

Quantenmechanik

Rainer Verch

Institut für Theoretische Physik
Universität Leipzig

Vorlesung 02

Literatur

Die Vorlesung war ursprünglich nicht als Online-Veranstaltung geplant. Daher spielt der Rückgriff auf Lehrbücher zur Ergänzung oder für ausführlichere Erklärungen durchaus eine große Rolle.

1. Empfohlene Lehrbuchliteratur — nahe am Inhalt der Vorlesung

- **N. Straumann**, Quantenmechanik (Teil 1: Nichtrelativistische Quantenmechanik). 2. Auflage, Springer, 2013
Ein sehr gut gemachtes und in der Begriffsbildung und den mathematischen Methoden sorgfältiges Lehrbuch. Der Stoff zu gruppentheoretischen Methoden und ihrer Anwendung geht über die Vorlesung z.T. deutlich hinaus. Mit etwas Material zu Verschränkung und Bell-Ungleichungen.
- **M. Bartelmann et al.**, Theoretische Physik 3: Quantenmechanik. Springer, 2018
Sehr ansprechend gestaltet mit guter Stoffauswahl, und sorgfältiger Begriffsbildung. Leider nichts zu Verschränkung — obwohl es ein sehr neues Lehrbuch ist.
- **G. Münster**, Quantentheorie. DeGruyter, 2010
Ein schönes, sehr zugängliches Lehrbuch mit guten Erklärungen und einer sehr guten Stoffauswahl. Sehr geeignet zum Selbststudium.
- **F. Scheck**, Theoretische Physik 2: Nichtrelativistische Quantentheorie. 2. Aufl., Springer, 2005
Ein ebenfalls wohlorganisiertes Lehrbuch zur Quantenmechanik aus einer sehr empfehlenswerten Lehrbuchreihe zur Theoretischen Physik. Auch zum Selbststudium geeignet.

Umfassende Lehrbücher — enthalten mehr als in einer Vorlesung behandelt werden kann

- **A. Galindo und P. Pascual**, Quantum Mechanics 1 und 2. Springer Verlag, 1991 (es gibt eine Neuauflage von Bd. 1 von 2011)
Eines der besten Lehrbücher zur Quantenmechanik. Sehr umfassend, sehr gut in der Begriffsbildung und den mathematischen Methoden, mit vielen ausführlich diskutierten und sehr gut ausgewählten Beispielen. Leider nur schwerig erhältlich.
- **A. Messiah**, Quantenmechanik 1 und 2. 2./3. Auflage, DeGruyter, 1990/91
Standardlehrbuch an vielen europäischen Unis seit etwa der 1970er Jahre. Sehr ausführlich, vielleicht methodisch und thematisch teilweise nicht mehr ganz auf dem neuesten Stand, aber zu vielen Themen immer noch gut. Als Vorlesungstext zu lang und zu wenig fokussiert, mehr als Ergänzung geeignet.

3. Ergänzungen – meist englischsprachig

- **S. Gasiorowicz**, Quantenphysik. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 10. Auflage, 2012
Ein einführendes Lehrbuch, das sehr zugänglich ist und, obwohl es ziemlich in die Jahre gekommen ist, immer noch geschätzt wird. Es erreicht konzeptionell und mathematisch jedoch kein sehr weit entwickeltes Niveau. Aber wer bei einer mehr mathematisch orientierten Herangehensweise an die Quantenmechanik Schwierigkeiten empfindet, wird dieses Buch vielleicht als einen Einstieg zu schätzen wissen.
- **M. LeBellac**, Quantum Physics. Cambridge University Press, 2006
Von der Konzeption bestehen Ähnlichkeiten zu Gasiorowicz's Buch – der Zugang orientiert sich an der Diskussion von Experimenten. Allerdings ist das Buch von LeBellac sehr viel moderner, umfassender und anspruchsvoller. Es ist in einigen Teilen sehr interessant und im Aufbau komplementär zu vielen anderen Büchern.
- **G. Auletta, M. Fortunato, G. Parisi**, Quantum Mechanics. Cambridge University Press, 2009
Ein Buch über Quantenmechanik mit einer mehr theoretisch-konzeptionellen Ausrichtung, dabei aber zugänglich und für Studierende geeignet.
- **A. Peres**, Quantum Theory – Concepts and Methods. Kluwer, 1996
Ein mehr grundlagenorientiertes Lehrbuch zur Quantenmechanik, mit einer hervorragenden Heranführung an Bell-Ungleichungen und Verschränkung.

4. Mathematische Literatur

- **V. Moretti**, Spectral Theory and Quantum Mechanics. Springer UniText, 2. Aufl., 2017
Ein hervorragend geschriebenes Lehrbuch über die Mathematik, die in der Quantenmechanik verwendet wird, mit allen Definitionen, Sätzen und Beweisen, und wie die mathematischen Begriffe sich in den konzeptionellen Aufbau der Quantenmechanik einfügen. Sehr zu empfehlen, wenn auch etwas sehr umfangreich und über den Inhalt der Vorlesung erheblich hinausgehend.
- **Ph. Blanchard, E. Brüning**, Distributionen und Hilbertraumoperatoren. Springer, 1993
Ein ebenfalls sehr gut geschriebenes Mathematiklehrbuch zu den einschlägigen mathematischen Methoden der Quantenmechanik. Es gibt neuere englischsprachige Ausgaben dieses Buches.

1.4 Bohr-Sommerfeldsches Atommodell

Rutherford(1911): Streuexperimente mit α -Teilchen an dünner Goldfolie bestätigen folgendes Atommodell:

Atome sind aufgebaut aus:

- sehr kleinem Kern, positiv geladen, enthält fast gesamte Masse des Atoms
- Atomhülle gebildet aus Elektronen, Durchmesser der Atomhülle ist groß gegen Abmessungen des Kerns

Balmer (1885), Ritz (1908):

Von Atomen (z.B. bei Gasentladung) emittiertes Licht hat ein diskretes Spektrum (Spektrallinien). Z.B. sind die Emissionsfrequenzen für Wasserstoff:

$$\nu_{m,n} = \frac{1}{h} R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m > n = 1, 2, \dots$$

($R = \text{Rydbergkonstante} = 13,6 \text{ eV}$)

Zum Bild der klassischen Physik:

Analogie zu Planeten (\leftrightarrow Elektronen) auf elliptischen Bahnen um Zentralgestirn (\leftrightarrow Atomkern); e.m. Wechselwirkung statt Gravitation.

Resultierendes Problem:

Elektronen bewegen sich beschleunigt (Bahnkrümmung) im starken elektrischen Feld

- strahlen nach E-Dynamik e.m. Wellen ab
- verlieren kontinuierlich Energie
- Bahnkurven um Kern nicht stationär
- Elektronen stürzen in Atomkern
- Atome nicht stabil (Lebensdauer klass. $\approx 10^{-10}$ s)

Die Methoden der klassischen Physik, Mechanik und E-Dynamik, liefern keine sinnvolle Beschreibung des Rutherford'schen Atommodells und keinen Anhaltspunkt für diskrete Emissionsspektren.

Hypothesen von Bohr (1913) zur Beschreibung der Stabilität von Atomen und diskreten Spektrallinien:

1. Atome (bzw. Elektronen in der Hülle) besitzen eine diskrete Menge von stationären Zuständen mit Energien E_1, E_2, \dots
2. Emission und Absorption von e.m. Strahlung geschieht nicht kontinuierlich, sondern nur beim Übergang von einem stationären Zustand in einen anderen
3. Beim Übergang von einem stat. Zustand mit Energie E_j in einen anderen mit Energie E_k wird ein Lichtquant (Photon) mit Frequenz

$$\nu = \frac{1}{h}(E_j - E_k) \quad \text{emittiert, falls } E_j > E_k$$

$$\nu = \frac{1}{h}(E_k - E_j) \quad \text{absorbiert, falls } E_j < E_k$$

4. a) Die stat. Zustände entsprechen stationären Orbits der Hüllenelektronen, die formal den Gesetzen der klass. Mechanik genügen, außer bei Übergängen zwischen stationären Zuständen.
b) Die stat. Orbits der Hüllenelektronen sind dadurch gekennzeichnet, dass ihr Bahndrehimpuls von der Form

$$L = n\hbar$$

ist, wobei $\hbar = h/2\pi$.

Die Bedingung 4 wurde von Sommerfeld und Wilson (1916) verallgemeinert.

In der Hamiltonschen Mechanik wird ein konservatives mechanisches System beschrieben durch

q_1, \dots, q_f kanon. Koordinaten

p_1, \dots, p_f kanon. konj. Impulse

$H(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$ Hamiltonfunktion

Die Zeitentwicklung des Systems wird bestimmt durch die Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \quad k = 1, \dots, f$$

Bei der Wahl der kanon. Koordinaten besteht gewisse Freiheit: Man kann zu anderen kanon. Koordinaten

$$Q_k = Q_k(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$$

$$P_k = P_k(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$$

übergehen, die wie die q_k, p_k die kanon. Poisson-Gleichungen

$$\{Q_k, Q_j\} = 0 = \{P_k, P_j\}$$

$$\{Q_k, P_j\} = \delta_{kj}$$

erfüllen, mit

$$\{F, G\} = \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial G}{\partial q_k} \right)$$

Dann gelten die Hamiltonschen Gleichungen auch für die Q_k, P_k .

Sommerfeld und Wilson betrachten nur Systeme, für die es kanon. Koordinaten q_k, p_k gibt, so dass die Bewegung in jedem Koordinatenpaar q_k, p_k periodisch ist, d.h.

$$q_k(t + T_k) = q_k(t) \quad , \quad p_k(t + T_k) = p_k(t) \quad \forall t \text{ reell}$$

Die Quantisierungsbedingung von Sommerfeld-Wilson lautet:

$$\oint_{\text{Orbit}} p_k dq_k = \int_0^{T_k} p_k(t) \dot{q}_k(t) dt = n_k h$$

wobei n_k eine natürliche Zahl.

Für wasserstoffähnliche Atome mit Z Protonen im Kern, 1 Elektron in der Atomhülle findet man aus diesen Bedingungen als mögliche Energien der stationären Zustände

$$E_{n_\varphi, n_r} = -\frac{Z m_e \alpha^2}{2\hbar} \frac{1}{(n_\varphi + n_r)^2}$$

$$n_\varphi, n_r \in \mathbb{N}, n_\varphi + n_r \geq 1$$

m_e = Masse des Elektrons

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,036} \quad \text{“Feinstrukturkonstante”}$$

Dabei wird die Bahnbewegung des Hüllenelektrons beschrieben durch Polarkoordinaten

$$r, \varphi, p_r, p_\varphi$$

mit der Hamiltonfunktion

$$H(r, \varphi, p_r, p_\varphi) = \frac{1}{2m_e} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\varphi^2 \right) - \frac{Z\alpha}{r}$$

Daraus folgen die möglichen Emissionsfrequenzen

$$\nu_{m,n} = \frac{Z}{h} R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad n < m$$

für wasserstoffähnliche Atome nach Bohrs Hypothese Nr. 2.

Vorgehensweise:

1.

$$\begin{aligned} n_\varphi \hbar &= \int_E p_\varphi d\varphi = \int_0^{T_\varphi} p_\varphi \dot{\varphi}(t) dt = p_\varphi(0) \int_0^{T_\varphi} \dot{\varphi}(t) dt \\ &= p_\varphi(0) \int_{\varphi(0)=0}^{\varphi(T_\varphi)=2\pi} d\varphi = p_\varphi \cdot 2\pi \end{aligned}$$

$p_\varphi =$ Drehimpuls = konst. für stat. Orbit im Zentralpotential

2.

$$n_r \hbar = \int_E p_r dr = \int_0^{T_r} p_r(t) \dot{r}(t) dt$$

(i)

$$\begin{aligned} \dot{r}(t) = 0 \quad \forall t &\Leftrightarrow r(t) = r_0 \quad (\text{Kreisbahn}) \\ &\Rightarrow n_r = 0 \quad \Rightarrow p_r = 0 \end{aligned}$$

Einsetzen in:

$$E = H = \frac{p_\varphi^2}{2mr_0} - \frac{Ze^2}{r_0}$$

und

$$0 = -\dot{r} = -\frac{p_\varphi^2}{mr_0^3} \cdot \frac{Ze^2}{r_0}$$

(eine der Hamiltonschen Gleichungen)

führt auf die möglichen Werte von $E_{n_\varphi, n_r=0}$

(ii) \dot{r} nicht immer = 0 (Ellipsenbahn)

$$\dot{r}(t) = 0 \text{ für } t = 0, \text{ d.h. } r(0) = r_{\min}$$

$$\dot{r}(t) = 0 \text{ für } t = \frac{T_r}{2}, \text{ d.h. } r\left(\frac{T_r}{2}\right) = r_{\max}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \int_0^{T_r} p_r(t) \dot{r}(t) dt &= \int_0^{T_r/2} p_r(t) \dot{r}(t) dt + \int_{T_r/2}^{T_r} p_r(t) \dot{r}(t) dt \\ &= 2 \int_0^{T_r/2} p_r(t) \dot{r}(t) dt = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} p_r(\tilde{r}) d\tilde{r} \stackrel{!}{=} \hbar n_r \end{aligned}$$

Führt durch die Bedingung $E = H$ auf die möglichen Werte von E_{n_φ, n_r}

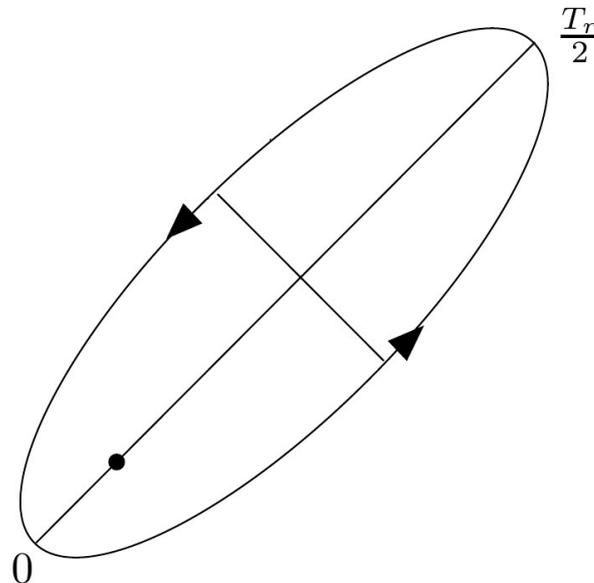


Abbildung 1.3: Ellipsenbahn im Bohr-Sommerfeldschen Atommodell

Experimentelle Bestätigung:

Franck-Hertz-Versuch (1914)

Quecksilber-Dampf bei Raumtemperatur: Alle Atome (bzw. Hüllenelektronen) im Grundzustand.

Erhöhung von V : Mehr Elektronen erreichen die Anode. Elektronen im Bereich elast. Stöße bis etwa

5 V : Elektronen machen im Mittel einen inelast. Stoß mit einem Quecksilberatom (1. angeregter

Zustand von Quecksilber $E_1 \approx 4,86\text{ eV}$)

Bei Erhöhung der Spannung: Wieder elast. Stöße der Elektronen an den Quecksilberatomen, bis etwa

10 V , dann: Im Mittel 2 inelast. Stöße eines Elektrons mit den Quecksilberatomen.

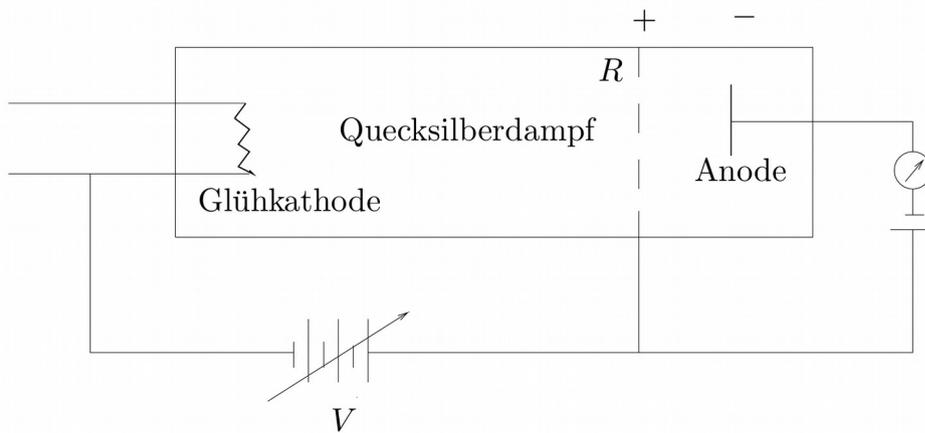


Abbildung 1.4: Aufbau des Franck-Hertz-Versuches

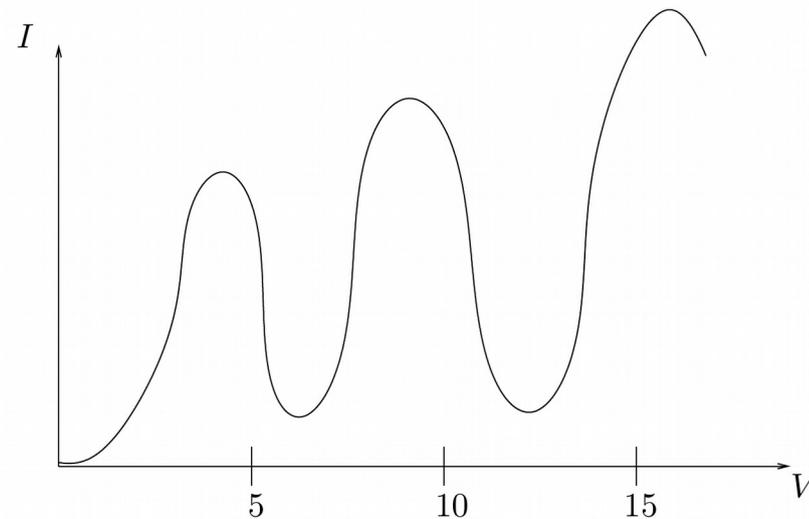


Abbildung 1.5: charakteristischer Verlauf der Strom-Spannungs-Kurve für Quecksilberdampf

Bem. 1.4.1.

Mit der Methode von Bohr-Sommerfeld-Wilson lässt sich auch die Feinstruktur (aufspaltung der Spektrallinien im Magnetfeld) wasserstoffartiger Atome (z.T.) beschreiben. Die Methode versagt aber bei der Beschreibung der Spektren von Atomen mit mehr als einem Hüllenelektron (bereits bei Helium).