

Einführung in die Physik 3

Mitschrift von www.kuertz.name

Hinweis: Dies ist **kein offizielles Script**, sondern nur eine private Mitschrift. Die Mitschriften sind teilweise **unvollständig, falsch oder inaktuell**, da sie aus dem Zeitraum 2001–2005 stammen. Falls jemand einen Fehler entdeckt, so freue ich mich dennoch über einen kurzen Hinweis per E-Mail – vielen Dank!

Mihhail Aizatulin (avatar@hot.ee)

Inhaltsverzeichnis

1	Entwicklung des Atombegriffs	1
2	Eigenschaften der Atome	2
2.1	Masse und Größe der Atome	2
2.2	Das Elektron	8
2.3	Spektren und Spektrometer	12
2.3.1	Eigenschaften der Spektren	12
2.3.2	Physik der Spektrometer	13
2.4	Massenspektrometer, Ionenfallen und Quadrupole	17
2.5	Thomson's Atommodell.	20
3	Teilchen und Wellen	26
3.1	Photoeffekt, Comptoneffekt	26
3.2	Mößbauereffekt	29
3.3	Das Elektron als Welle	30
4	Die ältere Quantentheorie	31
4.1	Das Bohrsche Atommodell	31
4.2	Bohr-Sommerfeld Modell	36
5	Wellenmechanik	36
5.1	de Broglie Wellen	36
5.2	Zeitunabhängige Schrödingergleichung	38
5.3	Zeitabhängige Schrödingergleichung	39
5.4	Potentialprobleme	40
5.4.1	Potentialstufe	40
5.4.2	Teilchen im Potentialkasten	42
5.4.3	Dreidimensionaler Potentialkasten	43
5.5	Tunneleffekt	45
5.6	Der quantenmechanische harmonische Oszillator	47
5.7	Heisenbergs Unschärferelation	49
6	Atome mit einem Elektron	50
6.1	Wasserstoff	50
6.2	Drehimpulsquantisierung	53
6.3	Normaler Zeemann-Effekt	55
6.4	Elektronenspin	56
6.5	Alkalidubletts	58
6.6	Feinstruktur der Balmerreihe	62
6.7	Starkeffekt	63

7	Atome mit mehreren Elektronen	65
7.1	Helium	65
7.2	Zusammensetzung von Drehimpulsen	66
	7.2.1 Russel-Saunders Kopplung (LS-Kopplung)	66
7.3	Austauschentartung in Helium	68
7.4	Anomaler Zeeman-Effekt.	70

1 Entwicklung des Atombegriffs

- Parmenides hat Probleme der Existenz betrachtet
 - das Sein "ist" - das Nichtsein "ist nicht" (auch nicht in Gedankenform) \Rightarrow Vakuum ist existent
 - Seiendes kann sich nicht verändern
 - Widerspruch zwischen Denken und Erfahrung \Rightarrow Erscheinungswelt
- Demokrit
 - seiend-nichtseiend ersetzt durch voll-leer
 - Angst vor dem Unendlichen \Rightarrow es muss kleinste unteilbare Einheiten (Atome) geben
 - alles wird durch die Form und Größe der Atome bestimmt
 - Atome gehören zu den Ideen, weil sie "ewig" sind
- Platon: Atome sind reguläre Körper, jedem Element (Luft, Feuer...) entspricht ein Atomtyp
- Aristoteles
 - Dinge müssen zueinander passen
 - Teleologie - die Welt hat ein Ziel (Evolution VS Intelligent Design)
 - Materie ist beliebig teilbar
 - es gibt keinen leeren Raum
- Newton
 - Atomismus, Gott hat Atome erschaffen mit einem Ziel
 - auch Licht besteht aus Teilchen
 - absoluter Raum und Zeit
- Huygens: Wellenbewegung des Lichtes
- Leibniz: Raum und Zeit sind keine Gegenstände, sondern nur Anordnung von Sachen. Es gibt keinen absoluten Raum und Zeit.
- Immanuel Kant
 - was ausgedehnt ist, kann in Teile zerlegt werden

- was nicht ausgedehnt ist, kann nicht existieren
- irgendwo muss man mit der Unterteilung aufhören
- John Dalton - chemische Gesetze:
 - Materie besteht aus Atomen
 - alle Atome eines Elementen sind gleich
 - ganzzahlige Menge der Atome im Molekül
- Joseph von Fraunhofer: Spektralanalyse des Sonnenlichtes
- Michael Faraday
 - Gramm-Mol Ionen führt eine Ladung mit sich, die Vielfaches von F ist, wobei $F = 96484,93 C \Rightarrow$ auch Ladung besteht aus Teilchen
 - hat Physik ohne Hilfe von Mathematik gemacht
- Julius Plücker: Entdeckung der Kathodenstrahlen, Schatten \Rightarrow Partikeleigenschaften
- Kirchhof und Bunsen: Spektralanalyse - Fingerabdruck der Atome
- Maxwell: Atome sind unveränderbar
- Johann Jakob Balmer
 - hat die Natur nach mathematische Regelmäßigkeiten untersucht
 - hat die Serienformel des Wasserstoffs entdeckt:

$$\lambda = 3645,6 \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

2 Eigenschaften der Atome

2.1 Masse und Größe der Atome

Methode zur Bestimmung der Atommasse:

- aus dem Dalton Gesetz ergibt sich die Proportionalität der Atommassen:

$$\begin{aligned}
 &2H + O \rightarrow H_2O \\
 &11,1gH_2 + 88,9gO_2 \rightarrow 100gH_2O \\
 \Rightarrow &\frac{m(2H)}{m(O)} = \frac{11,1g}{88,9g} = \frac{1}{8} \\
 \Rightarrow &m(H) = \frac{1}{16}m(O)
 \end{aligned}$$

Atomgewicht - der Quotient von Atommasse/Bezugsmasse (dimensionslos). Früher hat man alles auf den Wasserstoff bezogen, jetzt auf den Kohlenstoff:

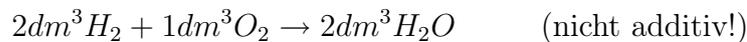
$$\begin{aligned} 1\text{AME} &:= \frac{1}{12}m(^{12}\text{C}) = 1,66053873(13) \cdot 10^{-27}\text{g} \\ &= 1,66053873 \pm 0,00000013 \cdot 10^{-27} = 1\text{Dalton} \end{aligned}$$

- DEFINITION: *Mol* ist Stoffmenge, die ebenso viele Teilchen enthält, wie $12\text{g}^{12}\text{C}$, das sind $N_L = 6,02214199(47) \cdot 10^{23}$ Teilchen (Loschmidt Zahl, Avogadro-Konstante). Wenn man die Avogadro-Konstante kennt, kann man aus

$$N_L = \frac{12\text{g}}{m(^{12}\text{C})}$$

die Masse einzelner Atome bestimmen. Weiter wird gezeigt, wie man diese Konstante "messen" kann.

- Gay-Lussac Gesetz der konstanten Proportionen: wenn zwei Gase reagieren, stehen die Volumina im ganzzahligen Verhältnis:



1 Mol eines Gases bei $273,15\text{K}$ und $101,325\text{kPa}$ hat das Volumen von $22,413996(39) \cdot 10^{-7}\text{m}^3/\text{Mol}$.

- Bestimmung von R in $PV = nRT$: man misst die Schallgeschwindigkeit indem man Resonanzfrequenz einer mit Gas gefüllten Kugelschale bestimmt

$$c_S = \sqrt{\varkappa \frac{P}{\rho}} \quad \text{wobei } \varkappa = \frac{f+2}{2}$$

Für Argon $f = 3$, $\varkappa = \frac{5}{2}$

$$\begin{aligned} c_S^2 &= \varkappa \frac{PV}{\rho V} = \varkappa \frac{nRT}{\rho V} = \varkappa \frac{RT}{M_{mol}} \\ R &= \frac{M_{mol}}{\varkappa T} c_S^2 \\ c_S &= f_{res} \lambda \quad \text{wobei } \lambda = \alpha r = \alpha' V^{\frac{1}{3}} \\ R &= \frac{M_{mol}}{\varkappa T} f_{res}^2 \alpha' V^{\frac{2}{3}} \end{aligned}$$

α' kann man im Demtröder nachlesen.

- Bestimmung der Boltzmann Konstante aus der Verteilung der Latexkügelchen in einer Flüssigkeit. Die Verteilungsfunktion ist

$$n(z) = n_0 e^{-mgz/kT}$$

wobei z die Höhe bezeichnet. Wenn man nun R und k weiß, ergibt sich aus $N_L = \frac{R}{k}$ die Avogadro Konstante und daraus die Masse einzelner Atome (siehe oben).

- aus der Faraday-Konstante: $1 \text{ Mol} \triangleq 96.485,3 \pm 0,6C = N_L e$ (e - Elektronenladung). Wenn man jetzt die Elektronenladung kennt, so kann man wiederum die Avogadro Konstante bestimmen.

Bestimmung der Größe der Atome:

- Diamant hat $\rho = 3,51 \text{ kg/dm}^3 = 3,51 \text{ g/cm}^3$ ¹

$$V = \frac{M}{\rho} = \frac{12 \text{ g}}{3,51 \text{ cm}^3} = 3,42 \text{ cm}^3$$

$$\Rightarrow V_{atom} = \frac{M}{N_L \rho} = 5,68 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$$

Typische Abmessung

$$a \approx \sqrt[3]{V_{atom}} \approx 2 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2$$

Indirekte Verfahren für die Atomgröße:

- Van der Waals Gas:

$$\left(P + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = RT$$

b - besetztes Volumen, $b = 4N_L \frac{4\pi}{3} r^3$

- Viskosität der Flüssigkeiten

$$\eta = \frac{1}{3} mn \bar{v} \lambda$$

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma}$$

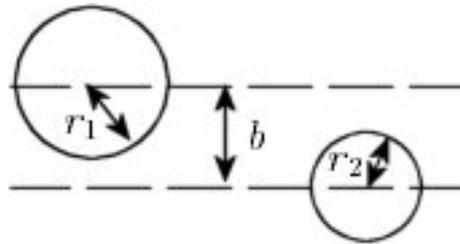
λ - mittlere freie Weglänge, σ - Wirkungsquerschnitt

¹12gr Diamant (1 Mol) nennt man 60ct

Messungen zeigen: Masse ist nicht proportional der dritten Wurzel der Radien \Rightarrow Atome haben keine konstante Dichte (im Gegensatz zu Atomkernen).

Verschiedene Ergebnisse verschiedener Methoden, weil reelle Atome durch Modelle ersetzt werden (etwa Billiardkugeln). Das führt zu der Frage: wo hört ein Atom auf?

- Atomare Stöße.



Stoß, falls $b < r_1 + r_2$. Damit ist $r_1 + r_2$ ein Maß für die Möglichkeit des Zusammenstoßes. In 3 Dimensionen benutzt man

$$\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2$$

Man nimmt Projektile mit Radius Null an, Targets haben eine hypothetische Größe von $r_1 + r_2$. Stoßwahrscheinlichkeit:

$$w = \frac{\text{versperrte Fläche}}{\text{Gesamtfläche}}$$

Für kleine Schichtdicke Δx :

$$w = \frac{N_2 \sigma}{A} = \frac{(n_2 A \Delta x) \sigma}{A} = n_2 \Delta x \sigma$$

N_2 ist die Gesamte Anzahl der Targets, n_2 - Anzahl der Targets pro Volumen.

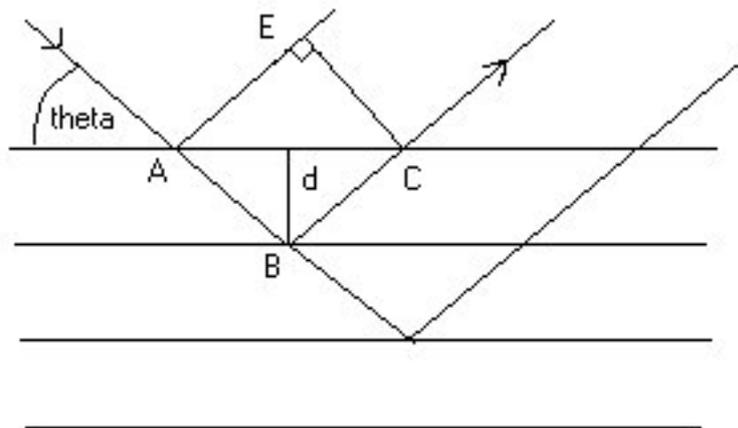
Abnahme der Projekttilanzahl:

$$\begin{aligned} \Delta N_1 &= -w N_1 = -n_2 \Delta x \sigma N_1 \\ \frac{dN_1}{dx} &= -n_2 \sigma N_1 \\ \Rightarrow N_1 &= N_{10} e^{-n_2 \sigma x} \\ \lambda &:= \frac{1}{n_2 \sigma} = \text{mittlere freie Weglänge} \end{aligned}$$

λ ist die Strecke, nach der die Projekttilanzahl um e abnimmt.

Optische Interferometrie Zum Beginn des 20. Jahrhunderts war Radioaktivität schon bekannt. Im Rutherford Laboratorium hat man Kristalle mit Röntgenlicht bestrahlt. Da die Röntgenstrahlung in atomaren Prozessen erzeugt wird, so hoffte man, dass sie auch mit Atomen wechselwirken wird. Das Experiment wurde von Laue, Friedrich und Knipping 1912 durchgeführt. Vierzählige Symmetrie des Bildes. Auftreten von scharfen Flecken kann man mit konstruktiver Interferenz erklären.

Im Kristall kann man spiegelnde parallele Flächen (Atomschichten) annehmen. Die Schichten sind nicht eindeutig, jede Reflexion ist von einem solchen Gitter erzeugt. Die konstruktive Interferenz tritt auf, wenn Gangdifferenz der zwei Strahlen ein Vielfaches der Wellenlänge ist (Braggsche Bedingung).²



$$\begin{aligned}
 \text{Gangunterschied } \Delta &= AB + BC - AE = 2AB - AE \\
 &= 2 \frac{d}{\sin \theta} - AC \cos \theta \\
 &= 2 \frac{d}{\sin \theta} - 2d \frac{\cos \theta}{\tan \theta} \\
 &= 2 \frac{d}{\sin \theta} (1 - \cos^2 \theta) \\
 &= 2d \sin \theta
 \end{aligned}$$

Bragg Bedingung: $\Delta = n\lambda$

Der Versuch wurde gemacht mit polychromatischem Röntgenlicht (d.h. bestehend aus Wellen verschiedener Länge). Nur dann konnte man sicher sein, dass

²In der Röntgenbeugung misst man den Winkel zwischen dem Strahl und der Netzebene

sich eine Wellenlänge findet, für die die Bragg Bedingung erfüllt ist. Alternativ könnte man den Kristall drehen bis die Atome bezüglich der Strahlen in richtiger Anordnung sind.

Es gibt sog. Quasikristalle, die fünfzählige Symmetrie haben. Da man aber mit Fünfecken keine Ebene kacheln kann, entstehen im Kristall extreme Spannungen.³

Pulverdiffraktion (Debye, Scherrer) Problem vom Laue Versuch - man weiß die Orientierung des Gitters bezüglich des Strahls nicht. Lösung: man macht Pulver aus dem Kristall. Dann findet man immer ein Teilchen mit solcher Orientierung, dass die Bragg-Bedingung erfüllt ist. Jetzt kann man das Pulver mit einem monochromatischem Licht bestrahlen.

Man kann mit diesen zwei Experimenten den Abstand der Atome bestimmen. Im festen Körper liegen Atome dicht aneinander. Argon kann man verfestigen und damit diese Experimente machen.

Regelmäßigkeiten im Periodensystem

- Edelgase und Alkali und ihre Anordnung - Alkali folgen immer gleich nach Edelgasen.
- Reaktionsfreundlichkeit - Alkali und Halogene reagieren sehr intensiv.
- Volumina - Maxima bei Alkali
- Ionisationsenergie - Maxima bei Edelgasen.

Unregelmäßigkeit der Massenzahl Gebrochenezahlige Massen der Elemente - man möchte das aus ästhetischen Prinzipien nicht haben.

Man kann Atome indirekt sichtbar machen:

- Feldelektronenmikroskop (Müller). Das Prinzip von "proximity focus". Die schwarzen Flecken entsprechen den Netzebenen, wo sich die Atome gegenseitig abschatten.
- Raster-Elektronenmikroskop (Auflösung knapp unter Nanometer)
- Rastertunnelmikroskop (Gerd Binnig, Heinrich Rohrer, Ernst Ruska). Wird im eigenen Kapitel besprochen.
- Aufschrift IBM aus Xenon Atomen auf Platinum, Don Eigler, 1989.

³Roger Penrose hat zwei Vielecke gefunden, mit denen man die Ebene bedecken kann, aber ohne Periodizität

2.2 Das Elektron

Historisches:

- Kathodenstrahlen. Julius Plücker, Johann Wilhem Hittorf (sein Schüler), Sir William Crookes (1869). Geradlinige Ausbreitung (Schatten), daraus Schluss auf die Teilchen.
- Der Name Elektron kommt von G. Johnstone Stoney.
- Heinrich Hertz:
 - Habilitationsschrift (Kiel 1883): wollte zeigen, dass Kathodenstrahlen durch elektrisches Feld abgelenkt werden, aber negatives Ergebnis: Kathodenstrahlen elektrisch indifferent. Erklärung: das Vakuum war nicht hoch genug (schlechte Ausrüstung). Aus dem Stoff in der Röhre entstand kaltes Plasma, das die Abschirmung der Feldquelle verursachte. Debye hat etwa 30 Jahre später die Abschirmung erklärt.
 - Tagebuch: beklagt, dass es in Kiel nichts für Experimentalphysik gibt.
 - 7.2.1885: Kiel scheint gottverlassen zu sein, in Paar Tagen wechselte nach Karlsruhe.
 - Im Bonn wieder Kathodenstrahlen, erstaunlich: nicht nur Leuchtflecken, die Strahlen konnten sich sogar bei atmosphärem Druck einige Zentimeter bewegen. Auch wenn man im Weg der Kathodenstrahlen eine dünne Folie stellt, passen einige Strahlen trotzdem durch.
- Sir Arthur Schuster
 - 1881-1907 Professor in Manchester
 - Elektrizität in Gasen
 - Spektroskopie
 - 1884: Messung von $\frac{e}{m}$ mit dem Fadenstrahlrohr. Zwei parallele Drahtringe, die den Abstand ungefähr gleich ihren Radien haben, erzeugen in der Mitte dazwischen ein homogenes magnetisches Feld. Im Feld bewegen sich die Kathodenstrahlen im Kreis, aus dem Radius rechnet man das Verhältniss Ladung/Masse des Elektrons aus (Rechnung siehe weiter unten). Wasserstoffühlung damit die Elektronen nicht auseinanderlaufen: es bilden sich die H_2^+ Ionen,

deren Wirkung den Strahl fokussiert. Das Gas leuchtet wenn die Elektronen mit Atomen stoßen.

- Philip Lenard
 - Assistent bei Hertz in Bonn
 - 1894 ao (außerordentlicher) Prof in Breslau
 - wechselt als Assistent an TH Aachen - die Stelle schlechter, dafür die Laboratorie besser
 - 1896 ao Prof in Heidelberg
 - 1897 Ruf nach Kiel
 - 1898 Publikation über Kathodenstrahlen = elektrische Ladungsträger
 - 24.12.1900 Entdeckung des Photoeffekts, Wellenlängenabhängigkeit für verschiedene Metalle. UV Strahlen.
 - 1905 Nobelpreis für Photoeffekt. Im gleichen Jahr erklärte Einstein das Photoeffekt
 - 1907 Ordinarius in Heidelberg
 - war ein Nationalist, auch nach dem Weltkrieg, antibritische Einstellung, glühender Verfechter des Nationalsozialismus (mit Johannes Stark). Hat sich nie davon distanziert. ⁴
 - 1937 "Deutsche Physik"(Bewegung der Physiker)
- J.J. Thomson (1856-1940), Entdecker des Elektrons. Zeigte, dass die Kathodenstrahlen aus negativen Ladungsträgern bestehen, hat die Bahn im Magnetfeld vermessen. Hat das Experiment von Hertz neu mit gutem Vakuum gemacht, diesmal wurden die Strahlen abgelenkt.

⁴Irgendwo im Keller der Uni gibt es Tafeln für alle vier kieler Nobelpreisträger, man will aber Lenard nicht ausstellen

Kreisbahnmethode zur Bestimmung von $\frac{e}{m}$:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e(\vec{v} \times \vec{B})$$

Energie: $\frac{mv^2}{2} = eU$

$$\Rightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$$

Kreisbahn: $\frac{mv^2}{r} = evB$

$$\Rightarrow \frac{e}{m} = \frac{2U}{r^2 B^2}$$

$$\frac{e}{m} = 1,7588 \cdot 10^{-11} \frac{As}{kg}$$

- Robert Millikan (1868-1953). Messung der Elektronenladung 1911. Lies ionisierte Öltropfen im elektrischen Feld fallen.⁵ Problem: Reibungskräfte. Eine Lösung ist das Feld so einzustellen, dass der Tropfen schwebt - *Schwebemethode*. Dann gilt

$$qE = mg$$

$$\frac{q}{m} = \frac{g}{E}$$

Die Masse des Tröpfchens kann man aus dem Radius ausrechnen, den man im Mikroskop beobachtet, das ist aber nicht genau.

Millikan hat die sog. *Driftmethode* verwendet - erst fällt der Tropfen nach unten, dann wird das Feld invertiert und der Tropfen fliegt nach oben. Jetzt benutzen wir die Reibungskraft um den Radius auszurechnen:

$$\text{nach unten: } \underbrace{\frac{4}{3}\pi r^3(\rho_{\text{öl}} - \rho_{\text{luft}})g}_{\text{Gewicht}} + \underbrace{qE}_{\text{Feldkraft}} - \underbrace{6\pi\eta r|v_1|}_{\text{Reibung}} = 0$$

$$\text{nach oben: } \frac{4}{3}\pi r^3(\rho_{\text{öl}} - \rho_{\text{luft}})g - qE + 6\pi\eta r|v_2| = 0$$

Differenz der Gleichungen:

$$2qE - 6\pi\eta r(v_1 + v_2) = 0$$

$$\frac{8}{3}\pi r^2(\rho_{\text{öl}} - \rho_{\text{luft}})g = 6\pi\eta(v_1 - v_2)$$

$$q = \frac{9\pi}{2E} \sqrt{\frac{\eta^3(v_1 - v_2)}{g(\rho_{\text{öl}} - \rho_{\text{luft}})}}(v_1 + v_2)$$

⁵Die Tropfen wurden mit Röntgenlicht ionisiert

Mit diesen Experimenten hat Millikan gezeigt, dass die Ladung auf dem Tropfen immer ein Vielfaches einer Elementarladung ist. Die Elementarladung ist nach modernen Angaben

$$e = 1,602176462(63) \cdot 10^{-19} \text{As}$$

- Nobelpreis im Jahr 1923
- Hat festgestellt, dass 180 Grad Magnetfeld fokusierende Eigenschaft hat. Damit konnte man viel genauer die Eigenschaften der Elektronenbahn bestimmen.

Man entdeckte die (relativistische) Abhängigkeit der Masse des Elektrons von der Geschwindigkeit. Um das zu messen nimmt man eine folgende Kombination: elektrisches Feld (Kondensator), dann Magnetfeld. Die absolute Ablenkung beim Austritt aus dem Kondensator ist

$$y = \frac{eEl^2}{4E_{kin}}$$

Damit wirkt Kondensator als ein Energiefilter. Im Magnetfeld hat die Bahn den Krümmungsradius $\frac{p}{eB}$, wobei $p = mv$ und m - relativistische Gesamtmasse:

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

Vom Elektronen wissen wir die Ladung und spezifische Ladung, daraus wissen wir die Masse. Man fragt sich aber: wie gross ist Elektron? Es gibt keine Methode Elektron sichtbar zu machen. Noch ein Phänomen: im Feldmikroskop ist der Fleck bei $6kV$ Spannung scharf und bei $2kV$ - nicht Scharf. Kann es sein, dass die Größe des Elektrons von der Energie abhängt?

Klassischer Elektronenradius

$$E = m_0c^2$$

Für Kugelkondensator

$$\begin{aligned} C &= 4\pi\epsilon_0 r \\ W_{kond} &= \frac{1}{2} \frac{Q^2}{C} \\ W_{el} &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = m_0c^2 \\ \Rightarrow r_{kl} &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_0c^2} \\ r_{kl} &= 2,8 \cdot 10^{-15} m \end{aligned}$$

Damit nehmen wir an, dass die gesamte Energie des Elektrons elektrische Natur hat, mit anderen Worten, dass Elektron aus reiner Ladung besteht. Das erklärt aber nicht, warum bei kleinen Energien das Bild im Mikroskop nicht scharf ist.

2.3 Spektren und Spektrometer

2.3.1 Eigenschaften der Spektren

- Frequenzbereich von $10^{14} - 10^{15} Hz$ (sichtbares Licht).

- **Einheiten:**

- Wellenlänge:

$$1 = 0,1nm = 10^{-10}m \quad (\text{Atomare Dimension})$$

- Wellenzahl:⁶

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

$$[\bar{\nu}] = 1\text{Kayser} = 1cm^{-1} \triangleq 29,979GHz$$

- Energie (siehe auch [Planck-Konstante](#)):

$$1eV = 1,602 \cdot 10^{-19} J$$

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu}$$

$$1eV \triangleq 2,418 \cdot 10^{14} Hz \triangleq 8066cm^{-1}$$

Sichtbares Licht hat Energie, die kleine Vielfache von $1eV$ ist.

- **Balmer Serie** (1885). Sequenz der Spektrallinien, die beschrieben wird durch

$$\lambda = G \frac{n_1^2}{n_1^2 - 4} \quad n_1 \in \mathbb{N}, \quad n_1 > 2$$

$G = 3645,6$ - eine Naturkonstante.

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right]$$

⁶Vergleiche: *Frequenz* ν wird definiert als $\frac{c}{\lambda}$

$R_H = 109\,677\text{cm}^{-1}$ - Rydberg-Konstante ⁷

Seriengrenze:

$$n_1 \rightarrow \infty : \bar{\nu}_\infty = \frac{R_H}{4}$$

Man misst bis zu 20 Linien der Serie.

Bei Luftdruck hat man Probleme mit Brechungsindex - die Wellenlänge wird verkürzt.

2.3.2 Physik der Spektrometer

Interferenz von mehreren Strahlen. Fraunhofersche Interferenztheorie. Betrachten wir n Strahlen. Wir schreiben jeden Strahl mit komplexer Phase und Amplitude. Einfachheit halber betrachten wir Strahlen in einer Raumdimension. Zudem nehmen wir an, dass alle Amplituden gleich groß sind.

$$E_l = Ae^{i(\omega t - kx - (l-1)\delta)}$$

$$\omega = 2\pi f$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

δ - Gangunterschied benachbarter Strahlen. $E_l \triangleq$ Elektrischer Feldvektor.

Schritt 1. Alle Strahlen aufsummieren:

$$E = \sum_{l=1}^n E_l = Ae^{i(\omega t - kx)} + \sum_{l=1}^n e^{-i(l-1)\delta}$$
$$1 + e^{-i\delta} + e^{-2i\delta} + \dots + e^{-(n-1)i\delta} = \frac{1 - e^{-in\delta}}{1 - e^{-i\delta}}$$

Schritt 2. Intensität ausrechnen. Intensität ist gegeben durch das Quadrat des Betrages: ^{8 9}

$$\bar{I} = \frac{1}{2} E \cdot E^* = \frac{1}{2} |E|^2$$

Trick:

$$\left(\frac{z_1}{z_2} \right)^* = \frac{z_1^*}{z_2^*}$$

⁷eine der vielen

⁸mit * wird im weiteren die komplexkonjugierte Zahl bezeichnet

⁹ $\frac{1}{2}$ in der Formel wegen Effektivwert des Wechselsignals

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}
 |1 - e^{-i\delta}|^2 &= ((1 - \cos \delta)^2 + \sin^2 \delta) \\
 &= 1 - 2 \cos \delta + \cos^2 \delta + \sin^2 \delta \\
 &= 2(1 - \cos \delta) = 4 \sin^2 \left(\frac{\delta}{2} \right)
 \end{aligned}$$

$$\bar{I}(\delta) = \frac{A^2 \sin^2 \left(n \frac{\delta}{2} \right)}{2 \sin^2 \left(\frac{\delta}{2} \right)}$$

In 0 (in der Mitte) kann man die Regel von L'Hospital anwenden

Beugung am Einzelspalt Ähnlicher Formalismus. Anzahl der Teilstrahlen strebt gegen ∞ , Strahlbreite - gegen 0.

$$\begin{aligned}
 d &= b \sin \varphi = \overline{BF} \sin \varphi \\
 b &= p\beta \\
 \delta &= \frac{2\pi d}{p\lambda}
 \end{aligned}$$

β - Breite des Teilstreifens. Einsetzen in die alte Formel ergibt:

$$\begin{aligned}
 E(\varphi) &\simeq \beta e^{i(\omega t - kx)} [1 + e^{-i\delta} + e^{-2i\delta} + \dots + e^{-i(p-1)\delta}] \\
 E(\varphi) &\simeq \beta e^{i(\omega t - kx)} \frac{1 - e^{-ip\delta}}{1 - e^{-i\delta}} \\
 I(\varphi) &\simeq \beta^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{p\delta}{2} \right)}{\sin^2 \left(\frac{\delta}{2} \right)} \\
 &= \frac{b^2 \sin^2 \left(\frac{\pi d}{\lambda} \right)}{p^2 \sin^2 \left(\frac{\pi d}{p\lambda} \right)}
 \end{aligned}$$

Gangunterschied der Randstrahlen:

$$\Delta = \frac{2\pi d}{\lambda}$$

Damit ¹⁰

$$\begin{aligned}
 I(\varphi) &\simeq \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta}{2}\right)}{\left(p \sin\left(\frac{\Delta}{2p}\right)\right)^2} \\
 &\xrightarrow{p \rightarrow \infty} b^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2} \\
 I(\varphi) &\simeq b^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\pi b}{\lambda} \sin \varphi\right)}{\left(\frac{\pi b}{\lambda} \sin \varphi\right)^2}
 \end{aligned}$$

Im Zentrum ergibt sich Intensitätsmaximum, Nullstellen bei Vielfachen von $\frac{\lambda}{b}$

$$\Delta = p\delta = \frac{2\pi d}{\lambda}$$

Ursache der Spektrallinien. Atome fangen das Licht mit Wellenlängen, die ihren Resonanzfrequenzen entsprechen, und dissipieren es (Re-Emission). Dadurch entsteht eine schwarze Linie im Spektrum (geometrische Ursache).

Beugung am Gitter Muster von schwarzen und durchlässigen Striche, die äquidistant sind. Intensität in Abhängigkeit vom Winkel ergibt sich als Produkt der Formeln für Interferenz mehrerer Strahlen und für Beugung am Spalt:

$$\begin{aligned}
 I(\theta) &= I(0) \frac{1}{n^2} \left[\frac{\sin(nku)}{\sin(ku)} \right]^2 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2, \text{ wobei} \\
 u &= \frac{\pi a}{\lambda} \sin \theta \quad \text{und} \\
 k &= \frac{a+b}{a}
 \end{aligned}$$

a, b sind die Breiten der weißen und schwarzen Striche.

Auflösungsvermögen des Gitters Wir betrachten die Summe zweier Funktionen für zwei unterschiedliche Wellenlängen. Die Frage ist: was ist der minimale Wellenlängenunterschied, bei dem wir die Maxima der Funktionen

¹⁰Oft wird in der Interferenztheorie die Funktion sinc benutzt:

$$\text{sinc}(x) = \frac{\sin(x)}{x}$$

noch auflösen können (d.h. bei dem sie noch nicht zusammenfallen)? Kriterium: Wenn die Summe der beiden Funktionen ein lokales Minimum im Zentrum hat, d.h. wenn das Hauptmaximum von einem Strahl in das Interferenzminimum des anderen Strahlen fällt. Dann kann man aus der Summe die Intensität der Komponenten noch ermitteln.

Über die Breite von einer scharfen Linie (in der Nähe eines Hauptmaximums) gilt:

$$\frac{\sin u}{u} \sim \text{const}$$

Wir müssen also nur den zweiten Ausdruck in der obigen Formel entwickeln. Angenommen bei A hat Wellenlänge ¹¹ λ ein Maximum. Dann

$$u = \frac{m\pi}{k} = \frac{\pi}{\lambda} a \sin \theta$$

m - Beugungsordnung des Gitters. Am selben Punkt hat Licht der Nachbarwellenlänge $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$ ein Minimum:

$$u = \frac{(mn - 1)\pi}{nk} = \frac{\pi}{\lambda + \Delta\lambda} a \sin \theta$$

n - Anzahl der Striche. Die beiden Gleichungen durcheinander dividieren:

$$\frac{\lambda + \Delta\lambda}{\lambda} = \frac{m\pi}{k} \frac{nk}{(mn - 1)\pi} = \frac{mn}{mn - 1} = 1 + \frac{1}{R}$$

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \text{Auflösungsvermögen (resolving power)}$$

$$\boxed{R = mn} = \text{Produkt der Beugungsordnung und Strichzahl}$$

Reflexionsgitter ¹²

Man macht im Gitter Stufenstruktur mit geneigten Flächen. Die Fläche wird mit Aluminium bedeckt um sie Reflektiv zu machen.

- Beim *Echelle-Gitter* benutzt man für die Reflexion die stärker geneigten Flächen der Stufen. Damit erhält man eine sehr hohe Beugungsordnung, aber nur für einen kleinen Bereich vom Spektrum.
- 10m *Ebert Spektrometer*, steht im Physik-Institut.
- *Czerny-Turner Anordnung*. Wiegt weniger, da nur zwei Sektionen des Spiegels bleiben, die man wirklich braucht. Vakuumkammer. Heutzutage Detektor statt Ausgangspalt (Strichcodescanner).

¹¹d.h. Licht der Wellenlänge

¹²Bald kommen auch Bilder dazu

- *Fabry-Perot Interferometer*. Als Nachzerleger des Gitterspektrometers verwendet. In letzter Zeit in Vergessenheit geraten, weil es heute Laserspektroskopie gibt.

2.4 Massenspektrometer, Ionenfallen und Quadrupole

Das Problem von nichtganzzahligen Atommassen, z.B. Cl hat das Gewicht von $35,5 AEM$. Kann man Atome nach ihrem Gewicht sortieren?

Parabelmethode von J.J.Thomson (1913). Nicht nur Elektronen, sondern auch schwere Teilchen: gleichzeitige Ablenkung im Kondensatorfeld und Magnetfeld:

$$\vec{E} \parallel \vec{B}$$

$$\ddot{y} = \frac{e}{m} E \quad \text{für einfach geladenes Ion}$$

$$y = \frac{1}{2} \frac{eE}{m} t^2 = \frac{e}{2m} E \frac{l^2}{v^2}$$

l - Kondensatorlänge, t - Laufzeit. Zentripetalbeschleunigung im B -Feld:

$$a_z = \frac{evB}{m}$$

Den Kreis, den ein Teilchen im B -Feld beschreibt ungefähr als Parabel ansehen:

$$x = \frac{1}{2} a_z t^2 = \frac{eBl^2}{2mv}$$

$$y = \frac{2E}{l^2 B^2} \left(\frac{m}{e} \right) x^2$$

$$\Rightarrow \text{Parabelförmige Bahn}$$

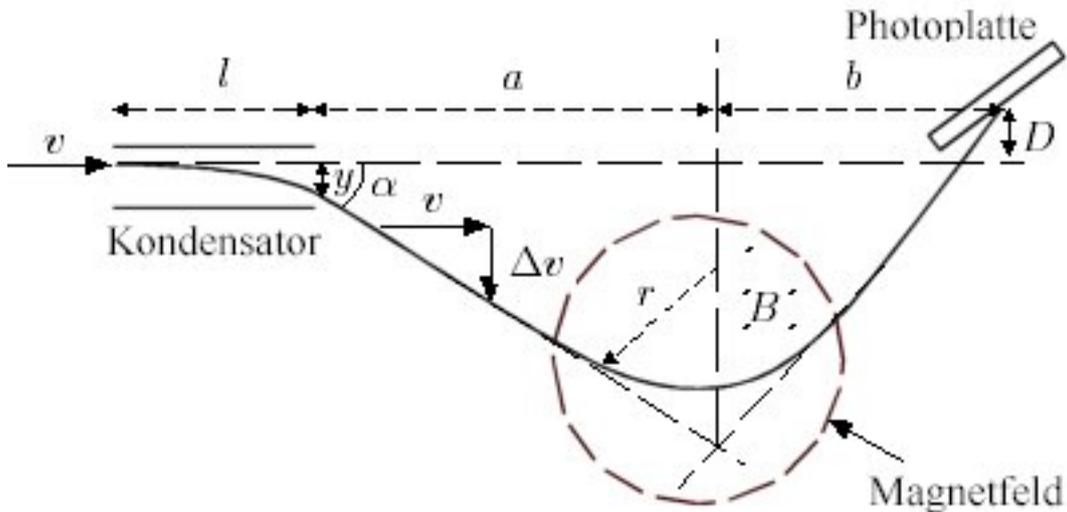
Für jede Geschwindigkeit gibt es einen bestimmten Punkt auf der Parabel - zusätzliche Information. Andererseits braucht man längere Messzeit bis man die Parabeln sehen kann.

Isotope von Neon

Isotop	Anteil	Masse
${}^{20}_{10}Ne$	90,92%	19,99244
${}^{21}_{10}Ne$	0,26%	20,99385
${}^{22}_{10}Ne$	8,82%	21,99138

Frage: warum sind die Massen einzelner Isotope trotzdem nicht ganzzahlig? Das hat mit der Bindungsenergie im Atom zu tun.

Geschwindigkeitsfokussierung von Aston (1920) ¹³



Verbesserung des Parabelverfahrens. Im folgenden machen wir Approximationen für kleine Winkeln.

$$\frac{dv}{dt} = \frac{F}{m}$$

$$\tan \alpha = \frac{|\Delta V|}{|v|} = \frac{Fl}{mv \cdot v}$$

$$\alpha \approx \frac{qE}{m} \cdot \frac{L_1}{v^2} \qquad \frac{d\alpha}{dv} = -2 \frac{qE L_1}{m v^3} = -\frac{2\alpha}{v}$$

$$\beta \approx \frac{qBv}{m} \cdot \frac{L_1}{v^2} \qquad \frac{d\beta}{dv} = -\frac{qB L_1}{m v^2} = -\frac{\beta}{v}$$

$$D \approx (a + b)\alpha - b\beta$$

Fokussierungsbedingung: $\boxed{\frac{dD}{dv} = 0}$

$$0 = -(a + b) \frac{d\alpha}{dv} + b \frac{d\beta}{dv} = \frac{2(a + b)\alpha}{v} - \frac{b\beta}{v}$$

$$b\beta = 2(a + b)\alpha$$

$$D = -(a + b)\alpha \text{ (unabhängig von der Geschwindigkeit)}$$

¹³Aston war ein Schüler von J.J.Thompson

Time-of-flight detector. Dünne Kohlenstoffolie (100nm Dicke) ist für die untersuchende Partikel durchsichtig, reißt aber äußere Elektronen aus der Hülle aus. Diese Elektronen dienen als Startsignal (sie haben viel kleinere Laufzeit). Genauso eine Folie am Ende der Bahn für Stoppsignal. Detektoren dieser Art sind sehr kompakt.

Ergebnis für Chlor: $^{35}\text{Cl}(75\%) + ^{37}\text{Cl}(25\%) \Rightarrow A_{rel} = 35,5$.

Isotope - Elemente mit gleichen Z (Elektronenzahl) aber verschiedenen A (Massenzahl). Elemente mit nur einem Isotop: ^4_9Be , $^{27}_{13}\text{Al}$, $^{127}_{53}\text{I}$. Es gibt aber auch sehr wenige radioaktive Isotope von diesen Elementen.

Isotope des Wasserstoffs:

- ^1_1H - normales Wasserstoff.
- ^2_1D - Deuterium. Spektroskopisch entdeckt in Sonnenspektrum.
- ^3_1T - Tritium, radioaktiv, $\tau \approx 10$ Jahre, häufig im Erdmantel, in 60-70 Jahren in der Atmosphäre wegen Atombombenexplosionen.

Paulfalle Frage: kann man einen Filter bauen, der Teilchen mit nur einer bestimmten Geschwindigkeit durchläßt. Wolfgang Paul hat für eine solche Entwicklung den Nobelpreis (1989) bekommen.

$$V = V_0 + V_1 \cos \omega t$$

$$\ddot{x} + \frac{e}{mr_0^2}(V_0 + V_1 \cos \omega t)x = 0$$

$$\ddot{z} - \frac{e}{mr_0^2}(V_0 + V_1 \cos \omega t)z = 0$$

Mit Abkürzungen

$$\tau := \frac{\omega t}{2}$$

$$a_x = -a_z := \frac{4eV_0}{mr_0^2\omega^2}$$

$$q_x = -q_z := \frac{2eV_1}{mr_0^2\omega^2}$$

ergeben sich die Mathieugleichungen:

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} + (a_x + 2q_x \cos 2\tau)x = 0$$

$$\frac{d^2z}{d\tau^2} + (a_z + 2q_z \cos 2\tau)z = 0$$

Stabilitätsbereiche der Lösung in Abhängigkeit von a_x und q_x . Fokussierung hängt von der Masse ab, d.h. nur Teilchen mit bestimmten Massen werden fokussiert.

Anwendung von Paulfallen Man kann einzelne Ionen einfangen und die Wechselwirkung untersuchen. "Ionenkristalle" - Itano, Bergquist, Wineland (1989)

Isotopentrennung Ursprünglich die Frage: wie trennt man Uranisotope (für die Atombombe) voneinander? Möglichkeit: Zentrifuge, funktioniert nur für niedrige Massenzahl, Uran kann man so nicht trennen. Calutrons: riesige Massenspektrometer. Für Wasser - Elektrolyse (Reaktionsgeschwindigkeit hängt von der Masse ab).

2.5 Thomson's Atommodell.

Mit Kanalstrahlen kann man eine Folie durchleuchten, die eine Dicke von etwa 10000 Atome hat (die Luft leuchtet außerhalb der Röhre - Experiment von Lenard). Auch die radioaktiven Stahlen können die Materie durchdringen.¹⁴ Das widerspricht der Vorstellung von Atomen als festen Billiardkugeln. J.J.Thomson hat das sog. "Rosinenkuchenmodell" vorgeschlagen: die positive Ladung ist im Atom gleichmäßig verteilt, die Elektronen befinden sich also in einer positiven Ladungswolke.

Erklärung von Atomeigenschaften im Thomson's Modell.

- Die Ausdehnung von Atomen. Das Abstoßungsgesetz zwischen positiven Ladungen muss dazu führen, dass die Atome sich nicht gegenseitig durchdringen können.
- Experiment von Lenard: Elektronen müssen klein sein und positive Ladung ausgedehnt um dieses Experiment zu erklären.
- Elektronen bilden ganz bestimmte Strukturen (ineinander liegende Schalen), weil sie versuchen die Energie zu minimieren. Damit könnte man Regelmäßigkeiten im Periodensystem erklären. Z.B. Edelgase und

¹⁴Zu Radioaktivität: man unterscheidet α , β und γ Strahlen in Abhängigkeit vom Verhalten im elektrischen Feld. α -Strahlung wird in Materie leicht abgebremst. Damit muss α -Strahler ein offenes Präparat sein und kann leicht auf die Haut übertragen werden, ist also der gefährlichste. Radioaktivität misst man in *Bekkerel* - Anzahl der Zerfälle pro Sekunde. Die Intensität der Strahlung nimmt mit dem Abstand quadratisch ab. Dies liegt daran, dass die Fläche der Kugel quadratisch mit dem Abstand wächst.

Alkali:¹⁵ einige Konfigurationen (19 Teilchen, 1–6–12 in entsprechenden Schalen) sind aus Sechsecken gebaut, sind damit symmetrisch und stabil und haben hohe Anregungsenergien (Edelgase). Im Vergleich dazu ist es bei der Konfiguration 20(1 – 7 – 12) leicht die äußeren Teilchen in Bewegung zu setzen (Alkali).

- Spektrallinien: die Elektronen in homogener Ladungswolke verhalten sich wie harmonische Oszillatoren, die Spektrallinien könnten dann den Eigenfrequenzen entsprechen. Wir betrachten eine homogen geladene Kugel mit

$$a_+ = \frac{4\pi}{3}\rho R^3$$

Feldstärke (ohne Berücksichtigung von Elektronen) in homogener Ladungswolke:

$$\varepsilon_0 E(r) 4\pi r^2 = Q(r) = \frac{4\pi}{3} r^3 \rho$$

Feldstärke nimmt vom Zentrum zum Rand *linear* zu, Potenzial - *quadratisch*. Ladung in solchem Feld ist ein harmonischer Oszillator. Umformung:

$$E(r) = \frac{\rho}{3\varepsilon_0} r, \quad r < R$$

$$m_e \ddot{r} + \frac{\rho e}{3\varepsilon_0} r = 0 \quad (\text{Gleichung des harmonischen Oszillators})$$

$$\text{Eigenfrequenz: } \omega^2 = \frac{\rho e}{3\varepsilon_0 m_e} = \frac{3Qe}{4\pi R^3 \varepsilon_0 m_e}$$

Frequenz, die man aus dieser Formel bekommt liegt in der Nähe optischer Spektrallinien. Die Formel kann aber die Balmerreihe nicht erklären.

Problem des Modells: Rutherfordstreuung. ¹⁶ α -Teilchen werden durch Stöße mit Atomen stark abgelenkt. Thomson's Modell kann die Ablenkung von solchen massiven Teilchen nicht erklären. Idee von Rutherford: für die Erklärung muss man lokalisierte Ladung annehmen.

Ableitung der Streuformel

¹⁵Siehe Artikel von Thomson, 1904

¹⁶Das Modell selbst war nicht widersprüchlich, sie ist mathematisch korrekt, nur die Annahmen waren nicht richtig.

- Momentane Kraft

$$\begin{aligned}\vec{F} &= \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \cdot \left(\frac{\vec{r}}{r}\right) \quad (\text{Für Helium}) \\ F_{\perp} &= F \sin \varphi \\ F_{\parallel} &= F \cos \varphi\end{aligned}$$

- Drehimpuls

$$\vec{r} \times \vec{F} = 0 \Rightarrow \vec{L} = \text{const}$$

Wir nehmen den Drehimpuls zum Anfang:

$$\begin{aligned}L &= mv_0 p = \underbrace{mr^2}_{\text{PunktM}} \dot{\varphi} \\ \Rightarrow \frac{1}{r^2} &= \frac{\dot{\varphi}}{v_0 p}\end{aligned}$$

p - Stoßparameter (b in der neuen Literatur).

- Parallel- und Senkrechtbewegung trennen: Newton Bewegungsgleichung für senkrecht:

$$\begin{aligned}m \frac{dv_{\perp}}{dt} &= \underbrace{\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}}_k \cdot \frac{1}{r^2} \sin \varphi \\ m \frac{dv_{\perp}}{dt} &= k \frac{\dot{\varphi}}{v_0 p} \sin \varphi \int_{t_A}^{t_B} \frac{dv_{\perp}}{dt} dt \\ &= \frac{k}{mv_0 p} \int_A^B \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} dt\end{aligned}$$

Grenzwerte:

$$\begin{aligned}A \rightarrow -\infty &\Rightarrow v_{\perp}(-\infty) = 0 \text{ und } \varphi(-\infty) = 0 \\ B \rightarrow \infty &\Rightarrow \varphi = 180^\circ - \vartheta\end{aligned}$$

- Energiesatz (mit Annahme, der Kern ist sehr schwer und bekommt keine Energie, damit keine reduzierte Masse):

$$v(+\infty) = v_0$$

Damit

$$\begin{aligned}\int_0^{v_0 \sin \theta} dv_{\perp} &= \frac{k}{mv_0 p} \int_0^{\pi-\theta} \sin \varphi d\varphi \\ &= \frac{k}{mv_0 p} [-\cos \varphi]_0^{\pi-\theta} = \frac{k}{mv_0 p} (1 + \cos \theta) \\ &= \frac{k}{mv_0^2} \cot \left(\frac{\theta}{2} \right) \\ \text{weil } \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} &= \cot \frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

Thomson, Rutherford, Geiger.

- J.J.Thomson (1856-1940)
 - 1883 Lecturer am Trinity college (Cambridge).
 - 1884 Cavendish professor of experimental Physics.
 - 1897 "Entdeckung" des Elektrons.
 - 1903 Buch "Conduction of Electricity through gases".
 - Parabelmethode für Massenseparation.
 - Nobelpreis für Physik.
 - Autor von 4 weiteren Fachbüchern.
- Ernest Rutherford (1871-1937)
 - Geboren In Neuseeland.
 - 1894 Research student bei Thomson.
 - 1898 Professor in Montreal (Zusammenarbeit mit Soddy über Radioaktivität).
 - 1907 Nachfolger von Schuster in Manchester.
 - 1908 Nobelpreis für Chemie (Radioaktivität).
 - 1910 Streuexperimente mit Alphateilchen → Entdeckung des Atomkerns.
 - Ist auf dem 100-Dollar Schein von Neuseeland geschildert.
- Hans Geiger (1882-1945)

- 1906 Post-doc in Manchester.
- 1907 Beginn der Arbeit mit Rutherford an Alphateilchen.
- 1908 Proportionalzählrohr.
- 1912 Geiger in Berlin.
- 1924 Habilitation.
- 1925 Ruf nach Kiel als Leiter des Instituts für Experimentalphysik.
- 1928 Geiger-Müller Zählrohr (damit kann man ein einziges Teilchen hören).
- 1929 Ruf nach Tübingen.
- Ausgeber vieler Bücher ¹⁷

Reichweite von α -Teilchen. Auf den Nebelkammeraufnahmen sieht man, dass das Bündel von Teilchenspuren eine scharfe Grenze hat, nach der die Spuren aufhören. Die Bewegung eines Partikels in einem viskosen Medium (Luft in diesem Fall) wird durch das Gesetz $v = e^{-f(x)}$ beschrieben. Es gibt ein Ort, wo die Geschwindigkeit 0 wird. Da es für alle Teilchen fast gleichzeitig passiert, so schließt man auf ein Diskretes Energiespektrum.

Streuformel (Fortsetzung). In den Streuexperimenten wurde Goldfolie benutzt - Goldschmiede können sehr dünne Folien erstellen (etwa 10000 Atome dick). Man guckt in ein Mikroskop unter einem bestimmten Winkel und zählt die Blitze. Die Rutherford Formel beantwortet die Frage: wie wahrscheinlich ist es, dass ein gegebener Winkel getroffen wird? Mit anderen Worten sie beschreibt die Verteilung der austretenden Teilchen bezüglich verschiedener Richtungen.

Wir betrachten Teilchen mit Stoßparametern zwischen p und $p + dp$. Diese Teilchen werden abgelenkt auf Winkeln θ bis $\theta + d\theta$.

$$dp = -\frac{k}{2mv_0^2} \cdot \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} d\theta$$

Eintrittsfläche je Atom - Kreisring:

$$da = 2\pi p dp$$

Im Versuch gibt es aber viele Atome. Die Folie sei so dünn, dass es unwahrscheinlich ist, dass ein Teilchen zwei Stöße macht. Aktive Fläche aller Atome der Folie:

$$dA = 2\pi p dp \cdot NDA$$

¹⁷Zu der Zeit war es selbstverständlich, dass Professoren Bücher schrieben

D - Dicke der Folie. N - Dichte der Atome. A - Beleuchtete Fläche. NDA ist mittlere Anzahl der Atome, die nacheinander angeordnet sind.

Stoßwahrscheinlichkeit:

$$W = \frac{dA}{A} = 2\pi p dp \cdot ND^{18}$$

Bruchteil der Abgelenkten Teilchen zwischen θ und $\theta + d\theta$:

$$\underbrace{\frac{dn'}{n}}_{\text{Zahl Projektil}} = 2\pi ND p dp$$

Diese Teilchen durchsetzen einen "Kreisring" (genauer - einen Raumwinkelement, d.h. einen Kreisring auf der Oberfläche einer Kugel). Da wir früher den halben Winkel schon benutzt haben, rechnen wir wieder auf $\frac{\theta}{2}$ um:

$$\Delta\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta = 4\pi \sin\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2} d\theta$$

Zähleröffnung: $d\Omega$. Nachweisanzahl (Zahl der Lichtblitzen):

$$\begin{aligned} dn &= dn' \frac{d\Omega}{\Delta\Omega} \\ \frac{dn(\theta, d\Omega)}{d\Omega} &= n \frac{Z^2 e^4 DN}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v_0^4 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \end{aligned}$$

Wichtig: Anzahl der Ereignisse geht mit $\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$

Kritik. Die Formel besagt:

$$\frac{dn}{d\Omega} \xrightarrow{\theta \rightarrow 0} \infty$$

Antwort: dies erfolgt bei $p \rightarrow \infty$, in Wirklichkeit muss aber gelten:

$$p < \frac{\Delta r}{2}, \text{ wobei } \Delta r - \text{mittlerer Atomabstand}$$

damit das Teilchen nicht auf andere Atome stößt. ¹⁹

¹⁸ ND wird von Physikern "Massen"-Belegung genannt.

¹⁹Singularität tritt immer auf, wenn man Wechselwirkung eines Teilchens mit nur einem Atom betrachtet.

Grenzfall $p \rightarrow 0$. In kleineren Abständen zeigt sich der Unterschied zwischen dem Kernkraftpotential und dem Coulombpotential, mit Streuexperimenten kann man dieses Potential messen.²⁰ Ergebnis: die Coulomb-Formel gilt bis Abstand $p = 6 \cdot 10^{-15}m \Rightarrow$ Radium des Atomkerns ist kleiner als $6 \cdot 10^{-15}m$. Problem bei sehr hohen Energien: inelastische Stöße. Frage: wie groß sind unsere Projektile (sie müssen kleiner als Targets sein). Andere Frage: wenn Kerne und Elektronen so klein sind, warum sind Atome ausgedehnt? Man könnte Atome als Planetensystem ansehen, mit Elektronen, die um den Kern kreisen. Dieser Ansatz funktioniert aber nicht: laut Maxwell-Gleichungen müssen Elektronen bei Kreisbewegung Strahlung abgeben. Damit verlieren sie die Energie und fallen in den Kern hinein. Der richtige Weg zur Beschreibung des Atoms führt über Photoeffekt und Comptoneffekt.

3 Teilchen und Wellen

3.1 Photoeffekt, Comptoneffekt

Experiment von Hallwachs (1859-1922). Eine Zinkplatte wird durch Amalgamieren aktiviert²¹ und an einen Elektrometer angeschlossen. Dann wird die Platte mit einer Quecksilberlampe (UV-Strahlung) beleuchtet. Wenn der Elektrometer mit $+3kV$ aufgeladen ist, so passiert nichts, wenn mit $-3kV$, so entlädt er sich schnell. Wenn man Glas zwischen der Lampe und der Platte stellt, entlädt sich der Kondensator nicht.

H. Hertz hat gemerkt bei Untersuchung der Entladungen: mit Tageslicht entstehen die Entladungsfunken bei größeren Abständen als im dunklen Raum.

Lenards Versuch (24.12.1900)

- Erzeugt Kathodenstrahlen durch UV-Licht.
- Zeigt dass die Menge der befreiten Elektronen mit der Lichtmenge wächst, nicht aber die Geschwindigkeit.

Einstein

- März 1905: Quantenhypothese des Lichtes $E = h\nu$.
- Mai 1095: Brownsche Molekularbewegung.

²⁰Man benutzt heutzutage Protonen als Projektile.

²¹D.h. mit Quecksilber, heutzutage verboten.

- Juni 1905: Relativitätsprinzip.
- September 1905: $E = mc^2$

Photozelle. Durch Beleuchtung - Auslösung von Elektronen. Rote Beleuchtung - kein Effekt (größere Wellenlänge - kleinere Energie). Die Spannung entsteht erst bei Gelb obwohl die Lampe Intensitätsmaximum bei Rot hat. Effekt hängt also nicht von der Menge der Photonen, sondern von der Wellenlänge ab.

Photoeffekt.

- Es gibt eine Grenzfrequenz des Lichtes unter der kein Photoeffekt stattfindet.
- Einstein (1905): Energie eines Photons ist

$$E_{\text{photon}} = h\nu$$

h - Planckscher Wirkungsquantum, $h = 6,626\,076(4) \cdot 10^{-34} \text{Js}$. Oft wird auch \hbar verwendet: $\hbar = h/2\pi$.

- Energie des austretenden Elektrons:

$$E_{\text{elektron}} = h\nu - W_{\text{austritt}}$$

W_{austritt} ist die Bindungsenergie eines Elektrons, die nötig ist um es zu befreien. Aus der Formel folgt: Steigung im Diagramm $V_0(\nu)$ ist gleich $\frac{h}{e}$.

Photomultiplier. Um Photonen zu registrieren, benutzt man mehrere Verstärkerstufen - Metallplatten mit Alkalischtung. Photon befreit in der ersten Platte ein Elektron, das wird im elektrischen Feld beschleunigt, löst in der zweiten Platte weitere Elektronen aus etc. bis es so viele Elektronen gibt, dass man sie registrieren kann.

Channeltron Eine "Glasschnecke", in der Sekundäremission passiert, wenn Photonen oder Elektronen die Wand treffen. Glas hat hohen Sekundäremissionskoeffizienten (man kann sogar durch Reibung Elektronen freisetzen).

Microchannelplate. Mehrere kleine Röhren in eine Platte stapeln - Bündel von Glasfasern. Kann in Nachtsichtgeräten verwendet werden.

Arthur Holly Compton(1892-1962)

- 1922 Wellenlängenverschiebung bei der Röntgenstreuung (Compton-Effekt).
- 1927 Nobelpreis (zusammen mit C.T.R.Wilson der den Preis für die Nebelkammer bekommen hat).
- Entdeckt Totalreflektion von Röntgenstrahlen.
- Mißt Wellenlänge von Röntgenstrahlen mit Gitter in "grazing incidence"
⇒ verbesserter Wert von e .

Compton-Streuung. Streuung von Photonen kurzer Wellenlänge (monochromatisches Licht) auf Elektronen (1921). Teil der gestreuten Strahlung hat größere Wellenlänge als zuvor - die Photonen übergeben Energie an Elektronen, wie beim Billiardspiel ²² (kleinere Energie bedeutet größere Wellenlänge). Da das Photon sich in dieser Situation wie eine Billiardkugel verhält, wird ihm ein Impuls zugeschrieben: $p = \frac{h}{\lambda}$.

Im Folgenden wollen wir die Abhängigkeit der Änderung der Frequenz ν von dem Streuwinkel θ ausrechnen. Mit φ wird der Winkel zwischen dem ursprünglichen Impuls des Photons und dem Impuls des Elektrons nach dem Stoß bezeichnet. Man beachte, dass φ unbekannt ist.

Energiebilanz (relativistisch):

$$\begin{aligned}h\nu + m_0c^2 &= \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + h\nu' \\ \nu - \nu' &= \Delta\nu \\ h^2(\Delta\nu)^2 + 2h\Delta\nu m_0c^2 + m_0^2c^4 &= \frac{m_0^2c^4}{1 - v^2/c^2} \\ h^2(\Delta\nu)^2 + 2h\Delta\nu m_0c^2 &= m_0^2c^4 \frac{v^2}{c^2 - v^2}\end{aligned}$$

Impuls in y -Richtung:

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \sin \theta - mv \sin \varphi$$

In x -Richtung:

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \theta + mv \cos \varphi$$

²²Ein Teil der gestreuten Strahlung hat die gleiche Wellenlänge als zuvor. Dies ist die Strahlung, die an massiven Teilchen, z.B. an Kernen gestreut wird.

Nach $\sin \varphi$ auflösen um φ zu eliminieren:

$$\begin{aligned}
 \sin \varphi &= \frac{h\nu'}{c} \cdot \frac{\sin \theta}{m\nu} \\
 \cos \varphi &= \frac{1}{m\nu} \cdot \frac{h}{c} [\nu - \nu' \cos \theta] \\
 1 &= \frac{h^2}{c^2} \cdot \frac{1}{m^2\nu^2} [\nu'^2 \sin^2 \theta + (\nu - \nu' \cos \theta)^2] \\
 m^2 c^2 \nu^2 &= h^2 [\nu'^2 + \nu^2 - \nu\nu' \cos \theta] \\
 \frac{m_0^2 c^4 \nu^2}{c^2 - \nu^2} &= h^2 [(\Delta\nu)^2 + 2\nu\nu'(1 - \cos \theta)] \\
 &= h^2 [(\Delta\nu)^2 + 2\nu(\nu - \Delta\nu)(1 - \cos \theta)] \\
 \frac{\Delta\nu}{\nu(\nu - \Delta\nu)} &= \frac{h}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta) \\
 \Delta\lambda &= \frac{c}{\nu - \Delta\nu} - \frac{c}{\nu} \\
 \Rightarrow \quad \Delta\lambda &= \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta)
 \end{aligned}$$

Die Größe $\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$ heißt Compton-Wellenlänge.

3.2 Mößbauereffekt

Rudolf Mößbauer (1929-)

- 1955 Diplom bei Maier-Leibnitz.
- 1958 Promotion (Heidelberg).
- Entdeckung der "rückstoßfreien Emission von γ -Quanten".

Zwei Kerne: Quelle und Absorber. Wenn die Quelle ein γ -Quant emittiert, erhält sie einen Impuls p , damit auch eine Rückstoßenergie von ²³

$$\Delta E = \frac{p^2}{2M}$$

Die Energie des γ -Quants wird dadurch um ΔE verschoben. Die gleiche zusätzliche Energie ist aus dem gleichen Grund auch für die Absorption nötig. Als Ergebnis kann das Quant nicht mehr vom Absorber aufgenommen werden,

²³Das gleiche passiert auch mit sichtbarem Licht, da ist aber die übertragene Energie so klein, dass sie vernachlässigt werden kann.

weil die Frequenz nicht mehr passt. Deswegen kann man das Spektrum des Kerns nicht mehr so einfach studieren wie man es mit sichtbarem Licht macht. Mößbauer hat folgendes entdeckt: wenn ein Atom sich in einem Kristallgitter befindet, so nimmt unter Umständen das gesamte Gitter den Impuls auf. In diesem Fall ist die Masse M in der obigen Formel gleich der Masse des ganzen Kristallstücks:

$$\Delta E = \frac{p^2}{2M_{\text{Kristall}}}$$

ΔE wird damit sehr gering und die Kernresonanzabsorption kann stattfinden.²⁴

Wenn man nun die Quelle und den Absorber mit der Geschwindigkeit von einigen cm/s relativ zueinander bewegt, so ändert sich die Frequenz wegen des Dopplereffekts. Diese Änderung genügt um die Absorption wieder unmöglich zu machen. Man kann damit Atome mit sehr hoher Energieauflösung (spektraler Auflösung) studieren. Man misst die Absorptionsintensität bei verschiedenen Geschwindigkeiten und erhält damit das so genannte Mößbauer-Spektrum. In den früheren Experimenten wurde die Quelle auf ein rotierendes Rad montiert und dadurch die Relativbewegung erreicht.

Pound und Rebka haben das Mößbauereffekt eingesetzt um die Messung der Gravitationsrotverschiebung durchzuführen.²⁵

3.3 Das Elektron als Welle

Wir müssen komplementäre Beschreibungen für das Elektron benutzen: als Teilchen und als Welle. Folgende Effekte sind ein Hinweis darauf, dass das Elektron Interferenzfähig (Beugungsfähig) ist, also Welleneigenschaften hat.

- **Ramsauereffekt (1921)** Zusammenstöße mit Atomen. Bestimmte Atome (Edelgase, z.B. Argon) sind für Elektronen mit kleineren Energien "durchsichtig". Hinweis auf Interferenz: wenn die Wellenlänge vergleichbar mit Durchmesser des Atoms ist, können sich die Elektronen um den Atom "herumbiegen". Bei großen Energien nicht mehr - Wellenlänge wird kleiner.
- **Davisson-Germer:** Kristallbeugung/Interferenz von Elektronen. Als Funktion des Streuwinkels und Energie findet man an einer Stelle eine ausgeprägte Interferenzstruktur. Man braucht dafür langsame Elektronen ($E < 100eV$). Mit schnellen geht es nicht.

²⁴Der erste Versuch wurde mit $^{191}_{77}I$ durchgeführt.

²⁵Phys. Rev. Letters 4, 337 (1960)

- **Elektronenbeugung am Halbraum.** Beugung von Elektronen an einer Halbebene (Al_2O_3 -Folienkante). Auch an einem dünnen Draht.
- **Interferenz am "Biprisma".** Frenelsche Doppelprisma: zwei Spiegeln mit sehr kleinem Winkel dazwischen erzeugen zwei Bilder, die ein bisschen versetzt sind \Rightarrow Interferenz. Für Elektronen benutzt man ein elektrostatisches Biprisma: ein aufgeladener Draht fokussiert zwei Elektronenstrahlen aus der gleichen Quelle auf den Bildschirm.
- **Debye-Scherrer Difraktion** mit Elektronen am Kristallpulver.
- **Laue-Diagramme** mit Elektronen.

Dasselbe kann man mit Neutronen machen: Neutronenbeugung, Laue, Debye-Scherrer, Monochromator mit Bragg-Reflexion. Damit kann man z.B. Strukturfehler in Materialien testen.

4 Die ältere Quantentheorie

4.1 Das Bohrsche Atommodell

Niels Hendrik Bohr

- Geboren 7.10.1885.
- 1911 Dr. Phil. (Elektronentheorie der Metalle)
- Stipendiat der Carlsberg-Stiftung, zunächst arbeitet in England bei J.J.Thomson.
- 1912 Arbeit mit Rutherford.
- 1912 Privatdozent in Dänemark.

Idee für die Lösung des Problems mit Strahlung im Atom (siehe [oben](#)): man muss dem Atom "verbieten" zu strahlen.

Postulate von Bohr:

1. Die klassischen Bewegungsgleichungen gelten auch für Elektronen im Atom, aber es sind nur bestimmte diskrete Bahnen (Energiezustände E_n) erlaubt.

2. Bahnen sind durch Quantelung des Drehimpulses festgelegt:

$$l = mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

3. Die Bewegung auf diesen Bahnen erfolgt strahlungslos. Die Emission von Lichtwellen erfolgt bei spontanen Übergängen zwischen zwei Bahnen n und n' gemäß:

$$\boxed{h\nu = E_n - E_{n'}}$$

Wir betrachten wasserstoffähnliche Ionen: H, He^+, Li^{++} , d.h. Kern mit Ladung Ze , und 1 Elektron mit Ladung $q = -e$ im Abstand r_n . Kraftgleichgewicht:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{m_0 v_n^2}{r_n} = m_0 r_n \omega_n^2$$

Drehimpuls:

$$m_0 v_n r_n = m_0 r_n^2 \omega_n = n\hbar$$

Geschwindigkeit:

$$\begin{aligned} v_n &= \frac{n\hbar}{m_0 r_n} \\ \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} &= \frac{m_0}{r_n} \cdot \frac{n^2 \hbar^2}{m_0^2 r_n^2} \\ \Rightarrow r_n &= \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{Ze^2 m_0} \end{aligned}$$

Damit liegen die Bahnen fest. Wichtig: Bahnenradien verhalten sich wie Quadrate der Indizes:

$$\boxed{r_n \sim n^2}$$

n heißt *Hauptquantenzahl*. Sonderfall $Z = 1$ (Wasserstoff):

$$r_1(H) = 0,529 = a_0$$

a_0 gehört historisch zu r_1 , heißt *der 1. Borsche Radius*. Bestätigung der Theorie: a_0 passt von der Größenordnung her zu Wasserstoff.

Mit wachsendem Z zwei Trends: einerseits mehr Elektronen, andererseits ist der Radius proportional zu $\frac{1}{Z}$. Die schwereren Atome sind also nicht unbedingt viel größer, z.B. Helium und Neon sind fast genauso groß wie Wasserstoff.

Umlauffrequenz:

$$\omega_n = \frac{n\hbar}{m_0 r_n^2} = \frac{Z^2 e^4 m_0}{\hbar^3 n^3}$$

Für den ersten Borschen Radius:

$$\omega_1(H) \approx 10^{16} s^{-1}$$

also Ultravioletlicht. Die Theorie von Thomson ergab dafür bessere Werte!

Energiezustände: Kinetische Energie ist durch die Frequenz festgelegt, potentielle - durch den Radius

$$\begin{aligned} E_n &= E_{kin} + E_{pot} \\ E_{kin} &= \frac{1}{2} m_0 v_n^2 \end{aligned}$$

Es ist aber nicht selbstverständlich die klassische Formel zu nehmen, da die Geschwindigkeit sehr groß sein kann.

$$\begin{aligned} E_{pot} &= \int_{\infty}^r \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r'^2} dr' = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ v_n^2 &= \left(\frac{n\hbar}{m_0 r_n} \right)^2 \\ &= \left[\frac{n\hbar}{m_0} \cdot \frac{Ze^2 m_0}{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0} \right]^2 \\ &= \frac{Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \\ E_n &= \frac{m_0}{2} \cdot \frac{Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2 m_0}{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0} \\ E_n &= -\frac{1}{2} \cdot \frac{Z^2 e^4 m_0}{\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich die Ionisationsenergie des Wasserstoffs:

$$E_1(H) = -13,59 eV$$

Dies stimmt mit Messungen überein also Bestätigt die Theorie.
Für beliebige Atome ergibt sich:

$$E_1(Z) = Z^2 \cdot E_1(H)$$

Also die Spektren der größeren Atome sind genauso aufgebaut wie die des Wasserstoffs, nur in den Bereich der kurzen Wellenlängen verschoben.

Strahlungsfrequenz beim Energieübergang:

$$\begin{aligned}\bar{\nu}_{nn'} &= \frac{1}{hc}(E_n - E_{n'}) \\ &= \frac{Z^2 e^4 m_0}{64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^3 c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \\ &= Z^2 \cdot R_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)\end{aligned}$$

R_∞ heißt Rydbergkonstante.

Serie: Übergänge von verschiedenen Zuständen zu einem bestimmten Zustand.

- Lyman - Ultraviolet (Übergang zum Grundzustand).
- Balmer - sichtbar (zum 2. Zustand).
- Paschen, Brackett, Pfund - Infrarot (zu den Zuständen 3, 4, 5 etc).

Rydberg-Atome Sehr großes Wasserstoff mit $n \gtrsim 50 - 500$

$$r_n = n^2 a_0, \text{ damit } r_{100} \approx 5 \cdot 10^{-7} m$$

Dies ist die Größe einer Bakterie. Solche Atome kann man wirklich erstellen, sie sind aber sehr instabil, da die Bindungsenergie minimal ist. Die größeren Atome sind wasserstoffähnlich, da der Kern mit $Z - 1$ Elektronen abgeschirmt wird und ist damit vom Sichtpunkt des äußeren Elektrons aus genau wie ein Wasserstoffkern. Man kann also theoretisch alle Atome zu Rydbergatomen machen. Für diese Experimente sind Alkalien beliebt: man kann die Übergänge mit Laser machen. Rydberg-Atom im elektrischen Feld wird mit Laser bestrahlt, das äußere Elektron wird ausgerissen, das Ion eingefangen. Effekt nur bei bestimmten Laserfrequenzen.

Argumente für die Richtigkeit des Bohrschen Modells. ²⁶

- Erklärung der Balmerreihe, Vorhersage anderer Serien, die man nachher entdeckt hat.

²⁶Ganz richtig ist das Modell nicht.

- Zweikörperproblem: **Mitbewegung des Kerns** kann zu einem spektroskopisch messbaren Effekt führen. Reduzierte Masse:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Damit die richtige Rydbergkonstante:

$$R_H = R_\infty \frac{1}{1 + \frac{m_0}{m_p}}$$

⇒ *Isotopie-Effekt* des Wasserstoffs (Spektrumunterschied für verschiedene Isotope). Z.B. für Deuterium eine Wellenlängenverschiebung der α -Linie bezüglich der des einfachen Wasserstoffs um $\Delta\lambda \simeq 3$.

- **Triumph von Bohr.** Erklärung der Pickeringserie von Helium im Sternlicht²⁷:

$$\nu = 4R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Der Vorteil des Bohrschen Modells ist, dass es mit sehr wenigen Annahmen auskommt.

Korrespondenzprinzip. Klassische Vorstellung: Strahlung hat genau die gleiche Frequenz, wie die Quelle. Im Bohrschen Modell ist das aber nicht so. Das Verhalten der Atome wird klassisch für große Quantenzahl n (Rydberg, Strahlungsfrequenz bei $n = 100$ ist ungefähr gleich der Umlauffrequenz)

Müonen Atome μ^- -Meson hat Masse $m_\mu = 273m_e$. Solches Meson kann im Atom das Elektron ersetzen. Lyman-Serie:

$$h\nu = R_\infty \left(\frac{m_\mu}{m_0} \right) \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Hier geht es ein, dass der Kern ausgedehnt ist, da das Müon sich sehr nah dran befindet. Es kann sogar "im Kern" sein. Man kann somit Müonen als Sonden betrachten, die es erlauben, die interne Atomstruktur zu studieren.

²⁷Helium in der Luft war damals noch unbekannt. Hohe Ionisationsenergie führt dazu, dass keine Übergänge stattfinden, also man kann die Heliumserie in der Luft kaum beobachten. Um ein Ion zum Leuchten anzuregen muss man es erst ionisieren. In einer Gasentladung nehmen aber die anderen, aktiveren Atome die Elektronen auf, für Helium bleibt nichts übrig. Spektrum kann man also nur dann beobachten, wenn man reines Helium hat. Erst wenn man entsprechende Technik hatte, konnte man Helium auf der Erde spektroskopisch untersuchen.

4.2 Bohr-Sommerfeld Modell

Problem: Feinstruktur der Wasserstofflinien, z.B. hat α -Linie eine Doppelstruktur. Erklärung von Sommerfeld: Elektronen können sich auf Ellipsenbahnen befinden. Näher am Kern ist die Geschwindigkeit größer, damit auch die Energie. Also sind nicht alle Energien für die gleichen Orbits gleich, es gibt eine kleine Aufspaltung. Die Bahn wird durch zwei Quantenzahlen beschrieben: n - Hauptachse und k - Nebenachse der Ellipse.

Ergebnis der Rechnungen von Sommerfeld:

$$E_{n,k} = -Rhc \cdot \frac{z^2}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 z^2}{n^2} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \right]$$
$$\alpha = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 hc} \simeq \frac{1}{137}$$

n heißt Hauptquantenzahl, k - Drehimpulsquantenzahl. ²⁸

Versuch von Frank und Hertz (1914). Zeigt, dass die Übergabe der Energie an Atome nur in diskreten Mengen passieren kann, dies bestätigt das Bohrsche Modell. Elektronen werden in einer Gasröhre mit elektrischem Feld beschleunigt. Wenn die Elektronen genügend Energie haben, fangen sie an Atome anzuregen und verlieren die eigene Energie, der Auffängerstrom senkt. Wenn man nun den Auffängerstrom in Abhängigkeit von der Beschleunigungsspannung (Gitterspannung) misst, ergeben sich Minima in Abhängigkeit von der Anzahl der Ionisationsstöße, die bei gegebener Energie nacheinander erfolgen können. Elektronen müssen also bestimmte minimale Energie haben, um Atome anzuregen.

5 Wellenmechanik

5.1 de Broglie Wellen

Prinz Louis de Broglie (1923) postuliert: falls Elektron eine Welle ist, dann gilt²⁹:

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

²⁸Heute wird als Drehimpulsquantenzahl $l = k - 1$ genommen.

²⁹Vergleiche Compton-Impuls vom Photon: $p = \frac{h}{\lambda}$. De Broglie wusste allerdings nicht vom Impuls des Photons, der Compton Versuch wurde unabhängig im Jahr 1923 durchgeführt.

Bohrs Kreisbahn:

$$\begin{aligned}
 mv \cdot r &= n\hbar \\
 \underbrace{mv}_{\text{Impuls}} \cdot 2\pi r &= nh \\
 \frac{h}{\lambda} \cdot 2\pi r &= nh \\
 2\pi r &= n\lambda
 \end{aligned}$$

Materiewelle kann also Bohrs Quantisierungsbedingung erfüllen.

Elektrisches Feld

Materiefeld

Lichtwelle - Photon

Materiewelle - Teilchen

gemeinsam: $p = \hbar k$

$$E = h\nu = pc$$

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$$

Feldamplitude: $\vec{E}, \vec{H}(\vec{x})$

Wahrscheinlichkeitsamplitude

Intensität $|E|^2 = EE^*$

Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2 = \psi\psi^*$

$$\text{gemeinsam: } \left. \begin{aligned} E &= E_0 e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \\ \psi &= \psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \end{aligned} \right\} \text{Ebene Welle, komplexe Amplitude}$$

Energie im Volumen ΔV :

$|E|^2 \cdot \Delta V \triangleq$ "Anzahl der Photonen"

Aufenthaltswahrscheinlichkeit in

ΔV :

$|\psi|^2 \cdot \Delta V \triangleq$ "Anzahl der Teilchen"

Bohr Modell erklärt die Dualität der Teilchen (Wellennatur des Elektrons) nicht. Idee von de Broglie: es wird ein Materiefeld eingeführt mit Amplitude $\psi(x, y, z, t) \in \mathbb{C}$ (im Allgemeinen komplex). Welche physikalische Bedeutung hat diese Amplitude? Sie gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in einem infinitesimalen Stück des Raumes an ³⁰:

$$|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^* = \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$$

Integral von $|\psi|^2$ über den ganzen Raum soll 1 ergeben:

$$\iiint_{\text{ganzer Raum}} |\psi|^2 d^3x = 1$$

³⁰Vergleiche mit Intensität des Lichtes: $I = |E|^2 = E \cdot E^*$

Man braucht aber nicht über Gebiete zu integrieren, die für das Teilchen nicht zugänglich sind (Potentialtopf etc.) Jetzt ist das Teilchen nicht mehr punktförmig, wir können nicht mit Sicherheit angeben, wo es sich befindet. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion kann Singularitäten besitzen (d.h. an einigen Stellen unendlich werden). Dies ist aber nicht gefährlich. Betrachte z.B. den klassischen Pendel:

$$\begin{aligned}x &= x_0 \sin \omega t \\ \dot{x} &= \omega x_0 \cos \omega t\end{aligned}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Intervall Δx (die im Intervall verbrachte Zeit) ist

$$dw = \frac{dx}{v}$$

Beim Grenzübergang ist der Ausdruck im Umkehrpunkt singulär (da die Geschwindigkeit 0). Die eigentliche Wahrscheinlichkeit, d.h. der Wert

$$\int_{\Delta x} \frac{dw}{dx} dx$$

besitzt aber keine Singularitäten³¹. Die Verwendung der Kugelkoordinaten kann zu Singularitäten führen: das Maß in Kugelkoordinaten ist $4\pi r^2 dr$, d.h. es wird kleiner im Zentrum, von daher ist das gemessene Wert größer. Beim Integrieren verschwindet die Singularität nach Multiplikation mit dem Faktor $4\pi r^2$. In kartesischen Koordinaten gäbe es keine Singularität. Also: physikalisch sinnvoll ist nur das Produkt $|\psi|^2 dV$ - Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen in dV ist.

5.2 Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Klassische Energie ist gegeben durch

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_p(x)$$

gesucht: DGL, die für ebene Wellen diesen Zusammenhang ergibt. Ebene Welle entspricht einer gleichmäßigen und geradlinigen Bewegung:

$$\psi = \psi_0 \sin e^{ikx}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} - \text{Wellenzahl}$$

³¹Singuläre Funktionen kommen in der Statistik oft vor, auch in der Quantenmechanik. Man kann solche Funktionen mit Hilfe des Lebesgue-Maßes integrieren.

Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E_p(x)\psi = E\psi$$

Wenn ebene Welle diese Gleichung lösen soll, dann

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2 e^{ikx} + E_p(x)e^{ikx} = Ee^{ikx}$$

$$\underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{=\frac{p^2}{2m}} + E_p(x) = E$$

Identifiziere

$$p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

Dann erfüllt der erste Term die Energiegleichung, wobei der Impuls neu definiert ist. Übersetzung $p \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}$ heißt *Impulsoperator*. Man kann in Ableitungen der Wellenfunktionen Sachen wie Energie, Impuls usw. wiederfinden.

Freies Teilchen. Sonderfall $E_p(x) = 0$.

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \Rightarrow k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

2 Lösungen:

$$k = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow \boxed{\psi = Ae^{i|k|x} + Be^{-i|k|x}}$$

Wellenfunktion ist also immer Summe einer Vorwärts- und Rückwärtswelle.

5.3 Zeitabhängige Schrödingergleichung

Schrödinger hat die Gleichung allgemeiner formuliert für den Fall, wenn Energie nicht mehr konstant ist:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E_p(x)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Falls

$$\psi(x, t) = \tilde{\psi}(x)e^{-iEt/\hbar}, \text{ also } \omega = \frac{E}{\hbar}$$

dann steht links in der Gleichung

$$\begin{aligned}
 & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial x^2} + E_p(x) \tilde{\psi} \right] e^{-Et/\hbar} \\
 &= i\hbar(-i) \frac{E}{\hbar} \tilde{\psi} e^{iEt/\hbar} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial x^2} + E_p(x) \tilde{\psi} \\
 &= E \tilde{\psi}
 \end{aligned}$$

Also wieder die zeitunabhängige Gleichung

Die Schrödingergleichung hat Lösungen vom Typ $e^{-iEt/\hbar}$, aber nicht $e^{+iEt/\hbar}$. Die zweite Lösung wäre auch mathematisch korrekt, wir wollen aber keine zeitlich rückwärtslaufende Welle zulassen. In Elektrodynamik gibt es was verwandtes - Ausstrahlbedingung, die besagt, dass eine Welle sich von der Quelle weg und nicht auf die Quelle zu bewegt (obwohl die Maxwell Gleichungen beide Möglichkeiten erlauben).

Genauso wenig sind $\sin\left(\frac{Et}{\hbar}\right)$ und $\cos\left(\frac{Et}{\hbar}\right)$ Lösungen der Gleichung. ψ ist komplex, es ist keine reelle Lösung möglich. Insbesondere ist ψ -Funktion keine physikalisch messbare Größe. Der Wert

$$|\psi|^2 = \left[\tilde{\psi}^* e^{+iEt/\hbar} \right] \left[\tilde{\psi} e^{iEt/\hbar} \right] = \tilde{\psi}^*(x) \tilde{\psi}(x) = |\tilde{\psi}|^2$$

ist zeitunabhängig (stehende Welle) - "stationäre Lösung". Nicht-stationäre Zustände sind Überlagerungen von stationären Zuständen.

$$\begin{aligned}
 \psi &= c_1 \tilde{\psi}_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \tilde{\psi}_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \\
 P(t, x) &= |\psi(x, t)|^2 \\
 &= \left(c_1^* \tilde{\psi}_1^* e^{+iE_1 t/\hbar} + c_2^* \tilde{\psi}_2^* e^{+iE_2 t/\hbar} \right) \cdot \left(c_1 \tilde{\psi}_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \tilde{\psi}_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right) \\
 &= |c_1 \tilde{\psi}_1|^2 + |c_2 \tilde{\psi}_2|^2 + c_1 c_2^* \tilde{\psi}_1 \tilde{\psi}_2^* e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} + c_1^* c_2 \tilde{\psi}_1^* \tilde{\psi}_2 e^{+i(E_1 - E_2)t/\hbar}
 \end{aligned}$$

c_1 und c_2 beschreiben den Ausgangszustand des Systems - "Präparation". $\hbar\omega = E_1 - E_2$ - Bohr Bedingung, ergibt sich aus der Gleichung. Freies Teilchen: $\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$.

5.4 Potentialprobleme

5.4.1 Potentialstufe

Analog: wie tief dringt der Ball in die Wand ein? Freies Teilchen mit Energie kleiner als die Energie der Barriere:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_0) = 0 \quad \text{für } E < E_0$$

$$\begin{aligned}\alpha^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - E) > 0 \\ \psi_2'' - \alpha^2\psi_2 = 0 &\implies \psi_2 = e^{\alpha x}, e^{-\alpha x}, \text{ unphysikalisch} \\ \psi_2 &= ce^{-\alpha x}\end{aligned}$$

Anpassung: Stetigkeit bei $x = 0$: $A + B = C$, Differenzierbarkeit: $ik(A - B) = -\alpha C$.

$$\begin{aligned}B &= \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha}A & C &= \frac{2ik}{ik - \alpha}A \\ \psi_1(x) &= A \underbrace{\left(e^{ikx} + \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} e^{-\alpha x} \right)}_{\text{einlaufende Welle}} & \psi_2(x) &= \underbrace{\frac{2ik}{ik - \alpha} A e^{-\alpha x}}_{\text{rücklaufende Welle}} \\ |B|^2 &= \left| \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} \right|^2 |A|^2 = \frac{(ik + \alpha)(-ik + \alpha)}{(ik - \alpha)(-ik - \alpha)} |A|^2 = |A|^2\end{aligned}$$

Zahl der reflektierten Teilchen ist gleich der Zahl der einlaufenden Teilchen, aber Phase geändert.

Nun betrachten wir den Fall wenn die Energie des Teilchens größer als die Energie der Barriere ist, d.h. $E > E_0$:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k'^2\psi_2 &= 0, \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_0) \\ \psi_2 &= Ce^{ik'x}\end{aligned}$$

Wiederum: Stetigkeit und Differenzierbarkeit ergeben: $A + B = C$ und $k(A - B) = k'C$.

$$\begin{aligned}B &= \frac{k - k'}{k + k'}A & \psi_1 &= A \left(e^{ikx} + \frac{k - k'}{k + k'} e^{-ikx} \right) \\ C &= \frac{2k}{k + k'}A & \psi_2 &= \frac{2k}{k + k'} A e^{ik'x}\end{aligned}$$

Interpretation:

1. $\left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 < 1$, ergibt sich aus der Dreiecksungleichung.
2. $\left| \frac{2k}{k + k'} \right|^2 < 1$.

Dieses bedeutet, dass die Intensität sowohl von der reflektierten Welle als auch von der fortlaufenden Welle, die durch die Barriere gekommen ist, kleiner als die Ursprüngliche Intensität ist. Frage: gilt hier, dass $|A|^2 = |B|^2 + |C|^2$. Nein, es gilt Flussenergieerhaltung:

$$v|A|^2 = v|B|^2 + v'|C|^2, \quad \text{für } v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$$

5.4.2 Teilchen im Potentialkasten

Wir betrachten einen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden der Form

$$E_p(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Wir rechnen Energie im Bezug auf den Boden des Potentialtopfs.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad 0 < x < a$$

Die Lösung

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

muss die Randbedingungen erfüllen:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0, \quad A + B = 0, \quad B = -A$$

$$\underbrace{A(e^{ika} - e^{-ika})}_{2i \sin ka} = 0 \implies ka = \pi \text{ oder } A = 0$$

Harmonische Obertöne:

$$\begin{aligned} k &= \frac{n\pi}{a} p = \frac{n\pi\hbar}{a} \\ E_n &= \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \\ \psi_n &= C \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad C = 2iA \end{aligned}$$

C kann man nicht aus den Randbedingungen, sondern aus den Anfangsbedingungen bestimmen. Es ergeben sich Energieeigenwerte. Es gibt aber nicht die Möglichkeit im Topf Nullenergie zu haben. Quadrat von ψ gleich 0 würde einfach bedeuten: es gibt kein Elektron drin. Es gibt also kein Zustand mit $n = 0$. Elektronen sind die Schwingungszustände der Saite, nicht die Saite selbst.

Wenn man Schwingungsenergie klassisch betrachtet, dann gilt

$$\begin{aligned} E &\sim \langle v^2 \rangle \\ v &\sim \omega \cos \omega t \sim \omega^2 \sim n^2 \end{aligned}$$

Es kann nur Teilchen (Lösungen) geben, die nach der Reflektion mit sich selbst konstruktiv interferieren.

Bei endlich hohen Wänden dringt das Teilchen in die Wände ein, die Knotenpunkte und Energiezustände verschieben sich.

5.4.3 Dreidimensionaler Potentialkasten

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = e\psi_z z$$

Das bedeutet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi = E\psi$$

$$\begin{aligned}\psi(x, y, z) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \\ &= e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \psi(x)\psi(y)\psi(z) \\ k_x &= \frac{n_1\pi}{a} \quad k_y = \frac{n_2\pi}{b} \quad k_z = \frac{n_3\pi}{c}\end{aligned}$$

Wellenfunktion ist also faktorisiert:

$$\psi = C \sin(n_1\pi a) \sin(n_2\pi b) \sin(n_3\pi c)$$

Für den Würfel ($a = b = c$) gilt:

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

Für beliebige Quader:

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

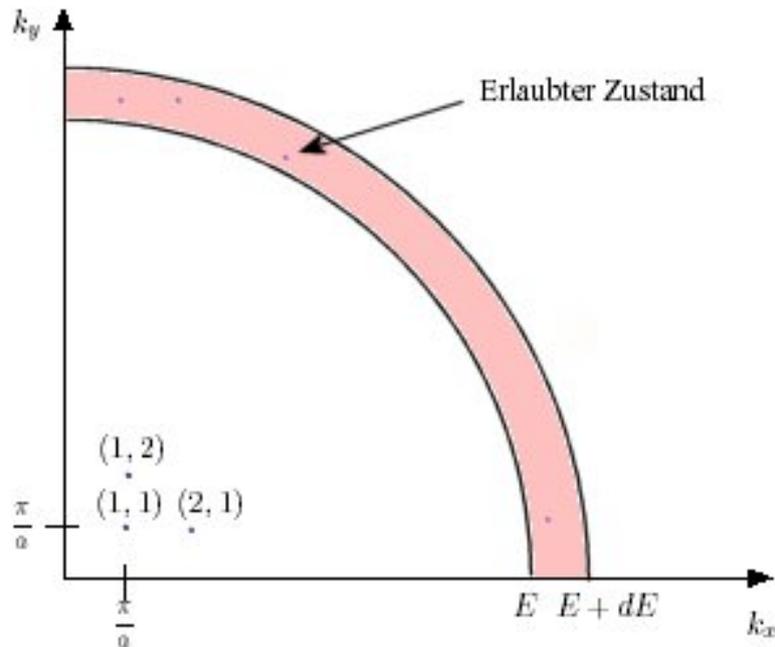
Die niedrigste Energie ist

$$E_{100} = \frac{n^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Alle anderen Energien sind Kombinationen davon:

E	(n_1, n_2, n_3)	Entartung
$3E_{100}$	(111)	1
6	(211) (121) (112)	3
9	(221) (212) (122)	3
11	(311) (131) (113)	3
12	(222)	1
14	(123) (321) (231)	6
	(132) (213) (312)	

Entartung - Zahl der unterscheidbaren Zustände mit gleicher Energie, siehe Bild.



In 2 Dimensionen entspricht einer bestimmten Energie ein Kreisring mit Fläche $2\pi k \cdot dk$. Frage: wie viele Zustände (Punkte mit ganzzahligen Werten von k_x und k_y) liegen in diesem Ring? Rechnung für einen Quadranten (da Energie positiv definit):

$$dN = \frac{1}{4} \cdot \frac{2\pi k dk}{(\pi/a)^2}$$

In 3 Dimensionen "Zwiebelschale" mit Volumen $4\pi k^2 dk$. Für einen Oktanten:

$$dN = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{(\pi/a)^2}$$

Dies entspricht einem Energieintervall $[E, E + dE]$. Umrechnen in Energie:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \frac{dk}{dE} &= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \frac{1}{2\sqrt{E}} \\ \Rightarrow dN &= \frac{a^3 m^{3/2} E^{1/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} dE \end{aligned}$$

Anzahl der Schwingungszustände, die erlaubt sind pro Energieintervall (*Entartungsgrad* oder *Zustandsdichte*):

$$\frac{dN}{dE} = g(E) = \frac{V m^{3/2} E^{1/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \sim E^{1/2}$$

V - Volumen einer Elementarzelle.

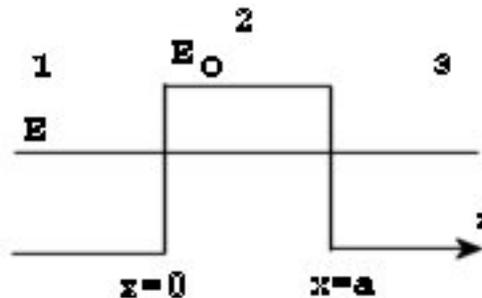
5.5 Tunneleffekt

Thema: Was tun Materiewellen an den Grenzen zwischen den Medien, wo sich die Energie ändert? Bei der Energie größer als die der Potentialstufe, verhält sich die Welle unterschiedlich von den Teilchen. Alle Teilchen würden nach klassischen Vorstellungen durchkommen, in Wirklichkeit verhalten sie sich wie Licht, d.h. ein Teil wird reflektiert und ein Teil kommt durch.

Beim Eindringen der Welle in ein Gebiet mit hohem Potential hat Welle die Form

$$\vec{E} = \varepsilon_0 e^{-\alpha x} e^{i\omega t}$$

Solche Welle heißt *evaneszente* Welle. Charakteristische Abklinglänge ist von der Größenordnung der charakteristischen Wellenlänge. Wenn die Potentialbarriere kleinere Länge hat, kann ein Teil der Welle diese Barriere überwinden. Dies passiert z.B. bei Totalreflektion elektromagnetischer Wellen. Dieses Effekt heißt *frustrierte Totalreflektion* und ist optisches Analogon des Tunneleffekts. Dieses kann man benutzen um einen wohldefinierten Anteil des Lichtes in Lichtleitern auszukoppeln. Man nimmt zwei parallele Lichtleiter, die einen Abstand kleiner als die Wellenlänge haben. Durch die evaneszente Welle findet eine Übertragung der Energie zwischen den beiden Leitern statt.



Passiert das genauso mit Materiewellen? Im Bereich 1 (siehe Bild) Wellenan-satz:

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Im Bereich 2:

$$\psi_2 = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$$

Im Bereich 3:

$$\psi_3 = A'e^{ikx}$$

Wir erlauben im Bereich 3 keine Welle, die aus $+\infty$ läuft (es wäre unphysikalisch), von daher nur ein Koeffizient. Im Bereich 2 ist exponentieller Wachstum kein Problem, wir nehmen beide Anteile damit die Randbedingungen erfüllt sind. Die Lösungen sind:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{in Bereichen 1, 3}$$

$$\alpha^2 = \frac{2m(E_0 - E)}{\hbar^2} \quad \text{im Bereich 2}$$

Wie groß ist die transmittierte Welle? T - *Transmissionsfaktor*:

$$T = \frac{|A'|^2}{|A|^2}$$

Hier keine Unterscheidung, ob $E > E_0$ oder nicht, eine Lösung geht stetig in die andere Lösung über: imaginäre Zahl wird zu reeller. Lösung im Bereich 2 ist nicht rein abfallend, die Welle wird reflektiert, deswegen kleine Steigung am Ende. Es gibt eine Reflektion sowohl an der Vorder- als auch an der Rückseite. Minima und Maxima des Transmissionskoeffizienten in Abhängigkeit von $\frac{E}{E_0}$ wegen Interferenz an der Barriere.

Fluktuationen des Ammoniaks. Spontaner Übergang zwischen zwei Isomeren des Ammoniak-Moleküls. Analogon: schwache Kopplung zweier Pendeln, Energie wird nicht erzeugt oder vernichtet, der Zustand wird gewechselt ohne Energie zu verändern. Können wir eine genaue Aussage über den jetzigen Zustand treffen, oder ist er gemischt, etwa 50/50? Man muss in Quantenmechanik nicht unbedingt reine Zustände haben.

Historisches:

- Fritz Hund (1927). Elektronische Zustände in Molekülpotentialen. Potential mit zwei Minima, die unterschiedlich tief sind, betrachtet. Wenn Energie hoch genug ist, hat man einen gemischten Zustand.
- Erste experimentelle Bestätigung: Ralph Fowler und Lothar Nordheim (1928). Feldemission im Metall.
- George Gamov (1928). Alphazerfall des Urans. Beim spontanen Zerfall haben manchmal die resultierenden Teilchen kleinere Energie als die, die für die Absorption nötig ist (d.h. die Energie des Potentialkastens).
- Gurney und Condon (1928). Qualitative Erklärung.

5.6 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

Hamilton-Funktion, die die Gesamtenergie beschreibt:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0}{2}\omega^2 x^2$$

$m_0\omega^2$ - Federkonstante ($\omega^2 = \frac{p}{m_0}$). Schrödingergleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0}{2}\omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

Falls kinetische Energie negativ ist, erhält man exponentielle Dämpfung. Falls also Lösung einen Wellencharakter haben soll, muss die Gesamtenergie größer 0 sein. Wir zeigen nun, dass diese Bedingung wirklich erfüllt ist.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi\psi^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \geq 0$$

$$\frac{m_0}{2}\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 x^2 dx \geq 0$$

Mit partieller Integration:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\psi}{dx^2} \psi^* dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left[\frac{d\psi}{dx} \psi^* \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi}{dx} \cdot \frac{d\psi^*}{dx} dx \right)$$

$$= +\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi'|^2 dx$$

$$\geq 0$$

Trick: im Hamilton Operator gibt es Struktur der Form

$$(-a^2 + b^2) = (-a + b)(a + b)$$

Wir rechnen mit Operatoren wie mit Zahlen.

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}} \xi; \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}; \quad \varphi(\xi) = \psi(x)$$

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \varphi = \varepsilon\varphi$$

Versuch zu zerlegen:

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)}_{b^+} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \left(+\frac{d}{d\xi} + \xi \right)}_b \varphi \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right)}_{\sim \text{Hamilton Operator}} \varphi + \frac{1}{2} \left(-\frac{d}{d\xi} \xi + \xi \frac{d}{d\xi} \right) \varphi \end{aligned}$$

In letzter Klammer werden zwei Operatoren vertauscht, die beiden Sachen sind nicht gleich. Wir können die Schrödingergleichung mit b -Operatoren umschreiben als:

$$b^+ b \varphi = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right) \varphi$$

b und b^+ haben eine Eigenschaft (ohne Beweis):

$$(b b^+ - b^+ b) \varphi = 1 \varphi$$

b ist linearer Operator.

$$b \cdot (b^+ b \varphi) = (\varepsilon - 1) b \varphi$$

Assoziativ:

$$\begin{aligned} (b b^+) b \varphi &= (b^+ b + 1)(b \varphi) = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right) b \varphi \\ b^+ b (b \varphi) &= \left(\varepsilon - \frac{1}{2} - 1 \right) (b \varphi) \end{aligned}$$

Zu Funktion $(b \varphi)$ gehört ein Eigenwert, der bezüglich φ um 1 abgesenkt ist. Deswegen heißt b *Vernichtungsoperator*. b^+ macht das Gegenteil, heißt *Erzeugungsoperator*. b -Operator kann absteigen, aber nicht unter 0 kommen, irgendwann wird die Lösung identisch zu 0. Es gibt also eine Wellenfunktion φ_0 zu niedrigstem Eigenwert $\varepsilon_0 > 0$ mit

$$b \varphi_0 = 0 \implies \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \varphi_0 = 0$$

Trennung der Variablen:

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi_0}{\varphi_0} &= -\xi d\xi \implies \ln \varphi_0 = -\frac{1}{2} \xi^2 + c' \\ \varphi_0 &= c e^{-\frac{1}{2} \xi^2} \text{ -Gaußkurve} \end{aligned}$$

Anders geschrieben

$$b\varphi_0 = 0 \implies b^+b\varphi_0 = \left(\varepsilon_0 - \frac{1}{2}\right)\varphi_0 = 0$$

Damit $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$ und $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Der niedrigste Energiezustand, ist also von 0 verschieden.

5.7 Heisenbergs Unschärferelation

Spalt. Wenn ein Elektron durch den Spalt geht, ändert er seinen Impuls (Impuls wird gedreht). Impuls ist unscharf mit dem Wert von $2\Delta p$.

- Unsicherheit im Raum: $\Delta x = b$ (Spaltbreite).
- Unsicherheit des Impulses:

$$\Delta p_x \simeq |p| \sin \theta = \underbrace{|p| \frac{\lambda}{b}}_{1. \text{ Minimum}} = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{b}$$

$$\Delta p_x \simeq \frac{h}{\Delta x}$$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p_x \approx h$$

Unschärfe kommt nicht dadurch zustande, dass ein Teilchen gestreut wird. Es passiert kein Zusammenstoß.

Mikroskop. Mikroskopbild ist umso schärfer, je kürzer die Wellenlänge ist. Deswegen sind Laser in DVD blau und nicht mehr rot. „Beugungsscheibchen“:

$$\Delta x \approx 2y \sin \theta = 2y \frac{\lambda}{d}$$

Nachweis des Photons geschieht, wenn der Photon im Kegel liegt:

$$\Delta p_x \leq p \sin \alpha \approx \frac{h}{\lambda} \frac{d}{2y}$$

$$\Delta x \Delta p_x = 2y \frac{\lambda}{d} \frac{h}{\lambda} \frac{d}{2y} = h$$

Erklärung von Heisenberg: Wenn man ein Teilchen scharf sehen will, nimmt man kurzwelliges Licht, das Teilchen wird davon aber stark abgelenkt, der Ort ist nicht mehr genau bestimmt, also die Unschärfe durch Wechselwirkung.

Erklärung von Bohr: Unschärfe entsteht im Moment der Beobachtung. Sie hat informationstheoretische Ursachen.

Damit ist es unmöglich, dass ein Teilchen im tiefsten Punkt der Parabel sitzt (siehe oben). In diesem Fall

$$\Delta x \Delta p = \frac{2\pi}{8} h$$

Sonst wären gleichzeitig Ort und Energie (damit auch Impuls) genau bestimmt.

6 Atome mit einem Elektron

6.1 Wasserstoff

Gesucht die Lösung der Gleichung

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi \\ H &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(r) \end{aligned}$$

mit Coulomb-Potential:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Nebenbedingungen geschrieben im Kugelkoordinatensystem:

- ψ soll normiert sein

$$\int \psi^* \psi d\vec{r} = 1; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \psi(r, \theta, \varphi) = 0$$

- Periodizität bezüglich θ und φ (Eindeutigkeit):

$$\psi(r, \theta + \pi, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi)$$

Beziehung zwischen den Koordinatensystemen:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi; \quad y = r \sin \theta \sin \varphi; \quad z = r \cos \theta$$

Transformation des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \psi \right) \\ + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0 \end{aligned}$$

Ansatz:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

Mit Einsetzen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} (RY) \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (RY) \right) \\ + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (RY) + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) (RY) = 0 \end{aligned}$$

Y hängt nur von θ und φ ab, im ersten Term können wir Y also ausklammern. Im zweiten analog für R :

$$\begin{aligned} \frac{Y}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} (R) \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (Y) \right) \\ + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (Y) + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) (RY) = 0 \end{aligned}$$

Division mit $\frac{RY}{r^2}$:

1. Term:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R \right) + \frac{2m_0 r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)$$

Ersten Term umschreiben als

$$R'' + \frac{2}{r} R' + R \left(\frac{2m_0}{r} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{\alpha}{r^2} \right) = 0$$

2. Term:

$$\frac{1}{Y} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} Y \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y \right)$$

Wenn zwei Terme zusammen gleich 0 für beliebige θ und φ sind, so müssen die beiden gleich und konstant sein. Seien die beiden Terme gleich α . Ansatz für zweite Gleichung:

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Analog Division mit $\frac{\Theta\Phi}{\sin^2 \theta}$ um zu separieren, wir kommen auf zwei Gleichungen, eine bezüglich θ , die andere bezüglich φ :

1.

$$\frac{1}{\Theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Theta \right) + \alpha \sin^2 \theta = \beta$$

2.

$$-\frac{1}{\Phi''} = \beta$$

Lösung der zweiten Gleichung:

$$\begin{aligned}\Phi'' &= -\beta\Phi \\ \Rightarrow \Phi &= \Phi_0 \cdot e^{\pm i\varphi}, \text{ wobei } m^2 = \beta\end{aligned}$$

m wird eine Quantenzahl. Wir fordern:

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$$

Mit Einsetzen:

$$e^{\pm im2\pi} = 1$$

Damit darf m nur bestimmte Werte haben, genauer: es muss gelten $m \in \mathbb{Z}$. Damit führt die Eindeutigkeitsbeziehung zur Quantisierung (jetzt mathematisch begründbar im Gegenteil zu der Theorie von Bohr).

Lösung der ersten Gleichung: wir können β loswerden, wenn wir den Wert aus (2) nehmen:

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \Theta \right) + (\alpha \sin^2\theta - m^2)\Theta = 0$$

Keine direkte Abhängigkeit von θ , Substitution: $\xi = \cos\theta$, erstmal für den Fall $m = 0$ ³²:

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{d}{d\xi} \Theta \right] + \alpha\Theta = 0 \quad (\text{Legendresche DGL})$$

Polynomansatz: wir nehmen an

$$\Theta = a_0 + \xi a_1 + \xi^2 a_2 + \dots$$

Wir müssen dafür sorgen, dass es eine Abbruchbedingung gibt, so, dass das Polynom endlich bleibt. Zwischen den Koeffizienten gibt es folgenden Zusammenhang:

$$a_{k+2} = a_k \frac{k(k+1) - \alpha}{(k+2)(k+1)}$$

³²Jetzt ist die Funktion abhängig von nur einer Variablen, wir schreiben also die totale Ableitung.

Für den Abbruch fordern wir $a_{l+2} = 0$, falls a_l der letzte Koeffizient ist (l Abbruchbedingung), damit $l(l+1) = \alpha$. Also Lösung von (1):

$$\begin{aligned}\Theta(\theta) &= \Theta_l^0 P_l(\cos \theta) \\ P_l(x) &= \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l\end{aligned}$$

Wobei P_l das so genannte *Legendre Polynom* ist. Man sieht, dass die Potenzen entweder alle gerade oder alle ungerade sind. Bei $l = 1, 2$ gibt es eine Nullstelle, bei $l = 3, 4$ zwei Nullstellen usw.

Lösung für $m \neq 0$: man benutzt das Polynom

$$P_l^m(\xi) = \text{const} \cdot (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi)$$

Beide Polynome sind von der Ordnung m , damit folgt $|m| \leq l$, sonst ist das Polynom gleich 0.

Ursprünglich war

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

damit

$$Y_l^m(\theta, \phi) = P_l^m(\cos \theta)\Phi_m(\varphi)$$

Diese Funktion heißt *Kugelflächenfunktion*, da nur für einen festen Radius definiert. Legendre Polynome werden *Kugelfunktionen* genannt. Für $l = m = 0$ ergibt sich konstante Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf der Kugelfläche mit

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

Die höheren Polynome sehen wie folgt aus:

$$\begin{aligned}Y_1^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta \\ Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}\end{aligned}$$

6.2 Drehimpulsquantisierung

³³ Drehimpuls ist wichtig, wenn man eine Raumrichtung auszeichnet (z.B. in Anwesenheit einer Kraft), dann spielt die Richtung des Impulses eine Rolle. Der Impuls L zeigt nie in Richtung L_z .

³³Die Vorlesung vom 19.12.02 kommt erst nächste Woche.

Entartung *Entartungsgrad* wird definiert als

$$k = 2 \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 2n^2$$

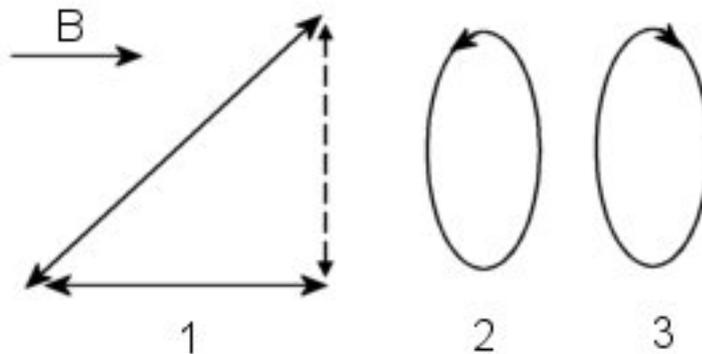
denn die Energieeigenwerte hängen nur von n ab. $2l + 1$ ist die Anzahl der Einstellmöglichkeiten von m , der Faktor 2 kommt vom Elektronenspin. Aufhebung der Entartung durch:

- Innere oder äußere Kräfte.
- Relativistische Korrekturen.

Vergleich Theorie und Experiment H_α Linie in der Balmerreihe teilt sich in mehrere Linien auf (*Dublettstruktur*). Bei noch höheren Auflösung findet man eine sog. *Feinstruktur*. Wir wollen im Folgenden diese Strukturen erklären.

1. $E \sim \frac{1}{n^2}$ stimmt recht gut, aber eine schwache Abhängigkeit von l wird ebenfalls beobachtet (relativistische Effekte).
2. Alle Spektrallinien, die von $l = 0$ ausgehen, bestehen aus 2 benachbarten Linien (Dublett). Für $l > 0$ Tripletstruktur usw (noch mehr Linien bei großen l).
3. Der Grundzustand ($n = 1, l = 0$) zeigt eine sehr feine Aufspaltung in zwei Komponenten (isotopenabhängig). Wir haben bisher den Kern als punktförmig betrachtet, der hat aber eine Ausdehnung. Hier spielt der *Kernspin* eine Rolle.
4. Aufspaltung im Magnetfeld (extern).

Im Folgenden wollen wir die Aufspaltung im Magnetfeld näher betrachten. Wir machen eine halbklassische Betrachtung, die nicht die ganze Wahrheit beschreibt. Wir betrachten ein Elektron. Elektron emittiert Licht, weil es schwingt. Wir zerlegen die Schwingung in drei Anteile. Die Komponente, die senkrecht zum Magnetfeld ist, stellen wir als Überlagerung zweier Kreisschwingungen in entgegengesetzten Richtungen dar.



Auf den Anteil 1 wirkt im Magnetfeld keine Lorentzkraft. Anteile 2 und 3 erfahren eine Frequenzänderung $\pm\delta\omega$ auf Grund der Lorentzkraft.

$$\delta\omega = \frac{1}{2} \cdot \frac{e}{m} B$$

Wird oft geschrieben als $\frac{\mu_B}{\hbar} B$, wobei $\mu_B \approx 5,65 \cdot 10^{-5} \frac{eV}{T}$, heißt *bohrsches Magnetron*. Klassische Kreisfrequenz:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} + m\omega_0^2 x - e\dot{y}B &= 0 \\ m\ddot{y} + m\omega_0^2 y - e\dot{x}B &= 0 \\ m\ddot{z} + m\omega_0^2 z &= 0 \\ \Rightarrow z &= z_0 e^{i\omega_0 t} \end{aligned}$$

Substitution

$$u = x + iy, \quad v = x - iy$$

ergibt

$$\begin{aligned} u &= u_0 e^{i(\omega_0 - \frac{eB}{2m})t} \\ v &= v_0 e^{i(\omega_0 + \frac{eB}{2m})t} \end{aligned}$$

ein Anteil wird also verstärkt und ein erniedrigt, es ergeben sich also drei unterschiedliche Frequenzen (Energieniveaus).

6.3 Normaler Zeemann-Effekt

Ein Elektron auf einer Kreisbahn erzeugt ein magnetisches Moment. Wir versuchen eine Beziehung zwischen dem magnetischen Moment und dem

Drehimpuls zu finden.

$$\begin{aligned}\mu_l &= I \cdot A = I \cdot \pi r^2 = -\frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{ev}{2} r \\ l &= r \times p = mrv \\ \Rightarrow \mu_l &= -\frac{e}{2m} l = -\frac{\mu_B}{\hbar} l\end{aligned}$$

L (Drehachse) ist aber nicht parallel zur z -Achse, also zum Magnetfeld. Wir versuchen (genauso wie für den Drehimpuls) die Eigenwertgleichung für μ_l zu finden

$$\mu_l^2 Y_{lm} = l(l+1) \mu_B^2 Y_{lm}$$

in der z -Komponente:

$$\mu_{l_z} Y_{lm} = m \cdot \mu_B Y_{lm}$$

Der Drehimpuls fängt an um die z -Achse zu präzidieren mit Frequenz $\pm\delta\omega$ (+ oder - in Abhängigkeit von der Richtung des Feldes).

$$E = -\mu_l B = -m \mu_B B$$

Die Regel ist nicht der normale, sondern *der anormale Zeemann-Effekt*, wo es mehr als zwei Linien gibt.

Auswahlregeln für (elektrische) Dipolstrahlung Zeigen, wie die Übergänge passieren sollen. Wir definieren die *Parität* der Wellenfunktion als:

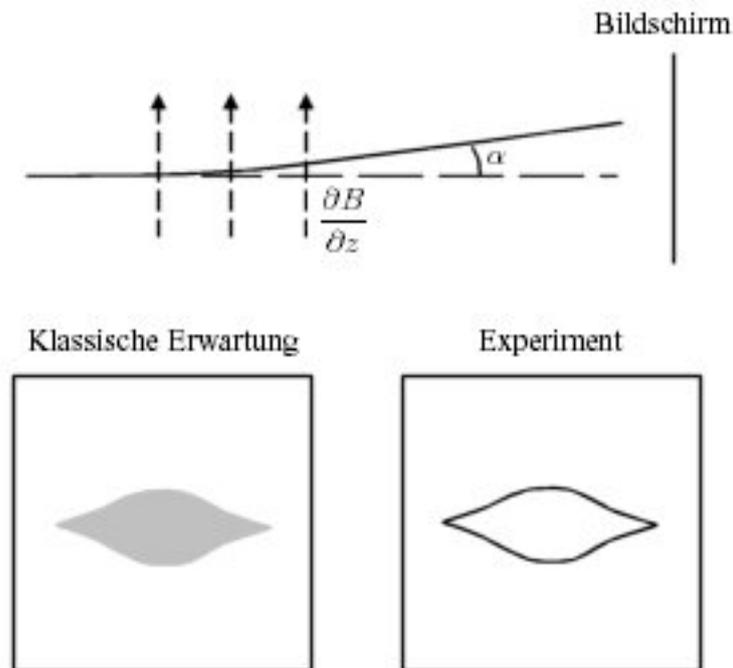
$$P = \frac{\psi(-\vec{r})}{\psi(\vec{r})}$$

z.B. $P(l=1) = -1$, $P(l=0) = +1$. Strahlende Übergänge für elektrische Dipolstrahlung erfolgen nur zwischen Zuständen verschiedener Parität (d.h. nicht z.B. $p \rightarrow p$), also $\Delta l = \pm 1$. Weiter muss gelten: $\Delta m_l = 0, \pm 1$. Was bedeutet das physikalisch? Das ausgestrahlte Photon hat Drehimpuls $L_{ph} = 1$ und $m_l = -1, 0, 1$, dies entspricht den drei möglichen Polarisierungen. Das sind die drei Wellenarten, die beim Zeemann-Effekt beobachtet werden. Zirkular polarisierte Welle besitzt einen Drehimpuls. Die Übergangsregel entspricht damit einfach der Drehimpulserhaltung.

6.4 Elektronenspin

Frage: gibt es außer den schon bekannten noch weiter versteckte Quantenzahlen?

Stern-Gerlach Experiment. Atomstrahl, Inhomogenes Magnetfeld, Vorzugsrichtung z (Gradient des Feldes in z -Richtung).



Auf einen magnetischen Dipol wirkt in solchem Feld die Kraft

$$\begin{aligned}\vec{F} &= -\nabla(E_{mag}) = -\nabla(-\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \\ \Rightarrow F_z &= \vec{\mu}_z \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial z} \\ F_z &= |\mu| \cos \alpha \frac{\partial B}{\partial z}\end{aligned}$$

Klassisch muss jeder Wert von $\cos \alpha$ gleichwahrscheinlich sein. Klassische Erwartung: alle Winkel α zugelassen (siehe Bild). Beobachtet werden in Wirklichkeit nur 2 Zustände. Quantenmechanik besagt: wenn Drehimpulsquantenzahl gleich L ist, so gibt es $2L + 1$ Orientierungsmöglichkeiten. Bei 2 Zuständen müsste also „ L “ = $\frac{1}{2}$ sein. Das würde einer Situation entsprechen, wenn sich die Wellenfunktion nach zwei Umdrehungen reproduziert, wie auf dem Möbuis-Band (Eindeutigkeitsbedingung). Auch in der klassischen Elektrodynamik gibt es Phänomene dieser Art (mathematische Konstrukte, z.B. bei der Beugung des Lichtes an einer Kante).

Der Spin. 2 Nachweisverfahren:

- Stern-Gerlach Experiment.
- Dublett-Struktur der Alkalien.

6.5 Alkalidubletts

Operator $\vec{S}(\hat{s}^2, \hat{s}_z)$:

$$\begin{aligned}\psi_{nlm_l m_s} &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{\frac{1}{2} m_s} \\ \hat{s}^2 \chi_{m_s} &:= s(s+1) \hbar^2 \chi_{m_s} \\ \hat{s}_z \chi_{m_s} &:= m_s \hbar \chi_{m_s}\end{aligned}$$

wobei $s = \frac{1}{2}$ und $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Magnetisches Moment eines Elektrons ist

$$\vec{\mu}_s = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{s}$$

Wenn man relativistisch genau rechnet (d.h. die Energie des Elektrons in der Nähe des Kerns berücksichtigt), dann ergibt sich:

$$|\mu_s| = 1,00116 \cdot (-2) \frac{\mu_B}{\hbar} |s|$$

Diese Anomalie heißt *Anomalie des Elektronenmoments* oder *gyromagnetisches Verhältnis*.

„**Vektormodell**“ Eigenschaften des Elektrons: $-e, m_l$ und

$$|s| = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar; \quad |\mu_s| = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{s}$$

Frage: ist der Spin die Eigendrehung des Elektrons? Wir rechnen in diesem Fall die Geschwindigkeit aus. Trägheitsmoment einer Kugel:

$$\begin{aligned}I &= \frac{2}{5} M r^2 \quad L = I \cdot \omega; \quad v = \omega r \\ r_{kl} &= \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0 m_0 c^2} \\ \Rightarrow \frac{v}{c} &= 343\end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch zur Relativität.

Einsten-de Haas Effekt. Erlaubt das gyromagnetische Verhältnis direkt zu messen. In dem Versuch wird ein Metallzylinder schlagartig ummagnetisiert. Die Atome (und ihr Drehmoment) ändern ihre Orientierung; wegen Drehimpulserhaltung fängt der Zylinder an zu rotieren. Diese Rotation kann man mit Hilfe einer Drehwaage messen.

$$\begin{aligned}
 \text{Änderung der Magnetisierung: } \Delta M &= 2n \cdot \mu_z \\
 \text{Änderung des Drehimpulses: } \Delta L &= 2n \cdot l_z \\
 \frac{\Delta M}{\Delta L} &= \frac{\mu_z}{l_z} \approx \frac{e}{m_0} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \\
 \implies g &= 2
 \end{aligned}$$

wobei g der Faktor in der Formel $|\mu_s| = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{s}$ ist.

Addition von Drehimpulsen im „Vektorgerüstmodell“. Sei $\vec{j} = \vec{l} = \vec{s}$. Ursprünglich hatten wir die Quantenzahlen l, m_l, s, m_s , jetzt übersetzen wir sie in l, s, j, m_j . Interpretation von j als Operator $\vec{j}(\hat{j}^2, j_z)$:

$$\hat{j}^2 \rightarrow j(j+1)\hbar^2; \quad j_z \rightarrow m_j \hbar$$

2 oder mehr Elektronen koppeln:

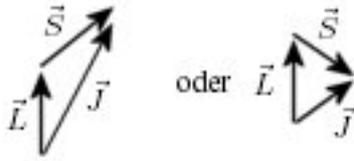
$$\left. \begin{aligned} \vec{L} &= \vec{l}_1 + \vec{l}_2 \dots \\ \vec{s} &= \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \dots \end{aligned} \right\} \vec{L} + \vec{S} = \vec{J} \text{ (LS-Kopplung, Russel-Sanders)}$$

oder

$$\left. \begin{aligned} \vec{j}_1 &= \vec{l}_1 + \vec{s}_1 \\ \vec{j}_2 &= \vec{l}_2 + \vec{s}_2 \\ \vdots & \end{aligned} \right\} \vec{j}_1 + \vec{j}_2 \dots = \vec{J}$$

Eigenschaften der Alkali-Atome

- Es gibt ein sog. *Leuchtelektron* - das äußerste Elektron, das das Spektrum des Atoms bestimmt.
- Abgeschlossene Schalen („*der Rumpf*“) mit Gesamtimpuls $L_R = 0$ und Gesamtspin $S_R = 0$.
- Das Leuchtelektron bestimmt den Gesamtdrehimpuls. Nomenklatur: große Buchstaben L, S für die Gesamtgrößen und l_i, s_i für einzelne Elektronen. Mit einem Elektron im Atom ist $S = \frac{1}{2}$. Alkalispektren sind Dubletts, da \vec{L} und \vec{S} auf zwei Weisen kombiniert werden können:



„Quantendefekt“

$$E_{n,l} = -R_{Na}hcS = \frac{1}{n_{eff}^2} = -R_{Na}hc \frac{1}{(n - \Delta(n,l))^2}$$

$\Delta(n,l)$ ist empirische Größe, heißt *Quantendefekt*.

Alkalispektren

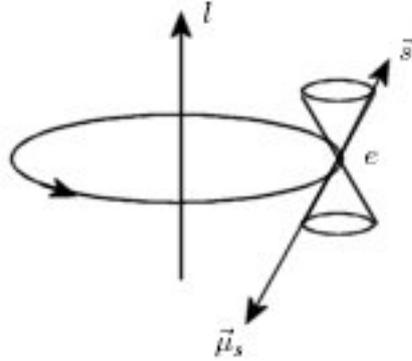
- *principal* ($p \rightarrow s$)

$$\nu_p = R_{na} \left[\frac{1}{(n_0 - \Delta(n_0, 0))^2} - \frac{1}{(n - \Delta(n, 1))^2} \right]$$

- *sharp* ($s \rightarrow p$)
- *diffuse* ($d \rightarrow p$)

Spin-Bahn Wechselwirkung bei Alkalien Wie ist die Wechselwirkung von Spin und Bahn? Mit dem Drehimpuls ist ein magnetisches Moment verbunden. Aus Analogiegründen könnte man das gleiche bei Spin annehmen. Wir haben aber gezeigt, dass sich das Elektron nicht dreht, wir können also diesen Spin nicht durch die Drehung des Elektrons erklären. Das Moment ist fundamental und lässt sich nicht auf einfachere Sachen (etwa Drehung) zurückführen.

Wenn wir zwei Momente haben (in diesem Fall Bahnmoment und Spinmoment), wie ist die Wechselwirkung im magnetischen Feld? Im inneren eines Atoms herrscht auf Grund des Bahnmagnetismus ein starkes Magnetfeld von etwa 1 Tesla. Es gibt also erhebliche Veränderung der Bahn durch das Magnetfeld (*Spin-Bahn Kopplung*).



Die Idee der Berechnung: wir sagen, der Kern bewegt sich um das Elektron herum. Es ist nicht äquivalent zur Bewegung des Elektrons um den Kern, man benutzt das nur um die Größe des Magnetfelds auszurechnen.

$$\begin{aligned}\vec{B}_l &= \frac{+Ze\mu_0}{4\pi r^3}(\vec{v} \times (-\vec{r})) \\ \vec{l} &= \vec{r} \times m_0\vec{v} \\ \vec{B}_l &= \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3 m_0} \vec{l}\end{aligned}$$

Rücktransformation auf \vec{r} bedarf der „Thomas-Korrektur“. Wechselwirkungsenergie zwischen μ_s und \vec{B} ist

$$\begin{aligned}V_{LS} &= -\mu_s \vec{B}'_l = 2\frac{l}{2m_0} \vec{s} \cdot \vec{B}'_l \\ &= \frac{Ze^2\mu_0}{8\pi m_0^2 r^3} (\vec{s} \cdot \vec{l})\end{aligned}$$

\vec{B}'_l ist von der Größenordnung 1 Tesla, V_{LS} - von $10^{-4} eV$.

$$\begin{aligned}j^2 &= (\vec{l} + \vec{s}) \cdot (\vec{l} + \vec{s}) = l^2 + 2\vec{l} \cdot \vec{s} + s^2 \\ \vec{l} \cdot \vec{s} &= \frac{1}{2}(j^2 - l^2 - s^2)\end{aligned}$$

Mit Abkürzung $a = \frac{Ze^2\mu_0\hbar^2}{8\pi m_0^2 r^3}$ ergibt sich:

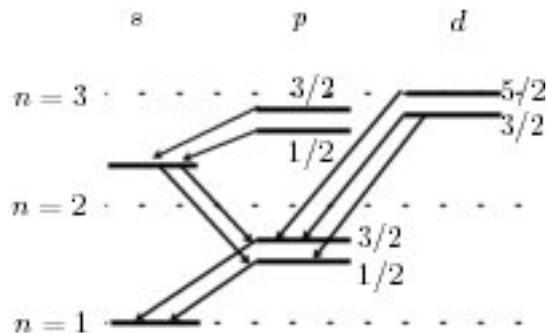
$$\begin{aligned}V_{LS} &= \frac{a}{\hbar^2} |\vec{l}| |\vec{s}| \cos(l, s) \\ &= \frac{a}{2\hbar^2} (j^2 - l^2 - s^2) \quad (\text{Vektorlängen}) \\ &= \frac{a}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (\text{Quantenzahlen}) \\ &= a \begin{cases} \frac{1}{2}L & \text{wenn } J = L + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2}(L+1) & \text{wenn } J = L - \frac{1}{2} \end{cases}\end{aligned}$$

Regeln für Alkalien

- Die intensivste Linie des Natriums ($Na - D$ Linie) spaltet auf in ${}^2P_{3/2}$ und ${}^2P_{1/2}$.
- Niveaus mit größeren j liegen höher.
- S-Terme haben kein Magnetfeld und spalten nicht auf.
- Weil $r \sim \frac{1}{Z}$, ist $a \sim Z^4$, also ist Feinstruktur bedeutsam für hohe Z .
- $H_\alpha(6562, 79)$ hat 0, 14 Aufspaltung.

34

Niveauschema von Na .



Optische Übergänge erlaubt falls $\Delta l = \pm 1$ und $\Delta j = \pm 1, 0$. Der Übergang mit $\Delta j = 0$ selten, weil sich beide l und s ändern müssen.

6.6 Feinstruktur der Balmerserie

Verschiedene Effekte, die zu Linienaufspaltungen führen:

- Bohr-Sommerfeld Korrektur:

$$E_{FS} = -Rhc \frac{Z^4}{n^4} \alpha^2 \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right)$$

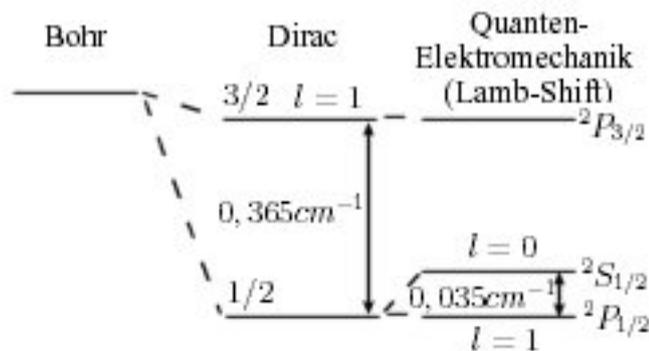
wobei $\alpha \simeq \frac{1}{137}$ (Sommerfeld FS-Konstante)

³⁴Zur Frage, warum sich die s -Terme nicht aufspalten: s -Zustand entspricht nicht einer Kreisbahn im Bohr-Sommerfeld Modell. Er entspricht umgekehrt einer schlanken Ellipse, denn das Bohr-Sommerfeld Modell besagt: Kreisbahnen sind die, die den maximalen Drehimpuls haben.

- Dirac's relativistische Rechnung mit $\vec{L} \cdot \vec{S}$ Kopplung:

$$E_{FS} = -E_n \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)$$

- **Lamb-Shift.** Kleine Aufspaltung der $^2S_{1/2}$ und $^2P_{1/2}$ Linien. Wurde entdeckt im Experiment von Lamb-Rutherford (1947-1952, das Experiment wurde in diesen Jahren immer wieder verbessert). Kann im Dirac-Modell nicht erklärt werden, denn Terme wie $^2S_{1/2}$ und $^2P_{1/2}$ in Dirac-Theorie gleichwertig sind. Die Ursache für Lamb-Shift sind die sog. Vakuumfluktuationen, wenn im Vakuum spontan kurzlebige Elektron-Positron Paare entstehen (die Entstehung solcher Paare ist wegen der Unschärferelation möglich).



- Es gibt noch Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment des Atoms und dem Elektron (*Hyperfeinstruktur*)

6.7 Starkeffekt

Johannes Stark (1874-1957)

- 1897-1900 Assistent in München.
- 1900-06 Priv. Doz. In Göttingen.
- 1906 ao Prof. In Hannover (d.h. keine eigene Ausstattung)
- 1909 Prof. an TH-Aachen.
- 1917 Prof. in Greifswald.

- 1919 Nobelpreis für den „Dopplereffekt an Kanalstrahlen“ und die „Linienaufspaltung im elektrischen Feld“.
- 1920-22 Prof. in Würzburg.
- 1922-23 Privatmann
- 1933-39 Präsident von PTR (Physikalisch-Technische Reichsanstalt).

Hat zusammen mit Lenard an Entfernung der Juden aus der wissenschaftlichen Elite teilgenommen. Knick nach dem ersten Weltkrieg.

Entdeckte die Aufspaltung der Balmerlinien im elektrischen Feld. Bei kleinem Druck kann man im Gas über kleinen Abstand große Spannungen anlegen, ohne dass die Entladung passiert. Man beobachtet elektrisches Dipol im Atom.

Linearer und quadratischer Starkeffekt.

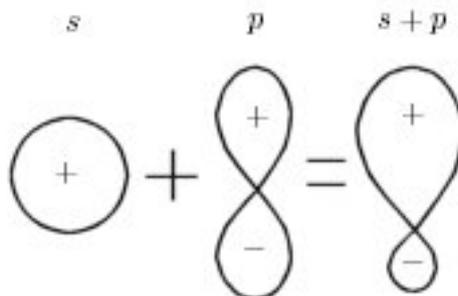
$$V_{el} = -p_{el} \cdot E$$

- Wasserstoff und wasserstoffähnliche Ionen zeigen linearen Starkeffekt (entartete Zustände)
- Atome mit mehreren Elektronen zeigen quadratischen Starkeffekt (Entartung aufgehoben)

Entarteter Zustand enthält Dipolmomente, die nur "entmischt" werden müssen.

$$p_{el} = \alpha E \Rightarrow V_{el} = -\alpha E^2$$

Wieso hat Wasserstoff ein Dipolmoment (die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist ja eine symmetrische Funktion)? Überlagerung von s und p ergibt ein Dipolmoment.



Kern wird in eine Richtung und Elektron in die andere Richtung verschoben, es wird ein Dipolmoment induziert, Atom richtet sich im elektrischen Feld aus.

Quadratisch ist Aufspaltung in Abhängigkeit von Feldstärke. Bei großen Feldstärken Übergang zum linearen Starkeffekt.

Mit diesem Effekt kann man gut elektrische Felder messen: für einen Atom in Plasmaumgebung, beobachtet man, wie die Teilchen um den Atom herum angeordnet ist.

Wir können die Dichte des Plasmas im Stern bestimmen ausgehend vom Feld:

$$E_0 = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 \langle r^2 \rangle} = \frac{e}{3\epsilon_0} N_e^{3/2}$$

Man kann Elektronendichte in Plasmen messen. Nicht nur für Wasserstoff. Zusammengefasst: es gibt einen linearen Starkeffekt, d.h.

$$\Delta V \sim p_{el} E$$

und quadratischen Starkeffekt (induziertes Dipolmoment - Mischung von Wellenfunktionen)

$$\Delta V \sim \alpha E^2$$

linear wenn $\Delta V_{Stark} > \Delta V_{LS}$, quadratisch sonst - zwei verschiedene Grenzfälle der Störungstheorie.

7 Atome mit mehreren Elektronen

7.1 Helium

Potentielle Energie in der Schrödinger-Gleichung:

$$E_{pot} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + V_{LS}$$

den letzten Term können wir vernachlässigen.

- Wir betrachten die Elektronen als unabhängig und führen entsprechende Korrekturen ein.
- Wir berücksichtigen das Zentralfeld des Kerns.
- „Mittleres Zentralfeld“ des zweiten Elektrons (Abschirmung) ist sinnvoll, wenn ein Elektron angeregt (wie bei Alkalien).

Ionisationsarbeit:

$$E_0 = 2(Z - S)^2 E_H$$

S - Abschirmung. In Wirklichkeit

$$E_{He} = 24,5 eV \quad E_H = 13,6 eV$$

Es folgt: $S = 0,32$. Also nicht wirklich reine Abschirmung. Der eine Elektron taucht in die Wellenfunktion des zweiten ein. Wir sagen also: jedes Elektron schirmt das andere etwa um $\frac{1}{3}e$ ab.

Mittleres Zentralfeld hat die Eigenschaft: die Abschirmung beeinflusst Radialfunktionen R_{nl} aber nicht die Winkelfunktion Y_{lm} .

Für jedes Elektron

$$\begin{aligned} s_1 &= \frac{1}{2} s_2 = \frac{1}{2} \\ \vec{S} &= \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \end{aligned}$$

$2S + 1$ kann 3 oder 1 sein. Spektrum zerfällt in zwei Systeme (zwei Gruppen von Serien): Singulett- und Triplettsystem. „Parahelium“ und „Orthohelium“ - man dachte früher, das seien verschiedene Atome. ³⁵

7.2 Zusammensetzung von Drehimpulsen

7.2.1 Russel-Saunders Kopplung (LS-Kopplung)

Schema:

$$\left. \begin{aligned} \vec{L} &= \vec{l}_1 + \vec{l}_2 \\ \vec{S} &= \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \end{aligned} \right\} \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

entspricht dem direkten Produkt der Vektorräume:

$$\begin{pmatrix} l_1 \\ s_1 \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} l_2 \\ s_2 \end{pmatrix} = (\vec{L} \vec{S} \vec{J} M_J)$$

L kann die Werte $l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|$ annehmen. Beachte: $L = 1$ heißt P -Term ohne, dass eines der beteiligten Elektronen ein P -Elektron sein muss.

Auswahlregeln: $\Delta l = \pm 1$ für 1 Elektron und $\Delta L = 0, \pm 1$ für Gesamtsystem. Der Übergang mit $\Delta L = 0$ (wenn zwei Elektronen den Zustand ändern) ist selten außer bei schweren Atomen.

³⁵Helium kann man aus dem Erdgas gewinnen. Als Produkt des radioaktiven Zerfalls in der Erdkruste.

Gesamtspin

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \quad |S| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$
$$S = \begin{cases} 0 & \uparrow\downarrow \\ 1 & \uparrow\uparrow \end{cases}$$

Auswahlregel für den Spin ist $\Delta S = 0$, der Spin strahlt nicht.

Zusammensetzen von L und S . Spin-Bahn Wechselwirkung koppelt \vec{L} und \vec{S} zu \vec{J} :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad |J| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

Für Helium falls $S = 0$, so $J = L$, wenn $S = 1$, so ist $J = L + 1, L, L - 1$. Also Triplet-Struktur. Multiplizität der Terme gleich $2S + 1$. Für Helium:

$$n_1 = n_2 = 1 \Rightarrow l_1 + l_2 = 0 \quad \text{dann} \quad s_1 = \frac{1}{2}s_2 = \frac{1}{2}$$

Es folgt: $L = 0, S = 0, J = 0$, weil (Pauli-Prinzip) $m_{s_1} = -m_{s_2}$, Beobachtungen zeigen: es kann keine zwei Elektronen mit allen 4 gleichen Quantenzahlen geben (Pauli Prinzip). Pauli-Prinzip: zwei Elektronen in einem Atom müssen sich in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden! Es folgt daraus: der Zustand 3S_1 existiert nicht.

Angeregter Zustand des Heliums: $n_1 = 1, n_2 = 2$

1. Möglichkeit: $L = 0 \quad S = 0 \quad J = 0^1S_0$

2. Möglichkeit: $L = 0 \quad S = 1 \quad J = 1^3S_1$

Beobachtung: Tripletzustände haben eine bisschen kleinere Energie. 2^3S_1 ist energetisch tiefer als 2^1S_0 . Im Tripletzustand wird die Energie beider Elektronen minimiert (siehe unten).

Vielelektronensysteme:

Anzahl Elektronen	Mögliche Zustände (Werte von S)
2	0 (Singulett), 1 (Triplet)
3	$\frac{1}{2}$ (Dublett), $\frac{3}{2}$ (Quartett)
4	0 (Singulett), 1 (Triplet), 2 (Quintett)
5	$\frac{1}{2}$ (Dublett), $\frac{3}{2}$ (Quartett), $\frac{5}{2}$ (Sextett)

In der Mitte des Periodensystems gilt dies nicht mehr so genau.

7.3 Austauschentartung in Helium

Man erwartet, dass man zwei gleichen Objekten eine Markierung machen kann, dann sie unterscheiden. Das hat Wirkung darauf, wie man Statistik betreibt. Mit Elektronen geht es nicht. Man kann ein Elektron von einem anderen unterscheiden. Wesentliche Quanteneigenschaft: Ununterscheidbarkeit von Elektronen! Das heißt die Atomwellenfunktion $|\psi_{atom}|^2$ muss symmetrisch sein bezüglich Vertauschung der beiden Elektronen. Die Bahnwellenfunktion:

$$\psi_{atom} = \psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\psi_b(1)$$

wobei a die Schreibweise für n, l, m_l des ersten, b - des zweiten Elektrons ist und 1, 2 - Schreibweisen für Orte 1 und 2. Warum unterscheiden sich Energieniveaus 2^1S_0 und 2^3S_1 wenn doch $\vec{L} \cdot \vec{S} = 0$, d.h. keine Spin-Bahn Energie?

Symmetrische Bahnwellenfunktion:

$$\psi_S = \dots + \dots$$

antisymmetrische:

$$\begin{aligned} \psi_A &= \dots - \dots \\ \lim_{r_1 \rightarrow r_2} \psi_S &= \text{const} \neq 0 \end{aligned}$$

Abstoßung zwischen den Elektronen wird energetisch wichtig. Der Term hat Coulombenergie im Grenzfall.

$$\lim_{r_1 \rightarrow r_2} \psi_A = 0$$

Coulombenergie wird minimiert.

Spinwellenfunktion Antisymmetrische:

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] \quad M_s = 0$$

3 verschiedene symmetrische:

$$\chi_S = \begin{cases} \chi_+(1)\chi_+(2) & M_s = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)] & M_s = 0 \\ \chi_-(1)\chi_-(2) & M_s = -1 \end{cases}$$

Singulett: $S = 0, \chi_A$, Triplett: $S = 1, \chi_S$. Die totale Wellenfunktion

$$\psi_{total} = \psi_{atom}\chi$$

Pauli-Prinzip mathematisch formuliert: ψ_{total} muss antisymmetrisch sein.

$$\psi_{sing.} = \psi_S\chi_A$$

$$\psi_{trip.} = \psi_A\chi_S$$

Metastabile Zustände.

- 2^3S_1 ist metastabil wegen Interkombinationsverbot
- 2^1S_0 ist metastabil wegen $\Delta L = 0$ und $0 - 0$ Verbot, also kein Übergang zu 1^1S_0 .

Atome mit kleinen Kernmassen - dominiert Russel-Sanders Kopplung. Bei extrem viele Elektronen, ist diese Methode schwierig anwendbar. Stattdessen wird die LJ-Kopplung verwendet.

LJ-Kopplung. Anwendbar nur bei schweren Elementen

$$(l_i \cdot s_i) \gg (l_i \cdot l_j), (s_i \cdot s_j)$$

(d.h. da, wo es besser ist, Kopplung eines einzelnen Elektronen zu betrachten)

$$\left. \begin{array}{l} \vec{l}_1 + \vec{s}_1 = \vec{j}_1 \\ \vec{l}_2 + \vec{s}_2 = \vec{j}_2 \\ \vdots \end{array} \right\} \vec{j}_1 + \vec{j}_2 + \dots = \vec{J}$$

Bei vielen Elektronen kann die Coulomb Energie nicht minimiert werden. Hier müssen auch die kleine Beiträge ausbalanciert werden. Es geht auch um Restbeträge. Atom kann sich magnetische Energie leisten, wenn er Coulomb-Energie einspart. Magnetische Energie ist wichtiger als bei LS-Kopplung. Man hat keine Termsymbolik mit s, p, d, \dots mehr, weil L undefiniert ist. Die Termsymbolik kann z.B. $(j_1, j_2)_J$ sein.

Intermediäre Kopplung. In der Mitte des Periodensystems. Beispiel: Quecksilber. Termschema besteht aus Singulett und Triplett. Es gibt einen Übergang von 6^3P_1 und 6^1S_0 .³⁶ Dies ist bei leichten Atomen streng verboten. Hier gilt der Interkombinationsverbot nicht mehr.

³⁶Wird in Quecksilberlampen benutzt, das ist die stärkste Linie im Quecksilberspektrum. Ultraviolette Strahlungsquelle, es gibt keine Alternative.

7.4 Anomaler Zeeman-Effekt.

Normaler tritt nur auf, wenn der Gesamtspin $S = 0$ ist. Dabei Auswahlregeln:

$$\begin{aligned}\Delta m_j &= 0 \quad (\pi - \text{Komponente}) \\ \Delta m_j &= \pm 1 \quad (\sigma - \text{Komponente})\end{aligned}$$

Allgemein ist $S \neq 0$: $\vec{\mu}_j \nparallel \vec{J}$. Wir wollen ausrechnen, wie groß der zeitliche Mittelwert von $\vec{\mu}_j$ ist. Physikalisch bedeutsam ist nur Projektion

$$\begin{aligned}\vec{\mu}_j \cdot \vec{e}_j &\approx \text{Mittelwert von } \mu_j \\ \langle \vec{\mu}_j \rangle &= -g_j \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J}\end{aligned}$$

g_j heißt *Lande'-Faktor*. Berechnung von $(\vec{\mu}_j \cdot \vec{J})$: Wir nehmen z.B. $J(J+1)$, $S(S+1)$ für die Beträge der Vektoren.³⁷

$$\begin{aligned}\vec{\mu}_j \cdot \vec{J} &= -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} \cdot \vec{J} + 2\vec{S} \cdot \vec{J}) \\ &= -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} \cdot (\vec{L} + \vec{S}) + 2\vec{S} \cdot (\vec{L} + \vec{S})) \\ &= -\frac{\mu_B}{\hbar} (|\vec{L}|^2 + \vec{L} \cdot \vec{S} + 2\vec{L} \cdot \vec{S} + 2|\vec{S}|^2) \\ &= f(L(L+1), S(S+1), J(J+1)) \\ \vec{L} \cdot \vec{S} &= \frac{1}{2} (|J|^2 - |L|^2 - |S|^2) \\ \vec{\mu}_j \cdot \vec{e}_j &= -\mu_B \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}} \\ &= g_j \sqrt{J(J+1)} \mu_B\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich g_j . Aufspaltung der Energierterme. Aufspaltungsweite zwischen m_j und $m_j - 1$:

$$\Delta E_{m_j, m_j-1} = g_j \mu_B \cdot B_0$$

der anormale Zeeman-Effekt „lebt“ von dem Land'e-Faktor.

Paschen-Back Effekt. Die äußere Magnetfelder für das Zeeman-Effekt sind schwächer, als die, die LS-Kopplung verursachen. Man kann aber Atome in extrem starke Felder plazieren. Effekt: falls $B_{ext} \gg B_{intern}$, so werden

³⁷Komplette Rechnung auf dem Übungszettel.

$vecL$ und \vec{S} entkoppelt. \vec{L} ist nicht länger die Vorzugsrichtung, zu der sich \vec{S} orientieren muss, sondern das externe Magnetfeld. Magnetische Zusatzenergie ³⁸:

$$V_{m_s, m_l} = (m_l + 2m_s)\mu_B B$$

$$\Delta E = (\Delta m_l + 2\Delta m_s)\mu_B B$$

Auswahlregeln:

$$\left. \begin{array}{ll} \Delta m_l = 0 & \text{für } \pi \\ \Delta m_l = \pm 1 & \text{für } \sigma \end{array} \right\} \text{Triplet } \Delta m_s = 0 \text{ (Spin strahlt nicht!)}$$

³⁸mit Land'e-Faktoren 1 und 2, die Grenzwerte