

1 I. Die Schwächen der klassischen physikalischen Theorien an Beispielen.

1. Literaturverzeichnis zur modernen Physik, Auswahl:

Becker, R.: Theorie der Elektrizität, Bd. 2, Teubner, 1970

Berry, M.: Kosmologie und Gravitation, Teubner, 1990

Bethe, H. A.; Jackiw, R. W.: Intermediate Quantum Mechanics, Addison - Wesley

Blatt, F. J.: Modern Physics, McGraw-Hill, N. Y., 1992

Davies, P.: The New Physics, Cambridge, 1992

dtv-Atlas zur Astronomie, Tafeln und Texte, Mit Sternatlas, dtv, 1993; zur Atomphysik, Tafeln und Texte, dtv, 1993; zur Biologie, 3 Bände, Tafeln und Texte, dtv, 1994; zur Ökologie, Tafeln und Texte, dtv, 1990

Eder, G.: Kernmaterie, Grundlagen und Probleme der Kernphysik, Spektrum, Akademischer Verlag, 1992

Feynman, R. P., et al.: The Feynman Lectures on Physics, Addison-Wesley comp., USA1989

Feynman, R. P.: QED The Strange Theory of Light and Matter, Princeton, 1988 (auch deutsch)

Feynman, R. P.: Quantum Electrodynamics, Addison- Wesley, 1993, (auch auf deutsch)

Flügge, S.: Practical Quantum Mechanics I + II, Springer

Flügge, S.: Rechenmethoden der Quantentheorie, Springer, 1993

Flügge, S.: Rechenmethoden in der Quantenmechanik, Springer,

Forschungszentrum Karlsruhe: Nachrichten 28, 1-96, 1996

Friedman, H.: Die Sonne, Aus der Perspektive der Erde, Spektrum, Akademischer Verlag, 1987

Gasiorowicz, St.: Quantum Physics (auch deutsche Version), Wiley, 1996

Gell-Mann, M.: The Quark and the Jaguar, Abacus, 1994 (auch auf deutsch erhältlich)

Geo, Nr. 3: Galaxien, März 1996

Goenner, H.: Einführung in die Kosmologie, Spektrum, 1994

Gravitation, Spektrum, Akademischer Verlag, 1991

Haken, H.: Quantenfeldtheorie des Festkörpers, Teubner, 1993

Haken, H.et. al.: Atom- und Quantephysik, Springerer, 1990

Haken, H.et. al.: Molekülphysik und Quantenchemie, Springerer, 1991

Herrmann, J.: Wörterbuch zur Astronomie, dtv, 1996

Kaler, J. B.: Sterne, Die physikalische Welt der kosmischen Sonnen, Spektrum, Akademischer Verlag, 1993

Keller, H.-U.: Astrowissen, Zahlen, Daten, Fakten, Franckh, 1994

Kippenhahn, R.: 100 Milliarden Sonnen, Geburt, Leben und Tod der Sterne, Piper, 1993

Kittel, C. et. al.: Quantentheorie der Festkörper, Oldenbourg, 1989

Kratzer, A.: Arbeitsbuch Optik und Quantenphänomene, Oldenbourg, 1994

Landau, L. D.; Lifschitz, E. M.: Quantenmechanik (2 Bände), Akademie, 1979, 1991

Lederman, I.: Das schöpferische Teilchen, Der Grundbaustein des Universums, Goldmann, 1995

Lehrbücher der experimentellen Physik; der Genetik; der Geschichte der Physik; der Quantenelektrodynamik; der Quantenmechanik; der theoretischen Biologie; der theoretischen Chemie; der theoretischen Physik; etc.

Messiah, A.: Quantenmechanik, Bd. 1 + 2, de Gruyter, 1991

Morrison, D.: Planetenwelten, Eine Entdeckungsreise durch das Sonnensystem, Spektrum, Akademischer Verlag, 1995

Newbury, N., et. al.: Princeton Problems in Physics with Solutions, Princeton, 1991

Paturi, F. R.: Harenberg Schlüsseldaten Astronomie, Harenberg Lexikon Verlag, 1996

Quantenphilosophie, Spektrum, Akademischer Verlag, 1996

Reise durch das Universum, Galaxien, Time-Life, 1992

Russell, B.: Das ABC der Relativitätstheorie, Fischer 6579, 1995

Sagan, C.: Unser Kosmos, Knauer, 1989

Schiff, L.: Quantummechanics, McGraw-Hill,

Schwinger, J.: Einsteins Erbe, Die Einheit von Raum und Zeit, Spektrum, 1987

Schwinger, J.: Quantum Electrodynamics, Dover, 1958

Scientific American, verschiedene Hefte, besonders: June 1996, July 1996

Silk, J.: Die Geschichte des Kosmos, Spektrum, Akademischer Verlag, 1996

Teilchen, Felder und Symmetrien, Spektrum, Akademischer Verlag, 1995

Thorne, K. S.: Gekrümmter Raum und verbogene Zeit, Einsteins Vermächtnis, Knauer, 1996

Walecka, J. D.: Theoretical Nuclear and Subnuclear Physics, Oxford, 1995

Waloschek, P.: Neuere Teilchenphysik - Einfach dargestellt, Aulis, Köln, 1991

Watson, J., D.: Die Doppel-Helix, rororo, 1993

Weinberg, St.: Der Traum von der Einheit des Universums, Goldmann, 1995

Weinberg, St.: Die ersten drei Minuten, dtv, 1994

Wheeler, J. A.: Gravitation und Raumzeit, Die vierdimensionale Ereigniswelt der Relativitätstheorie, Spektrum, Akademischer Verlag, 1992

Zeitschriften wie u. a. Nature, Science, Scientific American und viele andere, die sowohl in Einzelveröffentlichungen wie auch in Übersichtsartikeln die verschiedensten neuen Entwicklungen darstellen.

Die Entwicklung der modernen Naturwissenschaften im 20. Jahrhundert fand (und findet) vor allem auf den Gebieten der Astrophysik, der Atomtheorie, der Biologie, der Chemie, der Elementarteilchen, der Kernphysik und der Relativitätstheorie statt, die fast alle anderen Gebiete der Naturwissenschaften befruchtet und zum Teil erst ermöglicht haben.

Moderne Physik und die Quantentheorie:

01. Die Schwächen, auch Grenzen, der klassischen Physik.

Die nachfolgenden Papiere sollen den Studenten anregen, bei Interesse ein wenig tiefer in die aktuellen physikalischen Fragestellungen einzudringen.

Die klassische Physik, im Kern nichts anderes als Mechanik mit etwas Drumherum und die Elektrodynamik mit einigen ihrer Konsequenzen, schien zum Ende des 19. Jahrhunderts so weit abgeschlossen, daß man wohlwollend seinerzeit Max Planck riet, doch etwas Spannenderes zu studieren als ausgerechnet die Physik.

Gleichwohl gab es eine ganze Reihe von Experimenten, die mit den Mitteln und mit den Methoden der klassischen Physik vollständig unverständlich bleiben mußten. Radikale Neueinsicht und brillante Neudeutung von bereits vollzogenen und von neuen Experimenten führten schließlich sowohl zur Quantentheorie wie auch zur Relativitätstheorie.

Anfänglich wird an einigen experimentellen Fakten geschildert, was gefunden wurde, und wie eine Neuinterpretation auszusehen hat.

Drei neuartige Konzepte stehen dabei im Mittelpunkt der Untersuchungen:

- die Teilcheneigenschaft von Strahlung,
- die Welleneigenschaft von Materie und
- die Quantisierung aller physikalischen Größen.

Man muß sich darüber im Klaren werden, daß die in der klassischen Physik noch vielleicht mögliche umgangssprachliche Beschreibung vollständig einer angemessenen mathematischen Beschreibung der physikalischen Geschehnisse zu weichen hat. Das ist schwer, nicht nur für diejenigen, die sich zum ersten Male mit diesen modernen Konzepten befassen.

Es gibt zur Quantentheorie eine Unzahl von Büchern und fast keine Veröffentlichung kommt ohne die Quantentheorie aus, wenn manchmal auch nur zwischen den Zeilen erwähnt.

Aber schon die angemessene mathematische Behandlung der klassischen Fächer ist keineswegs einfach, wie Sie sich erinnern werden.

Die Quantentheorie aber hat spezifische neue mathematische Probleme aufgeworfen und in einigen Bereichen ist man weit davon entfernt, diese lösen zu können, selbst näherungsweise nicht. Die Beschäftigung mit der Quantentheorie wird Ihnen weitere zwei, Ihnen neue, Rechenmethoden nahebringen: Matrizenrechnung und Operatorenrechnung und das alles mit komplexen Zahlen.

Der Durchgang durch die Quantentheorie an der TFHW sieht wie folgt aus:

Das beigegebene Material ist auf dem vorgegebenen Niveau exakt und (hoffentlich) frei von Fehlern. Die Erläuterungen werden phänomenologischer Natur anhand von Beispielen sein, die in der Rechnung nachvollzogen werden können und sollten.

Anfangs werden an mehreren Beispielen Ergebnisse gezeigt und gerechnet, die klar zeigen, daß das klassische Konzept nicht mehr funktioniert.

Danach wird erläutert und das muß verstanden werden, daß bei atomaren Dimensionen Effekte beobachtbar sind, die nur durch neue Ideen angemessen gedeutet werden können.

Schließlich wird die alles regierende Schrödingergleichung der elementaren Quantenmechanik erläutert und für einige Beispiele vorgeführt.

Hier zeigt sich bereits, daß es ggf. nützlich sein kann, andere und neue Rechenmethoden unterschiedlicher Art kennenzulernen.

Abschließend gibt es einen Ausblick auf die Verzahnung der speziellen Relativitätstheorie mit der Quantenmechanik, wobei einige vollständig neue Erkenntnisse (=Anteilchen) dem mathematisch schon sehr schwierigen Apparat entsteigen werden. Der Rest bleibt für Sie zu tun.

02. Klassisch nicht erklärable Effekte: Der äußere photoelektrische Effekt.

Die Beobachtung lehrte schon Heinrich Hertz, daß bei elektrischen Bogenentladungen der äußere Photoeffekt dann kleiner wurde, wenn die Lichtbogenelektroden vom primären ultraviolettem Licht abgeschirmt wurden.

Folgende experimentelle Tatsachen wurden gefunden:

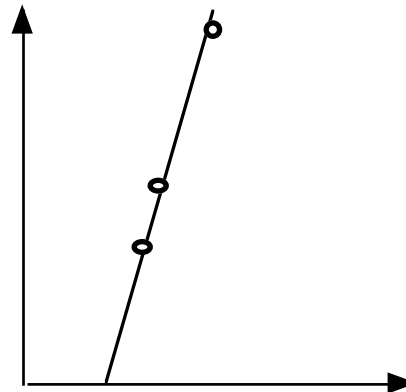
- Metalloberflächen emittieren nur Elektronen und keine positiv geladenen Ionen. Von Metall zu Metall verschieden, wurde von einer bestimmten Frequenz des einfallenden Lichtes an Elektronen emittiert, die den photoelektrischen Strom ergeben.
- Die Größe des Fotostroms ist zwar proportional zur Intensität der Lichtquelle, aber die Energie der Photoelektronen ist von der Lichtintensität unabhängig, hängt aber linear mit der Frequenz = Energie des einfallenden Lichtes zusammen.

Diese Effekte sind mit der klassischen Theorie der elektromagnetischen Strahlung = Maxwellsche Theorie nicht vereinbar, obwohl die klassische Theorie einen photoelektrischen Effekt insoweit verstehen kann, da Elektronen im Metall vorhanden sind. Klassisch jedoch kann weder die Frequenzabhängigkeit des Effektes noch die spontane Emission von Photoelektronen erklärt werden.

Abbildung:

Daten des äußeren photoelektrischen Effektes von Lithium - Metall. Die Steigung der Geraden beträgt $m = h/e$ mit $h =$ Plancksches Wirkungsquantum und $e =$ Elektronenladung. Aufgetragen ist das Bremspotential für einen Photostrom über die Frequenz des einfallenden Lichtes.

Das Bremspotential läuft von 0 - 2,4 Volt; die Lichtfrequenz von $(40 - 120) \times 10^{13}$ 1/sec. Die Abschneidefrequenz liegt bei 56×10^{13} 1/sec.



Erst Albert Einstein betrachtete die auftreffende elektromagnetische Lichtstrahlung als eine Sammlung von Teilchen (=Photonen) mit deren Energie E : Diese einfallenden Photonen haben die Energie

$$2.1: E = h \cdot \nu = h \cdot \omega$$

Die Absorption eines einzelnen Photons durch ein Metallelektron läßt dessen Energie um die Photonenenergie E ansteigen. Ein gewisser Betrag dieser Energie E ist notwendig, um das Elektron aus dem Metall herauszulösen, das wird die Austrittsarbeit W genannt, die von Element zu Element verschieden ist. Die verbleibende Restenergie entspricht der kinetischen Elektronenenergie im Vakuum, so daß der Zusammenhang bestehen sollte:

$$2.2: E_{kin} = \frac{m}{2} v^2 = h \cdot \nu - W_{Element}$$

Dieser Zusammenhang wurde experimentell gefunden und erklärt sowohl den Grenzeffekt (threshold effect) wie auch den linearen Zusammenhang zwischen der kinetischen Elektronenenergie (=angelegtes Bremspotential) und der Frequenz des eingestrahlteten Lichtes.

Die Intensität des äußeren Photostroms bei einer gegebenen Frequenz ist proportional zur Zahl der auftreffenden Photoquanten = Photonen dieser Frequenz, die Elektronen ablösen können.

Die gemessenen Austrittsarbeiten W sind spezifisch für die einzelnen Elemente (und dort wieder flächenspezifisch) und liegen in der Größenordnung einiger Elektronenvolt ($1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-12} \text{ erg}$).

03.: Klassisch nicht erklärable Effekte: Ableitungen der Strahlung des schwarzen Körpers.

03.1.: Die schwarze Strahlungsformel: Ableitung.

Zur Ableitung der Planckschen Strahlungsformel sind zwei Arten von Berechnungen zur schwarzen elektromagnetischen Hohlraumstrahlung nötig:

1. Die Berechnung der mittleren Energie der elektromagnetischen Hohlraumresonatoren und
2. die Berechnung der Verteilungsfunktion g der Energien der Oszillatoren.

Die Strahlungsformel ist das Produkt der mittleren Oszillatorenergien mit deren Verteilung:

$$3.3.1.: U(\nu) = \langle \varepsilon \rangle \cdot g(\nu).$$

03.1.1.: Berechnung der mittleren Oszillatorenergien:

Die mittlere Oszillatorenergie des Schwarzkörperstrahlers ist gegeben durch:

$$3.3.2.: \langle \varepsilon \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon}{\int_0^{\infty} f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon}, \text{ wobei } f(\varepsilon) = C \cdot \exp\left\{-\frac{\varepsilon}{k \cdot T}\right\} = \text{der Boltzmann - Verteilung}$$

der Energien ε bei einer vorgegebenen Temperatur T .

Dieser Ausdruck 3.3.2. wurde im klassischen Sinne von Rayleigh - Jeans mit den falschen Ergebnis und von Planck mit dem richtigen Ergebnis gelöst.

Dies ist der Startpunkt der Quantentheorie und der modernen Physik des 20. Jahrhunderts.

Klassische Lösung von Rayleigh - Jeans:

Die auftretenden Energien im Hohlraum liegen dicht wie die reellen Zahlen, d. h., sie sind mehrfach unendlich dimensioniert

$$3.3.3.: \langle \varepsilon \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon}{\int_0^{\infty} f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon} = C_1 \cdot E \cdot \frac{\int_0^{\infty} f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon}{\int_0^{\infty} f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon} = C_1 \cdot E = k \cdot T,$$

wobei $\varepsilon = C_1 \cdot E$ mit $C_1 \in$ reellen Zahlen = **R**. Mit $g(\nu) \Rightarrow$

$$U(\nu) = K \cdot \nu^2 \cdot T.$$

Die gequantelte Lösung von Max Planck:

Die Zahl aller Objekte im Universum inklusive der Lichtteilchen = Photonen ist abzählbar, daher muß in 3.3.2. das Integral in eine Summe mit einfach unendlich vielen Gliedern verwandelt werden und die erlaubten Energien können nur noch in Sprüngen = Quanten Energie austauschen.

Die Lichtteilchen wurden von Einstein später Photonen genannt:

$$3.3.4.: \langle \varepsilon \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon}{\int_0^{\infty} f(\varepsilon) \cdot d\varepsilon} \rightarrow \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon)}{\sum_{n=0}^{\infty} f(\varepsilon)}, \Rightarrow \text{mit } \varepsilon = n \cdot h \cdot \nu = n \cdot h \cdot \omega, n \in \text{ganzen positiven Zahlen} = \mathbf{G}.$$

Die Berechnung des Nenners von 3.3.4. ergibt unter Verwendung der Boltzmann - Verteilung:

$$3.3.5.: \sum_{n=0}^{\infty} f(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} C \cdot \exp\left\{-\frac{\varepsilon}{kT}\right\} = C \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\frac{n \cdot h\nu}{kT}\right\} = C \cdot \left[1 + \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\} + \left(\exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^2 + (\dots)^3 + \dots\right]$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(\varepsilon) = C \cdot \frac{1}{1 - \exp\left\{-\frac{\varepsilon}{kT}\right\}}, \text{ da } \frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} x^i \text{ ist.}$$

Die Berechnung des Zählers der Gleichung 3.3.4. ergibt mit der Boltzmann-Verteilung:

$$3.3.6.: \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} nh\nu \cdot C \cdot \exp\left\{-\frac{\varepsilon}{kT}\right\} = h\nu \cdot C \cdot \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot \exp\left\{-\frac{nh\nu}{kT}\right\} =$$

$$= h\nu \cdot C \cdot \left[0 + 1 \cdot \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\} + 2 \cdot \left(\exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^2 + 3 \cdot \left(\exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^3 + 4 \cdot (\dots)^4 + \dots\right]$$

$$= h\nu \cdot C \cdot \left[-\frac{d}{d\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} \left(1 + \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\} + \left(\exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^2 + \left(\exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^3 + (\dots)^4 + \dots\right)\right]$$

$$= h\nu \cdot C \cdot \left[-\frac{d}{d\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} \left(\frac{1}{1 - \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}}\right)\right] = h\nu \cdot C \cdot \left[-\frac{d\left(1 - \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^{-1}}{d\left(\frac{h\nu}{kT}\right)}\right], \Rightarrow$$

$$3.3.6.: \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon) = h\nu \cdot C \cdot \left[-\frac{\exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}}{\left(1 - \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^2}\right]$$

Die Berechnung der mittleren Energie ist damit nach 3.3.4.:

$$3.3.7.: \langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon)}{\sum_{n=0}^{\infty} f(\varepsilon)} = \frac{h\nu \cdot C \cdot \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}}{\left(1 - \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right)^2} \cdot \frac{1}{C} \cdot \left[1 - \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}\right] = \frac{h\nu \cdot \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}}{1 - \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}}$$

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon \cdot f(\varepsilon)}{\sum_{n=0}^{\infty} f(\varepsilon)} = \frac{h\nu}{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1}, \text{ nachdem mit } 1 = \frac{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\}}{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\}} \text{ erweitert wurde.}$$

Anmerkung:

Die in 3.3.7. auftretende Funktion enthält die Bose - Einstein - Statistik oder - Verteilung für Teilchen mit ganzzahligem Spin = Eigendrehimpuls wie z.B. Photonen, Alpha-Teilchen, Helium-4-Atome, etc., die nicht dem Paulischen (Ausschließungs-)Prinzip gehorchen;

$$3.3.8.: f_{BE}(E) = \frac{1}{1 - \exp\left\{-\frac{h\nu}{kT}\right\}}.$$

03.1.2.: Berechnung der Verteilungsfunktion g im Strahlungshohlraum:

In einem beliebigen Volumen V gilt die Wellengleichung für das elektromagnetische Feld, hier nur für die elektrische Feldkomponente **E** aufgeschrieben:

$$3.3.9.: \frac{\partial^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = c^2 \cdot \nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \text{ in der üblichen Notation.}$$

Diese Gleichung wird in der üblichen Weise durch Faktorisierung und durch die Randbedingungen

3.3.10.: $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = G(t) \cdot R(\mathbf{r})$ mit den Randbedingungen:

$$\mathbf{E}(\mathbf{0}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, t) = \mathbf{0} \text{ und } \left. \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 = \left. \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} \right|_{\mathbf{r}_i} = \mathbf{0}.$$

gelöst und ergibt als Lösungen:

$$3.3.11.: \begin{aligned} \text{laufende elektrische Wellen} &= \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cdot \exp\{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})\}, \text{ und} \\ \text{stehende Wellen} &= \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cdot \exp\{i(\omega t)\} \cdot [\exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r})\} - \exp\{-i(\mathbf{k}\mathbf{r})\}], \end{aligned}$$

mit $\omega = 2\pi\nu = \text{Kreisfrequenz}$; $\mathbf{k} = \frac{\omega}{c}$ und $c = \text{Vakuum - Lichtgeschwindigkeit}$.

Zur Vereinfachung der Rechnungen wird ein rechteckiger Hohlraum mit drei unterschiedlichen Kantenlängen genommen.

Die Berechnung in der x - Richtung ergibt die gleichen Werte wie in die y- und in die z - Richtung. 3.3.9. und 3.3.11. werden damit zu:

$$3.3.12.: \frac{\partial^2 \mathbf{E}(x,t)}{\partial t^2} = c^2 \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{E}(x,t)}{\partial x^2} \text{ und mit dem Ansatz:}$$

$$\mathbf{E}(x,t) = \mathbf{E}_0 \cdot \exp\{i(\omega t)\} \cdot [\exp\{i(k_x x)\} - \exp\{-i(k_x x)\}] \Rightarrow \text{durch Differentiation und Einsetzen:}$$

$$3.3.13.: \text{die Gruppengeschwindigkeit} = v_G = \frac{d\omega}{dk} = c = \text{Vakuumlichtgeschwindigkeit, sowie}$$

$$\text{die Phasengeschwindigkeit} = v_{ph} = \frac{\omega}{k} = c = \text{Vakuumlichtgeschwindigkeit mit } -\omega^2 = k_x^2 \cdot c^2.$$

Durch Einsetzen der Randbedingungen in die Lösung der Wellengleichung 3.3.12. folgt:

$$3.3.12.: \mathbf{0} = \mathbf{E}(0,t) = \mathbf{E}_0 \cdot \exp\{i(\omega t)\} \cdot 0 =$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{E}(l_x,t) = \mathbf{E}_0 \cdot \exp\{i(\omega t)\} \cdot [\exp\{i(k_x l_x)\} - \exp\{-i(k_x l_x)\}] \Rightarrow$$

$$\text{gelöst für } (k_x l_x) = \pi \cdot n_x \text{ mit } n_x = 0,1,2,\dots$$

Die entsprechende Rechnung kann in y- und in z-Richtung durchgeführt werden und dieses führt zu ähnlichen Ergebnissen:

$$3.3.13.: n_x = \frac{k_x \cdot l_x}{\pi} = \frac{2\pi\nu}{\pi c} \cdot l_x, \text{ allgemein formuliert: } n_i = \frac{k_i \cdot l_i}{\pi} = \frac{2\pi\nu}{\pi c} \cdot l_i, \text{ für } i = x, y, z.$$

Alle in dem Rechteckkasten auftretenden Schwingungsmöglichkeiten (=Modes) werden - bis auf einen hier uninteressanten kleinen Zahlenfaktor - gegeben durch:

$$3.3.14.: N(\nu) = n_x \cdot n_y \cdot n_z = \frac{l_x \cdot l_y \cdot l_z}{c^3} \cdot 8 \cdot \nu^3 = \frac{V}{c^3} \cdot 8 \cdot \nu^3 = K \cdot \nu^3, \text{ damit wird die Dichte}$$

$$3.3.15.: g(\nu) = \frac{dN(\nu)}{d\nu} = K \cdot \frac{\nu^2}{c^3} = K \cdot \nu^2.$$

Mit 3.3.1., und den errechneten Ergebnissen 3.3.5. und 3.3.15. folgt das endgültige Ergebnis von Planck:

$$3.3.16.: U(\nu) = \langle \epsilon \rangle \cdot g(\nu) = \frac{h\nu}{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1} \cdot K \cdot \nu^2 = C \cdot \frac{\nu^3}{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{\exp\left\{\frac{h\nu}{kT}\right\} - 1}$$

Dieses Ergebnis wird im nächsten Abschnitt benutzt, um weitere physikalische Phänomene verstehen zu lernen.

03.2.: Einsteins Ableitung der Schwarzkörperstrahlung.

In einem Hohlraum seien Atome oder Moleküle vorhanden, die mit der elektromagnetischen Strahlung wechselwirken und sich in den Energiezuständen m und n befinden.

Die Verteilung der Atome und Moleküle auf die verschiedenen Energiezustände E_i bei der Temperatur

T gehorcht der Boltzmann - Verteilung:

$$3.2.1.: N_m = g_m \cdot \exp\left\{-\frac{E_m}{kT}\right\} \text{ mit } g_m = \text{Verteilungsfunktion und } k = \text{Boltzmann - Faktor.}$$

Im thermischen Gleichgewicht ist die Verteilung in den Energiezuständen m und n durch den Quotienten gegeben:

$$3.2.2.: \frac{N_m}{N_n} = \frac{g_m}{g_n} \cdot \frac{\exp\left\{-\frac{E_m}{kT}\right\}}{\exp\left\{-\frac{E_n}{kT}\right\}} = \frac{g_m}{g_n} \cdot \exp\left\{-\frac{(E_m - E_n)}{kT}\right\}$$

Betrachtet werden die Übergänge vom Energiezustand 0 = Grundzustand nach 1 = erster angeregter Zustand, wobei der letztere Zustand energetisch größer sei als der Erstere.

Die Zahl der Übergänge R_{mn} ist proportional der Atom- bzw. der Molekülzahl N_0 im Grundzustand 0 und der vorhandenen Strahlungsintensität:

$$3.2.3.: R_{01} = N_0 \cdot u(\nu, T) \cdot B_{01} \text{ mit } \nu = \text{Frequenz des absorbierten Lichtes;}$$

$$B_{01} = \text{Absorptionskoeffizient der Strahlung durch Atome und Moleküle der Energie } E_0.$$

Der Prozeß heißt induzierte Absorption (eines Photons). Der umgekehrte elektronische Übergang heißt induzierte Emission (eines Photons) und ergibt den Wert:

$$3.2.4.: R_{10} = N_1 \cdot [u(\nu, T) \cdot B_{10} + A_{10}] \text{ mit } N_1 = \text{Zahl der Teilchen im Zustand 1;}$$

$$B_{10} = \text{induzierter Emissionskoeffizient; } A_{10} = \text{spontaner Emissionskoeffizient.}$$

Im thermischen Gleichgewicht sind die Koeffizienten $R_{mn} = R_{nm}$ gleich, so daß folgt:

$$3.2.5.: N_0 \cdot u(\nu, T) \cdot B_{01} = N_1 \cdot [u(\nu, T) \cdot B_{10} + A_{10}].$$

Diese Gleichung mit 3.2.2. kombiniert, ergibt:

$$3.2.6.: \frac{N_1}{N_0} = \frac{g_1}{g_0} \cdot \exp\left\{-\frac{[E_0 - E_1]}{k \cdot T}\right\} = \frac{u(\nu, T) \cdot B_{10} + A_{10}}{u(\nu, T) \cdot B_{01}}.$$

oder umgeschrieben:

$$3.2.7.: g_1 \cdot A_{10} = u(\nu, T) \cdot \left[g_0 \cdot B_{01} \cdot \exp\left\{-\frac{[E_0 - E_1]}{k \cdot T}\right\} - g_1 \cdot B_{10} \right].$$

Aus bereits bekannten Gesetzmäßigkeiten lassen sich eine Reihe von Schlußfolgerungen ziehen:

1.) Für hohe Temperaturen ergibt sich das Rayleigh - Jeans - Gesetz:

$$3.2.8.: g_0 \cdot B_{01} = g_1 \cdot B_{10}$$

für $T \rightarrow \infty$ und festem Energieübergang $E_1 \rightarrow E_0$ wird

$$\exp\left\{\frac{E_1 - E_0}{k \cdot T}\right\} \rightarrow 0, \text{ sowie } u(\nu, T) = \left[\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\right] \cdot k \cdot T.$$

Die Rate der induzierten Emissionen ist gleich der Rate der induzierten Absorptionen.

Eingesetzt in 3.2.7. ergibt sich:

$$3.2.9.: g_1 \cdot A_{10} = u(\nu, T) \cdot [g_1 \cdot B_{10}] \cdot \left[\exp\left\{-\frac{[E_0 - E_1]}{k \cdot T}\right\} - 1\right].$$

Oder umgeformt für die Energieverteilung:

$$3.2.10.: u(\nu, T) = \frac{A_{10}}{B_{10}} \cdot \frac{1}{\exp\left\{-\frac{[E_0 - E_1]}{k \cdot T}\right\} - 1}.$$

Die linke Seite dieser Gleichung gehorcht dem Wienschen Verschiebungsgesetz, so daß gelten muß

$$3.2.11.: \nu^3 \cdot g\left(\frac{\nu}{T}\right) = u(\nu, T) = \frac{A_{10}}{B_{10}} \cdot \frac{1}{\exp\left\{-\frac{[E_0 - E_1]}{k \cdot T}\right\} - 1}, \text{ woraus } \Rightarrow$$

$$\frac{A_{10}}{B_{10}} \approx \nu^3, \text{ da } \frac{A_{10}}{B_{10}} \neq f(T) \text{ und } (E_1 - E_0) \neq \nu \Leftrightarrow (E_1 - E_0) = h \cdot \frac{\nu}{2\pi}.$$

Daraus folgt schließlich die spektrale Energieverteilung; aus Plancks Formel der erste Quotient.

$$3.2.12.: u(\nu, T) = \frac{A_{10}}{B_{10}} \cdot \frac{1}{\nu^3} \cdot \frac{\nu^3}{\exp\left\{-\frac{[E_0 - E_1]}{k \cdot T}\right\} - 1}.$$

Die mittlere Anzahl von Photonen pro Einheitsvolumen in einem schwarzen Körper der Temperatur T beträgt dann:

$$3.2.1.3.: \langle n \rangle = \frac{1}{\exp\left\{-\frac{h \cdot \nu}{k \cdot T}\right\} - 1}.$$

Der rechte Teil dieser Gleichung stellt die Bose - Einstein - Statistik für Teilchen mit gradzahligem Spin dar, eben auch den Photonen.

Der Vollständigkeit halber sei hier noch die statistische Verteilung für Teilchen mit halbzahligem Spin wie u. a. Elektronen, die Fermi - Dirac - Statistik angeführt:

$$03.2.1.4.: \langle n \rangle_{Fermi-Dirac} = \frac{1}{\exp\left\{-\frac{h \cdot \nu}{k \cdot T}\right\} + 1}.$$

Die Teilchen, die dieser Fermi - Dirac - Statistik gehorchen, heißen Fermi - Teilchen = Fermionen und unterliegen dem Pauli („schen Ausschließungs“-) Prinzip, welches besagt, daß sich Fermionen in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden müssen, um in einem gleichen Zustand, zum Beispiel energetischen Zustand, sein zu können.

Sobald die Exponentialfunktion in den Nennern der Bose - Einstein - und der Fermi - Dirac - Statistik klein gegen 1 wird, gehen diese Statistiken in die bereits zu Beginn angeführte Boltzmann - Verteilung der klassischen Physik über.

04. Klassisch nicht erklärbare Effekte:

Planck -, Rayleigh/ Jeans -, Stefan/ Boltzmann und das Wiensche Verschiebungsgesetz.

Im Jahre 1900 veröffentlichte Max Planck seine Formel 4.1., die die Energieverteilung der Intensität U der elektromagnetischer Strahlung aus dem Schwarzen Körper (black body radiation) richtig beschrieb:

$$4.1.: U(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} = C_1 \cdot \frac{\nu^3}{e^{\frac{C_2 \cdot \nu}{T}}} \text{ mit } \nu = \text{Frequenz}; c = \text{Vakuumlichtgeschwindigkeit};$$

$$h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 4,1 \cdot 10^{-15} \frac{\text{eV}}{\text{s}} = \text{Plancksches Wirkungsquantum}; k = \text{Boltzmannkonstante}$$

$T = \text{Temperatur in Grad Kelvin}; C_1; C_2 = \text{Konstante}$

Diese Gesetzmäßigkeit ist korrekt nur dann herleitbar, wenn angenommen wird, daß die elektromagnetischen Oszillatoren im schwarzen Körper, die die Strahlung emittieren, nur ganzzahlige Energiewerte annehmen können:

$$4.2.: \epsilon_n = n \cdot h \cdot \nu = n \cdot h \cdot \omega \text{ mit } n = 1, 2, 3, \dots$$

Mit der von Planck gefundenen Formel 4.1. lassen sich die seinerzeit schon bekannten Gesetze a), b) und c) ableiten:

04.1.: Die Ultraviolett - Katastrophe = Rayleigh - Jeanssches Gesetz:

$$4.3.: U(\nu) = C \cdot \nu^2 \cdot T \text{ mit den benutzten Abkürzungen, s.o.}$$

Die Ultraviolett Katastrophe sagt aus, daß mit steigender Frequenz in 4.3. die Intensität U der Strahlung entgegen der Beobachtung quadratisch bis ins Unendliche wachsen sollte.

Ausgehend von 4.1. wird die Exponentialfunktion im Nenner hinsichtlich des Exponenten in eine MacLaurin-Reihe entwickelt:

$$\text{Für } h\nu \ll kT \text{ ergibt sich: } f(\nu) = e^{\frac{h\nu}{kT}} = 1 + \frac{h\nu}{kT} + \frac{1}{2!} \cdot \left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 + \dots \approx 1 + \frac{h\nu}{kT}; \text{ damit}$$

$$4.3.: U(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{kT} - 1} = C_1 \cdot \frac{\nu^3}{\frac{h\nu}{kT}} = C_1^* \cdot \nu^2 \cdot T$$

04.2.: Das Stefan - Boltzmannsche Gesamtstrahlungsgesetz

lautet für die gesamte Strahlungsenergie, die aus dem schwarzen Körper kommt:

$$4.4.: R = \sigma \cdot T^4 \text{ mit der Definition: } R = C_1 \cdot \int_{\nu=0}^{\nu=\infty} U(\nu) \cdot d\nu = C_1 \cdot \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \int_{\nu=0}^{\nu=\infty} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \cdot d\nu$$

Es wird die folgende Substitution der Variablen vorgenommen:

$$x = v \cdot \frac{h}{kT} \Rightarrow dv = dx \cdot \frac{kT}{h}, \text{ eingesetzt ergibt sich aus 4.4.:}$$

$$4.4.: R = C_1 \cdot \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \int_0^\infty \frac{x^3 \cdot k^3 \cdot T^3}{h^3 \cdot \{e^x - 1\}} \cdot \frac{kT}{h} \cdot dx = C_1^* \cdot T^4 \cdot \int_0^\infty \frac{x^3}{\{e^x - 1\}} \cdot dx$$

Das Integral ergibt einen konstanten Wert:

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{\{e^x - 1\}} \cdot dx = C_1 = \frac{\pi^4}{15} \text{ und ist } \neq 0 \text{ und } \neq \infty.$$

Es ergibt sich also tatsächlich 4.4.:

$$4.4.: R = C_1^* \cdot C_1 \cdot T^4 = C_1^{**} \cdot T^4; \text{ wobei } C_1^{**} = \sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15 \cdot c^2 h^3} = 5,7 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 \cdot K^4}.$$

04.3.: Das Wiensche Verschiebungsgesetz

gilt für den ultraroten Strahlungsanteil der Strahlung des schwarzen Körpers und lautet:

$$4.5.: U(\nu) = A \cdot \nu^3 \cdot e^{-B \cdot \frac{\nu}{T}} \text{ in der üblichen Notation.}$$

Setzt man nämlich in die Plancksche Formel 4.1.

$$h\nu \gg kT \text{ ein, } \Rightarrow e^{\frac{h\nu}{kT}} \gg 1 \text{ und damit}$$

$$4.5.: U(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}} = C_1 \cdot \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}} = C_1 \cdot \nu^3 \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}.$$

Damit war die Formel 4.1. nicht nur experimentell abgesichert, sondern erklärte bereits bekannte Gesetzmäßigkeiten.

05.: Klassisch nicht erklärable Effekte: Die spezifische Wärme fester Körper.

Die spezifische Wärme ergibt sich aus der klassischen Thermodynamik zu

$$5.1.: c_v = \frac{dU(T)}{dT}, \text{ wobei } c_v = \text{die spezifische Wärme bei festem Volumen} \Leftrightarrow V = \text{konstant};$$

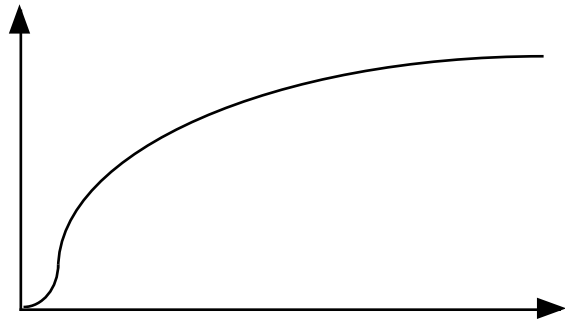
$U = \text{innere Energie des Festkörpers und } T = \text{Temperatur.}$

Die Regel von Dulong - Petit ergibt bei hohen Temperaturen einen Wert an, der für tiefe Temperaturen nicht mehr gilt, nämlich:

$$5.2.: c_v = \frac{dU(T)}{dT}, \text{ wobei } R = \text{universelle Gaskonstante.}$$

Einstein gelang es 1907 und Debye 1927 die spezifischen Wärmen fester Körper bei tiefen Temperaturen durch die quantisierten Schwingungen des Festkörperrgitters (=Phononen) zu erklären:

Abbildung:
Typischer Verlauf der spezifischen Wärmen von Festkörpern bei tiefen Temperaturen. Aufgetragen ist die spezifische Wärme in cal/mol K über eine normierte Temperatur, die nach Einstein bzw. nach Debye benannt ist. Für hohe Temperaturen geht der Wert der spezifischen Wärme in den klassischen Wert von Dulong - Petit über.



05.1.: Einstein Quantisierung der Festkörperrgitterschwingungen:

Es wird die Plancksche Formel 4.1. verwendet, die offenbar eine Statistik der Schwingungsverteilung des Festkörpers liefert, und es ergibt sich damit:

$$5.3.: U(T) = N_\alpha \cdot \langle \epsilon \rangle = C^* \cdot \frac{h\nu}{e^{kT} - 1} = \frac{C}{e^{\frac{\Theta_E}{T}} - 1}, \text{ wobei neben den bereits erklärten Notationen}$$

noch $N_\alpha = \text{Zahl der Schwinger der mittleren Energie } \langle \epsilon \rangle, \Theta_E = \text{Einstein - Temperatur.}$

Diese Festkörperschwingungen liegen alle bei einer einzigen Einsteinfrequenz, die dem Experiment nicht ganz gerecht wird.

Die Ableitung nach 5.1. ergibt dann

$$5.4.: c_v = \frac{d}{dT} \left(\frac{C}{e^{\frac{\Theta_E}{T}} - 1} \right) = C \cdot \frac{e^{\frac{\Theta_E}{T}} \cdot \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2}{\left(e^{\frac{\Theta_E}{T}} - 1 \right)^2}.$$

Physikalisch können mit 5.4. zwei Fälle, nämlich hohe und tiefe Temperaturen, unterschieden werden:

Fall 1: Hohe Temperatur = Dulong - Petitscher Grenzfall.

Die Gleichung 5.4. wird nach MacLaurin entwickelt, da T groß gegenüber der Einsteintemperatur ist:

$$5.5.: c_v = C \cdot \frac{\left(1 + \frac{\Theta_E}{T}\right) \cdot \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2}{\left(1 + \frac{\Theta_E}{T} - 1\right)^2} = C \approx 3R \text{ für } T \gg \Theta_E.$$

Fall 2: T gegen 0 K; ist die Näherung an den absoluten Nullpunkt:

Der Ausdruck 5.5. ergibt, daß die spezifische Wärme ebenfalls gegen Null - wie beim Experiment auch - geht.

05.2.: Die Debyesche Verbesserung der Einsteinschen Formeln:

Die Verbesserung der tatsächlichen Meßergebnisse durch Debye geschieht in der Art, daß statt einer einzigen Gitterfrequenz des Festkörpers (=Einsteinfrequenz) ein Frequenzspektrum zwischen Null und der Debye-Frequenz zugelassen ist. Damit ergibt sich:

$$5.6.: U(T) = C^* \cdot \int_0^{v_D} \frac{v^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} dv, \text{ mit } v_D = \text{Debyefrequenz und}$$

$$\Theta_D = \frac{h\nu_D}{k} = \text{Debyetemperatur.}$$

Das auftretende Integral wird über eine Substitution gelöst:

$$5.6.: U(T) = C \cdot T^4 \cdot \int_0^{v_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = C^* \cdot T^4,$$

$$\text{wobei } \int_0^{v_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \text{endlich bleibt und } x = \frac{h\nu}{kT} \text{ ist.}$$

Dabei wurde noch 5.1. beachtet und die spezifische Wärme berechnet:

$$5.7.: c_v(T) = \frac{dU(T)}{dT} = \frac{d(C^* \cdot T^4)}{dT} = C^* \cdot \frac{1}{4} T^3 = C \cdot T^3.$$

Die spezifische Wärme des Festkörpers läuft wie ein Polynom dritten Grades aus dem Ursprung heraus und beschreibt die experimentellen Gegebenheiten genau.

06. Klassisch nicht erklärable Effekte: Die Compton - Streuung.

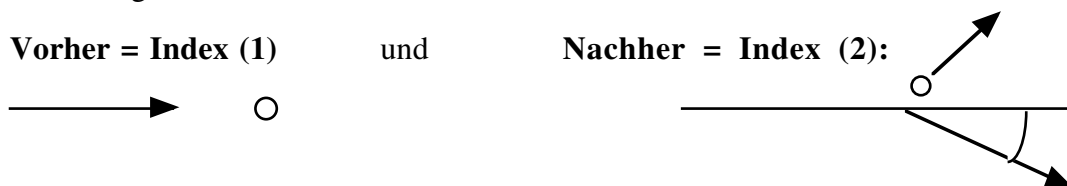
Die Comptonstreuung beschreibt den physikalischen Sachverhalt, daß ein hochenergetisches Photon (=Röntgenquant oder Höhenstrahlungsquant) an einem Elektron gestreut, d. h. abgelenkt wird.

Die Rechnung muß mit der speziellen Relativitätstheorie durchgeführt werden. Die Rechnung zeigt, daß ein Photon wie z. B. ein Gammaquant mit Elektronen des Festkörperverbandes wechselwirkt.

Aus der speziellen Relativitätstheorie ist bekannt, daß die relativistische Energie E gegeben ist durch:

$$6.1.: E^2 = E_0^2 + p^2 c^2, \text{ wobei } E_0 = m_0 c^2 = \text{Ruhenergie mit der Ruhmasse } m_0, \\ p = \text{Impuls und } c = \text{Vakuumllichtgeschwindigkeit.}$$

Untersucht wird die Wechselwirkung Elektron - Photon entsprechend der Abbildung: Vor und nach der Wechselwirkung



Es gelten natürlich der Energie- und der Impulserhaltungssatz für das Elektron wie für das Photon:

$$6.2.: E_1 = h \cdot \nu_1 \text{ für vorher, sowie für nachher: } E_2 = h \cdot \nu_2 \text{ und} \\ \text{für den Impuls: } p_1 = \frac{h \cdot \nu_1}{c} = \frac{h}{\lambda_1}, \text{ für nachher: } p_2 = \frac{h \cdot \nu_2}{c} = \frac{h}{\lambda_2}.$$

Der **Energierhaltungssatz** für das Elektron, mit dem Index e, und das Photon lautet ausgerechnet:

$$6.3.: E_1 = h(\nu_1 - \nu_2) + m_0 \cdot c^2 = E_2 = \sqrt{E_0^2 + p_e^2 \cdot c^2} = \sqrt{m_0 \cdot c^2 + p_e^2 \cdot c^2}$$

Der **Impulserhaltungssatz** fordert:

$$6.4.: \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_e, \text{ woraus } \Rightarrow \\ \mathbf{p}_e^2 = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2 = \mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 - 2 \cdot \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 \cdot \cos \theta, \text{ mit } \theta = \text{Streuwinkel.}$$

Die Rechnung ergibt nach Multiplikation mit c^2 :

$$6.4.*.: \mathbf{p}_e^2 \cdot c^2 = \mathbf{p}_1^2 \cdot c^2 + \mathbf{p}_2^2 \cdot c^2 - 2 \cdot \mathbf{p}_1 \cdot c \cdot \mathbf{p}_2 \cdot c \cdot \cos \theta = (h\nu_1)^2 + (h\nu_2)^2 - 2h^2\nu_1\nu_2 \cdot \cos \theta.$$

Aus Gleichung 6.3. folgt nach dem Quadrieren:

$$6.3.*.: \mathbf{p}_e^2 \cdot c^2 = (h\nu_1)^2 + (h\nu_2)^2 - 2h^2\nu_1\nu_2 + 2m_0c^2h(\nu_1 - \nu_2) + m_0^2c^4 - (m_0c^2)^2.$$

Die Gleichungen 6.3.*. und 6.4.*. werden gleichgesetzt und ergeben nach kurzer Rechnung die experimentell gut bestätigte **Winkelabhängigkeit der Comptonstreuung**:

$$6.5.: \frac{1}{\nu_2} - \frac{1}{\nu_1} = \frac{h}{m_0 \cdot c^2} \cdot (1 - \cos \theta) \Leftrightarrow \lambda_2 - \lambda_1 = \Delta \lambda = \frac{h}{m_0 \cdot c^2} \cdot (1 - \cos \theta); \text{ mit } c = \lambda \cdot \nu.$$

QT 07 - Seite 1 - 04. 09. 1997

07. Klassisch nicht erklärbare Effekte: Der Einstein - de Haas - Effekt.

QT 08 - Seite 1 - 04. 09. 1997

08. Klassisch nicht erklärbare Effekte: Der Stern - Gerlach - Versuch.

09. Beschreibung der Ausbreitung von physikalischen Objekten durch Wellenpakete:

Will man Atome, Moleküle, Atomkerne und Aggregate von Atomen, Molekülen und von Atomkernen verstehen, ist die Quantenphysik unverzichtbar dafür.

Die zugehörigen mathematischen Gleichungen sind aus der klassischen Physik nicht ableitbar, wenn es auch gewisse plausible Wege dorthin gibt.

Das Verständnis der Natur ist aber auf keinerlei Weise mit Mitteln der klassischen Physik zu erreichen.

Schwierig ist es, sich atomare Objekte vorzustellen, die Wellenverhalten zeigen, während lokalisierte Wellen hingegen vorstellbar sind z. B. beim Wasser.

Lokalisierte Wellenpakete können durch die Superposition von Wellen verschiedener Frequenz durch die Fourier - Integrale und -Serien dargestellt werden.

Sei z. B. die Funktion $f(x)$ definiert durch

$$9.1.: f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot e^{ikx} dk = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot \exp\{ikx\} dk \text{ mit } i = \text{imaginäre Einheit.}$$

Der Realteil von 9.1. ist durch 9.1.*. gegeben als eine lineare Superposition von Wellen:

$$9.1.*: f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot \cos kx dk \text{ mit } \lambda = \frac{2\pi}{k} = \text{Wellenlänge.}$$

Für jedes gegebene k wiederholt sich die Welle nach einer Wellenlänge.

Als Beispiel eines Wellenpakets wird $g(k)$ so gewählt:

$$9.2.: g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2} = \exp\{-\alpha(k-k_0)^2\}, \text{ mit } k^* = k - k_0 \Rightarrow \text{aus 9.1.:}$$

$$9.3.: f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot e^{ikx} dk = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot e^{i(k-k_0)x} \cdot e^{ik_0x} dk = e^{ik_0x} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik^*x} \cdot e^{-\alpha(k^*)^2} dk^* \\ = e^{ik_0x} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x^2}{4\alpha}\right)} \cdot e^{-\alpha\left[k^* - \left(\frac{ix}{2\alpha}\right)\right]^2} dk^*.$$

Die Lösung dieses Integrals ist gegeben durch:

$$9.4.: f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \cdot e^{ik_0x} \cdot e^{-\left(\frac{x^2}{4\alpha}\right)}, \text{ da ja } \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha k^2} dk = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \text{Gaußsches Fehler - Integral.}$$

Der imaginäre Anteil ist der Phasenfaktor, dessen Betragsquadrat gleich 1 ist. damit folgt für $f(x)$:

$$9.5.: |f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\alpha}} = \frac{\pi}{\alpha} \cdot \exp\left[-\frac{x^2}{2\alpha}\right].$$

Diese Funktion hat bei $x = 0$ einen Peak = Gaußsche Fehlerfunktion (10 DM!) und stellt ein breites oder schmales Wellenpaket dar.

9.5. kann als die Representation eines Teilchens angesehen werden.



Abbildung: Wellenpaket und Fouriertransformierte bei einem Rechteckpaket.

Die Breite des Wellenpakets kann so gewählt werden, daß die Funktion in 9.5. auf $1/e$ abfällt. Die Breiten von den Betragsquadraten von $f(x)$ und $g(x)$ sind korreliert, stark konzentrierte Werte für k bedeuten große Werte für x und umgekehrt, so daß das Produkt ergibt:

$$9.6.: \Delta k \cdot \Delta x \approx \frac{2}{\sqrt{2\alpha}} \cdot 2\sqrt{2\alpha} = 4$$

Der genaue numerische Wert ist nicht bedeutend, sondern daß das Produkt unabhängig ist von Alpha und in der Größenordnung von etwa 1 liegt:

$$9.7.: \Delta k \cdot \Delta x \geq O(1), \text{ mit } \Delta k, \Delta x = \text{Breite der zwei Verteilungen.}$$

Es ist also unmöglich, beide Werte von der linken Seite der Gleichung 9.7. klein zu machen, eine universelle Eigenschaft von Wellenpaketen mit weiten Auswirkungen in der Quantentheorie.

Die Ausbreitung von Wellenpaketen.

Untersucht wird, wie sich das Wellenpaket 9.1. in der Zeit verhält. Um das zu verstehen, untersucht man zuerst die Ausbreitung einer einfachen Lichtwelle in x-Richtung:

$$9.8.: f(x, t) = e^{ikx - i\omega t} = \exp\{ikx - i\omega t\} = \exp\{i(kx - \omega t)\} = \exp\left\{2\pi i \left[\frac{x}{\lambda} - vt \right]\right\} = \exp\{ik(x - ct)\}$$

$$\text{wobei } \omega = 2\pi v = \text{Kreisfrequenz, } k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ und im Vakuum: } c = \lambda \cdot v.$$

Damit wird 9.8. bei der Superposition von $g(k)$ am Nullpunkt zu

$$9.10.: f(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot \exp\{ik(x - ct)\} dk = f(x - ct).$$

Die Lichtwelle hat zu jedem beliebigen Zeitpunkt immer dieselbe Form, es gibt keinerlei Geschwindigkeitsverbreiterungen des Lichtblitzes.

Bei der Beschreibung von Teilchen durch Wellenpakete gibt es bei der Kreisfrequenz keinen festen Zusammenhang mehr mit der Wellenlänge wie beim Licht:

$$9.11.: f(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot \exp\{i(kx - \omega[k]t)\} dk \text{ mit}$$

$$9.12.: \omega[k] = \omega[k_0] + (k - k_0) \cdot \left\{ \frac{d\omega}{dk} \right\}_{k_0} + \frac{1}{2} \cdot (k - k_0)^2 \cdot \left\{ \frac{d^2\omega}{dk^2} \right\}_{k_0} + \dots (\text{Taylor - Entwicklung}).$$

QT09 - Seite 3 -

Die Kreisfrequenzabhängigkeit von k sei klein, so daß diese Taylorentwicklung um k_0 möglich ist.

Der erste Term ist eine Konstante, von k unabhängig. Der zweite Term heißt Gruppengeschwindigkeit und beschreibt die Ausbreitung des Wellenpakets:

$$9.13.: v_G = \left\{ \frac{d\omega}{dk} \right\}_{k_0}. \text{ Sei nun } k - k_0 = k^* \text{ und } \left\{ \frac{d^2\omega}{dk^2} \right\}_{k_0} = \beta, \Rightarrow$$

die Zeitabhängigkeit des Wellenpakets:

$$9.15.: f(x,t) = \exp\{i(k_0 - \omega[k_0]t)\} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\alpha k^{*2}\} \cdot \exp\{ik^*(x - v_G t)\} \cdot \exp\left\{-\frac{ik^{*2} \beta t}{2}\right\} dk^* \\ = \exp\{i(k_0 - \omega[k_0]t)\} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{ik^*(x - v_G t)\} \cdot \exp\left\{-\frac{(\alpha - i\beta t)k^{*2}}{2}\right\} dk^*$$

Dies entspricht dem bereits gelösten Integral 9.4:

$$9.16.: f(x,t) = \exp\{i(k_0 - \omega[k_0]t)\} \cdot \left(\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x - v_G t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}\right\}, \text{ mit } x \rightarrow x - v_G t \text{ und } \alpha \rightarrow \alpha + i\beta t.$$

Das Quadratabsolut von 9.16. ergibt den Wert

$$9.17.: |f(x,t)|^2 = \left(\frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left\{-\frac{\alpha \cdot (x - v_G t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}\right\}.$$

Die Gleichung stellt ein Wellenpaket dar, dessen Peak sich mit der Gruppengeschwindigkeit ausbreitet, aber die Paket zerläuft in der Zeit t .

Die Breite des Wellenpakets ist proportional zu

$$9.18.: B_{WP} = \left(\alpha + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\alpha} \cdot \left(1 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Die Geschwindigkeit, mit der das Wellenpaket zerläuft, ist bei kleinem α groß und bei großem α klein, entsprechend den Anfangsbedingungen des Wellenpakets.

10. Die Heisenbergsche Unschärferelationen - Beispiele und Grundideen.

Die Heisenbergsche Unschärferelation ist eine, nach bisheriger Kenntnis, universell gültige Gesetzmäßigkeit, die eine Aussage darüber trifft, mit welcher Genauigkeit bestimmte Größen gleichzeitig bestimmt (gemessen) werden können. Natürlich ist diese Relation sowohl physikalisch begründet, wie auch mathematisch über Operatoren ableitbar, jedoch soll versucht werden, aus Kenntnissen der klassischen Physik, nämlich der Optik und der Mechanik, die Idee dahinter zu verstehen.

In der Optik ist jede Abbildung verstehbar als die Folge von Beugungserscheinungen: man kann sagen, das eine Abbildung ohne Beugungen völlig unmöglich wäre. Werden nun die abzubildenden Gegenstände immer kleiner (bis in den atomaren Bereich hinein ; ca. 10^{-9} m), so muß, um noch eine Beugung möglich zu machen, die Wellenlänge des Lichtes ebenfalls die Größenordnung haben.

Mit den beiden wohlbekannten Beziehungen:

$$10.1: \text{Lichtgeschwindigkeit} = c = \lambda \cdot \nu = \text{Wellenlänge des Lichtes} \cdot \text{Frequenz des Lichtes}$$

sowie dem Energiezusammenhang und 10.1. ergibt sich die Energie des Lichtes zu:

$$10.2: E = h\nu = \hbar\omega = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{\hbar \cdot c}{2\pi \cdot \lambda} = \frac{\text{Plancksches Wirkungsquantum} \cdot \text{Lichtgeschwindigkeit}}{\text{Wellenlänge}}, \text{ mit}$$

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 4,14 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}; \text{ sowie } \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6,58 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}.$$

wird klar, daß mit kürzerer Wellenlänge die Energie des Lichtstroms so steigt, daß der abzubildende Gegenstand, energetisch gesehen, gleichwertig wird und die abbildende Wechselwirkung zwischen dem abbildenden Licht und dem abzubildenden atomaren Gegenstand (=Objekt) diesen nicht mehr an dem Ort beläßt, wo er sich vor der Abbildung befand.

Das läßt sich auch mechanisch verstehen, indem angenommen wird, daß mit einem Strom von Kugeln (beispielsweise aus einem Maschinengewehr) versucht werden soll, die Position eines größeren und schwereren Sackes (=Objektes) in seiner Position festzulegen. Wäre hinter dem Sack eine Mauer, so wäre diese nur dort nicht getroffen, wo der Sack für die Kugeln einen Schatten bildet. Wird nun der Sack kleiner und kleiner bis hin zu den Dimensionen der Kugeln, so wird klar, daß dann von diesem Kugelsack keinerlei Schattenwirkung mehr ausgehen kann, sondern vielmehr die Stoßgesetze gelten würden.

Die beiden Formen 10.3. und 10.4. der Heisenbergschen Unschärfe - Relation lauten:

$$10.3: \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{4}; \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{4} \text{ und } \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{4}.$$

Das ist die Impuls - Ortskoordinaten - Unschärfe - Relation mit $\Delta x, \Delta y$ und Δz als Ortskoordinaten und $\Delta p_x, \Delta p_y$ und Δp_z als Impulskomponenten des atomaren Teilchens und als Heisenbergsche Energie- und Zeit - Unschärfe - Relation:

$$10.4: \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{4}.$$

Im weiteren werden einige Beispiele zeigen, welche Probleme mit der Heisenbergschen Unschärfe - Relation verstanden werden können:

10.1.: Beispiel des fliegenden Golfballes (Abschätzung klassischer Grenzen):

der Masse $m = 50 \text{ g}$ und der Geschwindigkeit $v_G = 80 \text{ m/s}$, wobei die Geschwindigkeit mit einem $\Delta v_G = 0,01 \text{ m/s}$ gemessen werde und Δm zu vernachlässigen sei.

Die Anwendung von 1.3., aufgelöst nach Δx ergibt:

$$10.1.1.: \Delta x \geq \frac{h}{4\pi m \cdot \Delta v} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{(4\pi \cdot 0,05 \cdot 0,01)}$$

mit dem Ergebnis:

$$10.1.2.: \Delta x \geq 1,06 \cdot 10^{-31} \text{ m.}$$

Das ist eine Ortsunschärfe, die nicht meßbar ist und die Schlußfolgerung lautet sogleich, daß für klassische Gebilde die Heisenbersche Unschärfe - Relation in der Regel ohne Belang ist.

10.2.: Beispiel des Protons in einem Atomkern:

mit einem Radius $r_K = 5 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ und damit einer Ortsunschärfe des Protons von $\Delta x \approx 5 \cdot 10^{-15} \text{ m}$.

Zur Berechnung des Impulses p_P (=Momentes) des Protons wird wieder die Gleichung 1.3., aufgelöst nach Δp , gebraucht:

$$10.2.1.: \Delta p \geq \frac{h}{4\pi \cdot r_K} = 1,05 \cdot 10^{-20} \frac{\text{kg m}}{\text{s}}.$$

Bewegt sich das Proton im Atomkern mit relativistischen Geschwindigkeiten $v_P \approx c$? Aus $\Delta p = m_0 \cdot v$ folgt sogleich die Geschwindigkeit des Protons mit

$$10.2.2.: v_P = \frac{\Delta p}{1,6 \cdot 10^{-27}} = 6,3 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \ll 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}} = \text{Lichtgeschwindigkeit},$$

die also klein gegenüber der Lichtgeschwindigkeit c und daher nichtrelativistisch ist.

$$\text{Aus } E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow dE = 2p \cdot \frac{dp}{2m} = \frac{p \cdot dp}{m}; \text{ damit } \Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{m} = 6,6 \cdot 10^{-14} \text{ J} = 412 \text{ keV},$$

weil natürlich $p \geq \Delta p$ sein muß, also minimal bei $p = \Delta p$.

10.3. Beispiel der Breite von Spektrallinien bei Atomen:

Die Elektronenübergänge innerhalb eines Atoms sind gegeben durch:

QT 10 - Seite 3 -

$$10.3.1.: E_3 - E_1 = \omega_{31} \cdot h = \nu_{31} \cdot h, \quad E_3 - E_0 = \omega_{30} \cdot h = \nu_{30} \cdot h \text{ und } E_1 - E_0 = \omega_{10} \cdot h = \nu_{10} \cdot h$$

damit folgt

$$10.3.2.: E_1 - E_0 = \omega_{10} \cdot h = \nu_{10} \cdot h = \omega_{31} \cdot h - \omega_{30} \cdot h = \nu_{31} \cdot h - \nu_{30} \cdot h \text{ oder auch:}$$

$$10.3.2.: \nu_{30} = \nu_{31} - \nu_{10}. \quad \text{Das ergibt die Wellenzahl} = \frac{1}{\lambda_{30}} = \frac{1}{\lambda_{31}} - \frac{1}{\lambda_{10}}.$$

Die Lebensdauer eines angeregten Atomzustandes beträgt etwa $t_A \approx 10^{-8}$ s; aus 1.4. ergibt sich die **Energieunschärfe des angeregten Atomzustandes** (der Spektrallinie) zu

$$10.3.3.: \Delta E_A \geq \frac{h}{4\pi \cdot \Delta t} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 10^{-8}}{4\pi} J = 5,3 \cdot 10^{-6} eV.$$

Die Lebensdauer eines angeregten Atomkerns beträgt etwa $10^{-18} \geq t_K \geq 10^{-20}$ s; aus 1.4. ergibt sich die

10.3.4.:Energieunschärfe des Atomkerns zu $\Delta E^K \approx 300 - 30.000 eV (= 30 k eV)$.

Die Wellenlängenunschärfe des angeregten Atomzustandes (z. B. beim Mößbauereffekt) ergibt sich aus den Gleichungen 1.1. und 1.4. mit einem $\Delta E \approx 4 eV$ zu

$$10.3.4.: \Delta \lambda = \frac{h \cdot 2p \cdot c}{4} eV = 4 \cdot 10^{-16} eVs \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{m}{eVs} = 3 \cdot 10^{-8} m.$$

10.4.: Beispiel der Dimensionsabschätzung des Wasserstoffatoms:

Im klassischen Bild sollte das einzige äußere Elektron strahlend unter der Emission von Photonen (= elektromagnetischer Strahlung) in den positiv geladenen Atomkern (=Proton) stürzen. Tatsächlich befindet sich aber das Elektron vom Atomkern in etwa in einem stabilen Abstand a zum Kern.

Offenbar befindet sich das System Atomkern (allgemein = Protonen + Neutronen) und Elektron in einem energetischen Minimum, damit gilt wieder 10.3. (mit $x = a$), sowie für den Erwartungswert der kinetischen Energie im Minimum:

$$10.4.1.: \langle E_{kin} \rangle = \frac{m \cdot \langle v \rangle^2}{2} = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} \text{ und für das Coulomb - Potential: } \langle E_{Coul} \rangle = \frac{-e^2}{\langle a \rangle}$$

so daß für die Gesamtenergie gilt:

$$10.4.2.: \langle E \rangle = \langle E_{kin} \rangle + \langle E_{Coul} \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} - \frac{e^2}{\langle a \rangle} = \frac{h^2}{2m \langle a \rangle^2} - \frac{e^2}{\langle a \rangle} = \langle E \langle a \rangle \rangle$$

dies wird minimal für :

$$10.4.3.: \frac{d\langle E\langle a \rangle \rangle}{d\langle a \rangle} = 0 = \frac{-\hbar^2}{m \cdot \langle a \rangle^3} + \frac{e^2}{\langle a \rangle^2}; \Rightarrow$$

QT 10 - Seite 4 -

$$10.4.4.: \langle a \rangle_{\min} = \frac{\hbar^2}{m \cdot e^2} = 4 \cdot 10^{-15} \text{ eVs} \approx 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m} = \text{Bohrradius des Wasserstoffatoms.}$$

Das Einsetzen des Wertes aus Gleichung 10.4.4. in 10.4.2. ergibt die **Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms**:

$$10.4.5.: \langle E \rangle_{\min} = \frac{-e^2}{2 \cdot \langle a \rangle_{\min}} = \frac{-m \cdot e^4}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ eV} = \text{Rydbergenergie des Wasserstoffatoms.}$$

Das negative Vorzeichen in Gleichung 10.4.5. gibt nur an, daß das Elektron im gebundenen Zustand energetisch günstiger ist als im freien Zustand (= ionisiert).

10.5.: Beispiel der Nullpunktsenergie des (atomaren) harmonischen Oszillators.

Die Gesamtenergie E des klassischen harmonischen Oszillators ist gegeben durch die Summe seiner kinetische Energie $E_{kin} = p^2/2m$ plus der potentiellen Energie (= Federkraft) $E_{pot} = k x^2/2$ und geht gegen Null, wenn die Temperatur gegen Null läuft, d. h. die Teilchen sind entsprechend der klassischen statistischen Mechanik (= Thermodynamik) in Ruhe.

Beim atomaren harmonischen Oszillator, vorstellbar als zweiatomiges Gas oder als Elektron um einen Atomkern, müssen die kinetische und die potentielle Energie durch die Erwartungswerte der Energie ersetzt werden:

$$10.5.1.: \langle E \rangle = \langle E_{kin} \rangle + \langle E_{pot} \rangle = \frac{\langle \Delta p \rangle^2}{2m} + k \cdot \frac{\langle \Delta x \rangle^2}{2},$$

und natürlich die Unschärferelation 10.3. für den Impuls und für die Ortskoordinaten der atomaren Teilchen gelten. Setzt man noch $k = m \omega^2$ und die Gleichung 10.3. in die Gleichung 10.5.1.ein, so ergibt sich:

$$10.5.2.: \langle E_{ges} \rangle = \langle E_{kin} \rangle + \langle E_{pot} \rangle = \frac{\hbar^2}{8m \cdot \langle x \rangle^2} + \frac{m \cdot \omega^2 \cdot \langle x \rangle^2}{2} = \langle E \langle x \rangle \rangle.$$

Das mögliche Minimum der Energie des atomaren harmonischen Oszillators ergibt sich durch die übliche Bedingung für ein Minimum:

$$10.5.3.: \frac{d\langle E_{ges} \rangle}{d\langle x \rangle} = 0 = -\frac{\hbar^2}{4 \cdot m \cdot \langle x \rangle^3} + m \cdot \omega^2 \cdot \langle x \rangle; \Rightarrow$$

$$10.5.4.: \langle x \rangle_{\min}^4 = \frac{\hbar^2}{4 \cdot m^2 \cdot \omega^2}$$

errechnet. Damit ergibt sich die minimale Amplitude des atomaren harmonischen Oszillators zu

$$10.5.5: \langle x \rangle_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{4 \cdot m \cdot \omega}}$$

Wird der Wert von Gleichung 10.5.5. in die Gleichung 10.5.2 eingesetzt, so ergibt sich der minimale Energiewert des atomaren harmonischen Oszillators zu

$$10.5.6: \langle E \rangle_{\min} = \langle E_{kin} \rangle + \langle E_{pot} \rangle = \frac{\hbar^2}{8 \cdot m \cdot 2m \cdot \frac{\omega}{\hbar}} + \frac{m \cdot \omega^2 \cdot \hbar}{2 \cdot m \cdot \omega} = \frac{\hbar \cdot \omega}{2}$$

Dies ist die Nullpunktsenergie des atomaren harmonischen Oszillators - die im Gegensatz zum klassischen Oszillator, dessen Energie Null werden kann - , niemals verschwinden kann und auch am absoluten Nullpunkt stets noch vorhanden ist.

Die Anregungsenergien des atomaren harmonischen Oszillators können mit Hilfe der Heisenbergschen Unschärferelation nicht berechnet werden, das ist die Aufgabe der Quantenmechanik und erfordert z. B. die Kenntnis höherer Funktionen u. a..

Die Unschärferelation ist von Heisenberg 1925 auf Helgoland entdeckt worden und war einer der Ausgangspunkte der Quantenmechanik (Matrizenmechanik).

Moderne Physik: Quantentheorie: I.

11. Die Grundgleichungen der nichtrelativistischen elementaren Quantenmechanik (Schrödinger).

Die beiden Grundgleichungen der nichtrelativistischen elementaren Quantenmechanik, nämlich der zeitabhängigen 11.1. und der zeitunabhängigen 11.7. Schrödingergleichungen lauten:

$$11.1.: \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial t} = i\hbar \dot{\Psi}(r,t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2 \Psi(r,t)}{2m} + V(r,t) \Psi(r,t) = \mathbf{H} \cdot \Psi(r,t)$$

wobei definiert wird:

$$\mathbf{H} = \frac{p^2}{2m} + V \quad \mathbf{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla \Rightarrow p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

dabei sind \mathbf{H} als der Hamiltonoperator, \mathbf{E} als der Energieoperator und \mathbf{p} als der Impulsoperator der klassischen Mechanik in kartesischen Koordinaten aufzufassen (1 - dimensionalen Raum als Operatoren) mit den entsprechenden Laplaceoperatoren in den verschiedenen Koordinatensystemen.

Die zeitabhängige Schrödingergleichung 11.1. ist eine partielle Differential Gl, die mit dem üblichen Produktansatz (Faktorisierung) gelöst wird:

$$11.2.: \quad \Psi(r,t) = \psi(r)g(t) \text{ zu } i\hbar \psi \dot{g} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi\right)g \Rightarrow \frac{i\hbar \dot{g}}{g} = \text{Konstante} = \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V\right)\psi}{\psi}$$

Diese erste Lösung, die zu zwei linearen DifferentialGlen geworden ist, die nur zeit- bzw. ortsabhängig ist und auf übliche Weise gelöst werden kann:

$$11.3.: \quad i\hbar \dot{g}(t) = Kg(t)$$

$$11.4.: \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = K\psi \Leftrightarrow \nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi = 0$$

heißt zeitunabhängige Schrödingergleichung.

Die Lösung von 11.3. ergibt sich durch Integration und lautet bei allen zukünftigen Problemen immer wieder:

$$11.5.: \quad g(t) = \exp\left(-i \frac{Kt}{\hbar}\right) = e^{-i \frac{Et}{\hbar}} \quad \text{mit } E = \hbar\omega = \hbar\nu \Rightarrow K = E,$$

wobei aus Dimensionsgründen bei der Betrachtung des Exponenten $K = E$ nahegelegt wird, und der zeitabhängige Lösungsteil damit schreibbar ist als

$$11.6.: \quad g(t) = \exp\left(-\frac{iKt}{\hbar}\right) = \exp(-i\omega t) = e^{-\frac{iKt}{\hbar}} = e^{-i\omega t}$$

Damit erscheint (11.2*) in seinen endgültigen Formen:

$$11.7.: \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = \mathbf{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow \nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi = 0$$

wobei \mathbf{H} wieder der Hamiltonoperator ist.

Die Schrödingergleichung 11.7. ist, abgesehen von Spezialfällen, nur mit Näherungsmethoden lösbar,

die z. T. als PC - Versionen käuflich sind.

Werden nämlich alle teilnehmenden Elektronen in die Gleichung 11.7. aufgenommen - das ist ein Vielkörperproblem -, jedoch die Spinwechselwirkungen und die nuklearen Effekte vernachlässigt, so wird 11.7. zu einem Vielkörperproblem mit folgendem Hamiltonoperator \mathbf{H} (bei geeigneter Summation über j und j > i):

$$11.4: \quad \mathbf{H} = \sum \frac{p_j^2}{2m} - Ze \sum \frac{1}{r_j} + \sum \frac{e^2}{r_{ij}}$$

der noch nicht berechnet werden soll.

Es ist e , m = Ladung bzw. Masse des Elektrons, Z = Ladungsträgerzahl und die r 's die Ortsvektoren der Elektronen untereinander.

Es folgen einige Beispiele der elementaren Quantenmechanik, die zeigen sollen, wie Lösungen gefunden werden, anfangs als Einkörper-, sonst als Mehrkörperprobleme.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Freie Teilchen:

12. Die Untersuchung eines freien, einzelnen , 1-dimensionalen Teilchens.

Für ein Teilchen im kräftefreien Raum ist $V(r,t) = 0$, damit wird 11.1. in kartesischen Koordinaten in x-Richtung (= 1 - dimensionaler Fall) zu

$$12.1.: i\hbar\dot{\Psi}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

mit der räumlichen und zeitlichen Lösung, siehe 11.2. und 11.5.:

$$12.2.: \Psi(x,t) = \psi(x) \cdot g(t) = \psi(x) \cdot \exp(-i\omega t) = \psi(x) \cdot \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

und der verbleibenden DGI 11.7. mit $V(x) = 0$ und k Element der reellen Zahlen:

$$12.3.: \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \psi'' + \frac{2m\omega}{\hbar}\psi = \psi'' + k^2\psi = 0 \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}},$$

deren räumliche Lösung in x - Richtung lautet:

$$12.4.: \psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) = A \exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

Die Gesamtlösung des Problems heißt also:

$$12.5.: \Psi(x,t) = \psi(x) \cdot g(t) = A \exp\{i(kx - \omega t)\} + B \exp\{-i(kx + \omega t)\} = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} + B e^{-\frac{i}{\hbar}(px + Et)}$$

$$\text{mit } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \text{ und } E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \hbar k$$

Diese Lösungswellenfunktionen laufen mit den Phasengeschwindigkeiten v_{ph} in die positive und die negative x-Richtung.

Die klassische Teilchengeschwindigkeit v_{kl} ist die Gruppengeschwindigkeit v_{gr} , die wie folgt bestimmt werden kann:

$$12.6.: v_{kl} = v_{gr} = \frac{d\omega}{dt} = \frac{\hbar k}{m}$$

Solange es keine speziellen weiteren Bedingungen gibt, kann das Teilchen sowohl von rechts nach links oder in die andere Richtung fliegen.

QT12 - Seite 2 -

Aus 12.5. wird beim Flug in die +x-Richtung, d. h. ohne Interferenzen:

$$12.7.: \Psi(x,t) = A \cdot \exp\{i(kx - \omega t)\} = A \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\}$$

Die Dichte d der Teilchen ist gegeben durch

$$12.8.: d = \Psi^*(r,t) \cdot \Psi(r,t)$$

und der Stromdichte s durch die Größe

$$12.9.: s = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi \right\} = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right\} \quad (\text{kartesische } K \text{ im } V^1)$$

in kartesischen Koordinaten; schließlich muß sich das Teilchen irgendwo im gesamten Raum befinden, so daß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit gilt

$$12.10.: 1 = W = \iiint_V \Psi^*(r,t) \cdot \Psi(r,t) d\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) \cdot dx \quad (\text{kartes. } K.; \text{ im } V^1)$$

Im Falle freier Teilchen wird mit 11.7. die Dichte 12.8. und der Stromdichte 12.9. zu

$$12.11.: d = |A^2| \text{ und}$$

$$12.12.: s = |A^2| \cdot \frac{\hbar k}{m}.$$

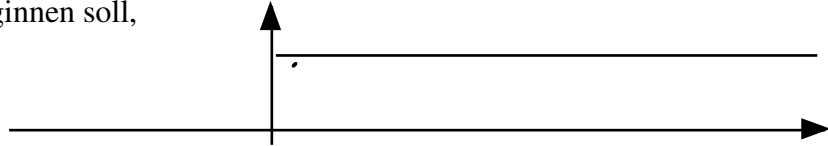
Schließlich lassen sich noch die Erwartungswerte der Energie E und des Impulses \mathbf{p} berechnen, die allerdings durch die Norm dividiert werden muß (siehe Literatur).

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Freie Teilchen.

13. Ein 1-dimensionales freies Teilchen an einer rechteckigen Potentialbarriere.

Ein Strom freier Teilchen fliegt potentialfrei im Gebiet I auf eine Barriere der Höhe $h = U_0$ zu, die an der Stelle $x = 0$, Gebiet II, beginnen soll,

$$13.1.: V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ U_0 & \text{für } x > 0 \end{cases}$$



entsprechend der Abbildung.

Die klassischen Lösungen für dieses Problem lauten:

a) Ist die Energie E des Teilchens größer U_0 , d. h. $(E - U_0) > 0$, so gibt es bei $x = 0$ keinerlei Hindernis;

b) ist jedoch E kleiner U_0 , d. h. $(E - U_0) < 0$, so werden alle Teilchen an der Potentialschwelle in das Gebiet I reflektiert.

In der Quantenmechanik muß die Schrödingergleichung 11.1. mit Potential $V(x) = U_0$ und ohne Potential, d. h. $V(x) = 0$ gelöst werden, es ergeben sich die zeitlichen Lösungen 11.6., multipliziert mit den räumlichen Lösungen von 11.7.:

$$13.2.: \Psi(x,t) = A \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}x - \omega t\right)\right\} + B \cdot \exp\left\{-i\left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}x + \omega t\right)\right\}$$

für den Fall $E > U_0$, und für den Fall $E < U_0$:

$$13.3.: \Psi(x,t) = A \cdot \exp\left\{\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}x\right\} \cdot \exp\{-i\omega t\} + B \cdot \exp\left\{-\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}x\right\} \cdot \exp\{-i\omega t\}.$$

Ist $U_0 = 0$, so ergibt 13.2. die schon bekannte Lösung des freien Teilchens 12.5..

Jedoch müssen die Randbedingungen an der Stelle des Potentialsprungs bei $x = 0$ noch diesen Lösungen 13.2. und 13.3. angefügt werden:

$$13.4.: \Psi(x,t)_I = \Psi(x,t)_{II} \text{ sowie}$$

$$13.5.: \frac{\partial \Psi(x,t)_I}{\partial x} = \frac{\partial \Psi(x,t)_{II}}{\partial x}, \text{ die Indices bezeichnen die Gebiete I, II.}$$

Diese beiden Bedingungen bedeuten, daß die gefundenen Funktionen und auch deren erste Ableitungen an der Stelle $x = 0$ für die Fälle 1.) $E > U_0$ und 2.) $E < U_0$ gleich sein müssen.

Damit ergeben sich zwei Fallunterscheidungen:

1. Fall $E > U_0$: Die Lösungen 13.2. lauten für das potentialfreie Gebiet I ($U_0 = 0$):

$$13.6.: \Psi(x,t) = A \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h}x - \omega t\right)\right\} + B \cdot \exp\left\{-i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h}x + \omega t\right)\right\}$$

und für das Gebiet II mit dem Potential U_0 (nur in $+x$ - Richtung, da dort im Unendlichen keine Teilchenquelle vorhanden sein soll):

QT 13 - Seite 2 -

$$13.7.: \Psi(x,t) = C \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}x - \omega t\right)\right\}$$

Die Randbedingungen 13.4. und 13.5. an der Stelle $x = 0$ führen direkt zu den beiden Gleichungen

$$13.8.: A \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h}0 - \omega t\right)\right\} + B \cdot \exp\left\{-i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h}0 + \omega t\right)\right\} = C \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}0 - \omega t\right)\right\}$$

$$13.9.: A \cdot \left(i\frac{\sqrt{2mE}}{h}\right) \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h}0 - \omega t\right)\right\} + B \cdot \left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{h}\right) \cdot \exp\left\{-i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h}0 + \omega t\right)\right\}$$

$$= C \cdot \left(i\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}\right) \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h}0 - \omega t\right)\right\}$$

und aus 13.8. und 13.9. folgen sogleich:

$$13.10.: A + B = C \text{ und ,}$$

$$13.11.: A\sqrt{E} - B\sqrt{E} = C\sqrt{E-U_0}.$$

Mit diesen beiden Gleichungen berechnen sich die Koeffizienten B und C sowohl der reflektierten und der transmittierten Funktion in Abhängigkeit von der einfallenden Funktion A:

$$13.12.: B = A - \frac{C\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}} = A - \frac{(A+B)\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}} = A \left[\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0}} \right]$$

$$13.13.: C = A + B = A \left(1 + \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0}} \right) = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0}}.$$

Der Reflektionskoeffizient **R** ist definiert als der Quotient der reflektierten zur einfallenden Strahldichte.

Der Transmissionskoeffizient **D** ist definiert als Quotient der durchgehenden zur einfallenden Strahldichte, wobei die Summe **R + D = 1** = der normierten einfallenden Strahldichte sein muß.

Diese Größen sind gegeben durch den einfallenden Strom

$$13.14.: I_e = \Psi_e^* \cdot \Psi_e / v_{gr} = |A^* \cdot A| \cdot \frac{h}{m} \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{h}.$$

den reflektierten Strom

$$13.15.: I_r = \Psi_r^* \cdot \Psi_r / v_{gr} = |B^* \cdot B| \cdot \frac{\hbar \cdot \sqrt{2mE}}{m \cdot \hbar}$$

den durchgehenden Strom

QT 13 - Seite 3 -

$$13.16.: I_d = \Psi_d^* \cdot \Psi_d / v_{gr} = |C^* \cdot C| \cdot \frac{\hbar \cdot \sqrt{2m(E - U_0)}}{m \cdot \hbar}$$

Damit lautet der Reflektionskoeffizient **R**

$$13.17.: \mathbf{R} = \frac{I_r}{I_e} = \frac{|B^* \cdot B|}{|A^* \cdot A|} = \left[\frac{\{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}\}}{\{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}\}} \right]^2$$

der Transmissionskoeffizient **D**

$$13.18.: \mathbf{D} = \frac{I_d}{I_e} = \frac{|C^* \cdot C|}{|A^* \cdot A|} = \left[\frac{\sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E}} \right]^2 = \frac{4\sqrt{E} \cdot \sqrt{E - U_0}}{[\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}]^2}$$

und die Summe **R + D = 1**, wie es sein muß:

$$13.19.: \mathbf{R} + \mathbf{D} = \frac{\{\sqrt{E}^2 - 2\sqrt{E} \cdot \sqrt{E - U_0} + [\sqrt{E - U_0}]^2 + 4\sqrt{E} \cdot \sqrt{E - U_0}\}}{\{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}\}^2}$$

Es gibt also für $E > U_0$ einen reflektierten Strahl.

Wird U_0 jedoch unendlich, so ergibt sich **R = 1** und **D = 0**.

2. Der Fall $E < U_0$:

Die Lösung 13.6. bleibt im Gebiet I erhalten, während 13.7. im Gebiet II wird zu:

$$13.20.: \Psi_{II}(x, t) = \Psi_I(x, t) = C \exp\left\{-\frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} x\right\} \exp\{-i\omega t\} =$$

$$A \exp\left\{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x - \omega t\right\} + B \exp\left\{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x + \omega t\right\}$$

die Randbedingungen 13.4. und 13.5. müssen erfüllt werden und ergeben:

$$13.21.: : A + B = C \text{ für}$$

$$\Psi_I(x,t)|_{x=0} = \Psi_{II}(x,t)|_{x=0} \quad \text{und für} \quad \frac{\partial \Psi_I(x,t)}{\partial x}|_{x=0} = \frac{\partial \Psi_{II}(x,t)}{\partial x}|_{x=0}$$

ergibt sich diesmal jedoch:

$$13.22.: iA\sqrt{E} - iB\sqrt{E} = -C\sqrt{E-U_0}.$$

Mit 13.21. und mit 13.22. berechnen sich die Koeffizienten B und C der reflektierten und der transmittierten Funktion in Abhängigkeit von der einfallenden Funktion A:

QT 13 - Seite 4 -

$$13.23.: B = A \frac{\sqrt{E} - i\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + i\sqrt{E-U_0}}$$

$$13.24.: C = A + B = A \left(1 + \frac{\{\sqrt{E} - i\sqrt{E-U_0}\}}{\{\sqrt{E} + i\sqrt{E-U_0}\}} \right) = 2A \frac{\sqrt{E} \{\sqrt{E} - i\sqrt{E-U_0}\}}{2E - U_0}.$$

Die Stromdichte im Gebiet II für $V=U_0$ lautet somit

$$13.25.: s = \Psi^* \cdot \Psi = C^* \cdot \exp\left\{\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h} x\right\} e^{i\alpha x} \cdot C \cdot \exp\left\{-\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{h} x\right\} e^{-i\alpha x} = C^* C \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2m(E-U_0)}}{h} x\right\}$$

$$13.26.: s = 4\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) \cdot \frac{E}{2E-U_0} \cdot \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2m(E-U_0)}}{h} x\right\}.$$

Der Strom fällt für die Länge $x = l$ exponentiell ab auf den Wert von $1/e$:

$$13.27.: l = \frac{h}{\sqrt{2m(E-U_0)}}$$

Damit wird U_0 unendlich für $l=0$, während für das Photons mit der Masse $m_{ph} = 0$ gleichzeitig eine unendliche Eindringtiefe besteht.

Der Reflektionskoeffizient **R** ergibt sich rechnerisch wie in 13.17., jedoch zu

$$13.28.: \mathbf{R} = 1 = \frac{I_r}{I_e} = \frac{|A^* \cdot A|}{|A^* \cdot A|} \cdot \frac{h\sqrt{2mE}}{mE} \cdot \frac{m \cdot E}{h\sqrt{2mE}} = \left[\frac{\sqrt{E} - i\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + i\sqrt{E-U_0}} \right]^* \cdot \left[\frac{\sqrt{E} - i\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + i\sqrt{E-U_0}} \right].$$

Es werden alle Teilchen reflektiert (**R=1**, das heißt, im Gebiet II gibt es keine Absorption, obwohl die Teilchen dort eindringen).

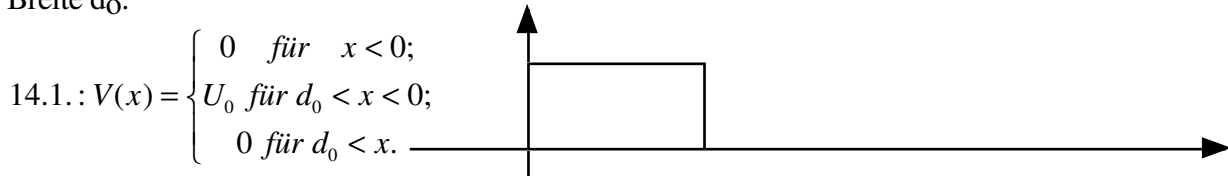
Mit **R + D = 1** ist **D = 0**, jedoch ist die Teilchendichte in dem Gebiet II von Null verschieden.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Freie Teilchen.

14. Tunneleffekte, eindimensional.

14.a.: Eindimensionale rechteckige Potentialbarriere der Breite d_0 und der Höhe U_0 .

Gegeben sei, siehe auch die Abbildung, an der Stelle $x=0$ ein Potentialsprung der Höhe U_0 mit der Breite d_0 :



Wie lauten die Lösungen der Schrödingergleichung unter Beachtung der Tatsache, daß die folgenden Randbedingungen gelten müssen:

$$14.2.: \Psi_I(x=0, t) = \Psi_{II}(x=0, t); \Psi_{II}(x=d_0, t) = \Psi_{III}(x=d_0, t) \text{ und}$$

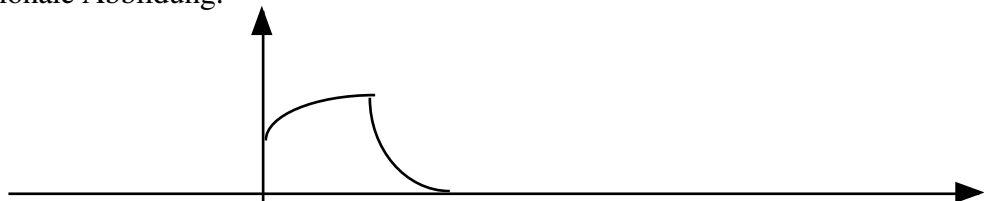
$$14.3.: \frac{\partial \Psi_I(x=0, t)}{\partial x} = \frac{\partial \Psi_{II}(x=0, t)}{\partial x}; \frac{\partial \Psi_{II}(x=d_0, t)}{\partial x} = \frac{\partial \Psi_{III}(x=d_0, t)}{\partial x}$$

Man findet Lösungen für die Teilchenenergien

$$14.4.: E = \begin{cases} \text{größer als } U_0 \\ \text{kleiner als } U_0. \end{cases}$$

14.b.: Eindimensionale nichtrechteckige Potentialbarrieren.

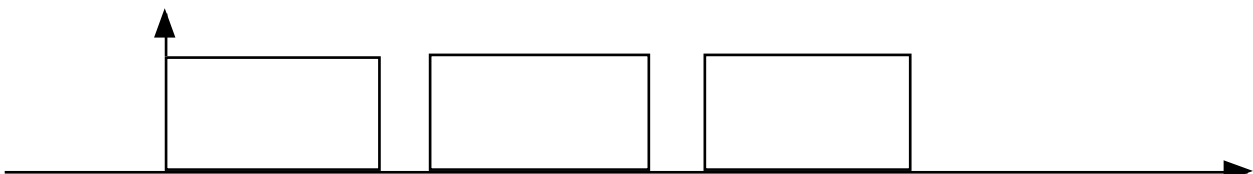
In der realen Welt werden die Potentialbarrieren weder eindimensional, noch rechteckig sein, sondern beliebige Formen haben, entsprechend den tatsächlichen Potentialverläufen des Problems, siehe die Folgende eindimensionale Abbildung:



Das Potential $V(x)$ muß approximativ beschrieben werden und zur Lösung in die Schrödingergleichung eingegeben werden, wieder sind die Randbedingungen zu beachten.

14.c.: Eindimensionale rechteckige Potentialbarrieren mit den Abständen a_0 : Resonanztunneln:

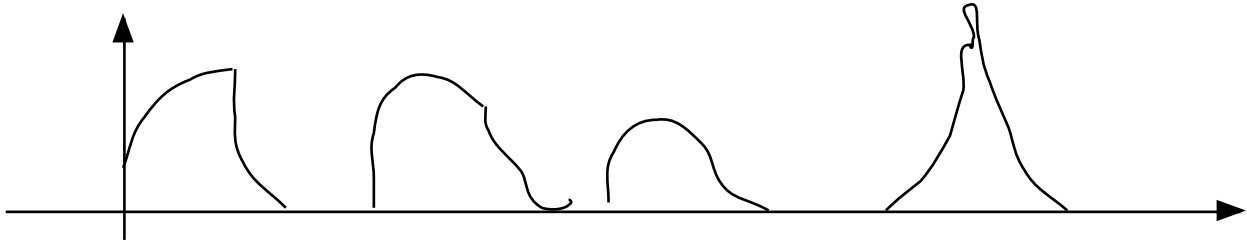
Gegeben seien an den Stellen $x_k = k (d_k + a_k)$ für $k = 0, 1, 2, \dots$ Potentialsprünge mit der Höhe U_0 (allgemeiner Fall: beliebiger und wechselnder Höhe; beliebige Formen und dreidimensional), siehe Abbildung:



QT 14 - Seite 2 -

Allgemeiner Fall in zweidimensionaler Darstellung mit beliebig geformten Potentialen (dies kann als eine sinnvolle Vorüberlegung für die Theorie des Bändermodells bei Festkörpern angesehen werden):

Natürlich müssen die entsprechenden Randbedingungen bekannt sein, vielleicht sind dann auch Näherungen möglich.



Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Freie Teilchen.

15.: Die Rotation eines Teilchens im dreidimensionalen Raum (allgemeiner Fall).

Die Schrödingergleichungen 11.1. und 11.7. sind koordinatenunabhängig geschrieben, bei der Rotation bleibt der Radius r konstant, so daß 11.7. in Kugelkoordinaten geschrieben werden kann, nur die Ortsabhängigkeit, die Zeitlösung bleibt 11.5.:

$$15.1.: 0 = \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sin \beta \frac{\partial \psi}{\partial \beta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \beta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha^2} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E - V) \psi$$

oder mit r = konstant auf jeder Kugeloberfläche und dort V = 0:

$$15.2.: 0 = \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sin \beta \frac{\partial \psi}{\partial \beta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \beta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha^2} + \frac{2mr^2}{\hbar^2} E \psi = \frac{1}{\sin \beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sin \beta \frac{\partial \psi}{\partial \beta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \beta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha^2} + \frac{2}{\hbar^2} IE \psi$$

mit $I = m r^2$, dem klassischen Trägheitsmoment und

15.3.: $\psi = \psi(\alpha, \beta) = A(\alpha) \cdot B(\beta)$ mit der Faktorisierung (Trennung der Variablen) ergeben sich schließlich die zwei Differentialgleichungen:

$$15.4.: A(\alpha)'' + m_l^2 \cdot A(\alpha) = 0$$

$$15.5.: \sin \beta \cdot \frac{\partial}{\partial \beta} (\sin \beta) B(\beta) + \left(\frac{2IE \sin^2 \beta}{\hbar^2} - m_l^2 \right) B(\beta) = 0$$

Die Lösungen von 15.4. lauten

$$15.6.: A(\alpha) = K \cdot \exp(+/- im_l \alpha) = K \cdot e^{+/- im_l \alpha} \text{ mit } m_l = 0, 1, 2, \dots$$

mit den erlaubten Werten $m_l = \text{ganze Zahlen, jedoch } < l$.

Die DGl. 15.5. ist eine Legendresche DGl, die sich mit der Abkürzung:

$$15.7.: 2IE = \hbar^2 \cdot l \cdot (l + 1) \text{ und } x = \cos \beta$$

ergibt und die nur für bestimmte Argumente Lösungen liefert, die physikalisch sinnvoll sind.

Es gibt bezüglich m_l $(2l + 1)$ verschiedene Lösungen gleicher Energie, das wird $(2l + 1)$ -fache Entartung genannt.

Wegen der Energie $E = p^2 / 2m$, dem Drehimpuls $l = p r$ und dem Trägheitsmoment $I = m r^2$ wird der Betrag des Drehimpulses

$$15.8.: |l| = \sqrt{l \cdot (l + 1)} \text{ mit } l \text{ ganzzahlig.}$$

Die Orientierung eines rotierenden Körpers ist gequantelt, ebenso wie die Einzelkomponenten L_x , L_y und L_z des Drehimpulses L .

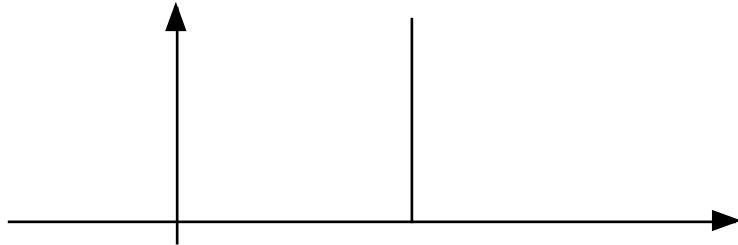
Die Rechnungen zur Erzeugung des Spins (= Eigendrehimpuls) von Teilchen mit einer Masse m erfordert jedoch die Lösung der Dirac- bzw. der Klein - Gordon - Gleichung, d. h., einer relativistischen Behandlung der Quantenmechanik und der Schrödinger - Gleichung.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Teilchen.

21.: Teilchen in einem eindimensionalen Potentialtopf der Breite b mit unendlicher Höhe.

Das zu untersuchende Teilchen befindet sich in einem Potentialtopf der Breite b, die Wände des Topfes seien unendlich hoch, siehe Abbildung:

$$21.1.: V(x) = \begin{cases} +\infty, & \text{für } x < 0, \\ U_0, & \text{für } 0 < x < b, \text{ sowie} \\ +\infty, & \text{für } x > b. \end{cases}$$



Für die Gebiete I, II und III gelten die Schrödingergleichungen 11.1. und 11.7., sowie die Randbedingungen an den Stellen $x = 0$ und $x = b$.

In den Gebieten I und III ist U_0 unendlich hoch, während im Gebiet II: $U_0 = 0$ ist.

Die Lösungen sind in den Gebieten I und III für ein unendlich hohes Potential identisch Null, damit wird für $x = 0$:

$$21.2.: 0 = A \cdot \exp\{-i\omega t\} + B \cdot \exp\{-i\omega t\}, \text{ damit } \Rightarrow A = -B,$$

und für die Stelle $x = b$ mit $A = -B$:

$$21.3.: 0 = A \cdot \exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h} \cdot b - \omega t\right)\right\} + B \cdot \exp\left\{-i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h} \cdot b + \omega t\right)\right\} =$$

$$A \cdot \left[\exp\left\{i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h} \cdot b\right)\right\} + B \cdot \exp\left\{-i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{h} \cdot b\right)\right\} \right]$$

Die Gleichung 21.3. ist nur lösbar für die Werte

$$21.4.: n \cdot \pi = \frac{b \cdot \sqrt{2mE}}{h}, \text{ wobei } n = \text{ganzzahlig und } n \neq 0.$$

Die Energieeigenwerte E als Funktion von n lauten für ein unendlich tiefes Potential:

$$21.5.: E_n = \frac{n^2 \cdot \pi^2 \cdot h^2}{2 \cdot m \cdot b^2}, \text{ mit } n = 1, 2, 3, \dots$$

Die Normierung dieses Problems, also die Integration der Lösungsfunktionen

$$21.6.: W = 1 = \iiint_V \Psi^* \cdot \Psi \cdot d\tau = \int_{x=0}^{x=b} \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) \cdot dx \text{ im Ein - Dimensionalen.}$$

liefert für die Koeffizienten $A=B=(2/b)^{1/2}$.

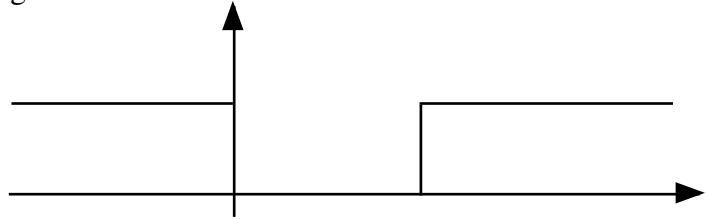
Ist der Potentialtopf mit Wänden der Höhe T umgeben, ändern sich die Lösungen.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Teilchen.

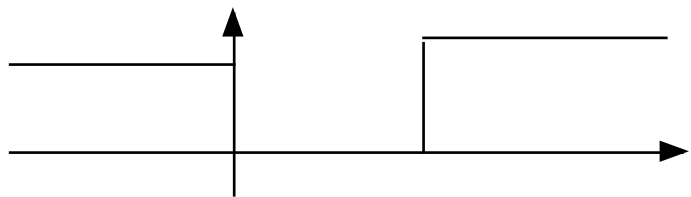
22.: Teilchen in einem eindimensionalen Potentialtopf der Breite b mit variabler endlicher Tiefe.

Das Verhalten eines Teilchens soll untersucht werden, welches in einem Potentialtopf der Breite b , aber mit variabler Tiefe sitzt, wobei die Höhen auf der rechten und auf der linken Seite noch unterschiedlich sein können, siehe Abbildungen:

22.1.: $V(x) = U_0 = 0$ für $0 > x > b$ und
 U_0 für $x < 0$,
 U_0 für $x > b$.



22.2.: $V(x) = U_0 = 0$ für $0 > x > b$ und
 U_1 für $x < 0$,
 U_2 für $x > b$.

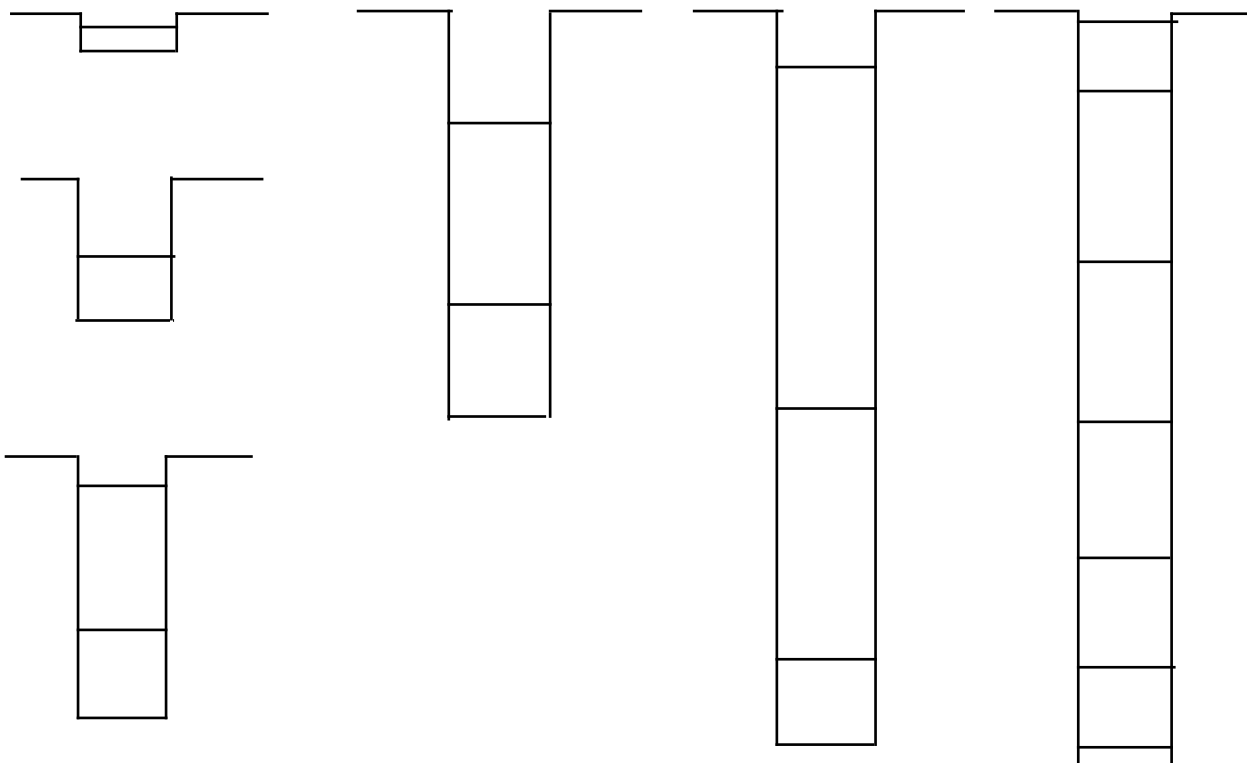


Für die Gebiete I, II und III gelten die Schrödingergleichungen 11.1. und 11.7..
 An den Stellen $x=0$ und $x=b$ müssen die Randbedingungen, d. h., daß die gefundenen Funktionen und deren Ableitungen stetig sein müssen.

Da in den Gebieten I und III das Potential endlich ist, ergeben sich Termschemata, die sich nach Topfbreite und Topfhöhe und der unterschiedlichen Höhe der Seiten voneinander unterscheiden.

Werden gewisse Werte der Breite oder der Höhe dabei unterschritten, sind keine gebundenen Lösungen mehr möglich.

Beispiele sind in der Abbildung skizziert:



Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Teilchen.

23.: Der eindimensionale harmonische Oszillator.

Das Potential des harmonischen Oszillators lautet

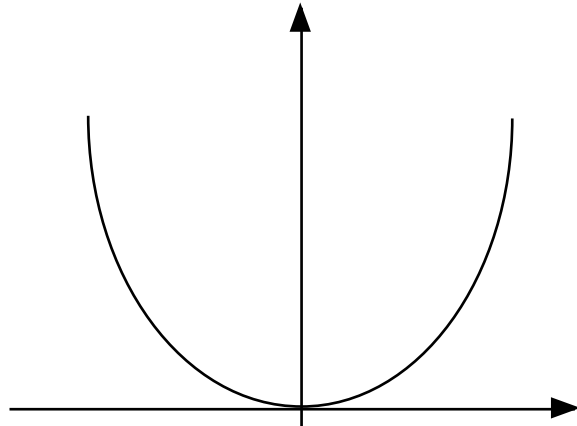
$$23.1.: V(x) = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 \cdot x^2, \text{ wobei } m = \text{Masse,}$$

$\omega = \text{Kreisfrequenz und } x = \text{Auslenkung von } m;$

$$23.2.: \mathbf{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 \cdot x^2$$

mit $\mathbf{p} = \text{Impuls von } m.$

mit dem Hamiltonoperator $\mathbf{H}.$



Die Lösung des Problems des harmonischen Oszillators ist das klassische Beispiel dafür, daß mindestens drei verschiedene mathematische Methoden angewendet werden können:

Eine Lösung der Schrödingergleichung als partielle DGL über Faktorisierung;
eine Lösung mit der Operatorenmethode und schließlich
die Lösung mit der Heisenbergschen Matrizenmechanik.

In der Praxis der Quantenmechanik wird die Methode gewählt, die am einfachsten ist und die am schnellsten zum Ziel führt.

Lösung über die Schrödinger-Gleichung:

Wird in die Gleichung 11.1. oder 11.7. entweder das Potential oder der Hamiltonoperator \mathbf{H} eingesetzt, folgt damit die Schrödingergleichung:

$$23.3.: \psi''(x) + \left[\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2} - \frac{m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2}{\hbar^2} \right] \cdot \psi(x) = 0$$

Mit einem Faktorisierungsansatz aus dem Produkt der beiden Funktionen $f(x)$ und $v(x)$, der hier nicht verfolgt werden soll, erhält man eine gewöhnliche Differentialgleichung für $v(x)$.

Der Faktorisierungsansatz liefert $f(x)$ des dann folgenden Ansatzes:

$$23.4.: \psi(x) = \exp\{f(x)\} \cdot v(x) = e^{f(x)} \cdot v(x).$$

$$23.5.: \psi(x) = \exp\left\{-\frac{1}{2} \cdot \frac{m \cdot \omega \cdot x^2}{\hbar}\right\} \cdot v(x) = e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{m \cdot \omega \cdot x^2}{\hbar}} \cdot v(x).$$

Physikalisch ist dieses Ergebnis verständlich, es bedeutet, daß im Unendlichen beim gebundenen harmonischen Oszillator die schwingenden Teilchen nicht zu finden sind, $f(x)$ als Gauß-funktion sorgt dafür.

Geht man mit diesem Ansatz 23.5. in die Schrödingergleichung 23.3. des harmonischen Oszillators ein, so folgt die DGL für $v(x)$, die zu lösen ist:

$$23.6.: v''(x) - \frac{2xm\omega}{h} \cdot v'(x) + \left(\frac{2mE}{h} - \frac{m\omega}{h} \right) \cdot v(x) = v''(x) - 2x \cdot v'(x) + (k^2 - \lambda) \cdot v(x) = 0$$

$$\text{mit } \lambda = \frac{m \cdot \omega}{h} \text{ und } k^2 = \frac{2 \cdot m \cdot E}{h^2}.$$

Die DGI 23.6. ist eine Variante der Hermiteschen DGL, die in verschiedenen Werken dargestellt sind.

Die Lösung kann über die Methode einer unendlichen Potenzreihe mit folgendem Ansatz gefunden werden:

$$23.7.: v(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \cdot x^j$$

Das Einsetzen von 23.7. in die DGI 23.6 ergibt nach einigen Rechnungen für die a_j die Rekursionsformel

$$23.8.: a_{j+2} = a_j \cdot \frac{\lambda \cdot (2j+1) - k^2}{(j+2) \cdot (j+1)}.$$

Läßt man j gegen Unendlich laufen, erhält man die Reihenentwicklung von $\exp(ax^2)$, so daß keine Normierung möglich ist mit einer Wahrscheinlichkeit $W = 1$. Um eine endliche Wahrscheinlichkeit für den Aufenthaltsort des Teilchens zu erreichen, muß daher die Reihe 23.8. bei einem endlichen Koeffizienten $a_j = 0$ werden, das wird erreicht für ein $j = n$ durch

$$23.9.: k^2 = \lambda \cdot (2n+1),$$

woraus sich mit den gewählten Abkürzungen die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators ergeben zu

$$23.10.: E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \omega \cdot h \text{ für } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen $v(x)$ sind die Hermiteschen Polynome, die unter der Bedingung $W = 1$ normiert werden müssen:

$$23.11.: u_0 = C_0 \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \cdot \lambda \cdot x^2\right\}; u_1 = C_1 \cdot x \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \cdot \lambda \cdot x^2\right\}; u_2 = C_2 \cdot (1 - 2 \cdot \lambda \cdot x^2) \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \cdot \lambda \cdot x^2\right\};$$

$$u_3 = C_3 \cdot \left(x - \frac{2}{3} \cdot \lambda \cdot x^3\right) \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2} \cdot \lambda \cdot x^2\right\};$$

Die Normierungskonstanten sind hier noch nicht angegeben, errechnen sich unter der Bedingen, daß $W=1$ sein muß.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Teilchen.

O.23.: Der eindimensionale harmonische Oszillator. Operatorenmethoden.

Die DGI 23.3. kann wie folgt aufgefaßt werden:

$$O.23.1.: = 23.3.: -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi''(x) + \frac{m}{2} \cdot \omega^2 \cdot x^2 \cdot \psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right] \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Mit den Abkürzungen: $x = q \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m \cdot \omega}}$; $dx = dq \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m \cdot \omega}}$, sowie $dx^2 = dq^2 \cdot \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m \cdot \omega}}\right)^2$,

und $(a^2 - b^2) = (a + b)(a - b)$; durch Einsetzen wird O.23.1.:

$$O.23.2.: \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \left\{ -\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right\} \cdot \psi(q) = E^* \cdot \psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \left(-\frac{d}{dq} + q \right) \cdot \left(+\frac{d}{dq} + q \right) \cdot \psi(q) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$$

= $\hbar \cdot \omega \cdot b^+ \cdot b^- \cdot \psi(q) = E^* \cdot \psi(q)$, wobei

$$b^+ = \frac{\left(-\frac{d}{dq} + q \right)}{\sqrt{2}} = \text{Aufsteige-} \quad \text{und} \quad b^- = \frac{\left(+\frac{d}{dq} + q \right)}{\sqrt{2}} = \text{Absteige-Operator heißt.}$$

Die Berechnung des ersten Ausdrucks der Schrödinger - Operatorgleichung O.23.2. erfolgt unter Beachtung der Reihenfolge bei Operatoren und Veränderung der Reihenfolge:

$$O.23.3.: \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right) \cdot \psi(q) - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \left(+\frac{d}{dq} \cdot q - q \cdot \frac{d}{dq} \right) \cdot \psi(q) = E^* \psi(q) =$$

$$O.23.3.: \hbar \cdot \omega \cdot b^+ \cdot b^- \cdot \psi(q) = E^* \psi(q) = \text{Schrödinger - Operatoren - Gleichung.}$$

dabei machten die folgenden Abkürzungen die Gleichung O.23.3. zur Schrödinger-Operatoren-Gleichung, die Gleichung O.23.4. und O.23.5. ohne Ableitung:

$$O.23.4.: -\frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{d}{dq} q - q \frac{d}{dq} \right) \psi(q) = -\frac{\hbar\omega}{2} \psi(q) \quad \text{und} \quad E^* = E \cdot \frac{\hbar\omega}{2}. \text{ Und}$$

die Vertauschungsrelation der Bose - Operatoren b^- und b^+ lautet:

$$O.23.5.: b^- b^+ - b^+ b^- = 1.$$

Die Berechnung der Energieeigenwerte und der zugehörigen Eigenfunktionen geschieht, indem der tiefste Energiezustand E_0^* und die zugehörige Wellenfunktion in O.23.2. mit dem Operator b^- von links unter Verwendung von O.23.5. multipliziert wird:

$$O.23.6.: \hbar \cdot \omega \cdot b^- \cdot b^+ \cdot b^- \cdot \psi_0(q) = \hbar \cdot \omega \cdot (1 + b^+ \cdot b^-) \cdot b^- \cdot \psi_0(q) = E_0^* \cdot b^- \cdot \psi_0(q).$$

Die Ergebnisse unter Verwendung von O.23.5. lauten

$$O.23.7.: \hbar \cdot \omega \cdot b^+ \cdot b^- \cdot [b^- \cdot \psi_0(q)] = (E_0^* - \hbar \cdot \omega) \cdot b^- \cdot \psi_0(q).$$

Dies steht im Widerspruch zum "tiefsten" Energiezustand 0 im Gegensatz zu dem angenommenen Zustand und ist nur widerspruchsfrei für

$$O.23.8.: 0 = b^- \psi_0(q) = \left(\frac{d}{dq} + q \right) \cdot \psi_0(q), \text{ damit wird erst:}$$

$$0 = \frac{d}{dq} [\psi_0(q)] + q \cdot \psi_0(q), \text{ und somit: } O.23.9.: \psi_0(q) = C \cdot \exp \left\{ -\frac{q^2}{2} \right\} \text{ als}$$

Lösung einer Dgl 1. Ordnung und die Wellenfunktion des energetischen Grundzustandes.

Auf rein algebraischen Wege lassen sich die erlaubten Energiewerte und die zugehörigen Wellenfunktionen errechnen, indem die Operatorengleichung O.23.3. von links mit b^+ multipliziert wird und die Vertauschungsrelation O.23.5. angewandt wird, und es ergibt sich:

$$O.23.10.: b^+ \cdot [\hbar\omega b^+ b^-] \psi_0(q) = b^+ \cdot E^* \psi_0(q) = b^+ \cdot \hbar\omega \cdot [1 + b^+ \cdot \hbar\omega] \psi_0(q), \Rightarrow$$

$$O.23.11.: b^+ \cdot \hbar\omega \cdot b^+ \cdot \hbar\omega \cdot \psi_0(q) = b^+ \cdot [E^* + \hbar\omega] \cdot \psi_0(q).$$

Die ursprüngliche Eigenfunktion wird um eins erhöht und ist ebenfalls eine Eigenfunktion. Die n-fach wiederholte Anwendung dieser Operation ergibt

$$O.23.12.: [b^+]^n \psi_0(q) = \psi_n(q), \text{ mit der Normierung } 1 = W = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(q) \cdot \psi_n(q) dx.$$

Vergleicht man die Gleichungen O.23.2. und O.23.8. unter Hilfe von O.23.4., so ergibt sich:

$$O.23.13.: 0 = b^- \psi_0(q) = \hbar\omega \cdot b^- \cdot b^+ \cdot \psi_0(q) = E^* \psi_0(q) = \left[E - \frac{\hbar\omega}{2} \right] \cdot \psi_0(q).$$

Daraus folgt sogleich für den Grundzustand das bekannte Ergebnis 23.10. für $n=0$; die n-fache Wiederholung ergibt wiederum 23.10.:

$$O.23.14.: n \cdot \hbar\omega = E_n^* = E_n - \frac{\hbar\omega}{2}, \text{ damit } \Rightarrow E_n = \left[n + \frac{1}{2} \right] \cdot \hbar\omega, n = 0, 1, 2, \dots$$

Die Boseoperatoren b^+ und b^- heißen Erzeugungs- oder Aufsteigeoperator b^+ bzw. Vernichtungs- oder Absteigeoperator b^- , da jeweils ein Quant erzeugt bzw. vernichtet wird.

Eine weitere Darstellung, von Dirac stammend, besteht darin, den zugehörigen mehrdimensionalen Hilbertraum durch bra- und ket - Vektoren zu beschreiben (= brackets):

$$\text{bra - Vektor} = \langle \psi_n(q) | \text{ und ket - Vektor} = | \psi_n(q) \rangle.$$

Wie bereits erwähnt, lassen sich auch die Eigenfunktionen algebraisch ermitteln und mit der Normierungsvorschrift O.23.12. die Größe der Konstanten, hier wäre selbst zu rechnen oder die Literatur zu konsultieren.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Teilchen.

M.23.: Der eindimensionale harmonische Oszillator. Matrizenmethoden.

Die Heisenbergsche Matrizenmechanik:

Die Schrödingergleichung ist ein Problem der Lösung von partiellen DGL, oder von Operatoren.

Versucht man, die sich ergebenden physikalischen Zustände (= Meßergebnisse) direkt aufzuschreiben und damit mathematisch umzugehen, so hat man es in einfachen Fällen mit der Heisenbergsche Matrizenmechanik zu tun. Der Ausgangspunkt für die Heisenbergsche Matrizenmechanik kann die Schrödingergleichung als partielle DGL oder auch als Operatorenleichung sein. Zu dieser Methode gibt es umfangreiche Literatur.

Mit der klassischen potentiellen Energie $V(x)$ eines schwingenden Teilchens ohne Dämpfung ergibt sich die Schrödingergleichung 23.3. mit einem Hamiltonoperator:

$$M.23.1.: \mathbf{H} = \left[\frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right], \text{ wobei } V(x) = \frac{m}{2} \cdot \omega^2 \cdot x^2 \text{ ist.}$$

Die DGL der Bewegung dieses Teilchens ohne Reibung lautet über $\sum \mathbf{F}_i = \mathbf{0}$:

$$M.23.2.: \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \omega^2 \cdot x(t) = 0 \Leftrightarrow \frac{d^2 x}{dt^2} + \omega^2 \cdot x = 0, \text{ in Matrixschreibweise}$$

$$M.23.3.: \left\{ \frac{d^2 x}{dt^2} \right\}_{mn} + \omega^2 \cdot \{x\}_{mn} = 0 \text{ mit der Lösung } \{x(t)\}_{mn} = C_{nm} \cdot \exp\{i\omega_{nm}t\}.$$

mit den Matrixelementen der Beschleunigung

$$M.23.4.: \left\{ \frac{d^2 x}{dt^2} \right\}_{mn} = i \cdot \omega_{mn} \cdot \left\{ \frac{dx}{dt} \right\}_{mn} = -\omega_{mn}^2 \cdot \{x\}_{mn} = -\omega_{mn}^2 \cdot x_{mn}.$$

damit

$$M.23.5.: [\omega_{mn}^2 - \omega^2] \cdot x_{mn} = 0. \text{ Alle Matrixelemente } x_{mn} = 0, \text{ oder es ist } [] = 0, \text{ d. h. : } \omega_{mn} = \pm\omega.$$

Die stationären Zustände des Oszillators werden so numeriert, daß die einzelnen Frequenzen zu den Übergängen n gehören, nur damit sind die Matrixelemente verschieden von Null:

$$\text{Frequenzen } \pm\omega \text{ entsprechen Übergängen } n \rightarrow (n \pm 1), \Rightarrow \omega_{n,n\pm 1} = \pm\omega, \text{ damit } x_{n,n\pm 1} \neq 0.$$

Die Schrödingerwellenfunktionen sind reell, damit auch alle Matrixelemente x_{mn} , damit muß die Matrix symmetrisch sein: $x_{mn} = x_{nm}$.

Es gilt ebenfalls die Vertauschungsrelation 13.11., in Impuls- und Ortskoordinatenschreibweise geschrieben:

$$M.23.6.: pq - qp = px - xp = i \cdot \hbar, \text{ oder : } \left\{ \frac{dx}{dt} \right\}_x - x \left\{ \frac{dx}{dt} \right\} = -i \cdot \frac{\hbar}{m}, \text{ in Matrixschreibweise :}$$

$$M.23.7.: \left[\left\{ \frac{dx}{dt} \right\} \cdot x \right]_{mn} - \left[x \cdot \left\{ \frac{dx}{dt} \right\} \right]_{mn} = -i \cdot \frac{\hbar}{m} \cdot \delta_{mn}, \text{ mit } \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{für } n \neq m, \\ 1, & \text{für } n = m \end{cases} = \text{Kroneker-Symbol.}$$

Die Multiplikation der Matrizen liefert für $m = n$ den Wert:

$$M.23.8.: \quad i \cdot \sum_l [\omega_{nl} x_{nl} x_{ln} - x_{nl} \omega_{ln} x_{ln}] = 2 \cdot i \cdot \sum_l \omega_{nl} x_{nl}^2 = -i \cdot \frac{\hbar}{m}, \text{ mit Summierung über } l.$$

Nur die Summanden mit $l = n \pm 1$ sind von Null verschieden:

$$M.23.9.: \quad [x_{n+1,n}]^2 - [x_{n,n-1}]^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \text{ mit } [x_{n+1,n}]^2 = \text{arithmetische Reihe, beschränkt nach unten.}$$

Es gibt also einen willkürlich auswählbaren Wert n , der dem Grundzustand des harmonischen Oszillators zugeordnet werden kann und der gleich Null gesetzt wird, also ist

$$M.23.10.: \quad [x_{n,n-1}]^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}, \text{ da ja } x_{0,-1} \equiv 0 \text{ sein soll und M.23.9. wiederholt für } n = 0, 1, 2, \dots \text{ wird.}$$

Die einzelnen, von Null verschiedenen, Matrixelemente lauten somit

$$M.23.11.: \quad x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}.$$

Die Matrix von \mathbf{H} ist diagonal und die Matrixelemente H_{nm} sind die gesuchten Energieeigenwerte des harmonischen quantenmechanischen Oszillators:

$$\begin{aligned} M.23.12.: \quad H_{nn} = E_n &= \frac{m}{2} \cdot \left\{ \left[\frac{d^2 x}{dt^2} \right]_{nn} + \omega^2 \cdot [x^2]_{nn} \right\} = \frac{m}{2} \cdot \left\{ \sum_l i\omega_{nl} x_{nl} i\omega_{ln} x_{ln} + \omega^2 \cdot \sum_l x_{nl} x_{ln} \right\} \\ &= \frac{m}{2} \cdot \sum_l \{ \omega^2 + \omega_{nl}^2 \} \cdot x_{ln}^2 \end{aligned}$$

Es wird erneut summiert, von Null verschieden sind nur die Werte mit $l = n \pm 1$, mit M.23.11. in M.23.12.:

$$M.23.13.: \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \cdot \omega \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, 3, \dots \text{ und } E_0 = \frac{\hbar \cdot \omega}{2}.$$

Die Energieniveaus haben einen äquidistanten Abstand und ergeben für $n = 0$ den Energieeigenwert E_0 des Grundzustandes, der von Null verschieden ist.

Weitere Anwendungen der Matrixmethode ergeben auch noch die Eigenfunktionen, die Hermite'sche Polynome sind, siehe oben.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Teilchen.

24.: Das Keplerproblem und das Wasserstoff-Atom.

Für die Schrödingergleichung 12.3. wird das Potential V beim Wasserstoff (= H) - Atom mit dem Hamilton Operator \hat{H} als kugelsymmetrisches Problem in Kugelkoordinaten gelöst:

$$24.1.: \nabla^2 \Psi(x, y, z) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \left[E + \frac{q^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right] \Psi(x, y, z) = 0, \Leftrightarrow \nabla^2 \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \left[E + \frac{q^2}{R} \right] \Psi = 0$$

mit $V(R) = -\frac{q^2}{R}$, R = Entfernung der Ladung q vom Atomkern.

In Kugelkoordinaten geschrieben:

$$24.2.: \frac{1}{R} \cdot \frac{\partial^2 (R\Psi)}{\partial R^2} + \frac{1}{R^2} \cdot \left\{ \frac{1}{\sin\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial\beta} \left[\sin\beta \cdot \frac{\partial\Psi}{\partial\beta} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \left[E + \frac{q^2}{R} \right] \Psi + \frac{1}{\sin^2\beta} \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial\alpha^2} \right\} = 0,$$

mit $\Psi(r, \alpha, \beta)$ in den üblichen Kugelkoordinaten.

Die Lösung dieser Gleichung 24.2. geschieht durch Faktorisierung mit dem Ansatz:

$$24.3.: \Psi(\alpha, \beta, R) = A(\alpha) \cdot B(\beta) \cdot f(R) = Y_{l,m}(\alpha, \beta) \cdot f(R), \text{ wobei die}$$

$Y_{l,m}(\alpha, \beta)$ = Kugelflächenfunktionen genannt werden.

Zuerst sei von der Winkelabhängigkeit abgesehen und die möglichen Energieeigenwerte nur vom Abstand R vom Atomkern (punktförmig mit der Ladung q gedacht) betrachtet, dann wird 24.3. zu:

$$24.4.: \frac{1}{R} \cdot \frac{d^2 [R \cdot \psi(R)]}{dR^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{q^2}{R} \right] \cdot \psi(R) = 0$$

Wählt man die nachfolgenden Abkürzungen, so geht die Gleichung über in:

$$24.5.: \frac{d^2 [r \cdot \psi(r)]}{dr^2} + \left[e + \frac{2}{r} \right] \cdot \psi(r) = 0, \text{ mit } R = \frac{\hbar^2}{mq^2} \cdot r, E = \frac{mq^4}{2\hbar^2} \cdot e, \text{ wobei}$$

$$R_B = \text{Bohr - Radius} = \frac{\hbar^2}{mq^2} = 0,528 \text{ Angström; } E_{Rb} = \text{Rydbergenergie} = \frac{mq^4}{2\hbar^2}$$

= 13,6 eV, der Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms.

Diese Gleichung 24.5. geht über in die zu lösenden DGI für r

$$24.7.: \frac{d^2 [f(r)]}{dr^2} + \left[e + \frac{2}{r} \right] \cdot f(r) = 0, \text{ mit } f(r) = [r \cdot \psi(r)] \Leftrightarrow \frac{d^2 f}{dr^2} + \left[e + \frac{2}{r} \right] \cdot f = 0, \text{ die mit dem}$$

Ansatz : $f(r) = g(r) \cdot \exp\{-ar\}$ gelöst wird.

Physikalisch bedeutet dies, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons um das Proton (= H - Atom) im Unendlichen gegen Null gehen soll, entsprechend einem gebundenen Zustand des Elektrons.

$$24.8.: \frac{d^2g}{dr^2} - 2a \cdot \frac{dg}{dr} + \left[a^2 + e + \frac{2}{r} \right] \cdot g = 0 \text{ mit einem } a = \text{frei wählbar.}$$

$$24.9.: \frac{d^2g}{dr^2} - 2a \cdot \frac{dg}{dr} + \frac{2}{r} \cdot g = 0 \text{ mit } a^2 = -e.$$

Diese DGI 24.8. kann in der üblichen Weise mit einem Potenzreihenansatz für $g(r)$ gelöst werden:

$$\text{Mit : } g(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j \cdot r^j \Rightarrow \sum_{j=0}^{\infty} \{ j[j-1]b_j r^{j-2} - 2ajb_j r^{j-1} + 2b_j r^{j-1} \} = 0 \Leftrightarrow$$

$$24.10.: \sum_{j=0}^{\infty} \{ j[j+1]b_{j+1} - 2ajb_j + 2b_j \} r^{j-1} = 0. \text{ (Durch Veränderung des Summationsindex!)}$$

Diese Reihe 24.10. muß für alle Werte von r Null ergeben; es folgt damit eine Rekursionsformel für die Koeffizienten:

$$24.11.: b_{j+1} = b_j \cdot 2 \cdot \frac{a \cdot n - 1}{j \cdot (j+1)}.$$

Für große Werte von: j wird der Koeffizient in 24.11. gleich den Koeffizienten der Taylorentwicklung von einer Funktion $\exp(+2ar)$.

Mit dem Faktorierungsansatz 24.7. $f(r) = g(r) \exp(+ar)$ wachsen die Lösungsfunktionen über alle Grenzen und $f(r)$ ist nicht mehr normierbar mit: $W = 1$.

Die Koeffizienten von 24.11. müssen also für Werte $j = n$ und größer alle gleich Null werden:

$$24.12.: b_{n+1} = 0 = b_n \cdot \frac{2 \cdot (a \cdot n - 1)}{n \cdot (n+1)} \quad \text{für : } a \cdot n - 1 = 0.$$

Dieses gilt für: $n = 1, 2, 3, \dots$ und setzt man wieder: $-e = a^2$ wie oben ein, so folgt als Ergebnis:

$$24.13.: E_n = \frac{1}{n^2} \cdot \frac{m \cdot e^4}{2h^2} = \frac{1}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV}, \Leftrightarrow -e = \frac{1}{n^2} = E_n \cdot 2 \cdot \frac{h^2}{m \cdot e^4}.$$

Dies ist das Termschema des Wasserstoffatoms mit n als „Schalen“-Angabe, darin enthalten sind die typischen Serien mit Namen wie Balmer-, Lyman- und Paschen Serie u. a. und dem richtigen Wert des Ionisierungspotentials, welches nur aus Konstanten errechnet wird.

Die radialen Eigenfunktionen ergeben sich damit zu

$$24.14.: \psi_n(r) = \frac{f_n(r)}{r} = g_n(r) \cdot \frac{\exp\left\{-\frac{r}{n}\right\}}{r}, \text{ mit } g_n(r) = \sum_j b_j \cdot r^j.$$

Die vollständige Lösung unter Einbeziehung der Winkelkoordinaten muß den Ansatz 24.3. in die Gleichung 24.2. einführen, damit können die Kugelflächenfunktionen berechnet werden, was hier nicht durchgeführt werden soll, siehe Literatur.

Es ergeben sich zwei weitere Quantenzahlen: l und: m , die den Zustand der Elektronen im Atom charakterisieren.

Im nachfolgenden werden einige normierte Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms angegeben:

24.15.: $n \quad l \quad m \quad \psi_{nlm}$

$$1 \quad 0 \quad 0 \quad \psi_{100} = \frac{\sqrt{x^3}}{\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\}$$

$$2 \quad 0 \quad 0 \quad \psi_{200} = \frac{\sqrt{x^3}}{4\sqrt{2} \cdot \pi} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot [2 - xR]$$

$$2 \quad 1 \quad 0 \quad \psi_{210} = \frac{\sqrt{x^3}}{4\sqrt{2} \cdot \pi} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot xR \cdot \cos \alpha$$

$$2 \quad 1 \pm 1 \quad \psi_{21\pm 1} = \frac{\sqrt{x^3}}{8\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot xR \cdot \sin \alpha \cdot \exp\{\pm i\beta\}$$

$$3 \quad 0 \quad 0 \quad \psi_{300} = \frac{\sqrt{x^3}}{81\sqrt{3\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot [27 - 18xR + 2x^2R^2]$$

$$3 \quad 1 \quad 0 \quad \psi_{310} = \frac{\sqrt{2}\sqrt{x^3}}{81\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot xR \cdot [6 - xR] \cdot \cos \beta$$

$$3 \quad 1 \pm 1 \quad \psi_{31\pm 1} = \frac{\sqrt{x^3}}{81\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot xR \cdot [6 - xR] \cdot \sin \beta \cdot \exp\{\pm i\alpha\}$$

$$3 \quad 2 \quad 0 \quad \psi_{320} = \frac{\sqrt{x^3}}{81\sqrt{6\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot x^2R^2 \cdot [3\cos^2 \beta - 1]$$

$$3 \quad 2 \pm 1 \quad \psi_{32\pm 1} = \frac{\sqrt{x^3}}{81\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot x^2R^2 \cdot \sin \beta \cdot \cos \beta \cdot \exp\{\pm i\alpha\}$$

$$3 \quad 2 \pm 2 \quad \psi_{32\pm 2} = \frac{\sqrt{x^3}}{162\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left\{-\frac{y}{2}\right\} \cdot x^2R^2 \cdot \sin^2 \beta \cdot \exp\{\pm i2\alpha\}$$

Dabei werden die folgenden Abkürzungen verwandt:

$$24.16.: \quad x = \frac{Z}{a_0^*} \quad \text{und} \quad y = \frac{2ZR}{na_0^*}. \quad Z = \text{Zahl der positiven Kernladungen};$$

$$a_0^* = \text{atomare Längeneinheit} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = \frac{4p\hbar^2 e_0}{m \cdot q^2}.$$

Anmerkungen: Dies ist nur eine Näherungsrechnung des H - Atoms, da die Atomkernmasse m_K als unendlich groß angenommen wurde und die Masse der Elektrons m_E damit ebenso vernachlässigt wurde, wie die Schwerpunktsbewegung der Massen des Elektrons wie des Protons um ein gemeinsames Schwerzentrum.

Es wurden ebenfalls keine relativistischen und keine wechselwirkenden Effekte berücksichtigt. Diese zuletzt genannten relativistischen Effekte ergeben dann unter anderem als vierte und letzte Quantenzahl den Spin des Elektrons.

Ist die Ladung des Kerns z-fach größer als die Elementarladung q , so ist dies im Potential $V(R)$ durch Multiplikation mit der Kernladung Zq zu berücksichtigen. Bis zu einem gewissen Grade können wasserstoffähnliche Atome (Abschirmung der Kernladung durch eine Elektronenhülle mit einem Außenelektron wie z. B. die Alkaliatome und ein- oder mehrfach ionisierte Atome) mit Korrekturen ebenfalls durch die angegebene Formeln richtig beschrieben werden.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Mehrteilchen.

31.: Die chemische Bindung.

Die Quantentheorie liefert natürlich auch alle die bekannten Arten der chemischen Bindungen, indem der Hamiltonoperator \mathbf{H} geeignet gewählt wird.

Die sich darbietenden Aufgaben sind sehr komplex und nur mit Näherungsmethoden lösbar, die z. T. seit langem bekannt sind und entsprechend den Anforderungen weiterentwickelt werden (es gibt sowohl Lehrbuch wie PC - Versionen).

Mit diesen verschiedenen \mathbf{H} 's und bei Kenntnis der verschiedenen Potentiale entsprechender Atome ergeben sich die bekannten chemischen Bindungsarten, wie die ionische, die kovalente oder homopolare, die metallische, die van-der-Waals, die Wasserstoffbrücken- und alle anderen Bindungsarten.

Wesentlich dabei bleibt, daß die Näherungsrechnungen stets - wie bei allen theoretischen Modellen - mit den Ergebnissen der Experimente verglichen werden müssen und eine wechselseitige Befruchtung zwischen Experiment und Theorie eintritt und ggf. auch Korrekturen aller Art möglich werden.

Dabei darf bei den Rechnungen nicht außer acht gelassen werden, daß der Spin der Elektronen ebenso eine Rolle spielt, wie die verschiedenen Wechselwirkungen aller teilnehmenden Partner inklusive des Atomkerns (Hyperfeinstruktur der Spektrallinien z. B.), elektrischer und magnetischer Felder, etc..

Es gibt zu diesem Bereich, der weit in die theoretische Biologie und Chemie hineinreicht, bedeutende und grundlegende moderne Literatur, die bei Interesse oder Notwendigkeit konsultiert werden sollte.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Mehrteilchen.

32.: Moleküle und Molekülspektren.

Moleküle oder deren Ionen bestehen in neutraler oder in ionisierter Form aus mindestens zwei gebundenen gleichartigen oder verschiedenartigen Atomkernen (z. B. H₂, H Cl), die im neutralen Zustand sovielen zugehörige Elektronen mit sich tragen, wie sich Protonen in den beteiligten Atomkernen befinden.

Im neutralen Zustand wie auch als positive oder negative Ionen stellen sie quantenmechanische Vielkörperprobleme dar, welche nur über verschiedene, jedoch ziemlich komplexe Näherungsrechnungen lösbar sind, die zum Beispiel Born - Oppenheimer - Näherungen genannt werden.

Es gibt aber einige grundsätzliche Energiezustände von Molekülen und Ionen, die in verdünntem Zustand von Atomen und von Molekülen zum Beispiel in der Gasphase bei entsprechender Energiezufuhr auftreten können, nämlich Anregungen der äußerer oder innerer Elektronen, von Rotationen der Atome und Moleküle um verschiedenen Raumachsen und zahlreiche Schwingungsmöglichkeiten der Atomrümpfe gegeneinander.

Um einen Anhalt zu haben über diese Größenordnungen der dabei auftretenden Energien, folgt eine Abschätzung dieser Energien, bei atomen, Molekeln oder Ionen in eV.

1. Die Translationsenergie eines freien Teilchens kann mit klassischen oder auch mit quantenmechanischen Regeln entsprechend seinen Massen und den angelegten Energien berechnet werden und kann von Bruchteilen von eV bis zu mehr als GeV bei kosmischen Teilchen reichen:

$$32.1.: E_T = \frac{p^2}{2 \cdot m} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 \text{ mit } m, \mathbf{p} \text{ und } v = \text{Masse, Impuls und Geschwindigkeit des Teilchens.}$$

2. Die elektronischen Energien E_e ergeben sich aus dem Keplerproblem für das Wasserstoffatom zu

$$32.2.: E_e \approx E_1 = 13,6 \text{ eV, mit } E_n = \frac{13,6}{n^2} \text{ eV} \Rightarrow E_2 = \frac{1}{4} \cdot 13,6 \text{ eV} = 3,5 \text{ eV.}$$

liegen also im Allgemeinen bei einigen eV.

3. Die Schwingungsenergien: Über die Energien des harmonischen Oszillators

$$32.3.: E_n = h \cdot \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \text{ mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Abgeschätzt werden muß mit m als Molekülmasse die "atomare Federkonstante" k .

Die Schwingungsenergie ist etwa E_S = C k R² mit R etwa Molekülgröße. Die Dissoziationsenergie ist etwa E_e, daraus folgt für die Energiedifferenzen E_{n+1} - E_n des harmonischen Oszillators

$$32.2.: E_{n+1} - E_n = h \cdot \sqrt{\left[\frac{E_e}{R^2 \cdot M} \right]} = 0,1 \text{ eV} \cdot \sqrt{\left[\frac{M}{m} \right]} \text{ mit } 10^{-4} < \frac{m}{M} < 10^{-3}.$$

4. Die Rotationsenergien: E_{rot} ergeben sich aus den Energieeigenwerten der Rotation zu etwa

$$32.4.: E_r = h \cdot \left[\frac{l \cdot (l+1)}{2 \cdot I} \right] = h \cdot \left[\frac{l \cdot (l+1)}{2 \cdot m \cdot r^2} \right] = \frac{m \cdot E_e}{M} = 10^{-3} \text{ eV}.$$

Sollen also diese drei verschiedenen Moden eines Moleküls z. B. durch elektromagnetische Resonanzstrahlung angeregt werden, so erkennt man, daß Ionisation und elektronische Anregungen im blauen oder ultravioletten, daß Schwingungen im roten oder ultraroten und Rotationen im Mikrowellenbereich des elektromagnetischen Spektrums angesiedelt sind.

Hinzuzufügen ist, daß es zwischen diesen unterschiedlichen Anregungen sowohl Kopplungen wie Übergänge gibt.

Untersuchung von Beispielen der elementaren QM: Gebundene Mehrteilchen.

33.: Das Bändermodell und der Festkörper.

Werden die Potentiale der atomaren Kerne dreidimensional regelmäßig wiederholt, ergeben sich Lösungen der Schrödinger - Gleichungen 1. und 2., die verschiedene Eigenschaften und Formen des Festkörpers oder von Riesenmolekülen (Polymere) beschreiben können.

Da es auf unterschiedlichem Niveau ausgezeichnete Literatur zur quantenmechanischen Behandlung der Festkörperprobleme gibt, wird hier nur die physikalische Idee skizziert.

Es werden die Schrödinger - Gleichungen 1. bzw. 2. zugrunde gelegt, der zugehörige Hamiltonoperator \mathbf{H} muß angegeben und die zugehörigen erlaubten Energieeigenwerte und -funktionen aufgesucht und berechnet werden.

Physikalisch kann man von weit entfernten Atomen und Molekülen, d. h. Atomen und Molekülen in der Gasphase mit ihren Energiemoden ausgehen und sich überlegen, was mit den erlaubten diskreten Energieeigenwerten geschieht, wenn gleichartige oder voneinander verschiedene Atome und Moleküle zu festeren Verbänden agglomerieren:

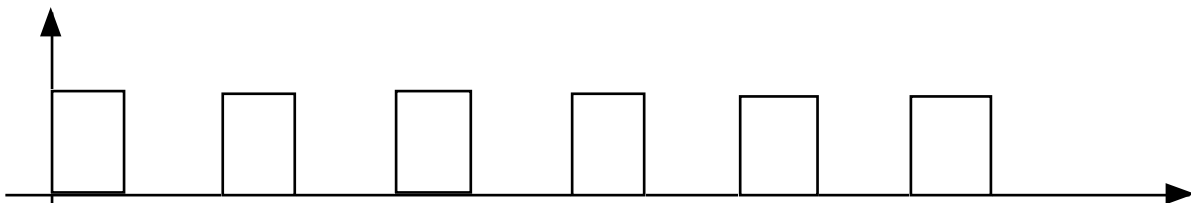
Die erlaubten und besetzten Energieniveaus z. B. gleichartiger Atome werden proportional der Zahl der atomaren Teilnehmer größer, die Energieniveaus verbreitern sich und werden quasikontinuierlich (erlaubte Bänder), in den Zwischenräumen ist für die teilnehmenden Elektronen, die dem gesamten Aggregat zugehören können oder werden, aus quantenmechanischen Gründen "kein Platz" (verbotene Bänder) vorhanden.

Die Breite dieser Bänder, deren Besetzungszustand und die Abstände der Bänder voneinander entscheiden darüber, ob ein Halbleiter, ein Leiter oder ein Metall etc. vorliegt. Die im Festkörper vorhandene elektronische komplexe Oberfläche ist die Material- und temperaturabhängige mehrdimensionale Fermifläche.

Die räumliche Wiederholung eines im einfachsten Falle gleichen Potentials $V(x)$

33.1.: $V(x) = V(x + a)$ mit $a = \text{Abstand der Potentiale} = \text{Gitterabstand}$.

ergibt bereits im Eindimensionalen die wesentlichen Erkenntnisse, die für einen Festkörper typisch sind, siehe Abbildung:



Durch Einsetzen des periodischen Potentials in die Schrödingergleichung 2 ergibt sich eine Lösung der Form, hier noch ohne mathematischen Beweis, wobei wegen der Randbedingungen gelten muß:

33.2.: $\psi(x) = \psi(x + a)$ mit $\int_V \psi^*(x) \cdot \psi(x) \cdot d\tau = W = 1 = \text{normierbar}$.

Eine Funktion $\psi(x)$ ist eine Linearkombination der beiden Lösungen von (2), die selbst ein lineares Gleichungssystem bilden.

Nach einigen Umrechnungen und physikalischen Überlegungen wird klar, daß die physikalische sinnvolle Lösung für das periodische Potential $V(x)$ die beiden **Blochtheoreme** 33.3. erfüllen muß, weil die Situation jedes Teilchens bei sich unendlich wiederholenden Potentialen $V(x)$ stets

hinsichtlich der Nachbarn dieselbe ist:

33.2.: $v(x) = v_{\mathbf{K}}(x) \cdot \exp\{i\mathbf{K}x\}$ mit der periodischen Funktion :

33.3.: $v_{\mathbf{K}}(x) = v_{\mathbf{K}}(x + a)$; wobei $a = \text{Abstand der Potentiale}$; $\mathbf{K} = \text{Ausbreitungsvektor}$.

Aus diesen Lösungen lassen sich bei dem vorgegebenen periodischen Potential die möglichen Energieniveaus berechnen, es ergeben sich schließlich lineare Gleichungssysteme mit einer Lösungsstruktur aus $v(x) = A u_1(x) + B u_2(x)$, aus denen A und B berechnet werden muß:

$$33.4.: \cos Ka = \frac{[u_1(0) \cdot u_2'(a) + u_1(a) \cdot u_2'(0)] - [u_2(0) \cdot u_1'(a) + u_2(a) \cdot u_1'(0)]}{2 \cdot [u_1 \cdot u_2' - u_1' \cdot u_2]} \leq 1,$$

die Nennerwronski – Determinante $\neq f(x)$, $K \in \text{reelle Zahlen}$.

Damit ergeben sich aus den reellen Lösungen der Gleichung (33.4) die erlaubten und die verbotenen Energieeigenwerte (Bänder), wie bereits oben erläutert wurde mit den Grenzen $|\cos Ka| = 1$.

Für das spezielle periodische rechteckige Potential $V(x) = U$ mit der Breite b mit den Potentialabständen a und der Periodenlänge $l = a + b$, siehe die oben dargestellte Abbildung, d. h.:

$$33.5: V(x) = \begin{cases} U & \text{für } nl - b < x \leq nl \text{ und} \\ 0 & \text{für } nl \leq x < nl + a. \end{cases}$$

mit den numerischen Werten $a=b$ und den Abkürzungen, siehe auch das eindimensionale Teilchen an der Potentialwand sollen detaillierte Rechnungen durchgeführt werden, mit:

$$ma^2U = 2\hbar^2; \text{ sowie } : k^2 \cdot \hbar^2 = 2mE \text{ und } \kappa^2 \cdot \hbar^2 = 2m[U - E].$$

Mit dem folgenden Lösungsansatz:

$$u(x) = \begin{cases} A_1 \cdot \exp\{\kappa x\} + B_1 \cdot \exp\{-\kappa x\} & \text{für } -b \leq x \leq 0; \\ A_2 \cdot \exp\{kx\} + B_2 \cdot \exp\{-kx\} & \text{für } 0 \leq x \leq a; \\ [A_1 \cdot \exp\{\kappa(x-l)\} + B_1 \cdot \exp\{-\kappa(x-l)\}] \cdot \exp\{iKl\} & \text{für } a \leq x \leq l; \\ [A_2 \cdot \exp\{k(x-l)\} + B_2 \cdot \exp\{-k(x-l)\}] \cdot \exp\{iKl\} & \text{für } l \leq x \leq l+a. \end{cases}$$

den Stetigkeitsbedingungen für die Funktionen $u(x)$ und der Berechnung der Koeffizienten A_1, A_2, B_1 und B_2 folgt schließlich nach einigen Rechnungen die Beziehung:

$$33.6.: \cos(K \cdot l) = \cos(k \cdot a) \cdot \cosh(\kappa \cdot b) + \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \cdot \sin(k \cdot a) \cdot \sinh(\kappa \cdot b) \text{ mit } |\cos(K \cdot l)| \leq 1$$

Die Gleichung 33.6. ergeben sich die Energiebänder für die Beziehung $E < U$.

Ist jedoch $E > U$, so geht 33.6. über in

$$33.7.: \cos(K \cdot l) = \cos(k \cdot a) \cdot \cos(\sigma \cdot b) + \frac{\sigma^2 + k^2}{2\sigma k} \cdot \sin(k \cdot a) \cdot \sinh(\sigma \cdot b) \text{ mit } \kappa = i \cdot \sigma.$$

QT33 - Seite 3 -

Die Gleichungen 33.6. und 33.7. zeigen das folgende Verhalten:

In 33.6. sind nur für bestimmte Energiewerte alle anderen Werte und deren Umgebung verboten:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[\frac{n\pi}{a} \right]^2 < U$$

Die Gleichung 33.7. ergibt ebenfalls verbotene Energiewerte:

$$33.8.: \cos(K \cdot l) = \cos(k \cdot a + \sigma \cdot b) - \frac{(k - \sigma)^2}{2\sigma k} \cdot \sin(k \cdot a) \cdot \sin(\sigma \cdot b)$$

aus $ka + \sigma b = n\pi \Rightarrow ka = n\pi - \varphi$, wobei mit $\sigma \cdot b = \varphi$

$$\cos(K \cdot l) = (-1)^n - \frac{(k - \sigma)^2}{2\sigma k} \cdot (-1)^{n+1} \cdot \sin^2 \varphi, \text{ weiter } \Rightarrow$$

$$\cos(K \cdot l) = (-1)^n \left[1 + \frac{(k - \sigma)^2}{2\sigma k} \cdot \sin^2 \varphi \right] \text{ mit } \left[1 + \frac{(k - \sigma)^2}{2\sigma k} \cdot \sin^2 \varphi \right] > 1.$$

Für Energien $E > U$ ist das umgebende Band verboten, der Bruch in der Klammer wird mit wachsender Energie immer kleiner, damit die verbotenen Zonen immer schmaler.

Sind die Potentialberge sehr hoch wie z.B. beim Coulombpotential von Atomen, dann kann 33.6. näherungsweise geschrieben werden als:

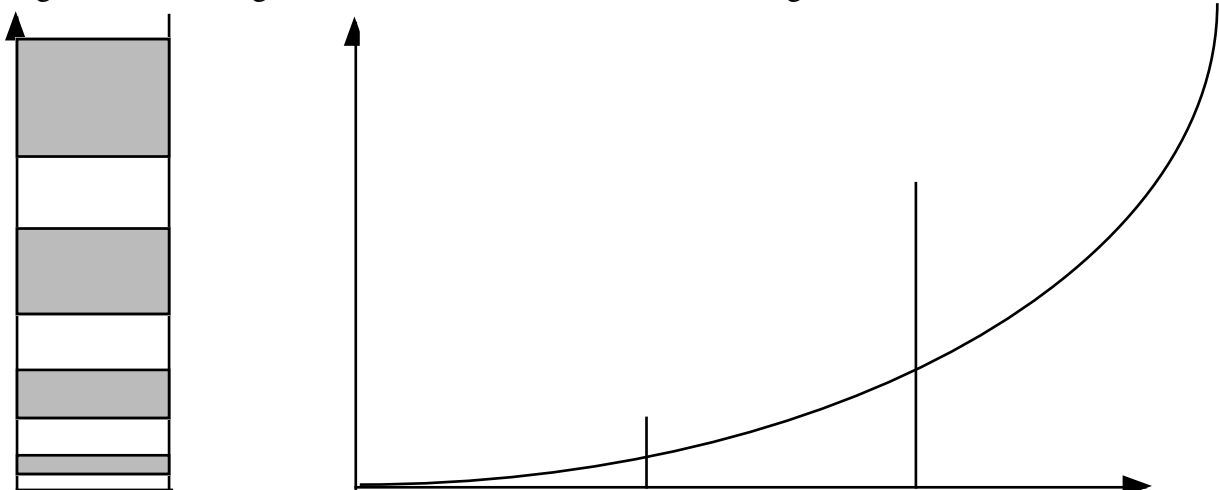
$$33.9.: \left| \cos(k \cdot a) + \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \cdot \sin(k \cdot a) \right| \leq 2 \exp\{-\kappa \cdot b\} \leq 1.$$

Diese Ungleichung ist in schmalen Zonen um die Nullstellen der linken Seite von 33.9. erfüllt.

Je tiefer die erlaubten Energiebänder liegen, desto schmaler werden diese, physikalisch werden die Potentialtöpfe entkoppelt, die Teilchen (=Elektronen im Festkörper) bleiben in ihnen stecken und tunneln wesentlich schwerer.

Die ausführlichen Rechnungen und deren physikalischen Interpretationen sind Lehrbüchern der Festkörperphysik zu entnehmen.

Die folgenden Abbildungen versuchen eine Illustration des soeben gerechneten:



Untersuchung von Teilchen der elementaren Quantentheorie: Störungstheorien und Strahlung.

34. Methoden der Störungstheorie.

IV. Die Quantenmechanik und die Relativitätstheorie.

41. Die Klein - Gordon - Gleichung.

Vorbemerkung: Die Quantentheorie kann bislang nur Einsteins spezielle Relativitätstheorie einbeziehen, eine Kopplung der Quantentheorie mit der allgemeinen Relativitätstheorie Einsteins ist bislang noch nicht gelungen, daran wird gearbeitet.

Ersetzt man in der nichtrelativistischen Gleichung $E = p^2 / 2m$ die Energie E und den Impuls $p = m \cdot v$ durch die anfangs angegebenen Operatoren für E_{Op} und p_{Op} , so folgt aus dieser Beziehung die Schrödingergleichung (1).

Die nichtrelativistische Energiegleichung $E = p^2 / 2m$ muß jedoch durch die relativistische Gleichung ersetzt werden (Einfügen der speziellen Relativitätstheorie):

$$E^2 = c^2 \cdot p^2 + m^2 \cdot c^4$$

Mit dem Einsetzen der Operatoren für E und für p folgt die Klein-Gordon-Gleichung:

$$41.1: \hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \Psi(r,t) = -c^2 \cdot \hbar^2 \cdot \nabla^2 \Psi(r,t) + m^2 \cdot c^4 \cdot \Psi(r,t)$$

die nicht mehr eine Partielle Differential Gl 1. Ordnung in der Zeit t und 2. Ordnung in den Ortskoordinaten r wie (1) ist und die nach ihrer Entdeckung beträchtliche Schwierigkeiten erzeugt hat.

Die Lösung der Klein-Gordon-Gleichung (41.1) lautet:

$$41.2: \Psi(r,t) = \exp i \cdot (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \text{ mit } \hbar^2 \cdot \omega^2 = \hbar^2 \cdot c^2 \cdot k^2 + m^2 \cdot c^4 \text{ und } E = \hbar \cdot \omega, \text{ sowie } \mathbf{p} = \hbar \cdot \mathbf{k}$$

Die Klein-Gordon-Gleichung liefert negative Energiewerte und auch Wahrscheinlichkeiten, durch die Klein-Gordon-Gleichung werden nur Translationsbewegungen von Teilchen mit dem Spin Null in der Raum-Zeit beschrieben (Mesonen), dazu muß u. a. eine Lorentz - invariante Kontinuitätsgleichung erfüllt sein.

42. Die Dirac - Gleichung.

Zur Vermeidung negativer Wahrscheinlichkeitsdichten der Klein-Gordon-Gleichung dürfen in der Wellengleichung nur Zeitableitungen 1. Ordnung auftreten, die Relativitätstheorie fordert ferner eine Symmetrie von Raum und Zeit, wegen der Gültigkeit des Superpositionsprinzips in der Quantenmechanik muß die DGl linear sein.

Schließlich müssen für große Zahlen die klassischen Gesetzmäßigkeiten erscheinen (Korrespondenzprinzip).

Die Dirac - Gleichung beschreibt Teilchen mit dem Spin einhalb und Vielfache davon = Fermiteilchen.

Dirac schrieb diese Gleichung durch eine Reihenentwicklung auf

$$42.1: \frac{1}{c} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \alpha \cdot \Psi(\mathbf{r},t) + \frac{i \cdot m \cdot c \cdot \beta}{\hbar} \Psi(\mathbf{r},t) = 0 \text{ mit } \Psi(\mathbf{r},t) =$$

ist der Dirac'sche Spinor, der mindestens eine hermitesche (2 x 2) - Matrix darstellt.

Die zusätzlichen Freiheitsgrade ermöglichen die Beschreibung des Spins des Elektrons ebenso wie die Existenz von Antiteilchen.

Neu definiert wird sowohl die Kontinuitätsgleichung wie auch die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Raum zu finden.

Damit läßt sich die Schrödingergleichung (1) wieder in der gewohnten Weise schreiben:

$$42.2 : i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathbf{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

mit $\mathbf{H} = (-i \cdot c \cdot \hbar \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + m \cdot c^2 \cdot \beta)$, dem relativistischen Hamiltonoperator.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte d ist gegeben durch:

$$42.3. : d = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) \text{ und } \mathbf{j} = c \cdot \Psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \Psi(\mathbf{r}, t)$$

ist der Wahrscheinlichkeitstrom.

Die Dirac'sche Interpretation und Linearisierung der Quantenmechanik und der speziellen Relativitätstheorie bildete u. a. mit den Ausgangspunkt für die so erfolgreiche Quantenelektrodynamik (QED).

Üblicherweise beschreiben die drei- oder vierdimensionalen Maxwell'schen Gleichungen die Ausbreitung eines elektromagnetischen Feldes u. a. durch die Feldvektoren \mathbf{E} und \mathbf{B} .

Jedoch zeigt der von Einstein erklärte äußere photoelektrische Effekt, daß "sich die Energie des elektrischen Feldes \mathbf{E} in einem einzigen Punkt kulminiert, um ein Elektron aus dem Verband eines Festkörpers herauszulösen".

Die mathematische Verfolgung dieser Idee ist es, die die QED schuf.

Das Teilchen des elektrischen Feldes sind die Photonen, der Übergang von den "Feldern \mathbf{E} und \mathbf{B} " der Elektrodynamik zum Teilchen "Photon" dieser Felder beschreibt die QED.

Alle vorgestellten Beispiele können natürlich auch in der Dirac'schen, d. h., der relativistischen Darstellung gelöst und untersucht werden.

Empfehlenswert ist dazu ein Studium von entsprechenden Lehrbüchern und der bislang veröffentlichten Literatur.

QT Aufgaben - Seite 1 -

Physics 33.22.: Aus einer Punktquelle werden Kugelwellen emittiert. Lösen Sie die Wellengleichung in Kugelkoordinaten unter Aspekten der Energieerhaltung.

$$\Delta\psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}.$$

Physics 33.22.: Gegeben seien die Lösungen der

$$\Delta\psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \text{ mit } \psi_1(\mathbf{r},t) \text{ und } \psi_2(\mathbf{r},t)$$

. Zeigen Sie, daß auch die Summe beider Lösungen eine Lösung (=superpositionsprinzip) darstellt.

Modern Physics.18.2.: Wie ungenau ist der Ort eines Photons der Wellenlänge 3000 Angström bestimmt, wenn die Wellenlänge mit $1:10(+6)$ bekannt ist?

Modern Physics.18.2.: Die Breite einer Spektrallinie von 4000 Angström ist $10(-4)$ Angström. Wie lange ist im Mittel das atomare System in diesem Energiezustand?

Berechnung der eindimensionalen Tunnelwahrscheinlichkeit.

Leiten Sie aus der planckschen Strahlungsformel das Rayleigh-jeanssche und das Wiensche Verschiebungsgesetz her.

Modern Physics.18.9, 18.10.: Berechnen Sie die maximalen Energien der Kernteilchen, Elektron und Neutron, hypothetisch, eines Atomkerns mit einem Durchmesser $d_K=10(-14)$ m über die Heisenbergsche Unschärferelation aus. Anmerkungen: Elektron relativistische Rechnung. Für das Elektron ergeben sich zwischen Messungen und Rechnung derart große Differenzen, daß das Elektron kein „freies“ Kernteilchen sein kann.

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Elektron des Wasserstoffatoms im Grundzustand innerhalb des Atomkerns = Protons aufhält?

Physics 38.4+38.8: Berechnen Sie die Frequenz, die Vakuumwellenlänge und die Energie in Joule eines Photons der Energie $E = 2$ eV. Eine Lampe von 100 W emittiere diese Photonen, wie groß ist ihre Zahl und sind diese für das Auge sichtbar?

Physics 38.67: Die Unschärfe der Zeit eines Elektrons sei $10(-7)$ sec im angeregten Zustand eines Atoms oder Moleküls. Wie groß in eV und in Joule ist die Energie dieses Zustandes?