

Kapitel 12

Materiewellen

Wir haben in den vorangegangenen Kapiteln gelernt, dass elektromagnetische Strahlung neben Welleneigenschaften auch Teilcheneigenschaften besitzt. In vielen Experimenten verhält sich elektromagnetische Strahlung so, als ob sie aus Lichtquanten besteht. Diese Lichtquanten können als Korpuskeln der Energie $E = \hbar\omega$ und des Impulses $p = \hbar\omega/c = h/\lambda$ aufgefasst werden. Die beiden sich nach klassischer Vorstellung ausschließenden Eigenschaften sind Grenzfälle der das Licht vollständig beschreibenden Quantenelektrodynamik. Diese Teilcheneigenschaften einer nach klassischer Auffassung typischen Wellenstrahlung legten schon sehr früh die Frage nahe, ob nicht auch umgekehrt die nach klassischer Auffassung typischen Teilchen (z.B. Protonen, Neutronen, Elektronen, ...) neben ihren Teilcheneigenschaften auch Welleneigenschaften besitzen. Experimentell gab es im 19. Jahrhundert keine direkten Hinweise auf ein dem Licht analoges wellenartiges Verhalten mikroskopischer Materieteilchen. Das Hauptproblem, das es zu Anfang des 20. Jahrhunderts zu lösen gab, betraf die Stabilität der Atome, deren Existenz insbesondere auf Grund der Versuche von **Rutherford** (1910) nicht mehr zu bezweifeln war. Dass dieses Problem allerdings eng mit dem Wellencharakter der den Kern umgebenden Elektronen verbunden sein könnte, war zur damaligen Zeit nicht absehbar.

Im Jahr 1924 vermutete **Louis de Broglie**, motiviert durch den Wunsch nach Symmetrie in der Natur, dass auch Teilchen mit einer so genannten **Materiewelle** verknüpft seien, deren Wellenlänge sich aus einer Umkehrung der entsprechenden Beziehung für das Licht ergeben sollte. Er postulierte also eine Materiewellenlänge (vergleiche (9.1.11)).¹ Danach ist jedem Teilchen mit Impuls $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ (hierbei ist m die Masse des Teilchens und v seine Geschwindigkeit) ein Wellenvektor $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ und damit eine Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{|\mathbf{p}|} .$$

sowie eine Frequenz

$$\omega = \frac{E}{\hbar} .$$

zugeordnet. Das Verhältnis von kinetischer Energie zur Wellenlänge ergibt sich dann zu $E_{\text{kin}} = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m = \hbar^2/2m\lambda^2$, was auf die die Dispersionsrelation

¹de Broglie hat diese Thesen in seiner Doktorarbeit aufgestellt. Sie waren so revolutionär, dass der Prüfungsausschuss völlig im Dunkeln darüber tappte, was davon zu halten sei. Der berühmte französische Physiker Paul Langevin sandte ein Exemplar der Arbeit an Einstein mit der Bitte um Kritik. Auf Grund Einsteins positiver Fürsprache wurde die Arbeit akzeptiert.

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 = \frac{h\pi}{2m} \frac{1}{\lambda^2} .$$

führt. Die Beziehung zwischen Frequenz und Betrag des Wellenvektors ist also nicht wie im Falle von Licht linear sondern quadratisch.

Ist de Broglie's Annahme begründet, so müsste man bei Experimenten mit Teilchen Interferenzerscheinungen beobachten können. Warum werden diese, im Gegensatz zum Licht, in unserem Alltag aber nicht beobachtet? Dazu ist es nützlich die Wellenlänge eines makroskopischen Objekts, wie z.B. einer Gewehr-kugel, zu berechnen. Mit $h = 6.626 \times 10^{-34}$ Js ergibt sich für ein Teilchen, das eine Masse von einem Gramm aufweist und sich mit $1000 \text{ m/s} = 3600 \text{ km/h}$ bewegt (d.h. einen Impuls von $p = 1 \text{ kg m/s}$ hat) eine Wellenlänge von $\lambda = 6.626 \times 10^{-34} \text{ m}$. Diese Wellenlänge ist um ein vielfaches kleiner als die typischen Größe der Atome. Das heißt, die Materiewelle trifft immer auf Objekte, die um Größenordnungen größer sind als ihre Wellenlänge. Dies ist beim Licht nicht der Fall. Dort kommt es ständig vor, dass die Photonen auf beugende Objekte treffen, deren Ausdehnung im Bereich der Wellenlänge liegen. Beugungseffekte treten aber, wie wir in Kapitel 5 gelernt haben, genau dann auf, wenn die Ausdehnung der beugenden Objekte in den Bereich der Wellenlänge kommt. Deshalb ist es nicht verwunderlich, dass man bei Experimenten mit makroskopischen Teilchen, wie z.B. einer Gewehr-kugel, keine Interferenzeffekte beobachtet. Wir werden sehen, dass dies bei mikroskopischen Teilchen, die aufgrund ihrer wesentlich kleineren Masse wesentlich größere de Broglie Wellenlängen haben, nicht der Fall ist.

Wir wollen in diesem Kapitel die Welleneigenschaften von Materie und die sich daraus ergebenden Konsequenzen diskutieren. Im nächsten Abschnitt werden wir dazu zunächst kurz auf die elementaren Teilchen eingehen, aus denen unsere Materie aufgebaut ist, und ihre grundlegenden Eigenschaften vorstellen.

12.1 Elementarteilchen

Nach unserem heutigen Wissensstand gibt es genau drei Generationen von Bausteinen in der uns bekannten Welt. Die elementaren Teilchen sind die *Quarks* und die *Leptonen*. Die experimentelle Information über die Zahl der Generationen ist 2.983 ± 0.025 . Sie stammt aus Messungen der Zerfallswahrscheinlichkeit des so genannten Z_0 -Teilchens, die am CERN in Genf durchgeführt wurden.²

Eine Zusammenstellung der Quarks und Leptonen ist in Tabelle 12.1 gegeben. Zu jeder Generation gehören zwei Quarks und zwei Leptonen und die jedem Teilchen zugeordneten Antiteilchen. Quarks haben außer ihrer elektrischen Ladung noch eine *Farbladung*. Jedes Quark tritt in drei verschiedenen Farben auf. Das Elektron (e^-) und das Positron (e^+) sind zusammen mit dem Elektron-Neutrino (ν_e) und dem Elektron-Antineutrino ($\bar{\nu}_e$) Leptonen der ersten Generation. Sie sind stabile Teilchen. Sie könnten aus Energieerhaltungsgründen nur in leichtere Teilchen zerfallen, z.B. in Photonen und Neutrinos. Dies ist aber nie beobachtet worden.

| | 1 | 2 | 3 | Ladung [e] |
|----------|---------|-----------|------------|----------------|
| Leptonen | ν_e | ν_μ | ν_τ | 0 |
| | e^- | μ^- | τ^- | -1 |
| Quarks | u | c | t | $+\frac{2}{3}$ |
| | d | s | b | $-\frac{1}{3}$ |

Tabelle 12.1: Elementare Bausteine der Materie. Die Quarks heißen **up**, **down**, **charm**, **strange**, **bottom** und **top**.

In der anschließenden Diskussion der Welleneigenschaften von mikroskopischen Teilchen werden wir uns hauptsächlich mit den Welleneigenschaften von Elektronen befassen. Die dabei diskutierten allgemeinen Eigenschaften können auf andere Teilchen übertragen werden. Da wir uns im Folgenden intensiv mit Elektronen (und ihren Anti-Teilchen, den Positronen) beschäftigen werden, wollen wir nun zunächst die fundamentalen Eigenschaften von Elektronen und deren experimentellen Nachweis vorstellen.

12.1.1 Elektronen und Positronen

Fundamentale Eigenschaften des Elektrons sind seine *Ruhemasse* m_0 bzw. seine *Ruheenergie*

$$m_0 = 9.109\,381\,88(72) \times 10^{-31} \text{ kg} \quad (12.1.1)$$

$$m_0 c^2 = 510\,998.902(21) \text{ eV} \quad (12.1.2)$$

sowie seine Ladung, die Elementarladung q , die auch mit e^- oder nur mit e bezeichnet wird:

$$e^- = 1.602\,176\,462(63) \times 10^{-19} \text{ As} \quad (12.1.3)$$

Wir wollen nun kurz beschreiben, wie diese Größen experimentell ermittelt werden können.

²Review of Particle Properties, Phys. Rev. **D 50**, 1417 (1994).

Anmerkung zur Quantisierung der elektrischen Ladung

Bis heute hat man in Experimenten nur ganzzahlige Vielfache der Elementarladung messen können. Die negative Ladung des Elektrons und die positive Ladung des Protons sind dabei im Rahmen der sehr hohen Messgenauigkeit identisch. Daraus folgt, dass alle in der Natur vorkommenden Atome elektrisch neutral sind, da die positive Ladung des Atomkerns von der negativen Ladung der Elektronenhülle exakt kompensiert wird.

Obwohl die Quarks, die nach unserer jetzigen Vorstellung fundamentale Bausteine unserer Welt sind, die Ladungen $-\frac{1}{3}e$ und $+\frac{2}{3}e$ tragen, konnten trotz größter experimenteller Anstrengungen freie Quarks mit diesen Ladungen nicht nachgewiesen werden. Es ist vielmehr so, dass Quarks immer in Gruppe von zwei oder drei Quarks auftreten und zwar immer in solchen Kombinationen, dass die Ladung der gesamten Gruppe entweder Null oder ein ganzzahliges Vielfaches der Elementarladung ist.

Erzeugung freier Elektronen

Freie Elektronen werden vielseitig eingesetzt (z.B. bei der Elektronenmikroskopie, in Bildschirmen oder in diversen Elektronenröhren). In den meisten Fällen werden dabei freie Elektronen durch Erhitzen eines Metalldrahtes oder einer Metallspitze erzeugt. Wir haben bereits in Abschnitt 10.1 diskutiert haben (siehe hierzu Abb. 10.4) muss bei dem Auslösen eines Elektrons aus einem Metall die Austrittsarbeit W_A überwunden werden. Bei Raumtemperatur ist die zur Verfügung stehende mittlere thermische Energie der Elektronen ($k_B T \sim 25$ meV) wesentlich kleiner als die Austrittsarbeit, die im eV-Bereich liegt. Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit ($\propto \exp(-W_A/k_B T)$) für ein thermisch aktiviertes Auslösen eines Elektrons bei Raumtemperatur sehr klein. Man muss deshalb die Temperatur des Metalls stark erhöhen, so dass $k_B T$ in die gleiche Größenordnung wie W_A kommt.

Quantitativ wird das thermische Auslösen von Elektronen aus Metallen durch die *Richardson-Gleichung*

$$J = C T^2 \exp\left(-\frac{W_A}{k_B T}\right) \quad (12.1.4)$$

gegeben. Hierbei sind C und W_A Materialkonstanten und J die ausgelöste Stromdichte.

Aus unserer Diskussion des Photoeffekts in Abschnitt 10.1 ist evident, dass auch die Bestrahlung eines Metalls mit Photonen genügend hoher Energie zu einer Auslösung von Elektronen benutzt werden kann. Weitere Techniken sind die Feldemission oder der β^- -Zerfall radioaktiver Atomkerne, die hier aber nicht diskutiert werden sollen.

Bestimmung der Elektronenladung

Wir wollen hier drei Verfahren skizzieren, mit denen die Elementarladung bestimmt werden kann:

1. Die Faraday-Zahl der Elektrolyse:

Wir betrachten ein Mol einer einwertigen Substanz (z.B. Natrium). Ein Mol dieser Substanz enthält $N_L = 6.02 \times 10^{23}$ Atome, N_L wird *Loschmidt'sche Zahl* genannt. Scheiden wir ein Mol dieser Substanz elektrolytisch ab und bestimmen die dazu benötigte Ladung, so erhalten wir die *Faraday-Zahl*

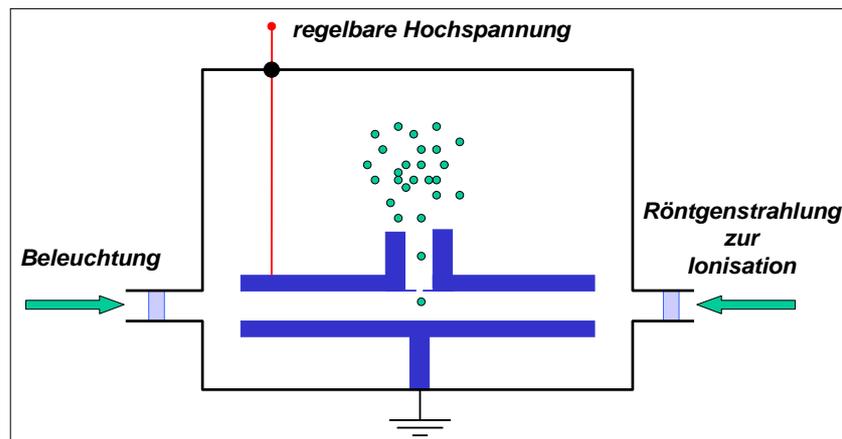


Abbildung 12.1: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus zum Öltröpfchenversuch von Millikan zur Bestimmung der Elementarladung.

$$F = 96\,485 \text{ As} \quad (12.1.5)$$

und daraus die Elementarladung

$$e = \frac{F}{N_L} . \quad (12.1.6)$$

Diese Analyse ergibt allerdings keinen direkten Hinweis auf die Quantisierung der elektrischen Ladung, da man immer argumentieren kann, dass nur im Mittel die Ladung e transportiert wird.

2. Das Millikan-Experiment (1911):

Die Elementarladung e wurde das erste Mal von **Millikan** im Jahre 1911 bestimmt. Auch heute noch liefert das von Millikan durchgeführte Experiment sehr präzise Werte für e . Dabei werden durch einen Zerstäuber sehr feine Öltröpfchen erzeugt und in das elektrische Feld eines Kondensators fallen gelassen (siehe Abb. 12.1). Mit Hilfe von Röntgenlicht lassen sich einige dieser Tröpfchen ionisieren. Diese ionisierten Tröpfchen driften im homogenen elektrischen Feld des Kondensators. Die Driftgeschwindigkeit ergibt sich aus der Balance der elektrostatischen Kräfte, der Auftriebskraft in Luft, der Reibungskraft und der Schwerkraft. Üblicherweise stellt man die elektrostatische Kraft so ein, dass die Driftgeschwindigkeit null wird, da man dann die Reibungskraft ($\propto v$) vernachlässigen kann. Ermittelt man die Masse eines Tröpfchen aus dem mikroskopisch ermittelten Radius, so kann man aus dem Kräftegleichgewicht die Ladung des Tröpfchens bestimmen. Millikan fand, dass die Ladung nur in Vielfachen von $e = 1.6 \times 10^{-19}$ Coulomb vorliegt.

3. Die Feinstruktur-Konstante:

Die *Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante* $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c \simeq 1/137$ ist als Kopplungskonstante der Quantenelektrodynamik eine fundamentale Naturkonstante. Sie bestimmt die Stärke aller elektromagnetischen Wechselwirkungsprozesse und ist aus diesem Grund sehr genau zu messen (z.B. aus Atomspektroskopie oder dem Quanten-Hall-Effekt: Nobelpreis für Klaus von Klitzing im Jahr 1985). Da man die Größe $\hbar c$ getrennt ermitteln kann, lässt sich damit ein Wert für die Elementarladung ermitteln.

Der Radius eines Elektrons

Man kann den so genannten klassischen Elektronenradius bestimmen, indem man die Ruheenergie des Elektrons gleich der Coulombenergie einer homogen geladenen Kugel mit Radius r_0 setzt. Man erhält

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_0 c^2} = 2.82 \times 10^{-15} \text{ m} . \quad (12.1.7)$$

Man muss sich aber darüber im Klaren sein, dass die so definierte Größe eine reine Rechengröße ist. Wir nehmen nach unserem heutigen Kenntnisstand an, dass die Leptonen, zu denen das Elektron und das Positron gehören, punktförmige Teilchen sind mit einem Durchmesser $\ll 10^{-18}$ m. Diese Information erhält man aus Experimenten, bei denen in einem Stoß eines Elektron mit einem Positron ein Myonenpaar entsteht ($e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \mu^-$). Derartige Experimente wurden an Speicherringen (z.B. DESY oder CERN) durchgeführt. Die Experimente zeigten, dass auch bei den höchsten Kollisionsenergien von mehr als 20 GeV Elektronen und Positronen als punktförmig angenommen werden können. Dadurch wurde deutlich, dass die oben verwendete klassische Beschreibung eines Elektron als eine homogen geladene Kugel nicht mehr haltbar ist: Die Coulombenergie divergiert nämlich, wenn der Radius gegen Null geht.

Die spezifische Ladung eines Elektrons

Die fundamentale Größe, welche ein makroskopisches Teilchen charakterisiert ist seine Ruhemasse m_0 . Dies wird schon daran deutlich, dass sie der einzige Parameter ist, der in die Newton-Gleichungen bzw. deren relativistische Verallgemeinerungen eingeht. Das Verhältnis von Ladung zu Masse, die *spezifische Ladung*, lässt sich über die Ablenkung eines Elektrons in elektrischen und magnetischen Feldern bestimmen. Es gilt die Bewegungsgleichung

$$\mathbf{F} = m_0 \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] . \quad (12.1.8)$$

Wir wollen hier eine auf **Classen** (1911) zurückgehende Methode betrachten (siehe Abb. 12.2). Dabei werden Elektronen in einem homogenen elektrischen Feld \mathbf{E} beschleunigt und dann mit einer definierten Geschwindigkeit, d.h. kinetischer Energie, in ein homogenes Magnetfeld gebracht, das senkrecht zu ihrer Geschwindigkeit steht. Somit werden sie auf eine Kreisbahn mit Radius ρ abgelenkt. Durch Messung des Radius dieser Kreisbahn, der Geschwindigkeit des Elektron und des angelegten Magnetfelds kann das Verhältnis e/m_0 von Ladung und Ruhemasse des Elektrons bestimmt werden.

Die Apparatur zur Messung dieser Größe ist in Abb. 12.2 skizziert. Sie besteht aus einer Vakuumröhre, in der mittels thermischer Emission freie Elektronen erzeugt werden. Diese werden mit einer Spannung U_B auf eine definierte Geschwindigkeit $m_0 v^2/2 = eU_B$ beschleunigt. Außerhalb der Vakuumröhre befindet sich ein Spulenpaar, das ein Magnetfeld senkrecht zur Flugrichtung der Elektronen erzeugt. Dieses Magnetfeld resultiert in der Lorentz-Kraft $F_L = evB$. Setzt man diese Kraft der Zentrifugalkraft $m_0 v^2/\rho$ gleich, so erhält man

$$p = m_0 v = e\rho B . \quad (12.1.9)$$

Mit $E_{\text{kin}} = p^2/2m_0 = eU_B$ folgt dann

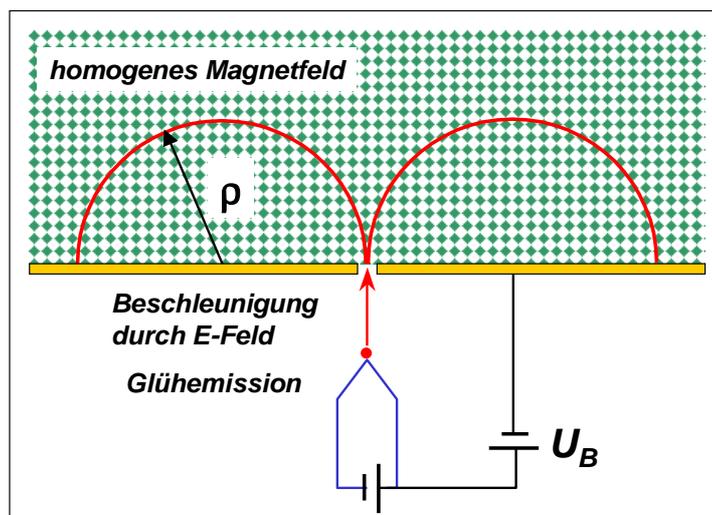


Abbildung 12.2: Versuchsanordnung zur Bestimmung der spezifischen Ladung des Elektrons nach Classen. Die ganze Anordnung befindet sich in einer Vakuumröhre. Das homogene Magnetfeld steht senkrecht auf der Papierebene.

$$\frac{e}{m_0} = \frac{2U_B}{\rho^2 B^2} = 1.758\,820\,174(71) \times 10^{11} \text{ As/kg} . \quad (12.1.10)$$

Das Experiment zeigte, dass der nach (12.1.10) für e/m_0 abgeleitete Wert nicht konstant ist. Man stellt vielmehr fest, dass der Wert von der Geschwindigkeit der Elektronen abhängt. Dies liegt daran, dass man in (12.1.10) eigentlich die relativistische Masse m einsetzen muss. Berücksichtigt man die relativistische Korrektur gemäß $m = m_0 / \sqrt{1 - (v^2/c^2)}$, so erhält man in der Tat einen konstanten Wert für e/m_0 . Historisch ist interessant, dass die Geschwindigkeitsabhängigkeit von e/m bereits im Jahr 1901 festgestellt wurde, also 4 Jahre vor der Entwicklung der speziellen Relativitätstheorie durch Einstein.

Hat man die spezifische Ladung des Elektrons ermittelt, so kann man mit Hilfe des aus anderen Experimenten abgeleiteten Werts für die Elementarladung die Masse des Elektrons ableiten.

Der Spin des Elektrons

Mehrere experimentelle Befunde³ zeigen, dass Elektronen außer ihrer Ladung e und Ruhemasse m_0 noch eine weitere Eigenschaft besitzen müssen, die wir *Elektronenspin* s nennen und die mit einem magnetischen Moment μ verknüpft ist. Bereits 1925 stellten **Samuel A. Goudsmit** und **George E. Uhlenbeck** die Hypothese auf, dass Elektronen einen Eigendrehimpuls besitzen, den sie Spin nannten. Wenn der Spin den üblichen Regeln für Drehimpulse folgt,⁴ so können wir folgendes festhalten:

- Der Betrag des Drehimpulsvektors s , bzw. das Quadrat dieses Betrages ist

$$s^2 = \hbar^2 s(s+1) = \frac{3}{4} \hbar^2 . \quad (12.1.11)$$

³Zum Beispiel die Feinstruktur in den Spektren von Atomen oder der anomale Zeeman-Effekt, die ausführlich in Physik IV behandelt werden, oder das Ergebnis des Stern-Gerlach-Experiments.

⁴Eine ausführliche Diskussion des Drehimpulses in der Quantenmechanik folgt in Physik IV.

- Die Projektion s_z des Drehimpulsvektors \mathbf{s} auf die z -Richtung ist, wie das weiter unten beschriebene Stern-Gerlach-Experiment zeigt,

$$s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar . \quad (12.1.12)$$

Das heißt, der Spin und seine z -Komponente sind quantisiert.

- Wir können also Elektronen die so genannte Spinquantenzahl s

$$s = \frac{1}{2} \quad (12.1.13)$$

zuordnen.

Der Eigendrehimpuls (Spin) \mathbf{s} des Elektrons ist mit einem magnetischen Moment (Eigenmoment, Spinnmoment) $\boldsymbol{\mu}$ verknüpft, wobei

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{s} \quad (12.1.14)$$

$$\text{und} \quad \mu_z = \gamma s_z . \quad (12.1.15)$$

gilt. Die Proportionalitätskonstante zwischen magnetischem Moment und Spinnmoment nennt man *gyromagnetisches Verhältnis*, sie muss experimentell bestimmt werden. Misst man das magnetische Moment in Einheiten des *Bohrschen Magnetons*

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} = 9.2740 \times 10^{-24} \text{ J/T} , \quad (12.1.16)$$

so erhalten wir

$$\frac{\boldsymbol{\mu}}{\mu_B} = -g_s \frac{\mathbf{s}}{\hbar} \quad \text{oder} \quad \boldsymbol{\mu} = -g_s \mu_B \frac{\mathbf{s}}{\hbar} \quad (12.1.17)$$

$$\text{und} \quad \frac{\mu_z}{\mu_B} = -g_s \frac{s_z}{\hbar} \quad \text{oder} \quad \mu_z = -g_s \mu_B \frac{s_z}{\hbar} = \mp \frac{1}{2} g_s \mu_B . \quad (12.1.18)$$

Dabei ist $g_s \simeq 2$ der Spin- g -Faktor des Elektrons, der das Verhältnis des magnetischen Moments in Einheiten von μ_B zum Drehimpuls in Einheiten von \hbar angibt. Aufgrund der Quantisierung der z -Komponente des Spins ist die z -Komponente des magnetischen Moments ebenfalls quantisiert und gleich $\pm \mu_B$.

Es waren 3 Experimente notwendig, die obigen Tatsachen experimentell belegt haben und zur Bestimmung der relevanten Größen herangezogen werden konnten:

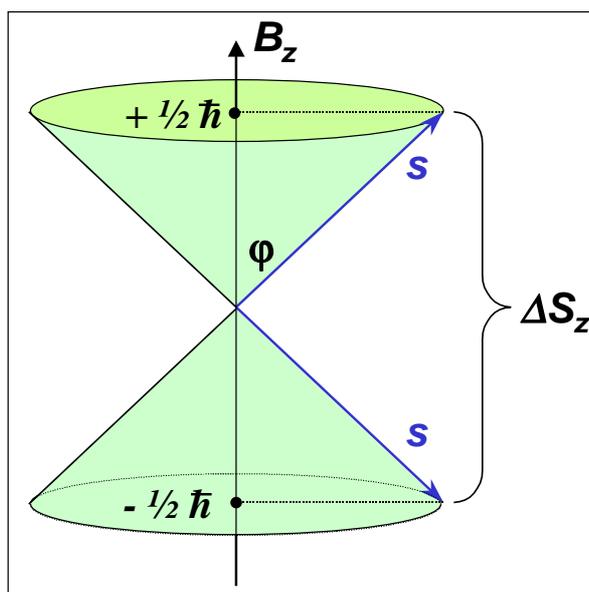


Abbildung 12.3: Zur Spinquantisierung eines Spin-1/2-Teilchens im Magnetfeld. Der Spin kann alle Richtungen auf einem Kegelmantel einnehmen, so dass der Wert in z -Richtung quantisiert ist.

- Das *Stern-Gerlach-Experiment*, das die Quantisierung der z -Komponente des magnetischen Moments $\mu_z = \pm\mu_B$ demonstriert hat.
- Das *Experiment von Einstein und de Haas*, das Information über das gyromagnetische Verhältnis und damit den Betrag $\sqrt{\mu^2}$ des magnetischen Moments aus der Messung des magnetischen Moments makroskopischer Proben liefert.
- Die Messung einer $1/T$ -Abhängigkeit der Suszeptibilität paramagnetischer Proben. Diese Abhängigkeit nennt man das *Curie'sche Gesetz*.

Um diese Experimente näher zu erläutern, betrachten wir zunächst die potentielle Energie des magnetischen Moments in einem angelegten Magnetfeld. Sie beträgt

$$E_{\text{pot}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} . \quad (12.1.19)$$

Der energetisch niedrigste Zustand ist daher dann realisiert, wenn das magnetische Moment parallel zum angelegten Feld steht.⁵ Ein klassisches magnetisches Moment kann natürlich beliebige Winkel zum Magnetfeld und daher beliebige Werte der potentiellen Energie annehmen.

Wenn wir die oben angegebenen Quantisierungsvorschriften zunächst akzeptieren, dann kann das quantenmechanische Moment, das mit dem Spin des Elektrons verknüpft ist, nur zwei Einstellmöglichkeiten annehmen. Diese sind in Abb. 12.3 dargestellt. Dieses Phänomen bezeichnet man auch als Richtungsquantisierung. Der Energieunterschied zwischen den beiden möglichen Einstellungen des Elektronenspins beträgt

$$\Delta E_{\text{pot}} = g_s \mu_B |\mathbf{B}| . \quad (12.1.20)$$

⁵Der Spin \mathbf{s} steht dann wegen $\boldsymbol{\mu} \parallel -\mathbf{s}$ antiparallel zum angelegten Feld.

Da das magnetische Moment μ parallel zum Drehimpulsvektor \mathbf{s} und damit nicht parallel zu $\mathbf{B} = B_z \hat{z}$ ist (siehe Abb. 12.3), erfährt der Vektor des magnetischen Moments ein Drehmoment $\mathbf{m} = \mu \times \mathbf{B}$. Dieses steht also senkrecht auf μ und \mathbf{B} und verursacht eine *Präzessionsbewegung* um die z -Achse, die man *Larmor-Präzession* nennt (siehe hierzu auch Abb. 12.11). Die Larmor-Präzessionsfrequenz ist⁶

$$\omega_L = g_s \frac{eB}{2m_0}. \quad (12.1.21)$$

Falls g_s exakt gleich zwei ist, stimmt die Larmor-Präzessionsfrequenz exakt mit der Zyklotronfrequenz $\omega_c = e|\mathbf{B}|/m_0$ überein.⁷

Wir wollen nun die drei erwähnten Experimente kurz vorstellen:

- **Das Stern-Gerlach-Experiment (1924):**⁸

Im Stern-Gerlach-Experiment nutzt man die Kraft auf ein magnetisches Moment in einem inhomogenen Magnetfeld mit $d\mathbf{B}/dz \neq 0$ aus:

$$\mathbf{F} = -\frac{d}{dz}(\mu \cdot \mathbf{B}) = -g_s \mu_B \left| \left(\frac{d\mathbf{B}}{dz} \right) \right| \frac{s_z}{\hbar}. \quad (12.1.22)$$

Falls $s_z = \pm \hbar$ quantisiert ist, gibt es nur zwei im Vorzeichen entgegengesetzte Kraftkomponenten. Falls s_z beliebig wäre, wären auch die Kraftkomponenten beliebig.

Die Versuchsanordnung zum Stern-Gerlach-Experiment ist in Abb. 12.4 skizziert. Eine Atomstrahlquelle erzeugt einen Strom neutraler Silberatome. Silber hat ein einzelnes, ungepaartes Elektron in seiner Atomhülle, das als $s_{1/2}$ -Niveau betrachtet werden kann. Der Strahl durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld und wird dabei in zwei Komponenten aufgespalten, die den zwei möglichen Einstellungen des Elektronenspins bezüglich der durch das äußere Feld festgelegten Quantisierungsachse z entspricht.

Die Tatsache, dass man nur zwei Komponenten beobachtet belegt klar, dass eine Richtungsquantisierung vorliegt und dass die Spinquantenzahl des Elektrons $s = 1/2$ ist. Aus der quantitativen Auswertung der Ablenkung des Strahls, kann die Größe des magnetischen Moments des Elektrons, d.h. letztendlich der Spin- g -Faktor des Elektrons zu $g_s \simeq 2$ bestimmt werden.

- **Das Einstein-de Haas-Experiment (1915):**

Das Verhältnis von magnetischem Moment des Elektrons zum Elektronenspin lässt sich experimentell durch ein ursprünglich von **Albert Einstein** vorgeschlagenes Experiment bestimmen und erstmals von **Wander Johannes de Haas** im Jahr 1915 durchgeführt wurde. Beim Einstein-de Haas-Experiment wird ein zylinderförmiger Eisenstab mit Radius R und Masse m , der durch eine zylinderförmige Spule erregt werden kann, an einem Torsionsfaden aufgehängt (siehe Abb. 12.5). Man kann somit Drehschwingungen des Eisenstabs über ein Spiegelsystem beobachten. Beim Umpolen des Spulenstroms werden die magnetischen Momente der Elektronen jeweils in entgegengesetzte Richtungen ausgerichtet. Ist das Magnetfeld stark genug, so werden alle Momente vollkommen ausgerichtet und es ergibt sich für beide Stromrichtungen ein Magnetisierungsunterschied

⁶Eine explizite Ableitung dieses Ausdrucks folgt später in Abschnitt 12.2.

⁷Bringt man ein Elektron mit Impuls \mathbf{p} in ein homogenes Magnetfeld $\mathbf{B} \perp \mathbf{p}$, so bewegt es sich auf einer Kreisbahn. Die Zyklotronfrequenz gibt die Kreisfrequenz dieser Bewegung an.

⁸W. Gerlach, O. Stern, *Annalen der Physik* **74**, 45 (1924).

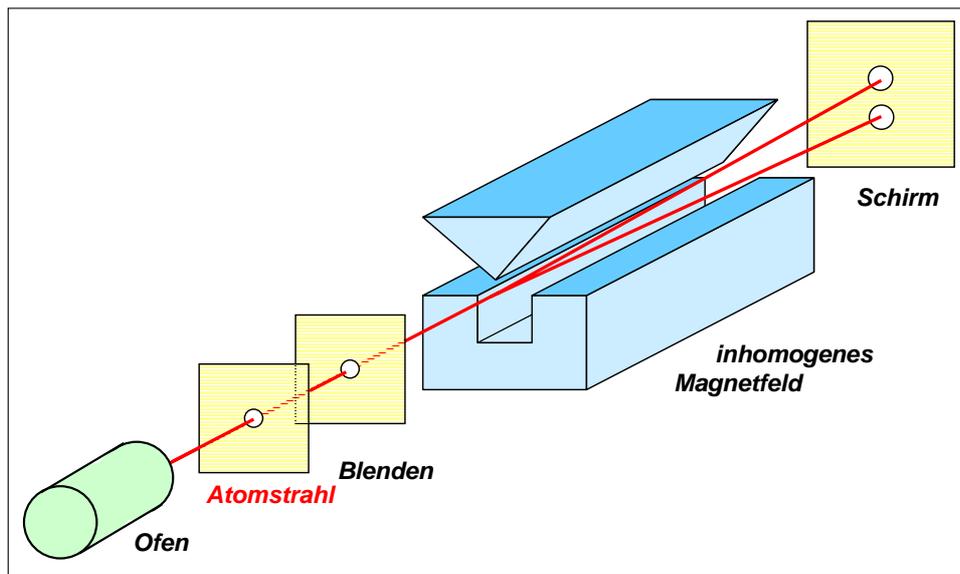


Abbildung 12.4: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus von Stern und Gerlach zur Messung der Spinquantisierung. Das inhomogene Magnetfeld wird durch ein asymmetrisches Eisenjoch erzeugt.

$\Delta M = 2M = 2N \cdot \mu_z$, wobei N die Anzahl der Elektronen in der Probe ist. Da bei der Ummagnetisierung alle Elektronenspins umklappen, erhält man eine Änderung des mechanischen Drehimpulses von $\Delta s = 2Ns_z = N\hbar = -I\omega$, wobei $I = \frac{1}{2}mR^2$ das Trägheitsmoment des Eisenstabs ist. Setzt man die damit verbundene Rotationsenergie $E_{\text{rot}} = \frac{1}{2}I\omega^2$ der potentiellen Energie $E_{\text{pot}} = D\varphi$ des verdrillten Fadens mit dem Torsionsmoment D gleich, so erhält man $\Delta s = (d\varphi m R^2)^{1/2}$. Durch Messung der Magnetisierung M und des Winkels φ lassen sich damit ΔM und Δs bestimmen und daraus das gyromagnetische Verhältnis

$$\frac{\Delta M}{\Delta s} = \gamma$$

ableiten.

- **Das Curie'sche Gesetz:**

Misst man die Suszeptibilität χ einer paramagnetischen Probe als Funktion der Temperatur, so stellt man eine $1/T$ -Abhängigkeit fest. Diese Abhängigkeit bezeichnet man als *Curie-Gesetz* und kann am einfachsten dadurch erklärt werden, dass es sich bei der paramagnetischen Probe um ein Spin-1/2-System handelt. Der Energieunterschied zwischen den beiden Einstellmöglichkeiten des Spins beträgt $\Delta E_{\text{pot}} = g_s \mu_B |\mathbf{B}| \simeq 2\mu_B |\mathbf{B}|$ (siehe Abb. 12.6). Im thermischen Gleichgewicht kann man nun annehmen, dass die beiden Einstellmöglichkeiten gemäß der Boltzmann-Statistik besetzt werden. Das heißt, für die Besetzungszahlen n_1 und n_2 des unteren und oberen Niveaus gilt

$$\frac{n_1}{n} = \frac{\exp\left(\frac{\mu \cdot \mathbf{B}}{k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{\mu \cdot \mathbf{B}}{k_B T}\right) + \exp\left(-\frac{\mu \cdot \mathbf{B}}{k_B T}\right)} \quad (12.1.23)$$

$$\frac{n_2}{n} = \frac{\exp\left(-\frac{\mu \cdot \mathbf{B}}{k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{\mu \cdot \mathbf{B}}{k_B T}\right) + \exp\left(-\frac{\mu \cdot \mathbf{B}}{k_B T}\right)} \quad (12.1.24)$$

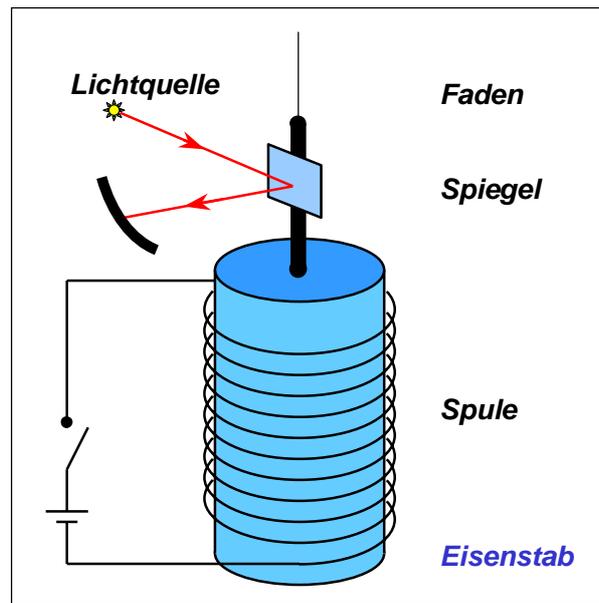


Abbildung 12.5: Experimentelle Anordnung beim Einstein-de Haas-Experiment.

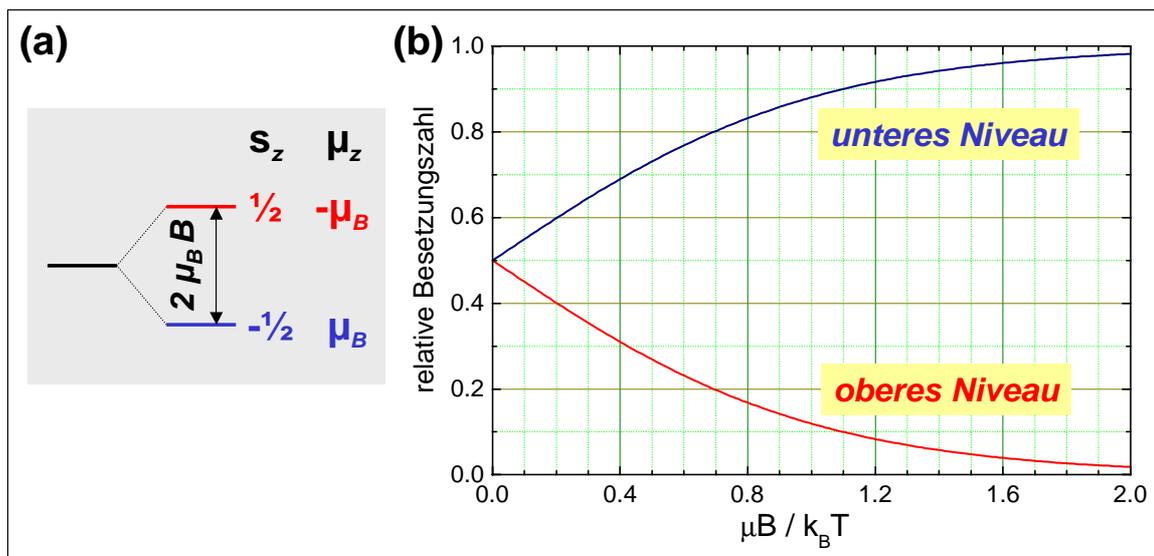


Abbildung 12.6: (a) Aufspaltung der Energieniveaus eines Elektrons in einem Magnetfeld parallel zur z -Achse. (b) Relative Besetzungszahlen eines Zwei-Niveau-Systems im thermischen Gleichgewicht bei einer Temperatur T und einem Magnetfeld B . Das magnetische Moment ist proportional zur Differenz der beiden Kurven.

Hierbei ist $n = n_1 + n_2$ die Gesamtzahl der Atome. Die relativen Besetzungszahlen sind in Abb. 12.6 gezeigt.

Unter Benutzung von $\mu = \mu_z$ und $n = n_1 + n_2$ ergibt sich die Magnetisierung der Probe zu

$$\begin{aligned}
 M = n_1(\mu) + n_2(-\mu) &= n\mu \frac{e^{\frac{\mu B}{k_B T}} - e^{-\frac{\mu B}{k_B T}}}{e^{\frac{\mu B}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu B}{k_B T}}} \\
 &= n\mu \tanh\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right). \quad (12.1.25)
 \end{aligned}$$

Da im Experiment (außer bei sehr tiefen Temperaturen und sehr hohen Magnetfelder) meist $\mu B/k_B T \ll 1$ gilt, kann man die Näherung $\tanh x \simeq x$ verwenden und man erhält

$$M = n\mu \frac{\mu B}{k_B T}$$

oder

$$\chi = \frac{\mu_0 M}{B} = \frac{\mu_0 \mu^2 n}{k_B T} \propto \frac{1}{T} . \quad (12.1.26)$$

Dies ist das Curie'sche Gesetz für paramagnetische Materialien.

Wir haben in diesem Unterabschnitt Experimente beschrieben, die gezeigt haben, dass der Spin und die z -Komponente des magnetischen Moments des Elektrons nur diskrete Werte annehmen können. Aus den Experimenten entnimmt man, dass der Spin- g -Faktor des Elektrons $g_s \simeq 2$ ist, d.h. dass die z -Komponente des magnetischen Moments des Elektrons $\pm \mu_B$ ist. Wir möchten an dieser Stelle darauf hinweisen, dass die nicht-relativistische Quantenmechanik (im Sinne einer Schrödinger-Quantenmechanik, siehe Abschnitt 12) dieses Phänomen nicht erklären kann. Es ist vielmehr so, dass der Spin und das magnetische Moment des Elektrons in der einführenden Vorlesung zur Quantenmechanik empirisch (aufgrund der experimentellen Tatsachen) eingeführt werden. Die relativistisch korrekte Quantenelektrodynamik (QED) erlaubt es dagegen, den Spin- g -Faktor des Elektrons und des Positrons genau zu berechnen. Dabei werden kleine Abweichungen vom Wert $g_s \simeq 2$ gefunden, die als Potenzreihen der Feinstrukturkonstante $\alpha \simeq 1/137$ darstellbar sind. Wenn man also α aus anderen Experimenten genau kennt, kann man damit g_s genau ableiten. Andererseits kann man durch sehr genaue Messungen von g_s die Feinstrukturkonstante bestimmen.

Die QED sagt ferner voraus, dass der Spin- g -Faktor des Elektrons exakt dem des Positrons entspricht. Dies hat raffinierte Experimente motiviert, bei denen die g -Faktoren von Elektron und Positron sehr genau bestimmt und miteinander verglichen wurden. Das Ergebnis dieser Experimente war, dass die g_s -Werte für Elektronen und Positronen sehr genau übereinstimmen. Man erhielt

$$\frac{g_s(e^-)}{g_s(e^+)} = 1 + (0.5 \pm 2.1) \times 10^{-12} . \quad (12.1.27)$$

Die Übereinstimmung zwischen dem theoretisch vorhergesagten und experimentell gemessenen Wert für den Spin- g -Faktor des Elektrons ist von der Größenordnung 10^{-10} .

12.2 Welleneigenschaften von Elektronen

Für Photonen haben wir den Teilchen-Welle-Dualismus ausführlich diskutiert. Wir haben gesehen, dass sich die Ausbreitung elektromagnetischer Strahlung, insbesondere Beugungs- und Interferenzeffekte gut mit Hilfe des Wellenbilds beschreiben lassen. Wechselwirkungsprozesse von Photonen mit Materie, insbesondere der Photoeffekt und der Compton-Effekt lassen sich dagegen nur im Rahmen des Teilchenbildes richtig interpretieren.

In diesem Abschnitt wollen wir den Welle-Teilchen-Dualismus auch für Teilchen mit endlicher Ruhemasse am Beispiel von Elektronen diskutieren. Im Rahmen der klassischen Mechanik wurde das Teilchenbild verwendet, um die Bewegung von Teilchen und elastische Stöße zwischen Teilchen zu beschreiben. Andererseits kann man mit mikroskopischen Teilchen (Elektronen, Neutronen, Protonen, etc.) auch Streuexperimente durchführen, bei denen Beugungs- und Interferenzeffekte auftreten. Diese lassen sich nur im Rahmen eines Wellenbildes richtig interpretieren.

12.2.1 Elektronenwellen

Die de Broglie Wellenlänge

Wir haben bereits am Anfang dieses Kapitel darauf hingewiesen, dass **Louis de Broglie** bereits im Jahr 1924, motiviert durch den Wunsch nach Symmetrie in der Natur, postulierte, dass auch Teilchen mit einer endlichen Ruhemasse mit einer so genannten **Materiewelle** verknüpft sind, deren Wellenlänge sich aus einer Umkehrung der entsprechenden für das Licht bekannten Beziehungen ergeben sollte. Er postulierte

$$E = \hbar\omega \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad \lambda = \frac{h}{|\mathbf{p}|} .$$

Diese von de Broglie postulierten Beziehungen wurden mittlerweile durch zahlreiche Experimente bestätigt.

Um die Größenordnung der de Broglie Wellenlänge von Materie zu illustrieren, betrachten wir Elektronen und Neutronen mit unterschiedlichen Energien.

- **Elektronen:**

Elektronen können durch eine elektrische Spannung U_B auf die kinetische Energie $E_{\text{kin}} = eU_B = |\mathbf{p}|^2/2m$ beschleunigt werden. Für genügend langsame, nicht-relativistische Elektronen ($m = m_0$) gilt damit $|\mathbf{p}| = \sqrt{2m_0 E_{\text{kin}}} = \sqrt{2m_0 eU_B}$ und man erhält die de Broglie Wellenlänge zu

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eU_B}} = \frac{12.26}{\sqrt{U_B[\text{Volt}]}} \text{ \AA} . \quad (12.2.1)$$

Wir sehen, dass Elektronenwellen für Elektronen mit einer kinetischen Energie von 100 eV eine Wellenlänge im Bereich von 1 Å besitzen.

- **Neutronen:**

Für Neutronen gilt ebenfalls $|\mathbf{p}| = \sqrt{2m_0 E_{\text{kin}}}$ und man erhält mit der Ruhemasse $m_0 = 1.6749 \times 10^{-27}$ kg des Neutrons

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_{\text{kin}}}} = \frac{0.286}{\sqrt{E_{\text{kin}}[\text{eV}]}} \text{ \AA} . \quad (12.2.2)$$

So genannte *thermische Neutronen* besitzen eine kinetische Energie $E_{\text{kin}} \simeq k_B T \simeq 25 \text{ meV}$ bei $T = 300 \text{ K}$. Sie haben nach (12.2.2) eine Wellenlänge im Ångström-Bereich, d.h. im Bereich atomarer Längenskalen.

Anmerkungen zum Bohr'schen Atommodell

Im Bohr'schen Modell des Wasserstoffatoms läuft das Elektron auf einer geschlossenen, z.B. kreisförmigen Bahn um den positiven Atomkern. Im Wellenbild entspricht dem eine Amplitudenverteilung der Materiewelle längs der klassischen Bahn (siehe hierzu Abb. 12.7). Würde der Kreisumfang der Bahn nicht einem Vielfachen der Wellenlänge entsprechen, so würde sich die Welle durch Interferenz auslöschen. Man erkennt, dass ein stationärer Fall nur möglich ist, wenn der Bahnumfang $2\pi r_n$ einem ganzzahligen Vielfachen der Materiewellenlänge entspricht:

$$2\pi r_n = n \lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots . \quad (12.2.3)$$

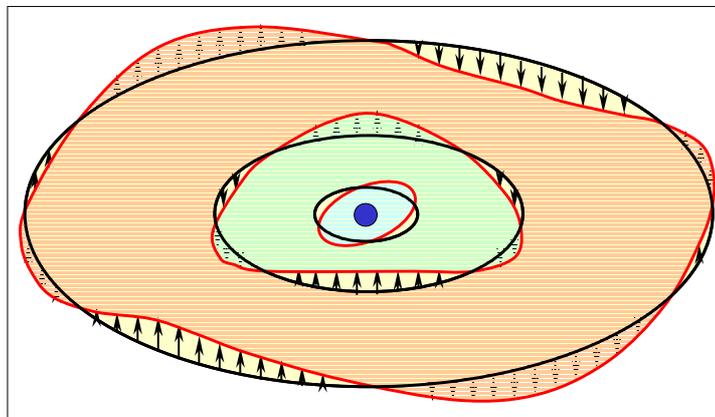


Abbildung 12.7: Elektronenwelle auf einer Kreisbahn um den Atomkern.

Aus der de Broglie Beziehung folgt damit sofort die Bohr'sche Quantisierungsbedingung für den Bahndrehimpuls L

$$L = p r_n = \frac{n\lambda}{2\pi} \frac{h}{\lambda} = n \frac{h}{2\pi} = n \hbar . \quad (12.2.4)$$

Die zunächst unverständliche Quantisierungsbedingung kann also mit der Materiewellenvorstellung auf ein Stationaritätsproblem eines schwingenden Systems mit Randbedingungen zurückgeführt werden. Die Randbedingung lautet dabei, dass die Welle in sich zurücklaufen muss. Denkt man sich die in Abb. 12.7

gezeigten Kreisbahnen an einem Knotenpunkt aufgeschnitten und zu einer linearen Saite gestreckt, so erkennt man die Analogie zu dem Problem einer schwingenden Saite. Die Weiterentwicklung dieser Überlegung führte zu der *Schrödinger'schen Wellenmechanik*.

Mit der Wellenvorstellung lässt sich noch eine weitere Schwierigkeit des Bohr'schen Atommodells beseitigen, nämlich die postulierte Strahlungslosigkeit der stationären Bohr'schen Bahnen. Das System des um den positiven Kern kreisenden Elektrons stellt ja einen elektrischen Dipol dar, der nach der klassischen Elektrodynamik elektromagnetischen Wellen abstrahlen und dadurch kontinuierlich seine Energie verlieren sollte. Eine längs der klassischen Elektronenbahn schwingende Materiewelle bedeutet aber, dass das Elektron gewissermaßen über den gesamten Bahnumfang verschmiert ist. In diesem Bild stellt das System Atomkern-Elektron keinen schwingenden Dipol mehr dar und die Strahlungsnotwendigkeit entfällt.

12.2.2 Vertiefungsthema: Beugung und Interferenz mit Elektronenwellen

In diesem Abschnitt beschreiben wir einige Experimente, aus denen der Wellencharakter von Elektronen (bzw. im Allgemeinen von Teilchen mit endlicher Ruhemasse) hervorgeht. Es liegt nahe, die Welleneigenschaften von Elektronen dadurch nachzuweisen, indem wir Experimente zur Beugung und Interferenz durchführen, wie wir sie für Licht ausführlich in Kapitel 5 diskutiert haben. Da wir ferner gesehen haben, dass die typische Wellenlänge von Elektronen mit Energien im Bereich von 100 eV atomaren Größenordnungen entspricht, ist klar, dass wir für die Untersuchung von Beugungseffekten Beugungsgitter mit atomaren Gitterabständen benötigen. Das Kristallgitter eines Festkörpers stellt gerade ein solches Beugungsgitter dar.

Elektronenbeugung an Kristallen

Zur Prüfung der Wellenhypothese von de Broglie schlug **W. Elsäßer** im Jahr 1925 Experimente zur Beugung von Elektronen am Kristallgitter vor. Bereits im Jahr 1927 gelang es **Clinton Joseph Davisson** und **Lester Halbert Germer** solche Beugungseffekte bei der Streuung von Elektronen an einem Kristall zu finden.⁹ Sie erzeugten freie Elektronen durch Glühemission und beschleunigten diese durch eine Beschleunigungsspannung U_B im Bereich bis etwa 100 V. Den durch eine kleine Öffnung in der Anode austretenden Stahl richteten sie auf einen Nickeleinkristall. Die an der Oberfläche gestreuten Elektronen wurden mit Hilfe eines Faraday-Behers aufgefangen und mit einem daran angeschlossenen Messgerät als elektrischer Strom nachgewiesen. Durch Schwenken des Bechers konnten sie die Streuintensität als Funktion des Streuwinkels messen. Dabei ergaben sich keine glatten Kurven, sondern es wurden ausgeprägte Maxima bei ganz bestimmten Streuwinkeln beobachtet, deren Lage von der kinetischen Energie der Elektronen, also von ihrer Wellenlänge, abhing. Durch Drehen des Kristalls in unterschiedliche Richtungen beobachteten sie Streuintensitätsmaxima für bestimmte Raumrichtungen in Analogie zu dem mit Röntgenbeugung erhaltenen Laue-Diagramm eines Einkristalls. Dies deutete stark darauf hin, dass es sich bei dem beobachteten Phänomen tatsächlich um eine Beugungserscheinung von Elektronenwellen handelte.

Diese Interpretation wurde dadurch erhärtet, dass die zu den beobachteten Maxima der Streuintensität gehörenden Winkel fast genau mit denjenigen übereinstimmen, die man erhält, wenn man in die

⁹De Broglie erhielt daraufhin 1929 den Nobelpreis, Davisson und Thomson mussten bis 1937 warten. G.P. Thomson war der Sohn von J.J. Thomson, der 1897 das Verhältnis von elektrischer Elementarladung e zur Elektronenmasse m_e bestimmte, und dafür ebenfalls den Nobel-Preis erhielt. Während also der Vater das "Teilchen" fand, entdeckte der Sohn die "Welle".

Bragg'sche Gleichung¹⁰ (vergleiche (5.6.13) und Abb. 5.34 in Abschnitt 5.6.3) für das Auftreten von Röntgenreflexen

$$2d \sin \vartheta = n \lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.2.5)$$

die Wellenlänge λ aus der Beziehung für die de Broglie Wellenlänge einsetzt. Damit war die Existenz der Materiewellen und gleichzeitig die Richtigkeit der de Broglie Beziehung nachgewiesen.

Die Beugung von Elektronen mit relativ niedriger Energie (10 bis 100 eV) wird heute sehr häufig zur Analyse der Kristallstruktur an Festkörperoberflächen eingesetzt, da die niederenergetischen Elektronen eine geringe Eindringtiefe besitzen. Dieses Verfahren ist heute unter der Abkürzung **LEED** (low energy electron diffraction) bekannt.

Ebenfalls im Jahr 1927 berichtete **G. P. Thomson** über Beugungsexperimente mit Elektronen höherer Energie (10 bis 100 keV). Da das Durchdringungsvermögen solcher Elektronen höher ist, konnte Thomson dünne Metallschichten durchstrahlen und Beugungseffekte in Transmission beobachten. Elektronenbeugung in Transmission ist heute ein Standardverfahren in der Transmissionselektronenmikroskopie.

Elektronenbeugung an der Kante

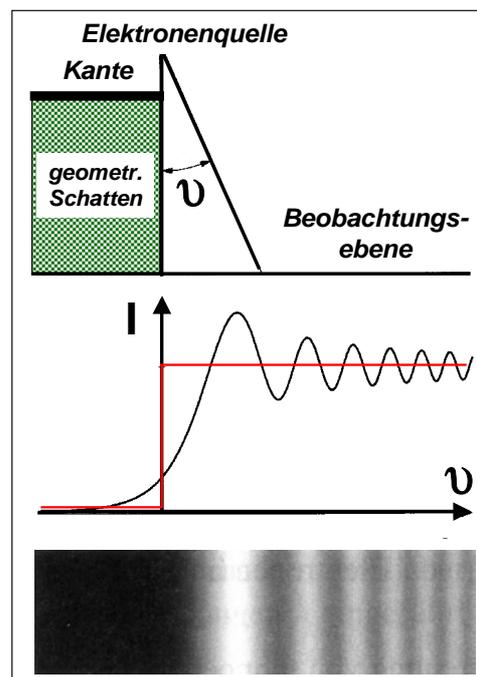


Abbildung 12.8: Fresnel'sche Beugung von Elektronenwellen an einer makroskopischen Kante.

Die bisher diskutierten Beugungsexperimente stellen alle Fraunhofer'sche Beugung an Mikrostrukturen (Atomgitter als beugendes Objekt) dar. Im Jahr 1940 gelang es dann **H. Boersch** erstmals, die Fresnel'sche Beugung von Elektronen an einer makroskopischen Kante eines Al_2O_3 -Einkristalls nachzuweisen (siehe Abb. 12.8). Die Bedeutung der Fresnel'schen Beugungserscheinung besteht darin, dass der

¹⁰Die Bragg Gleichung ist nach Sir William Henry Bragg (1862-1945) und seinem Sohn William Lawrence Bragg (1890-1971) benannt. Beide erhielten gemeinsam 1915 den Nobel Preis für ihre Methode, die Wellenlänge von Röntgenstrahlung zu bestimmen, bzw. bei deren Kenntnis Kristallstrukturen mit Röntgenbeugung aufzuklären. Sie sind bisher das einzige Vater-Sohn Team, das den Nobel-Preis erhalten hat.

Abstand der Interferenzmaxima nicht von den geometrischen Dimensionen des Streukörpers abhängt (wie z.B. den Atomabständen im Streugitter). Infolgedessen wird die Bestimmung der Wellenlänge der Elektronen unmittelbar auf Messung der Abstände der Elektronenquelle vom Objekt und der Interferenzmaxima untereinander zurückgeführt. Die Experimente von Boersch lieferten damit den endgültigen Beweis für den Wellencharakter von Elektronen.

Elektroneninterferometrie

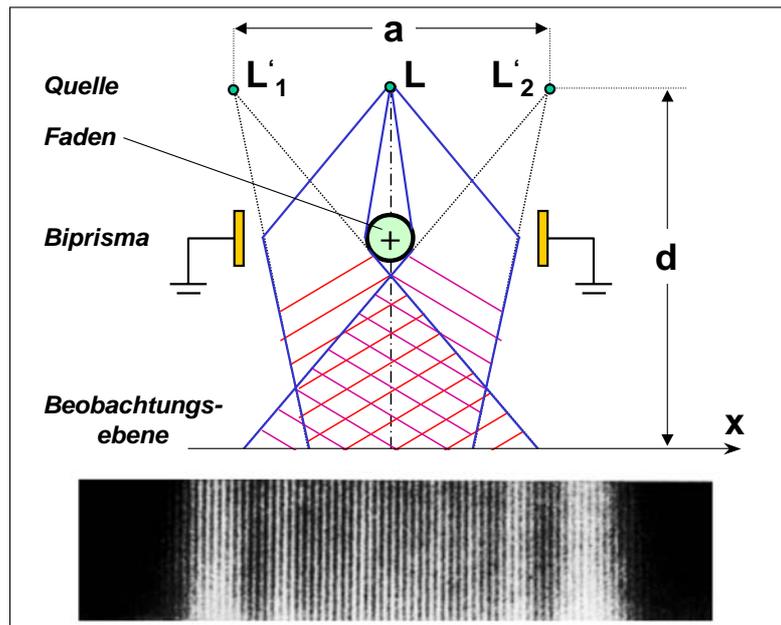


Abbildung 12.9: Interferometeranordnung zur Erzeugung von Elektroneninterferenzen nach Möllenstedt und Düker. L stellt eine elektronenoptisch verkleinerte Elektronenquelle dar, L'_1 und L'_2 sind die entsprechenden virtuellen Elektronenquellen. Am unteren Bildrand ist eine Aufnahme von Elektroneninterferenzen in der Beobachtungsebene gezeigt (G. Möllenstedt, H. Düker, Zeitschrift für Physik **145**, 377 (1956)).

Eine weitere Möglichkeit zum Nachweis der Wellennatur von Elektronen ist die Überlagerung von zwei kohärenten Elektronenbündeln, ähnlich zum Fresnel'schen Biprisma (siehe Abb. 5.37 in Abschnitt 5.7). Ein solches Biprisma (siehe Abb. 12.9) wurde von **G. Möllenstedt** und **H. Düker** im Jahr 1956 realisiert.¹¹ Es besteht aus einem gegenüber der Umgebung positiv geladenen Draht von wenigen μm Durchmesser auf den ein Elektronenstrahl gerichtet wird. Die Teilbündel zu beiden Seiten des Drahts werden aufgrund dessen positiver Ladung umgelenkt und überlagern sich unterhalb des Fadens unter einem sehr kleinen Winkel. Auf einem Leuchtschirm werden dann Interferenzstreifen beobachtet.

Da die Streifen sehr dicht liegen, benötigt man, um diese auflösen zu können, eine sehr feine Elektronenquelle. Man realisiert diese durch Verkleinerung einer üblichen Elektronenquelle. Aus dem Abstand der Interferenzstreifen kann man in völliger Analogie zum Experiment mit Licht (Fresnel) die Wellenlänge der Elektronen bestimmen. Das Resultat bestätigt erneut die Gültigkeit der de Broglie Beziehung.

Die Bedeutung der Biprisma-Interferometeranordnung bestand darin, dass man damit auch die phasenschiebende Wirkung kleiner magnetischer Flüsse messen konnte, die die Fläche zwischen den beiden Teilstrahlen durchsetzt. Insbesondere konnte damit auch die Flussquantisierung in kleinen supraleitenden Hohlzylindern nachgewiesen werden.¹²

¹¹G. Möllenstedt, H. Düker, Zeitschrift für Physik **145**, 377 (1956).

¹²H. Boersch, B. Lischke, Zeitschrift für Physik **237**, 449 (1970). Die Flussquantisierung in Supraleitern wurde mit einer

Beugung und Interferometrie mit Heliumatomen und Neutronen

Experimente zur Beugung und Interferenz von Materiewellen wurden in ähnlicher Weise wie mit Elektronen mittlerweile auch mit Heliumatomen und Neutronen durchgeführt. Als Erste wiesen **Stern, Frisch** und **Estermann** bereits 1929 die Beugung von Heliumatomstrahlen an einer LiF-Kristalloberfläche nach. Wegen der viel größeren Masse dieser Teilchen wurden kleine Geschwindigkeiten (so genannte thermische Geschwindigkeiten) benutzt. Als Atomstrahlquelle diente ein He-Gas mit einer Temperatur von 400 K, was einer de Broglie Wellenlänge von $\lambda = h/\sqrt{3m_{\text{He}}k_B T}$ von etwa 0.06 nm entspricht.

Seitdem es Kernreaktoren gibt, stehen Neutronenquellen mit hohen Flussdichten zur Verfügung, wodurch heute auch die Neutronenbeugung eine wichtige Rolle zur Untersuchung von Festkörpern spielt. In jüngerer Vergangenheit wurden mit Neutronen auch wichtige Experimente zum Test der Quantenmechanik durchgeführt, auf die aber hier nicht eingegangen werden soll.¹³

12.2.3 Elektronen als Wellenpakete

Wir haben bereits gesehen, dass die Einführung der Materiewellen außerordentlich erfolgreich bei der Deutung der Quanteneigenschaften des Atoms und der Interpretation von Beugungs- und Interferenzeffekten ist. Es tritt allerdings jetzt ein neues Problem auf, nämlich das der Lokalisierbarkeit von Teilchen, wenn man die Wellenvorstellung auf ein sich frei bewegendes Teilchen überträgt. Ordnet man einem freien Teilchen eine monochromatische Welle zu, so ist diese unendlich ausgedehnt, womit ein klarer Widerspruch zu der Eigenschaft eines Teilchens, räumlich lokalisiert zu sein, auftritt.

Es liegt daher nahe, einem Teilchen – ähnlich wie dem Photon – nicht eine streng monochromatische Welle zuzuordnen, sondern vielmehr ein *Wellenpaket*, das man sich durch die Überlagerung von vielen harmonischen Wellen mit etwas unterschiedlicher Wellenlänge bzw Wellenvektor entstanden denken kann:

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \Psi_0 \exp\left[ik\left(x - \frac{\omega}{k}t\right)\right] dk . \quad (12.2.6)$$

Man sieht (siehe hierzu Abb. 12.10), dass das Wellenpaket seine größte Amplitude in einem räumlich begrenzten Bereich hat, was unserer Vorstellung eines räumlich lokalisierten Teilchens schon näher kommt. Dennoch ist auch dieses Wellenpaket räumlich ausgedehnt. Man erhält eine Ortsunschärfe Δx und eine Frequenz- bzw. Wellenlängenunschärfe $\Delta\omega$ bzw. $\Delta\lambda$, die, wie wir später noch zeigen werden, wieder zur Heisenberg'schen Unschärferelation führt.

Über die Natur dieser Materiewellen, z.B. welche Größe durch die Wellenfunktion Ψ beschrieben wird, haben wir noch keine Aussage gemacht. Auch die genauere theoretische Beschreibung, die Wellenmechanik, macht darüber keine Aussage. Es ist lediglich klar, dass das Absolutquadrat $|\Psi|^2$ als Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens gedeutet wird, weshalb Ψ auch als "Wahrscheinlichkeitsamplitude" bezeichnet wird.

Bevor wir unsere Diskussion fortsetzen, wollen wir einige wichtige Eigenschaften von Wellen rekapitulieren (vergleiche hierzu Kapitel 2). Wir definieren die Gruppengeschwindigkeit und die Phasengeschwindigkeit als

anderen Messmethode erstmals von Doll und Näbauer im im Jahr 1961 nachgewiesen.

¹³H. Rauch, Physikalische Blätter **50**, 439 (1994).

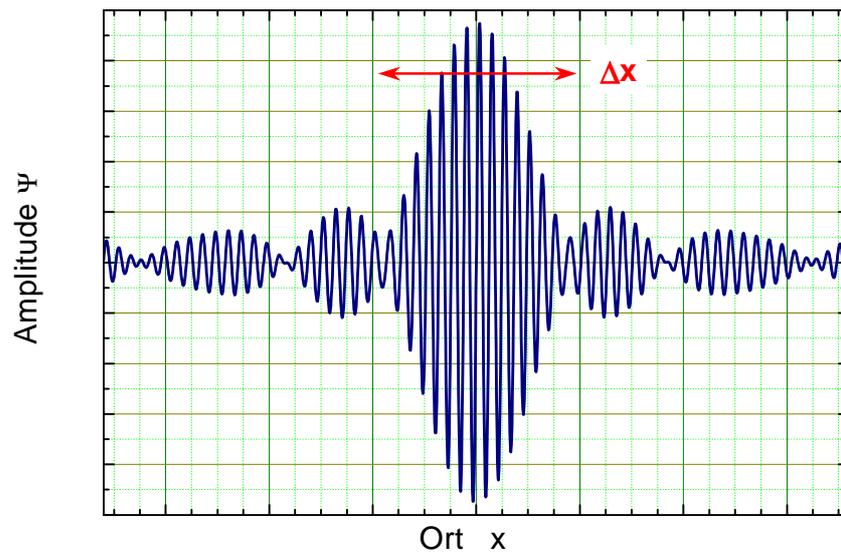


Abbildung 12.10: Wellenpaket als Überlagerung von ebenen Wellen mit unterschiedlicher Frequenz.

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} \quad (\text{Phasengeschwindigkeit}) \quad (12.2.7)$$

$$v_{\text{gr}} = \frac{d\omega}{dk} = v_{\text{ph}} - \lambda \frac{dv_{\text{ph}}}{d\lambda} = -\frac{\lambda^2}{2\pi} \frac{d\omega}{d\lambda} \quad (\text{Gruppengeschwindigkeit}) \quad (12.2.8)$$

Wenn v_{ph} nicht von der Wellenlänge abhängt (dispersionsloser Fall), bleibt die Form eines Wellenpakets bei Ausbreitungsprozess erhalten, da alle Fourierkomponenten des Wellenpakets gleich schnell laufen. Für diesen Fall sind Gruppen- und Phasengeschwindigkeit identisch. Wenn sich jedoch die Phasengeschwindigkeit mit der Wellenlänge ändert, erleidet das Wellenpaket eine Deformation oder *Dispersion*, wenn es sich ausbreitet. In diesem Fall sind Gruppen- und Phasengeschwindigkeit nicht mehr identisch.

Betrachten wir nun wieder unsere Materiewelle, so können wir in Analogie zu Lichtwellenpaketen (Photonen) die Energie der sich bewegenden Teilchen mit einer Frequenz ω verknüpfen. Legen wir ferner das Äquivalenzprinzip von Masse und Energie zugrunde, so erhalten wir aus

$$E = \hbar\omega = mc^2 \quad (12.2.9)$$

für die Frequenz einer Materiewelle

$$\omega = \frac{mc^2}{\hbar} \quad (12.2.10)$$

Hierbei handelt es sich gemäß unserer Diskussion zu Wellenpaketen um eine mittlere Frequenz. Mit diesem Ausdruck erhalten wir für die Phasengeschwindigkeit der Materiewelle unter Berücksichtigung der de Broglie Beziehung

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega\lambda}{2\pi} = \frac{\frac{mc^2}{\hbar}}{\frac{2\pi}{\lambda}} = \frac{mc^2}{mv_T} = \frac{c^2}{v_T}. \quad (12.2.11)$$

Daraus folgt, da die Teilchengeschwindigkeit v_T die Lichtgeschwindigkeit c nicht übersteigen kann, dass die Phasengeschwindigkeit einer Materiewelle immer größer als die Lichtgeschwindigkeit ist.¹⁴

Nach (12.2.11) ist die Phasengeschwindigkeit umgekehrt proportional zur Teilchengeschwindigkeit v und damit von der Wellenlänge $\lambda = h/mv_T$ abhängig. Es liegt also Dispersion vor.

Für die Gruppengeschwindigkeit v_{gr} , also die Fortpflanzungsgeschwindigkeit des dem Teilchen zugeordneten Wellenpakets, erhalten wir

$$v_{\text{gr}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}. \quad (12.2.12)$$

Für ein nichtrelativistisches Teilchen ($v_T \ll c$) gilt $p = m_0 v_T$ und $E = p^2/2m_0 = m_0 v_T^2/2$ und wir erhalten

$$v_{\text{gr}} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m_0} = \frac{m_0 v_T}{m_0} = v_T. \quad (12.2.13)$$

¹⁴Zur Herleitung der Beziehung zwischen Phasen- und Teilchengeschwindigkeit gilt:

(a) nicht-relativistische Teilchen:

Es gilt

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{E(k)}{\hbar k} = \frac{E(p)}{p} = \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{\hbar k} = \frac{\hbar k}{2m}.$$

Für die Teilchen (bzw. Gruppengeschwindigkeit) gilt

$$v_{\text{gr}} = \frac{\partial E(p)}{\partial p} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} = \frac{p}{m} = v_T = \frac{\hbar k}{m} = 2v_{\text{ph}}.$$

(b) relativistische Teilchen:

Es muss die volle Dispersionsrelation aus der Dirac-Gleichung benutzt werden. Es gilt

$$E(p) = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} = \sqrt{m_0^2 c^4 + \frac{m_0^2 v^2}{\beta^2} c^2} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{v^2/c^2}{\beta^2}} = \frac{m_0 c^2}{\beta} = mc^2$$

mit $\beta^2 = 1 - \frac{v^2}{c^2}$. Für die Phasengeschwindigkeit erhält man damit

$$v_{\text{ph}} = \frac{E(p)}{p} = \frac{mc^2}{mv_T} = \frac{c^2}{v_T}.$$

Andererseits lässt sich zeigen, dass

$$v_{\text{gr}} = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{p}{m} = v_T.$$

Das heißt, es gilt wiederum

$$v_{\text{ph}} v_{\text{gr}} = c^2.$$

Das heißt, die Teilchengeschwindigkeit ist gleich der Gruppengeschwindigkeit des dem Teilchen zugeordneten Wellenpaket.

Aus den Ausdrücken für die Phasen- und Gruppengeschwindigkeit folgt damit ganz allgemein die Beziehung

$$v_{\text{gr}} v_{\text{ph}} = v_T \frac{c^2}{v_T} = c^2 . \quad (12.2.14)$$

Nur für masselose Teilchen, wie z.B. Photonen, ist $v_{\text{gr}} = v_{\text{ph}} = c$. Für Materiewellen sind dagegen Phasen- und Gruppengeschwindigkeit unterschiedlich.

Zum Vergleich sind in Tabelle 12.2 die Teilchen- und Welleneigenschaften von Teilchen mit endlicher Ruhemasse m_0 und von Photonen zusammengestellt.

| | Eigenschaft | Teilchen: $m_0 \neq 0$ | Photon |
|--------------------------|------------------------|---|--------------------------|
| Teilchen- Eigenschaft | Ruhemasse | m_0 | 0 |
| | Geschwindigkeit | v_T | c |
| | Masse | m | $m = E/c^2$ |
| | Impuls | $p = mv_T$ | $p = E/c$ |
| | Energie | $E = mc^2 = \sqrt{p^2 c^2 + (m_0 c^2)^2}$ | $E = mc^2$ |
| | Drehimpuls | $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ | $\mathbf{s} = \pm \hbar$ |
| Wellen- Eigenschaften | Frequenz | $\omega = E/\hbar = mc^2/\hbar$ | $\omega = E/\hbar$ |
| | Wellenlänge | $\lambda = h/p$ | $\lambda = hc/E = c/\nu$ |
| | Phasengeschwindigkeit | $v_{\text{ph}} = c^2/v_T$ | $v_{\text{ph}} = c$ |
| | Gruppengeschwindigkeit | $v_{\text{gr}} = v_T$ | $v_{\text{gr}} = c$ |
| | Energie | $E = \hbar\omega$ | $E = \hbar\omega$ |

Tabelle 12.2: Vergleich der Teilchen- und Welleneigenschaften von Teilchen mit endlicher Ruhemasse und von Photonen.

12.2.4 Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion

Wir wollen in diesem Abschnitt kurz diskutieren, wie die Wellen- und Teilcheneigenschaften für Objekte mit endlicher Ruhemasse miteinander vereinbart werden können. Dabei wollen wir die orts- und zeitabhängigen Eigenschaften von Teilchen mittels einer Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ beschreiben, die die Form eines Wellenpakets hat. Wir wollen jetzt vor allem die physikalische Interpretation dieser Wellenfunktion diskutieren.

Der Welle-Teilchen-Dualismus ist uns schon bei der Diskussion der Eigenschaften von Photonen begegnet. Wir wiederholen hier kurz die für Photonen gewonnene Interpretation und übertragen diese auf Materiewellen.

1. Photonen:

Für Photonen im Vakuum gibt der Poyntingvektor $S = \epsilon_0 c E^2$ die Energiestromdichte im Wellenbild an. Im Teilchenbild gilt $S = \langle N \rangle \hbar \omega$. Dabei ist $\langle N \rangle$ die Zahl der Photonen pro Flächen- und Zeiteinheit (Photonen-Stromdichte) und $\hbar \omega$ die Energie der Photonen.

Die Wahrscheinlichkeit, N Photonen pro Flächen- und Zeiteinheit nachzuweisen, ist deshalb proportional zum Quadrat der elektrischen Feldstärke. Beim Doppelspaltexperiment entsteht die auf dem Schirm beobachtete Interferenzstruktur aus der Überlagerung der elektrischen Feldstärken \mathbf{E}_1 und \mathbf{E}_2 der von beiden Spalten auslaufenden Wellen. Die Wahrscheinlichkeit P , ein Photon an der Stelle y auf dem Schirm hinter den Spalten zu finden, ist somit

$$P \propto |\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2|^2 . \quad (12.2.15)$$

Wir haben gesehen, dass einzelne Photonen ausreichen, um die Interferenz zu erzeugen.

2. Materiewellen:

Wir können die für Photonen benutzte Interpretation auf Materiewellen übertragen. Dabei wird das elektrische Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ durch die im Allgemeinen komplexe Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ersetzt. Für ein Teilchen mit endlicher Ruhemasse ist $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Volumenelement $d^3\mathbf{r} = dx dy dz$ an der Stelle \mathbf{r} zu finden. Aus dieser Bedingung folgt natürlich eine Normierungsbedingung für die Wellenfunktion:

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1 . \quad (12.2.16)$$

Wie im Fall der Photonen ist diese Interpretation allerdings nur dann sinnvoll, wenn wir viele Teilchen experimentell untersuchen. In diesem Fall können wir den gemessenen Ensemble-Mittelwert mit der so definierten Wahrscheinlichkeit, dem Quadrat der Wellenfunktion, identifizieren.

12.2.5 Die Unschärferelation bei Materiewellen

Wir haben in den vorangegangenen Kapitel gezeigt, dass sowohl die elektromagnetische Strahlung als auch die Materie Eigenschaften zeigen, die teils im klassischen Wellenbild, teils im klassischen Teilchenbild gedeutet werden können. Das heißt, sowohl der Wellenbegriff als auch der Teilchenbegriff können nicht eindeutig der Strahlung oder der Materie zugeordnet werden. Je nach Situation muss der eine oder der andere Begriff herangezogen werden. Dies wirft die Frage auf, wo denn die Grenzen der Anwendbarkeit der klassischen Begriffe Welle und Teilchen liegen. Eine Teilantwort darauf gibt die *Heisenberg'sche Unschärferelation*, die wir bereits in Kapitel 9 eingeführt haben und in Abschnitt 10.4.3 im Zusammenhang mit elektromagnetischer Strahlung diskutiert haben. Wir wollen jetzt hier die Unschärferelation auch im Zusammenhang mit Materiewellen diskutieren.

Unschärfe von Ort und Impuls

Wir haben zur Beschreibung von räumlich lokalisierten Teilchen Wellenpakete verwendet, die aus einer Überlagerung von ebenen Wellen mit einer kontinuierlichen Verteilung von Wellenlängen $\lambda = 2\pi/k$ mit einer Unschärfe $\Delta\lambda = 2\pi/\Delta k$ um den Mittelwert gebildet werden (vergleiche (12.2.6)):

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \Psi_0 \exp \left[ik \left(x - \frac{\omega}{k} t \right) \right] dk . \quad (12.2.17)$$

Mit

$$\begin{aligned} k &= k_0 + (k - k_0) = k_0 + \Delta k \\ \text{und} \quad \omega &= \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} (k - k_0) + \dots \end{aligned} \quad (12.2.18)$$

folgt

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \exp(ik_0 x - i\omega_0 t) 2 \frac{\sin[(\omega' t - x)\Delta k]}{\omega' t - x} . \quad (12.2.19)$$

Dabei wurde $\omega' = d\omega/dk$ und $\Delta k = k - k_0$ verwendet. Für feste Zeiten (z.B. $t = 0$) ist dies eine Funktion vom Typ

$$\Psi(x) \sim \frac{\sin(x\Delta k)}{x} . \quad (12.2.20)$$

Der Nullstellenabstand dieser Funktion ist durch die Beziehung

$$\Delta x \Delta k = 2\pi \quad (12.2.21)$$

gegeben. Mit $\Delta p = \hbar \Delta k$ ergibt sich für die Orts- und Impulsunschärfe

$$\Delta p_x \Delta x = h . \quad (12.2.22)$$

Diese Beziehung bedeutet, dass wir den Ort und den Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig mit einer beliebigen Genauigkeit messen können.

Wir wollen dazu ein Gedankenexperiment machen, bei dem wir versuchen, den Ort eines ruhenden Elektrons ($p = 0$) möglichst genau zu messen. Damit wir eine möglichst hohe Auflösung $\Delta x = \lambda / \sin \alpha$ erhalten, verwenden wir sehr kurzwelliges Licht (γ -Strahlung) mit einer Wellenlänge vergleichbar dem Durchmesser eines Elektrons. Führen wir eine solche Messung durch, so muss, damit wir das Elektron abbilden können, mindestens ein Photon an ihm gestreut werden und dadurch ins Beobachtungsobjektiv gelangen, mit dem es nachgewiesen wird. Bei diesem Streuprozess überträgt das Photon allerdings einen endlichen Impuls auf das Elektron. Auch wenn wir den genauen Impulsübertrag nicht wissen, so können wir doch die gleiche Argumentation wie bei der Diskussion zum Heisenberg'schen Gammastrahlenmikroskop (siehe Abschnitt 7.4 und Abb. 7.10) anwenden und argumentieren, dass die Impulsunschärfe des Photons, das vom Objektiv mit dem Öffnungswinkel α aufgefangen wird, $\Delta p_x \sim p \sin \alpha = \frac{h}{\lambda} \sin \alpha$ beträgt. Daraus ergibt sich die dann die Beziehung $\Delta p_x \Delta x = h$. Man kann hier also sagen, dass der Messvorgang die zu messende Größe derart stört, dass man keine Messung von Ort und Impuls mit beliebiger Genauigkeit durchführen kann.

Unschärfe von Energie und Zeit

In der Wellenfunktion für ebene Wellen ($\propto \exp[i(kx - \omega t)]$), aus denen wir unser Wellenpaket aufgebaut haben, treten der Ort x und die Zeit t symmetrisch auf. Wir können also Wellenpakete aufbauen, die eine maximale Amplitude zu einer Zeit t mit einer Unschärfe Δt aufweisen. An die Stelle der Beziehung $\Delta x \Delta k = 2\pi$ tritt dann die Relation $\Delta t \Delta \omega = 2\pi$ oder mit $E = \hbar \omega$

$$\Delta E \Delta t = h. \quad (12.2.23)$$

Dies bedeutet, dass man die Energie eines Wellenpakets nur mit einer Unschärfe ΔE ermitteln kann und dafür mindestens die Zeit Δt aufwenden muss.

Ein typisches Beispiel für die Energie-Zeit Unschärfe ist die Zerfallsbreite der Strahlung, die beim Übergang eines Atoms vom angeregten in den Grundzustand emittiert wird. Die angeregten Niveaus eines Atoms gehen spontan nach einer mittleren Zeit τ in den Grundzustand über. Daher ist die Emissionszeit der Photonen im Ensemblemittel nur mit der Unsicherheit τ messbar. Damit ist dann eine Energieunschärfe Γ bzw. Frequenzunschärfe $\Delta \omega$ der emittierten Strahlung mit

$$\Gamma \tau = \hbar \quad \text{oder} \quad \Delta \omega = \frac{1}{\tau} \quad (12.2.24)$$

verbunden. Die Tatsache, dass in der Unschärferelation jetzt \hbar anstelle von h auftaucht, liegt an der speziellen Definition der mittleren Zerfallszeit τ .

Ein weiteres Beispiel betrifft die Wechselwirkungszeiten von Neutronen mit Magnetfeldern. Die Wechselwirkungsenergie des magnetischen Moments μ eines Neutrons mit einem homogenen Magnetfeld ist $E = -\mu \cdot \mathbf{B}$. Wenn wir diese Energie messen wollen, so gelingt uns dies nur mit einer endlichen Unschärfe ΔE , die umgekehrt proportional zur Messzeit Δt ist. Um also die Wechselwirkungsenergie möglichst genau zu messen, müssen sich die Neutronen möglichst lange im Magnetfeld aufhalten. Dies realisiert man mit sehr langsamen, so genannten *ultrakalten Neutronen* ($v \propto 1/\sqrt{T}$).

Vertiefungsthema:

Die Larmor-Präzession eines magnetischen Dipols

Als weiteres Beispiel für die Bedeutung der Unschärferelation wollen wir hier kurz zeigen, dass man in einem mikroskopischen System immer nur den Betrag des Drehimpulsvektors und eine seiner Komponenten in einem Experiment gleichzeitig messen kann.

Aus unserer Diskussion zum Stern-Gerlach-Experiment in Abschnitt 12.1.1 wissen wir, dass das Elektron einen Eigendrehimpuls $s = 1/2$ besitzt mit zwei möglichen Einstellungen $s_x = \pm \frac{1}{2} \hbar$ bezüglich eines äußeren Magnetfeldes \mathbf{B} . Mit dem Eigendrehimpuls ist das magnetische Moment

$$\mu = -g_s \mu_B \frac{\mathbf{s}}{\hbar} \quad \mu_z = \pm g_s \mu_B / 2 \simeq \pm \mu_B \quad (12.2.25)$$

verknüpft. Ein in z -Richtung angelegtes Magnetfeld $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ verursacht ein Drehmoment

$$\mathbf{m} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} = \frac{d\mathbf{s}}{dt} \quad (12.2.26)$$

auf den Spin des Elektrons. Dieses Drehmoment resultiert in einer Präzession des Drehimpulsvektors um die z -Achse (siehe hierzu Abb. 12.11). Die Energie des magnetischen Moments im äußeren Feld ist $E_{\text{pot}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ und der Energieunterschied zwischen den beiden Einstellmöglichkeiten beträgt $\Delta E_{\text{pot}} = g_s \mu_B B_z$.

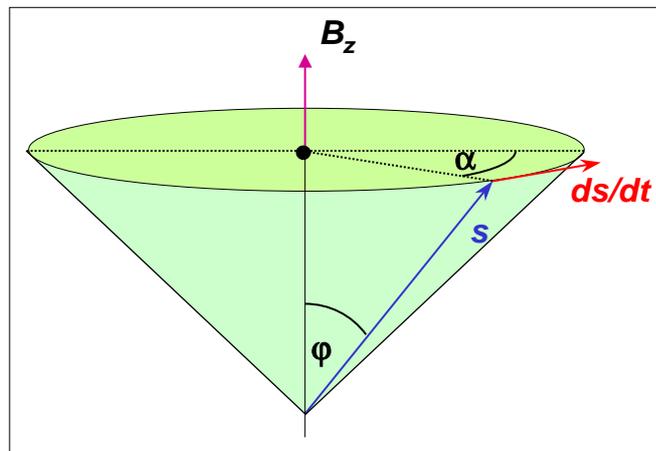


Abbildung 12.11: Zur Definition der Größen bei der Larmor-Präzession.

Mit den in Abb. 12.11 gegebenen Bezeichnungen können wir (12.2.26) wie folgt ausdrücken:

$$g_s \mu_B \frac{|\mathbf{s}|}{\hbar} |\mathbf{B}| \sin \varphi = \left| \frac{d\mathbf{s}}{dt} \right|. \quad (12.2.27)$$

Mit $r/|\mathbf{s}| = \sin \varphi$ und der Larmor-Präzessionsfrequenz $\omega_L = d\alpha/dt = |d\mathbf{s}/dt|/r$ erhält man

$$\omega_L = \frac{|d\mathbf{s}/dt|}{|\mathbf{s}| \sin \varphi} = g_s \mu_B \frac{1}{\hbar} |\mathbf{B}| \quad (12.2.28)$$

und damit ergibt sich für die Larmor-Frequenz

$$\omega_L = g_s \mu_B B_z / \hbar = \Delta E_{\text{pot}} / \hbar \quad (12.2.29)$$

Um experimentell festzustellen, ob der Elektronenspin parallel oder antiparallel zur z -Richtung ausgerichtet ist, müssen wir eine Energiemessung mit einer Genauigkeit von ΔE_{pot} durchführen. Nach der Unschärferelation benötigen wir dazu mindestens die Zeit $\Delta t = \hbar / \Delta E_{\text{pot}}$. Mit (12.2.29) folgt dann

$$\Delta t \geq \frac{h}{\Delta E_{\text{pot}}} = \frac{h}{\hbar\omega_L} = \frac{1}{\nu_L} = T_L . \quad (12.2.30)$$

Wir sehen also, dass die minimale Messzeit genau einer Umlaufzeit des Drehimpulsvektors um die z -Achse, also einer Larmor-Periode, entspricht. Wenn wir also den Wert von s_x bestimmen wollen, geht uns dabei jegliche Information über s_x und s_y verloren.

Es sei hier noch darauf hingewiesen, dass man für makroskopische Systeme nicht mit der Genauigkeit h messen muss. Deshalb kann man für diese Systeme immer alle Drehimpulskomponenten gleichzeitig und genügend genau messen.

12.3 Die Schrödinger-Gleichung

In Kapitel 2 haben wir aus den Maxwell-Gleichungen eine Wellengleichung für elektromagnetische Wellen abgeleitet. Diese Wellengleichung stellt eine Bewegungsgleichung für das elektrische und magnetische Feld dar. In diesem Abschnitt wollen wir nun eine Bewegungsgleichung für Materiewellen diskutieren, die es uns erlauben wird, mikroskopische Systeme in einer nicht-relativistischen Näherung zu beschreiben. Diese Bewegungsgleichung wurde zuerst von **Erwin Schrödinger** im Jahr 1926 aufgestellt und wird deshalb *Schrödinger-Gleichung* genannt. Obwohl die von Schrödinger gefundene Wellengleichung für Materie genauso wie die *Newton'schen Bewegungsgleichungen* nicht wirklich ableitbar ist, wollen wir im Folgenden doch versuchen, sie mit Hilfe von experimentellen Tatsachen zu motivieren.

Mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung können wir die Materiewellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ für einige einfache Situationen berechnen. Das Absolutquadrat dieser Wellenfunktion wird uns dann die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Teilchen angeben. Die Beschreibung von klassischen Teilchen durch Materiewellen führt dazu, dass wir die klassische, deterministische Beschreibung der zeitlichen Entwicklung von Ort und Impuls eines Teilchens ersetzen müssen durch eine statistische Behandlung, bei der wir lediglich Wahrscheinlichkeiten für die Ergebnisse einer Messung dieser Größen angeben können. Es tritt dabei eine prinzipielle Unschärfe auf, die eine gleichzeitige scharfe Messung von Ort und Impuls verhindert. An die Stelle einer wohldefinierten Bahnkurve $\mathbf{r}(t)$, die wir aus der klassischen Mechanik kennen, tritt nun eine Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{r}, t)dV = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$, ein Teilchen zur Zeit t in einem Volumenelement dV an der Stelle \mathbf{r} zu finden.

12.3.1 Formulierung der Schrödinger-Gleichung

Für Teilchen mit wohldefiniertem Impuls kann es sich bei der entsprechenden Wellenfunktion nur um eine ebene Welle der Form

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) \quad (12.3.1)$$

handeln. Wir haben ferner gesehen, dass wir Wellenpakete, die räumlich lokalisierte Teilchen beschreiben, aus einer linearen Superposition von ebenen Wellen erhalten können.

Die Teilchen besitzen ferner die Energie E , die mit dem Impuls p über

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (12.3.2)$$

verbunden ist. Mit $E = \hbar\omega$ und $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ ergibt dies die Dispersionsrelation¹⁵

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (12.3.3)$$

Wir suchen eine Bewegungsgleichung für die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ mit den folgenden Eigenschaften:

¹⁵Im allgemeinen Fall, dass zusätzlich eine potentielle Energie $V(r)$ auftritt, ist die Dispersionsrelation auf der rechten Seite durch $V(r)$ zu ergänzen.

- Sie muss eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit sein, damit $\Psi(\mathbf{r}, t)$ durch die Anfangsverteilung $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ bestimmt ist.
- Sie muss linear in $\Psi(\mathbf{r}, t)$ sein, um die Superposition von mehreren Lösungen zu ermöglichen.
- Sie muss homogen sein, damit die resultierenden Wellenfunktionen für alle Zeiten normierbar sind.
- Harmonische Wellen der Form $\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ sollten Lösungen sein, damit man durch die Superposition dieser Lösungen Wellenpakete konstruieren kann.
- Die Dispersionsrelation sollte erfüllt sein.

Wir betrachten zunächst ein freies Teilchen. Für das freie Teilchen können wir

$$\mathbf{p} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hbar \mathbf{k} \Psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (12.3.4)$$

schreiben. Es liegt daher nahe, den Impuls \mathbf{p} mit dem Operator $-i\hbar \nabla$ zu identifizieren:

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla . \quad (12.3.5)$$

Im quantenmechanischen Bild können wir jeder klassischen Messgröße einen Operator zuordnen, wobei sich die physikalischen Messwerte als Erwartungswert dieses Operators ergeben (eine genaue Diskussion dieses Zusammenhang wird im Rahmen der theoretischen Quantenmechanik gegeben). Für den Impulsoperator in der Ortsdarstellung müssen die ebenen Wellen die Eigenfunktionen darstellen. Genau dies kommt in (12.3.5) zum Ausdruck:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{p} \Psi_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) = -i\hbar \nabla \Psi_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) \\ &= \hbar \mathbf{k} \Psi_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) = \hbar \mathbf{k} \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (12.3.6)$$

Wir können nun diese Beziehung in die Impuls-Energie-Beziehung (12.3.2) eines freien Teilchens einsetzen und erhalten dadurch

$$E \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{p^2}{2m} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi(\mathbf{r}, t) . \quad (12.3.7)$$

Wir müssen jetzt noch eine Annahme über die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion machen. Wir sind dabei dem de Broglie's Symmetriegedanken und haben die gleiche Zeitabhängigkeit

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \propto \exp(-i\omega t) \quad (12.3.8)$$

gewählt wie für Photonen. Hierbei ist die Frequenz durch

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (12.3.9)$$

gegeben, wodurch wir

$$E \Psi(\mathbf{r}, t) = \hbar \omega \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (12.3.10)$$

erhalten. Aus (12.3.10) und (12.3.7) erhalten wir dann

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) . \quad (12.3.11)$$

Falls wir es nicht mit einem freien Teilchen zu tun haben, sondern sich dieses in einem Potenzial $V(\mathbf{r}, t)$ befindet, so ist seine Energie durch die potentielle Energie zu ergänzen. Schrödinger postulierte nun, dass der Zusammenhang (12.3.11) auch bei zeitabhängiger potentieller Energie gelten soll:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) . \quad (12.3.12)$$

Diese Gleichung wurde erstmals 1926 von **E. Schrödinger** angegeben und wird nach ihm *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung* genannt. Sie ist eine Differentialgleichung für die Wellenfunktion oder Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ und spiegelt die Eigenschaften des betrachteten Teilchens oder Systems wider, wobei das Potenzial Randbedingungen erzwingt, denen die Lösungsfunktion gehorchen muss. Die Gültigkeit dieser Gleichung wurde mittlerweile durch zahlreiche Experimente bestätigt.

Ist das Potenzial $V(\mathbf{r})$ nicht explizit von der Zeit abhängig, so faktorisiert die Lösungsfunktion in einen orts- und zeitabhängigen Anteil, d.h. sie lässt als Produkt

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) \cdot \phi(t) . \quad (12.3.13)$$

schreiben. Um dies explizit zu zeigen, setzen wir $\Psi(\mathbf{r}) \cdot \phi(t)$ in die Schrödinger-Gleichung ein. Wir erhalten dann

$$\Psi(\mathbf{r}) \cdot \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(t) \right) = \phi(t) \cdot \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) \right] . \quad (12.3.14)$$

Erwin Schrödinger (1887 -1961) – Nobelpreis für Physik 1933

Erwin Schrödinger wurde am 12. August 1887 in Wien geboren. Nach der Schulausbildung am k. u. k. Akademischen Gymnasium in Wien studierte Schrödinger Mathematik und Physik in Wien. 1910 wurde er mit einer Arbeit "über die Leitung der Elektrizität auf der Oberfläche von Isolatoren an feuchter Luft" promoviert und begann als Assistent am 2. Physikalischen Institut der Universität Wien. Hier habilitierte er sich im Jahre 1914. Anschließend nahm er als Offizier der Festungsartillerie am ersten Weltkrieg teil. Nach mehreren Aufenthalten an verschiedenen deutschsprachigen Universitäten (Wien und Jena, Dozent; Stuttgart, Extraordinarius; Breslau, Ordinarius) ging er 1921 an die Universität Zürich und übernahm nach Albert Einstein und Max von Laue den Lehrstuhl für Physik. Am 1. Oktober 1927 folgte er einem Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Physik der Universität Berlin und wurde somit Nachfolger von Max Planck. Die Machtergreifung Hitlers im Jahre 1933 war für Deutschland nicht nur in politischer, sondern auch in wissenschaftlicher Hinsicht ein Wendepunkt. In den ersten Wochen des Naziregimes wurden tausende Gelehrte infolge politischer und rassistischer Verfolgung aus ihren Ämtern entlassen. Die Zerschlagung Berlins als physikalische Hochburg einerseits, eine zutiefst bürgerlich-humanistische und antifaschistische Grundhaltung Schrödingers andererseits, veranlassten ihn im Oktober zur Emigration nach Oxford. Kurz darauf erhielt er die Nachricht, dass ihm zusammen mit dem Engländer Paul Dirac der Nobelpreis für Physik des Jahres 1933 (in Anerkennung der Entdeckung und Anwendung neuer fruchtbarer Formulierungen der Atomtheorie) zugesprochen worden war. Nach drei Jahren des Exils zog es ihn 1936 an die Universität Graz. Nach Anschluss Österreichs an Hitlerdeutschland im Jahre 1938 wurde Schrödinger aber frist- und pensionslos aus dem Grazer Ordinariat entlassen, wonach er fluchtartig das Land verließ. Nach Aufhalten in Oxford und Belgien ging er im Oktober 1939 an das Institute for Advanced Studies in Dublin, wo er bis 1956 tätig war. Im April 1956 kehrte er nach Wien zurück, trat wenige Tage nach seiner Ankunft ein "ad personam Ordinariat für Theoretische Physik" an. 1957 erfolgte Schrödingers Emeritierung. Er schied aber erst nach einem so genannten Ehrenjahr 1958 aus dem Dienst aus. Seine letzten Lebensjahre verlebte er relativ zurückgezogen im Alpendorf Alpbach, in Tirol.

Erwin Schrödinger verstarb am 04. Januar 1961 in Wien.



Die Ausdrücke in den Klammern hängen jeweils nur vom Ort bzw. der Zeit ab. Wir dürfen deshalb schreiben

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(t) = h(\mathbf{r}) \phi(t) \quad (12.3.15)$$

und
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = g(t) \Psi(\mathbf{r}) , \quad (12.3.16)$$

wobei die Funktionen $g(t)$ und $h(\mathbf{r})$ noch zu bestimmen sind. Einsetzen dieser Beziehungen in (12.3.14) ergibt

$$\Psi(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi(t) = \phi(t) g(t) \Psi(\mathbf{r}) , \quad (12.3.17)$$

was schließlich zu

$$h(\mathbf{r}) = g(t) \quad (12.3.18)$$

für alle (\mathbf{r}, t) führt. Es kann sich also bei den gesuchten Funktionen nur um eine Konstante handeln, die wir mit E bezeichnen wollen, da sie die Dimension einer Energie hat. Damit können wir (12.3.15) und (12.3.16) schreiben als:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(t) = E \phi(t) \quad (12.3.19)$$

$$\text{und} \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) , \quad (12.3.20)$$

Gleichung (12.3.19) hat die einfache Lösung

$$\phi(t) = \phi_0 \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) , \quad (12.3.21)$$

d.h. wir erhalten eine harmonische Zeitabhängigkeit. Damit ergibt sich für die Wellenfunktion im stationären Fall eines nur vom Ort abhängigen Potentials

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) . \quad (12.3.22)$$

Der Vergleich mit einer ebenen Welle zeigt, dass die Konstante E identisch mit der Gesamtenergie des untersuchten Systems ist. Der Ausdruck

$$\mathcal{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \quad (12.3.23)$$

ist das quantenmechanische Analogon zur klassischen Hamiltonfunktion

$$H \equiv \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) . \quad (12.3.24)$$

Wir bezeichnen diesen Ausdruck daher als *Hamilton Operator* \mathcal{H} . Gleichung (12.3.20) besagt, dass es sich bei der Funktion $\Psi(\mathbf{r})$ um eine Eigenfunktion von \mathcal{H} mit dem Eigenwert E handelt:

$$\boxed{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) .} \quad (12.3.25)$$

Diese Gleichung bezeichnet man als *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung*. Sie stellt ein Eigenwertproblem dar. Die Größe E nimmt ein Spektrum von Werten E_n an, die die Eigenwerte zum Operator \mathcal{H} für die Eigenfunktionen Ψ_n sind. Die Eigenwerte E_n sind die möglichen Energieeigenwerte des Systems und sind nach Voraussetzung zeitlich konstant. Die Zahlenwerte von E_n müssen aus der Lösung der zeitunabhängigen Eigenwertgleichung (12.3.25) ermittelt werden.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) = \exp\left(\frac{E}{\hbar}t\right) \Psi^*(\mathbf{r}) \cdot \exp\left(-\frac{E}{\hbar}t\right) \Psi(\mathbf{r}) = \Psi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \quad (12.3.26)$$

ist unabhängig von der Zeit. Aus diesem Grund nennen wir die Zustände, die durch die Eigenwerte E_n und die Eigenfunktionen Ψ_n beschrieben werden, *stationäre Zustände* des Systems. Das Konzept der stationären Zustände basiert auf der Annahme, dass der Hamilton-Operator nicht explizit von der Zeit abhängt.

Wir möchten hier noch einmal daran erinnern, dass die Energie eines Systems aus Symmetriegründen eine Erhaltungsgröße darstellen muss, falls das System homogen in der Zeit ist, d.h. seine mathematische Beschreibung nicht explizit von der Zeit abhängt. Dies ist für ein nur vom Ort abhängiges Potential $V(\mathbf{r})$ der Fall. Im allgemeinen Fall wird sich das System allerdings zeitlich entwickeln, d.h. es wird sich nicht in einem Eigenzustand des Hamilton-Operators befinden. Die Energie E ist dann über den Erwartungswert des Hamilton-Operators $\langle \mathcal{H} \rangle$ zu ermitteln.

Bevor wir Lösungen der Schrödinger-Gleichung für die verschiedenen physikalischen Situationen suchen, wollen wir noch einige zusammenfassende Bemerkungen zu der Schrödinger-Gleichung selbst machen.

1. Die Schrödinger-Gleichung ist eine Differenzialgleichung erster Ordnung in der Zeit und zweiter Ordnung im Ort. Ort und Zeit werden deshalb nicht gleichwertig behandelt. Sie kann daher nicht relativistisch invariant sein. Dies verwundert uns nicht, basierte doch unsere Motivation der Schrödinger-Gleichung auf der nicht-relativistischen Energie-Impuls Beziehung $E = \vec{p}^2/2m$. Relativistische Verallgemeinerungen der Schrödinger-Gleichung wurden relativ früh vorgeschlagen. Dabei boten sich zwei Wege an. Es galt entweder eine Gleichung zu finden, die nur zweite Ableitungen enthält (Klein-Gordon-Gleichung), oder aber eine Gleichung die sich auch beim Ort mit den ersten Ableitungen begnügt (Dirac-Gleichung). Beide Wege haben physikalisch ihre Berechtigung und führen auf Wellengleichungen für Bosonen und Fermionen. Diese Gleichungen, die übrigens automatisch die Antiteilchen sowie den Spin implizieren, sollen hier nicht diskutiert werden.
2. Die Tatsache, dass die Schrödinger-Gleichung erster Ordnung in der Zeit ist, hat den Vorteil, dass als Anfangsbedingung die Kenntnis von $\Psi(\mathbf{r}, t = t_0)$ ausreicht.¹⁶ Die Newton'schen Gleichungen sind ja bekanntlich zweiter Ordnung in der Zeit und deshalb benötigen sie zu deren Lösung nicht nur die Orte sondern auch die Anfangsgeschwindigkeiten. Ähnliches gilt für die elektromagnetischen Wellen. Auch dort ist die Wellengleichung zweiter Ordnung in der Zeit. Als Anfangsbedingungen benötigen wir sowohl \mathbf{A} als auch $\dot{\mathbf{A}}$, d.h. das magnetische und das elektrische Feld zum Anfangszeitpunkt. Dies ist nicht verwunderlich, basiert doch die Wellengleichung auf den fundamentalen Maxwell-Gleichungen, die erster Ordnung in der Zeit sind, aber zwei Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} enthalten.

¹⁶Bitte beachten sie, dass dies im Unterschied zur klassischen Mechanik immer noch die Kenntnis überabzählbar vieler Funktionswerte $\Psi(\mathbf{r}, t = t_0)$ impliziert.

3. Die Wechselwirkung mit anderen Teilchen ist in der Schrödinger-Gleichung, wie sie hier dargestellt wurde, nicht enthalten, es sei denn, dass diese über ein Feld beschrieben werden kann. Dies ist natürlich nicht immer der Fall, weshalb wir eine erweiterte Theorie benötigen, sobald wir es mit komplizierteren Wechselwirkungsprozessen zu tun haben.
4. Die Schrödinger-Gleichung enthält die Masse als Parameter. Sie bezieht sich daher auf ein System, in dem die Teilchenzahl erhalten ist.
5. Die Schrödinger-Gleichung enthält explizit die Größe \hbar . Dies ist bei der Wellengleichung des elektromagnetischen Feldes nicht der Fall.
6. Die Schrödinger-Gleichung ist komplex und damit auch deren Lösungen. Zwar hat auch die Wellengleichung des elektromagnetischen Feldes komplexe Lösungen, wir können aber immer reelle physikalische Wellenfelder durch Linearkombinationen erhalten. Im Photonenbild impliziert dies die Kombination von Quanten mit entgegengesetzten Impulsen.

12.3.2 Vertiefungsthema:

Anmerkung zu quantenmechanischen Operatoren

Operatoren spielen in der Quantenmechanik eine zentrale Rolle:

1. Man geht davon aus, dass jeder physikalischen Observablen P ein Operator \mathcal{P} entspricht.
2. Die einzigen möglichen Werte, die bei einer Messung der physikalischen Größe auftreten können, sind die Eigenwerte der Gleichung

$$\mathcal{P}\Psi = P\Psi . \quad (12.3.27)$$

Die Schrödinger-Gleichung in der Form (12.3.25) ist ein spezieller Fall dieser Beziehung.

3. Bei wiederholter Messung der Größe P ist der Erwartungswert, das ist das arithmetische Mittel aller möglichen Messungen, gegeben durch

$$\langle P \rangle = \int \Psi^* \mathcal{P}\Psi d\mathbf{r} . \quad (12.3.28)$$

Nicht alle Arten von Operatoren sind möglich, physikalische Bedeutung haben nur so genannte *hermitesche Operatoren*, die durch die Bedingung

$$\int \Psi_l^* \mathcal{P}\Psi_m d\mathbf{r} = \int \Psi_m \mathcal{P}^* \Psi_l^* d\mathbf{r} \quad (12.3.29)$$

definiert sind. Man kann zeigen, dass alle hermiteschen Operatoren reelle Eigenwerte haben.

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, dass die Reihenfolge der Anwendung von Operatoren nicht beliebig ist, sie sind nicht immer vertauschbar. Das gilt z.B. für Ort und Impuls. Mit (12.3.5) folgt

$$[\mathcal{P}\mathcal{Q}] = \mathcal{P}\mathcal{Q} - \mathcal{Q}\mathcal{P} = i\hbar . \quad (12.3.30)$$

Hieraus kann man mit etwas mathematischem Aufwand die Heisenberg'sche Unschärferelation ableiten. Das heißt, die zu nichtvertauschbaren Operatoren gehörigen Observablen sind nicht gleichzeitig mit beliebiger Schärfe messbar.

12.3.3 Vertiefungsthema: Wahrscheinlichkeitsstrom

Wir wollen nun betrachten, wie sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf Grund der Schrödinger-Gleichung zeitlich entwickelt. Wir erinnern uns in diesem Zusammenhang an die Ableitung der Energiedichte für das elektromagnetische Wellenfeld. Die Energiedichte ist proportional zum Quadrat des elektrischen Feldes und kann damit, wie in Abschnitt 12.2.4 diskutiert wurde, mit einer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsfunktion $W(\mathbf{r}, t)$ der Photonen identifiziert werden. Für Materiewellen gilt die gleiche Überlegung, nur muss hier das elektrische Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ durch die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ersetzt werden.

Wir wollen nun einen Ausdruck für den Wahrscheinlichkeitsstrom ableiten. Dazu gehen wir wie folgt vor:

- Wir multiplizieren die Schrödinger-Gleichung von links mit $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$.
- Wir multiplizieren die konjugiert komplexe Gleichung von links mit $\Psi(\mathbf{r}, t)$.
- Wir subtrahieren die beiden so erhaltenen Gleichungen.

Auf diese Weise erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) + \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*) = 0 . \quad (12.3.31)$$

Diesen Ausdruck können wir zu

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) + \nabla \cdot \left[\frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) \right] = 0 \quad (12.3.32)$$

umformulieren. Diese Gleichung hat die Form einer Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 . \quad (12.3.33)$$

Die Größe

$$\rho \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi(\mathbf{r}, t)\Psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (12.3.34)$$

ist somit wie die Energie oder die Massendichte in der klassischen Kontinuumsmechanik eine Erhaltungsgröße. Diese Aussage ist konform mit unserer Interpretation von $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte.¹⁷ Für ein endliches Volumen gibt

$$\mathbf{J} = \left[\frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \right] \quad (12.3.35)$$

die Veränderung von $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ an, das heißt den Wahrscheinlichkeitsstrom durch die das Volumen einschließende Oberfläche.

¹⁷Es soll hier nicht verschwiegen werden, dass alternative Interpretationen der Schrödinger-Gleichung existieren. Die hier vorgestellte Interpretation geht in erster Linie auf Bohr zurück und wird als Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik bezeichnet. Sie hat sich historisch als die am besten akzeptierte Interpretation durchgesetzt. Insbesondere de Broglie arbeitete lange Zeit an einer alternativen Interpretation. Diese wurde von Bohm aufgegriffen und von Bell verteidigt. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind aber definitiv keine klassischen Massedichtewellen. D.h. es wäre mit den Experimenten nicht vereinbar, sich Teilchenwellen als klassisches Massefluidum vorzustellen.

12.4 Anwendungen der Schrödinger-Gleichung

Wir werden in diesem Abschnitt die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für einige einfache Potenzialformen untersuchen. Dabei sollen die wesentlichen Eigenschaften quantenmechanischer Zustände deutlich gemacht und gegen diejenigen klassischer Systeme abgegrenzt werden. Diese Grundzüge quantenmechanischer Zustände sind für die Diskussion der Kern-, Atom-, Molekül- und Festkörperphysik von zentraler Bedeutung.

Im Grunde unterscheidet sich die Aufgabe, die Schrödinger-Gleichung unter bestimmten Randbedingungen zu lösen, in nichts von den analogen Problemen, die wir im Rahmen der Optik bereits kennengelernt haben. Viele der in der Licht-Optik entwickelten Konzepte finden sich deshalb in der "Materie-Optik" wieder. Dies reicht von den ebenen Wellen zur Beschreibung ungestörter Teilchenausbreitung über Reflexions- und Transmissionserscheinungen, bis hin zur Interferenz und Beugung von Materiewellen. Wir wollen in diesem Abschnitt nur einige wenige Beispiele diskutieren. Eine ausführlichere Diskussion wird in Rahmen der theoretischen Quantenmechanik gegeben.

12.4.1 Der kräftefreie Massenpunkt

Ist das Potenzial $V(\mathbf{r}, t) = 0$, so ist $E = p^2/2m = h^2/2m\lambda^2 = \hbar^2 k^2/2m$. Setzt man dies in die Schrödinger-Gleichung ein, so erhält man

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + k^2 \Psi = 0. \quad (12.4.1)$$

Zur Trennung der Variablen setzt man Ψ als Produkt von drei Funktionen an

$$\Psi = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z). \quad (12.4.2)$$

Setzt man dies in (12.4.1) ein, so erhält man

$$\frac{1}{\Psi_1} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 + \frac{1}{\Psi_2} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial y^2} + k_2^2 + \frac{1}{\Psi_3} \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial z^2} + k_3^2 = 0 \quad (12.4.3)$$

mit

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2. \quad (12.4.4)$$

Damit ist das Problem auf die Lösung der eindimensionalen Gleichung

$$\frac{\partial^2 \Psi_1(x)}{\partial x^2} + k_1^2 \Psi_1(x) = 0 \quad (12.4.5)$$

zurückgeführt. Die Lösung dieser Gleichung sind ebene Wellen der Form

$$\Psi_{k_1}(x) = A_{\pm 1} \exp(\pm i k_1 x) . \quad (12.4.6)$$

Wichtig ist, dass alle k -Werte und damit alle Energien im ganzen Raum möglich sind, da es keine Randbedingungen durch ein Potenzial gibt. Die Lösungen nennt man deshalb auch *Kontinuumslösungen*. Dieses Ergebnis besagt, dass die stationären Lösungen der Gleichung diejenigen sind, bei denen das Teilchen mit gleicher Wahrscheinlichkeit an allen Orten aufgefunden werden kann. Dies macht aus Gründen der Symmetrie Sinn und erinnert an die ebenen Wellen der Optik.¹⁸

Die Normierungsbedingung

$$\int_V \rho \, d\mathbf{r} = \int \Psi_k^* \Psi_k \, d\mathbf{r} = A^* A V = 1 . \quad (12.4.7)$$

kann in diesem Fall allerdings nicht angewendet werden, da das Integral im Intervall $x = -\infty$ bis $x = \infty$ nicht konvergiert. Um den Wert für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = |A|^2$ abzuleiten, benutzen wir den Wahrscheinlichkeitsstrom¹⁹

$$\mathbf{J} = \left[\frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \right] = \frac{\rho}{m} \hbar \mathbf{k} = \rho \mathbf{v} . \quad (12.4.8)$$

Wir sehen, dass der Wahrscheinlichkeitsstrom durch die $\rho \mathbf{v}$, also die Wahrscheinlichkeitsdichte mal die Geschwindigkeit gegeben ist. Wir erhalten somit für die Normierungsbedingung $\rho = Jv = Jm/\hbar k$. Für den Experimentator bedeutet dieses Ergebnis, dass die ebene Materiewelle mit einem kontinuierlichen Teilchenstrom zu identifizieren ist.

Die ebenen Wellen, die wir als Lösungen für das freie Teilchen erhalten haben, sind keine Eigenfunktionen des Orts. Der Ort ist daher unbestimmt, was in der Tatsache zum Ausdruck kommt, dass der Impulsoperator p nicht mit dem Ortsoperator r vertauscht. Es gilt

¹⁸Wie bei den ebenen Wellen in der Optik handelt es sich bei den ebenen Materiewellen um idealisierte Lösungen, die experimentell nicht erzeugt werden können.

¹⁹Den Ausdruck für den Wahrscheinlichkeitsstrom können wir einfach ableiten, indem wir $\nabla = ik$ verwenden. Wir erhalten dann $\mathbf{J} = \left[\frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* ik \Psi - \Psi (-ik) \Psi^*) \right] = \frac{\hbar}{2mi} 2ik \rho = \frac{\hbar k}{m} \rho$.

$$\begin{aligned}
(\mathbf{p}_x \cdot \mathbf{x}) \Psi(\mathbf{r}, t) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x \Psi(\mathbf{r}, t)) \\
&= -i\hbar \Psi(\mathbf{r}, t) + x (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\mathbf{r}, t)) \\
&= (-i\hbar + \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}) \Psi(\mathbf{r}, t) .
\end{aligned} \tag{12.4.9}$$

Analoge Gleichungen erhalten wir für die anderen Komponenten, was wir in

$$[\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{p}_{\alpha'}] = (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{p}_{\alpha'}) - (\mathbf{p}_{\alpha'} \cdot \mathbf{r}_\alpha) = i\hbar \delta_{\alpha, \alpha'} \tag{12.4.10}$$

zusammenfassen können.

Wir wollen dieses Nichtvertauschen der Operatoren noch einmal aus der Sicht des Experimentators betrachten. Messen wir den Impuls des Systems, so zwingen wir das System in einen Eigenzustand von \mathbf{p} . Eine nachfolgende Ortsmessung wird mit gleicher Wahrscheinlichkeit einen beliebigen Wert für den Ort liefern. Vertauschen wir die Reihenfolge der Messungen, so befindet sich das Teilchen nach der Ortsmessung in einem Eigenzustand des Ortsoperators, d.h. $\Psi(\mathbf{r})$ entspricht einer Delta-Funktion

$$\Psi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) , \tag{12.4.11}$$

wobei \mathbf{r}_0 dem Messwert entspricht. Die Delta-Funktion in ebenen Wellen ausgedrückt, d.h. nach Eigenfunktionen des Impulsoperators zerlegt, enthält alle Impulse mit gleicher Wahrscheinlichkeit. Es gilt (vergleiche Anhang B.3)

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{1}{2\pi} \int \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)] d^3k . \tag{12.4.12}$$

Der Impuls ist daher nach der Ortsmessung völlig unbestimmt. Analog lässt sich zeigen, dass sich die Messungen von Größen, deren Operatoren vertauschen, nicht beeinflussen. So kann im Falle des freien Teilchens sowohl der Impuls als auch die Energie exakt angegeben werden, da \mathcal{H} mit \mathbf{p} vertauscht. Das gleiche ist für die Energie und den Ort nicht möglich.

12.4.2 Teilchen im eindimensionalen Potenzialtopf

Wir betrachten nun ein Teilchen in einem eindimensionalen Potenzialtopf der Breite a (siehe Abb. 12.12). Der Einfachheit nehmen wir an, dass die Höhe des Potenzialtopfes unendlich hoch sein soll, das heißt, es soll gelten

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x < 0, x > a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \tag{12.4.13}$$

Das Teilchen ist zwischen den Koordinaten $x = 0$ und $x = a$ im Gebiet II eingesperrt. Wir müssen deshalb aus der allgemeinen Lösung (12.4.6) diejenigen aussuchen, für die $\Psi_k(x)$ außerhalb des Potenzialtopfs (Gebiet I und III) verschwindet. Aus Gründen der Stetigkeit verlangen wir, dass die Lösung bereits an den Begrenzungen verschwindet. Wir machen den Ansatz

$$\Psi_k(x) = A_k \exp(ikx) + A_{-k} \exp(-ikx) . \quad (12.4.14)$$

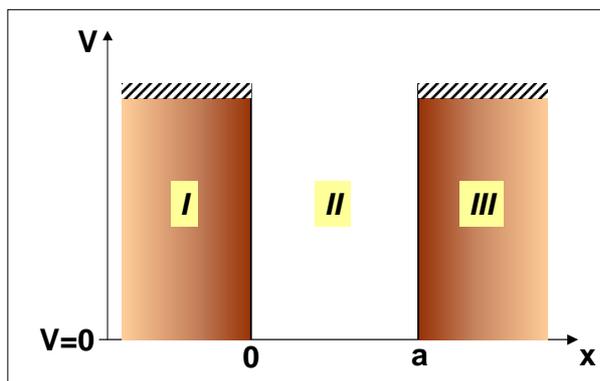


Abbildung 12.12: Eindimensionaler, unendlich hoher Potenzialtopf.

Die Randbedingungen lauten somit

$$\Psi_k(0) = A_k + A_{-k} = 0 \quad (12.4.15)$$

$$\Psi_k(a) = A_k \exp(ika) + A_{-k} \exp(-ika) . \quad (12.4.16)$$

Aus (12.4.15) folgt wegen $A_k = -A_{-k}$, dass Ψ nur durch Sinusfunktionen dargestellt werden kann.²⁰ Die zweite Bedingung (12.4.16) besagt, dass die Sinusfunktion auch bei $x = a$ verschwinden muss. Schließen wir die triviale Lösung $A_k = -A_{-k} = 0$ aus, so muss $\sin ka = 0$ sein, d.h. es muss gelten

$$ka = n\pi \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots . \quad (12.4.17)$$

Damit erhalten wir die Lösung

$$\Psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) . \quad (12.4.18)$$

Damit erhalten wir die Energiewerte

²⁰Es gilt $\sin x = \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix})$.

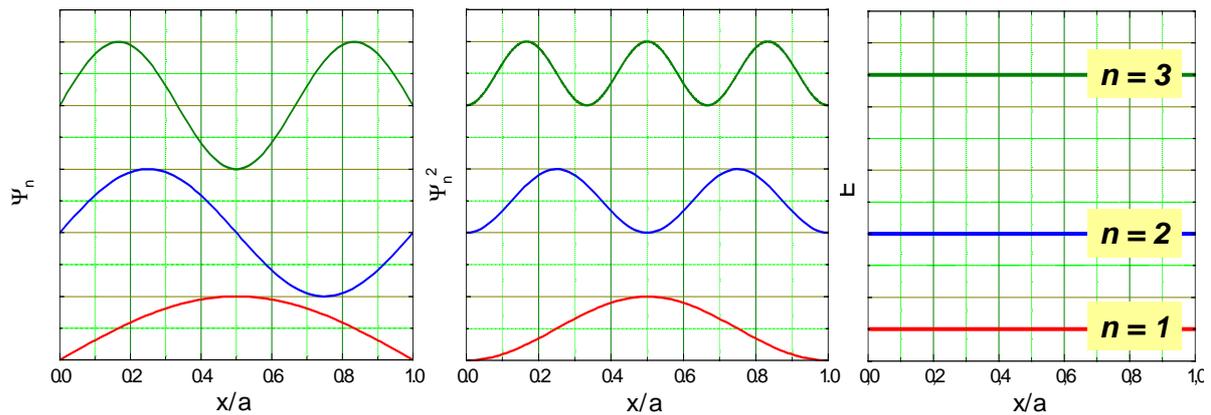


Abbildung 12.13: Eigenfunktionen, Wahrscheinlichkeitsdichten und Energieniveaus eines Teilchens in einem unendlich hohen Potenzialtopf.

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 = E_0 n^2 \quad (12.4.19)$$

mit $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$. Es sind also nur ganz bestimmte Energiewerte erlaubt, die Energie des Teilchens ist *quantisiert*. Die entsprechenden Zustände werden als *gebundene Zustände* bezeichnet, da das Teilchen in einem vorgegebenen Bereich der Ortskoordinate fixiert ist.

Aus der Normierungsbedingung ergibt sich die Amplitude $A = \sqrt{2/a}$ und somit erhalten wir die Lösungsfunktionen

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad (12.4.20)$$

Die Eigenfunktionen, die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten und die Energieeigenwerte sind für die Werte $n = 1, 2, 3$ der Quantenzahl n in Abb. 12.13 dargestellt. Die stationären Lösungen entsprechen stehenden Wellen. Die Frequenzen der Eigenschwingungen nehmen quadratisch mit n zu. Die Analogie mit den stehenden Wellen in einem abgeschlossenen System, z.B. einer schwingenden Saite, ist offensichtlich.

12.4.3 Teilchen im dreidimensionalen Potenzialtopf

Man kann leicht zeigen, dass man für einen dreidimensionalen, unendlich hohen Potenzialtopf mit den Abmessungen a_1, a_2, a_3 die Lösung

$$\Psi(x, y, z) = \tilde{A} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a_1} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{a_2} y\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi}{a_3} z\right) \quad (12.4.21)$$

mit

$$k^2 = \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right) \pi^2 \quad (12.4.22)$$

und

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right) \pi^2 \quad (12.4.23)$$

erhält.

Eine ganz wichtige Tatsache ist, dass der Grundzustand des Systems, d.h. der energetisch tiefste Zustand, nicht die Energie $E = 0$ besitzt, sondern den Wert $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ einnimmt. Der Grund dafür liegt in der Unschärferelation. Da der Ort des Teilchens nur innerhalb eines Intervalls der Abmessung $\Delta x = a$ festgelegt ist, ist die Impulsunschärfe gleich $\Delta p = h/a$. Wenn wir annehmen, dass der Impuls p selbst mindestens den Wert Δp haben muss, schätzen wir eine minimale Energie $E_0 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ ab, die mit dem Wert aus (12.4.19) bis auf einen Faktor 4 übereinstimmt.²¹

Ein wichtiges Beispiel für einen dreidimensionalen Potenzialtopf stellen Zentralpotenziale dar. Zentralpotenziale wurden bereits im Rahmen der klassischen Mechanik z.B. bei der Diskussion der Planetenbewegung behandelt. Zentralpotenziale spielen aber auch in der Atomphysik (z.B. elektrostatisches Kernpotenzial), der Kern- und Teilchenphysik (z.B. Beschreibung der starken Kraft) und der Festkörperphysik (z.B. Quantendots) eine bedeutende Rolle. In der Molekülphysik (z.B. Beschreibung der chemischen Bindung) spielt ferner das harmonische Oszillatorpotenzial eine große Rolle bei der Beschreibung von Schwingungen von Atomen um ihre Gleichgewichtslage.

Da Lösungen der Schrödinger-Gleichung für diese Potenziale ausführlich im Rahmen der Kern- und Teilchenphysik, der Festkörperphysik und der theoretischen Quantenmechanik behandelt werden, wollen wir hier auf eine Diskussion verzichten.

Ein Beispiel für eine stationäre Elektronenwelle in einem zweidimensionalen Elektronengassystem auf der Cu(111)-Oberfläche ist in Abb. 12.14 gezeigt. Das zweidimensionale Elektronengas wird durch eine ringförmige Barriere aus Atomen, die mit einem Rastertunnelmikroskop auf der Oberfläche positioniert wurden, eingeschlossen. Man erkennt deutlich das ringförmige Interferenzmuster innerhalb der Barriere.

12.4.4 Vertiefungsthema: Der harmonische Oszillator

Ein wichtiges Beispiel für ein Teilchen im Potenzialtopf, das in vielen Bereichen der Physik (z.B. in der Festkörperphysik) eine wichtige Rolle spielt, ist der *harmonische Oszillator*. Unter einem harmonischen Oszillator versteht man ein Teilchen in einem Parabelpotenzial mit der potentiellen Energie

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} D x^2$$

²¹Es sei hier nochmals darauf hingewiesen, dass der genaue Zahlenwert der unteren Grenze für das Produkt $\Delta x \Delta p$ von der Definition der Unschärfen Δx und Δp abhängt, vergleiche Abschnitt 10.4.3.

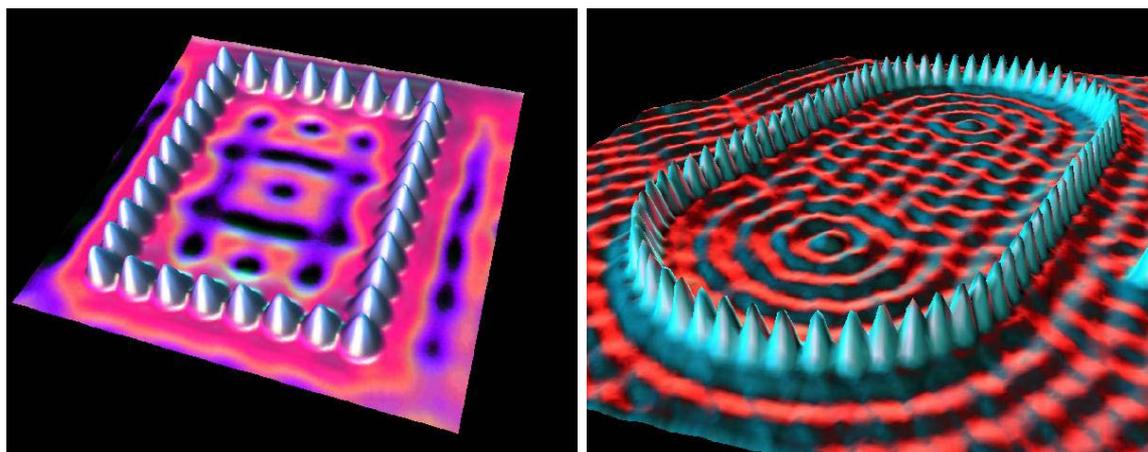


Abbildung 12.14: Tunnelmikroskopische Aufnahme einer Cu(111)-Oberfläche. Auf die Oberfläche wurde eine rechteckförmige (links) und eine stadionförmige Barriere aus Fe-Atomen aufgebracht. Bei dem Wellenmuster handelt es sich um eine stehende Elektronenwelle innerhalb der Barriere. Auch außerhalb der Barriere kommt es durch Überlagerung der gegen die Barriere einlaufenden und der an der Barriere reflektierten Wellen zu stehenden Wellenmustern (Quelle: IBM Research Division, Almaden, USA).

und der rücktreibenden Kraft

$$\mathbf{F} = -\nabla E_{\text{pot}} = -Dx \quad .$$

Klassisch wird das Teilchen wie ein Massenpunkt m behandelt, der an einer Feder mit der Federkonstante D und der resultierenden Rückstellkraft $F = -Dx$ hängt. Der Massenpunkt kann dann harmonische Schwingungen um seine Ruhelage mit der Frequenz

$$\omega = \sqrt{D/m} \quad (12.4.24)$$

ausführen. Für die quantenmechanische Behandlung müssen wir die eindimensionale, stationäre Schrödinger-Gleichung (12.3.25) lösen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}Dx^2\Psi = E\Psi \quad . \quad (12.4.25)$$

Mit (12.4.24) erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\Psi = E\Psi \quad , \quad (12.4.26)$$

was wir mit der Variablentransformation $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$ und der Abkürzung $F = 2E/\hbar\omega$ zu

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (F - \xi^2)\Psi = 0 \quad (12.4.27)$$

umformen können. Für $F = 1$ lautet die Lösung dieser Differentialgleichung

$$\Psi_0(\xi) = A e^{-\xi^2/2},$$

was wir durch Einsetzen in (12.4.27) leicht verifizieren können. Wir machen deshalb den allgemeinen Lösungsansatz

$$\Psi(\xi) = H(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (12.4.28)$$

Setzen wir diesen Ansatz in (12.4.27) ein, erhalten wir die folgende Differentialgleichung für $H(\xi)$:

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (F - 1) H = 0. \quad (12.4.29)$$

Diese Gleichung stellt eine *Hermitesche Differentialgleichung* dar, deren Lösungsfunktionen die *Hermiteschen Polynome* $H_n(\xi)$ vom Grad n sind.²² Sie werden durch die Bestimmungsgleichung

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (12.4.30)$$

mit $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ und $F - 1 = 2n$ definiert, wie man durch Einsetzen in (12.4.29) nachvollziehen kann. In Tabelle 12.3 sind die Hermiteschen Polynome bis zum 3. Grad aufgelistet. Die Normierungskonstanten C_i sind dabei so zu wählen, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

gilt.

Die Hermiteschen Polynome lassen sich durch eine Potenzreihe

$$H_n(\xi) = \sum_{i=0}^n h_i \xi^i \quad (12.4.31)$$

darstellen. Die Reihe muss endlich sein, da sonst $H_n(\xi)$ für $\xi > 1$ unendlich würde und dann die allgemeine Lösungsfunktion

$$\Psi(x) = \tilde{H}(x) \exp\left(-\frac{mE}{2\hbar^2} x^2\right)$$

nicht mehr für alle x normierbar wäre. Setzen wir die Potenzreihe (12.4.31) in die Differentialgleichung (12.4.29) ein, so erhalten wir durch einen Vergleich der Koeffizienten gleicher Potenzen ξ^i die Rekursionsformel

²²Die Hermiteschen Polynome können in fast allen Lehrbüchern über Differentialgleichungen gefunden werden.

| n | E_n | $\Psi_n(\xi)$ | C_i |
|-----|---------------------------|--|---|
| 0 | $\frac{1}{2}\hbar\omega$ | $C_0 e^{-\xi^2/2}$ | $\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$ |
| 1 | $\frac{3}{2}\hbar\omega$ | $C_1 2\xi e^{-\xi^2/2}$ | $\left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$ |
| 2 | $\frac{5}{2}\hbar\omega$ | $C_2 (4\xi^2 - 2) e^{-\xi^2/2}$ | $\left(\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$ |
| 3 | $\frac{7}{2}\hbar\omega$ | $C_3 (8\xi^3 - 12\xi) e^{-\xi^2/2}$ | $\left(\frac{1}{48\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$ |
| 4 | $\frac{9}{2}\hbar\omega$ | $C_4 (16\xi^4 - 48\xi^2 + 12) e^{-\xi^2/2}$ | $\left(\frac{1}{384\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$ |
| 5 | $\frac{11}{2}\hbar\omega$ | $C_5 (32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi) e^{-\xi^2/2}$ | $\left(\frac{1}{3840\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$ |

Tabelle 12.3: Die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators.

$$(i+2)(i+1)h_{i+2} = [2i - (F-1)]h_i . \quad (12.4.32)$$

Falls ξ^n die höchste Potenz in (12.4.31) ist, so muss $h_{n+2} = 0$ sein. Das heißt, es muss gelten:

$$2n - (F-1) = 0 \quad \text{oder} \quad n = \frac{1}{2}(F-1) . \quad (12.4.33)$$

Da n eine ganze Zahl ist, erhalten wir folglich eine Quantisierungsbedingung für die Größe $F = 2E/\hbar\omega$, das heißt, für die möglichen Energiewerte. Die Zahlen n bezeichnet man als *Schwingungsquantenzahlen*, da sie die Schwingungsenergie eindeutig festlegen. Insgesamt erhalten wir also den folgenden wichtigen Sachverhalt:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (12.4.34)$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega . \quad (12.4.35)$$

Wir sehen, dass die möglichen Energiewerte des harmonischen Oszillators äquidistant liegen und den Abstand $\hbar\omega$ haben. Der niedrigste Energiezustand besitzt eine Energie, die größer als Null ist. In Abb. 12.15 sind die niedrigsten vier Schwingungszustände sowie ihre Absolutquadrate dargestellt. Letztere geben die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des schwingenden Teilchens an.

Wir wollen nun noch die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte $dW(\xi)/d\xi$, ein Teilchen während des Zeitintervalls dt im Ortsintervall zwischen ξ und $\xi + d\xi$ zu finden, mit der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\xi)|^2$ vergleichen. Bei einer Schwingungsperiode $T = 2\pi/\omega$ ist die klassische Wahrscheinlichkeit durch

$$dW_{\text{kl}}(\xi) = \frac{dt}{T/2} = \frac{2}{T} \frac{dt}{d\xi} d\xi = \frac{2}{Tv(\xi)} d\xi \quad (12.4.36)$$

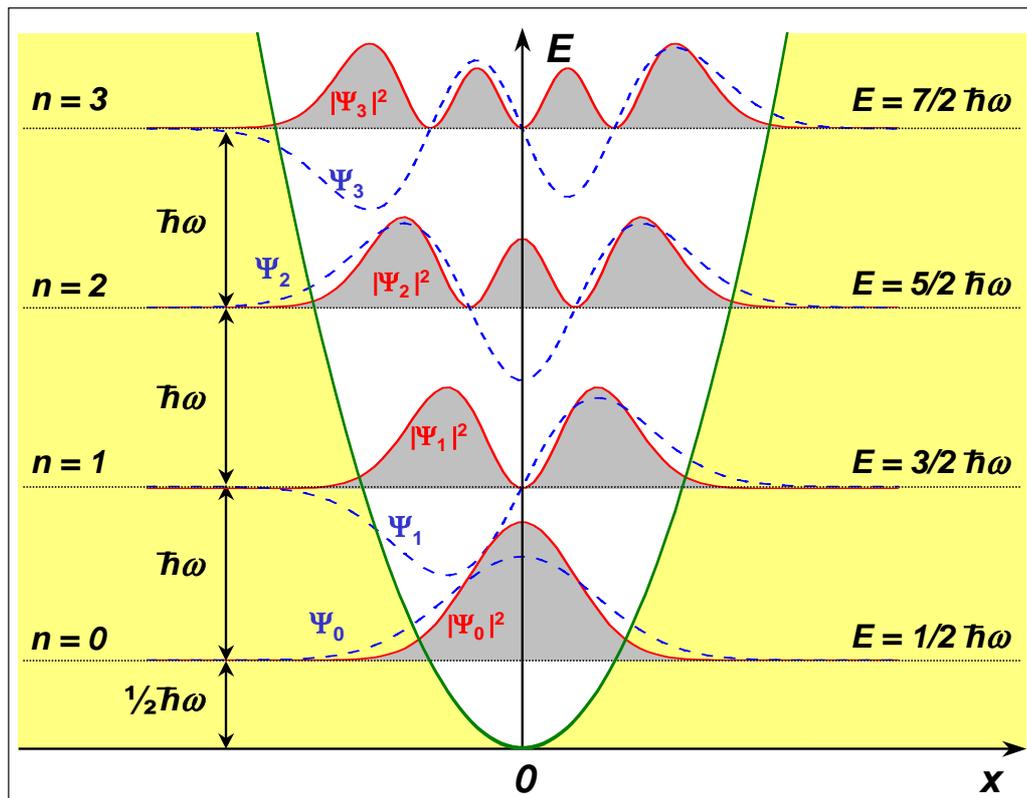


Abbildung 12.15: Wellenfunktionen Ψ_n (gestrichelt) und ihre Absolutquadrate $|\Psi_n|^2$ für den harmonischen Oszillator.

gegeben, wobei $dt = d\xi/v(\xi)$ dasjenige Zeitintervall ist, in dem das Teilchen die Strecke $d\xi$ zurücklegt. Das heißt, mit $T = 2\pi/\omega$ beträgt die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\frac{dW_{\text{kl}}(\xi)}{d\xi} = \frac{\omega}{\pi v(\xi)} = \frac{\omega}{\pi} \frac{1}{d\xi/dt}, \quad (12.4.37)$$

die quantenmechanische

$$\frac{dW_{\text{qm}}(\xi)}{d\xi} = |\Psi(\xi)|^2. \quad (12.4.38)$$

Die Geschwindigkeit $v(\xi) = d\xi/dt$ ist gegeben durch

$$\frac{d\xi}{dt} = \omega \sqrt{2n+1 - \xi^2} = \omega \sqrt{\xi_n^2 - \xi^2}, \quad (12.4.39)$$

wobei ξ_n die Amplitude der Schwingung mit der Energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ist.²³

²³Zur Herleitung der Geschwindigkeit $d\xi/dt$ verwenden wir den Energieerhaltungssatz

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} D x^2.$$

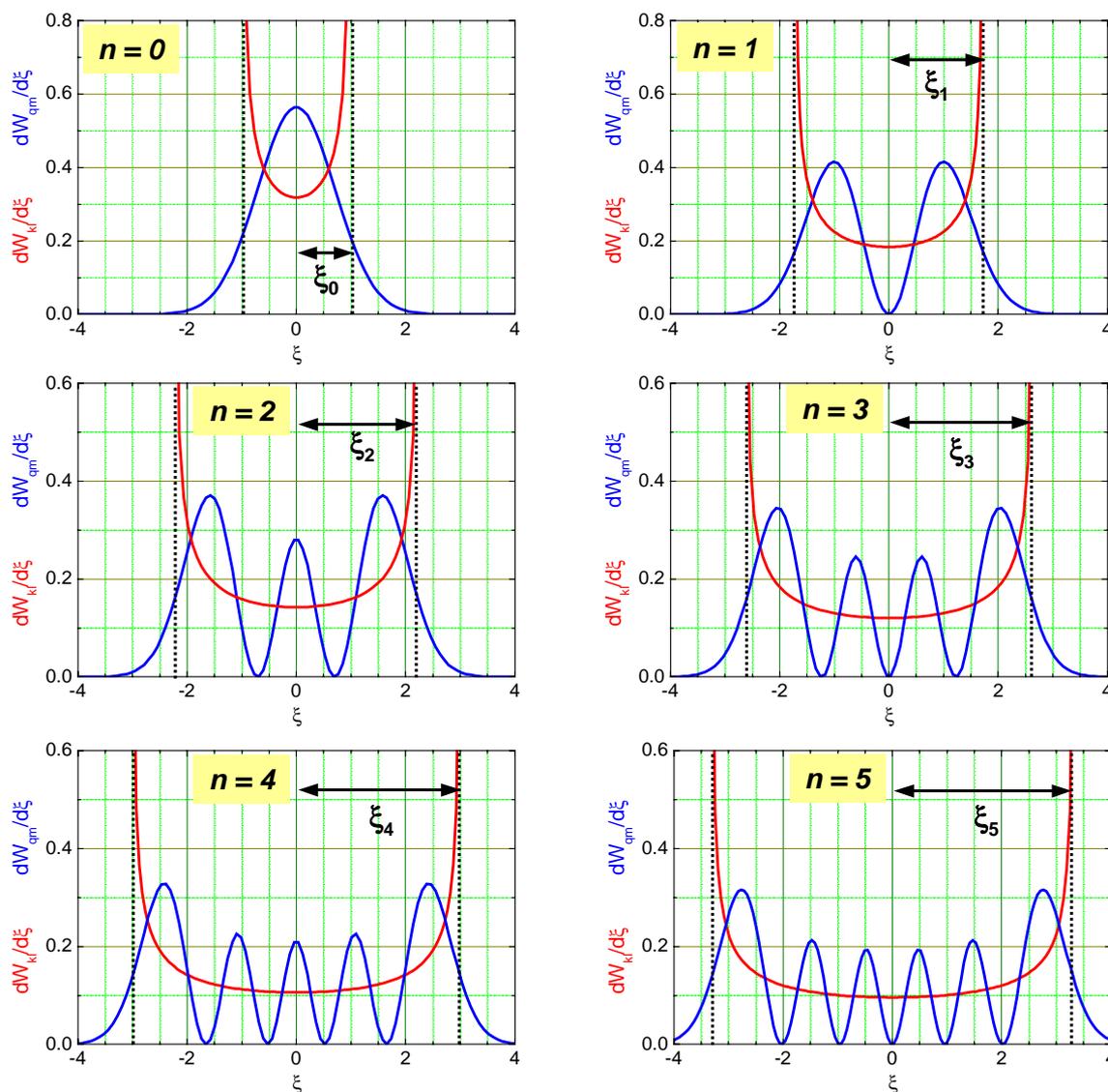


Abbildung 12.16: Quantenmechanische und klassische Wahrscheinlichkeitsdichte für den eindimensionalen harmonischen Oszillator.

In Abb. 12.16 sind die quantenmechanische und die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte für einige Ei-

Durch die Substitution $x = \xi \sqrt{\hbar/m\omega}$ und mit $E = (n + 1/2)\hbar\omega$ erhalten wir

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \frac{m}{2} \left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 \frac{\hbar}{m\omega} + \frac{1}{2} D\xi^2 \frac{\hbar}{m\omega}$$

und unter Benutzung von $\omega^2 = D/m$ schließlich

$$(2n + 1) \omega = \frac{1}{\omega} \left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 + \omega\xi^2 \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Durch Auflösen nach $d\xi/dt$ erhalten wir

$$\frac{d\xi}{dt} = \omega\sqrt{2n + 1 - \xi^2} = \omega\sqrt{\xi_n^2 - \xi^2}.$$

Hierbei ist ξ_n die Amplitude der Schwingung mit der Energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, die man leicht dadurch erhält, indem man die Geschwindigkeit $d\xi/dt = 0$ setzt, da diese an den Umkehrpunkten der Schwingung verschwindet.

genschwingungen des harmonischen Oszillators gezeigt. Da die klassische Geschwindigkeit des Teilchens an den Umkehrpunkten der Schwingung Null wird, divergiert dort die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte. Für $\xi > \xi_n$ wird die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte null. Die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte ist dagegen auch für $\xi > \xi_n$ endlich, das heißt, das Quantenobjekt kann sich mit einer kleinen aber endlichen Wahrscheinlichkeit auch in dem Bereich aufhalten, der klassisch verboten ist. Lassen wir zunächst den Fall $n = 0$ außer Acht, so sehen wir, dass auch die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte in der Nähe der Umkehrpunkte maximal ist. Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte nähert sich den Umkehrpunkten mit größer werdendem n immer mehr an.

Die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte zeigt allerdings im Gegensatz zur quantenmechanischen keine Minima und Maxima, sie gibt vielmehr den Mittelwert der quantenmechanischen Verteilung $|\Psi(\xi)|^2$ an. Im energetisch niedrigsten Schwingungszustand differieren die klassische und die quantenmechanische Beschreibung aufgrund der Nullpunktsenergie völlig: $dW_{\text{kl}}/d\xi$ hat an den Umkehrpunkten $\xi = \xi_n$ Maxima, $dW_{\text{qm}}/d\xi$ dagegen ein Maximum bei $\xi = 0$. Das heißt, die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte ist dort am größten, wo die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte ihr Minimum besitzt.

Auch die Tatsache der endlichen Nullpunktsenergie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ wird von der quantenmechanischen Beschreibung richtig wiedergegeben (siehe Abb. 12.15), während klassisch ja $E_0 = 0$ erwartet wird. Wir haben bereits gelernt, dass die endliche Nullpunktsenergie eine Folge der Unschärferelation ist.²⁴

12.4.5 Durchgang durch eine Potentialschwelle – Tunnelphänomene

Als weiteres Beispiel für die Beschreibung eines mikroskopischen Systems mittels der Schrödinger-Gleichung betrachten wir in diesem Abschnitt Tunnelphänomene. Diese treten immer dann auf, wenn ein Teilchen gegen eine Potenzialbarriere anläuft, die es nach den Regeln der klassischen Physik nicht überwinden kann, da seine kinetische Energie kleiner als die Höhe der Potenzialbarriere ist. Diese Situation ist in Abb. 12.17 gezeigt. Wir nehmen eine eindimensionale Bewegung in x -Richtung an. Das Teilchen habe die Energie E und bewege sich zunächst im potenzialfreien Gebiet I. Bei $x = 0$ beginnt ein Potenzial $V_0 > E$, das sich bis $x = d$ erstreckt und dann wieder auf Null abfällt.

Da die Energie des Teilchens kleiner als die Höhe der Potenzialbarriere ist, ist nach den Regeln der klassischen Physik eine Bewegung des Teilchens in den Bereich III jenseits der Barriere nicht möglich. Im Falle mikroskopischer Systeme kann das Teilchen aufgrund seiner Wellennatur die Barriere mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit durchtunneln und das Gebiet III erreichen. Dieses Phänomen ist analog zur Totalreflexion in der Optik, bei der die Amplitude der elektromagnetischen Welle beim Übergang in das Medium mit kleinerem Brechungsindex auch nicht abrupt, sondern exponentiell gegen Null geht. Hat das Medium mit kleinerem Brechungsindex nur eine geringe Dicke, kann es deshalb “durchtunnelt” werden.

Wir werden nun die in Abb. 12.17 gezeigte Situation analysieren. Die Wellenzahlen in den Gebieten I bis III sind

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{für Gebiet I und III} \quad (12.4.40)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{für Gebiet II} \quad (12.4.41)$$

²⁴Es sei hier noch darauf hingewiesen, dass in Abb. 12.15 nur stationäre Zustände gezeigt sind. Will man die Dynamik diskutieren, so muss man Wellenpakete bilden, die außer dem Ortsanteil noch den Zeitfaktor $\exp(-i\omega t)$ enthalten. Dazu muss das betrachtete Zeitintervall Δt klein gegenüber der Schwingungsperiode T sein, damit eine genügend gute Ortsauflösung erhalten wird.

Da $E - V_0 < 0$, ist k_2 rein imaginär, das heißt, die Wellenfunktion klingt in Gebiet II exponentiell ab.

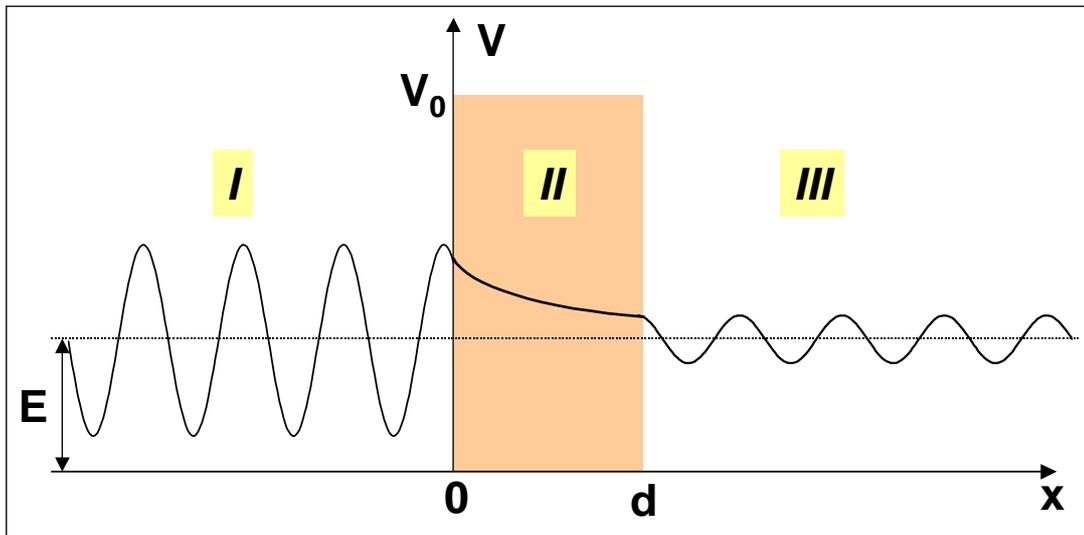


Abbildung 12.17: Potenzialverlauf und Wahrscheinlichkeitsamplitude beim Tunneleffekt.

Entsprechend unseren obigen Überlegungen machen wir folgenden Ansatz für die Wellenfunktion in den 3 Gebieten:

$$\Psi_I = A_1 \exp(ik_1x) + A_{-1} \exp(-ik_1x) \quad (12.4.42)$$

$$\Psi_{II} = A_2 \exp(ik_2x) + A_{-2} \exp(-ik_2x) \quad (12.4.43)$$

$$\Psi_{III} = A_3 \exp(ik_1x) \quad (12.4.44)$$

Der Einfachheit halber setzen wir die Amplitude der einlaufenden Welle $A_1 = 1$. Ferner enthält Ψ_{III} nur einen Term, da hier keine rücklaufende Welle zu erwarten ist.

Da die Barriere nur eine endliche Höhe hat, muss die Wellenfunktion im Bereich der Barriere nicht verschwinden, wie dies beim unendlich hohen Potentialtopf der Fall war. Als Randbedingung ergibt sich deshalb nicht das Verschwinden der Wellenfunktion an den Rändern der Potenzialbarriere, sondern die stetige Anpassung der Wellenfunktion zwischen den einzelnen Bereichen. Aus der Stetigkeit von Ψ und $\Psi' = d\Psi/dx$ an den Grenzen zwischen den einzelnen Gebieten, d.h. bei $x = 0$ und $x = d$, ergeben sich folgende Bedingungen:

$$1 + A_{-1} = A_2 + A_{-2} \quad (12.4.45)$$

$$k_1 - k_1 A_{-1} = k_2 A_2 - k_2 A_{-2} \quad (12.4.46)$$

$$A_2 \exp(ik_2d) + A_{-2} \exp(-ik_2d) = A_3 \exp(ik_1d) \quad (12.4.47)$$

$$A_2 \exp(ik_2d) - A_{-2} \exp(-ik_2d) = A_3 \frac{k_1}{k_2} \exp(ik_1d) \quad (12.4.48)$$

Aus diesen 4 Gleichungen können wir die A_{-1} , A_2 und A_{-2} eliminieren und erhalten

$$A_3 = \frac{4k_1 k_2 \exp(-ik_1 d)}{(k_1 + k_2)^2 \exp(-ik_2 d) - (k_1 - k_2)^2 \exp(ik_2 d)} . \quad (12.4.49)$$

Da k_2 rein imaginär ist, schreiben wir $k_2 = i\kappa$ mit

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (12.4.50)$$

und erhalten damit

$$A_3 = \frac{4ik_1 \kappa \exp(-ik_1 d)}{(k_1 + i\kappa)^2 \exp(-\kappa d) - (k_1 - i\kappa)^2 \exp(\kappa d)} . \quad (12.4.51)$$

Mit den hyperbolischen Funktionen $\cosh x = (e^x + e^{-x})/2$ und $\sinh x = (e^x - e^{-x})/2$ erhalten wir schließlich

$$A_3 = \frac{2ik_1 \kappa \exp(-ik_1 d)}{(k_1^2 - \kappa^2) \sinh(-\kappa d) + 2ik_1 \kappa \cosh(\kappa d)} . \quad (12.4.52)$$

Da die ankommende Welle die Amplitude $A_1 = 1$ hat, gibt $|A_3|^2$ die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen in Gebiet III zu finden. Wir können deshalb den Transmissionskoeffizienten T als

$$\begin{aligned} T &= A_3 A_3^* \\ &= \frac{4k_1^2 \kappa^2}{(k_1^2 - \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa d) + 4k_1^2 \kappa^2 \cosh^2(\kappa d)} \end{aligned} \quad (12.4.53)$$

eingeführen, wobei wir $\sinh^2(\kappa d) = \sinh^2(-\kappa d)$ verwendet haben. Mit $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$ erhalten wir dann

$$T = \frac{4k_1^2 \kappa^2}{(k_1^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa d) + 4k_1^2 \kappa^2} . \quad (12.4.54)$$

Dieser Ausdruck lässt sich für große Werte von κd , das heißt hohe und breite Potenzialbarrieren mit der Näherung²⁵ $\sinh^2 \kappa d \simeq \frac{1}{4} \exp(2\kappa d)$ weiter zu

$$T = \frac{4}{\frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{\kappa} + \frac{\kappa}{k_1} \right)^2 \exp(2\kappa d) + 4} \quad (12.4.55)$$

vereinfachen. Da κ und k_1 in derselben Größenordnung sind, ist der Vorfaktor vor der Exponentialfunktion in der Größenordnung von eins. Ferner kann die 4 im Nenner gegenüber $\exp(2\kappa d)$ vernachlässigt werden, so dass wir schließlich die Näherung

$$T \simeq \exp(-2\kappa d) = \exp(-2\sqrt{2m(V_0 - E)d^2/\hbar^2}) \quad (12.4.56)$$

erhalten. Wir erhalten also das wichtige Ergebnis, dass der Transmissionskoeffizient exponentiell mit der Dicke der Barriere abnimmt. Während also nach klassischer Auffassung ein Teilchen mit $E < V_0$ an der Potenzialbarriere vollständig reflektiert würde, erhält man quantenmechanisch eine endliche Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen auch jenseits der Barriere zu finden, wo es mit derselben Geschwindigkeit ($k_1 = k_3$) weiterfliegt. Es scheint also durch den Wall durchzugehen, man spricht vom Tunneleffekt.

Für ein Elektron ergeben sich folgende Werte für den Transmissionskoeffizienten:

| $V_0 - E$ (eV) | $d = 1$ nm | $d = 3$ nm | $d = 10$ nm |
|----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| 10 meV | 0.346 | 4.1×10^{-2} | 2.4×10^{-5} |
| 100 meV | 3.5×10^{-2} | 4.3×10^{-5} | 2.7×10^{-15} |
| 1 eV | 2.4×10^{-5} | 1.5×10^{-14} | 9.2×10^{-47} |

Wir sehen, dass bereits für sehr kleine Barrierendicken von wenigen nm die Transmissionswahrscheinlichkeit für Elektronen sehr klein wird. In elektronischen Bauelementen, die auf dem Tunneleffekt beruhen, müssen deshalb sehr dünnen Tunnelbarrieren verwendet werden. Die Herstellung solcher Tunnelbarrieren ohne Löcher ist technologisch oft sehr anspruchsvoll. Die Tunnelwahrscheinlichkeit von makroskopischen Teilchen ist aufgrund ihrer großen Masse selbst bei sehr dünnen Tunnelbarrieren meist verschwindend gering und deshalb auch experimentell nicht zu beobachten.

Tunnelphänomene spielen allerdings in vielen Bereichen der Physik eine wichtige Rolle. Insbesondere soll hier auf

- den α -Zerfall schwerer Atomkerne,
- die Feldemission von Elektronen aus Festkörpern,
- den Josephson-Effekt in Supraleiter/Isolator/Supraleiter Strukturen und
- die Rastertunnelmikroskopie

hingewiesen werden. Als Beispiel gehen wir im Folgenden kurz auf den α -Zerfall schwerer Atomkerne ein.

²⁵Es gilt $\sinh^2(x) = \left(\frac{e^x - e^{-x}}{2} \right)^2 = \frac{e^{2x} + e^{-2x} - 2}{4} \simeq \frac{1}{4} \exp(2x)$.

Beispiel: α -Zerfall schwerer Atomkerne

Viele Atomkerne mit einer Ordnungszahl größer als $Z = 82$ (Blei) emittieren spontan Atomkerne des ${}^4_2\text{He}$, des am häufigsten in der Natur vorkommenden Helium-Isotops. Wir nennen diese Atomkerne α -Teilchen. Die kinetische Energie der α -Teilchen hat wohldefinierte Werte, woraus man folgern kann, dass es sich bei dem Prozess um ein Zweikörperproblem handelt. Als Beispiel betrachten wir den spontanen α -Zerfall des Polonium-Isotops mit der Massenzahl $A = 210$:



Die kinetische Energie der α -Teilchen wird im Experiment zu $E_\alpha = 5.30 \text{ MeV}$ bestimmt. Der spontane Zerfall bedeutet, dass die Zahl $N(t)$ der Poloniumkerne exponentiell mit der Zeit abnimmt:

$$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t) \quad (12.4.58)$$

mit der Zerfallskonstante

$$\lambda = \frac{1}{\tau} = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} . \quad (12.4.59)$$

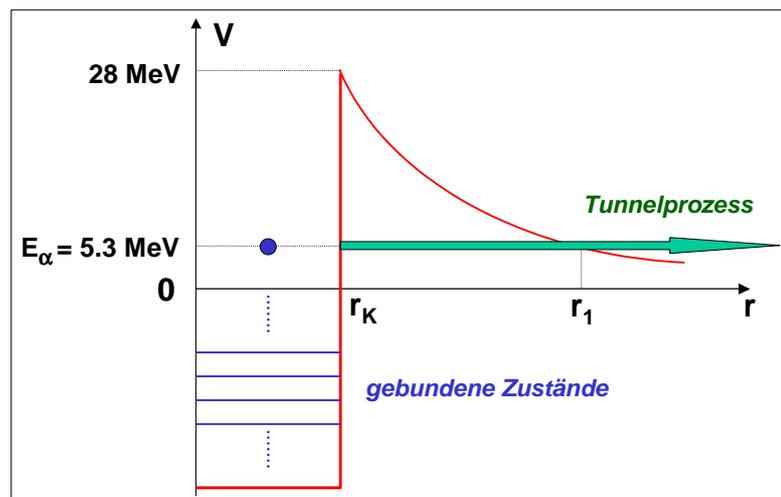
Die Halbwertszeiten $T_{1/2}$ variieren zwischen 10^{-6} s für ${}^{232}\text{Th}$ und 10^{18} für ${}^{238}\text{U}$. Diese große Variation zwischen verschiedenen Atomen um mehr als 24 Zehnerpotenzen ließ sich nur schwer erklären. **Gam-mov** war der erste, der darauf hinwies, dass es sich bei dem Prozess um ein Tunnelphänomen handelt. Aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit der Tunnelrate von der Barrierenhöhe und -breite konnte die große Variation der Zerfallszeiten erklärt werden.

Abb. 12.18 zeigt schematisch den Potenzialverlauf. Aus Streuexperimenten weiß man, dass die Atomkerne einen recht scharfen Rand haben und dass die Radien der Atomkerne in guter Näherung mit der dritten Wurzel der Massenzahl A skalieren, d.h.

$$r_K \propto (1.4 \times 10^{-15} \text{ m}) \cdot A^{1/3} . \quad (12.4.60)$$

Für den Kern ${}^{210}\text{Po}$ errechnet man den Radius $r_K = 8.3 \times 10^{-15} \text{ m}$. Aus der radialen Abhängigkeit der potenziellen Energie

$$V(r) = \frac{Z_1(Z_2 - 2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} . \quad (12.4.61)$$

Abbildung 12.18: Tunneleffekt beim α -Zerfall.

zwischen dem α -Teilchen mit $Z_1 = 2$ und dem Tochterkern ^{206}Pb mit $(Z_2 - 2) = 82$ errechnet man, dass die Potenziellschwelle am Rand des Kerns etwa 28 MeV hoch sein sollte. Das α -Teilchen hat allerdings nur eine Energie von 5.3 MeV. Dies entspricht dem Wert des Potentials bei einem Radius $r_1 = 4.4 \times 10^{-14}\text{m}$. Daraus kann man folgern, dass das α -Teilchen die Barriere durchtunnelt hat. Die gemessene Zerfallsrate ($T_{1/2} = 1.2 \times 10^7\text{s}$) stimmt gut mit der berechneten Tunnelrate überein. Die Bestimmung der Tunnelrate ist aufgrund der räumlichen Variation des Potentials allerdings etwas schwieriger und soll hier nicht vorgeführt werden.²⁶

²⁶Der Transmissionskoeffizient wird üblicherweise als $T = \exp(-2G)$ geschrieben und G wird als Gammov-Faktor bezeichnet. Der Gammov-Faktor hängt von der Kernladungszahl $Z_2 - 2$ des Tochterkerns, der Energie E des α -Teilchens und vom Verhältnis r_K/r_1 ab.

12.5 Quantisierung gebundener Zustände

Wir wollen in diesem Abschnitt das in den vorangegangenen Abschnitten eingeführte Instrumentarium dazu benutzen, die Eigenschaften einiger einfacher Systeme zu analysieren. Dabei werden wir das Konzept der *stationären Zustände* benutzen. Insbesondere wollen wir sich frei bewegende Teilchen und gebundene Teilchen diskutieren und ihre Eigenschaften zusammenfassen.

12.5.1 Kontinuierliche und diskrete Energieeigenwerte

Kontinuumszustände freier Teilchen

Die Schrödinger-Gleichung, die die Bewegung eines freien Teilchens beschreibt, unterliegt einer allgemeinen Normierungsvorschrift und eventuell weiteren Randbedingungen durch ein Potenzial. Wichtig ist, dass für freie Teilchen alle Werte der Gesamtenergie möglich sind und damit auch alle Werte der kinetischen Energie. Man bezeichnet diese Zustände deshalb als *Kontinuumszustände*.

Ein typisches Beispiel ist ein α -Teilchen, das mit dem abstossenden Coulomb-Potenzial eines Kerns wechselwirkt. Solange nur die abstossende Coulombkraft wirkt, gibt es keine gebundenen Zustände im System. Die α -Teilchen können deshalb je nach Wahl der kinematischen Variablen beliebige Werte der kinetischen Energie und des Drehimpulses annehmen.

Gebundene Zustände

Im Gegensatz zu freien Teilchen sind gebundene Teilchen durch ein Potenzial V auf ein bestimmtes Volumen eingeschränkt. Durch diese Einschränkung sind nur noch Zustände mit bestimmten, diskreten Werten der Gesamtenergie möglich. Die Eigenwerte der Schrödinger-Gleichung bilden ein Spektrum diskreter Werte.

Ein typisches Beispiel ist ein Teilchen in einem eindimensionalen Potenzialtopf. Aufgrund der Randbedingungen durch das Potenzial kann das Teilchen nur *stationäre Zustände* mit diskreten Werten der Energie besetzen. Den energetisch tiefsten Zustand nennen wir Grundzustand. Wir haben bereits in Abschnitt 12.2.1 im Zusammenhang mit den Anmerkungen zum Bohr'schen Atommodell darauf hingewiesen, dass sich die Quantisierungsbedingung auf ein Stationaritätsproblem eines schwingenden Systems mit Randbedingungen zurückführen lässt. Zustände mit anderen Energiewerten würden sich weginterferieren und deshalb nicht zu einem stationären Zustand führen. Die diskreten Energieniveaus der stationären Zustände lassen sich experimentell durch Beobachtung optischer Übergänge zwischen den verschiedenen Niveaus bestimmen.

Historisch interessant ist, dass **Niels Bohr** bereits im Jahr 1913, also vor der Entwicklung der Quantenmechanik zur Lösung der Probleme im Zusammenhang mit der Bewegung eines Elektrons im Zentralpotenzial eines Atomkerns die zunächst nicht näher begründeten Bohr'schen Postulate aufgestellt hat:

- Für Elektronen in Atomen gibt es gewisse ausgezeichnete Bahnen mit diskreten Energieeigenwerten, die ohne Abstrahlung durchlaufen werden können (Quantelung der Energie).
- Die Bahnen werden dadurch festgelegt, dass der Betrag des Bahndrehimpulses $L = p r_{\perp}$ nur ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar betragen kann (Quantelung des Drehimpulses).
- Beim Übergang eines Atoms von einer Bahn mit Energie E_j zu einer mit Energie E_k wird Licht mit der Energie $\hbar\omega_{jk} = E_j - E_k$ emittiert.

Eine Begründung dieser Postulate konnte erst durch die Quantenmechanik und das Konzept der stationären Zustände gegeben werden (siehe hierzu die Diskussion zum Bohr'schen Atommodell auf Seite 463).

12.5.2 Experimentelle Untersuchung der Energiequantisierung

Optische Spektroskopie

Eine Standardmethode zur Untersuchung der diskreten Energieniveaus in Atomen und Molekülen ist die optische Spektroskopie. Dabei regt man zunächst höhere Energieniveaus an, indem man die Atome/Moleküle in eine Gas- oder Funkenentladung bzw. ein Plasma bringt, oder sie mit Teilchen oder Licht beschießt. Das von den angeregten Atomen bei ihrem Übergang in weniger angeregte Niveaus oder den Grundzustand abgestrahlte Licht kann mit hochauflösenden optischen Spektrometern analysiert werden.

Man beobachtete bei solchen Experimenten immer eine Reihe von so genannten Spektrallinien, die für jedes Atom oder Molekül charakteristisch war. Historisch war das Zustandekommen der beobachteten diskreten Emission- (bzw. Absorptionslinien) lange Zeit unverstanden. Es gelang aber, die beobachteten Linien in Serien zu ordnen und auf diese Weise die diskreten Energieniveaus festzulegen. Dabei benutzte man das *Ritz'sche Kombinationsprinzip*, das anhand von Abb. 12.19 veranschaulicht ist. Man addiert die gemessenen Energien der einzelnen Übergänge und sucht nach Summenlinien, die diesen Kombinationen entsprechen. Im Beispiel wäre

$$E_{32} + E_{21} = E_{31} \quad (12.5.1)$$

Dabei ist natürlich noch nicht geklärt, ob die Reihenfolge der Niveaus nicht invertiert ist. Hierzu kann man allerdings Intensitätsargumente heranziehen. Die höher angeregten Niveaus sind in der Regel schwächer besetzt als die niedrig angeregten. Deshalb ist die Intensität einer Spektrallinie, die einem Übergang aus einem hoch angeregten Zustand entspricht, schwächer als diejenige, die einem Übergang aus einem weniger hoch angeregten Zustand entspricht.

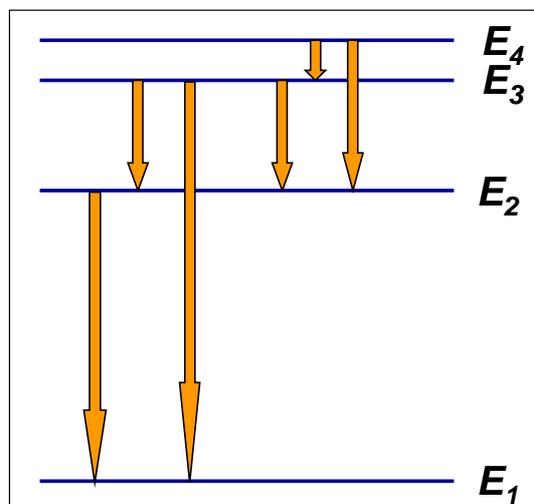


Abbildung 12.19: Ritz'sches Kombinationsprinzip.

Der Franck-Hertz-Versuch

James Franck und **Gustav Hertz** zeigten bereits im Jahr 1914, dass Atome durch Elektronenrückstoß nur quantisiert Energie aufnehmen können. Beim Franck-Hertz Versuch werden Elektronen in einer Vakuumröhre (Triode) zwischen Kathode und Gitter beschleunigt (siehe Abb. 12.20a). Die Röhre ist allerdings nicht evakuiert, sondern mit Quecksilberdampf gefüllt. Um eine gleichmäßige Verteilung des Quecksilbers in der Röhre zu gewährleisten, wird metallisches Quecksilber in der Röhre deponiert und der Hg-Dampfdruck über die Temperatur der gesamten Einrichtung, die sich zu diesem Zwecke in einen Ofen befindet, kontrolliert. Zwischen Gitter und Anode liegt eine Gegenspannung U_A von typischer Weise 1 V an.²⁷ Experimentell beobachtet man Folgendes: Erhöht man die Beschleunigungsspannung U_B , so nimmt der zwischen Gitter und Anode gemessene Strom I_A zu. Bei einer Spannung $U_B \simeq 5$ V beobachten wir eine ziemlich abrupte Abnahme des Anodenstromes (siehe Abb. 12.20b). Dieses Phänomen der plötzlichen Anodenstromabnahme tritt bei weiterer Erhöhung der Beschleunigungsspannung periodisch alle 4.9 V auf.

Die historische Erklärung dieser Beobachtungen durch Franck und Hertz ist folgendermaßen: Elektronen tragen zum Anodenstrom I_A bei, falls ihre kinetische Energie am Gitter größer ist als die zu überwindende Gegenspannung U_A . Die Elektronen stoßen auf ihrem Weg von der Kathode zum Gitter mit den Hg-Atomen zusammen.²⁸ Da die Hg-Atome etwa 366 000 mal schwerer sind als die Elektronen, sind die Stöße klassisch gesehen elastischer Natur, d.h. sie ändern nur die Richtung, nicht aber die Energie der Elektronen.

Besitzen die freien Elektronen allerdings genügend Energie, um ein gebundenes Elektron des Hg auf ein angeregtes Niveau zu heben, so sind auch inelastische Prozesse möglich. Diese setzen wegen der Quantisierung der Energieniveaus des Hg-Atoms abrupt ein und führen zu einem bestimmten Energieverlust der Elektronen. Die so verzögerten Elektronen können die Gegenspannung U_A nicht mehr überwinden und der Anodenstrom bricht deswegen ein. Erhöht man die Beschleunigungsspannung über den Schwellwert hinaus, so wird den Elektronen nach den inelastischen Stößen kinetische Restenergie verbleiben. Übersteigt diese den Wert eU_A , so setzt der Anodenstrom wieder ein und zwar bis zu dem Punkt, wo die Restenergie ausreicht, in einem zweiten Stoß eine weitere Anregung auszulösen. Dies geschieht bei $U_B = 2 \cdot 4.9$ eV und allen weiteren Vielfachen von 4.9 eV.

Für die Differenz zwischen dem angeregten und dem Grundzustand ergibt sich auf Grund dieser Interpretation der experimentelle Wert

$$\Delta E = E_1 - E_0 = 4.9 \text{ eV} . \quad (12.5.2)$$

Die Hg-Elektronen in angeregten Zuständen werden wieder in den Grundzustand zurückfallen (nach etwa einer ns) und dabei Licht der Energie $\hbar\omega = \Delta E$ aussenden. Diese Photonenenergie entspricht wegen $\lambda = c/v = ch/\Delta E$ einer Wellenlänge von 253.7 nm, welche im UV-Bereich liegt. Licht dieser Wellenlänge wird auch tatsächlich experimentell im Bereich der Kathode beobachtet, sobald der Wert $U_B = 4.9$ V in der Beschleunigungsspannung überschritten wird.²⁹

²⁷Die Gegenspannung ist so gering zu wählen, dass sie bei der gegebenen Temperatur keinen Anodenstrom durch Feldemission verursacht.

²⁸Wie häufig die Stossprozesse sind, hängt von vielen Parametern wie dem Dampfdruck des Quecksilbers und der mittleren Elektronengeschwindigkeit ab. Auf diese interessanten experimentellen Details wollen wir hier aber nicht eingehen. Dies ist auch glücklicherweise nicht notwendig, da wir uns nur für die Periodizität der Strukturen in der beobachteten Strom-Spannungskennlinie interessieren und nicht für die absolute Stromintensität.

²⁹Die Physik, die sich beim Franck-Hertz Versuch im Detail abspielt, ist sehr komplex und interessant. Wir haben die Darstellung hier stark vereinfacht. Historisch gesehen hat diese Einfachheit der Erklärung zur raschen Akzeptanz des Franck-Hertz Versuchs und damit der Quantisierung von Energieniveaus beigetragen. Die Details sind in G.F. Hanne, American Journal of Physics, **56**, 696 (1988) nachzulesen.

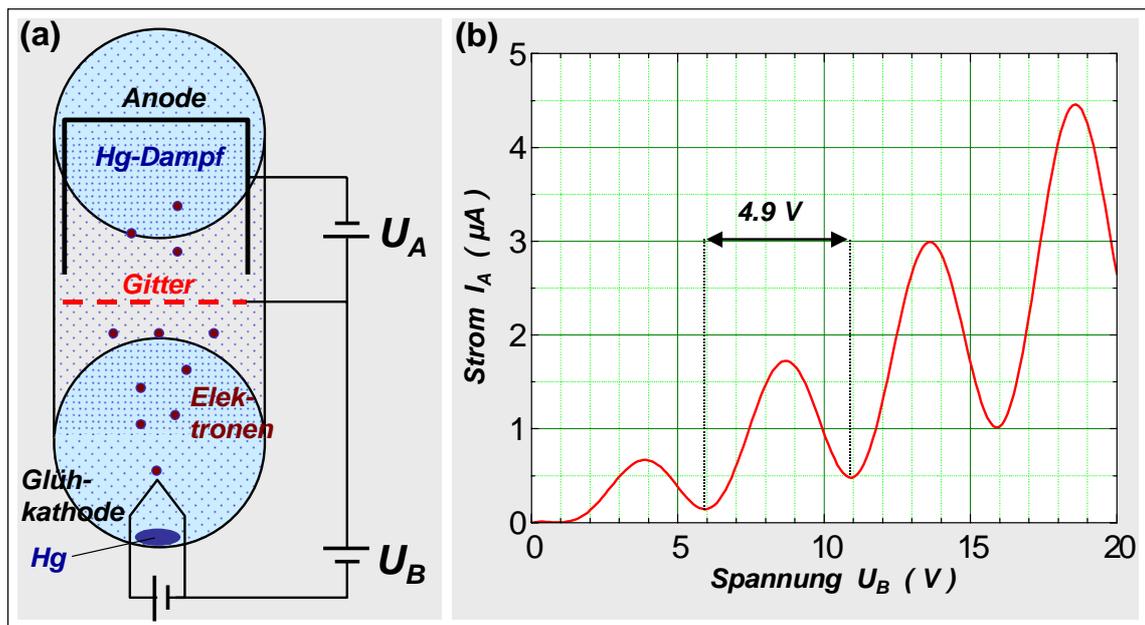


Abbildung 12.20: (a) Schematischer Aufbau des Franck-Hertz-Versuchs. (b) Anodenstrom I_A in Abhängigkeit von der Beschleunigungsspannung U_B : Der periodische Abstand der Minima der Kennlinie erlaubt die Bestimmung der Ionisierungsenergie von Quecksilber.

Durchstimmbare Laser und Synchrotronstrahlung erlauben uns heute, Atome und Moleküle gezielt mit monoenergetischen Photonen anzuregen. Durch die Nutzung von mehreren Lasern und von Vielfachanregungsprozessen erreicht man immer höher angeregte Niveaus und schließlich sogar eine Ionisierung. Mit Hilfe solcher Techniken kann man deshalb nicht nur die Anregungsenergie des ersten angeregten Zustands (wie beim Franck-Hertz-Versuch) sondern das ganze Anregungsspektrum eines Atoms oder Moleküls bestimmen.

Zusammenfassung

- Freie Elektronen können durch Glühemission aus heißen Metallen, durch Feldemission im elektrischen Feld oder durch Elektronenstoßionisation freier Atome erzeugt werden.
- Die Elementarladung und das Ladungs/Masse-Verhältnis von Elektronen betragen

$$e^- = 1.602\,176\,462(63) \times 10^{-19} \text{ As}$$

und

$$\frac{e}{m_0} = 1.758\,820\,174(71) \times 10^{11} \text{ As/kg.}$$

- Elektronen besitzen einen Eigendrehimpuls oder Spin. Der Betrag des Drehimpulsvektors ist

$$|\mathbf{s}| = \sqrt{\hbar^2 s(s+1)} = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar.$$

Die Projektion s_z des Drehimpulsvektors \mathbf{s} auf die z -Richtung ist

$$s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar.$$

Der Spin \mathbf{s} des Elektrons ist mit einem magnetischen Moment μ verknüpft, wobei

$$\mu = -g_s \mu_B \frac{\mathbf{s}}{\hbar}$$

und

$$\mu_z = -g_s \mu_B \frac{s_z}{\hbar}.$$

Hierbei ist $g_s \simeq 2$ der Spin- g -Faktor des Elektrons und $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} = 9.2740 \times 10^{-24} \text{ J/T}$ das Bohrsche Magneton.

- Elektronen und andere massebehaftete Teilchen besitzen Wellencharakter, der experimentell durch Beugungs- und Interferenzeffekte nachgewiesen werden kann (z.B. Elektronenbeugung). Über die de Broglie Beziehungen

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

und

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

können Teilchen mit Impuls \mathbf{p} und Energie E eine Wellenlänge λ bzw. ein Wellenvektor \mathbf{k} und eine Frequenz ω zugeordnet werden.

- Materiewellen zeigen Dispersion, d.h. ihre Phasengeschwindigkeit v_{ph} hängt von der Frequenz ab:

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar k}{2m}.$$

- Teilchen können als Wellenpakete beschrieben werden. Die Teilchengeschwindigkeit v_T ist gleich der Gruppengeschwindigkeit v_{gr} des Wellenpakets. Es gilt $v_{\text{gr}} \cdot v_{\text{ph}} = c^2$.
- Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion:

Das Absolutquadrat $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ der Materiewellenfunktion gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Teilchen zur Zeit t in einem Volumenelement dV um den Ort \mathbf{r} zu finden.

- Heisenbergsche Unschärfe-Beziehung:

Ort und Impuls eines Teilchens können nicht gleichzeitig beliebig genau gemessen werden. Die Heisenbergsche Unschärfe-Beziehung

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$$

gibt eine untere Schranke für die Unschärfen des Orts und des Impulses bei gleichzeitiger Messung an.

Eine Unschärfe-Beziehung besteht auch für Energie und Zeit:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

- Bohrsches Atommodell:

Die Bedingung, dass die Materiewellenlänge der Elektronen gleich einem ganzzahligen Vielfachen des Bahnumfanges der Elektronenbahnen um den Atomkern sein muss, um stationäre Lösungen (stehende Wellen) zu erhalten, führt zu einer Quantisierung der möglichen Bahnradien:

$$2\pi r_n = n \cdot \lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

und der möglichen Drehimpulse

$$|\mathbf{L}| = n \cdot \hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Die Unschärferelation macht die Stabilität des tiefsten Atomzustandes möglich. Sie erlaubt die Abschätzung des kleinsten Elektronenradius (Bohrscher Radius).

- Die erlaubten Energien für Atome sind diskret. Beim Übergang eines Atoms vom Zustand E_i zum Zustand E_k wird Licht mit der Frequenz $\omega_{ik} = (E_i - E_k)/\hbar$ abgestrahlt. Die Quantisierung der Energieniveaus kann experimentell mit optischer Spektroskopie oder dem Franck-Hertz-Versuch nachgewiesen werden.
- Die quantenmechanische Beschreibung der Bahnkurve $\mathbf{r}(t)$ eines Teilchens wird durch die Wahrscheinlichkeitsverteilung $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ersetzt, deren räumliche Verteilung im Laufe der Zeit breiter wird (Auseinanderlaufen des Wellenpaketes).
- Die Funktionen $\Psi(\mathbf{r}, t)$ sind Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t),$$

die das Verhalten eines Teilchens der Masse m in einem beliebigen Potenzial $V(\mathbf{r}, t)$ beschreibt. Mit dem Hamilton-Operator

$$H \equiv \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t)$$

kann man zeitabhängige Schrödinger-Gleichung als

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

schreiben.

- Für stationäre Probleme kann die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

verwendet werden.

- Für zeitabhängige Probleme liefert die Schrödinger-Gleichung zeitabhängige Lösungen, deren Absolutquadrat die zeitliche Bewegung des Teilchens beschreibt.

Für zeitunabhängige Probleme lassen sich die zeitabhängigen Wellenfunktionen in eine zeitunabhängige, reine Ortsfunktion und einen Phasenfaktor, dessen Exponent von der Energie abhängt, aufspalten:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp(i\frac{E}{\hbar}t).$$

- Anwendungen der Schrödinger-Gleichung:

- Teilchen im eindimensionalen, unendlich hohen Potenzialtopf:
Die möglichen Energiewerte sind

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Teilchen im Parabelpotenzial:
Im Parabelpotenzial liegen die Energieeigenwerte

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

des harmonischen Oszillators äquidistant.

- quantenmechanisches Tunneln:

Ein Teilchen der Energie E kann einen Potenzialwall der Höhe $V_0 > E$ und Dicke d durchdringen. Die Tunnelwahrscheinlichkeit T hängt von $V_0 - E$ und d ab und beträgt

$$T \propto \exp(-2\kappa d) \quad \text{mit} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$