

7. Grundlagen der Quantenmechanik

7.1. Experimentelle Hinweise

Gegen Ende des 19. Jhd. war man allgemein überzeugt, dass die enormen wissenschaftlichen Fortschritte der letzten Jahrzehnte ein fast perfektes Verständnis der Natur in Reichweite gebracht hatten.

Dies führt sogar dazu dass man glaubte, ein weiterer Fortschritt werde nicht mehr möglich sind.

Allerdings existierten noch einige Diskrepanzen zwischen den damaligen Theorien und den experimentellen Befunden. Die Differenzen waren auf den ersten Blick relativ gering, doch sie waren mit den existierenden Erklärungen auf die eine oder andere Weise nicht in Übereinstimmung zu bringen.

**Everything that can be invented
has been invented**

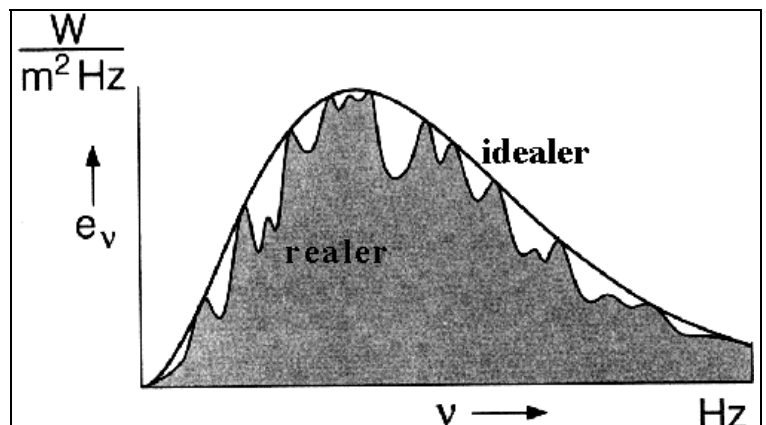
Charles H. Duell,
Commissioner,
U.S. Office of Patents,
1899

7.1.1. Das Strahlungsgesetz

Der erste Widerspruch zwischen klassischer Theorie und experimentellen Befunden ist die Abhängigkeit der Strahlungsenergie von der Wellenlänge, resp. Frequenz. Dass die Temperatur einen Einfluss auf die spektrale Verteilung von Licht hat kann man schon mit dem Auge erkennen: ein Objekt mit einer Temperatur von ... strahlt

600 °C	rot
850 °C	hellrot
1000 °C	gelb
1300 °C	weiss

Diese Art von Strahlungsquelle wird als schwarzer Strahler bezeichnet. Ein schwarzer Strahler ist dadurch definiert dass er alle eintreffende Strahlung perfekt absorbiert (für jede Wellenlänge). Kirchhoff hatte gezeigt, dass das Verhältnis zwischen der Absorptivität und dem Emissionsvermögen eines Körpers nur von Temperatur und Frequenz abhängig. Somit bedingt eine perfekte Absorption eine ebenso perfekte Emission. Die Strahlungsleistung pro Frequenzbereich ist dann nur noch eine Funktion von Temperatur und Frequenz. Ein realer Körper hat immer eine Abstrahlung



einem realen Körper hat immer eine Abstrahlung

die geringer ist als die des idealen Strahlers. Bei einem idealen Spiegel wird die gesamte Strahlung reflektiert, also nicht absorbiert, und damit auch keine eigene Strahlung emittiert.

Einige experimentelle Befunde sind:

- Die abgestrahlte Energie ist proportional zur vierten Potenz der Temperatur,

$$I = \sigma T^4 \quad \sigma = 5.669 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4) .$$

Diese Abhängigkeit wird als Stefan-Boltzmann'sches Strahlungsgesetz bezeichnet. Es wurde 1879 von Stefan heuristisch auf Grund von Messungen von Tyndall aufgestellt. Boltzmann leitete es später thermodynamisch her.

- Die Strahlung enthält alle Wellenlängen. Das Maximum verschiebt sich mit zunehmender Temperatur zu kleineren Wellenlänge:

$$\lambda_{\text{max}} T = \text{const} = 0.2898 \text{ cm K} .$$

Diese Abhängigkeit wird als Wien'sches Verschiebungsgesetz bezeichnet.

- Bei großen Wellenlängen nimmt die Strahlungsintensität mit der vierten Potenz der Wellenlänge ab:

$$\delta I / \delta \lambda \sim \lambda^{-4} .$$

Diese experimentellen Befunde waren Ende des 19 Jhd bekannt, aber es gab keine Theorie, welche diese Befunde erklären konnte.

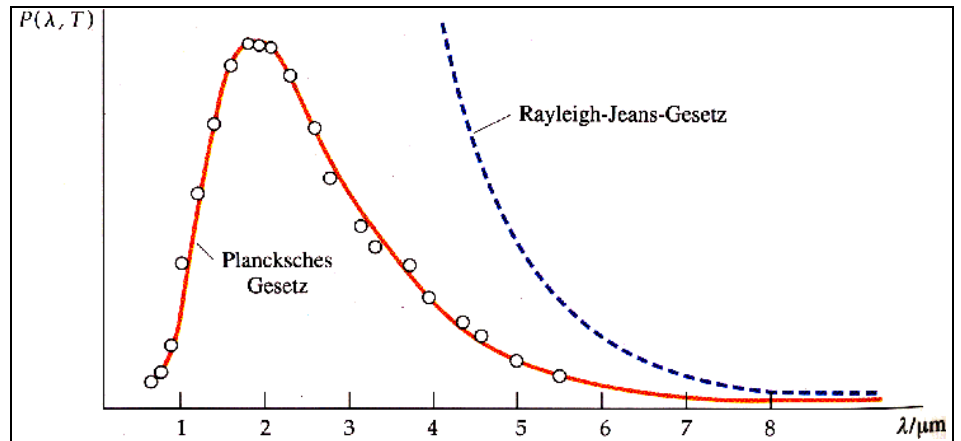
7.1.2. Klassische Strahlungsgesetze

Den Grenzfall für große Wellenlängen erhält man relativ einfach wenn man annimmt, dass die Strahlung in einer Mode immer die Energie kT besitzen soll. Diese Bedingung ergibt sich aus dem Ansatz, dass die Strahlung im Gleichgewicht mit der sie umgebenden Materie sein soll. Ein harmonischer Oszillator besitzt aber gerade die Energie kT . Die Zahl der Moden in einem Hohlraum steigt proportional mit dem Quadrat der Frequenz. Deshalb beträgt die Energiedichte pro Frequenzintervall

$$\frac{1}{V} \frac{dE}{dv} = 8\pi \frac{v^2}{c^3} kT .$$

Daraus folgt das Rayleigh-Jeans Gesetz, nach dem die Intensität mit der vierten Potenz der Wellenlänge abnimmt.

Allerdings ist offensichtlich dass dieses Gesetz für kurze Wellenlängen, d.h. hohe Frequenzen, nicht gültig sein kann. Da die emittierte Leistung mit dem Quadrat der Frequenz zunimmt müsste jeder Körper eine intensive UV-, und eine noch intensivere Röntgenquelle sein. Dies ist offenbar nicht der Fall. Außerdem divergiert das Integral dieses Ausdrucks, die emittierte Leistung wäre also unendlich.



Eine wesentliche Verbesserung ergibt sich wenn man annimmt, dass die Energie in einer Mode nicht kT , sondern

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu}{e^{kT}}$$

beträgt. Daraus ergibt sich das sog. Wien'sche Strahlungsgesetz. Es stimmt für hohe Frequenzen sehr gut mit den experimentellen Daten überein und vermeidet insbesondere die "Ultraviolett-Katastrophe", d.h. die unbegrenzte Zunahme der Strahlungsleistung bei hohen Frequenzen. Für niedrige Frequenzen geht der Nenner gegen 1. Daraus resultiert ein Verlauf, der qualitativ dem Rayleigh-Jeans Gesetz entspricht, sich aber quantitativ unterscheidet und deshalb die experimentellen Daten in diesem Bereich schlechter beschreibt.

Dieses Problem wurde von Planck durch die Annahme gelöst, daß die Strahlung in diskreten Einheiten abgegeben werden soll, wobei die Energie dieser einzelnen "Pakete" durch die Beziehung

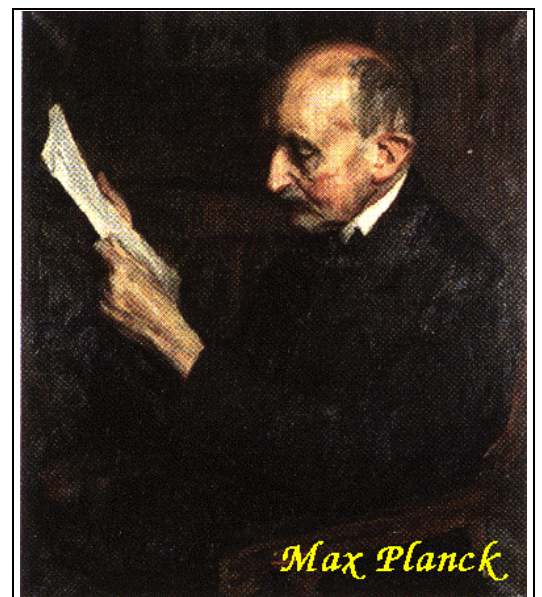
$$E = h \nu$$

gegeben ist. Die Planck'sche Konstante besitzt den Wert

$$h = 6.6256 \cdot 10^{-34} \text{ J s .}$$

Die Frequenz ν liegt für sichtbares Licht im Bereich

$$\nu = c/\lambda = 3 \cdot 10^8 \text{ m/sec} / 0.5 \mu\text{m} = 6 \cdot 10^{14} \text{ Hz ,}$$



also typischerweise etwas unterhalb von 10^{15} Hz. Die Energie der einzelnen Pakete liegt somit für sichtbares Licht bei

$$E = 6.6256 \cdot 10^{-34} \cdot 6 \cdot 10^{14} \text{ J} \sim 4 \cdot 10^{-19} \text{ J} .$$

Für unsere Begriffe ist dies eine relativ kleine Energie, was erklärt, weshalb wir sie meistens nicht beobachten.

Die Absorption und Emission von Licht durch einen materiellen Körper kommt dadurch zustande, dass der Körper zwischen diskreten Zuständen Übergänge durchführt und dabei Photonen absorbiert oder emittiert, deren Energie gerade der Energiedifferenz zwischen den Zuständen des Körpers entspricht. Geht der Körper vom niedrigen in den höheren Zustand über, so absorbiert er dabei Licht; geht er vom höheren in den niedrigeren Zustand über ohne dass er von außen dazu gebracht wurde, so emittiert er spontan Licht. Treffen Photonen der geeigneten Wellenlänge auf diesen Körper, so können sie aber auch Emission stimulieren. Genaueres wird im folgenden Kapitel diskutiert.

Im Vergleich zu den vorher diskutierten Annahmen folgt daraus dass die Energie einer Mode

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu}{e^{kT} - 1}$$

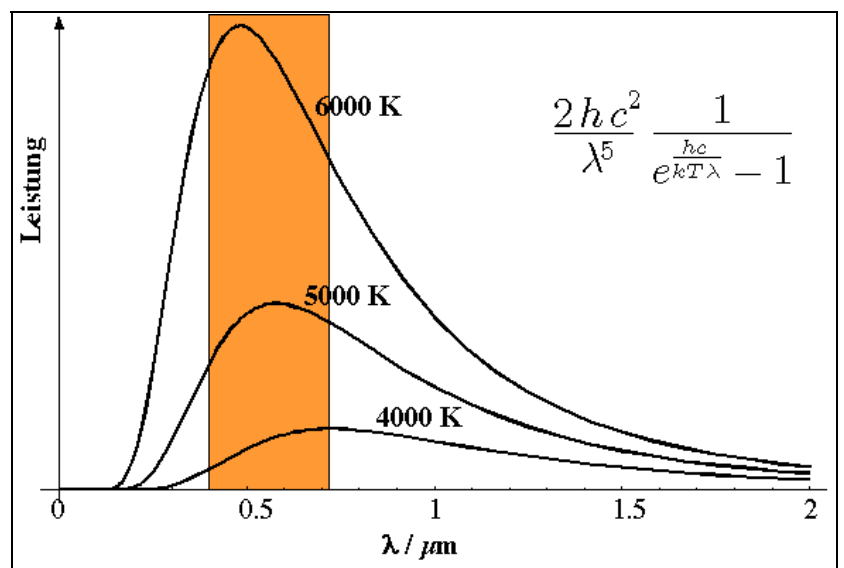
beträgt. Somit erhält man bei hohen Frequenzen, wo die 1 im Nenner vernachlässigt werden kann, das Wien'sche Gesetz, bei niedrigen Frequenzen, wo die Exponentialfunktion entwickelt werden kann, gerade kT , also das Rayleigh-Jeans Gesetz. Das Planck'sche Strahlungsgesetz enthält somit die beiden klassischen Gesetze als Grenzfälle.

Der Energieinhalt pro Frequenzeinheit beträgt dann

$$L dv = \frac{2h\nu^3}{c^2 \Omega_0} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} dv .$$

Als Funktion der Wellenlänge erhält man entsprechen

$$L d\lambda = \frac{2hc^5}{\lambda^5 \Omega_0} \frac{1}{e^{hc/kT\lambda} - 1} d\lambda .$$



7.1.3. Einstein's Theorie von Absorption und Emission

Befinden sich N_1 Atome im Grundzustand und N_2 Atome im angeregten Zustand, so ergibt sich die Absorptionsrate von $|1\rangle$ nach $|2\rangle$ als

Z: Einstein A, B

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{\text{abs}} = B_{12} u_f(\nu) N_1 .$$

Hier stellt der "Einsteinkoeffizient" B_{12} eine Proportionalitätskonstante dar, die für den Übergang charakteristisch ist. $u_f(\nu)$ ist die Energiedichte im betreffenden Frequenzintervall, also die Anzahl Photonen pro Volumen.

Genau so berechnet man die spontane Emission

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{\text{sp.Em.}} = A_{12} N_2$$

und die induzierte Emission

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{\text{ind.Em.}} = B_{12} u_f(\nu) N_2 .$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{\text{abs}} = \left(\frac{dN}{dt}\right)_{\text{sp.Em.}} + \left(\frac{dN}{dt}\right)_{\text{ind.Em.}} .$$

Somit muss

$$N_2/N_1 = \frac{B_{12}u_f(\nu)}{A_{12} + B_{12}u_f(\nu)} .$$

Außerdem ergibt sich das Verhältnis der Besetzungszahlen auch aus der Boltzmann-Verteilung:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}} .$$

Aus dem Vergleich dieser Ausdrücke erhält man

$$u_f(\nu) = \frac{A_{12}}{B_{12} e^{h\nu/kT} - B_{21}} .$$

Außerdem gilt für $T \rightarrow \infty$ $u_f(\nu) \rightarrow \infty$. Somit muss

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

d.h. induzierte Absorption und induzierte Emission sind gleich wahrscheinlich. Damit wird

$$u_f(\nu) = \frac{A_{12}}{B_{12} (e^{h\nu/kT} - 1)} .$$

Dieser Ausdruck kann für den Grenzfall $h\nu \ll kT$

$$u_f(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} .$$

7.1.4. Photonen

Diese Energiepakete, welche man heute als Photonen bezeichnet, kann man heute ohne weiteres direkt beobachten. Man benutzt dazu z.B. einen sog. Fotomultiplier. In diesem Gerät werden die Photonen in elektronische Impulse umgewandelt.

Wenn wir die Lichtmenge, die pro Zeiteinheit auf diesen Detektor fällt,

Exp. 96a: Nachweis einzelner Photonen

genügend klein halten, ist es möglich, einzelne Photonen zu beobachten, welche jeweils einen Spannungsimpuls erzeugen. Die Photonen gelangen in unregelmäßigen, nicht voraussagbaren Abständen auf den Detektor. Erst wenn wir die Anzahl der Photonen über einen Zeitraum mitteln, der lang ist im Vergleich zum mittleren Abstand erhalten wir einen konstanten Wert. Die mittlere Photonenzahl pro Zeiteinheit multipliziert mit der Energie der Photonen ergibt die auf den Detektor einfallende Leistung.

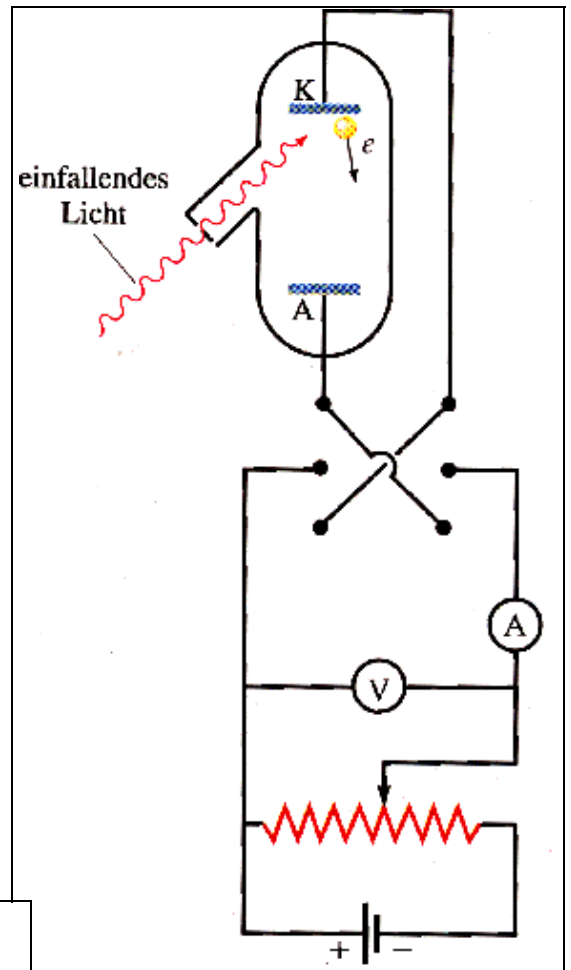
Wenn wir diese Leistung erhöhen so nimmt der mittlere Abstand zwischen zwei Photonen ab.

Exp / Z: Leistungsabhängigkeit

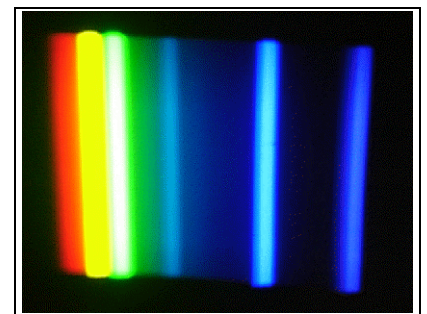
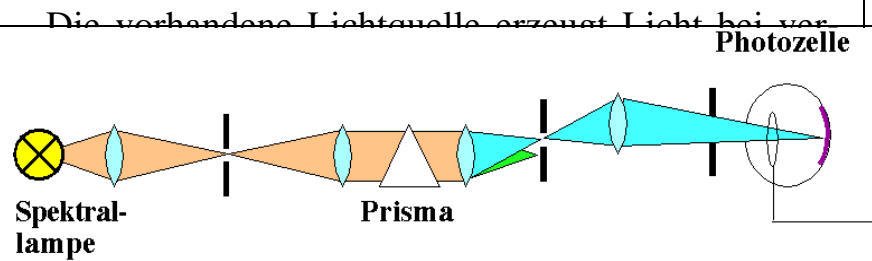
7.1.5. Photoeffekt

Der zweite derartige Effekt war der Photoeffekt: Werden Metalloberflächen, insbesondere Alkalimetalle, mit Licht bestrahlt, so werden Elektronen freigesetzt, die sich mit einer bestimmten Geschwindigkeit von der Oberfläche weg bewegen, also eine kinetische Energie besitzen.

Die kinetische Energie kann gemessen werden, wenn man bestimmt, wie groß eine Spannung sein kann oder muß, damit die Elektronen gegen das äußere Potential einen bestimmten Punkt erreichen können. Wenn man also die Spannung erhöht, mit der die Elektronen gebremst werden, so treffen irgendwann keine mehr auf dem Messdraht auf und der gemessene Strom geht gegen Null.

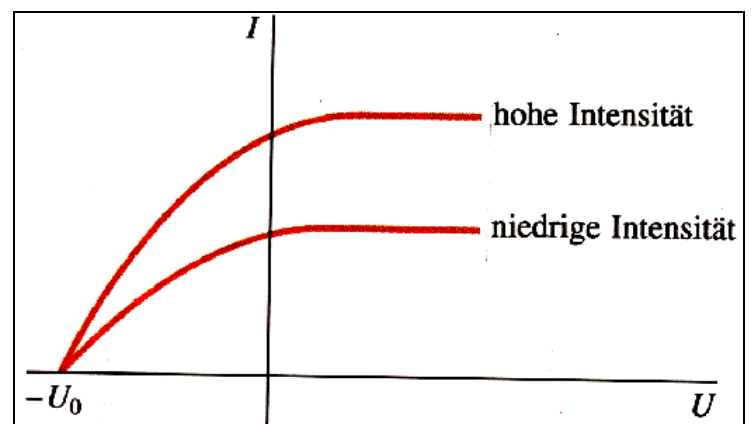


Exp: Photoeffekt Wir benutzen diesen Messaufbau nun, um die Abhängigkeit der kinetischen Energie von der Wellenlänge des Lichtes zu messen.



schiedenen diskreten Wellenlängen, welche wir einzeln auf die Probe fallen lassen.

Misst man den Photostrom als Funktion der Beschleunigungsspannung, so findet man, dass bei genügend stark negativer Spannung der Strom verschwindet. Offenbar erreichen die Elektronen die Anode nicht. Wird das Potential der Anode höher, so erhält man einen wachsenden Strom, und ab einer schwach positiven Spannung bleibt der Strom konstant.



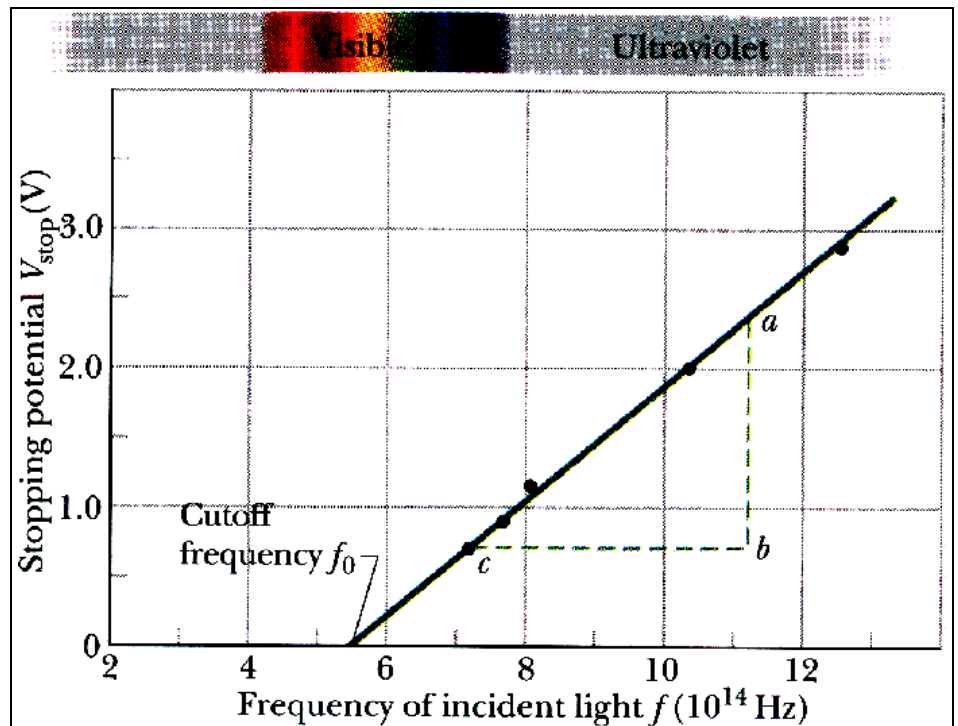
Steigert man die Intensität des Lichtes, so nimmt der Strom linear mit der Lichtintensität zu. Die Sperrspannung bleibt hingegen konstant. Dies ist vorläufig nicht erklärbar: offenbar ist die Energie der Elektronen nicht von der optischen Leistung abhängig. Dagegen ist die Anzahl der Elektronen proportional zur optischen Leistung.

Ändert man die Wellenlänge des Lichts, so ändert zum einen die Spannung U_0 , zum anderen die Sättigungsstromstärke. Bei zunehmender Wellenlänge wird die Sperrspannung geringer, der Sättigungsstrom größer. Dies scheint aus zwei Gründen merkwürdig: Offenbar hängt also die Energie der Elektronen von der Wellenlänge des Lichtes ab, nicht aber von der Intensität des Lichtes. Bei konstanter Intensität nimmt jedoch die Zahl der emittierten Elektronen mit zunehmender Frequenz des Lichtes ab.

Wenn wir die gemessenen Sperrspannungen gegen die Frequenz des einfallenden Lichtes auftragen, so finden wir daß für Frequenzen unterhalb eines bestimmten Grenzwertes ν_0 keine Elektronen austreten. Oberhalb dieses Grenzwertes steigt die Energie der Elektronen linear an. Die kinetische Energie kann somit geschrieben werden als

$$E_{\text{kin}} = h(\nu - \nu_0) = h\nu - A.$$

Es gibt somit eine Grenzfrequenz ν_0 , unterhalb derer keine Elektronen mehr emittiert werden.



Man interpretiert dieses Verhalten so, daß die Energie des Lichtes paketweise absorbiert wird. Ein einzelnes Paket erhält den Namen "Photon". Jedes Photon kann ein Elektron aus dem Metall herauslösen. Jedes Elektron besitzt also nur die Energie, die ihm ein einzelnes Photon übergeben kann. Ein Teil der Energie wird benötigt, um das Elektron aus dem Metall herauszulösen. Diese Energie wird als Austrittsarbeit bezeichnet. **Z: Teilchenbild**

Aus der Steigung der Geraden können wir direkt die Planck'sche Konstante bestimmen. Wir benutzen z.B. den Unterschied zwischen der kinetischen Energie bei rotem und violetterem Licht. Diese beträgt

$$\Delta E = (1.176 - 0.078) \text{ eV} = 1.098 \text{ eV} = 1.76 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Die entsprechende Frequenzdifferenz beträgt

$$\Delta\nu = (7.35 - 4.81) \cdot 10^{14} \text{ Hz} = 2.54 \cdot 10^{14} \text{ Hz} .$$

Daraus erhalten wir für die Planck'sche Konstante

$$\Delta E / \Delta\nu = 1.76 \cdot 10^{-19} \text{ J} / 2.54 \cdot 10^{14} \text{ Hz} = 6.9 \cdot 10^{-34} \text{ J s} .$$

Das Einstein'sche Postulat erklärt nicht nur das Auftreten einer maximalen Wellenlänge, sondern auch die Abnahme des Photostroms mit zunehmender optischer Frequenz bei konstanter Intensität: die gleiche Lichtenergie wird jetzt auf weniger Photonen verteilt, so dass weniger Elektronen erzeugt werden können, allerdings besitzt jedes einzelne Elektron eine höhere kinetische Energie.

7.1.6. Austrittsarbeit

Dies Austrittsarbeit ist eine Materialkonstante und beträgt für Kalium:

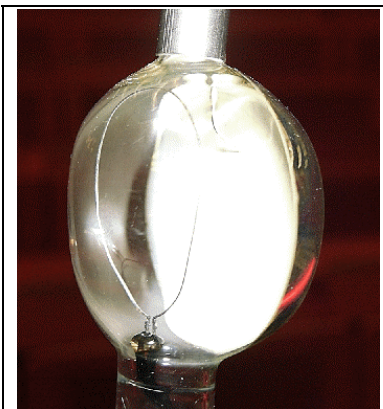
$$A = 4.5 \cdot 10^{14} \text{ Hz } h = 3 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1.9 \text{ eV} .$$

Meistens verwendet man hier als Einheit aber nicht J, sondern eV, Elektronenvolt, wobei

$$1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

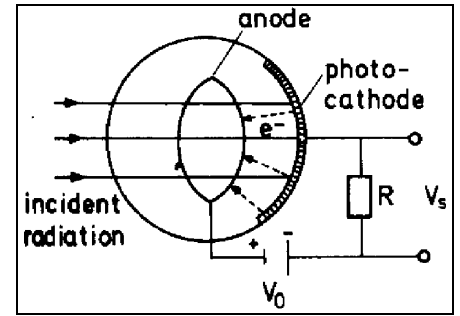
gerade derjenigen Energie entspricht, die ein Elektron beim Durchlaufen einer Spannungsdifferenz von 1 V erhält.

Bei anderen Materialien beträgt die Austrittsarbeit einige eV.

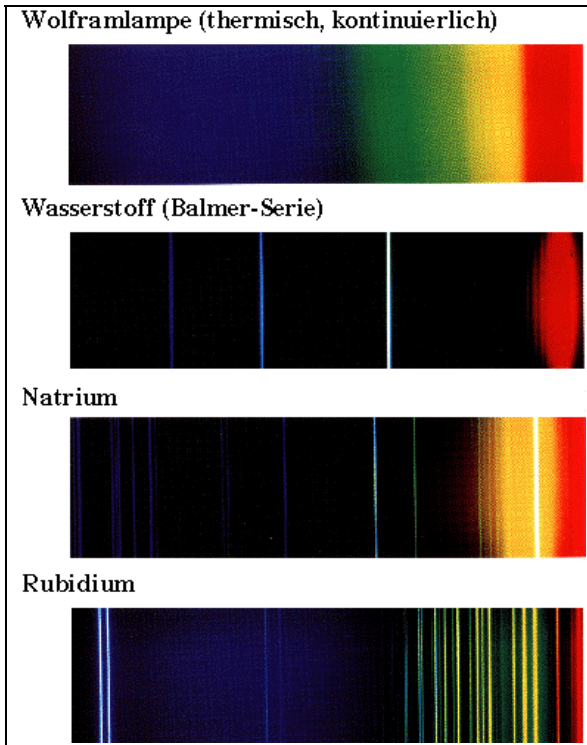


Metall	A/eV	λ_{max}
Na	2.28	543
Cs	1.94	639
Ca	3.20	387
Sr	2.74	452
Cu	4.48	277
Zn	4.27	290
Cr	4.45	278
Fe	4.63	268
Ni	4.91	252
Pt	5.36	231
Na2KSb	1.46	859
AgOCs	0.99	1250

Der Photoeffekt wird u.a. im Fotomultiplier verwendet, wo die Photonen zunächst aus einer Alkalioberfläche Elektronen herausschlagen. Man wandelt also sozusagen Photonen in Elektronen um.

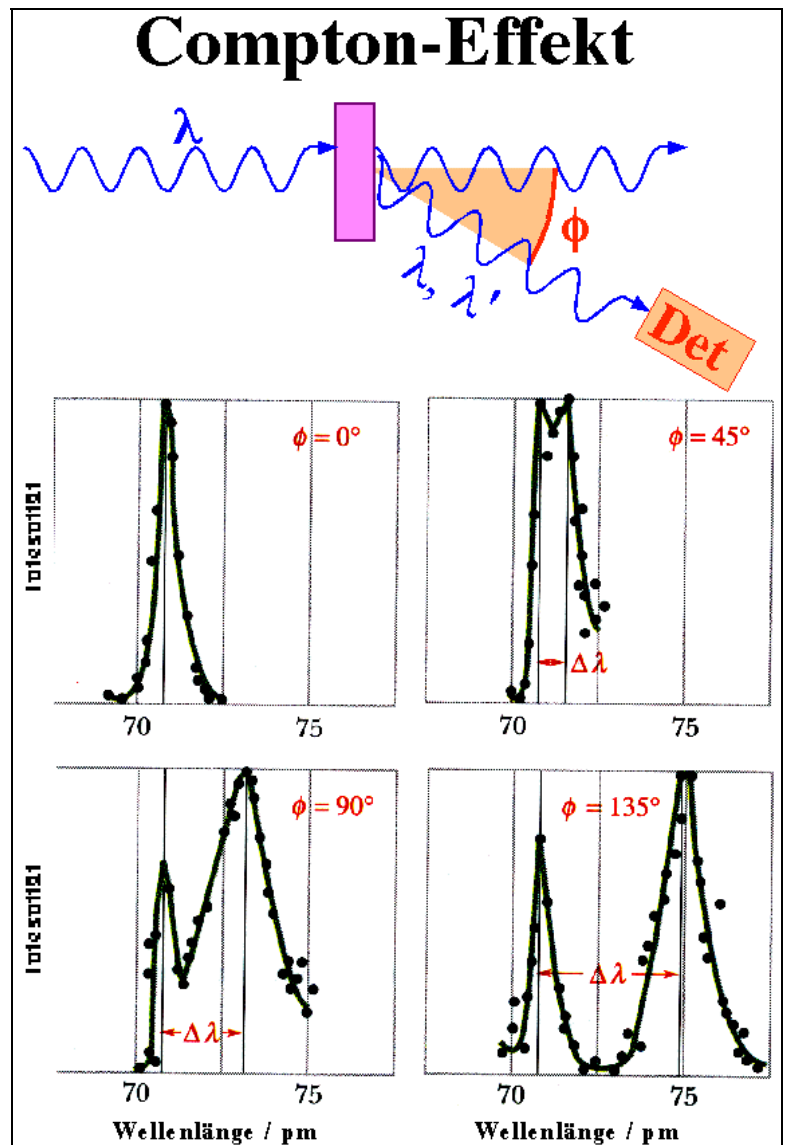


7.1.7. Spektrallinien von Atomen



Atome besitzen schmale Emissionslinien. Dies deutet Exp.: Na-D Linien darauf hin, dass Atome Strahlung in der Form von "Energiepaketen" aufnehmen und abgeben. Die Farbe des Lichtes ist unabhängig von der Temperatur der Atome, im Gegensatz zum schwarzen Strahler.

7.1.8. Der Comptoneffekt



Streut man Röntgenlicht an freien (d.h. schwach gebundenen) Elektronen, so stellt man fest, dass das gestreute Licht neben der Wellenlänge des einfallenden Lichtes auch Licht einer anderen Wellenlänge enthält. Diese zweite Wellenlänge ist eine Funktion des Streuwinkels θ :

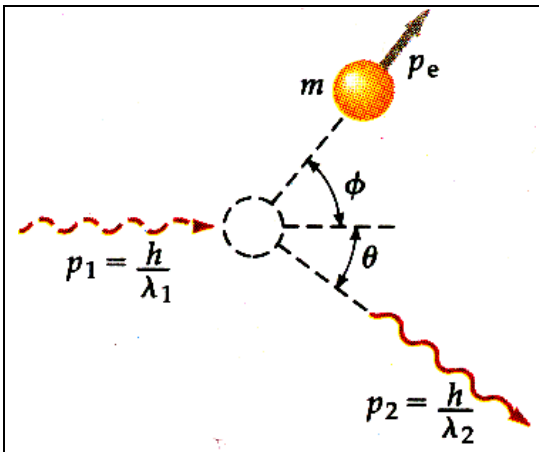
$$\Delta\lambda = (\lambda - \lambda') = \lambda_c (1 - \cos\theta)$$

$$\lambda_c = 2.4 \text{ pm} .$$

Am größten ist der Wellenlängenunterschied somit in Rückwärtsstreuung, also für $\theta = \pi$. Der Effekt ist unabhängig vom der verwendeten Probenmaterial. Dieses

Experiment wurde erstmals 1923 von Arthur Compton durchgeführt.

Dieser Effekt kann im Rahmen der Wellentheorie der Röntgenstrahlung nicht interpretiert werden. Man erhält diesen Befund jedoch als Resultat einer einfachen Rechnung sofern man dem Röntgenlicht Teilchencharakter zuschreibt, d.h. indem man es als einen Strom von Photonen behandelt. Da die Art der Atome keinen Einfluss auf den Streuprozess hat kann man davon ausgehen, dass die Photonen an den Elektronen gestreut werden.



Man geht also davon aus, dass jedes Photon einzeln an einem Elektron gestreut wird. Für jeden dieser Streuprozesse gilt Energieerhaltung:

$$h\nu + m_0 c^2 = h\nu' + m c^2.$$

Hier stellt m_0 die Ruhemasse des Elektrons und

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Außerdem gilt ein Erhaltungsgesetz für den Impuls. Der Impuls des Photons beträgt

$$p_{\text{Ph}} = m_{\text{Ph}} c = h\nu/c^2 c = h\nu/c = h/\lambda$$

und der Gesamtimpuls des Systems in x-Richtung

$$h/\lambda = h/\lambda' \cos\theta + m v \cos\phi$$

und in y-Richtung

$$0 = h/\lambda' \sin\theta - m v \sin\phi.$$

Die drei Gleichungen können nach λ' aufgelöst werden:

$$\Delta\lambda = (\lambda - \lambda') = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\theta) = \lambda_c (1 - \cos\theta). \quad \lambda_c = 2.426 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

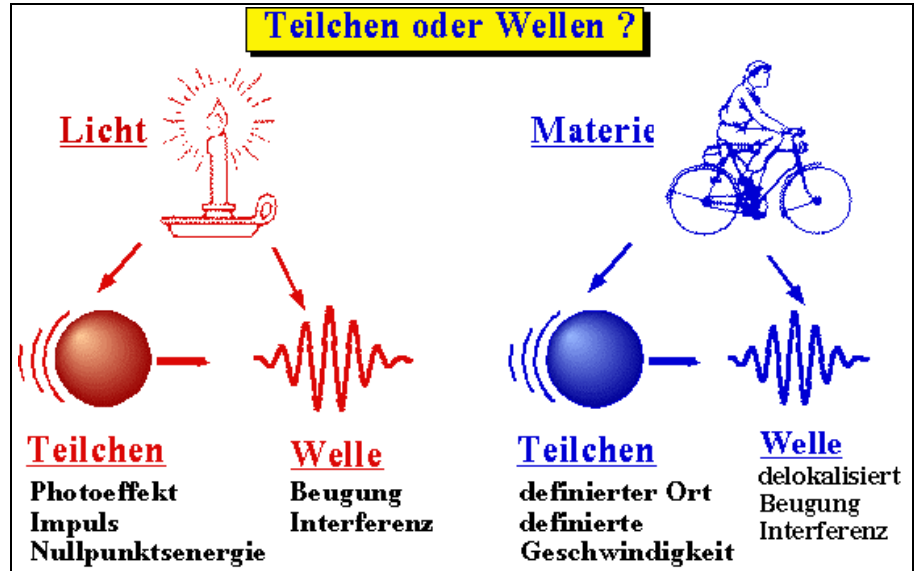
Hier stellt λ_c die Compton-Wellenlänge dar. Sie enthält nur Naturkonstanten, d.h. sie hängt nicht vom Material oder von der Wellenlänge des Röntgenlichtes ab. Da sie im Picometerbereich liegt muss man Licht mit einer vergleichbaren Wellenlänge, also Röntgenlicht, verwenden, um den Effekt beobachten zu können.

7.2. Wellencharakter der Materie

Lit: Berkeley Physics Course 4 (QM), Chapter 5

7.2.1. Wellen und Teilchen

Licht besitzt sowohl Teilchen- wie auch Wellencharakter: Bei der Diskussion des Strahlungsgesetzes hatten wir gesehen, dass es einen Teilchencharakter aufweist, ebenso beim Photoeffekt. Allgemein tritt der Teilchencharakter bei der Wechselwirkung mit Materie in den Vordergrund. Andererseits hatten wir im Zusammenhang mit der Ausbreitung, insbesondere bei Interferenz und Beugung sowie bei der



Polarisation deutliche Zeichen des Wellencharakters kennengelernt. Die Beziehung zwischen den Wellen- und den Teilcheneigenschaften wird durch die Beziehungen

$$E = h \nu = \hbar \omega \quad \text{und} \quad p = \hbar k = h / \lambda$$

hergestellt, welche die Energie und den Impuls eines Teilchens in Beziehung setzen zu den Welleneigenschaften Frequenz und Wellenlänge, resp. Wellenvektor.

Genauso wie für Licht findet man auch bei Materie beide Aspekte. Mit Materie sind hierbei Teilchen gemeint, die eine nicht verschwindende Ruhemasse aufweisen, wie z.B. Elektronen, Neutronen, Atome, Planeten, Dafür verwenden wir üblicherweise den Begriff "Teilchen". Wie wir aber im folgenden sehen werden, besitzt gewöhnliche Materie nicht nur einen Teilchencharakter, sondern ebenso Welleneigenschaften. Allerdings treten die Welleneigenschaften weniger häufig zu Tage als der Teilchencharakter.

Broglie, Louis Victor, duc de (brôglê), 1892–1987, French physicist. From his hypothesis that particles should exhibit certain wavelike properties, wave mechanics, a form of quantum mechanics, was developed. Experiments proved (1927) the existence of these waves; he was awarded the 1929 Nobel Prize in physics for his theory.



Die Möglichkeit, daß auch Materie Welleneigenschaften aufweisen könnte, wurde erstmals von Louis de Broglie 1923 geäußert. Ausgangspunkt seiner Überlegungen waren das Fermat'schen Prinzips der Optik und des Hamilton'schen Prinzips der Mechanik, welche beide besagen, dass das Licht, resp. ein Körper, unter den möglichen Wegen denjenigen "wählen", welcher am wenigsten Zeit benötigt.

Er spekulierte, dass für Materie die gleichen Beziehungen zwischen Energie und Frequenz, resp. Impuls und Wellenlänge gelten könnten wie für Licht. Dann müsste jedes Teilchen durch eine Welle

$$\Psi = A \exp[i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})]$$

mit Wellenlänge, resp. Wellenzahl

$$\lambda = h / p \quad k = p / \hbar$$

und Frequenz

$$\omega = E / \hbar \quad \text{oder} \quad v = E / h$$

beschrieben werden. Bei niedrigen Geschwindigkeiten kann man für die

Genauer gesagt sollten wir uns dies als Wellengruppe vorstellen, welche in der Nähe der klassischen Position des Teilchens lokalisiert ist.

Z: Wellengruppe

7.2.2. Ausbreitung und Dispersion

Wir überprüfen, ob diese Annahme sinnvoll ist. Insbesondere würden wir erwarten, daß sie in der Nähe des Teilchens lokalisiert bleibt, wenn sich dieses bewegt. Wir betrachten somit ein bewegtes Teilchen mit Masse m und Geschwindigkeit v . Seine kinetische Energie ist dann

Z: klass / QM

$$E = m/2 v^2 .$$

Damit wird die Kreisfrequenz

$$\omega = E / \hbar = \frac{m v^2}{2\hbar}$$

und der Wellenvektor

$$k = p / \hbar = \frac{m v}{\hbar} .$$

Wir lösen auf nach der Geschwindigkeit $v = \hbar k / m$ und eliminieren diese aus dem Ausdruck für ω :

$$\omega = \hbar k^2 / 2m .$$

Die Geschwindigkeit der Wellengruppe sollte nun gegeben sein als

$$v_G = d\omega/dk = \hbar k / m = v .$$

Somit ist sichergestellt, daß sich die Wellengruppe mit der gleichen Geschwindigkeit wie das klassische Teilchen bewegt.

7.2.3. Beispiel: Elektronenwellen

Die Wellenlänge der Materiewellen sollte damit invers proportional zum Impuls des Teilchens sein, seine Frequenz proportional zur Energie. Aufgrund der Kleinheit der Planck'schen Konstante sehen wir leicht, daß für massive Körper die Frequenz sehr groß sein wird, die Wellenlänge sehr klein. Um sie überhaupt beobachten zu können müssen wir deshalb möglichst leichte Teilchen verwenden. Das leichteste stabile Teilchen ist das Elektron, welches auch leicht zu erzeugen ist.

Für die Berechnung der Wellenlänge benötigen wir zunächst die Geschwindigkeit. Wir betrachten Elektronen mit einer kinetischen Energie, wie sie z.B. in einem Fernseh- oder Computerbildschirm auftreten, also z.B.

$$E_{\text{kin}} = 100 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-17} \text{ J} .$$

Ihre Geschwindigkeit ist damit

$$v = (2 E_{\text{kin}} / m_e)^{1/2} = (3.2 \cdot 10^{-17} / 9.10^{-31})^{1/2} = (3.5 \cdot 10^{13})^{1/2} = 6 \cdot 10^6 \text{ m/sec} .$$

Sie ist damit noch weit unterhalb der Lichtgeschwindigkeit und rechtfertigt die nichtrelativistische Rechnung.

Für die Wellenlänge erhalten wir

$$\lambda = h / p = h / (m_e v) = 6 \cdot 10^{-34} / (9 \cdot 10^{-31} \cdot 6 \cdot 10^6) \approx 10^{-10} \text{ m},$$

also etwa 1 Angström. Diese Wellenlänge ist sehr klein im Vergleich zu makroskopischen Distanzen, aber sie ist vergleichbar mit atomaren Distanzen.

Eine Bestätigung der Wellenhypothese kann somit erreicht werden, wenn man zeigen kann, daß periodische Anordnungen von Atomen Beugungseffekte erzeugen. Diese Möglichkeit wurde 1925 von Elsasser vorgeschlagen. Eine Voraussetzung dafür ist, daß Elektronen elastisch gestreut werden, so daß die reflektierte Welle eine feste Wellenlänge aufweist.

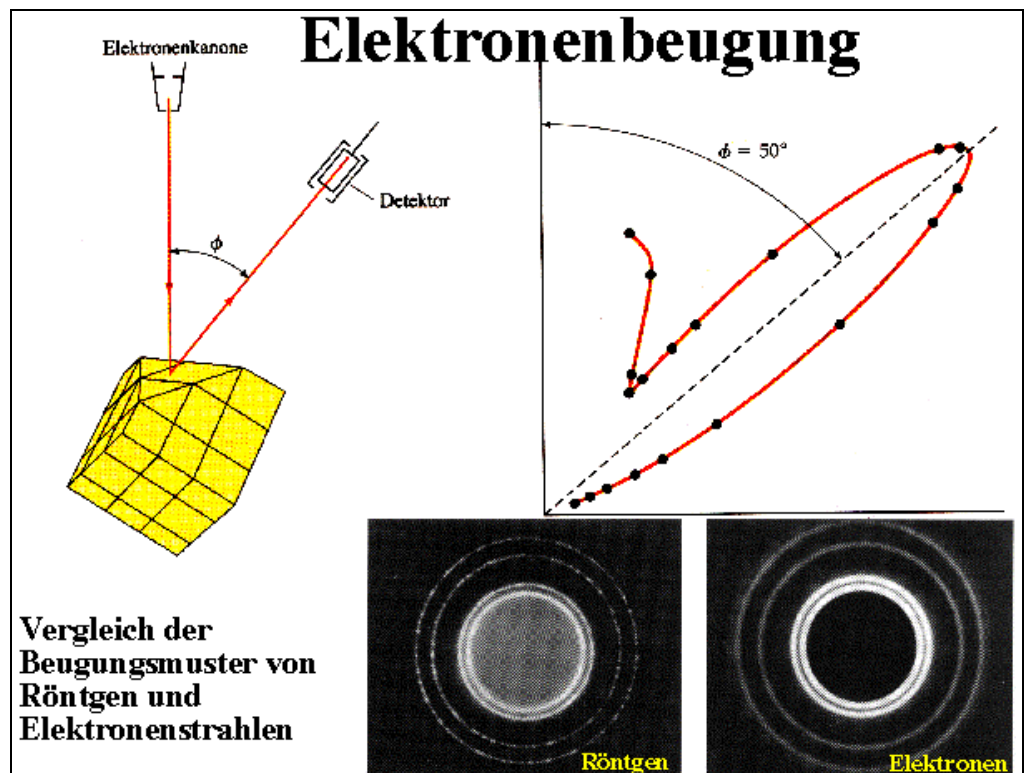
Die erste experimentelle Bestätigung für de Broglie's Vermutung wurde 1927 von Davisson und Germer publiziert. Sie benutzten Streuung von Elektronen an einer Kristalloberfläche. Davisson hat dafür 1937 den Nobelpreis erhalten. Seine Rede anlässlich der Preisverleihung ist u.a. deshalb interessant weil sie zeigt, wie Forschung wirklich abläuft, d.h. nicht immer so geradlinig wie es beim Studium von Lehrbüchern teilweise erscheint, sondern u.a. durch eher zufällige Begegnungen, Diskussionen und experimentelle oder technische Randbedingungen diktiert. Auszugsweise ist diese Rede auch im "Berkeley Physics Course, Band 4 (QM), Kapitel 5.12 wiedergegeben.

Davisson, Clinton Joseph, 1881-1958; American physicist. He shared a 1937 Nobel Prize with G.P. Thomson for the discovery of the diffraction of electrons by crystals.

Unabhängig davon fand G.P. Thomson das gleiche Resultat mittels Transmission eines Elektronenstrahls durch einen dünnen Kristall.

Das Experiment wie auch das Resultat ist sehr ähnlich wie bei der Röntgenbeugung: Man verwendet einen Elektronenstrahl anstelle eines Röntgenstrahls und misst die Intensität der gestreuten Elektronen als Funktion der Orientierung. Genau wie bei Röntgenstrahlen erhält man ein Beugungsmaximum wenn die Braggbedingung

$$a \sin \theta = n \lambda = n h / p$$



mit $n = 1, 2, 3, \dots$ erfüllt ist.

Genau wie bei Lichtwellen kann man bei Materiewellen Interferenzeffekte beobachten. In diesem Beispiel wurde eine Elektronenwelle durch einen Doppelspalt geschickt. Die Interferenz zwischen den beiden Pfaden erzeugt eine Modulation der Intensität auf dem Schirm, welche mit zunehmender gesamt Teilchenzahl beobachtet wird. Das interessante an diesem Experiment ist, daß es die Teilchen- und Wellenaspekte im gleichen Experiment aufzeigt. So messen wir die Ankunft jedes Teilchens auf dem Schirm z.B. mit einem Zähler, der für jedes Teilchen einen Ort und eine Zeit des Auftreffens liefert. Dieser Teil entspricht somit dem Teilchencharakter. Andererseits können wir von den einzelnen Teilchen nicht sagen, ob sie durch den unteren oder oberen Spalt durchgetreten sind. Diese Information wäre bei einem klassischen Teilchen verfügbar.

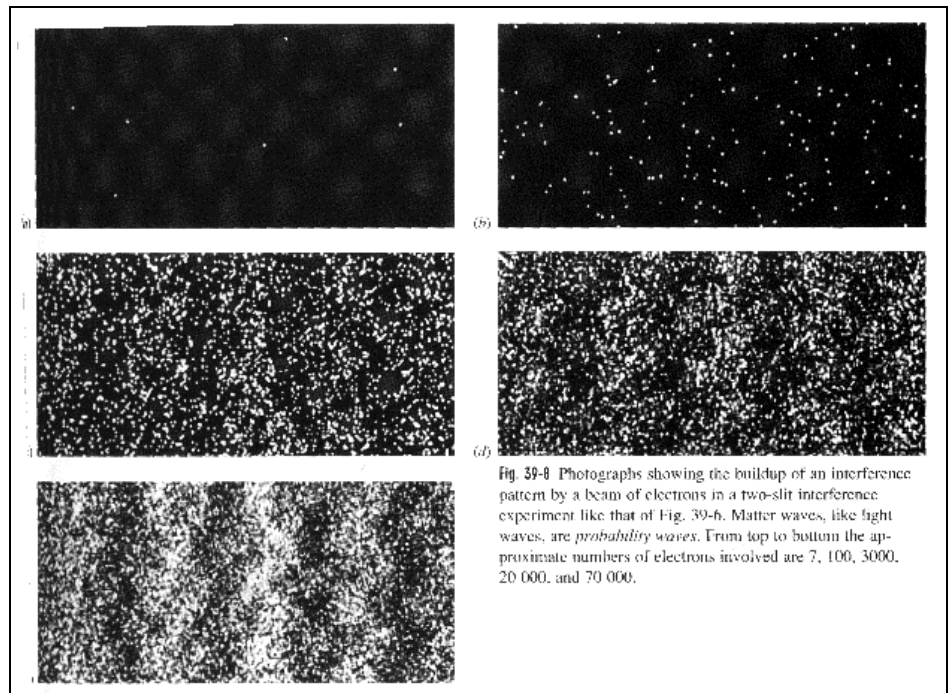
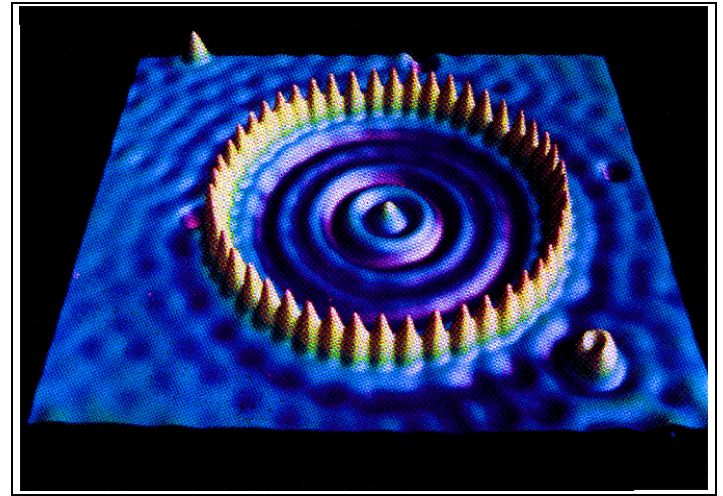
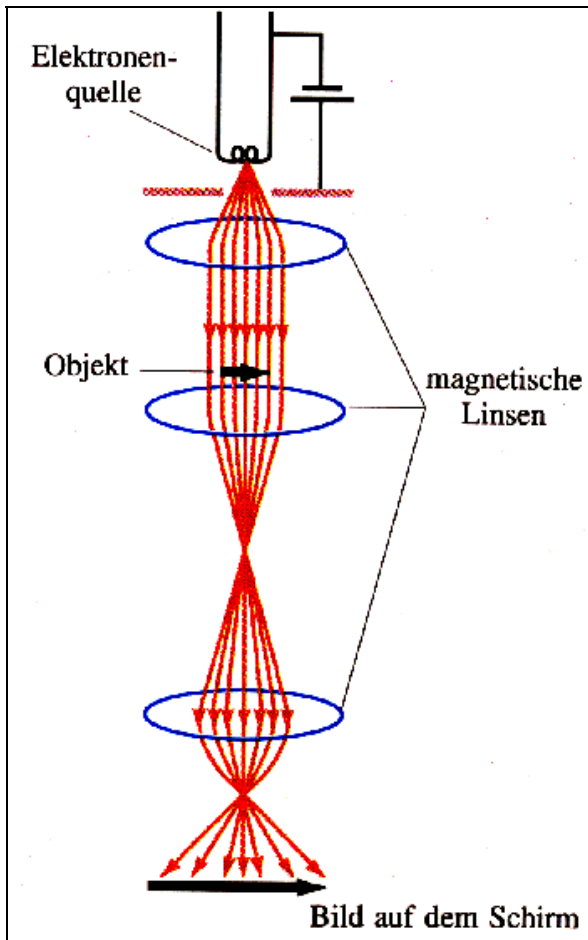


Fig. 39-8 Photographs showing the buildup of an interference pattern by a beam of electrons in a two-slit interference experiment like that of Fig. 39-6. Matter waves, like light waves, are *probability waves*. From top to bottom the approximate numbers of electrons involved are 7, 100, 3000, 20 000, and 70 000.

Elektronenwellen können auch durch Linsen gebeugt und damit für die Mikroskopie verwendet werden.



Heute können Welleneigenschaften u.a. auch mit einem Tunnelmikroskop nachgewiesen werden. In diesem Fall wurden ... (Science 262, 218 (1993)).

7.2.4. Neutronen

Ein anderes wichtiges Beispiel sind Neutronen, welche ebenfalls für Strukturuntersuchungen verwendet werden. Insbesondere werden sogenannte thermische Neutronen verwendet, d.h. Neutronen, deren kinetische Energie der mittleren thermischen Energie bei Raumtemperatur entspricht

$$E = p^2/2m_N = 3/2 kT \quad \text{für} \quad T = 300 \text{ K} .$$

Diese haben eine Wellenlänge

$$\lambda = h/p = h / (3 k T m_N)^{1/2} = 6 \cdot 10^{-34} / (3 \cdot 1.4 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \cdot 1.7 \cdot 10^{-27})^{1/2} \approx 10^{-10} \text{ m} ,$$

also wiederum etwa ein Angström.

Für höherenergetische Neutronen, z.B. mit einer Energie von 100 eV (wie die Elektronen im ersten Beispiel) wird der Impuls $p = 2 (m E_{\text{kin}})^{1/2}$ um den Faktor

$$(m_N/m_e)^{1/2} \approx (1836)^{1/2} \approx 43$$

größer als bei den Elektronen und die Wellenlänge deshalb um den gleichen Faktor kleiner.

7.2.5. Schwerere und zusammengesetzte Teilchen

Allgemein gilt: mit zunehmender Masse wird die de Broglie Wellenlänge kürzer. Prinzipiell bleibt aber die Beziehung gültig, auch bei zusammengesetzten Teilchen wie Atomen. Erste Versuche dazu wurden 1930 von Estermann und Stern mit Helium durchgeführt.

Ref: I. Estermann and O. Stern, Z. Phys. 61 (1930) 95. Ein Heliumatom hat eine Masse von $6.7 \cdot 10^{-27}$ kg, also ähnlich wie ein Neutron (x4), und damit bei thermischen Geschwindigkeiten eine ähnliche Wellenlänge (1/2). In diesen Experimenten wurden die Beugungsmaxima bei der Reflexion an NaCl Kristallen gemessen. Wenn die Bragg-Bedingung erfüllt ist findet man eine erhöhte Reflektivität. Da es sich um thermische Strahlen handelt sind sie nicht monochromatisch und die Reflexionsmaxima sind relativ breit. Es ist aber möglich, die mittlere Wellenlänge der Strahlen zu ändern indem man die Temperatur und / oder die Art des Atoms / Moleküls ändert. Dadurch werden die Positionen der Beugungsmaxima verschoben.

Der nächste Schritt ist von Atomen zu Molekülen. Auch dieser Schritt wurde bereits von Estermann und Stern durchgeführt, welche neben He auch die Beugung von molekularem Wasserstoff, H_2 , untersuchten. An komplizierteren Molekülen wurden erst vor wenigen Jahren Beugungseffekte nachgewiesen.

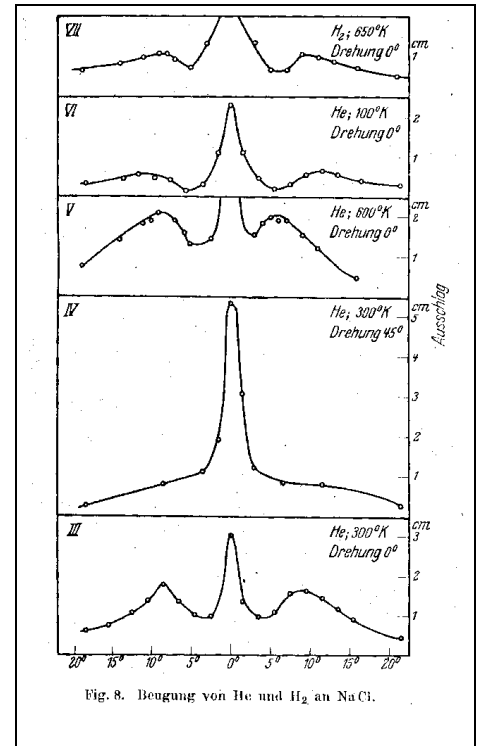
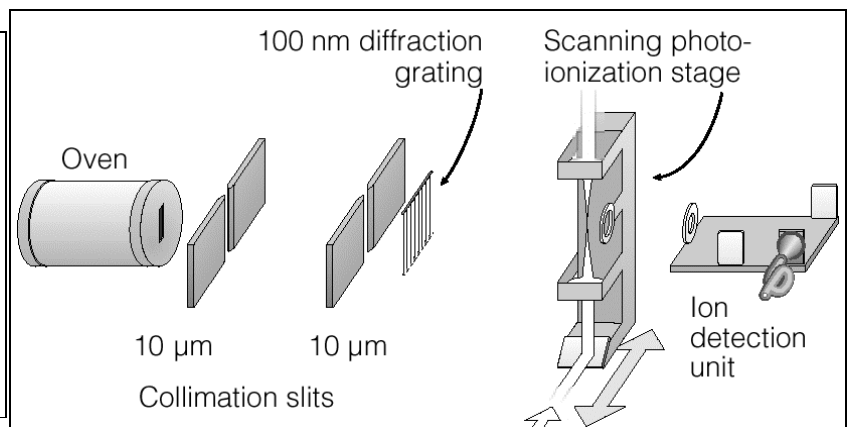
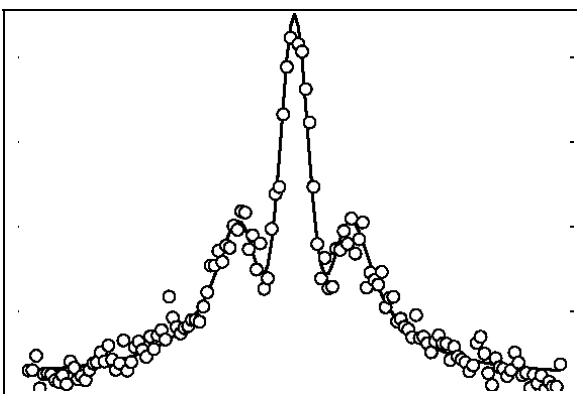


Fig. 8. Beugung von He und H_2 an NaCl.



Dafür wurde ein Strahl von C_{60} Molekülen zunächst kollimiert und dann auf ein Beugungsgitter geschickt. In einer Distanz von ca. 1 m wurden dann die Beugungsmaxima gemessen.

Werden aber die Massen größer, so werden die Wellenlängen extrem kurz. Bei einer Kugel z.B. der Einfachheit halber eine Masse von 1 kg und eine Geschwindigkeit von 1 m/sec zuordnen wird die de Broglie Wellenlänge

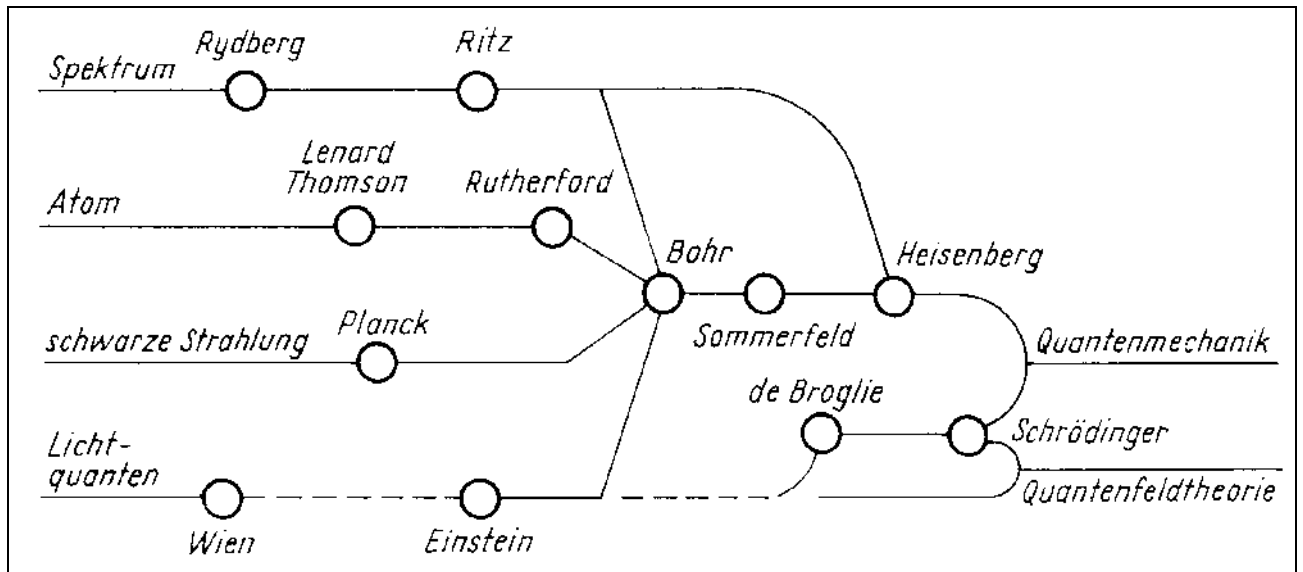
$$\lambda = h/p = 6 \cdot 10^{-34} \text{ m .}$$

Bei der Diskussion der Optik hatten wir gefunden, dass wir die Welleneigenschaften eines Teilchens nicht beobachten können wenn die Dimensionen des Apparates groß sind im Vergleich mit der Wellenlänge. Diese Voraussetzung ist offensichtlich für eine Kegelbahn erfüllt. In diesem Bereich kann die Ausbreitung mit Hilfe der geometrischen Optik, resp. der klassischen Mechanik diskutiert werden.

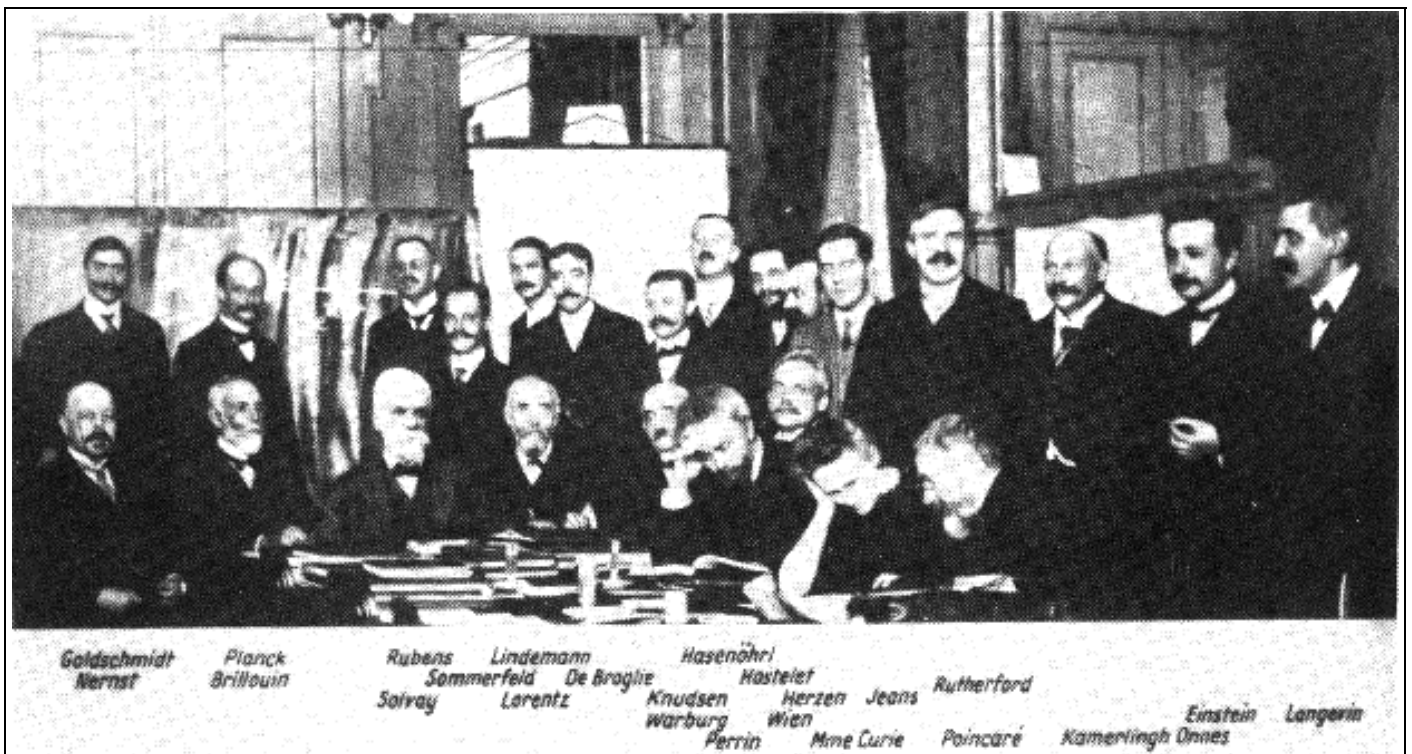
Man kann noch weitergehen und z.B. die Wellenlänge der Erde bestimmen. Deren Masse beträgt $6 \cdot 10^{24}$ kg. Auf der Bahn um die Sonne hat sie eine Geschwindigkeit von ca. 30 km/sec und damit eine Wellenlänge von $4 \cdot 10^{-63}$ m. Deshalb ist die klassische Mechanik, welche die Welleneigenschaften der Materie vollständig vernachlässigt, eine ausgezeichnete Näherung für die Beschreibung von astronomischen Objekten.

7.3. Der quantenmechanische Formalismus

7.3.1. Historische Vorbemerkungen



Die oben dargestellten experimentellen Hinweise wurden im Laufe der ersten Jahrzehnte des 20. Jahrhunderts durch die neu entwickelte Theorie der Quantenmechanik überwunden.



Im Vergleich zu heute war es eine relativ kleine Zahl von Physikern, welche diese Theorie entwickelten. In diesem Bild sind einige von ihnen zu sehen, welche hier zur 1. Solvay Konferenz versammelt sind.

7.3.2. Grundlagen

Die Quantenmechanik verwendet

- Die Zustandsfunktionen Ψ : sie enthält alle Informationen über den Zustand des relevanten Systems.
- Operatoren A , welche auf die Zustandsfunktion wirken; das Resultat der Operation entspricht einer Multiplikation mit der entsprechenden Variablen: $\hat{p} \Psi = p \Psi$.

Die Zustandsfunktion fasst das vorhandene Wissen über den Zustand des Systems zusammen. Sie beschreibt eine Welle, welche im einfachsten Fall (ebene Welle) dargestellt werden kann als

$$\Psi(x, t) = a e^{i(k_x x - \omega t)} = a e^{i/\hbar(p_x x - Et)},$$

wobei die Beziehungen $E = \hbar\omega$, $p_x = \hbar k_x$, $i = \sqrt{-1}$ verwendet wurde.

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen, das durch diese Wellenfunktion beschrieben wird, am Ort x zu finden, ist

$$I(x) = |\Psi(x)|^2.$$

Hier wurde vorausgesetzt, dass die Funktion normiert ist, d.h.

$$\int_{-\infty, \infty} I(x) dx = 1$$

für ein Teilchen. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem bestimmten Volumenelement zu finden, ist entsprechend gegeben durch das Integral über das betreffende Volumenelement.

Es existieren verschiedenen Darstellungen dieser Funktionen und Operatoren. Eine beliebte ist die Darstellung der Funktionen als Vektoren und der Operatoren als Matrizen.

7.3.3. Quantenmechanische Messungen; Erwartungswerte

Aus den Anfängen der Quantenmechanik hat man einen Formalismus für die Beschreibung von Messungen entwickelt. Misst man eine Größe, die einem Operator A entspricht, so ist der Erwartungswert für die Messung

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi | A | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}.$$

Hier stellt $\langle a | b \rangle$ das Skalarprodukt dar.

Ist der Zustand Ψ_i ein Eigenzustand von A , gilt also

$$A \Psi_i = a_i \Psi_i$$

für einen Eigenwert a_i , so ist offenbar

$$\langle A \rangle = a_i \frac{\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle}{\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle} = a_i .$$

Da man meist die Zustandsfunktionen Ψ_i normiert wählt, $\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle = 1$, kann für diesen Fall der Ausdruck für den Erwartungswert reduziert werden auf

$$\langle A \rangle = \langle \Psi_i | A | \Psi_i \rangle .$$

Die Eigenwerte von A sind die möglichen Resultate von dispersionsfreien Messungen. Ist das System vor der Messung nicht in einem Eigenzustand, so wird es durch die Messung in einen Eigenzustand gebracht. Eine Messung im Sinne des quantenmechanischen Messprozesses ist somit nicht ein einfaches "Hinschauen und Ablesen des Resultates", es beeinflusst im Allgemeinen den Zustand des Systems. Die Ausnahme ist nur der Fall wo sich das System bereits in einem Eigenzustand der Observablen (d.h. des Operators, welcher gerade gemessen wird) befindet.

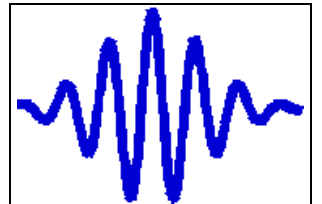
Ein allgemeiner Anfangszustand kann als Linearkombination der Eigenzustände geschrieben werden,

$$\Psi = \sum_i c_i \Psi_i(\vec{r}, t) . \quad \sum_i |c_i|^2 = 1 .$$

da diese eine vollständige Basis darstellen. Der Zustand geht dann mit Wahrscheinlichkeit $|c_i|^2$ in den Zustand Ψ_i über, und das Resultat der Messung ist durch a_i gegeben, also den Eigenwert des Operators, der zum entsprechenden Endzustand gehört. Mehrere Messungen an einem Superpositionszustand ergeben deshalb unterschiedliche Resultate. Die Breite der Verteilung der Messresultate hängt von der Art des Superpositionszustandes ab.

Beispiel: Ein Teilchen sei in einem Zustand, welcher als Superpositionszustand einer Verteilung von ebenen Wellen beschrieben werden kann,

$$\Psi = \int_{-k_0, k_0} c(k) e^{ikx} .$$



Hier stellt k_0 die Breite der Verteilung dar. Offenbar hat dieses Teilchen (im Gegensatz zu einem Teilchen, das als ebene Welle beschrieben werden kann), keinen scharfen Impuls.

Führt man an diesem Teilchen eine (ideale) Messung des Impulses durch, so kann als Resultat nur eine Eigenfunktion des Impulses, d.h. eine ebene Welle erhalten. Nach der Messung befindet sich das Teilchen somit im Zustand e^{ikx} . Wird an diesem Zustand nochmals der Impuls gemessen, so ist das Resultat immer $\hbar k$, und der Zustand ändert sich nicht mehr.

7.3.4. Quantenmechanischer Impuls

Beim Photon hatten wir bereits gesehen, dass der Impuls einer harmonischen Welle als

$$p = \hbar k$$

geschrieben werden kann. Dies kann verallgemeinert werden. Den Wellenvektor kann man als

$$k = -i (d/dx e^{ikx})/e^{ikx} \quad \rightarrow \quad k = -i \Psi'(x)/\Psi(x)$$

erhalten. Damit wird der Impulsoperator

$$\hat{p} = -i \hbar \vec{\nabla} = -i \hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

7.3.5. Schrödingergleichung

Die zeitliche Entwicklung des Systems wird bestimmt durch die zeitliche Entwicklung von $\Psi(x,t)$. Diese ist gegeben durch die Schrödingergleichung

$$\mathcal{H} \Psi(\vec{r},t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r},t).$$

\mathcal{H} bezeichnet den Hamiltonoperator des Systems. Dieser Operator entspricht dem Quantenmechanischen Ausdruck für die Energie.

Besonders wichtig sind diejenigen Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung, die Eigenfunktionen Ψ_i des Hamiltonoperators darstellen, d.h.

$$\mathcal{H} \Psi_i(\vec{r},t) = \mathcal{E}_i \Psi_i(\vec{r},t).$$

Hier entspricht \mathcal{E}_i , der Eigenwert, der Energie des entsprechenden Zustandes. Offensichtlich ist dieser Zustand eine Lösung der Schrödingergleichung; er kann geschrieben werden als

$$\Psi_i(\vec{r}, t) = \Psi_i(\vec{r}) e^{-iE_i t/\hbar},$$

d.h. der räumliche Teil der Wellenfunktion ist zeitunabhängig. Setzt man diese Funktion in die ursprüngliche Gleichung ein, so erhält man

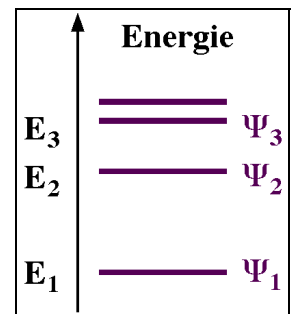
$$\mathcal{H} \Psi_i(\vec{r}) e^{-iE_i t/\hbar} = i \hbar \Psi_i(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} e^{-iE_i t/\hbar} = E_i \Psi_i(\vec{r}) e^{-iE_i t/\hbar}.$$

Wir können somit den zeitabhängigen Faktor $e^{-iE_i t/\hbar}$ eliminieren und erhalten die "stationäre" oder zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\mathcal{H} \Psi_i(\vec{r}) = E_i \Psi_i(\vec{r}).$$

Hier handelt es sich um eine Eigenwertgleichung, die nicht mehr von der Zeit abhängt.

Die Lösungen dieser Gleichung stellen die stationären Zustände des Systems dar. Sie bilden die natürliche Basis für die Beschreibung eines quantenmechanischen Systems. Diese Zustände werden oft einfach als "die Zustände des Systems" bezeichnet, auch wenn nur die zeitunabhängigen (bis auf den nicht wesentlichen Phasenfaktor) Zustände gemeint sind.



Die zeitunabhängige Schrödingergleichung beschreibt somit nur die stationären Zustände erfüllt. Die zeitabhängige Schrödingergleichung gilt für alle quantenmechanischen Zustände und beschreibt die zeitliche Entwicklung eines Systems, welches sich in einem beliebigen Zustand befindetet.

7.3.6. Heisenberg's Unschärferrelation

Führt man an diesem Zustand statt der Impulsmessung eine Ortsmessung durch, so ist das Resultat völlig unbestimmt: das Teilchen ist gleichmäßig über den gesamten Raum verteilt. Im Allgemeinen wird man einen Zustand haben, bei dem weder Ort noch Impuls exakt bestimmt sind. Ist z.B.

$$\Psi = \int_{-k_0, k_0} e^{-((k-k_0)/\Delta k)^2} e^{ikx},$$

d.h. die Verteilung im Impulsraum ist eine Gaußfunktion, so ist auch die Verteilung im Ortsraum eine Gaußfunktion.

Führt man zwei Messungen A und B hintereinander durch, so hängt das Ergebnis offensichtlich von der Reihenfolge der Messungen ab: das System ist am Schluss im Eigenzustand des zuletzt gemessenen Operators. Beide Messungen zusammen ergeben das Resultat

$$\hat{A} \hat{B} .$$

Ist diese unterschiedlich von $\hat{B} \hat{A}$, d.h. ist

$$\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 ,$$

dann ist es nicht möglich, beide Größen mit beliebiger Genauigkeit zu messen. Dieser Operator wird als Kommutator (Vertauschungsoperator) bezeichnet.

Den Einfluss einer Messung auf das Resultat einer späteren Messung eines konjugierten Operators (z.B. Ort / Impuls) kann man gut anhand einer Welle beschreiben: Lässt man die Welle durch einen schmalen Spalt laufen, so hat man ihren Ort (senkrecht zur Ausbreitungsrichtung) mit beliebiger Genauigkeit (der Breite des Spaltes) bestimmt. Die Beugungseffekte führen jedoch dazu, dass die Wellenlänge (d.h. der Impuls) in die entsprechende Richtung nicht mehr gut definiert ist.

Für Ort- und Impuls gilt

$$[\alpha, p_\alpha] = -i \hbar \quad [\alpha, p_\beta] = 0 \quad \alpha, \beta = x, y, z.$$

Für das mittlere Schwankungsquadrat der Messungen gilt:

$$(\Delta a)^2 = (a - \bar{a})^2 \quad \Delta p_\alpha \Delta a \geq \hbar .$$

Für Drehimpulsoperatoren gilt

$$[L^2, L_\alpha] = 0 \quad [L_\alpha, L_\beta] = i \hbar L_\gamma .$$

Mit anderen Worten: Mit dem Betrag des Drehimpulsoperators ist immer eine Komponente gleichzeitig messbar; der Kommutator von zwei Komponenten ist jeweils die dritte Komponente.

