

6 Grundlagen der Quantenmechanik

Die Quantenmechanik stellt die Grundlage der meisten Bereiche der Physik dar. Beispiele sind die Linienspektren von Atomen oder die unterschiedlichen Eigenschaften von Isolatoren, Halbleitern, Metallen und Supraleitern. Die theoretischen Grundlagen wurden in den ersten Jahrzehnten des 20. Jahrhunderts entwickelt, auf der Basis von experimentellen Fakten aus dem 19. Jahrhundert.

6.1 Experimentelle Hinweise

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

“ All possible inventions
have already been made “

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

Abbildung 6.1: Gegen Ende des 19. Jhd schien die Wissenschaft zu einem Abschluss gekommen zu sein.

Dies führt sogar dazu, dass man glaubte, ein weiterer Fortschritt werde nicht mehr möglich sind. Allerdings existierten noch einige Diskrepanzen zwischen den damaligen Theorien und den experimentellen Befunden. Die Differenzen waren auf den ersten Blick relativ gering, doch sie waren mit den existierenden Erklärungen auf die eine oder andere Weise nicht in Übereinstimmung zu bringen.

6.1.1 Schwarze Strahler

Der erste Widerspruch zwischen klassischer Theorie und experimentellen Befunden ist die Abhängigkeit

der Strahlungsenergie von der Wellenlänge, respektive der Frequenz. Dass die Temperatur einen Einfluss auf die spektrale Verteilung von Licht hat, kann man schon mit dem Auge erkennen: ein Objekt mit einer Temperatur von x Grad strahlt in der Farbe

Temperatur	Farbe
600 °C	rot
850 °C	hellrot
1000 °C	gelb
1300 °C	weiß

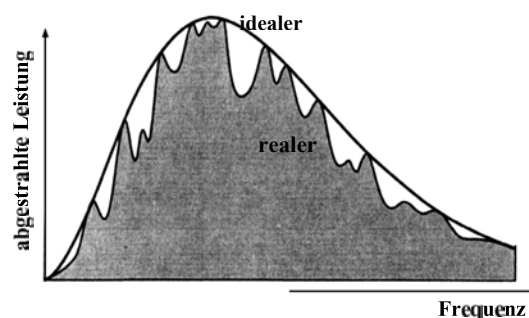


Abbildung 6.2: Frequenzspektrum eines idealen und eines realen Strahlers.

Diese Art von Strahlungsquelle wird als schwarzer Strahler bezeichnet. Ein schwarzer Strahler ist dadurch definiert dass er alle eintreffende Strahlung perfekt absorbiert (für jede Wellenlänge). Kirchhoff hatte gezeigt, dass das Verhältnis zwischen der Absorptivität und dem Emissionsvermögen eines Körpers nur von Temperatur und Frequenz abhängt. Somit bedingt eine perfekte Absorption eine ebenso perfekte Emission. Die Strahlungsleistung pro Frequenzbereich ist dann nur noch eine Funktion von Temperatur und Frequenz. Ein realer Körper hat immer eine kleinere Abstrahlung als ein idealer Strahler. Bei einem idealen Spiegel wird die gesamte Strahlung reflektiert, also nicht absorbiert, und damit auch keine eigene Strahlung emittiert.

Ein idealer schwarzer Körper kann genähert wer-

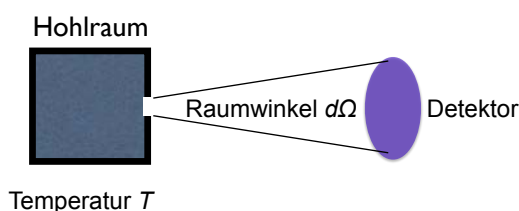


Abbildung 6.3: Hohlraumstrahler.

den durch einen Hohlraum mit schwarzen Wänden und einer kleinen Öffnung. Strahlung, welche durch diese Öffnung eindringt wird mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit absorbiert. Befindet sich der Körper bei der Temperatur T , emittiert er Strahlung durch die Öffnung. Die Leistung, welche dabei in einen Raumwinkel $d\Omega$ abgestrahlt wird, ist proportional zur Energiedichte U im Resonator.

Einige experimentelle Befunde sind:

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

$$P = A\sigma T^4 \quad \sigma = 5,669 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}^4}.$$

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

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

$$\lambda_{\max} T = \text{const} = 0,2898 \text{ cm K}.$$

Diese Abhängigkeit wird als Wien'sches Verschiebungsgesetz bezeichnet.

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

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} \propto \lambda^{-4}.$$

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

6.1.2 Strahlungsgesetze

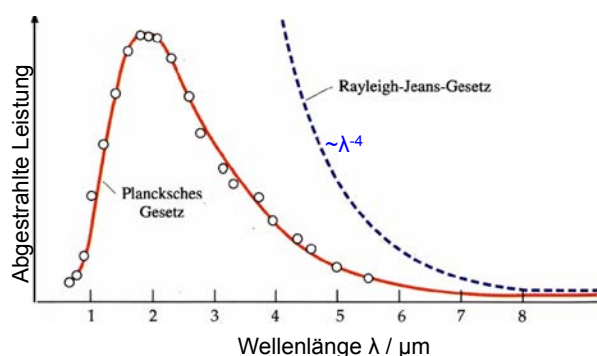


Abbildung 6.4: Vergleich des Planck'schen Strahlungsgesetzes mit dem Gesetz von Rayleigh-Jeans.

Für große Wellenlängen konnte man das empirische Rayleigh-Jeans Gesetz, $P \propto \lambda^{-4}$, nach dem die Intensität mit der vierten Potenz der Wellenlänge abnimmt. Allerdings kann dieses Gesetz für kurze Wellenlängen, d.h. hohe Frequenzen, nicht gültig sein. Da die emittierte Leistung mit dem Quadrat der Frequenz zunimmt, müsste jeder Körper eine intensive UV-, und eine noch intensivere Röntgenquelle sein. Dies ist offenbar nicht der Fall. Außerdem divergiert das Integral dieses Ausdrucks, die emittierte Leistung wäre also unendlich.

Den Bereich hoher Frequenzen (kurzer Wellenlängen) konnte man bereits vor Planck durch das sog. Wien'sche Strahlungsgesetz beschreiben. Dieses kann geschrieben werden als

$$\Phi(\lambda) = \frac{C}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{c/\lambda T}},$$

wobei C und c Konstanten sind. Es stimmt für hohe Frequenzen sehr gut mit den experimentellen Daten überein und vermeidet insbesondere die "Ultraviolett-Katastrophe", d.h. die unbegrenzte Zunahme der Strahlungsleistung bei hohen Frequenzen. Im langwelligen Bereich liefert es aber zu niedrige Werte ($\propto \lambda^{-5}$ statt $\propto \lambda^{-4}$).

Planck hat diese beiden Strahlungsgesetze, welche jeweils nur für einen Teilbereich galten, durch eine einheitliche Theorie ersetzt und damit die theoretischen Probleme gelöst. Seine Annahme war, dass



Abbildung 6.5: Max Planck (1858 – 1947).

die Strahlung in diskreten Einheiten abgegeben werden soll, wobei die Energie dieser einzelnen “Pakete” durch die Beziehung $\mathcal{E} = h\nu$ gegeben ist. Die Planck’sche Konstante besitzt den Wert

$$h = 6,6256 \cdot 10^{-34} \text{Js.}$$

Die Frequenz ν liegt für sichtbares Licht im Bereich

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{m/s}}{0,5 \mu\text{m}} = 6 \cdot 10^{14} \text{Hz,}$$

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

$$\mathcal{E} = 6,6256 \cdot 10^{-34} \cdot 6 \cdot 10^{14} \text{J} \approx 4 \cdot 10^{-19} \text{J.}$$

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

Wenn man für einen Hohlraum die Eigenfrequenzen berechnet und jede entsprechende Mode mit einer Anzahl von Energiepaketen besetzt, welche seinem thermischen Gleichgewicht entspricht, kann man die gesamte Energiedichte des Hohlraums berechnen. Die emittierte Strahlung ist proportional dazu.

Der Energieinhalt pro Frequenzintervall beträgt dann

$$L d\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2 \Omega_0} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu.$$

Als Funktion der Wellenlänge erhält man entsprechend

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

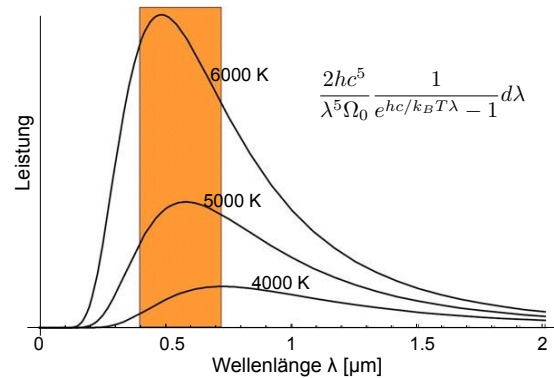


Abbildung 6.6: Leistung als Funktion der Wellenlänge für schwarze Strahler mit unterschiedlichen Temperaturen.

6.1.3 Photonen

Die Planck’sche Konstante h wurde von Planck zunächst als rein rechnerische Hilfsgröße betrachtet. Von anderen, z.B. Einstein, wurde sie aber als fundamentale physikalische Größe erkannt, welche in sehr vielen Zusammenhängen erscheint. Die Energiepakete, welche man heute als Photonen bezeichnet, kann man heute ohne weiteres direkt beobachten. Man benutzt dazu z.B. einen sog. Photomultiplier. In diesem Gerät werden die Photonen in elektronische Impulse umgewandelt.

Wenn die Lichtmenge, die pro Zeiteinheit auf einen Detektor fällt, gering ist, wird es möglich, einzelne Photonen zu beobachten, welche jeweils einen Spannungsimpuls erzeugen. Die Photonen gelangen in unregelmäßigen, nicht voraussagbaren Abständen auf den Detektor. Erst wenn man die Anzahl der Photonen über einen Zeitraum mittelt, der lang ist im Vergleich zum mittleren Abstand, erhält man einen konstanten Wert. Die mittlere Photonenzahl pro Zeiteinheit multipliziert mit der Energie der Photonen ergibt die auf den Detektor einfallende Leistung. Wenn man die Leistung erhöht so nimmt der mittlere Abstand zwischen zwei Photonen ab, die Zählrate steigt entsprechend.

6.1.4 Einstein's Theorie von Absorption und Emission

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

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

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

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

Genau so berechnet man die spontane Emission

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{sp.Em.} = A_{21}N_2$$

und die induzierte Emission

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{ind.Em.} = B_{21}u_f(\nu)N_2$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt

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

Somit muss

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}u_f(\nu)}{A_{21} + B_{12}u_f(\nu)}.$$

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

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-(\epsilon_2 - \epsilon_1)/k_B T}.$$

Aus dem Vergleich dieser Ausdrücke erhält man

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

Außerdem gilt für hohe Temperaturen, $T \rightarrow \infty$ dass die Energiedichte ebenfalls divergiert, $u_f(\nu) \rightarrow \infty$. Somit muss

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

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

$$u_f(\nu) = \frac{A_{21}}{B_{12}(e^{h\nu/k_B T} - 1)}.$$

Dieser Ausdruck kann für den Grenzfall $h\nu \ll k_B T$ vereinfacht werden zu

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

6.1.5 Photoeffekt

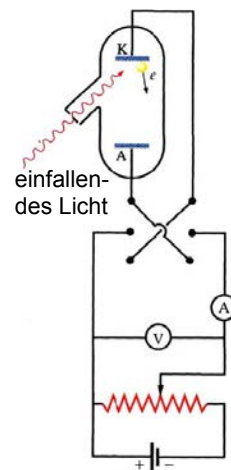


Abbildung 6.7: Prinzipieller Aufbau zur Messung des Photoeffekts.

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

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

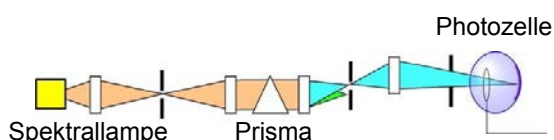


Abbildung 6.8: Aufbau zur wellenlängenabhängigen Messung des Photoeffekts.

Wir benutzen diesen Messaufbau nun, um die Abhängigkeit der kinetischen Energie von der Wellenlänge des Lichtes zu messen. Die vorhandene Lichtquelle erzeugt Licht bei verschiedenen diskreten Wellenlängen, welche wir einzeln auf die Probe fallen lassen.

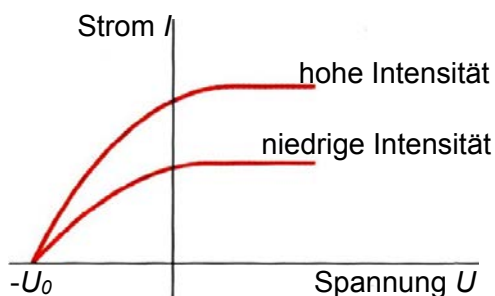


Abbildung 6.9: Qualitatives Resultat der Messung des Photoeffekts.

Misst man den Photostrom als Funktion der Beschleunigungsspannung, so findet man, dass bei genügend stark negativer Spannung der Strom verschwindet. Offenbar erreichen die Elektronen die Anode nicht. Wird das Potential der Anode höher,

so erhält man einen wachsenden Strom, und ab einer schwach positiven Spannung bleibt der Strom konstant.

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

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

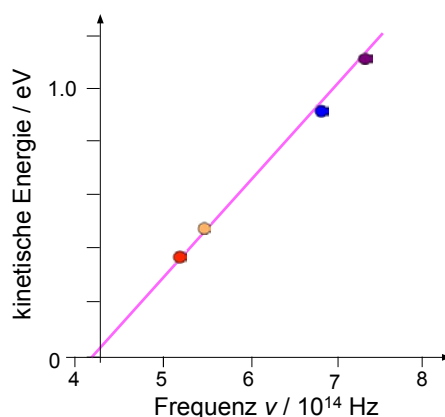


Abbildung 6.10: Kinetische Energie der Photoelektronen als Funktion der Photonenfrequenz.

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

$$\mathcal{E}_{kin} = h(\nu - \nu_0) = h\nu - A.$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{E} &= (1,176 - 0,078) \text{ eV} = 1,098 \text{ eV} \\ &= 1,76 \cdot 10^{-19} \text{ J.} \end{aligned}$$

Die entsprechende Frequenzdifferenz beträgt

$$\Delta \nu = (7,35 - 4,81) \cdot 10^{14} \text{ Hz} = 2,54 \cdot 10^{14} \text{ Hz.}$$

Daraus erhalten wir für die Planck'sche Konstante

$$\frac{\Delta \mathcal{E}}{\Delta \nu} = \frac{1,76 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{2,54 \cdot 10^{14} \text{ Hz}} = 6,9 \cdot 10^{-34} \text{ Js.}$$

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

6.1.6 Austrittsarbeit

Die Austrittsarbeit A ist eine Materialkonstante und beträgt für Kalium:

$$A = 4,5 \cdot 10^{14} \text{ Hz} h = 3,10^{-19} \text{ J} = 1,9 \text{ eV.}$$

Meistens verwendet man hier als Einheit nicht Joule, sondern Elektronenvolt (eV), wobei

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

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

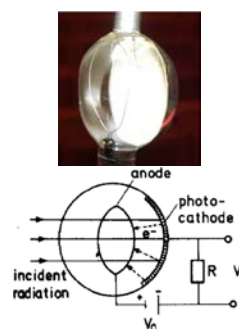


Abbildung 6.11: Austrittsarbeit für unterschiedliche Metalle (links) und Photozelle.

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

Bei anderen Materialien beträgt die Austrittsarbeit einige eV (siehe Abb. 6.11). Der Photoeffekt wird u.a. im Photomultiplier verwendet, wo die Photonen zunächst aus der Oberfläche eines Alkalimetalls Elektronen herausschlagen. Man wandelt also sozusagen Photonen in Elektronen um.

6.1.7 Spektrallinien von Atomen

Die Existenz von stabilen Atomen ist eines der wichtigsten Tatsachen, welche im Rahmen der klassischen Physik nicht befriedigend erklärt werden kann. Stellt man sich ein Atom als eine Art Sonnensystem vor, in dem negativ geladene Elektronen um positiv geladene Kerne kreisen, dann führen sie eine beschleunigte Bewegung durch. Im Rahmen der klassischen Elektrodynamik stellen beschleunigte Ladungen die Quelle einer elektromagnetischen Welle dar. Durch die Abstrahlung müsste das atomare System an Energie verlieren. Dadurch verringert sich der Abstand, die Rotationsbewegung wird schneller, die Beschleunigung und damit die Abstrahlung nehmen zu und das Elektron müsste in kurzer Zeit in den Kern stürzen, unter Aussendung eines kontinuierlichen Spektrums von elektromagnetischer Strahlung.

Tatsächlich sind Atome stabil. Im Grundzustand strahlen sie keine Energie ab. Werden sie angeregt strahlen sie die Energie wieder ab, allerdings



Abbildung 6.12: Spektren von unterschiedlichen Atomen.

nur in Form von spektral klar getrennten, schmalen Emissionslinien. Dies deutet darauf hin, dass Atome Strahlung in der Form von "Energiepaketen" aufnehmen und abgeben. Diese Photonenenergien entsprechen Differenzen zwischen stationären Zuständen der Energie. Die Farbe des Lichtes ist unabhängig von der Temperatur der Atome, im Gegensatz zum schwarzen Strahler.

6.1.8 Der Comptoneffekt

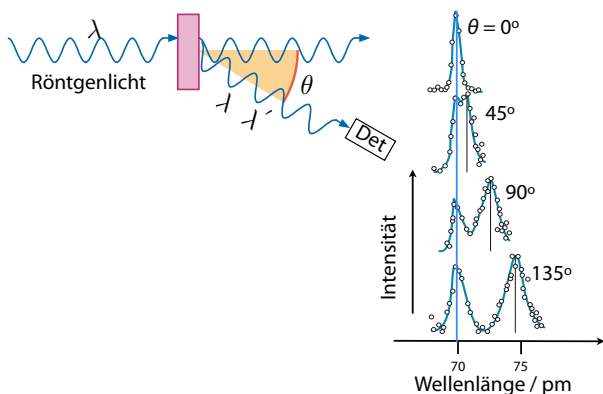


Abbildung 6.13: Compton Effekt.

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

$$\Delta\lambda = (\lambda - \lambda') = \lambda_c (1 - \cos \theta) \quad \lambda_c = 2,4 \text{ pm.}$$

Am größten ist der Wellenlängenunterschied somit in Rückwärtsstreuung, also für $\theta = \pi$. Der Effekt ist unabhängig vom verwendeten Probenmaterial. Dieses Experiment wurde erstmals 1923 von Arthur Compton durchgeführt.

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

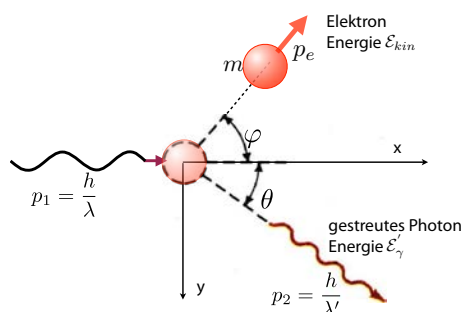


Abbildung 6.14: Compton Streuung eines Photons an einem freien Elektron.

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

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2.$$

Hier stellt m_0 die Ruhemasse des Elektrons und

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

die relativistische Masse des gestreuten Elektrons. Außerdem gilt ein Erhaltungsgesetz für den Impuls des Gesamtsystems. Der Impuls des Photons beträgt

$$p_{ph} = m_{ph}c = \frac{h\nu}{c^2}c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

und der Gesamtimpuls des Systems in x -Richtung

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \theta + mv \cos \phi$$

und in y-Richtung

$$0 = \frac{h}{\lambda'} \sin \theta - mv \sin \phi.$$

Die drei Gleichungen können aufgelöst werden nach der Änderung der Wellenlänge

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda' = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos \theta) = \lambda_c(1 - \cos \theta).$$

Hier stellt

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0c} = 2,426 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

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

6.2 Wellencharakter der Materie

6.2.1 Wellen und Teilchen

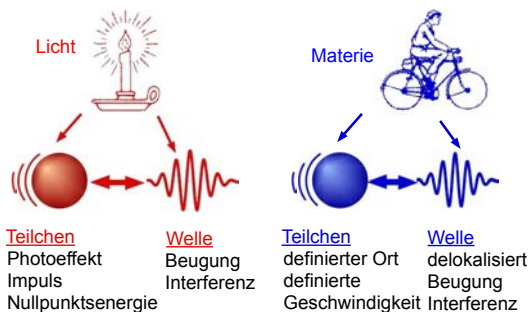


Abbildung 6.15: "Typische" Eigenschaften von Licht und Materie.

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

und den Teilcheneigenschaften wird durch die Beziehungen

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

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

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



Abbildung 6.16: Louis Victor de Broglie, 1892–1987.

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

Er spekulierte, dass für Materie die gleichen Beziehungen zwischen Energie und Frequenz, resp. Impuls und Wellenlänge gelten könnten wie für Licht.

Dann müsste jedes Teilchen durch eine Welle

$$\Psi = A e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

mit Wellenlänge, resp. Wellenzahl

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad k = \frac{p}{\hbar}$$

und Frequenz

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

beschrieben werden.

Allerdings ist eine ebene Welle nicht die optimale Darstellung für ein Teilchen, da es damit über den gesamten Raum delokalisiert wäre. Eine bessere Darstellung ist statt dessen eine Wellengruppe, welche in der Nähe der klassischen Position des Teilchens lokalisiert ist. Diese Postulate wurden 1927 experimentell belegt und 1929 erhielt de Broglie dafür den Nobelpreis.

6.2.2 Ausbreitung und Dispersion

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

$$\mathcal{E} = \frac{m}{2} v^2.$$

Damit wird die Kreisfrequenz

$$\omega = \frac{\mathcal{E}}{\hbar} = \frac{mv^2}{2\hbar}$$

und der Betrag des Wellenvektors

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{mv}{\hbar}. \quad (6.1)$$

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

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Die Geschwindigkeit der Wellengruppe sollte nun gegeben sein als

$$v_G = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = v.$$

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

6.2.3 Beispiel: Elektronenwellen

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

Für die Berechnung der Wellenlänge benötigen wir zunächst die Geschwindigkeit. Wir betrachten Elektronen mit einer kinetischen Energie, wie sie z.B. in Kathodenstrahlen verwendet werden, also z.B.

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

Ihre Geschwindigkeit ist damit

$$v = \sqrt{\frac{2\mathcal{E}_{kin}}{m_e}} = \sqrt{\frac{3.2 \cdot 10^{-17}}{9 \cdot 10^{-31}}} \frac{\text{m}}{\text{s}} = 6 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

Sie ist damit noch weit unterhalb der Lichtgeschwindigkeit und rechtfertigt die nichtrelativistische Rechnung. Für die Wellenlänge erhalten wir

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

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

Eine Bestätigung der Wellenhypothese kann somit erreicht werden, wenn man zeigen kann, dass periodische Anordnungen von Atomen Beugungseffekte erzeugen. Diese Möglichkeit wurde 1925 von Elsassner vorgeschlagen. Eine Voraussetzung dafür ist,

dass Elektronen elastisch gestreut werden, so dass die reflektierte Welle eine feste Wellenlänge aufweist.

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

6.2.4 Interferenz und Beugung

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

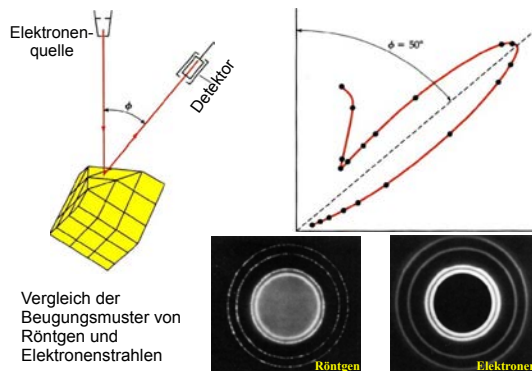


Abbildung 6.17: Beugung von Elektronen an einem Kristall.

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

die Bragg - Bedingung

$$a \sin \theta = n\lambda = \frac{nh}{p}$$

mit $n = 1, 2, 3, \dots$ erfüllt ist.

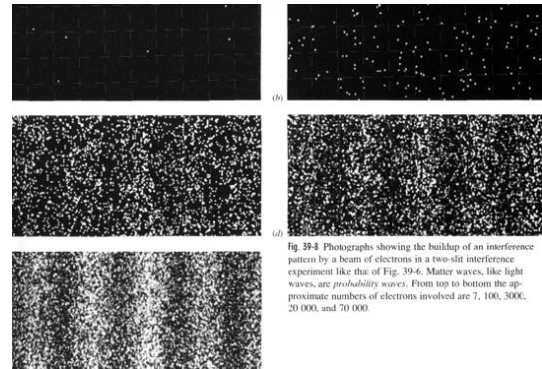


Abbildung 6.18: Interferenzmuster von Elektronen, welche durch einen Doppelspalt geflogen sind.

Genau wie bei Lichtwellen kann man bei Materiewellen Interferenzeffekte beobachten. Im Beispiel von Abb. 6.18 wurde eine Elektronenwelle durch einen Doppelspalt geschickt. Die Interferenz zwischen den beiden Pfaden erzeugt eine Modulation der Intensität auf dem Schirm, welche mit zunehmender gesamter Teilchenzahl beobachtet wird. Das interessante an diesem Experiment ist, dass es die Teilchen- und Wellenaspekte im gleichen Experiment aufzeigt. So messen wir die Ankunft jedes Teilchens auf dem Schirm z.B. mit einem Zähler, der für jedes Teilchen einen Ort und eine Zeit des Auftreffens liefert. Dieser Teil entspricht somit dem Teilchencharakter. Andererseits können wir von den einzelnen Teilchen nicht sagen, ob sie durch den unteren oder oberen Spalt durchgetreten sind. Diese Information wäre bei einem klassischen Teilchen verfügbar.

Elektronenwellen können auch durch Linsen gebeugt und damit für die Mikroskopie verwendet werden. Abb. 6.19 zeigt schematisch den Aufbau eines Elektronenmikroskops. Die Elektronen werden durch ein System von elektrischen und magnetischen Linsen fokussiert und auf einen Bildschirm projiziert.

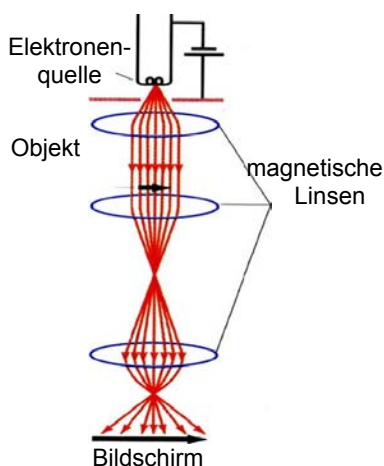


Abbildung 6.19: Schematische Darstellung eines Elektronenmikroskops.

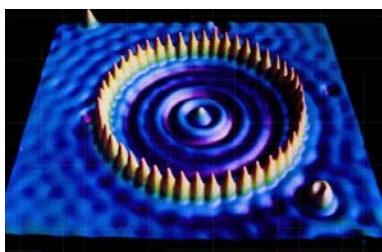


Abbildung 6.20: Stehende Elektronenwellen in einem Ring aus Eisenatomen.

Heute können Welleneigenschaften u.a. auch mit einem Tunnelmikroskop nachgewiesen werden. In diesem Fall wurden 48 Eisenatome auf einer Kupferoberfläche in einem Ring angeordnet. Die Elektronenwellen werden an diesen Fremdatomen reflektiert und bilden stehende Oberflächenwellen, welche mit einem Rastertunnelmikroskop abgebildet wurde (Science 262, 218 (1993)).

6.2.5 Neutronen

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

bei Raumtemperatur entspricht

$$\mathcal{E} = \frac{p^2}{2m_N} = \frac{3}{2}k_B T \quad \text{für } T = 300 \text{ K.}$$

In Elektronenvolt entspricht diese Energie etwa 26 meV.

Aus der Energie kann man den Impuls von thermischen Neutronen berechnen:

$$p = \sqrt{3k_B T m_N}$$

und ihre Wellenlänge

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3k_B T m_N}} \\ &= \frac{6.10^{-34}}{\sqrt{3 \cdot 1,4 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \cdot 1,7 \cdot 10^{-27}}} \\ &\approx 10^{-10} \text{ m,} \end{aligned}$$

also wiederum etwa ein Angström, wie bei den 100 eV Elektronen aus Kapitel 6.2.3. Die hier diskutierten Neutronen haben jedoch eine kinetische Energie, die um einen Faktor $100/0,026=3846$ niedriger ist. Dieser wird kompensiert durch das Massenverhältnis

$$\frac{m_N}{m_e} \approx 1836.$$

Bei gleicher Energie ist der Impuls $p = \sqrt{2m\mathcal{E}_{kin}}$ von Neutronen um den Faktor

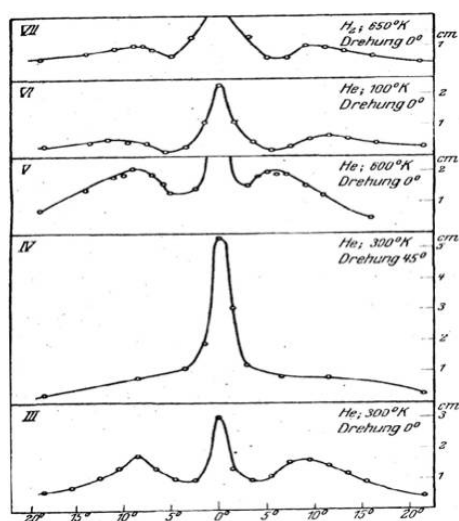
$$\sqrt{\frac{m_N}{m_e}} \approx \sqrt{1836} \approx 43$$

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

6.2.6 Schwerere und zusammengesetzte Teilchen

Welleneigenschaften kann man nicht nur Elementarteilchen zuordnen, sondern auch zusammengesetzten Teilchen wie Neutronen, Atome oder Moleküle. Gemäß Gleichung (6.1) wird jedoch mit zunehmender Masse die de Broglie Wellenlänge kürzer. Erste Versuche dazu wurden 1930 von Estermann und Stern¹ mit Helium durchgeführt.

¹I. Estermann and O. Stern, Z. Phys. 61 (1930) 95.

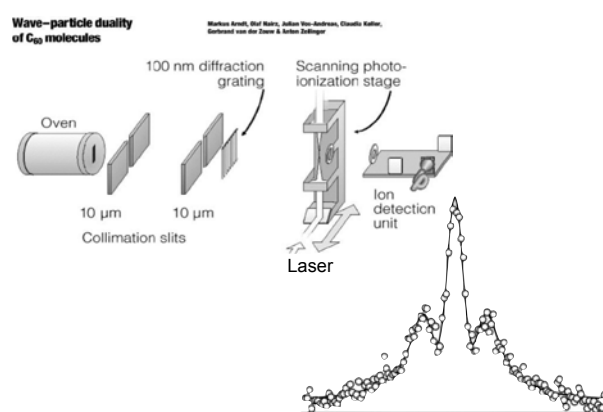
Abbildung 6.21: Beugung von He und H₂ an NaCl.

Ein Heliumatom hat eine Masse von $6,7 \cdot 10^{-27}$ kg, also ähnlich wie ein Neutron (4 mal), und damit bei thermischen Geschwindigkeiten die halbe Wellenlänge. Estermann und Stern haben die Beugungsmaxima bei der Reflexion an NaCl Kristallen gemessen. Wenn die Bragg-Bedingung erfüllt ist, findet man eine erhöhte Reflektivität, wie in Abb. 6.21 gezeigt. Da es sich um thermische Strahlen handelt, besitzen die Teilchen eine relativ breite Verteilung von Geschwindigkeiten und Wellenlängen und die Reflexionsmaxima sind relativ breit. Es ist aber möglich, die mittlere Wellenlänge der Strahlen zu ändern, indem man die Temperatur und / oder die Art des Atoms / Moleküls ändert. Dadurch werden die Positionen der Beugungsmaxima verschoben.

Der nächste Schritt ist von Atomen zu Molekülen. Auch dieser Schritt wurde bereits von Estermann und Stern durchgeführt, welche neben He auch die Beugung von molekularem Wasserstoff, H₂, untersuchten. An größeren Molekülen wurden erst vor wenigen Jahren Beugungseffekte nachgewiesen.

Dafür wurde ein Strahl von C₆₀ Molekülen zunächst kollimiert und dann auf ein Beugungsgitter geschickt. In einer Distanz von ca. 1 m wurden dann die Beugungsmaxima gemessen.

Werden aber die Massen größer, so werden die Wellenlängen extrem kurz. Bei einer Kugel, z.B., der wir der Einfachheit halber eine Masse von 1 kg

Abbildung 6.22: Doppelspaltexperiment mit C₆₀-Molekülen.

und eine Geschwindigkeit von 1 m/s zuzuordnen, wird der Impuls $p=1$ mkg/s und die de Broglie Wellenlänge

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

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

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

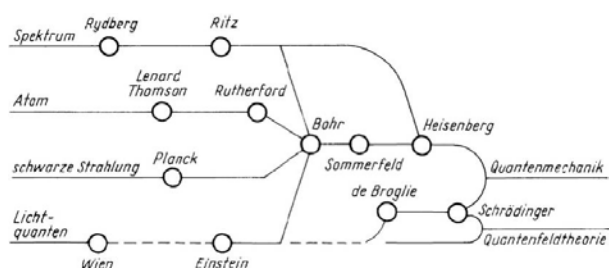


Abbildung 6.23: Schematische Darstellung der Entwicklung der Quantenmechanik.

6.3 Der quantenmechanische Formalismus

6.3.1 Historische Vorbemerkungen

Die oben dargestellten experimentellen Hinweise wurden im Laufe der ersten Jahrzehnte des 20. Jahrhunderts durch die neu entwickelte Theorie der Quantenmechanik überwunden. Abb. 6.23 fasst die konzeptionelle Entwicklung zusammen.



Abbildung 6.24: Teilnehmer der 1. Solvay-Konferenz.

Im Vergleich zu heute war es eine relativ kleine Zahl von Physikern, welche diese Theorie entwickelten. Abb. 6.24 zeigt einige von ihnen anlässlich der 1. Solvay Konferenz.

6.3.2 Grundlagen

Der Formalismus der Quantenmechanik verwendet

- Die Zustandsfunktionen Ψ : sie enthält alle Informationen über den Zustand des relevanten Systems.

- Operatoren A , welche auf die Zustandsfunktion wirken. Diese beschreiben physikalische Größen wie Ort, Impuls oder Energie.

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

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

wobei die Beziehungen $\mathcal{E} = \hbar\omega$, $p = \hbar k$ verwendet wurden.

Zu den charakteristischen Eigenschaften der Quantenmechanik gehört, dass sie linear ist. Das bedeutet, dass wenn 2 Zustände Ψ_1 und Ψ_2 erlaubte Zustände sind, dass immer auch die Überlagerung

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 \quad c_1^2 + c_2^2 = 1$$

ein erlaubter Zustand ist.

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

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

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

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

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

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

6.3.3 Quantenmechanische Messungen; Erwartungswerte

Aus den Anfängen der Quantenmechanik hat man einen Formalismus für die Beschreibung von Messungen entwickelt. Misst man eine Größe, die einem

Operator A entspricht, so ist der Erwartungswert für die Messung

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

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

Ist der Zustand Ψ_i ein Eigenzustand von A , gilt also

$$A\Psi_i = a_i\Psi_i$$

für einen Eigenwert a_i , so ist offenbar

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

Meist wählt man die Zustandsfunktionen Ψ_i normiert, $\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle = 1$. Die Eigenwerte von A sind die möglichen Resultate von dispersionsfreien Messungen. Ist das System vor der Messung nicht in einem Eigenzustand, so wird es durch die Messung in einen Eigenzustand gebracht. Eine Messung im Sinne des quantenmechanischen Messprozesses ist somit nicht ein einfaches "Hinschauen und Ablesen des Resultates", es beeinflusst im Allgemeinen den Zustand des Systems. Die Ausnahme ist nur der Fall wo sich das System bereits in einem Eigenzustand der Observablen (d.h. des Operators, welcher gerade gemessen wird) befindet.

Ein allgemeiner Anfangszustand kann als Linearkombination der Eigenzustände geschrieben werden,

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

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

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

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

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

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

6.3.4 Die wichtigsten Operatoren

Die wichtigsten Operatoren der Quantenmechanik sind Ort \hat{x} , Impuls \hat{p} und Energie $\hat{\mathcal{H}}$. Der Ortsoperator entspricht in der Ortsdarstellung einer Multiplikation mit \vec{x} , d.h.

$$\hat{x}\Psi = \vec{x}\Psi.$$

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

$$\hat{p} = \hbar\vec{k}$$

geschrieben werden kann. Dies kann verallgemeinert werden. Im eindimensionalen Fall erhält man die Wellenzahl k als

$$k = -i \frac{d}{dx} \frac{e^{ikx}}{e^{ikx}} = -i \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)}.$$

Damit wird der Impulsoperator in 3 Dimensionen

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

Der Energieoperator wird üblicherweise als $\hat{\mathcal{H}}$ (Hamiltonoperator) geschrieben². Man erhält ihn aus dem klassischen Ausdruck für die Energie eines Systems, indem man Ort und Impuls durch die entsprechenden Operatoren ersetzt. So ist der Hamiltonoperator eines freien Teilchens gegeben durch die kinetische Energie:

$$\mathcal{E}_{kin} = \frac{p^2}{2m}$$

²Das $\hat{\cdot}$ -Zeichen markiert Operatoren. Wenn keine Verwechslungsgefahr besteht wird es meist weggelassen

und somit

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{(-i\hbar\vec{\nabla})^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}.$$

6.3.5 Schrödingergleichung

Die zeitliche Entwicklung des Systems, d.h. die Zeitentwicklung von $\Psi(x,t)$ ist gegeben durch die Schrödingergleichung

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

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

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

$$\mathcal{H}\Psi_i(\vec{r},t) = \mathcal{E}_i\Psi_i(\vec{r},t). \quad (6.2)$$

Hier entspricht \mathcal{E}_i , der Eigenwert, der Energie des entsprechenden Zustandes. Aus Eigenzuständen erhält man Lösungen der Schrödingergleichung, indem man sie als Produkt eines räumlichen Anteils $\Psi_i(\vec{r})$ mit einem zeitabhängigen Phasenfaktor $e^{-i\mathcal{E}_i t/\hbar}$ schreibt:

$$\Psi_i(\vec{r},t) = \Psi_i(\vec{r})e^{-i\mathcal{E}_i t/\hbar}.$$

Die Phase ist somit linear in der Zeit und in der Energie \mathcal{E}_i des Zustandes. Setzt man diese Funktion in die ursprüngliche Gleichung (6.2) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Psi_i(\vec{r})e^{-i\mathcal{E}_i t/\hbar} &= i\hbar\Psi_i(\vec{r})\frac{\partial}{\partial t}e^{-i\mathcal{E}_i t/\hbar} \\ &= \mathcal{E}_i\Psi_i(\vec{r})e^{-i\mathcal{E}_i t/\hbar}. \end{aligned}$$

Division durch den zeitabhängigen Faktor $e^{-i\mathcal{E}_i t/\hbar}$ ergibt die "stationäre" oder zeitunabhängige Schrödingergleichung

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

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

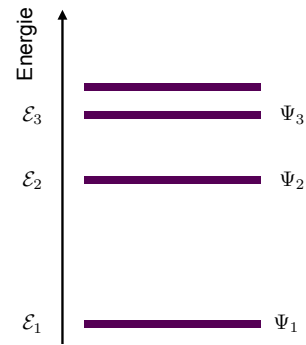


Abbildung 6.25: Energie-Eigenwerte und Eigenzustände.

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

Die zeitabhängige Schrödingergleichung gilt für alle quantenmechanischen Zustände und beschreibt die zeitliche Entwicklung eines Systems, welches sich in einem beliebigen Zustand befindet.

6.3.6 Heisenberg's Unschärferrelation

In Kap. 6.3.3 wurde gezeigt, dass nach einer idealen quantenmechanischen Messung des Impulses das Teilchen in eine ebene Welle kollabiert. Der Ort des entsprechenden Teilchens ist nicht scharf definiert, das Teilchen ist gleichmäßig über den gesamten Raum verteilt. Für einen allgemeinen Zustand sind weder Ort noch Impuls exakt bestimmt sind. Ist z.B.

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

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

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

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

Für eine andere Reihenfolge der Messungen ist der Endzustand i.A. unterschiedlich, sofern

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

Dann ist es nicht möglich, beide Größen mit beliebiger Genauigkeit zu messen. Der Operator $[\hat{A}, \hat{B}]$ wird als Kommutator (Vertauschungsoperator) bezeichnet.

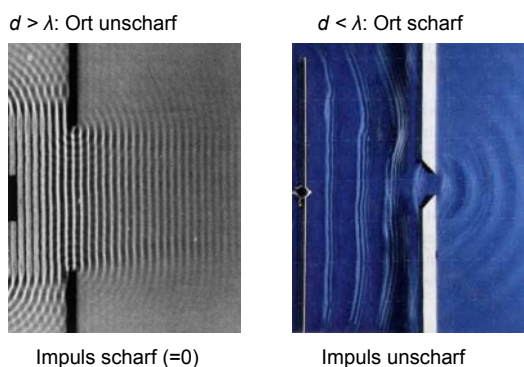


Abbildung 6.26: Unschärfe bei Beugung von Wellen.

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

Für Ort- und Impuls gilt

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

Für das mittlere Schwankungsquadrat der Messresultate gilt:

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

Dies wird als Heisenberg'sche Unschärferelation oder Unbestimmtheitsrelation bezeichnet. Sie wurde 1927 von Werner Heisenberg formuliert.

6.4 Eindimensionale Probleme

Während realistische Quantensysteme nur numerisch behandelt werden können, gibt es eine Reihe von einfachen Modellen, welche analytisch behandelt werden können und trotzdem relevante Resultate über reale Systeme liefern. In vielen Fällen reicht es, diese in einer Dimension zu behandeln.

6.4.1 Der harmonische Oszillator

Ein wichtiges Beispiel für ein quantenmechanisches System in einer Dimension ist der harmonische Oszillator. Er beschreibt zum Beispiel die Schwingung von Atomen in Molekülen und Festkörpern, aber auch alle anderen schwingungsfähigen Systeme in der Nähe ihres Potenzialminimums.

Wie in der klassischen Physik ist der harmonische Oszillator gegeben durch ein quadratisches Potenzial

$$V(x) = ax^2.$$

Unter Berücksichtigung der kinetischen Energie erhält man den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{ho} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Setzt man dieses Potenzial in die Schrödingergleichung ein, so findet man, dass die Energien durch den Ausdruck

$$\mathcal{E}_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$$

gegeben sind, d.h. sie sind äquidistant und der Zustand niedrigster Energie liegt um ein halbes Quant über dem Minimum der Potenzialkurve. Die Energiedifferenz $h\nu$ hängt ab von der Krümmung des Potentials und von der Masse des bewegten Teilchens. Dies ist einer der wichtigsten Unterschiede zwischen der klassischen und der Quantenmechanik. Die Frequenz ν ist die Schwingungsfrequenz

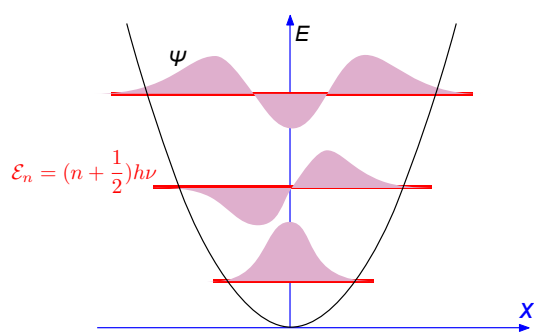


Abbildung 6.27: Energien und Eigenzustände (Realteile) des harmonischen Oszillators.

des entsprechenden Systems, z.B. die Frequenz einer Molekülschwingung.

Abbildung 6.27 zeigt eine graphische Darstellung der Eigenzustände des harmonischen Oszillators. Im Grundzustand ist das Maximum der Zustandsfunktion in der Mitte des Potentials. Der erste angeregte Zustand weist einen Nulldurchgang auf, der zweite zwei etc.

6.4.2 Teilchen im Potentialtopf

Ein weiteres einfaches Beispiel ist gegeben durch das Potenzial

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 < x < L \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die potenzielle Energie verschwindet somit im Bereich des "Kastens" $[0, L]$ und ist unendlich außerhalb. Man bezeichnet es deshalb als Teilchen im Potentialtopf (particle in a box). Dies ist ein wichtiges, wenn auch idealisiertes System, das eine gute Näherung für viele reale Systeme darstellt. So werden in der Halbleiterphysik häufig Elektronen in sogenannten Potentialtöpfen gebracht, u.a. um damit Halbleiterlaser herzustellen. Auf ähnliche Weise wird Licht in Glasfasern geführt, z.B. bei der Datenübertragung. Dies ist auch ein gutes Modell für die Bindung von gewissen Elementarteilchen in Atomkernen.

Der Hamiltonoperator für dieses System enthält wie

beim freien Teilchen kinetische Energie, sowie zusätzlich den Beitrag der potentiellen Energie

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{2m} + U(x).$$

Da das Potential außerhalb der Mulde unendlich groß ist, würde eine Komponente der Wellenfunktion in diesem Bereich zu einer unendlich hohen Energie führen. Wir interessieren uns aber nur für Zustände mit endlicher Energie, so dass wir fordern müssen, dass die Zustandsfunktion außerhalb der Mulde verschwindet. Aus Stetigkeitsgründen gilt damit auch

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0. \quad (6.3)$$

Damit können wir unsere Betrachtungen auf den Bereich der Potentialmulde $0 < x < L$ beschränken und die Gegenwart des Potentials über die Randbedingungen (6.3) berücksichtigen. Das Teilchen ist somit gebunden, es muss sich mit Wahrscheinlichkeit 1 innerhalb des Potentialtopfs aufhalten:

$$\int_0^L dx |\Psi(x)|^2 = 1.$$

Innerhalb des Potentialtopfs verhält sich das System wie ein freies Teilchen, welches durch eine ebene Welle beschrieben wird. Mit der Randbedingung (6.3) erhält man folgende Funktionen als Lösung der Schrödingergleichung:

$$\Psi_n(x, t) = C_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-i\omega_n t} \quad n = 1, 2, \dots$$

Der Wellenvektor ist somit $k = n\pi/L$ und die Energie ist gleich der kinetischen Energie

$$\mathcal{E}_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}.$$

Die Energie steigt somit quadratisch mit dem Index n . Die Zustandsfunktionen weisen mit zunehmender Energie eine größer werdende Zahl von Nulldurchgängen, so genannten Knoten auf. In Abb. 6.28 sind jeweils die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten dargestellt. Mit zunehmender Energie werden die Wellenlängen kürzer, was einem zunehmenden Impuls und

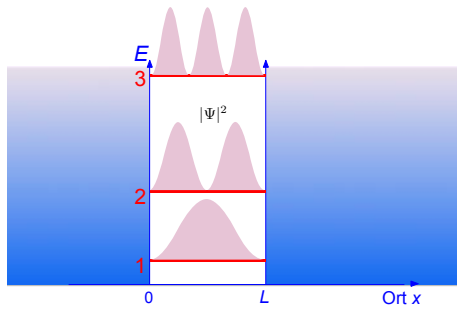


Abbildung 6.28: Die 3 niedrigsten Zustände für ein Teilchen in einem Potentialtopf.

damit zunehmender kinetischen Energie entspricht. Interessant ist auch, dass damit die Zustandsfunktion des Teilchens in Bereiche aufgeteilt wird, zwischen denen die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu finden, verschwindet. Solche Zustände, in denen das Elektron sich nicht mehr frei bewegen kann, sondern auf einen lokalen Bereich beschränkt ist, werden als lokalisierte Zustände bezeichnet.

6.4.3 Anwendung: Halbleiter-Quantenstrukturen

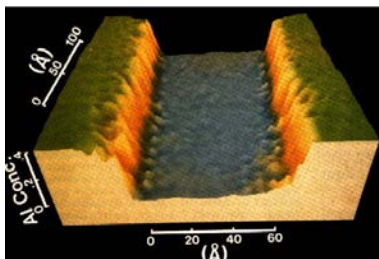


Abbildung 6.29: GaAs Quantenfilm.

Obwohl das Teilchen im Potentialtopf zunächst nur ein mathematisch angenehmes Modellsystem ist, kann man solche Systeme heute in guter Näherung verwirklichen. Zu den wichtigsten Beispielen gehören Elektronen in Halbleiter-Schichtstrukturen.

Indem man die Zusammensetzung auf atomarer Skala kontrolliert, kann man ein effektives Potenzial für die Elektronen erzeugen, welches sie z.B. in einen sog. "Quantentopf" einschließt. Solche Strukturen sind inzwischen bei der Herstellung von Lasern sehr wichtig geworden. Natürlich stimmt das

Modell nicht exakt, aber es stellt eine erste Näherung dar. Die wichtigste Abweichung ist, dass das Potenzial außerhalb des 'Topfs' endlich ist.

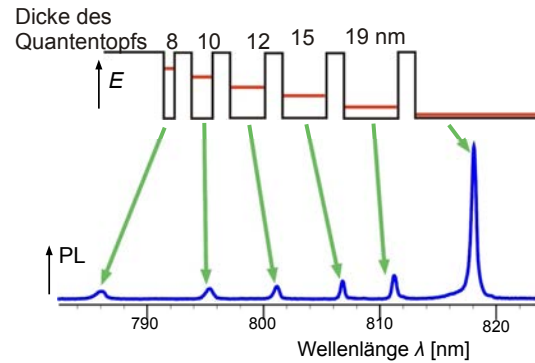


Abbildung 6.30: Photolumineszenz einer Probe mit 5 unterschiedlich dicken Quantentöpfen.

Vergleicht man Quantentöpfe mit unterschiedlicher Dicke, so erwartet man, dass die Energie der Elektronen etwa proportional zu $1/L^2$ ansteigt. Dies wird durch experimentelle Daten bestätigt. In der Industrie wird dieser Effekt benutzt, um die Wellenlänge von Halbleiterlasern anzupassen. Abb. 6.30 zeigt entsprechende Messdaten. Gemessen wird hier die Energiedifferenz zwischen Elektronen im Leitungsband und dem oberen Rand des Valenzbandes. Dabei wird die Elektronenenergie um die Grundzustandsenergie erhöht. Man kann die Grundzustandsenergie für einen bestimmten Quantenfilm bestimmen, indem man die Frequenz der emittierten Photonen vergleicht mit Frequenz der Photonen, die vom Volumen-Material emittiert werden (Linie ganz rechts in Abb. 6.30). Das Volumenmaterial entspricht dem Grenzfall $L \rightarrow \infty$.