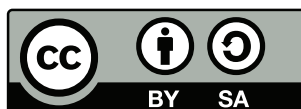


Vorlesungsskript

PHYS2200.0 Atomphysik Bachelor Physik Bachelor Wirtschaftsphysik Lehramt Physik

Othmar Marti und Manuel Gonçalves
Institut für Experimentelle Physik
Universität Ulm

veröffentlicht unter



[Lizenzinformationen](#)

16. März 2015

Sag Atome, sage Stäubchen.
Sind sie auch unendlich klein,
Haben sie doch ihre Leibchen
Und die Neigung da zu sein.

Haben sie auch keine Köpfchen,
Sind sie doch voll Eigensinn.
Trotzig spricht das Zwerggeschöpfchen:
Ich will sein so wie ich bin.

Suche nur, sie zu bezwingen,
Stark und findig, wie du bist.
Solch ein Ding hat seine Schwingen,
Seine Kraft und seine List.

Wilhelm Busch in „Zu Guter Letzt“ (1899)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
1.1	Lizenzinformationen	9
1.2	Dank	9
1.3	Liste der Versuche zu den Vorlesungen	10
1.4	Literaturhinweise	12
2	Masse und Atome	13
2.1	Avogadro-Zahl	13
2.2	Atome sehen	16
2.2.1	Feldionenmikroskopie	17
2.2.2	Rastertunnelmikroskopie	19
2.2.3	Brownsche Bewegung	20
2.3	Bestimmung der Atomgrösse	21
3	Strahlung	23
3.1	Strahlungsfelder	23
3.1.1	Photometrische Grössen	24
3.2	Strahlungsgesetze	25
3.2.1	Thermische Strahlung	25
3.2.2	Schwarzkörperstrahlung	26
3.2.3	Farben	38
3.2.4	Strahlung der Sonne	39
4	Teilchen und Wellen	41
4.1	Das Photon	41
4.1.1	Masse und Impuls	44
4.2	Elektronen	53
4.2.1	Ladung des Elektrons	53
4.2.2	Grösse des Elektrons	56
4.3	Materiewellen	58
4.3.1	Elektronenbeugung	58
4.3.2	Rutherford-Streuung	67
4.3.3	Selbstinterferenz von Atomen	71
5	Quantentheorie	73
5.1	Hilbert-Räume	73
5.1.1	Lineare Operatoren	74
5.1.2	Hermitesche Operatoren	74
5.2	Herleitung der Schrödingergleichung	74
5.2.1	Erste Möglichkeit der Herleitung der Schrödingergleichung	74

5.2.2	Zweite Möglichkeit der Herleitung der Schrödingergleichung	75
5.2.3	Wahrscheinlichkeitsinterpretation	76
5.3	Eigenfunktionen und Eigenwerte der Schrödingergleichung	78
5.3.1	Stationäre Zustände	78
5.3.2	Kanonische konjugierte Variablen	79
5.3.3	Vertauschungsrelationen	80
5.4	Axiome der Quantenmechanik	80
5.5	Wahrscheinlichkeitsdichte und Wellenfunktionen der Schrödingergleichung: die Bohrsche Interpretation	81
5.5.1	Wellenpakete	81
5.6	Heisenbergsche Unschärferelation	82
5.7	Lösung der Schrödingergleichung für einen unendlichen Potentialtopf	83
5.8	Lösungen der Schrödingergleichung für eine Potentialstufe	85
5.9	Potentialbarriere und Tunneleffekt	88
5.10	Harmonischer Oszillator	92
5.10.1	Hermite-Polynome und der harmonische Oszillator	97
5.10.2	Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators	98
5.10.3	Teilchen im endlichen Potentialtopf	100
5.10.4	Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden: entartete Zustände	106
6	Atome und ihr Aufbau	107
6.1	Bohr-Sommerfeld-Modell des Atoms	107
6.1.1	Bohrsches Atommodell	109
6.2	Franck-Hertz Versuch	114
6.2.1	Sommerfeld-Bohrsche Theorie	118
6.3	Das Wasserstoffatom	119
6.3.1	Drehimpulsoperatoren	120
6.3.2	Schrödingergleichung	121
6.3.3	Vollständige Wellenfunktion des Wasserstoffatoms	138
6.3.4	Unbestimmtheitsrelationen und Vertauschungsrelationen	140
6.3.5	Quantenzahlen, Spektren und Energien	143
6.4	Atome im Magnetfeld	148
6.4.1	Stern-Gerlach-Experiment	148
6.5	Elektronenspin	150
6.5.1	Magnetische Spin-Bahn-Kopplung	151
6.5.2	Feinstruktur und Ein-Elektronen-Atome	152
6.5.3	Zeemann-Effekt	159
6.5.4	Paschen-Back-Effekt	165
6.6	Atome im elektrischen Feld	167
6.6.1	Quadratischer Stark-Effekt	168
6.6.2	Linearer Stark-Effekt	171
6.7	Auswahlregeln	172
6.7.1	Symmetrien beim harmonischen Oszillator	173
6.7.2	Parität	174
6.7.3	Rotationssymmetrie	174
6.8	Mehrelektronenatome	178
6.8.1	Pauli-Prinzip	180

6.8.2	Drehimpulse	182
6.9	Äussere und innere Schalen	187
6.10	Röntgenstrahlung	187
6.10.1	Röntgenbeugung	189
6.10.2	Bremsstrahlung, charakteristische Strahlung und Perioden- system	191
6.10.3	Auger-Prozesse	194
7	Atome und elektromagnetisches Feld	197
7.1	Strahlung aus Atomen	197
7.1.1	Lorentz-Oszillator	197
7.1.2	Linienbreite	199
7.1.3	Fluoreszenz	201
7.1.4	Phosphoreszenz	202
7.1.5	Raman-Effekt	202
7.2	Laser	204
7.2.1	Laserprozesse	205
7.2.2	Laserstrahlen	209
7.2.3	Gaslaser	222
7.2.4	Festkörperlaser	225
7.2.5	Diodenlaser	226
7.2.6	Erzeugung kurzer Pulse	229
A	Wellenfunktionen	245
A.1	Zugeordnete Kugelfunktionen	245
A.2	Radiale Wellenfunktionen, Laguerre-Polynome	250
A.3	Radiale Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung	252
B	Periodensystem, Elektronenkonfiguration und Spinzustände	255
C	Begriffe	259
	Liste der Experimente	263
	Abbildungsverzeichnis	264
	Tabellenverzeichnis	269
	Index	275

1. Einleitung

1.1. Lizenzinformationen

Diese Skript wird unter der Creative Commons Lizenz CC-BY-SA 3.0 veröffentlicht. Dies heisst,

- Sie dürfen das Werk ganz oder in Teilen in allen denkbaren Formaten weiterverwenden, vervielfältigen und weiterverbreiten
- das Werk oder Teile davon neu zusammenstellen, verändern und darauf weitere Werke aufbauen,

sofern Sie

- den Namen der Verfassers dieses Werkes sowie deren Institution, die Universität Ulm, nennen und angemessene Rechte- und Urheberrechtsangaben machen, einen Link zur Lizenz beifügen und angeben, ob Sie Änderungen vorgenommen haben. Dabei darf nicht der Eindruck entstehen, die Verfasser oder die Universität Ulm würden Sie oder Ihre Nutzung unterstützen.
- Wenn Sie Dieses Werk oder Teile davon neu zusammenstellen, verändern und darauf weitere Werke aufbauen, dürfen Sie ihre Beiträge nur unter der gleichen Lizenz wie dieses Werk wie dieses Original verbreiten.

Sie dürfen insbesondere keine weiteren Einschränkungen einsetzen und auch keine technischen Verfahren wie z.B. DRM verwenden, die anderen Nutzern etwas untersagt oder daran hindert, das abgeleitete Werk nach dieser Lizenz zu nutzen. Eine detaillierte Erklärung finden Sie unter

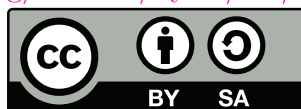
<http://www.uni-ulm.de/en/einrichtungen/e-learning/blog/article/was-sind-eigentlich-cc-lizenzen.html>

oder unter

<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>

oder unter

<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/de/>



Die CC-Icons und -Buttons  und  wurden unter der Lizenz CC BY von <http://creativecommons.org/about/downloads> veröffentlicht.

1.2. Dank

Zu diesem werdenden Skript habe ich wertvolle Anregungen von Herrn Vollmer, Herrn Crasser und von Studierenden erhalten: herzlichen Dank!

1.3. Liste der Versuche zu den Vorlesungen

- **Versuch zur Vorlesung:** [Kristallzerkleinerung](#)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Feldemissions-Mikroskop: Austritt von Elektronen aus einer Wolframspitze ([Versuchskarte EM-15](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Brownsche Molekularbewegung ([Versuchskarte TH-90](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Fettfleckphotometrie: Helligkeitsvergleich zweier Lampen ([Versuchskarte O-61](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Pyrometermodell ([Versuchskarte AT-12](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Infrarotkamera: Optische Temperaturmessung ([Versuchskarte AT-44](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Wärmestrahlung: Abstandsabhängigkeit bei einer punktförmigen Quelle ([Versuchskarte AT-54](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Planck'sches Strahlungsgesetz: Strahlung einer Glühlampe bei versch. Temperaturen ([Versuchskarte AT-21](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Hohlraumstrahler: Absorption und Emission an Rohr mit Loch ([Versuchskarte AT-39](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Strahlungswürfel nach Leslie: Emissionsfaktor von verschiedenen Strahlern ([Versuchskarte AT-20](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Stefan-Boltzmann'sches Gesetz: mit Leslie-Würfel ([Versuchskarte AT-43](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Fotoeffekt: qualitativ mit Aluminiumplatte ([Versuchskarte AT-17](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Interferenz am Doppelspalt: mit einzelnen Photonen ([Versuchskarte AT-50](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Doppelspalt: Interferenz mit polarisiertem Licht ([Versuchskarte AT-51](#))
- **Versuch zur Vorlesung:**
Millikan-Versuch: Ladung von Öltröpfchen ([Versuchskarte AT-13](#))

- **Versuch zur Vorlesung:**
Elektronenbeugung: an einer polykristallinen Graphitschicht (Versuchskarte AT-56)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Balmer-Serie (Versuchskarte AT-35)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Franck-Hertz-Versuch (Versuchskarte AT-7)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Orbitalmodelle: Stehende Wellen auf runder Wasseroberfläche (Versuchskarte AT-60)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Orbital-Modelle: Styropormodelle von Ladungswolken (Versuchskarte AT-61)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Normaler Zeeman-Effekt: Berechnung von e/m (Versuchskarte AT-14)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Elektronenspinresonanz: Modellversuch (Versuchskarte AT-31)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Elektronenspinresonanz: ESR an DPPH (Versuchskarte AT-29)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Natrium: Feinstruktur der D-Linie (Versuchskarte AT-48)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Linienspektren: Quecksilber, Helium, Kalium, Cadmium, Krypton, Zink (Versuchskarte AT-46)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Quecksilber: Druckverbreiterung von Spektrallinien (Versuchskarte AT-47)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Paul-Falle: Für Lykpodium (Versuchskarte AT-62)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Zerlegbarer Laser (Versuchskarte AT-30)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Röntgenfluoreszenz (Versuchskarte AT-24)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Absorption von Röntgenstrahlen: Qualitativ (Versuchskarte AT-40)
- **Versuch zur Vorlesung:**
Drehbares Kreuzgitter: Optisches Analogon zur Debye-Scherrer-Interferenz (Versuchskarte O-133)

- **Versuch zur Vorlesung:**
Röntgenstrahlung: Bremsstrahlung und charakteristische Linien (Versuchskarte AT-37)

1.4. Literaturhinweise

Die Vorlesung orientiert sich an den Werken von Haken und Wolf: Atom- und Quantenphysik[HW04] und Gerthsen Physik[Mes06]. Weitere Bücher zur Atomphysik sind Atomic Physics von C.J. Foot [Foo06], Atome - Moleküle - Kerne von Otter und Honecker [OH01]. Zur Mathematik sind die Werke von Arfken und Weber[AW95] und das Internetskript von Komma[Kom96] zu empfehlen. Weiter können Tipler[TM04], Physik, und, als leichtere Einführung, das Buch von Halliday[HRW03] konsultiert werden. Zum Aufarbeiten des gelernten Stoffes (nicht als Einsteigerliteratur) kann auch Kneubühls[Kne78] "Repetitorium der Physik" empfohlen werden. Mathematische Probleme und Formeln sind sehr schön im Bronstein[BSMM00] zusammengefasst.

Die Geschichte der Physik ist von Simonyi[Sim90] hervorragend dargestellt.

Eine wunderbare Website zum Aufarbeiten Ihres Wissens ist Hyperphysics [Nav15b] von R. Nave, als Website oder als Smartphone-App. Ergänzend gibt es vom gleichen Autor auch Hypermath [Nav15a].

2. Masse und Atome

(Siehe Simonyi, Kulturgeschichte der Physik [Sim90, pp. 71-75])

Die Existenz von Atomen wurde, nach unserem Wissen, das erste Mal in Griechenland vor über 2000 Jahren postuliert. Eine ausgezeichnete Darstellung der Physikgeschichte findet sich bei Simonyi[Sim90].

2.1. Avogadro-Zahl

(Siehe Haken, Wolf, Atom-und Quantenphysik [HW04, pp. 7-10])

Wenn ein Kristall immer weiter mit mechanischen Methoden zerkleinert wird, so scheint dies ein kontinuierlicher Prozess zu sein.



Versuch zur Vorlesung: [Kristall-Zerkleinerung](#)

Warum muss man trotzdem annehmen, dass die Materie aus kleinsten Einheiten aufgebaut ist?

Optik Auch bei extrem klarer Sicht ist der Himmel blau. Da der Weltraum bis auf die Sonne (und in vermindertem Masse, Mond und Sterne) dunkel ist, muss das von oben kommende Licht in der hohen Atmosphäre gestreut worden sein. Dies kann nur an Inhomogenitäten der Luft geschehen. Also muss die Luft eine Körnigkeit haben. Wir wissen durch Rayleigh, dass die Streuamplitude proportional zu $(r/\lambda)^4$ ist, sofern die streuenden Teilchen sehr viel kleiner sind als die Wellenlänge λ des gestreuten Lichtes. Da der Himmel blau ist, muss also die Längenskala r der Körnigkeit sehr viel kleiner sein als die mittlere Wellenlänge des Sonnenlichts, also

$$r \ll \langle \lambda \rangle = 500 \text{ nm}$$

Die Streuung führt übrigens auch zu einer **Polarisation**.

Chemie Bei jeder chemischen Reaktion werden Stoffe immer in gewissen, unänderlichen Gewichtsverhältnissen umgesetzt. Das heisst, dass die Ursache der Körnigkeit materialspezifisch ist. Weiter findet man, dass Stoffe wie Wasserstoff, Sauerstoff, Kohlenstoff eine Körnigkeit haben, die ein ganzzahliges Vielfaches der Körnigkeit des Wasserstoffs ist.

Brownsche Bewegung **Robert Brown** beobachtete die Zitterbewegung einzelner Bärlappsamen. Er schloss daraus, dass diese Bärlappsamen ununterbrochen von einzelnen sehr viel masseärmeren Teilchen gestossen würden. Daraus folgerte er, dass Wasser aus Teilchen bestehen müsse.

Röntgenbeugung Mit der von **Max von Laue** erstmals beobachteten **Röntgenbeugung** durch Max von Laue (Nobelpreis 1914) konnte erstmals gezeigt werden, dass feste Materie aus einzelnen kleinsten Teilchen bestand, deren Abstand aus den Beugungsmustern berechnet werden konnte.

Alle diese Experimente ergaben, dass die Anzahl der Teilchen aus der Molzahl der Chemiker berechnet werden konnte. Der Proportionalitätsfaktor heisst **Avogadro-Zahl** N_A . Sie gibt an, wie viele Teilchen in einem Mol vorhanden sind. In Deutschland wird manchmal auch die **Loschmidt-Zahl** $N_L = N_A$ verwendet, sie ist aber im Rest der Welt nicht gebräuchlich. Bei Kenntnis der **Boltzmann-Konstante** k_B kann N_A auf verschiedene Weise bestimmt werden:

Elektrolyse Wenn die Elementarladung e bekannt ist, kann man aus dem Strom I durch einen Elektrolyten und der abgeschiedenen Masse m die **Faraday-Zahl**

$$F = eN_A = 9.65 \cdot 10^4 \text{ C mol}^{-1} \quad (2.1.1)$$

bestimmt werden. Damit ist auch die Avogadro-Zahl N_A bestimmt.

Gaskonstante und Boltzmann-Konstante Es gilt die Beziehung

$$R = k \cdot N_A \quad (2.1.2)$$

Die Gaskonstante R kann aus der Gleichung für ideale Gase abgeleitet werden, zum Beispiel aus pV -Diagrammen.

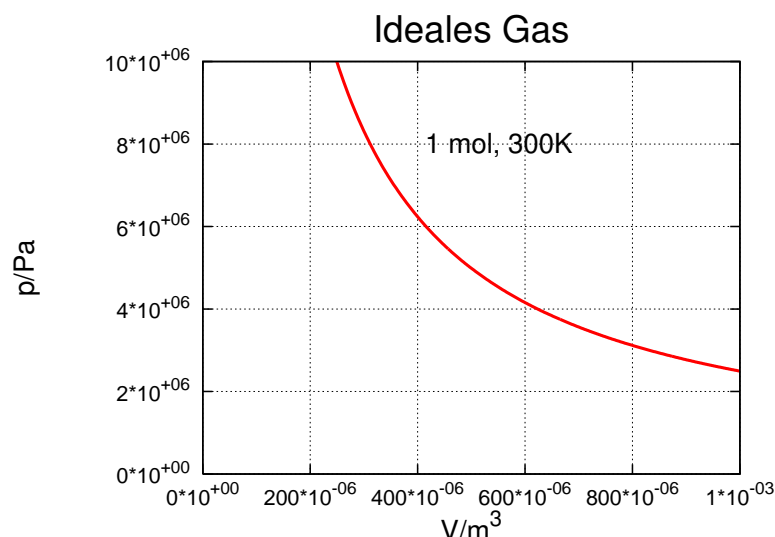


Abbildung 2.1.: pV -Diagramm für ein ideales Gas

Die Boltzmann-Konstante kann aus dem Sedimentationsgleichgewicht bestimmt werden (Jean-Baptiste Perrin[Per09], Nobelpreis 1926). Er erhielt

für die Höhenverteilung der Teilchenzahl die folgende Gleichung:

$$n(h) = n_0 \exp\left(-\frac{V_T(\rho - \tilde{\rho})gh}{k_B T}\right) \quad (2.1.3)$$

Hier ist V_T das Volumen eines Teilchens, ρ die Dichte dieses Teilchens, $\tilde{\rho}$ die Dichte der umgebenden Flüssigkeit, g der Betrag des Feldvektors der Gravitation an der Erdoberfläche (dem Ort des Experiments) und h die Höhe über der Referenzstelle.

Röntgenbeugung William Henry Bragg und sein Sohn William Lawrence Bragg (beide Nobelpreis 1915) entwickelten 1913 die Drehkristallmethode und die *Bragggleichung* die die Streuwinkel θ mit der Wellenlänge λ und dem Netzebenenabstand d verknüpft.

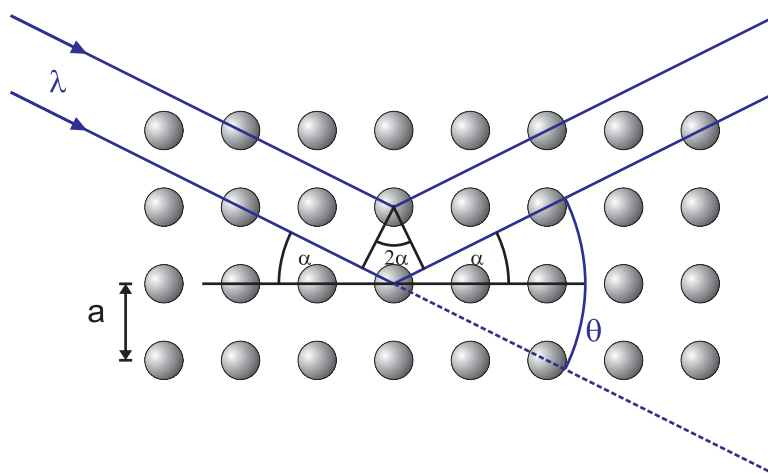


Abbildung 2.2.: Gangunterschied bei der *Bragg-Streuung*

$$n \lambda = 2 d \sin \alpha = 2 d \sin \frac{\theta}{2} \quad (2.1.4)$$

Aus dem Netzebenenabstand kann man das Volumen eines Atoms V_A bestimmen. Die Avogadrozahl folgt dann aus

$$N_A = \frac{M}{\rho V_A} \quad (2.1.5)$$

NaCl kristallisiert in einem kubischen Gitter mit dem Netzebenenabstand a , wobei sich in der Einheitszelle jeweils ein positives und ein negatives Ion befinden. Dies ist äquivalent zu dem Würfel in der Abbildung unten mit der halben Kantenlänge $a/2$, wobei sich die positiven Na^+ -Ionen (klein) und die negativen Cl^- -Ionen abwechseln.

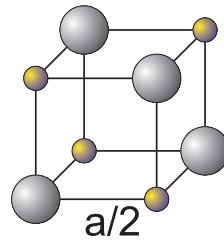


Abbildung 2.3.: NaCl-Gitter

Die Ionen an den Ecken sind Teil von 8 Würfeln, so dass in diesem Würfel mit dem Volumen $(a/2)^3$ netto ein Ion, also ein halbes NaCl liegt. Die Dichte der NaCl ist demnach

$$n = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{a} \right)^3 \quad (2.1.6)$$

Mit $V_{mol} = N_A V_A = M/\rho$ bekommen wir aus Gleichung (2.1.5) und aus Gleichung (2.1.6)

$$n = \frac{N_A}{V_{mol}} = \frac{N_A \rho}{M} \quad (2.1.7)$$

und damit

$$N_A = n \frac{M}{\rho} = \frac{4M}{a^3 \rho} \quad (2.1.8)$$

Mit den Daten $\rho = 1987 \text{ kg m}^{-3}$ und $M = 0.07455 \text{ kg mol}$ sowie $a = 629 \text{ pm}$ bekommt man

$$N_A = 6.03 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

2.2. Atome sehen

Atome kann man nicht sehen. Greifen wir der Vorlesung voraus und verwenden die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h$$

und die Beziehung für den Impuls des Lichts in Funktion der Wellenlänge

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

so bekommt man

$$\frac{h}{\lambda} \cdot x \geq h$$

oder

$$x \geq \lambda$$

Diese grobe Ableitung des Auflösungsvermögens eines optischen Instrumentes zeigt, dass um Atome sehen zu können, Licht mit einer Wellenlänge von etwa 100 pm verwenden muss. Dies ist **Röntgenlicht**: es gibt auch heute noch keine vernünftige Optik für diese kurzen Wellenlängen. Die besten Optiken haben eine etwa 100 bis 1000 mal schlechtere Auflösung als die Wellenlänge.

Bis jetzt sind nur indirekte Methoden bekannt um Atome sichtbar zu machen. Am nächsten einer optischen Abbildung kommt dabei das Transmissionselektronenmikroskop (TEM). Auch hier ist die Wellenlänge etwa 1/100-tel der aufgelösten Struktur.

2.2.1. Feldionenmikroskopie

Obwohl mit Streumethoden gesichert war, dass Atome existieren, dauerte es bis 1951 bis einzelne Atome direkt beobachtet werden konnten. **E.W. Müller** erfand das **Feldionenmikroskop** [Mül51]. Dieses ist eine Weiterentwicklung des *Feldemissionsmikroskops*.

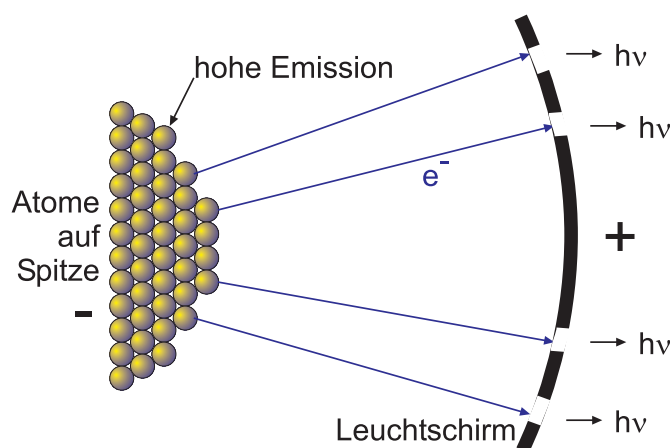


Abbildung 2.4.: E.W. Müllers Feldemissionsmikroskop.

Elektronen verlassen wegen den hohen Feldern an Kanten (Blitzableiter) die Spitze und fliegen radial auf den Leuchtschirm zu. Durch die kleine Masse der Elektronen ist ihre transversale Impulskomponente nicht gut definiert: das Bild wird so ausgeschmiert, dass die Abbildung keine scharfen Kanten enthält.

Versuch zur Vorlesung:

Feldemissions-Mikroskop: Austritt von Elektronen aus einer Wolframspitze (Versuchskarte EM-15)

Das *Feldionenmikroskop* verwendet zusätzlich Helium-Atome. Diese werden in der Nähe der nun positiv geladenen Spitze ionisiert und auf den Leuchtschirm zu beschleunigt. Normalerweise könnte das höchstenergetische Elektron nicht das He-Atom verlassen. Durch die extrem hohe Feldstärke $E \sim 50 \text{ V m}^{-1}$ wird das elektro-

statische Potential jedoch so verformt, dass dieses Elektron in die Wolframspitze tunneln kann. Durch die grössere Masse der He^+ -Ionen ist deren transversaler Impuls wesentlich besser definiert als bei Elektronen. Dadurch entsteht eine genügend aufgelöste Abbildung der Atome.

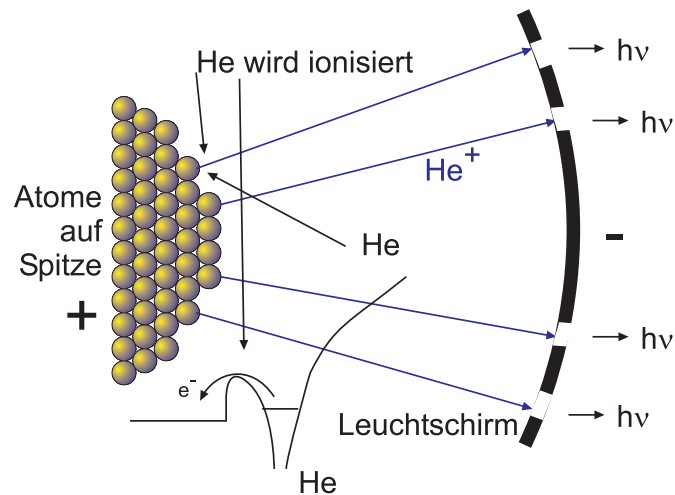


Abbildung 2.5.: E.W. Müllers Feldionenmikroskop. Unten ist der Potentialverlauf bei der He-Ionisation angegeben.

Eine solche Abbildung ist in der nächsten Abbildung 2.6 gezeigt.

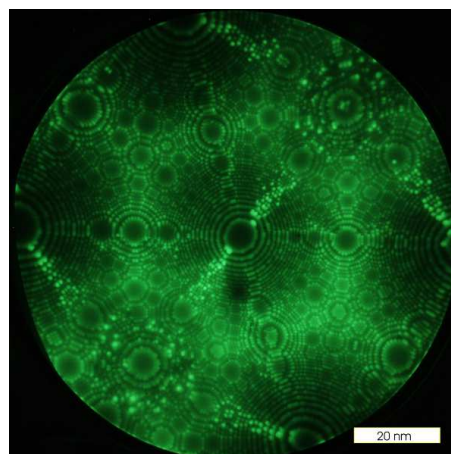


Abbildung 2.6.: Feldionenmikroskopisches Bild einer 110-orientierten Wolframspitze (By Atomsondenbenutzer. Atomsondenbenutzer at de.wikipedia [Public domain], from Wikimedia Commons) [ad07].

2.2.2. Rastertunnelmikroskopie

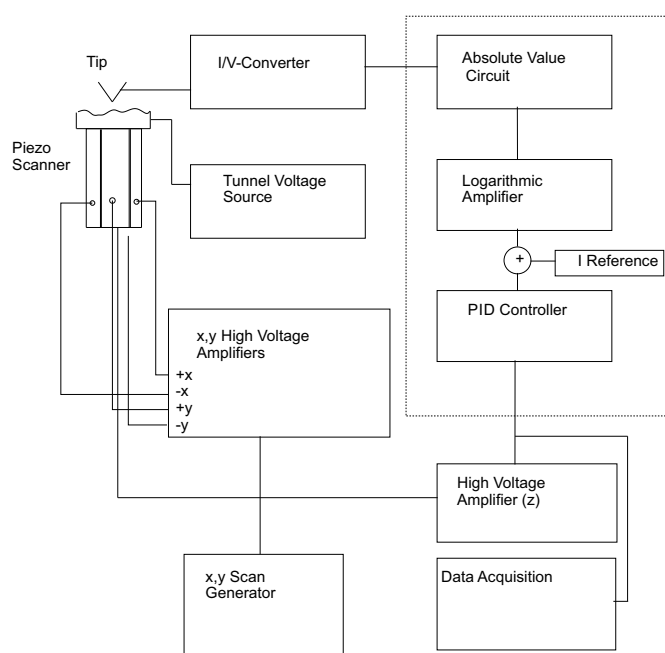


Abbildung 2.7.: Schematischer Aufbau eines Rastertunnelmikroskopes. Der Tunnelstrom an der Spitze wird durch einen Strom-Spannungswandler in eine Spannung umgewandelt und wird als Eingangssignal für die Steuerung des Spitze-Probe-Abstandes verwendet. Hochspannungsverstärker erzeugen die notwendigen Spannungen für die x -, y -, und z -Elektroden. Die Datenerfassung und die Erzeugung der Rastersignale werden durch Rechner durchgeführt.

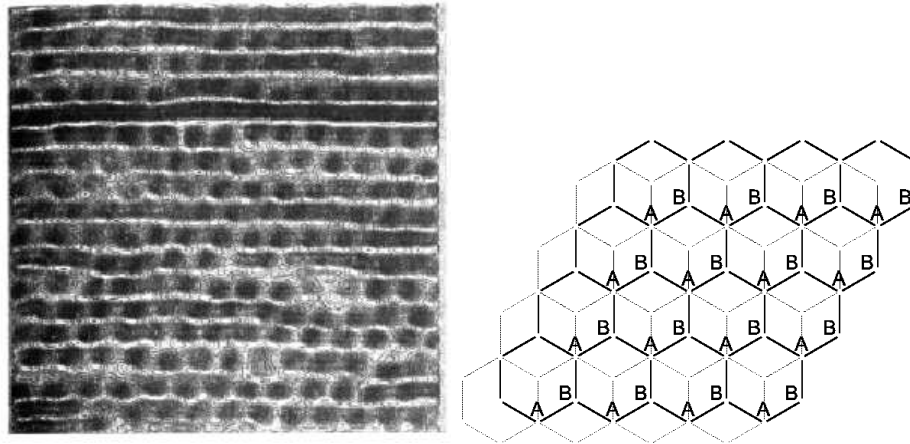


Abbildung 2.8.: Die linke Seite zeigt eine rastertunnelmikroskopische Aufnahme einer *Graphitoberfläche* bei 6.8 K (aus [Mar87]). Der Bildausschnitt hat 3.3 nm Kantenlänge. Die totale Höhenvariation ist 0.54 nm, von unten (hell) nach oben (dunkel) gemessen. Die rechte Seite zeigt den Aufbau der Graphitoberfläche.

2.2.3. Brownsche Bewegung

Bei der Brownschen Bewegung wandern die Teilchen getrieben durch die Stöße von Atomen oder Molekülen aus dem umgebenden Medium zufällig durch das Gesichtsfeld im Mikroskop¹.

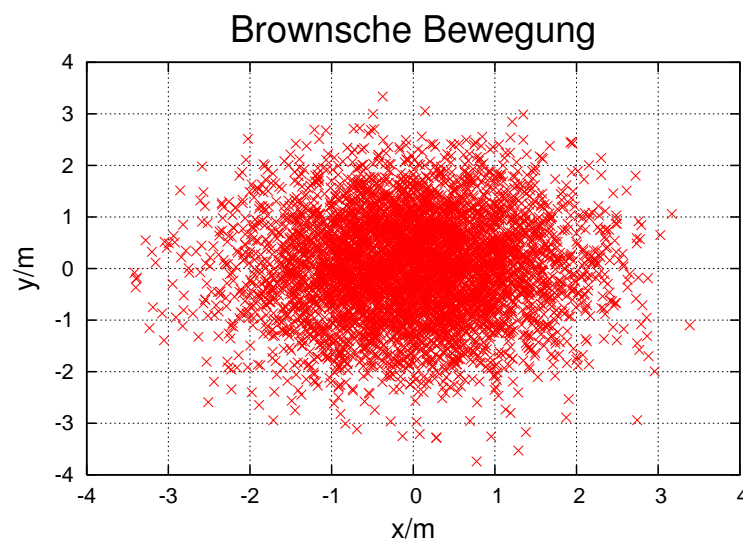


Abbildung 2.9.: Simulierte Verteilung des Aufenthaltes eines Teilchens mit Brownscher Bewegung bei 5000 Zeitschritten.

¹Zur Simulation kann man das [Box-Müller-Verfahren](#) verwenden.

Der mittlere Abstand vom Ursprung nimmt für grosse Zeiten wie

$$\langle x^2 \rangle_t = 3Dt = \frac{k_B T}{2\pi\eta r} t \quad (2.2.1)$$

zu, wobei η die Viskosität, r der Teilchenradius und D die Diffusionskonstante nach Einstein[Ein05] und Soluchowski[vS06].



Versuch zur Vorlesung:

Brownsche Molekularbewegung (Versuchskarte TH-90)

Damit ist gezeigt, dass die Brownsche Bewegung eine alternative Möglichkeit zur Bestimmung von k_B bietet.

2.3. Bestimmung der Atomgrösse

Die Grösse von Atomen kann mit *Röntgenbeugung* (Siehe 2.1) bestimmt werden. Eine weitere, unabhängige Möglichkeit bietet die Bestimmung des *Wirkungsquerschnitts*.

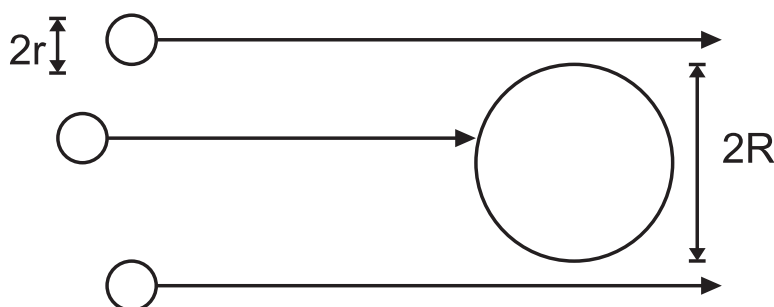


Abbildung 2.10.: Berechnung des Streuquerschnitts mit zwei Teilchen mit den Radien r und R .

Aus der Zeichnung liest man ab, dass der Streuquerschnitt

$$\sigma = \pi (r + R)^2 \quad (2.3.1)$$

ist. Wir betrachten ein Ensemble von vielen Teilchen in einem Volumen. Dieses Volumen habe die Oberfläche $A = \pi R^2$ gegenüber der Teilchenquelle und die Dicke d . In diesem Volumen befinden sich N_V Atome mit jeweils dem Streuquerschnitt σ . Dann ist die Wahrscheinlichkeit W einer Kollision

$$W = \frac{\text{Fläche aller } \sigma \text{ im durchstrahlte Volumen}}{A} = \frac{N_V \sigma}{A}$$

Dabei haben wir nicht berücksichtigt, dass ab einer gewissen Tiefe d die Streuquerschnitte σ sich teilweise überlappen. Zur Berechnung müssen wir also zu einer differentiellen Formulierung übergehen. Hier ist N die Anzahl der eingestrahnten

Partikel an der Oberfläche A der Schicht und ΔN die Anzahl der Streufälle. Dann nimmt die Anzahl der Partikel nach der Strecke Δx im Volumen ab wie

$$\Delta N = -W \cdot N = -\frac{N_V \cdot \sigma}{A} \cdot N \quad (2.3.2)$$

Wir nahmen dabei an, dass jeder Streufall das eingestrahelte Partikel aus dem transmittierten Strahl entfernt. Ersetzen wir N_V durch $n \cdot A \cdot \Delta x$, wobei n die Teilchenzahldichte der Atome ist, erhalten wir

$$\Delta N = -\frac{n \cdot A \cdot \Delta x \cdot \sigma}{A} \cdot N = -n \cdot \Delta x \cdot \sigma \cdot N \quad (2.3.3)$$

Oder nach dem Übergang zur differentiellen Schreibweise

$$\frac{dN}{N} = -n \cdot \sigma \cdot dx \quad (2.3.4)$$

Die Lösung für eine durchstrahlte Fläche der Dicke x ist

$$N(x) = N_0 \exp(-n \cdot \sigma \cdot x) \quad (2.3.5)$$

Die Zahl N_{streu} der abgelenkten Atome ist

$$N_{streu}(x) = N_0 - N(x) = N_0 (1 - \exp(-n \cdot \sigma \cdot x)) \quad (2.3.6)$$

$\alpha = n\sigma$ ist der *totale Wirkungsquerschnitt*. Also kann man durch die Bestimmung der Anzahl gestreuten oder ungestreuten Atome σ und daraus, wenn man gleiche Atomsorten für Projektile und Ziele verwendet aus $R = r$ auch r bestimmen.

3. Strahlung

(Siehe Gerthsen, Physik [Mes06, pp. 567-603])

Unter Strahlung verstehen wir die *Emission* elektromagnetischer Energie. Wir beschränken uns hier nicht nur auf Licht, sondern auf allgemeine elektromagnetische Strahlung. Wir verwenden die Grundgesetze aus der *Optik* und der *Elektrizitätslehre*.

3.1. Strahlungsfelder

(Siehe Gerthsen, Physik [Mes06, pp. 567-571])

Von einer Quelle eines Strahlungsfeldes fließt Energie weg. Der Fluss dieser *Energie* wird durch die *Intensität* I (Einheit W m^{-2}) und die Strahlungsstromdichte $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ als gerichtete Grösse charakterisiert. Auf einem Flächenstück $d\mathbf{A}$, dessen Normaleneinheitsvektor $d\mathbf{A}/dA$ im Winkel α zur Ausbreitungsrichtung (gegeben durch den Wellenvektor \mathbf{k}) steht, ist die momentane Strahlungsleistung dP

$$dP = \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} = D A \cos(\alpha) = I A \cos(\alpha) \quad (3.1.1)$$

Die *Bestrahlungsstärke* nennt man E , definiert als

$$E = D \cos \alpha \quad (3.1.2)$$

Die Einheit von E ist W m^{-2} . Die auf der Fläche eintreffende Energie, die *Bestrahlung*, ist

$$\int E \cdot dt$$

Die Leistung der Strahlungsquelle auf einer endlichen Fläche, auch *Strahlungsfluss* Φ genannt, ist

$$P = \Phi = \iint \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} = \iint E dA$$

Strahlungsquellen haben meistens keine kugelsymmetrische Abstrahlcharakteristik. Der in den Raumwinkel $d\Omega$ gerichtete Leistung wird durch die *Strahlungsstärke* J , Einheit W sterad^{-1} gegeben

$$J = \frac{dP}{d\Omega} \quad (3.1.3)$$

Die *spezifische Ausstrahlung* R beschreibt die Ausstrahlung der Quelle von einem Flächenstück $d\mathbf{A}$ in den ganzen Halbraum

$$R = \frac{dP}{dA} \quad (3.1.4)$$

Schliesslich wird vom Flächenelement dA in den Raumwinkel $d\Omega$ eine Leistung d^2P abgestrahlt. Diese wird durch die *Strahlungsdichte* B beschrieben

$$B = \frac{d^2P}{dA d\Omega} \quad (3.1.5)$$

Eine Quelle ohne Richtungsabhängigkeit wird *Lambert-Strahler* genannt. Realisierungen eines Lambert-Strahlers sind ein mattes weisses Papier, ein heisser schwarzer Körper oder eine Öffnung in einem strahlungsgefüllten Körper. Wird ein Lambert-Strahler im Winkel α gegen die Oberflächennormale betrachtet, so ist die Strahlungsstärke nach dem *Lambert-Gesetz*

$$J = J_0 \cos \alpha \quad (3.1.6)$$

3.1.1. Photometrische Grössen

Wenn wir sichtbare Strahlung durch unser *Auge* wahrnehmen, ist die Reizung unserer Sehnerven nicht proportional zur teilchenzahl oder zur Energie. Um der Wellenlängenabhängigkeit unseres Sehempfindens Rechnung zu tragen, wurden *photometrische Grössen* definiert, die Eigenschaften des *Auges* berücksichtigen. Die *Photometrie* beruht auf der SI-Grundeinheit *Candela*, abgekürzt *cd*.

Ein Candela ist definiert als der *Lichtstrom* pro Raumwinkeleinheit, der von $\frac{1}{60}$ cm² eines schwarzen Körpers bei 2042 K, der Schmelztemperatur von Platin, ausgeht.

Physikalische Grössen			Physiologische oder photometrische Grössen		
Grösse	Symbol	Einheit	Grösse	Symbol	Einheit
Strahlungsenergie	E	J	Lichtmenge	Q	lm s
Strahlungsfluss	Φ	W	Lichtstrom	Φ	lm
Spezifische Ausstrahlung	R	W m ⁻²	Spezifische Lichtausstrahlung	R	lm m ⁻²
Strahlungsstärke	$J = \frac{d\Phi}{d\Omega}$	W sterad ⁻¹	Lichtstärke	$I = \frac{d\Phi}{d\Omega}$	cd = lm sterad ⁻¹
Strahlungsdichte	$B = \frac{dJ}{dA d \cos \alpha}$	W m ⁻² sterad ⁻¹	Leuchtdichte	$B = \frac{dI}{dA d \cos \alpha}$	cd m ⁻² = sb
Intensität	$D = I = \frac{d\Phi}{dA_{\perp}}$	W m ⁻²	Intensität	$D = I = \frac{d\Phi}{dA_{\perp}}$	lx = lm m ⁻²
Strahlungsflussdichte			Lichtstromdichte		
Bestrahlungsstärke	$E = D \cos \alpha$	W m ⁻²	Beleuchtungsstärke	$E = D \cos \alpha$	lx
Bestrahlung	$\int Edt$	J m ⁻²	Beleuchtung	$\int Edt$	lx s

Tabelle 3.1.: Photometrische Grössen



Versuch zur Vorlesung:

Fettfleckphotometrie: Helligkeitsvergleich zweier Lampen (Versuchskarte O-61)

3.2. Strahlungsgesetze

3.2.1. Thermische Strahlung

Wärmestrahlung ist eine Form elektromagnetischer Strahlung. Die Sonne versorgt so die Erde mit der notwendigen Energie. Aus der Optik wissen wir, dass bei einem Strahlungsfluss Φ auf eine Grenzfläche die folgende Energiebilanz gilt:

$$\Phi = \Phi_R + \Phi_T + \Phi_a = a_R \cdot \Phi + a_T \cdot \Phi + \epsilon \cdot \Phi \quad (3.2.1)$$

wobei Φ_T den transmittierten Fluss, Φ_R den reflektierten Fluss und Φ_a den absorbierten Fluss beschreibt. Wir bezeichnen mit ϵ den *Absorptionsgrad*. Nimmt man an, dass die Probe dick ist, dann gibt es keinen transmittierten Fluss. Dann gilt mit $a_R = 1 - \epsilon$

$$\Phi = (1 - \epsilon)\Phi_R + \epsilon\Phi_a \quad (3.2.2)$$

Der Absorptionsgrad ϵ hängt von der Frequenz ab. Wenn dem nicht so wäre, gäbe es zum Beispiel keine Kaltlichtspiegel bei Halogenlampen.

Wenn man die Ausstrahlung einer schwarzen Fläche ($\epsilon = 1$) mit P_s beschreibt ist die Ausstrahlung einer beliebigen Fläche durch

$$P = \epsilon P_s \quad (3.2.3)$$

gegeben. Dieses *Strahlungsgesetz von Kirchhoff* bedeutet, dass die Emissionseigenschaften und die Absorptionseigenschaften zusammenhängen. Gut absorbierende Flächen sind auch gut emittierende Flächen. wenn dem nicht so wäre, könnte man ein Perpetuum Mobile der zweiten Art herstellen.

Nehmen wir an, eine Fläche mit ϵ_1 und Temperatur T strahle die Leistung P_1 auf die zweite Fläche mit der Temperatur T . Gleichzeitig strahle die zweite Fläche mit ϵ_2 die Leistung P_2 auf die erste Fläche. Beide Flächen sind im thermischen Gleichgewicht. Dann muss

$$\epsilon_1 \cdot P_2 = \epsilon_2 \cdot P_1 \quad (3.2.4)$$

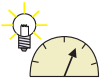
sein. Dies ist dann der Fall, wenn die aus der Temperatur berechnete Leistung $P(T)$, die auch nur von der Temperatur abhängt, sich mit P_i wie

$$P_i = \epsilon_i \cdot P(T) \quad (3.2.5)$$

verhält. Nur dann ist die Gleichung (3.2.4) erfüllt.

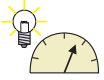
**Versuch zur Vorlesung:**

Pyrometermodell (Versuchskarte AT-12)



Versuch zur Vorlesung:

Infrarotkamera: Optische Temperaturmessung (Versuchskarte AT-44)



Versuch zur Vorlesung:

Wärmestrahlung: Abstandsabhängigkeit bei einer punktförmigen Quelle (Versuchskarte AT-54)

3.2.2. Schwarzkörperstrahlung

(Siehe Gerthsen, Physik [Mes06, pp. 573])



Versuch zur Vorlesung:

Hohlraumstrahler: Absorption und Emission an Rohr mit Loch (Versuchskarte AT-39)

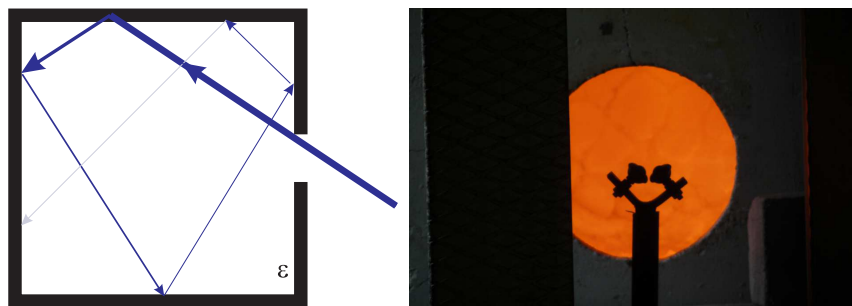


Abbildung 3.1.: Links: Schematische Darstellung eines schwarzen Körpers. Rechts: Blick auf den Ofen einer Glasbläselei. Die kleine Öffnung wirkt fast wie ein schwarzer Körper.

Licht, das durch die kleine Öffnung in den Hohlraum des *schwarzen Körpers* eintritt, wird bei jeder Reflexion an der Oberfläche mit der Wahrscheinlichkeit ϵ absorbiert und mit der Wahrscheinlichkeit $1 - \epsilon < 1$ reflektiert. Nach n Reflexionen ist die verbleibende Intensität des Lichtstrahls auf $(1 - \epsilon)^n$ abgesunken, sie wird also beliebig klein. Das heisst, der Absorptionsgrad der Öffnung in diesem Hohlraum ist $\epsilon = 1$.

Spektrale Grössen werden hier mit dem Subskript ν

$$X_\nu = \frac{dX}{d\nu}$$

bestimmt.

Wir definieren nun eine *spektrale Energiedichte* $\varrho(\nu, T)d\nu$. Sie besteht aus dem Produkt aus der Energiedichte $\varrho(\nu, T)$ und dem Frequenzband der Breite $d\nu$, das das Intervall $(\nu, \nu + d\nu)$ beschreibt. Diese Energie $\varrho(\nu, T)d\nu$ bewegt sich mit der Geschwindigkeit c durch den Raum und zu den Wänden des Hohlraums. Eine ideale schwarze Wand absorbiert diese Energie $\varrho(\nu, T)$ und emittiert nach Kirchhoff gleichzeitig $P_{s,\nu}(\nu, T)$. Im Gleichgewicht müssen sich die Absorption und die Emission die Balance halten. Wir können also die *spezifische Ausstrahlung* durch die Energiedichte ϱ ausdrücken¹.

$$R_{s,\nu}(\nu, T) = c \varrho(\nu, T) \quad (3.2.6)$$

oder, integriert über alle Frequenzen,

$$R_s(T) = c \int_0^\infty \varrho(\nu, T) d\nu \quad (3.2.7)$$

Die gemessene spektrale Energiedichte sieht wie in der Abbildung 3.2 aus.

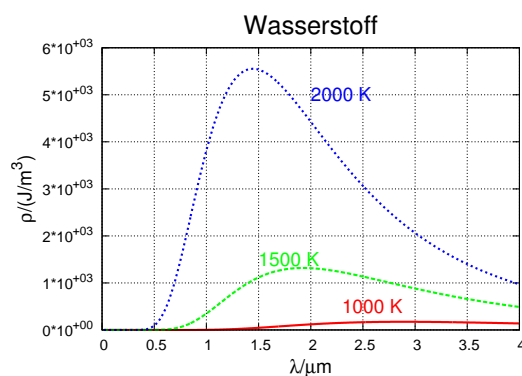


Abbildung 3.2.: Spektrale Energiedichteverteilung nach Wellenlänge.

Wenn man die Energiedichteverteilung gegen die Frequenz aufträgt, erhält man:

¹Die Notation im Gerthsen[Mes06] ist verwirrend an der Stelle. Es wird nicht korrekt zwischen spektralen und integrierten Grössen unterschieden

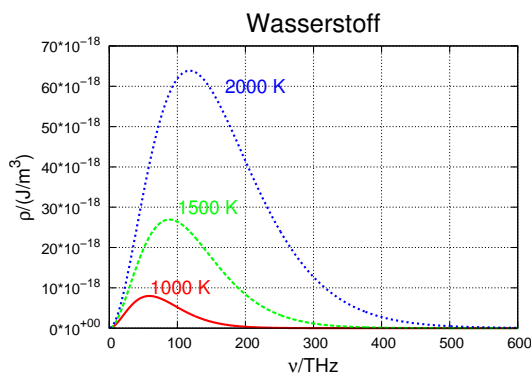


Abbildung 3.3.: Spektrale Energiedichteverteilung nach Frequenz

3.2.2.1. Plancks Strahlungsgesetz



Versuch zur Vorlesung:

Plancksches Strahlungsgesetz: Strahlung einer Glühlampe bei verschiedenen Temperaturen (Versuchskarte AT-21)

Im Vorgriff auf das Kommende definieren wir das *Plancksches Wirkungsquantum*

$$h = 6.62606896 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad (3.2.8)$$

Die Größe können sie sich mit der Eselsbrücke: $h \sim 2\pi \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ merken.

Oftmals wird in der Physik, weil es bequemer ist, mit dem *reduzierten Wirkungsquantum* gerechnet

$$\hbar = 1.054571628 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad (3.2.9)$$

Auch hier gibt es eine Eselsbrücke: $\hbar = 10^{-34} \text{ J s}$.

Das Wirkungsquantum ist ein Konzept aus der statistischen Physik, einem Teilgebiet der Thermodynamik.

(Siehe Demtröder, Laserspektroskopie [Dem93, p. 8])

Wir betrachten eine elektromagnetische Welle in einem quaderförmigen Hohlraum. Der zeit- und ortsabhängige Vektor ihres elektrischen Feldes ist

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \mathbf{E}_i \exp[i(\omega_i t + \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})] + c.c. \quad (3.2.10)$$

In diesem quaderförmigen Hohlraum, dessen Quaderseiten entlang den Koordinatenachsen seien, gibt es stehende Wellen. Die Wellenzahlen k_x , k_y und k_z sind durch die Ausdehnung in die entsprechende Richtung gegeben. Nur dann wenn eine ganzzahlige Anzahl halber Wellenlängen Platz hat, haben wir eine mögliche Welle. Alle Wellen können sowohl in die + wie auch in die --Richtung laufen. Wir haben also

$$\mathbf{k} = (\pm k_x, \pm k_y, \pm k_z) \implies 2 \cdot 2 \cdot 2 = 8 \quad (3.2.11)$$

mögliche Kombinationen zu einem Tripel (k_x, k_y, k_z) . Bei einem Würfel mit der Seitenlänge L sind die möglichen Wellenzahlen

$$\mathbf{k} = \frac{\pi}{L} (n_x, n_y, n_z) \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N} \cup \{0\} \quad (3.2.12)$$

Der Betrag der Wellenzahlen wird

$$k = |\mathbf{k}| = \frac{\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad (3.2.13)$$

Damit gibt es zwischen der Kantenlänge und der Wellenlänge die Beziehung

$$L = \frac{\lambda}{2} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad (3.2.14)$$

Analog dazu bekommt man mit $k = \omega/c$ die Kreisfrequenzen

$$\omega = \frac{\pi c}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad (3.2.15)$$

Da elektromagnetische Wellen transversal sind, gibt es zwei Polarisierungen entlang den Vektoren $\hat{\mathbf{e}}_1$ und $\hat{\mathbf{e}}_2$ (mit $\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{k} = 0$). Diese beiden Polarisationsvektoren stehen senkrecht zum Wellenvektor (der Ausbreitungsrichtung). Das elektrische Feld der i -ten Mode ist

$$\mathbf{E}_i = e_{i,1} \hat{\mathbf{e}}_1 + e_{i,2} \hat{\mathbf{e}}_2 \quad (3.2.16)$$

Zu jedem einen Wellenvektor beschreibenden Zahlentripel (n_x, n_y, n_z) gibt es zwei Polarisierungen.

Jede beliebige Feldkombination im Hohlraum lässt sich als Linearkombination der Moden mit ihren Modenzahlen n_x, n_y, n_z und den beiden Polarisierungen darstellen.

Wir wollen die Anzahl Moden bis zu einer bestimmten Energie bestimmen. Das heisst, dass $\omega < \omega_{max}$ oder $k < k_{max}$ sein soll. Diese Frage ist äquivalent zu: Wieviele Wellenvektoren passen in eine Kugel mit dem Radius k_{max} . Aus $\omega = \frac{\pi c}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$ folgt

$$\frac{L\omega}{\pi c} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad (3.2.17)$$

Dies ist eine Kugel mit dem Radius $R = \frac{L\omega}{\pi c}$. In dieser Kugel bilden die möglichen Wellenvektoren ein kubisches Gitter mit der Gitterkonstante $\frac{\pi}{L}$. Die Randeffekte beim Abzählen können vernachlässigt werden, wenn

$$\frac{L\omega}{\pi c} \gg 1 \text{ oder } 2L \gg \lambda \quad (3.2.18)$$

ist. Das Volumen einer Kugel ist $V = (4\pi/3)r^3$. Da $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ ist, verwenden wir nur 1/8 des Kugelvolumens. Die Anzahl Moden bis zu k_{max} oder ω_{max} sind

$$N(\omega_{max}) = 2 \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{L\omega}{\pi c} \right)^3 = \frac{8\pi V^3 L^3}{3c^3} \quad (3.2.19)$$

wobei die Faktoren die **Polarisationen**, **den Bruchteil des Kugelsegments**, und **Radius des Kugelsegments** darstellen. Die Modendichte erhält man durch Ableiten

$$n(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}d\nu \quad (3.2.20)$$

Die Energie des Lichtes kann nur diskrete Werte annehmen, nach Einstein ist $E = h\nu$. Die Wände unseres Resonators sollen die Temperatur T haben. Die Wahrscheinlichkeitsdichte Eigenschwingungen mit der Energie $W(k) = k \cdot h\nu$ im Gleichgewicht mit Wänden der Temperatur T ist dann

$$p(k) = \frac{n}{Z} \exp\left(-\frac{(k \cdot h\nu)}{k_B T}\right) \quad (3.2.21)$$

wobei n die Gesamtdichte aller Eigenschwingungen im Resonator sind. Die Grösse Z in dieser Gleichung ist die Zustandssumme

$$Z = \sum_k \exp\left(-\frac{(k \cdot h\nu)}{k_B T}\right) \quad (3.2.22)$$

Mit dieser Definition ist $p(k)$ normiert:

$$n = \sum_k p(k)$$

Die mittlere Energiedichte pro Eigenschwingung ist nun

$$\bar{\rho}d\nu = \frac{1}{n} \sum_k p(k)(k \cdot h\nu)d\nu = \frac{1}{Z} \sum_k (k \cdot h\nu) \exp\left(-\frac{(k \cdot h\nu)}{k_B T}\right) d\nu \quad (3.2.23)$$

Die unendliche Reihe hat einen analytisch berechenbaren Grenzwert

$$\bar{\rho}d\nu = \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} d\nu \quad (3.2.24)$$

Die spektrale Strahlungsdichte $\rho(\nu, T)$ bekommen wir, indem die mittlere Energiedichte pro Eigenschwingung mit der Dichte der Eigenschwingungen $n(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}d\nu$ multipliziert wird. Wir erhalten das Plancksche Strahlungsgesetz.

Plancksches Strahlungsgesetz

$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/(k_B T)} - 1} d\nu \quad (3.2.25)$$

3.2.2.1.1. Einsteins Quantenhypothese Ausgehend von seinem Verständnis des Photoeffekts [Ein05] kam Einstein zur folgenden Hypothese:

Quantenhypothese Einsteins

Atome, die die Energie $h\nu$ absorbieren, haben eine höhere Energie als Atome im Grundzustand

Wir verwenden die folgenden Definitionen:

n^* Teilchenzahldichte der angeregten Atome

n_0 Teilchenzahldichte der Grundzustandsatome

Wir nehmen thermisches Gleichgewicht an und verwenden deshalb die *Boltzmann-Verteilung* zur Berechnung der Teilchenzahldichte der angeregten Atome

$$\frac{n^*}{n_0} = e^{-E/(k_B T)} \quad (3.2.26)$$

Albert Einstein nahm an, dass wie in Abbildung fig:energie:austausch dargestellt der Energieaustausch zwischen dem Unteren und dem oberen Zustand auf drei Wegen möglich sei. Die Anregung aus dem unteren Zustand in den oberen Zustand (Niveau) geschieht nur, wenn externe Energie absorbiert. Der höherenergetischen Zustand kann auf zwei Wegen verlassen werden: erstens zufällig (statistisch) oder induziert, das heisst im Takt mit externen Feldern.

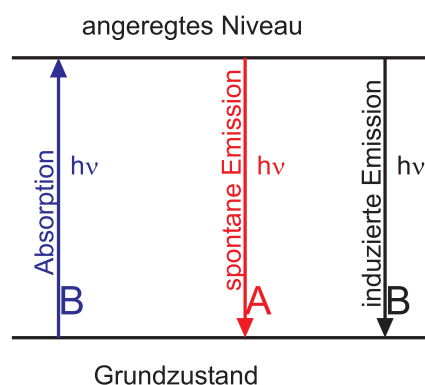


Abbildung 3.4.: Schema der möglichen Anregungen und Emissionen in einem Zwei-niveau-Atom.

Einstein hatte als Neuerung die *induzierten Emission* postuliert. Zur Berechnung des Spektrums eines schwarzen Strahlers verwenden wir die Einsteinsche Formulierung mit Quanten. Ursprünglich hatte *Planck* das Spektrum mit thermodynamischen Methoden berechnet, wobei h das aus der statistischen Physik bekannte Phasenraumvolumen war. ein Phasenraumelement ist eine Fläche, deren eine Seite eine Länge und deren andere Seite eine Geschwindigkeit ist.

Die Anzahlen der Absorptionen und Emissionen werden wie folgt angegeben:

$$\begin{aligned}
\frac{\text{Anzahl Absorptionen}}{\text{m}^3 \text{ s}} &= B_1 \varrho(\nu, T) n_0 & (3.2.27) \\
\frac{\text{Anzahl spontane Emissionen}}{\text{m}^3 \text{ s}} &= A n^* \\
\frac{\text{Anzahl induzierter Emissionen}}{\text{m}^3 \text{ s}} &= B_2 \varrho(\nu, T) n^*
\end{aligned}$$

wobei A den *Einsteinkoeffizienten* den *spontanen Emission*, B_1 der Einsteinkoeffizienten der *Absorption* und B_2 den Einsteinkoeffizienten der *induzierten Emission* bedeutet.

3.2.2.1.2. Von der Einsteinschen Quantenhypothese zum Planckschen Strahlungsgesetz Im Gleichgewicht muss es gleich viele Emissionen wie Absorptionen geben.

$$B_1 \varrho(\nu, T) n_0 = A n^* + B_2 \varrho(\nu, T) n^* \quad (3.2.28)$$

Da die induzierte Emission der Umkehrprozess zur Absorption ist, muss

$$B_1 = B_2 = B \quad (3.2.29)$$

sein. Wir können Gleichung (3.2.28) wie folgt umformen

$$B \varrho(\nu, T) n_0 = (A + B \varrho(\nu, T)) n^* = [A + B \varrho(\nu, T)] n_0 e^{-E/(k_B T)} \quad (3.2.30)$$

Damit erhalten wir die Energiedichte

$$B \varrho(\nu, T) n_0 [1 - e^{-E/(k_B T)}] = A n_0 e^{-E/(k_B T)}$$

Infinitesimal geschrieben bekommen wir

$$\varrho(\nu, T) d\nu = \frac{A}{B} \frac{e^{-h\nu/(k_B T)}}{1 - e^{-h\nu/(k_B T)}} d\nu = \frac{A}{B} \frac{1}{e^{h\nu/(k_B T)} - 1} d\nu \quad (3.2.31)$$

Unbekannt ist nun noch A/B . Den Koeffizienten berechnet man aus der *Modendichte* des Hohlraumes

$$\frac{A}{B} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \quad (3.2.32)$$

Die Modendichte sagt, wie viele Resonanzen es pro Frequenzintervall gibt. Zusammen bekommen wir das Plancksche Strahlungsgesetz (wie Gleichung (3.2.25)).

$$\varrho(\nu, T) d\nu = \varrho_\nu(T) d\nu = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/(k_B T)} - 1} d\nu \quad (3.2.33)$$

Es ist nun instruktiv, die beiden Grenzfälle für sehr hohe und für sehr niedrige Frequenzen zu betrachten. Für sehr niedrige Frequenzen, im Grenzfall $h\nu \ll k_B T$, gilt

$$e^{h\nu/(k_B T)} \approx 1 + \frac{h\nu}{k_B T}$$

Dies ist das Raileigh-Jeans-Gesetz.

Rayleigh-Jeans-Gesetz

$$\varrho(\nu, T)d\nu = \varrho_\nu(T)d\nu \approx \frac{8\pi \nu^2}{c^3} k_B T d\nu \quad (3.2.34)$$

Dieses Gesetz war vor Planck bekannt. Es sagt voraus, dass die Energiedichte gegen hohe Frequenzen zunimmt, dass also im Ultravioletten die gesamte unendlich grosse Energie des Universums konzentriert sei. Diese *Ultraviolettkathastrophe* zeigt, dass das Gesetz nur in Teilbereichen stimmen kann.

Für sehr hohe Frequenzen, also $h\nu \gg k_B T$, gilt

$$e^{h\nu/(k_B T)} \gg 1$$

Dann kann das Plancksche Strahlungsgesetz durch das Wiensche Strahlungsgesetz angenähert werden

Wiensches Strahlungsgesetz

$$\varrho(\nu, T)d\nu = \varrho_\nu(T)d\nu \approx \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} e^{-h\nu/(k_B T)} d\nu \quad (3.2.35)$$

Das Wiensche Strahlungsgesetz (siehe Abbildung fig:3.5) stimmt einigermaßen, aber doch nicht so korrekt wie das Plancksche Strahlungsgesetz. Insbesondere ergibt sich aber bei Wien keine Ultraviolettkathastrophe.

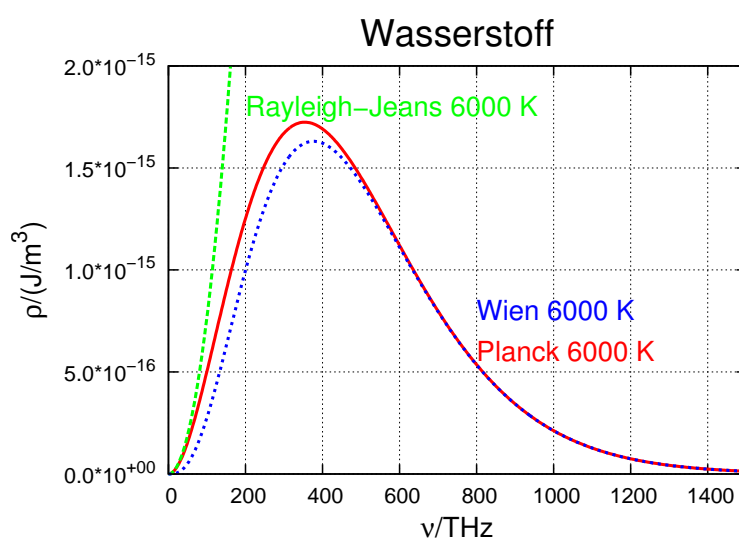


Abbildung 3.5.: Vergleich der Gesetze von Planck, Wien und Rayleigh Jeans bei 6000 K

Penzias und Wilson fanden Anfang der sechziger Jahre des zwanzigsten Jahrhunderts, dass das Rauschen höchstempfindlicher Antennen, wenn sie nach oben gerichtet waren, die gleiche spektraleverteilung hatte, wie ein schwarzer Strahler bei etwa 2.7 K. Abbildung 3.6 zeigt die kosmische Energiedichteverteilung

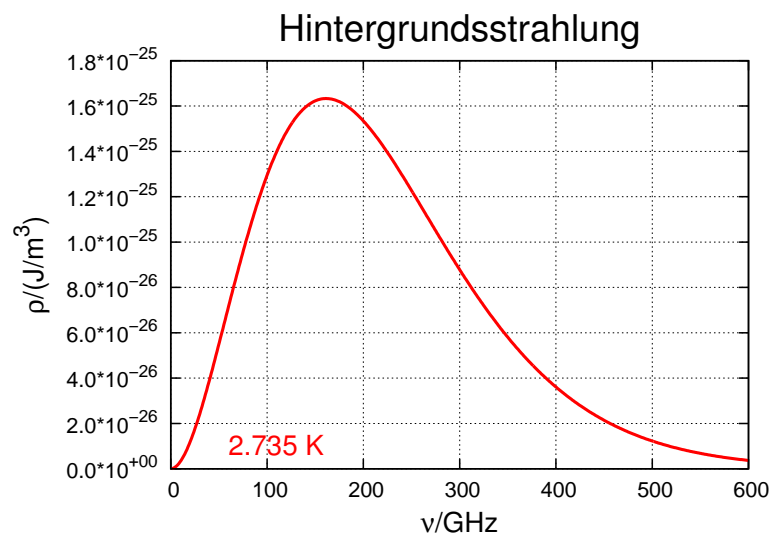


Abbildung 3.6.: Spektrale Energiedichteverteilung der Hintergrundsstrahlung von 2.735 K

3.2.2.2. Wiensches Verschiebungsgesetz

Oftmals möchte man die Frequenz ν wissen, bei der das Emissionsspektrum des schwarzen Strahlers maximal ist. Zur Berechnung des Maximums substituieren wir in Gleichung (3.2.25)

$$x = \frac{h\nu}{k_B T}$$

und setzen

$$dx = \frac{h}{k_B T} d\nu$$

Weiter vernachlässigen wir die konstanten Vorfaktoren, die für die Lage des Maximums irrelevant sind. Wir erhalten

$$\tilde{\varrho}(x)dx = \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (3.2.36)$$

Durch Ableiten erhalten wir die Lage des Maximums

$$0 = \frac{d\tilde{\varrho}(x)}{dx} = 3 \frac{x^2}{e^x - 1} - \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

Vereinfacht ergibt sich

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{3x^2(e^x - 1) - x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} \\
 x^3 e^x &= 3x^2(e^x - 1) \\
 e^x(3 - x) &= 3 \\
 e^x &= \frac{3}{3 - x}
 \end{aligned}$$

Die Lösung dieser transzendenten Gleichung ist

$$x = W_L\left(\frac{-3}{e^3}\right) = 2.821439372$$

wobei W_L **Lambert's W-Funktion** ist. Also kann die Lage des Maximums in der Planckschen Strahlungsformel (Gleichung (3.2.25)) durch das Wiensche Verschiebungsgesetz angegeben werden.

Wiensches Verschiebungsgesetz

$$\nu_m = \frac{2.82 k_B T}{h} \quad (3.2.37)$$

Die folgende Abbildung 3.7 zeigt eine graphische Darstellung des Wienschen Verschiebungsgesetzes.

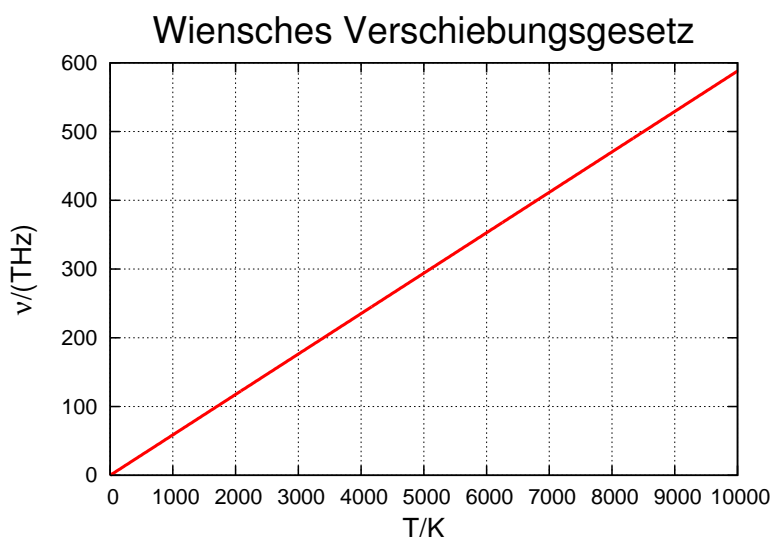


Abbildung 3.7.: Wiensches Verschiebungsgesetz

Die Energiedichte beim Emissionsmaximum des Wienschen Verschiebungsgesetzes

ist

$$\varrho(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi h \nu_m^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu_m/(k_B T)} - 1} d\nu = 35.7 \frac{k^3}{c^3 h^2} T^3 d\nu \quad (3.2.38)$$

Abbildung 3.8 stellt Gleichung (3.2.38) graphisch dar.

Wiensches Verschiebungsgesetz: spektrale Energiedichte

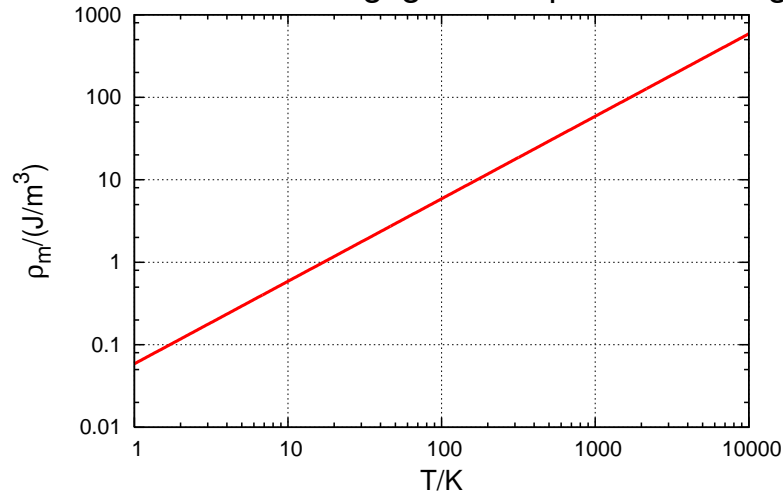


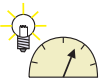
Abbildung 3.8.: Energiedichte im spektralen Maximum nach dem Wienschen Verschiebungsgesetz

3.2.2.3. Stefan-Boltzmann-Gesetz



Versuch zur Vorlesung:

Strahlungswürfel nach Leslie: Emissionsfaktor von verschiedenen Strahlern (Versuchskarte AT-20)



Versuch zur Vorlesung:

Stefan-Boltzmannsches Gesetz: mit Leslie-Würfel (Versuchskarte AT-43)

Wir möchten wissen, wie die Abstrahlung eines schwarzen Körpers von dessen Temperatur abhängt. Dazu definieren wir zunächst die spezifische Ausstrahlung nach Gleichung (3.2.6) senkrecht zur Oberfläche

$$R_\nu(T)d\nu = c \varrho(\nu, T)d\nu \quad (3.2.39)$$

Daraus bekommen wir die richtungsabhängige Abstrahlung (θ ist der Winkel zur Normalen)

$$R_\nu(T, \theta)d\nu = R_\nu(T) \cos \theta d\nu \quad (3.2.40)$$

Diese Grösse ist sowohl von der Frequenz wie auch von der Richtung abhängig. Der Mittelwert einer richtungsabhängigen Grösse ist

$$\langle f \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} f(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.2.41)$$

Über den Halbraum gerechnet erhalten wir

$$\langle f \rangle_{\text{Halbraum}} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} f(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \frac{\langle f \rangle}{2} \quad (3.2.42)$$

Zusammen mit der Mittelung über die Frequenz erhalten wir

$$R(T) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \left[\int_0^{\infty} c \cdot \varrho(\nu, T) d\nu \cos \theta \right] \sin \theta d\theta d\phi \quad (3.2.43)$$

Diese drei Integrale sind voneinander unabhängig. Wir beachten, dass

$$\int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi$$

und

$$\int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta = \frac{1}{2}$$

ist und erhalten

$$R(T) = \frac{c}{4} \int_0^{\infty} \varrho(\nu, T) d\nu \quad (3.2.44)$$

Mit Gleichung (3.2.25) ergibt dieses Integral

$$R(T) = \frac{c}{4} \cdot \frac{8}{15} \frac{\pi^5 k^4 T^4}{h^3 c^3} = \frac{2}{15} \frac{\pi^5 k^4 T^4}{h^3 c^2} \quad (3.2.45)$$

Wir definieren die *Stefan-Boltzmann-Konstante*

$$\sigma = \frac{2}{15} \frac{\pi^5 k^4}{h^3 c^2} = 5.67040(4) \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4} \quad (3.2.46)$$

und können dann das Stefan-Boltzmann-Gesetz so formulieren

Stefan-Boltzmann-Gesetz

$$R(T) = \sigma T^4 = \frac{2}{15} \frac{\pi^5 k^4}{h^3 c^2} T^4 \quad (3.2.47)$$

R ist die in den *Halbraum* abgestrahlte Leistung bei der Temperatur T . Diese Leistung $R(T)$ ist in der Abbildung 3.9 in doppelt-logarithmischer Darstellung gezeichnet.

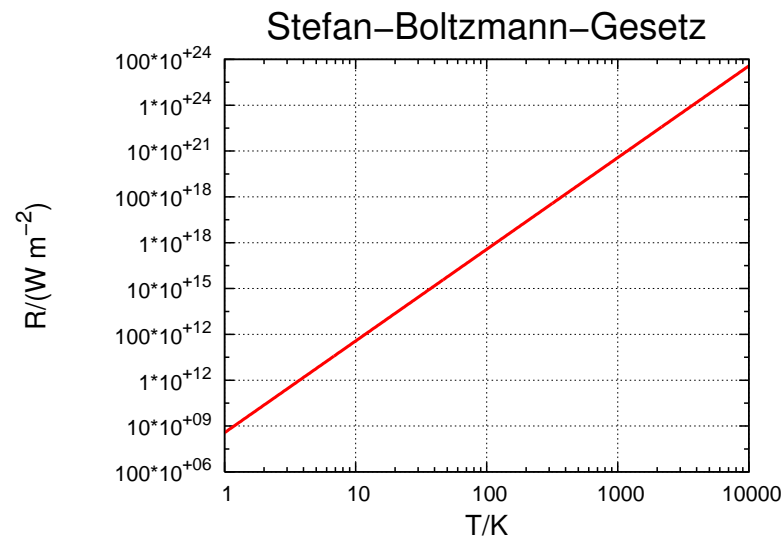


Abbildung 3.9.: Stefan-Boltzmann-Gesetz

3.2.3. Farben

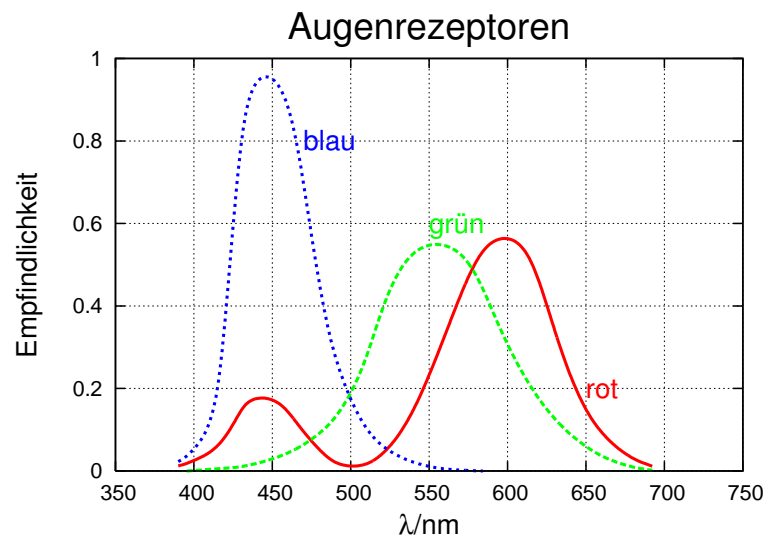


Abbildung 3.10.: Empfindlichkeitskurven der Augenrezeptoren skaliert auf gleiche integrale Empfindlichkeit (nach [Mes06])

Was wir Farben nennen, hängt von der Interpretation der Reize unserer Sehnerven ab. Abbildung 3.10 zeigt die spektrale Empfindlichkeit des Auges.

3.2.4. Strahlung der Sonne

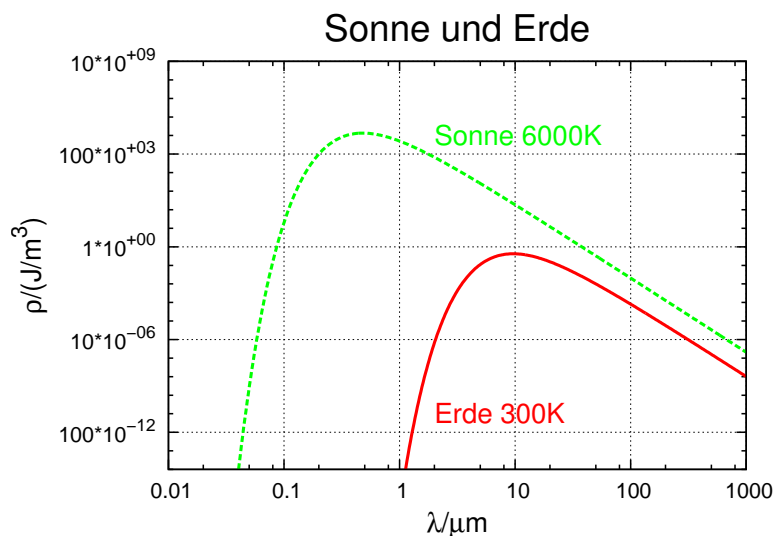


Abbildung 3.11.: Vergleich der spektralen Energiedichte von Sonne und Erde. Die verschiedene Lage der Maxima ermöglicht den *Treibhauseffekt*.

Sowohl die Sonne wie auch die Erde sind in ziemlich guter Genauigkeit schwarze Strahler. Abbildung 3.11 zeigt die beiden Kurven, wobei die Erde die Temperatur 300 K und die Sonne die Temperatur 6000 K hat. Die Unterschiede der beiden Kurven bewirken, dass die Energiezufuhr zur Erde bei einer anderen Wellenlänge oder Frequenz geschieht wie deren Abstrahlung.

4. Teilchen und Wellen

4.1. Das Photon

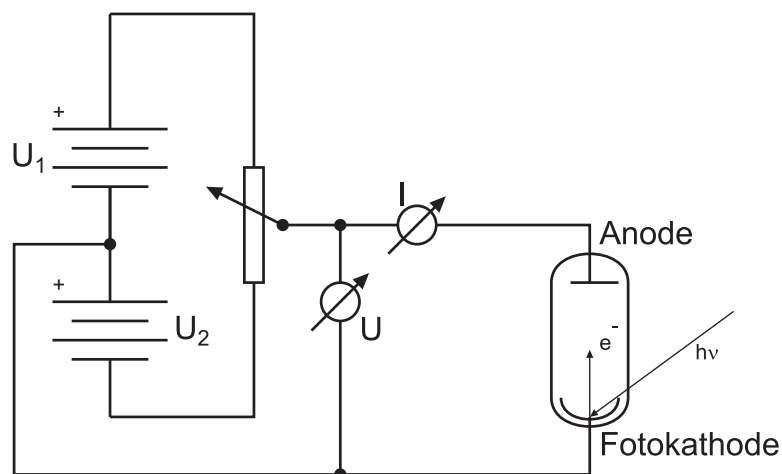


Abbildung 4.1.: Versuchsanordnung zur Messung des Fotoeffektes

Einsteins Erklärung des Fotoeffektes [Ein05] war einer der Meilensteine auf dem Siegeszug der Quantenmechanik. Abbildung 4.1 zeigt den Versuchsaufbau. Licht beleuchtet die Fotokathode und befreit so Elektronen aus dem Metall. Diese werden von der Anode abgesogen und erzeugen einen Strom, das Messsignal. Die beiden Spannungen U_1 und U_2 sind so angeordnet, dass die Anode sowohl an positiver wie auch an negativer Spannung liegen kann.



Versuch zur Vorlesung:

Fotoeffekt: qualitativ mit Aluminiumplatte (Versuchskarte AT-17)

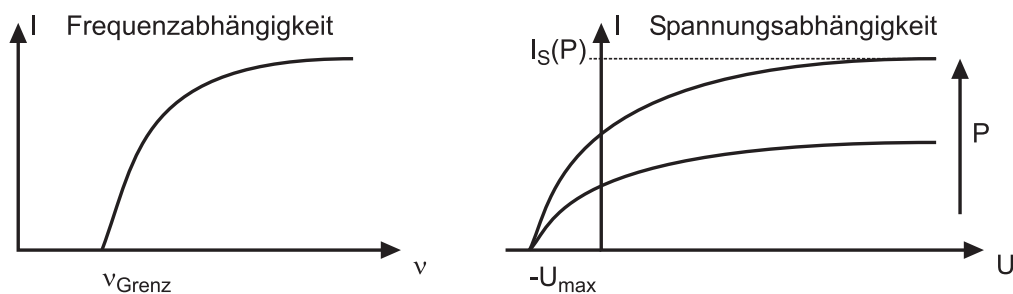


Abbildung 4.2.: Links: Frequenzabhängigkeit des Fotostroms bei konstantem U . Rechts die Abhängigkeit von der Spannung zwischen Kathode und Anode. Negative Spannungen bedeuten, dass die Photonen die Elektronen aus der Anode herausschlagen. Die Spannung U_{max} ist die maximale Bremsspannung.

Wenn der Fotoeffekt gemessen wird, dann können die in [Abbildung 4.2](#) dargestellten Beobachtungen gemacht werden. bei konstanter Anodenspannung U muss das Licht eine gewisse Frequenz überschreiten (oder eine bestimmte Wellenlänge) unterschreiten, damit ein Strom fließt. Wenn die Spannung U variiert wird, dann nimmt der Strom mit zunehmender Spannung U monoton zu. Unter einer negativen Spannung $-U_{max}$ fließt kein Strom. Wird nun die Lichtleistung erhöht, dann nimmt der Strom zu, aber die Grenzspannung $-U_{max}$ ändert sich nicht.

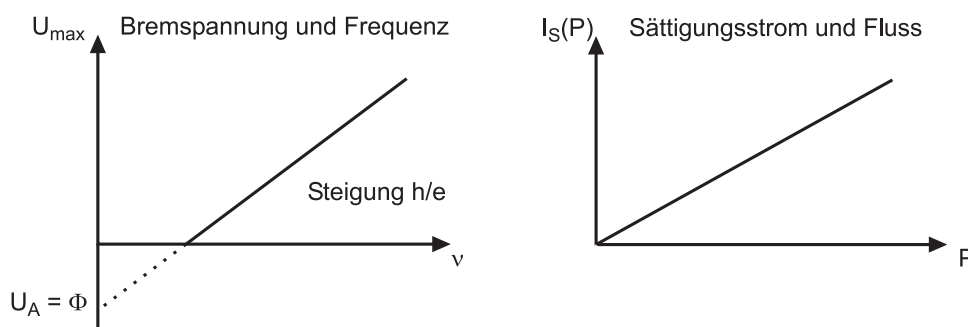


Abbildung 4.3.: Links: Abhängigkeit der Bremsspannung U_{max} von der Frequenz ν . $U_A = \Phi$ heisst die Austrittsarbeit. Rechts die Abhängigkeit des Sättigungsstromes I_S vom Photonenfluss $P = \Phi$.

[Abbildung 4.3](#) zeigt, dass bei einer bestimmten Spannung $U > U_{max}$ der Strom proportional zur Leistung ist. Einstein zog daraus die folgenden Schlüsse:

- Licht transportiert Energie in Paketen, Photonen oder Quanten (von Quantum) genannt. Die Grenzspannung $-U_{max}$ ist ein Mass für dieses Energiequant: $E_{\text{Photon}} = eU - max$.
- Leistung ist Energie pro Zeit. Also ist die Leistung und damit auch die Intensität ein Mass für die Anzahl der Photonen (Energiequanten).

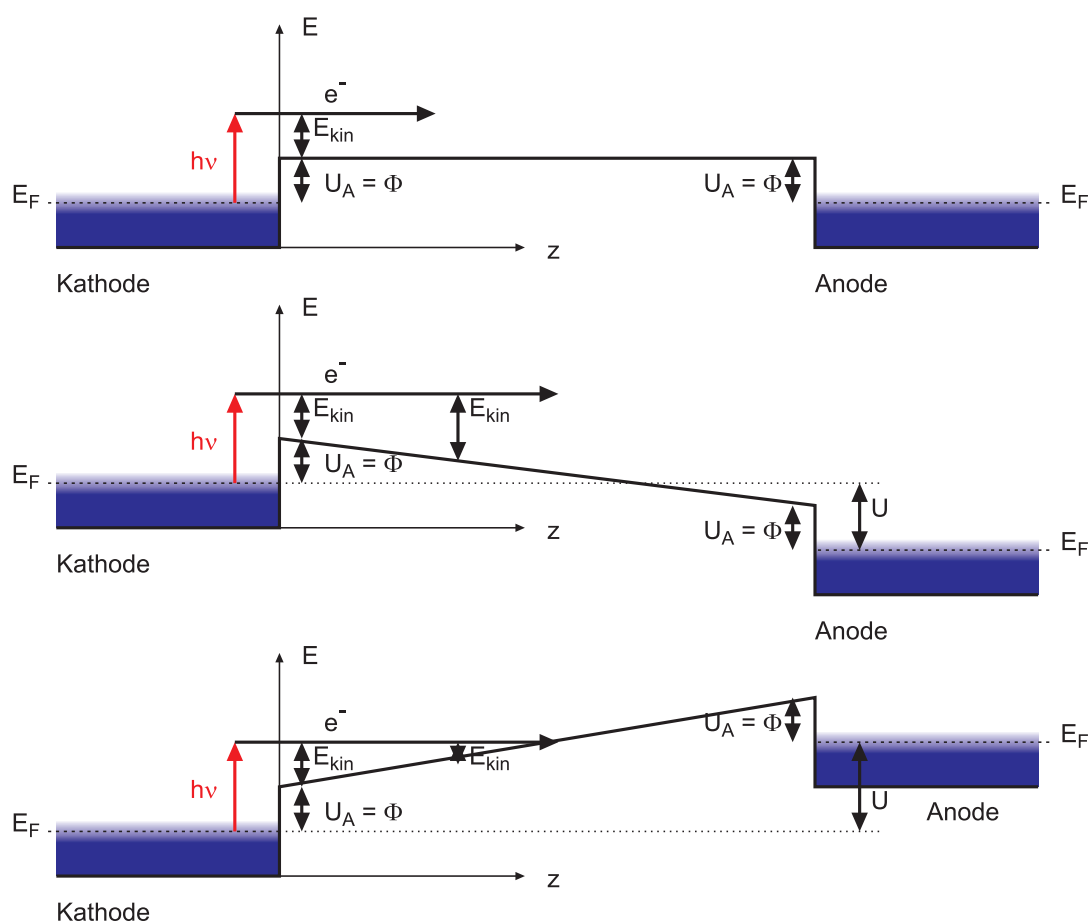


Abbildung 4.4.: Oben: Energieschema des Fotoeffekts ohne angelegte Spannung, Mitte: mit der Anode positiv gegen die Photokathode, unten mit der "Anode" negativ gegen die "Photokathode". Die Energiekoordinate muss man sich als vierte (ohne Zeit) oder fünfte Koordinate eines Punktes vorstellen.

Abbildung 4.4 zeigt, im Vorgriff auf die Vorlesung zur Physik der kondensierten Materie, ein Bänderschema des Fotoeffektes. Es ist bekannt, dass bei der Tempe-

ratur T die thermische Energie sich nach Boltzmann wie $\exp(-E/(k_B T))$ verhält. Damit Also Elektronen bei Raumtemperatur im Metall bleiben, muss eine Energiebarriere zum Verlassen des Festkörpers existieren. Die Höhe dieser Barriere wird Austrittsarbeit Φ genannt.

Elektronen, die das Metall verlassen, haben die kinetische Energie:

$$E_{kin} = h\nu - \Phi \quad (4.1.1)$$

Da die kinetische Energie der Elektronen im Metall nach Boltzmann bei einer endlichen Temperatur über einen Energiebereich verteilt, also ausgeschmiert, ist, ist auch die kinetische Energie der Elektronen E_{kin} ausgeschmiert. Da die Emissionsrichtung der Elektronen um die Senkrechte zur Oberfläche verteilt ist, wird die Energieverteilung der Elektronen noch weiter verändert.



Versuch zur Vorlesung:

Interferenz am Doppelspalt: mit einzelnen Photonen (Versuchskarte AT-50)



Versuch zur Vorlesung:

Doppelspalt: Interferenz mit polarisiertem Licht (Versuchskarte AT-51)

Die Versuche mit dem Doppelspalt zeigen, dass die statistische Interpretation des Energietransportes von Einstein korrekt war.

Wenn die Lichtintensität niedrig ist, verhält sich Licht wie ein Strom von Teilchen. Wenn die Auftreffwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit des Ortes über eine längere Zeit aufsummiert wird, ergeben sich Interferenzmuster, wie sie von der Wellentheorie vorausgesagt wird.

Photonen haben wie alle anderen Objekte mit Energie sowohl einen Teilchencharakter wie auch einen Wellencharakter. Der Wellencharakter gibt die Wahrscheinlichkeit, ein Objekt an einem bestimmten Ort zu einer bestimmten Zeit zu finden. Die Energie pro Objekt ist quantisiert.

4.1.1. Masse und Impuls

Licht ist ein Strom von Energiepaketen mit einer Richtung und einer Geschwindigkeit, der (vom Medium abhängigen) Lichtgeschwindigkeit. Aus der Mechanik weiss man, dass eine Änderung der kinetischen Energie durch eine Kraft erreicht wird. Genauso benötigt man eine Kraft zur Änderung der Richtung. Eine Kraft ist, auch relativistisch, eine Änderung des Impulses pro Zeit.

Photonen sind Teilchen ohne Ruhemasse, aber mit einer kinetischen Energie

$$E = h\nu \quad (4.1.2)$$

Konsequenterweise haben Photonen dann auch einen Impuls. Um die Beziehung zwischen dem Impuls des Lichtes und seiner Energie zu bestimmen verwenden wir die relativistische Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2} \quad (4.1.3)$$

Da im Vakuum die Geschwindigkeit des Lichtes die Vakuumlichtgeschwindigkeit ist, gilt für alle Photonen

$$m_0 = 0 \quad \text{und} \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (4.1.4)$$

Aus Gleichung (4.1.3) und Gleichung (4.1.2) bekommt man

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} \quad (4.1.5)$$

Damit ist die Impulsänderung bei Absorption und Reflexion

$$\begin{aligned} \Delta p &= \frac{2h}{\lambda} = \frac{2h\nu}{c} && \text{bei Reflexion} \\ \Delta p &= \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} && \text{bei Absorption} \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

Daraus ergibt sich bei der Reflexion der mechanische Druck

$$p = \frac{\Delta F}{\Delta A} = \frac{\Delta p}{\Delta t \Delta A} = \frac{2h\nu}{c \Delta A \Delta t}$$

Mit \check{n} = Anzahl Teilchen/Zeit bekommen wir

$$p = \frac{2\check{n} h\nu}{c \Delta A}$$

Die Intensität ist auch

$$I = \frac{\Delta P}{\Delta A} = \frac{h\nu \check{n}}{\Delta A}$$

Schliesslich erhalten wir

$$\begin{aligned} p &= \frac{2I}{c} && \text{bei Reflexion} \\ p &= \frac{I}{c} && \text{bei Absorption} \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

Abbildung 4.5 zeigt eine Apparatur zur Messung des *Lichtdruckes* auf mikroskopische einseitig eingespannte Balken[MRH+92].

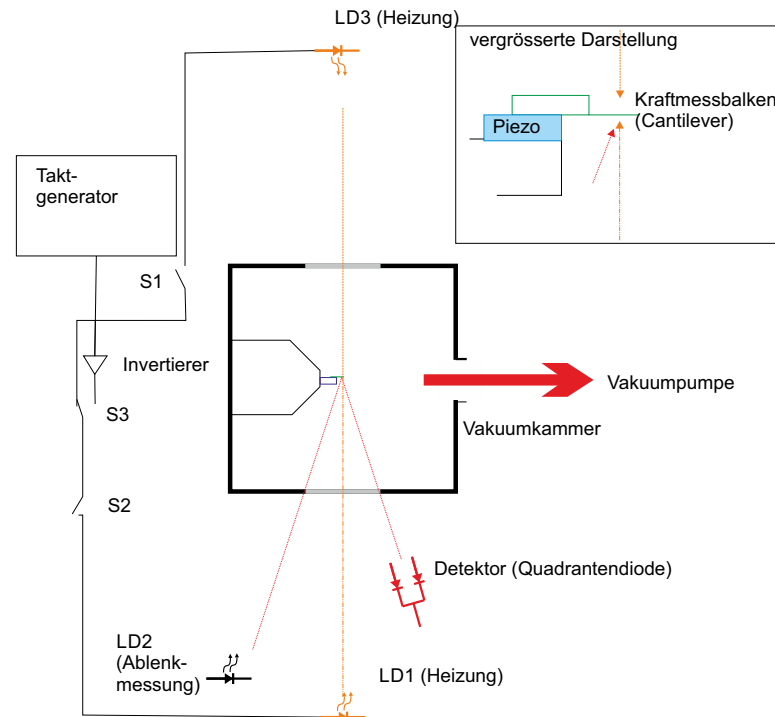


Abbildung 4.5.: Aufbau einer Apparatur zum Messen des Lichtdrucks.

Das gleiche Ergebnis hätten wir auch erhalten, wenn wir die Volumenenergiedichte des Lichtfeldes vor dem Spiegel oder vor dem Absorber berechnet hätten. Beim Absorber fließt nur ein Lichtstrom auf ihn zu, bei der Reflexion gibt es zwei gegenläufige Lichtströme, also auch die doppelte Energiedichte. Konkret lautet die klassische Rechnung aus der Elektrizitätslehre so:

Man beginnt mit dem Vektor des Energieflusses, dem **Poyntingvektor** .

$$\mathbf{S}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t)$$

Hier ist der Poyntingvektor gleich der Strahlungsstromdichte (3.1), also $\mathbf{S} = \mathbf{D}$. Weiter ist die Intensität gleich dem Betrag der Strahlungsstromdichte, also $I = |\mathbf{D}|$ Druck ist das Gleiche wie Energie pro Volumen oder Energiedichte. Wenn die Energiedichte p sich mit einer Geschwindigkeit c bewegt, ist der Poyntingvektor $\mathbf{S} = \mathbf{D}$.

$$S = p \cdot c$$

und damit der Druck oder die Energiedichte ρ auf eine senkrecht dazu stehende Ebene

$$p_{\perp} = \rho = \frac{S}{c} = \frac{I}{c} \tag{4.1.8}$$

Bei isotroper Strahlung ist die der Druck

$$p_{isotrop} = \frac{1}{3}\rho \tag{4.1.9}$$

Die beiden folgenden Abbildungen zeigen Messungen mit der Apperatur aus Abbildung 4.5.

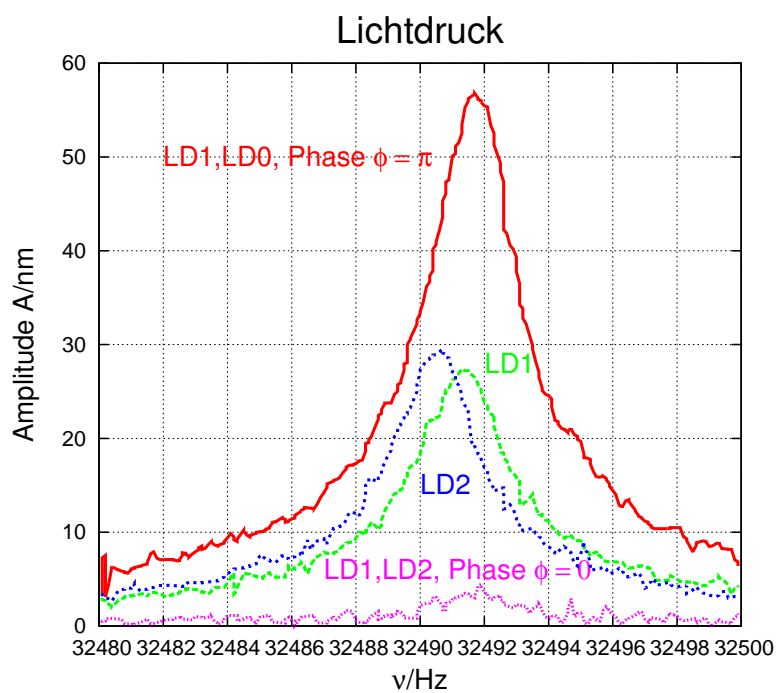


Abbildung 4.6.: Messung der lichtinduzierten Kräfte. Die Amplitude ist maximal, wenn die Impulsmodulation maximal ist.

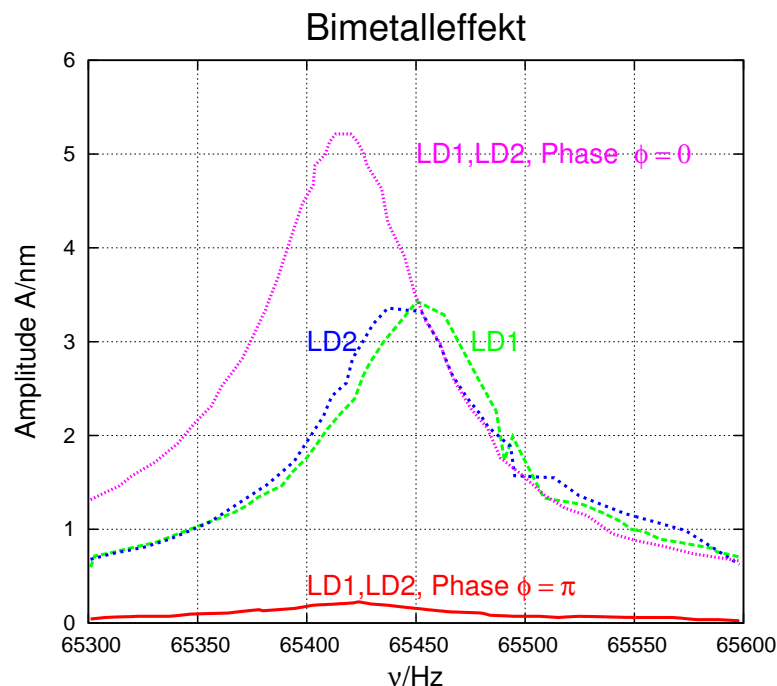


Abbildung 4.7.: Kontrolle: Mit einer Metallbeschichtung ist die Amplitude maximal, wenn die thermische Modulation maximal ist. man beachte die Verschiebung zu kleineren Frequenzen bei sehr hohen Amplituden.

Es wurden zwei gegenläufige Laserstrahlen verwendet. Im Falle der Abbildung 4.6 wurden die Strahlen wechselseitig ein- und ausgeschaltet, so dass der Kraftwechsel maximal wurde und gleichzeitig der Energieeintrag über die Zeit konstant war. Die gemessene Kurve ist eine Resonanzkurve als Funktion der Schaltfrequenz. Die Resonanzkurve zeigt den ponderomechanischen Effekt des Lichtes sehr schön. Zur Kontrolle wurde in der Abbildung 4.7 die beiden gegenläufigen Laserstrahlen gleichzeitig ein- und ausgeschaltet. Damit ist die ponderomotorische Kraft des Lichtes konstant null, aber der Energieeintrag wird maximal moduliert. Mit dieser Messung kann gezeigt werden, dass in Abbildung 4.6 wirklich mechanische Effekte des Lichtes bestimmt wurden.

Schliesslich kann aus den obigen Messungen und Überlegungen eine dynamische Masse des Photons bestimmt werden. Aus

$$p = mc = \frac{h\nu}{c}$$

bekommen wir

$$m = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{\lambda c} \quad (4.1.10)$$

Beispiel: Mit $\lambda = 500\text{nm}$ ist $m_{\text{photon}} = 4.4 \cdot 10^{-36}\text{kg}$.

4.1.1.1. Compton-Effekt

Beim Compton-Effekt wird Licht an einem Teilchen gestreut. Im Originalversuch von Arthur Compton [Com23] wurden Photonen an Elektronen gestreut.

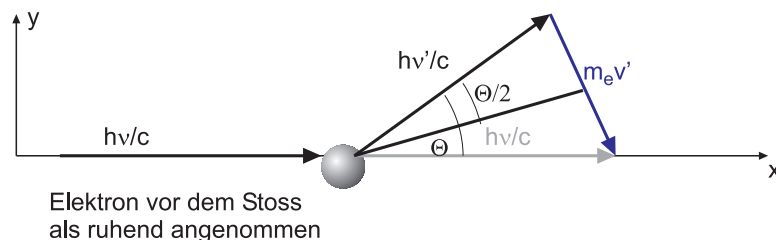


Abbildung 4.8.: Impulserhaltung beim *Compton-Effekt*.

In Abbildung 4.8 ist die experimentelle Anordnung gezeigt. Der Winkel zwischen der einfallenden Lichtwelle (oder, was äquivalent dazu ist, dem Impuls des einfallenden Photons) und der gestreuten Welle sei θ . Die Masse des Elektrons sei m_e . Bei jeder Kollision zwischen zwei Teilchen wird Energie ausgetauscht. Dabei ändert sich der Impuls des leichteren Teilchens, hier also des Photons, besonders stark. Mit Gleichung (4.1.5) ändert sich also auch die Frequenz und damit die Wellenlänge und die Energie.

Aus der Impulserhaltung folgt im Falle einer kleinen Frequenzverschiebung ist $\nu \approx \nu'$. Damit haben wir ein gleichschenkliges Dreieck mit der Mittelsenkrechten $h\nu$ und der halben Grundseite $m_e v'/2$ ein rechtwinkliges Dreieck, wobei $h\nu$ die Hypotenuse ist. Dann haben wir

$$\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \frac{h\nu}{c} = \frac{m_e v'}{2} \quad (4.1.11)$$

Aus der Energieerhaltung folgt weiter

$$h\nu = h\nu' + E'_{kin,e} = h\nu' + \frac{1}{2}m_e v'^2 \quad (4.1.12)$$

Mit

$$\frac{m_e^2 v'^2}{4} = \frac{1}{2}m_e E'_{kin,e} = \frac{1}{2}m_e (h\nu - h\nu')$$

wird

$$\begin{aligned} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \frac{h^2 \nu^2}{c^2} &= \frac{m_e^2 v'^2}{4} &&= \frac{1}{2}m_e (h\nu - h\nu') \\ 2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \frac{h}{m_e c^2} &= \frac{h\nu - h\nu'}{h\nu^2} \approx \frac{h\nu - h\nu'}{h\nu\nu'} &&= \frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} \end{aligned}$$

Mit $\lambda = c/\nu$ ergibt sich für die

Compton-Streuung

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{m_e c} \sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) = (4.85 \text{ pm}) \cdot \sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) \quad (4.1.13)$$

und die

Compton-Wellenlänge

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2.43 \text{ pm} \quad (4.1.14)$$

Abbildung 4.9 zeigt Messungen der Compton-Streuung bei unterschiedlichen Streuwinkeln. Die horizontale Achse ist die Wellenlänge.

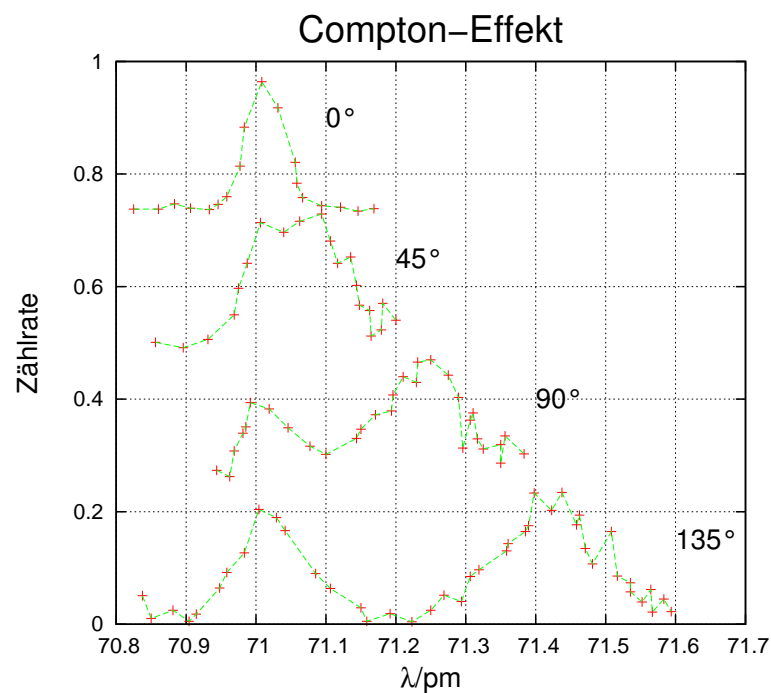


Abbildung 4.9.: Compton-Effekt bei vier Streuwinkeln

4.1.1.2. Mössbauer-Effekt

Beim Mössbauer-Effekt [Möb58] wurde die Emission und die Absorption von γ -Quanten aus Kernen beobachtet. Gamma-Quanten sind hochenergetische Photo-

nen. Durch die hohe Masse der Kerne und deren Einbindung in ein Kristallgitter ist die Energie der γ -Quanten sehr wohl definiert (d.h. die Streuung der Energie ist minimal.). Das hängt auch damit zusammen, dass die Energieniveaus in Kernen sehr scharf definiert sind.

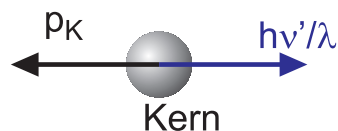


Abbildung 4.10.: Impulserhaltung bei der Emission eines Gammaquants.

Bei der Emission eines γ -Quants sind Energie und Impuls erhalten. Sei $h\nu$ die Energie eines γ -Quants, wenn der Kern bei der Emission in Ruhe bleibt. Das Emissions- und das Absorptionsspektrum müssen überlappen (siehe Abbildung 4.1.1.2).

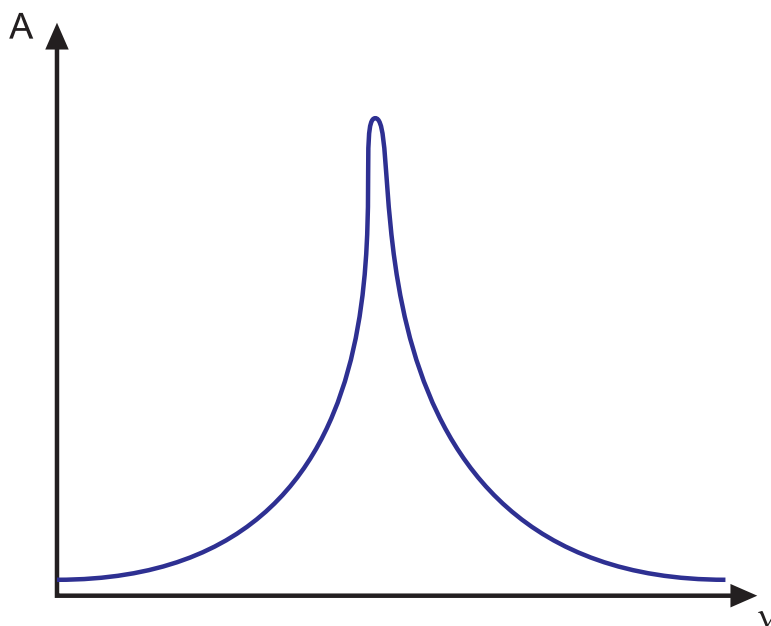


Abbildung 4.11.: Absorptions- oder Emissionsspektrum für ein γ -Quant.

Absorptions- oder Emissionsspektrum für ein γ -Quant. Nur wenn die Frequenz des ankommenden γ -Quants im Bereich der Absorptionslinie liegt, kann das Quant absorbiert werden.

Wegen der Impulserhaltung kann man schreiben:

$$\begin{aligned} \sum p &= 0 && \text{vor der Emission} && (4.1.15) \\ p_k + \frac{h\nu'}{c} &= 0 && \text{nach der Emission} \end{aligned}$$

wobei p_k der Impuls des Kernes sei. Mit m_k der Masse des Kernes wird seine kinetische Energie

$$E_{kin,Kern} = \frac{1}{2m_k} p_k^2 = \frac{h^2 \nu'^2}{2m_k c^2} \quad (4.1.16)$$

Aus der Energieerhaltung folgt

$$\begin{aligned} h\nu' &= h\nu - E_{kin,Kern} && (4.1.17) \\ E_{kin,Kern} &= h(\nu - \nu') = h\Delta\nu = \frac{h^2 \nu'^2}{2m_k c^2} \end{aligned}$$

Wenn man eine vernachlässigbar kleine Energieänderung des Photons (γ -Quants) annimmt ($\nu' \approx \nu$) macht man einen Fehler, der typischerweise kleiner als 10^{-3} ist. Wir erhalten:

$$\Delta\nu \approx \frac{h\nu^2}{2m_k c^2} \quad (4.1.18)$$

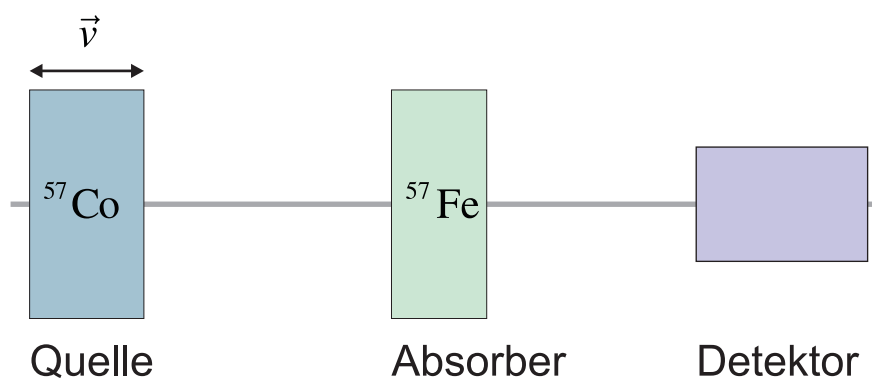


Abbildung 4.12.: Experimenteller Aufbau der Mössbauer-Spektroskopie

Um den Rückstossimpuls des Kernes zu minimieren, erfand Mössbauer den folgenden nobelpreiswürdigen Trick: Die γ -Quanten emittierenden Atome wurden in einen Kristall eingebettet. Damit wird der Rückstossimpuls von den anderen Atomen im Gitter aufgenommen (Thema der Vorlesung Festkörperphysik). Die Linienbreite der Linien wird dann so schmal, dass normale Detektoren sie nicht auflösen können. Mössbauer verwendete dann eine ähnliche Versuchsanordnung wie in Abbildung 4.12 gezeigt. Die Energie der Photonen ist nun so gut definiert, dass die relativistische Frequenzverschiebung bei Geschwindigkeiten von mm/s ausreicht, um die Absorption zu unterdrücken.

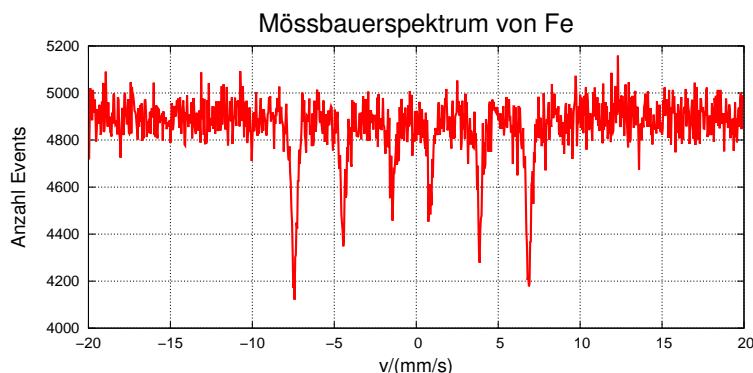


Abbildung 4.13.: Mössbauerspektrum von ^{57}Fe , gemessen von Dr. M. Gonçalves.

Abbildung 4.13 zeigt eine Messung eines Mössbauerspektrums von ^{57}Fe . Die beiden Kerne mit der gleichen Barionenzahl (Summe aus Neutronen und Protonen) haben eine ähnliche Niveaustuktur. ^{57}Co ist instabil, ^{57}Fe arbeitet als Absorber. Durch den Einbau in einen Festkörper sind die Linienbreiten sehr klein. Deshalb wird die Quelle (oder der Absorber) gegen den Absorber (oder der Quelle) bewegt. Angezeigt ist die Geschwindigkeit der ^{57}Co -Quelle und die Anzahl der Ereignisse nach einer sehr langen Messung (> 24 h). Die Geschwindigkeit ist linear, das Spektrum mit sechs Linien (Zeemann-Aufspaltung) ist symmetrisch um $v = 0$.

4.2. Elektronen

Seit J.J. Thomson [Tho97] das Elektron entdeckt hatte, ist es eines der am genauesten untersuchten Elementarteilchen. Die Kennwerte des Elektrons werden mit den folgenden Methoden bestimmt:

Ladung pro Masse e/m : durch Massenspektrometer (Methode aus der Elektrizitätslehre)

Elektronenladung e : durch den Millikan-Versuch oder durch Elektrolyse

Elektronenradius r : durch Streuversuche

4.2.1. Ladung des Elektrons

Die Ladung eines Elektrons kann auf elektrochemischem Wege bestimmt werden:

Elektrolyse Man bestimmt die umgesetzte Molzahl und daraus mit der Gaskonstante R die Materiemenge. Durch Bestimmung der Gesamtladung über eine Integration des Stromes erhält man die Faraday-Zahl $F = e \cdot N_A$

Massenspektrometer In gekreuzten \mathbf{E} - und \mathbf{B} -Feldern bestimmt man e/m_e .

4.2.1.1. Millikan-Versuch

Der Millikan-Versuch [Mil11, Mil13, Hol00] ermöglicht eine direkte Bestimmung von e . Millikans Schlüsselidee war, über die viskose Reibung von kleinen Öltröpfchen die Kraft eines elektrischen Feldes auf Ladungen zu bestimmen.

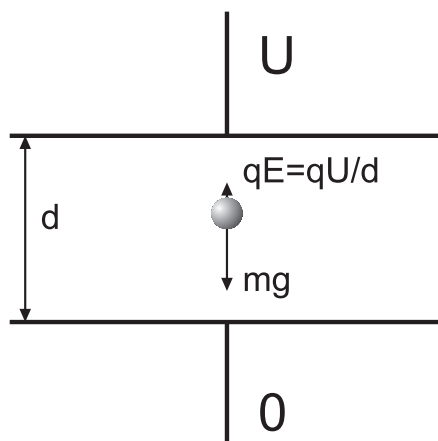


Abbildung 4.14.: Bestimmung der Elektronenladung nach Millikan [Mil11, Mil13]

Der Versuch wird in einer Anordnung wie in Abbildung 4.14 durchgeführt.

Ein Öltröpfchen mit dem Durchmesser $2r$ und der Masse $m_T = \frac{4\pi}{3}\rho_T r^3$ wird zwischen die Platten eines Kondensators (Abstand d) gebracht. Auf dem Öltröpfchen befindet sich die Ladung q . Unter dem Einfluss der Gravitation F_G , des Auftriebs F_A in Luft (Dichte ρ_L) und des elektrischen Feldes F_E bewegt sich das Öltröpfchen mit der konstanten Geschwindigkeit v , gegeben durch die Stokesche Reibungskraft F_S .

Dabei treten die folgenden Kräfte auf:

$$\mathbf{F}_G + \mathbf{F}_E + \mathbf{F}_A + \mathbf{F}_S = 0 \quad (4.2.1)$$

Stokes Gesetz für eine laminare Strömung sagt:

$$\mathbf{F}_S = -6\pi\eta\mathbf{v}r \quad (4.2.2)$$

Die elektrostatische Kraft Kraft ist:

$$\mathbf{F}_E = q\mathbf{E} = q\mathbf{grad} U = q\frac{U}{d}\mathbf{e}_E \quad (4.2.3)$$

Dann muss auch die Gravitation berücksichtigt werden:

$$\mathbf{F}_G = m_T\mathbf{g} = \frac{4\pi}{3}\rho_T r^3\mathbf{g} \quad (4.2.4)$$

Schliesslich haben die Tröpfchen in Luft einen Auftrieb:

$$\mathbf{F}_A = -\frac{4\pi}{3}\rho_L r^3\mathbf{g} \quad (4.2.5)$$

Kombiniert man die obigen Gleichungen, erhält man für den Zusammenhang von Ladung und Geschwindigkeit

$$\frac{4\pi}{3}\rho_T r^3 \mathbf{g} - \frac{4\pi}{3}\rho_L r^3 \mathbf{g} + q \mathbf{grad} U = -6\pi \eta \mathbf{v} r \quad (4.2.6)$$

Betragsmässig ergibt sich

$$\frac{4\pi}{3}(\rho_T - \rho_L) r^3 g + q \frac{U}{d} = 6\pi \eta v r \quad (4.2.7)$$

und

$$q \frac{U}{d} = 6\pi \eta v r - \frac{4\pi}{3}(\rho_T - \rho_L) r^3 g \quad (4.2.8)$$

Damit kann die Ladung über das elektrische Feld (oder die Spannung), die Dichten, die Viskosität, die Fallstrecke und den Tröpfchendurchmesser bestimmt werden

$$q = 2\pi r \left(3\eta v - \frac{2}{3}(\rho_T - \rho_L) r^2 g \right) \frac{d}{U} \quad (4.2.9)$$

Im Einzelnen läuft der Versuch wie folgt ab:

Freier Fall mit $U = 0$

$$\begin{aligned} 0 &= 6\pi \eta v r - \frac{4\pi}{3}(\rho_T - \rho_L) r^3 g \\ 0 &= 3\eta v - \frac{2}{3}(\rho_T - \rho_L) r^2 g \\ r &= 3 \sqrt{\frac{\eta v_{Fall}}{2(\rho_T - \rho_L) g}} \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

Schwebezustand ($v = 0$)

$$\begin{aligned} q \frac{U}{d} &= -\frac{4\pi}{3}(\rho_T - \rho_L) r^3 g \\ q &= -\frac{4\pi}{3}(\rho_T - \rho_L) r^3 g \frac{d}{U} = -\frac{4\pi}{3}(\rho_T - \rho_L) \left(\frac{9\eta v_{Fall}}{2(\rho_T - \rho_L) g} \right)^{3/2} g \frac{d}{U} \\ q &= -\frac{\sqrt{2} 9\pi d}{U} \left(\frac{\eta^3 v_{Fall}^3}{(\rho_T - \rho_L) g} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (4.2.11)$$

Gemessene Geschwindigkeit v

$$q = \frac{6\pi r d}{U} \left(\eta v - \frac{2}{9}(\rho_T - \rho_L) r^2 g \right) \quad (4.2.12)$$

Millikan[[Mil13](#)] erhielt als Wert für die Elektronenladung $e = 1.592 \cdot 10^{-19} C$.



Versuch zur Vorlesung:

Millikan-Versuch: Ladung von Öltröpfchen ([Versuchskarte AT-13](#))

4.2.2. Grösse des Elektrons

Das Elektron mit seiner kleinen Masse ist eines der ausgeprägtesten quantenmechanischen Objekte. Wenn man annimmt, dass die Selbstenergie des elektrischen Feldes der relativistischen Ruheenergie des Elektrons entspricht, kann ein *klassischer Elektronenradius* $r_{e,class} = 2.8 \cdot 10^{-15}$ m bestimmt werden. Belloni [Bel81] zeigt, dass eine andere Überlegung von Fermi auf einen etwa 12 mal grösseren Elektronenradius führt. Neuere Experimente durch zum Beispiel Dehmelt [Deh88] haben jedoch gezeigt, dass der quantenmechanisch korrektere Radius des Elektrons $r_{e,QM} < 10^{-22}$ m sein muss. Genaueres ist nicht bekannt, es gibt keine abschliessende Aussage über den Elektronenradius. Es kann gut sein, dass ein Elektron ein mathematisches Punktteilchen ist, eine Divergenz im Raum.

Um den klassischen Elektronenradius zu berechnen, beginnen wir mit der Ladungsdichte ρ_{el} einer homogen geladenen Kugel mit dem Radius r

$$Q(r) = \frac{4\pi}{3} \rho_e l r^3$$

Wenn bei der gleichen Ladungsdichte eine Kugelschale mit der Dicke dr dazugefügt wird, trägt diese eine Ladung

$$dQ(r) = 4\pi \rho_{el} r^2 dr$$

Die Ladung Q wirkt auf eine Probeladung dQ im Abstand r vom Zentrum von Q mit der Kraft

$$F(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{QdQ}{r^2}$$

Hält man nun Q und dQ fest und führt dQ vom Unendlichen auf die Distanz r , so muss die folgende Energie zugeführt werden:

$$dE_{pot}(r) = - \int_{\infty}^r F(r) dr = - \frac{QdQ}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^r \frac{1}{r^2} dr = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{QdQ}{r}$$

Die gesamte Energie in der homogen geladenen Kugel ist

$$E_{pot,tot} = \int_0^r dE_{pot} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_0^r \frac{Q(r)dQ(r)}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_0^r \frac{\frac{4\pi}{3} \rho_e l r^3 4\pi \rho_{el} r^2}{r} dr = \frac{4\pi r^5}{15\epsilon_0}$$

Die Ladungsdichte kann mit

$$e = \frac{4\pi}{3} \rho_e r^3$$

ersetzt werden, so dass wir für eine homogen geladene Kugel bekommen

$$E_{selbst,homogen}(e, r) = \frac{3e^2}{20\pi\epsilon_0 r} \quad (4.2.13)$$

Diese Energie setzen wir der relativistischen Ruheenergie der Masse m_e gleich.

$$E_{rel} = m_e c^2 \quad (4.2.14)$$

Setzen wir Gleichung (4.2.13) und Gleichung (4.2.14) gleich und lösen nach r_e auf, erhalten wir

$$r_{e,class,homogen} = \frac{3}{5} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^2} = 1.7 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (4.2.15)$$

Andererseits kann man den klassischen Elektronenradius auch berechnen, wenn man annimmt, dass die gesamte Ladung an der Oberfläche konzentriert sei. Dazu betrachtet man das elektrische Feld einer Ladung e

$$E(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{r^2}$$

Die Energiedichte dieser Ladung ausserhalb ist

$$w(r) = \frac{\epsilon_0}{2} \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{r^2} \right)^2 = \frac{e^2}{32\pi^2\epsilon_0 r^4}$$

Der Energieinhalt des elektrischen Feldes ausserhalb in Kugelkoordinaten ist

$$\begin{aligned} E_{Feld} &= \int_{r_e}^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} w(r) \cdot r^2 \sin(\Theta) \cdot dr \cdot d\Theta \cdot d\phi \\ &= 4\pi \int_{r_e}^{\infty} w(r) \cdot r^2 \cdot dr \\ &= 4\pi \int_{r_e}^{\infty} \frac{e^2}{32\pi^2\epsilon_0 r^2} \cdot dr \\ &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int_{r_e}^{\infty} \frac{1}{r^2} \cdot dr \\ &= -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \Big|_{r_e}^{\infty} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_e} \end{aligned}$$

Durch Gleichsetzen mit Gleichung (4.2.14) erhalten wir

$$r_{e,class,Schale} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} = 1.4 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (4.2.16)$$

Wir haben also zwei leicht unterschiedliche Resultate für die homogene Ladung und die Oberflächenladung. Sie unterscheiden sich durch die Vorfaktoren $3/5$ und $1/2$. Deshalb, und weil es im cgs-System so schön aussieht definiert man

Der klassische Elektronenradius ist

$$r_{e,class} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} = 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (4.2.17)$$

4.3. Materiewellen

Wir haben gesehen, dass Licht sich bei gewissen Experimenten wie dem Fotoeffekt wie ein Teilchen verhält. In diesem Abschnitt wollen wir uns nun fragen, ob auch offensichtliche Teilchen wie das Elektron oder sogar Atome sich wie Wellen verhalten.

Wir wissen, dass jedes Teilchen einen Impuls \mathbf{p} hat. beim Photon fanden wir aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung in Gleichung (4.1.5)

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Es lohnt sich, an diesem Punkt ebene Wellen zu betrachten. *Ebene Wellen* im Raum haben eine Ausbreitungsrichtung gegeben durch ihren *Wellenvektor* \mathbf{k} mit

$$|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda \quad (4.3.1)$$

(λ ist die Wellenlänge). Sie haben eine Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$ (ν ist die Frequenz). Wellenvektor und Frequenz sind über $c_{\text{Medium}} = \lambda\nu = \omega/k$ miteinander verknüpft. Die momentane Amplitude einer ebenen Welle an einem beliebigen Raumpunkt \mathbf{r} zu einer beliebigen Zeit t ist

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) + c.c. \quad (4.3.2)$$

+*c.c.* meint plus das gleiche, aber konjugiert komplex. Physikalisch messbare Größen sind immer reell.

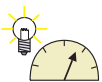
Wir können mit Gleichung (4.3.1) Gleichung (4.1.5) auch schreiben

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (4.3.3)$$

Zusammen können wir also einem Teilchen mit einem Impuls \mathbf{p} einen Wellenvektor \mathbf{k} zuschreiben. Man kann sich jetzt fragen, ob diese Analogie formal ist, oder ob prinzipiell mit Teilchen die gleichen Interferenzexperimente wie mit Licht durchgeführt werden können.

4.3.1. Elektronenbeugung

Dies ist ein fakultativer Abschnitt



Versuch zur Vorlesung:

Elektronenbeugung: an einer polykristallinen Graphitschicht (Versuchskarte AT-56)

Elektronenbeugung ist eine in der Oberflächenphysik [HG91] übliche Methode zur Untersuchung von Probenoberflächen mit periodisch angeordneten Atomen. In den nächsten beiden Abschnitten werden die Beugung niederenergetischer Elektronen sowie die Beugung von Elektronen mit mittlerer Energie besprochen.

4.3.1.1. Reziprokes Gitter

Periodische Anordnungen von Atomen werden Netze genannt, die von zwei Gittervektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 aufgespannt werden. Oberflächennetze sind translationsinvariant. Es gilt also

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = f(\mathbf{r}) \quad (4.3.4)$$

mit $\mathbf{T} = v\mathbf{a}_1 + w\mathbf{a}_2$ wobei $(v, w) \in \mathbb{Z}$. $f(\mathbf{r})$ ist die funktionale Darstellung einer beliebigen (auch vektoriellen) Eigenschaft der Oberfläche. Da die Oberfläche periodisch translationsinvariant ist, ergibt die Entwicklung von $f(\mathbf{r})$ in eine Fourierreihe

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (4.3.5)$$

Die Summe in Gleichung (4.3.5) geht über alle reziproken Gittervektoren. Dabei ist

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A}_1 + k\mathbf{A}_2 \quad (4.3.6)$$

wobei $(h, k) \in \mathbb{Z}$. \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 sind die erzeugenden Vektoren dieses primitiven Netzes im reziproken Raum, das heißt im Raum der Raumfrequenzen.

Zwischen dem Netz im realen Raum aufgespannt durch \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 und dem Netz im reziproken Raum aufgespannt durch \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 muss die Beziehung

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{T} = 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z} \text{ für beliebige } \mathbf{G}, \mathbf{T} \quad (4.3.7)$$

gelten. Aus den Beziehungen (4.3.4) bis (4.3.7) folgt:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{a}_1 &= 2\pi \\ \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{a}_2 &= 0 \\ \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{a}_1 &= 0 \\ \mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{a}_2 &= 2\pi \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

Diese Bedingungen sind erfüllt wenn \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 wie folgt konstruiert werden:

$$\mathbf{A}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}}{\mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n})} \quad (4.3.9)$$

und

$$\mathbf{A}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n})} \quad (4.3.10)$$

Dabei ist \mathbf{n} ein beliebiger Vektor senkrecht zum Oberflächennetz. Abbildung 4.15 zeigt an einem Beispiel die Beziehung zwischen den Oberflächennetzen des realen und des reziproken Raumes.

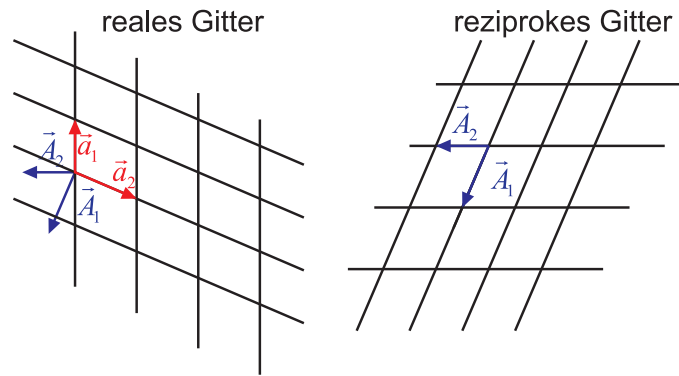


Abbildung 4.15.: Reales Gitter (links) und reziprokes Gitter (rechts).

4.3.1.2. Streuung (Beugung) an Oberflächen

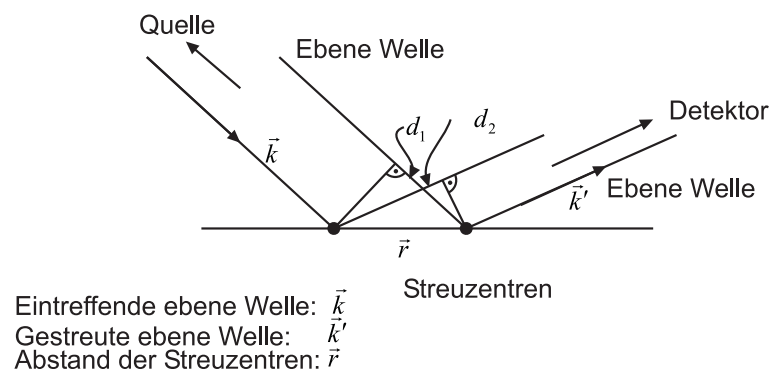


Abbildung 4.16.: Skizze zur Streuung an Oberflächenatomen

Abbildung 4.16 zeigt die Geometrie der Streuung. Die einfallende ebene Welle wird mit ihrem Wellenvektor \mathbf{k} und die gestreute ebene Welle mit ihrem Wellenvektor \mathbf{k}' bezeichnet. Der Abstand der Streuzentren sei \mathbf{r} .

Die Wegdifferenzen der Wellenzüge zwischen zwei benachbarten Streuzentren sind

$$d_1 = |\mathbf{r}| \cdot \cos(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = |\mathbf{r}| \cdot \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}}{|\mathbf{r}| |\mathbf{k}|} = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$$

$$d_2 = |\mathbf{r}| \cdot \cos(\mathbf{r}, \mathbf{k}') = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} \tag{4.3.11}$$

Aus dem Wegunterschied berechnet man die Phasendifferenzen für die beiden Wege

$$\phi = |\mathbf{k}| \cdot d_1 = \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}$$

$$\phi' = |\mathbf{k}'| \cdot d_2 = \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}' \tag{4.3.12}$$

Die endgültige Phasendifferenz ist

$$\Delta\phi = \phi - \phi' = \mathbf{r} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}' = -\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \quad (4.3.13)$$

mit $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Für die gestreuten Amplituden am i -ten Atom gilt $\psi' = \psi e^{i\Delta\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$.

Für die Beträge der Wellenvektoren haben wir

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{h} \quad (4.3.14)$$

Hier ist p der Impuls und mit Gleichung (4.3.1) λ die Wellenlänge, die für Teilchen die *de Broglie-Wellenlänge* λ genannt wird.

Für die Streuamplitude eines Netzes mit monoatomarer Basis (also beschreibbar als eine periodische Anordnung von Dirac- δ -Impulsen, erhält man:

$$\psi = \sum_{\mathbf{T}} e^{i\Delta\mathbf{k}\mathbf{T}} \quad (4.3.15)$$

mit $\mathbf{T} = v \cdot \mathbf{a}_1 + w \cdot \mathbf{a}_2$. Für eine mehratomige Basis erhält man:

$$\psi = \left(\sum_{\mathbf{T}} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \right) \cdot \left(\sum_j f_j e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \right) \quad (4.3.16)$$

f_j ist der Streufaktor des j -ten Streuzentrums und \mathbf{r}_j ist die Position dieses Streuzentrums in der Einheitszelle. Der erste Faktor in der Gleichung (4.3.16) hängt nur vom Oberflächennetz ab und nicht von der Struktur der Einheitszelle. Dieser Faktor wird Gittersumme

$$G_{\Delta\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{T}} e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \quad (4.3.17)$$

genannt. Der zweite Faktor in Gleichung (4.3.16) ist die geometrische Strukturamplitude

$$G_{\Delta\mathbf{k}} = \sum_j f_j e^{-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (4.3.18)$$

Da \mathbf{T} in der Oberfläche liegt, ist

$$\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{T} = (\Delta\mathbf{k}_{\perp} + \Delta\mathbf{k}_{\parallel}) \cdot \mathbf{T} = \Delta\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{T} \quad (4.3.19)$$

Also ist die Laue-Bedingung

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{a}_1 &= 2\pi h \\ \Delta\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{a}_2 &= 2\pi k \end{aligned} \quad (4.3.20)$$

Bei elastischer Streuung gilt

$$E = E' \Rightarrow \mathbf{k}^2 = \mathbf{k}'^2 \quad \text{oder} \quad |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| \quad (4.3.21)$$

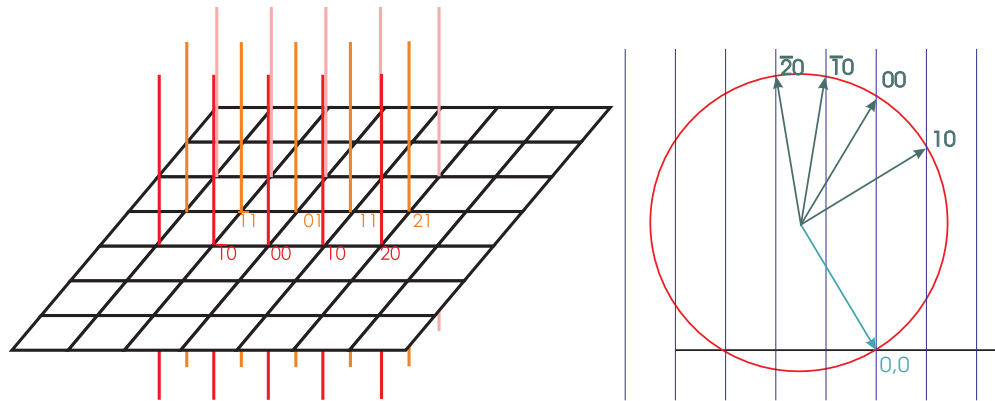


Abbildung 4.17.: Ewald-Konstruktion für Oberflächennetze. Rechts wird ein Schnitt dargestellt.

Aus dieser Bedingung kann man die in der Abbildung gezeigte Ewald-Konstruktion für Oberflächennetze ableiten.

4.3.1.3. LEED (Low Energy Electron Diffraction)

Dies ist ein fakultativer Abschnitt

LEED[JSY82] ist die am häufigsten angewandte Methode zur strukturellen Untersuchung periodischer Kristalloberflächen. Die Elektronen werden mit einer bestimmten, möglichst monochromatischen Energie aus einer wohldefinierten Richtung auf die Probe gesandt. Ihre de Broglie-Wellenlänge muss von der gleichen Größenordnung wie die Gitterperiode an der Kristalloberfläche sein. Wenn man eine Periodizität von 0.1 nm annimmt, so ergibt sich

$$0.1 \text{ nm} = \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (4.3.22)$$

Daraus folgt für die Energie

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{(6.6 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-20}} \approx 100 \text{ eV} \quad (4.3.23)$$

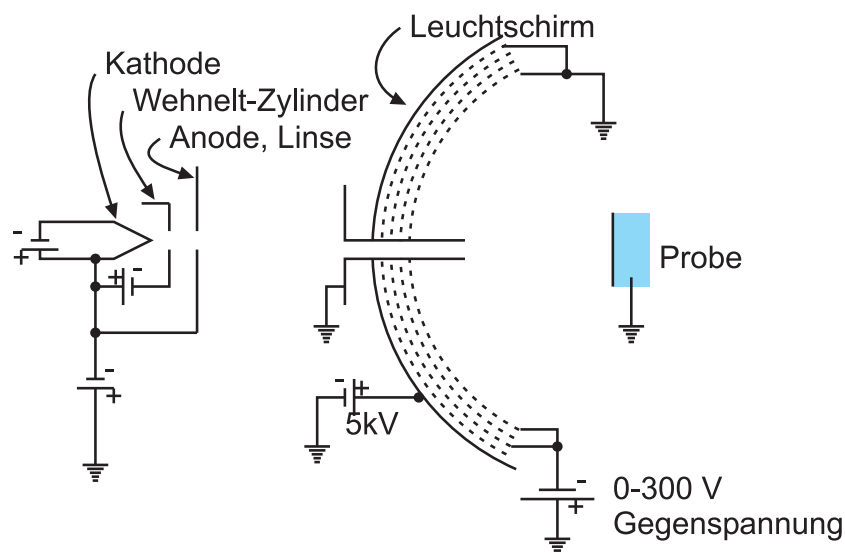


Abbildung 4.18.: Aufbau eines LEED-Experimentes. Links ist die Elektronenkanone gezeigt. Rechts ist der schematische Aufbau des LEED-Schirms gezeigt.

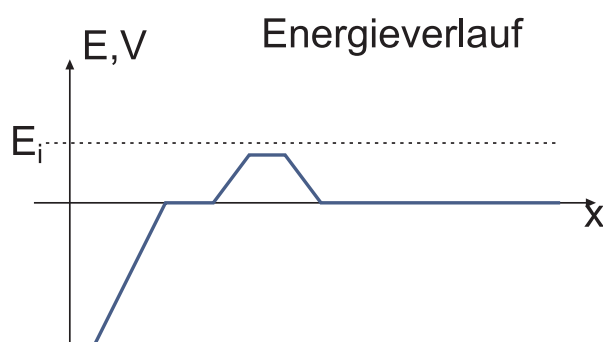


Abbildung 4.19.: Energieverlauf im LEED-Detektor. Rechts ist der Zwischenraum zwischen der Probe und dem Detektor.

Die obere Abbildung zeigt den Aufbau eines LEED. Die Elektronen stammen in der Regel aus einer thermischen Kathode. Nach der Beschleunigungsphase bewegen sich die Elektronen in einem feldfreien Raum bis zur Probe. Die rückgestreuten Elektronen nähern sich dem mit einer phosphoreszierenden Substanz belegten kugelkalottenförmigen Schirm in einem feldfreien Raum. Der Energieverlauf im LEED-Detektor ist schliesslich in der unteren Abbildung gezeigt.

Die Energieunschärfe bei der Emission muss mit der thermischen Energie bei Raumtemperatur verglichen werden. Diese ist $\Delta E \approx kT \approx \frac{1}{40} eV$. Die Glühemission bei $T = 2000K$ ist mit einer Energieunschärfe von $\Delta E \approx 0.2eV$ behaftet und damit etwa acht mal grösser als kT bei Raumtemperatur. Die Energieunschärfe der Feldemission bei $T = 300K$ ist schliesslich gleich der thermischen Energie kT ,

also $\Delta E \approx 0.025eV$.

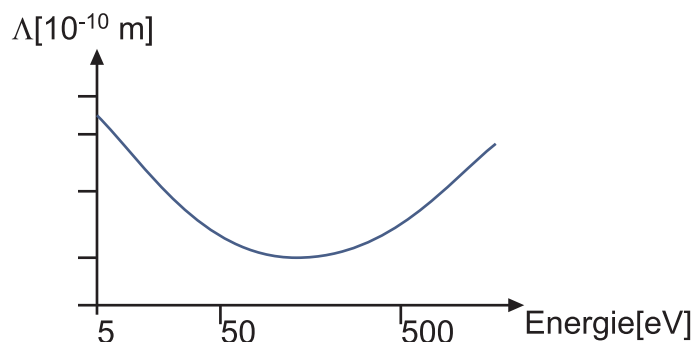


Abbildung 4.20.: Eindringtiefe der Elektronen als Funktion der Energie

Die Abbildung zeigt die Eindringtiefe der Elektronen als Funktion ihrer kinetischen Energie. Die Eindringtiefe ist für Elektronen mit einer Energie von etwa $100eV$ minimal. Bei höheren Energien, wie sie zum Beispiel bei der Elektronenmikroskopie vorkommen ist die Eindringtiefe grösser. Sie nimmt über etwa $500eV$ monoton mit der kinetischen Energie der Elektronen zu.

Für LEED verwendet man Elektronen mit einer kinetischen Energie von $20 - 500eV$. Die Eindringtiefe der Elektronen ist entsprechend kleiner als einen Nanometer.

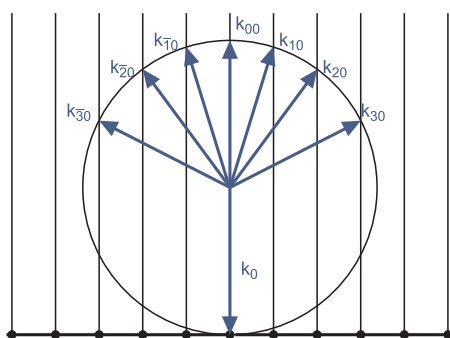


Abbildung 4.21.: Ewaldkonstruktion für LEED

Das durch die Wechselwirkung der langsamen Elektronen mit der Probe entstehende Beugungsbild kann mit Hilfe der *Ewald-Konstruktion* wie in der Abbildung gezeigt interpretiert werden.

Zwischen der periodischen Struktur der Probenoberfläche oder einer eventuell vorhandenen Überstruktur und der Überstruktur im reziproken Raum besteht folgender Zusammenhang:

$$\text{reeller Raum } \mathbf{b} = S \cdot \mathbf{a} \quad (4.3.24)$$

$$\begin{aligned} \text{reziproker Raum } \mathbf{B} &= (S^T)^{-1} \mathbf{A} = S_{rez} \cdot \mathbf{A} \\ \mathbf{A} &= (S^T) \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (4.3.25)$$

Hier ist (siehe [Physikalische Elektronik und Messtechnik](#)) S die die Struktur der Oberfläche charakterisierende Matrix. Nach der Gleichung (4.3.25) kennt man mit S_{rez} auch S .

Damit Beugungseffekte in der Abbildung mit Elektronen beobachtet werden können, muss die Kohärenzlänge der Elektronen grösser als die maximal möglichen Wegunterschiede sein. Wie bei Licht müssen zwei Arten von Kohärenz unterschieden werden.

Zeitliche Kohärenz ist gegeben durch die Energieunschärfe.

Räumliche Kohärenz ist gegeben durch die Ausdehnung der Elektronenquelle (dominant)

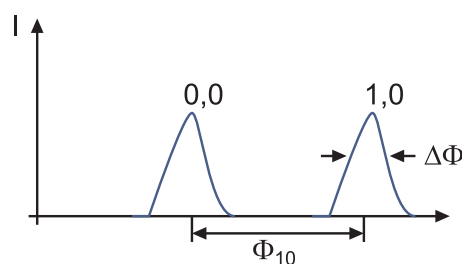


Abbildung 4.22.: Beugungsmuster und Definitionen zur Transferweite

Mit der Transferweite t (Definition in der oben stehenden Abbildung) bezeichnet man die Breite des Elektronenstrahls, die bei perfekter Quelle und perfekter Abbildung die gleiche Breite der Leuchtflecken bewirkt wie der Elektronenstrahl im realen LEED. Sie ist gegeben durch

$$t = a \frac{\phi_{10}}{\Delta\phi} \quad (4.3.26)$$

Damit wird $t \approx 10\text{nm}$. Da Elektronen eine sehr kleine Kohärenzlänge haben und da sie als Fermionen nicht im gleichen Quantenzustand sein können¹ kann jedes Elektron nur mit sich selber interferieren.

¹Das bedeutet für freie Elektronen, dass sich keine zwei Elektronen am gleichen Ort aufhalten können.

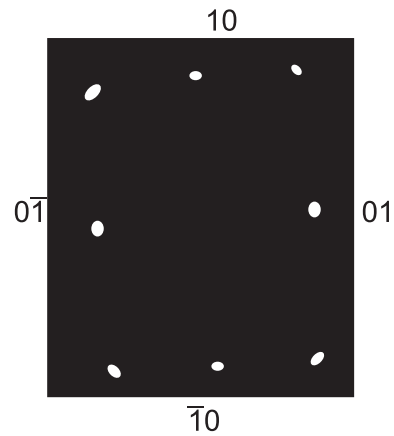


Abbildung 4.23.: Schematische Skizze eines LEED-Bildes von $Cu(110)$ (gezeichnet nach [JSY82]). Dies ist eine FCC-Struktur. Die Messung wurde bei 36 eV aufgenommen.



Abbildung 4.24.: Schematische Skizze eines LEED-Bildes von $Ni(111)$ bei einer Primärenergie von 205 eV (gezeichnet nach [JSY82]).

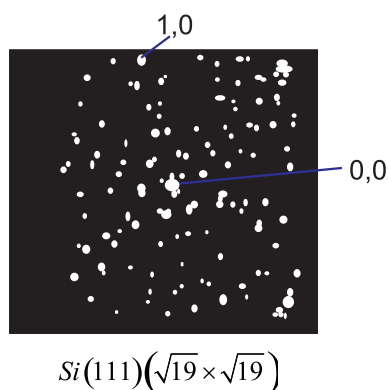


Abbildung 4.25.: Skizze eines LEED-Bildes von $Si(111) \sqrt{19} \times \sqrt{19}$ (gezeichnet nach [JSY82]).

4.3.2. Rutherford-Streuung

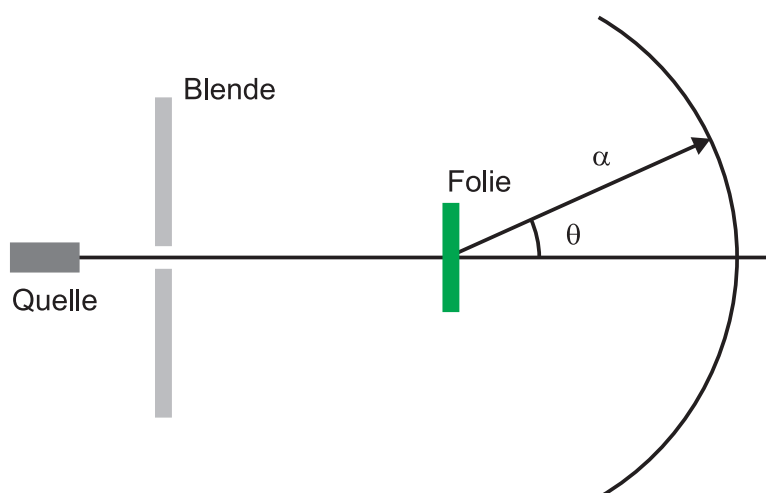


Abbildung 4.26.: Anordnung für die *Rutherford-Streuung*.

Bei der *Rutherford-Streuung* nach Abbildung 4.26 wird eine Quelle von α -Teilchen durch eine Lochblende auf eine Probe gesendet. Die Lochblende kollimiert den Strahl und verringert den Raumwinkel der Quelle. Die Probe wird in der Physik oft auch mit dem Wort *Target* bezeichnet. Die Fluchtlinie zur Quelle (gegeben durch die Quelle und die Blende) ist die z -Achse. Die gestreuten Teilchen bewegen sich im Winkel θ auf den Detektor zu. Bei ungeordneten Targets wie Gasen oder polykristallinen Materialien hängt der Streuwinkel θ nicht vom Azimut ab.

Rutherford konnte aus der Analyse seiner Streudaten schliessen, dass fast die ganze Masse eines Atoms in einem sehr kleinen, positiv geladenen Kern konzentriert ist und dass die negativ geladene sehr leichte Hülle die Grösse der Atome ausmacht.

Bei Stößen ist die Wechselwirkung abhängig vom Massenverhältnis der Stosspartner. Die schweren α -Teilchen werden durch die Elektronen kaum gestört, so wie ein Vogel bei einer Kollision mit einem Auto den Weg des Autos kaum beeinflusst.

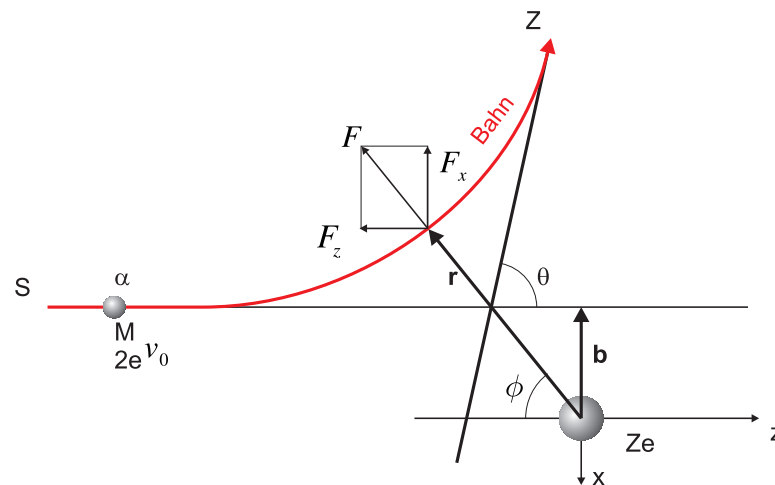


Abbildung 4.27.: Skizze zur Berechnung der *Rutherford-Streuung*.

Zur Berechnung der Rutherford-Streuung verwenden wir ein Koordinatensystem wie in der Abbildung 4.27. Das α -Teilchen kommt aus $\mathbf{r}_S = (0, 0, -\infty)$ mit der Ursprungsgeschwindigkeit $\mathbf{v}_0 = (0, 0, v_0)$. Nach der Streuung bewegt sich das α -Teilchen nach $\mathbf{r}_Z = \lim_{a \rightarrow \infty} (-a \sin(\theta), 0, a \cos(\theta))$ mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v}_z = (-v_0 \sin(\theta), 0, v_0 \cos(\theta))$. Zwischen dem Kern und dem α -Teilchen wirkt eine Zentralkraft, die Coulombkraft

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (4.3.27)$$

Die Kraft \mathbf{F} kann in zwei Komponenten entlang der x -Achse und der z -Achse aufgespalten werden.

$$\begin{aligned} F_x &= -|\mathbf{F}| \sin(\phi) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2} \sin(\phi) \\ F_z &= -|\mathbf{F}| \cos(\phi) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2} \cos(\phi) \end{aligned} \quad (4.3.28)$$

Die Coulomb-Kraft \mathbf{F} ist eine *Zentralkraft*. Deshalb ist der Drehimpuls \mathbf{L} bezüglich des Koordinatenursprungs erhalten. Als Zentralkraft ist die Coulomb-Kraft auch eine konservative Kraft. Das heisst dass $|\mathbf{v}_S| = |\mathbf{v}_Z|$ ist, da im Unendlichen die Coulombkraft verschwindet.

Der Anfangsdrehimpuls sowie der Drehimpuls an einem beliebigen Ort

$$\mathbf{r} = r (-\sin(\phi), 0, -\cos(\phi))$$

sind

$$\begin{aligned}
 \mathbf{L}_S &= \lim_{z \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} -b \\ 0 \\ -z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ Mv_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ Mv_0b \\ 0 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{L}(\phi) &= \begin{pmatrix} -r \sin(\phi) \\ 0 \\ -r \cos(\phi) \end{pmatrix} \times M \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} -r \sin(\phi) \\ 0 \\ -r \cos(\phi) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} -r \sin(\phi) \\ 0 \\ -r \cos(\phi) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -r \cos(\phi) \\ 0 \\ r \sin(\phi) \end{pmatrix} M \frac{\partial \phi}{\partial t} = \begin{pmatrix} 0 \\ Mr^2 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (4.3.29)
 \end{aligned}$$

Also

$$Mv_0b = Mr^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} \implies \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{v_0b}{r^2} \quad (4.3.30)$$

Weiter müssen wir die Newtonsche Bewegungsgleichung lösen. Die Newtonsche Bewegungsgleichung in die x -Richtung hat den Vorteil, dass die Anfangsbedingung $v_{x,0} = 0$ ist. Unter Verwendung von Gleichung (4.3.30) bekommen wir

$$M \frac{\partial v_x}{\partial t} = F_x(t) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2} \sin(\phi) = -\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 v_0 b} \sin(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (4.3.31)$$

Diese Gleichung kann direkt integriert werden

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^t M \frac{\partial v_x}{\partial t} dt &= M \int_0^{v_x(t)} d\tilde{v}_x = -\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 v_0 b} \int_{-\infty}^t \sin(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} dt \\
 &= -\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 v_0 b} \int_0^{\phi(t)} \sin(\tilde{\phi}) d\tilde{\phi} \quad (4.3.32)
 \end{aligned}$$

Der Endwinkel ist $\phi_Z = \pi - \theta$. Die Endgeschwindigkeit ist $v_{x,Z} = -v_0 \sin(\phi_Z) = -v_0 \sin(\theta)$. Also lautet Gleichung (4.3.32)

$$\begin{aligned}
 M \int_0^{-v_0 \sin(\theta)} d\tilde{v}_x &= -Mv_0 \sin(\theta) \\
 &= -\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 v_0 b} \int_0^{\pi-\theta} \sin(\tilde{\phi}) d\tilde{\phi} = -\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 v_0 b} (1 + \cos(\theta)) \quad (4.3.33)
 \end{aligned}$$

Unter Verwendung von $1 + \cos(\theta) = \sin(\theta) \cot(\theta/2)$ erhalten wir

$$Mv_0 = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 v_0 b} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (4.3.34)$$

Der Stossparameter b hängt vom Streuwinkel θ ab

$$b = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 Mv_0^2} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (4.3.35)$$

Wenn man annimmt, dass im kreisförmigen Intervall zwischen b und $b + db$ eine gewisse Anzahl Teilchen eingestrahlt werden, dann treffen diese im Winkelsegment zwischen θ und $\theta + d\theta$ auf. Also benötigen wir auch

$$db = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 Mv_0^2} \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\theta \quad (4.3.36)$$

Das Problem ist zylindersymmetrisch bezüglich der z -Achse. Zwischen b und $b+db$ ist die Fläche

$$dA_{Atom} = 2\pi b db \quad (4.3.37)$$

Das Target ist in der Regel eine Folie mit der Dicke D_{Folie} , der bestrahlten Fläche A_{Folie} und der Zahlendichte der Atome N . Insgesamt streuen $N_{gesamt} = D_{Folie} A_{Folie} N$. Die gesamte Fläche, die zur Streuung in den Bereich $d\theta$ um θ beiträgt, ist

$$dA_{gesamt} = N_{gesamt} dA_{Atom} = 2\pi N D_{Folie} A_{Folie} b db \quad (4.3.38)$$

Wenn nun n α -Teilchen eintreffen, dann werden

$$dn' = n \frac{dA_{gesamt}}{A_{Folie}} = 2\pi n N D_{Folie} b db \quad (4.3.39)$$

Teilchen gestreut.

An der Detektorfläche berechnen wir den bestrahlten Raumwinkel

$$d\Omega_{gesamt} = 2\pi \sin(\theta) d\theta = 4\pi \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) d\theta \quad (4.3.40)$$

Der Detektor misst nur einen kleinen Raumwinkelbereich $d\Omega$, da er in der Regel nur schmal ist. In den Detektor werden dann

$$dn = dn' \frac{d\Omega}{d\Omega_{gesamt}} \quad (4.3.41)$$

Alles zusammengefügt erhält man

die *Streuformel von Rutherford*

$$\frac{dn(\theta, d\Omega)}{n} = \frac{Z^2 e^4 D_{Folie} N}{(4\pi\epsilon_0)^2 M^2 v_0^4 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\Omega \quad (4.3.42)$$

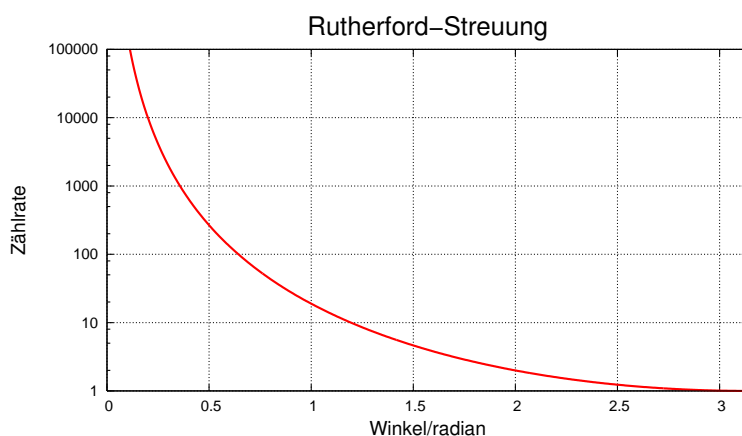


Abbildung 4.28.: Schematischer Verlauf der Streuamplitude der *Rutherford-Streuung*.

Abbildung 4.28 zeigt die mit der Gleichung (4.3.42) berechnete Streukurve.

4.3.3. Selbstinterferenz von Atomen

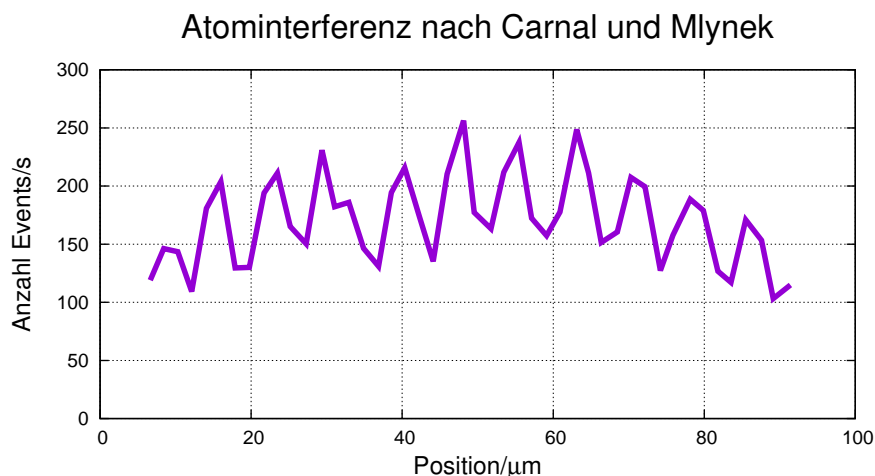


Abbildung 4.29.: Zweistrahlinterferenz von Atomen (gezeichnet nach [CM91]).

Die Experimente von Carnal und Mlynek [CM91] im Jahre 1991 haben gezeigt, dass auch kompliziertere Objekte wie Atome Interferenzerscheinungen zeigen. Neuerere Experimente haben gezeigt, dass auch mehratomige Moleküle wie ein Wellenpaket interferieren. Ausser dass die Wellenlänge enorm klein ist, gibt es nichts was den Wellencharakter eines Fussballs verbieten würde.

5. Quantentheorie

Wir sahen, dass Licht sich unter gewissen Umständen wie ein Teilchenstrom verhält. Wir stellten fest, dass Elektronen und Atome sich wie Wellen verhalten. Die Quantenphysik stellt nun die Hypothese auf, dass dies immer gilt. Weiter wird vermutet, dass Impulse und Energien in vielen Systemen nur diskrete Werte annehmen können. Im Folgenden wollen wir mit beschränktem mathematischem Aufwand Gesetze und Regeln finden, die aus diesen Annahmen folgen.

5.1. Hilbert-Räume

Zu Beginn folgen einige mathematische Definitionen, die für die korrekte Formulierung der Gesetze und Regeln notwendig sind. Der mathematische Formalismus beruht auf Hilbert-Räumen. Ein *Hilbert-Raum* wird wie folgt definiert:

\mathcal{H} ist ein linearer Vektorraum über dem Raum der komplexen Zahlen \mathbb{C} mit der Eigenschaften:

- Wir betrachten zwei Funktionen f und g . Wenn $f \in \mathcal{H}$ und $g \in \mathcal{H}$, dann ist auch $(f + g) \in \mathcal{H}$
- Es gibt ein Nullelement 0 , so dass $(f + 0) = f$ gilt.
- Es gibt zu f ein symmetrisches Element $-f$ so dass $[f + (-f)] = 0$
- Das skalare Produkt zweier Elemente $f \in \mathcal{H}$ und $g \in \mathcal{H}$ ist als Abbildung $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} : (f, g) = f \cdot g = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(u)g(u) du$ definiert.

Die Norm einer beliebigen Funktion $f \in \mathcal{H}$ ist definiert als $\|f\| = (f \cdot f)^{1/2}$

Weil \mathcal{H} ein linearer Vektorraum ist, es gelten die folgenden Eigenschaften:

- $f \cdot (g_1 + g_2) = f \cdot g_1 + f \cdot g_2$
- $f \cdot \lambda g = \lambda(f \cdot g)$, mit $\lambda \in \mathbb{C}$ konstant
- $f \cdot f \geq 0$
- $f \cdot f = 0 \Rightarrow f = 0$
- $g \cdot f = (f \cdot g)^*$

Ein Vektorraum ist *vollständig*, wenn es für jedes f eine Reihe $f_1, f_2, f_3, \dots, f_n \rightarrow f$ gibt, so dass $\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\| = 0$ gilt.

Wenn für das Skalarprodukt von $f \in \mathcal{H}$ und $g \in \mathcal{H}$ $f \cdot g = 0$ gilt, dann sind f und g *orthogonal*.

5.1.1. Lineare Operatoren

Wenn für einen linearen Operator \hat{A} und eine Funktion $f \in \mathcal{H}$ die Gleichung $\hat{A}f = af$ gilt, dann f ist *Eigenfunktion* von \hat{A} . a ist der entsprechende *Eigenwert* von \hat{A} .

5.1.2. Hermitesche Operatoren

Hermitesche Operatoren sind Operatoren, für die die folgende Gleichung gilt

$$\hat{A}^*(f^* \cdot g) = f^* \cdot \hat{A}^*g \quad (5.1.1)$$

Zum Beispiel sind die Operatoren $\hat{p}_x = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ und $\hat{E} = i(\partial/\partial t)$ hermitesch. Die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators sind orthogonal und die dazugehörigen Eigenwerte sind reell.

5.2. Herleitung der Schrödingergleichung

Wir haben gesehen, dass Materieteilchen bei gewissen Experimenten Interferenzerscheinungen zeigen. Wir brauchen also eine konsistente Beschreibung von Materieteilchen als Wellen. Die Schrödingergleichung ist eine Gleichung für eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$. Wir werden sehen, dass $\psi(\mathbf{r}, t)$ nicht direkt beobachtet werden kann.

5.2.1. Erste Möglichkeit der Herleitung der Schrödingergleichung

Wir leiten die eindimensionale Schrödingergleichung in den Koordinaten $(x, t) \in \mathbb{R}$ her, indem wir den Ansatz $\psi(x) = A \exp[i(kx - \omega t)]$ verwenden. Wir erinnern uns an die de Broglie-Beziehung $p = h/\lambda = \hbar k$ aus Gleichung (4.3.1). Die erste und die zweite örtliche Ableitung unseres Ansatzes sind

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi = ikA \exp[i(kx - \omega t)] = ik\psi \quad (5.2.1)$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = (ik)^2 A \exp[i(kx - \omega t)] = -k^2\psi \quad (5.2.2)$$

Unser Ansatz $\psi(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)]$, mit $k = 2\pi/\lambda$ und $\omega = 2\pi\nu$, ist auch eine Lösung der Wellengleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x, t) \quad (5.2.3)$$

wobei, $c = \lambda\nu = \omega/k$ die *Ausbreitungsgeschwindigkeit* ist. Gleichzeitig ist

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) = -k^2\psi(x, t) \quad (5.2.4)$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x, t) = -\omega^2\psi(x, t) \quad (5.2.5)$$

Nach Planck setzen wir für die Energie $E = \hbar\omega$ an. Das Teilchen habe den de Broglie-Impuls $p = \hbar k$. Wir verwenden die relativistische Energie-Impulsbeziehung und entwickeln in eine Reihe.

$$E_{\text{rel}} = m(v)c^2 = \gamma m c^2 = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} = mc^2 + p^2/2m + \dots \quad (5.2.6)$$

wobei $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ ist.

für nichtrelativistische Geschwindigkeiten $v \ll c$ können relativistische Effekte vernachlässigt werden. Dann ist die kinetische Energie

$$E_{\text{kin}} = p^2/2m \quad (5.2.7)$$

mit $p = mv$. Andererseits kann die kinetische Energie T auch geschrieben werden als $T = E - V = (\hbar^2 k^2)/(2m)$ mit $k^2 = 2m(E - V)/\hbar^2$. Wir erhalten also

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi = E\psi \quad (5.2.8)$$

Dieser Weg zur Herleitung der Schrödingergleichung ist Schrödingers originaler Weg zur Beschreibung von Materiewellen.

5.2.2. Zweite Möglichkeit der Herleitung der Schrödingergleichung

Die *Schrödingergleichung* kann auch mit einer zweiten Methode hergeleitet werden. Das Hamiltonsche Extremalprinzip fordert, dass die Wirkung eines Systems beschrieben durch die *Lagrangefunktion* $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$ extremal ist, das heisst

$$\delta S = \delta \int \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt = 0 \quad (5.2.9)$$

Die *Hamiltonfunktion* ist definiert als die Summe der kinetischen und der potentiellen Energie

$$H = T + V \quad (5.2.10)$$

V soll hier nur eine Funktion von x sein. Die kinetische Energie ist $T = p^2/(2m)$, wobei p der Impuls eines punktförmigen Teilchens mit der Masse m ist. Wir wissen nach Planck, dass die Energie einer Welle $E = \hbar\omega$ ist. Der Impuls kann gleichzeitig auch als $p = \hbar k$ geschrieben werden. Wenn sich ein Teilchen mit der Masse m bewegt, kann ihm eine de Broglie-Wellenlänge $\lambda_{\text{dB}} = h/p$ zugeschrieben werden. Damit können wir die obigen Gleichungen wie folgt umformen

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi = \hbar k \psi = p \psi \quad (5.2.11)$$

oder

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi = T \psi \quad (5.2.12)$$

Wir definieren den *Impulsoperator*

$$\hat{p}_x = \hbar \frac{\partial}{i \partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.2.13)$$

und den *Operator der kinetischen Energie*

$$\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (5.2.14)$$

Wir wollen nun noch die Zeitabhängigkeit bestimmen. Die erste zeitliche Ableitung von ψ ist

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega A \exp[i(kx - \omega t)] = -i\omega \psi \quad (5.2.15)$$

Den Operator der Gesamtenergie E definieren wir andererseits so

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5.2.16)$$

Wenn \hat{V} zeitunabhängig ist, können wir den Operator für die Hamiltonfunktion definieren

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \quad (5.2.17)$$

wenn $\hat{V} = V$ ist.

Wenn wir die Gesamtenergie gleich der Hamiltonfunktion setzen, also $\hat{E} = \hat{T} + \hat{V} = \hat{H}$, bekommen wir die Schrödingergleichung als Analogon zur klassischen Hamiltonfunktion $H = T + V$. Operatoren müssen immer auf etwas wirken, hier auf die Wellenfunktion ψ .

$$\hat{E}\psi = \hat{H}\psi \quad \implies i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi \quad (5.2.18)$$

Wir haben in dieser Herleitung angenommen, dass die potentielle Energie zeitlich konstant ist. Dann hat der Hamiltonoperator Eigenwerte, das heisst

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (5.2.19)$$

Dies ist die stationäre, zeitunabhängige Schrödingergleichung. Die Lösungen der Gleichungen sind dann harmonische Wellen

$$\psi(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)] = A \exp(ikx) \exp(-i\omega t)$$

5.2.3. Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Die Lösung der Schrödingergleichung, die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ kann nicht direkt beobachtet werden. Nach der *Kopenhagener Interpretation* ist das Skalarprodukt

$$\psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = p(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = p(\mathbf{r}, t) dx dy dz \quad (5.2.20)$$

gleich der Wahrscheinlichkeit, das System beschrieben durch $\psi(\mathbf{r}, t)$ zur Zeit t am Ort \mathbf{r} im Volumen $d\mathbf{r} = dx dy dz$ zu finden.

Zum Beispiel hat ein Teilchen in einem unendlich hohen Potentialkasten die Wellenfunktion

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{a}} \exp\left(\frac{2\pi i}{a} x\right) - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{a}} \exp\left(\frac{-2\pi i}{a} x\right) = \frac{u_1(x)}{\sqrt{2}} - \frac{u_2(x)}{\sqrt{2}} \quad (5.2.21)$$

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit der Teilwellenfunktion u_1 oder u_2 im Potentialkasten zu finden ist

$$p(u_{1,2}) = \int_0^a u_{1,2}^* u_{1,2} dx = 1 \quad (5.2.22)$$

Mit einer Wahrscheinlichkeit von $1/2$ misst man Teilchen die nach links oder rechts laufen. Dies heisst, dass der Vorfaktor von u_1 und u_2 $1/\sqrt{2}$ ist. Man kann nachrechnen, dass auch

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi^*(x)\psi(x)dx &= \frac{1}{2} \int_0^a u_1^*(x)u_1(x)dx + \frac{1}{2} \int_0^a u_2^*(x)u_2(x)dx \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_0^a (u_1^*(x)u_2(x) + u_2^*(x)u_1(x)) dx \\ &= \frac{1}{2}p(u_1) + \frac{1}{2}p(u_2) - \frac{1}{a} \int_0^a (e^{2\pi ix/a} e^{2\pi ix/a} + e^{-2\pi ix/a} e^{-2\pi ix/a}) dx \\ &= \frac{1}{2}p(u_1) + \frac{1}{2}p(u_2) \quad (5.2.23) \end{aligned}$$

Wenn wir nun den Erwartungswert eines Operators \hat{f} berechnen wollen, müssen wir den gewichteten Mittelwert ausrechnen. Für übliche Funktionen $f(x)$ mit der Gewichtsfunktion $g(x)$ ($g(x)$ nicht identisch null) ist dies

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(x)g(x)dx}{\int g(x)dx} \quad (5.2.24)$$

In unserem Falle ist die Gewichtsfunktion $g(x) = p(x) = \psi^*(x) \cdot \psi(x)$, der Wahrscheinlichkeitsdichte. Da die Wahrscheinlichkeitsdichten normiert sind, ist $\int g(x)dx = \int \psi^*\psi dx = 1$. Wir erhalten für den Erwartungswert der Funktion f

$$\langle f \rangle = \langle \psi | f | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f p(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f \psi^*(x)\psi(x) dx \quad (5.2.25)$$

Wenn \hat{f} ein Operator ist, muss der Erwartungswert

$$\langle \hat{f} \rangle = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{f}\psi(x) dx \quad (5.2.26)$$

Grösse	Erwartungswert
Ort x	$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi ^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx = \langle \psi x \psi \rangle$
Potential V	$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} V \psi ^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* V \psi dx = \langle \psi V \psi \rangle$
Impuls p_x	$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x \psi dx = \langle \psi \hat{p} \psi \rangle$
Energie E_{kin}	$\langle E_{kin} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \right) \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{E}_{kin} \psi dx = \langle \psi \hat{E}_{kin} \psi \rangle$

Tabelle 5.1.: Erwartungswerte für normierte Wellenfunktionen ψ .

Tabelle 5.1 gibt einige Erwartungswerte an. Verwenden Sie die Tabelle als Anleitung, wie Erwartungswerte berechnet werden sollen. Zur Schreibweise

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= |\psi\rangle & \psi^*(x, y, z) &= \langle \psi| \\ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} &= \mathbf{r} = |\mathbf{r}\rangle & \begin{pmatrix} x^* \\ y^* \\ z^* \end{pmatrix} &= \mathbf{r}^* = \langle \mathbf{r}| \\ \langle p \rangle &= \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle \end{aligned}$$

5.3. Eigenfunktionen und Eigenwerte der Schrödingergleichung

Die Eigenwerte des Hamiltonoperators sind die Energieeigenwerte des betrachteten Systems. In den nächsten Abschnitten sollen die Energieeigenwerte der *Schrödingergleichung* für verschiedenen Potentialfunktionen berechnet werden.

5.3.1. Stationäre Zustände

Wenn der Zustand eines Systems ψ eine ortsabhängige Linearkombination zweier Eigenfunktionen $\psi_1 = a_1(x) \exp(-i\omega_1 t)$ und $\psi_2 = a_2(x) \exp(-i\omega_2 t)$ ist, gilt

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = a_1(x) e^{-i\omega_1 t} + a_2(x) e^{-i\omega_2 t} \tag{5.3.1}$$

Wenn Zustände ψ_1 und ψ_2 sich zeitlich nicht ändern, dann nennt man sie stationär und die Wahrscheinlichkeitsdichten $p_1 = \psi_1^* \cdot \psi_1$ und $p_2 = \psi_2^* \cdot \psi_2$ haben zeitlich sich nicht ändernde Werte. Im Dialekt der Quantenphysiker nennt man das scharfe Werte. Die entsprechenden Eigenwerte sind zeitunabhängig.

Obwohl die Funktionen ψ_1 und ψ_2 stationäre Zustände sein sollen, also zeitlich

unveränderlich, ist die Summe ψ nicht stationär. Die kurze Rechnung

$$\begin{aligned}
 \psi^* \cdot \psi &= \left(a_1(x)e^{-i\omega_1 t} + a_2(x)e^{-i\omega_2 t} \right)^* \left(a_1(x)e^{-i\omega_1 t} + a_2(x)e^{-i\omega_2 t} \right) \\
 &= \left(a_1^*(x)e^{i\omega_1 t} + a_2^*(x)e^{i\omega_2 t} \right) \left(a_1(x)e^{-i\omega_1 t} + a_2(x)e^{-i\omega_2 t} \right) \\
 &= a_1^* a_1 + a_2^* a_2 + a_1^* a_2 e^{i\omega_1 t} e^{-i\omega_2 t} + a_1 a_2^* e^{-i\omega_1 t} e^{i\omega_2 t} \\
 &= a_1^* a_1 + a_2^* a_2 + a_1^* a_2 e^{i\omega_1 t} e^{-i\omega_2 t} + \left(a_1^* a_2 e^{i\omega_1 t} e^{-i\omega_2 t} \right)^* \quad (5.3.2)
 \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^* \psi$ ist also zeitlich nicht konstant, das heisst nicht stationär. Es gibt keinen zeitlich konstanten Energieeigenwert zu dieser Funktion.

Wenn ein Eigenzustand des Operators $\hat{A} = ia\partial/\partial t$ sich mit der Zeit nicht ändert, dann wird er *stationär* genannt.

5.3.2. Kanonische konjugierte Variablen

Der Hamiltonformalismus der klassischen Mechanik eines Systems mit der Lagrangefunktion \mathcal{L} beschreibt die mechanischen Bewegungsgleichungen mit verallgemeinerten Ortskoordinaten q_i und verallgemeinerten Impulskordinaten $p_i = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{q}_i$. Die Variablen q_i und p_i werden üblicherweise kanonische konjugierte Variablen genannt.

In Quantenmechanik gibt es ein analoges Konzept zu kanonisch konjugierten Variablen, die kanonisch konjugierten Operatoren. Dies sind

- Ort \hat{x} und Impuls \hat{p}_x
- Winkel $\hat{\phi}$ und Drehimpuls \hat{L}
- Zeit t und Energie \hat{E} (Die Zeit t ist in der Quantenmechanik eine klassische Variable, kein Operator).

Die Definitionen der Operatoren sind

$$\begin{aligned}
 \hat{x} &= x \\
 \hat{p}_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\
 \hat{\mathbf{r}} &= x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k} \\
 \hat{\mathbf{p}} &= \frac{\hbar}{i} \nabla \\
 \hat{\phi} &= \phi \\
 \hat{L} &= \frac{\hbar}{i} \hat{\mathbf{r}} \times \nabla \\
 \hat{E} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5.3.3)
 \end{aligned}$$

wobei \mathbf{i} , \mathbf{j} und \mathbf{k} die Einheitsvektoren sind, die das Koordinatensystem aufspannen.

5.3.3. Vertauschungsrelationen

Analog zur *Poissonklammer* der klassischen Mechanik gibt es in der Quantenmechanik Kommutatoren.

Die mathematische Operation

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

heisst Kommutator.

So wie die Operatoren in der Quantenmechanik definiert sind, gelten die folgenden Vertauschungsrelationen:

Ort und Impuls

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \psi = (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) \psi = i\hbar\psi, \quad \forall \psi \quad (5.3.4)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{x} &= x \\ \hat{p}_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

Energie und Zeit

$$[\hat{E}, E] \psi = (\hat{E}t - t\hat{E}) \psi = i\hbar\psi, \quad \forall \psi \quad (5.3.5)$$

mit

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Die Vertauschungsrelationen von konjugierten Operatoren heissen auch *Unschärferelationen*. Sie sind eine Konsequenz der Wellennatur der Lösungen der Schrödingergleichung und wurden von Werner Heisenberg gefunden. Die Energie-Zeit-Unschärferelation gilt oftmals nicht als echte Unschärferelation, da die Zeit kein Operator ist.

5.4. Axiome der Quantenmechanik

1. Der Zustand eines physikalischen Systems wird durch eine Wellenfunktion oder Zustandsfunktion ψ beschrieben.
2. Jede physikalische Grösse entspricht einem linearen Hermiteschen Operator.
3. Ein Zustand eines Systems, in dem eine physikalische Grösse a einen scharfen Wert besitzt, muss durch eine Eigenfunktion des zu a gehörigen Operators \hat{A} beschrieben sein; der Wert dieser Grösse a ist ein Eigenwert des Operators \hat{A} .

4. Wenn der Zustand eines Systems durch eine Wellenfunktion $\psi = \sum_k c_k f_k$ dargestellt wird, wobei die f_k Eigenfunktionen des gleichen hermiteschen Operators und die c_k komplexe Konstanten sind, dann ist

$$f_i^* \cdot f_j = (f_i^* f_i) \delta_{ij} \quad (5.4.1)$$

und

$$\psi^* \cdot \psi = \sum_{i,j} c_i^* c_j f_i^* \cdot f_j = \sum_k c_k^* c_k f_k^* \cdot f_k \quad (5.4.2)$$

Die Eigenwerte a_k von \hat{A} sind reelle Zahlen ($a_k \in \mathbb{R} \forall k$). Die Wellenfunktionen ψ_k definiert durch $\hat{A}\psi_k = a_k\psi_k$ oder $\hat{A}|\psi\rangle = a_k|\psi\rangle$ sollen ein vollständiges Funktionensystem bilden.

Der Erwartungswert von a ist

$$\begin{aligned} \langle a \rangle &= \sum_{\ell,k} \psi_\ell^* c_\ell^* \hat{A} (c_k \psi_k) = \sum_{\ell,k} c_\ell^* \psi_\ell^* c_k \hat{A} \psi_k \\ &= \sum_{\ell,k} c_\ell^* c_k \psi_\ell^* a_k \psi_k = \sum_{\ell,k} c_\ell^* c_k a_k \psi_\ell^* \psi_k \\ &= \sum_k c_k^* c_k a_k \quad (5.4.3) \end{aligned}$$

In Allgemein ist die Streuung einer Observablen a analog wie die Standardabweichung definiert

$$\Delta a = \sqrt{\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2} \quad (5.4.4)$$

5.5. Wahrscheinlichkeitsdichte und Wellenfunktionen der Schrödingergleichung: die Bohrsche Interpretation

Wie oben ausgeführt, beschreiben die Eigenfunktionen des Operators \hat{H} (Lösungen der *Schrödingergleichung*) oder jeden anderen Operators nicht die räumliche Verteilung eines Teilchens. Nach Niels Bohr und der Kopenhagener Interpretation befindet sich ein Teilchen mit Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$ am Ort x .

5.5.1. Wellenpakete

Wenn der Impuls $p_x = \hbar k$ eines Teilchens nicht scharf definiert ist, das heisst wenn das Teilchen nicht durch eine ebene Welle (unendlich ausgedehnt!) beschrieben wird, hat der Impuls des Teilchens eine Streuung $\Delta p/2$. Mit einer *Fouriertransformation* kann man den Ort ausrechnen, wenn bekannt ist, dass das Teilchen sich im Impulsraum zwischen $p_x - \Delta p/2 \leq p_x \leq p_x + \Delta p/2$ aufhält. Wir betrachten nur den Ortsanteil der Wellenfunktion $\psi(x, t) = \psi_0 \exp(i(kx - \omega t))$.

$$\psi(x) \sim \int_{p_x - \Delta p/2}^{p_x + \Delta p/2} e^{ikx} dp_x = \int_{p_x - \Delta p/2}^{p_x + \Delta p/2} e^{ixp_x/\hbar} dp_x = \frac{\hbar}{ix} \left(e^{ix\Delta p/2\hbar} - e^{-ix\Delta p/2\hbar} \right) e^{ixp_x/\hbar} \quad (5.5.1)$$

dieses Resultat kann umgeformt werden

$$\psi(x) \sim \frac{2\hbar}{x} \sin\left(\frac{x\Delta p}{2\hbar}\right) e^{ixp_x/\hbar} \quad (5.5.2)$$

Der Ortsanteil der Wellenfunktion $\psi(x)$ ist eine ebene Welle mit der ortsabhängigen Amplitude (also keine echte ebene Welle)

$$\frac{\sin z}{z}$$

mit

$$z = \frac{x\Delta p}{2\hbar}$$

Dann gilt $\Delta z = \pi$ oder $\Delta x = \hbar/\Delta p$. Das Produkt $\Delta x \Delta p = \hbar$ zeigt, dass sowohl Impuls wie auch Ort maximal gut definiert sind. Ein Wellenpaket mit diesen Eigenschaften ist in [Abbildung 5.1](#) gezeigt.

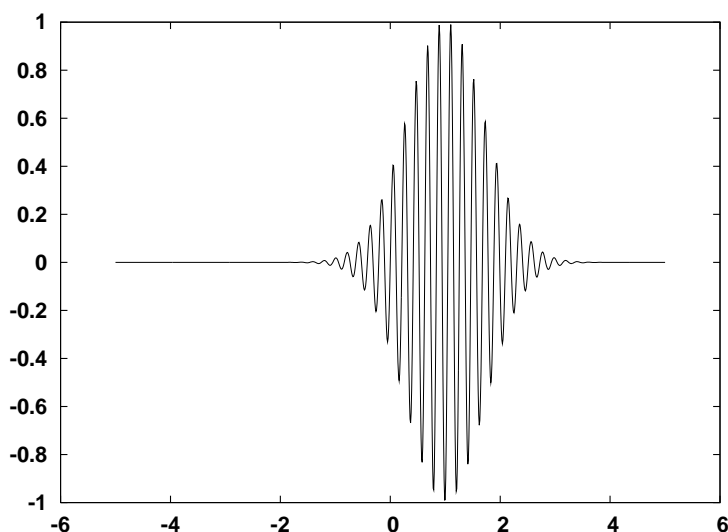


Abbildung 5.1.: Wellenpaket.

5.6. Heisenbergsche Unschärferelation

Die Betrachtung im vorherigen Abschnitt legen die Frage nahe: was ist die minimale Grösse des Produktes $\Delta x \Delta p$? Dazu betrachten wir ein Wellenpaket wie in [Abbildung 5.1](#) gezeigt, das durch eine Gaußsche Verteilung der Amplitude der Wellenfunktion (im Ortsraum oder in der Zeit) definiert ist.

$$\psi(x, t = 0) = \psi_0 \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4} e^{ikx} dk \quad (5.6.1)$$

Die Vorfaktoren dienen zur Normierung der Funktion. Das Maximum der Wellenfunktion befindet sich bei x , die Variable a ist die Breite des Pakets und k_0

der mittlere Wellenvektor. Die resultierende Funktion $\psi(x, 0)$ ist eine Gaußsche Verteilung in Abhängigkeit von x .

$$\psi(x, t = 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-x^2/a^2} \quad (5.6.2)$$

und

$$|\psi(x, 0)|^2 = \psi^* \psi = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2x^2/a^2} \quad (5.6.3)$$

Wenn die Ortsunschärfe, das heisst die Streuung im Ort $\Delta x = a/2$ ist, dann ist die entsprechende Impulsunschärfe $\Delta p = \hbar/a$. Dann ist das Produkt

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.6.4)$$

Damit ist gezeigt, dass es unmöglich ist, gleichzeitig Ort und Impuls mit beliebigen Genauigkeit zu messen. Die Gleichung (5.6.4) ist als *Heisenbergsche Unschärfere-lation* bekannt.

5.7. Lösung der Schrödingergleichung für einen unendlichen Potentialtopf

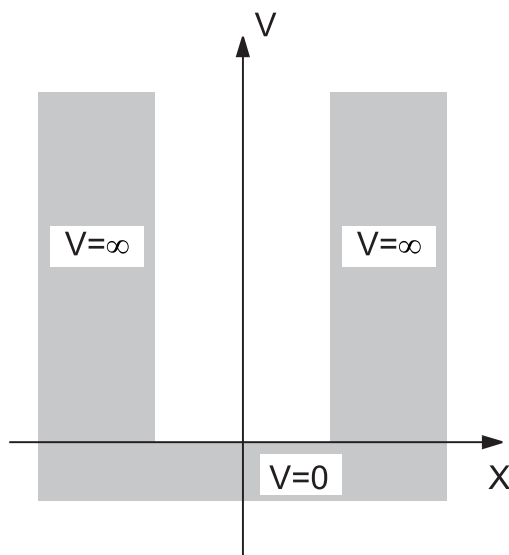


Abbildung 5.2.: Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden.

Die zeitunabhängige *Schrödingergleichung* erlaubt die Berechnung der Wellenfunktion eines Teilchens in einem unendlichen tiefen Potentialtopf (Abb. 5.2). Die Breite des Topfes ist a . Wir nehmen als Ansatz die Funktion $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\omega t}$. Die

zeitunabhängige *Schrödingergleichung* lautet

$$\hat{H}\phi = E\phi \quad \Longrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = E\phi(x) \quad (5.7.1)$$

Dabei haben wir die Potentialfunktion

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.7.2)$$

Im Potentialtopf für $0 \leq x \leq a$ haben die Lösungen die Form

$$\phi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \quad (5.7.3)$$

mit $k = 2\pi/\lambda$. Die beide Terme entsprechen zwei harmonischen Wellen, die sich in der negativen und der positiven Richtung der x -Achse ausbreiten. Die Potentialfunktion V in den Wänden des Potentialtopfs hat den Wert unendlich. Dann sind die Amplituden der Lösungen der Schrödingergleichung innerhalb der Wände des Topfes null. Mit anderen Worten, die Wellenfunktion soll für $\phi(x \leq 0) = 0$ und $\phi(x \geq a) = 0$ verschwinden. Die Randbedingungen ergeben

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= 0 \\ A_1 e^{ika} + A_2 e^{-ika} &= 0 \end{aligned} \quad (5.7.4)$$

Wenn wir die obigen Gleichungen nach A_1 und A_2 auflösen, bekommen wir

$$\begin{aligned} -A_1 &= A_2 \\ A_1 (e^{ika} - e^{-ika}) &= 0 \end{aligned} \quad (5.7.5)$$

Nun ist $e^{ika} - e^{-ika} = 2i \sin(ika)$. Wir erhalten also

$$\begin{aligned} -A_1 &= A_2 \\ 2A_1 i \sin(ika) &= 0 \quad \Rightarrow \quad k = n\pi/a \end{aligned} \quad (5.7.6)$$

mit $n \in \mathbb{Z}$. Die Lösung der Schrödingergleichung für den Potentialtopf hat also die Form

$$\phi(x) = A_1 \sin(in\pi x/a) \quad (5.7.7)$$

Wenn wir den Ansatz unter Berücksichtigung der Randbedingungen in die Schrödingergleichung einsetzen, erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = E\phi(x) \quad (5.7.8)$$

Die dazugehörigen Energieeigenwerte sind

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (5.7.9)$$

Die Wellenfunktion ϕ muss auf 1 normiert sein, da wir das Teilchen sicher im gesamten Raum finden. Aus $\phi^* \cdot \phi = 1$ erhalten wir den Wert der Konstanten $A_1 = \sqrt{2/a}$.

Die Einschränkung (Lokalisierung) der Wellenfunktion auf ein beschränktes Gebiet, den Potentialkasten, bedingt die Quantisierung der Teilchenenergie.

5.8. Lösungen der Schrödingergleichung für eine Potentialstufe

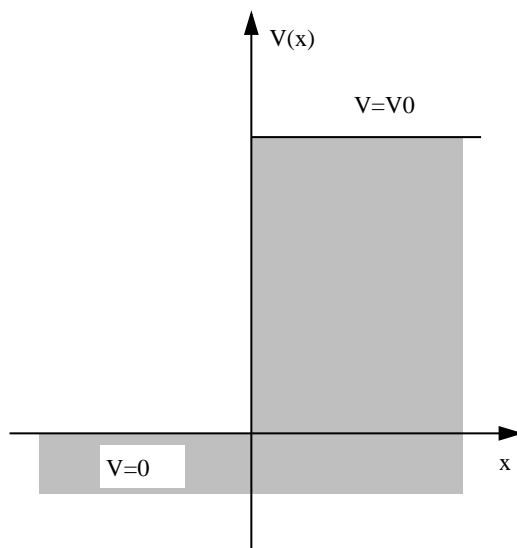


Abbildung 5.3.: Potentialstufe.

Wir betrachten eine von links auf eine Potentialstufe mit endlicher Energiehöhe einfallende Welle. Dies führt zum Ansatz

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\omega t}$$

$\psi(x, t)$ ist harmonisch von der Zeit abhängig. Deshalb ist $\phi(x)$ eine stationäre Lösung der zeitunabhängigen *Schrödingergleichung*.

Die Lösungen sind abhängig von der Energie des Teilchens (der Welle) unterschiedlich:

- Die Energie der einfallenden Welle E ist grösser als die potentielle Energie ($E > V_0$). Dann werden wir im ganzen Gebiet wellenartige Lösungen mit Interferenzen bekommen.
- Die Energie der einfallenden Welle E ist kleiner als die potentielle Energie ($E \leq V_0$). Hier gibt es das Phänomen der evaneszenten Wellen, also an der Grenzfläche lokalisierter Wellen.

Sei $\phi(x)$ die Ortsfunktion einer einfallenden Welle, die sich in der positiven Richtung der x -Achse ausbreitet. Ihr Impuls ist $p_1 = \hbar k_1$ für $x < 0$ und $p_2 = \hbar k_2$ für $x > 0$. Die kinetische Energie ist $T = p^2/2m = E$ und $T = p^2/2m = E - V_0$. Also haben wir

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{für } x < 0 \quad (5.8.1)$$

und

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{für } x \geq 0 \quad (5.8.2)$$

Die Lösungen der *Schrödingergleichung* müssen zweimal differenzierbar sein, d.h. ϕ und $\partial\phi/\partial x$ müssen stetig sein für alle x . Die Stetigkeit besagt, dass $\phi(x)$ und $\partial\phi(x)/\partial x$ für $x = 0$ dieselben Werte haben müssen. Die Eigenfunktion $\phi(x)$ hat für $x < 0$ zwei Komponenten: Eine sich ausbreitende Welle mit der Amplitude A_1 in der positiven Richtung der x -Achse und eine sich ausbreitende Welle (die reflektierte Welle) mit der Amplitude A'_1 in der negativen Richtung der x -Achse. Beide mit demselben Impuls $p_1 = \hbar k_1$. Für $x > 0$ es gibt nur eine harmonische Welle mit der Amplitude A_2 und dem Impuls $p_2 = \hbar k_2$ (transmittierte Welle), die sich in die positive Richtung der x -Achse ausbreitet. Also erhalten wir für den ersten Fall

$$\begin{aligned} ik_2 A_2 &= ik_1 (A_1 - A'_1) \\ A_2 &= A_1 + A'_1 \end{aligned} \quad (5.8.3)$$

oder

$$\begin{aligned} \frac{A'_1}{A_1} &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ \frac{A_2}{A_1} &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{aligned} \quad (5.8.4)$$

Wir definieren die folgenden Größen als *Reflexionskoeffizienten*

$$R = \left(\frac{A'_1}{A_1} \right)^* \frac{A'_1}{A_1} = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 \quad (5.8.5)$$

und *Transmissionskoeffizienten*

$$T = \frac{k_2 + k_2^*}{k_1 + k_1^*} \left(\frac{A_2}{A_1} \right)^* \frac{A_2}{A_1} = \frac{k_2 + k_2^*}{2k_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \quad (5.8.6)$$

Diese beiden Koeffizienten beschreiben die Intensität der Reflexion bzw. der Transmission, oder, in anderen Worten, deren Wahrscheinlichkeitsdichte. Die Vorfaktoren haben die gleiche Funktion wie die Dielektrizitätszahlen in den Fresnelschen Formeln der Optik. Die Erhaltung der Gesamtenergie verlangt, dass

$$R + T = 1 \quad (5.8.7)$$

ist.

Wenn im Gebiet $x > 0$ die kinetische Energie kleiner als die potentielle Energie ist (Fall 5.8) wird der Wellenvektor imaginär

$$k_2 = i \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = i\rho_2 \quad \Longrightarrow \quad \rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (5.8.8)$$

Dies bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit das Teilchen für $x > 0$ zu finden, exponentiell mit x abnimmt. Weiter haben wir

$$\begin{aligned} \rho_2 A_2 &= ik_1 (A'_1 - A_1) \\ A_2 &= A_1 + A'_1 \end{aligned} \quad (5.8.9)$$

Wie immer ist A_1 frei wählbar. Wir erhalten

$$\begin{aligned}\frac{A'_1}{A_1} &= \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \\ \frac{A_2}{A_1} &= \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2}\end{aligned}\quad (5.8.10)$$

für den Reflexionskoeffizienten

$$R = 1 \quad (5.8.11)$$

und für den Transmissionskoeffizienten

$$T = 0 \quad (5.8.12)$$

Alle Energie wird also reflektiert, aber es gibt im verbotenen Bereich dennoch eine mit der Distanz abnehmende Energiedichte.

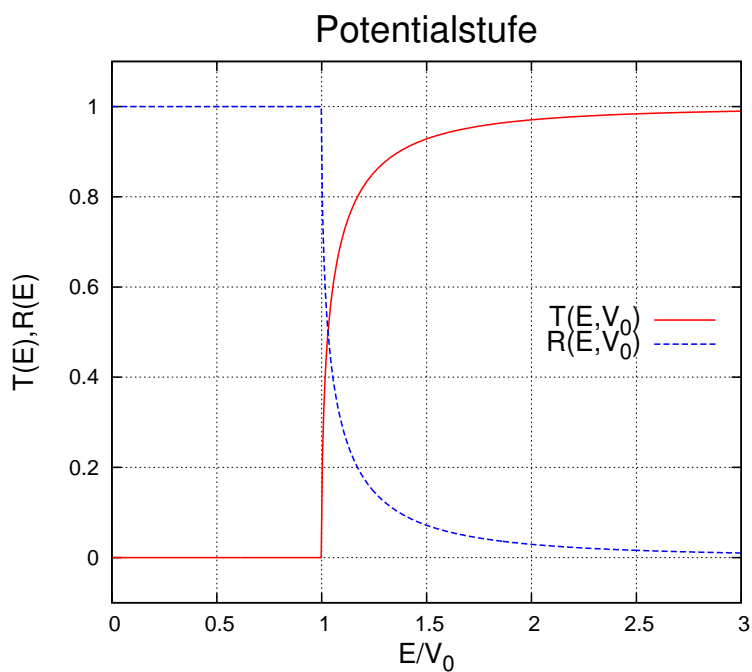


Abbildung 5.4.: Transmissionskoeffizient T und Reflexionskoeffizient R .

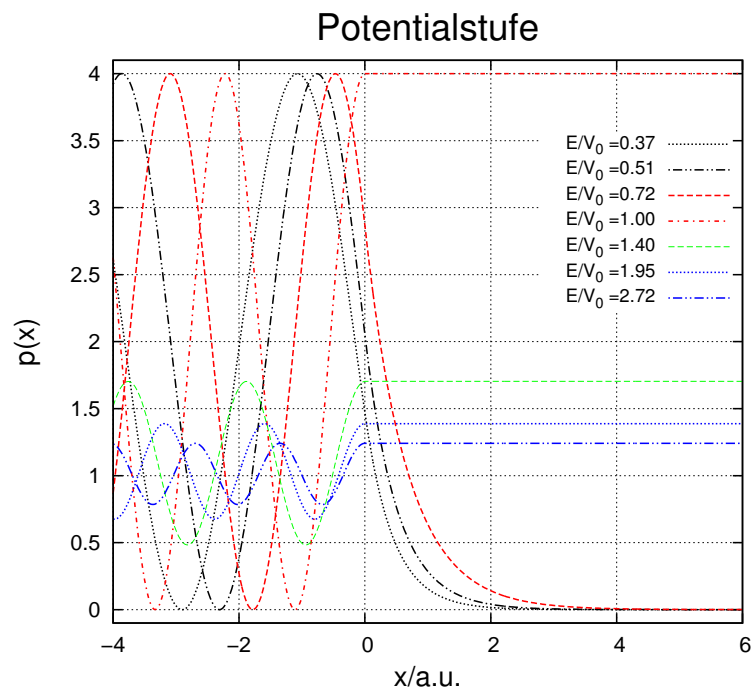


Abbildung 5.5.: $\phi(x)^* \phi(x)$ für verschiedene Verhältnisse von E/V_0 .

5.9. Potentialbarriere und Tunneleffekt

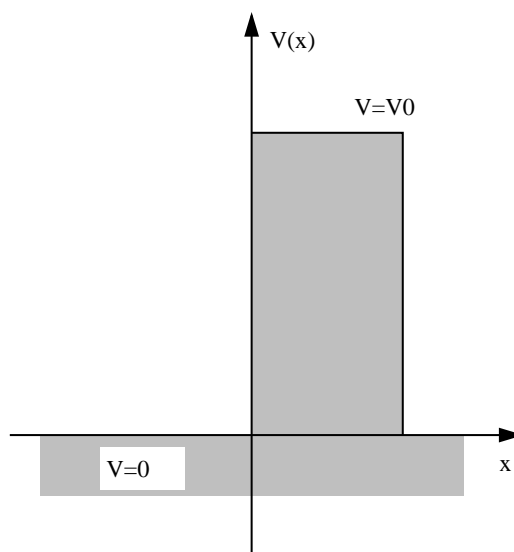


Abbildung 5.6.: Potentialwand.

Wir sahen, dass eine von links einlaufende Welle mit einer kinetischen Energie kleiner als die Stufenhöhe im Bereich der Stufe eine exponentiell abfallende Wahrscheinlichkeit besitzt. Ist die Stufe endlich breit, so gibt es auch am rechten Rand der Stufe eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit: das Teilchen hat die Barriere durchtunnelt. Zur Rechnung verwenden wir den Ortsanteil der Wellenfunktion $\psi(x, t) = \phi(x) \exp(-i\omega t)$, die von links her in positiver Richtung auf die Barriere zwischen $x = 0$ und $x = a$ (Abbild. 5.6) einfallen soll.

Wie im vorherigen Absatz muss ϕ und $\partial\phi/\partial x$ stetig sein. Die Energie der Welle ist zuerst beliebig.

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} && \text{für} && x < 0 \\ \phi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} && \text{für} && 0 \leq x \leq a \\ \phi_3(x) &= A_3 e^{ik_3 x} + A'_3 e^{-ik_3 x} && \text{für} && x > a \end{aligned} \quad (5.9.1)$$

Da für $x < 0$ und $x > a$ das Potential $V(x) = 0$ ist, ist $k_1 = k_3$. Für $x = 0$ und $x = a$ sind die Stetigkeitsbedingungen

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \phi_2 && x = 0 \\ \frac{\partial\phi_1}{\partial x} &= \frac{\partial\phi_2}{\partial x} && x = 0 \\ \phi_2 &= \phi_3 && x = a \\ \frac{\partial\phi_2}{\partial x} &= \frac{\partial\phi_3}{\partial x} && x = a \end{aligned} \quad (5.9.2)$$

Wir haben sechs Unbekannte und vier Gleichungen. A_1 ist beliebig wählbar, da wir eine von links einlaufende Welle annehmen. $A'_3 = 0$ weil keine von rechts einlaufende Welle existiert. Damit bleiben vier Unbekannte für vier Gleichungen. Die Stetigkeitsbedingungen sind dann

$$\begin{aligned} A_1 + A'_1 &= A_2 + A'_2 && \text{für} && x = 0 \\ k_1(A_1 - A'_1) &= k_2(A_2 - A'_2) && \text{für} && x = 0 \\ A_2 e^{ik_2 a} + A'_2 e^{-ik_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} && \text{für} && x = a \\ k_2(A_2 e^{ik_2 a} - A'_2 e^{-ik_2 a}) &= k_1 A_3 e^{ik_1 a} && \text{für} && x = a \end{aligned} \quad (5.9.3)$$

Die Lösungen sind:

$$\begin{aligned} A'_1 &= \frac{A_1 (k_1 - k_2) (k_1 + k_2) \sin(ak_2)}{((k_1^2 + k_2^2)) \sin(ak_2) + 2ik_1 k_2 \cos(ak_2)} \\ A_2 &= -\frac{2A_1 k_1 (k_1 + k_2)}{-(k_1 + k_2)^2 + e^{2iak_2} (k_1 - k_2)^2} \\ A'_2 &= \frac{2A_1 k_1 e^{2iak_2} (k_1 - k_2)}{-(k_1 + k_2)^2 + e^{2iak_2} (k_1 - k_2)^2} \\ A_3 &= -\frac{4A_1 k_1 k_2 e^{-ia(k_1 - k_2)}}{-(k_1 + k_2)^2 + e^{2iak_2} (k_1 - k_2)^2} \end{aligned} \quad (5.9.4)$$

Aus diesen Beziehungen folgen mit

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{für } x < 0 \vee x > a \quad (5.9.5)$$

und

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{für } 0 \leq x \leq a \quad (5.9.6)$$

die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten \mathbb{T} und \mathbb{R}

$$\mathbb{R} = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{8E(V_0 - E)}{V_0^2 \left(1 - \cos \left(2\sqrt{2} \sqrt{m(E - V_0)} \frac{a}{\hbar} \right) \right) + 8E(E - V_0)} + 1 \quad (5.9.7)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbb{T} &= \frac{k_3 + k_3^*}{k_1 + k_1^*} \begin{pmatrix} A_3 \\ A_1 \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} A_3 \\ A_1 \end{pmatrix} \\ &= \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{8E(E - V_0)}{V_0^2 \left(1 - \cos \left(2\sqrt{2} \sqrt{m(E - V_0)} \frac{a}{\hbar} \right) \right) + 8E(E - V_0)} \end{aligned} \quad (5.9.8)$$

wobei $k_1 = k_3 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ und $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$ sind. Eine kurze Kontrolle zeigt, dass $\mathbb{R} + \mathbb{T} = 1$ ist, wir also keine Teilchen verlieren. Sowohl die Reflexion wie auch die Transmission oszillieren mit der Breite der Barriere a . Die Gleichungen können noch vereinfacht werden:

$$\mathbb{R} = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{2m(E - V_0)} \frac{a}{\hbar} \right) + 4E(E - V_0)} + 1 \quad (5.9.9)$$

und

$$\mathbb{T} = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{2m(E - V_0)} \frac{a}{\hbar} \right) + 4E(E - V_0)} \quad (5.9.10)$$

Wenn $E < V_0$ ist, wird aus dem Cosinus ein Cosinus hyperbolicus und die Gleichungen lauten

$$\mathbb{R} = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{8E(V_0 - E)}{V_0^2 \left(1 - \cosh \left(2\sqrt{2} \sqrt{m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar} \right) \right) + 8E(E - V_0)} + 1 \quad (5.9.11)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbb{T} &= \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 \\ &= \frac{8E(E - V_0)}{V_0^2 \left(1 - \cosh \left(2\sqrt{2} \sqrt{m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar} \right) \right) + 8E(E - V_0)} \end{aligned} \quad (5.9.12)$$

Auch diese Gleichungen können vereinfacht werden

$$\mathbb{R} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(E - V_0) - V_0^2 \sinh \left(\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar} \right)} + 1 \quad (5.9.13)$$

und

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) - V_0^2 \sinh\left(\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}\right)} \quad (5.9.14)$$

$$T \sim \frac{8E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\left(\sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{a}{\hbar}\right)} \quad (5.9.15)$$

Wenn sich ein Elektron mit der Energie $E = 1$ eV auf einen Potentialwall mit Breite $a = 100$ pm und der Höhe $V_0 = 2$ eV hinzu bewegt, dann ist die Transmissionswahrscheinlichkeit $T \sim 0.64$. Die Näherung nach Gleichung (5.9.15) ergäbe 1.17, ein unphysikalischer Wert. Für eine Barrierenbreite von 500 pm wäre $T = 0.12$, die Näherung 0.13. Je dicker die Barriere, desto besser ist die exponentielle Näherung. Unter den gleichen Bedingungen würde ein Proton ($m_p \simeq 1840m_e$) durch eine Barriere von $a = 100$ pm eine Transmissionswahrscheinlichkeit von $T \sim 4 \times 1.8 \cdot 10^{-10}$ und bei $a = 500$ pm wäre $T = 1.1 \cdot 10^{-50}$. Das heisst, dass der Tunneleffekt für atomare Distanzen für Elektronen wahrscheinlich, für Protonen sehr unwahrscheinlich ist.

Dieser Befund wird durch die aus der Chemie bekannte Tatsache, dass Elektronen die Bindungen vermitteln, gestützt. Tunneln für Protonen ist nur auf der Längenskala von Kernen (1 fm) wahrscheinlich.

Das Rastertunnelmikroskop (STM) beruht auf dem Tunneleffekt für Elektronen. Diese können eine kurze Potentialbarriere durchqueren. Dabei verringert sich der Tunnelstrom exponentiell mit der Breite der Barriere.

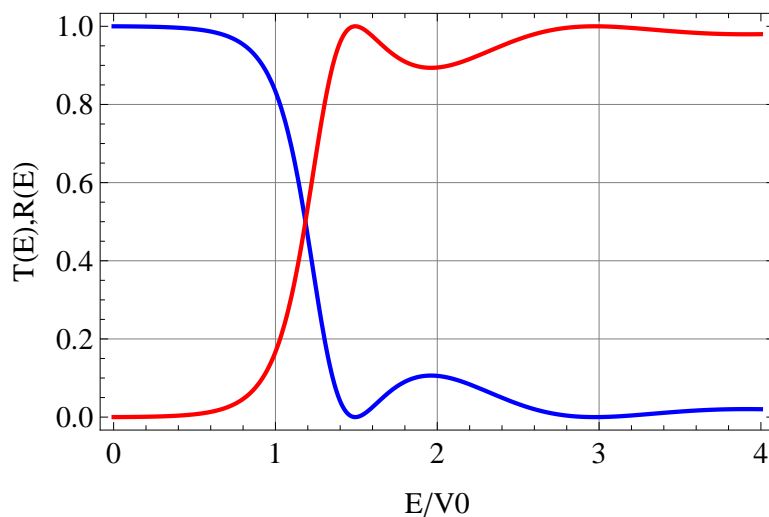


Abbildung 5.7.: Transmissionskoeffizient (rot) und Reflexionskoeffizient (blau)

Abbildung 5.7 zeigt auf einer skalenfreien Darstellung den Verlauf des Transmissions- und des Reflexionskoeffizienten für eine feste Barrierenbreite und in Abhängigkeit der Energie des einlaufenden Teilchens skaliert mit der Barrierenhöhe V_0 . Für E/V_0 haben wir den erwarteten ungefähr exponentiellen Verlauf. Im Durchlassbereich ($E/V_0 > 1$) zeigen sich jedoch Resonanzen. Bei $E/V_0 = 1.5$ ist die Transmission

minimal. Der Effekt ist analog zu den Phänomenen, die man beobachtet, wenn eine Wasserwelle über eine Untiefe hinweg geht.

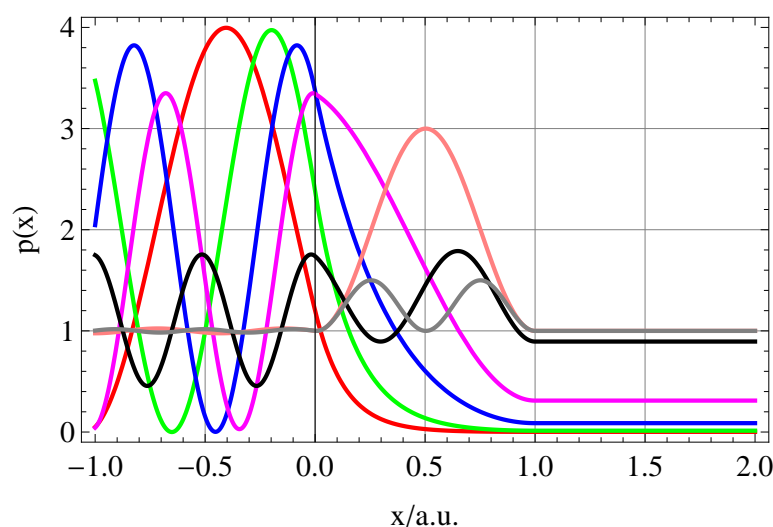


Abbildung 5.8.: Wahrscheinlichkeitsdichten an der Tunnelbarriere der Breite $a = 1$. Rot: $E/V_0 = 0.3$, grün: $E/V_0 = 0.6$, blau: $E/V_0 = 0.9$, magenta: $E/V_0 = 1.1$, pink: $E/V_0 = 1.5$ (Resonanz, Reflektivität minimal, Transmission maximal), schwarz: $E/V_0 = 2.0$ (Maximale Reflektivität), grau: $E/V_0 = 3.0$.

Abbildung 5.8 zeigt für verschiedene Realteilenergien E/V_0 die Wahrscheinlichkeitsdichten für den Aufenthalt. Beachten Sie insbesondere die Welle für $E/V_0 = 1.5$!

5.10. Harmonischer Oszillator

Wenn die potentielle Energie $V(x)$ eine quadratisch von x abhängt ist die Bewegung des Teilchens beschränkt und analog zum Fall eines klassischen harmonischen Oszillators. Der Operator \hat{H} hat die Form

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (5.10.1)$$

mit der potentiellen Energie

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (5.10.2)$$

Die Lösungen der Schrödingergleichung sind stationär und haben, dem Separationsansatz entsprechend, die Form

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \phi(x) \quad (5.10.3)$$

Damit können wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung verwenden

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \phi = E \phi \quad (5.10.4)$$

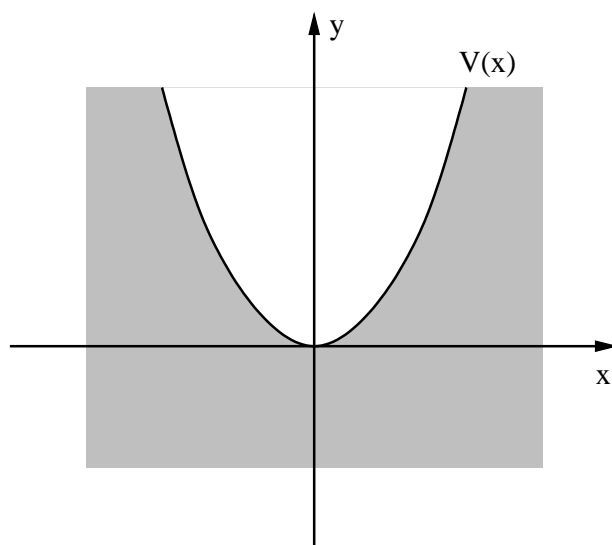


Abbildung 5.9.: Potentielle Energiefunktion eines harmonischen Oszillators.

Wir definieren drei Parameter und ersetzen die Variable x durch u

$$\begin{aligned} b &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ \epsilon &= \frac{E}{\hbar\omega} \\ u &= \frac{x}{b} \end{aligned} \quad (5.10.5)$$

Die Gleichung 5.10.4 lautet dann

$$-\frac{\partial^2}{\partial u^2} \phi(u) + u^2 \phi(u) = 2\epsilon \phi(u) \quad (5.10.6)$$

Um die Eigenfunktionen ϕ_n und die Eigenwerte ϵ_n (oder E_n) zu finden, definieren wir die folgenden Operatoren

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u - \frac{\partial}{\partial u} \right) = \frac{1}{b\sqrt{2}} \left(x - b^2 \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) = \frac{1}{b\sqrt{2}} \left(x + b^2 \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (5.10.7)$$

Die Operatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} sind nicht hermitisch (also nicht selbstadjungiert). Sie sind aber adjungiert zueinander. Deshalb kann man schreiben

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2} \left(u^2 - 1 - \frac{d^2}{du^2} \right) \quad (5.10.8)$$

Also wird Gleichung (5.10.6)

$$\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \phi(u) = \epsilon \phi(u) \quad (5.10.9)$$

Die Hamiltonoperator kann mit den Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger umgeschrieben werden

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \quad (5.10.10)$$

Der Kommutator der Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger hat den Wert

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \quad (5.10.11)$$

Die Eigenschaften des Kommutators zeigen, dass

$$[\hat{a}, \hat{a}] = 0 \quad (5.10.12)$$

und

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad (5.10.13)$$

Wir wollen nun untersuchen, wie die Gleichung (5.10.9) sich ändert, wenn wir sie von links mit \hat{a} oder \hat{a}^\dagger multiplizieren. Wir schreiben Gleichung (5.10.9) um

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} \phi(u) = \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) \phi(u) \quad (5.10.14)$$

Multiplizieren wir Gleichung (5.10.14) von links mit \hat{a} und verwenden Gleichung (5.10.12) erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{a} (\hat{a}^\dagger \hat{a}) \phi(u) &= \hat{a} \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) \phi(u) \\ (\hat{a}\hat{a}^\dagger) \hat{a} \phi(u) &= \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) \hat{a} \phi(u) \\ (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) (\hat{a} \phi(u)) &= \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) (\hat{a} \phi(u)) \\ \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a} \phi(u)) &= \left(\left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) - 1 \right) (\hat{a} \phi(u)) \end{aligned} \quad (5.10.15)$$

Wenn $\phi(u)$ eine Lösung der Gleichung (5.10.14) mit dem Eigenwert $(\epsilon - 1/2)$ ist, ist $\hat{a}\phi(u)$ eine Lösung der gleichen Gleichung (5.10.14), aber mit dem Eigenwert $((\epsilon - 1/2) - 1)$. Der Operator \hat{a} erniedrigt den Eigenwert um 1. Er wird *Absteigeoperator* oder *Vernichtungsoperator* genannt.

Multiplizieren wir Gleichung (5.10.14) von links mit \hat{a}^\dagger und verwenden Gleichung (5.10.12) erhalten wir

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a}) \phi(u) &= \hat{a}^\dagger \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) \phi(u) \\
\hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a}) \phi(u) &= \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) \hat{a}^\dagger \phi(u) \\
\hat{a}^\dagger (\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1) \phi(u) &= \left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) (\hat{a}^\dagger \phi(u)) \\
\hat{a}^\dagger (\hat{a} \hat{a}^\dagger) \phi(u) &= \left(\left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) + 1 \right) (\hat{a}^\dagger \phi(u)) \\
\hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger \phi(u)) &= \left(\left(\epsilon - \frac{1}{2} \right) + 1 \right) (\hat{a}^\dagger \phi(u))
\end{aligned} \tag{5.10.16}$$

Wenn $\phi(u)$ eine Lösung der Gleichung (5.10.14) mit dem Eigenwert $(\epsilon - 1/2)$ ist, ist $\hat{a}^\dagger \phi(u)$ eine Lösung der gleichen Gleichung (5.10.14), aber mit dem Eigenwert $((\epsilon - 1/2) + 1)$. Der Operator \hat{a}^\dagger erhöht den Eigenwert um 1. Er wird *Aufsteigeoperator* oder *Erzeugungoperator* genannt.

Wenn wir eine endliche Energieskala haben, muss es eine kleinste Energie und damit auch einen kleinsten Eigenwert geben. Das heisst, es muss eine Ortswellenfunktion $\phi_0(u)$ geben, auf die angewandt der Vernichtungsoperator \hat{a} eine Nullfunktion ergibt.

$$\hat{a} \phi_0(u) = 0 \tag{5.10.17}$$

Wir verwenden die Definition von \hat{a} und erhalten

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2}} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \phi_0(u) &= 0 \\
\left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \phi_0(u) &= 0 \\
u \phi_0(u) &= - \frac{\partial}{\partial u} \phi_0(u) \\
u &= - \frac{1}{\phi_0(u)} \frac{\partial}{\partial u} \phi_0(u) = - \frac{\partial}{\partial u} \ln(\phi_0(u)) \\
\frac{1}{2} u^2 &= - \ln(\phi_0(u)) + \tilde{C} \\
\phi_0(u) &= C \exp\left(-\frac{1}{2} u^2\right)
\end{aligned} \tag{5.10.18}$$

Die Konstante C ergibt sich aus der Normalisierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^*(u) \phi_0(u) du = 1 \implies C = \pi^{-1/4}$$

Die normierte Wellenfunktion des Grundzustandes des harmonischen Oszillators in den Koordinaten u und x ist

$$\phi_0(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2}u^2\right) \implies \phi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (5.10.19)$$

Ausgehend von $\phi_0(u)$ können wir nun durch die wiederholte Anwendung von \hat{a}^\dagger auf $\phi_0(u)$ alle Lösungen generieren.

Die ersten nicht normierten Funktionen sind

$$\begin{aligned} \phi_0(u) &= \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ \phi_1(u) &= (\sqrt{2}u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ \phi_2(u) &= (2u^2 - 1) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ \phi_3(u) &= (\sqrt{2}u(2u^2 - 3)) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ &\vdots = \vdots \end{aligned} \quad (5.10.20)$$

Mit der Normalisierungsbedingung dass das Integral über der Wahrscheinlichkeitsdichte gleich eins sein soll bekommen wir

$$\begin{aligned} \phi_0(u) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ \phi_1(u) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} (\sqrt{2}u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ \phi_2(u) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{(2u^2 - 1)}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ \phi_3(u) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{(u(2u^2 - 3))}{\sqrt{3}} \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \\ &\vdots = \vdots \end{aligned} \quad (5.10.21)$$

Aus $\hat{a}\phi_0(u) = 0$ und Gleichung (5.10.14) folgt, dass

$$\epsilon_0 - \frac{1}{2} = 0 \implies \epsilon_0 = \frac{1}{2} \quad (5.10.22)$$

Allgemein ist also

$$\epsilon_n = n + \frac{1}{2} \quad \forall n \in \mathbb{N} \cup \{0\} \quad (5.10.23)$$

Wir erinnern uns an die Substitutionen in Gleichung (5.10.5). Deshalb sind die

Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad \forall n \in \mathbb{N} \cup \{0\} \quad (5.10.24)$$

Die gleichabständigen Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind für diesen charakteristisch. Der kleinste Energieeigenwert E_0 hat den Wert $\hbar\omega/2$. Es ist nicht möglich, einen harmonischen Oszillator in Ruhe zu haben. Die minimale Energie E_0 ist die Nullpunktsenergie. Sie bewirkt, dass harmonische Oszillatoren immer energie enthalten, egal wie tief die Temperatur sinkt. Das heisst, die Boltzmannverteilung aus der klassischen Thermodynamik gilt nicht mehr.

5.10.1. Hermite-Polynome und der harmonische Oszillator

Die Lösungen von Gleichung (5.10.14) können mit *Hermite-Polynomen* ausgedrückt werden.

$$\phi_n(u) = \frac{1}{\sqrt{n! \sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} H_n(u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \quad (5.10.25)$$

mit

$$H_n(u) = (-1)^n \exp(u^2) \frac{\partial^n}{\partial u^n} \exp(-u^2) \quad (5.10.26)$$

Die ersten Hermite-Polynome sind

$$\begin{aligned} H_0(u) &= 1 \\ H_1(u) &= 2u \\ H_2(u) &= 4u^2 - 2 \\ H_3(u) &= 8u^3 - 12u \\ H_4(u) &= 16u^4 - 48u^2 + 12 \\ H_5(u) &= 32u^5 - 160u^3 + 120u \end{aligned} \quad (5.10.27)$$

Die Normierungsbedingung ist erfüllt, da

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^2(u) du = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} H_n^2(u) \exp(-u^2) du = 1 \quad \forall n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$$

ist. Hermite-Polynome haben die folgenden Eigenschaften

$$H_n(-u) = (-1)^n H_n(u) \quad (5.10.28)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(u) H_n(u) e^{-u^2} du = H_m \cdot H_n = \delta_{mn} \quad (5.10.29)$$

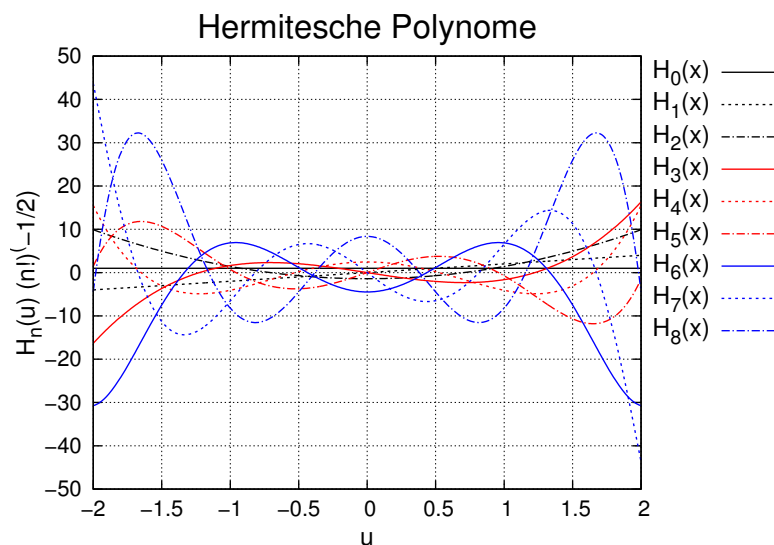


Abbildung 5.10.: Die ersten acht Hermite-Polynome.

5.10.2. Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators

Wenn wir die Substitutionen aus Gleichung (5.10.5) rückgängig machen, erhalten wir

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

$$\phi_1(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

$$\phi_2(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right)}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

$$\phi_3(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{\left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 3\right)\right)}{\sqrt{3}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

⋮

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} H_n\left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (5.10.30)$$

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\pi^{1/4}} (\hat{a}^\dagger)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (5.10.31)$$

Die Normierungsbedingung ist

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \phi_m \cdot \phi_n = \delta_{mn} \quad (5.10.32)$$

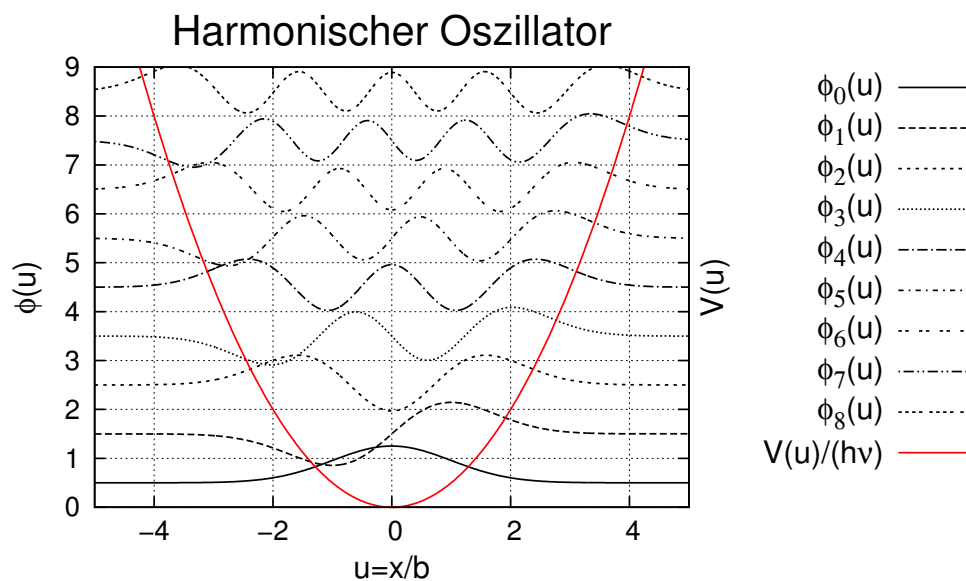


Abbildung 5.11.: Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators

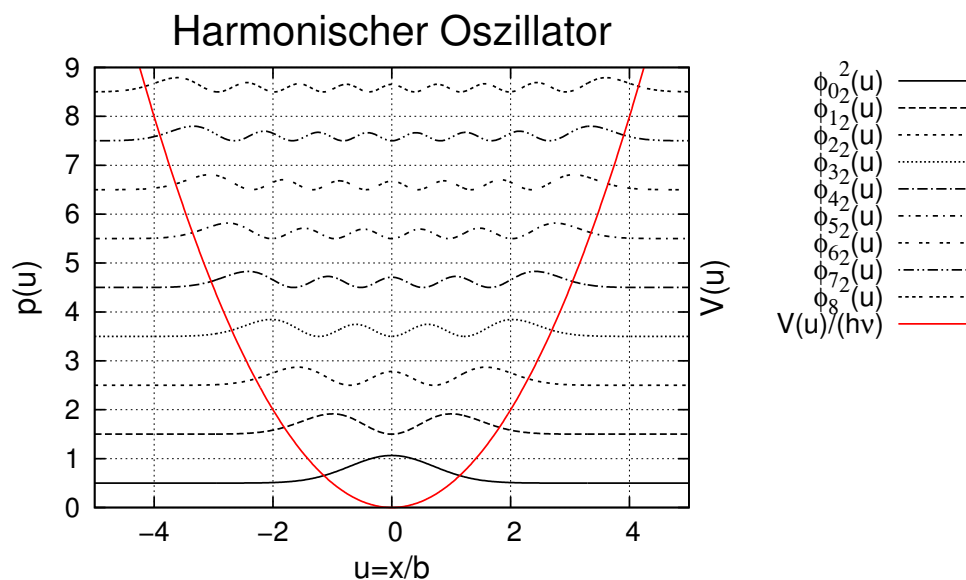


Abbildung 5.12.: Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators

5.10.3. Teilchen im endlichen Potentialtopf

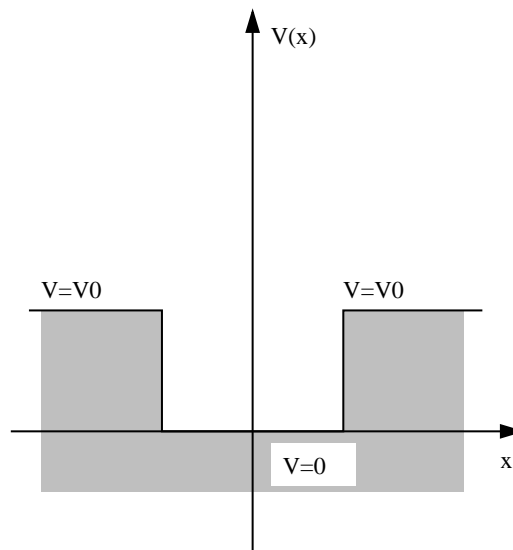


Abbildung 5.13.: Potentialtopf.

Der Fall eines Teilchens in einem endlichen Potentialtopf ist etwas komplizierter als der Fall des unendlichen. Die Wellenfunktion verschwindet nicht am Rand des Topfes. Wir müssen zwei Fälle betrachten: wenn die Energie höher als die Potentialwälle ist, also $E > V_0$ und wenn sie kleiner ist. Im ersten Falle haben wir zum Beispiel eine von links einlaufende Welle, die sich an den Diskontinuitäten des Potentials reflektiert. Diese Lösung müsste aus der Lösung des Potentialwalls ablesbar sein. Im zweiten Falle haben wir lokalisierte Wellenfunktionen.

5.10.3.1. Potentialtopf, $E > V_0$

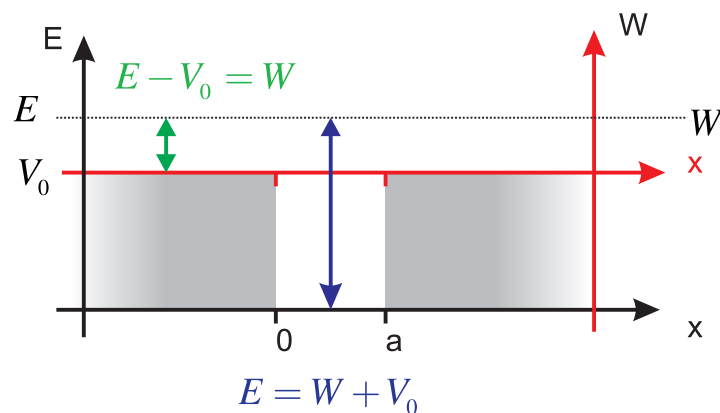


Abbildung 5.14.: Transformation einer Potentialschwelle in einen Potentialtopf

Die Lösungen sind in Gleichung (5.9.4) angegeben und werden hier nochmals wiederholt.

$$\begin{aligned} A'_1 &= \frac{A_1 (k_1 - k_2) (k_1 + k_2) \sin(ak_2)}{((k_1^2 + k_2^2)) \sin(ak_2) + 2ik_1k_2 \cos(ak_2)} \\ A_2 &= -\frac{2A_1k_1(k_1 + k_2)}{-(k_1 + k_2)^2 + e^{2iak_2}(k_1 - k_2)^2} \\ A'_2 &= \frac{2A_1k_1e^{2iak_2}(k_1 - k_2)}{-(k_1 + k_2)^2 + e^{2iak_2}(k_1 - k_2)^2} \\ A_3 &= -\frac{4A_1k_1k_2e^{-ia(k_1-k_2)}}{-(k_1 + k_2)^2 + e^{2iak_2}(k_1 - k_2)^2} \end{aligned}$$

A_1 stellt die einfallende Welle dar. der Wert ist frei wählbar. Die Energiewerte müssen aus Gleichung (5.9.5)

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{für } x < 0 \vee x > a$$

und Gleichung (5.9.6)

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{für } 0 \leq x \leq a$$

werden umskaliert mit $E \rightarrow E - V_0$ ausserhalb und $E - V_0 \rightarrow E$ im Topf. Wir erhalten

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{für } x < 0 \vee x > a \quad (5.10.33)$$

und

$$k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{für } 0 \leq x \leq a \quad (5.10.34)$$

Daraus folgen die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten T und R

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{8E(V_0 - E)}{V_0^2 \left(1 - \cos \left(2\sqrt{2}\sqrt{Em}\frac{a}{\hbar} \right) \right) + 8E(EV_0)} + 1 \quad (5.10.35)$$

und

$$\begin{aligned} T &= \frac{k_3 + k_3^*}{k_1 + k_1^*} \left(\frac{A_3}{A_1} \right)^* \left(\frac{A_3}{A_1} \right) \\ &= \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{8E(E - V_0)}{V_0^2 \left(1 - \cos \left(2\sqrt{2}\sqrt{m(E - V_0)}\frac{a}{\hbar} \right) \right) + 8E(E - V_0)} \end{aligned} \quad (5.10.36)$$

Die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten sind also gleich wie bei einer Barriere, sofern $E > V_0$ ist. Eine kurze Kontrolle zeigt, dass $R + T = 1$ ist, wir also keine Teilchen verlieren. Sowohl die Reflexion wie auch die Transmission oszillieren mit der Breite der Barriere a . Die Gleichungen können noch vereinfacht werden:

$$R = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{2m(E - V_0)}\frac{a}{\hbar} \right) + 4E(E - V_0)} + 1 \quad (5.10.37)$$

und

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{2m(E - V_0)} \frac{a}{\hbar} \right) + 4E(E - V_0)} \quad (5.10.38)$$

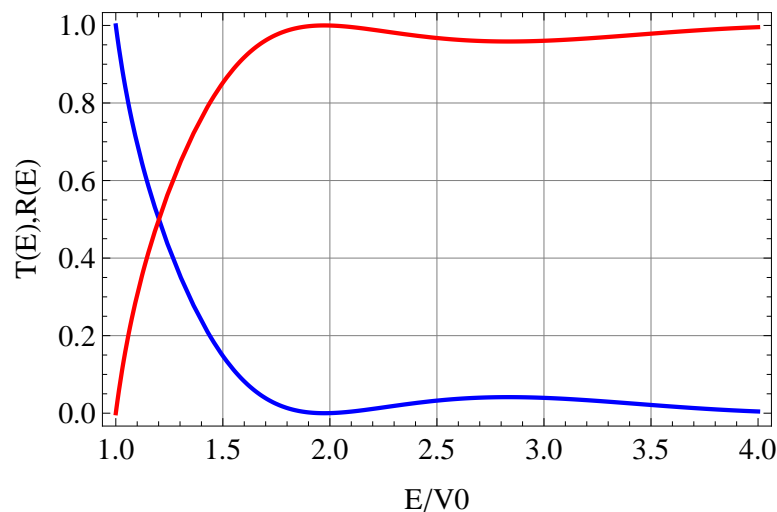


Abbildung 5.15.: Transmission über einen Potentialtopf.

Abbildung 5.15 zeigt den Transmissionskoeffizienten und den Reflexionskoeffizienten als Funktion der Energiedifferenz von E zu V_0 .

5.10.3.2. Potentialtopf, $E < V_0$

Die Energie des Teilchens E kleiner ist als die potentielle Energie der Wände $E < V_0$ kann die Schrödingergleichung mit dem allgemeinen Ansatz

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \phi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \\ \phi_3(x) &= A_3 e^{ik_3 x} + A'_3 e^{-ik_3 x} \end{aligned} \quad (5.10.39)$$

gelöst werden. Hier ist $k_1 = k_3$. Für $x = 0$ und $x = a$ sind die Randbedingungen

$$\begin{aligned} \phi_1(x)|_{x=0} &= \phi_2(x)|_{x=0} \\ \frac{\partial \phi_1(x)}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \frac{\partial \phi_2(x)}{\partial x} \Big|_{x=0} \end{aligned} \quad (5.10.40)$$

sowie

$$\begin{aligned} \phi_2(x)|_{x=a} &= \phi_3(x)|_{x=a} \\ \frac{\partial \phi_2(x)}{\partial x} \Big|_{x=a} &= \frac{\partial \phi_3(x)}{\partial x} \Big|_{x=a} \end{aligned} \quad (5.10.41)$$

Von links und rechts kommen keine Wellen, also ist $A_1 = A'_3 = 0$. A_2 oder A'_2 können frei gewählt werden. Wir lassen A_2 als freien Parameter. Dann ist bei

$x = 0$

$$\begin{aligned} A'_1 &= A_2 + A'_2 \\ -k_1 A'_1 &= k_2(A_2 - A'_2) \end{aligned} \quad (5.10.42)$$

und bei $x = a$

$$\begin{aligned} A_2 e^{ik_2 a} + A'_2 e^{-ik_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a} \\ k_2(A_2 e^{ik_2 a} - A'_2 e^{-ik_2 a}) &= k_1 A_3 e^{ik_1 a} \end{aligned} \quad (5.10.43)$$

Beide Gleichungssysteme können gelöst werden und ergeben eine Beziehung zwischen A'_1 , A'_2 als Funktion von A_2 beziehungsweise für A_3 und A'_2 als Funktion von A_2 .

$$A'_1 = \frac{2k_2}{k_2 - k_1} A_2 \quad A'_2 = \frac{k_2 + k_1}{k_2 - k_1} A_2 \quad (5.10.44a)$$

$$A_3 = \frac{2k_2}{k_2 + k_1} A_2 \quad A'_2 = \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1} e^{2ik_2 a} A_2 \quad (5.10.44b)$$

Die beiden Lösungen für A'_2 müssen identisch sein, das heisst die Gleichung

$$\left(\frac{k_2 + k_1}{k_2 - k_1} \right)^2 = \exp(2ik_2 a) \quad (5.10.45)$$

muss gelten. Da $k_2(E)$ und $k_1(E, V_0)$ beides Funktionen von E sind, ist Gleichung (5.10.45) eine Bestimmungsgleichung für die erlaubten Werte von E . Mit $k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $k_1 = i\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ (da $E < V_0$ ist) wird Gleichung (5.10.45)

$$\left(\frac{\sqrt{E} + i\sqrt{V_0 - E}}{\sqrt{E} - i\sqrt{V_0 - E}} \right)^2 = \exp(i\sqrt{8mE} a/\hbar) \quad (5.10.46)$$

Gleichung (5.10.46) ist nicht analytisch lösbar. Bei den Lösungen muss sowohl der Realteil gleich sein wie auch der Imaginärteil. Diese sind

$$\frac{8E^2 - 8EV_0 + V_0^2}{V_0^2} = \cos\left(\sqrt{8mE} \frac{a}{\hbar}\right) \quad (5.10.47a)$$

$$\frac{4(2E - V_0)\sqrt{E(V_0 - E)}}{V_0^2} = \sin\left(\sqrt{8mE} \frac{a}{\hbar}\right) \quad (5.10.47b)$$

Addiert man die quadrierte Gleichung (5.10.47a) zur quadrierten Gleichung 5.10.47b, so erhält man $1 = 1$. Es reicht also die numerische Lösung von Gleichung (5.10.47a) zu bestimmen. Mit $E/V_0 = x^2$ und $\kappa(V_0, a) = \left(\sqrt{8m\hbar}\right) \left(\sqrt{V_0} a\right)$ wird Gleichung (5.10.47a)

$$8x^4 - 8x^2 + 1 = \cos(\kappa x) \quad (5.10.48)$$

Die linke Seite der Gleichung ist invariant. x hat den Wertebereich $[0, 1]$. Die rechte Seite hängt von $a\sqrt{V_0}$ ab.

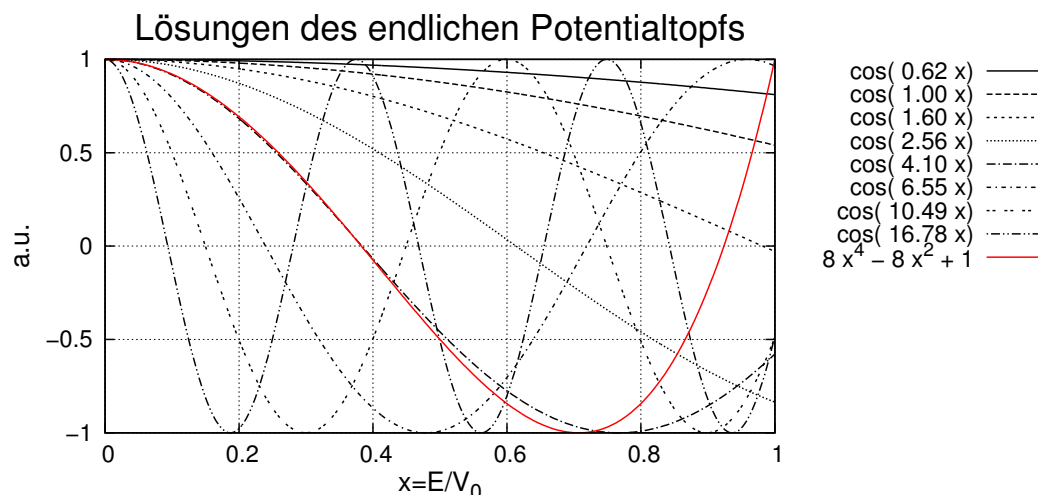


Abbildung 5.16.: Darstellung von $8x^4 - 8x^2 + 1$ gegen $\cos(\kappa x)$ in Abhängigkeit von κ

Abbildung 5.16 zeigt die linke und die rechte Seite der Gleichung 5.10.48. Die Schnittpunkte mit der roten Linie sind die Lösungen x_i . Wenn κ zunimmt, gibt es mehr gebundene Lösungen. Ein zunehmendes κ bedeutet, dass entweder die Potentialtiefe V_0 zugenommen hat, oder aber die Breite des Topfes a .

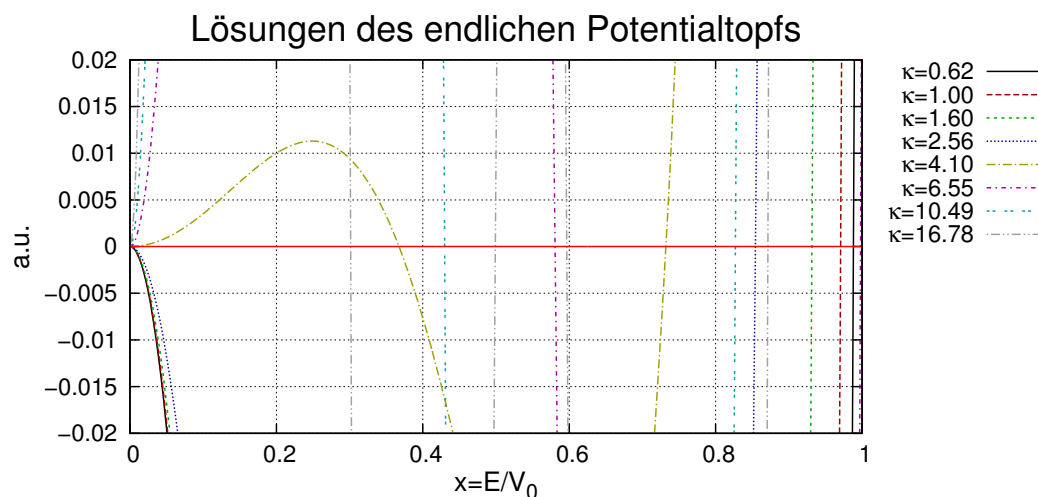


Abbildung 5.17.: Nullstellen von $8x^4 - 8x^2 + 1 - \cos(\kappa x) = 0$ in Abhängigkeit von κ

Abbildung 5.17 zeigt einen vergrößerten Ausschnitt zur Bestimmung der Nullstellen der Gleichung 5.10.48.

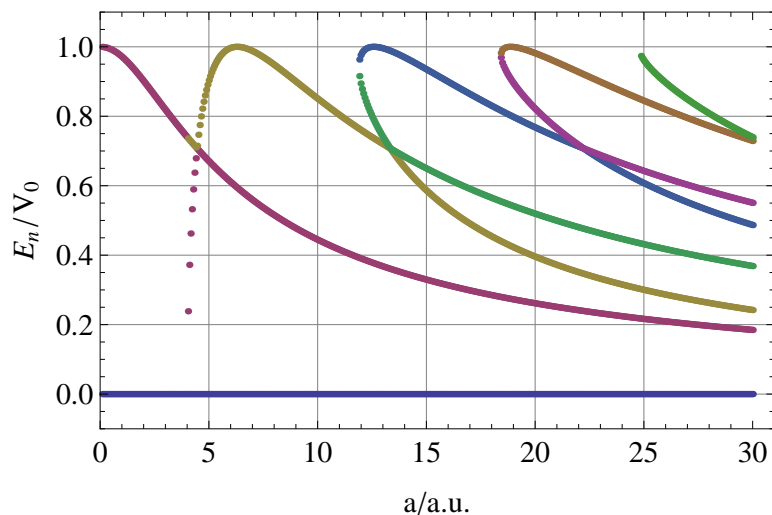


Abbildung 5.18.: Relative Energieniveaus des Potentialtopfs als Funktion der Topfbreite a .

Abbildung 5.18 zeigt die Energieniveaus bei konstantem V_0 als Funktion der Topfbreite a . Bei kleinem a existieren nur zwei Niveaus, $E_0 = 0$ und $E_1 \approx V_0$. Wenn a zunimmt, gibt es mehr Niveaus. Bei $a = 4$ a.u. sieht man, dass sich zwei Energieniveaus kreuzen. Bei einer vollen Betrachtung würde an dieser Stelle sich eine Bandlücke öffnen.

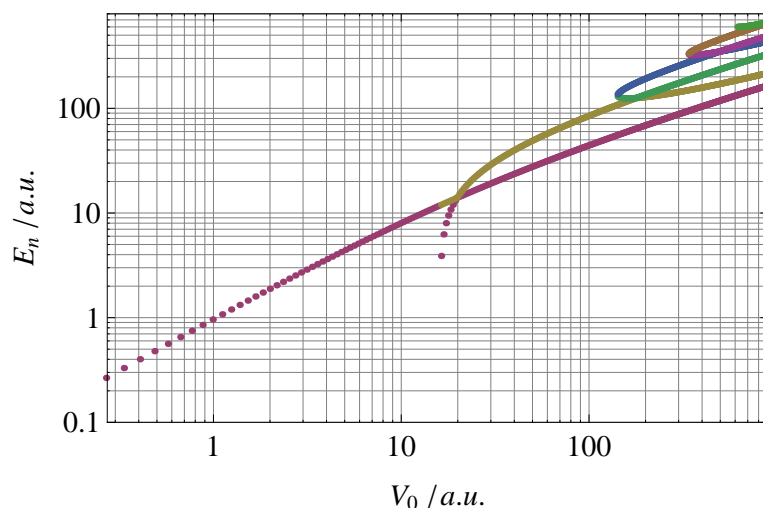


Abbildung 5.19.: Energieniveaus des Potentialtopfs als Funktion der Wandhöhe V_0 .

Abbildung 5.18 zeigt die Energieniveaus bei konstantem a als Funktion der Wandhöhe V_0 . Bei kleinem V_0 existieren nur zwei Niveaus, $E_0 = 0$ (hier nicht angezeigt) und $E_1 \approx V_0$. Wenn V_0 zunimmt, gibt es mehr Niveaus. Die erste Kreuzung von

energieniveaus sieht man bei $V_0 = 16$ a.u.

5.10.4. Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden: entartete Zustände

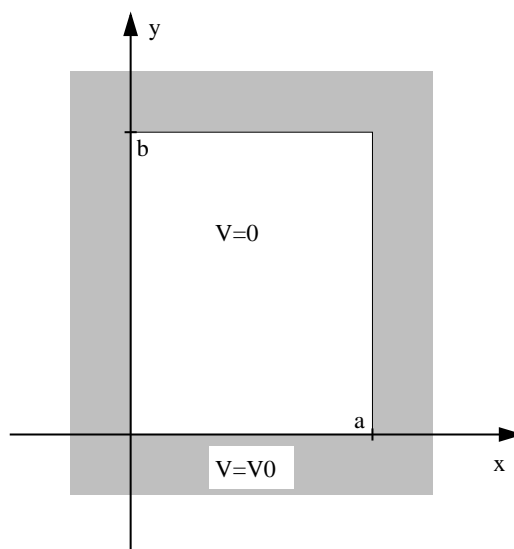


Abbildung 5.20.: 2D unendlicher Potentialkasten.

Die Energieeigenwerte eines zweidimensionalen Potentialtopfs sind ähnlich quantisiert wie in dem Fall eines eindimensionalen Potentialtopfs mit unendlich hohen Wänden (Siehe Abschnitt 5.7). Wenn der Topf die Dimensionen a und b hat (siehe Abbildung 5.20) sind die Energieeigenwerte

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right) \quad n_x, n_y \in \mathbb{N} \cup \{0\} \quad (5.10.49)$$

Die Eigenfunktionen lauten

$$\phi(x, y) = C \sin \left(n_x \pi \frac{x}{a} \right) \sin \left(n_y \pi \frac{y}{b} \right) \quad (5.10.50)$$

Wenn a/b oder b/a ganzzahlig sind, treten unterschiedliche Eigenfunktionen mit dem gleichen Energieeigenwert auf. Man sagt, die Eigenwerte seien *entartet*. Wenn zum Beispiel $a/b = 1$ ist, dann sind die Energien zu den Eigenwerten $(n_x, n_y) = (7, 1)$ und $(n_x, n_y) = (5, 5)$ gleich.

$$E_{7,1} = E_{5,5} = 50 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (5.10.51)$$

Beim eindimensionalen Potentialtopf mit endlichen Wandhöhen treten für gewisse Kombinationen von Topfbreiten a und Topfhöhen V_0 Kreuzungen von Niveaus auf. Dies führt wie gezeigt auch zu einer Entartung. Beim zweidimensionalen Potentialtopf mit endlich hohen Wänden tritt der gleiche Effekt auch auf.

6. Atome und ihr Aufbau

6.1. Bohr-Sommerfeld-Modell des Atoms



Versuch zur Vorlesung:

Balmer-Serie (Versuchskarte AT-35)

Johann Jakob Balmer entdeckte 1885 im Spektrum der Sonne eine Serie von Absorptionslinien, die bei den Wellenlängen

$$H_\alpha = 656.28 \text{ nm}$$

$$H_\beta = 486.13 \text{ nm}$$

$$H_\gamma = 434.05 \text{ nm}$$

$$H_\delta = 410.17 \text{ nm}$$

lagen. *Balmer, Johann Jakob, 1885* schloss aus der Beobachtung, dass die Wellenlänge einer seiner Absorptionslinien durch

$$\lambda = \frac{n_1^2}{n_1^2 - 4} \cdot G \quad n_1 = 3, 4, \dots \quad (6.1.1)$$

gegeben sei, mit $G = 364.5 \text{ nm}$.

Wenn wir Gleichung (6.1.1) mit spektroskopischen Wellenzahlen $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$ ausdrücken, erhalten wir

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \left(1 - \frac{4}{n_1^2}\right) \frac{1}{G} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n_1^2}\right) \frac{4}{G} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n_1^2}\right) R_H \quad (6.1.2)$$

Die Grösse $R_H = 4/G = 1.09739 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ ist die *Rydbergkonstante* für Wasserstoff. Gleichung (6.1.1) oder Gleichung (6.1.2) können so umgeschrieben werden, dass die Frequenz ν und nicht die Wellenlänge λ berechnet wird. Mit $\nu \cdot \lambda = c$ oder $\nu = c\tilde{\nu}$ erhalten wir

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n_1^2}\right) \cdot \frac{4c}{G} \quad (6.1.3)$$

Die Zahl 4 ermuntert, sie als n_2^2 zu schreiben mit $n_2 = 2$. Also erhalten wir

$$\nu = \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) \cdot R'_H \quad (6.1.4a)$$

$$\tilde{\nu} = \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) \cdot R_H \quad (6.1.4b)$$

mit $n_2 < n_1$. Zwischen der Rydbergkonstante R'_H für Wellenlängen und der Rydbergkonstante R_H für Wellenzahlen gibt es die Beziehung

$$R'_H = c R_H \tag{6.1.5}$$

Die theoretischen und gemessenen Werte von R_H und R'_H sind

$$\begin{aligned} R'_H &= \frac{4c}{G} = 3.291 \cdot 10^{15} \text{ Hz} \\ R_{H,(\text{gemessen})} &= 1.097095531 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \\ R_\infty &= (1.0973731568539 \pm 5.5 \cdot 10^{-5}) \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (\text{unendlich schwere Kerne}) \end{aligned}$$

Mit R_X bezeichnet man die Rydbergkonstante für die Atomsorte X. R_∞ ist die Rydbergkonstante für unendlich schwere Atome.

Setzt man in Gleichung (6.1.4a) oder Gleichung (6.1.4b) $n_2 = 2$ so erhält man wieder die *Balmer-Serie*. Die kürzeste durch Gleichung (6.1.4a) vorhergesagte Wellenlänge einer Absorptionslinie liegt bei der Seriengrenze bei $\lambda_\infty = 91 \text{ nm}$. Neben der *Balmer-Serie* existieren die kürzerwellige *Lyman-Serie* ($n_2 = 1$) sowie die längerwelligen *Paschen-Serie* ($n_2 = 3$), *Brackett-Serie* ($n_2 = 4$) und *Pfund-Serie* ($n_2 = 5$).

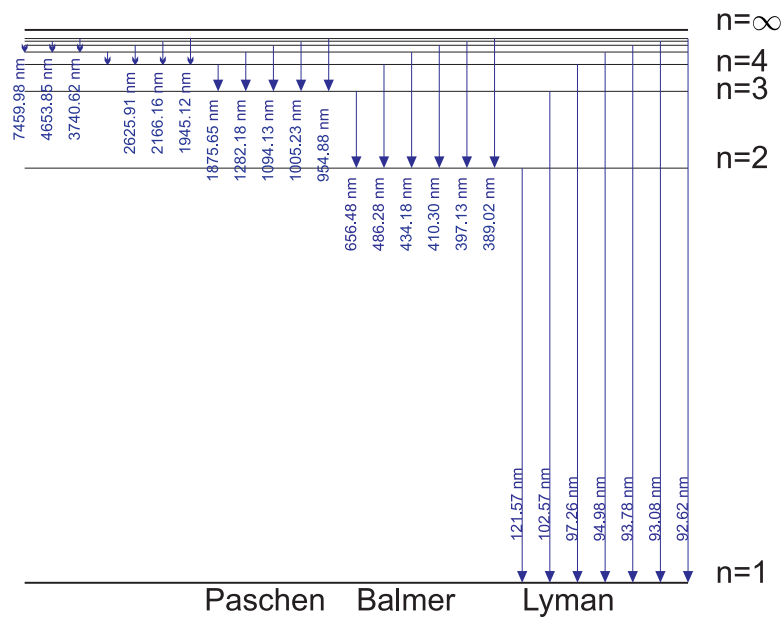


Abbildung 6.1.: Wellenlängen der Lyman-, Balmer, Johann Jakob, 1885- und Paschen-Serien im Wasserstoffspektrum.

Abbildung 6.1 zeigt die Lage der Lyman-, Balmer- und Paschen-Serien im Wasserstoffspektrum. Bei Gasentladungslampen können diese Linien als Emissionslinien beobachtet werden. Da die Temperatur der Sonne so hoch ist, dass ihr Emissionsmaximum als thermischer Strahler im Grünen liegt, werden die Emissionslinien überstrahlt. Emission ist aber immer mit Absorption verbunden, so dass auf der Sonne die Absorptionslinien gemessen werden können.

Die Differenzfrequenz zweier Linien aus einer der Serien ist wieder eine beobachtete Linie im Absorptionsspektrum. Die kann man aus

$$\left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) - \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_3^2}\right) = \frac{1}{n_3^2} - \frac{1}{n_2^2} \quad (6.1.6)$$

ersehen. Aus der Existenz der *Wasserstofflinien* folgt, dass *Elektronen* im *Wasserstoffatom* H nur diskrete Energien einnehmen können, die sogenannten diskreten *Energieniveaus*.

6.1.1. Bohrsches Atommodell

Um die optisch-spektroskopischen Eigenschaften von Atomen zu erklären, nahm Niels Bohr an, dass sich Elektronen auf Kreisbahnen wie bei Kopernikus bewegten. Arnold Sommerfeld erweiterte dieses Modell, indem er Kepler-Bahnen annahm. Er konnte damit auch Drehimpulsphänomene erklären.

Elektronen, die sich nach Bohr auf kreisförmigen Planetenbahnen bewegen, werden durch die Coulombkraft auf der Bahn gehalten. Die Zentripetalkraft ist das Gleiche wie die Coulombkraft. Die Zentripetalkraft gibt die notwendige Stärke einer Kraft an, die ein Teilchen auf einer Bahn mit gegebenem Krümmungsradius hält.

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e r \omega^2 \quad (6.1.7)$$

Über kinetische und potentielle Energien können die folgenden Aussagen getroffen werden:

$$\begin{aligned} E &= E_{kin} + E_{pot} \\ E_{pot} &= - \int_{\infty}^r \left(\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r'^2} \right) dr' = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ E &= E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m_e r^2 \omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{aligned} \quad (6.1.8)$$

E ist die Gesamtenergie. Sie ist für gebundene Zustände kleiner null. Aus Gleichung (6.1.7) folgt

$$m_e r^2 \omega^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.1.9)$$

und damit für die Energie

$$E = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (6.1.10)$$

Andererseits folgt auch aus Gleichung (6.1.7) auch das dritte Keplergesetz

$$r^3 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e \omega^2} \quad (6.1.11)$$

Aus Gleichung (6.1.11) erhalten wir für den inversen Bahnradius

$$\frac{1}{r} = \sqrt[3]{\frac{4\pi\epsilon_0 m_e \omega^2}{e^2}} = \frac{(4\pi\epsilon_0 m_e)^{\frac{1}{3}} \omega^{\frac{2}{3}}}{e^{\frac{2}{3}}} \quad (6.1.12)$$

und für die Energie

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{(4\pi\epsilon_0 m_e)^{\frac{1}{3}} \omega^{\frac{2}{3}}}{e^{\frac{2}{3}}} = -\frac{e^{\frac{4}{3}} \omega^{\frac{2}{3}} m_e^{\frac{1}{3}}}{2 \cdot 4^{\frac{2}{3}} \pi^{\frac{2}{3}} \epsilon_0^{\frac{2}{3}}} = \sqrt[3]{\frac{e^4 \omega^2 m_e}{27 \pi^2 \epsilon_0^2}} \quad (6.1.13)$$

Aus dieser klassischen Rechnung haben wir eine Beziehung für den Bahnradius und die Energie als Funktion der Kreisfrequenz der Anregung bekommen. Diese Klassische Rechnung hat die folgenden Probleme:

- Die Bahnradien und Energien sind kontinuierlich verteilt.
- Elektronen auf diesen Bahnen sind beschleunigt und strahlen deshalb Energie in Form elektromagnetischer wellen ab.

Niels Bohr postulierte in seinen Arbeiten zur Quantentheorie [Boh13, Boh15, Boh18, Boh20] von 1913 an, dass

- klassische Bewegungsgleichungen gelten nur diskrete Bahnen gelten,
- die Bewegung der Elektronen strahlungslos sei
- die Emission oder Absorption von Licht bei einem Bahnwechsel mit der Frequenz ν gegeben durch $h\nu = E_{n'} - E_n$ geschieht.

Der Energieunterschied zwischen zwei Bahnen bei unendlich schwerem Kern kann mit der Balmerformel und der *Rydbergkonstante* ausgedrückt werden:

$$E_{n_1} - E_{n_2} = h\nu = h \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) R'_\infty \quad (6.1.14)$$

Aus Gleichung (6.1.14) folgt

$$E_n = -\frac{h \cdot R'_\infty}{n^2} = -\frac{h \cdot c \cdot R_\infty}{n^2} \quad (6.1.15)$$

Nach *Niels Bohr* ist die Umlauffrequenz gleich der *emittierten Frequenz*. Sommerfeld ergänzte die Theorie, indem er elliptische Bahnen einführte. So konnte er auch Bahndrehimpulseffekte beschreiben. Wenn die Quantenmechanik eine übergreifende Theorie sein soll, dann muss sie als Grenzfall die klassische Theorie beinhalten. Diese Aussage wird das *Korrespondenzprinzip* genannt.

Korrespondenzprinzip: Im Grenzfall grosser Energien und kleiner Energiedifferenzen muss die Quantenmechanik (und jede moderne Theorie) in die klassische Mechanik übergehen.

Die Bohr-Sommerfeldtheorie war unbefriedigend, da sie durch klassische Physik mit einigen ad-hoc Annahmen quantenmechanische Phänomene beschreiben wollte.

6.1.1.1. Anwendung der Bohrschen Theorie

Wir betrachten zwei Zustände $n_1 \gg 1$ und $n_2 = n_1 + \tau$ mit $\tau \in \mathbb{N}$. Wir betrachten also benachbarte Bahnen und nehmen an, dass der Kern unendlich schwer sei. Mit der Rydberggleichung erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \nu &= c \cdot R_\infty \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) && = c \cdot R_\infty \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{(n_1 + \tau)^2} \right) \\
 &= c \cdot R_\infty \left(\frac{(n_1 + \tau)^2}{n_1^2 (n_1 + \tau)^2} - \frac{n_1^2}{n_1^2 (n_1 + \tau)^2} \right) && = c \cdot R_\infty \left(\frac{(n_1^2 + 2n_1\tau + \tau^2) - n_1^2}{n_1^2 (n_1 + \tau)^2} \right) \\
 &= c \cdot R_\infty \left(\frac{2n_1\tau + \tau^2}{n_1^2 (n_1 + \tau)^2} \right) && \approx c \cdot R_\infty \left(\frac{2\tau}{n_1^3} \right) \text{ für } \tau \ll n_1 \\
 &= \frac{2c \cdot R_\infty}{n_1^3} (n_2 - n_1) && \tag{6.1.16}
 \end{aligned}$$

Bei benachbarten Bahnen ($\tau = 1$), hohen Energien ($n_1 \gg 1$) und sehr schweren Kernen erhalten wir für die Frequenz des absorbierten oder emittierten Lichtes

$$\nu = \frac{2R_\infty c}{n_1^3} = \frac{2R'_\infty}{n_1^3} = \frac{\omega}{2\pi} \tag{6.1.17}$$

Mit Gleichung (6.1.17) kann Gleichung (6.1.13) umgeschrieben werden

$$E = \frac{R_\infty hc}{n^2} = \sqrt[3]{\frac{e^4 \omega^2 m_e}{27 \pi^2 \epsilon_0^2}} = \sqrt[3]{\frac{e^4 m_e}{27 \pi^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{4\pi R_\infty c}{n^3} \right)^2} \tag{6.1.18}$$

Die folgende Umrechnung führt zu einer Gleichung mit der *Elektronenmasse* (Achtung! die Definition der Rydbergkonstante $R - \infty$ beinhaltet die Elektronenmasse, nicht die *reduzierte Elektronenmasse* (Zweikörperproblem!) und der Elektronenladung

$$\begin{aligned}
 \frac{R_\infty^3 h^3 c^3}{n^6} &= \frac{e^4 m_e}{27 \pi^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{2^4 \pi^2 R_\infty^2 c^2}{n^6} && = \frac{e^4 m_e R_\infty^2 c^2}{2^3 \epsilon_0^2 n^6} \\
 R_\infty \cdot h^3 \cdot c &= \frac{e^4 m_e}{2^3 \epsilon_0^2} \\
 R_\infty &= \frac{e^4 m_e}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} && \tag{6.1.19}
 \end{aligned}$$

Aus den Abständen der Wasserstofflinien in Rydbergzuständen ($n_i \gg 1$) kann man R_H bestimmen und daraus mit Gleichung (6.1.19) h , e oder μ_e , die reduzierte Masse, und daraus die Elektronenmasse m_e berechnen, wenn die Protonenmasse m_P und die relativistischen Massendefekte bekannt sind.

Aus der Energie Gleichung (6.1.10) und der Definition der Rydbergkonstante R_∞

aus Gleichung (6.1.19) erhalten wir mit

$$E_{tot,n} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -h c \tilde{\nu}_n = -\frac{h c R_\infty}{n^2} = -\frac{h c e^4 m_e}{n^2 8\epsilon_0^2 h^3 c}$$

$$\frac{1}{\pi r_n} = \frac{1}{n^2} \frac{e^2 m_e}{\epsilon_0 h^2}$$

Damit wird der Radius der n -ten Bahn bei unendlich schweren Kernen

$$r_n = n^2 \cdot \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi e^2 m_e} \quad (6.1.20)$$

n wird die *Hauptquantenzahl* genannt. Die Hauptquantenzahl ist mit dem Radius Bahn und ihrer Energie verknüpft. Genaue Messungen zeigten schon Anfang des 20. Jahrhunderts, dass Abweichungen existieren, dass die physikalische Beschreibung der Absorption und der Emission von Licht durch das Wasserstoffatom nach *Balmer, Johann Jakob, 1885* und Rydberg noch nicht vollständig war.

6.1.1.2. Bahndrehimpuls

Die Spektren können präziser beschrieben werden, wenn nach Sommerfeld auch der *Bahndrehimpuls* berücksichtigt wird. Der Bahndrehimpuls ist

$$\boldsymbol{\ell} = \boldsymbol{\nu} \times \boldsymbol{p} \quad (6.1.21)$$

Bei Kreisbahnen stehen \boldsymbol{r}_n und $\boldsymbol{\nu}$ senkrecht aufeinander. Gleichung (6.1.21) kann deshalb mit Gleichung (6.1.19) umgeschrieben werden

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{\ell}| &= m_e v_n r_n && = m_e \omega_n r_n^2 \\ &= m_e \frac{2R_\infty c \cdot 2\pi}{n^3} \cdot \left(\frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi e^2 m_e} \right)^2 && = \frac{4\pi m_e m_e e^4 c}{8\epsilon_0^2 h^3 c n^3} \cdot \frac{n^4 h^4 \epsilon_0^2}{\pi^2 e^4 m_e^2} \\ &= \frac{h}{2\pi} n = \hbar n \end{aligned}$$

Also sollte bei Kreisbahnen

$$|\boldsymbol{\ell}| = n\hbar \quad (6.1.22)$$

sein. Dies ist jedoch nicht der Fall, da wir mit dem theoretischen Wert der spektralen Grösse R_∞ gerechnet hatten und nicht mit der atommassenabhängigen Rydbergkonstante. Effektiv zählt nur die reduzierte Masse, und diese hängt von der Ordnungszahl des Atoms und dem Ladungszustand ab. Die reduzierte Masse ist

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} \quad (6.1.23)$$

wobei m_e die Elektronenmasse und M die Masse des Kerns plus aller weiterer Elektronen ist.

Das heisst, dass die gemessene Rydbergkonstante R_H ungleich der vorher in Gleichung (6.1.19) berechneten Rydbergkonstante R_∞ ist. Aus $R_\infty = \frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$ bekommen wir

$$\begin{aligned}
 R_{\text{H}} &= \frac{e^4 \mu}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} &= R_{\infty} \cdot \frac{\mu}{m_e} \\
 &= R_{\infty} \cdot \frac{M}{m_e + M} &= R_{\infty} \cdot \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}} \quad (6.1.24)
 \end{aligned}$$

Nun ist die Masse eines Elektrons $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg, die eines Protons $m_p = 1.67 \cdot 10^{-27}$ kg. Das heisst, dass für ein Wasserstoffatom die relative Änderung der Rydbergkonstante

$$\frac{\Delta R_{\text{H}}}{R_{\infty}} = 1 - \left(\frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}} \right) = \frac{m_e}{m_e + M} \quad (6.1.25)$$

Wir erhalten

$\frac{\Delta R_{\text{H}}}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + m_p} = 5.44321 \cdot 10^{-4}$	Wasserstoffatom
$\frac{\Delta R_{1\text{H}}^2}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + m_p + m_n} = 2.72047 \cdot 10^{-4}$	Deuterium
$\frac{\Delta R_{1\text{H}}^3}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + m_p + 2m_n} = 1.81339 \cdot 10^{-4}$	Tritium
$\frac{\Delta R_{2\text{He}^+}^3}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + 2m_p + m_n} = 1.81423 \cdot 10^{-4}$	einfach geladenes Helium-3
$\frac{\Delta R_{2\text{He}^+}^4}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + 2m_p + 2m_n} = 1.36042 \cdot 10^{-4}$	einfach geladenes Helium-4
$\frac{\Delta R_{3\text{Li}^{++}}^7}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + 3m_p + 4m_n} = 0.777352 \cdot 10^{-4}$	zweifach geladenes Lithium-7
$\frac{\Delta R_{4\text{Be}^{+++}}^9}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + 4m_p + 5m_n} = 0.60463 \cdot 10^{-4}$	dreifach geladenes Berillium-9
$\frac{\Delta R_{\mu}}{R_{\infty}} = \frac{m_e}{m_e + m_{\mu}} = 48.1305 \cdot 10^{-4}$	Muonium

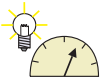
Diesen aus der Tabelle ersichtlichen Effekt nennt man den *Isotopeneffekt*. Man sieht, dass zwischen ${}^3_1\text{H}$ und ${}^3_2\text{He}$ optisch spektroskopisch unterschieden werden kann. Der Unterschied ist zwar auf der 7. Stelle nach dem Komma, aber immer noch gross gegen die bis zu 14 Stellen Genauigkeit der optischen Spektroskopie. Zum Vergleich ist noch das Muonium gezeigt, ein wasserstoffähnliches Gebilde, bei dem das Proton durch ein Elektron ersetzt wurde.

Dieser spektroskopische Unterschied besteht auch zwischen ${}^{92}_{235}\text{U}$ und ${}^{92}_{238}\text{U}$. Bei ${}^{92}_{235}\text{U}$ wäre $\Delta R_{({}^{92}\text{U}^{91+})}/R_{\infty} = 2.31557 \cdot 10^{-6}$, bei ${}^{92}_{238}\text{U}$ wäre

$\Delta R_{({}^{92}\text{U}^{91+})}/R_{\infty} = 2.28637 \cdot 10^{-6}$. Diese Unterschiede in den Absorptionswellenlängen durch den *Isotopeneffekt* werden in einem neuartigen Verfahren zur Isotopentrennung (*SILEX*) verwendet (siehe Mitteilung der DPG http://www.dpg-physik.de/veroeffentlichung/physik_konkret/quellen_physik-konkret_mar12.html). Dieses Verfahren ist ein Hochrisikoverfahren, weil die notwendigen Apparaturen im

Keller eines Einfamilienhauses Platz haben. So kann die Urananreicherung nicht mehr kontrolliert werden.

6.2. Franck–Hertz Versuch



Versuch zur Vorlesung:

Franck-Hertz-Versuch (Versuchskarte AT-7)

Gegen Ende des 19. Jahrhunderts wurde festgestellt, dass beschleunigte Elektronen verdünnte Gase zum Leuchten bringen. Glimmlampen verwenden diesen Effekt. Philip Lenard, ein ungarischstämmiger Physiker, der sich später der Nazi-Ideologie näherte, beschrieb 1902 eine Versuchsanordnung (siehe Abbildung 6.2), mit der der Effekt quantitativ untersucht werden konnte.

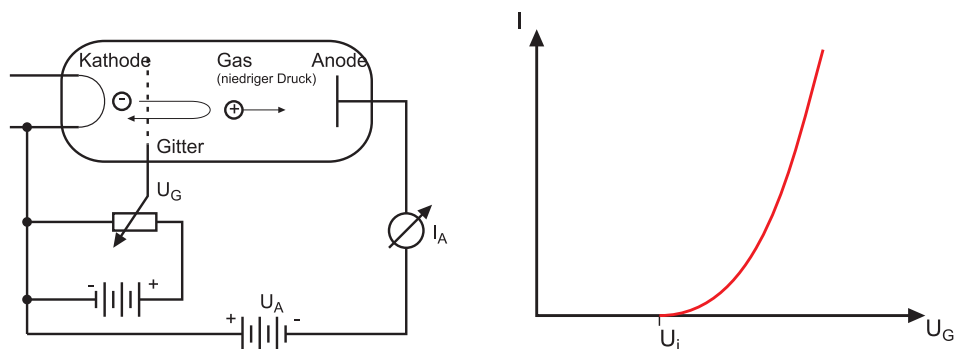


Abbildung 6.2.: Ionisierung eines Gases. Links ist der Versuchsaufbau, rechts die Kennlinie.

Elektronen werden durch die *Beschleunigungsspannung* U_G von der *Kathode* zum *Gitter* beschleunigt. Durch die Gitterspannung U_G werden Elektronen beschleunigt. Die schnellen Elektronen verfehlen meistens das Gitter und dringen in den Raum zwischen dem Gitter und der negativ polarisierten Elektrode ein. Dort werden sie abgebremst und zum Gitter zurück beschleunigt. Abbildung 6.3 zeigt die Energieverhältnisse. Wenn die ortsabhängige kinetische Energie der Elektronen den Wert eU_i übersteigt, können die Elektronen die Gasmoleküle ionisieren. Die positiven Ionen werden durch die negative Spannung U_A zur Anode beschleunigt. Wenn $|U_A| > |U_G|$ ist, werden die Ionen angezogen die Elektronen abgestossen. Die Kennlinie zeigt, dass es für die Ionisation eine Schwelle eU_i gibt, die von der Atom- oder Molekülsorte abhängt.

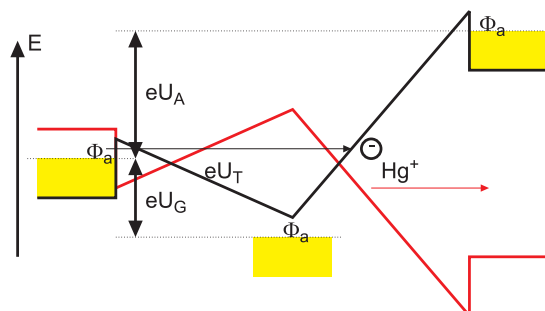


Abbildung 6.3.: Energieverhältnisse beim Ionisierungs-Versuch. Die Energiekurven in Schwarz sind für Elektronen gezeichnet. Rot sind die Energieverhältnisse für positive Ionen angegeben.

Beim Versuch von Franck und Hertz aus dem Jahre 1913 ([FH14]) wird der nach der Ionisation übrigbleibende Strom zwischen Gitter und Anode gemessen.

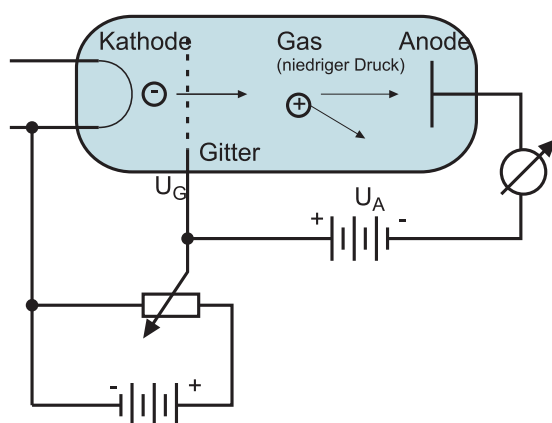


Abbildung 6.4.: Aufbau des *Franck-Hertz-Versuches*

Abbildung 6.4 zeigt den Aufbau des Franck-Hertz-Versuches. Im Unterschied zum Lennard-Versuch ist die Anodenspannung gegen das Gitter geschaltet. Mit dieser negativen Spannung kann der Elektronenstrom als Funktion der Bremsspannung gemessen werden.

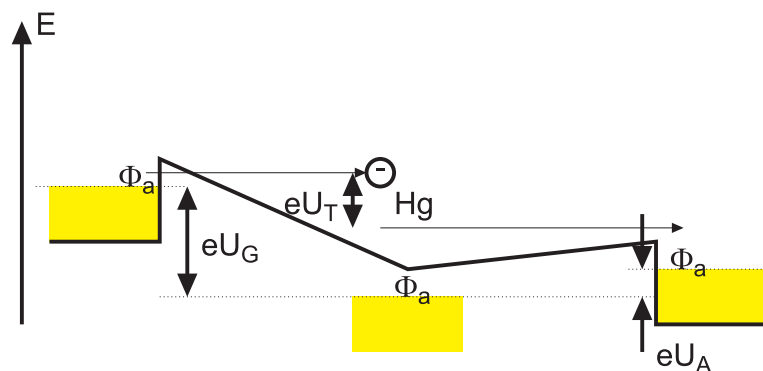


Abbildung 6.5.: Energieverhältnisse beim Franck-Hertz-Versuch. Die negative Anodenspannung U_A hält niederenergetische Elektronen von der Anode fern.

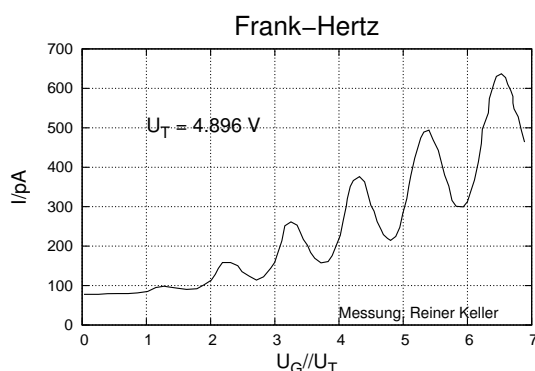


Abbildung 6.6.: Resultat des Franck-Hertz-Versuches mit Quecksilber.

Abbildung 6.5 zeigt die Potentialverhältnisse. Abbildung 6.6 zeigt eine von Herrn Reiner Keller mit dem Vorlesungsversuch. Die Minima (oder Maxima) sind $4.88 \text{ eV} = hc/253.7 \text{ nm}$ entfernt. Dies ist die Ionisierungsenergie von Hg. Immer wenn die kinetische Energie der Elektronen die Ionisierungsenergie überschreitet, können die Elektronen durch Stöße die Atome im Gas ionisieren. Die kinetische Energie der Elektronen sinkt um den Betrag der Ionisierungsenergie. Werden die Elektronen weiter beschleunigt, kann ihre Energie ein weiteres Mal die Ionisierungsenergie überschreiten. Durch Stöße verlieren die Elektronen kinetische Energie. Dieser bei genügender *Beschleunigungsspannung* mehrmals auftretende Effekt führt zu der in der Abbildung 6.6 gezeigten Kurvenform.

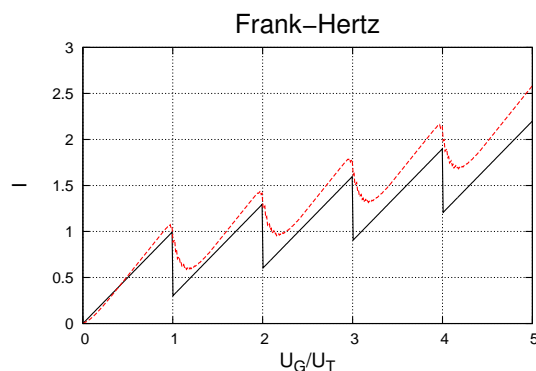


Abbildung 6.7.: Resultat des Franck-Hertz-Versuches. Die schwarze Linie zeigt den Strom, den man mit einer Absorptionslinie und einer wohldefinierten Elektronenenergie erhalten würde. Die rote gestrichelte Linie berücksichtigt den Effekt der verschmierten Elektronenenergie.

Die theoretisch erwartete Kurvenform ist in Abbildung 6.7 als Sägezahnkurve schwarz gezeichnet. Die Kurve wäre korrekt, wenn die Elektronen für eine bestimmte *Beschleunigungsspannung* nur eine scharf definierte kinetische Energie hätten.

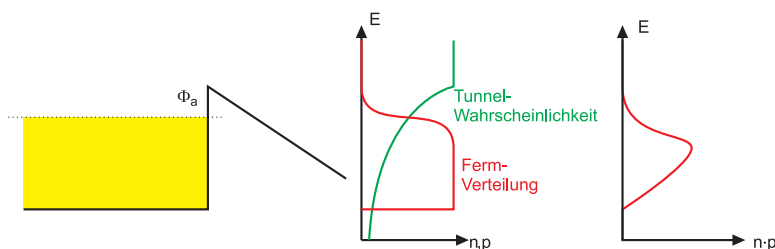


Abbildung 6.8.: Die Elektronenverteilung bei der Emission ist durch das Produkt der *Fermi-Verteilung* und der Tunnelwahrscheinlichkeit gegeben.

Wie Abbildung 6.8 zeigt, ist die kinetische Energie der aus einem Metall austretenden über einen Energiebereich von 100 meV bis etwa 300 meV verteilt. Diese Verschmierung macht in Abbildung 6.8 aus der schwarzen Kurve die rote gestrichelte Kurve.

Die erneute Beschleunigung der Elektronen nach einem Stoß bewirkt eine Verzerrung der Kurvenform. Es wäre besser, wenn die Stöße im feldfreien Raume vonstatten gingen.

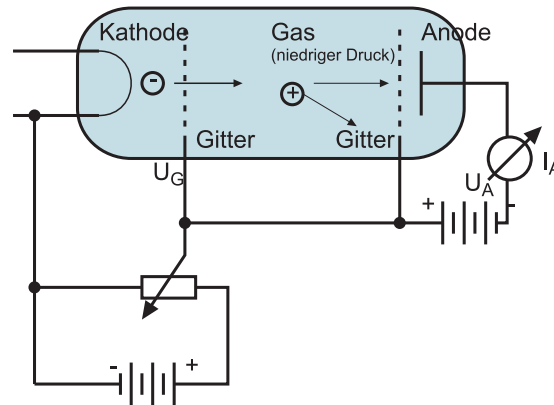
Abbildung 6.9.: Verbesserter Aufbau des *Franck-Hertz-Versuches*

Abbildung 6.9 zeigt eine bessere Anordnung. Die beiden Gitter auf gleichem Potential erzeugen den benötigten feldfreien Raum. Bei dieser Anordnung ist es möglich, wie in der Skizze in Abbildung 6.10 gezeigt, mehrere Energieniveaus zu detektieren. Grössere Spannungen bedeuten dabei einen grösseren energetischen Abstand des Niveaus zum Vakuumniveau.

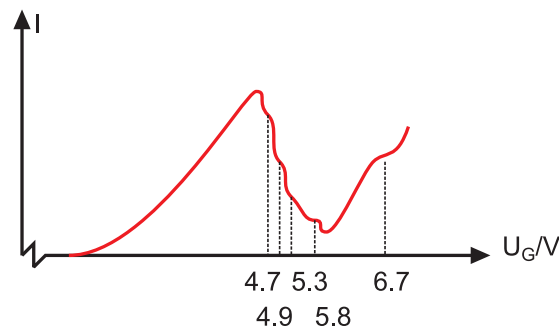


Abbildung 6.10.: Ergebnis der genaueren Messung (Skizze)

6.2.1. Sommerfeld-Bohrsche Theorie

Arnold Sommerfeld wollte mit einer Erweiterung seiner Theorie im Jahre 1915 die Drehimpuls- und damit die Magnetfeldabhängigkeit der Spektrallinien erklären [Som16a, Som16b]. Sommerfeld nahm an, dass die Bahnen Ellipsen seien. Dies führt auf weitere Quantenzahlen, die sogenannten *Nebenquantenzahlen*. Eine elliptische Bahn kann als eine Bahn mit zwei Freiheitsgraden aufgefasst werden. Diese müssen durch zwei Quantenzahlen beschrieben werden, wobei die erste durch die Bohrsche Bedingung und die zweite durch

$$|\ell| = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar \quad (6.2.1)$$

gegeben ist. Wenn in Gleichung (6.2.1) $\ell = 0$ gesetzt wird, sollte das Bohrsche Resultat entstehen. ℓ ist die Bahndrehimpulsquantenzahl, $\boldsymbol{\ell}$ ist der Bahndrehimpuls. Seine Einheit ist $[\boldsymbol{\ell}] = \text{m} \cdot (\text{m s}^{-1}) \cdot \text{kg} = \text{J s}$.

Auch wenn wir heute wissen, dass Elektronen sich nicht auf einer Planetenbahn bewegen, ist es doch instruktiv, die Geschwindigkeit auszurechnen. Nach Gleichung (6.1.10) ist die kinetische Energie einer Bahn mit dem Radius r betragsmässig gleich der Gesamtenergie

$$E_{kin} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Für eine Bahn mit einem Radius von 0.5 nm ist die kinetische Energie

$$E_{kin} = \frac{1}{2}m_e v^2 = 2.30 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

und damit die Geschwindigkeit

$$v = 2.2 \cdot 10^6 \text{ m s}^{-1}$$

Die Geschwindigkeit ist im Prozentbereich der Lichtgeschwindigkeit, die relativistische Massenzunahme ist $2.82 \cdot 10^{-5}$. Wenn nun relativistische Teilchen sich auf einer Ellipsenbahn bewegen, ist die Massenzunahme zeitabhängig. Die Bahnen sind nur noch angenähert Ellipsenbahnen, ihr Perihel dreht sich. Aus den Sommerfeldschen Berechnungen (klassisch mit Quantenbedingungen) folgte die Sommerfeldsche *Feinstrukturkonstante*.

$$\alpha = \frac{\text{Geschwindigkeit des Elektrons auf 1.Bohrschen Bahn}}{c}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{2\epsilon_0 h c} = \frac{1}{137} \quad (6.2.2)$$

Nach Sommerfeld sind die Korrekturen der beobachteten Energieniveaus

$$E_{n,k} = -R_H h c \frac{Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{n}{\ell + 1} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right] \quad (6.2.3)$$

Die Korrektur ist von der Grössenordnung 10^{-5} , also spektroskopisch sehr gut messbar. Bei sehr hohen Energien kommt das Korrespondenzprinzip zum Tragen, dass jede nicht-klassische Theorie im Grenzfall hoher Energien und kleiner Energieänderungen in die klassische Theorie übergehen muss. Eine solche Realisation sind *Rydberg-Atome*.

6.3. Das Wasserstoffatom

Als Literatur ist für dieses Kapitel insbesondere die Werke von Haken und Wolf[HW04], von Arfken und Weber[AW95] und das *Internetskript* von Komma[Kom96] zu empfehlen. In diesem Abschnitt wird die quantenmechanische Formulierung des Drehimpulses und seiner Anwendungen abgeleitet.

6.3.1. Drehimpulsoperatoren

Klassisch ist der Bahndrehimpuls durch

$$\boldsymbol{\ell} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (6.3.1)$$

gegeben. In Komponenten geschrieben ist er

$$\begin{pmatrix} \ell_x \\ \ell_y \\ \ell_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y p_z - z p_y \\ z p_x - x p_z \\ x p_y - y p_x \end{pmatrix} \quad (6.3.2)$$

Wir ersetzen nun die Impulskomponenten durch die Operatoren

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

und erhalten für die Drehimpulsoperatoren

$$\hat{\ell}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (6.3.3)$$

$$\hat{\ell}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (6.3.4)$$

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (6.3.5)$$

Das Quadrat des Drehimpulses ist

$$\begin{aligned} \hat{\ell}^2 &= \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2 \\ &= \hbar^2 \left\{ -x^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + 2zx \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} + 2x \frac{\partial}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. - y^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + 2y \frac{\partial}{\partial y} - z^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + 2z \frac{\partial}{\partial z} \right\} \end{aligned} \quad (6.3.6)$$

Für Vertauschungsrelationen zwischen den Operatoren $\Omega^{(1)}$ und $\Omega^{(2)}$ schreiben wir

$$[\Omega^{(1)}, \Omega^{(2)}] = \Omega^{(1)}\Omega^{(2)} - \Omega^{(2)}\Omega^{(1)} \quad (6.3.7)$$

Eine Möglichkeit diese Operatoren in Maple V zu definieren zeigt [qm-defs.mw](#).

Wir erhalten nun die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hbar \hat{\ell}_z \quad (6.3.8a)$$

$$[\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z] = i\hbar \hat{\ell}_x \quad (6.3.8b)$$

$$[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hbar \hat{\ell}_y \quad (6.3.8c)$$

$$[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_j] = 0 \quad \text{für } j \in \{x, y, z\} \quad (6.3.8d)$$

Das elektrostatische Potential des Wasserstoffatoms für ein Elektron ist kugelsymmetrisch. Wir verwenden deshalb Kugelkoordinaten.

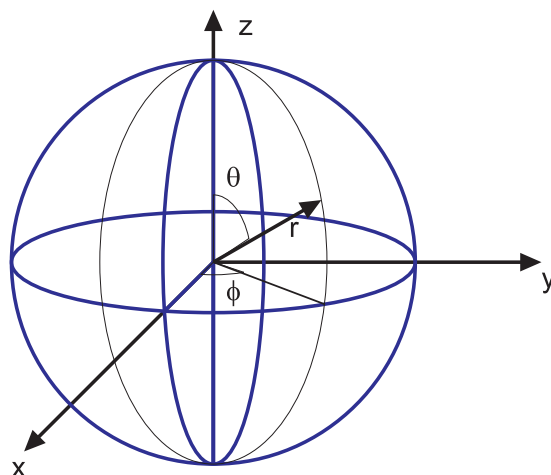


Abbildung 6.11.: Definition der Kugelkoordinaten.

Der Laplace-Operator in Kugelkoordinaten [BSMM00] ist

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2} \cot^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)\end{aligned}\quad (6.3.9)$$

In Kugelkoordinaten lauten die *Drehimpulsoperatoren*

$$\hat{\ell}_x = -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (6.3.10a)$$

$$\hat{\ell}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (6.3.10b)$$

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (6.3.10c)$$

$$\hat{\ell}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \quad (6.3.10d)$$

6.3.2. Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom ist

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(r) \right] \Psi = E \Psi \quad (6.3.11)$$

wobei $V(r)$ ein allgemeines, kugelsymmetrisches Potential ist.

Mit der Schreibweise von $\hat{\ell}^2$ in Kugelkoordinaten (Gleichung (6.3.10d)) und Gleichung (6.3.9) ist auch

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2m_0r^2}\hat{\ell}^2 \quad (6.3.12)$$

Wir beachten, dass Ableitungen nach einer Variablen ξ mit Funktionen vertauschen, die nicht von ξ abhängig sind und setzen

$$\Psi(r, \phi, \theta) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (6.3.13)$$

Die Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms lautet dann

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi(r, \phi, \theta) &= \hat{H}R(r)Y(\theta, \phi) \\ &= Y(\theta, \phi)\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r)\right]R(r) + \frac{R(r)}{2m_0r^2}\hat{\ell}^2Y(\theta, \phi) \\ &= E R(r)Y(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (6.3.14)$$

Da $[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_z] = 0$ ist, können die sowohl die Eigenwerte von $\hat{\ell}^2$ wie auch von $\hat{\ell}_z$ gleichzeitig scharf gemessen werden. Mit anderen Worten, die resultierende Wellenfunktion kann als Produkt zweier Funktionen geschrieben werden.

Also erhält man die Gleichungen

$$\hat{\ell}^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 w Y(\theta, \phi) \quad (6.3.15a)$$

$$\hat{\ell}_z Y(\theta, \phi) = \hbar m Y(\theta, \phi) \quad (6.3.15b)$$

m und w sind einheitenlose Zahlen, die noch bestimmt werden müssen. Eine Mapledatei zum Berechnen der Lösungen (*Orbitale*) ist [hydrogen.mw](http://www.chemie.uni-konstanz.de/agmetz/hydrogen.mw). Das Original (für eine nicht aktuelle Maple-Version ist

<http://www.chemie.uni-konstanz.de/agmetz/hydrogen.mws>.

Unter der Annahme, dass ω bekannt ist, lautet die Gleichung für den Radialteil

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r) + \frac{\hbar^2 w}{2m_e r^2}\right]R(r) = E \cdot R(r) \quad (6.3.16)$$

wobei m_0 zum Beispiel die Masse eines Elektrons ist. Prinzipiell könnte m_0 aber auch die Masse jedes anderen passenden Elementarteilchens sein. Nach Arfken und Weber[AW95, 736] schreibt man

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi) \quad (6.3.17)$$

Die Kugelflächenfunktion $Y(\theta, \phi)$ wird als Produkt einer nur vom Winkel zum „Nordpol“ abhängigen Funktion $\Theta(\theta)$ und einer azimutalen Funktion $\Phi(\phi)$. Aus Gleichung (6.3.15b) folgt

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z Y(\theta, \phi) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}Y(\theta, \phi) \\ &= \hbar m Y(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (6.3.18)$$

und

$$\begin{aligned}
 \hat{\ell}_z (\hat{\ell}_z Y (\theta, \phi)) &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y (\theta, \phi) \\
 &= \hat{\ell}_z (\hbar m Y (\theta, \phi)) \\
 &= \hbar m \hat{\ell}_z Y (\theta, \phi) \\
 &= \hbar^2 m^2 Y (\theta, \phi)
 \end{aligned} \tag{6.3.19}$$

Weiter bekommt man für den azimutalen Anteil der Wellenfunktion

$$\begin{aligned}
 -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Theta (\theta) \cdot \Phi (\phi) &= \hbar^2 m^2 \Theta (\theta) \cdot \Phi (\phi) \\
 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi (\phi) &= -m^2 \Phi (\phi) \quad \text{für } \Theta (\theta) \neq 0 \quad \forall \theta \in [0, \pi]
 \end{aligned} \tag{6.3.20}$$

Die Lösungen der Gleichung (6.3.20) sind

$$\Phi (\phi) = \begin{cases} e^{-im\phi} \\ e^{im\phi} \end{cases} \tag{6.3.21}$$

Dies sind orthogonale Funktionen, da

$$\int \Phi_{m_1}^* (\phi) \Phi_{m_2} (\phi) d\phi = \int_0^{2\pi} e^{im_1\phi} e^{im_2\phi} d\phi = 2\pi \delta_{m_1, m_2} \tag{6.3.22}$$

Wenn der Raum um den Winkel $\phi = 2\pi$ gedreht wird, muss aus Symmetriegründen wieder eine zur ursprünglichen Funktion identische Observable $\Phi^* \Phi$ entstehen. Also muss

$$m(\phi + 2\pi) \bmod (2\pi) = m\phi \bmod (2\pi) \tag{6.3.23}$$

sein. Die Funktion Modulo trägt der Tatsache Rechnung, dass die Winkelfunktionen 2π -periodisch sind. Gleichung (6.3.23) gilt dann, wenn m ganzzahlig ist. Die Observable ist dann auf dem Intervall $[0, 2\pi)$ eindeutig bestimmt.

Wenn die Transformationseigenschaft des Wellenfunktion so wäre, dass der Erwartungswert, also die Observable, bei einer Drehung um 2π das Vorzeichen wechselt, dann könnte m auch halbzahlig sein: Dies wäre dann eine Spinfunktion.

Wir kennen nun m . Um w und $\Theta(\theta)$ zu bestimmen, subtrahieren wir Gleichung (6.3.15a) von Gleichung (6.3.15b)

$$\begin{aligned}
 \hat{\ell}^2 Y (\theta, \phi) &= \hbar^2 w Y (\theta, \phi) &= (\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2) Y (\theta, \phi) \\
 \hbar^2 m^2 Y (\theta, \phi) & &= \hat{\ell}_z^2 Y (\theta, \phi)
 \end{aligned}$$

Für $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$ ergibt sich

$$\hbar^2 (w - m^2) Y (\theta, \phi) = (\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2) Y (\theta, \phi) \tag{6.3.24}$$

Es hat sich eingebürgert, die folgenden Bezeichnungen zu verwenden

$$Y (\theta, \phi) \rightarrow Y_{\ell, m} \tag{6.3.25}$$

Um eine Beziehung zwischen w und m zu erhalten, multiplizieren wir von links mit $Y^*(\theta, \phi)$. Weiter schreiben wir anstelle von $w w_\ell$ um klarzumachen, dass eine Abhängigkeit von ℓ besteht und dass w_ℓ **keine** Kreisfrequenz ist.

$$Y_{\ell,m}^* (w_\ell - m^2) Y_{\ell,m} = Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_x^2 Y_{\ell,m} + Y_{\ell,m}^* \hat{\ell}_y^2 Y_{\ell,m} \quad (6.3.26)$$

Nach Haken, Wolf[HW04] ergibt das Integral über θ und ϕ , dass

$$w_\ell - m^2 \geq 0 \quad (6.3.27)$$

sein muss.

6.3.2.1. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Mit der Identität

$$a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib) \quad (6.3.28)$$

kann man die Operatoren

$$\hat{\ell}_+ = \hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y \quad (6.3.29a)$$

$$\hat{\ell}_- = \hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y \quad (6.3.29b)$$

definieren. Es folgt

$$\hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 \quad (6.3.30)$$

und weiter

$$[\hat{\ell}^2 \hat{\ell}_\pm] = 0 \quad (6.3.31a)$$

$$[\hat{\ell}_z \hat{\ell}_\pm] = i [\hat{\ell}_z \hat{\ell}_x] \pm [\hat{\ell}_z \hat{\ell}_y] = i\hbar \hat{\ell}_y \pm i(-i\hbar \hat{\ell}_x) = i\hbar \hat{\ell}_y \pm \hbar \hat{\ell}_x = \pm \hbar \hat{\ell}_\pm$$

$$[\hat{\ell}_z \hat{\ell}_\pm] = \pm \hbar \hat{\ell}_\pm \quad (6.3.31b)$$

Wir wenden $\hat{\ell}_\pm$ auf $\hat{\ell}^2 Y_{\ell,m}$ an

$$\hat{\ell}_\pm (\hat{\ell}^2 Y_{\ell,m}) = \hat{\ell}_\pm \hbar^2 \omega Y_{\ell,m} \quad (6.3.32)$$

$\hat{\ell}_\pm$ und $\hat{\ell}^2$ sind vertauschbar, also gilt

$$\hat{\ell}^2 (\hat{\ell}_\pm Y_{\ell,m}) = \hbar^2 \omega (\hat{\ell}_\pm Y_{\ell,m}) \quad (6.3.33)$$

d.h. wenn $Y_{\ell,m}$ eine Eigenfunktion von $\hat{\ell}^2$ ist, dann ist auch $\hat{\ell}_\pm Y_{\ell,m}$ eine Eigenfunktion von $\hat{\ell}^2$. Aus der Azimutalgleichung (6.3.15b) erhalten wir

$$\hat{\ell}_\pm (\hat{\ell}_z Y_{\ell,m}) = \hat{\ell}_\pm \hbar m Y_{\ell,m} \quad (6.3.34)$$

sowie aus Gleichung (6.3.31b)

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_\pm, \hat{\ell}_z] &= -[\hat{\ell}_z \hat{\ell}_\pm] = \mp \hbar \hat{\ell}_\pm = \hat{\ell}_\pm \hat{\ell}_z - \hat{\ell}_z \hat{\ell}_\pm \\ \hat{\ell}_\pm \hat{\ell}_z &= \hat{\ell}_z \hat{\ell}_\pm \mp \hbar \hat{\ell}_\pm \end{aligned} \quad (6.3.35)$$

Also ist

$$\hat{\ell}_z \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} = \hat{\ell}_z \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} \mp \hbar \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} = \hbar m \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} \quad (6.3.36)$$

und

$$\hat{\ell}_z \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} = \pm \hbar \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} + \hbar m \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} = \hbar (m \pm 1) \hat{\ell}_z Y_{\ell,m} \quad (6.3.37)$$

Damit ist auch $\hat{\ell}_z Y_{\ell,m}$ eine Eigenfunktion zur Azimutalgleichung, aber mit dem neuen Eigenwert

$$\hat{\ell}_z Y_{\ell,m} = K \cdot Y_{\ell,m \pm 1} \quad (6.3.38)$$

wobei K eine Normierungskonstante ist.

weiter gilt die folgende Beziehung

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_\mp \hat{\ell}_\pm &= (\hat{\ell}_x \mp i \hat{\ell}_y) (\hat{\ell}_x \pm i \hat{\ell}_y) &&= \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 \pm i \hat{\ell}_x \hat{\ell}_y \mp i \hat{\ell}_y \hat{\ell}_x \\ &= \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 \pm i (\hat{\ell}_x \hat{\ell}_y - \hat{\ell}_y \hat{\ell}_x) &&= \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 \pm i (i \hbar \hat{\ell}_z) \\ &= \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 \mp \hbar \hat{\ell}_z &&= \hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 \mp \hbar \hat{\ell}_z \\ &= \hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z (\hat{\ell}_z \pm \hbar) \end{aligned} \quad (6.3.39)$$

In einem Magnetfeld ist die Frequenzänderung der Übergänge in einem Atom proportional zu m (Zeemaneffekt, siehe Abschnitt 6.5.3). Da für ein endliches Magnetfeld diese Änderungen endlich sein müssen, fordern wir, dass es für m Minimal- und Maximalwerte geben muss. Dann gilt auch

$$\hat{\ell}_+ Y_{\ell,m_{\max}} = 0 \quad (6.3.40a)$$

$$\hat{\ell}_- Y_{\ell,m_{\min}} = 0 \quad (6.3.40b)$$

$$\hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ Y_{\ell,m_{\max}} = 0 \quad (6.3.40c)$$

$$\begin{aligned} &= \hat{\ell}^2 Y_{\ell,m_{\max}} - \hat{\ell}_z (\hat{\ell}_z + \hbar) Y_{\ell,m_{\max}} \\ &= \hbar^2 w_\ell Y_{\ell,m_{\max}} - \hat{\ell}_z (\hbar m_{\max} + \hbar) Y_{\ell,m_{\max}} \\ &= \hbar^2 w_\ell Y_{\ell,m_{\max}} - \hbar m_{\max} (\hbar m_{\max} + \hbar) Y_{\ell,m_{\max}} \\ &= \hbar^2 (w_\ell - m_{\max}^2 - m_{\max}) Y_{\ell,m_{\max}} \end{aligned}$$

Da $Y_{\ell,m_{\max}} \neq 0$ ist, folgt

$$w_\ell - m_{\max}^2 - m_{\max} = 0 \quad (6.3.41)$$

Aus

$$\hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- Y_{\ell,m_{\min}} = 0 = \hbar^2 (w_\ell - m_{\min}^2 + m_{\min}) = 0 \quad (6.3.42)$$

folgt weiter

$$w_\ell - m_{\min}^2 + m_{\min} = 0 \quad (6.3.43)$$

Löst man Gleichung (6.3.41) und Gleichung (6.3.43) beide w_ℓ auf und setzt sie gleich, erhält man

$$\begin{aligned} w_\ell &= m_{\max} (m_{\max} + 1) = m_{\min} (m_{\min} - 1) \\ m_{\max}^2 - m_{\min}^2 &= -m_{\min} - m_{\max} = (m_{\max} - m_{\min}) (m_{\max} + m_{\min}) \\ 0 &= (m_{\max} + m_{\min}) (m_{\max} - m_{\min} + 1) \end{aligned} \quad (6.3.44)$$

Da $m_{\max} \geq m_{\min}$ ist, folgt $m_{\max} + m_{\min} = 0$. Wegen Gleichung (6.3.38) erhöht sich m bei jeder Anwendung von $\hat{\ell}_+$ auf $Y_{\ell,m}$ um den Wert eins. Deshalb muss $m_{\max} - m_{\min}$ eine ganze Zahl sein. Dies geht nur, wenn

$$m_{\max} = \frac{\text{ganze Zahl}}{2} \geq 0 \quad (6.3.45)$$

mindestens halbzahlig ist.

Andererseits sahen wir, dass weil $\Phi^*\Phi$ eindeutig bestimmt sein muss auf dem Intervall $[0, 2\pi)$, muss m ganzzahlig sein. Wir definieren: $m_{\max} = \ell \in \mathbb{N} \cup \{0\}$.

$$\ell \geq m \geq -\ell \quad (6.3.46)$$

mit

$$m_{\max}(m_{\max} + 1) = \ell(\ell + 1) = w_\ell \quad (6.3.47a)$$

$$m_{\min}(m_{\min} - 1) = -\ell(-\ell - 1) = w_\ell \quad (6.3.47b)$$

Damit haben wir die beiden Eigenwertgleichungen

$$\hat{\ell}^2 Y_{\ell,m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell,m} \quad (6.3.48a)$$

$$\hat{\ell}_z Y_{\ell,m} = \hbar m Y_{\ell,m} \quad (6.3.48b)$$

und

$$Y_{\ell,m+1} = \hat{\ell}_+ N Y_{\ell,m} \quad (6.3.49)$$

mit der Normierung

$$N = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)}} \quad (6.3.50)$$

Die Tatsache, dass auch halbzahlige ℓ eine Lösung sein könnten, wenn nur die Eindeutigkeitsbedingung für m erfüllt wäre, deutet darauf hin, dass es eventuell noch weitere Effekte geben könnte, Zum Beispiel ermöglicht das Elektron mit seinem halbzahligem Eigendrehimpuls diese zusätzlichen Lösungen.

Die bis jetzt in kartesischen Koordinaten definierten Drehimpulsoperatoren können auch durch die Differentialoperatoren in Kugelkoordinaten ausgedrückt werden.

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (6.3.51a)$$

$$\hat{\ell}_x = -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (6.3.51b)$$

$$\hat{\ell}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (6.3.51c)$$

Wir wissen schon, dass $Y_{\ell,m}$ die Form

$$Y_{\ell,m} = e^{im\phi} \Theta_{\ell,m}(\theta) \quad (6.3.52)$$

haben muss. Wir setzen nach Arfken und Weber [AW95]

$$\Theta_{\ell,m}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) \quad (6.3.53)$$

$P_\ell^m(x)$ ist eine zugeordnete Legendre-Funktion, die aus der Legendre-Funktion mit

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x) \quad (6.3.54)$$

berechnet werden kann. Die Definition der Legendre-Funktion lautet [AW95]

$$P_{\ell m}(x) = \begin{cases} \sum_{k=0}^{(\ell-1)/2} (-1)^k \frac{(2^\ell-2k)!}{2^\ell k! (\ell-k)! (\ell-2k)!} x^{\ell-2k} & \text{für } \ell \text{ ungerade} \\ \sum_{k=0}^{\ell/2} (-1)^k \frac{(2^\ell-2k)!}{2^\ell k! (\ell-k)! (\ell-2k)!} x^{\ell-2k} & \text{für } \ell \text{ gerade} \end{cases} \quad (6.3.55)$$

Weiter muss

$$\hat{\ell}_- Y_{\ell, -\ell} = 0 \quad (6.3.56)$$

sein. Wir berechnen nun, welche Wirkung die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausüben. In sphärischen Koordinaten haben wir

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_\pm = \hat{\ell}_x \pm i \hat{\ell}_y &= -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \pm \hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= \hbar \left(i \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \pm \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \mp \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= \hbar \left((i \sin \phi \pm \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \mp \cot \theta (\sin \phi \mp i \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= \hbar \left((i \sin \phi \pm \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \mp \cot \theta \left(\frac{1}{-i} \right) (-i \sin \phi \pm i^2 \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= \hbar \left((i \sin \phi \pm \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \mp i \cot \theta (\mp \cos \phi - i \sin \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= \hbar \left((i \sin \phi \pm \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta (\pm \cos \phi + i \sin \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= \hbar (\pm \cos \phi + i \sin \phi) \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\ &= \hbar \left(\pm \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} + \frac{i(e^{i\phi} - e^{-i\phi})}{2i} \right) \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\ &= \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \end{aligned}$$

Wir setzen in die beiden Relationen für $\hat{\ell}_-$ und $\hat{\ell}_+$ die Funktion $Y_{\ell, m} = e^{im\phi} \Theta_{\ell, m}(\theta)$ ein und erhalten

$$\hat{\ell}_+ = \hbar e^{i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right] \quad (6.3.57a)$$

$$\hat{\ell}_- = -\hbar e^{-i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + m \cot \theta \right] \quad (6.3.57b)$$

Für $m = -\ell$ wird

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_- Y_{\ell,-\ell} = 0 &= \hat{\ell}_- e^{-i\ell\phi} \Theta_{\ell,-\ell}(\theta) = \\ &= -\hbar e^{-i\phi} e^{-i\ell\phi} \left[\frac{\partial}{\partial\theta} - \ell \cot\theta \right] \Theta_{\ell,\ell}\end{aligned}$$

Wir erhalten die Differentialgleichung

$$\frac{\partial \Theta_{\ell,-\ell}}{\partial\theta} = \ell \cot\theta \Theta_{\ell,-\ell} \quad (6.3.58)$$

Deren Lösung lautet

$$\Theta_{\ell,-\ell}(\theta) = C \cdot \sin^\ell(\theta) \quad (6.3.59)$$

Die Lösungen müssen normiert sein, also ist

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{\ell,m}|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell,m}^* Y_{\ell,m} \sin\theta \, d\theta \, d\phi = 1 \quad (6.3.60)$$

Deshalb ist die Integrationskonstante aus Gleichung (6.3.59)

$$C = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sqrt{(2\ell+1)!}}{\ell! 2^\ell} \quad (6.3.61)$$

Mit dem Erzeugungsoperator

$$\hat{\ell}_+ Y_{\ell,m} = \hbar e^{i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial\theta} - m \cot\theta \right] Y_{\ell,m} \quad (6.3.62)$$

können alle Funktionen konstruieren werden. Wenn $\ell = 0$ ist, ist

$$\Theta_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad P_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

Mit den Rekursionsrelationen erhalten wir

$$\ell = 0 \quad m = 0 \quad Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (6.3.63a)$$

$$\ell = 1 \quad m = 0 \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{z}{r} \quad (6.3.63b)$$

$$\ell = 1 \quad m = \pm 1 \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r} \quad (6.3.63c)$$

$$\ell = 2 \quad m = 0 \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2} \quad (6.3.63d)$$

$$\ell = 2 \quad m = \pm 1 \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \frac{(x \pm iy)z}{r^2} \quad (6.3.63e)$$

$$\ell = 2 \quad m = \pm 2 \quad Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \left(\frac{x \pm iy}{r} \right)^2 \quad (6.3.63f)$$

Darstellungen dieser Wellenfunktionen finden Sie im Anhang A.1.

6.3.2.2. Radialteil der Wellenfunktion

Der Radialteil der Wellenfunktion (6.3.14) ist

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_e r^2} + V(r) \right] R(r) = E \cdot R(r) \quad (6.3.64)$$

Diese Gleichung gilt für alle sphärisch symmetrischen Potentiale. Wir verwenden

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \quad (6.3.65)$$

und Multiplizieren die Gleichung (6.3.64) mit $\frac{2m_e}{\hbar^2}$

$$-\frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R + \frac{2m_e V(r)}{\hbar^2} R = \frac{2Em_e}{\hbar^2} R \quad (6.3.66)$$

wir setzen

$$A = \frac{2Em_e}{\hbar^2} = \begin{cases} +k^2, & \text{für } E > 0; \\ -\kappa^2, & \text{für } E < 0. \end{cases} \quad (6.3.67)$$

$$\tilde{V}(r) = \frac{2m_e}{\hbar^2} V(r) \quad (6.3.68)$$

und erhalten aus Gleichung (6.3.66) die skalierte Gleichung

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[A - \tilde{V}(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (6.3.69)$$

Wir betrachten den Grenzfall: $r \rightarrow \infty$ und verwenden den Ansatz $R = \frac{u(r)}{r}$. Für die Ableitungen gilt

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} &= \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{du(r)}{dr} - u(r) \frac{1}{r^2} \right) \\ &= -\frac{1}{r^2} \frac{du(r)}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{du(r)}{dr} \frac{1}{r^2} + 2u(r) \frac{1}{r^3} \\ &= \frac{1}{r} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \frac{du(r)}{dr} + 2 \frac{u(r)}{r^3} \\ \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{u(r)}{r} \right) &= \frac{2}{r} \frac{1}{r} \frac{du(r)}{dr} - u(r) \frac{2}{r^3} \\ &= \frac{2}{r^2} \frac{du(r)}{dr} - 2 \frac{u(r)}{r^3} \\ \frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{u}{r} \right) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{u(r)}{r} \right) &= \frac{1}{r} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} \end{aligned}$$

Zusammen erhalten wir

$$\frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[A - \tilde{V}(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \frac{u}{r} = 0 \quad (6.3.70)$$

oder mit $r \neq 0$

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left[A - \tilde{V}(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = 0 \quad (6.3.71)$$

Im Grenzfall $r \rightarrow \infty$ muss das Potential null sein, also

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{V} &= 0 \\ \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} &= 0 \end{aligned}$$

Im Grenzfall $r \rightarrow \infty$ lautet Gleichung (6.3.71)

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + Au(r) = 0 \quad (6.3.72)$$

- Wenn $E > 0$ ist, das heisst, wenn $A > 0$ ist, lautet die Lösung für freie Elektronen

$$u(r) = C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr} \quad (6.3.73a)$$

$$R(r) = \frac{1}{r} (C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr}) \quad (6.3.73b)$$

Zusammen mit der zeitlichen Lösung ($e^{i\omega t}$) haben wir ein- und auslaufende Kugelwellen.

- Im Falle gebundener Zustände, Wenn $E < 0$ ist, das heisst, wenn $A < 0$ ist, lautet die Lösung

$$u(r) = C_1 e^{\kappa r} + C_2 e^{-\kappa r} \quad (6.3.74)$$

Da die Lösung für $r \rightarrow \infty$ gegen Null gehen muss, muss $C_1 = 0$ sein. Also ist

$$R(r) = \frac{C_2}{r} e^{-\kappa r} \quad (6.3.75)$$

die Lösung für gebundene Zustände.

Die gefundenen allgemeinen Lösungen gelten nur für $r \rightarrow \infty$. Die Form der Lösung hängt allein von der Asymptotik des Potentials ab. Die Lösungen für $r \rightarrow 0$ hängen jedoch von der Form des Potentials $V(r)$ ab und sind für jedes Potential anders.

6.3.2.3. Radialfunktion für das Wasserstoffatom H

Mit den allgemeinen Lösungen für ein beliebiges Potential $V(r)$ können wir nun die Lösungen für das Wasserstoffatom berechnen

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.3.76)$$

Wir wenden die Variablentransformation

$$\rho = 2\kappa r \quad (6.3.77)$$

mit der Definition für $E < 0$ aus Gleichung (6.3.67)

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2m_e E}{\hbar^2}} \quad (6.3.78)$$

Weiter setzen wir

$$R(r) = \tilde{R}(2\kappa r) = \tilde{R}(\rho) \quad (6.3.79)$$

Mit

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dr} &= \frac{d\tilde{R}}{d\rho} \cdot \frac{d\rho}{dr} = \frac{d\tilde{R}}{d\rho} \cdot 2\kappa \\ \frac{d^2R}{dr^2} &= \frac{d^2\tilde{R}}{d\rho^2} 4\kappa^2 \end{aligned}$$

wird der Radialteil der Wellengleichung (6.3.64)

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d^2\tilde{R}}{d\rho^2} 4\kappa^2 + \frac{4\kappa}{\rho} \cdot 2\kappa \cdot \frac{d\tilde{R}}{d\rho} + \left[A + \frac{2m_e Z e^2 2\kappa}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0 \rho} - \frac{\ell(\ell+1) 4\kappa^2}{\rho^2} \right] \\ 0 &= \frac{d^2\tilde{R}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\tilde{R}}{d\rho} + \left[\frac{-\kappa^2}{4\kappa^2} + \frac{2m_e Z e^2}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0 2\kappa\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] \\ &= \frac{d^2\tilde{R}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\tilde{R}}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\kappa\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] \tilde{R} \end{aligned} \quad (6.3.80)$$

mit

$$B = \frac{Z e^2 m_e}{4\pi\hbar^2\epsilon_0} \quad (6.3.81)$$

Zur Lösung von Gleichung (6.3.80) verwenden wir den Exponentialansatz

$$\tilde{R}(\rho) = e^{-\rho/2} v(\rho) \quad (6.3.82)$$

Zuerst berechnen wir die einzelnen Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}}{d\rho} &= \frac{d}{d\rho} \left(e^{-\rho/2} v(\rho) \right) \\ &= -\frac{1}{2} e^{-\rho/2} v(\rho) + e^{-\rho/2} \frac{dv(\rho)}{d\rho} \\ \frac{d^2\tilde{R}}{d\rho^2} &= \frac{d}{d\rho} \left(e^{-\frac{\rho}{2}} \left(-\frac{v(\rho)}{2} + \frac{dv(\rho)}{d\rho} \right) \right) \\ &= -\frac{1}{2} e^{-\rho/2} \left(-\frac{v(\rho)}{2} + \frac{dv(\rho)}{d\rho} \right) + e^{-\rho/2} \left(-\frac{1}{2} \frac{dv(\rho)}{d\rho} + \frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} \right) \\ \frac{d^2\tilde{R}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\tilde{R}}{d\rho} &= e^{-\rho/2} \left[\frac{v(\rho)}{4} - \frac{1}{2} \frac{dv(\rho)}{d\rho} - \frac{1}{2} \frac{dv(\rho)}{d\rho} + \frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} - \frac{v(\rho)}{\rho} + \frac{2}{\rho} \frac{dv(\rho)}{d\rho} \right] \\ &= e^{-\rho/2} \left[\frac{v(\rho)}{4} - \frac{v(\rho)}{\rho} + \frac{dv(\rho)}{d\rho} \left(\frac{2}{\rho} - 1 \right) + \frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} \right] \\ \frac{d^2\tilde{R}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\tilde{R}}{d\rho} &= \frac{e^{-\rho/2}}{4\rho} \left[v(\rho) (\rho - 4) + \frac{dv(\rho)}{d\rho} (-4\rho + 8) + 4\rho \frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} \right] \end{aligned} \quad (6.3.83)$$

Wir setzen den Exponentialansatz in Gleichung (6.3.80) ein, verwenden die Ableitungen aus Gleichung (6.3.83) und spalten $e^{-\rho/2} > 0$ ab.

$$\begin{aligned} \frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \frac{dv(\rho)}{d\rho} + \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{\rho} - \frac{1}{4} + \frac{B}{\kappa\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] v(\rho) &= 0 \\ \frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \frac{dv(\rho)}{d\rho} + \left[\frac{1}{\rho} \left(\frac{B}{\kappa} - 1\right) - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] v(\rho) &= 0 \end{aligned} \quad (6.3.84)$$

Gleichung (6.3.84) kann mit dem Rekursionsansatz gelöst werden

$$v(\rho) = \rho^\mu \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_\nu \rho^\nu = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_\nu \rho^{\nu+\mu} \quad (6.3.85)$$

wobei $\alpha_0 \neq 0$ ist. Eingesetzt erhalten wir

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu + \mu) (\nu + \mu - 1) \alpha_\nu \rho^{\nu+\mu-2} \\ + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu + \mu) \alpha_\nu \rho^{\nu+\mu-1} \\ + \left[\left(\frac{B}{\kappa} - 1\right) \frac{1}{\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_\nu \rho^{\nu+\mu} = 0 \end{aligned} \quad (6.3.86)$$

Für $\nu = 0$ tritt nur μ auf. Für $\nu = 0$ bekommen wir

$$\begin{aligned} (\mu) (\mu - 1) \alpha_0 \rho^{\mu-2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right) \mu \alpha_0 \rho^{\mu-1} + \left[\left(\frac{B}{\kappa} - 1\right) \frac{1}{\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] \alpha_0 \rho^\mu &= 0 \\ (\mu) (\mu - 1) \alpha_0 \rho^{\mu-2} + 2\mu \alpha_0 \rho^{\mu-2} - \mu \alpha_0 \rho^{\mu-1} + \left(\frac{B}{\kappa} - 1\right) \alpha_0 \rho^{\mu-1} + \ell(\ell+1) \alpha_0 \rho^{\mu-2} &= 0 \end{aligned}$$

Die Gleichung gilt dann allgemein, wenn die Koeffizienten von $\rho^{\nu+\mu-2}$ für jedes ν getrennt gleich null sind. Wir erhalten so eine Gleichung für μ

$$\mu(\mu - 1) \alpha_0 \rho^{\mu-2} + 2\mu \rho^{\mu-2} \alpha_0 - \ell(\ell + 1) \alpha_0 \rho^{\mu-2} = 0 \quad (6.3.87)$$

Vereinfacht erhalten wir

$$\begin{aligned} \mu(\mu - 1) + 2\mu - \ell(\ell + 1) &= \\ \mu(\mu + 1) - \ell(\ell + 1) &= 0 \end{aligned}$$

Wir wissen aus den Lösungen für $Y_{\ell,m}$, dass $\ell \geq 0$ ist. Die Lösungen für μ sind

$$\mu = \begin{cases} \ell, & \text{brauchbare Lösung;} \\ -\ell - 1, & \text{führt in Gleichung (6.3.84) zu einem bei } \rho = 0 \text{ divergenten } v(\rho). \end{cases} \quad (6.3.88)$$

Die Bestimmungsgleichungen enthalten für μ bei $\nu = 0$ enthalten auch höhere Potenzen von ρ . Diese sind aber nicht vollständig, da auch die Summanden bei $\nu = 1$ Koeffizienten mit diesen Potenzen haben. Nun kann man in Gleichung

(6.3.86) $\mu = \ell$ einsetzen und für ein bestimmtes ν die Beziehungen zwischen den α_ν s aufschreiben. Die Vorfaktoren des niedrigsten Exponenten $\nu + \ell - 2$ liefern eine Rekursionsgleichung

$$a_\nu [(\nu + \ell)(\nu + \ell - 1) + 2(\nu + \ell) - \ell(\ell + 1)] + a_{\nu-1} \left[-(\nu - 1 + \ell) + \left(\frac{B}{\kappa} - 1 \right) \right] = 0 \quad (6.3.89)$$

Wir setzen

$$n = \frac{B}{\kappa_n} \quad (6.3.90)$$

wobei κ durch κ_n ersetzt wurde, da κ von n abhängt. Mit dieser Abkürzung erhält man aus Gleichung (6.3.89)

$$\alpha_\nu = \frac{\nu + \ell - n}{\nu(\nu + 2\ell + 1)} \alpha_{\nu-1} \quad (6.3.91)$$

Es gibt 2 Lösungstypen:

- Wenn die Kette nicht abbricht, dann führt dies in Gleichung (6.3.84) zu einer Exponentialfunktion, die im Unendlichen $\rho \rightarrow \infty$ divergiert. Diese Lösung ist unphysikalisch.
- Wenn die Kette abbricht, muss in Gleichung (6.3.91) der Nenner für ein ν_{max} null sein, das heisst.

$$\nu_{max} + \ell - n = 0 \implies \nu_{max} + \ell = n$$

Aus dem Zähler von Gleichung (6.3.91) ergibt sich die Forderung

$$\nu > 0$$

Also ist das ganzzahlige ν mindestens eins. Zusammen erhalten wir die Bedingung

$$\ell \leq n - 1 \quad (6.3.92)$$

In der ganzen Rekursionskette ist α_0 frei wählbar. Dieser Koeffizient ergibt die Amplitude. Die ersten α_ν sind

$\ell =$	$n = 1$		$n = 2$			$n = 3$			$n = 4$			
	0	1	0	1	2	0	1	2	0	1	2	3
$\nu = 0$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\nu = 1$	0	$-\frac{1}{2}$	0	-1	$-\frac{1}{4}$	0	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{6}$	0	0	0
$\nu = 2$	0	0	0	$\frac{1}{6}$	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{20}$	0	0	0	0
$\nu = 3$	0	0	0	0	0	0	$-\frac{1}{24}$	0	0	0	0	0
$\nu = 4$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle 6.1.: Tabelle der ersten α_ν , wenn $\alpha_0 = 1$ ist.

Die ganzzahligen Indizes heissen

n Hauptquantenzahl

ℓ Drehimpulsquantenzahl

Die zu den Haupt- und Drehimpulsquantenzahlen gehörigen nicht normierten Funktionen sind

$$v_{n,\ell} = \sum_{\nu=0}^{n-\ell-1} \alpha_{\nu} \rho^{\nu+\ell} \tag{6.3.93}$$

<i>n</i>	<i>ℓ</i>	$v_{n,\ell}$
1	0	$v_{1,0} = \alpha_0 \rho^{0+0} = 1$
2	0	$v_{2,0} = \alpha_0 \rho^{0+0} + \alpha_1 \rho^{1+0} = 1 - \frac{\rho}{2}$
	1	$v_{2,1} = \alpha_0 \rho^{0+1} = \rho$
3	0	$v_{3,0} = \alpha_0 \rho^{0+0} + \alpha_1 \rho^{1+0} + \alpha_2 \rho^{2+0} = 1 - \rho + \frac{\rho^2}{6}$
	1	$v_{3,1} = \alpha_0 \rho^{0+1} + \alpha_1 \rho^{1+1} = \rho - \frac{\rho^2}{4}$
	2	$v_{3,2} = \alpha_0 \rho^{0+2} = \rho^2$
4	0	$v_{4,0} = \alpha_0 \rho^{0+0} + \alpha_1 \rho^{1+0} + \alpha_2 \rho^{2+0} + \alpha_3 \rho^{3+0} = 1 - \frac{3\rho}{2} + \frac{\rho^2}{2} - \frac{\rho^3}{24}$
	1	$v_{4,1} = \alpha_0 \rho^{0+1} + \alpha_1 \rho^{1+1} + \alpha_2 \rho^{2+1} = \rho - \frac{\rho^2}{2} + \frac{\rho^3}{20}$
	2	$v_{4,2} = \alpha_0 \rho^{0+2} + \alpha_1 \rho^{1+2} = \rho^2 - \frac{\rho^3}{6}$
	3	$v_{4,3} = \alpha_0 \rho^{0+3} = \rho^3$

Tabelle 6.2.: Nicht normierte Eigenfunktionen zu *n* und *ℓ*

Die normierten radialen Eigenfunktionen als Funktion der dimensionslosen Varia-

blen ρ sind

n	ℓ	$\tilde{R}_{n,\ell}(\rho)$
1	0	$\tilde{R}_{1,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} e^{-\rho/2}$
2	0	$\tilde{R}_{2,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\rho/2}$
	1	$\tilde{R}_{2,1}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{6\pi}} \rho e^{-\rho/2}$
3	0	$\tilde{R}_{3,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \rho + \frac{\rho^2}{6}\right) e^{-\rho/2}$
	1	$\tilde{R}_{3,1}(\rho) = \frac{1}{6\sqrt{\pi}} \left(\rho - \frac{\rho^2}{4}\right) e^{-\rho/2}$
	2	$\tilde{R}_{3,2}(\rho) = \frac{1}{24\sqrt{5\pi}} \rho^2 e^{-\rho/2}$
4	0	$\tilde{R}_{4,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{3\rho}{2} + \frac{\rho^2}{2} - \frac{\rho^3}{24}\right) e^{-\rho/2}$
	1	$\tilde{R}_{4,1}(\rho) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{6\pi}} \left(\rho - \frac{\rho^2}{2} + \frac{\rho^3}{20}\right) e^{-\rho/2}$
	2	$\tilde{R}_{4,2}(\rho) = \frac{1}{8\sqrt{10\pi}} \left(\rho^2 - \frac{\rho^3}{6}\right) e^{-\rho/2}$
	3	$\tilde{R}_{4,3}(\rho) = \frac{1}{48\sqrt{70\pi}} \rho^3 e^{-\rho/2}$
5	0	$\tilde{R}_{5,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - 2\rho + \rho^2 - \frac{\rho^3}{6} + \frac{\rho^4}{120}\right) e^{-\rho/2}$
	1	$\tilde{R}_{5,1}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{3\pi}} \left(\rho - \frac{3\rho^2}{4} + \frac{3\rho^3}{20} - \frac{\rho^4}{120}\right) e^{-\rho/2}$
	2	$\tilde{R}_{5,2}(\rho) = \frac{1}{40} \sqrt{\frac{7}{\pi}} \left(\rho^2 - \frac{\rho^3}{3} + \frac{\rho^4}{42}\right) e^{-\rho/2}$
	3	$\tilde{R}_{5,3}(\rho) = \frac{1}{60\sqrt{7\pi}} \left(\rho^3 - \frac{\rho^4}{8}\right) e^{-\rho/2}$
	4	$\tilde{R}_{5,4}(\rho) = \frac{1}{1440\sqrt{7\pi}} \rho^4 e^{-\rho/2}$

Tabelle 6.3.: Normierte radiale Eigenfunktionen als Funktion der dimensionslosen Variablen ρ

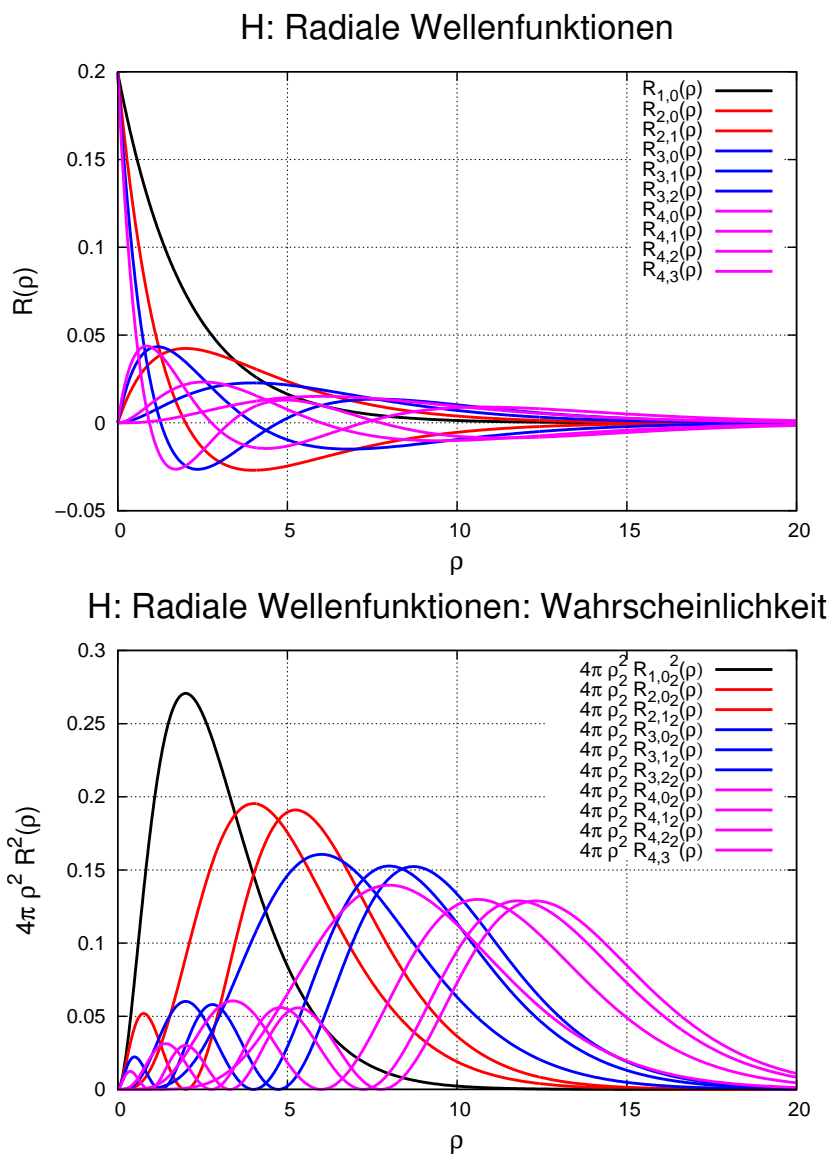


Abbildung 6.12.: Oben: normierte radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffs. Unten: Wahrscheinlichkeitsdichte der Wasserstoffwellenfunktionen abhängig vom Kernabstand.

Abbildung 6.12 zeigt die für $n = 1$ bis $n = 4$ die radialen normierten Wellenfunktionen des Wasserstoffs. $4\pi\rho^2 \widehat{R}_{1,0}^2(\rho)$ hat bei $\rho = 2$ ein Maximum. Das bedeutet, dass das Wasserstoffatom im Grundzustand etwa einen Durchmesser von 106 pm hat (siehe auch Gleichung (6.3.100)), was eben $\rho = 2$ entspricht. Der Kerndurchmesser ist 10^5 mal kleiner, also auf der Darstellung nicht sichtbar.

Mit der Rücksubstitution $\rho = 2\kappa_n r$ bekommen wir die radialen Eigenfunktionen

des Wasserstoffatoms

n	ℓ	$R_{n,\ell}(r)$
1	0	$R_{1,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} e^{-\kappa_1 r}$
2	0	$R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} (1 - \kappa_2 r) e^{-\kappa_2 r}$
	1	$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6\pi}} \kappa_2 r e^{-\kappa_2 r}$
3	0	$R_{3,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - 2\kappa_3 r + \frac{2\kappa_3^2 r^2}{3}\right) e^{-\kappa_3 r}$
	1	$R_{3,1}(r) = \frac{1}{12\sqrt{\pi}} \left(\kappa_3 r - \frac{\kappa_3^2 r^2}{2}\right) e^{-\kappa_3 r}$
	2	$R_{3,2}(r) = \frac{1}{6\sqrt{5\pi}} \kappa_3^2 r^2 e^{-\kappa_3 r}$
4	0	$R_{4,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - 3\kappa_4 r + 2\kappa_4^2 r^2 - \frac{\kappa_4^3 r^3}{3}\right) e^{-\kappa_4 r}$
	1	$R_{4,1}(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{6\pi}} \left(\kappa_4 r - \kappa_4^2 r^2 + \frac{\kappa_4^3 r^3}{5}\right) e^{-\kappa_4 r}$
	2	$R_{4,2}(r) = \frac{1}{2\sqrt{10\pi}} \left(\kappa_4^2 r^2 - \frac{\kappa_4^3 r^3}{3}\right) e^{-\kappa_4 r}$
	3	$R_{4,3}(r) = \frac{1}{6\sqrt{70\pi}} \kappa_4^3 r^3 e^{-\kappa_4 r}$
5	0	$R_{5,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - 4\kappa_5 r + 4\kappa_5^2 r^2 - \frac{3\kappa_5^3 r^3}{3} + \frac{2\kappa_5^4 r^4}{15}\right) e^{-\kappa_5 r}$
	1	$R_{5,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}} \left(\kappa_5 r - \frac{3\kappa_5^2 r^2}{2} + \frac{3\kappa_5^3 r^3}{5} - \frac{\kappa_5^4 r^4}{15}\right) e^{-\kappa_5 r}$
	2	$R_{5,2}(r) = \frac{1}{10} \sqrt{\frac{7}{\pi}} \left(\kappa_5^2 r^2 - \frac{2\kappa_5^3 r^3}{3} + \frac{2\kappa_5^4 r^4}{21}\right) e^{-\kappa_5 r}$
	3	$R_{5,3}(r) = \frac{2}{15\sqrt{7\pi}} \left(\kappa_5^3 r^3 - \frac{\kappa_5^4 r^4}{4}\right) e^{-\kappa_5 r}$
	4	$R_{5,4}(r) = \frac{1}{90\sqrt{7\pi}} \kappa_5^4 r^4 e^{-\kappa_5 r}$

Tabelle 6.4.: Radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

Die Konstante κ_n in Tabelle 6.4 ist

$$\kappa_n = \sqrt{-\frac{2m_e E_n}{\hbar^2}}$$

gesetzt. Mit Gleichung (6.3.81) und Gleichung (6.3.90) kann der n -te Energieeigenwert berechnet werden.

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (6.3.94)$$

Wir können nun auch κ_n mit E_n ausdrücken

$$\kappa_n = \sqrt{-\frac{2m_e \left(-\frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2}\right)}{\hbar^2}} = \frac{m_0 Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n} \quad (6.3.95)$$

Schliesslich haben wir

$$R_{n,\ell}(r) = N_{n,\ell} \exp(-\kappa_n r) r^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2\kappa_n r) \quad (6.3.96)$$

Dabei ist $N_{n,\ell}$ ein Normierungsfaktor und

$$L_{n+\ell}^{2\ell+1} = (-1)^{2\ell+1} \frac{d^{2\ell+1}}{d\rho^{2\ell+1}} L_{n+\ell} \quad (6.3.97)$$

eine Funktion, die aus einem *Laguerrischen Polynom*

$$L_{n+\ell} = \frac{1}{(n+\ell)!} e^\rho \frac{d^{n+\ell}}{d\rho^{n+\ell}} \left(e^{-\rho} \rho^{n+\ell} \right) \quad (6.3.98)$$

durch Ableiten erzeugt werden kann.

Die Grösse

$$\kappa_n = \frac{1}{n} \frac{m_e Z e^2}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0} = \frac{Z}{n} \frac{1}{a_0} \quad (6.3.99)$$

ist ein inverser Radius. Er hängt von der $1/n$ ab und der Kernladung Z ab. Der von der Quantenzahl n und der Kernladungszahl Z unabhängige Radius a_0 , der *Bohrsche Radius*, hat den Wert

$$a_0 = \frac{1}{n} \frac{1}{\kappa_n} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 5.29177 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (6.3.100)$$

n	ℓ	$R_{n,\ell}(r)$
1	0	$R_{1,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \kappa_1^{3/2} e^{-\kappa_1 r} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	$R_{2,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \kappa_2^{3/2} (1 - \kappa_2 r) e^{-\kappa_2 r} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi} a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/(2a_0)}$
	1	$R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}} \kappa_2^{3/2} \kappa_2 r e^{-\kappa_2 r} = \frac{1}{4\sqrt{6\pi} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)}$
3	0	$R_{3,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \kappa_3^{3/2} \left(1 - 2\kappa_3 r + \frac{2\kappa_3^2 r^2}{3}\right) e^{-\kappa_3 r} = \frac{1}{(3a_0)^{3/2} \sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/(3a_0)}$
	1	$R_{3,1}(r) = \frac{2}{3\sqrt{2\pi}} \kappa_3^{3/2} (2\kappa_3 r - \kappa_3^2 r^2) e^{-\kappa_3 r} = \frac{4}{27\sqrt{6\pi} a_0^{3/2}} \left(\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{6a_0^2}\right) e^{-r/(3a_0)}$
	2	$R_{3,2}(r) = \frac{4}{3\sqrt{10\pi}} \kappa_3^{3/2} \kappa_3^2 r^2 e^{-\kappa_3 r} = \frac{2}{81\sqrt{30\pi} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/(3a_0)}$
4	0	$R_{4,0}(r) = \frac{\kappa_4^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \left(1 - 3\kappa_4 r + 2\kappa_4^2 r^2 - \frac{\kappa_4^3 r^3}{3}\right) e^{-\kappa_4 r} = \frac{e^{-r/(4a_0)}}{8\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \left(1 - \frac{3r}{4a_0} + \frac{r^2}{8a_0^2} - \frac{r^3}{192a_0^3}\right)$
	1	$R_{4,1}(r) = \frac{5\kappa_4^{3/2}}{\sqrt{15\pi}} \left(\kappa_4 r - \kappa_4^2 r^2 + \frac{\kappa_4^3 r^3}{5}\right) e^{-\kappa_4 r} = \frac{5}{32\sqrt{15\pi}} \left(\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{4a_0^2} + \frac{r^3}{80a_0^3}\right) e^{-r/(4a_0)}$
	2	$R_{4,2}(r) = \frac{1}{\sqrt{5\pi}} \kappa_4^{3/2} \left(\kappa_4^2 r^2 - \frac{\kappa_4^3 r^3}{3}\right) e^{-\kappa_4 r} = \frac{1}{128\sqrt{5\pi}} \kappa_4^{3/2} \left(\frac{r^2}{a_0^2} - \frac{r^3}{12a_0^3}\right) e^{-r/(4a_0)}$
	3	$R_{4,3}(r) = \frac{1}{3\sqrt{35\pi}} \kappa_4^{3/2} \kappa_4^3 r^3 e^{-\kappa_4 r} = \frac{1}{1536\sqrt{35\pi}} \kappa_4^{3/2} \frac{r^3}{a_0^3} e^{-r/(4a_0)}$

Tabelle 6.5.: Normierte radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms.

Die normierten radialen Wellenfunktionen sind in Tabelle 6.5 dargestellt. Bei [Hyperphysics](#) gibt es eine schöne Darstellung dieser Funktionen. Eine Skizze dieser Wellenfunktionen findet sich auch im Anhang A.2.

6.3.3. Vollständige Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

Die vollständige Wellenfunktion eines durch n , ℓ und m gegebenen Zustandes eines Wasserstoffatoms ist

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} P_\ell^m(\cos \vartheta) R_{n,\ell}(r) \quad (6.3.101)$$

mit

$$\begin{aligned} n &\in \mathbb{N} \\ 0 &\leq \ell \leq n-1 \\ -\ell &\leq m \leq \ell \end{aligned}$$

Die Wasserstoffwellenfunktion ist dann

$$\Psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\phi) = \sqrt{\alpha^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+\ell)!}} e^{-\alpha r/2} (\alpha r)^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\alpha r) Y_\ell^m(\theta,\phi) \quad (6.3.102)$$

wobei

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_0e^2}$$

der Bohrsche Radius und

$$\alpha = 2\kappa = 2 \frac{m_0e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \cdot \frac{Z}{n} = \frac{2Z}{na_0}$$

ist. Die Wasserstofforbitale [AW95] sind

$$\begin{aligned} \Psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\phi) &= \sqrt{\left(\frac{m_0e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} \cdot \frac{Z}{n}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+\ell)!}} \\ &\cdot e^{-\frac{m_0e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \cdot \frac{Z}{n} \cdot r} \left(\frac{m_0e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} \cdot \frac{Z}{n} \cdot r\right)^\ell \\ &\cdot L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\left(\frac{m_0e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} \cdot \frac{Z}{n}\right) r\right) \\ &\cdot Y_\ell^m(\theta,\phi) \end{aligned}$$



Versuch zur Vorlesung:

Orbitalmodelle: Stehende Wellen auf runder Wasseroberfläche (Versuchskarte AT-60)



Versuch zur Vorlesung:

Orbital-Modelle: Styropormodelle von Ladungswolken (Versuchskarte AT-61)

6.3.4. Unbestimmtheitsrelationen und Vertauschungsrelationen

Die folgende Ausarbeitung folgt der Behandlung von Gordon Baym [Bay69, 66]. Eine analoge Darstellung findet sich im Buch von Landau und Lifschitz [LL79, 46].

In der Quantenmechanik ist es üblich Skalarprodukte mit Brakets zu beschreiben. Die Definitionen sind:

$$\begin{aligned} |g\rangle &= g && \text{der Spaltenvektor der Funktion } g \\ \langle f| &= f^*(u) && \text{der Zeilenvektor der zu} \\ &&& \text{\textit{f} konjugiert komplexen Funktion} \\ \langle f|g\rangle &= (f, g) = f \cdot g \\ \langle f|g\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(u)g(u) du && \text{Skalarprodukt von } f \text{ und } g \end{aligned}$$

Nun seien $|\Theta\rangle$ und $|\Phi\rangle$ normierte Wellenfunktionen, das heisst $\langle\Theta|\Theta\rangle = 1$ und $\langle\Phi|\Phi\rangle = 1$.

Behauptung:

$$|\langle\Theta|\Phi\rangle| \leq 1 \quad (6.3.103)$$

Beweis:

Sei

$$|\zeta\rangle = |\Theta\rangle - e^{i\alpha} |\Phi\rangle \text{ für } \alpha \in \mathbb{R}$$

Die Reihenfolge der Wellenfunktionen darf nicht geändert werden, Zahlen dürfen vor das Skalarprodukt gezogen werden. Dann ist

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle\zeta|\zeta\rangle && \text{wegen der Normierung} \\ &= (\langle\Theta| - e^{-i\alpha} \langle\Phi|) (|\Theta\rangle - e^{i\alpha} |\Phi\rangle) \\ &= \langle\Theta|\Theta\rangle - e^{i\alpha} \langle\Theta|\Phi\rangle - e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle + e^{-i\alpha} e^{i\alpha} \langle\Phi|\Phi\rangle \\ &= 2 - e^{i\alpha} \langle\Theta|\Phi\rangle - e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle \\ \implies 2 &\geq e^{i\alpha} \langle\Theta|\Phi\rangle + e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle && (6.3.104) \end{aligned}$$

Gleichheit gilt also nur, wenn $|\zeta\rangle = 0$. Wir wählen das beliebige α so, dass

$$\langle\Theta|\Phi\rangle = e^{-i\alpha} |\langle\Theta|\Phi\rangle|$$

und setzen in Gleichung (6.3.104) ein

$$\begin{aligned} 2 &\geq e^{i\alpha} e^{-i\alpha} |\langle\Theta|\Phi\rangle| + e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle && = |\langle\Theta|\Phi\rangle| + e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle \\ 2 - |\langle\Theta|\Phi\rangle| &\geq e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle \\ (2 - |\langle\Theta|\Phi\rangle|)^2 &\geq |\langle\Phi|\Theta\rangle|^2 && = |\langle\Theta|\Phi\rangle|^2 \\ (2 - |\langle\Theta|\Phi\rangle|) &\geq |\langle\Theta|\Phi\rangle| \\ 2 &\geq 2|\langle\Theta|\Phi\rangle| && \implies 1 \geq |\langle\Theta|\Phi\rangle| \end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. Bei nicht normierten Funktionen verwendet man

$$\frac{|\Theta\rangle}{\sqrt{\langle\Theta|\Theta\rangle}} \text{ und } \frac{|\Phi\rangle}{\sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle}}$$

Aus Gleichung (6.3.103) erhält man

$$\sqrt{\langle\Theta|\Theta\rangle} \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle} \geq |\langle\Theta|\Phi\rangle| \quad (6.3.105)$$

Aus Gleichung (6.3.104) erhält man

$$2 \geq e^{i\alpha} \frac{\langle\Theta|\Phi\rangle}{\sqrt{\langle\Theta|\Theta\rangle} \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle}} + e^{-i\alpha} \frac{\langle\Phi|\Theta\rangle}{\sqrt{\langle\Theta|\Theta\rangle} \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle}}$$

$$2 \sqrt{\langle\Theta|\Theta\rangle} \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle} \geq e^{i\alpha} \langle\Theta|\Phi\rangle + e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle$$

und damit

$$\sqrt{\langle\Theta|\Theta\rangle} \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle} \geq \frac{1}{2} (e^{i\alpha} \langle\Theta|\Phi\rangle + e^{-i\alpha} \langle\Phi|\Theta\rangle) \quad (6.3.106)$$

Die Standardabweichungen der Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ der Orts- und Impulsoperatoren sind

$$\Delta x = \sqrt{\langle(\hat{x} - \langle x \rangle)^2\rangle} \quad (6.3.107a)$$

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle(\hat{p}_x - \langle p_x \rangle)^2\rangle} \quad (6.3.107b)$$

wobei für die Erwartungswerte wie üblich gilt:

$$\langle x^2 \rangle = \langle \Psi | \hat{x}^2 | \Psi \rangle = \int x^2 |\langle x | \Psi \rangle|^2 d^3r$$

Wir nehmen an, dass das zu untersuchende Teilchen die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ hat. Wir definieren

$$|\Theta\rangle = (\hat{x} - \langle x \rangle) |\Psi\rangle \quad (6.3.108a)$$

$$|\Phi\rangle = (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle) |\Psi\rangle \quad (6.3.108b)$$

Dann ist

$$\langle\Theta|\Theta\rangle = (\hat{x} - \langle x \rangle)^2 = (\Delta x)^2 \quad (6.3.109a)$$

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle)^2 = (\Delta p_x)^2 \quad (6.3.109b)$$

Aus Gleichung (6.3.106) erhält man mit $e^{i\alpha} = -i$ und der Annahme, dass $\langle x \rangle = 0$ und $\langle p_x \rangle = 0$ (was sich immer durch eine Galilei-Transformation erreichen lässt.)

$$\begin{aligned}
\Delta x \Delta p_x &\geq \frac{1}{2} (-i \langle \Theta | \Phi \rangle + i \langle \Phi | \Theta \rangle) \\
&= -\frac{i}{2} (\langle \Theta | \Phi \rangle - \langle \Phi | \Theta \rangle) \\
&= -\frac{i}{2} (\langle \Psi | (\hat{x}^* - \langle x \rangle) (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle) | \Psi \rangle - \langle \Psi | (\hat{p}_x^* - \langle p_x \rangle) (\hat{x} - \langle x \rangle) | \Psi \rangle) \\
&= -\frac{i}{2} (\langle \Psi | (\hat{x}^* - \langle x \rangle) (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle) - (\hat{p}_x^* - \langle p_x \rangle) (\hat{x} - \langle x \rangle) | \Psi \rangle) \\
&= -\frac{i}{2} \langle \Psi | \hat{x}^* \hat{p}_x - \hat{x}^* \langle p_x \rangle - \langle x \rangle \hat{p}_x + \langle x \rangle \langle p_x \rangle - \hat{p}_x^* \hat{x} + \hat{p}_x^* \langle x \rangle + \langle p_x \rangle \hat{x} - \langle p_x \rangle \langle x \rangle | \Psi \rangle \\
&= -\frac{i}{2} \langle \Psi | \hat{x}^* \hat{p}_x - \hat{p}_x^* \hat{x} + \langle p_x \rangle (\hat{x} - \hat{x}^*) + \langle x \rangle (\hat{p}_x^* - \hat{p}_x) | \Psi \rangle \\
&= -\frac{i}{2} \langle \Psi | \hat{x}^* \hat{p}_x - \hat{p}_x^* \hat{x} | \Psi \rangle \\
&= -\frac{i}{2} \langle \Psi | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \Psi \rangle \\
&= -\frac{i}{2} i \hbar \langle \Psi | \Psi \rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}
\end{aligned}$$

Unschärferelation oder Unbestimmtheitsrelation

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (6.3.110)$$

Wir haben bei der Berechnung nichts über die Operatoren \hat{x} und \hat{p}_x angenommen, so dass auch für allgemeine Operatoren $\hat{\Omega}_1$ und $\hat{\Omega}_2$, bei denen man über eine Transformation $\langle \Omega_1 \rangle = 0$ und $\langle \Omega_2 \rangle = 0$ erreichen kann, die *Unbestimmtheitsrelation* gilt

$$\Delta \Omega_1 \Delta \Omega_2 \geq \frac{[\Omega_1, \Omega_2]}{2} \quad (6.3.111)$$

Nach Landau und Lifschitz [LL79, 46] folgt aus

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = -i\hbar\hat{c} \quad (6.3.112)$$

wobei \hat{f} und \hat{g} beliebige Operatoren zu den klassischen Grössen f und g sind und bei der \hat{c} der Operator zur klassischen Grösse c (der Poisson-Klammer) ist, dass im klassischen Grenzfall alle Operatoren vertauschbar sind. In zweiter Näherung kann der Operator \hat{c} als Multiplikation mit c auffassen, so dass

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = -i\hbar c \quad (6.3.113)$$

und in Analogie zu den Impulsen

$$\Delta f \Delta g \sim \hbar c \quad (6.3.114)$$

6.3.5. Quantenzahlen, Spektren und Energien

Beim Wasserstoffatom hatten wir drei Quantenzahlen

$n = 1, 2, 3$	Energiequantenzahl
$0 \leq \ell \leq n - 1$	Drehimpulsquantenzahl
$-\ell \leq m \leq \ell$	magnetische Quantenzahl

Diese drei Quantenzahlen beschreiben den atomaren Zustand des Wasserstoffatoms. Das *Rydberg-Gesetz* besagt, dass für hochangeregte Zustände nur die Energiequantenzahl n wichtig sei. Das bedeutet, dass alle Drehimpuls- oder ℓ - und alle magnetischen oder m -Zustände die gleiche Energie haben.

Zustände zu verschiedenem ℓ oder m , die alle die gleiche Energie haben, heissen entartet. Die Anzahl Zustände bei verschiedenem ℓ oder m mit der gleichen Energie ist die *Entartung*.

Es stellen sich die folgenden Fragen:

- In welcher Reihenfolge werden die Zustände besetzt?
- Wird die Entartung aufgehoben?
- Was ist der Grund für die Entartung?

Um sich den Antworten zu nähern, ist es instruktiv nochmals die *Kepler-Gesetze* zu betrachten. Diese beschreiben geschlossene Planetenbahnen, wenn das Potential sich wie $1/r$ verhält. jede Abweichung des Potentials von einem $\frac{1}{r}$ -Gesetz bewirkt eine Perihel-Drehung, also auch dann wenn mehr als ein Planet um das Zentralgestirn sich bewegen.

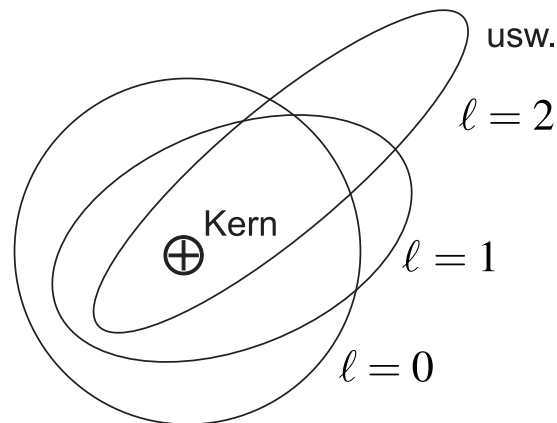


Abbildung 6.13.: Sommerfeld-Bild: Modell eines Atoms mit einem „Leuchtelektron“

Abbildung 6.13 zeigt verschiedene Keplerbahnen, wobei die Bahn mit der grössten Exzentrizität die Bahn des Leuchtelektrons sei. Abbildung 6.14 zeigt eine Skizze eines Leuchtelektrons auf einer Rydbergbahn zusammen mit dem Kern und der ihn abschirmenden Elektronenwolke

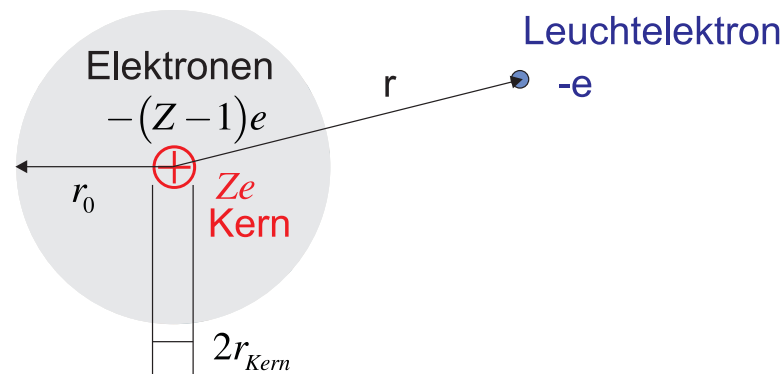


Abbildung 6.14.: Atom mit einem Leuchtelektron

Bei Atomen mit einem Elektron auf einer Rydbergbahn, wenn also $r \gg r_0$ gilt, ist die Coulombkraft $F_c = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$ unabhängig von der inneren Struktur des Atoms. Andererseits ist auch ganz in der Nähe des Kernes, das heisst für $r \approx r_{Kern}$, die Coulombkraft einfach. Sie muss $F_c = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$ sein.

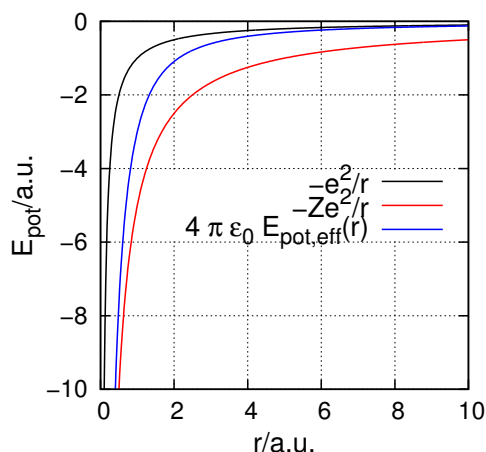


Abbildung 6.15.: Skizze: Coulombpotential und effektives Potential

Abbildung 6.15 zeigt eine Skizze des Übergangs vom geschirmten Potential für ein Elektron für $r \gg r_0$ zum reinen Coulombpotential eines Kerns mit der Ladung Ze . Die genaue Form des effektiven Potentials ist schwierig.

Die Existenz eines effektiven Potentials bedeutet, dass ein Elektron innen sich auf einer Bahn zu einem anderen Coulombpotential als aussen bewegt. Die Energie hängt also nun vom Drehimpuls ab. $\ell = 0$ ist eine Kreisbahn, die von einer einzigen effektiven Ladung bestimmt ist., $\ell > 0$ bedeutet, dass das Elektron sich in Potentialen zu verschiedenen Energien aufhält. Damit ändert sich die Energie und die Abschirmung hebt die Energieentartung auf.

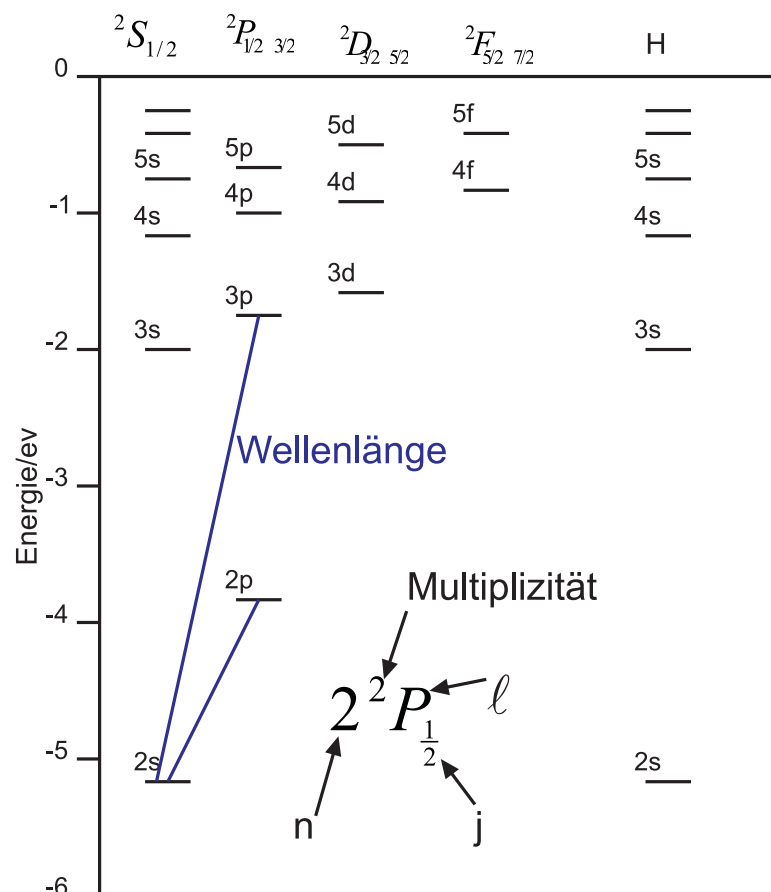


Abbildung 6.16.: Grotrian-Diagramm für Lithium

Energieniveaus werden üblicherweise mit *Grotrian-Diagrammen* (siehe Abbildung 6.16) dargestellt. Die Bedeutung der Symbole ist in Tabelle 6.6 zusammengefasst.

Buchstabe	Drehimpuls	Name
s	$l = 0$	sharp
p	$l = 1$	principal
d	$l = 2$	diffuse
f	$l = 3$	fundamental
g	$l = 4$	⋮

Tabelle 6.6.: Bezeichnungen der Bahndrehimpulszustände

Es gibt die folgende Konvention:

grosse Buchstaben beziehen sich auf das gesamte System

kleine Buchstaben beziehen sich auf ein Elektron

Bei den Alkaliatomen kann man empirisch Serienformeln angeben, die analog zur Balmerreihe sind. Für die Energien der einzelnen Zustände gilt:

$$E_{n,e} = -R_{Na} \cdot hc \cdot \frac{1}{n_{eff}^2} = -R_{Na}hc \frac{1}{(n - \Delta(n, \ell))^2} \quad (6.3.115)$$

$n_{eff} = n - \Delta(n, \ell)$ ist dabei eine im Allgemeinen nicht ganzzahlige Hauptquantenzahl. $\Delta(n, \ell)$ ist der zu n und ℓ gehörende .

Die Quantenzustände werden als Absorptions- oder Emissionslinien untersucht. Bei Absorptionslinien ist unter Normalbedingungen nur der Grundzustand eines Atoms besetzt: man beobachtet also ausschliesslich die nur die Hauptserie aus Resonanzlinien. Die gelbe D-Linie des Natriumatoms wird durch den Übergang $3s \rightarrow 3p$ erzeugt. Die mit Grossbuchstaben bezeichnete Gesamtheit aller s - beziehungsweise p -Terme ist beim Natrium

Hauptserie	$3S \leftrightarrow nP$
Nebenserien	$3P \leftrightarrow nS$
	$3P \leftrightarrow nD$ mit $n \geq 3$

Tabelle 6.7.: Haupt- und Nebenserien beim Na

Beim K-Atom ist die Elektronenkonfiguration der inneren Elektronen eine Ar-Konfiguration. Dazu kommt ein äusseres Leuchtelektron. Die Konfiguration des K-Atoms besteht aus zwei s -Elektronen mit $n = 1$, bezeichnet als $1s^2$. Dann folgen zwei s -Elektronen mit $n = 2$, die mit $2s^2$ angegeben werden. Weiter gibt es sechs p -Elektronen ($2p^6$) mit $n = 2$, zwei s -Elektronen mit $n = 3$, also $3s^2$ und sechs p -Elektronen mit $n = 3$ angegeben mit $3p^6$. Kurz gibt man das als

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \implies [\text{Ar}] \quad (6.3.116)$$

In der ganzen Konfiguration ist neben der $[\text{Ar}]$ -Edelgaskonfiguration noch ein Elektron unberücksichtigt. Dieses könnte sich sowohl in einem $[\text{Ar}]3d^1$ oder $[\text{Ar}]4s^1$ sein. Welche Konfiguration hat die kleinste Gesamtenergie? Das s -Elektron hat eine höhere Wahrscheinlichkeit, sich nahe am Kern aufzuhalten als das d -Elektron. Es bewegt sich also mehr im un abgeschirmten, potentialmässig tiefer liegenden Teil des Wechselwirkungspotentials, liegt also bei einer tieferen Energie (siehe auch Abbildung 6.17). Obwohl das d -Elektron eine stabilere Konfiguration zu haben scheint, ist die Konfiguration des K $[\text{Ar}]4s^1$.

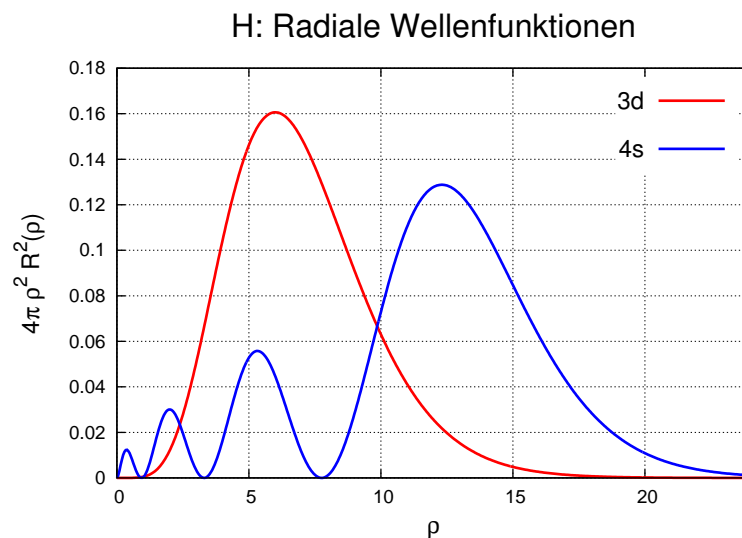


Abbildung 6.17.: Radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

6.4. Atome im Magnetfeld

6.4.1. Stern-Gerlach-Experiment

Wenn Atome magnetische Momente haben, werden sie in einem Magnetfeldgradienten abgelenkt. In einem homogenen Magnetfeld jedoch gibt es keine Ablenkung. Im Experiment von Stern und Gerlach wurden neutrale Silberatome durch ein inhomogenes Magnetfeld geschickt.

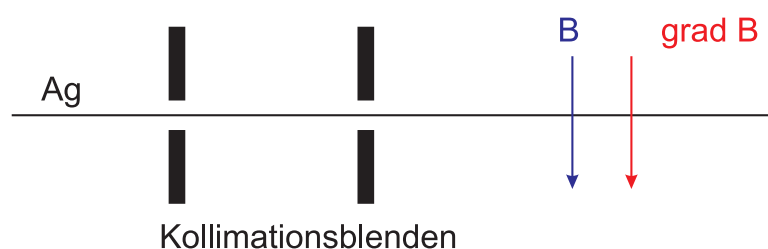


Abbildung 6.18.: Versuchsaufbau Stern-Gerlach-Versuch

Abbildung 6.18 zeigt den symbolischen Aufbau. In einem homogenen Magnetfeld wirkt auf ein magnetisches Moment keine Kraft. Wenn das magnetische Moment μ nicht parallel zur magnetischen Induktion \mathbf{B} ist, präzediert das magnetische Moment $\mu = \mathbf{m}_A = I \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{n}$ wegen dem Drehmoment $\mathbf{M} = \mu \times \mathbf{B}$. Die magnetische Lageenergie ist

$$E_{pot} = -\mu \cdot \mathbf{B} \quad (6.4.1)$$

Die Kraft auf einen Dipol im Gradientenfeld ist

$$\mathbf{F} = \underbrace{\{\text{grad } B\}}_{\text{Tensor}} \boldsymbol{\mu}$$

Bei einem üblichen thermodynamischen System erwartet man, dass die magnetischen Momente $\boldsymbol{\mu}$ beliebig zu \mathbf{B} orientiert sind.

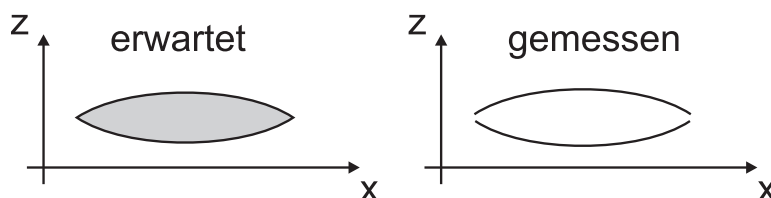


Abbildung 6.19.: Skizze: Erwartete (links) und gemessene Verteilung der Elektronen beim Stern-Gerlach-Versuch.

Abbildung 6.19 zeigt eine Skizze der erwarteten und, rechts, der gemessenen Verteilung. Die Ergebnisse zeigen, dass die z -Komponente des magnetischen Momentes der Silberatome im Magnetfeld quantisiert ist.

6.4.1.1. Drehimpulsoperator

Um zu einem Ausdruck für den Drehimpulsoperator zu kommen, betrachten wir den Strom in einem Atom.

$$I = \frac{q}{T_{Umlauf}} = \frac{-e\omega}{2\pi} \quad (6.4.2)$$

Der Drehimpuls ist

$$|\boldsymbol{\ell}| = m\omega r^2 = m\omega^2 \frac{A}{\pi} \quad \text{da } \pi r^2 = A \quad (6.4.3)$$

Der Drehimpuls ist also proportional zu der Fläche A des Kreisstromes. Das magnetische Moment ist

$$\boldsymbol{\mu} = I \cdot A = -\frac{e\omega}{2\pi} \cdot \pi r^2 = -\frac{e}{2m} (m\omega r^2) = -\frac{e}{2m} |\boldsymbol{\ell}| \quad (6.4.4)$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{e}{2m_e} \hat{\boldsymbol{\ell}} \quad (6.4.5)$$

Das Minuszeichen rührt von der negativen Elementarladung her. Setzt man den Betrag des Drehimpulses gleich dem reduzierten Planckschen Wirkungsquantum,

$$|\hat{\boldsymbol{\ell}}| = \hbar$$

erhält man das Bohrsche Magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (6.4.6)$$

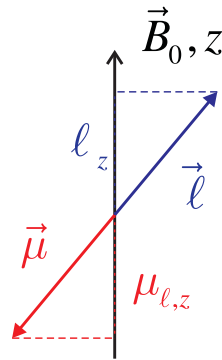


Abbildung 6.20.: Zusammenhang zwischen Drehimpuls und magnetischem Moment

Das magnetische Moment des Elektrons ist (siehe Abbildung 6.20)

$$\boldsymbol{\mu}_\ell = -g_\ell \mu_B \frac{\boldsymbol{\ell}}{\hbar} \quad (6.4.7)$$

Die Grösse g_ℓ ist der sogenannte g -Faktor. Beim magnetischen Moment eines Kreisstromes ist $g = 1$. Die Eigenwerte des magnetischen Momentes sind:

$$\mu_\ell = \mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)} = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad (6.4.8)$$

Die Drehimpulsänderung bei der Präzession ist

$$\dot{\boldsymbol{\ell}} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\boldsymbol{\ell} \times \mathbf{B}) \quad (6.4.9)$$

Die Frequenz dieser Präzession ist die Larmor-Frequenz

$$\omega_\ell = \frac{|\boldsymbol{\mu}|}{|\boldsymbol{\ell}|} = \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}}{\hbar} = \frac{g_\ell \mu_B B_z}{\hbar} = \gamma B_z \quad (6.4.10)$$

Hier ist γ das *gyromagnetische Verhältnis*.

6.5. Elektronenspin



Versuch zur Vorlesung:

Elektronenspinresonanz: Modellversuch (Versuchskarte AT-31)



Versuch zur Vorlesung:

Elektronenspinresonanz: ESR an DPPH (Versuchskarte AT-29)

6.5.1. Magnetische Spin-Bahn-Kopplung

Elektronen können für viele Untersuchungen als punktförmige Teilchen angesehen werden. Wenn der klassische Elektronenradius berechnet wird, wird eine ausgedehnte Ladungswolke angenommen. Wenn diese Wolke einen Eigendrehimpuls hat, dann gibt es einen Kreisstrom und damit ein magnetisches Moment. Der Eigendrehimpuls des Elektrons heisst *Spin*, der mit dem Vektor \mathbf{s} bezeichnet wird. Aus den klassischen Überlegungen kann aus dem Drehimpuls das magnetische Moment berechnet werden. Dieses so berechnete Moment ist jedoch nicht gleich dem gemessenen magnetischen Moment – ein Zeichen, dass hier die klassische Mechanik die Physik nicht mehr richtig beschreibt.

Analog zum Bahndrehimpuls ℓ haben wir

$$|\mathbf{s}| = \sqrt{s(s+1)} \quad (6.5.1)$$

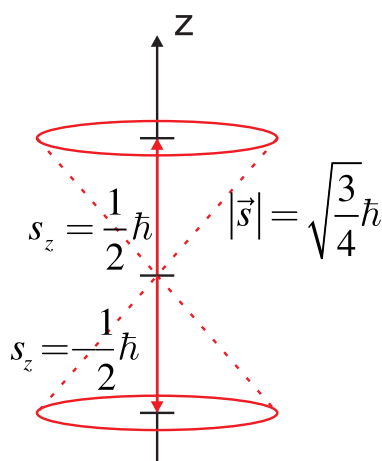


Abbildung 6.21.: Elektronenspin \mathbf{s} , Betrag $|\mathbf{s}|$ und z -Komponente s_z .

Der Zusammenhang zwischen dem Bahndrehimpuls ℓ und dem dazugehörigen magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}_\ell$, beziehungsweise dem Spin \mathbf{s} und dessen magnetischem Moment $\boldsymbol{\mu}_s$ (siehe auch Abbildung 6.21) ist

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m_e} \mathbf{s} \quad (6.5.2)$$

$$\boldsymbol{\mu}_\ell = -g_\ell \frac{e}{2m_e} \boldsymbol{\ell} \quad (6.5.3)$$

wobei

$$g_\ell = 1 \quad g_s = 2.0023 \quad (6.5.4)$$

ist. Der Wert von g_ℓ ist wie erwartet. Der Wert von g_s ist überraschend:

- Das magnetische Moment ist etwa doppelt so gross wie aus dem Kreisstromargument zu erwarten gewesen wäre. Dies ist ein quantenmechanischer Effekt.

- Die Abweichung von 2.0000 ist ein quantenelektrodynamischer Effekt und durch Messungen auf viele Nachkommastellen bestätigt. Die Quantenelektrodynamik verknüpft die spezielle Relativitätstheorie mit der Quantenmechanik.

Das magnetische Moment des Elektronenspins kann mit dem Bohrschen Magneton ausgedrückt werden

$$\mu_{s,z} = \pm 1.00116 \mu_{Bohr} \quad (6.5.5)$$

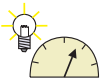
Das Verhältnis zwischen Drehimpuls und magnetischem Moment heisst gyromagnetisches Verhältnis $\gamma = \frac{|\mu|}{|\ell|}$. Das gyromagnetische Verhältnis für den Bahndrehimpuls und den Spin ist

$$\gamma_{\ell} = \frac{1}{2} \frac{e}{m_e} \quad (6.5.6)$$

$$\gamma = 1.00116 \frac{e}{m_e} \quad (6.5.7)$$

Der Spin kann zum Beispiel mit dem Stern-Gerlach-Versuch nachgewiesen, siehe Abbildung 6.19.

6.5.2. Feinstruktur und Ein-Elektronen-Atome



Versuch zur Vorlesung:

Natrium: Feinstruktur der D-Linie (Versuchskarte AT-48)

Wenn man die Natrium-D-Linie untersucht, findet man dass diese in ein Dublett aufgespalten ist. Diese Aufspaltung nennt man auch *Feinstruktur*. Sie entsteht, weil der Spin und der Bahndrehimpuls wechselwirken.

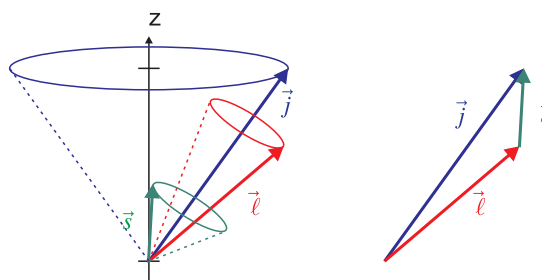


Abbildung 6.22.: Spin-Bahn-Kopplung

Abbildung 6.22 zeigt eine Skizze der Spin-Bahn-Kopplung. Der Drehimpuls \mathbf{l} und der Spin \mathbf{s} bilden zusammen den *Gesamtdrehimpuls* \mathbf{j} .

$$|\mathbf{j}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad (6.5.8)$$

mit $|j| = |\ell \pm s|$.

Wir betrachten ein p -Elektron mit der Bahndrehimpulsquantenzahl $\ell = 1$ und der Spinquantenzahl $s = \frac{1}{2}$.

$$j = \frac{3}{2} \quad |j| = \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2}} \hbar = \frac{\sqrt{15}}{2} \hbar \quad (6.5.9)$$

$$j = \frac{1}{2} \quad |j| = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \quad (6.5.10)$$

Wenn der Bahndrehimpuls verschwindet, wenn seine Quantenzahl $\ell = 0$ ist, wird die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses gleich der Quantenzahl des Spins $j = s$. Die magnetische Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses, die die Richtungsquantisierung darstellt, ist

$$j_z = m_j \hbar \quad m_j = -j \dots -j \text{ für } j \in \mathbb{Z} \quad (6.5.11)$$

Wie beim Bahndrehimpuls und dem Spin gehört zu jedem *Gesamtdrehimpuls* \mathbf{j} ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu}_j$. Für optische Übergänge gilt die Auswahlregel: $\Delta j = 0, \pm 1$, wobei der Übergang $j = 0 \rightarrow j = 0$ verboten ist.

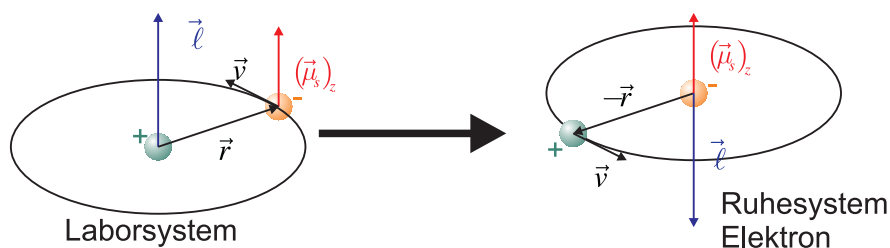


Abbildung 6.23.: Spin-Bahnkopplung nach Bohr

Zur Berechnung der Spin-Bahn-Aufspaltung im Magnetfeld betrachtet man das Atom im Ruhesystem des Elektrons. Nach *Biot-Savart* ist das Magnetfeld der Kernladung $+Ze$

$$\mathbf{B}_\ell = +\frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} [\boldsymbol{\nu} \times (-\mathbf{r})] = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} \boldsymbol{\nu} \times \mathbf{r} \quad (6.5.12)$$

wobei $\boldsymbol{\ell} = \mathbf{r} \times m_0 \boldsymbol{\nu} \Rightarrow -\boldsymbol{\ell} = m_0 \boldsymbol{\nu} \times \mathbf{r}$ verwendet wurde. Also ist das Magnetfeld

$$\mathbf{B}_\ell = \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} \frac{\boldsymbol{\ell}}{m_0} \quad (6.5.13)$$

Der Spin des Elektrons präzediert um \mathbf{B}_ℓ .

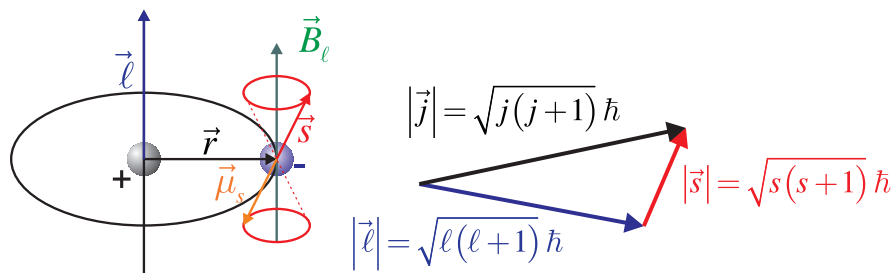


Abbildung 6.24.: Spinpräzession. Links Skizze, rechts Vektoraddition

Nach Gleichung (6.5.2) ist das magnetische Moment eines Spins $\boldsymbol{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m_e} \mathbf{s}$. Setzt man dies in die Gleichung für die Lageenergie eines magnetischen Moments in einer magnetischen Induktion $E_{\ell,s} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$ ein, erhält man

$$E_{\ell,s} = - \left(-g_s \frac{e}{2m_e} \mathbf{s} \right) \cdot \mathbf{B} = g_s \frac{e}{2m_e} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}) \quad (6.5.14)$$

Wenn man $g_s = 2$ setzt, erhält man mit Gleichung (6.5.13)

$$E_{\ell,s} = 2 \frac{e}{2m_e} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}) = \frac{Ze^2 \mu_0}{4\pi m_e^2 r^3} (\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\ell}) \quad \text{Achtung: Falsch!} \quad (6.5.15)$$

Eine genaue relativistische Betrachtung sowie experimentelle Daten zeigen, dass die Gleichung (6.5.15) um einen Faktor 1/2 zu falsch ist. Llewellyn Thomas entdeckte während seiner Doktorarbeit, dass bei der Rücktransformation aus dem mitrotierenden Koordinatensystem ins Laborsystem die relativistische Zeitdilatation berücksichtigt werden muss [Tho26]. Seine Argumentation (im cgs-System!) war wie folgt:

Das Elektron präzediert um das externe Magnetfeld mit $\frac{e}{m_0 c} \mathbf{H}$. Das Elektron bewegt sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} durch das elektrische Feld des \mathbf{E} des Kerns, was nach Maxwell zu einem Magnetfeld

$$\mathbf{H} = \frac{1}{c} \mathbf{E} \times \mathbf{v}$$

führt. Die Präzessionswinkelgeschwindigkeit ist dann

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{e}{m_0 c^2} \mathbf{E} \times \mathbf{v} = \frac{e}{m_0 c} \mathbf{H}$$

Diese Gleichung ist falsch. Das Elektron erfährt eine Beschleunigung \mathbf{a} . Man muss eine Lorentz-Transformation mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} + \mathbf{a} dt$ verwenden, sowie beachten, dass der Spin zur Zeit $t + dt$ gedreht ist. Also hat man nach Thomas eine Geschwindigkeit $\mathbf{a} dt$ und eine Rotation $(1/2c^2) \mathbf{v} \times \mathbf{a} dt$ zu beachten. Die Präzession wird dann in erster Näherung durch

$$\boldsymbol{\omega}_{Thomas} = \frac{e}{m_0 c^2} \mathbf{E} \times \mathbf{v} - \frac{1}{2c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{a}$$

Nun ist die Beschleunigung durch

$$\mathbf{a} = -\frac{e}{m_0} \mathbf{E}$$

gegeben. Also ist die Präzessionswinkelgeschwindigkeit

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\omega}_{Thomas} &= \frac{e}{m_0 c^2} \mathbf{E} \times \mathbf{v} - \frac{1}{2c^2} \mathbf{v} \times \left(-\frac{e}{m_0} \mathbf{E} \right) \\ &= \frac{e}{m_0 c^2} \mathbf{E} \times \mathbf{v} + \frac{e}{2m_0 c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} = \frac{e}{2m_0 c} \mathbf{H} \quad (6.5.16)\end{aligned}$$

Aus der Argumentation von Thomas folgt, dass Gleichung (6.5.15) mit dem Faktor $\frac{1}{2}$, dem aus der relativistischen Betrachtung folgenden Thomasfaktor korrigiert werden muss. Wir haben also für die Energie

$$E_{\ell,s} = \frac{Ze^2 \mu_e}{8\pi m_e^2 r^3} (\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\ell}) \quad (6.5.17)$$

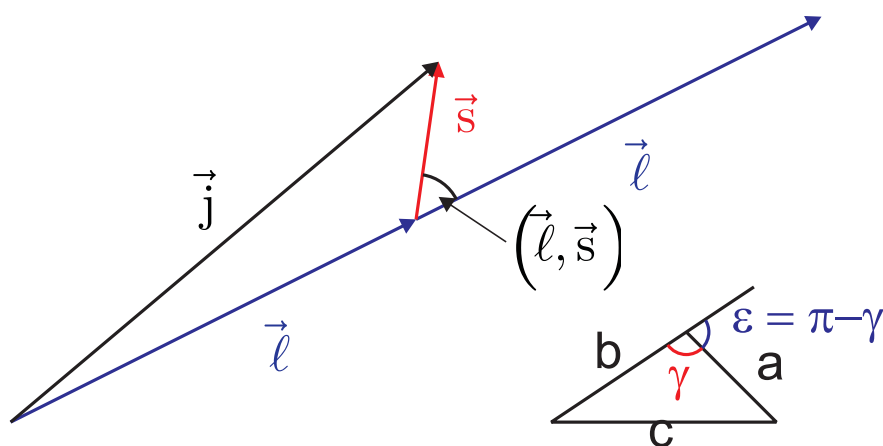


Abbildung 6.25.: Beziehung zwischen \mathbf{j} , $\boldsymbol{\ell}$ und \mathbf{s} nach dem *Cosinus-Satz*.

Aus dem *Cosinus-Satz* für beliebige Dreiecke (siehe Abbildung 6.25)

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos \gamma \quad (6.5.18)$$

erhalten wir mit der Winkelidentität

$$\gamma = \pi - \epsilon \quad \implies \quad \cos \gamma = -\cos \epsilon \quad (6.5.19)$$

und

$$\angle(a, b) = \epsilon \quad (6.5.20)$$

schliesslich

$$|\mathbf{j}|^2 = |\boldsymbol{\ell}|^2 + |\mathbf{s}|^2 + 2|\boldsymbol{\ell}||\mathbf{s}| \cos(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}) \quad (6.5.21)$$

Gleichung (6.5.17) mit dem Zwischenwinkel zwischen $\boldsymbol{\ell}$ und \mathbf{s} kann also auch

$$E_{\ell,s} = \frac{a}{\hbar^2} |\boldsymbol{\ell}||\mathbf{s}| \cos(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}) \quad \text{mit } a = \frac{Ze^2 \mu_0 \hbar^2}{8\pi m_e^2 r^3} \quad (6.5.22)$$

geschrieben werden. Andererseits ist mit Gleichung (6.5.21)

$$E_{\ell,s} = \frac{a}{2\hbar^2} [|\mathbf{j}|^2 - |\mathbf{l}|^2 - |\mathbf{s}|^2] = \frac{a}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \quad (6.5.23)$$

Setzt man in Gleichung (6.5.23) $\ell = 1$, $s = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$ oder $j = \frac{1}{2}$, erhält man die in der Abbildung 6.26 gezeigten Aufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung.

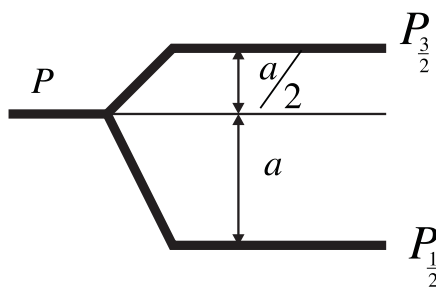


Abbildung 6.26.: p-Aufspaltung nach Gleichung (6.5.23) .

Der Radius r in der Konstanten a in Gleichung (6.5.22) ist r_n , der Radius der n -ten Bohrschen Bahn. Für diese Bahn gilt

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2 n^2}{Ze^2 m_e} \quad (6.5.24)$$

und damit

$$a \propto \frac{Z^4}{n^6}$$

Da es in der Quantenphysik keine festen Bahnen gibt, muss r^{-3} durch den mit der Wellenfunktion gewichteten Wert

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int_{\text{Volumen}} \frac{|\psi|^2}{r^3} dV \quad (6.5.25)$$

ersetzt werden. Man erhält so

$$a \propto \frac{Z^4}{n^3 \ell \left(\ell + \frac{1}{2} \right) (\ell + 1)} \quad (6.5.26)$$

6.5.2.1. Elektronenspin-Resonanz

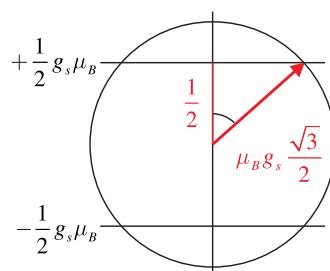


Abbildung 6.27.: Elektronenspinresonanz

Die präzedierenden Elektronenspins (Skizze in Abbildung 6.27) wechselwirken besonders stark mit Licht, wenn dieses in Resonanz mit der Präzessionsfrequenz ist. Die Länge eines Spins ist

$$|\mathbf{s}| = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \approx 0,81 \quad (6.5.27)$$

Dieser steht dann im Winkel α zum Magnetfeld.

$$\cos \alpha = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} = 54.73^\circ \quad (6.5.28)$$

Das magnetische Moment eines Spins in Einheiten des Bohrschen Magnetons μ_B ist

$$\mu_s = \sqrt{s(s+1)}\mu_B \cdot g_s \quad (6.5.29)$$

wobei seine z -Komponente entlang des Magnetfeldes durch

$$\mu_{s,z} = \pm \frac{1}{2}g_s\mu_B \quad (6.5.30)$$

gegeben ist. Die beiden möglichen Niveaus haben den Energieunterschied

$$\Delta E = g_s\mu_B B_0 \quad (6.5.31)$$

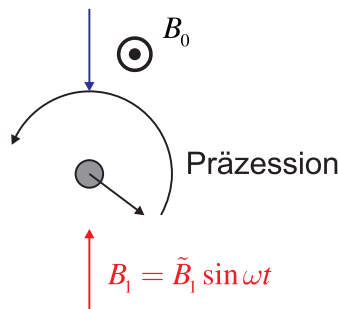


Abbildung 6.28.: Situation von oben gesehen

Übergänge treten auf, wenn die Energie des Lichtes dem Energieunterschied der beiden Spinzustände entspricht.

$$\Delta E = h\nu = g_s \mu_B B_0 \tag{6.5.32}$$

oder

$$\nu = 2.806 \cdot 10^{10} \cdot B_0 \text{ Hz T}^{-1} \tag{6.5.33}$$

Die Präzessionswinkelgeschwindigkeit (Skizze in Abbildung 6.28) ist

$$\omega_\ell = \frac{|\boldsymbol{\mu}| |\mathbf{B}_0|}{|\mathbf{L}|} = \frac{|\mathbf{M}|}{|\mathbf{L}|} = \gamma B_0 \tag{6.5.34}$$

mit einem von den atomaren Zuständen abhängigen Proportionalitätsfaktor γ .

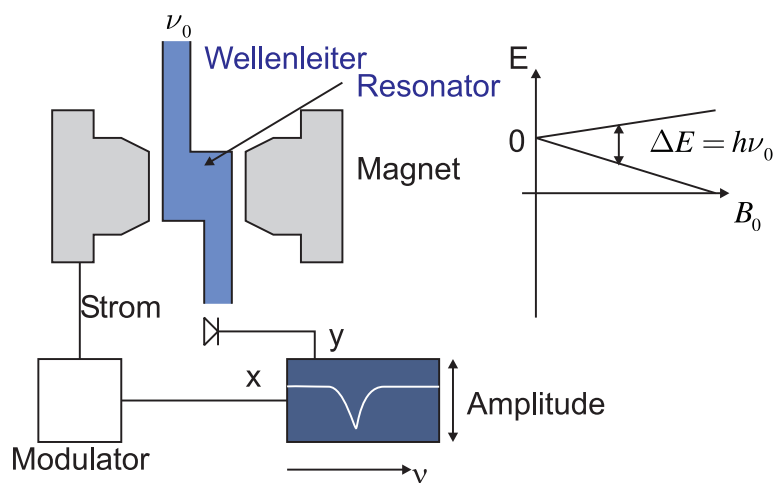


Abbildung 6.29.: Elektronen-Spin-Resonanz: Aufbau

Abbildung 6.29 zeigt den Aufbau einer *ESR-Apparatur*. Die Resonanz der Mikrowellen mit den Spins im Magnetfeld bewirkt einen Abfall des Signals an der Detektionsdiode.

6.5.3. Zeemann-Effekt



Versuch zur Vorlesung:

Normaler Zeeman-Effekt: Berechnung von e/m (Versuchskarte AT-14)

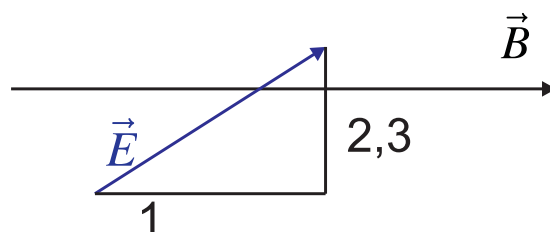


Abbildung 6.30.: Zeemann-Effekt klassisch

Die Wechselwirkung der Spins und der Bahndrehimpulse mit der magnetischen Induktion bewirkt eine Aufspaltung der Energieniveaus im Magnetfeld.

Eine lineare elektromagnetische Schwingung schräg zum \mathbf{B} -Feld kann in drei Komponenten aufgeteilt werden. Diese drei Polarisationskomponenten ergeben wieder die ursprüngliche elektromagnetische Schwingung. Die Polarisationskomponenten sind in Abbildung 6.30 gezeigt:

1. eine lineare Schwingung parallel zu \mathbf{B}_0 ,
2. eine linkszirkulare Schwingung
3. und rechtszirkulare Schwingung.

Die magnetische Induktion \mathbf{B} beeinflusst die lineare Schwingung nicht. Die zirkularen Schwingungen (linkszirkular) und (rechtszirkular) beschleunigen oder bremsen die Umlauffrequenz der Elektronen auf ihren Bahnen. Die Frequenzänderung wird die *Larmor-Frequenz* genannt. Sie ist

$$\Delta\omega = \omega_L = \frac{1}{2} \cdot \frac{e}{m_e} B_0 = \frac{\mu_B}{\hbar} B_0 \quad (6.5.35)$$

Beim Bahndrehungspuls ist $g = 1$.

Im Atom ist die lautet die Identität zwischen Coulombkraft und Zentripetalkraft

$$m_e \omega_0^2 \mathbf{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \mathbf{r} \quad (6.5.36)$$

Dazu kommt noch die Lorentz-Kraft mit den x , y und z -Komponenten

$$\begin{aligned} (a) \quad m_e \ddot{x} + m_e \omega_0^2 x - e \dot{y} B_0 &= 0 \\ (b) \quad m_e \ddot{y} + m_e \omega_0^2 y + e \dot{x} B_0 &= 0 \\ (c) \quad m_e \ddot{z} + m_e \omega_0^2 z &= 0 \end{aligned} \quad (6.5.37)$$

Für die z -Komponente folgt aus Gleichung (6.5.37) (c), dass $z = z_0 \exp(i\omega_0 t)$ konstant bleibt. Wir setzen $u = x + iy$ und $v = x - iy$, oder $x = \frac{u+v}{2}$ und $y = \frac{u-v}{2i}$ und erhalten aus Gleichung (6.5.37) (a) und (b), den Gleichungen für die x - und die y -Komponenten

$$\begin{aligned} (a) \quad & \frac{m_e}{2} (\ddot{u} + \ddot{v}) + \frac{m_e}{2} \omega_0^2 (u + v) - \frac{e}{2i} (\dot{u} - \dot{v}) B_0 = 0 \quad | \cdot 2i \\ (b) \quad & \frac{m_e}{2i} (\ddot{u} - \ddot{v}) + \frac{m_e}{2i} \omega_0^2 (u - v) + \frac{e}{2} (\dot{u} + \dot{v}) B_0 = 0 \quad | \cdot 2i \end{aligned} \quad (6.5.38)$$

Weiter formt man um:

$$\begin{aligned} (a) \quad & m_e i (\ddot{u} + \ddot{v}) + m_e i \omega_0^2 (u + v) - e (\dot{u} - \dot{v}) B_0 = 0 \quad | \cdot (-i) \\ (b) \quad & m_e (\ddot{u} - \ddot{v}) + m_e \omega_0^2 (u - v) + i e (\dot{u} + \dot{v}) B_0 = 0 \end{aligned} \quad (6.5.39)$$

$$(a) \quad m_e (\ddot{u} + \ddot{v}) + m_e \omega_0^2 (u + v) + i e (\dot{u} - \dot{v}) B_0 = 0 \quad (6.5.40)$$

$$\begin{aligned} (a) + (b) \quad & 2m_e \ddot{u} + 2m_e \omega_0^2 u + 2ie \dot{u} \cdot B_0 = 0 \\ (a) - (b) \quad & 2m_e \ddot{v} + 2m_e \omega_0^2 v - 2ie \dot{v} \cdot B_0 = 0 \end{aligned} \quad (6.5.41)$$

Die Lösungen dieser Gleichungssysteme sind

$$u = u_0 \exp \left[i \left(\omega_0 - \frac{eB_0}{2m} \right) t \right] \quad (6.5.42)$$

$$v = v_0 \exp \left[i \left(\omega_0 + \frac{eB_0}{2m} \right) t \right] \quad (6.5.43)$$

Eingesetzt erhalten wir die Bedingung

$$\begin{aligned} m_e \left(- \left(\omega_0 - \frac{eB_0}{2m} \right)^2 \right) + \left(2m_e \omega_0^2 + 2ie \left(i \left(\omega_0 - \frac{eB_0}{2m_e} \right) \right) \right) B_0 &= 0 \\ -m\omega_0^2 - m \frac{e^2 B_0^2}{4m_e^2} + 2m_e \omega_0 \frac{eB_0}{2m} + m\omega_0^2 - e\omega_0 B_0 + \frac{e^2 B_0^2}{2m_e} &= 0 \\ -\frac{e^2 B_0^2}{4m_e} + \frac{eB_0 \omega_0}{1} - e\omega_0 B_0 + \frac{e^2 B_0^2}{2m} &= 0 \\ -\frac{e^2 B_0^2}{4m_e} + \frac{e^2 B_0^2}{2m_e} &= 0 \end{aligned}$$

Aus der letzten Gleichung liest man ab, dass diese Gleichung nur im Grenzfall $B_0 \rightarrow 0$, oder wenn $e^2 B_0^2 \ll m_e$ ist, eine Lösung hat. Die Frequenz spaltet sich dann wie folgt auf:

$$\omega \rightarrow \omega_0 \pm \Delta\omega \quad (6.5.44)$$

mit

$$\Delta\omega = \frac{eB_0}{2m_e} \quad (6.5.45)$$

Dies entspricht einer Frequenz

$$\Delta\nu = \frac{\delta\omega}{2\pi} = \frac{1}{4\pi} \frac{eB_0}{m_e} = 1.410^{10} \text{ Hz} \hat{=} 0.465 \text{ cm}^{-1} \quad (6.5.46)$$

Der klassische Zeemaneffekt bewirkt eine konstante Frequenzverschiebung.

Es gibt ein Zeemann-Triplett mit

$$\Delta E = g_j \mu_B B_0 \quad (6.5.47)$$

- Wenn s und ℓ nicht koppeln, haben wir den *normalen Zeemaneffekt*.
- Wenn s und ℓ koppeln, haben wir den *anomalen Zeemaneffekt*.

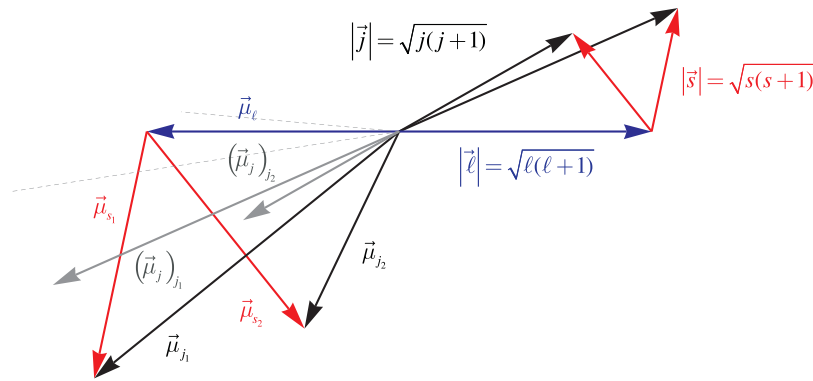


Abbildung 6.31.: Magnetisches Moment des *Gesamtspins*

Da der g -Faktor des Spins und des Bahndrehimpulses unterschiedlich sind, ist das magnetische Moment des Gesamtdrehimpulses nicht antiparallel zum *Gesamtdrehimpuls*, sondern präzediert um die Richtung des Gesamtdrehimpulses. Der *Gesamtdrehimpuls* \mathbf{j} ist parallel zur externen magnetischen Induktion \mathbf{B} . Da die Präzessionsfrequenz enorm hoch ist, kann durch eine Messung nur die Projektion von μ_j auf die Richtung von \mathbf{j} bestimmt werden, $(\mu_j)_j$. Mit $\alpha = \angle(\ell, \mathbf{j})$ und $\beta = \angle(\mathbf{s}, \mathbf{j})$ können wir schreiben

$$\begin{aligned} \left| (\mu_j)_j \right| &= |\mu_\ell| \cos(\alpha) + |\mathbf{s}| \cos(\beta) \\ &= \mu_B \left(g_\ell \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \cos(\alpha) + g_s \sqrt{s(s+1)} \cos(\beta) \right) \\ &= \mu_B \left(\sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \cos(\alpha) + 2 \sqrt{s(s+1)} \cdot \cos(\beta) \right) \end{aligned} \quad (6.5.48)$$

Aus Abbildung 6.31 kann man mit dem Cosinussatz $a^2 = b^2 + c^2 - 2bc \cos(\angle b, c)$ und $(b^2 + c^2 - a^2)(2bc)^{-1} = \cos(\angle b, c)$ ablesen

$$\begin{aligned}\cos(\alpha) &= \cos(\angle(\boldsymbol{\ell}, \boldsymbol{j})) = \frac{|\boldsymbol{\ell}|^2 + |\boldsymbol{j}|^2 - |\boldsymbol{s}|^2}{2|\boldsymbol{\ell}||\boldsymbol{j}|} \\ &= \frac{\ell(\ell+1) + j(j+1) - s(s+1)}{2\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{j(j+1)}}\end{aligned}\quad (6.5.49)$$

$$\begin{aligned}\cos(\beta) &= \cos(\angle(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{j})) = \frac{|\boldsymbol{s}|^2 + |\boldsymbol{j}|^2 - |\boldsymbol{\ell}|^2}{2|\boldsymbol{s}||\boldsymbol{j}|} \\ &= \frac{s(s+1) + j(j+1) - \ell(\ell+1)}{2\sqrt{s(s+1)}\sqrt{j(j+1)}}\end{aligned}\quad (6.5.50)$$

Weiter bekommen wir

$$\begin{aligned}\left|(\boldsymbol{\mu}_j)_j\right| &= \mu_B \left(\sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \cos(\alpha) + 2\sqrt{s(s+1)} \cos(\beta) \right) \\ &= \mu_B \left(\sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \frac{\ell(\ell+1) + j(j+1) - s(s+1)}{2\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{j(j+1)}} \right. \\ &\quad \left. + 2\sqrt{s(s+1)} \frac{s(s+1) + j(j+1) - \ell(\ell+1)}{2\sqrt{s(s+1)}\sqrt{j(j+1)}} \right) \\ &= \mu_B \left(\frac{\ell(\ell+1) + j(j+1) - s(s+1)}{2\sqrt{j(j+1)}} + 2 \frac{s(s+1) + j(j+1) - \ell(\ell+1)}{2\sqrt{j(j+1)}} \right) \\ &= \mu_B \frac{\ell(\ell+1) + j(j+1) - s(s+1) + 2(s(s+1) + j(j+1) - \ell(\ell+1))}{2\sqrt{j(j+1)}} \\ &= \mu_B \frac{3j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2\sqrt{j(j+1)}}\end{aligned}\quad (6.5.51)$$

Mit der Definition

$$\left|(\boldsymbol{\mu}_j)_j\right| = g_j \sqrt{j(j+1)} \mu_B \quad (6.5.52)$$

bekommen wir für den

***g*-Faktor des Gesamtdrehimpulses**

$$\begin{aligned}g_j &= \frac{3j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)} \\ g_j &= 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}\end{aligned}\quad (6.5.53)$$

Das messbare magnetische Moment des Gesamtdrehimpulses ist dann

$$(\boldsymbol{\mu}_j) = -\frac{g_j \mu_B}{\hbar} \boldsymbol{j} \quad (6.5.54)$$

Mit Gleichung (6.5.54) bekommen wir die folgende Tabelle

ℓ	0	1	1	2	2	3	3
s	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
j	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$
g_j	2	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{4}{5}$	$\frac{6}{5}$	$\frac{6}{7}$	$\frac{8}{7}$

Tabelle 6.8.: g_j als Funktion von ℓ , s und j

Zur quantenmechanischen Behandlung des Zeemann-Effekts benötigen wir den Hamiltonoperator im Magnetfeld. Wir vermuten, dass

$$\hat{H}_{frei} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (6.5.55)$$

$$\hat{H}_B = \hat{H}_{frei} - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \quad (6.5.56)$$

sei. Eine Rechnung mit kanonischen Impulsen ergibt mit den Ersetzungen $\mathbf{p} \rightarrow (\hat{\mathbf{p}} + e \mathbf{A})$ und $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} + e \mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \quad (6.5.57)$$

$$= \frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{\mathbf{p}}(e\mathbf{A}) + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{p}}) + e^2\mathbf{A}^2) + V(\mathbf{r}) \quad (6.5.58)$$

$$= \hat{H}_{frei} + \frac{e}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2m_e} \mathbf{A}^2 \quad (6.5.59)$$

Setzen wir den Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{grad}$ ein, erhalten wir

$$\hat{H}_B = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \mathbf{grad}^2 - \frac{\hbar e}{2m_0} \mathbf{A} \mathbf{grad} - \frac{\hbar e}{2m_0} \mathbf{grad} \mathbf{A} + \frac{e^2}{2m_0} \mathbf{A}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (6.5.60)$$

Denken Sie daran dass in dieser abgekürzten Schreibweise $\mathbf{grad} \mathbf{A}$ kurz für $\mathbf{grad}(\mathbf{A}\psi)$ ist. Ist die magnetische Induktion in die z -Richtung ausgerichtet, also $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$, ist ein mögliches Vektorpotential

$$\mathbf{A} = \frac{B_z}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.5.61)$$

Damit lautet Gleichung (6.5.60)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + B_z \frac{e\hbar}{2m_0 i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B_z^2}{8m_0} (x^2 + y^2) + V \left(\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right) \right] \psi = E\psi \quad (6.5.62)$$

Wenn das Vektorpotential (Einheit T m) vom Betrage nach viel kleiner ist als der Impuls, also $e|\mathbf{A}| \ll |\mathbf{p}|$ kann der Term mit $(e\mathbf{A})^2$ oder der Term mit $(x^2 + y^2)$ vernachlässigt werden. Dies ist gleichbedeutend mit der Aussage, dass der Diamagnetismus vernachlässigt wird. Der *Zeemaneffekt* kann dann durch ein Potential ausgedrückt werden

Nach Gleichung (6.3.5) und Gleichung (6.3.10c) ist

$$\frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Wenn nun das Potential $V(r)$ kugelsymmetrisch ist, lautet Gleichung (6.5.62)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) + \frac{eB_z \hbar}{2m_0 i} \frac{\partial}{\partial \phi} + V(r) \right] \psi = E\psi \quad (6.5.63)$$

Gleichung (6.5.63) kann wie das Wasserstoffatom im magnetfeldfreien Raum durch den Ansatz (6.3.13) gelöst werden. Dies führt zu Gleichung (6.3.101)

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} P_\ell^m(\cos \vartheta) R_{n,\ell}(r)$$

Die Energieeigenwerte sind aber

$$E = E_n^0 + B_z \frac{e\hbar}{2m_0} \cdot m \quad \text{mit } -\ell \leq m \leq \ell \quad (6.5.64)$$

Hier ist E_n^0 die Energie des n -ten Niveaus im magnetfeldfreien Raum.

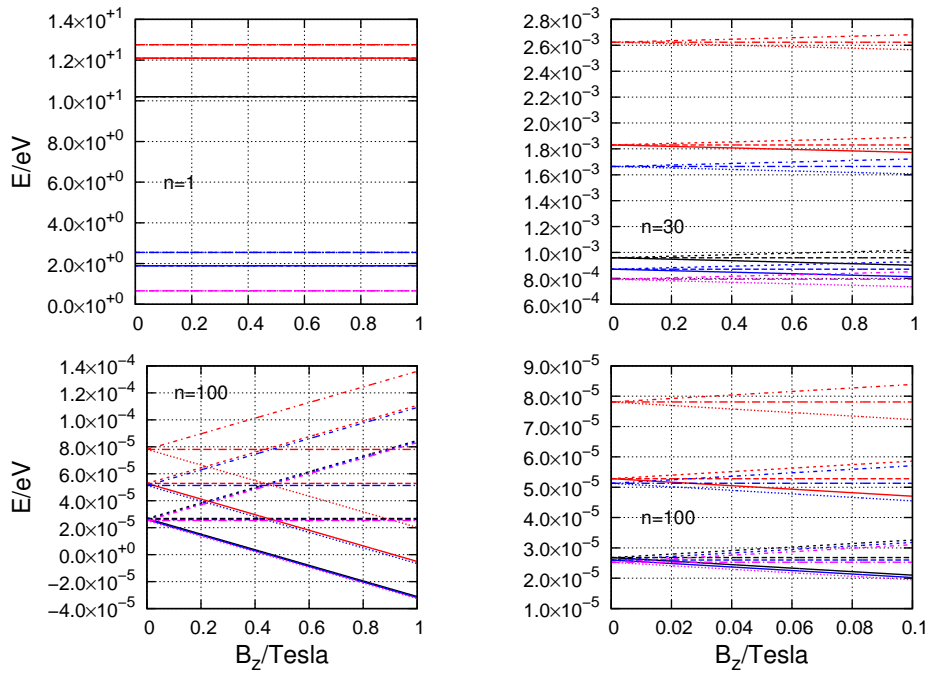


Abbildung 6.32.: Zeemann-Aufspaltung für Übergänge $n + 1 \rightarrow n$, $n + 2 \rightarrow n$, $n + 2 \rightarrow n + 1$, $n + 3 \rightarrow n$, $n + 3 \rightarrow n + 1$ und $n + 3 \rightarrow n + 2$.

Die Auswahlregeln gelten auch bei den Zeemann-aufgespaltenen Linien. Die Dipol-Auswahlregeln erlauben nur

$$\Delta m = 0, \pm 1 \quad (6.5.65)$$

Von allen Elementen zeigen nur Ca und Yb den normalen Zeemann-Effekt, alle anderen Atome zeigen den anomalen Zeemann-Effekt. Bei diesen muss der Spin des Elektrons mit berücksichtigt werden. Die dazugehörige Schrödingerleichung, die *Pauli-Gleichung*, ist

$$\hat{H}_{B,a}\psi = \left[\frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (6.5.66)$$

Wird die Spin-Bahn-Kopplung auch noch berücksichtigt, bekommt man

$$\begin{aligned} & \hat{H}_{B,a,sb}\psi \\ &= \left[\frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} + \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_0^2 r^3} \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \right] \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \end{aligned} \quad (6.5.67)$$

6.5.4. Paschen-Back-Effekt

Bei der Spektroskopie von Atomen in hohen Magnetfeldern spricht man *Paschen-Back-Effekt*. Dieser tritt auf, wenn die Feinstrukturaufspaltung durch die Kopplung von magnetischen Spinmomenten mit Bahndrehimpulsmomenten nicht mehr wesentlich grösser ist als die Kopplung der Spins oder der Bahndrehmomente an

das externe Magnetfeld. Durch das hohe Magnetfeld wird die Spin-Bahn-Kopplung aufgelöst, das heisst ℓ und s koppeln nicht mehr. Der *Gesamtdrehimpuls* \mathbf{j} existiert nicht mehr. Das Spektrum vereinfacht sich. Was bleibt ist die Magnetfeldaufspaltung. Die magnetische Zusatzenergie ist nun

$$V_{m_s, m_\ell} = (m_\ell + 2m_s) \mu_B B_0 \tag{6.5.68}$$

Beachten Sie, dass der Faktor 2 vor der Spinkomponente der g -Faktor ist. Die Energieaufspaltung ist

$$\Delta E = (\Delta m_\ell + 2\Delta m_s) \mu_B B_0 \tag{6.5.69}$$

Abbildung 6.33 gibt eine Skizze der Elektronenniveaus der Natrium-D-Linien.

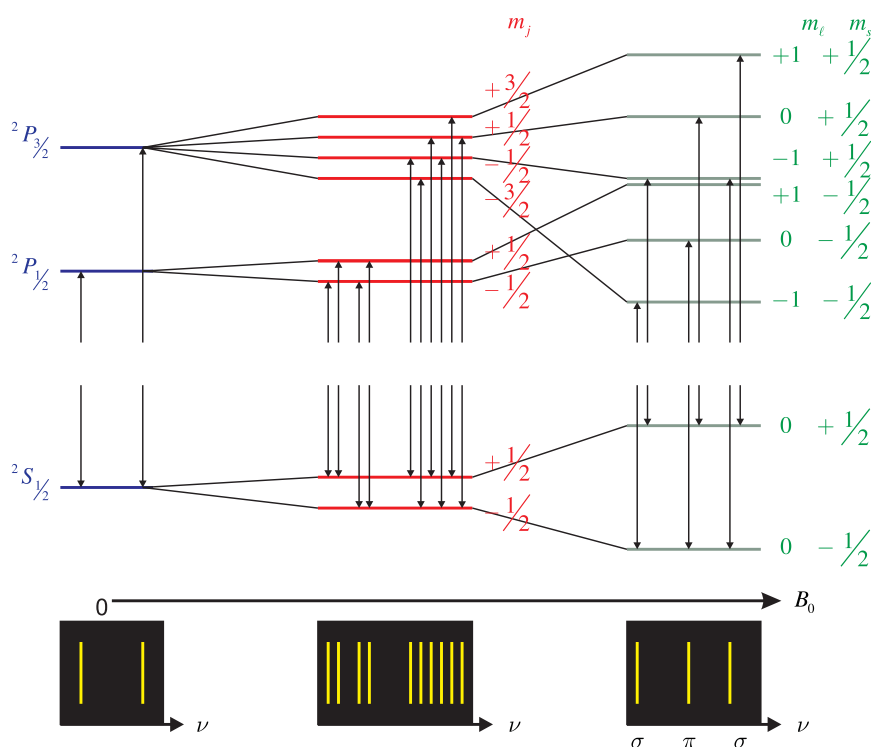


Abbildung 6.33.: Paschen-Back-Effekt bei starken Magnetfeldern.

6.6. Atome im elektrischen Feld

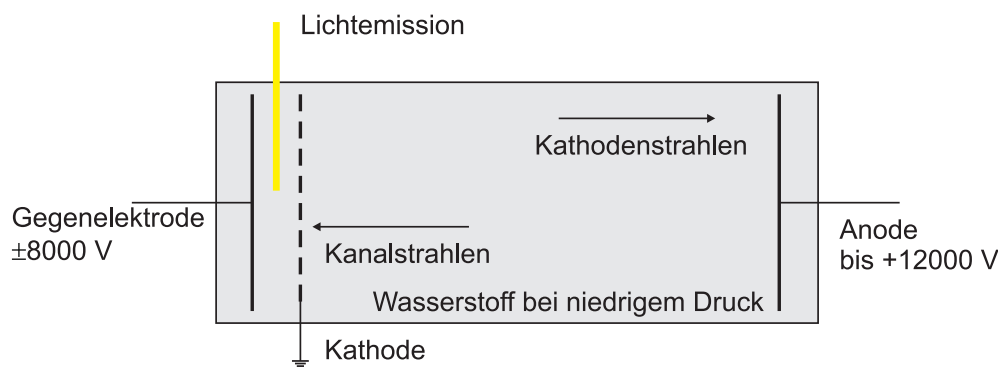


Abbildung 6.34.: Apparatur zur Beobachtung des Starkeffektes.

In der Apparatur nach Abbildung 6.34 werden Elektronen von der Kathode zur Anode mit Spannungen bis zu 12000 V beschleunigt. Diese Elektronen können das Hintergrundgas Wasserstoff ionisieren. Damit werden sie als „Kanalstrahlen“ zur Kathode hin beschleunigt. Durch die mechanische Trägheit treten sie durch die Kathode hindurch und werden neutralisiert, das heißt wieder mit einem Elektron versehen. Im starken elektrischen Feld zwischen Kathode und Gegenelektrode beobachtet man eine Aufspaltung der Spektrallinien, den *Starkeffekt*.

- Man beobachtet eine zu $|\mathbf{E}|$ proportionale Aufspaltung der $\ell \neq 0$ -Terme des Wasserstoffspektrums. Dieser Effekt wird der *lineare Starkeffekt*, genannt.
- Zusätzlich beobachtet man eine zu $|\mathbf{E}|^2$ proportionale Aufspaltung, den *quadratischen Starkeffekt*

Der Starkeffekt entsteht, weil das elektrische Feld \mathbf{E} in Atomen ein elektrisches Dipolmoment (Proportionalitätskonstante ist die Polarisierbarkeit α des Atoms) erzeugt.

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} \quad (6.6.1)$$

Dieser elektrische Dipol hat im externen elektrischen Feld \mathbf{E} die potentielle Energie:

$$E_{pot,el} = \frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{2} \alpha E^2 \quad (6.6.2)$$

Diese quadratische potentielle Energie führt in der Schrödingergleichung auf den quadratischen Starkeffekt. Um den linearen Starkeffekt zu verstehen werden die Methoden der Quantenmechanik benötigt.

6.6.1. Quadratischer Stark-Effekt

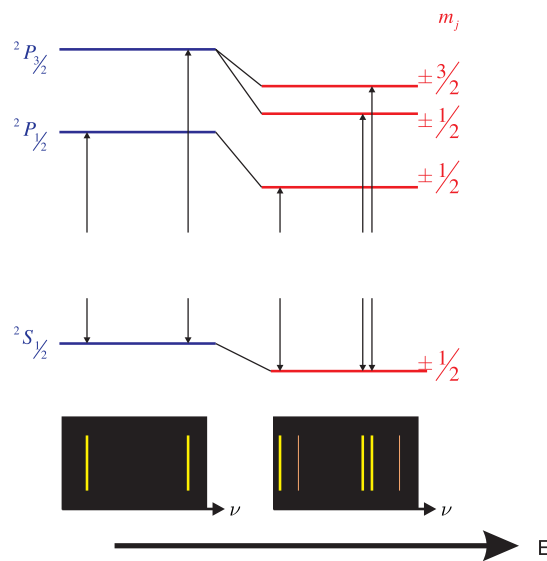


Abbildung 6.35.: Energieniveauschema des Natriumdubletts im elektrischen Feld.

Abbildung 6.35 zeigt in einem Jablonski-Diagramm den Stark-Effekt beim Na-Dublett mit den Übergängen ${}^2P_{3/2} \leftrightarrow {}^2S_{1/2}$ und ${}^2P_{1/2} \leftrightarrow {}^2S_{1/2}$. Im elektrischen Feld lautet der Hamiltonoperator für den Starkeffekt

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_s \tag{6.6.3}$$

wobei \hat{H}_0 der Hamiltonoperator des Atoms im feldfreien Raum und \hat{H}_s der im elektrischen Feld dazukommende Störterm ist.

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V(r) \tag{6.6.4}$$

Die Kraft auf ein Elektron im elektrischen Feld ist $-e \mathbf{E}$. Dies führt zu einer potentielle Energie der Störung $V_s = e \mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$. Diese Störung kann als Taylorreihe geschrieben werden:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_s = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 + \frac{1}{2} \lambda^2 \hat{H}_2 + \dots + \frac{1}{k!} \lambda^k \hat{H}_k \tag{6.6.5}$$

Für kleine Störungen kann man nach der ersten Ordnung abbrechen

$$\hat{H}_s = \lambda \hat{H}_1 \quad \text{mit } |\lambda| \ll 1 \tag{6.6.6}$$

Wir nehmen an, dass die Schrödingergleichung ohne den Störterm gelöst sei.

$$\hat{H}_0 \varphi_\nu = E_{\nu,0} \varphi_\nu \tag{6.6.7}$$

$E_{\nu,0}$ sei der ν -te Eigenwert. Der Index 0 deutet auf das ungestörte Problem. Wir nehmen weiter an, dass alle $E_{\nu,0}$ voneinander verschieden seien. Weiter nehmen wir

an, dass die resultierende Wellenfunktion eine Linearkombination der ursprünglichen Wellenfunktionen sei.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu=1}^{\infty} c_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) \quad (6.6.8)$$

Dies ist möglich, weil die Lösungen der ungestörten Schrödingergleichung ein vollständiges Funktionssystem bilden. Wir können also schreiben:

$$\hat{H}_0 \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) + \hat{H}_s \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) = E \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) \quad (6.6.9)$$

wobei

$$\hat{H}_0 \varphi_{\nu} = E_{\nu,0} \varphi_{\nu} \quad (6.6.10)$$

ist. Die Lösungen φ_{ν} sind normiert:

$$\int \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) dV = \delta_{\mu,\nu} \quad (6.6.11)$$

Dann sind die Matrixelemente des Hamiltonoperators der Störung

$$H_{s,\mu\nu} = \int \varphi_{\mu}^* \hat{H}_s \varphi_{\nu} dV \quad (6.6.12)$$

Gleichung (6.6.9) wird damit

$$\begin{aligned} \int \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \hat{H}_0 \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) dV + \int \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \hat{H}_s \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) dV \\ = E \int \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) dV \end{aligned} \quad (6.6.13)$$

Wir setzen Gleichung (6.6.10) in Gleichung (6.6.13) ein und erhalten

$$\begin{aligned} \int \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \sum_{\nu} c_{\nu} E_{\nu,0} \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) dV + \int \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \hat{H}_s \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) dV \\ = E \int \sum_{\nu} c_{\nu} \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) dV \end{aligned} \quad (6.6.14)$$

Diese Gleichung muss für jeden Index μ gelten, wobei die Normierung aus Gleichung (6.6.11) berücksichtigt werden muss

$$c_{\mu} E_{\mu,0} + \sum_{\nu} H_{s,\mu\nu} c_{\nu} = E c_{\mu}$$

oder

$$(E_{\mu,0} - E) c_{\mu} + \sum_{\nu} H_{s,\mu\nu} c_{\nu} = 0 \quad (6.6.15)$$

Wenn keine Störung vorhanden ist, ist $\lambda = 0$ und

$$c_{\nu,0} = \begin{cases} 1 & \text{für } \nu = \kappa \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.6.16)$$

wobei κ der Index des Ausgangszustandes sei, also

$$c_{0,\nu} = \delta_{\nu\kappa} \quad (6.6.17)$$

Damit ist die Reihenentwicklung

$$c_\nu = \delta_{\nu\kappa} + \lambda c_\nu^{(1)} + \lambda^2 c_\nu^{(2)} + \dots \quad (6.6.18)$$

Für die Energie bekommt man

$$E = E_{\kappa,0} + \lambda \epsilon^{(1)} + \lambda^2 \epsilon^{(2)} + \dots \quad (6.6.19)$$

Diese beiden Gleichungen kann man in Gleichung (6.6.14) einsetzen

$$\begin{aligned} & (E_{0,\mu} - E_{0,\kappa} - \lambda \epsilon^{(1)} - \lambda^2 \epsilon^{(2)} - \dots) (\delta_{\mu\kappa} + \lambda c_\mu^{(1)} + \lambda^2 c_\mu^{(2)} + \dots) \\ & + \sum_\nu \lambda H_{1,\mu\nu} (\delta_{\nu\kappa} + \lambda) c_\nu^{(1)} + \lambda^2 c_\nu^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (6.6.20)$$

Wir fordern nun, dass die Koeffizienten zu allen Potenzen von λ jeweils getrennt verschwinden. Für die nullte Potenz, die ungestörte Schrödingergleichung gilt $(E_{0,\mu} - E_{0,\kappa}) \delta_{\mu\kappa} = 0$, da entweder $\delta_{\mu\kappa} = 0$ ist oder die Koeffizienten sind gleich und die Klammer ist null.

Für die erste Potenz von λ erhalten wir

$$-\epsilon^{(1)} \delta_{\mu\kappa} + (E_{0,\mu} - E_{0,\kappa}) c_\mu^{(1)} + H_{1,\mu\kappa} = 0 \quad (6.6.21)$$

Wenn die Indizes gleich sind, also für $\mu = \kappa$, folgt aus Gleichung (6.6.21)

$$\epsilon^{(1)} = H_{1,\kappa\kappa} = \int \varphi_\kappa^* \hat{H}_1 \varphi_\kappa dV \quad (6.6.22)$$

oder

$$E = E_{0,\kappa} + H_{s,\kappa\kappa} \quad (6.6.23)$$

$H_{s,\kappa,\kappa}$ ist das Matrixelement, also eine Zahl und kein Operator. Für den Fall $\mu \neq \kappa$ erhält man aus Gleichung (6.6.21)

$$c_\mu^{(1)} = \frac{H_{1,\mu\kappa}}{E_{0,\kappa} - E_{0,\mu}} \quad (6.6.24)$$

Aus der Normierungsbedingung Gleichung (6.6.11) folgt, dass $c_\kappa^{(1)} = 0$ ist. Damit wird

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi_\kappa(\mathbf{r}) + \sum_{\mu \neq \kappa} \frac{H_{s,\mu\kappa}}{E_{0,\kappa} - E_{0,\mu}} \varphi_\mu(\mathbf{r}) \quad (6.6.25)$$

In 2. Ordnung erhalten wir

$$\epsilon^{(2)} = \sum_{\mu \neq \kappa} \frac{|H_{1,\mu\kappa}|^2}{E_{0,\kappa} - E_{0,\mu}} \quad (6.6.26)$$

Also ist

$$E = E_{0,\kappa} + H_{s,\kappa\kappa} + \sum_{\mu \neq \kappa} \frac{|H_{s,\mu\kappa}|^2}{E_{0,\kappa} - E_{0,\mu}} \quad (6.6.27)$$

Beim Wasserstoffatom folgt aus den Auswahlregeln, dass $H_{s,\kappa\kappa} = 0$ ist. Dann ist $V \approx \mathbf{E}$ und damit $H_s \approx \mathbf{E}^2$. Wasserstoff zeigt den *quadratischen Starkeffekt*.

6.6.2. Linearer Stark-Effekt

Den *linearen Starkeffekt* erhält man, wenn man entartete Zustände mit einer Multiplizität grösser eins betrachtet. Dann versagt das vorherige Verfahren. Wenn für zwei Indizes $\mu \neq \kappa$ die Energiedifferenz

$$E_{0,\kappa} - E_{0,\mu} = 0 \quad (6.6.28)$$

nennt man diese beiden Zustände entartete Zustände. Die Forderung

$$c_\nu^0 = \begin{cases} 1 & \text{für } \nu = \kappa \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.6.29)$$

kann man nicht erfüllen. Wir setzen

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} c_\nu^{(0)} \varphi_\nu(\mathbf{r}) + \text{Korrekturen} \quad (6.6.30)$$

Entartung

Dieses Gleichungssystem ist lösbar, wenn Determinante $\left| \cdot \cdot \cdot \right| = 0$ ist.

$$\begin{vmatrix} (E_{0,\kappa} - E + H_{s,1,1}) & H_{s,1,2} & \cdots & H_{s,1,N} \\ H_{s,2,1} & (E_{0,\kappa} - E + H_{s,2,2}) & \cdots & H_{s,2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{s,N,1} & \cdots & \cdots & (E_{0,\kappa} - E + H_{s,N,N}) \end{vmatrix} = 0 \quad (6.6.31)$$

Beispiel Wir betrachten den 1. angeregten Zustand von H mit $\varphi_{n,l,m}$. Die Hauptquantenzahl sei $n = 2$. Wir verwenden die folgenden Definitionen für ν

$$\nu = \begin{cases} 1 & \text{für } \ell = 0 \text{ und } m = 0 \\ 2 & \text{für } \ell = 1 \text{ und } m = 0 \\ 3 & \text{für } \ell = 1 \text{ und } m = 1 \\ 4 & \text{für } \ell = 1 \text{ und } m = -1 \end{cases} \quad (6.6.32)$$

und erhalten

$$\psi(\mathbf{r}) = c_1 \varphi_1(\mathbf{r}) + c_2 \varphi_2(\mathbf{r}) + c_3 \varphi_3(\mathbf{r}) + c_4 \varphi_4(\mathbf{r}) \quad (6.6.33)$$

mit

$$H_{s,\mu\nu} = \int \varphi_\mu^*(\mathbf{r}) e E_z \varphi_\nu(\mathbf{r}) dV \quad (6.6.34)$$

wobei das \mathbf{E} -Feld in die z -Richtung zeigt.

Nach den Auswahlregeln für optische Übergänge verschwinden alle $H_{s,\mu\kappa}$ bis auf $H_{s,1,2}$. Dieses Matrixelement hat den Wert

$$H_{s,1,2} = H_{s,2,1} = e E_{el} d \quad (6.6.35)$$

wobei E_{el} das elektrische Feld ist. Wir untersuchen den Fall mit $N = 4$ und erhalten

$$(E_{0,2} - E) c_1 + eE_{el} d c_2 = 0 \tag{6.6.36a}$$

$$e E_{el} d c_1 + (E_{0,2} - E) c_2 = 0 \tag{6.6.36b}$$

$$(E_{0,2} - E) c_3 = 0 \tag{6.6.36c}$$

$$(E_{0,2} - E) c_4 = 0 \tag{6.6.36d}$$

Aus den Gleichungen (6.6.36a) und (6.6.36b) folgt

$$\begin{vmatrix} E_{0,2} - E & e E_{el} d \\ e E_{el} d & E_{0,2} - E \end{vmatrix} = 0 \tag{6.6.37}$$

Die Energien sind

$$E_{\pm} = E_{0,2} \pm eE_{el}d \tag{6.6.38}$$

wobei für die Koeffizienten gilt

$$+ \Rightarrow c_1 = c_2 \tag{6.6.39}$$

$$- \Rightarrow c_1 = -c_2 \tag{6.6.40}$$

Aus den Gleichungen (6.6.36c) und (6.6.36d) erhalten wir

$$E_{0,2} = E \tag{6.6.41}$$

Dieser lineare Starkeffekt wird nur bei H beobachtet, da nur bei H ℓ entartet ist. Bei allen anderen Atomen sind die Energieniveaus zu $\ell \neq \ell'$ unterschiedlich.

6.7. Auswahlregeln

Wir betrachten ein Dipolmoment $\mathbf{p}_{el} = (p_x, p_y, p_z) = e(x, y, z)$. Zwischen zwei Wellenfunktionen ist das Dipolübergangsmatrixelement für die Komponente des Dipolmoments $p_x = e \cdot x$ in die x -Richtung definiert als

$$H_{s,mn} = \int \varphi_m^*(\mathbf{r}) p_x \varphi_n(\mathbf{r}) dV = e \int \varphi_m^*(\mathbf{r}) x \varphi_n(\mathbf{r}) dV \tag{6.7.1}$$

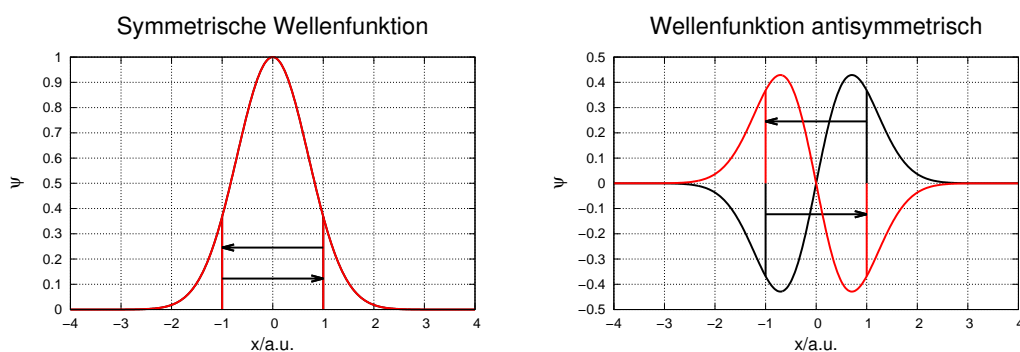


Abbildung 6.36.: Links: Transformation $x \rightarrow -x$ für symmetrische und, rechts, für antisymmetrische Wellenfunktionen

Abbildung 6.36 zeigt eine Skizze von symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen. Wie die Abbildung zeigt, geht eine symmetrische Wellenfunktion bei der Transformation $x \rightarrow -x$ in sich selber über, während eine antisymmetrische Funktion am Nullpunkt punktgespiegelt wird. Im Folgenden nutzen wir die Symmetrie der Wellenfunktionen aus, um die erlaubten Übergänge zu bestimmen.

6.7.1. Symmetrien beim harmonischen Oszillator

Beim harmonischen Oszillator ist die potentielle Energie proportional zu x^2 . Dann führt die Transformation $x \rightarrow -x$

$$x^2 \rightarrow (-x)^2 = x^2 \quad (6.7.2)$$

in sich selber über. Das heisst, das Potential des harmonischen Oszillators ist unverändert bei der Transformation $x \rightarrow -x$. Dann gilt für das Potential

$$V(-x) = V(x) \quad (6.7.3)$$

Ebenso ist die 2. Ableitung nach x für jede Funktion invariant unter der Transformation $x \rightarrow -x$.

$$\frac{d^2}{dx^2} \rightarrow \frac{d^2}{(d(-x))^2} = \frac{d^2}{dx^2} \quad (6.7.4)$$

Wir betrachten nun die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\hat{H}(x) \psi(x) = E\psi(x) \quad (6.7.5)$$

und transformieren sie mit $x \rightarrow -x$

$$\hat{H}(-x) \psi(-x) = E\psi(-x) \quad (6.7.6)$$

beim harmonischen Oszillator ist nun aber

$$\hat{H}(-x) = \hat{H}(x) \quad (6.7.7)$$

und damit auch

$$\hat{H}(x) \psi(-x) = E\psi(-x) \quad (6.7.8)$$

Das heisst, wenn $\psi(x)$ eine Eigenfunktion von $\hat{H}(x)$ ist, ist auch $\psi(-x)$ eine Eigenfunktion. Dabei haben wir implizit, also ohne es ausdrücklich zu erwähnen, angenommen, dass es zur Energie E nur eine Eigenfunktion (keine Entartung) gibt. Deshalb muss gelten

$$\psi(-x) = \alpha\psi(x) \quad (6.7.9)$$

mit α einer komplexen Konstanten. Wir können aber x auch durch $-x$ ersetzen, da der Hamiltonoperator \hat{H} diese Symmetrie auch hat. Dann lautet Gleichung (6.7.9)

$$\psi(x) = \alpha\psi(-x) \quad (6.7.10)$$

Wenn wir Gleichung (6.7.10) in Gleichung (6.7.9) einsetzen, dann gilt auch

$$\psi(x) = \alpha\psi(-x) = \alpha^2\psi(x) \quad (6.7.11)$$

Wenn $\psi(x)$ nicht identisch verschwindet, muss

$$\alpha^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \pm 1 \quad (6.7.12)$$

sein. Daraus folgt für die Wellenfunktion

$$\psi(x) = \begin{cases} +\psi(x) & \text{symmetrische Wellenfunktion für } \alpha = 1 \\ -\psi(x) & \text{antisymmetrische Wellenfunktion für } \alpha = -1 \end{cases} \quad (6.7.13)$$

6.7.2. Parität

In drei Dimensionen ist die zur Transformation $x \rightarrow -x$ äquivalente Transformation die *Punktspiegelung* am Ursprung. Wir ersetzen in den obigen Betrachtungen $x \rightarrow \mathbf{r}$ und erhalten die Transformation

$$\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r} \quad (6.7.14)$$

Ist nun $\hat{H}(\mathbf{r})$ invariant gegen die Transformation $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ folgt für die Wellenfunktionen

$$\psi(-\mathbf{r}) = \pm \psi(\mathbf{r}) \quad (6.7.15)$$

Die Transformation $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ist als *Paritätstransformation* bekannt. Es gibt die beiden Fälle

- $\psi(-\mathbf{r}) = +\psi(\mathbf{r})$: Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ hat *gerade Parität*
- $\psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r})$: Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ hat *ungerade Parität*

Die Parität von Wellenfunktionen ist in der Teilchenphysik von überragender Bedeutung. Ein mit dem Nobelpreis gewürdigtes Experiment von Chien-Shiung Wu (* 31. Mai 1912 in Shanghai, China; † 16. Februar 1997 in New York, USA) aus dem Jahre 1957 erbrachte den Nachweis, dass bei der schwachen Wechselwirkung die Paritätstransformation nicht gültig war. Man sagt: die Parität sei verletzt. Beim harmonischen Oszillator gibt es Wellenfunktionen mit gerader und ungerader Parität, je nach der Hauptquantenzahl n :

- $n = 0, 2, 4, \dots$: Die Wellenfunktion hat gerade Parität.
- $n = 1, 3, 5, \dots$: Die Wellenfunktion hat ungerade Parität.

6.7.3. Rotationssymmetrie

Wir betrachten nun einen Hamiltonoperator \hat{H} , der mindestens Zylindersymmetrie oder aber eine höhere Symmetrie haben soll. Mathematisch ausgedrückt bedeutet die Zylindersymmetrie, dass

$$\hat{H}(r, \varphi + \varphi_1) = \hat{H}(r, \varphi) \quad \text{für } \varphi \in \mathbb{R} \quad (6.7.16)$$

Bei einem sphärisch symmetrischen Hamiltonoperator \hat{H} wie beim Coulombpotential sei ϑ konstant. Die Schrödingergleichung lautet dann

$$\hat{H}(r, \varphi + \varphi_1) \psi(r, \varphi + \varphi_1) = E\psi(r, \varphi + \varphi_1) \quad (6.7.17)$$

Wegen Gleichung (6.7.16) können wir auch schreiben

$$\hat{H}(r, \varphi) \psi(r, \varphi + \varphi_1) = E\psi(r, \varphi + \varphi_1) \quad (6.7.18)$$

Da $\psi(r, \varphi + \varphi_1)$ eine Eigenfunktion von $\hat{H}(r, \varphi)$ ist, gilt auch

$$\psi(r, \varphi + \varphi_1) = \alpha(\varphi_1) \psi(r, \varphi) \quad (6.7.19)$$

Wenn wir eine Rotation um einen zweiten Winkel φ_2 betrachten, gilt

$$\psi(r, \varphi + \varphi_2) = \alpha(\varphi_2) \psi(r, \varphi) \quad (6.7.20)$$

und damit auch

$$\begin{aligned} \psi(r, \varphi + \varphi_1 + \varphi_2) &= \psi(r, (\varphi + \varphi_2) + \varphi_1) \\ &= \alpha(\varphi_1) \psi(r, \varphi + \varphi_2) = \alpha(\varphi_1) \alpha(\varphi_2) \psi(r, \varphi) \end{aligned} \quad (6.7.21)$$

Andererseits folgt aus

$$\psi(r, \varphi + \varphi_s) = \alpha(\varphi_s) \psi(r, \varphi) \quad (6.7.22)$$

die Beziehung

$$\varphi_s = \varphi_1 + \varphi_2 \quad (6.7.23)$$

Damit haben wir

$$\psi(r, \varphi_s) = \psi(r, \varphi + (\varphi_1 + \varphi_2)) = \alpha(\varphi_s) = \alpha(\varphi_1 + \varphi_2) \psi(r, \varphi) \quad (6.7.24)$$

Wenn man die Operationen hintereinander ausführt, also

$$\begin{aligned} \psi(r, \varphi + \varphi_1 + \varphi_2) &= \psi(r, (\varphi + \varphi_1) + \varphi_2) \\ &= \alpha(\varphi_2) \psi(r, \varphi + \varphi_1) = \alpha(\varphi_2) \alpha(\varphi_1) \psi(r, \varphi) \end{aligned} \quad (6.7.25)$$

Damit haben wir die Beziehung

$$\alpha(\varphi_1 + \varphi_2) = \alpha(\varphi_1) \alpha(\varphi_2) \quad (6.7.26)$$

Die Mathematik sagt uns, dass die einzige mögliche Lösung

$$\alpha(\varphi) = e^{im\varphi} \quad (6.7.27)$$

ist, wobei m noch unbekannt ist. Bei einer Drehung um $\varphi = 2\pi$ erhalten wir wieder eine von der Ausgangslage ununterscheidbare Situation. Deshalb muss gelten

$$e^{2\pi im} = 1 \quad \text{mit } m \in \mathbb{Z} \quad (6.7.28)$$

Dies ist nur möglich, wenn m eine ganze Zahl ist. Deshalb gilt auch

$$\psi(r, \varphi) = e^{im\varphi} \psi(r, 0) \quad \text{mit } m \in \mathbb{Z} \quad (6.7.29)$$

Unsere gefundene Zahl m ist kompatibel mit der magnetischen Quantenzahl m im Wasserstoffatom.

6.7.3.1. Auswahlregeln für die Wellenfunktionen aus Abbildung 6.36

Das Übergangsmatrixelement für Dipolübergänge aus Gleichung (6.7.1) lautet entlang der x -Achse

$$H_{s,mn} = e \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) x \varphi_n(x) dx \quad (6.7.30)$$

Deshalb definieren wir das Integral $e \cdot I_{mm} = H_{s,mm}$ für die Matrixelemente auf der Hauptdiagonale

$$I_{mm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) x \psi_m(x) dx \quad (6.7.31)$$

Bei der Transformation $x \rightarrow -x$ ergibt sich

$$I_{mm} = \int_{+\infty}^{-\infty} \psi_m^*(-x) (-x) \psi_m(-x) d(-x) \quad (6.7.32)$$

Wenn wir $d(-x)$ durch dx ersetzen, müssen wir das Vorzeichen des Integrals wechseln

$$\begin{aligned} I_{mm} &= - \int_{\infty}^{-\infty} \psi_m^*(-x) (-x) \psi_m(-x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(-x) (-x) \psi_m(-x) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(-x) x \psi_m(-x) dx \end{aligned} \quad (6.7.33)$$

Bei der Transformation $x \rightarrow -x$ ändert $\psi_m^* \psi_m$ als quadratische Funktion das Vorzeichen nicht. Also folgt

$$I_{mm} = -I_{mm} \quad \Longrightarrow \quad I_{mm} = 0 \quad (6.7.34)$$

Das bedeutet, dass das Matrixelement $H_{s,mm} \equiv 0$ ist für alle m . Die Argumentation gilt auch für y und z . Es gibt in dieser Betrachtung keine Übergänge zwischen Zuständen mit der Quantenzahl m für Wellenfunktionen nach Abbildung 6.36.

Wenn $m \neq n$ ist, lauten die Matrixelemente

$$I_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) x \varphi_n(x) dx \quad (6.7.35)$$

Falls nun φ_n und φ_m gleiche Parität haben ist $I_{mn} = 0$. Das heisst, dass es für Wellenfunktionen nach Abbildung 6.36 keine Dipolübergänge geben kann bei denen $\Delta m = m_2 - m_1$ eine gerade Zahl ist. Bei ungleicher Parität der Wellenfunktionen ist $I_{mn} \neq 0$. Diese Übergänge mit $\Delta m = m_2 - m_1 = \pm 1, \pm 3, \dots$ sind für Wellenfunktionen nach Abbildung 6.36 erlaubt.

6.7.3.2. Auswahlregeln für Wasserstoffatome

Die Dipol-Matrixelemente des Wasserstoffatoms in die z -Richtung sind

$$I_z = \int \psi_{n,\ell,m}^*(\mathbf{r}) z \psi_{n',\ell',m'}(\mathbf{r}) dV \quad (6.7.36)$$

In Polarkoordination lauten sie

$$I_z = \int \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi) (r \cos \vartheta) \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi) dV \quad (6.7.37)$$

Wir betrachten Drehungen um die z -Achse um den Winkel φ_0 . Wir verwenden die Transformationseigenschaft nach Gleichung (6.7.29) und wenden sie auf Gleichung (6.7.37) an und erhalten mit $\psi_{n,\ell,m}(r, \vartheta, \varphi)$

$$\begin{aligned} I_z(\varphi_0) &= \int \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi + \varphi_0) (r \cos \vartheta) \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi + \varphi_0) dV \\ &= \int e^{-im\varphi_0} \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi) (r \cos \vartheta) e^{im'\varphi_0} \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi) dV \\ &= e^{-im\varphi_0} e^{im'\varphi_0} \int \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi) (r \cos \vartheta) \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi) dV \end{aligned} \quad (6.7.38)$$

Damit ist

$$I_z(\varphi_0) = e^{-i(m-m')\varphi_0} I_z(0) = I_z(0) = I_z \quad (6.7.39)$$

da dies eine Symmetrietransformation sein soll. Diese Gleichung hat zwei mögliche Lösungen. Entweder ist

$$I_z = 0 \quad (6.7.40)$$

oder

$$m' = m \quad (6.7.41)$$

Für Übergänge die das Dipolmoment des Wasserstoffs in die z -Richtung ansprechen, muss also $m = m'$ sein. Für die Dipolmomente in die x - und y -Richtung erhalten wir die reduzierten Integrale

$$I_x = \int \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi) x \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi) dV \quad (6.7.42)$$

$$I_y = \int \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi) y \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi) dV \quad (6.7.43)$$

$$I_x \pm iI_y = \int \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi) (x \pm iy) \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi) dV \quad (6.7.44)$$

Aus der Mathematik der komplexen Zahlen wissen wir, dass

$$x \pm iy = r \cos \varphi \sin \vartheta \pm i r \sin \varphi \sin \vartheta = r e^{\pm i\varphi} \sin \vartheta \quad (6.7.45)$$

Damit können wir Gleichung (6.7.44) umschreiben

$$I_x \pm iI_y = \int \psi_{n,\ell,m}^*(r, \vartheta, \varphi) (r \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}) \psi_{n',\ell',m'}(r, \vartheta, \varphi) dV \quad (6.7.46)$$

Wir drehen das Wasserstoffatom um φ_0 um die z -Achse und erhalten

$$\begin{aligned}
\psi_{n,l,m}^*(r, \vartheta, \varphi + \varphi_0) &= e^{-im\varphi_0} \psi_{n,l,m}^*(r, \vartheta, \varphi) \\
\psi_{n',l',m'}(r, \vartheta, \varphi + \varphi_0) &= e^{im'\varphi_0} \psi_{n',l',m'}(r, \vartheta, \varphi) \\
e^{\pm i(\varphi + \varphi_0)} &= e^{\pm i\varphi} e^{\pm i\varphi_0}
\end{aligned} \tag{6.7.47}$$

Mit Gleichung (6.7.47) lautet Gleichung (6.7.46) neu (der Faktor $e^{\pm i\varphi}$ fällt heraus)

$$\begin{aligned}
I_x \pm iI_y &= e^{im'\varphi_0} e^{\pm i\varphi_0} e^{-im\varphi_0} (I_x \pm iI_y) \\
&= e^{i(m'\pm 1-m)\varphi_0} (I_x \pm iI_y)
\end{aligned} \tag{6.7.48}$$

Damit Gleichung (6.7.48) erfüllt ist, muss gelten

$$I_x + iI_y = 0 \quad \text{für } m \neq m' + 1 \tag{6.7.49}$$

$$I_x - iI_y = 0 \quad \text{für } m \neq m' - 1 \tag{6.7.50}$$

Wenn eine komplexe Zahl null ist, sind imaginär- und Realteil jeder für sich null.

$$I_x = 0 \tag{6.7.51}$$

$$I_y = 0 \tag{6.7.52}$$

Wir können also für das Wasserstoffatom die folgenden Regeln formulieren:

Auswahlregeln für die magnetische Quantenzahl

$m = m'$	$I_z \neq 0$ linear polarisiertes Licht (π -Polarisation)
$m = m' \pm 1$	$I_x + iI_y \neq 0$ zirkular polarisiert $I_x - iI_y \neq 0$ ($\pm\sigma$ -Polarisation)

Auswahlregel für die Bahndrehimpulsquantenzahl (ohne Ableitung)

$$\ell = \ell' \pm 1$$

6.8. Mehrelektronenatome

Elektronenzustände in Atomen mit mehreren Elektronen werden der Reihe nach von tiefen Energien zu hohen besetzt.

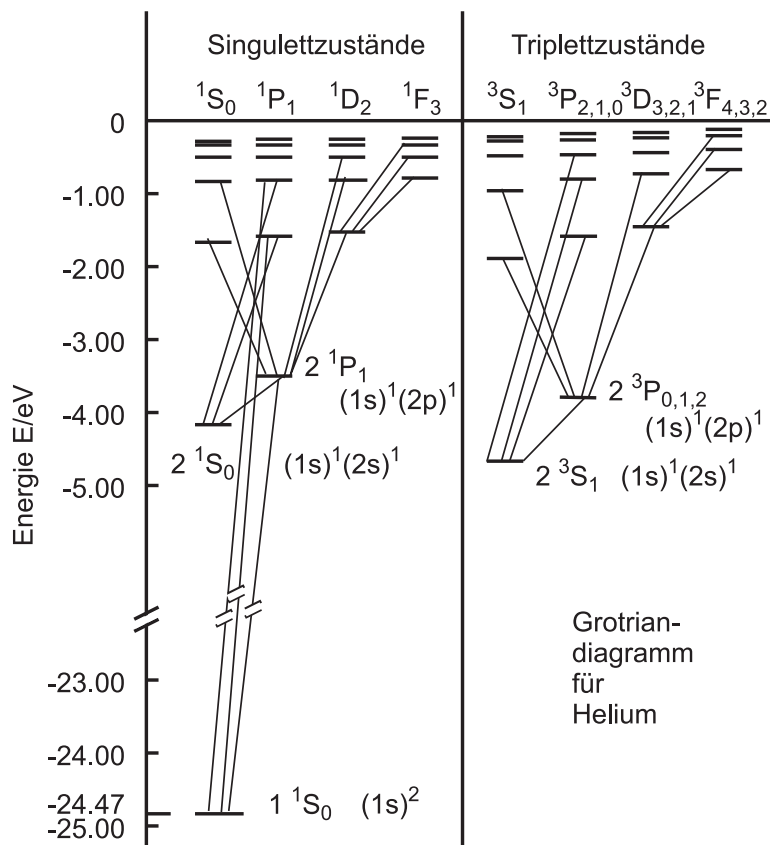


Abbildung 6.37.: Termschema von Helium

Abbildung 6.37 zeigt das Grotrian-Diagramm oder Termschema von Helium. Es gibt zwei System, die keine Verbindung miteinander haben. Links ist das Singulettssystem und rechts das Triplettssystem. Sowohl der tiefste Zustand des Triplettsystems 2^3S_1 -Zustand mit der Struktur $(1s)^1(2s)^1$ wie auch der zweittiefste Zustand im Singulettssystem 2^1S_0 -Zustand mit der Struktur $(1s)^1(2s)^1$ sind metastabil. Metastabil bedeutet, dass die Lebensdauer $\tau_{metastabil} \gg 10^{-8}$ s ist. 10^8 s ist eine übliche Lebensdauer für erlaubte Zustände. Metastabile Zustände werden über Dipol-verbotene Übergänge entleert.

Wenn ein Elektron aus dem Grundzustand in den angeregten Zustand wechselt, ändern sich die Quantenzahlen

		Zustände				
vor der Anregung	1.Elektron	$n = 1$	$\ell = 0$	$m = 0$	$s = \frac{1}{2}$	$s_z = \frac{1}{2}$
	2.Elektron	$n = 1$	$\ell = 0$	$m = 0$	$s = \frac{1}{2}$	$s_z = -\frac{1}{2}$
nach der Anregung	1. Elektron	$n = 1$	$\ell = 0$	$m = 0$	$s = \frac{1}{2}$	$s_z = \frac{1}{2}$
	2. Elektron	$n > 1$	$\ell = 1$	$m = -1 \dots 1$	$s = \frac{1}{2}$	$s_z = \pm \frac{1}{2}$

Tabelle 6.9.: Übergänge in Helium

Man bezeichnet He im Singulett-System als *Parahelium*, He im Triplettssystem wird als *Orthohelium* bezeichnet. Im Singulettssystem von Helium wird keine Feinstruktur beobachtet. Das bedeutet, dass die Spins der Elektronen antiparallel sein müssen.

Man bezeichnet mit grossen Buchstaben das gesamte System, mit kleinen Buchstaben die Zustände der einzelnen Elektronen. So ist der *Gesamtspin*

$$s_1 + s_2 = S = 1$$

Das magnetische Moment des Gesamtspins μ_S hat drei Einstellmöglichkeiten:

$$S_z = 1, 0, -1 \quad (6.8.1)$$

Wenn der Spin drei Einstellmöglichkeiten hat führt die Spin-Bahn-Kopplung zu einer dreifachen Feinstrukturaufspaltung.

Im Triplettzustand, beim Orthohelium, stehen die Spins parallel. Zwischen den entsprechenden Zuständen des Paraheliums und des Orthoheliums gibt es eine Energiedifferenz. Dies beruht auf der unterschiedlichen elektrostatischen Wechselwirkung bei parallel und antiparallel angeordneten Spins. So liegt der Zustand 2^1S_0 über dem Zustand 2^3S_1 . Den Energieunterschied nennt man Symmetrie-Energie.

6.8.1. Pauli-Prinzip

Im Helium muss man die Energie der Elektronen so schreiben

$$E = \underbrace{-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}}_{1. \text{ Elektron}} \underbrace{-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{2. \text{ Elektron}} \underbrace{+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}}_{\substack{\text{Abstossung} \\ \text{der Elektronen}}} \quad (6.8.2)$$

Damit ist die potentielle Energie nicht mehr kugelsymmetrisch. Die Wellenfunktion kann nicht mehr in einen Radial- und einen Winkelanteil separiert werden. Deshalb ist die Schrödingergleichung nicht geschlossen lösbar. Näherungsweise kann sie mit der Störungsrechnung gelöst werden. Als erste Näherung vernachlässigt man den Abstossungsterm zwischen den beiden Elektronen 1 und 2

$$E = -\left(\frac{R h c Z^2}{n_1^2}\right)_1 - \left(\frac{R h c Z^2}{n_2^2}\right)_2 \quad (6.8.3)$$

Dieses vereinfachte Problem ist lösbar. Die so berechneten Energien für die Ionisierung sind

$$E_{\text{He}} = 2 \times (-54.4 \text{ eV}) = -108.8 \text{ eV} \quad (6.8.4)$$

Experimentell hat man die folgenden Werte gemessen:

$$E_{\text{He}} = -79 \text{ eV} = \underbrace{-24.6 \text{ eV}}_{1. \text{ Elektron}} + \underbrace{(-54.4 \text{ eV})}_{2. \text{ Elektron}} \quad (6.8.5)$$

Die gesamte Ionisierungsenergie ist kleiner als die theoretische Vorhersage ohne gegenseitige Wechselwirkung der Elektronen. Die gegenseitige Abstossung verringert offensichtlich den Abstand zum Vakuumniveau. Das erste Elektron hat eine

kleiner Ionisierungsenergie als das Elektron des Wasserstoffs. Die Ionisierungsenergie des zweiten Elektrons (wenn das erste schon weg ist) ist ziemlich genau das Doppelte des Wertes für den Wasserstoff. Den vierfachen Wert würde man auch aus der doppelt so grossen Kernladung erwarten.

Man könnte argumentieren, dass das äussere Elektron wegen der Abschirmung die Kernladung $Z = 1$ sieht, und nicht $Z = 2$. Dann wäre aber

$$E_{He} = -54.4 \text{ eV} - \frac{1}{4} \cdot 54.4 \text{ eV} = -54.4 \text{ eV} - 13.35 \text{ eV} = -67.75 \text{ eV} \quad (6.8.6)$$

Dies ist ein besserer Schätzwert, aber trotzdem immer noch falsch.

Da bei Helium zwar der Zustand 1_1S gibt, nicht aber den Zustand 1^3S bei dem zwei Elektronen im Grundzustand mit parallelem Spin vorhanden wären, folgerte *Wolfgang Pauli*

Die Elektronenzustände eines Atoms können mit Elektronen nur so besetzt werden, dass nie zwei oder mehr Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

Dieses ist das fundamentale *Pauli-Prinzip*. Die allgemein gültige mathematische Formulierung des Pauli-Prinzips lautet:

Bei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen ist Gesamtwellenfunktion

$$\Psi = \prod_j \Psi_j = \prod_j (\Psi_{r,j} \cdot \Psi_{L^2,j} \cdot \Psi_{L_z,j} \cdot \Psi_{s_z,j} \cdot \dots) \quad (6.8.7)$$

antisymmetrisch bei der Vertauschung zweier Variablen sein.

Dabei ist $\Psi_{r,j}$ der Radialteil der Wellenfunktion des j -ten Teilchens, bei den an-

deren Wellenfunktionen analog.

Wenn wir zwei Teilchen haben, ist die mögliche Wellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{\{n_1, \ell_1, m_{\ell_1}, m_{s_1}\}}(\mathbf{r}_1) \psi_{\{n_2, \ell_2, m_{\ell_2}, m_{s_2}\}}(\mathbf{r}_2) \quad (6.8.8)$$

eine Wellenfunktion mit der Energie

$$E_{tot} = E_{\{n_1, \ell_1, m_{\ell_1}, m_{s_1}\}} + E_{\{n_2, \ell_2, m_{\ell_2}, m_{s_2}\}} \quad (6.8.9)$$

Die Wellenfunktion aus Gleichung (6.8.8) ist auch erlaubt, wenn

$$\{n_1, \ell_1, m_{\ell_1}, m_{s_1}\} = \{n_2, \ell_2, m_{\ell_2}, m_{s_2}\}$$

ist. Da mit der Wellenfunktion aus Gleichung (6.8.8) auch

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{\{n_2, \ell_2, m_{\ell_2}, m_{s_2}\}}(\mathbf{r}_1) \psi_{\{n_1, \ell_1, m_{\ell_1}, m_{s_1}\}}(\mathbf{r}_2)$$

die zugrunde liegende Schrödingergleichung erfüllt, sind auch alle Linearkombinationen dieser beiden Wellenfunktionen Lösungen der Schrödingergleichung. Die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \Psi_{AS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \tilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{\{n_1, \ell_1, m_{\ell_1, 1}, m_{s, 1}\}}(\mathbf{r}_1) \psi_{\{n_2, \ell_2, m_{\ell_2, 2}, m_{s, 2}\}}(\mathbf{r}_2) - \psi_{\{n_2, \ell_2, m_{\ell_2, 2}, m_{s, 2}\}}(\mathbf{r}_1) \psi_{\{n_1, \ell_1, m_{\ell_1, 1}, m_{s, 1}\}}(\mathbf{r}_2) \right) \end{aligned} \tag{6.8.10}$$

ist eine Lösung der Schrödingergleichung. Sie verschwindet aber identisch, wenn

$$\{n_1, \ell_1, m_{\ell_1, 1}, m_{s, 1}\} = \{n_2, \ell_2, m_{\ell_2, 2}, m_{s, 2}\}$$

ist. Die Wellenfunktion Ψ_{AS} ist kompatibel mit dem Pauli-Prinzip. Wann immer alle Indizes der beiden Teilwellenfunktionen identisch sind, ist sie null. Die Koordinaten \mathbf{r}_i können alle Variablen sein, sie müssen nicht notwendigerweise Vektoren sein, es können auch zahlenwertige Funktionen und insbesondere auch Spinfunktionen sein.

Wenn zwei Spins mit den möglichen Zuständen $m_{z,j} = \frac{1}{2}\hbar = \phi_{\uparrow}(j)$ und $m_{z,j} = -\frac{1}{2}\hbar = \phi_{\downarrow}(j)$ kombiniert werden, ergeben sich

Singulettzustand	$S = 0$	$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\uparrow}(1)\phi_{\downarrow}(2) - \phi_{\uparrow}(2)\phi_{\downarrow}(1))$	$M_S = 0$
Tripletzustand	$S = 1$	$\Phi = \begin{cases} \phi_{\uparrow}(1)\phi_{\uparrow}(2) & M_S = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\uparrow}(1)\phi_{\downarrow}(2) + \phi_{\uparrow}(2)\phi_{\downarrow}(1)) & M_S = 0 \\ \phi_{\downarrow}(1)\phi_{\downarrow}(2) & M_S = -1 \end{cases}$	

Tabelle 6.10.: Singulett- und Triplet-Zustände bei zwei Spins

6.8.2. Drehimpulse

Beim Wasserstoffatom wurde der Bahndrehimpuls ℓ mit dem Spin s zum *Gesamtdrehimpuls* j gekoppelt. Ähnliche Mechanismen gibt es auch beim *Gesamtbahndrehimpuls* L und dem *Gesamtspin* S , die den *Gesamtdrehimpuls* J bilden. Geschlossene Schalen, die Edelgasschalen, haben einen *Gesamtdrehimpuls* null, so dass Atome allein durch die Spins und die bahndrehimpulse der Valenzelektronen charakterisiert werden.

Wenn wir zum Beispiel zwei Bahndrehimpulse ℓ_1 und ℓ_2 haben, können diese sich auf drei Arten zu einem *Gesamtbahndrehimpuls* zusammensetzen:

Anordnung	parallel	im Dreieck	antiparallel
<i>Gesamtdrehimpuls</i>	$L = 2$	$L = 1$	$L = 0$
Bezeichnung	D-Term	P-Term	S-Term

Tabelle 6.11.: Anordnung von Bahndrehimpulsen zum *Gesamtbahndrehimpuls*

In Atomen mit mehreren Elektronen gibt es die Bahndrehimpulse ℓ_i und die Spins s_i . Es gibt nun drei Wechselwirkungen,

- die Spin-Bahnwechselwirkung proportional zu $(\ell_i \cdot s_i)$
- die Bahn-Bahnwechselwirkung proportional zu $(\ell_i \cdot \ell_j)$
- die Spin-Spinwechselwirkung proportional zu $(s_i \cdot s_j)$

6.8.2.1. LS- oder Russel-Saunders-Kopplung

Wenn nun die *Spin-Bahn-Kopplung* $(\ell_i \cdot s_i)$ klein ist gegen die *Bahn-Bahn-Kopplung* $(\ell_i \cdot \ell_j)$ und gegen die *Spin-Spin-Kopplung* $(s_i \cdot s_j)$, dann addieren sich alle Bahndrehimpulse und Spins getrennt bevor sie zum *Gesamtdrehimpuls* zusammengesetzt werden.

$$\mathbf{L} = \sum \ell_i \quad (6.8.11a)$$

$$\mathbf{S} = \sum s_i \quad (6.8.11b)$$

Aus dem *Gesamtbahndrehimpuls* \mathbf{L} und dem *Gesamtspin* \mathbf{S} wird der *Gesamtdrehimpuls* gebildet

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (6.8.12)$$

Bei der *LS-Kopplung* oder der *Russel-Saunders-Kopplung* wird

1. die Summe aller Bahndrehimpulse $\mathbf{L} = \sum \ell_i$, dann
2. die Summe aller Spins $\mathbf{S} = \sum s_i$ und schliesslich
3. der *Gesamtdrehimpuls* $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ gebildet.

Den Betrag des Gesamtbahndrehimpulses wird wir beim einzelnen Bahndrehimpuls berechnet

$$|\mathbf{L}| = \hbar \sqrt{L(L+1)} \quad (6.8.13)$$

Wenn man alle möglichen Kombinationen zweier Vektoren ℓ_1 und ℓ_2 untersucht, also von parallel bis antiparallel, dann sind die folgenden Bahndrehimpulsquantenzahlen möglich

$$L = \begin{cases} \ell_1 + \ell_2 \\ \ell_1 + \ell_2 - 1 \\ \vdots \\ \ell_1 - \ell_2 \end{cases} \quad \text{mit } \ell_1 \geq \ell_2 \quad (6.8.14)$$

Man verwendet die folgenden Bezeichnungen

- $L = 0$ S-Term
- $L = 1$ P-Term
- $L = 2$ D-Term

Für die optischen Übergänge gelten die folgenden Auswahlregeln

- bei Einzelektronen $\Delta\ell = \pm 1$
- beim Gesamtsystem $\Delta L = 0, \pm 1$

Für den *Gesamtspin* bei n Elektronen haben wir die Beziehungen

$$\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i \quad (6.8.15a)$$

$$|\mathbf{S}| = \hbar \sqrt{S(S+1)} \quad (6.8.15b)$$

$$S = n \cdot s, (n-2) \cdot s \dots 0 \quad (6.8.15c)$$

Für die Dipolstrahlung gilt die folgende *Auswahlregel*

$$\Delta S = 0 \quad (6.8.16)$$

Die Auswahlregel aus Gleichung (6.8.16) besagt, dass Terme mit verschiedenem *Gesamtspin* nicht koppeln. Dies ist der Grund, warum zum Beispiel beim Helium das Singulett- und das Triplett-System nicht koppeln, da zwischen diesen Systemen mit unterschiedlichem *Gesamtspin* verboten sind.

Beim *Gesamtdrehimpuls* haben wir die Beziehungen

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L} \quad (6.8.17a)$$

$$|\mathbf{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)} \quad (6.8.17b)$$

Für den *Gesamtspin* \mathbf{J} sind die folgenden Werte möglich

Spin	Gesamtdrehimpuls	
$S = 0$	$J = L$	(6.8.18a)
$S = \frac{1}{2}$	$J = L + \frac{1}{2}, L - \frac{1}{2}$	(6.8.18b)
$S = 1$	$J = L + 1, L, L - 1$	(6.8.18c)
$S = \frac{3}{2}$	$J = L + \frac{3}{2}, L + \frac{1}{2}, L - \frac{1}{2}, L - \frac{3}{2}$	(6.8.18d)

Insgesamt gibt es also $2S + 1$ mögliche Kombinationen eines Gesamtbahndrehimpulses mit dem *Gesamtspin* zum *Gesamtdrehimpuls*

Zum Beispiel setzt sich bei He der Grundzustand wie folgt zusammen: Es gibt zwei Elektronen mit der Hauptquantenzahl $n_1 = n_2 = 1$. Diese haben jeweils den Bahndrehimpuls $\ell_1 = \ell_2 = 0$ und die Spins $s_1 = \frac{1}{2}$ und $s_2 = \frac{1}{2}$. Das bedeutet, dass der *Gesamtdrehimpuls* $L = 0$ und der *Gesamtspin* $S = 0$. Wenn $m_{s_1} = -m_{s_2}$ ist, ist der *Gesamtdrehimpuls* $J = 0$. Dies ist der beobachtete Singulettgrundzustand. Er wird mit 1^1S_0 bezeichnet.

Andererseits ist bei $L = 0$, $S = 1$ für $m_{s_1} = m_{s_2}$ der *Gesamtdrehimpuls* $J = 1$. Dieser Zustand mit dem Namen 1^3S_1 ist **verboten (Wolfgang Pauli)**, da hier zwei Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

Wenn die beiden Elektronen unterschiedliche Hauptquantenzahlen haben, sind die möglichen Werte

- $n_1 = 1, \ell_1 = 0, s_1 = \frac{1}{2}$
- $n_2 = 2, \ell_2 = 0, s_2 = \frac{1}{2}$

Dann ist entweder ($L = 0, S = 0, J = 0$, der Singulettzustand) oder ($L = 0, S = 1, J = 1$, der Triplettzustand). Beide Fälle mit den Namen 2^1S_0 und 2^3S_1 sind erlaubt und werden experimentell beobachtet.

Zustände werden mit der folgenden Nomenklatur $n^{2S+1}L_j$ bezeichnet.

Dabei ist n die Hauptquantenzahl des höchsten angeregten Elektrons.

Anzahl Elektronen	2	3	4	5
Zustände	$S = 0$	$S = \frac{1}{2}$	$S = 0$	$S = \frac{1}{2}$
	Singulett	Dublett	Singulett	Dublett
	$S = 1$	$S = \frac{3}{2}$	$S = 1$	$S = \frac{3}{2}$
	Triplett	Quartett	Triplett	Quartett
			$S = 2$	$S = \frac{3}{2}$
			Quintett	Sextett

Tabelle 6.12.: Drehimpulszustände für Vielelektronensystemen

Tabelle 6.12 zeigt die möglichen *Multiplettsysteme* von *Vielelektronenatomen*.

6.8.2.2. Hundzsche Regeln

Die *Hundschen Regeln* bei LS -Kopplung ergänzen das Pauli-Prinzip bei der Besetzung der Einelektronenzustände in einem Mehrelektronenatom.

1. Volle Schalen und volle Unterschalen haben den *Gesamtdrehimpuls* $\mathbf{L} = 0$ und den *Gesamtspin* $\mathbf{S} = 0$.
2. Äquivalente Elektronen (d.h. Elektronen die bei gleichem ℓ auf die z -Unterzustände m_ℓ verteilt werden) werden im Grundzustand so eingebaut, dass der resultierende Gesamtspin \mathbf{S} maximal ist.

Dies bedeutet, dass Zustände mit der höchsten Multiplizität energetisch am tiefsten liegen. Die Gesamtwellenfunktion muss antisymmetrisch sein.

3. Um den grössten Wert der Quantenzahl S zu realisieren, müssen die Elektronen auf die Unterzustände m_ℓ zu den Drehimpulszuständen ℓ so verteilt werden, dass die z -Komponente von \mathbf{L}

$$\hbar m_L = \hbar \sum_i m_{\ell,i}$$

maximal ist. Dann ist die Drehimpulsquantenzahl

$$L = |M_L|$$

Zustände liegen bei gleicher Multiplizität $S(S+1)$ energetisch umso tiefer, je grösser L ist.

4. Bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung liegen Multipletts mit der kleinsten Quantenzahl J energetisch am tiefsten, wenn die Teilschale weniger als halb gefüllt ist. Bei einer mehr als halb gefüllten Teilschale liegen die Multipletts mit der grössten Quantenzahl J energetisch am höchsten.

Diese vier Regeln, zusammen mit dem Pauli-Prinzip erlauben, die Grundzustände der Elektronen in allen Atomsorten zu bestimmen. Eine Übersicht über die erlaubten Zustände finden Sie in der Tabelle **B.2** im Anhang.

6.8.2.3. *jj*-Kopplung

Bei schweren Atomen nimmt die Spin-Bahn-Kopplung mit der Kernladungszahl Z zu. Dann koppeln zuerst Spin und Bahndrehimpuls des Einzelelektrons

$$j_i = \ell_i + s_i \quad (6.8.19)$$

und erst dann wird der *Gesamtspin* gebildet.

$$J = \sum j_i \quad (6.8.20)$$

Wenn die *jj*-Kopplung dominiert, ist der *Gesamtbahndrehimpuls* \mathbf{L} und der *Gesamtspin* \mathbf{S} nicht mehr definiert. Der Betrag des Gesamtdrehimpulses ist

$$|\mathbf{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)} \quad (6.8.21)$$

Die *jj*-Kopplung bewirkt das Auftreten von Interkombinationsfrequenzen. Sie tritt nur bei **sehr** schweren Atomen auf.

Die Auswahlregeln bei der *jj*-Kopplung sind

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (6.8.22)$$

wobei der Übergang von $J = 0$ nach $J = 0$ verboten ist.

6.8.2.4. Magnetische Momente von Mehrelektronenatomen

Das magnetische Moment bei LS -Kopplung ist

$$\boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S = \boldsymbol{\mu}_J \quad (6.8.23)$$

Wie schon beim Einzelelektron ist $\boldsymbol{\mu}_L$ antiparallel zum *Gesamtbahndrehimpuls* \mathbf{L} und $\boldsymbol{\mu}_S$ antiparallel zum *Gesamtspin* \mathbf{S} . Da für Bahndrehimpulse und Spins jedoch die g -Faktoren unterschiedlich sind, ist \mathbf{J} nicht antiparallel zu $\boldsymbol{\mu}_J$. Deshalb präzediert wie beim Einzelelektron das magnetische Moment $\boldsymbol{\mu}_J$ um \mathbf{J} . Die Komponente $(\boldsymbol{\mu}_J)_J$ von $\boldsymbol{\mu}_J$, die antiparallel zu \mathbf{J} ist, ist das messbare magnetische Moment des Gesamtspins.

Der Betrag des magnetischen Moments des Gesamtspins ist

$$|(\boldsymbol{\mu}_J)_J| = -\frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1)}}\mu_B = -g_j\sqrt{J(J+1)}\mu_B \quad (6.8.24)$$

Hier ist der g -Faktor

$$g_j = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (6.8.25)$$

Schliesslich beträgt die z -Komponente des magnetischen Momentes

$$[(\boldsymbol{\mu}_{J,z})_J]_z = -m_j g_j \mu_B \quad (6.8.26)$$

mit der magnetischen Quantenzahl $m_j = -J, -J+1, \dots, J$.

6.9. Äussere und innere Schalen

Wir sahen, dass beim Wasserstoffatom die *Bindungsenergie* des Elektrons -13.6 eV war. Für ein Atom mit der Ordnungszahl z nimmt die *Bindungsenergie* des letzten Elektrons (wenn alle anderen schon ionisiert sind) wie Z^2 zu. Das heisst, dass alle Elektronen ausser die äussersten für eine Anregung sehr hohe Energien benötigen. Die Niveaus dieser Elektronen sind von gegenseitigen Kopplungen, Abschirmeffekten und der Bildung geschlossener Schalen bestimmt.

6.10. Röntgenstrahlung

Licht mit hoher Energie wird nach *Wilhelm Conrad Röntgen* in Deutschland Röntgenstrahlen benannt, in anderen Sprachen heissen die Strahlen nach Röntgen „X-Strahlen“. Eine Abschätzung der Frequenz erlaubt die *Serienformel* nach Rydberg und Ritz eine Abschätzung der Frequenz

$$\nu = R_H c Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \quad (6.10.1)$$

wobei $R_H = 10970955.31 \text{ m}^{-1}$ die Rydbergkonstante ist. Bei $Z = 20$ ist die Frequenz und damit die Energie über $Z^2 = 400$ mal grösser.

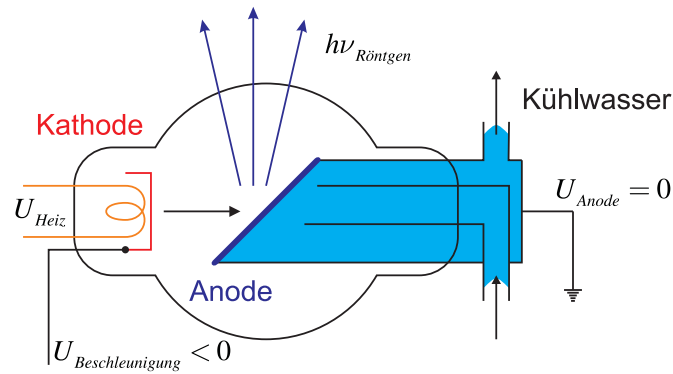
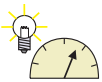
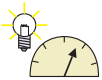


Abbildung 6.38.: Skizze einer Röntgenröhre. Die Anode der Röntgenröhre muss mit Wasser gekühlt werden. Deshalb liegt sie auf Erde. Die indirekt geheizte Kathode liegt auf der negativen *Beschleunigungsspannung*. Das Material der Anode bestimmt das Spektrum der Röntgenstrahlung $h\nu_{\text{Röntgen}}$.



Versuch zur Vorlesung:
Röntgenfluoreszenz (Versuchskarte AT-24)



Versuch zur Vorlesung:
Absorption von Röntgenstrahlen: Qualitativ (Versuchskarte AT-40)

Röntgenstrahlen werden üblicherweise mit Röntgenröhren (siehe Abbildung 6.38) oder in Ausnahmefällen mit hochenergetischen Lasern hergestellt. Durch Frequenzvervielfachung [SHA+91] um einen Faktor 100 oder mehr wird langwelliges Röntgenlicht mit Wellenlängen von 5 nm bis 10 nm erzeugt.

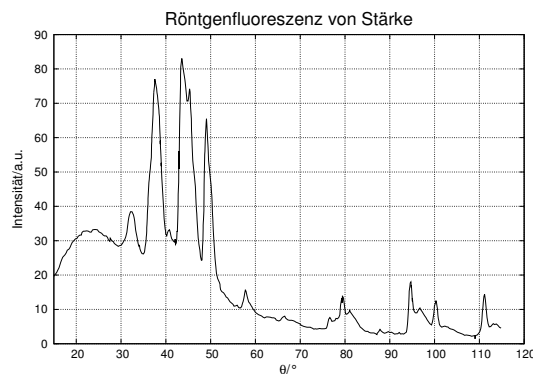


Abbildung 6.39.: Röntgenfluoreszenz einer Stärkeprobe (adaptiert von [Gun57]).

Röntgenfluoreszenz wird die gemischte Emission spezifischer und unspezifischer Röntgenstrahlung aus einer Probe bei deren Bestrahlung mit höherenergetischer Röntgenstrahlung genannt. Abbildung 6.39 zeigt, wie diese Röntgenfluoreszenz zur Identifikation von Elementen in einer Stärkeprobe verwendet werden kann. Die Details finden Sie in der Arbeit von Gunn [Gunn57].

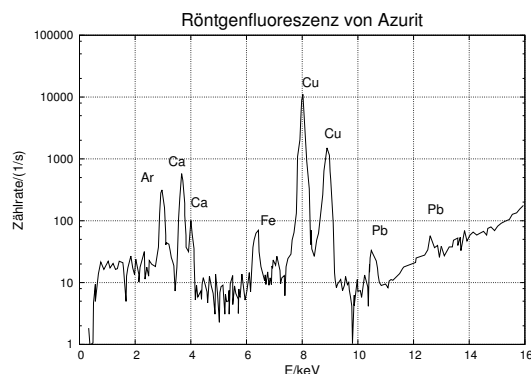


Abbildung 6.40.: Röntgenfluoreszenz von Azurit oder Kupferlasur, einem Bestandteil eines Pigmentes in einem mittelalterlichen Manuskript aus der Bibliothek der Universität Ghent (adaptiert von [WVM+99]).

Abbildung 6.40 zeigt ein weiteres Fluoreszenzspektrum. Es wurde von Wehling und Mitarbeitern [WVM+99] zur Untersuchung von Pigmenten mittelalterlicher Manuskripte gemessen.

6.10.1. Röntgenbeugung



Versuch zur Vorlesung:

Drehbares Kreuzgitter: Optisches Analogon zur Debye-Scherrer-Interferenz (Versuchskarte O-133)

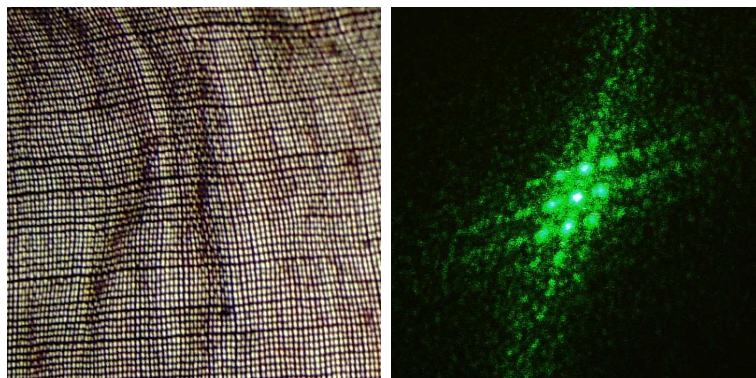


Abbildung 6.41.: Optisches Analogon zur Röntgenbeugung. Links ist das Beugungsgitter, ein textiles Gewebe, gezeigt, rechts das dazugehörige Beugungsmuster.

Abbildung 6.41 zeigt das beugende Gitter und dazu rechts das resultierende Beugungsmuster. Prinzipiell funktioniert die Röntgenbeugung analog zu diesem Experiment. Abbildung 6.42 zeigt das Beugungsmuster aus Abbildung 6.41 rotationsgemittelt um den Mittelpunkt des Beugungsmusters. Wenn viele identische Beugungsobjekte wie das textile Gewebe aus Abbildung 6.41 mit zufälliger Orientierung gleichzeitig untersucht werden, so erwartet man ein Beugungsbild nach Abbildung 6.42. Bei Kristallen ist dies die Pulvermethode nach *Debye-Scherrer*.

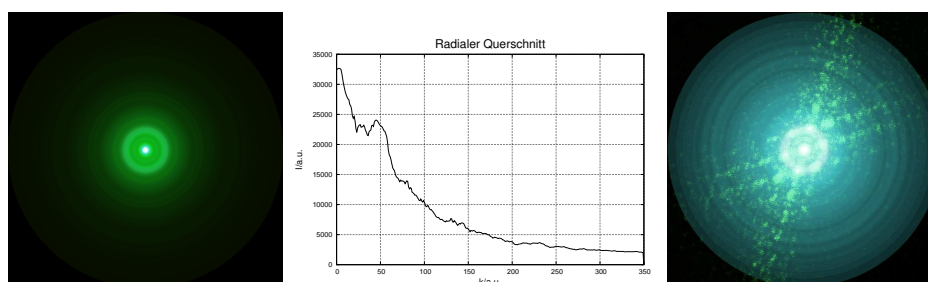


Abbildung 6.42.: Analogon des Beugungsmusters nach Debye-Scherrer. Links ist das über alle Winkel ausgeschmierte Beugungsmuster aus Abbildung 6.41 gezeigt, in der Mitte das Profil des Querschnitts und rechts die logarithmisch skalierte Version des linken Bildes mit der Überlagerung des Beugungsmusters aus Abbildung 6.41.

Die rechte Seite von Abbildung 6.42 zeigt schließlich eine Überlagerung des Einzelbeugungsmusters mit dem rotationsgemittelten Muster. Klar ist die Übereinstimmung der hellen Ringe mit Beugungspunkten zu erkennen.

6.10.2. Bremsstrahlung, charakteristische Strahlung und Periodensystem



Versuch zur Vorlesung:

Röntgenstrahlung: Bremsstrahlung und charakteristische Linien (Versuchskarte AT-37)

Wenn Materie mit Röntgenlicht beleuchtet wird, entsteht ein Kontinuum und charakteristische Linien. Das kontinuierliche Spektrum heisst *Bremspektrum*.

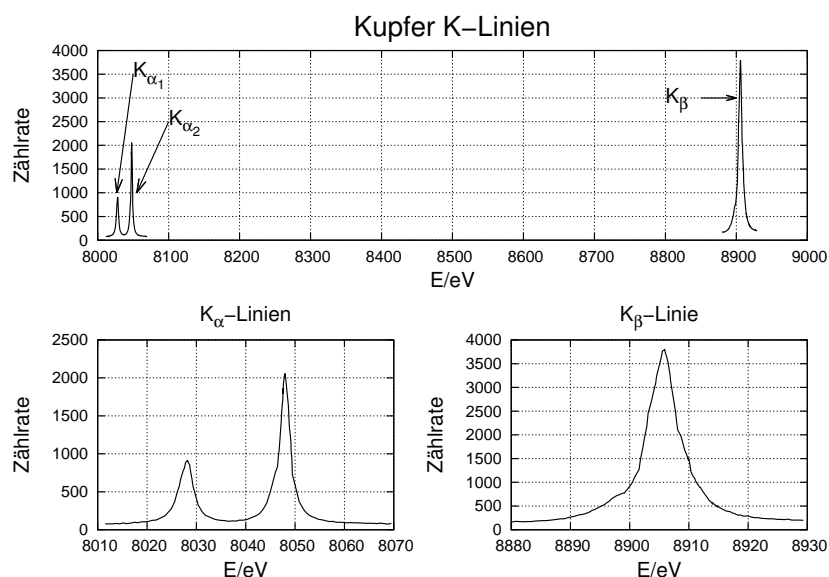


Abbildung 6.43.: Kupfer-K-Linien (adaptiert aus [DHH+95]).

Abbildung 6.43 zeigt am Beispiel der Cu- $K_{\alpha_{1,2}}$ - und der Cu- K_{β} -Linien, wie ein Röntgenspektrum aussehen kann. Die maximal mögliche Energie der Röntgenquanten ist durch die Differenzspannung zwischen Anode und Kathode, der *Beschleunigungsspannung* U_B gegeben.

$$h\nu_{\text{Röntgen}} < eU_B \quad (6.10.2)$$

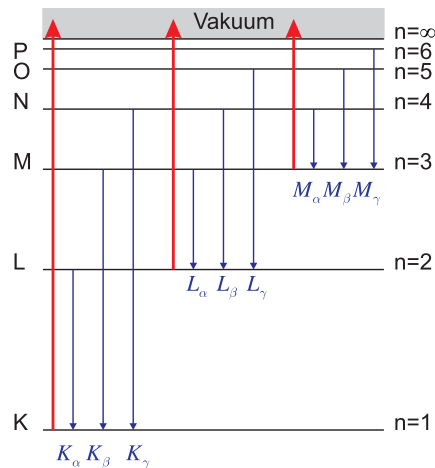


Abbildung 6.44.: Bezeichnung der Übergänge zwischen den inneren Schalen

Abbildung 6.44 zeigt schematisch die inneren Elektronenniveaus. Die roten Linien stellen die Ionisierung ins Vakuum dar. Wenn zum Beispiel ein Elektron von der L-Schale in die K-Schale relaxiert, nennt man die emittierte Röntgenlinie eine K_α -Linie. Die durch die Hauptquantenzahl n bezeichneten Niveaus werden durch die Spin-Bahnkopplung und die Spin-Bahn-Kopplung aufgespalten.

Schale	n	ℓ	j	Bezeichnung
K	1	0	$\frac{1}{2}$	$1^2S_{1/2}$
L_I	2	0	$\frac{1}{2}$	$2^2S_{1/2}$
L_{II}	2	1	$\frac{1}{2}$	$2^2P_{1/2}$
L_{III}	2	1	$\frac{3}{2}$	$2^2P_{3/2}$
M_I	3	0	$\frac{1}{2}$	$3^2S_{1/2}$
M_{II}	3	1	$\frac{1}{2}$	$3^2P_{1/2}$
M_{III}	3	1	$\frac{3}{2}$	$3^2P_{3/2}$
M_{IV}	3	2	$\frac{3}{2}$	$3^2D_{3/2}$
M_V	3	2	$\frac{5}{2}$	$3^2D_{5/2}$

Tabelle 6.13.: Bezeichnung der dreimpulsaufgespaltenen inneren Niveaus

Tabelle 6.13 gibt eine Auflistung der Bezeichnungen. Diese folgen der Konvention $n^{2S+1}L_j$ (Siehe auch Abschnitt 6.8.2.1).

Abbildung 6.45 die radiale Elektronendichteverteilung von Wasserstoff und von einfach positiv geladenen Ionen. Je grösser die Kernladung ist, desto näher ist die K-Schale beim Kern.

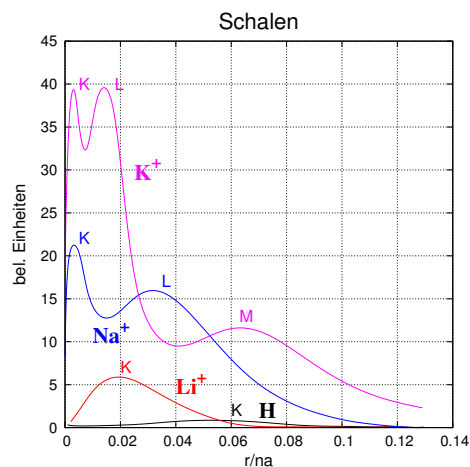


Abbildung 6.45.: Schalen aufbau von H, Li^+ , Na^+ und K^+ nach [HW04, p. 351].

Schliesslich zeigt Abbildung 6.46 die Ionisationszustände von Atomen aus dem Periodensystem. Mit Periodensystem wird die auf der Elektronenkonfiguration beruhende Anordnung der Elemente genannt.

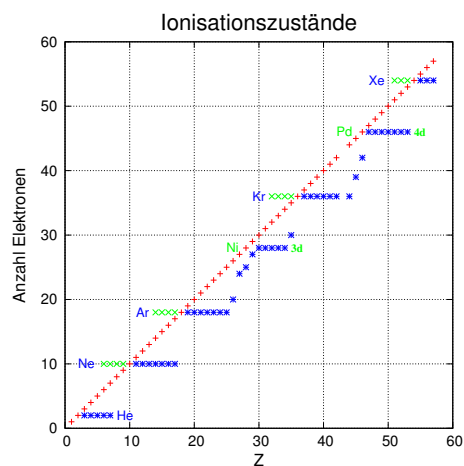


Abbildung 6.46.: Ionisationszustände nach [HW04, p. 349].

Eine Tabelle aller Elektronenkonfigurationen, Ionisationsenergien und Schalen aller Elemente finden Sie im Anhang B.

6.10.3. Auger-Prozesse

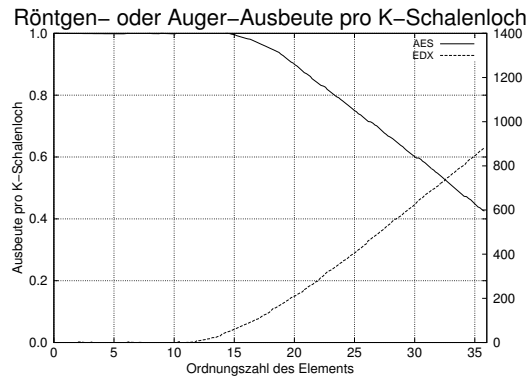


Abbildung 6.47.: Ausbeute von Augerelektronen als Funktion der Ordnungszahl (gezeichnet nach [HG91])

Augerelektronen treten durch einen Folgeprozess neben photoemittierten Elektronen auf. Als Konkurrenzprozess zur Emission von Augerelektronen kann die durch den Elektronenübergang erzeugte Energie auch als charakteristische Röntgenstrahlung abgegeben werden. Analysiert man die Energie dieser Strahlung, so spricht man von EDX („Energy Dispersive X-Ray Analysis“). Die Abbildung zeigt, dass die Augerelektronenspektroskopie bei relativ niedrigen Ordnungszahlen, EDX bei relativ hohen Ordnungszahlen einen empfindlichen Nachweis von Elementen ermöglicht. Wegen der wesentlich grösseren Fluchttiefe von Photonen wird bei EDX jedoch über einen tiefen Bereich (ca. $1 \mu\text{m}$) unter der Oberfläche gemittelt, so dass schon weitgehend Volumeneigenschaften erfasst werden. Der Augerelektronenprozess ist bestimmt durch drei Orbitalenergien (siehe Abbildung unten).

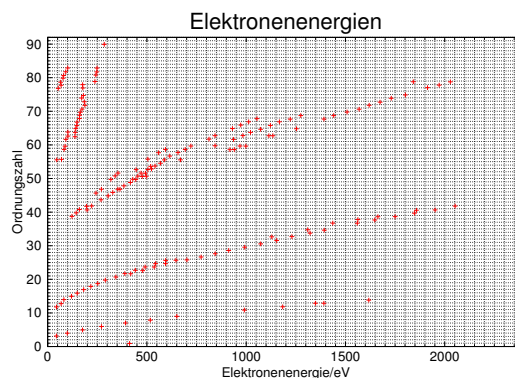


Abbildung 6.48.: Elektronenenergien beim Auger-Prozess als Funktion der Ordnungszahl (gezeichnet nach [HG91])

So lässt sich beispielsweise die kinetische Energie von $KL_I L_{II/III}$ -Elektronen über

$$E(KL_I L_{II/III}) = E(K) - E(L_I) - E(L_{II/III})^* \quad (6.10.3)$$

grob abschätzen. Darin ist $E(K)$ die *Bindungsenergie* des unteren Lochzustandes, $E(L_I)$ die *Bindungsenergie* des Elektrons, das diesen Lochzustand auffüllt, und $E(L_{II/III})^*$ die effektive *Bindungsenergie* des emittierten Augerelektrons. Letztere weicht signifikant von der Energie des neutralen Atoms ab, da starke Wechselwirkungen zwischen den beiden Endzustandslöchern im Atom auftreten. So wird in dem o.g. Beispiel nach Auffüllung der K -Schale durch das L_I -Elektron die *Bindungsenergie* des $L_{II/III}$ -Elektrons erhöht durch das Erzeugen eines Lochs im L_I -Orbital. Die Loch/Loch-Wechselwirkung in der Endzustandskonfiguration hängt dabei davon ab, ob beide Löcher in den Rumpfniveaus, ein Loch im Rumpfniveau und ein anderes in schwächer gebundenen Bändern oder beide in Bändern auftreten. In guter Näherung lassen sich die Augerelektronenenergien abschätzen über:

$$\begin{aligned} E [KL_I L_{II/III}] &= E [K(Z)] \\ &\quad - \frac{1}{2} \{ E [L_I(Z)] - E [L_I(Z + 1)] \\ &\quad + E [L_{II/III}(Z)] + E [L_{II/III}(Z + 1)] \} \end{aligned} \quad (6.10.4)$$

Auch gebräuchlich ist es, die Coulomb-Abstossung der Lochzustände über einen separaten Energieterm zu erfassen. Dabei wird angesetzt:

$$\begin{aligned} E[KL_I L_{II/III}] &= E[K(Z)] - E[L_I(Z)] \\ &\quad - E[L_{II/III}(Z)] - U[KL_I L_{II/III}] \end{aligned} \quad (6.10.5)$$

Darin erfasst der Term $U[KL_I L_{II/III}]$ alle Korrelationseffekte. Bei hoher Korrelation der Bewegung der Löcher und grosser räumlicher Nähe erfolgt starke Coulomb-Abstossung. Diese qualitativen Beispiele machen deutlich, dass die Augerelektrenspektroskopie neben dem überwiegenden Einsatz zur Elementcharakterisierung auch zur Charakterisierung lokaler Bindungsverhältnisse am Zentralatom herangezogen werden kann. Ebenso wie bei *XPS* sind Augerelektronenübergänge unter ausschliesslicher Beteiligung von Rumpfniveaus durch relativ scharfe Linien gekennzeichnet, deren Form in erster Näherung unabhängig von der chemischen Umgebung ist, die jedoch eine charakteristische chemische Verschiebung aufweisen können. Augerelektronen unter Beteiligung des Valenzhandes zeigen dagegen eine extreme Abhängigkeit der *Linienform* vom Zustand der Oberfläche. Eine quantitative Auswertung ist allgemein schwierig, da wegen der Beteiligung mehrerer Orbitale eine Entfaltung vorgenommen werden muss, um die Valenzbandstruktur aus Augerelektrenspektren zu ermitteln. Die grosse Oberflächenempfindlichkeit der Augerelektrenspektroskopie ist durch die Fluchttiefe der Elektronen bei kinetischen Energien der Elektronen unter 1000 eV gegeben.

7. Atome und elektromagnetisches Feld

7.1. Strahlung aus Atomen

7.1.1. Lorentz-Oszillator



Versuch zur Vorlesung:

Linienpektren: Quecksilber, Helium, Kalium, Cadmium, Krypton, Zink (Versuchskarte AT-46)

Wenn ein Atom in einem angeregten Zustand ist, emittiert es seine Energie als Photon zu einem zufälligen Zeitpunkt. Wenn n^* die Anzahl der angeregten Atome ist, dann ist die Rate $n_{h\nu}$ der ausgesandten Photonen in den Raum ($\Omega = 4\pi$)

$$n_{h\nu}(t) = 2\gamma n^*(t) = -\frac{d}{dt}n^*(t) \quad (7.1.1)$$

proportional zur Anzahl der angeregten Atome n^* . Die Lösung von Gleichung (7.1.1) ist eine Exponentialfunktion. Mit der Anfangsbedingung $n^*(0) = n_0^* = n_{h\nu,0}$ erhalten wir

$$n_{h\nu}(t) = C e^{-2\gamma t} n_{h\nu,0}(t) \quad (7.1.2)$$

Die Normierungskonstante ergibt sich aus

$$n_{h\nu,0} = \int_0^{\infty} n_{h\nu}(t) dt = \frac{C}{2\gamma} n_{h\nu,0} \quad \implies \quad C = 2\gamma \quad (7.1.3)$$

Damit ist die Gesamtzahl aller ausgesandter Photonen gleich der Zahl der angeregten Atome $n_{h\nu,0}$ zur Zeit $t = 0$.

Die Lebensdauer des Zustandes ist $\tau = 1/(2\gamma)$. Sie hängt mit dem Einstein-Koeffizienten A der spontanen Emission (aus Gleichung (3.2.27)) zusammen.

Die Anzahl Photonen ist proportional zur Energie. Die Rate mit der die Energie abnimmt ist das Quadrat der Rate, mit der die Amplitude abnimmt. Die Amplitudenabnahme ist

$$E(t) = k \sqrt{2\gamma n_{h\nu}(t)} = k \sqrt{2\gamma n_{h\nu,0}} e^{-\gamma t} \quad (7.1.4)$$

k ist eine Proportionalitätskonstante, die wir hier nicht bestimmen. Aus diesem Verlauf der Amplitude Gleichung (7.1.4) kann die *Linienform* über eine einseitige *Fouriertransformation* \mathfrak{F} oder eine *Laplacetransformation* \mathfrak{L} berechnet. Anschließend wird $s \rightarrow i(\omega - \omega_0)$ ersetzt (Die Überlegung ergibt die Frequenzabweichung,

nicht die Frequenz) das Betragsquadrat gebildet. Die einseitige *Fouriertransformation* wird benötigt, da die zweiseitige *Fouriertransformation* nicht kausal ist.

$$\tilde{E}(s) = \mathcal{L}E(t) = \mathcal{L}k \sqrt{2\gamma n_{h\nu,0}} e^{-\gamma t} = k \sqrt{2\gamma n_{h\nu,0}} \int_0^{\infty} e^{-\gamma t} e^{-st} dt = \frac{k \sqrt{2\gamma n_{h\nu,0}}}{\gamma + s} \quad (7.1.5)$$

Wir ersetzen nun in Gleichung (7.1.5) s mit $i(\omega - \omega_0)$

$$E(\omega) = \tilde{E}(i\omega) = \frac{k \sqrt{2\gamma n_{h\nu,0}}}{\gamma + i(\omega - \omega_0)} \quad (7.1.6)$$

Wir suchen aber die *Linienform* der Intensität (Energie pro Fläche und Zeit). Deshalb müssen wir das Betragsquadrat berechnen.

$$E^2(\omega) = k^2 n_{h\nu}(\omega) = \frac{k^2 \cdot 2\gamma n_{h\nu,0}}{\gamma^2 + (\omega - \omega_0)^2} \quad (7.1.7)$$

Wir erhalten damit die Form der

Lorentzlinie

$$n(\omega) = \frac{2\gamma n_{h\nu,0}}{\gamma^2 + (\omega - \omega_0)^2} \quad (7.1.8)$$

Unsere Normierung garantiert, dass wir wieder die Gesamtzahl der angeregten Atome erhalten, sofern wir über die Frequenz $\nu = \omega/(2\pi)$ integrieren.

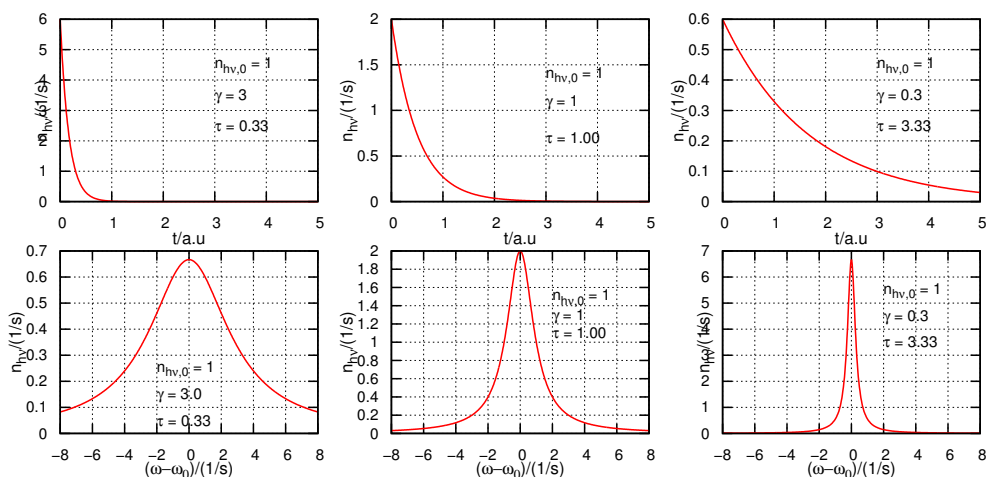


Abbildung 7.1.: Zusammenhang zwischen der Abfallzeit und der Breite der Lorentzlinie. Oben sind die Abfallzeiten gezeigt, darunter die dazu gehörigen Linienbreiten.

Abbildung 7.1 zeigt einige Abfallkurven für die Energie (oder Intensität) und die dazugehörigen Linienbreiten. Wenn die Lebensdauer zunimmt, nimmt die Linienbreite ab.

Typische Werte für die Lebensdauer τ sind 1 ns bis 10 ns. Entsprechend ist $\gamma = 5 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$ bis $5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. Diese Lebensdauer wird auch die *natürliche Lebensdauer* genannt.

Der Einstein-Koeffizient A der spontanen Emission (aus Gleichung (3.2.27)) gibt die Anzahl der Emissionen pro Volumen und Zeit, wenn er mit der Anzahl der Atome im angeregten Zustand n^* multipliziert wird.

7.1.2. Linienbreite



Versuch zur Vorlesung:

Quecksilber: Druckverbreiterung von Spektrallinien (Versuchskarte AT-47)

Die Atome sind in der Regel nicht in Ruhe. Sie bewegen sich auf den Beobachter zu oder weg. Da die Geschwindigkeiten klein gegen die Lichtgeschwindigkeit sind, kann mit der linearisierten Dopplerverschiebung gerechnet werden. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit legen wir die Beobachtungsrichtung in die x -Richtung

$$\omega(v_x) = \omega_0 \left(1 + \frac{v_x}{c} \right) \quad (7.1.9)$$

Für die beobachtete Dopplerverschiebung ist nur die Komponente v_x in Richtung der Wellenausbreitung wichtig. Der Geschwindigkeitsbetrag der Atome in Richtung des Beobachters ist (Siehe Reif, Statistical and Thermal Physics [Rei65, pp. 265])

$$g(v_x)dv_x = n \left(\frac{m_0}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{-m_0 v_x^2}{2k_B T} \right) dv_x \quad (7.1.10)$$

wichtig. Aus der Dopplerverschiebung erhalten wir

$$v_x = c \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \quad (7.1.11)$$

Eingesetzt in Gleichung (7.1.10) ergibt sich

$$g(\omega)d\omega = n \left(\frac{m_0}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{-m_0 c^2 (\omega - \omega_0)^2}{2\omega_0^2 k_B T} \right) d\omega \quad (7.1.12)$$

Diese Verteilungsfunktion muss auch in der Intensität zu finden sein, wobei wir eine unspezifizierte Konstante C verwenden.

$$I(\omega) = C \left(\frac{m_0}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{-m_0 c^2 (\omega - \omega_0)^2}{2\omega_0^2 k_B T} \right) \quad (7.1.13)$$

Die für die *Linienform* charakteristische Größe ist die Halbwertsbreite $\Delta\omega_{1/2} = \omega_{+1/2} - \omega_{-1/2}$ definiert als $I(\omega_{\pm 1/2}) = I(\omega_0)/2$.

$$\Delta\omega_D = 2 \sqrt{2 \log(2)} \sqrt{\frac{k_B T}{m_0 c^2}} \omega_0 \quad (7.1.14)$$

Zum Beispiel sind die Natrium D-Linien bei etwa 589 nm. Dies entspricht einer Frequenz von $\nu_{\text{NaD}} = 5.08985 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Ein Natriumatom hat eine Masse von

$m_0 = 22.98976928 \text{ u} = 3.81754 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$. Bei einer Temperatur von 1273 K ist die Dopplerverbreiterung

$$\begin{aligned}\Delta\nu_D &= 1.49378 \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1/2} \cdot \sqrt{T} \nu_{\text{NaD}} \\ &= 1.49378 \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1/2} \cdot 35.6791 \text{ K}^{1/2} \cdot 5.08985 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1} \\ &= 2.71273 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1} = 2.71273 \text{ GHz}\end{aligned}$$

Gleichung (7.1.13) kann für Na auch so geschrieben werden:

$$I(\omega) = C' T^{-1/2} \exp\left(-\frac{T_{\text{Na}}}{T} \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)\right)$$

mit $T_{\text{Na}} = 1.24254 \cdot 10^{14} \text{ K}$. Abbildung 7.2 zeigt einen Vergleich der Dopplerverbreiterung bei 1273 K und 273 K mit der natürlichen Linienbreite bei einer Lebensdauer von $\tau = 16.3 \text{ ns}$.

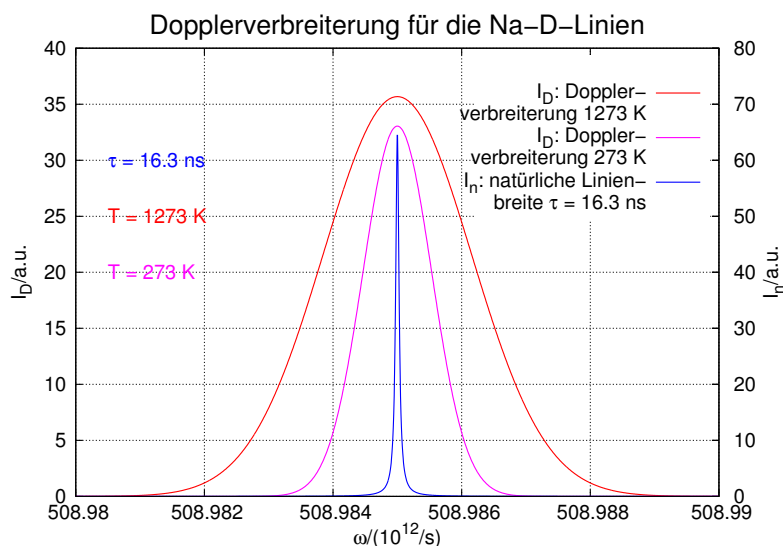


Abbildung 7.2.: Vergleich der Dopplerverbreiterung mit der natürlichen Linienbreite bei den Natrium-D-Linien.

Der Einstein-Koeffizient A der spontanen Emission (aus Gleichung (3.2.27)) gibt die Anzahl der Emissionen pro Volumen und Zeit, wenn er mit der Anzahl der Atome im angeregten Zustand n^* multipliziert wird.

7.1.3. Fluoreszenz

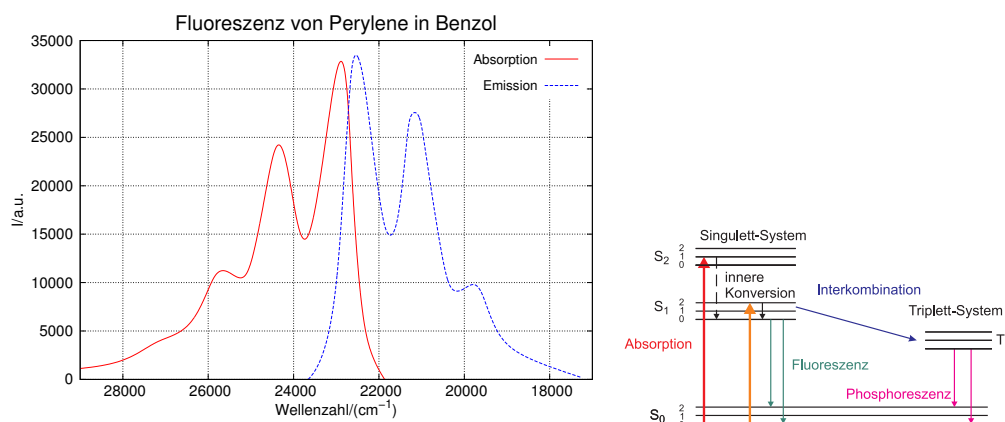


Abbildung 7.3.: Fluoreszenz von Perylene in Benzol (adaptiert aus [Lak06] und rechts: *Jablonski-Diagramm*)

Abbildung 7.3 zeigt ein Fluoreszenzspektrum von Perylene in Benzol und auf der rechten Seite das dazugehörige *Jablonski-Diagramm*. Die Fluoreszenz wurde von William Herschel im Jahre 1845 entdeckt. Sie spielt sich im Singulett-System ab. Die einzelnen Niveaus in ausgedehnten Molekülen sind durch Vibrationen und Rotationen noch weiter aufgespalten. Die Anregung erfolgt dann vom Grundzustand des Singulett-Systems in einen der vibratorisch angeregten Zustände eines höheren Quantenniveaus. Durch die Druckverbreiterung bilden diese Vibrationszustände ein Quasikontinuum. Nach dem *Franck-Condon-Prinzip* ändert ein Elektron bei der Anregung (dauert etwa 10^{-15} s) in ein höheres Niveau seinen Ort kaum. Da die Minima der höheren energetischen Zustände weiter vom Kern weg sind, endet das Elektron üblicherweise in einem vibratorisch angeregten Niveau. Es relaxiert dann im Mittel in weniger als einer Picosekunde in den vibratorischen Grundzustand des angeregten Niveaus. Im Mittel bleibt dann das Elektron während der *Fluoreszenzlebensdauer* (10^{-9} s bis 10^{-8} s) im höheren Niveau um dann unter Aussendung eines Fluoreszenzphotons in einen der vibratorisch angeregten Unterzustände des Grundzustandes zu gelangen. Durch diese Prozesse entsteht ein *Stokes-Shift*. Dieser zeigt sich in Abbildung 7.3 darin, dass das Absorptionsspektrum bei höheren Energien ist als das Emissionsspektrum.

Die Abstände der Vibrationsniveaus sind etwa gleich im Grundzustand wie in den angeregten Zuständen. Das führt dazu, dass das Emissionsspektrum und das Absorptionsspektrum oft spiegelbildlich liegen (*Kasha's Regel*). Diese Regel gilt nicht, wenn ein Molekül bei der Absorption eines Photons ionisiert wird oder wenn es seine *Konformation* ändert.

Wenn der Übergang in den S_2 -Zustand angeregt wird, relaxiert er ziemlich schnell in den S_1 -Zustand. Sowohl da wie auch bei der vibratorischen Abregung werden Energie- und Impulserhaltung durch den Rest des Moleküls oder oft durch die umgebende Flüssigkeit garantiert.

7.1.4. Phosphoreszenz

Nach der Auswahlregel aus Gleichung (6.8.16) koppeln das Singulett- und das Triplettssystem nicht. In einem komplizierten Molekül ist es aber nicht unwahrscheinlich, dass der durch die Impuls- und Drehimpulserhaltung verbotene Übergang von S_2 nach T_1 in Abbildung Gleichung (7.3) mithilfe eines dritten Partners möglich ist. Wenn der Übergang durch *Interkombination* (auch *Intersystem Crossing*) in den Triplettzustand gelangt ist, muss er in diesem metastabilen Zustand wesentlich länger als die Fluoreszenzlebensdauer von etwa $\tau \approx 10^{-8}$ s bleiben. Die mittlere Lebensdauer eines Triplettzustandes T_1 beträgt von Millisekunden bis Stunden. Selbstleuchtende Uhrzeiger sind heute phosphoreszierend. Früher wurde die Fluoreszenz durch radioaktive Stoffe erzeugt. Beim Übergang von $T_1 \rightarrow S_1$ tritt wieder Interkombination auf.

7.1.5. Raman-Effekt

Beim Ramaneffekt (erstmalig beobachtet 1928 von Chandrasekhara Raman) gewinnt oder verliert das Licht Energie bei der Streuung an einem Atom oder Molekül. Die übliche Streuung von Licht (*Rayleigh-Streuung*) kann quantenmechanisch so verstanden werden, dass ein Photon aus dem Grundzustand S_0 (siehe Abbildung 7.4) in ein virtuelles Niveau angeregt wird und dann spontan (Einstein-Koeffizient A) wieder in eine beliebige Richtung emittiert wird. Aus der Unschärferelation für Energie und Zeit ersieht man, dass

$$\Delta E \cdot \Delta t = h\nu\Delta t \approx \frac{\hbar}{2} \quad \Longrightarrow \quad \Delta t \approx \frac{1}{4\pi\nu} \quad (7.1.15)$$

sein muss. Das heißt, für ganz kurze Zeiten (der Effekt ist nicht messbar, aber die Auswirkungen beobachtbar) kann ein virtuelles Niveau existieren. Im Falle von sichtbarem Licht heißt das, dass $\Delta t \approx 1$ fs sein muss.

Wir hatten bei der Fluoreszenz gesehen, dass das Grundniveau S_0 vibratorisch aufgespalten ist. Wir könnten mit Infrarotlicht den vibratorischen Übergang mit $h\nu_v$ direkt ansprechen und spektroskopieren. Bis vor kurzem waren aber keine durchstimmbaren Laser in diesem Wellenlängenbereich vorhanden. Zudem ist die Optik unhandlicher und teurer.

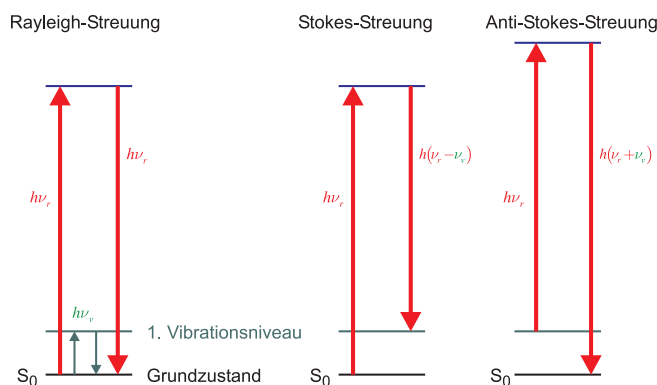


Abbildung 7.4.: Illustration der Ramanstreuung im Vergleich zur Rayleighstreuung.

In Abbildung 7.4 in der Mitte ist der *Stokes-Shift* angegeben. Das Elektron im virtuellen Niveau kann auch in das erste vibratorisch angeregte Niveau relaxieren. Seine Frequenz ist dann

$$h(\nu_r - \nu_v) < h\nu_r \quad (7.1.16)$$

kleiner als das eingestrahelte Licht. Wir erwarten also, dass wir auf der längerwelligen Seite der Rayleigh-Linie eine schwache Linie im Abstand der Vibrationsfrequenz des ersten Vibrationsniveaus finden. Diese Linie wird beobachtet, sie ist aber um Größenordnungen schwächer, da der Streuquerschnitt für Ramanstreuung nur etwa $\sigma_{\text{Raman}} = 10^{-34} \text{ m}^2$ beträgt.

Neben der Stokes-Linie gibt es noch die Anti-Stokes-Linie. Abbildung 7.4 rechts zeigt die Niveaus beim *Anti-Stokes-Shift*. Hier wird ein Elektron im ersten vibratorischen Niveau durch das einfallende Photon in ein virtuelles Niveau angeregt. Dieses relaxiert nachher in das Grundniveau. Wir haben also

$$h(\nu_r + \nu_v) > h\nu_r \quad (7.1.17)$$

Hier hat das Raman-gestreuete Photon eine höhere Frequenz und eine kleinere Wellenlänge als das einfallende Photon. Da das erste vibratorisch angeregte Niveau nach der Boltzmannstatistik weniger stark besetzt ist als der Grundzustand, ist die Anti-Stokes-Linie schwächer als die Stokes-Linie.

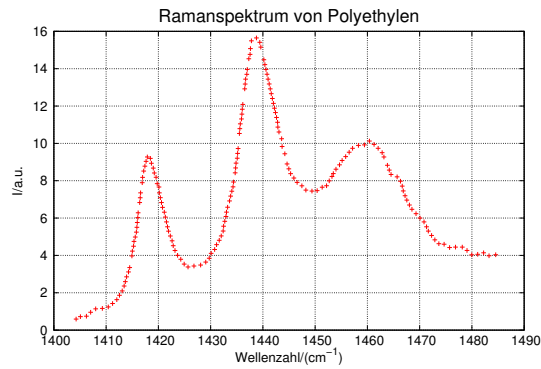


Abbildung 7.5.: Ramanspektrum von Polyethylen im Bereich der Methylen-Biegeschwingung (adaptiert aus [BK70])

Abbildung 7.5 zeigt beispielhaft ein Ramanspektrum von kristallinem Polyethylen (siehe auch [BK70]). Die Auswahlregeln für Dipolübergänge sagen, dass die Übergänge, die in der Infrarotspektroskopie beobachtet werden, also den üblichen Auswahlregeln für optische Spektroskopie genügen, nicht in Ramanspektren beobachtet werden, und umgekehrt.

7.2. Laser

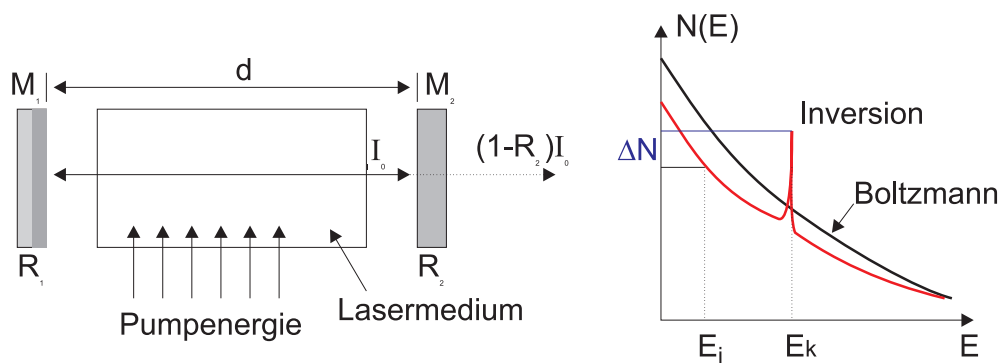


Abbildung 7.6.: Aufbau eines Lasers (links) sowie schematische Darstellung der Inversion im Vergleich zur thermischen Verteilung.

Wenn sich Materie in optisch angeregten Zuständen befindet, wird diese Anregung durch Emission abgebaut. Wenn es gelänge, alle Atome oder Moleküle in einem bestimmten Volumen kohärent strahlen zu lassen, dann würde man eine Lichtquelle mit einzigartigen Eigenschaften gewinnen.

Der Laser, am Anfang der 60-er Jahre erfunden wurde, erfüllt genau diese Bedingungen. Die Abbildung 7.6 zeigt den schematischen Aufbau. Ein aktives Medium befindet sich in einem *Fabry-Perot-Resonator* [Pér96][Dem93]. Das Licht im *Resonator* wird durch das aktive Medium bei jedem Durchgang verstärkt. Die Verstär-

kung erfolgt durch stimulierte Emission. Ein kleiner Teil des Lichtes wird durch die Spiegel des Fabry-Perot-Resonators ausgekoppelt und steht für Experimente zur Verfügung.

Die rechte Seite der Abb. 7.6 zeigt die Besetzungsverteilung. Im Vergleich zu einer thermischen Verteilung, gegeben durch die Boltzmannverteilung $N(E) = \exp(-E/kT)$, sind die Zustände bei hohen Energien deutlich stärker besetzt als im thermischen Fall. Diese sogenannte Besetzungsinversion ist für die Funktionsweise des Lasers notwendig.

Die Diskussion der Wirkungsweise von Lasern beruht auf dem exzellenten Lehrbuch von Demtröder [Dem93].

7.2.1. Laserprozesse

7.2.1.1. Schwellwertbedingung

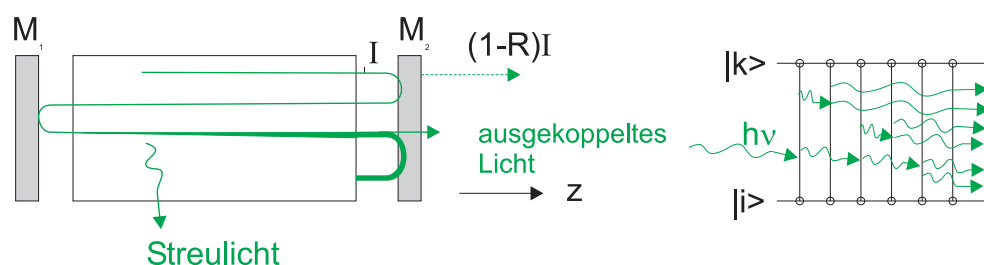


Abbildung 7.7.: Schematische Darstellung der Verstärkung und der Verluste in einem *Resonator*

Um die Intensität der in z -Richtung laufenden Welle in Abb. 7.7 zu berechnen setzen wir für die Intensität an

$$I(\nu, z) = I(\nu, z = 0)e^{-\alpha(\nu)z} \quad (7.2.1)$$

Hier ist der frequenzabhängige Absorptionskoeffizient durch

$$\alpha(\nu) = [N_i - (\tilde{g}_i/\tilde{g}_k)N_k] \sigma(\nu) \quad (7.2.2)$$

gegeben. $\alpha(\nu)$ hängt von den Besetzungsdichten N_i des unteren Laserniveaus und N_k des oberen Laserniveaus, von den statistischen Gewichten \tilde{g}_i und \tilde{g}_k ¹ und vom optischen Wirkungsquerschnitt $\sigma(\nu)$ ab.

Wenn $(g_i/g_k)N_k > N_k$ ist, wird der Absorptionskoeffizient in Gleichung (7.2.2) negativ. Aus der Dämpfung ist also, analog wie bei der Phasendrehung von Operationsverstärkern, eine Verstärkung geworden. Der Verstärkungsfaktor ist

$$G_0(\nu, z) = \frac{I(\nu, z)}{I(\nu, z = 0)} = e^{-\alpha(\nu)z} \quad (7.2.3)$$

¹Für einen elektronischen Zustand E_i eines freien Atoms mit der Drehimpulsquantenzahl J ist $\tilde{g}_i = 2J_i + 1$

Die gesamte zusätzliche Abschwächung der Intensität durch Auskoppelverluste und Ähnliches kann in eine Gleichung mit einem Exponentialfaktor γ zusammengefasst werden.

$$I/I_0 = e^{-\gamma} \quad (7.2.4)$$

In der Regel wird das zur Verstärkung verwendete optische Medium in einen *Resonator* gebracht (analog zur Abb. 7.7, links). An den beiden Endspiegeln treten Verluste auf. Einerseits ist es nicht möglich, einen Spiegel mit einer Reflektivität von 100% zu bauen, der zudem noch eine unendliche Ausdehnung hat um Beugungsverluste zu minimieren. Andererseits muss an einem Spiegel die Reflektivität kleiner als 1 sein, damit Laserlicht ausgekoppelt werden kann. Die Verstärkung, Beugungs-, Auskopplungs- Reflexionsverluste beim Durchgang durch einen *Resonator* können als Intensitätsänderung pro Umlauf geschrieben werden

$$G = I/I_0 = \exp[-2\alpha(\nu)L - \gamma] \quad (7.2.5)$$

Bei der Berechnung der Verstärkung nach einem Umlauf ist angenommen worden, dass das Medium die Länge L hat. Wenn G grösser als 1 ist, beginnt die stimulierte Emission im Lasermedium die spontane Emission zu dominieren. Damit dies möglich ist, muss $-2\alpha(\nu)L > \gamma$ sein. Zusammen mit Gleichung (7.2.2)

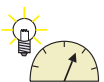
$$-2[N_i - (\tilde{g}_i/\tilde{g}_k)N_k]\sigma(\nu)L > \gamma$$

bekommt man die Schwellwertbedingung

$$\Delta N = N_k(\tilde{g}_i/\tilde{g}_k) - N_i > \Delta N_S = \frac{\gamma}{2\sigma(\nu)L} \quad (7.2.6)$$

für die minimale Besetzungsinversion ΔN_S .

Die Laseremission beginnt immer mit einer spontanen Emission aus dem oberen Laserniveau in eine Resonatormode. Dabei werden die Photonen, deren Frequenz nahe der Resonator-Mittenfrequenz liegt, bevorzugt verstärkt. Durch die beginnende stimulierte Emission wird die Besetzungsinversion abgebaut bis ein Gleichgewicht erreicht wird. Unabhängig von der Pumpleistung ist die Inversion in einem Laser beim stationären Betrieb immer gleich der Schwellwertinversion ΔN_S .



Versuch zur Vorlesung:

Zerlegbarer Laser (Versuchskarte AT-30)

7.2.1.2. Die Bilanzgleichungen

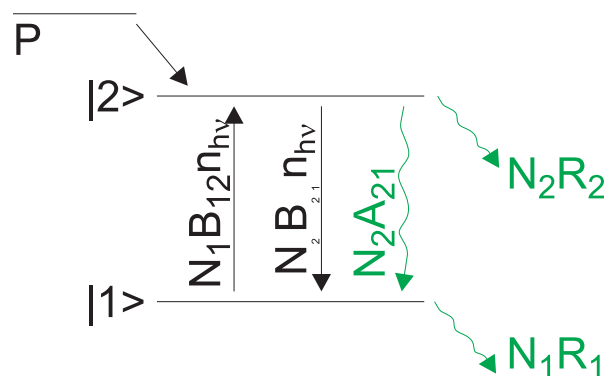


Abbildung 7.8.: Funktion eines Lasers: Pumpprozess P , Relaxationsraten, induzierte und spontane Emission.

Der stationäre Laserbetrieb kann durch Bilanzgleichungen beschrieben werden. Anhand des Termschemas in Abb 7.8 ist ersichtlich, dass aus einem Pumpprozess P das obere Laserniveau $|2\rangle$ gespiesen wird. Zusätzlich wird die Besetzungszahl dieses Niveaus durch die Absorption aus dem unteren Laserniveau $|1\rangle$ mit der Rate $N_1 B_{12} \cdot n \cdot h \cdot \nu$ erhöht. Es gibt drei Verlustkanäle, die spontane Emission mit der Rate $N_2 A_{21}$, die induzierte Emission mit der Rate $N_2 B_{21} \cdot n \cdot h \cdot \nu$ und die verlustrate $N_2 R_2$, zum Beispiel in Tripletzustände. Das untere Laserniveau $|1\rangle$ wird durch den Relaxationsprozess mit der Rate $N_1 R_1$ entvölkert.

Die Photonenzahl $n_{h\nu}$ nimmt durch die stimulierte Emission aus dem Niveau $|2\rangle$ zu und durch die Absorption aus dem Niveau $|1\rangle$ ab. Zusätzlich werden

$$\frac{dn_{h\nu, \text{spontan}}}{dt} = N_2 A_{21} \frac{2 \langle d\Omega_m \rangle}{4\pi} \quad (7.2.7)$$

Photonen durch die spontane Emission in die Richtung der Resonatormode geschickt. Jedes Atom sieht dabei einen Spiegel im Raumwinkel $d\Omega_m$. Wir haben zwei Spiegel, so dass im Mittel von jedem Atom der Bruchteil $2 \langle d\Omega_m \rangle / (4\pi)$ der spontan emittierten Photonen auf die Spiegel trifft und so nennenswerte induzierte Emission auslösen kann.

Wenn man annimmt, dass die statistischen Gewichte gleich sind ($\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2$), bekommt man die Ratengleichungen

$$\frac{dN_1}{dt} = (N_2 - N_1) B_{21} n_{h\nu} + N_2 A_{21} - N_1 R_1 \quad (7.2.8)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = P - (N_2 - N_1) B_{21} n_{h\nu} - N_2 A_{21} - N_2 R_2 \quad (7.2.9)$$

$$\frac{dn_{h\nu}}{dt} = -\beta n_{h\nu} + (N_2 - N_1) B_{21} n_{h\nu} + N_2 A_{21} \frac{2 \langle d\Omega_m \rangle}{4\pi} \quad (7.2.10)$$

Der Laserresonator hat seine eigene Verlustrate. Wenn man $N_1 = N_2$ setzt erhält

man aus (7.2.10) den Verlustfaktor β

$$n_{h\nu} = n_0 e^{-\beta t} \quad (7.2.11)$$

Durch Vergleich erhält man für den Verlustfaktor γ

$$\gamma = \beta T = \beta(2L/c) \quad (7.2.12)$$

wobei L die Resonatorlänge ist.

Im stationären Betrieb müssen die in den obigen Gleichungen vorkommenden Ableitungen verschwinden. Aus den Gleichungen (7.2.8) und (7.2.9) bekommt man in diesem Falle

$$P = N_1 R_1 + N_2 R_2 \quad (7.2.13)$$

Die Pumprate muss also im stationären Betrieb die beiden Verlustraten $N_1 R_1$ und $N_2 R_2$ aus dem unteren, beziehungsweise aus dem oberen Laserniveau ausgleichen. Andererseits bekommt man durch Addition aus (7.2.9) und (7.2.10) die Gleichung

$$P = \beta n_{h\nu} + N_2 \left(A_{21} \left(1 - \frac{\langle d\Omega_m \rangle}{2\pi} \right) + R_2 \right) \approx \beta n_{h\nu} + N_2 (A_{21} + R_2) \quad (7.2.14)$$

sofern $1 \gg 1 - \frac{\langle d\Omega_m \rangle}{2\pi}$ ist. Die Pumprate P ersetzt also die Resonatorverluste (7.2.12) sowie die durch spontane Emission und Relaxation aus dem oberen Laserniveau verschwindenden Photonen. Die Relaxationsrate des unteren Niveaus ist im stationären Betrieb

$$N_1 R_1 = N_2 A_{21} + \beta n_{h\nu} \quad (7.2.15)$$

Sie kompensiert gerade die spontane Emission und die Verlustrate der induzierten Photonen. Deshalb ist sie immer grösser als die Auffüllrate aus dem Niveau $|2\rangle$ durch spontane Emission.

Wir multiplizieren Gleichung (7.2.8) mit R_2 und Gleichung (7.2.9) mit R_1 und können für den stationären Zustand ($d/dt = 0$) mit der Definition $\Delta N_{stat} = N_2 - N_1$ die folgende Umformung

$$\begin{aligned} 0 &= -R_1 P + (R_2 + R_1)(N_2 - N_1) B_{21} n_{h\nu} + \\ &\quad (R_2 + R_1) N_2 A_{21} + (N_2 - N_1) R_1 R_2 \\ &= -R_1 P + (R_2 + R_1) \Delta N_{stat} B_{21} n_{h\nu} + \\ &\quad (R_2 + R_1) N_2 A_{21} + \Delta N_{stat} R_1 R_2 \end{aligned} \quad (7.2.16)$$

durchführen.

Mit der Gleichung (7.2.13) erhält man über

$$P = N_1 R_1 + N_2 R_2 = (N_2 - \Delta N_{stat}) R_1 + N_2 R_2 = N_2 (R_1 + R_2) - \Delta N_{stat} R_1$$

die stationäre Besetzungsinversion

$$\Delta N_{stat} = \frac{(R_1 - A_{21}) P}{B_{21} n_{h\nu} (R_1 + R_2) + A_{21} R_1 + R_1 R_2} \quad (7.2.17)$$

Aus (7.2.17) folgt, dass eine stationäre Besetzungsinversion $\Delta N_{stat} > 0$ nur für Medien mit $R_1 > A_{21}$ möglich ist. Dies bedeutet, dass das untere Laserniveau sich schneller entleeren muss als das obere sich durch spontane Emission entvölkert. Im realen Laserbetrieb wird das untere Laserniveau zusätzlich durch die induzierte Emission bevölkert. Die Relaxationsrate des unteren Laserniveaus muss deshalb der Bedingung

$$R_1 > A_{21} + B_{21}\rho \quad (7.2.18)$$

genügen.

7.2.2. Laserstrahlen

Wenn der Energieverlust der k-ten Mode mit der Zeit wie

$$dE_k = -\beta_k E_k dt \quad (7.2.19)$$

ist dann ist

$$E_k(t) = E_k(0)e^{-\beta_k t} \quad (7.2.20)$$

Die Resonatorgüte ist als

$$Q_k \equiv -2\pi\nu \frac{E_k}{dE_k/dt} = 2\pi\nu/\beta_k \quad (7.2.21)$$

definiert. Für einen *Resonator* der Länge d ist der Verlustfaktor durch

$$\gamma = (2d/c)\beta \quad (7.2.22)$$

gegeben. Der Verlustfaktor setzt sich aus Beugungsverlusten, Absorptionsverlusten, Reflexionsverluste und die Verluste durch Lichtstreuung zusammen.

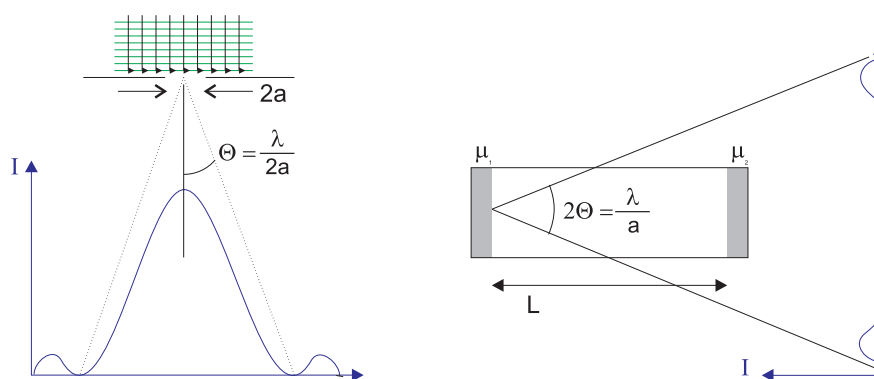


Abbildung 7.9.: Beugung einer ebenen Welle an einer Blende

Intensität und Reflexionsverluste

$$I = I_0 R_1 R_2 = I_0 e^{-\gamma R} \quad \text{mit} \quad \gamma R = -\ln(R_1 R_2) \quad (7.2.23)$$

Mit der Umlaufzeit $T = 2d/c$ wird die Abklingkonstante $\beta_R = \gamma_R/T = \gamma_{RC}/2d$. Die mittlere Verweilzeit der Photonen im Resonator ist

$$\tau = \frac{2d}{c \ln(R_1 R_2)} \tag{7.2.24}$$

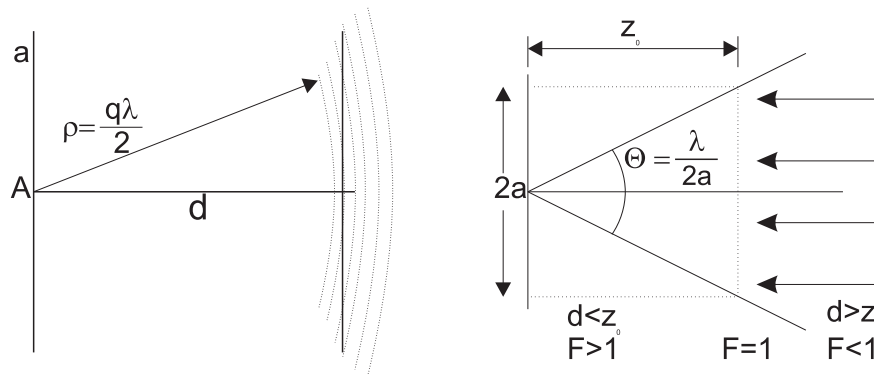


Abbildung 7.10.: Erklärung der Fresnelzahl

Die Beugung wird durch die Fresnel-Zahl charakterisiert.

$$F = a^2/(d\lambda) \tag{7.2.25}$$

Sie gibt an, wieviele Fresnelzonen auf dem gegenüberliegenden Spiegel entstehen, wenn man im Abstand $\rho_q = q\lambda/d$ (q ganzzahlig). Wenn $d < z_0$ ist, ist $F > 1$ und die Beugungsverluste minimal. Damit bei planparallelen Spiegeln ein Photon m -Umläufe machen kann, muss der Beugungswinkel $\Theta < a/(md)$ sein. Also muss

$$F > m \tag{7.2.26}$$

sein. Resonatoren mit der gleichen *Fresnelzahl* haben die gleichen Verluste.

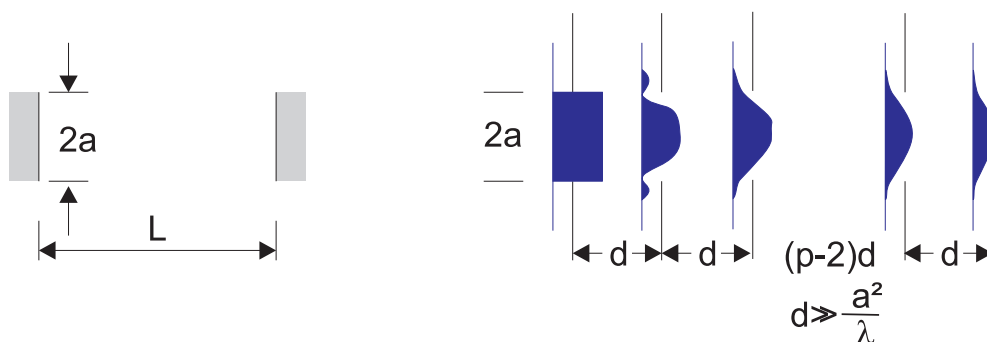


Abbildung 7.11.: Anschauliche Erklärung, dass ein ebener Spiegelresonator mit einer Folge von Blenden äquivalent ist.

Um die *Beugungsverluste* eines Resonators zu berechnen, kann man den *Resonator* durch eine Folge von Linsen und Blenden ersetzen (siehe Abb. 7.11). Dabei entsprechen ebene Spiegel einer Apertur. Gekrümmte Spiegel müssen entsprechend durch Sammell- oder Zerstreuungslinsen ersetzt werden. Aus der Abbildung 7.11 ist sofort ersichtlich, dass *ebene Wellen* keine Lösung des Resonatorproblems sein können.

7.2.2.1. Resonatormoden

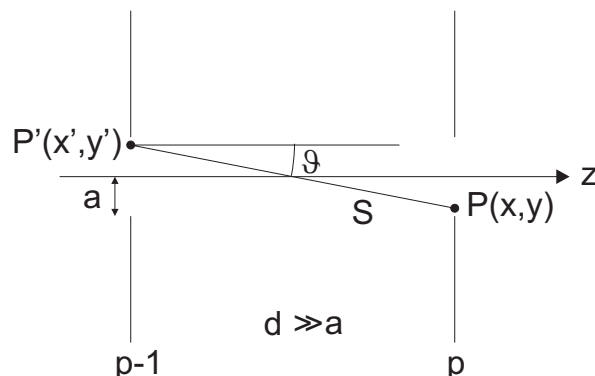


Abbildung 7.12.: Die Feldamplitude $P(x, y)$ kann aus den Amplituden in der Ebene $P'(x', y')$ bestimmt werden.

Um die Beugungserscheinungen an einer Folge von Aperturen handhaben zu können, wird die *Kirchhoff-Fresnel'sche* Beugungstheorie auf die Geometrie in Abb. 7.11. Die Feldverteilung bei der A_p -ten Apertur wird aus der Feldverteilung in der A_{p-1} -ten Apertur mit Hilfe der Gleichungen der *Fourieroptik* berechnet.

Die Amplitude am Punkt $P(x, y)$ in der Apertur A_p ist durch

$$A_p(x, y) = -\frac{j}{2\lambda} \int_{x'} \int_{y'} A_{p-1}(x', y') \frac{1}{\rho} e^{-jk\rho} (1 + \cos\vartheta) dx' dy' \quad (7.2.27)$$

gegeben (Siehe Abb. 7.12). Die stationäre Feldverteilung muss die beiden folgenden Eigenschaften haben:

- Da der *Resonator* als lineares System betrachtet wird, wirken sich die Beugungsverluste als Multiplikation mit einem reellen Faktor $0 < \sqrt{1 - \gamma_B} < 1$ aus.
- Der Lichtweg zwischen zwei Aperturen (Spiegeln) wird durch einen Phasenfaktor $e^{j\phi}$ beschrieben.

Für die Amplitude gilt also

$$A_p(x, y) = C A_{p-1}(x, y) \text{ mit } C = e^{j\phi} \sqrt{1 - \gamma_B} \quad (7.2.28)$$

wobei wie oben diskutiert, der Faktor $|C|^2 = 1 - \gamma_B$ den ortsunabhängigen Intensitätsverlust durch Beugung beschreibt. Die Modenverteilung ist die Lösung der

Gleichung, die entsteht, wenn man (7.2.28) in (7.2.27) einsetzt. Diese Gleichungen sind im allgemeinen nicht analytisch lösbar.

Nur für den symmetrischen konfokalen Resonator kann eine Näherungslösung [Dem93] angegeben werden. Dazu muss der Ursprung des Koordinatensystems in das Zentrum des Resonators gelegt werden. Dann ist für eine beliebige Ebene die Intensitätsverteilung

$$A_{m,n}(x, y, z) = C \cdot H_m(x^*) \cdot H_n(y^*) \cdot e^{-(x^{*2}+y^{*2})/4} \cdot e^{-j\phi(x,y,z)} \quad (7.2.29)$$

H_m und H_n sind die Hermitschen Polynome m -ter und n -ter Ordnung. C ist ein Normierungsfaktor und $x^* = \sqrt{2} \frac{x}{w}$ und $y^* = \sqrt{2} \frac{y}{w}$ sind normierte Koordinaten. Die Normierungsgrösse w ist ein Mass der radialen Amplitudenverteilung und durch

$$w^2(z) = \frac{\lambda d}{2\pi} \left[1 + \left(\frac{2z}{d} \right)^2 \right] \quad (7.2.30)$$

gegeben. d ist hier die Länge des Resonators. Unter Verwendung der Abkürzung $\xi = 2z/d$ bekommt man für die Phase der elektromagnetischen Wellen in einem konfokalen Resonator mit den Krümmungsradien b der Spiegel gleich dem Abstand der Spiegel d

$$\phi(x, y, z) = \frac{2\pi}{\lambda} \left[\frac{b}{2} (1 + \xi^2) + \frac{(x^2 + y^2) \xi}{d(1 + \xi^2)} \right] - (1 + m + n) \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{1 - \xi}{1 + \xi} \right) \quad (7.2.31)$$

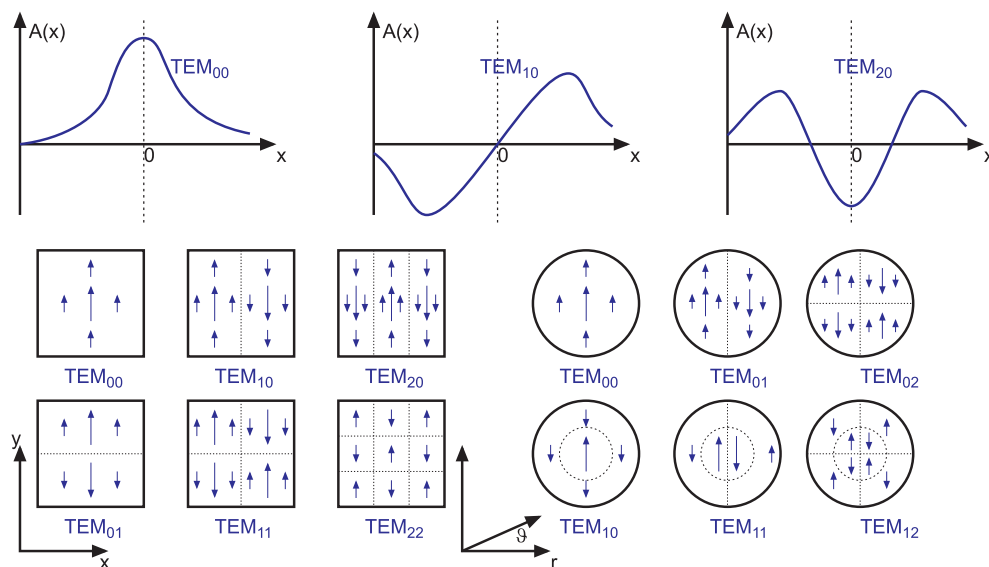


Abbildung 7.13.: Oben die eindimensionale Modenverteilung unten links die *Modenverteilung* in kartesischen Koordinaten und unten rechts in Zylinderkoordinaten.

Abbildung 7.13 zeigt einige Modenverteilungen. Sie werden *TEM-Moden* genannt, da sie in guter Näherung transversal-elektromagnetische Wellen darstellen. Die

Zahlen m und n geben die Anzahl *Knoten* der Feldverteilung an.

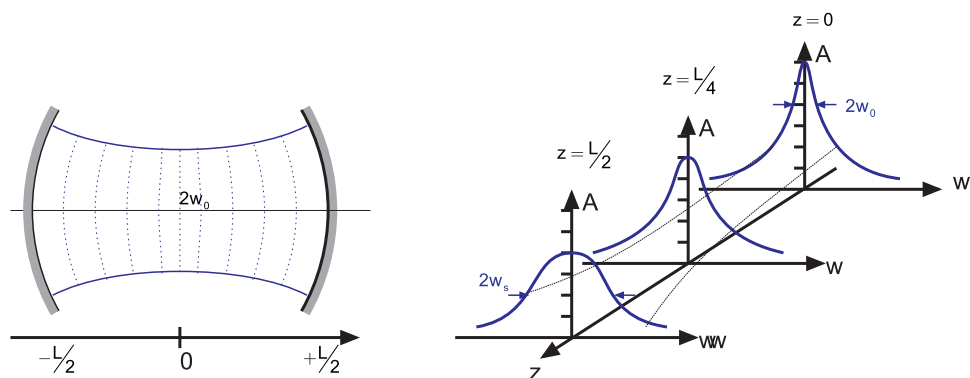


Abbildung 7.14.: Radiale Amplitudenverteilung in konfokalen Resonatoren

Ist $n = m = 0$ so hat man die Grundmode. Ihre Intensitätsverteilung ist

$$I_{00}(x, y) = I_0 e^{-(x^2+y^2)/w^2} \tag{7.2.32}$$

Sie haben deshalb eine Gauss'sche Intensitätsverteilung. Die Größe w gibt an, bei welchem Radius die Intensität auf den Faktor $1/e^2$ bezogen auf das Strahlzentrum abgefallen ist. Der minimale Strahldurchmesser

$$w_0 = \sqrt{\lambda d / 2\pi} \tag{7.2.33}$$

heißt auch Strahltaile. Eine exemplarische Amplitudenverteilung ist in der Abbildung 7.14 gezeigt. Resonatoren, deren Spiegel sich in die Wellenfronten eines symmetrischen konfokalen Resonators einpassen lassen, können ebenfalls mit der hier gezeigten Theorie beschrieben werden.

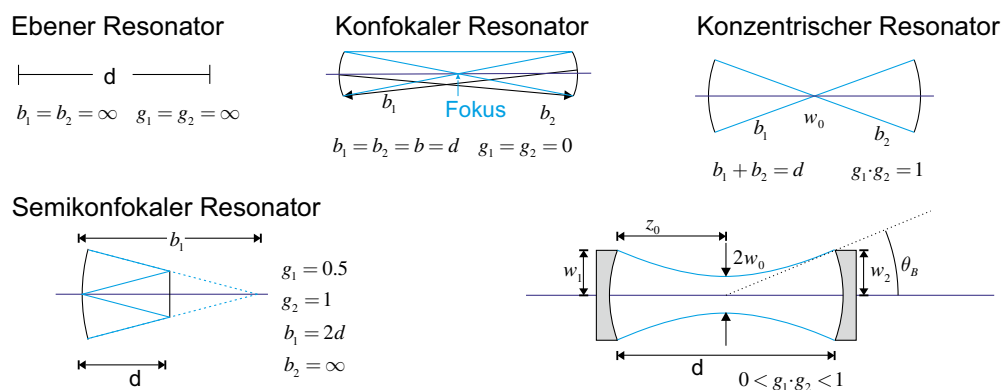


Abbildung 7.15.: Beispiele für Laserresonatoren

Die Abbildung 7.15 zeigt Beispiele von *Laserresonatoren*.

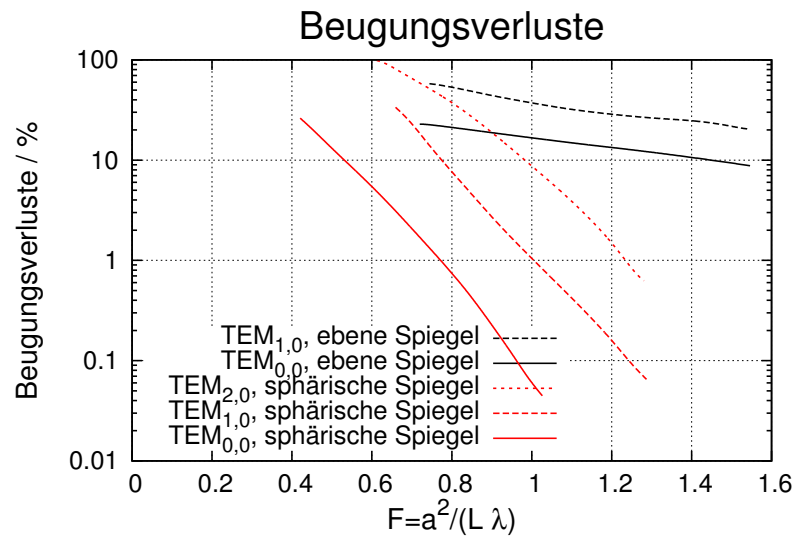


Abbildung 7.16.: Beugungsverluste von $TEM_{n,m}$ -Moden

Die Beugungsverluste von offenen Resonatoren hängen von der betrachteten Lasermode ab. Abbildung 7.16 zeigt einen Graphen der Beugungsverluste. Als Ordinate ist die *Fresnel-Zahl* angegeben. Durch eine Verringerung der *Fresnel-Zahl* können die Verluste der höheren Modenordnungen so vergrößert werden, dass sie nicht mehr anschwingen können.

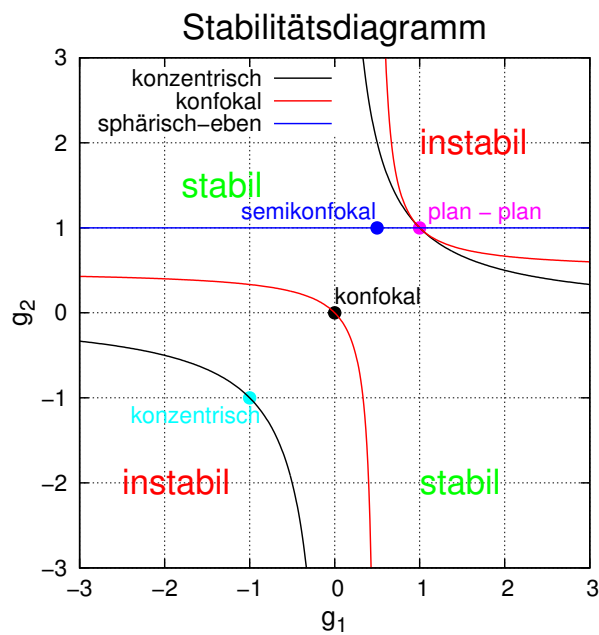


Abbildung 7.17.: Stabilitätsdiagramm für optische Resonatoren

Die Stabilität eines Resonators folgt aus der Forderung, dass die Strahlparameter eines zu den Spiegeln passenden Gausstrahls nach einem Umlauf auf sich selber abgebildet werden soll. Aus der Mathematik der Gausstrahlen erhält man mit

$$g_i = 1 - \frac{d}{b_i} = 1 - \frac{L}{b_i} \quad (7.2.34)$$

den Durchmesser des Strahls auf den Spiegeln M_1 und M_2 . $L = d$ ist der Abstand der beiden Spiegel. Der Strahldurchmesser ist jeweils

$$\pi w_1^2 = \lambda d \left(\frac{g_2}{g_1(1 - g_1 g_2)} \right)^{1/2} \quad (7.2.35)$$

$$\pi w_2^2 = \lambda d \left(\frac{g_1}{g_2(1 - g_1 g_2)} \right)^{1/2} \quad (7.2.36)$$

Also divergieren die Strahldurchmesser für $g_1 g_2 = 1$ sowie für $g_1 = 0$ und $g_2 = 0$. Die Stabilitätsbedingung folgt aus (7.2.35) und (7.2.36) und ist

$$0 < g_1 g_2 < 1 \quad (7.2.37)$$

Das resultierende Stabilitätsdiagramm ist in der Abbildung 7.17 gezeigt. Eine Liste der Bezeichnungen zeigt Tabelle 7.19.

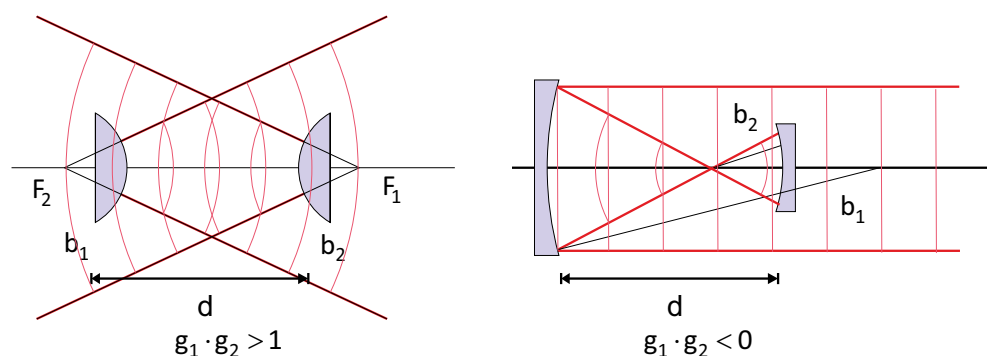


Abbildung 7.18.: Beispiele von instabilen Resonatoren

Typ	Spiegelradien	Stabilitätsparameter
konfokal	$b_1 + b_2 = 2L$	$g_1 + g_2 = 2g_1 \cdot g_2$
konzentrisch	$b_1 + b_2 = L$	$g_1 \cdot g_2 = 1$
symmetrisch	$b_1 = b_2$	$g_1 = g_2 = g$
symmetrisch konfokal	$b_1 = b_2 = L$	$g_1 = g_2 = 0$
symmetrisch konzentrisch	$b_1 = b_2 = \frac{1}{2}L$	$g_1 = g_2 = -1$
semikonfokal	$b_1 = \infty, b_2 = 2L$	$g_1 = 1, g_2 = \frac{1}{2}$
eben	$b_1 = b_2 = \infty$	$g_1 = g_2 = +1$

Abbildung 7.19.: Klassifizierung von Resonatoren nach Demtröder[Dem93]. Die b_i sind die Krümmungsradien der Spiegel, deren Abstand b ist.

Instabile Resonatoren, wie sie in der Abbildung 7.18 gezeigt sind, werden bevorzugt bei Verstärkermedien mit sehr hoher Verstärkung verwendet. Ebenso werden sie oft bei Kurzpuls-Lasern eingesetzt. Dadurch dass der Strahl divergiert, ist die Intensitätsverteilung des Laserlichts gleichmässiger über alle Moden verteilt.

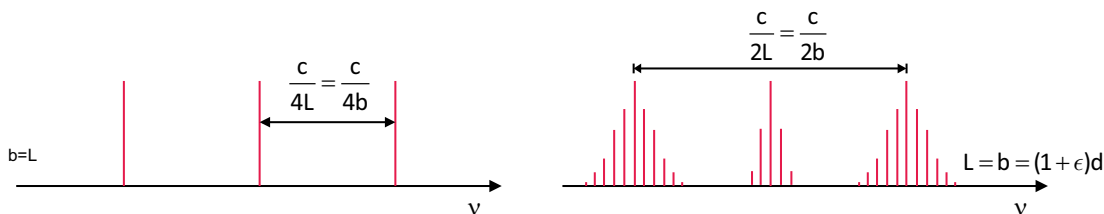


Abbildung 7.20.: Frequenzspektrum eines konfokalen Resonators (links) und eines nicht-konfokalen Resonators (rechts). Für den rechten Fall ist der Resonator nur wenig ($b = (1 + \epsilon) \cdot d$ mit $|\epsilon| \ll 1$) vom konfokalen Resonator ($b = d$) unterschieden.

Die Frequenzen der in einem Resonator möglichen Moden hängen, wie in Abbildung 7.20 gezeigt, vom Resonatortyp an. Beim konfokalen Resonator sind die Eigenfrequenzen durch

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2d} \left[q + \frac{1}{2}(m + n + 1) \right] \quad (7.2.38)$$

gegeben. q ist der Index der longitudinalen Modenverteilung, m und n die Indices der transversalen Modenverteilung. Der Spiegelabstand

$$d = p \cdot \frac{\lambda}{2} \quad \text{wobei} \quad p = q + \frac{1}{2}(m + n + 1) \quad (7.2.39)$$

Das heisst, dass höhere transversale Moden mit $q_1 = q$ und $q_2 = m + n$ die gleich Frequenz haben wie eine transversale Grundmode ($m + n = 0$) mit dem longitudinalen Modenindex $q = q_1 + q_2$. Das Frequenzspektrum eines konfokalen Resonators ist also entartet. Der Modenabstand für die longitudinalen Moden ist

$$\delta\nu = \frac{c}{2d} \quad (7.2.40)$$

während transversale Moden mit $q_1 = m + n$ und $q_2 = q_1 + 1$ um

$$\delta\nu_{konfokal} = \frac{c}{4d} \quad (7.2.41)$$

voneinander entfernt sind.

Bei nichtkonfokalen Resonatoren, bei denen der Krümmungsradius der Spiegel b nicht gleich dem Spiegelabstand d ist, ist das Frequenzspektrum nicht mehr entartet

$$\nu = \frac{c}{2d} \left[q + \frac{1}{2}(1 + m + n) \left(1 + \frac{4}{\pi} \arctan \frac{d - b}{d + b} \right) \right] \quad (7.2.42)$$

Die transversalen Moden liegen in einem Bereich um die transversale Grundmode mit dem gleichen longitudinalen Modenindex. Dies ist in der rechten Seite von Abbildung 7.20 gezeigt.

Bei einer endlichen Güte des Laserresonators verringert sich die Intensität des Lichtes mit jedem Umlauf um einen kleinen Wert. Nach der Zeit $\tau = \frac{Q}{2\pi\nu}$ ist sie auf den Wert $1/e$ gesunken. Die daraus resultierende Frequenzunschärfe ist

$$\Delta\nu = \frac{1}{2\pi\nu} = \frac{\nu}{Q} \quad (7.2.43)$$

oder, umgeschrieben,

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{1}{Q} \quad (7.2.44)$$

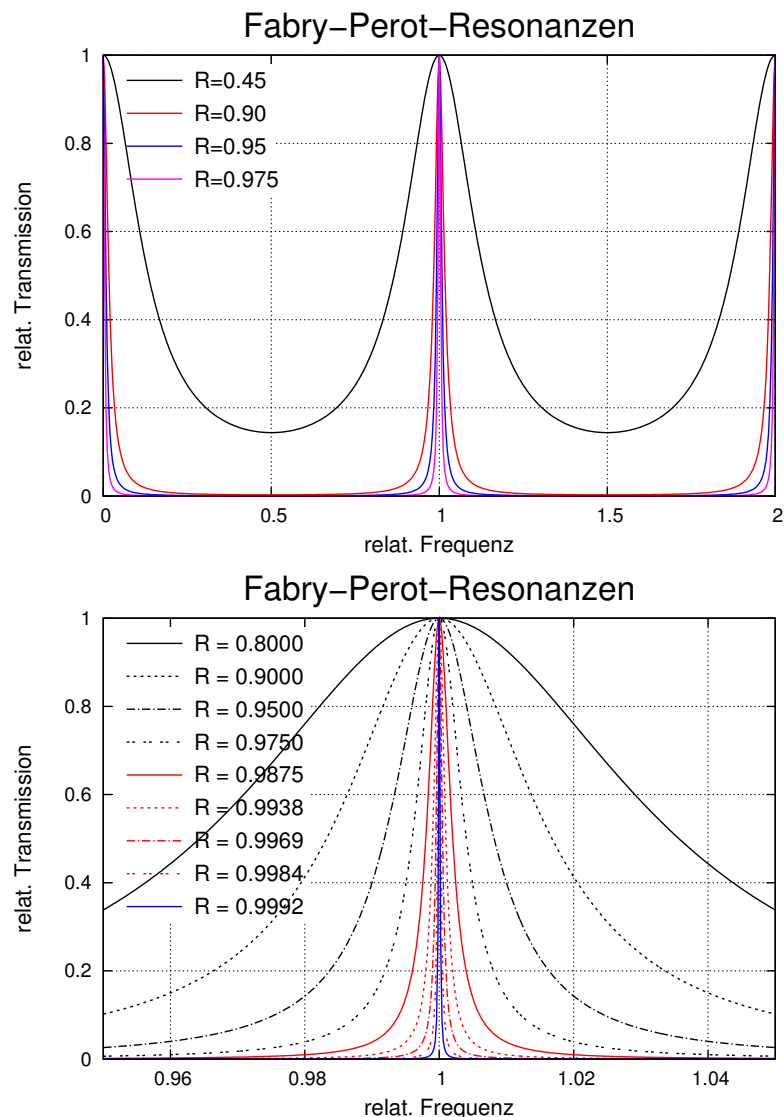


Abbildung 7.21.: Fabry-Perot-Resonanzen: oben ist ein Überblick gezeigt, unten die Vergrößerung um 1. Die Kurven sind auf einen frequenzabstand von 1 normiert.

Wenn die Verluste im Laserresonator vorwiegend durch die Auskopplung von Licht an den Spiegeln stammen, können die Gleichungen für Fabry-Perot-Interferometer verwendet werden. Dort ist die transmittierte Intensität durch

$$I_T = I_0 \frac{T^2}{(1 - R)^2 \cdot (1 + F \sin^2 \frac{\delta}{2})} \tag{7.2.45}$$

gegeben (siehe auch Abb. 7.21), wobei die *Finesse* $F = \frac{4R}{(1-R)^2}$ ist. Die Reflektivität R der Spiegel, die Absorption A in den Spiegeln und ihre Transmission hängen über $T = 1 - A - R$ zusammen. Die Intensität im Resonator ist $I_{int} = \frac{I_T}{1-R}$. Resonanzen

treten bei $\delta = 2m\pi$ auf. Die Halbwertsbreite ist dann

$$\Delta\nu = \frac{c}{2d} \frac{1-R}{\pi\sqrt{R}} = \frac{\delta\nu}{F^*} \quad (7.2.46)$$

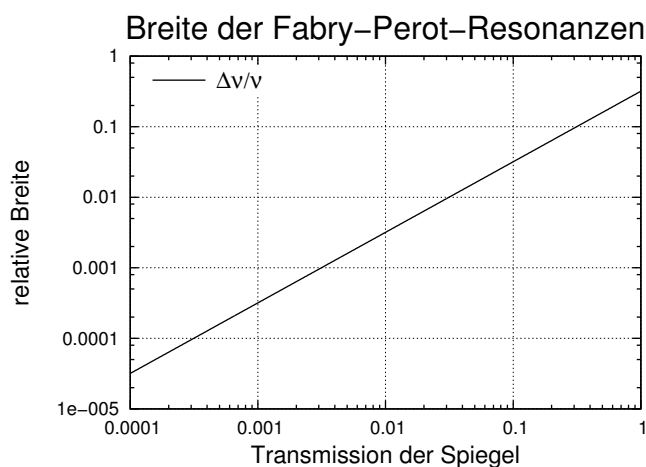


Abbildung 7.22.: Normierte Linienbreite als Funktion von $T = 1 - R$. Der Modenabstand im Fabry-Perot-Resonator ist 1.

Hier ist $F^* = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R}$ die Reflexionsfinesse. Haben die beiden Spiegel unterschiedliche Reflektivitäten R_1 und R_2 , so wird für $R = \sqrt{R_1 \cdot R_2}$ gesetzt. Die in diesem Abschnitt berechneten Linienbreiten sind die Linienbreiten eines passiven Resonators. Durch das aktive Medium werden die Resonatoren entdämpft: die Linienbreiten werden geringer.

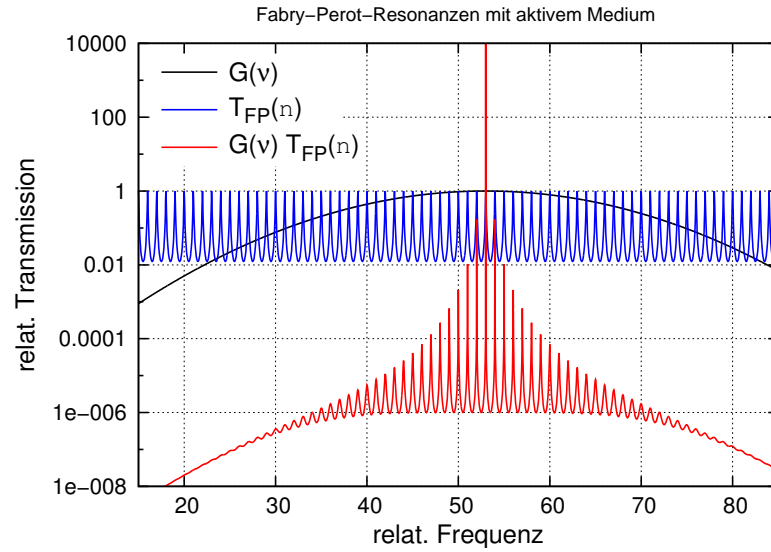


Abbildung 7.23.: Verstärkungsprofil (rot) eines Laserüberganges und die Resonanzmoden (blau). Das kombinierte verstärkungsprofil nach Gleichung (7.2.47) ist grün eingezeichnet.

Mit einem aktiven Medium im Resonator werden diejenigen Moden verstärkt, für die die Nettoverstärkung pro pro Umlauf $G(\nu) = I/I_0 = \exp[-2\alpha(\nu)L - \gamma]$ nach Gleichung (7.2.5) maximal ist. Nach Demtröder[Dem93] ist die transmittierte Intensität

$$I_T = I_0 \frac{(1 - R)^2 G(\nu)}{[1 - G(\nu)]^2 + 4G(\nu) \sin^2 \frac{\delta}{2}} \quad (7.2.47)$$

In Abbildung 7.23 ist das damit berechnete Verstärkungsprofil eingezeichnet. Wenn die Verstärkung gegen 1 geht (hier mit einer Gauss-Funktion², die ihr Maximum bei 53 und eine Breite von 14.34 hat) geht die Gesamtverstärkung $I_T/I_0 \rightarrow \infty$. Dieses maximum wird bei $\delta = q \cdot 2\pi$ erreicht. Dabei muss anstelle der Resonatorlänge d die effektive Resonatorlänge

$$d^* = (d - L) + n(\nu)L = d + (n - 1) \cdot L \quad (7.2.48)$$

verwendet werden. L ist die Länge des Lasermediums und $n(\nu)$ der (frequenzabhängige) Brechungsindex. Die Frequenzbreite des aktiven Resonators wird

$$\Delta\nu = \delta\nu \frac{1 - G(\nu)}{2\pi \sqrt{G(\nu)}} = \frac{\delta\nu}{F_\alpha^*} \quad (7.2.49)$$

Die Finesse F_α^* des aktiven Resonators wird unendlich, wenn die Verstärkung $G(\nu) \rightarrow 1$ wird.

²Nach Demtröder[Dem93] ist das Linienprofil gaussförmig, wenn die Dopplerverbreiterung, wie bei Gaslasern im sichtbaren Wellenlängenbereich, dominierend ist.

Fabry–Perot–Resonanzen mit aktivem Medium

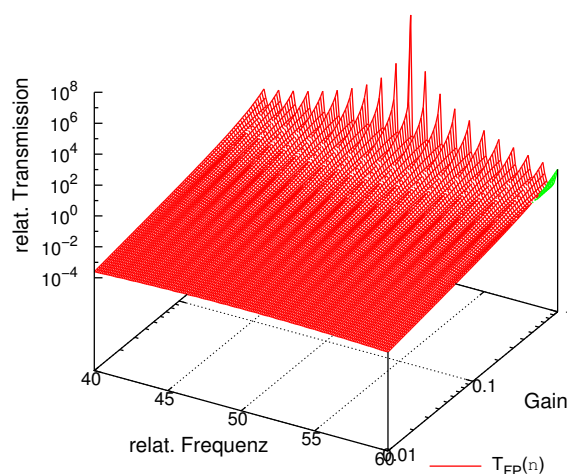


Abbildung 7.24.: Modenprofil des aktiven Resonators in Abhängigkeit der Verstärkung.

Die Abbildung 7.24 zeigt, wie das Modenprofil sich in Funktion der Verstärkung ändert. Während bei niedrigen Verstärkungen die Transmission für viele Moden etwa gleich ist, beginnt eine einzelne Mode zu dominieren, wenn die Verstärkung $G(\nu)$ gegen 1 geht.

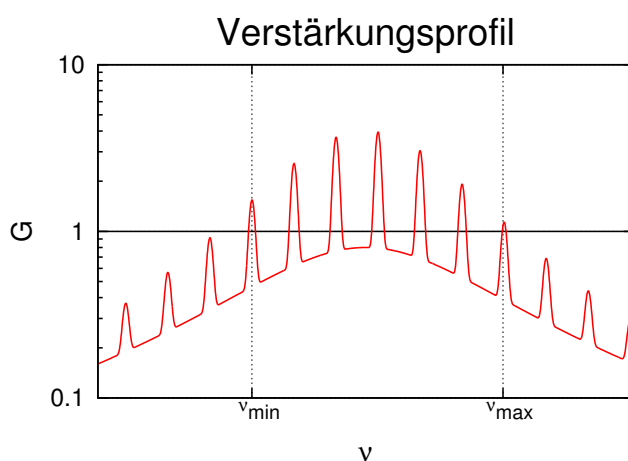


Abbildung 7.25.: Verstärkungsprofil des aktiven Mediums

Im Gegensatz zu den der Abbildung 7.23 zugrundeliegenden Annahmen ist das Verstärkungsprofil des Lasermediums meistens sehr viel breiter als der longitudinale

Modenabstand. Deshalb ist die Anzahl schwingungsfähiger Moden meistens wie in der Abbildung 7.25 gezeigt, grösser als 1. Ausnahmen sind Laserdioden wegen ihrem sehr kurzen Resonator und gewisse sehr hochgezüchtete Laseranordnungen.

7.2.3. Gaslaser

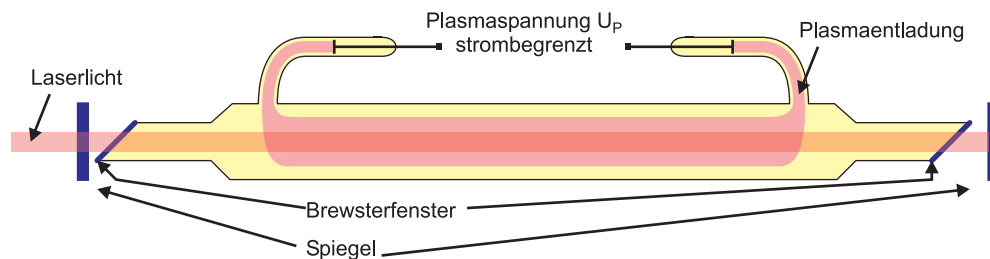


Abbildung 7.26.: Aufbau von Gaslasern.

Bei Gaslasern wie in Abbildung 7.26 werden die Atome durch Stösse mit Elektronen in das obere Laserniveau gepumpt. Bei Stössen gilt die Regel, dass das obere Niveau weniger besetzt sein muss als das untere nicht. Die Elektronen werden durch eine Plasmaentladung getrieben durch die strombegrenzte Plasmaspaltung U_P getrieben. Diese Spannung beträgt einige Kilovolt. Die Röhre mit dem Gas wird durch Brewsterfenster abgeschlossen. Die Spiegel des Resonators sind in der Regel ausserhalb der Gasentladungsröhre.

Gaslaser haben eine ziemlich geringe Verstärkung pro Länge. Deshalb ist es notwendig, die Verluste zu minimieren. Brewsterfenster ermöglichen bei einer Polarisation eine Transmission ohne Verluste. Sie sind in der Regel auf Fortsätzen montiert, das das Plasma chemisch aggressiv ist und mit der Zeit insbesondere die empfindlichen optischen Oberflächen angreift.

Die Modenstruktur des Laserlichtes kann mit Modenblenden kontrolliert werden. Da die $TEM_{0,0}$ -Mode die kleinste Ausdehnung senkrecht zur Ausbreitungsrichtung aufweist, ist sie bei immer kleiner werdendem Durchmesser der Modenblende die letzte überlebende Mode, kann also problemlos selektiert werden.

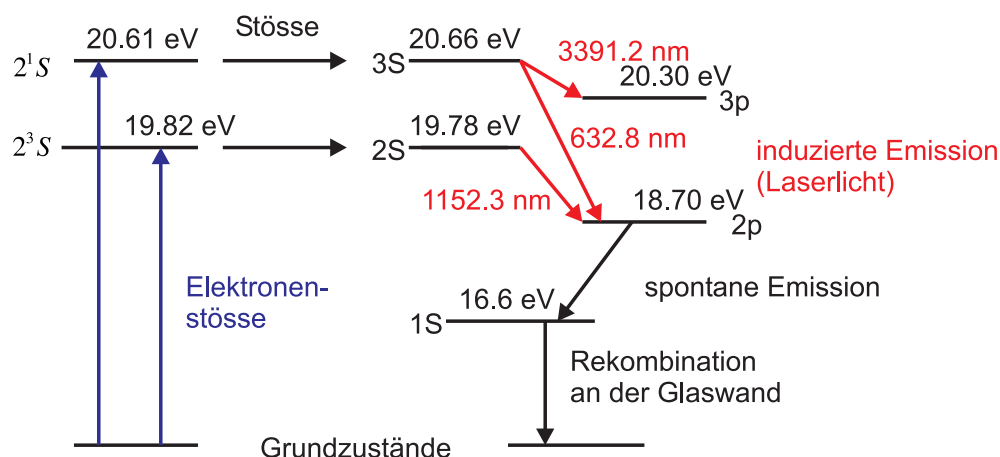


Abbildung 7.27.: Termschema des He-Ne-Lasers (nach [JBH61] und [Yar75]).

Der erste Typ Gaslaser war der Helium-Neon-Laser. Sein Termschema ist in Abbildung 7.27 gezeigt. Dieser Laser benutzt ein Gasgemisch, da Elektronenstöße in Neon wegen dem tief liegenden $1s$ -Niveau die Laserniveaus $2S$ und $3S$ nicht anregen können. Helium mit seiner kleinen Kernladung hat viel grössere energetische Niveauunterschiede. Die metastabilen 2^1S - und 2^3S -Zustände des Heliums sind in Resonanz mit den $3S$ - und $2S$ -Zuständen des Neons. Die Energie wird über resonante Stöße zweiter Art vom Helium auf das Neon übertragen. Wie Abbildung 7.27 zeigt, bilden die Niveaus des Neons ein 3-Niveau-Laserschema. Die stärkste Laserlinie des He-Ne-Lasers ist die Linie bei 1152.3 nm. Heute wird vor allem die Linie bei 632.8 nm verwendet. Die Laserlinien werden durch die schmalbandige Reflexionsbeschichtung der Spiegel oder über Prismen selektiert.

Das $1S$ -Niveau des Neons ist metastabil und langlebig. Hier würden sich alle Elektronen aus dem $2p$ -Niveau ansammeln. Nur Stöße mit der Wand sind effizient genug, um dieses Niveau zu entleeren. Man erwartet und findet, dass He-Ne-Laser mit kleineren Durchmessern des Entladungsrohres eine höhere Verstärkung haben, weil das $1S$ -Niveau stärker entleert ist. Tabelle 7.1 fasst einige Kenngrößen zusammen.

$\lambda/(\text{nm})$	$A/(\text{dB m}^{-1})$	$P_{out}/(\text{mW})$
632.8	0.3	5 – 10
1152.3	0.4	10 – 100
3391.3	25	10 – 100

Tabelle 7.1.: Verstärkungen und Ausgangsleistungen der Laserlinien der HeNe-Laser (nach [Sig82]).

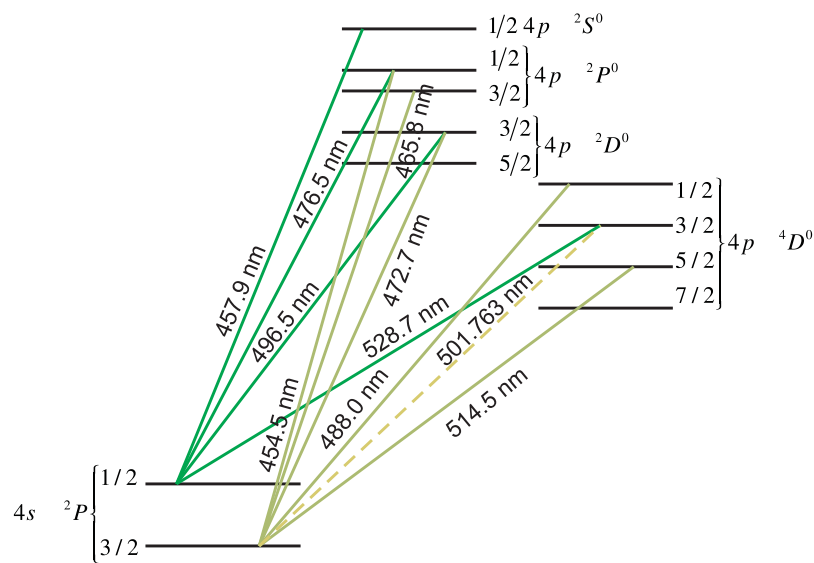


Abbildung 7.28.: Termschema des Argon-Ionen-Lasers (nach [Bri64]).

Abbildung 7.28 zeigt das Termschema des Ar^+ -Ionen-Lasers. Dieser Laser kann auf vielen Wellenlängen vom Ultravioletten bis ins infrarote emittieren. Die wichtigsten Wellenlängen sind $\lambda = 514.5 \text{ nm}$ und $\lambda = 488.0 \text{ nm}$. Weiter erreicht man mit diesem Laser Lichtleistungen von mehr als 100 W. Die Laserübergänge befinden sich zwischen hochangeregten Niveaus des positiv geladenen Ions. Der Laser benötigt extrem hohe Stromstärken und Pumpleistungen (für 10 W Licht etwa 50 kW elektrische Leistung). Der Argon-Ionenlaser funktioniert mit einer reinen Argonfüllung. Elektronen mit einer Energie von 4 eV bis 5 eV regen in Stufen die oberen Laserniveaus an, die bei etwa 20 eV liegen. Da der Laser auf verschiedenen Linien emittieren kann, wird im Resonator ein dispersives Element benötigt, zum Beispiel ein Prisma, mit dem man eine Wellenlänge auswählen kann. Tabelle 7.2 gibt eine Übersicht über einige der vorkommenden Wellenlängen.

$\lambda/(\text{nm})$	$A/(\text{dB m}^{-1})$	$P_{out}/(\text{W})$
351.1	—	1
363.8	—	1
476.5	—	0.5 – 2
488.0	0.1	2 – 50
496.5	—	0.5 – 2
514.5	0.1	2 – 50

Tabelle 7.2.: Verstärkungen und Ausgangsleistungen der Laserlinien des Argon-Ionen-Laser (nach [Sig82]).

7.2.4. Festkörperlaser

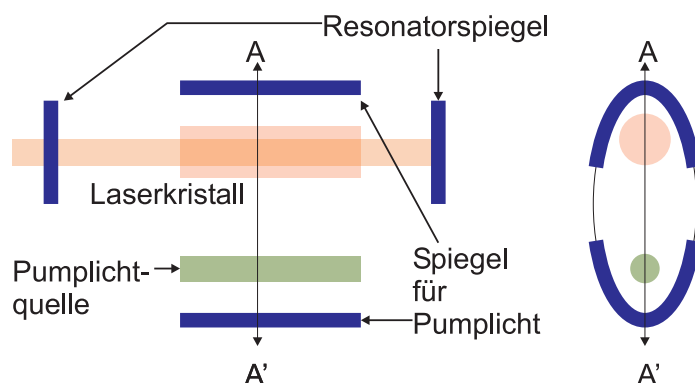


Abbildung 7.29.: Schematischer Aufbau eines Festkörperlasers. Die Pumplichtquelle kann eine Blitzlichtlampe, eine Laserdiode oder ein anderer Laser sein.

Abbildung 7.29 zeigt den prinzipiellen Aufbau von Festkörperlasern. Diese Laser werden durch Licht gepumpt. Ursprünglich waren dies Blitzlampen, heute häufig Laserdioden (siehe Abschnitt 7.2.5). Um das Pumplicht möglichst effizient in das Lasermedium zu bringen sind die Blitzlampen in Spiegel so angeordnet, dass sie zum Beispiel in einem Fokus sind und das Lasermedium im anderen Fokus eines elliptischen Spiegels. Laserdioden werden üblicherweise auf der Seite des Lasermediums angeordnet. Alternativ kann ein Pumplaserstrahl kollinear oder fast kollinear zum Ausgangslaserstrahl angeordnet sein. Im Buch von Yariv [Yar75] findet sich eine sehr gute Übersicht über Laser.

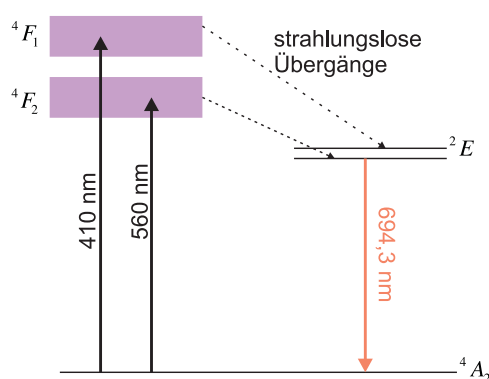


Abbildung 7.30.: Termschema des Rubinlasers (nach [Mai60] und [Sig82]).

Der erste Laser war der Rubinlaser [Mai60]. Abbildung 7.30 zeigt das Termschema des Lasers. Rubin ist Aluminiumoxid, wie auch Saphir und viele andere Edelsteine. Es sind nur die Verunreinigungen, die einen Saphir von einem Rubin unterschei-

den. Beim Rubin sind dies eingebaute Cr^+ -Ionen mit einem Gewichtsanteil von 0.05%. Ihr Termschema ist in Abbildung 7.30 gezeigt. Durch Pumplicht werden die breitbandigen Pumpniveaus bevölkert. Strahlungslose Übergänge bevölkern das obere Laserniveau. Der Laser emittiert bei $\lambda = 694.3 \text{ nm}$.

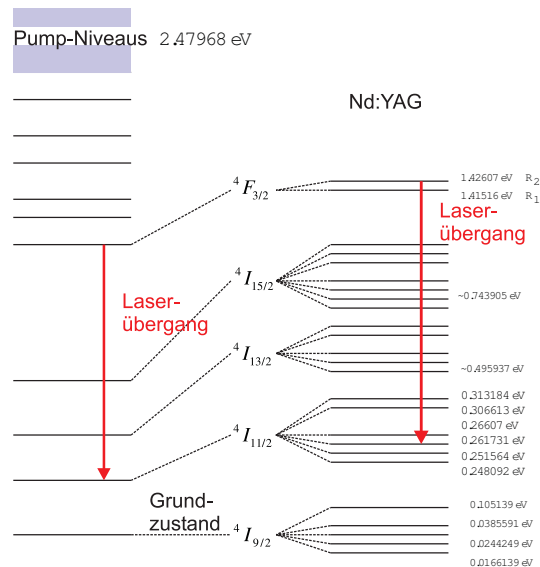


Abbildung 7.31.: Termschema von *Nd:YAG-Lasern* (siehe [Sig82] und [KS08])

Ein heute enorm wichtiger Festkörperlaser ist der *Nd:YAG-Laser*. Im Wirtskristall $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (Yttriumaluminiumgranat) sind etwa 1% der Y^{3+} -Ionen durch Nd^{3+} -Ionen ersetzt. Die gute Wärmeleitfähigkeit und die sehr gute optische Qualität ermöglichen hohe Laserleistungen. Das Energieschema des Nd:YAG-Lasers ist in Abbildung 7.31 gezeigt. Es ist ein Vierniveau-System, das besonders effiziente Laser ermöglicht. Das untere Laserniveau ist bei Raumtemperatur praktisch leer und wird auch sehr schnell entleert, so dass leicht grosse Inversionen erreicht werden können. Die stärkste Laserlinie ist die bei $\lambda = 1064.1 \text{ nm}$, Diese Linie wird oft Intra-Cavity frequenzverdoppelt und ergibt dann die Wellenlänge von $\lambda = 532 \text{ nm}$ (grüner Laserpointer!).

7.2.5. Diodenlaser

pn-Dioden aus Halbleitern mit direkter Bandlücke emittieren Strahlung, wenn sie in Durchlassrichtung betrieben werden: LED (Light emitting diode). Die Ursache ist die sog. strahlende direkte Rekombination über die Bandlücke hinweg. *GaAs* selbst emittiert im Infraroten, im Sichtbaren werden $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ -Materialien und GaP:N -Materialien eingesetzt. Neuerdings spielt GaN eine bedeutende Rolle. Das Emissionsspektrum ist i. allg. sehr breit und temperaturabhängig. Die Richtcharakteristik ist ausgesprochen breit und wird in der Praxis z. B. durch Kunststofflinsen in Vorwärtsrichtung verbessert. Die Schaltzeiten können $1 \mu\text{s}$ deutlich unterschreiten.

Die strahlende Rekombination kann auch über einen Zwischenzustand (Lumi-

neszenz-Zentrum) erfolgen. Bekanntes Beispiel sind die blauen SiC-LEDs (Siemens). Die neuen blauen LEDs bestehen aus AlGaN/InGaN-Doppelheterostrukturen. Werden sie mit YAG (Yttrium Aluminium Garnet) und Phosphoren direkt beschichtet, entsteht eine *weisse LED*. Ein weiterer Trend geht zu grossflächigen LEDs, einzelne Emitterflächen reichen an 1 mm^2 .

Das LED-Prinzip lässt sich zum *Halbleiter-Laser* weiterentwickeln. Dazu sind zwei Dinge notwendig. Erstens muss die induzierte Emission die bei der LED ausschliesslich vorhandene spontane Emission deutlich übertreffen. Hierzu ist in der sog. aktiven Zone eine ausreichende Besetzungsinversion notwendig. In einer beidseitig sehr hoch dotierten ($> 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) entarteten pn-Diode, die in Durchlassrichtung betrieben wird, ist die Ladungsträgerinjektion tatsächlich ausreichend gross, um gepulsten Laserbetrieb zu erhalten. Vorausgesetzt, die zweite Bedingung ist erfüllt: die gesamten Verluste der Strahlungsmode müssen kleiner sein als ihr Gewinn. Erreicht wird dies durch einen länglichen (ca. 1 mm) Resonator. Man erhält ihn durch Brechen entlang einer niederinduzierten Kristallebene ((110) in *GaAs*), die Seitenflächen werden aufgeraut. Dieser sog. Kantenstrahler emittiert an beiden Enden.

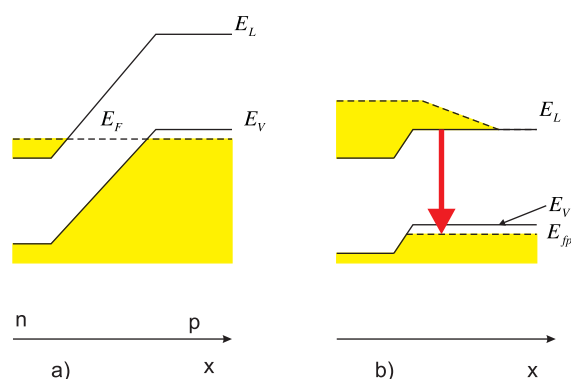


Abbildung 7.32.: P⁺N⁺-Laserdiode a) ohne Spannung und b) mit angelegter Spannung und dadurch hervorgerufener Besetzungsinversion. (nach [Rou99])

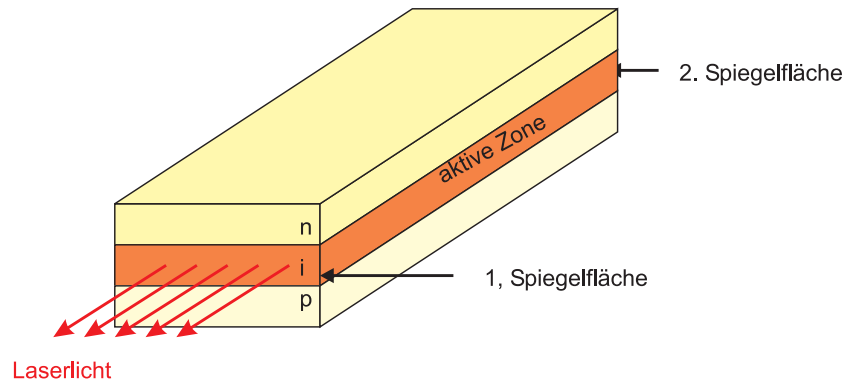


Abbildung 7.33.: Prinzip des Laserresonators nach [Hin96]. Eine ausführliche Darstellung findet sich im Abschnitt [7.2.2.1](#)

Die aktive Zone ist mehrere μm hoch und seitlich noch unbegrenzt; auch die Strompfade sind noch undefiniert. Deshalb ist die sog. Schwellstromdichte noch sehr hoch, die Verlustwärme zerstört die Laserdiode rasch.

Viel besser wäre es, wenn der optische Resonator durch einen Wellenleiter seitlich auf seine Grundmode eingeschränkt würde; das *Halbleiter-Material* der aktiven Zone müsste also einen deutlich höheren Brechungsindex haben als das sie umgebende Material: ‘optisches Confinement’. Auch der Diodenstrom müsste nur durch die aktive Zone und auf den Zuleitungswegen möglichst niederohmiges Material durchfließen müssen: ‘Elektrisches Confinement’. Die mässige spektrale Bandbreite, bedingt durch die energetische Breite der besetzten Zustände ($h\nu > E_{\text{Gap}}$!) und die gebrochenen planen Endflächen sollten durch einen wellenlängenselektiven hochreflektierenden Spiegel (z. B. DFB Distributed feedback) ersetzt werden.

Technologisch haben die *Halbleiter* diesen weiten Weg über viele Jahre mit schrittweisen Verbesserungen zurückgelegt. Hier können nur wenige genannt werden: der Heterojunction Laser, der Doppel-Heterojunction Laser mit dem optischen Confinement in der Senkrechten und einer senkrechten Ausdehnung der aktiven Zone von ca. 200 nm durch ein elektrisches Confinement mit Hilfe der Banddiskontinuitäten.

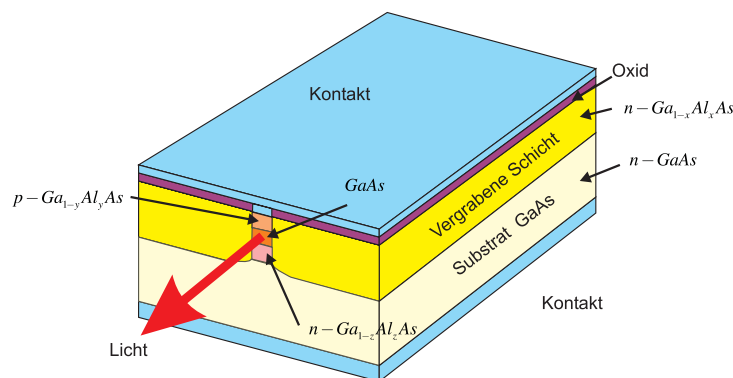


Abbildung 7.34.: Quantum Well Lasers (nach [Yar75]).

Abbildung 7.34 zeigt eine weitere verbesserte Variante dieses Typs. Der Wellenleiter ist zusätzlich seitlich begrenzt; der Zuleitungskontakt ist durch eine Oxidmaske streifenförmig definiert. Mit solchen Lasern sind ca. 10 mW im Dauerbetrieb bei Raumtemperatur möglich.

7.2.6. Erzeugung kurzer Pulse

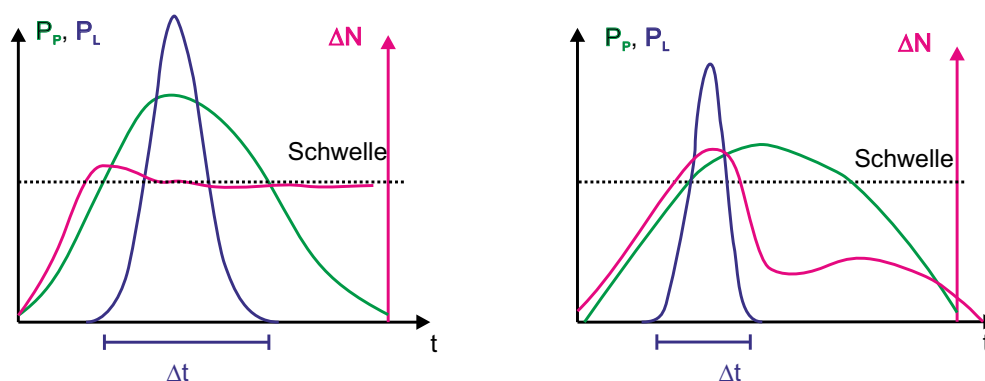


Abbildung 7.35.: Zeitliche Beziehung zwischen Pumpimpuls, Laserimpuls und Besetzungsinversion. Links die Kurvenformen, wenn die Lebensdauer des unteren Laserniveaus genügend klein sind, andernfalls (rechts) wird die Pulsdauer und -energie limitiert.

Kurze Lichtpulse könnten erzeugt werden, indem die Betriebsspannung der Lichtquelle kurzzeitig eingeschaltet wird. Die kürzesten erreichbaren Zeiten hängen von den Schaltkapazitäten und den möglichen Schaltströmen ab. Es ist schwierig, Spannungen oder Ströme kürzer als in etwa 100 ps einzuschalten.

Deshalb werden kurze Lichtpulse ausschliesslich auf optischem Wege erzeugt. Man nutzt aus, dass das Einschalten eines Lasers mit grossen Relaxationsschwingungen verbunden ist. Diese Schwingungen entstehen, weil die für eine Lasertätigkeit

notwendige Inversion im Dauerbetrieb wesentlich geringer ist als im Einschaltmoment. Die die Relaxationsschwingungen beschreibenden Differentialgleichungen sind nichtlinear: der Laser ist in vielen Betriebszuständen ein chaotisches System.

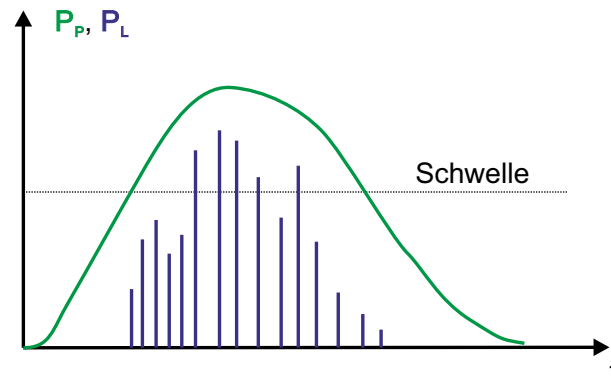


Abbildung 7.36.: Auch bei Kurzpulslasern treten Relaxationsschwingungen (Spikes) auf.

Die Abbildung 7.35 zeigt den Zusammenhang der Laserleistung, der Inversion und der Pumpleistung. Wenn die Pumpe eingeschaltet wird, baut sich die Inversion parallel zum Anstieg der Pumpleistung auf. Wenn die Schwelle überschritten wird, wird die Besetzungszahl auf einem Wert, der nur unwesentlich über der Schwelleninversion liegt, begrenzt. Die Laserleistung steigt rapide an und die Besetzungsinversion wird, wenn die Pumpleistung wieder abnimmt, wieder abgebaut. Der resultierende Laserpuls ist kürzer als der Pumpimpuls. Auf der rechten Seite der Abbildung 7.35 wird gezeigt, was passiert, wenn das untere Laserniveau nicht schnell genug entleert wird. Dann nimmt die Möglichkeit zu spontaner und induzierter Emission sehr viel schneller beschränkt. Die Besetzungszahlinversion baut sich ab, auch wenn die Pumpleistung hoch bleibt. Im Verhältnis zum Pumpimpuls ist der Laserpuls kürzer. Ein nächster Pumpimpuls kann jedoch erst dann folgen, wenn die Besetzung des unteren Laserniveaus wieder in die Nähe des Ursprungswertes abgebaut ist.

Wenn die induzierte Emission sehr stark verstärkt wird, wie zum Beispiel in Blitzlampen gepumpten Rubinlasern aber auch in Laserdioden, dann treten Relaxationsschwingungen auf. Während der Dauer des Pumpimpulses treten einige bis viele sogenannte Spikes, also Relaxationsschwingungen auf. Die Einhüllende der Amplitude dieser Spikes folgt der Amplitude des Pumpimpulses.

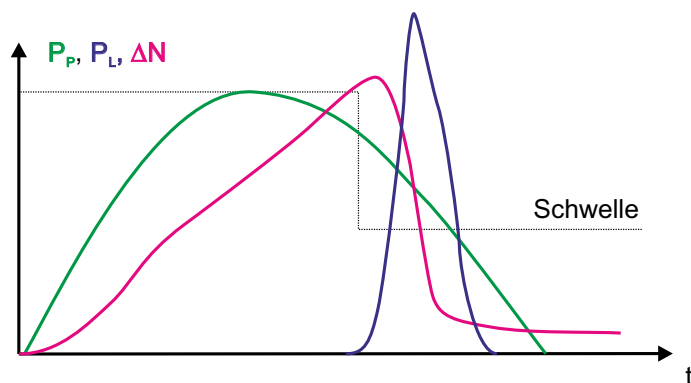


Abbildung 7.37.: Güteschaltung bei einem Kurzpulslaser. Die Dauer des Laserpulses und des Pumpimpulses sind so entkoppelt.

Ein Nachteil dieser *Relaxationsschwingungen* ist, dass der Zeitpunkt der einzelnen Pulse nicht gut bestimmt ist. Indem man die Verluste im Resonator gross macht, verhindert man das Anschwingen der Laserschwingung. In der Abbildung 7.37 ist gezeigt, dass, wenn man die Verluste in kurzer Zeit $< 1ns$ erniedrigt, zu einem genau definierten Zeitpunkt ein einzelner Laserpuls entsteht.

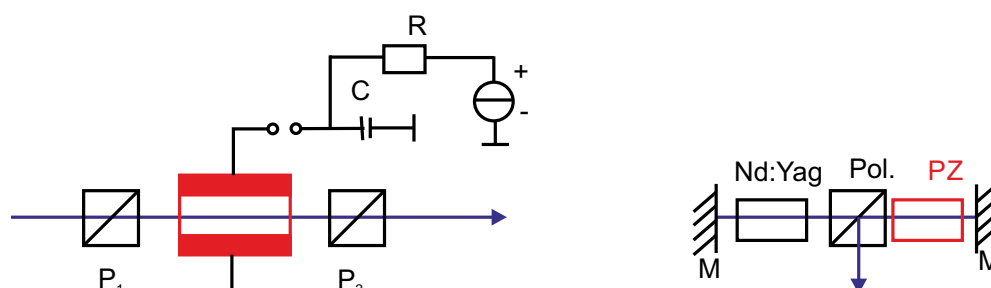


Abbildung 7.38.: Links die prinzipielle Schaltung einer Pockelszelle, rechts eine Implementation in einem gepulsten Nd-Yag-Laser.

Das Schalten der Verluste kann entweder über akusto-optische Schalter, elektrooptische Schalter oder durch sättigbare Absorber geschehen. Eine Implementation eines elektrooptischen Schalters ist die Pockelszelle. Die Transmission der Pockelszelle in Abb. 7.38 ist durch die Funktion

$$T = T_0 (1 - \cos^2 \Theta) \quad (7.2.50)$$

gegeben. Dabei ist Θ der Winkel der Drehung der Polarisationssebene. Dieser ist proportional zur an der Pockelszelle angelegten Spannung. Abb. 7.39 zeigt den Kurvenverlauf der Resonatorverluste, der Transmission durch die Pockelszelle in Relation zur angelegten Spannung.

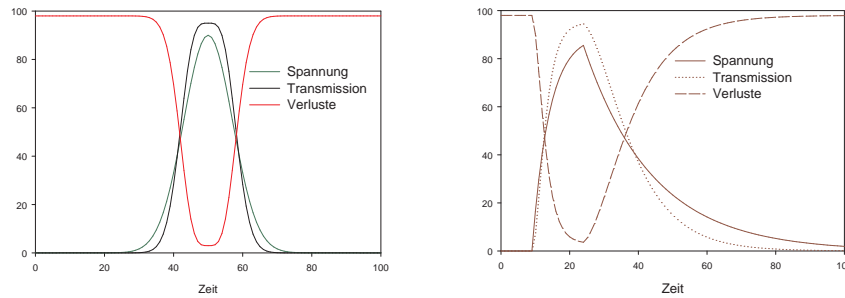


Abbildung 7.39.: Links sind für einen gaußförmigen Spannungspuls der Spannungsverlauf, die Transmission und die Verluste angegeben. Rechts das gleiche für einen exponentiell ansteigenden und abfallenden Puls.

7.2.6.1. Akusto-optischer Modulator und Puls laser mit Cavity Dumping

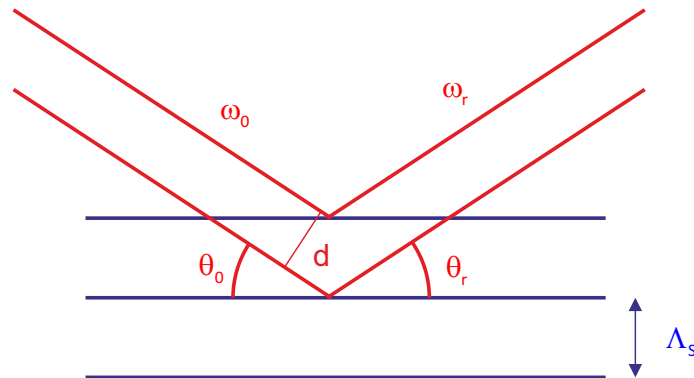


Abbildung 7.40.: Schematische Darstellung der Bragg-Reflexion von Licht an Schallwellen.

Im akusto-optischen Modulator wird eine Schallwelle unter schiefem Winkel zur Ausbreitungsrichtung des Lichtstrahles in einen Kristall eingestrahlt (siehe Abb. 7.41). Durch die laufende Schallwelle wird ein sich mit Schallgeschwindigkeit bewegendes modulierte Dichteprofil erzeugt. Dieses bewirkt eine Modulation des Brechungsindex und somit eine Bragg-Streuung am optischen Gitter.

Wir nehmen nun an, dass in diesem Kristall mit dem *Brechungsindex* n eine Schallwelle mit der Frequenz Ω , der Schallgeschwindigkeit c_S und der Wellenlänge $\Lambda_S = c_S/\Omega$ vorhanden ist. Wenn die Bragg-Bedingung

$$2\Lambda_S \sin \Theta = \frac{\lambda}{n} \quad (7.2.51)$$

erfüllt ist, dann wird der Bruchteil η der eingestrahnten Intensität in die erste Beugungsordnung abgelenkt. Hier ist λ die Wellenlänge des Lichtes. Die Beugungseffizienz η hängt von der Tiefe der Brechzahlmodulation Δn und somit von der Amplitude der Schallwelle ab. Dadurch dass das Licht durch eine **laufende** Schallwelle abgelenkt wird, wird seine Wellenlänge und Frequenz moduliert. Der unabgelenkte Lichtstrahl hat die Frequenz $\omega = \lambda/c$, während der abgelenkte Lichtstrahl um

$$\Delta\omega = 2\frac{nc_S}{c}\omega \sin\Theta = 2n\Lambda_S\frac{\Omega}{\omega\lambda}\omega \sin\Theta = \Omega \quad (7.2.52)$$

in der Frequenz Doppler-verschoben wird. Wenn die Amplitude des eingestrahnten Lichtes E_0 ist, sind die Amplituden des transmittierten und abgelenkten Anteiles

transmittiert	$\sqrt{1-\eta}E_0 \cos\omega t$
abgelenkt	$\sqrt{\eta}E_0 \cos(\omega + \Omega)t$

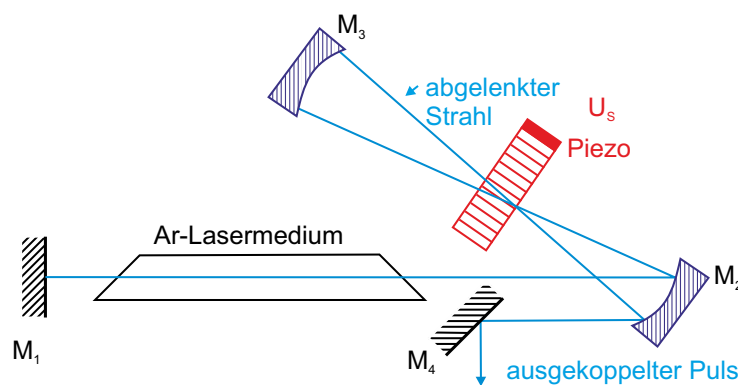


Abbildung 7.41.: Schematischer Aufbau der Auskopplung aus einem gütegeschalteten Laser (cavity dumping).

Abb. 7.41 zeigt den Aufbau eines gepulsten Lasers, bei dem der akusto-optische Modulator die Auskopplung aus der Laser-Cavity steuert. Das vom Spiegel M_2 herkommende Licht passiert den akusto-optischen Modulator und wird mit der Effizienz η abgelenkt. Auf dem Rückweg muss das ausgekoppelte Licht unabgelenkt durch den Modulator gehen (Effizienz $1 - \eta$). Der Strahl, der unabgelenkt vom Spiegel M_2 her kommend durch den akusto-optischen Modulator gegangen wird, wird auf dem Rückweg mit der Effizienz η abgelenkt. Im ersten Fall wird die Schallfrequenz von der Lichtfrequenz abgezählt, im zweiten Fall dazugezählt.

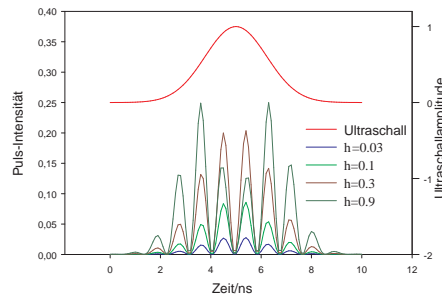


Abbildung 7.42.: Dargestellt ist der Verlauf des Ultraschallpulses und des Laserpulses für vier Modulationstiefen η im akusto-optischen Modulator.

In der Auskoppelrichtung überlagern sich die Amplituden

$$\begin{aligned} E_{tot} &= \sqrt{\eta} \sqrt{1-\eta} E_0 \cos(\omega - \Omega)t + \sqrt{\eta} \sqrt{1-\eta} E_0 \cos(\omega + \Omega)t \\ &= \sqrt{\eta} \sqrt{1-\eta} E_0 [\cos(\omega - \Omega)t + \cos(\omega + \Omega)t] \end{aligned} \quad (7.2.53)$$

Der ausgekoppelte Puls hat dann die Leistung

$$\begin{aligned} P_a(t) &= |\langle \mathbf{S}_t \rangle| \\ &= |\langle \mathbf{E}_{tot} \times \mathbf{H}_{tot} \rangle| \\ &= \frac{1}{2Z_0} E_{tot}^2 = 2c\epsilon\eta t (1 - \eta(t)) E_{tot}^2 \cos^2 \Omega t \end{aligned} \quad (7.2.54)$$

Hier ist \mathbf{S}_t der Poynting-Vektor und $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ der Wellenwiderstand des Vakuums. Während der zeit des Ultraschallimpulses wird $\eta(t) (1 - \eta(t))$ der in der Laserkavität eingeschlossenen optischen Leistung ausgekoppelt. Abb. 7.42 zeigt die Ultraschallamplitude und für vier verschiedene Beugungseffizienzen η den zeitlichen Verlauf des ausgekoppelten Pulses. Interessant ist, dass für $\eta = 0.5$ ein Maximum erreicht wird. Bei der in Abb. 7.42 gezeigten Kurve für $\eta = 0.9$ resultieren deshalb zwei Intensitätsmaxima.

Mit dem Verfahren des Cavity-Dumping erreicht man bei Ionenlasern oder bei Farbstofflasern Pulslängen von 10 – 100 ns mit Pulsfolgefrequenzen zwischen null und 4 MHz.

7.2.6.2. Modenkopplung

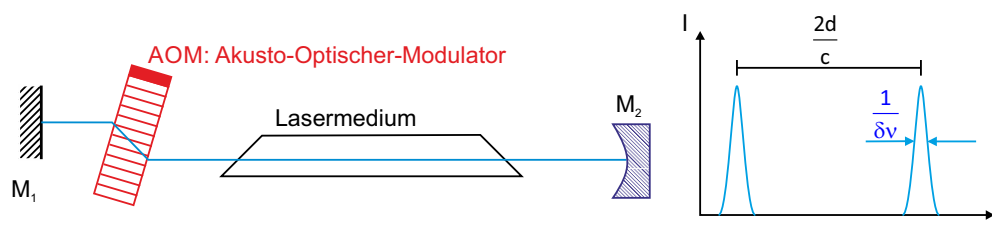


Abbildung 7.43.: Mit einem akusto-optischen Modulator im Ultraschallbereich kann eine aktive Modenkopplung erreicht werden.

Wenn, wie in Abbildung 7.43 gezeigt, ein akusto-optischer Modulator in den Laserresonator eingefügt wird, dann entstehen im Frequenzspektrum Nebenfrequenzen. Ist die Modulationsfrequenz f , dann existieren neben der Grundfrequenz des Lasers ν auch die Frequenzen $\nu \pm f$. Wenn die Modulationsfrequenz gleich dem Modenabstand im Resonator ist, das heisst wenn $f = c/2d$ ist, dann können die Seitenbänder auch an der Laseroszillation teilnehmen. Diese Seitenbänder werden auch moduliert, so dass alle vom Verstärkungsprofil des Lasermediums her möglichen Moden anschwingen.

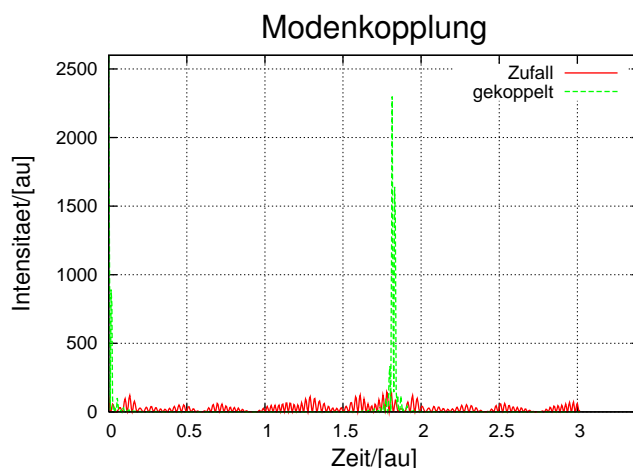


Abbildung 7.44.: Dargestellt einerseits die Überlagerung von 51 Moden mit zufälliger Phase und gleicher Amplitude sowie die Überlagerung von 51 modengelockter Moden. Die resultierende Pulsüberhöhung ist augenfällig.

Durch die Modulation schwingen die Lasermoden nicht unabhängig, da ihre Phasen durch den Modulator gekoppelt sind. Abb. 7.44 zeigt, die resultierende Ausgangsamplitude für viele Lasermoden mit zufälligen Phasen sowie für gekoppelte Phasen. Die Intensität bei gekoppelten Phasen wird periodisch sehr gross. Ande-

rerseits zeigt das Ausgangssignal bei zufälligen Phasen das auch von Laserdioden her bekannten vergrößerte Rauschen.

Der akusto-optische Modulator moduliert die Transmission des Laserresonators mit

$$T = T_0 [1 - \delta (1 - \cos \Omega t)] = T_0 \left[1 - 2\delta \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right) \right] \quad (7.2.55)$$

Unter der Annahme, dass alle Lasermoden die gleiche Amplitude $A_{k,0} = A_0$ haben wird bei einem kleinen Modulationsgrad $\delta \leq 1/2$ die instantane Amplitude der k -ten Mode zu

$$A_k(t) = T A_0 \cos \omega_k t = T_0 A_0 [1 - \delta (1 - \cos \Omega t)] \cos \omega_k t \quad (7.2.56)$$

Wenn nun die Modulationsfrequenz gleich der Umlaufzeit des Lichtes im Resonator ist, also wenn $\Omega = 2\pi c/(2d)$ so wird die $k+1$ -te Mode von der k -ten Mode her (es gilt $\omega_{k+1} = \omega_k + \Omega$) mit

$$A_{k+1} = \frac{A_0 T_0 \delta}{2} \cos(\omega_{k+1} t) \quad (7.2.57)$$

Diese Modulation wird, sofern sie innerhalb der Verstärkungsbandbreite des Lasermediums liegt, verstärkt. Die $k+1$ -te Mode wird nun wieder moduliert, genauso wie alle nachfolgenden Moden. Das gleiche gilt auch für Moden mit abnehmenden Indizes. Durch die Modulation sind alle Phasen der verschiedenen Moden periodisch gleich. Dies tritt in der Gleichung (7.2.56) immer zu den Zeiten

$$t_j = j \frac{2d}{c} \quad \text{für } j = 0, 1, 2, \dots \quad (7.2.58)$$

Ist die Bandbreite der verstärkbaren Moden (oberhalb der Laserschwelle) $\delta\nu$ und $\Delta\nu$ der Abstand der einzelnen Moden, dann ist die Anzahl der verstärkten Moden

$$N = \frac{\delta\nu}{\Delta\nu} = \frac{2\delta\nu d}{c} \quad (7.2.59)$$

Die Überlagerung von $2m+1 = N$ Lasermoden mit gleicher Amplitude führt zur Gesamtamplitude

$$A(t) = A_0 \sum_{j=-m}^{j=m} \cos(\omega_0 + j\Omega) t \quad (7.2.60)$$

Die Laserintensität $I(t) = A^2(t)$ wird dann

$$I(t) \approx A_0^2 \frac{\sin^2(N\Omega t/2)}{\sin^2(\Omega t/2)} \cos^2 \omega_0 t \quad (7.2.61)$$

Wie auch aus Abbildung 7.44 ersichtlich ist, bekommt man eine Pulsfolgezeit T und eine Pulsbreite Δt .

$$\text{Abstand der Pulse} \quad T = \frac{2d}{c} = \frac{1}{\Delta\nu} \quad (7.2.62)$$

$$\text{Pulsbreite} \quad \Delta T = \frac{1}{(2m+1)\Omega} = \frac{1}{N\Omega} = \frac{1}{\delta\nu} \quad (7.2.63)$$

Damit wird klar, dass die kürzest mögliche Pulsdauer von der Breite des Verstärkungsprofils abhängt. Lasermedien mit schmalen Linien wie zum Beispiel Gaslaser sind für Modenkopplung ungeeignet. Die Spitzenleistung eines modengekoppelten Lasers geht wie N^2 , das heisst auch wieder mit der spektralen Bandbreite des Lasers. Die Eignung von Lasermedien zur Erzeugung kurzer Pulse wird in Tabelle 7.45 zusammengefasst.

Lasermedium	Wellenlänge	Frequenzbreite $\delta\nu$	Pulsbreite ΔT
HeNe	633 nm	1.5 GHz	500 ps
Argon-Ionenlaser	488 nm, 514 nm	5-7 GHz	150 ps
Nd-Glas-Laser	1064 nm	200 GHz	5 ps
Farbstoff- oder Farbzentrenlaser	600 nm	30 THz	30 fs

Abbildung 7.45.: Demtröder [Dem93] gibt die oben zusammengefassten Möglichkeiten zur Erzeugung kurzer Pulse an.

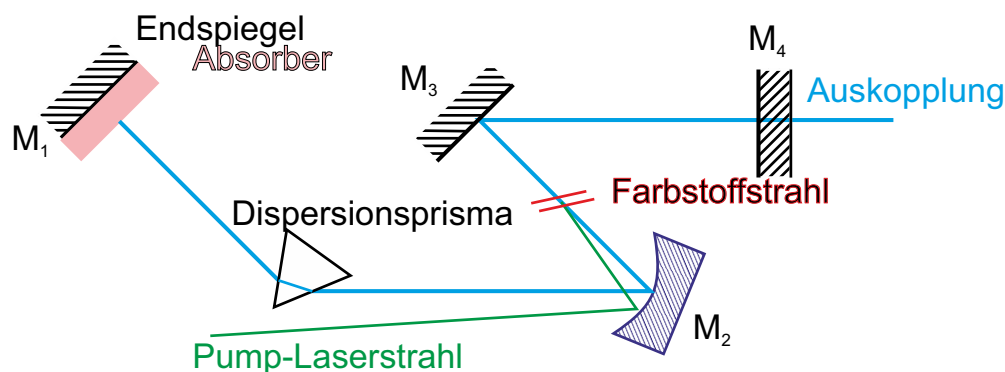


Abbildung 7.46.: Die Modenkopplung wird bei diesem Aufbau durch einen sättigbaren Absorber erreicht.

7.2.6.3. Passive Modenkopplung

Schneller als ein optischer Modulator schalten sättigbare Absorber. Wichtig ist, dass die Absorptionsniveaus des Absorbers eine möglichst kurze Abklingzeit haben. Abb. 7.46 zeigt den Aufbau eines Lasers mit einem sättigbaren Absorber. Dieser wird vor einem der Resonatorspiegel montiert, so dass nur an einem wohldefinierten Ort die Absorption sich ändern kann. Durch die Absorption im Medium werden die Verluste vergrössert. Die Verstärkung im Lasermedium muss so gross sein, dass das gesamte System die Schwellenverstärkung erreicht. Das Lasermedium emittiert vor dem Erreichen der Schwelle spontan und dann induziert verstärkt und in statistischen Abständen. Die Amplitude schwankt stark. Wenn einer dieser Pulse die Schwellenenergie erreicht, dann wird durch die Verstärkung die Absorp-

tion im sättigbaren Absorber leicht verringert. Dieser erste Puls löst also eine Photonenlawine aus, die einerseits die Verstärkung des Pulses erhöht und andererseits verhindert, dass die anderen Schwankungen weiter verstärkt werden. Da das Absorptionsmedium eine sehr kurze Lebensdauer hat, ist es schon kurz nach dem Puls wieder in seinem hoch absorbierenden Zustand. Dieser umlaufende Puls ist der einzige, der verstärkt wird.

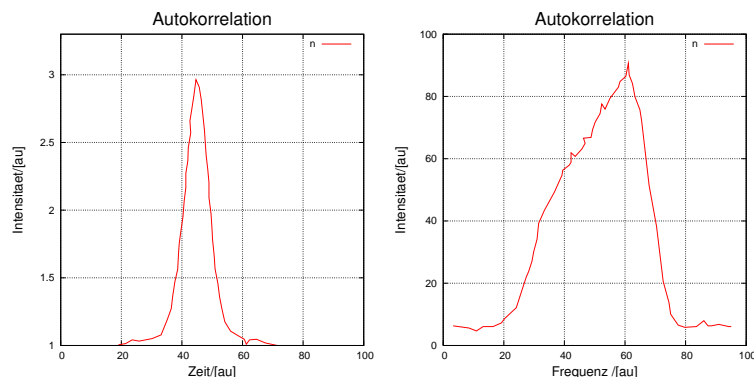


Abbildung 7.47.: Links wird die Autokorrelation, rechts das Spektrum eines modengekoppelten Pulses gezeigt (nach Demtröder [Dem93]). Die Pulslänge ist 0.5 ps, die spektrale Breite 1nm.

Die Pulsform und damit, über die *Fouriertransformation* auch das Spektrum, hängen von den Verstärkungseigenschaften des Mediums und von den spektralen Absorptionseigenschaften des Absorbers. Abbildung 7.47 zeigt links ein Beispiel für die Pulsform und rechts das Spektrum dieses Pulses. Die in Abb. 7.47 gezeigte Pulsbreite von 0.5ps ist die kürzeste, mit passiver Modenkopplung erreichbare Pulslänge.

7.2.6.4. Synchron gepumpte Laser

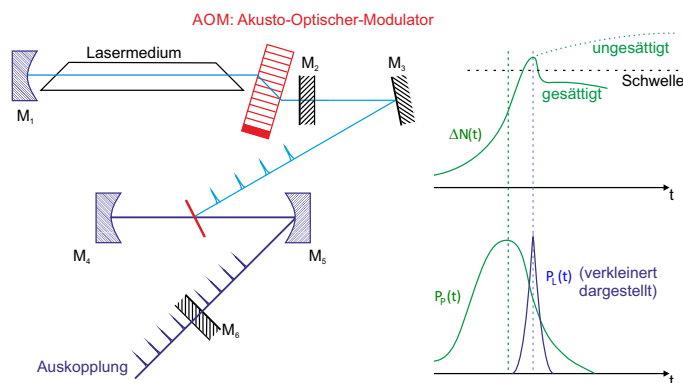


Abbildung 7.48.: Bei diesem Laser wird das Anregungslicht synchron zur Umlaufzeit im Resonator gepulst.

Bei synchron gepumpten Lasern wird die Pumpleistung in einem Takt mit ganzzahligem Verhältnis zur Umlaufzeit der Pulse im Resonator gepumpt. Die Abbildung 7.48 zeigt auf der linken Seite einen möglichen Aufbau eines synchron gepumpten Lasersystems [Dem93]. Der Argon-Ionenlaser wird im Laserresonator mit einem akusto-optischen Modulator moduliert. Die Pumpleistung trifft mit der Umlauffrequenz der Pulse im Farbstofflaser auf das Lasermedium, einen Farbstoffstrahl. Von allen möglichen, durch spontane Emission entstandenen Photonen werden nur diejenigen verstärkt, die synchron mit der Pumpleistung im Resonator umlaufen. Die rechte Seite von Abbildung 7.48 den Verlauf der Verstärkung (oben) und die Intensitäten von Pumpimpuls und Laserpuls. Die Verstärkung würde bei sehr grossen Verlusten der gestrichelten Kurve folgen. Durch die Emission des Laserpulses, und da das synchrone Pumpen ähnlich wie ein Absorber im Resonator des Farbstofflasers wirkt, wird die Besetzungszahlinversion stark abgebaut. nur ein einzelner, aber sehr kurzer Laserpuls entsteht.

Die Umlaufzeit der Pulse im Laserresonator ist $T = 2d/c$ bei einem Resonator mit der Länge d . Typischerweise kann man mit einem synchron gepumpten Lasersystem Pulslängen von $0.5ps$ erreichen. Wenn der Resonator eine Länge von $1m$ hat, ist die Pulsfolgefrequenz $150MHz$. Ein Fehler von $1\mu m$ der Länge des Resonators führt zu einer Verbreiterung der Pulse auf $1ps$.

Durch einen akusto-optischen Modulator im Resonator des Pulslasers können die Verluste für alle ausser jeden k -ten Puls so erhöht werden, dass sie nicht anschwingen. Durch dieses Verfahren, das auch *Cavity Dumping* genannt wird, kann die Pulsfolgefrequenz erniedrigt werden. damit ist es möglich, auch längere Relaxationen auszumessen.

7.2.6.5. fs-Laser

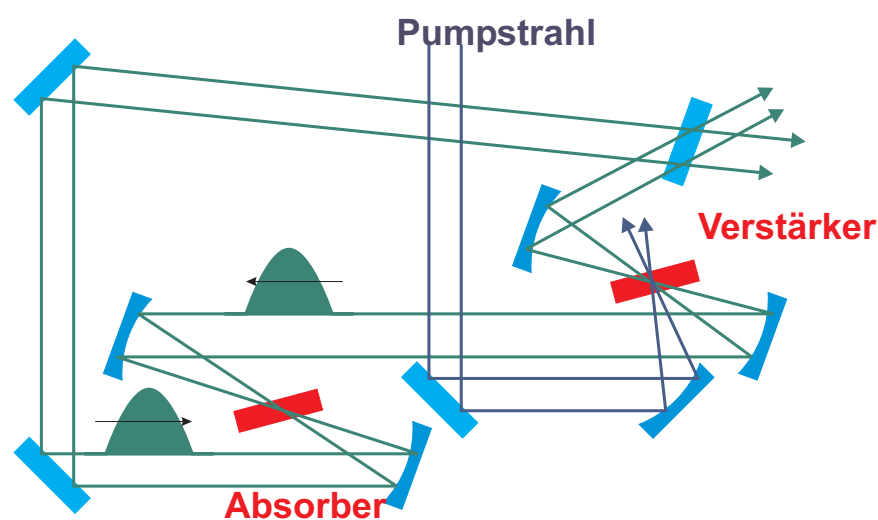


Abbildung 7.49.: Schematischer Aufbau eines CPM-Lasersystems.

Sehr kurze Laserpulse erhält man mit sogenannten *CPM-Lasersystemen*. Eine mögliche Anordnung eines solchen Lasersystems ist in der Abbildung 7.49 gezeigt. Die

Idee hinter dieser Anordnung ist die folgende:

- Zwei gegenläufige Pulse sollen den Verstärker im grösstmöglichen Abstand der halben Umlaufzeit $T/2$ passieren. Damit wird sichergestellt, dass die Verstärkung für beide Pulse gleich (aus Symmetriegründen) und maximal ist.
- Die Pulse sollen sich im sättigbaren Absorber überlagern. Jeder Puls schaltet für den anderen die Verluste auf einen niedrigeren Wert.

Indem man die Dicke des Absorberstrahls sehr dünn ($< 100\mu\text{m}$) wählt, ist die Laufzeit durch das Medium kleiner als etwa 400fs . Da nur die Überlagerung beider Pulse den Absorber auf niedrige Absorption schalten kann, ist dies nur bei einer perfekten Überlagerung der beiden Pulse, also wenn die Zeitunsicherheit sehr viel kleiner als 400fs ist, möglich.

Um die kürzesten möglichen Pulse zu erhalten, ist es notwendig, die *Dispersion* der Spiegel und der sonstigen optischen Elemente zu kompensieren [Dem93]. Durch die CPM-Technik konnten Pulse mit einer Länge von unter 100fs erzeugt werden. Durch sättigbare Braggspiegel und eine *Dispersionskompensation* mindestens bis zur 3. Ordnung sind Pulse die kürzer als 10fs sind, möglich.

7.2.6.6. Pulskompression

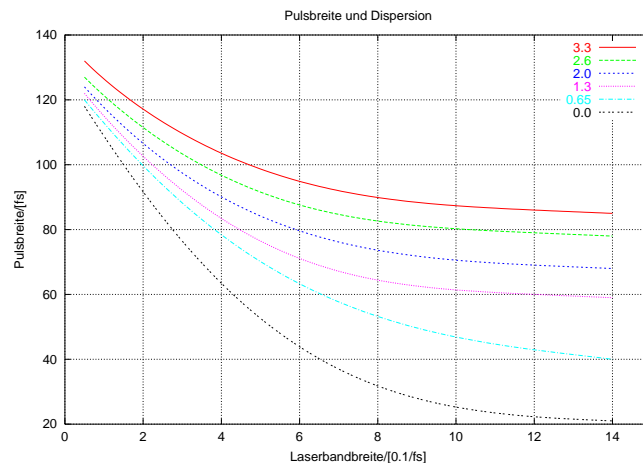


Abbildung 7.50.: Abhängigkeit der Pulsbreite von der Bandbreite eines Lasermediums unter Berücksichtigung der Dispersion.

Wir nehmen an, dass ein optischer Puls mit der spektralen Energieverteilung $E(\omega)$ und der spektralen Breite $\delta\omega$ den zeitlichen Intensitätsverlauf

$$I(t) = \varepsilon_0 c \int |E(\omega, t)|^2 e^{j(\omega t - kz)} d\omega \quad (7.2.64)$$

hat. Dieser Puls läuft durch ein Medium mit dem *Brechungsindex* $n(\omega)$. Seine Form ändert sich, da die *Gruppenlaufzeit* für die verschiedenen spektralen Anteile

verschieden lang ist.

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(v_{Ph}k) = v_{Ph} + k \frac{dv_{Ph}}{dk} = \frac{c}{n} \left(1 + \frac{\lambda}{n} \frac{dn}{d\lambda} \right) \quad (7.2.65)$$

Diese Gruppengeschwindigkeit hat die Dispersion

$$\frac{dv_g}{d\omega} = \frac{\frac{dv_g}{dk}}{\frac{d\omega}{dk}} = \frac{1}{v_g} \frac{d^2\omega}{dk^2} \quad (7.2.66)$$

Bei Pulsen mit sehr hoher Intensität hängt der *Brechungsindex* von der Pulsleistung ab, ist also $n(\omega, I) = n_0(\omega) + n_1 I(t)$. Damit hängt die Phase auch von der Intensität ab.

$$\phi = \omega t - kz = \omega t - \frac{\omega n z}{c} = \omega \left(t - \frac{n_0 z}{c} \right) - \frac{n_1 \omega z}{c} I(t) \quad (7.2.67)$$

Damit hängt aber auch die Frequenz eines Pulses von seiner instantanen Intensität ab. Mit $A = n_1 \omega z / c$ bekommt man

$$\omega = \frac{d\phi}{dt} = \omega_0 - \frac{AdI(t)}{dt} \quad (7.2.68)$$

Aus Gleichung (7.2.32) ersieht man, dass während des Intensitätsanstieges eines Pulses seine Frequenz ω abnimmt. Zum Pulsende hin nimmt die Frequenz wieder zu. Durch diese Selbst-Phasenmodulation wird die spektrale Breite eines Pulses nach dem Durchgang durch ein dispersives Medium grösser.

Da der *Brechungsindex* n bei normaler Dispersion $dn_0/d\lambda < 0$ die roten Anteile schneller propagieren lässt als die blauen Anteile, läuft der Puls auseinander. Das heisst wegen n_0 wird der Puls zeitlich breiter, wegen n_1 wird der Puls auch spektral breiter.

Unter der Annahme dass sich die Amplitude entlang der Ausbreitungsrichtung nur langsam ändert ($\lambda \partial^2 E / \partial z^2 \ll \partial E / \partial z$) wird die Wellengleichung

$$\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{1}{v_g} \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{j}{2v_g^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{j\pi}{\lambda n} n_1 |E|^2 E \quad (7.2.69)$$

Ein Puls der Länge τ der mit der Geschwindigkeit v_g durch ein Medium der Länge L läuft, wird auf

$$\tau' = \tau \sqrt{1 + \left(\frac{\tau_c}{\tau} \right)^4} \quad (7.2.70)$$

verbreitert. dabei ist τ_c die kritische Pulsbreite

$$\tau_c = 2^{(5/4)} \sqrt{\frac{L}{\frac{\partial v_g}{\partial \omega}}} \quad (7.2.71)$$

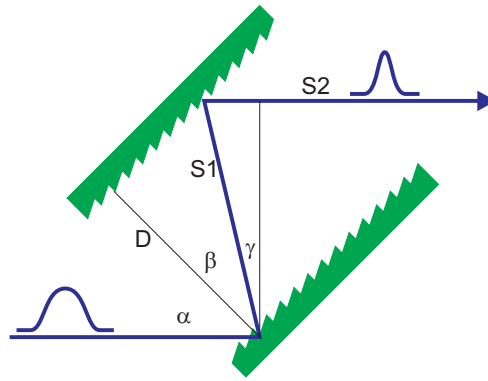


Abbildung 7.51.: *Dispersionskompensation* mit zwei Gittern. Der Wegunterschied $\Delta S = S_1 + S_2$ mit $S_1 = D / \cos \beta$ und $S_2 = S_1 \sin \gamma$

Je kürzer der Puls ist, desto schneller läuft er auseinander. Zwei Beugungsgitter im Abstand D können die unterschiedlichen Laufzeiten der roten und blauen Anteile wieder kompensieren und so den Puls wieder komprimieren. Der optische Weg (siehe Abb. 7.51) ist dann

$$S(\lambda) = S_1 + S_2 = \frac{D}{\cos \beta} (1 + \sin \gamma) \quad (7.2.72)$$

dabei ist $\gamma = \pi - (\alpha + \beta)$. Nun verwenden wir das Additionstheorem für den Kosinus $\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta$ wird Gleichung (7.2.72)

$$S(\lambda) = D \left(\cos \alpha + \frac{1}{\cos \beta} - \sin \alpha \tan \beta \right) \quad (7.2.73)$$

Die Dispersion eines Gitters ist $d\beta/d\lambda = 1/(d \cos \beta)$ wobei d die Gitterkonstante ist. Damit wird die Weglängendispersion

$$\frac{dS}{d\lambda} = \frac{dS}{d\beta} \frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{D\lambda}{d^2 \left[1 - \left(\sin \alpha - \frac{\lambda}{d} \right)^2 \right]^{3/2}} \quad (7.2.74)$$

Nach Gleichung (7.2.74) nimmt der optische Weg mit zunehmender Wellenlänge zu. Damit lässt sich die normale Dispersion in Medien kompensieren. Ohne diese *Dispersionskompensation*, die unter Einbeziehung von Fasern und Prismen auch Effekte zweiter und dritter Ordnung kompensieren kann, wären fs-Laser nicht denkbar.

7.2.6.7. Sättigbare Bragg-Spiegel als Anwendung von MQW-Schichten

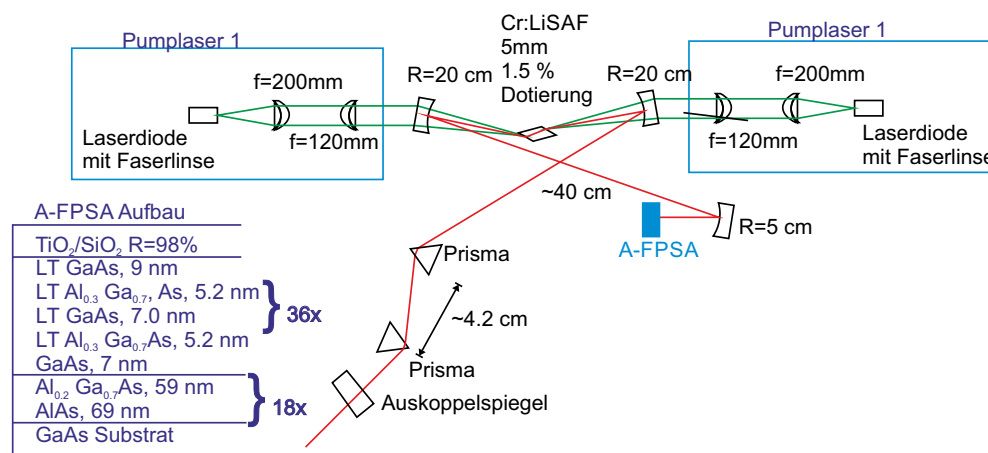


Abbildung 7.52.: Aufbau eines Cr:LiSAF-Lasers mit sättigbarem Bragg-Spiegel [Kel95]

Ein besonders eleganter Aufbau eines Kurzpuls-Lasersystems verwendet *sättigbare Bragg-Spiegel* [SHK00] als sättigbares Medium. Konventionelle sättigbare Absorber haben eine Bandbreite und eine Mittenfrequenz, die vom Material abhängt. Andererseits ist bekannt, dass die Breite der Bandlücke bei Halbleitermaterialien durch die Einstellung des Mischungsverhältnisses bei ternären und quaternären Materialien in weiten Grenzen einstellbar ist. Durch die Verwendung von Schichtstrukturen können so hochwertige optische Schichten mit einstellbarer Bandbreite und einstellbarer Frequenz erzeugt werden.

Wenn die optische Intensität bei der Beleuchtung eines Halbleitermaterials eine materialabhängige Schwelle überschreitet, befindet sich ein Grossteil der Elektronen des Valenzbandes in einem angeregten Zustand im Leitungsband. Das Material wird also transparent und ändert damit auch seinen *Brechungsindex*. Wenn nun ein Multischichtsystem so erzeugt wird, dass es bei hohen Intensitäten eine Reflektivität in der Nähe von 1 hat, dann kann dies wie ein sättigbarer absorber wirken.

Das in der Abbildung 7.52 gezeigte Lasersystem [Kel95] verwendet einen *sättigbaren Bragg-Spiegel*, markiert mit *AFPSA* (antiresonant Fabri-Perot saturable absorber). Der Kurzpulslaser wird durch zwei Laserdioden über jeweils eine Strahlformungsoptik gepumpt. Als aktives Medium wird ein Cr:LiSAF-Kristall verwendet. Die Auskopplungsseite des Laserresonators beinhaltet zwei Prismen zur *Dispersionskompensation*. Das andere Ende des Resonators wird durch einen *sättigbaren Bragg-Spiegel* gebildet. Die Schichtfolge in diesem Spiegel ist im Einsatz links angegeben.

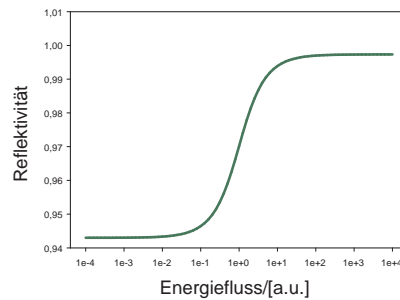


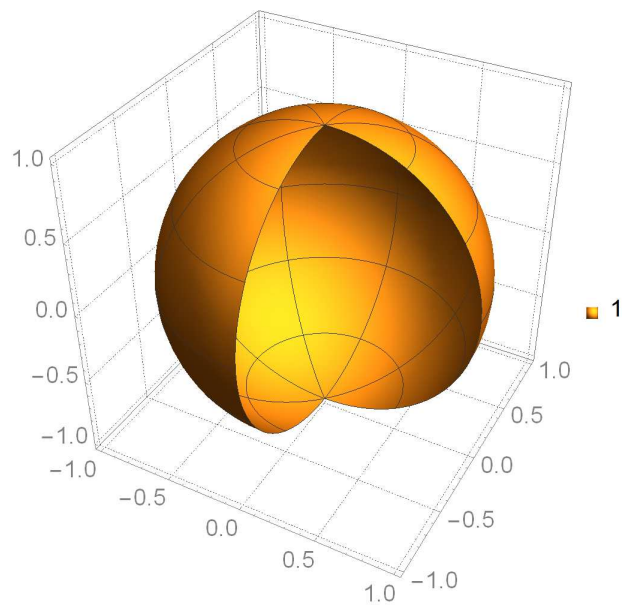
Abbildung 7.53.: Schematischer Verlauf der Reflektivität in einem *sättigbaren Bragg-Spiegel*

Die schematische Kennlinie eines *sättigbaren Bragg-Spiegel* in der Abbildung 7.53 zeigt, dass die Reflektivität mit steigender Intensität zunimmt. Damit hat, wie bei den sättigbaren Absorbern der intensivste aller beim Einschalten anschwingenden Pulse die grösste Verstärkung. Nur dieser Puls wird im weiteren Verlauf durch den Laser verstärkt.

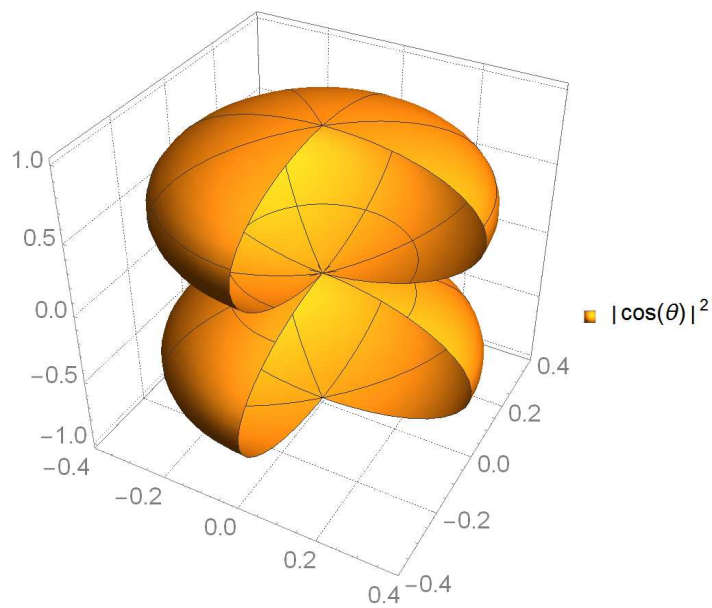
Ein *sättigbarer Bragg-Spiegel* aus $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}$ limitiert die Pulsweite auf 34 fs[SHK00]. Der in der Abbildung 7.52 gezeigte *AFPSA sättigbare Bragg-Spiegel* ermöglicht durch eine geschicktere Ausnutzung der Materialien eine Erhöhung der Bandbreite und damit eine Pulslänge von 19 fs. Durch eine Kombination der Materialien $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}$ und CaF_2 sind Bandbreiten von 500 nm um eine Mittenfrequenz von 800 nm möglich[SHK00]. Damit können mit einem Laser analog zur Abbildung 7.52 Pulse mit einer Länge von weniger als 10 fs erzeugt werden.

A. Wellenfunktionen

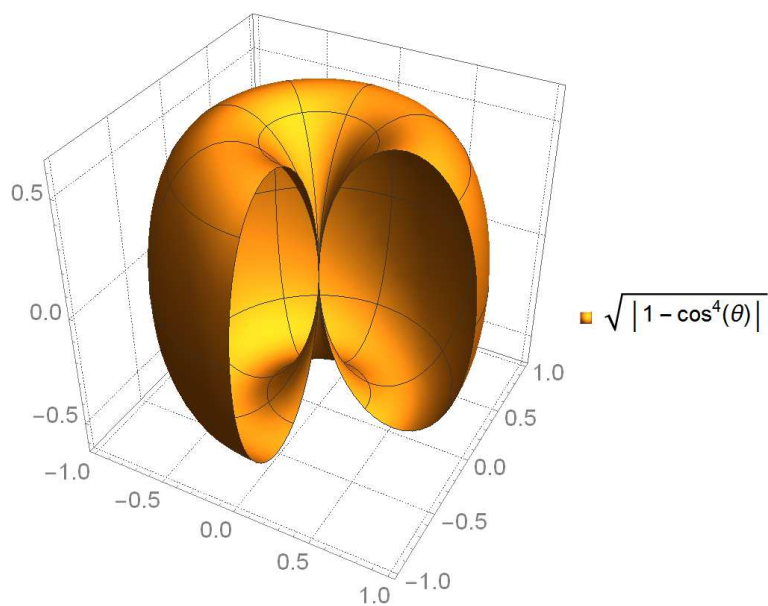
A.1. Zugeordnete Kugelfunktionen



$$\ell = 0$$
$$m = 0$$
$$P_0^0(\cos^2 \theta) = 1$$



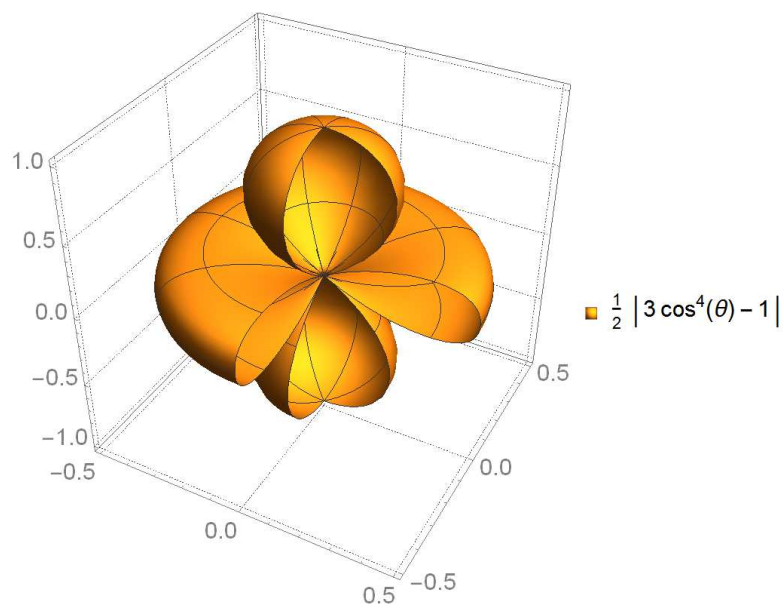
$$\ell = 1$$
$$m = 0$$
$$P_1^0(\cos^2 \theta) = (\cos(\theta))^2$$



$$\ell = 1$$

$$m = 1$$

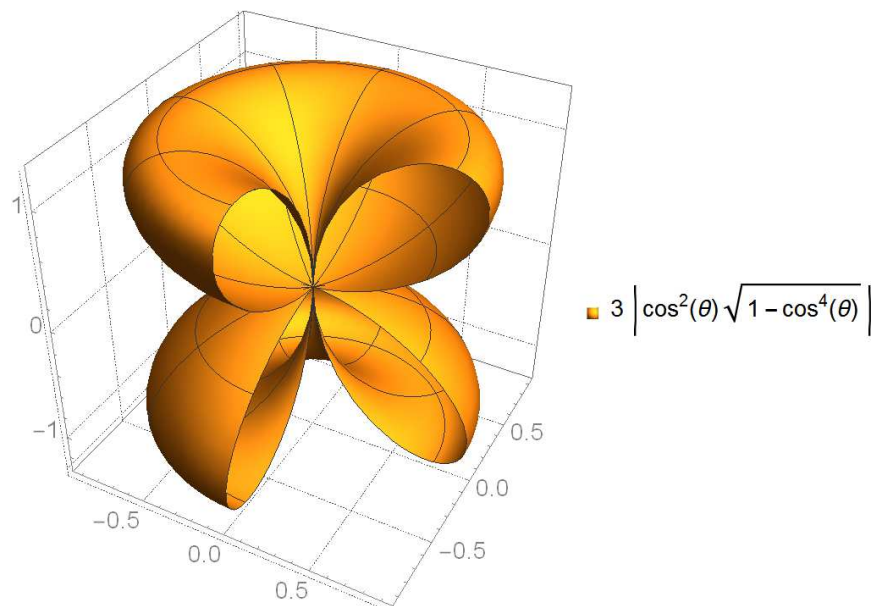
$$P_1^1(\cos^2 \theta) = \sqrt{1 - (\cos(\theta))^4}$$



$$\ell = 2$$

$$m = 0$$

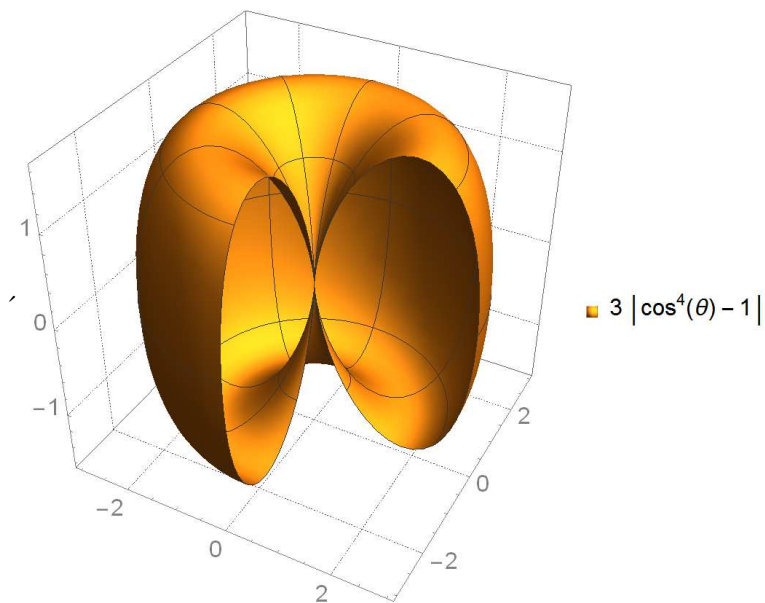
$$P_2^0(\cos^2 \theta) = \frac{3}{2} (\cos(\theta))^4 - \frac{1}{2}$$



$$\ell = 2$$

$$m = 1$$

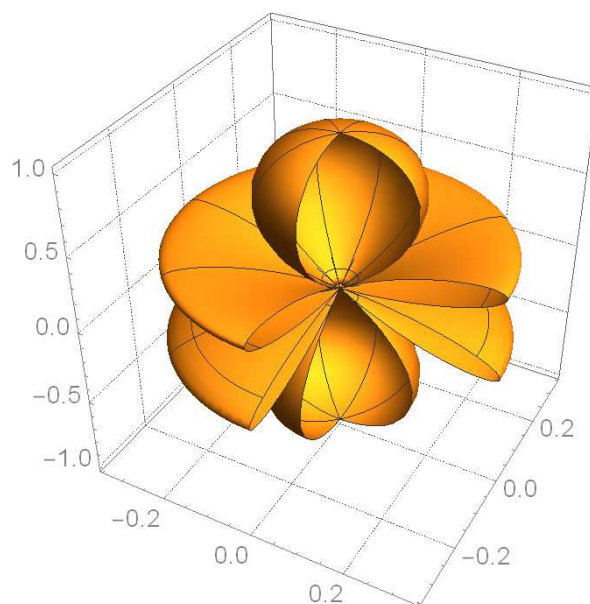
$$P_2^1(\cos^2 \theta) = 3 \sqrt{1 - (\cos(\theta))^4} (\cos(\theta))^2$$



$$\ell = 2$$

$$m = 2$$

$$P_2^2(\cos^2 \theta) = 3 - 3 (\cos(\theta))^4$$

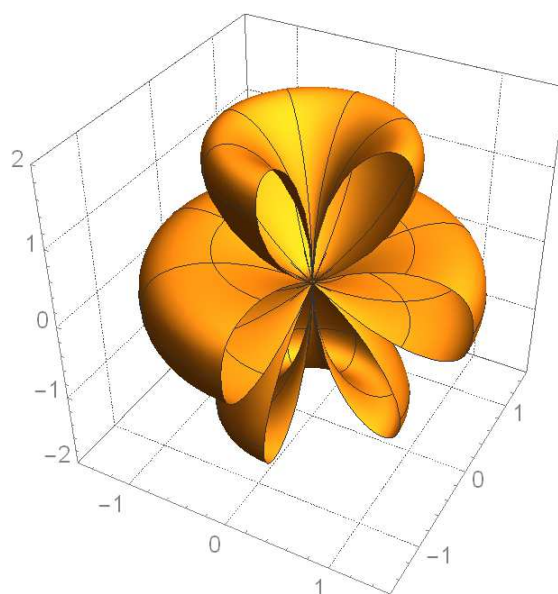


$$\frac{1}{2} |5 \cos^6(\theta) - 3 \cos^2(\theta)|$$

$$\ell = 3$$

$$m = 0$$

$$P_3^0(\cos^2 \theta) = (\cos(\theta))^6 + 3/2 ((\cos(\theta))^4 - 1) (\cos(\theta))^2$$

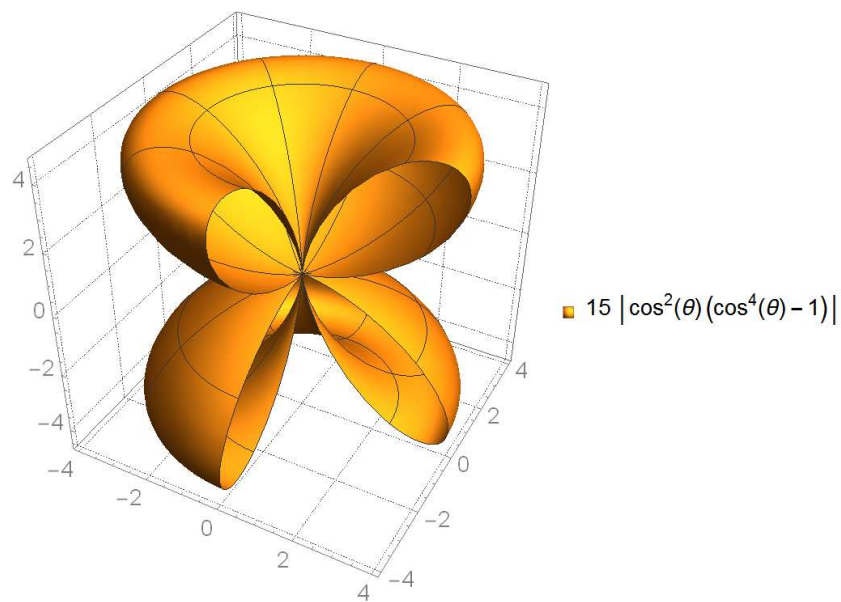


$$\frac{3}{2} \left| \sqrt{1 - \cos^4(\theta)} (5 \cos^4(\theta) - 1) \right|$$

$$\ell = 3$$

$$m = 1$$

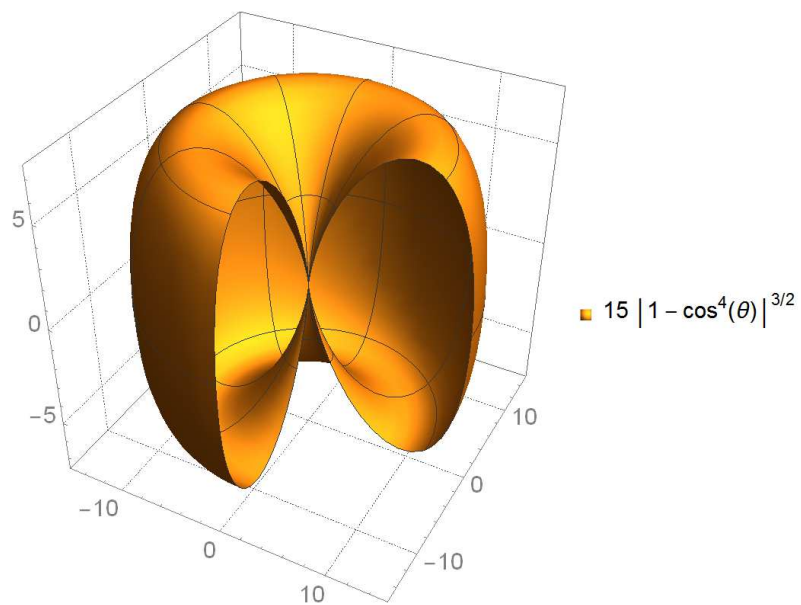
$$P_3^1(\cos^2 \theta) = \sqrt{1 - (\cos(\theta))^4} (15/2 (\cos(\theta))^4 - 3/2)$$



$$\ell = 3$$

$$m = 2$$

$$P_3^2(\cos^2 \theta) = 15 (1 - (\cos(\theta))^4) (\cos(\theta))^2$$



$$\ell = 3$$

$$m = 3$$

$$P_3^3(\cos^2 \theta) = 15 (1 - (\cos(\theta))^4)^{3/2}$$

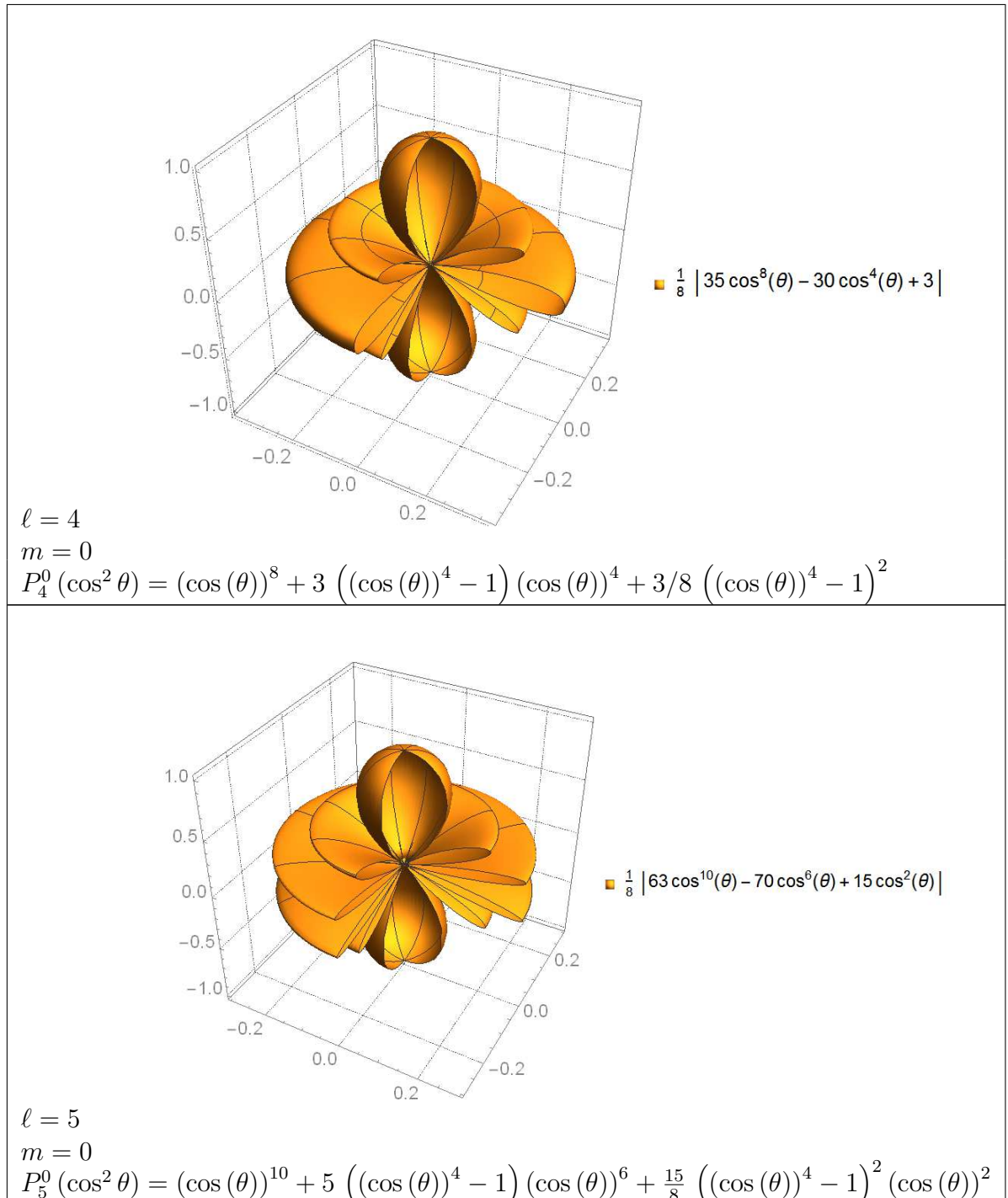


Tabelle A.2.: Zugeordnete Kugelfunktionen

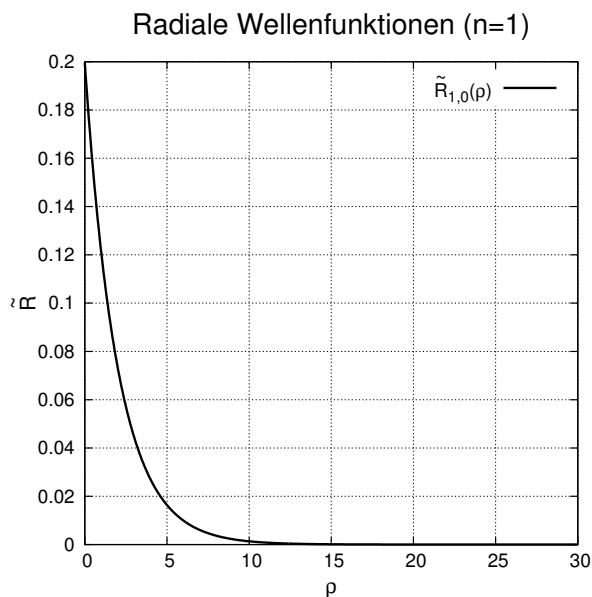
A.2. Radiale Wellenfunktionen, Laguerre-Polynome

Die Wellenfunktionen sind nicht normiert.

Radiale Wellenfunktion

$$n = 1$$

$$\ell = 0 \Rightarrow \tilde{R}_{1,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} e^{-\rho/2}$$

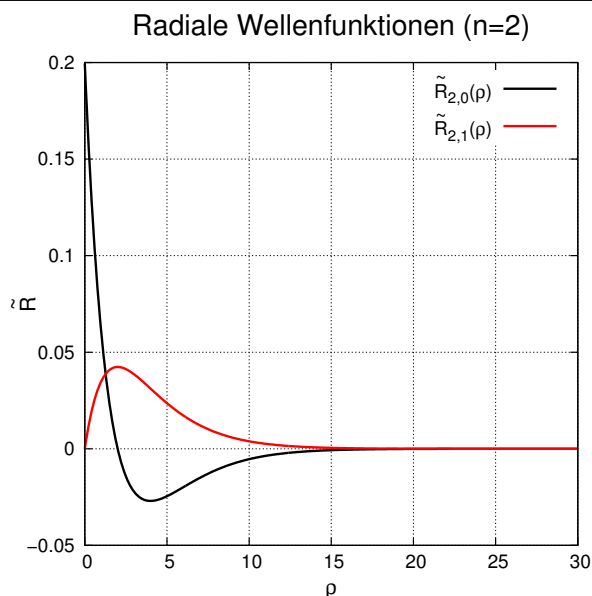


Radiale Wellenfunktion

$$n = 2$$

$$\ell = 0 \Rightarrow \tilde{R}_{2,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\rho/2}$$

$$\ell = 1 \Rightarrow \tilde{R}_{2,1}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{6\pi}} \rho e^{-\rho/2}$$



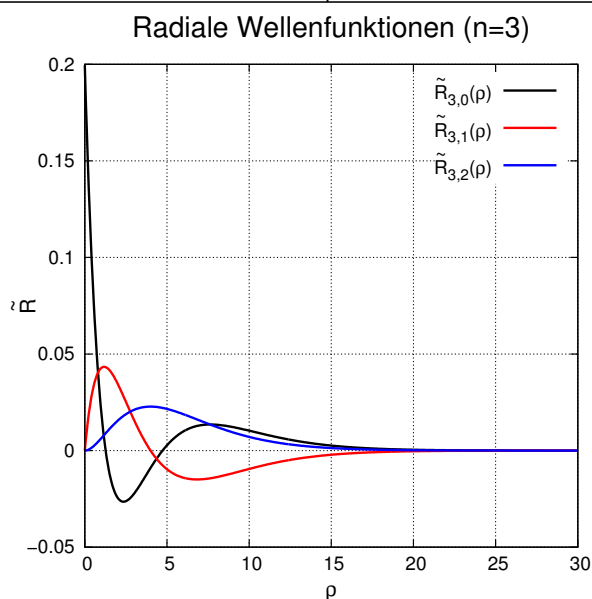
Radiale Wellenfunktion

$$n = 3$$

$$\ell = 0 \Rightarrow \tilde{R}_{3,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \rho + \frac{\rho^2}{6}\right) e^{-\rho/2}$$

$$\ell = 1 \Rightarrow \tilde{R}_{3,1}(\rho) = \frac{1}{6\sqrt{\pi}} \left(\rho - \frac{\rho^2}{4}\right) e^{-\rho/2}$$

$$\ell = 2 \Rightarrow \tilde{R}_{3,2}(\rho) = \frac{1}{24\sqrt{5\pi}} \rho^2 e^{-\rho/2}$$



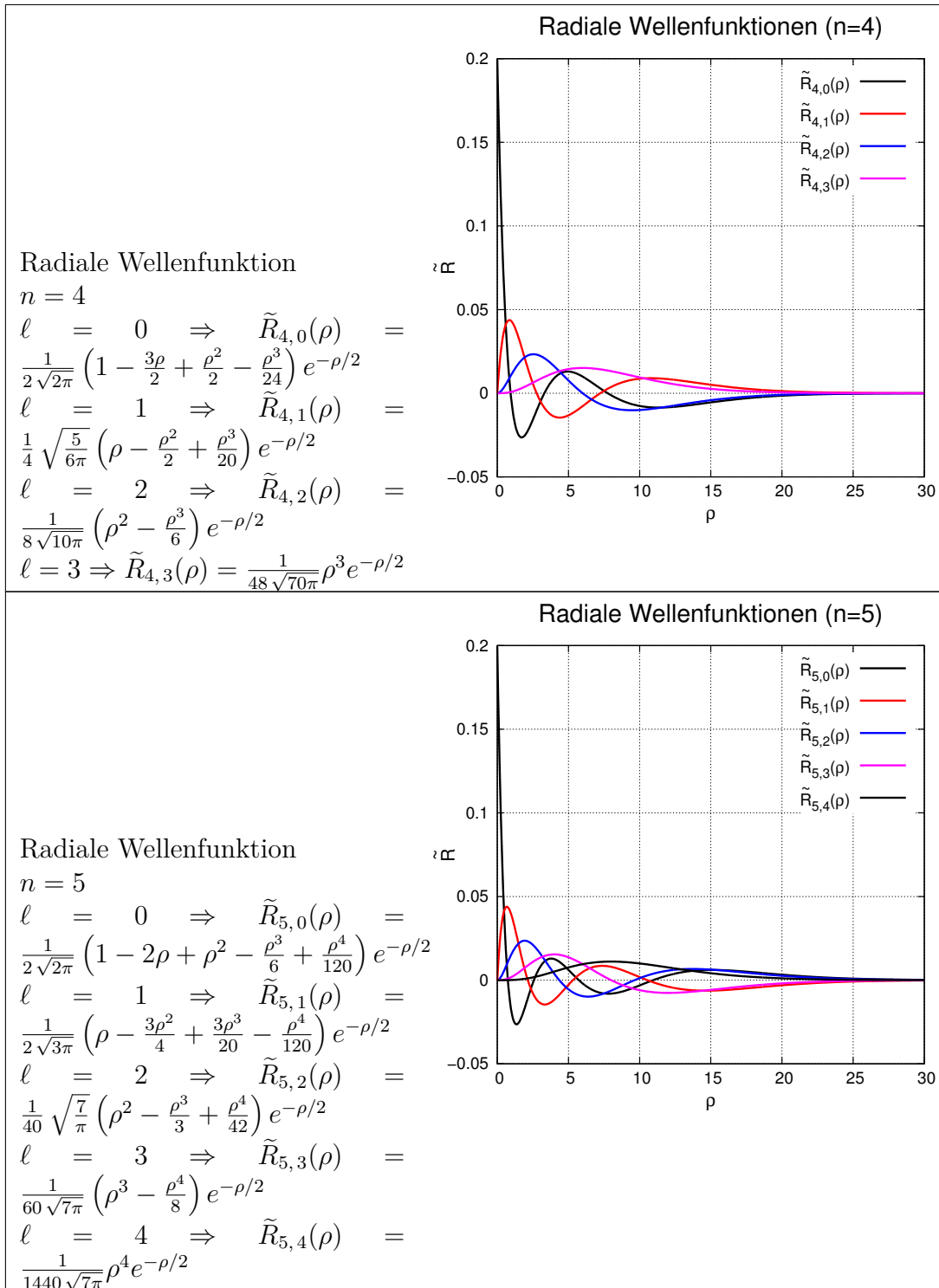


Tabelle A.4.: Nicht normierte radiale Wellenfunktionen

A.3. Radiale Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung

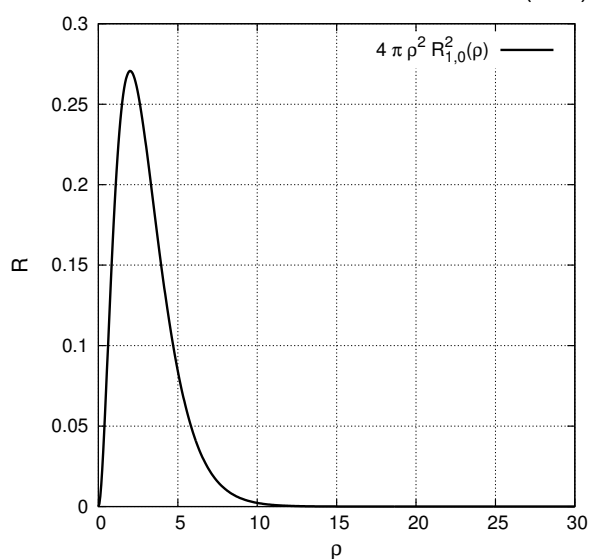
Die Wellenfunktionen sind nicht normiert.

Radiale Wellenfunktion

$$n = 1$$

$$\ell = 0 \Rightarrow \tilde{R}_{1,0}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} e^{-\rho/2}$$

Radiale Wahrscheinlichkeitsdichte (n=1)



Radiale Wellenfunktion

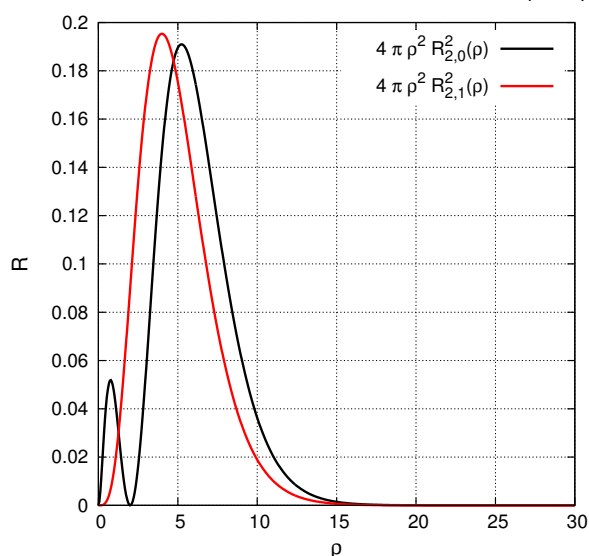
$$n = 2$$

$$\ell = 0 \Rightarrow \tilde{R}_{2,0}(\rho) =$$

$$\frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\rho/2}$$

$$\ell = 1 \Rightarrow \tilde{R}_{2,1}(\rho) = \frac{1}{4\sqrt{6\pi}} \rho e^{-\rho/2}$$

Radiale Wahrscheinlichkeitsdichte (n=2)



Radiale Wellenfunktion

$$n = 3$$

$$\ell = 0 \Rightarrow \tilde{R}_{3,0}(\rho) =$$

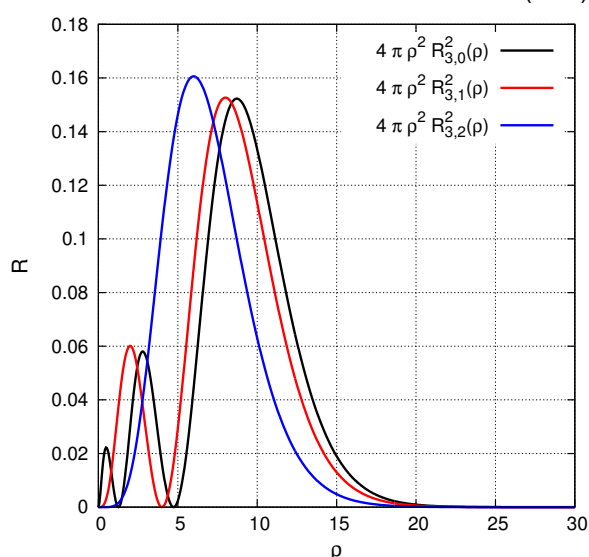
$$\frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \rho + \frac{\rho^2}{6}\right) e^{-\rho/2}$$

$$\ell = 1 \Rightarrow \tilde{R}_{3,1}(\rho) =$$

$$\frac{1}{6\sqrt{\pi}} \left(\rho - \frac{\rho^2}{4}\right) e^{-\rho/2}$$

$$\ell = 2 \Rightarrow \tilde{R}_{3,2}(\rho) = \frac{1}{24\sqrt{5\pi}} \rho^2 e^{-\rho/2}$$

Radiale Wahrscheinlichkeitsdichte (n=3)



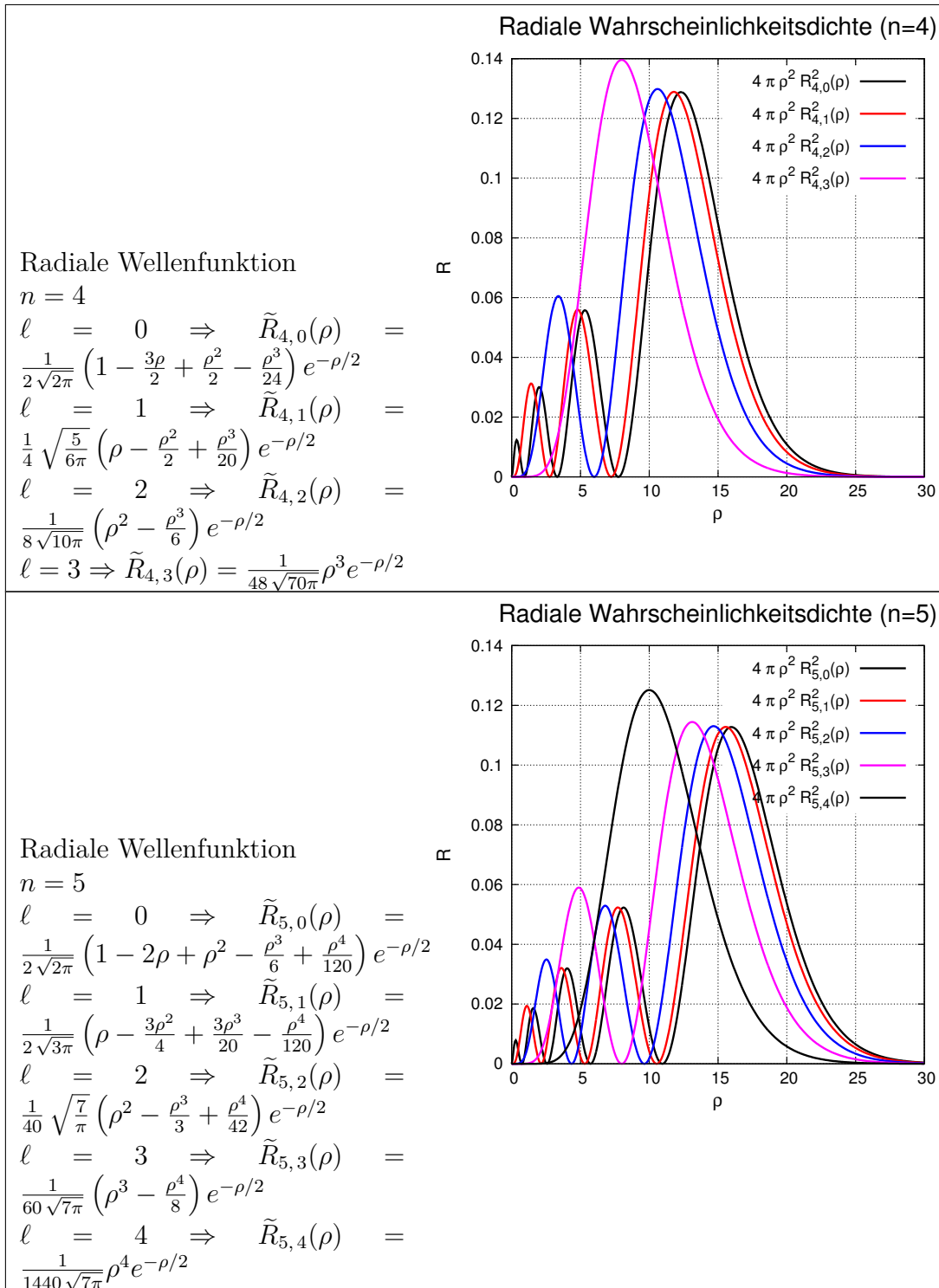


Tabelle A.6.: Nicht normierte radiale Wahrscheinlichkeitsdichtenverteilung

B. Periodensystem, Elektronenkonfiguration und Spinzustände

Tabelle der Elemente nach Haken und Wolf[HW04] und ergänzt mit www.webelements.com. Mendelewium wird auch *Md* genannt, Lawrencium auch *Lr*. Eingeklammerte Konfigurationen sind Vermutungen. Elemente mit einem * sind erzeugt worden, konnten aber nicht ausgemessen werden. Elemente mit ** werden vermutet, sind aber noch nicht gemessen worden.

Z	Element	L-S [eV] n=	Schalen			M			N				O				P			Q	
			K 1 s	L 2 s p		3 s p d	4 s p d f	5 s p d f	6 s p d f	7 s p d											
1	Wasserstoff H		1																		
2	Helium He		2																		
3	Lithium Li		2	1																	
4	Beryllium Be		2	2																	
5	Bor B		2	2	1																
6	Kohlenstoff C		2	2	2																
7	Stickstoff N		2	2	3																
8	Sauerstoff O		2	2	4																
9	Fluor F		2	2	5																
10	Neon Ne		2	2	6																
11	Natrium Na		2	2	6	1															
12	Magnesium Mg		2	2	6	2															
13	Aluminium Al		2	2	6	2	1														
14	Silizium Si		2	2	6	2	2														
15	Phosphor P		2	2	6	2	3														
16	Schwefel S		2	2	6	2	4														
17	Chlor Cl		2	2	6	2	5														
18	Argon Ar		2	2	6	2	6														
19	Kalium K		2	2	6	2	6	1													
20	Kalzium Ca		2	2	6	2	6	2													
21	Scandium Sc		2	2	6	2	6	1	2												
22	Titan Ti		2	2	6	2	6	2	2												
23	Vanadium V		2	2	6	2	6	3	2												
24	Chrom Cr		2	2	6	2	6	5	1												
25	Mangan Mn		2	2	6	2	6	5	2												
26	Eisen Fe		2	2	6	2	6	6	2												
27	Kobalt Co		2	2	6	2	6	7	2												
28	Nickel Ni		2	2	6	2	6	8	2												
29	Kupfer Cu		2	2	6	2	6	10	1												
30	Zink Zn		2	2	6	2	6	10	2												
31	Gallium Ga		2	2	6	2	6	10	2	1											
32	Germanium Ge		2	2	6	2	6	10	2	2											
33	Arsen As		2	2	6	2	6	10	2	3											
34	Selen Se		2	2	6	2	6	10	2	4											
35	Brom Br		2	2	6	2	6	10	2	5											
36	Krypton Kr		2	2	6	2	6	10	2	6											
37	Rubidium Rb		2	2	6	2	6	10	2	6	1										
38	Strontium Sr		2	2	6	2	6	10	2	6											
39	Yttrium Y		2	2	6	2	6	10	2	6	1										
40	Zirkon Zr		2	2	6	2	6	10	2	6	2										
41	Niob Nb		2	2	6	2	6	10	2	6	4										
42	Molybdän Mo		2	2	6	2	6	10	2	6	5										
43	Technetium Tc		2	2	6	2	6	10	2	6	6										
44	Ruthenium Ru		2	2	6	2	6	10	2	6	7										

Z	Element	L-S	[eV] n=	Schalen												P			Q	
				K 1	L 2			M 3			N 4			O 5			6	7		
				s	s	p	s	p	d	s	p	d	f	s	p	d	f	s	p	
45	RhodiumRh			2	2	6	2	6	10	2	6	8		1						
46	PalladiumPd			2	2	6	2	6	10	2	6	10								
47	SilberAg			2	2	6	2	6	10	2	6	10		1						
48	CadmiumCd			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2						
49	IndiumIn			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	1					
50	ZinnSn			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	2					
51	AntimonSb			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	3					
52	TellurTe			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	4					
53	JodJ			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	5					
54	XenonXe			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6					
55	CäsiumCs			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			1		
56	BariumBa			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2		
57	LanthanLa			2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	1		2		
58	CerCe			2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	6			2		
59	PraseodymPr			2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6			2		
60	NeodymNd			2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6			2		
61	PromethiumPm			2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6			2		
62	SamariumSm			2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6			2		
63	EuropiumEu			2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6			2		
64	GadoliniumGd			2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1		2		
65	TerbiumTb			2	2	6	2	6	10	2	6	10	9	2	6			2		
66	DysprosiumDy			2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6			2		
67	HolmiumHo			2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6			2		
68	ErbiumEr			2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6			2		
69	ThuliumTm			2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6			2		
70	YtterbiumYb			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6			2		
71	LutetiumLu			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1		2		
72	HafniumHf			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	2		2		
73	TantalTa			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	3		2		
74	WolframW			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	4		2		
75	RheniumRe			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	5		2		
76	OsmiumOs			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	6		2		
77	IridiumIr			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	9		2		
78	PlatinPt			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	9		1		
79	GoldAu			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		1		
80	QuecksilberHg			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2		
81	ThalliumTl			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	1	
82	BleiPb			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	2	
83	WismuthBi			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	3	
84	PoloniumPo			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	4	
85	AstatiumAt			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	5	
86	RadonRn			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	
87	FranciumFr			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1
88	RadiumRa			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2
89	ActiniumAc			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1
90	ThoriumTh			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2
91	ProtactiniumPa			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	2	6	1
92	UranU			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1
92	NeptuniumNp			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	
94	PlutoniumPu			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6	
95	AmericiumAm			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	
96	CuriumCm			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	1
97	BerkeliumBk			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	8	2	6	1
98	CaliforniumCf			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	10	2	6	
99	EinsteiniumEs			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	11	2	6	
100	FermiumFm			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	12	2	6	
101	MendeleviumMv			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	13	2	6	
102	NobeliumNo			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	
103	LawrenciumLw			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	1
104	RutherfordiumRf			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	2
105	DubniumDb			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	3
106	SeaborgiumSg			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	4
107	BohriumBh			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	5
108	HassiumHs			2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	6

Weiter auf der nächsten Seite

Z	Element	L-S	[eV] n=	Schalen																											
				K 1			L 2			M 3			N 4				O 5				P 6			Q 7							
				s	s	p	s	s	p	s	p	d	s	p	d	f	s	p	d	f	s	p	d	s	p	s	p				
109	Meit- nerium*	Mt		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	7	2										
110	Darm- stadtium*	Ds		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	9	1										
111	Roent- genium*	Rg		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	1										
112	Unun- bium*	Uub		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2										
113	Unun- trium*	Uut		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	1									
114	Unun- quadium*	Uuq		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	2									
115	Unun- pentium*	Uup		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	3									
116	Unun- hexium*	Uuh		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	4									
117	Unun- septium**	Uus		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	5									
118	Unun- octium**	Uuo		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	6									

Tabelle B.2.: Periodensystem, Elektronenkonfiguration und Spinzustände

C. Begriffe

Symbol	Name	Einheit	Wert, Bemerkungen
α	totaler (makroskopischer) Wirkungsquerschnitt	m^2	
α	Winkel	1	(z.B. zwischen Fläche und Ausbreitungsrichtung)
a	Netzebenenabstand	m	
A	Fläche	m^2	
B	Strahlungsdichte	$\frac{W}{m^2 \text{ sterad}}$	
B	Leuchtdichte	$\frac{cd}{m^2} = \text{Stilb} = sb$	
c	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$\frac{m}{s}$	299792458 $\frac{m}{s}$
D	Diffusionskonstante	$\frac{m^2}{s}$	
D	Intensität des Strahlungsfeldes	$\frac{W}{m^2} = \frac{N}{m \cdot s} = \frac{kg}{s^3}$	
D	Intensität (physiologisch)	$\frac{lm}{m^2} = \text{Lux} = lx$	
d	Abstand (Dicke)	m	
D	Strahlungsstromdichte	$\frac{W}{m^2}$	$I = D $
e	Elementarladung	C	$(1.60217646 \pm 6) \times 10^{-19} C$ [Mes06]
e	Basis des natürlichen Logarithmus	1	$e = 2.7182818284590$
e	Einheitsvektor	1	
ϵ	Absorptionsgrad	1	
η	Viskosität	$\frac{kg}{m \cdot s} = \frac{W}{m^3}$	
E	Bestrahlungsstärke	$\frac{W}{m^2}$	$B = D \cos \alpha$
Φ	Strahlungsfluss	W	

Symbol	Name	Einheit	Wert, Bemerkungen
Φ	Lichtstrom	$lm = \text{lumen}$	
Φ	Austrittsarbeit	$1eV = 1.602 \cdot 10^{-19} J$	
F	Faradayzahl	$\frac{C}{mol}$	$F = e \cdot N_A = (9,6485342 \pm 4) \cdot 10^4 \frac{C}{mol}$ [Mes06]
F	Kraft	N	
g	Feldvektor des Gravitationsfeldes	$\frac{m}{s^2}$	
h	Höhe	m	
h	Plancksches Wirkungsquantum	$J s$	$(6.6260688 \pm 5) \cdot 10^{-34} J s$ [Mes06]
\hbar	Plancksches Wirkungsquantum	$J s$	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = (1.05457160 \pm 8) \cdot 10^{-34} J s$ [Mes06]
I	Strom	A	
I	Intensität des Strahlungsfeldes	$\frac{W}{m^2} = \frac{N}{m s} = \frac{kg}{s^3}$	
I	Intensität (physiologisch)	$\frac{lm}{m^2} = \text{Lux} = lx$	
I	Lichtstärke	$cd = \frac{lm}{sterad}$	
I_S	Sättigungsstrom	A	
k	Wellenvektor	$\frac{1}{m}$	
k_B	Boltzmann-Konstante	$\frac{J}{K}$	$(1.380650 \pm 2) \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$ [Mes06]
λ	Wellenlänge	m	
λ_C	Compton-Wellenlänge	m	$\lambda_C = (2.42631 \pm 1) \cdot 10^{-12} m$
m	Masse	kg	
m_e	Ruhemasse des Elektrons	kg	$m_e = (9.109390 \pm 5) \cdot 10^{-31} kg$ [Mes06]
M	Molmasse	$\frac{kg}{mol}$	
ν	Frequenz	$Hz = \frac{1}{s}$	
ν_m	Maximalfrequenz	$Hz = \frac{1}{s}$	

Symbol	Name	Einheit	Wert, Bemerkungen
n	Teilchendichte	$\frac{1}{m^3}$	
n	Laufindex bei Streuexperimenten	1	
n_0	Teilchenzahldichte der Grundzustandsatome	$\frac{1}{m^3}$	
n^*	Teilchenzahldichte der angeregten Atome	$\frac{1}{m^3}$	
\check{n}	Anzahl Teilchen pro Zeit	$\frac{1}{s}$	
N	Anzahl1		
N_A	Avogadrozahl	$\frac{1}{mol}$	$(6.0221420 \pm 5) \times 10^{23} \frac{1}{mol}$ [Mes06]
N_L	Loschmidtzahl	$\frac{1}{mol}$	$N_L = N_A$ (lokale Bezeichnung für N_A)
Ω	Raumwinkel	<i>sterad</i>	
\mathbf{p}	Impuls (mechanisch)	$\frac{kgm}{s} = Ns$	
p	Druck	$\frac{N}{m^2} = \frac{kg}{m s^2}$	
P	Leistung	$W = \frac{J}{s} = \frac{Nm}{s} =$	z.B. Strahlungsleistung
P_s	Strahlungsfluss eines schwarzen Körpers	$\frac{m^2 kg}{s^3} = \frac{J}{s} = \frac{Nm}{s} =$	
$P_{s,\nu}$	spektraler Strahlungsfluss eines schwarzen Körpers	$\frac{W}{Hz} = Ws = J$	
p	Druck	$Pa = \frac{N}{m^2} = \frac{kg}{s^2 m}$	
Q	Lichtmenge	$lm s$	
ρ	Massedichte	$\frac{kg}{m^3}$	
$\varrho(\nu, T)$	Energieverteilung	$\frac{J s}{m^3}$	
r	Teilchenradius	m	
R	Teilchenradius	m	
R	spezifische Abstrahlung über alle Frequenzen	$\frac{W}{m^2}$	
R_ν	spezifische spektrale Abstrahlung	$\frac{W}{Hz m^2} = \frac{J}{m^2}$	
R	spezifische Lichtausstrahlung	$\frac{lm}{m^2}$	

Symbol	Name	Einheit	Wert, Bemerkungen
R	Gaskonstante	$\frac{J}{K \text{ mol}}$	$R = N_A \cdot k = 8.31447 \pm 2 \frac{J}{K \text{ mol}}$ [Mes06]
r	Ortsvektor	m	
σ	Streuquerschnitt	m^2	
σ	Stefan-Boltzmann-Konstante	$\frac{W}{m^2 K^4}$	$\sigma = (5.67040 \pm 4) \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$ [Mes06]
\mathbf{S}	Pointingvektor	$\frac{J \cdot s}{m^2} = \frac{W}{m^2}$	
θ	Streuwinkel	rad	
t	Zeit	s	
T	Temperatur	K	
V	Volumen	m^3	
V_T	Volumen eines Teilchens	m^3	
V_A	Volumen eines Atoms	m^3	
V_{mol}	Molvolumen	$\frac{m^3}{mol}$	
W	Wahrscheinlichkeit	1	
x	Koordinate im kartesischen Koordinatensystem	m	
y	Koordinate im kartesischen Koordinatensystem	m	
z	Koordinate im kartesischen Koordinatensystem	m	

Liste der Versuche

Versuch: Brownsche Molekularbewegung (TH-90)	21
Versuch: Fettfleckphotometrie: Helligkeitsvergleich zweier Lampen (O-61)	25
Versuch: Pyrometermodell (AT-12)	25
Versuch: Infrarotkamera: Optische Temperaturmessung (AT-44)	26
Versuch: Wärmestrahlung: Abstandsabhängigkeit bei einer punktförmigen Quelle (AT-54)	26
Versuch: Hohlraumstrahler: Absorption und Emission an Rohr mit Loch (AT-39)	26
Versuch: Plancksches Strahlungsgesetz: Strahlung einer Glühlampe bei verschiedenen Temperaturen (AT-21)	28
Versuch: Strahlungswürfel nach Leslie: Emissionsfaktor von verschiedenen Strahlern (AT-20)	36
Versuch: Stefan-Boltzmannsches Gesetz: mit Leslie-Würfel (AT-43)	36
Versuch: Fotoeffekt: qualitativ mit Aluminiumplatte (AT-17)	41
Versuch: Interferenz am Doppelspalt: mit einzelnen Photonen (AT-50)	44
Versuch: Doppelspalt: Interferenz mit polarisiertem Licht (AT-51)	44
Versuch: Millikan-Versuch: Ladung von Öltröpfchen (AT-13)	55
Versuch: Elektronenbeugung: an einer polykristallinen Graphitschicht (AT-56)	58
Versuch: Balmer-Serie (AT-35)	107
Versuch: Franck-Hertz-Versuch (AT-7)	114
Versuch: Orbitalmodelle: Stehende Wellen auf runder Wasseroberfläche (AT-60)	139
Versuch: Orbital-Modelle: Styropormodelle von Ladungswolken (AT-61)	139
Versuch: Elektronenspinresonanz: Modellversuch (AT-31)	150
Versuch: Elektronenspinresonanz: ESR an DPPH (AT-29)	150
Versuch: Natrium: Feinstruktur der D-Linie (AT-48)	152
Versuch: Normaler Zeeman-Effekt: Berechnung von e/m (AT-14)	159
Versuch: Röntgenfluoreszenz (AT-24)	188
Versuch: Absorption von Röntgenstrahlen: Qualitativ (AT-40)	188
Versuch: Drehbares Kreuzgitter: Optisches Analogon zur Debye-Scherrer-Interferenz (O-133)	189
Versuch: Röntgenstrahlung: Bremsstrahlung und charakteristische Linien (AT-37)	191
Versuch: Linienspektren: Quecksilber, Helium, Kalium, Cadmium, Krypton, Zink (AT-46)	197
Versuch: Quecksilber: Druckverbreiterung von Spektrallinien (AT-47)	199
Versuch: Zerlegbarer Laser (AT-30)	206

Abbildungsverzeichnis

2.1	<i>pV</i> -Diagramm für ein ideales Gas	14
2.2	Gangunterschied bei der <i>Bragg-Streuung</i>	15
2.3	NaCl- <i>Gitter</i>	16
2.4	E.W. Müllers Feldemissionsmikroskop.	17
2.5	E.W. Müllers Feldionenmikroskop. Unten ist der Potentialverlauf bei der He-Ionisation angegeben.	18
2.6	Feldionenmikroskopisches Bild.	18
2.7	Schematischer Aufbau eines Rastertunnelmikroskopes.	19
2.8	Graphitoberfläche	20
2.9	Simulierte Verteilung des Aufenthaltes eines Teilchens mit Brownscher Bewegung bei 5000 Zeitschritten.	20
2.10	Berechnung des Streuquerschnitts mit zwei Teilchen mit den Radien r und R	21
3.1	Links: Schematische Darstellung eines schwarzen Körpers. Rechts: Blick auf den Ofen einer Glasbläserei. Die kleine Öffnung wirkt fast wie ein schwarzer Körper.	26
3.2	Spektrale Energiedichteverteilung nach Wellenlänge.	27
3.3	Spektrale Energiedichteverteilung nach Frequenz	28
3.4	Schema der möglichen Anregungen und Emissionen in einem Zweiniveau-Atom.	31
3.5	Vergleich der Gesetze von Planck, Wien und Rayleigh Jeans bei 6000 K	33
3.6	Spektrale Energiedichteverteilung der Hintergrundstrahlung von 2.735 K	34
3.7	Wiensches Verschiebungsgesetz	35
3.8	Energiedichte im spektralen Maximum nach dem Wiensches Verschiebungsgesetz	36
3.9	Stefan-Boltzmann-Gesetz	38
3.10	Empfindlichkeitskurven der Augenrezeptoren skaliert auf gleiche integrale Empfindlichkeit (nach [Mes06])	38
3.11	Vergleich der spektralen Energiedichte von Sonne und Erde.	39
4.1	Versuchsordnung zur Messung des Fotoeffektes	41
4.2	Fotostrom in Funktion von Frequenz und Spannung	42
4.3	Bremsspannung in Abhängigkeit von der Bremsspannung und vom Sättigungsstrom	42
4.4	Fotoeffekt	43
4.5	Aufbau einer Apparatur zum Messen des Lichtdrucks.	46
4.6	Messung der lichtinduzierten Kräfte.	47
4.7	Kontrollexperiment zu Lichtinduzierten Kräften	48
4.8	Impulserhaltung beim <i>Compton-Effekt</i>	49

4.9	Compton-Effekt bei vier Streuwinkeln	50
4.10	Impulserhaltung bei der Emission eines Gammaquants.	51
4.11	Absorptions- oder Emissionspektrum für ein γ -Quant.	51
4.12	Experimenteller Aufbau der Mössbauer-Spektroskopie	52
4.13	Mössbauerspektrum von ^{57}Fe , gemessen von Dr. M. Gonçalves.	53
4.14	Bestimmung der Elektronenladung nach Millikan[Mil11, Mil13].	54
4.15	Reales Gitter (links) und reziprokes Gitter (rechts).	60
4.16	Skizze zur Streuung an Oberflächenatomen	60
4.17	Ewald-Konstruktion für Oberflächennetze.	62
4.18	Aufbau eines LEED-Experimentes.	63
4.19	Energieverlauf im LEED-Detektor.	63
4.20	Eindringtiefe der Elektronen als Funktion der Energie	64
4.21	Ewaldkonstruktion für LEED	64
4.22	Beugungsmuster und Definitionen zur Transferweite	65
4.23	Schematische Skizze eines LEED-Bildes von $\text{Cu}(110)$	66
4.24	Schematische Skizze eines LEED-Bildes	66
4.25	Skizze eines LEED-Bildes $\text{Si}(111)$	67
4.26	Anordnung für die <i>Rutherford-Streuung</i>	67
4.27	Skizze zur Berechnung der <i>Rutherford-Streuung</i>	68
4.28	Schematischer Verlauf der Streuamplitude der <i>Rutherford-Streuung</i>	71
4.29	Zweistrahlint interferenz von Atomen (gezeichnet nach [CM91]).	71
5.1	Wellenpaket.	82
5.2	Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden.	83
5.3	Potentialstufe.	85
5.4	Transmissionskoeffizient T und Reflexionskoeffizient R	87
5.5	$\phi(x)^* \phi(x)$ für verschiedene Verhältnisse von E/V_0	88
5.6	Potentialwand.	88
5.7	Transmissionskoeffizient (rot) und Reflexionskoeffizient (blau)	91
5.8	Wahrscheinlichkeitsdichten an der Tunnelbarriere	92
5.9	Potentielle Energiefunktion eines harmonischen Oszillators.	93
5.10	Die ersten acht Hermite-Polynome.	98
5.11	Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators	99
5.12	Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators	99
5.13	Potentialtopf.	100
5.14	Transformation einer Potentialschwelle in einen Potentialtopf	100
5.15	Transmission über einen Potentialtopf.	102
5.16	Darstellung von $8x^4 - 8x^2 + 1$ gegen $\cos(\kappa x)$ in Abhängigkeit von κ	104
5.17	Nullstellen von $8x^4 - 8x^2 + 1 - \cos(\kappa x) = 0$ in Abhängigkeit von κ	104
5.18	Relative Energieniveaus des Potentialtopfs als Funktion der Topfbreite a	105
5.19	Energieniveaus des Potentialtopfs als Funktion der Wandhöhe V_0	105
5.20	2D unendlicher Potentialkasten.	106
6.1	Wellenlängen der Lyman-, <i>Balmer</i> , <i>Johann Jakob, 1885</i> - und Paschen-Serien im Wasserstoffspektrum.	108
6.2	Ionisierung eines Gases. Links ist der Versuchsaufbau, rechts die Kennlinie.	114
6.3	Energieverhältnisse beim Ionisierungs-Versuch.	115

6.4	Aufbau des <i>Franck-Hertz-Versuches</i>	115
6.5	Energieverhältnisse beim Franck-Hertz-Versuch.	116
6.6	Resultat des Franck-Hertz-Versuches mit Quecksilber.	116
6.7	Resultat des Franck-Hertz-Versuches.	117
6.8	Elektronenverteilung bei der Emission	117
6.9	Verbesserter Aufbau des <i>Franck-Hertz-Versuches</i>	118
6.10	Ergebnis der genaueren Messung (Skizze)	118
6.11	Definition der Kugelkoordinaten.	121
6.12	Radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffs	136
6.13	Sommerfeld-Bild: Modell eines Atoms mit einem „Leuchtelektron“	144
6.14	Atom mit einem Leuchtelektron	144
6.15	Skizze: Coulombpotential und effektives Potential	145
6.16	Grotrian-Diagramm für Lithium	146
6.17	Radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms	148
6.18	Versuchsaufbau Stern-Gerlach-Versuch	148
6.19	Skizze: Erwartete (links) und gemessene Verteilung der Elektronen beim Stern-Gerlach-Versuch.	149
6.20	Zusammenhang zwischen Drehimpuls und magnetischem Moment	150
6.21	Elektronenspin \mathbf{s} , Betrag $ \mathbf{s} $ und z -Komponente s_z	151
6.22	Spin-Bahn-Kopplung	152
6.23	Spin-Bahnkopplung nach Bohr	153
6.24	Spinpräzession. Links Skizze, rechts Vektoraddition	154
6.25	Beziehung zwischen \mathbf{j} , $\mathbf{\ell}$ und \mathbf{s} nach dem <i>Cosinus-Satz</i>	155
6.26	p-Aufspaltung nach Gleichung (6.5.23)	156
6.27	Elektronenspinresonanz	157
6.28	Situation von oben gesehen	158
6.29	Elektronen-Spin-Resonanz: Aufbau	158
6.30	Zeemann-Effekt klassisch	159
6.31	Magnetisches Moment des <i>Gesamtspins</i>	161
6.32	Zeemann-Aufspaltung für Übergänge $n + 1 \rightarrow n$, $n + 2 \rightarrow n$, $n + 2 \rightarrow n + 1$, $n + 3 \rightarrow n$, $n + 3 \rightarrow n + 1$ und $n + 3 \rightarrow n + 2$	165
6.33	Paschen-Back-Effekt bei starken Magnetfeldern.	166
6.34	Apparatur zur Beobachtung des Starkeffektes.	167
6.35	Energieniveauschema des Natriumdubletts im elektrischen Feld.	168
6.36	Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktion	172
6.37	Termschema von Helium	179
6.38	Skizze einer Röntgenröhre	188
6.39	Röntgenfluoreszenz von Stärke	188
6.40	Röntgenfluoreszenz von Azurit	189
6.41	Optisches Analogon zur Röntgenbeugung	190
6.42	Analogon des Beugungsmusters nach Debye-Scherrer	190
6.43	Kupfer-K-Linien (adaptiert aus [DHH ⁺ 95]).	191
6.44	Bezeichnung der Übergänge zwischen den inneren Schalen	192
6.45	Schalenaufbau von H, Li ⁺ , Na ⁺ und K ⁺ nach [HW04, p. 351].	193
6.46	Ionisationszustände nach [HW04, p. 349].	193
6.47	Ausbeute von Augerelektronen als Funktion der Ordnungszahl	194
6.48	Elektronenenergien beim Auger-Prozess als Funktion der Ordnungszahl	194

7.1	Lorentzlinien	198
7.2	Vergleich der Dopplerverbreiterung mit der natürlichen Linienbreite bei den Natrium-D-Linien.	200
7.3	Fluoreszenz und Phosphoreszenz	201
7.4	Illustration der Ramanstreuung im Vergleich zur Rayleighstreuung.	203
7.5	Ramanspektrum von Poyletylen im Bereich der Methylen-Biegeschwingung (adaptiert aus [BK70])	204
7.6	Aufbau eines Lasers	204
7.7	Schematische Darstellung der Verstärkung	205
7.8	Funktion eines Lasers	207
7.9	Beugung einer ebenen Welle an einer Blende	209
7.10	Erklärung der Fresnelzahl	210
7.11	Spiegelresonator und Blenden	210
7.12	Feldamplitude	211
7.13	Modenverteilungen	212
7.14	Radiale Amplitudenverteilung in konfokalen Resonatoren	213
7.15	Beispiele für Laserresonatoren	213
7.16	Beugungsverluste von $TEM_{n,m}$ -Moden	214
7.17	Stabilitätsdiagramm für optische Resonatoren	214
7.18	Beispiele von instabilen Resonatoren	215
7.19	Klassifizierung von Resonatoren nach Demtröder[Dem93]. Die b_i sind die Krümmungsradien der Spiegel, deren abstand b ist.	215
7.20	Frequenzspektrum eines konfokalen Resonators	216
7.21	Fabry-Perot-Resonanzen	218
7.22	Normierte Linienbreite	219
7.23	Verstärkungsprofil und Resonatormoden	220
7.24	Modenprofil des aktiven Resonators in Abhängigkeit der Verstärkung.	221
7.25	Verstärkungsprofil des aktiven Mediums	221
7.26	Aufbau von Gaslasern.	222
7.27	Termschema des He-Ne-Lasers (nach [JBH61] und [Yar75]).	223
7.28	Termschema des Argon-Ionen-Lasers (nach [Bri64]).	224
7.29	Schematischer Aufbau eines Festkörperlasers	225
7.30	Termschema des Rubinlasers (nach [Mai60] und [Sig82]).	225
7.31	Termschema von $Nd:YAG$ -Lasern (siehe [Sig82] und [KS08])	226
7.32	PN-Laserdiode mit angelegter Spannung	227
7.33	Prinzip des Laserresonators	228
7.34	Quantum Well Lasers (nach [Yar75]).	229
7.35	Zeitliche Beziehung zwischen Pumpimpuls, Laserimpuls und Besetzungsinversion	229
7.36	Relaxationsschwingungen	230
7.37	Güteschaltung	231
7.38	Gepulste Laser	231
7.39	Spannungspuls und Spannungsverlauf	232
7.40	Schematische Darstellung der Bragg-Reflexion von Licht an Schallwellen.	232
7.41	Schematischer Aufbau der Auskopplung aus einem gütegeschalteten Laser (cavity dumping).	233
7.42	Ultraschallpulses und Laserpulses	234

7.43 Modenkopplung	235
7.44 Überlagerung von Moden	235
7.45 Erzeugung kurzer Pulse	237
7.46 Modenkopplung	237
7.47 Autokorrelation und Spektrum	238
7.48 Laser	238
7.49 CPM-Lasersystem	239
7.50 Pulsbreite und Bandbreite	240
7.51 Dispersionskompensation	242
7.52 Cr:LiSAF-Lasers	243
7.53 Verlauf der Reflektivität	244

Tabellenverzeichnis

3.1	Photometrische Grössen	24
5.1	Erwartungswerte für normierte Wellenfunktionen ψ	78
6.1	Tabelle der ersten α_ν , wenn $\alpha_0 = 1$ ist.	133
6.2	Nicht normierte Eigenfunktionen zu n und ℓ	134
6.3	Normierte radiale Eigenfunktionen als Funktion der dimensionslosen Variablen ρ	135
6.4	Radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms	137
6.5	Normierte radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms.	138
6.6	Bezeichnungen der Bahndrehimpulszustände	146
6.7	Haupt- und Nebenserien beim Na	147
6.8	g_j als Funktion von ℓ , s und j	163
6.9	Übergänge in Helium	179
6.10	Singulett- und Triplett-Zustände bei zwei Spins	182
6.11	Anordnung von Bahndrehimpulsen zum <i>Gesamtbahndrehimpuls</i>	182
6.12	Drehimpulszustände für Vielelektronensystemen	185
6.13	Bezeichnung der drehimpulsaufgespaltenen inneren Niveaus	192
7.1	Verstärkungen und Ausgangsleistungen der Laserlinien der HeNe-Laser (nach [Sig82]).	223
7.2	Verstärkungen und Ausgangsleistungen der Laserlinien des Argon-Ionen-Laser (nach [Sig82]).	224
A.2	Zugeordnete Kugelfunktionen	250
A.4	Nicht normierte radiale Wellenfunktionen	252
A.6	Nicht normierte radiale Wahrscheinlichkeitsdichtenverteilung	254
B.2	Periodensystem, Elektronenkonfiguration und Spinzustände	257

Literaturverzeichnis

- [ad07] Atomsondenbenutzer at de.wikipedia. Feldionemikroskopbild einer wolframspitze mit einem $\langle 110 \rangle$ -pol in der mitte. Wikipedia.de, 2007. By Atomsondenbenutzer.Atomsondenbenutzer at de.wikipedia [Public domain], from Wikimedia Commons.
- [AW95] George B. Arfken and Hans J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 1995.
- [Bay69] Gordon Baym. *Lectures on quantum mechanics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1969.
- [Bel81] L. Belloni. Historical remarks on the «classical» electron radius. *Lettere Al Nuovo Cimento (1971-1985)*, 31:131–134, 1981. 10.1007/BF02822412.
- [BK70] F. J. Boerio and J. L. Koenig. Raman scattering in crystalline polyethylene. *The Journal of Chemical Physics*, 52(7):3425–3431, 1970.
- [Boh13] Niels Bohr. The spectra of helium and hydrogen. *Nature*, 92:231–232, October 1913.
- [Boh15] N. Bohr. Xlii. on the quantum theory of radiation and the structure of the atom. *Philosophical Magazine Series 6*, 30(177):394–415, 1915.
- [Boh18] Niels Bohr. On the quantum theory of line-spectra. (*D. Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Skrifter, Naturvidensk. og Mathem. Afd. 8. Række, IV.1, 1-3*, IV:394–433, 1918.
- [Boh20] N. Bohr. Über die serienspektren der elemente. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 2:423–469, 1920. 10.1007/BF01329978.
- [Bri64] William B. Bridges. Laser oscillation in singly ionized argon in the visible spectrum. *Applied Physics Letters*, 4(7):128–130, 1964.
- [BSMM00] I.N. Bronštein, K.A. Semendjajew, G. Musiol, and H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, 2000.
- [CM91] Olivier Carnal and Jürgen Mlynek. Young’s double-slit experiment with atoms: A simple atom interferometer. *Physical Review Letters*, 66:2689–2692, 1991.
- [Com23] Arthur H. Compton. A quantum theory of the scattering of x-rays by light elements. *Physical Review*, 21(5):483–502, 1923.

- [Deh88] H. Dehmelt. A single atomic particle forever floating at rest in free space: New value for electron radius. *Physica Scripta Volume T*, 22:102–110, January 1988.
- [Dem93] Wolfgang Demtröder. *Laserspektroskopie*. Springer-Verlag, Heidelberg, 3rd edition, 1993.
- [DHH⁺95] M. Deutsch, G. Hölzer, J. Härtwig, J. Wolf, M. Fritsch, and E. Förster. $K\alpha$ and $K\beta$ x-ray emission spectra of copper. *Phys. Rev. A*, 51:283–296, Jan 1995.
- [Ein05] Albert Einstein. Über die von der molekulartheoretischen Theorie der Wärme geforderten Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Annalen der Physik*, 17:891–921, 1905.
- [FH14] J. Franck and G. Hertz. Über die erregung der quecksilberresonanzlinie $253,6\ \mu\mu$ durch elektronenstöße. *Deutsche Physikalische Gesellschaft. Verhandlungen*, 16:512–517, 1914.
- [Foo06] Christopher J. Foot. *Atomic physics*. Oxford University Press, Oxford [u.a.], 1. publ., repr. edition, 2006.
- [Gun57] E. L. Gunn. Fluorescent x-ray spectral analysis of powdered solids by matrix dilution. *Analytical Chemistry*, 29(2):184–189, 1957.
- [HG91] M. Henzler and W. Göpel. *Oberflächenphysik des Festkörpers*. Teubner Verlag, 1st edition, 1991.
- [Hin96] Hinsch. *Elektronik*. Springer, 1996.
- [Hol00] G. Holton. Millikan’s struggle with theory. *Europhysics News*, 31:12–14, May 2000.
- [HRW03] David Halliday, Robert Resnick, and Jearl Walker. *Physik*. Wiley-VCH GmbH, 2003. QC 21/2003 H.
- [HW04] Hermann Haken and Hans Christoph Wolf. *Atom- und Quantenphysik*. Springer Verlag, 8th edition, 2004.
- [JBH61] A. Javan, W. R. Bennett, and D. R. Herriott. Population inversion and continuous optical maser oscillation in a gas discharge containing a he-ne mixture. *Phys. Rev. Lett.*, 6:106–110, Feb 1961.
- [JSY82] F. Jona, J.A. Strozier, and W.S. Yang. Low-energy electron diffraction for surface structure analysis. *Reports of Progress in Physics*, 45:527–585, 1982.
- [Kel95] Ursula Keller. *Ultrashort Time Optics: An Overview*, pages 295–305. Volume 300 of Marti and Möller [MM95], 1995.
- [Kne78] Fritz Kneubühl. *Repetitorium der Physik*. Teubner, 1978.
- [Kom96] Michael Komma. *Moderne Physik mit Maple*. Int.Thomson Pub. Bonn, 1996.

- [KS08] F. Kneubühl and M. Sigrist. *Laser*. Vieweg + Teubner, Zürich, 7. auflage edition, 2008.
- [Lak06] Joseph R. Lakowicz. *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. Springer, 2006.
- [LL79] L.D. Landau and E.M. Lifschitz. *Quantenmechanik*. Akademie-Verlag Berlin, 1979.
- [Möb58] Rudolf Mößbauer. Gammastrahlung in ir191. *Zeitschrift für Physik*, 151:124–143, 1958.
- [Mai60] T. H. Maiman. Stimulated optical radiation in ruby. *Nature*, 187:493–494, 1960.
- [Mar87] Othmar Marti. *Scanning tunneling microscope at low temperatures*. Ph.d thesis, ETH (Federal Institute of Technology), 1987.
- [Mes06] Dieter Meschede. *Gerthsen Physik*. Springer Verlag, 23rd edition, 2006. QC 21/2006 G-1 Ex.2.
- [Mil11] R. A. Millikan. The isolation of an ion, a precision measurement of its charge, and the correction of stokes’s law. *Physical Review Series I*, 32:349–397, April 1911.
- [Mil13] R. A. Millikan. On the elementary electrical charge and the avogadro constant. *Phys. Rev.*, 2:109–143, 1913.
- [MM95] Othmar Marti and Rolf Möller, editors. *Photons and Local Probes*, volume 300 of *E*. Kluwer Academic Publishers, 1995.
- [MRH⁺92] O. Marti, A. Ruf, M. Hipp, H. Bielefeldt, J. Colchero, and J. Mlynek. Mechanical and thermal effects of laser irradiation on force microscope cantilevers. *Ultramicroscopy*, 42-44:345–350, 1992.
- [Mül51] E. W. Müller. Feldionenmikroskop. *Z. Physik*, 136:131, 1951.
- [Nav15a] R. Nave. Hypermath web site, Department of Physics and Astronomy, Georgia State University. Internet, 2015. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hmat.html>.
- [Nav15b] R. Nave. Hyperphysics web site, Department of Physics and Astronomy, Georgia State University. Internet, 2015. Url: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hph.html> (entnommen 27. 01. 2015).
- [OH01] Gerd Otter and Raimund Honecker. *Atome - Moleküle - Kerne*. Teubner, Stuttgart, 2001.
- [Per09] Jean Perrin. Mouvement brownien et réalité moléculaire. *Annales de chimie et de physique*, VIII 18:5–114, 1909.
- [Pér96] José-Philippe Pérez. *Optik*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 1996.

- [Rei65] Federick Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. McGraw Hill, 1965.
- [Rou99] Roulston. *An Introduction to the Physics of Semiconductor Devices*. Oxford University Press, 1999.
- [SHA⁺91] Nobuhiko Sarukura, Kiyoshi Hata, Takashi Adachi, Ryoichi Nodomi, Masayoshi Watanabe, and Shuntaro Watanabe. Coherent soft-x-ray generation by the harmonics of an ultrahigh-power krf laser. *Phys. Rev. A*, 43:1669–1672, Feb 1991.
- [SHK00] S. Schön, M. Haiml, and U. Keller. Ultrabroadband *AlGaAs/CaF₂* semiconductor saturable absorber mirrors. *Appl. Phys. Lett.*, 77(6):782–784, August 2000.
- [Sig82] Markus Werner Sigrist. *Laser*. Vorlesung ETH Zürich, 1982.
- [Sim90] Károly Simonyi. *Kulturgeschichte der Physik*. Akadémiai Kiadó, Budapest und Urania-Verlag Leipzig/Jena/Berlin, 1st edition, 1990.
- [Som16a] Arnold Sommerfeld. Zur quantentheorie der spektrallinien 1. *Annalen der Physik*, 356(17):1–94, 1916.
- [Som16b] Arnold Sommerfeld. Zur quantentheorie der spektrallinien 2. *Annalen der Physik*, 356(18):125–167, 1916.
- [Tho97] John Joseph Thomson. Cathode rays. *Philosophical Magazine*, 44:293–316, 1897.
- [Tho26] Llewellyn Thomas. The motion of the spinning electron. *Nature*, 117:514, 1926.
- [TM04] Paul A. Tipler and Gene Mosca. *Physik*. Spektrum Verlag, 2nd edition edition, 2004. ISBN-13: 978-3827411648.
- [vS06] Marian von Smoluchowski. Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspensionen. *Annalen der Physik*, 21:756–780, 1906.
- [WVM⁺99] Bernhard Wehling, Peter Vandenabeele, Luc Moens, Reinhold Klockenkämper, Alex von Bohlen, Guido Van Hooydonk, and Martine de Reu. Investigation of pigments in medieval manuscripts by micro raman spectroscopy and total reflection x-ray fluorescence spectrometry. *Microchimica Acta*, 130:253–260, 1999. 10.1007/BF01242913.
- [Yar75] A. Yariv. *Quantum Electronics, 2nd Edition*. John Wiley and Sons, New York., 1975.

Index

- LS*-Kopplung, 183
- γ -Quanten, 50
- g*-Faktor, 150
- jj*-Kopplung, 186
- Äussere Schalen, 187

- Absorption, 32
- Absorptionsgrad, 25
- Absteigeoperator, 94
- AFPSA, 243, 244
- Akusto-optischer Modulator, 232–234
- Anti-Stokes-Shift, 203
- Atom
 - Bohr-Sommerfeld-Modell, 107–114
- Atome
 - Aufbau, 107–195
 - Ein-Elektron, 152–158
 - elektrisches Feld, 167–172
 - elektromagnetisches Feld, 197–244
 - Feld
 - elektromagnetisch, 197–244
 - Grösse, 21–22
 - magnetfeld, 148–150
 - Masse, 13–22
 - Mehrelektronen, 178–187
 - Sichtbarkeit, 16–21
 - Strahlung, 197–204
- Atominterferenz, 71
- Atommodell
 - Bohr, 109–110
- Aufbau
 - Atome, 107–195
- Aufsteigeoperator, 95
- Auge, 24
- Auger-Prozesse, 194–195
- Ausbreitungsgeschwindigkeit, 74
- Auswahlregel für Spins
 - Dipolstrahlung, 184
- Auswahlregeln, 172–178
 - Wasserstoff, 177–178
 - Wellenfunktion, 176
- Avogadro-Zahl, 13–16
- Axiome
 - Quantenmechanik, 80–81

- Bahndrehimpuls, 112–114
- Bahn-Bahn-Kopplung, 183
- Bahndrehimpuls, 112
- Balmer, Johann Jakob, 1885, 107, 108, 112
- Balmer-Serie, 108
- Beschleunigungsspannung, 114, 116, 117, 188, 191
- Bestrahlung, 23
- Bestrahlungsstärke, 23
- Beugung
 - Elektron, 58–67
 - Oberfläche, 60–62
- Beugungsverluste, 211
- Bilanzgleichungen, 207–209
- Bindungsenergie, 187, 195
- Biot-Savart, 153
- Bohr, 81–82
- Bohr, Niels, 107–114
- Bohr-Sommerfeld-Modell, 107–114
- Bohrsche Theorie
 - Anwendung, 111–112
- Bohrscher Radius, 138
- Boltzmann
 - Konstante, 14
- Boltzmann-Verteilung, 31
- Brackett-Serie, 108
- Bragg
 - Streuung, 15
- Bragg-Spiegel
 - sättigbar, 243–244
- Bragggleichung, 15
- Brechungsindex, 220, 232, 240, 241, 243
- Bremsspektrum, 191

- Bremsstrahlung, 191–193
 Brownsche Bewegung, 20–21
 c.c., 58
 Candela, 24
 Cavity Dumping, 232–234, 239
 cd, 24
 Compton
 Streuung, 50
 Wellenlänge, 50
 Compton-Effekt, 49–50
 Cosinus-Satz, 155
 CPM-Laser, 239
 CPM-Lasersystem, 239

 de Broglie-Wellenlänge, 61
 Debye-scherrer-Beugung, 190
 Diodenlaser, 226–229
 Dispersion, 240
 Dispersionskompensation, 240, 242, 243
 Drehimpuls, 182–187
 Erzeugungsoperator, 124–128
 Vernichtungsoperator, 124–128
 Drehimpulsoperator, 121, 149–150
 Drehimpulsoperatoren, 120–121
 Drehimpulsquantenzahl, 134

 ebene Welle, 211
 Ebene Wellen, 58
 Effekt
 Compton, 49–50
 Mössbauer, 50–53
 Eigenfunktion, 74
 Eigenwert, 74
 entartet, 106
 Eigenwerte
 Schrödingergleichung, 78–80
 Ein-Elektronen-Atome, 152–158
 Einstein, 31
 Einsteinkoeffizient, 32
 elektrisches Feld
 Atom, 167–172
 Elektrolyse, 14
 elektromagnetisches Feld
 Atome, 197–244
 Elektron, 53–57, 109
 Grösse, 56–57
 Ladung, 53–55
 Elektronenbeugung, 58–67

 Elektronenmasse, 111
 reduziert, 111
 Elektronenspin, 150–166
 Elektronenspin-Resonanz, 157–158
 Emission, 23
 induziert, 31, 32
 spontan, 32
 Energie, 23
 harmonischer Oszillator, 96
 Energieniveau, 109
 Entartung, 143
 Erzeugungsoperator, 95
 Erzeugungsoperatoren
 Drehimpuls, 124–128
 ESR, 157–158
 ESR-Apparatur, 158
 Ewald-Konstruktion, 64

 Fabry-Perot-Resonator, 204
 Faradayzahl, 14
 Farben, 38
 Feinstruktur, 152–158
 Feinstrukturkonstante
 Sommerfeld, 119
 Feld
 elektromagnetisch
 Atome, 197–244
 Feldemissionsmikroskop, 17
 Felder
 Strahlung, 23–25
 Feldionenmikroskop, 17, 18
 Feldionenmikroskopie, 17–18
 Femtosekunden-Laser, 239–240
 Fermi-Verteilung, 117
 Festkörperlaser, 225–226
 Finesse, 218
 Fluoreszenz, 201
 Fluoreszenzlebensdauer, 201
 Fourieroptik, 211
 Fouriertransformation, 81, 197, 198,
 238
 Franck-Condon-Prinzip, 201
 Franck-Hertz-Versuch, 114–119
 Frequenz
 emittiert, 110
 Fresnel-Zahl, 214
 Fresnelzahl, 210
 fs-Laser, 239–240

- Güteschaltung, 231
- GaAs, 226, 227
- Gamma-Quanten, 50
- Gaslaser, 222–224
- gerade Parität, 174
- Gesamtbahndrehimpuls, 182, 183, 186, 187
- Gesamtdrehimpuls, 152, 153, 161, 166, 182–185
- Gesamtspin, 161, 180, 182–187
- Gesetz
 - Stokes, 54
- Gesetze
 - Stefan-Boltzmann, 36–38
 - Strahlung, 25–39
 - Planck, 28–34
 - Verschiebung
 - Wien, 34–36
- Gitter, 114
 - reziprok, 59–60
- Grösse
 - Elektron, 56–57
- Graphit, 20
- Grotrian-Diagramm, 146
- Gruppenlaufzeit, 240
- gyromagnetisches Verhältnis, 150
- Halbleiter, 228
 - Material, 228
- Halbleiter-Laser, 227
- Halbleiter-Strahlungsquellen, 226–229
- Halbraum, 37
- Hamiltonfunktion, 75
- hamiltonsches Extremalprinzip, 75–76
- Harmonischer Oszillator, 92–99
 - Symmetrie, 173–174
 - Wellenfunktion, 98–99
- Hauptquantenzahl, 112, 134
- Heisenbergsche Unschärferelation, 82–83
- Hermite-Polynom, 97
- Hermite-Polynome, 97–98
- hermitesche Operatoren, 74
- Hermitsche Polynome, 212
- Hilbert-Räume, 73–74
- Hilbert-Raum, 73
- Hundsche Regeln, 185–186
- Impuls
 - Photon, 44–53
- Impulsoperator, 75
- induzierte Emission, 31
- Innere Schalen, 187
- Intensität, 23
- Interferenz
 - Atome, 71
- Interkombination, 202
- Intersystem Crossing, 202
- Isotopeneffekt, 113
- Jablonski-Diagramm, 201
- jj-Kopplung, 186
- Körper
 - schwarz, 26
- kanonisch konjugierte Variablen, 79
- Kasha's Regel, 201
- Kathode, 114
- Kepler-Gesetze, 143
- Kirchhoff
 - Strahlungsgesetz, 25
- Kirchhoff-Fresnel, 211
- klassischer Elektronenradius, 56
- Knoten, 213
- Kohärenz, 65
- Kommutator, 80
- konfokaler Resonator, 212
- Konformation, 201
- Konstruktion
 - Ewald, 64
- Kopenhagener Interpretation, 76
- Korrespondenzprinzip, 110
- Kurze Pulse
 - Erzeugung, 229–244
- Kurzpulslaser, 229–244
- Ladung
 - Elektron, 53–55
- Lagrangefunktion, 75
- Laguerrsches Polynom, 138
- Lambert-Gesetz, 24
- Lambert-Strahler, 24
- Laplacetransformation, 197
- Larmor-Frequenz, 159
- Laser, 204–244
 - Diode, 226–229
 - Femtosekunden, 239–240
 - Festkörper, 225–226

- Gas, 222–224
- Halbleiter, 227
- Kurzpuls, 229–244
 - synchron gepumpt, 238–239
- Laserprozesse, 205–209
- Laserresonator, 213
- Laserstrahlen, 209–222
- LED
 - weiss, 227
- LEED, 62–67
- Legendre-Funktion, 127
 - zugeordnet, 127
- Lichtdruck, 45
- Lichtstrom, 24
- lineare Operatoren, 74
- Linearer Stark-Effekt, 171–172
- linearer Starkeffekt, 167, 171
- Linienbreite, 199–200
- Linienform, 195, 197–199
- Lorentz-Oszillator, 197–199
- Lorentzlinie, 198
- Loschmidt-Zahl, 13–16
- Low Energy Electron Diffraction, 62–67
- LS-Kopplung, 183–185
- Lyman-Serie, 108
- Mössbauer-Effekt, 50–53
- Magnetfeld
 - Atome, 148–150
- Magnetische Spin-Bahn-Kopplung, 151–152
- Magnetisches Moment
 - Mehrelektronenatome, 187
- Masse
 - Atome, 13–22
 - Photon, 44–53
- Material
 - Halbleiter, 228
- Materiewellen, 58–71
- Mehrelektronenatome, 178–187
 - Magnetisches Moment, 187
- Mikroskopie
 - Feldionenmikroskopie, 17–18
 - Rastertunnelmikroskopie, 19–20
- Millikan
 - Versuch, 54–55
- Moden
 - Resonator, 211–222
- Modendichte, 32
- Modenkopplung, 235–237
- Modenkopplung
 - passiv, 237–238
- Modenverteilung, 212
- Modulator
 - akusto-optisch, 232–234
- Multiplettsystem, 185
- NaCl, 16
- natürliche Lebensdauer, 199
- Nd:YAG-Laser, 226
- Nebenquantenzahlen, 118
- Niels Bohr, 110
- Oberfläche
 - Beugung, 60–62
 - Streuung, 60–62
- Operator
 - hermitesch, 74
 - linear, 74
- Operator der kinetischen Energie, 76
- Orbitale, 122
- orthogonale Funktionen, 73
- Orthohelium, 180
- Oszillator
 - Lorentz, 197–199
- Parahelium, 180
- Parität, 174
- Paritätstransformation, 174
- Paschen-Back-Effekt, 165–166
- Paschen-Serie, 108
- passive Modenkopplung, 237–238
- Pauli
 - Wolfgang, 181
- Pauli-Gleichung, 165
- Pauli-Prinzip, 180–182
- Periodensystem, 191–193
- Pfund-Serie, 108
- Phosphoreszenz, 202
- Photometrie, 24
 - photometrische Grösse, 24
 - photometrische Grössen, 24–25
- Photon, 41–53
 - Impuls, 44–53
 - Masse, 44–53
- Planck, 31
 - Strahlungsgesetz, 28–34

- Plancksches Strahlungsgesetz, 30
 Plancksches Wirkungsquantum, 28
 Pockelszelle, 231
 Poissonklammer, 80
 Potentialbarriere, 88–92
 Potentialstufe, 85–88
 Potentialtopf
 $E < V_0$, 102–106
 $E > V_0$, 100–102
 2D
 unendlich, 106
 endlich, 100–106
 unendlich hoch, 83–84
 Poynting-Vektor, 234
 Pulskompression, 240–242
 Punktspiegelung, 174
- Quadratischer Stark-Effekt, 168–170
 quadratischer Starkeffekt, 167, 170
 Quantendefekt, 147
 Quantenmechanik
 Axiome, 80–81
 Quantentheorie, 73–106
- Röntgenbeugung, 21
 Röntgen, Wilhelm Conrad, 187
 Röntgenbeugung, 189–190
 Röntgenfluoreszenz, 189
 Röntgenstrahlung, 187–195
 Radialfunktion
 Wasserstoff, 130–138
 Radialteil der Wellenfunktion, 129–130
 Raman-Effekt, 202–204
 Rastertunnelmikroskopie, 19–20
 Rayleigh-Jeans-Gesetz, 33
 Rayleigh-Streuung, 202
 Reflexionskoeffizient, 86
 Relaxationsschwingung, 231
 Resonator, 204–206, 209–211, 235, 238
 Fabry-Perot, 204
 konfokal, 212, 216
 Resonatormoden, 211–222
 reziproker Raum, 59
 reziprokes Gitter, 59–60
 Rotationssymmetrie, 174–178
 Russel-Saunders-Kopplung, 183–185
 Rutherford, 67
 Streuformel, 70
 Streuung, 67–71
- Rutherford-Streuung, 67, 68, 71
 Rydberg-Atome, 119
 Rydberg-Gesetz, 143
 Rydbergkonstante, 107, 110
- Sättigbare Braggspiegel, 243–244
 Schalen
 äussere, 187
 innere, 187
 Schrödingergleichung, 74–78, 81, 83–86, 121–138
 Eigenwerte, 78–80
 Herleitung, 74–78
 schwarzer Körper, 26
 Schwarzkörperstrahlung, 26–38
 Schwellwertbedingung, 205–206
 Selbst-Phasenmodulation, 241
 Serienformel, 187
 Si
 (111), 67
 SILEX, 113
 Silizium
 (111), 67
 Sommerfeld, Arnold, 107–114
 Sommerfeld-Bohrsche Theorie, 118–119
 Sonne
 Strahlung, 39
 spektrale Energiedichte, 27
 spezifische Ausstrahlung, 23, 27
 Spikes, 230
 Spin, 151
 Elektron, 150–166
 Spin-Bahn-Kopplung, 183
 magnetisch, 151–152
 Stark-Effekt
 linear, 171–172
 quadratisch, 168–170
 Starkeffekt, 167
 linear, 167, 171
 quadratisch, 167, 170
 stationär, 79
 Stationäre Zustände
 Schrödinger Gleichung, 78–79
 Stefan-Boltzmann
 Gesetz, 36–38
 Stefan-Boltzmann-Gesetz, 37
 Stefan-Boltzmann-Konstante, 37
 Stern-Gerlach-Experiment, 148–150
 Stokes

- Gesetz, 54
- Stokes-Shift, 201, 203
- Strahlung, 23–39
 - Atome, 197–204
 - Schwarzkörper, 26–38
 - Sonne, 39
 - thermisch, 25–26
- Strahlungsdichte, 24
- Strahlungsfelder, 23–25
- Strahlungsfluss, 23
- Strahlungsgesetz von Kirchhoff, 25
- Strahlungsgesetze, 25–39
 - Planck, 28–34
- Strahlungsquellen
 - Halbleiter, 226–229
- Strahlungsstärke, 23
- Streuung
 - Compton, 50
 - Oberfläche, 60–62
 - Rutherford, 67–71
- Symmetrie
 - harmonischer Oszillator, 173–174
 - Rotation, 174–178
- Synchron gepumpte Laser, 238–239
- Target, 67
- Teilchen, 41–71
- TEM-Moden, 212
- Theorie
 - Quanten, 73–106
- Thermische Strahlung, 25–26
- Transferweite, 65
- Transmissionskoeffizient, 86
- Treibhauseffekt, 39
- Ultraviolettstahlung, 33
- Unbestimmtheitsrelation, 142
- Unbestimmtheitsrelationen, 140–143
- ungerade Parität, 174
- Unschärferelation, 80, 142
- Vernichtungsoperator, 94
- Vernichtungsoperatoren
 - Drehimpuls, 124–128
- Verschiebungsgesetz
 - Wien, 34–36
- Versuch
 - Millikan, 54–55
- Vertauschungsrelationen, 80, 140–143
- Verteilung
 - Boltzmann, 31
- Vielelektronenatome, 185
- vollständig
 - Vektorraum, 73
- Wahrscheinlichkeitsdichte, 81–82
- Wahrscheinlichkeitsinterpretation, 76–78
- Wasserstoff
 - Auswahlregel, 177–178
 - Radialfunktion, 130–138
- Wasserstoffatom, 109, 119–148
 - Energien, 143–148
 - Quantenzahlen, 143–148
 - Spektren, 143–148
 - Wellenfunktion, 138–139
- Wasserstofflinien, 109
- Wellen, 41–71
- Wellenfunktion, 81–82
 - Radialteil, 129–130
 - Wasserstoffatom, 138–139
- Wellengleichung, 74–75
- Wellenlänge
 - Compton, 50
- Wellenpaket, 81–82
- Wellenvektor, 58
- Wien
 - Verschiebungsgesetz, 34–36
- Wiensches Strahlungsgesetz, 33
- Wiensches Verschiebungsgesetz, 35
- Wirkungsquantum
 - reduziert, 28
- Wirkungsquerschnitt, 21
 - total, 22
- XPS, 195
- Zeemann-Effekt, 159–165
- Zeemaneffekt, 164
 - anomal, 161
 - normal, 161
- Zentralkraft, 68
- zugeordnete Legendre-Funktion, 127
- Zustand
 - entartet, 106
 - stationär, 78–79