

Experimentalphysik III

Wellen und Quanten

Technische Universität Dresden
Fachrichtung Physik
Prof. Dr. K. R. Schubert

WS 2004/05

erste Version in LaTeX gesetzt von H. Reichardt und G. Schmidt, 1998-99

Version 5.20, 15/2/05

Dieses Vorlesungsskript ist nicht vollständig, es fehlen Teile des ersten Kapitels Wellenoptik. Das Skript ist nur für die Hörer meiner Vorlesung Experimentalphysik III im WS 2004/05 bestimmt. Ich werde während der Vorlesung kleinere Korrekturen am Skript vornehmen und bitte jeden Studierenden, mich auf Tippfehler, Unklarheiten u. a. hinzuweisen. Bei Hakon Reichardt und Gernot Schmidt bedanke ich mich herzlich für die aufwendige und kompetente Umsetzung meines handschriftlichen Skriptes in LaTeX, insbesondere auch für die Abbildungen.

Inhaltsverzeichnis

1	Wellenoptik	1
1.1	Interferenzerscheinungen	2
1.2	Kohärenzbedingungen	5
1.3	Interferenzen an planparallelen Grenzflächen	5
1.4	Phasensprung am optisch dichteren Medium	7
1.5	Beugungserscheinungen	9
1.6	Fraunhofersche Beugung am Einzelspalt	9
1.7	Fraunhofersche Beugung an der Kreisblende	11
1.8	Auflösungsvermögen optischer Instrumente	11
1.9	Beugungsgitter	11
1.10	Holographie	11
1.11	Das Michelson-Interferometer	12
1.12	Dopplereffekt beim Licht und Aberration	12
1.13	Komplexe Schreibweise des Lichtes	12
1.14	Reflexionsgitter und Fabry-Perot-Interferometer	13
2	Lichtquanten	17
2.1	Energie, Impuls, Masse und Drehimpuls elektromagnetischer Wellen	18
2.2	Der Photoeffekt	19
2.3	Erklärung des Photoeffektes durch EINSTEIN	22
2.4	Photodioden und Photovervielfacher	23
2.5	Elektrizität aus Sonnenlicht?	24
2.6	Bremsstrahlung	25
2.7	Wellenlängenmessung und Röntgenspektrometer	26
2.8	Bremstrahlungsspektren und das Gesetz von DUANE und HUNT	29
2.9	Charakteristische Röntgenstrahlung	32
2.10	Impulserhaltung bei Photoeffekt und Bremsstrahlung	35
2.11	Der COMPTON-Effekt	37
2.12	RAYLEIGH- und THOMSON-Streuung	40
2.13	Der Wirkungsquerschnitt	43
2.14	Der differentielle Wirkungsquerschnitt beim COMPTON-Effekt	45
2.15	Die Paarbildung	46
2.16	Die Paarvernichtung	47
2.17	Photoeffekt im Röntgengebiet	48
2.18	Zusammenfassung zur Wechselwirkung von Photonen mit Materie	49
2.19	Die schwere Masse des Photons	51

2.20	Lichtablenkung am Sonnenrand	53
2.21	Interferenz von Photonen	54
2.22	Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Interferenz	56
3	Wellen und Wellenpakete	58
3.1	Fourieranalyse periodischer Schwingungen	58
3.2	Beispiele von Fourieranalysen und -synthesen	60
3.3	Amplituden- und Intensitätsspektrum	64
3.4	Aperiodische Schwingungen und das Fourierintegral	66
3.5	Beispiele zum Fourierintegral	67
3.6	Die Unschärferelation zwischen Zeit und Frequenz	72
3.7	Wellen in einer Raumdimension	74
3.8	Wellen in drei Raumdimensionen	76
3.9	Elektromagnetische Wellen als Beispiel	77
3.10	Harmonische Wellen und Fourieranalyse	78
3.11	Dispersionsbehaftete Wellen	80
3.12	Wellenpakete	82
3.13	Die Unschärferelation zwischen Ort und Wellenlänge	86
4	Materiewellen	87
4.1	DE BROGLIES Hypothese	87
4.2	Verhalten bei Lorentztransformationen	88
4.3	Wie groß sind DE BROGLIES Wellenlängen?	89
4.4	Das DAVISSON-GERMER-Experiment	90
4.5	Demonstration des Experimentes von G. P. THOMSON	93
4.6	Das Doppelspaltexperiment	94
4.7	Wellenfunktionen und die HEISENBERGSche Unschärferelation	94
4.8	Das Auseinanderlaufen von Wellenpaketen	97
4.9	Drei- und vierdimensionale Wellenpakete	100
4.10	Beispiele für die HEISENBERGSche Unschärferelation	101
	4.10.1 Ortsbestimmung eines ruhenden Teilchens	101
	4.10.2 Beugung am Doppelspalt	103
	4.10.3 Beugung am Einzelspalt	104
4.11	Beugungstheorie mit Fourierintegralen	105
4.12	Die Größe der Atome	107
5	Die SCHRÖDINGER-Gleichung	110
5.1	Wellengleichungen für DE BROGLIE-Wellen	110
5.2	Nichtrelativistische Näherung	111
5.3	Teilchenbewegung mit Kräften	112
5.4	Die zeitunabhängige Schrödingergleichung	114
5.5	Die Potentialstufe mit $W > V_0$	114
5.6	Die Potentialstufe mit $W < V_0$	117
5.7	Potentialwall und Tunneleffekt	118
5.8	Beispiele für den Tunneleffekt	121
5.9	GAMOVs Theorie des Alpha-Zerfalls	122
5.10	Gebundene Zustände im Rechteckpotential	125

5.11 Das unendlich hohe Rechteckpotential	127
5.12 Der Potentialkasten in drei Dimensionen	130
5.13 Die Nullpunktsenergie	132
5.14 Die Parität	134
5.15 Der lineare harmonische Oszillator	135
5.16 Schwingungen zweiatomiger Moleküle	141

Kapitel 1

Wellenoptik

Die Beschreibung des Lichtes kennt in der Physik drei voneinander recht verschiedene Konzepte: Lichtwellen, Lichtstrahlen und Lichtquanten. Was Sie im Rahmen dieses Vorlesungszyklus als erstes vertieft kennengelernt haben, ist das Konzept der Lichtwelle. Maxwells Gleichungen von 1873 enthalten elektromagnetische Wellen als Lösungen. Im Vakuum heißen die einfachsten dieser Lösungen

$$\begin{aligned}\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}_0 \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) = \vec{E}_0 \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - ckt) \\ \vec{B} = \vec{B}(\vec{r}, t) &= (\vec{u} \times \frac{\vec{E}_0}{c}) \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - ckt) .\end{aligned}\quad (1.1)$$

Dies sind ebene monochromatische Wellen mit unendlicher Ausdehnung in $\vec{r} = (x, y, z)$ und t . Darin ist c die Lichtgeschwindigkeit (im Vakuum); und die Amplitude \vec{E}_0 der elektrischen Feldstärke sowie der Wellenzahlvektor $\vec{k} = \vec{u} \cdot 2\pi/\lambda$ sind fast beliebig. $|\vec{E}_0|$ und Wellenlänge λ können beliebige Werte annehmen, aber \vec{E}_0 und \vec{k} müssen aufeinander senkrecht stehen. Frequenz ν der Welle sowie Betrag und Richtung der magnetischen Feldstärkenamplitude \vec{B}_0 sind durch \vec{E}_0 und \vec{k} festgelegt. Es gilt, wie in obiger Form schon geschrieben

$$\begin{aligned}\omega = 2\pi\nu &= c \cdot k , \\ \nu &= c/\lambda , \\ |\vec{B}_0| &= |\vec{E}_0|/c , \\ \vec{E}_0, \vec{B}_0, \vec{k} &= \text{rechtshändiges orthogonales Dreibein} .\end{aligned}\quad (1.2)$$

Elektromagnetische Wellen wurden experimentell 1888 von Heinrich Hertz entdeckt, und daß sichtbares Licht eine elektromagnetische Welle mit irgendeiner Wellenlänge zwischen 400 nm und 800 nm ist, wurde in den folgenden Jahren deutlich. Die Wellennatur des Lichtes ist viel länger bekannt, C. Huygens und R. Hooke haben um 1700 die Grundlagen dazu erkannt und erarbeitet, J. Fresnel und T. Young haben um 1800 die ersten einfachen, überzeugenden und vor allem quantitativen Experimente dazu vorgeführt und im Wellenbild beschrieben. Mit diesen beiden Experimenten beginnt die Wellenoptik, mit dem Fresnelschen Biprisma und dem Youngschen Doppelspalt.

Nur noch eine Vorbemerkung: die geometrische Optik, die Sie als letztes Kapitel in Physik II studiert haben, arbeitet mit Lichtstrahlen, die sich geradlinig

im Vakuum oder in homogener durchsichtiger Materie ausbreiten und nur an Grenzflächen zwischen zwei Materialien ihre Richtung ändern können. Die Wellennatur tritt dabei überhaupt nicht hervor. Im Wellenbild sind Lichtstrahlen räumlich begrenzte ebene Wellen, die durch Blenden realisiert werden können.

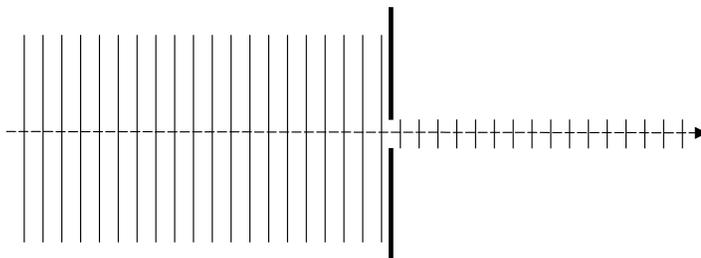


Abbildung 1.1: Konzept des Lichtstrahls. Eine Blende absorbiert den größten Teil einer ebenen Lichtwelle und lässt den ausgeblendeten Teil ungehindert in gleicher Richtung weiterlaufen.

Das Konzept des Lichtstrahls in Abb. 1.1 ist eine Näherung. Eine kreisförmig begrenzte Welle

$$\vec{E} = \begin{cases} E_0 \vec{u}_x \cos(kz - \omega t) & , \sqrt{x^2 + y^2} \leq R \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (1.3)$$

erfüllt die Maxwell'schen Gleichungen nicht. Am Rand $\sqrt{x^2 + y^2} = R$ wäre $\text{div} \vec{E} \neq 0$, das darf nicht sein. Die Feldstärke \vec{E} muß, und ebenso die magnetische Feldstärke \vec{B} , in Übereinstimmung mit den Maxwell'schen Gleichungen in der Nähe der Ränder auf komplizierte Weise von maximaler Auslenkung auf Null absinken. Die Natur schafft das durch ein Phänomen, das wir Beugung nennen. Beugung ist eine Folge von Interferenz, beides sind zentrale Begriffe der Wellenoptik. In der geometrischen Optik werden Interferenz und Beugung vernachlässigt. Im Gebrauch optischer Instrumente spielen sie aber eine entscheidende Rolle. Sie bestimmen das Auflösungsvermögen der Instrumente, wie in Abschnitt 1.8 gezeigt wird.

1.1 Interferenzerscheinungen

In der Vorlesung zeigen wir das Fresnelsche Biprisma-Experiment. Ein Doppelspiegel (zwei Spiegel nebeneinander mit eingeschlossenem Winkel nahe 180°) hat den gleichen Effekt und eignet sich besser zum Vorrechnen, da hier die zu betrachtende Lichtwelle nur durch ein Medium (Vakuum bzw. Luft) läuft und nicht durch zwei (Luft und Glas). Abb. 1.2 zeigt den Versuchsaufbau mit dem Fresnelschen Doppelspiegel. Das von der Lichtquelle Q ausgehende Licht trifft auf beide Hälften des Spiegels und wird so reflektiert, dass auf dem Schirm S ein Bereich entsteht, in den das Licht auf zwei verschiedenen Wegen gelangen kann. In diesem Bereich trifft das Licht so ein, als ob es ohne Spiegel aus den zwei virtuellen Quellen Q_1 und Q_2 kommen würde. Wären Q_1 und Q_2 zwei reelle Quellen, wäre die Intensitätsverteilung I auf dem Schirm einfach

$$I = I(P) = I_1(P) + I_2(P) \quad , \quad (1.4)$$

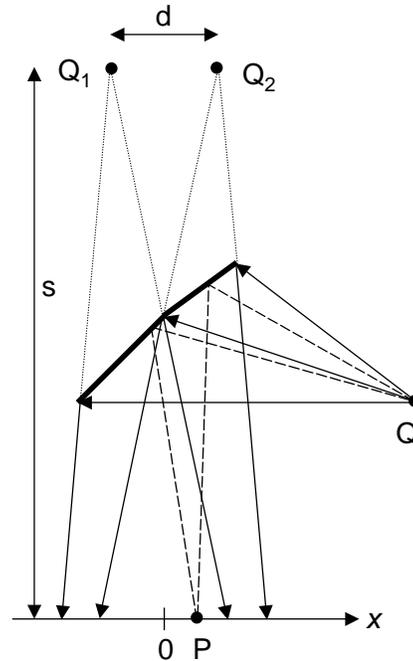


Abbildung 1.2: Fresnelscher Doppelspiegel. Das Licht gelangt von der Quelle Q zum Schirmpunkt P auf zwei verschiedenen Wegen. Der Gangunterschied Δ zwischen den beiden Weglängen führt zu konstruktiver und destruktiver Interferenz des Lichts auf dem Schirm.

wobei P ein Punkt im doppelt beleuchteten Bereich ist. Das Licht kommt aber aus nur einer Quelle, als Welle auf zwei verschiedenen Wegen, und deshalb addieren sich in P nicht die Intensitäten, sondern die Vektoren \vec{E} und \vec{B} . Da \vec{B} aus \vec{E} eindeutig folgt, reicht es \vec{E} zu betrachten, d. h.

$$\vec{E} = \vec{E}(P) = \vec{E}_1(P) + \vec{E}_2(P) . \quad (1.5)$$

Es reicht auch, nur eine Komponente zu nehmen. Im folgenden setzen wir $E_x \propto \psi$ und rechnen mit dieser "Auslenkung der Lichtwelle" ohne dabei an elektrische Felder oder an Maxwell zu denken,

$$\psi = \psi(P) = \psi_1(P) + \psi_2(P) . \quad (1.6)$$

Den Zusammenhang zwischen Intensität und Auslenkung holen wir aus den Maxwell'schen Gleichungen, er ist aber viel allgemeiner. Intensität ist der zeitliche Mittelwert der Energie W pro Fläche A und Zeit t , mit Dimension W/m^2 . Bei Ausbreitung des Lichtes in z -Richtung im Vakuum gilt

$$I = \frac{d\bar{W}}{dt dA} = \frac{d\bar{W}}{dV} \cdot \frac{dz}{dt} = \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 \overline{E^2} + \frac{\overline{B^2}}{\mu_0} \right) \cdot c = \epsilon_0 \cdot c \cdot \overline{E^2} . \quad (1.7)$$

Um den Faktor $\epsilon_0 c$ zu sparen, setzen wir, wenn \vec{E} in x -Richtung schwingt,

$$\psi = \sqrt{\epsilon_0 c} \cdot E_x , \quad I = \overline{\psi^2} . \quad (1.8)$$

Damit gilt für die Überlagerung der zwei Teilwellen in P

$$I(P) = \overline{[\psi_1(P) + \psi_2(P)]^2} = I_1(P) + I_2(P) + 2 \cdot \overline{\psi_1(P) \cdot \psi_2(P)} . \quad (1.9)$$

Zusätzlich zu den zwei Einzelintensitäten tritt das zeitgemittelte Produkt aus ψ_1 und ψ_2 , das wir den Interferenzterm I_{12} nennen. Sein Wert hängt vom Gangunterschied Δ der beiden Teilwellen ab, die im Punkt P miteinander interferieren. Damit ist im Vakuum einfach der Wegunterschied

$$\Delta = \overline{Q_2 P} - \overline{Q_1 P} \quad (1.10)$$

gemeint. Auf den Fall zweier Medien, z. B. Glas und Luft, kommen wir im Abschnitt 1.3 zurück. In nur Luft gilt

$$\psi_1 = \psi_0 \cdot \cos(kr - \omega t) , \quad \psi_2 = \psi_0 \cdot \cos(kr + k\Delta - \omega t) . \quad (1.11)$$

$$I_1 = I_2 = \psi_0^2 \cdot \overline{\cos^2(kr - \omega t)} = \psi_0^2/2 , \quad (1.12)$$

$$I_{12} = 2 \cdot \psi_0^2 \cdot \cos(k\Delta) \cdot \overline{\cos^2(kr - \omega t)} = \psi_0^2 \cdot \cos(k\Delta) = \psi_0^2 \cdot \cos \frac{2\pi\Delta}{\lambda} , \quad (1.13)$$

wobei wir $\cos \alpha \cdot \cos(\alpha + \beta) = \cos^2 \alpha \cos \beta - \cos \alpha \sin \alpha \sin \beta$, $2 \cos \alpha \sin \alpha = \sin 2\alpha$ und $\overline{\sin 2(kr - \omega t)} = 0$ verwendet haben. Damit wird

$$I = I_1 + I_2 + I_{12} = 2 I_1 \left(1 + \cos \frac{2\pi\Delta}{\lambda} \right) = 4 I_1 \cos^2 \frac{\pi\Delta}{\lambda} . \quad (1.14)$$

Diese Intensitätsverteilung ist eine regelmäßige Folge von Maxima, dort wo der Gangunterschied Δ ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ beträgt, und von Nullstellen, dort wo $\Delta = (m + 1/2) \cdot \lambda$ mit $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$. Für den Gangunterschied gilt

$$\Delta = \sqrt{s^2 + (d/2 + x)^2} - \sqrt{s^2 + (d/2 - x)^2} \approx d \cdot x/s , \quad (1.15)$$

wobei d der Abstand zwischen den zwei virtuellen Quellen Q_1 und Q_2 ist, s der Abstand der Quellen zum Schirm, und x die Koordinate von P. Auf dem Schirm sehen wir eine regelmäßige Folge von parallelen Streifen mit einer Intensitätsverteilung, die in x sinus-förmig variiert. Wie aus den beiden letzten Gleichungen folgt, ist die Intensitätsverteilung

$$I = 4 I_1 \cos^2 \frac{\pi d x}{\lambda s} . \quad (1.16)$$

Die Maxima der Intensität erscheinen bei $x = ns\lambda/d$. Der Abstand zweier Intensitätsmaxima beträgt

$$\Delta x = s \cdot \lambda/d . \quad (1.17)$$

Viele Streifen lassen sich nur dann beobachten, wenn das Licht monochromatisch ist, d.h. aus Wellen nur einer Wellenlänge besteht. Gl. 1.17 erlaubt dann eine Wellenlängenmessung. Im weißen Licht erscheint der zentrale Streifen weiß, rechts und links davon wird es dunkel, dann wird es farbig von blau bis rot, und dann sehr bald nur noch grau. In der Vorlesung wird das Interferenzphänomen auch mit Wasserwellen vorgeführt, wobei zwei Stifte, die mit gleicher Frequenz und gleicher Phase ins Wasser eintauchen, die kohärenten Quellen zweier Kreiswellen sind.

1.2 Kohärenzbedingungen

Im Fall des Fresnelschen Doppelspiegels oder Biprismas führt Addition von Maxima und Minima der elektrischen Feldstärke nur dann zu Verstärkung und Auslöschung, d. h. zu Interferenzerscheinungen, wenn die beiden interferierenden Teilwellen gleichzeitig am Beobachtungsort vorhanden sind. Lichtwellen sind aber nicht unendlich ausgedehnt, sondern können als "Wellenzüge" endlicher Länge angesehen werden. Interferenzmuster treten nur solange auf, wie sich die beiden Teilwellen kohärent überlagern, d. h. solange der Gangunterschied Δ kleiner ist als die Länge L der Wellenzüge:

$$\Delta < L. \quad (1.18)$$

Ist $\Delta > L$, haben wir einfach $I = I_1 + I_2$.

Als zweite Kohärenzbedingung muss gelten, dass die Lichtquelle nicht zu ausgedehnt ist. Andernfalls, wieder im Falle des Doppelspiegels als Beispiel, interferiert ein Punkt der Quelle Q_1 mit einer Hälfte der Quelle Q_2 konstruktiv, mit der anderen Hälfte destruktiv, und der Gesamtinterferenzterm wird Null. An der Stelle x des Beobachtungsschirmes trifft das im n -ten Streifen zu, wenn

$$x = n \cdot \frac{s\lambda}{d-a} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \frac{s\lambda}{d+a}, \quad (1.19)$$

wobei a die Ausdehnung der Quelle angibt. Dieses Verschwinden des n -ten Interferenzstreifens an der Stelle x tritt ein, wie sich aus der Lösung obiger Gleichung ergibt, wenn $n = d/4a$. Mit $x = ns\lambda/d$, s. Gl. 1.17, heisst das $a = s\lambda/4x$. Daraus folgt, Interferenzen an der Stelle x sind sichtbar für alle Quellenausdehnungen mit

$$a < \frac{s\lambda}{4x}. \quad (1.20)$$

Je weiter in x sich die Interferenzstreifen ausdehnen sollen, um so kleiner muss die Quellengrösse a sein.

1.3 Interferenzen an planparallelen Grenzflächen

In der Verlesung werden streifen- und kreisförmige Interferenzmuster mit monochromatischem Licht gezeigt, wobei Gasentladungen als Lichtquelle dienen und präzise gearbeitete Glaskörper als Erzeuger von Gangunterschieden. Polychromatisches (weisses) Licht aus einer Kohlebogenlampe erzeugt regenbogenartig bunte Streifen beim Durchgang des Lichts durch eine dünne Haut aus Seifenlösung.

All diesen Interferenzphänomenen liegt das Prinzip der Abb. 1.3 zugrunde. Licht gelangt auf zwei verschiedenen Wegen von der Quelle zum Empfänger, und im Empfänger überlagern sich die zwei Lichtwellen kohärent, weil zwischen den beiden Weglängen ein Gangunterschied besteht. An Grenzflächen zwischen zwei Medien mit verschiedenem Brechungsindex $n_1 \neq n_2$ dürfen wir Weg- und Gangunterschied nicht verwechseln. Es gilt:

$$\text{Gang} = \text{Weg} \cdot n. \quad (1.21)$$

Begründung: Im Vakuum gilt $\omega/k = c$, in Medien mit Brechungsindex n aber $\omega/k = v = c/n$. Mit Ausbreitungsrichtung x schreiben wir eine Welle in diesem Medium als

$$\psi = \psi_0 \cos(kx - \omega t) = \psi_0 \cos\left[\omega\left(\frac{nx}{c} - t\right)\right]. \quad (1.22)$$

Da die Frequenz des Lichts bei Übergang von einem Medium ins andere gleich bleibt, ändert sich die Phase der Welle mit $n \cdot x$, und wir nennen $n \cdot \Delta x$ den Gangunterschied Δ .

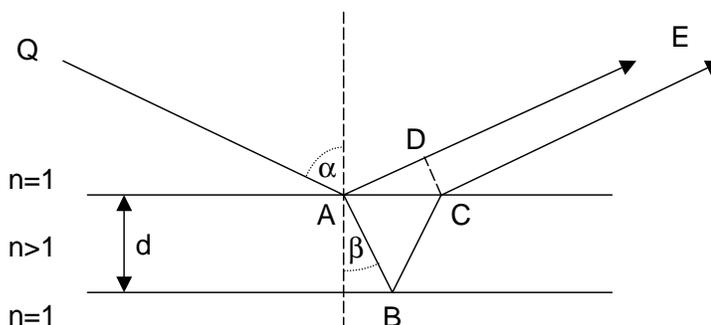


Abbildung 1.3: Zweistrahlinterferenz an einer Glasplatte. Das Licht läuft auf zwei verschiedenen Wegen von der Quelle Q zum Empfänger E . Der Gangunterschied auf beiden Wegen führt zur Interferenz in E .

In der Glasplatte in Abb. 1.3 läuft das Licht von der Quelle Q auf folgenden zwei Wegen zum Empfänger E ¹: Weg 1 = \overline{QAE} mit Reflexion am dichteren Medium in A ; Weg 2 = \overline{QABCE} mit Brechung in A , Reflexion am dünneren Medium in B und Brechung in C . Die Dicke der Platte ist d , der Einfallswinkel ist α , und für den Gangunterschied beider Wege gilt

$$\begin{aligned} \Delta &= 2 \cdot n \cdot \overline{AB} - \overline{AD} + \lambda/2 \\ &= 2n \cdot \overline{AB} - \overline{AC} \cdot \sin \alpha + \lambda/2 \\ &= \overline{AB} (2n - 2 \sin \alpha \sin \beta) + \lambda/2 \\ &= \frac{2d}{\cos \beta} \left(n - \frac{\sin^2 \alpha}{n} \right) + \lambda/2 \\ &= \frac{2d}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}} (n^2 - \sin^2 \alpha) + \lambda/2 \\ &= 2d \cdot \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha} + \lambda/2, \end{aligned} \quad (1.23)$$

wobei wir das Snelliussche Brechungsgesetz $\sin \alpha = n \cdot \sin \beta$ verwendet haben. Der zusätzliche Gangunterschied von einer halben Wellenlänge $\lambda/2$ entsteht durch die Reflexion am dichteren Medium, s. Abschnitt 1.4.

¹ Q und E werden im Unendlichen angenommen. Befinden sie sich im Endlichen, lässt sich mit Sammellinsen nachhelfen. Die Argumente bleiben dann aber die gleichen.

Wenn der gesamte Gangunterschied Δ ein ganzzahliges Vielfaches der Vakuum-Wellenlänge beträgt, $\Delta = n \cdot \lambda$, interferieren die beiden Strahlen konstruktiv, die Intensität in E hat ein Maximum. Wenn $\Delta = (n + 1/2) \cdot \lambda$, interferieren sie destruktiv und in E ist es dunkel. Durch Variation von α entsteht abwechselndes Hell und Dunkel.

Praktische Verwendung finden diese Interferenzen, um Glasoberflächen, z. B. Brillengläser oder Objektive von Photoapparaten, zu entspiegeln, zu "vergüten". Aufdampfen dünner Schichten mit geeignetem Brechungsindex und geeigneter Dicke führt zur Auslöschung des reflektierten Lichts. Damit verbunden ist ein Maximum der durchgehenden Lichtintensität. In gewissen Grenzen gelingt Vergüten auch für weisses Licht, durch mehrere Schichten mit verschiedener Dicke oder verschiedenem Brechungsindex. Kennt man die Wellenlänge des feindlichen Radars unter Wasser, lassen sich auch U-Boote unsichtbar machen.

1.4 Phasensprung am optisch dichteren Medium

Die Herleitung des im letzten Abschnitt auftretenden Phasensprungs einer reflektierten Welle benutzt die elektromagnetische Natur der Lichtwellen. Wie in Abb. 1.4 skizziert, soll eine ebene Welle in Richtung \vec{k}_1 auf eine Grenzfläche zulaufen, die senkrecht auf \vec{k}_1 steht. Die Feldstärkevektoren \vec{E}_1 und \vec{B}_1 liegen in Ebenen parallel zur Grenzfläche. Die Brechungsindizes seien n_1 vor und n_2 nach der Grenzfläche.

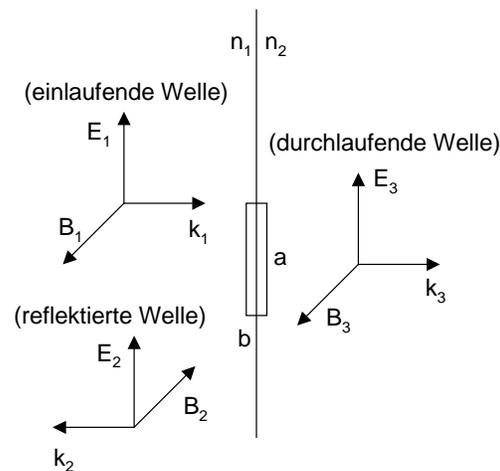


Abbildung 1.4: Herleitung des Phasensprungs einer elektromagnetischen Welle an einer Grenzfläche

Die durchlaufende Welle hat nach dem Brechungsgesetz mit $\alpha = \beta = 0$ die gleiche Richtung wie die einlaufende. Ein Teil der Welle wird reflektiert, bei $\alpha = 0$ ist $k_2 = -k_1$. Für Reflexion und Transmission sind mikroskopisch die Ladungsträger (Elektronen) in der Nähe der Grenzfläche verantwortlich. Die elektrische Feldstärke regt diese zum Mitschwingen an, und die von den schwingenden Elektronen wieder abgestrahlte Feldstärke hat die gleiche Richtung, des-

halb der Ansatz $\vec{E}_1 \parallel \vec{E}_2 \parallel \vec{E}_3$. Wegen $k_2 = -k_1$ und der Rechtshändigkeit des Dreibeins $(\vec{E}, \vec{B}, \vec{k})$ hat \vec{B}_2 die entgegengesetzte Richtung wie \vec{B}_1 . Jetzt betrachten wir einen geschlossenen rechteckigen Weg mit Seiten a und b wie in Abb. 1.4 gezeichnet. Nach den Maxwell'schen Gleichungen ist

$$\oint \vec{E} \, d\vec{r} = -\frac{\partial}{\partial t} \int \int \vec{B} \, d\vec{A} ,$$

$$\oint \vec{B} \, d\vec{r} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \int \int \vec{E} \, d\vec{A} . \quad (1.24)$$

Die zweite Gl. enthält keine Stromdichte \vec{j} , weil die Ladungsträger ortsfest sind und keine Ströme fließen. Mit $b \rightarrow 0$ werden die Flächenintegrale auf der rechten Seite null, und für die Feldstärken und deren Amplituden E_{0i} , B_{0i} gilt

$$a \cdot (E_1 + E_2) - a \cdot E_3 = 0 ,$$

$$E_{01} + E_{02} - E_{03} = 0 , \quad (1.25)$$

$$B_{01} + B_{02} - B_{03} = 0 . \quad (1.26)$$

Wegen $\vec{B}_0 = (\vec{k}/\omega) \times \vec{E}_0$, $k_1/\omega = n_1/c$, $k_3/\omega = n_2/c$ und wegen der Umkehr von \vec{B}_2 gilt

$$B_{01} = E_{01} \cdot n_1/c , \quad B_{02} = -E_{02} \cdot n_1/c , \quad B_{03} = E_{03} \cdot n_2/c .$$

Damit wird aus Gl. 1.26:

$$\frac{n_1}{c} E_{01} - \frac{n_1}{c} E_{02} = \frac{n_2}{c} E_{03} . \quad (1.27)$$

Mit den Definitionen

$$R = \frac{E_{02}}{E_{01}} , \quad T = \frac{E_{03}}{E_{01}} , \quad (1.28)$$

wobei wir R den Reflexions- und T den Transmissionskoeffizienten nennen, wird aus den Gln. 1.25 und 1.27:

$$1 + R = T , \quad n_1 \cdot (1 - R) = n_2 \cdot T , \quad (1.29)$$

$$R = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} , \quad T = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} . \quad (1.30)$$

Während T immer positiv ist, ist R positiv für $n_1 > n_2$ und negativ für $n_1 < n_2$. Die durchgehende und die am optisch dünneren Medium reflektierte Welle haben die gleiche Phase wie die einlaufende Welle. Die am optisch dichteren Medium reflektierte Welle erfährt einen Phasensprung um π , d. h. einen Gangunterschied um $\lambda/2$.

1.5 Beugungserscheinungen

In der geometrischen Optik werfen absorbierende Gegenstände, die von einer Punktquelle beleuchtet werden, scharfe Schatten. Die Wellennatur des Lichts führt zu Interferenzen an der Schattengrenze, zur sog. Beugung des Lichtes. In der Vorlesung wird der Schatten eines $40\ \mu\text{m}$ dicken Haares in rotem Laserlicht gezeigt. Die Intensitätsverteilung der Beugungstreifen zeigt die rechte Seite von Abb. 1.5, links die Erwartung der geometrischen Optik. Ebenfalls gezeigt wird das Beugungsbild hinter einem schmalen Spalt, siehe Abb. 1.6(b).

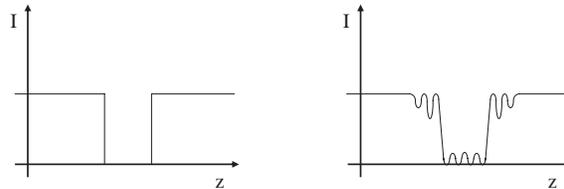


Abbildung 1.5: Lichtintensität hinter einem $40\ \mu\text{m}$ dicken Haar. Links die Erwartung der geometrischen Optik, rechts das beobachtete Beugungsbild.

Zur Beschreibung der Beugungsbilder verwenden wir das Huygenssche Prinzip: Jeder Punkt in einem Wellenfeld sendet Kugelwellen aus. In jedem Empfängerpunkt wird dann die kohärente Überlagerung all dieser Kugelwellen beobachtet. Zur Veranschaulichung werden auf der Wasseroberfläche ebene Wellen gezeigt, die nicht von einer harmonisch schwingend eintauchenden Platte, sondern von einer Vielzahl nebeneinander liegender Stifte erzeugt werden. Stellt man in diese Wasserwellenfront ein blendenförmiges Hindernis, ergibt sich im Wasser dahinter eine Wellenhöhenverteilung, die genauso aussieht wie in Abb. 1.6(b).

Beugung wurde ausführlich von Fresnel und Fraunhofer untersucht und beschrieben. Unter Fraunhoferscher Beugung verstehen wir den Spezialfall mit folgenden zwei Bedingungen:

- die einfallende Welle ist eine ebene Welle, und
- das Beugungsbild wird in einer Entfernung beobachtet, die sehr groß gegenüber der Ausdehnung des beugenden Objekts ist.

Unter allen anderen Bedingungen sprechen wir von Fresnelscher Beugung, die der gleiche Effekt ist, aber schwieriger zu berechnen.

1.6 Fraunhofersche Beugung am Einzelspalt

Der Einzelspalt, d. h. eine Rechteckblende lässt Licht in $-d/2 \leq x \leq d/2$ und $-h/2 \leq y \leq h/2$ mit voller Intensität durch und absorbiert überall sonst. Wir nehmen $h \gg d$ an, kümmern uns deswegen nicht um die y -Richtung und rechnen zweidimensional. Licht fällt als ebene Welle in z -Richtung auf den Spalt. Wir

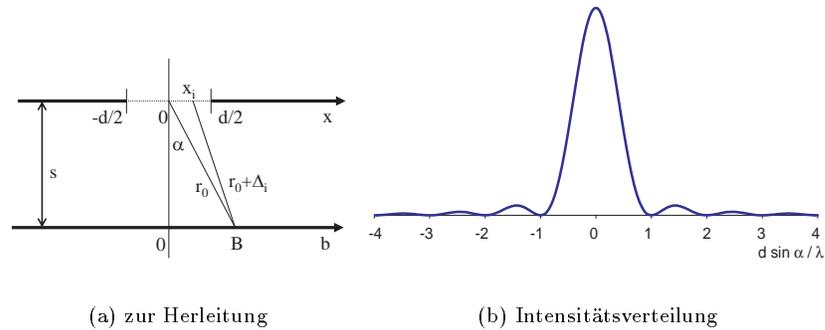


Abbildung 1.6: Fraunhofersche Beugung am Einzelspalt

suchen die Intensitätsverteilung auf einem Beobachtungsschirm bei $z = s$ mit $s \gg d$, siehe Abb. 1.6(a).

Die Fraunhoferschen Bedingungen sind erfüllt, und nach dem Prinzip von Huygens ergibt sich $\psi(b)$ aus der Überlagerung aller Elementarwellen, die von den Punkten $(x, z) = (x_i, 0)$ zwischen $x_i = -d/2$ und $x_i = +d/2$ ausgehen. Jede einzelne hat im Punkt $B = (b, s)$ die Amplitude

$$\psi_i = \psi_0 \cdot \cos[k(r_0 + \Delta_i) - \omega t] , \quad \Delta_i = -x_i \cdot \sin \alpha . \quad (1.31)$$

Aufsummieren unendlich vieler Amplituden erledigen wir durch Integrieren,

$$\sum \psi_i = \int \frac{d\psi}{dx} dx = \int \frac{\Psi_0}{d} dx , \quad (1.32)$$

und damit wird die Gesamtamplitude $\psi(\alpha)$ im Punkt B:

$$\psi(\alpha) = \int_{-d/2}^{+d/2} \frac{\psi_0}{d} \cos(kr_0 - \omega t - kx \sin \alpha) dx = \dots \quad (1.33)$$

1.7 Fraunhofersche Beugung an der Kreisblende

1.8 Auflösungsvermögen optischer Instrumente

1.9 Beugungsgitter

1.10 Holographie

Im Fortgeschrittenen-Praktikum der TU Dresden wird für alle Studierenden der Physik ein Holographie-Versuch angeboten. Die wesentlichen Schritte dieses Versuches sind:

- Aufspalten eines kohärenten Lichtstrahls in zwei Teilstrahlen, d. h. in zwei Teilwellen mit fester Phasendifferenz,
- Beleuchten eines Objekts mit einer der beiden Teilwellen,
- Überlagerung dieser am Objekt gebeugten Teilwelle mit der ungestörten anderen Teilwelle,
- Photographische Aufnahme des Interferenzmusters, das aus dieser Überlagerung entsteht, Hologramm genannt,
- Entwickeln und Fixieren des Hologramms,
- Beleuchtung des Hologramms mit kohärentem Licht der gleichen Wellenlänge wie im ersten Schritt,
- Betrachten des bei dieser Beleuchtung durch Beugung am Hologramm entstehenden dreidimensionalen Bildes des Objektes.

Ohne jedes mathematisches Detail hier das Wesentliche zusammengefasst: Holographie heisst Speicherung und Betrachtung eines dreidimensionalen Bildes in zwei Schritten,

$$O(x, y, z) \rightarrow I(\alpha, \beta),$$

vom Objekt O im Ortsraum x, y, z durch Beugung zur Intensitätsverteilung I im Winkelraum, und dann

$$I(\alpha, \beta) \rightarrow B(x', y', z'),$$

von der im Hologramm gespeicherten Verteilung I durch nochmalige Beugung zum Bild B im Ortsraum x', y', z' . Im Gegensatz zur Photographie wird I so raffiniert gespeichert, dass Phaseninformationen der ersten Beugung erhalten bleiben, wegen der Überlagerung der beiden Teilwellen. Photographie heisst Bildspeicherung und -betrachtung gemäss

$$O(x, y, z) \rightarrow I(\alpha, \beta) \rightarrow B(x', y')$$

in nur einem Schritt, wobei alle Phaseninformationen verloren gehen. Der Witz der Holographie, von Denis Gabor 1948 erfunden (Nobelpreis 1971), ist die Speicherung der dritten Dimension durch Speicherung der Phasendifferenzen im gebeugten Licht, realisiert durch die Interferenz zwischen gebeugtem und

ungebeugtem Licht.

Die Phase δ einer Lichtwelle ist unbeobachtbar,

$$\overline{\cos^2(\omega t - kx)} = \overline{\cos^2(\omega t - kx - \delta)} = 1/2 . \quad (1.34)$$

Die Phasendifferenz δ zweier Lichtwellen ist beobachtbar und speicherbar,

$$\overline{[\cos(\omega t - kx) + \cos(\omega t - kx - \delta)]^2} = 2 \cos^2(\delta/2) . \quad (1.35)$$

In dieser einfachen Gleichung liegen alle Effekte von Zwei- und Vielstrahlinterferenzen und damit (“im Prinzip”) auch die Holographie. Zum vollständigen Verständnis müssten wir uns ansehen, wie die Verteilung des gebeugten Lichtes aussieht, das von dreidimensionalen Beugungsstrukturen ausgeht. Das Hologramm ist die zweidimensionale Speicherung einer solchen Beugungsverteilung.

1.11 Das Michelson-Interferometer

1.12 Dopplereffekt beim Licht und Aberration

1.13 Komplexe Schreibweise des Lichtes

In Gl. 1.8 hatten wir die “Auslenkung der Lichtwelle” $\psi(\vec{r}, t)$ eingeführt und damit bis auf den Faktor $\sqrt{\epsilon_0 c}$ den Betrag der elektrischen Feldstärke gemeint. Für eine ebene monochromatische Welle ist

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_1 = \psi_0 \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) , \quad \psi_0 = \sqrt{\epsilon_0 c} |\vec{E}_0| . \quad (1.36)$$

Mit dem Wort Amplitude wird gelegentlich die Auslenkung ψ und gelegentlich die maximale Auslenkung ψ_0 bezeichnet. Bleiben wir in diesem Kapitel bei Auslenkung für ψ und bei Amplitude für ψ_0 .

Wegen der prinzipiellen Unbeobachtbarkeit von Phasen wird die gleiche Physik wie in Gl. 1.36 durch eine andere Funktion ψ_2 beschrieben, nämlich durch

$$\psi_2 = \psi_0 \cdot \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t) , \quad \psi_0 = \sqrt{\epsilon_0 c} |\vec{E}_0| ; \quad (1.37)$$

sie enthält die gleiche Amplitude wie ψ_1 , ist aber gegenüber ψ_1 um $\pi/2$ phasenverschoben. Die Phasenverschiebung darf beliebig sein, und wegen

$$\cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t - \delta) = \cos \delta \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + \sin \delta \cdot \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

beschreibt auch jede Linearkombination

$$\psi_3 = A \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + B \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

die gleiche Physik wie in Gl. 1.36. Für die Konstanten A und B muss gelten:

$$A^2 + B^2 = \psi_0^2$$

Eine besonders raffinierte und nützliche Linearkombination ist komplex,

$$\tilde{\psi}(\vec{r}, t) = \frac{\psi_0}{\sqrt{2}} [\cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + i \cdot \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] = \frac{\psi_0}{\sqrt{2}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} . \quad (1.38)$$

Mit ihr wird auch die Berechnung der Lichtintensität viel einfacher, weil $|\tilde{\psi}(\vec{r}, t)|$ zeitlich konstant ist und deshalb die zeitliche Mittelung entfällt. Im Reellen ist

$$I = \overline{\psi^2(\vec{r}, t)},$$

und im Komplexen mit der "Wellenfunktion" $\tilde{\psi}$ einfach

$$I = |\tilde{\psi}(\vec{r}, t)|^2. \quad (1.39)$$

Statt mit der Amplitude $\psi_0/\sqrt{2} = \sqrt{\epsilon_0 c} |\vec{E}_0|$ können wir einfacher schreiben

$$\tilde{\psi} = A \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}, \quad A = \sqrt{\epsilon_0 c/2} |\vec{E}_0|, \quad I = A^2. \quad (1.40)$$

Nun zur kohärenten Überlagerung zweier Wellen. Phasen sind unbeobachtbar, Phasendifferenzen sind beobachtbar. Gl. 1.35 war ein Spezialfall, betrachten wir allgemeiner

$$\psi = a \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + b \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t - \delta). \quad (1.41)$$

Zu dieser Interferenz gehört eine Intensität

$$\begin{aligned} I &= \overline{[a \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + b \cdot \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t - \delta)]^2} \\ &= \frac{a^2}{2} + \frac{b^2}{2} + 2ab \overline{\cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t - \delta)} \\ &= \frac{a^2 + b^2 + 2ab \cos \delta}{2}. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Nun die gleiche Interferenz mit komplexen Wellenfunktionen,

$$\tilde{\psi} = A \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} + B \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t - \delta)} = e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \cdot (A + B e^{-i\delta}), \quad (1.43)$$

$$I = |A + B e^{-i\delta}|^2 = A^2 + B^2 + 2AB \cos \delta. \quad (1.44)$$

Die Ergebnisse sind gleich, wegen $A = a/\sqrt{2}$ und $B = b/\sqrt{2}$, aber die Rechnerei ist wesentlich kürzer. Was für zwei Wellen gilt, gilt auch für viele, einschliesslich unendlich vieler, wo dann die Summe zum Integral wird. Eine erste Anwendung werden wir beim Fabry-Perot-Interferometer im nächsten Abschnitt kennen lernen.

1.14 Reflexionsgitter und Fabry-Perot-Interferometer

Die in der Optik behandelten Transmissionsgitter mit der Spaltbreite b und dem Spaltabstand d haben folgendes Beugungsbild mit der Intensität:

$$I = I_0 \frac{\sin^2 \left[\pi \frac{b}{\lambda} \sin \theta \right]}{\left[\pi \frac{b}{\lambda} \sin \theta \right]^2} \cdot \frac{\sin^2 \left[N \pi \frac{d}{\lambda} \sin \theta \right]}{\sin^2 \left[\pi \frac{d}{\lambda} \sin \theta \right]}. \quad (1.45)$$

Ihr Auflösungsvermögen $\lambda/\Delta\lambda = N \cdot m$ liegt im Bereich von 10^4 . Einfacher herzustellen sind Reflexionsgitter. Mit ihnen erreicht man $\lambda/\Delta\lambda \approx 10^6$, weil d hier kleiner gewählt werden kann (z.B. $d = 1\mu\text{m}$). Der Neigungswinkel der einzelnen Reflexionszonen gegenüber der Gitterebene heißt Glanzwinkel oder Blazewinkel θ . Der Einfallswinkel α bleibt konstant, der Ausfallswinkel β ist variabel, und gemessen wird die Intensität $I = I(\beta)$. Der Gangunterschied der zwei gezeichneten Teilstrahlen ist $\Delta s = d \sin \beta - d \sin \alpha$. Man findet ein Hauptmaximum m -ter Ordnung für $\Delta s = m\lambda$, also bei einem Winkel $\beta = \beta_m$ für den gilt:

$$d \sin \beta_m = d \sin \alpha + m\lambda, \quad \sin \beta_m = \sin \alpha + m \frac{\lambda}{d}.$$

Die Intensität dominiert in der m -ten Ordnung, wenn als Blazewinkel die Winkelhalbierende von α und β_m gewählt wird:

$$\beta_m - \theta = \theta + \alpha, \quad \theta = \frac{\beta_m - \alpha}{2}. \quad (1.46)$$

Der Blazewinkel hängt von λ ab. In der Praxis wählt man θ so, daß er für die Mitte des zu messenden λ -Bereiches optimal ist. Ein Beispiel: λ um 600 nm, Gitterabstand 3 μm , Einfallswinkel $\alpha = 30^\circ$, Spektroskopie bei $m = 1$. Für das erste Hauptmaximum berechnen wir

$$\sin \beta_m = \sin 30^\circ + 0,2 = 0,7, \quad \beta_m = 44^\circ.$$

Will man also unter 44° messen, wählt man ein Gitter mit einem Blazewinkel von 7° . Die Auflösung ist wie beim Transmissionsgitter $\lambda/\Delta\lambda = Nm$, d.h. für $m=1$ etwa 10^5 bei Kohärenz über 10 cm. Wie sind kleinste $\Delta\lambda$ und große Kohärenzbreiten der Ordnung $o(10\text{ cm})$ zu vereinbaren? Das schafft die Geometrische Optik, wie in Abb. xx gezeigt. Eine solche Anordnung mit Photodiodenzeile heißt Spektrograph oder Spektrometer. Mit nur einem Ausgangsschlitz ist sie ein Monochromator.

Als nächstes behandeln wir das Fabry-Perot-Interferometer, das seit 1897 bekannt ist und zur Spektroskopie von atomaren Spektrallinien eingesetzt wird. Es beruht auf dem Prinzip der Vielstrahlinterferenz. Hierzu benötigt man eine planparallele Quarzplatte oder einen Luftspalt zwischen zwei planparallelen Platten. Der Gangunterschied Δs zwischen zwei benachbarten Teilstrahlen ist, wie aus Abb. xx ersichtlich,

$$\begin{aligned} \Delta s &= n(\overline{AB} + \overline{BC}) - \overline{AD} \\ &= \frac{2nd}{\cos \beta} - 2d \tan \beta \sin \alpha \\ &= \frac{2nd}{\cos \beta} - 2d \frac{\sin \beta}{\cos \beta} n \cdot \sin \alpha \\ &= \frac{2nd}{\cos \beta} (1 - \sin^2 \beta) = 2nd \cos \beta \\ &= 2d \sqrt{n^2 - n^2 \sin^2 \beta} = 2d \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Dazu gehört ein Phasenunterschied von $\delta = 2\pi\Delta s/\lambda$.

Die Oberfläche der Quarzplatte ist auf beiden Seiten teilverspiegelt, mit hohem Reflexionskoeffizienten R . Dieser ist als Verhältnis von reflektierter zu

einlaufender Intensität definiert. Das Verhältnis der Amplituden ist \sqrt{R} . Analog gilt dies für die Transmission mit dem Transmissionskoeffizienten $T = 1 - R$, $\sqrt{T} = \sqrt{1 - R}$. Die einlaufende Lichtintensität ist $I_0 = \psi_0^2$. Für die auslaufende Intensität I_t , die durch beide Grenzflächen der Platte durchläuft, gilt

$$\begin{aligned}
 I_t &= |\psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \dots|^2, \\
 \psi_1 &= \sqrt{1 - R} \cdot \sqrt{1 - R} \cdot \psi_0 = (1 - R)\psi_0, \\
 \psi_2 &= \sqrt{1 - R} \cdot R \cdot \sqrt{1 - R} \cdot \psi_0 \cdot e^{i\delta} = R(1 - R)\psi_0 e^{i\delta}, \\
 I_t &= I_0(1 - R)^2 |1 + Re^{i\delta} + R^2 e^{2i\delta} + \dots|^2 = I_0(1 - R)^2 \left| \frac{1}{1 - Re^{i\delta}} \right|^2 \\
 &= \frac{I_0(1 - R)^2}{1 + R^2 - 2R \cos \delta} = \frac{I_0(1 - R)^2}{(1 - R)^2 + 2R(1 - \cos \delta)} \\
 &= \frac{I_0}{1 + F^2 \cdot \sin^2 \delta/2} \text{ mit } F^2 = \frac{4R}{(1 - R)^2}. \quad (1.48)
 \end{aligned}$$

Für $R=0,96$ erhalten wir $F^2=2400$, $F=49$. Schmale Maxima der durchlaufenden Intensität sind immer dort, wo $\delta/2 = m\pi$, s. Abb. xx. Nun zur Breite dieser Maxima. Mit voller Breite Γ_δ in halber Höhe gilt

$$\frac{I_t}{I_0} = \frac{1}{2} \text{ bei } F^2 \sin^2 \frac{\delta \pm \Gamma_\delta/2}{2} = 1 \quad (1.49)$$

Wie kann man damit Wellenlängen messen und wie genau? Diese Anwendung stammt von den Franzosen CHARLES FABRY und ALFRED PERROT. Das Prinzip der Vielstrahlinterferenzen ist älter (Newtonsche Ringe). Bei senkrechtem Durchgang ist $\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot 2dn$ und die Intensität der Transmission ist null. Typische Wellenlängen liegen bei 560 nm, typische Dicken sind 2 cm und typische Brechungsindizes von etwa 1,4. In einer Linie unter 0° wäre

$$m = \frac{2dn}{\lambda} = \frac{2,8 \cdot 2 \cdot 10^{-2} \text{ m}}{5,6 \cdot 10^{-7} \text{ m}} = 10^5.$$

Wie kann man λ messen, wenn man zwar n und d sehr gut kennt, aber m nicht? Einfache Algebra hilft weiter: $\Delta s = 2d\sqrt{n^2 \sin^2 \alpha} = m \cdot \lambda$

$$\begin{aligned}
 \text{1. Ring: } & 4d^2(n^2 - \sin^2 \alpha_1) = (m_0 - 1)^2 \lambda^2 \\
 \text{p-ter Ring: } & 4d^2(n^2 - \sin^2 \alpha_p) = (m_0 - p)^2 \lambda^2 = m_0^2 \lambda^2 - 2m_0 p \lambda^2 + p^2 \lambda^2
 \end{aligned}$$

Den letzten Term vernachlässigen wir, und mit $m_0 = 2dn/\lambda$ können wir umstellen.

$$\begin{aligned}
 \sin^2 \alpha_p &= \left[n^2 - \frac{m_0^2 \lambda^2}{4d^2} \right] + \frac{2m_0 p \lambda^2}{4d^2} \\
 &= \epsilon + p \cdot \frac{m_0 \lambda^2}{2d^2} = \epsilon + p \cdot \frac{n}{d} \cdot \lambda \quad (1.50)
 \end{aligned}$$

ϵ ist nicht interessant, nur die Steigung $n\lambda/d$! Den Vorfaktor n/d eicht man am besten mit einer Referenzlinie. Wie genau kann man damit Wellenlängen

messen?

$$\delta = \frac{2\pi\Delta s}{\lambda} = 2\pi m \quad , \quad \Delta\delta = \frac{\partial\delta}{\partial\lambda} = \left| -\frac{2\pi\Delta s}{\lambda^2} \cdot \Delta\lambda \right|$$

$$\Gamma = \Delta\delta = \frac{2\pi\Delta s \cdot \Delta\lambda}{\lambda^2} = 2\pi m \cdot \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{4}{F} \quad (1.51)$$

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{\pi}{2} F \cdot m = F^* \cdot m \quad (1.52)$$

$$F^* = \frac{\pi}{2} F = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R}$$

F^* heißt Finesse des Interferometers. Ein Zahlenbeispiel: $m = 10^5$, $F \approx 50$, $F^* \approx 80$, $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 8 \cdot 10^6$. Beim Gitter hatten wir $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = N \cdot m$ gefunden, Maximum $\approx 10^5 \cdot 10$. Hier ist $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = F^* \cdot m$, Maximum $\approx 10^2 \cdot 10^5$. Die Finesse F^* hat tatsächlich die Bedeutung einer effektiven Anzahl interferierender Teilstrahlen in der Interferometerplatte.

Kapitel 2

Lichtquanten

Die MAXWELLSche Deutung des Lichtes als elektromagnetische Welle (1873) erklärt eine Vielzahl von Phänomenen, die wir in der Optik kennengelernt haben. Interferenz, Beugung und Polarisation folgen aus der Wellennatur. Lichtstreuung an atomaren Dipolen (RAYLEIGH 1871/72) und die künstliche Erzeugung von Strahlung mit Hilfe makroskopischer Dipole (HERTZ 1888) folgen aus der elektromagnetischen Natur. Einiges bleibt von MAXWELL unerklärt: das Spektrum eines schwarzen Hohlraumstrahlers, die diskreten Wellenlängen strahlender Atome, der Photoeffekt. In diesen Effekten tritt die vom Licht getragene Energie in Form kleinster Pakete auf und nicht kontinuierlich.

PLANCK erklärt 1900 die Hohlraumstrahlung mit Hilfe dieser Energiepakete, er nennt sie Lichtquanten. Der Photoeffekt, in dem sich Lichtquanten wie Teilchen bemerkbar machen, wird 1905 von EINSTEIN in diesem Sinne erklärt. Und um 1920 zeigt sich in COMPTON's Experimenten über Streuung von Lichtquanten an Elektronen, daß sich ein Lichtquant in jeder Hinsicht wie ein Teilchen verhält. Ein solches Teilchen, von den Teilchenphysikern inzwischen „Photon“ genannt und mit dem Symbol γ bezeichnet, kann auch an Hochenergiereaktionen beteiligt sein und darin z.B. ein e^+e^- - oder ein $p\bar{p}$ -Paar erzeugen.

Besteht Licht nun aus Wellen oder aus Teilchen? Diese Frage basiert auf unseren Vorstellungen bzw. Vorurteilen über die Begriffe Welle und Teilchen. Unter Welle haben wir gelernt so etwas wie die Bewegung der Wasseroberfläche zu verstehen und unter Teilchen etwas zur Billiardkugel ähnliches. Licht ist aber Welle *und* Teilchen. Nicht mal so mal so, sondern von Natur aus immer beides. Diese Annahme der modernen Physik heißt Welle-Teilchen-Dualismus. Wegen dieses Dualismus in der Natur müssen wir unsere Vorstellungen über Welle und Teilchen korrigieren. Beide Begriffe sind als Grenzfälle eines gemeinsamen tieferliegenden Konzeptes anzusehen. Ein treffender und heute üblicher Begriff für dieses Konzept ist Quantenfeld. Licht ist ein Quantenfeld, oder, bescheidener formuliert, Licht wird am vollständigsten durch ein Quantenfeld beschrieben.

Nach der Behandlung der Quanteneffekte des Lichtes werden wir sehen, daß auch die Objekte, die wir mit der Vorstellung Teilchen verbinden, Welleneigenschaften haben. Ein Strahl monoenergetischer Elektronen zeigt Beugungseffekte

wie eine Welle. Der Dualismus hört nicht beim Licht auf, alle Objekte unserer materiellen Welt sind zugleich Teilchen und Welle. Auch Elektronen sind ein Quantenfeld, ebenso die anderen elementaren Bausteine der Materie. Mehr dazu in der Quantenfeldtheorie und in der Elementarteilchenphysik.

2.1 Energie, Impuls, Masse und Drehimpuls elektromagnetischer Wellen

Dies ist zunächst eine kurze Wiederholung aus der MAXWELLSchen Theorie. Eine monochromatische, linear polarisierte, ebene Lichtwelle im Vakuum ist durch zwei aufeinander senkrecht stehende Vektoren bestimmt: \vec{E}_0 und \vec{k} . Dabei ist $\vec{k} = 2\pi\vec{u}/\lambda$ der Wellenzahlvektor, λ die Wellenlänge, $k = |\vec{k}|$, \vec{u} der Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung und \vec{E}_0 die Amplitude der elektrischen Feldstärke.

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}_0 \cos(ckt - \vec{k}\vec{r}), \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \left(\frac{\vec{u}}{c} \times \vec{E}_0\right) \cos(ckt - \vec{k}\vec{r}).\end{aligned}\tag{2.1}$$

Eine solche ebene Welle dehnt sich in allen vier Dimensionen unendlich weit aus. Man kann aber eine Welle konstruieren, die innerhalb eines Würfels mit Volumen V und innerhalb einer Zeitspanne T ungefähr so aussieht wie in Glg. (2.1), auch die MAXWELLSchen Gleichungen erfüllt und außerhalb des Würfels verschwindet. Diese begrenzte Welle, dieser Wellenzug, trägt die Energie W und den Impuls \vec{p} ,

$$W = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \vec{E}_0^2 V,\tag{2.2}$$

$$\vec{p} = \frac{W}{c}\vec{u} = \frac{\varepsilon_0}{2c}\vec{E}_0^2 V\vec{u}.\tag{2.3}$$

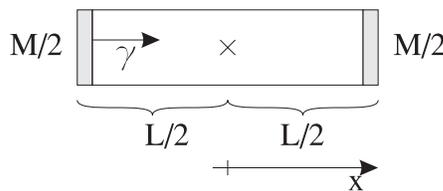


Abbildung 2.1: Gedankenexperiment zum Impuls von Licht

ist aber ein Musterbeispiel, die Formel $W = mc^2$ herzuleiten. Deshalb möchte ich das Gedankenexperiment EINSTEINS an dieser Stelle vorführen: Ein geschlossener Kasten soll ruhen, und von einer Seitenwand soll ein Lichtsignal zur gegenüberliegenden geschickt werden. Wie in Abb. 2.1 hat der Kasten die Masse M , je zur Hälfte an beiden betrachteten Seiten. Der Rest der Masse sei vernachlässigbar, die Länge des Kastens sei L , der Schwerpunkt ruht in $x = 0$.

Das links emittierte Lichtsignal habe die Energie W . Damit hat es den Impuls $p = W/c$ und versetzt dem Kasten eine Rückstoßgeschwindigkeit $v = p/M =$

Um Energie und elektrische Feldstärke nicht zu verwechseln, soll die Energie hier mit W bezeichnet werden. Wenn unser Ausschnitt aus einer ebenen elektromagnetischen Welle die Energie W trägt, dann hat er auch eine Masse $m = W/c^2$. Dies folgt aus der speziellen Relativitätstheorie,

$W/(cM)$ nach links. Während der Signallaufzeit $\Delta t = L/c$ bewegt sich der Kasten um $\Delta x = v \cdot \Delta t = WL/(Mc^2)$ nach links und ruht dann wieder. Der Schwerpunkt muß während des gesamten Prozesses in $x = 0$ geblieben sein, denn es wirkte keine äußere Kraft auf den abgeschlossenen Kasten. Nach dem Austausch des Lichtsignals ist der Schwerpunkt nicht mehr in der Kastenmitte, sondern um Δx weiter rechts. Also muß die rechte Seite schwerer sein als die linke; die Masse m ist von links nach rechts transportiert worden. Die Schwerpunktsbedingung lautet:

$$\begin{aligned} \left(\frac{M}{2} - m\right) \left(\frac{L}{2} + \Delta x\right) &= \left(\frac{M}{2} + m\right) \left(\frac{L}{2} - \Delta x\right) \\ \Leftrightarrow M\Delta x &= mL \\ m &= \frac{M}{L} \Delta x = \frac{M \cdot W \cdot L}{L \cdot M c^2} = \frac{W}{c^2}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Das Lichtsignal der Energie W hat die Masse $m = W/c^2$.

Eine zirkular polarisierte ebene elektromagnetische Welle trägt außerdem einen Drehimpuls, was sich als ein Drehmoment auf eine Probeladung bemerkbar macht. Energie, Masse, Impuls und Drehimpuls einer elektromagnetischen Welle haben noch nichts mit Lichtquanten zu tun, sondern sind in der Sicht der MAXWELLSchen Theorie kontinuierlich über das Wellenvolumen verteilt. Diese Vorbemerkung soll aber zeigen, daß eine Welle auch Eigenschaften hat, die wir in der Anschauung eher Teilchen zuordnen.

2.2 Der Photoeffekt

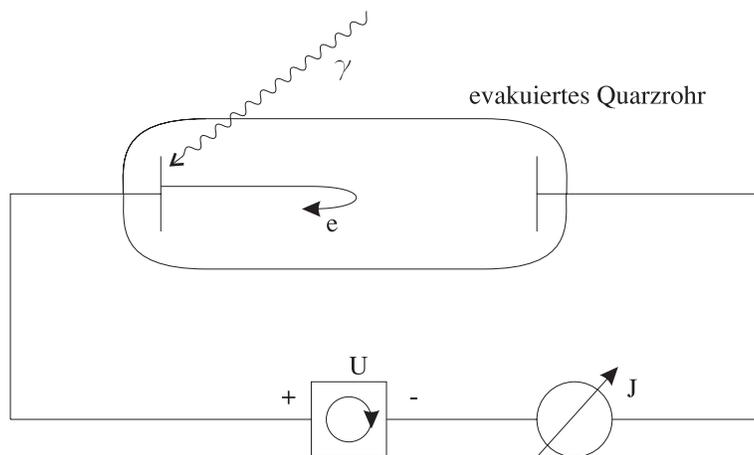


Abbildung 2.2: Versuchsaufbau zum Photoeffekt (schematisch)

Dieser Effekt, auch lichtelektrischer Effekt genannt, ist heute jedem durch den Einsatz von Photoelementen in Lichtschranken o.ä. geläufig. Seine Entdeckung geht auf Heinrich HERTZ zurück, der 1887 bei seinen Experimenten mit Funkenstrecken herausfand, daß es bei Bestrahlung der Kathode mit

ultraviolettem Licht besser funkte. Also ein Abfallprodukt der Entdeckung der elektromagnetischen Wellen! Der Photoeffekt wurde dann von HALLWACHS und LENARD weiter untersucht¹, und die folgenden Resultate gehen im wesentlichen auf die Arbeiten dieser beiden zurück. Abb. 2.2 zeigt den verwendeten Versuchsaufbau. Das Quarzrohr enthält zwei Metallelektroden, an denen eine variable Gleichspannung U angelegt werden kann. Die Anode wird mit monochromatischem Licht bestrahlt, dieses schlägt Elektronen aus der Metalloberfläche heraus. Einige dieser „Photoelektronen“ erreichen trotz der angelegten Gegenspannung die Kathode. Da diese Spannung mit Hilfe des Netzgerätes konstant gehalten wird, fließt daraufhin ein Strom I .

Bei konstanter Lichtwellenlänge λ zeigt Abb. 2.3 den erhaltenen „Photostrom“ I als Funktion der Spannung U . Die verschiedenen Kurven sind bei jeweils konstanter Lichtintensität aufgenommen. Der Photostrom ist bei jedem Spannungswert U der Lichtintensität proportional.

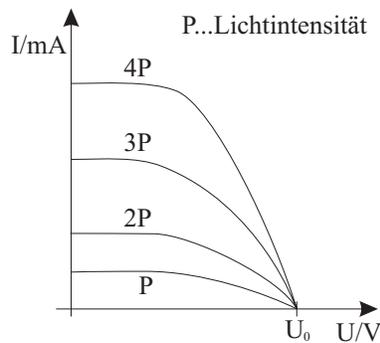


Abbildung 2.3: Photostrom-Spannung Diagramm bei konstanter Wellenlänge und variierter Intensität

von 10^{-6}W/m^2 . Wenn die gesamte Auslösearbeit von 2 eV durch die klassische Energie dieser Welle aufgebracht werden müßte, würde der Vorgang des Auslösens 20 Tage dauern. Wie Experimente mit kurzen Lichtblitzen aber zeigen, kommen die Photoelektronen aber spontan, 10^{-9} sec oder eher nach Absorption des Lichtes. Konklusion: Die von der elektromagnetischen Welle getragene Energie kann nicht kontinuierlich über das Wellenvolumen verteilt sein, sie muß in räumlich konzentrierten Energiepaketen gebündelt sein.

Wenn die Wellenlänge des eingestrahltten Lichtes variiert wird, wie in Abb. 2.4 gezeigt, ändert sich die Grenzspannung U_0 , also die maximale kinetische Energie, die den Photoelektronen mitgegeben wird: Dieses Ergebnis ist in der elektromagnetischen Lichttheorie ebenso unverständlich. Was kann die Wellenlänge mit der Energie zu tun haben? Für die Energie ist \vec{E}_0 zuständig, also die Intensität! Die Grenzspannung U_0 ist ein Maß für die bei gegebener Wellenlänge

Das Auftreten von Photoelektronen ist nach MAXWELLS Theorie nicht überraschend. Die Welle trägt ein elektrisches Feld \vec{E} , und dieses kann ein Elektron aus dem Metall „herausrütteln“. Die kinetische Energie des Photoelektrons, das dieses durch sein Anlaufen gegen die angelegte Spannung zeigt, nimmt es aus der Energie W der Welle. Überraschend und nach MAXWELL unvorstellbar ist das Resultat, daß mit schwächer werdender Lichtintensität – \vec{E} und W werden immer kleiner – immer noch Photoelektronen austreten und daß die Grenzspannung U_0 dabei konstant bleibt (LENARD 1902). In Zahlen: Ein messbarer Photostrom entsteht noch bei einer Lichtabsorption

¹Den Nobelpreis erhielt EINSTEIN für die Deutung der Resultate.

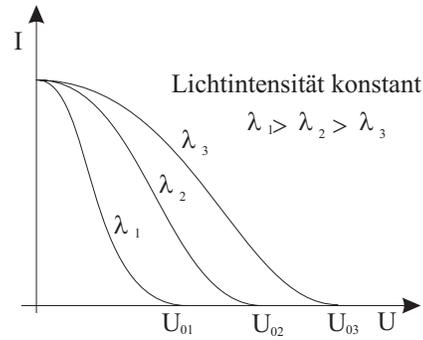


Abbildung 2.4: Photostrom-Spannung-Diagramm bei konstanter Intensität und variiertes Wellenlänge

auftretende maximale kinetische Energie der entstehenden Photoelektronen.

$$E_{\text{kin,max}} = e_0 \cdot U_0 \quad (2.5)$$

Wie hängt diese von der Lichtwellenlänge λ bzw. der Frequenz ν des eingestrahlteten monochromatischen Lichtes ab? Abb. 2.5 zeigt die Resultate: Unterhalb

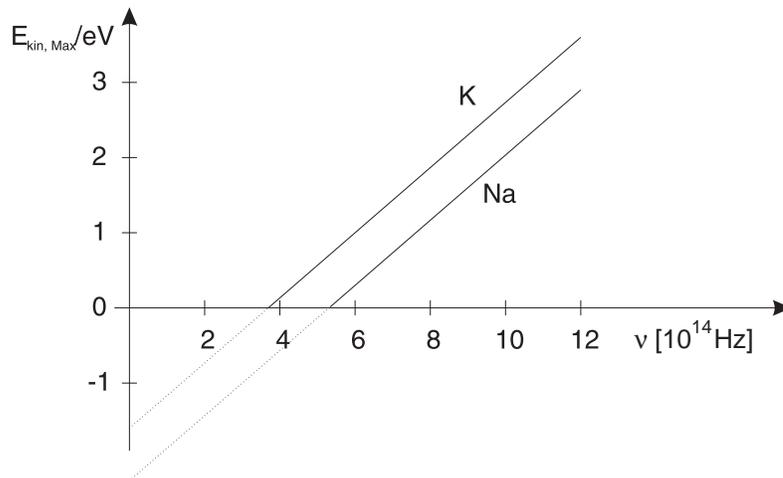


Abbildung 2.5: E_{kin} -Frequenz-Diagramm des Photoeffekts. Es ist unabhängig von der Lichtintensität.

einer Grenzfrequenz ν_g tritt überhaupt kein Photoeffekt auf, oberhalb ist der Zusammenhang zwischen $E_{\text{kin,max}}$ und ν linear. Verschiedene Materialien zeigen parallel verschobene Geraden: immer Geraden und immer mit der gleichen Steigung.

$$e_0 \cdot U_0 = E_{\text{kin,max}}(\nu, \text{Material}) = h \cdot \nu - A(\text{Material}). \quad (2.6)$$

Die „Ablösearbeit“ A liegt für die meisten Materialien im Bereich zwischen 1 eV und 10 eV. Für die Steigung h ergibt sich folgender Wert:

$$h = 4,1 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}. \quad (2.7)$$

h heißt *PLANCKsches Wirkungsquantum*. Es wurde 1900 von Max PLANCK zur Erklärung des Spektrums eines schwarzen Hohlraumstrahlers in die Physik eingeführt. Sein Zahlenwert wurde lange Zeit am genauesten mit Hilfe des Photoeffektes ermittelt. Heute wird meist $\hbar = h/2\pi$ verwendet, und der experimentelle Bestwert aus vielen Messungen ist

$$\hbar = 1,05457168 \cdot 10^{-34} \text{Js} \pm 170 \text{ ppb} , \quad (2.8)$$

ppb heißt parts per billion = 10^{-9} und gibt den relativen Messfehler mit einer Standardabweichung an.

2.3 Erklärung des Photoeffektes durch EINSTEIN

Zusammenfassung der Ergebnisse des letzten Abschnittes, W ist die Lichtintensität, I der Photostrom und λ die Wellenlänge:

	Wellentheorie Maxwell 1873	Experiment Lenard 1902	
$I = f(W)$	$I \propto W$	$I \propto W$	OK
$e_0 U_{\max} = f(W)$	steigt mit W	unabh. von W	Widerspruch
$e_0 U_{\max} = f(\lambda)$	unabh. von λ	$e_0 U_0 = hc/\lambda - A$	Widerspruch

Die bis 1905 gesammelten Daten wurden von EINSTEIN² wie folgt gedeutet: Die Energie einer elektromagnetischen Welle ist nicht kontinuierlich über ihr Volumen verteilt, sondern in Lichtquanten gebündelt. Diese Quanten treten nicht nur bei der Lichtemission auf, wie von PLANCK zur Erklärung des Spektrums schwarzer Strahler gefordert, sondern auch bei der Lichtabsorption. Bei Emission und Absorption ist Licht gequantelt, und ein Lichtquant trägt die kinetische Energie

$$W = h \cdot \nu = \hbar \omega \quad (2.9)$$

Darin ist ν die Frequenz der elektromagnetischen Welle, die mit dem Lichtquant identifiziert wird, $\omega = 2\pi\nu$ die entsprechende Kreisfrequenz. Das Lichtquant heißt heute Photon, abgekürzt γ . Im Photoeffekt reagiert das Photon wie ein Teilchen, es überträgt seine kinetische Energie auf ein Elektron, und Glg. (2.10)

$$E_{\text{kin,max}}(e^-) = E_{\text{kin}}(\gamma) - A \quad (2.10)$$

drückt einfach die Energieerhaltung in dieser Reaktion aus. Die Ablösearbeit A ist die minimale potentielle Energie eines Elektrons im Atomgitter, d. h. Glg. (2.10) bedeutet:

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}}(\gamma) &= E_{\text{kin,max}}(e^-) + E_{\text{pot,min}}(e^-) = E_{\text{tot}}(e^-) \\ &= E_{\text{kin}}(e^-) + E_{\text{pot}}(e^-). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Da die potentielle Energie nicht für alle Elektronen im Atomgitter die gleiche ist, z.B. sind Elektronen in tieferen Lagen anders gebunden als in der oberen, verteilen sich auch die kinetischen Energien der ausgelösten Photoelektronen, nur ihr Maximum liegt fest. Noch fünf Anmerkungen:

²Im selben Jahr erschien auch seine spezielle Relativitätstheorie

1. Beim Photoeffekt gibt ein Photon seine kinetische Energie vollständig an ein Elektron ab.
2. Das Photon verschwindet dabei völlig; diese Eigenschaft sind wir sonst von Teilchen nicht gewöhnt.
3. Das Photon bewegt sich mit Lichtgeschwindigkeit. Wegen $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2} = \infty$ muss es deshalb die Ruhemasse $m_0 = 0$ haben, sonst wäre $E = \gamma m_0 c^2$ unendlich.
4. Die Energie eines Photons ist $W = \hbar\omega$ und enthält mit ω eine Eigenschaft, die wir nur von Schwingungen und Wellen gewohnt sind.
5. Licht ist bei Emission und Absorption gequantelt, nicht aber bei der Lichtausbreitung. Bei der unbeobachteten Ausbreitung verhält es sich als Welle, bei den beobachtbaren Prozessen Emission und Absorption als Teilchen.

Aus Anmerkung 3 folgt eine Formelsammlung des Photons :

$$\begin{aligned}
 m_0 &= 0 \\
 W &= \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = pc \\
 E_{kin} &= W = \hbar\omega \\
 p &= \frac{W}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k \\
 \vec{p} &= \hbar \vec{k} \\
 m &= \frac{W}{c^2} = \frac{p}{c} = \frac{\hbar\omega}{c^2} = \frac{\hbar k}{c}
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

Die Richtung eines Photons ist die Richtung der elektromagnetischen Welle, deshalb folgt $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ aus $p = \hbar k$. Die Ruhemasse eines Photons ist Null. Ein Photon reagiert aber auf die Schwerkraft und zeigt auch Trägheit, beides durch $\hbar k/c$ beschrieben.

2.4 Photodioden und Photovervielfacher

Im Labor und in der Technik verwendet man den Photoeffekt, um Lichtintensitäten zu messen, bzw. um variable Lichtintensitäten zu messen, bzw. um variable Lichtintensitäten in variable elektrische Ströme zu verwandeln und damit einen Vorgang elektrisch zu steuern. Eine Möglichkeit dies zu realisieren

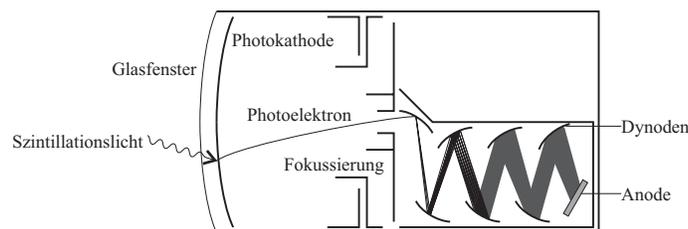


Abbildung 2.6: Photovervielfacher

sind *Photodioden*, die aus einer Photokathode und einer Anode in einem evakuierten Glaskolben bestehen. Aus der Kathode werden Elektronen ausgeschlagen und von der Anode angesaugt, was zu einem messbaren Photostrom führt. Beliebige kleine Lichtintensitäten lassen sich mit der Diode nicht messen, auch im Dunkeln fließt ein kleiner Strom, der aber um mehr als sechs Zehnerpotenzen kleiner ist als der maximal zulässige Photostrom. Deshalb kann man mit einer Photodiode Lichtintensitäten über etwa sechs Größenordnungen messen.

Mit Photodioden mißt man nicht nur Gleichströme, sondern auch kurze Lichtimpulse. Da die Photoelektronen auf verschiedenen Wegen von der Kathode zur Anode laufen, entsteht eine Zeitverschmierung in der Größenordnung von Nanosekunden. Aufwendigere Konstruktionen haben Zeitverschmierungen von nur etwa 100 ps.

Zur Messung sehr kurzer und sehr lichtschwacher Lichtsignale verwendet man sogenannte *Photovervielfacher*, englisch: Photomultiplier, kurz PM. Abb. 2.6 zeigt die Prinzipskizze eines PM. Das Prinzip des PM beruht auf der Sekundärelektronenemission. Zwischen Kathode und erster Dynode liegt eine Spannung von ca. 200 V. Die mit 200 eV auf der metallischen Dynode auftreffenden Elektronen lösen dort im Mittel 4 andere Elektronen aus, die ihrerseits zur zweiten Dynode beschleunigt werden, und jedes löst dort im Mittel wieder 4 Sekundärelektronen aus. Über 12 Stufen erreicht man damit aus einem Photoelektron an der Kathode $4^{12} = 1.7 \cdot 10^7$ Elektronen an der Anode. Je nach Typ liegen gängige Verstärkungsfaktoren zwischen 10^7 und 10^8 , die Spannungen zwischen Kathode und Anode bei etwa 2000 V.

Durch spezielle Formgebung der Dynoden erreicht man bei PMs schnelle elektrische Impulse mit Zeiten im ns-Bereich. Gute PMs erlauben bei schwachen Lichtintensitäten, einzelne Photonen zu registrieren. Die Nachweiswahrscheinlichkeit ist aber nie eins, typischerweise liegt sie bei 10 bis 20%. Die Lebensdauer eines PM ist auf 10 – 20 Jahre begrenzt. Dann ist durch das Glas aus der Luft soviel Helium hineindiffundiert, dass die Verstärkung gestört wird und „Nachimpulse“ entstehen.

2.5 Elektrizität aus Sonnenlicht?

Die Solarkonstante beträgt $S_0 = 1,3 \text{ kW/m}^2$, d.h. von einem Punkt außerhalb der Atmosphäre betrachtet misst man 1300 J einfallende Lichtenergie pro m^2 und Sekunde. Die Luft absorbiert, weshalb im deutschen Flachland nur noch etwa $\tilde{S}_0 = 0,6 \text{ kW/m}^2$ gemessen werden – immer vorausgesetzt die Luft ist sauber und die Sonne scheint. Pro m^2 heißt senkrecht zur Einfallsrichtung. Als mittlere in Deutschland wirksame Solarkonstante schätzen wir ab, mit dem optimistischen Faktor 1/2 für schlechtes Wetter:

$$\langle S \rangle = \tilde{S}_0 \cdot \cos 50^\circ \cdot \frac{\int_0^\pi \sin t \, dt}{2\pi} \cdot \frac{1}{2} = 60 \text{ W m}^{-2} \quad (2.13)$$

Deutschland mit einer Fläche von $A = 352 \cdot 10^9 \text{ m}^2$ erhält im Jahr im Mittel $6,7 \cdot 10^{20}$ J. Der „Primärenergiebedarf“, also die gesamte Energie, die wir zusätzlich zur kostenlos verwendbaren Sonnenenergie im gleichen Zeitraum nutzen, beträgt

$1,5 \cdot 10^{19}$ J, das ist 2,2 % der erhaltenen Sonnenenergie (praktisch konstant seit 1990). Eine Bialkali-Photokathode hat einen Wirkungsgrad von etwa 6 %. Man müsste also knapp die halbe Fläche des Landes mit Solarzellen bedecken, um den gesamten Primärenergiebedarf auf diese Weise zu erzeugen. Mit modernen Silizium-Photodioden ist der Wirkungsgrad (im Labor) etwa zwei- bis viermal höher, dafür geht aber sehr viel Energie in ihre Herstellung.

2.6 Bremsstrahlung

Bei der Bremsstrahlung handelt es sich um eine Umkehrung des Photoeffektes. Wurde dort Energie von einem Photon auf ein Elektron übertragen, so hier von einem Elektron auf ein Photon. Sehr schematisch in Abb. 2.7:

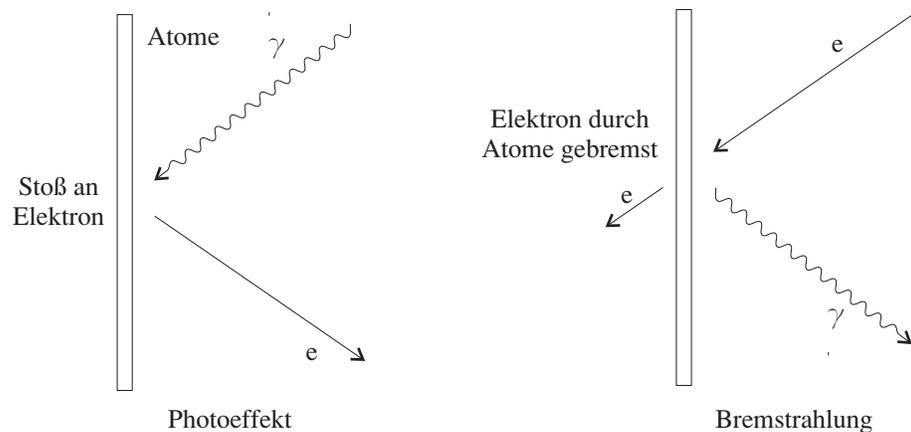


Abbildung 2.7: Vergleich Photoeffekt - Bremsstrahlung

Beim Photoeffekt verschwindet ein Photon, das Elektron ändert nur seinen Bewegungszustand. Beim Bremsstrahlprozeß entsteht ein Photon, ein Elektron ändert wieder seine Bewegung. Die Bremsstrahlung wurde 1895 von RÖNTGEN in Würzburg entdeckt. Abb. 2.8 zeigt den Versuchsaufbau. Mit Spannungen zwischen 10 und 100 kV in einer Vakuumröhre entsteht an der Anode eine durchdringende Strahlung, die sich als kurzwellige elektromagnetische Strahlung herausstellt.

Ihr Auftreten ist in der MAXWELLSchen Theorie verständlich: Elektronen werden im Anodenmaterial abgebremst, und beschleunigte Ladungen strahlen elektromagnetische Felder ab, wie beim HERTZschen Dipol behandelt. Das Frequenzspektrum ist aber nach der MAXWELLSchen Theorie unverständlich und wird wieder nur im Bild der Photonen, die diskrete Energieportionen tragen, erklärbar. Wie mißt man das Frequenzspektrum? Das soll im nächsten Abschnitt behandelt werden. Zunächst die experimentellen Ergebnisse über die Winkelverteilung der Bremsstrahlung. Bei $e \cdot U \ll m_e c^2$, also bei Elektronengeschwindigkeiten, die sehr klein gegen die Lichtgeschwindigkeit sind, sieht die Winkelverteilung aus wie beim HERTZschen Dipol, $dW/d\Omega \propto \sin^2 \vartheta$. Die pro

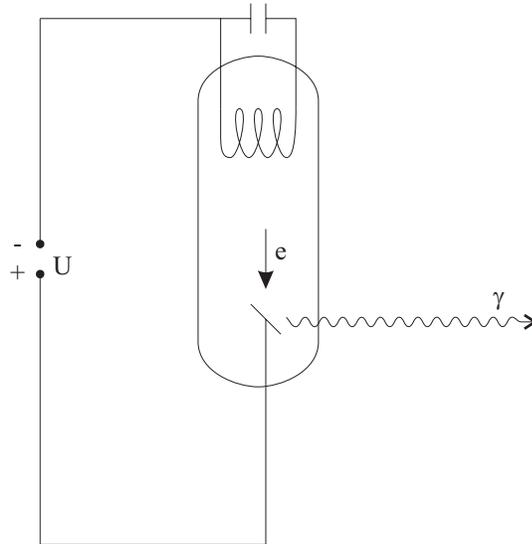


Abbildung 2.8: Versuchsaufbau zur Röntgenstrahlung

Raumwinkeleinheit abgegebene Strahlungsleistung ist proportional zum Sinus-Quadrat des Winkels gegen die Elektronenrichtung. Abb. 2.9(a) zeigt diese Leistungsverteilung als Polardiagramm. Die höchste Intensität tritt unter 90° zur Elektronenrichtung auf, deshalb auch die 90° -Geometrie in Abb. 2.8. Bei höheren Elektronengeschwindigkeiten, ab ca. $v/c \approx 0.2$ verbiegen sich die beiden Intensitätsmaxima in Bewegungsrichtung der Elektronen wie in Abb. 2.9(b) skizziert. Bei sehr hohen Geschwindigkeiten, und Bremsstrahlung wird heute bis zu den höchsten an Beschleunigern erzeugten Elektronenenergien von ca. 50 GeV beobachtet, geht fast die gesamte Bremsstrahlungsintensität in Bewegungsrichtung der Elektronen.

2.7 Wellenlängenmessung und Röntgenspektrometer

In der Optik bestimmt man die Wellenlänge monochromatischen Lichtes, d. h. mit fester Wellenlänge λ , z. B. mit Hilfe eines Beugungsgitters, wie in Abb. 2.10 dargestellt: Der Zusammenhang zwischen Gitterkonstante D , Wellenlänge λ und dem Ablenkwinkel α zum Intensitätsmaximum der Ordnung m ist :

$$m \cdot \lambda = D \cdot \sin \alpha . \quad (2.14)$$

Je kleiner D , umso kleinere Wellenlängen lassen sich damit messen. Das Problem in der Anfangszeit der Röntgenstrahlung war, daß die besten Gitter nur $D = 20 \mu\text{m}$ hatten; damit waren die Wellenlängen von Röntgenstrahlen unmessbar klein. Präzise Gitter lassen sich aber schräg in den Strahl stellen; bei $0,6^\circ$ zwischen Gitterebene und Strahlrichtung gewinnt man einen Faktor 100. Damit gelang es, die Wellenlänge der Cu- K_α -Linie, s. Abschnitt 2.9, zu bestimmen. Aus $\sin \alpha (m = 1) = 8 \cdot 10^{-4}$ folgte $\lambda(\text{Cu} - K_\alpha) = 1,6 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Die Einheit

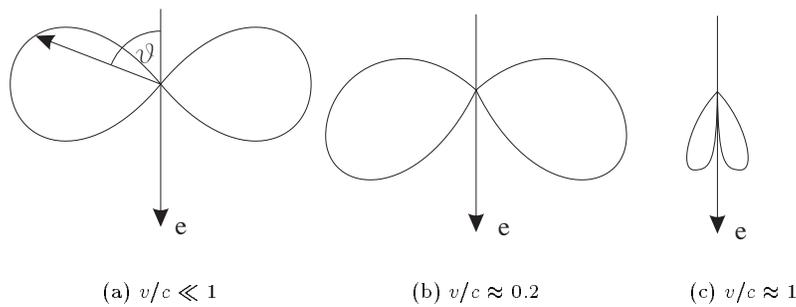


Abbildung 2.9: Bremsstrahlcharakteristik in Abhängigkeit von der Elektronengeschwindigkeit

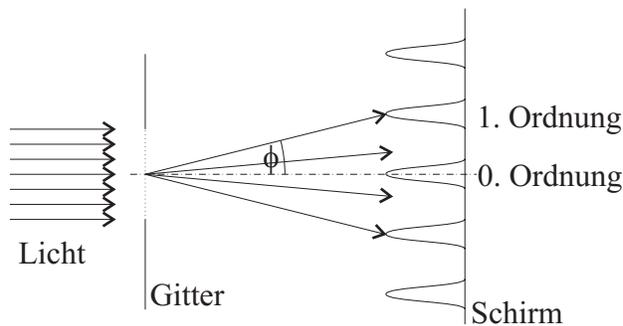


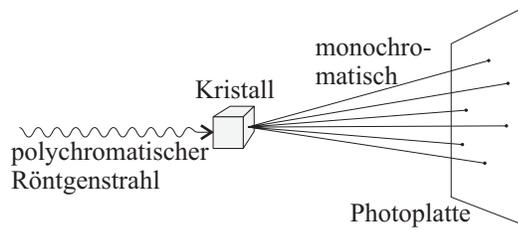
Abbildung 2.10: optisches Beugungsgitter

$1 = 10^{-10}$ m hieß früher 1 Angström. Röntgenwellenlängen bestimmt man jetzt bequemer mit Hilfe von Kristallgittern, nachdem deren Gitterkonstanten mit Röntgenstrahlung bekannter Wellenlänge – mit Hilfe schräg gestellter mechanischer Gitter – bekannt war. Die drei wichtigsten Kristallgittermethoden sind:

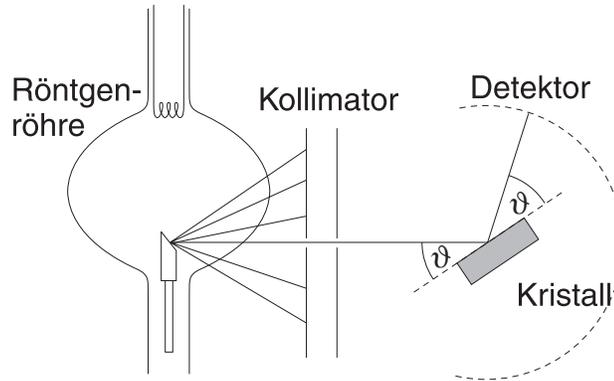
1. das Laue-Verfahren (v. LAUE 1912),
2. das Bragg-Verfahren (BRAGG und BRAGG 1913),
3. das DEBYE-SCHERRER-Verfahren (DEBYE und SCHERRER 1916).

Abb. 2.11 zeigt die ersten beiden Methoden. Mit ihnen lassen sich Kristallgitterabstände bestimmen, wenn die Wellenlänge der (monochromatischen) Röntgenstrahlung bekannt ist. Ebenso gut kann man mit bekannter Gitterkonstante Wellenlängen bestimmen, wofür sich besonders das BRAGG-Verfahren eignet. Und das interessiert uns hier im Hinblick auf die Vermessung eines Bremsstrahlungsspektrums.

Beim LAUE-Verfahren wird polychromatische Röntgenstrahlung durch einen Einkristall geschickt. Die Strahlung regt die Gitteratome zum Mitschwingen an, die Atome senden daraufhin Kugelwellen der gleichen Frequenz aus. Konstruktive Interferenz vieler Nachbaratome führt zu Intensitätsmaxima in jeweils nur



(a) VON LAUE-Verfahren



(b) BRAGG-Verfahren

Abbildung 2.11: Röntgenspektrometer

einer Raumrichtung bei jeweils nur einer Wellenlänge, wenn Glg. (2.14) gerade erfüllt ist. Beim Bragg-Verfahren wird die Röntgenstrahlung an der Oberfläche eines Einkristalls reflektiert. Gesucht wird nach Intensitätsmaxima mit $\varphi_{\text{ein}} = \varphi_{\text{aus}} = \varphi$. Bei monochromatischer Strahlung treten solche Maxima nur unter bestimmten Winkeln φ auf, wie anhand von Abb. 2.12 hergeleitet werden soll. Viel Reflexion heißt konstruktive Interferenz zwischen den Elementarwellen aus der ersten und zweiten und allen folgenden Kristallebenen. Dazu muß der Gangunterschied Δ zwischen \overline{ACD} und \overline{AB} ein Vielfaches der Wellenlänge λ betragen.

$$\overline{AB} = \overline{AD} \cos \varphi, \quad \overline{ACD} = 2 \frac{\overline{AD}/2}{\cos \varphi},$$

$$\Delta = \overline{ACD} - \overline{AB} = \overline{AD} \left(\frac{1}{\cos \varphi} - \cos \varphi \right) = \overline{AD} \frac{\sin^2 \varphi}{\cos \varphi} = z \cdot \lambda.$$

Die Strecke $\overline{AD}/2$ ist aber gerade $d \cdot \cos \varphi / \sin \varphi$ und daraus folgt die BRAGG-Bedingung :

$$\boxed{m \lambda = 2 d \sin \varphi} \quad (2.15)$$

Nur unter diesen Winkeln φ treten Reflexionsmaxima auf. Dabei ist d der Abstand zweier Ebenen, in der Kristallphysik von z. B. NaCl heißt $2d$ die

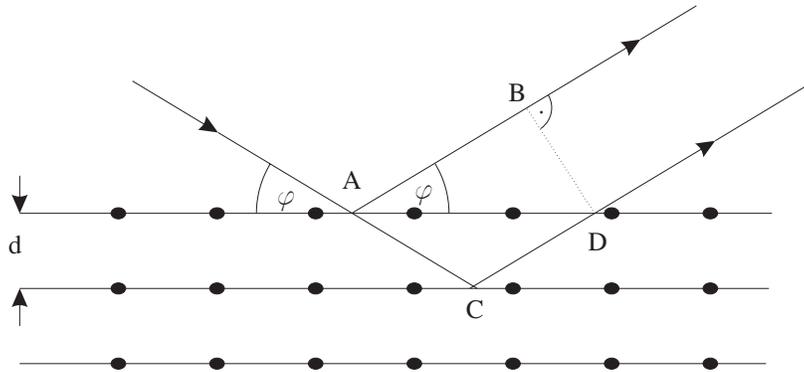


Abbildung 2.12: zur Herleitung der BRAGG-Bedingung.

Gitterkonstante, sie beträgt $2d = 563$ pm.

Beim DEBYE-SCHERRER-Verfahren wird statt eines Einkristalls ein Kristallpulver verwendet. Kristallebenen des Lagenabstandes d liegen dann in allen Raumrichtungen, und BRAGG'sche Reflexion nach Glg. (2.15) tritt unter dem Polarwinkel 2φ zur Einfallsrichtung unter allen Azimutwinkeln auf. Statt Reflexion in nur einer Raumrichtung führt dies zu einem Reflexionskegel, Auf einem fotografischen Film um die Probe herum zeigt sich dieser als schwärzende Kreislinie.

Besonders das BRAGG'sche Drehkristallverfahren eignet sich zum Ausmessen kontinuierlicher Spektren, wenn man mit bekannten Kristallen arbeitet. Kristalle wie NaCl ($d=281$ pm) oder Kalkspat ($d=303$ pm) sind dafür üblich; ihre Eichung geschah wie geschildert mit Hilfe monochromatischer Röntgenstrahlung im 200-pm-Bereich, deren Wellenlänge mit schräggestellten mechanisch hergestellten Gittern an das Meter-Maß angeschlossen wurde.

2.8 Bremstrahlungsspektren und das Gesetz von DUANE und HUNT

Die mit Hilfe von Röntgenröhren nach Abb. 2.8 auf S.26 und BRAGG'schen Drehkristall-Spektrometern nach Abb. 2.11 auf S.28 gefundenen Wellenlängen- bzw. Frequenzspektren der Bremsstrahlung hängen zwar in der Intensität, aber nicht in der Form ³ vom Anodenmaterial ab. Sie hängen jedoch stark von der Spannung U an der Röntgenröhre und der Dicke der Anode ab. Beginnen wir mit den experimentellen Ergebnissen an dünnen Anoden in Abb. 2.13, gemessen z. B. mit einer $1\ \mu\text{m}$ dicken Goldfolie.

Beide Spektren hängen auf triviale Weise miteinander zusammen.

$$\frac{d\dot{W}}{d\nu} = \text{const}, \quad \frac{d\dot{W}}{d\lambda} = \frac{d\dot{W}}{d\nu} \cdot \frac{d\nu}{d\lambda} = \frac{\text{const}}{\lambda^2}, \quad (2.16)$$

³abgesehen von den „charakteristischen“ Linien

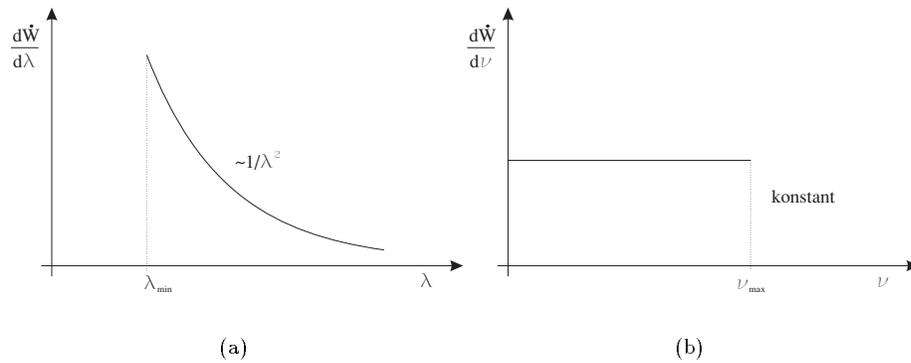


Abbildung 2.13: Wellenlängen- und Frequenzspektrum der Bremsstrahlung in dünner Anode

denn $\nu = c/\lambda$, $d\nu/d\lambda = -c/\lambda^2$. Ferner gilt $\nu_{\max} = c/\lambda_{\min}$. Diese Grenzwerte hängen von der Spannung der Röntgenröhre ab und überhaupt nicht vom Material. Man findet bei $U = 10 \text{ kV}$ $\nu_{\max} = 2,5 \cdot 10^{18} \text{ Hz}$, $\lambda_{\min} = 120 \text{ pm}$ und bei anderen Spannungen $\nu_{\max} \propto U$, $\lambda_{\min} \propto 1/U$.

Bei dicken Anoden werden die Spektren komplizierter, weil die Elektronen im Anodenmaterial ihre Energie nicht nur durch Bremsstrahlung verlieren, sondern überwiegend durch Stöße an Hüllenelektronen, die zu einer Erwärmung des Anodenmaterials führen. Wir betrachten hier die experimentellen Spektren an sehr dicken Anoden, d.h. so dick, daß die beschleunigten Elektronen im Anodenmaterial alle auf Geschwindigkeit Null abgebremst werden. Abb. 2.14(a) zeigt $d\dot{W}/d\nu$ für diesen Fall und die Erklärung, wieso diese Spektrform aus den Ergebnissen an der dünnen Anode folgt.

Jede Schicht erzeugt ein flaches Kastenspektrum der Form in Abb. 2.13(b). Je tiefer die Schicht, um so kleiner die Eindringenergie der Elektronen in diese Schicht und umso kleiner die dazugehörige Grenzfrequenz. Als Summe ergibt sich ein dreieckförmiges Frequenzspektrum, das nur bei kleinen Frequenzen gerundet ist, da die in tiefen Schichten erzeugten Bremsstrahlen im Anodenmaterial selbst wieder absorbiert werden. Für das betrachtete Spektrum gilt in guter Näherung

$$d\dot{W}/d\nu = \text{const} \cdot (\nu_{\max} - \nu) , \quad (2.17)$$

und ν_{\max} ist die gleiche Grenzfrequenz wie die bei gleicher Röhrensorgung U mit dünner Anode erhaltene Grenzfrequenz. Bei Umrechnung auf die Wellenlänge erhält man

$$\frac{d\dot{W}}{d\lambda} = \frac{\text{const}}{\lambda^2} \left(\frac{1}{\lambda_{\min}} - \frac{1}{\lambda} \right) = \text{konst} \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{\lambda_{\min}}{\lambda^3} \right) . \quad (2.18)$$

Abb. 2.14(b) zeigt diese Wellenlängenspektren für Spannungen zwischen 20 kV und 50 kV, gemessen mit einer dicken Wolframanode.

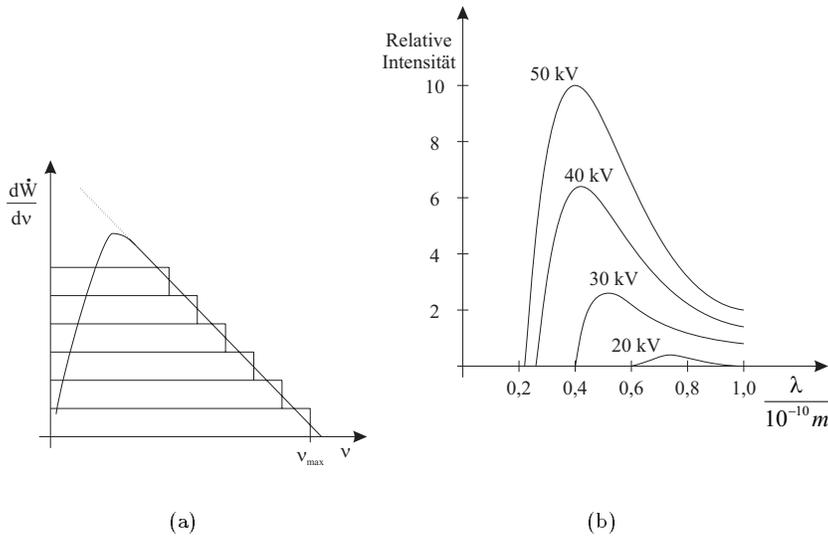


Abbildung 2.14: (a) Frequenzspektrum der Bremsstrahlung in dicker Anode, (b) Wellenlängenspektren mit dicker Wolfram-Anode bei verschiedenen Spannungen.

Jedes Bremsstrahlungsquant trägt die Energie $h\nu$. Im Intervall $[\nu, \nu + d\nu]$ steckt bei dünner Anode ein Intensitätsanteil $d\dot{W}$, der unabhängig von ν ist und nur von U und vom Material abhängt. Die Zahl der Quanten in diesem Intervall folgt dann aus $d\dot{W} = d\dot{N} h\nu$, und es gilt

$$\frac{d\dot{N}}{d\nu} = \frac{\text{const}}{\nu} . \quad (2.19)$$

Die Zahl der Photonen in jedem Frequenzintervall geht etwa mit $1/\nu$ bei dünner Bremschicht. Bei der dicken Anode übersetzt sich Glg. (2.17) in

$$\frac{d\dot{N}}{d\nu} = \text{const} \left(\frac{\nu_{\max}}{\nu} - 1 \right) . \quad (2.20)$$

Beide Photonenzahlspektren sind in Abb. 2.15 dargestellt.

1915 entdeckten DUANE und HUNT die Gesetzmäßigkeit zwischen ν_{\max} und angelegter Spannung,

$$h \cdot \nu_{\max} = e_0 \cdot U , \quad U \cdot \lambda_{\min} = hc/e_0 = 1234 \text{ V} \cdot \text{nm} . \quad (2.21)$$

Aus diesem Gesetz folgt unmittelbar die Deutung der Bremsstrahlung: Ein abgebremstes Elektron gibt Energie quantenweise in elektromagnetische Strahlung ab. Jedes Quant trägt die Energie $h\nu$, das energiereichste Quant die Energie $e_0 U$, denn mehr als seine gesamte Energie kann das Elektron nicht abgeben. Das Gesetz in Glg. (2.21) heißt DUANE-HUNT-Gesetz. Es wurde auch zur experimentellen Bestimmung des Wertes von h benutzt.

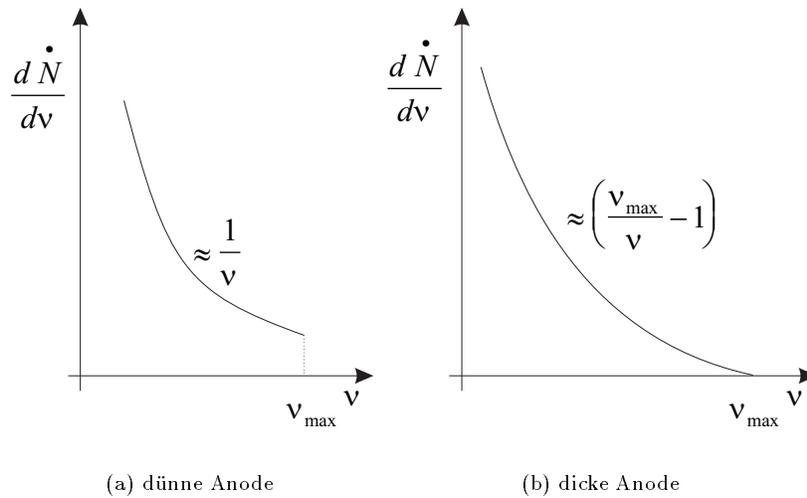


Abbildung 2.15: Photonenzahlspektren dünner und dicker Anoden

Aus den Ergebnissen in Abb. 2.14(b) ist auch etwas über die Gesamtintensität der Bremsstrahlung abzulesen, sie steigt ungefähr mit U^2 an. D. h. der Anteil der Elektronenenergie, der sich in Bremsstrahlung verwandelt, wächst etwa linear mit U . Als Faustformel im Bereich von 10 kV bis 100 kV gilt

$$\frac{\dot{W}(\text{Bremsstrahlung})}{\dot{W}(\text{Elektronenstrahl})} = \frac{Z \cdot U}{10^9 \text{ V}} \quad (2.22)$$

bei dicker Anode aus einem Material der Ordnungszahl Z . Die Bremsstrahlungsausbeute bei Wolfram mit $Z = 74$ und $U = 50$ kV liegt bei nur etwa 0,4%. Aber die Elektronen werden doch vollständig abgebremst, wo bleibt die Energie? Sie wird in Wärme umgesetzt. Das Anodenmaterial wird so stark erwärmt, daß im technischen Betrieb von Röntgenröhren die Anoden meist wassergekühlt werden müssen.

2.9 Charakteristische Röntgenstrahlung

Der weitaus größte Teil der Elektronenenergie in einer Röntgenröhre verwandelt sich in Wärme und nicht in Bremsstrahlung. Was heißt das mikroskopisch gesehen? Die beschleunigten Elektronen werden durch Stöße mit Kernen, mit festgebundenen Elektronen und mit schwachgebundenen Elektronen im Anodenmaterial abgebremst. Im Vorgriff auf die Atomphysik: „Festgebunden“ bedeutet, daß sich die Elektronen auf den innersten Bahnen um die Atomkerne bewegen; ihre Bindungsenergien betragen je nach Kernladungszahl zwischen 10^3 eV beim Aluminium und 10^5 eV beim Wolfram. „Losegebunden“ bedeutet in Metallen, daß sich diese Elektronen frei durch das gesamte Metall bewegen können, deswegen leiten Metalle den elektrischen Strom, und daß es nur einer Auslösearbeit im eV-Bereich bedarf. Natürlich liegt zwischen „fest“ und „lose“ eine Vielzahl von Elektronenzuständen.

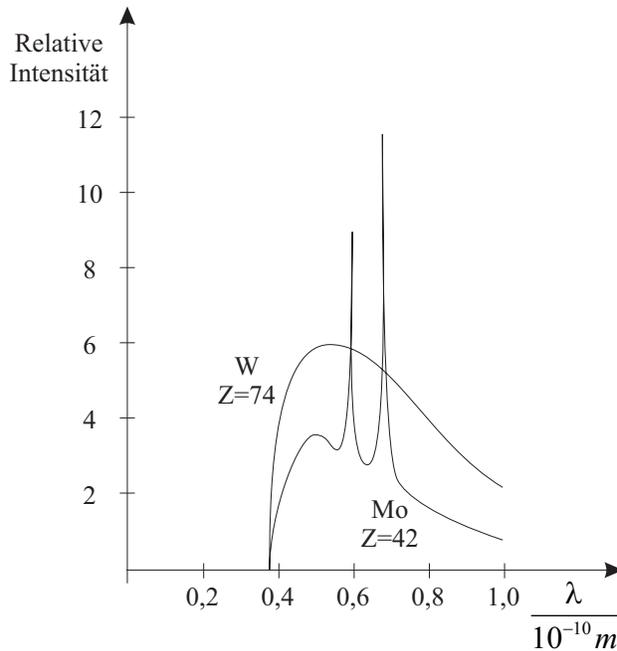


Abbildung 2.16: Röntgenstrahlungsspektren für Wolfram und Molybdän bei $U = 35$ kV

Stöße mit den Kernen führen zur Bremsstrahlung. Stöße mit den meisten Elektronen führen zur Erwärmung des Anodenmaterials und gelegentlich auch zum Herausschlagen eines Elektrons, zur Sekundärelektronenemission wie in Abschnitt 2.4 beim Photovervielfacher diskutiert. Stöße mit Elektronen auf den innersten Bahnen führen zur sogenannten „charakteristischen Röntgenstrahlung“. Abb. 2.16 zeigt die beobachteten Röntgenstrahlungsspektren bei $U = 35$ kV mit dicker Wolfram- und Molybdän-Anode. Das Wolframspektrum ist glatt und besteht nur aus Bremsstrahlung, das Molybdänpektrum enthält zusätzlich zwei ausgeprägte monochromatische Linien, genannt K_α bei ca. 70 pm und K_β bei ca. 62 pm. Sie treten gemeinsam mit der Bremsstrahlung im gleichen Versuchsaufbau auf, haben aber nichts mit Bremsstrahlung zu tun. Diese elektromagnetische Strahlung stammt aus der Atomhülle: Ein durch Elektronenstoß erzeugtes Loch in der innersten (K-) Schale wird durch Elektronensprung aus der nächsten (L-) Schale oder übernächsten (M-) Schale aufgefüllt. Bei diesem Sprungprozess wird ein Photon erzeugt, und dieses erhält als kinetische Energie die Differenz der Bindungsenergien in K- und L-Schale (K_α) bzw. K- und M-Schale (K_β). Die Schalenvorstellung wurde anhand der charakteristischen Röntgenlinien entwickelt und führte zusammen mit den optischen Linienspektren in Gasen 1913 zum BOHR'schen Atommodell. Die Strahlung heißt „charakteristisch“, weil zu jedem Element Linien anderer Frequenz gehören.

Abb. 2.17 zeigt eine Zusammenstellung der Linien über das Periodensystem der chemischen Elemente. Mehr darüber in der Atomphysik. Für das Folgende ist wichtig, daß die charakteristischen Linien dem Experimentator auf be-

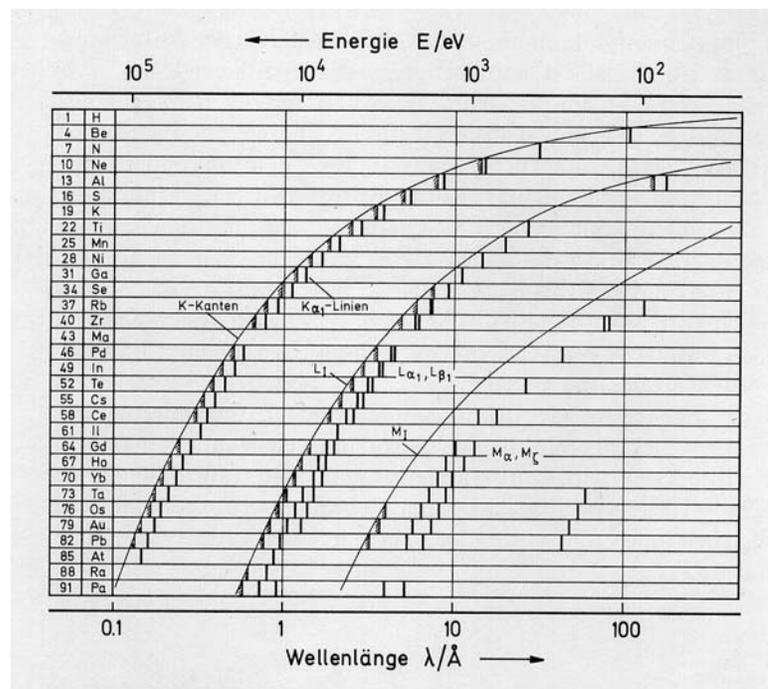


Abbildung 2.17: Energien und Wellenlängen charakteristischer Röntgenstrahlung für eine Auswahl von Elementen zwischen $Z = 1$ und $Z = 91$. [Aus K. H. Hellwege, Einführung in die Physik der Atome]

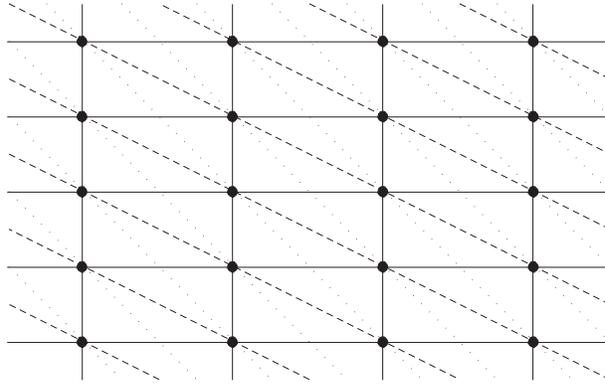


Abbildung 2.18: Interferenzebenen im kubischen Kristallgitter

queme Weise eine monochromatische elektromagnetische Strahlung im Bereich der Bremsstrahlungswellenlängen zur Verfügung stellen. Der im übernächsten Abschnitt diskutierte COMPTON-Effekt wurde mit der Molybdän- K_α -Linie aus Abb. 2.16 entdeckt.

Zusammengefasst: Röntgenstrahlung = Bremsstrahlung +
charakteristische Strahlung im Wellenlängenbereich 10 bis 1000 pm.

Ohne charakteristische Röntgenstrahlung wären auch viele Erfolge der Röntgenstrukturanalyse undenkbar. Im Abschnitt 2.7 über Röntgenspektrometer haben wir nur das Allereinfachste darüber gesagt. Wie in Abb. 2.18 skizziert, besteht selbst der einfachste kubische Kristall nicht nur aus Ebenen eines Gitterabstandes d , sondern aus einer Vielzahl interferenzfähiger Ebenen mit verschiedenen Abständen. Und die Streuzentren sind keine Punkte, sondern ausgehende Elektronenverteilungen. Mit charakteristischer Röntgenstrahlung einer festen Wellenlänge treten an einem Kristall viele Linien in der Reflexionswinkelverteilung auf. Das Vermessen solcher Linien einschließlich der Intensitäten und Breiten führt zu Elektronendichteverteilungen im Kristall.

2.10 Impulserhaltung bei Photoeffekt und Bremsstrahlung

Der Photoeffekt wurde von EINSTEIN im Quantenbild mit Energieerhaltung

$$h\nu = \frac{1}{2}mv^2 + A \quad (2.23)$$

gedeutet. Wie sieht es mit den Impulsen aus? Nehmen wir ein Zahlenbeispiel mit $v = 2 \cdot 10^{-3}c$. Das Photon trägt $p(\gamma) = 3 \text{ eV}/c$, das abgetrennte Elektron $p(e) = 1000 \text{ eV}/c$. Woher kommt dieser Impuls, oder ist der Impuls etwa nicht erhalten? Die Antwort steckt in der Wärmebewegung der Kerne. Sei M die Masse eines (z.B. Kalium-) Kernes, dann gilt :

$$\frac{1}{2}M\overline{v_x^2} = \frac{1}{2}kT = \frac{1}{80} \text{ eV} \quad (2.24)$$

bei Labortemperaturen um 293 K. Dem entspricht eine quadratisch mittlere Geschwindigkeit von $8 \cdot 10^{-7}c$. Dem entspricht ein quadratisch mittlerer Kernimpuls von $3 \cdot 10^4 \text{ eV}/c$. Dies ist 30 mal mehr als für den Photoeffekt notwendig. Der fehlende Impuls kommt also aus der Wärmebewegung des Kernes und die vollständige Reaktionsgleichung es Photoeffektes lautet :

$$\gamma + e(\text{gebunden}) + K \rightarrow e(\text{frei}) + K \quad (2.25)$$

Ohne Kernnähe gibt es keinen Photoeffekt. Was ist der Beitrag des aufgenommenen Kernimpulses zur Energiebilanz? Der Kern gibt $dp = 1000 \text{ eV}/c$ ab. Seine kinetische Energie beträgt $\frac{1}{40} \text{ eV}$. Seine Energieänderung $dE_{kin} = p dp/M = 4 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$. Für die Gesamtenergiebilanz,

$$h\nu + 4 \cdot 10^{-4} \text{ eV} = \frac{1}{2}mv^2 + A, \quad (2.26)$$

ist das unmeßbar wenig, d.h. vier Zehnerpotenzen kleiner als die anderen beteiligten Energien. Ist der Prozeß

$$\gamma + e(\text{langsam}) \rightarrow e(\text{schnell}), \quad (2.27)$$

d. h. Photoeffekt am freien Elektron überhaupt möglich? Relativistisch korrekt betrachtet mit Energieerhaltung,

$$h\nu + \gamma_1 m_0 c^2 = \gamma_2 m_0 c^2, \quad (2.28)$$

und Impulserhaltung,

$$\frac{h\nu}{c} + \beta_1 \gamma_1 m_0 c = \beta_2 \gamma_2 m_0 c, \quad (2.29)$$

ergibt sich, wenn man Energie- und Impulserhaltung verlangt :

$$\begin{aligned} (\gamma_2 - \gamma_1)m_0 c^2 &= (\beta_2 \gamma_2 - \beta_1 \gamma_1)m_0 c^2 \\ \gamma_2(1 - \beta_2) &= \gamma_1(1 - \beta_1) \\ \sqrt{\frac{1 - \beta_2}{1 + \beta_2}} &= \sqrt{\frac{1 - \beta_1}{1 + \beta_1}} \\ \beta_1 &= \beta_2 \end{aligned} \quad (2.30)$$

Dies ist die einzige Lösung. Kinematisch gibt es den Prozeß nur für $h\nu = 0$, d.h. es ist kein Energieübertrag eines Photons auf ein Elektron möglich, wenn das Photon dann verschwinden soll. Photoeffekt am freien Elektron ist unmöglich.

Die gleichen Überlegungen gelten für die Bremsstrahlung. Der Prozeß heißt

$$e(\text{schnell}) + \text{Kern} \rightarrow e(\text{langsam}) + \gamma + \text{Kern} \quad (2.31)$$

Der Kern nimmt bei der Bremsstrahlung Impuls auf, aber wieder nur sehr wenig Energie, und im DUANE-HUNT-Gesetz ist diese Energie gegen eU und $h\nu$ vernachlässigbar klein.

Die „Katalysatorrolle“ von Kernen macht die kleinen Quanteneffekte Bremsstrahlung und Photoeffekt in gewisser Weise fraglich. Verstehen wir wirklich alles in Kernnähe? Gibt es einen Quanteneffekt nur zwischen Licht und Elektronen ohne Mitwirkung anderer Materie?

2.11 Der COMPTON-Effekt

Dieser Quanteneffekt zwischen Licht und Elektronen wurde 1922 von A. H. COMPTON an der Universität von St. Louis in Missouri entdeckt. Gemäß Abb. 2.19 wurde monochromatische Mo- K_α -Strahlung (s. auch Abb. 2.16) an einem Graphit-Kristall gestreut und die Streustrahlung als Funktion des Streuwinkels ϑ analysiert. Zu jedem ϑ gehört ein Wellenlängenspektrum $dW/d\lambda$, und

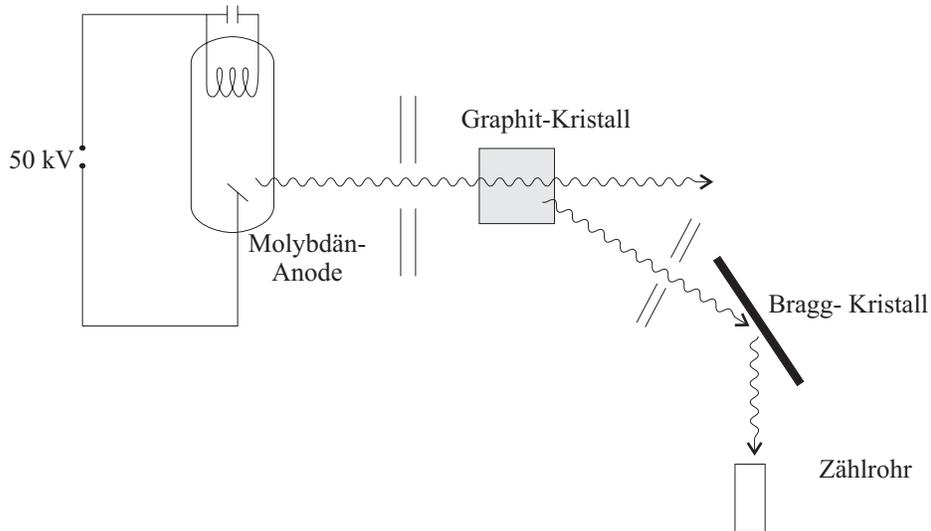


Abbildung 2.19: Versuchsaufbau zum COMPTON-Effekt

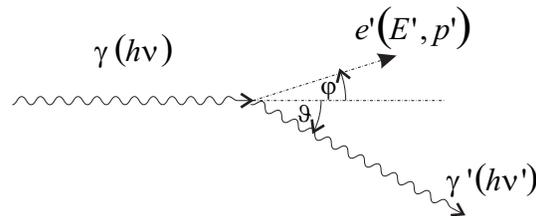


Abbildung 2.20: Prinzipskizze zum COMPTON-Effekt

Abb. 2.21 zeigt die Ergebnisse von COMPTON. Zusätzlich zu den Photonen der ursprünglichen Wellenlänge $\lambda = 70 \text{ pm}$ treten bei $\vartheta \neq 0^\circ$ Photonen mit größerer Wellenlänge $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda(\vartheta)$ auf, und $\Delta\lambda(\vartheta)$ wächst kontinuierlich mit dem Streuwinkel. $\Delta\lambda(90^\circ) = 2.4 \text{ pm}$. COMPTON deutete seine Resultate richtig als die elastische Streuung von Lichtquanten an quasifreien (lose-gebundenen) Elektronen im Graphit. Dieser Prozeß soll hier relativistisch durchgerechnet werden mit den Bezeichnungen aus Abb. 2.20.

$$p_i(\gamma) + p_i(e) = p_i(\gamma') + p_i(e'). \quad \text{Viererimpulserh.} \quad i = 0, 1, 2, 3 \quad (2.32)$$

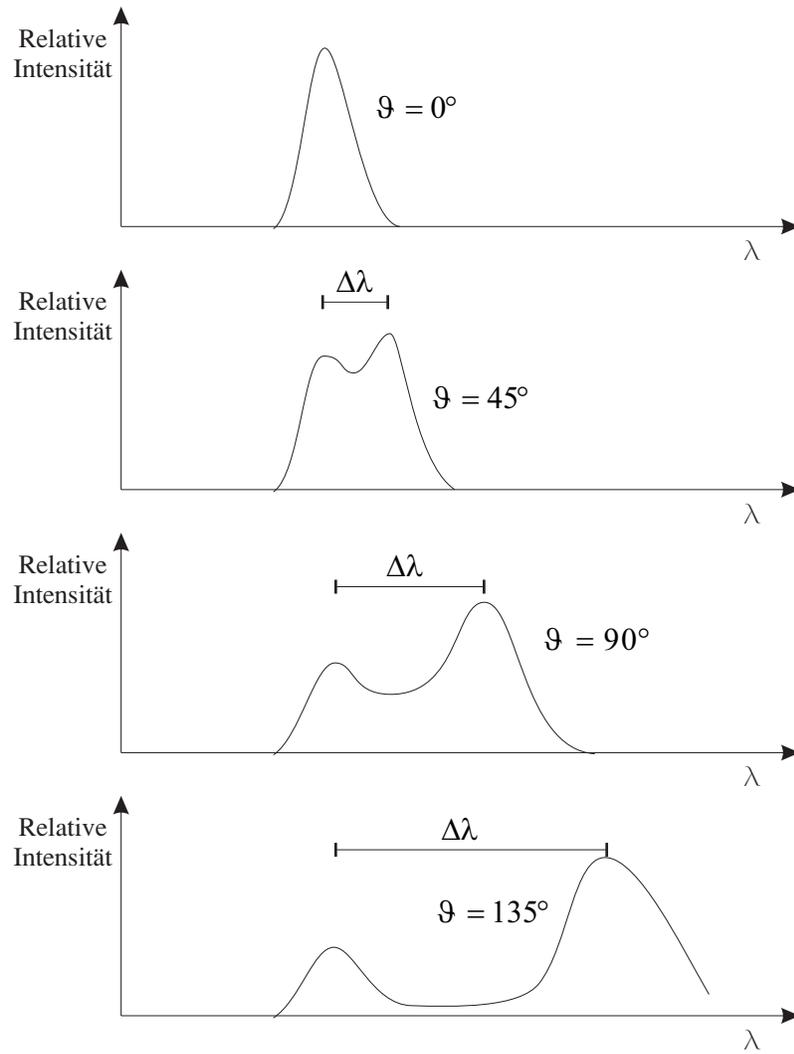


Abbildung 2.21: Rel. Intensitäten in Abhängigkeit vom Streuwinkel

$$\begin{aligned}
i = 0 : & \quad h\nu + mc^2 = h\nu' + \gamma' mc^2 \quad [m = m_0(e)] \\
i = 1 : & \quad \frac{h\nu}{c} + 0 = \frac{h\nu'}{c} \cos \vartheta + \beta' \gamma' mc \cos \varphi \\
i = 2 : & \quad 0 = -\frac{h\nu'}{c} \sin \vartheta + \beta' \gamma' mc \sin \varphi \\
i = 3 : & \quad 0 = 0 \quad [\text{senkrecht zur Streuebene}]
\end{aligned}$$

($i = 2$) und ($i = 1$) quadriert :

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 \sin^2 \vartheta = (\beta' \gamma' mc)^2 \sin^2 \varphi \\
\left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2} \cos \vartheta + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 \cos^2 \vartheta &= (\beta' \gamma' mc)^2 \cos^2 \varphi
\end{aligned}$$

beide Gleichungen addiert :

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2} \cos \vartheta = (\beta' \gamma')^2 m^2 c^2 \\
\rightarrow h^2(\nu - \nu')^2 + 2h^2\nu\nu'(1 - \cos \vartheta) &= (\beta' \gamma')^2 m^2 c^4 \quad (*)
\end{aligned}$$

($i = 0$) quadriert :

$$\begin{aligned}
& (h(\nu - \nu') + mc^2)^2 = \gamma'^2 m^2 c^4 \\
\Rightarrow h^2(\nu - \nu')^2 + 2h(\nu - \nu')mc^2 &= \gamma'^2 m^2 c^4 - m^2 c^4
\end{aligned}$$

Dies von [*] abgezogen ergibt:

$$\begin{aligned}
2h^2\nu\nu'(1 - \cos \vartheta) - 2h(\nu - \nu')mc^2 &= m^2 c^4 (\beta'^2 \gamma'^2 - \gamma'^2 + 1) \\
&= m^2 c^4 \frac{\beta'^2 - 1 + 1 - \beta'^2}{1 - \beta'^2} = 0 \quad , \\
h\nu\nu'(1 - \cos \vartheta) &= (\nu - \nu')mc^2 \\
\frac{\nu - \nu'}{\nu\nu'} &= \frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h(1 - \cos \vartheta)}{mc^2}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\lambda' - \lambda \equiv \Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \vartheta)} \quad (2.33)$$

Dies ist genau das in Abb. 2.21 gezeigte Resultat von COMPTON. Seine Beobachtung entspricht der elastischen Streuung von Lichtquanten an Elektronen. Damit ist das Teilchenverhalten eines Photons aufs Einfachste und Eindrucksvollste demonstriert. Der Faktor h/mc in Glg. (2.33)

$$\lambda_C = \frac{h}{mc} = 2,4263 \text{ pm} \quad (2.34)$$

heißt COMPTON-Wellenlänge des Elektrons. Ein Photon mit der Wellenlänge λ_C hat eine Energie, die der Ruheenergie des Elektrons entspricht. $W = hc/\lambda_C = mc^2 = 511 \text{ keV}$.

In COMPTONS Experiment war $\lambda = 70$ pm und das maximale $\Delta\lambda$ bei $\vartheta = 180^\circ$ ist $2\lambda_C = 4,8$ pm. Bei sichtbarem Licht mit $\lambda = 480$ nm ist der COMPTON-Effekt praktisch nicht zu erkennen. Welche kinetische Energie erhält das Elektron durch den COMPTON-Effekt?

$$\begin{aligned} E_{kin}(e') &= h(\nu - \nu') = \frac{h\nu \Delta\lambda}{\lambda\lambda'} = \frac{h\nu \cdot \frac{h}{mc} \cdot (1 - \cos\vartheta)}{\frac{c}{\nu} \left[\frac{c}{\nu} + \frac{h}{mc} (1 - \cos\vartheta) \right]} \\ &= \frac{(h\nu)^2}{mc^2} \frac{1 - \cos\vartheta}{1 + \frac{h\nu}{mc^2} \cdot (1 - \cos\vartheta)} \\ &\approx \frac{(h\nu)^2}{mc^2} (1 - \cos\vartheta), \quad \text{wenn } h\nu \ll mc^2. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Bei $\lambda = 70$ pm ist $E_{kin}(e') = 560 \text{ eV}(1 - \cos\vartheta)$. Mit höheren Photonenenergien steigt $E_{kin}(e')$, und 1925 gelang es COMPTON und SIMON, das gestreute Elektron in einer Nebelkammer sichtbar zu machen. Ebenfalls 1925 gelang es BOTHE und GEIGER, mit einer elektronischen „Koinzidenz“-Schaltung zweier Zählrohre zu zeigen, daß Elektron und Photon gleichzeitig auftreten. Bei entsprechend kleiner einfallender γ -Intensität mißt man in den Zählrohren keine Dauerintensität mehr, sondern einzelne elektrische Impulse. Der Prozeß $e + \gamma \rightarrow e' + \gamma'$ wird dann als Wechselwirkung eines Elektrons mit einem Photon sichtbar. Wie schon anhand des Photovervielfachers mit sehr kleiner einfallender Lichtintensität diskutiert, bleibt bei solchen Beobachtungen von der elektromagnetischen Wellenerklärung des Lichtes nichts übrig. Licht zeigt sich hier als Fluß einzelner Teilchen mit allen mechanischen Eigenschaften eines Teilchens.

2.12 RAYLEIGH- und THOMSON-Streuung

Im COMPTON-Experiment tritt, wie in Abb. 2.21 auf Seite 38 zu sehen, bei allen Streuwinkeln auch eine Linie bei 70 pm auf, also nicht um $\Delta\lambda$ verschoben. Während die Verschiebung um $\Delta\lambda$ in der klassischen Wellenverschiebung nicht erklärt werden kann, ist die Linie bei $\lambda' = \lambda$ darin verständlich: Die Lichtwelle regt die Atome zum Mitschwingen an und diese senden daraufhin wie ein HERTZ'scher Dipol Lichtwellen genau gleicher Frequenz aus. Das wurde 1899 von RAYLEIGH für Licht optischer Wellenlängen und 1906 von J. J. THOMSON für Röntgenwellen durchgerechnet. Wir wollen beide Streuprozesse hier nachholen, historisch verspätet, denn beide haben auch für die Entwicklung der Quantenphysik eine bedeutende Rolle gespielt: aus der RAYLEIGH-Streuung kann man die Avogadrozahl messen und aus der jetzt nach ihm benannten Streuung hat THOMSON 1906 geschlossen, daß in einem Atom der chemischen Massenzahl A ungefähr $A/2$ Elektronen enthalten sind.

Wir behandeln RAYLEIGH- und THOMSONstreuung hier nur kurz im Wellenbild und kommen am Ende des Abschnittes kurz auf die Beschreibung im Photonenbild zurück. Ein elektrischer Dipol, der harmonisch schwingt und das Dipolmoment

$$\vec{d} = q \cdot \vec{x} = \vec{d}_0 \cos \omega t \quad (2.36)$$

besitzt, strahlt elektromagnetische Wellen der über alle Ausstrahlungswinkel

integrierten Leistung

$$\frac{dW}{dt} = \dot{W} = \frac{\vec{d}_0^2 \omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} = \frac{4\pi^3 c}{3\epsilon_0} \frac{\vec{d}_0^2}{\lambda^4} \quad (2.37)$$

ab. Die auf ein Stück Materie der Fläche A einfallende Lichtleistung ist nach Glg. (2.2) :

$$\dot{W}_{in} = \frac{1}{2}\epsilon_0 \vec{E}_0^2 \frac{dV}{dt} = \frac{1}{2}\epsilon_0 \vec{E}_0^2 c A \quad (2.38)$$

Im Volumen $dV = A dx$ befinden sich $n \cdot dV$ Atome, wenn

$$n = \frac{N}{V} \quad (2.39)$$

die Zahl der Atome pro Volumen bedeutet („Anzahldichte“).

Eine auf das Stück Materie mit der Fläche A und Dicke dx auffallende (linear polarisierte und ebene) Welle verliert darin also durch Anregung der Atome und darauffolgende Abstrahlung eine Leistung von

$$d\dot{W} = n \cdot A \cdot dx \cdot \frac{4\pi^3 c \vec{d}_0^2}{3\epsilon_0 \lambda^4} \quad (2.40)$$

und einen Leistungsanteil von

$$\frac{d\dot{W}}{\dot{W}} = \frac{n A dx 4\pi^3 d_0^2 c}{3 \epsilon_0 \lambda^4 \frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2 c A} = n \cdot \frac{8\pi^3 (d_0/E_0)^2}{3\epsilon_0^2 \lambda^4} \cdot dx \quad (2.41)$$

Wir schreiben dies als

$$\frac{d\dot{W}}{\dot{W}} = -n \sigma dx \quad , \quad (2.42)$$

das Minuszeichen bedeutet Leistungsabnahme in der Welle, mit

$$\boxed{\sigma = \frac{8 \pi^3}{3 \epsilon_0^2 \lambda^4} \left(\frac{d_0}{E_0} \right)^2} \quad (2.43)$$

Integration von Glg. (2.42) ergibt bei Durchlaufen einer dicken Schicht :

$$\dot{W}(x) = \dot{W}(0)e^{-n\sigma x} \quad (2.44)$$

Die Leistung nimmt nach einer Strecke von $1/n\sigma$ auf e^{-1} der Anfangsleistung ab. Messungen im sichtbaren Wellenlängenbereich und in sehr sauberer Luft⁴ ergeben einen Wert von 18 km und gute Proportionalität von $n\sigma$ und $1/\lambda^4$. Das heißt, d_0/E_0 ist im optischen Bereich von λ unabhängig. Diese Tatsache ist für die blaue Farbe des Himmels und die roten Sonnenuntergänge verantwortlich: blaues Licht wird viel stärker gestreut als rotes, $\sigma \propto 1/\lambda^4$. Was bedeutet das atomistisch? Offenbar sind die Eigenfrequenzen der Ladungen im Atom sehr viel

⁴durch den Dresdner Physiker Harry Dember 1914 auf Teneriffa in 3200 m Höhe

größer als $\nu = c/\lambda$. Die erzwungenen Schwingungen durch die Lichtwelle führen dann gemäß der bekannten Resonanzkurve in Abb. 2.22 wegen $\nu \ll \nu_0$ zu einem Mitschwingen der Ladungen und frequenzunabhängiger Amplitude d_0 . Bei $\nu = 0$ ist d_0/E_0 bekannt. Diese „Polarisierbarkeit“ der Materie ist die Ursache für die Dielektrizitätskonstante, und es gilt $\varepsilon_0(\varepsilon_r - 1) = n \cdot d_0/E_0$. Die Messungen und der für die Luft bekannte Wert von $\varepsilon_r = 1,00063$ führen zu einer Bestimmung der Avogadrozahl N_A . Es ist

$$n = \frac{N}{V} = \frac{N}{\nu} \cdot \frac{\nu}{m} \cdot \frac{m}{V} = N_A \cdot \frac{1}{\mu} \cdot \rho \quad (2.45)$$

mit ν = Stoffmenge, μ = Molmasse mit der Einheit g/mol und ρ = Massendichte. Aus der gemessenen Absorptionslänge von 18 km und $\mu = 29$ g/mol für das Mittel von Luftmolekülen erhalten wir $N_A = 6,6 \cdot 10^{23}$ /mol.

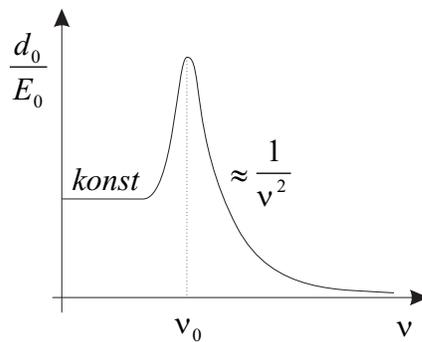


Abbildung 2.22:

Soweit die Theorie der RAYLEIGH-Streuung und ihre Erfolge. Streuexperimente mit Röntgenstrahlung zeigen eine gestreute Intensität, die in gewissen Grenzen unabhängig von λ ist und zudem auf einfache Weise vom Material abhängt. Der über Glg. (2.42), bzw. Glg. (2.44) gewonnene Streukoeffizient $n\sigma$ dividiert durch die Dichte ρ ist bei leichten Elementen um $\lambda = 30$ pm herum konstant:

$$\frac{n\sigma}{\rho} = 0,02 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}} \quad (2.46)$$

Die Unabhängigkeit von λ läßt sich aus Abb. 2.22 verstehen: Für $\nu \gg \nu_0$ wird $d_0/E_0 \approx 1/\nu^2$, und wir können sogar den Absolutwert ausrechnen. Die erzwungene Schwingung lautet nichtrelativistisch:

$$m\ddot{l} + kl + Dl = e_0 E_0 \cos \omega t \quad , \quad (2.47)$$

wenn ein Elektron der Masse m und der Ladung e_0 von der elektrischen Feldstärke mit E_0 und ω zum Mitschwingen gezwungen wird. Für $\omega \gg \omega_0 = \sqrt{D/m}$ ist kl und Dl gegen $m\ddot{l}$ vernachlässigbar, und mit dem Ansatz

$$l = l_0 \cos \omega t \quad (2.48)$$

heißt die Lösung :

$$\begin{aligned} l_0 &= \frac{e_0 E_0}{m\omega^2} \\ d_0 &= e_0 l_0 = \frac{e_0^2 E_0}{m\omega^2} \\ \frac{d_0}{E_0} &= \frac{e_0^2}{m\omega^2} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Eingesetzt in Glg. (2.43) :

$$\sigma = \frac{8 \pi^3}{3 \varepsilon_0^2 \lambda^4} \cdot \frac{e_0^4}{m^2 \omega^4} \quad (2.50)$$

$$= \frac{8 \pi^3 e_0^4 \lambda^4}{3 \varepsilon_0^2 \lambda^4 m^2 c^4 (2\pi)^4} \quad (2.51)$$

Dies ist für ein Elektron gültig. Hat ein Atom Z Elektronen, gilt

$$\sigma = Z \cdot \frac{8\pi}{3} \cdot r_e^2 = Z \cdot 6.65 \cdot 10^{-29} \text{ m}^2 \quad (2.52)$$

mit dem sogenannten „klassischen Elektronenradius“ :

$$r_e = \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 mc^2} = 2.818 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (2.53)$$

Diese Rechnung THOMSONS, verglichen mit den experimentellen Ergebnissen aus Glg. (2.46), ergibt :

$$\begin{aligned} Z \cdot 6.65 \cdot 10^{-29} \text{ m}^2 &= 0.02 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}} \cdot \frac{\rho}{n} = 0.02 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}} \cdot \frac{\mu}{N_A} \\ Z &\approx \frac{1}{2} \cdot \mu \frac{\text{kmol}}{\text{kg}} \end{aligned} \quad (2.54)$$

Eine Substanz mit dem Atomgewicht A und $\mu = A \text{ kg/kmol}$ hat $Z = A/2$ Elektronen pro Atom. Dieser uns so vertraute Sachverhalt (bei leichten Elementen) gewann THOMSON 1906 aus der Streuintensität von Röntgenstrahlung. Die Formel 2.52 für THOMSON-Streuung gilt nur in einem eingeschränkten Bereich. Für größere Wellenlängen überwiegt RAYLEIGH-Streuung, für kleinere COMPTON-Streuung.

Die Linie mit $\lambda = \lambda'$ in COMPTON'S Experiment, Abb. 2.21(S. 38), rührt von der THOMSON-Streuung her. Wie versteht man diese Linie im Quantenbild? Der Energieübertrag des Photons auf das Elektron ist nach Glg. (2.35) auf Seite 40:

$$E_{\text{kin}}(e') = \frac{(h\nu)^2}{mc^2} (1 - \cos \vartheta) = 560 \text{ eV} (1 - \cos \vartheta) \quad (2.55)$$

Die innersten Elektronen des Kohlenstoffes sind mit ca. 300 eV gebunden, d. h. bei kleinen Winkeln können diese Elektronen durch elastischen Photonenstoß gar nicht aus dem Atom gelöst werden. Das Photon stößt mit dem Atom als Ganzem, in der Herleitung wird die Elektronenmasse m durch die Atommasse M ersetzt und

$$\Delta\lambda = \frac{h}{Mc} (1 - \cos \theta) \ll \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) .$$

2.13 Der Wirkungsquerschnitt

Die Abschwächung der Wellenintensität $\dot{W} = dW/dt$ durch Streuung oder Absorption kann immer als

$$\frac{d\dot{W}}{\dot{W}} = -n \sigma dx , \quad \dot{W}(x) = \dot{W}(0) e^{-n\sigma x} \quad (2.56)$$

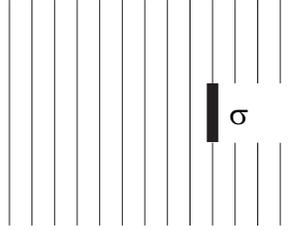


Abbildung 2.23: Der Wirkungsquerschnitt

geschrieben werden. Die Schwächung ist (bei dünnen Schichten) der Dicke der Schicht und der Anzahldichte der Streu- oder Absorptionszentren proportional. Die verbleibende Größe σ gibt dann die Schwächung an einem einzigen dieser Zentren, z.B. einem Elektron oder einem Molekül, an. σ heißt *Wirkungsquerschnitt* und hat die Dimension einer Fläche.

$$\sigma(\text{Rayleigh}) = \frac{8\pi^3}{3\varepsilon_0^2\lambda^4} \left(\frac{d_0}{E_0}\right) \quad \text{für ein Molekül,} \quad (2.57)$$

$$\sigma(\text{Thomson}) = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \quad \text{für ein Elektron.} \quad (2.58)$$

Daß der Wirkungsquerschnitt die Dimension einer Fläche hat sieht man an seiner Definition in Glg. (2.42) auf Seite 41. Anschaulich bedeutet der Wirkungsquerschnitt die Fläche, über die ein Streuzentrum Intensität aus der Welle herausnimmt, wie in Abb. 2.23 skizziert. Der Wirkungsquerschnitt ist aber nicht direkt eine Fläche, denn eine doppelt so große Fläche, die nur die Hälfte der Intensität wegnimmt, hat den selben Wirkungsquerschnitt.

Gehen wir vom Wellenbild zum Teilchenbild, z.B. bei monochromatischer elektromagnetischer Strahlung, dann ist

$$\frac{d\dot{W}}{W} = \frac{d\dot{N} h\nu}{\dot{N} h\nu} = \frac{d\dot{N}}{\dot{N}} \quad (2.59)$$

$$d\dot{N} = -\dot{N} n \sigma dx \quad (2.60)$$

$$\dot{N}(x) = \dot{N}(0) e^{-n\sigma x} \quad (2.61)$$

In dünner Schicht ist die Zahl der gestreute Quanten pro Zeiteinheit gleich der Zahl der einlaufenden Quanten pro Zeiteinheit mal Wirkungsquerschnitt mal Anzahldichte der Streuzentren mal Schichtdicke. In dicker Schicht nimmt die Zahl der nach der Strecke x noch ungestreuten Quanten exponentiell ab.

Je nach Prozeß spricht man statt vom Wirkungsquerschnitt auch von Streuquerschnitt oder Absorptionsquerschnitt oder Photoerzeugungsquerschnitt. Können an einem Streuzentrum mehrere Prozesse stattfinden, z.B. Photoeffekt und THOMSON-Streuung und COMPTON-Streuung, dann gilt:

$$\sigma = \sigma_{\text{Photo}} + \sigma_{\text{Thomson}} + \sigma_{\text{Compton}}. \quad (2.62)$$

Eine solche Summe heißt auch totaler Wirkungsquerschnitt σ_{tot} . Nehmen wir nur einen einzigen Prozeß wie z.B. die COMPTON-Streuung. Reduziert man die

Intensität des einfallenden γ -Strahlers immer weiter, ist \dot{N} nicht mehr konstant, sondern beginnt statistisch zu fluktuieren. Ist im Mittel die Zahl der einlaufenden Quanten 10 s^{-1} , so gibt es Zeitabschnitte mit nur 5 oder 7 oder 13 Quanten gemäß einer POISSON-Verteilung. Die Zahl der gestreuten Quanten wird dann erst recht statistisch fluktuieren. Die Gleichungen 2.60 und 2.61 geben dann nur noch zeitliche Mittelwerte wieder und $d\dot{N}/N$ ist die Wahrscheinlichkeit, daß ein einzelner Streuprozess stattfindet. Da σ bis auf Normierungsfaktoren gleich dieser Wahrscheinlichkeit ist, kann man auch sagen: Wirkungsquerschnitt ist Fläche mal Wahrscheinlichkeit, diese Fläche zu treffen. Als Einheit des Wirkungsquerschnitts ist $1\text{ barn} = 10^{-24}\text{ cm}^2$ gebräuchlich.

2.14 Der differentielle Wirkungsquerschnitt beim COMPTON-Effekt

Bei der Durchrechnung der COMPTON-Streuung hatten wir uns nur gefragt, welche Photonenwellenlänge und welche Elektronenenergie bei welchem Streuwinkel auftritt. Abb. 2.21 enthält aber eine weitere Information, nämlich die Wahrscheinlichkeit, mit der jeder Streuwinkel auftritt. Dies drückt man wieder durch einen Wirkungsquerschnitt aus, aber durch einen Wirkungsquerschnitt pro Winkelintervall. Wie in Abb. 2.24 skizziert, ist eine Raumrichtung gestreu-

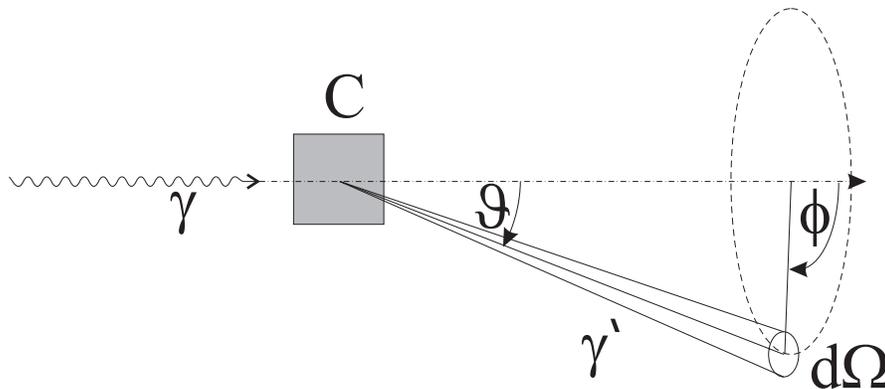


Abbildung 2.24: Der Raumwinkel beim differentiellen Wirkungsquerschnitt.

ter Photonen durch zwei Winkel bestimmt, den Streuwinkel ϑ und den Azimutwinkel φ . Ein Kegel um diese Richtung herum hat ein Raumwinkelelement $d\Omega$ mit

$$d\Omega = \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi . \quad (2.63)$$

Für die Rate \dot{N} (Anzahl/Zeit) der in $d\Omega$ hineingestreuerten Quanten gilt

$$d^2\dot{N} = \dot{N}_1 n_2 \frac{d\sigma}{d\Omega} dx d\Omega , \quad (2.64)$$

und $d\sigma/d\Omega$ heisst differentieller Wirkungsquerschnitt für den gegebenen Streuprozess. Er ist gleich der mittleren Zahl der in $d\Omega$ gestreuten Quanten pro Zeiteinheit, dividiert durch die einlaufende mittlere Quantenzahl pro Zeiteinheit

N_1 , durch die Schichtdicke dx und durch die Anzahldichte n_2 der Streuzentren. Den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die COMPTON-Streuung am freien Elektron kann man in der Quantenelektrodynamik ausrechnen. Man erhält die KLEIN-NISHINA-Formel,

$$\frac{d\sigma_{\text{Compton}}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \left(\frac{\nu'}{\nu} + \frac{\nu}{\nu'} - \sin^2 \vartheta \right). \quad (2.65)$$

Sie gilt für unpolarisierte Strahlung. r_e ist der „klassische Elektronenradius“ nach Glg. (2.53) auf Seite 43, ν ist die Frequenz der einlaufenden Quanten und ν' die der unter dem Winkel ϑ auslaufenden Quanten. Abb. 2.25 zeigt das Resultat für verschiedene Photonenstrahlenergien $h\nu$. Bei $h\nu \ll mc^2$ wird $\nu' = \nu$ und es gilt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (2 - \sin^2 \vartheta) = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \vartheta) \quad (2.66)$$

Über alle Streuwinkel integriert ergibt sich:

$$\begin{aligned} \iint \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega &= \frac{r_e^2}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi (1 + \cos^2 \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta \\ &= \pi r_e^2 \int_1^{-1} (1 - x^2) (-dx) = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \end{aligned} \quad (2.67)$$

was, wie in Glg. (2.52) auf Seite 43 schon gesehen wurde, der Wirkungsquerschnitt der THOMSON-Streuung für ein Elektron ist. Für $h\nu \gg mc^2$ wird das

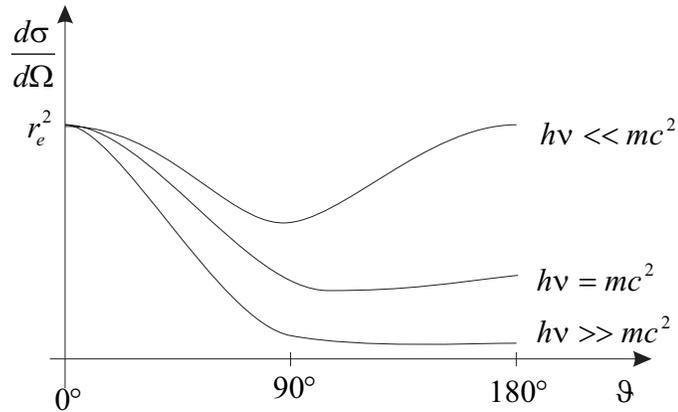


Abbildung 2.25: differentieller Wirkungsquerschnitt der COMPTON-Streuung für verschiedene Photonenenergien

Integral $\iint d\sigma/d\Omega \cdot d\Omega$ ungefähr proportional zu $1/\nu$. Für in Atomen gebundene Elektronen gilt die KLEIN-NISHINA-Formel nur angenähert.

2.15 Die Paarbildung

Eine weitere Wechselwirkungsmöglichkeit von kurzweilliger elektromagnetischer Strahlung mit Materie wurde 1932 von ANDERSON in der kosmischen Strahlung

entdeckt. Es handelt sich um den Prozeß der Paarbildung :

$$\gamma + \text{Kern} \rightarrow e^+ + e^- + \text{Kern}. \quad (2.68)$$

Das Photon verschwindet dabei völlig und erzeugt ein Elektron-Positron-Paar. Das Positron (e^+) ist das Antiteilchen des Elektrons (e^-) und hat die gleiche Ruhemasse und die entgegengesetzt gleiche Ladung wie dieses. Der Prozeß erhält Ladung, Energie und Impuls. Der Kern ist wieder wesentlich dabei, um die Impulserhaltung zu gewährleisten. Der Prozeß

$$\gamma \rightarrow e^+ + e^- \quad (2.69)$$

ist nicht möglich, die Rechnung läuft im wesentlichen wie im Abschnitt 2.10. Der Kern übernimmt Impuls, jedoch wegen seiner großen Masse so gut wie keine Energie, auch dieses war in Abschnitt 2.10 durchgerechnet worden. Die Energieerhaltung verlangt:

$$\begin{aligned} h\nu &= E(e^+) + E(e^-) \\ &= 2mc^2 + E_{\text{kin}}(e^+) + E_{\text{kin}}(e^-). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Wegen der Masse $2mc^2$ läuft der Prozeß erst oberhalb der Schwelle $h\nu_{\text{min}} = 2mc^2 = 1,022 \text{ MeV}$ ab. Sein Wirkungsquerschnitt steigt von der Schwelle ab stark an und wird bei sehr hohen Photonenenergien $h\nu \gg 1 \text{ GeV}$ ungefähr konstant. Der Kern spielt nicht nur für die Impulsbilanz, sondern auch für die Prozeßhäufigkeit eine Rolle: der Wirkungsquerschnitt ist proportional zu Z^2 . Die Energieaufteilung auf Elektron und Positron erlaubt viele Möglichkeiten und kann wieder durch einen differentiellen Wirkungsquerschnitt beschrieben werden. Außer mit e^+e^- ist die Paarbildung später auch mit $\mu^+\mu^-$, $\pi^+\pi^-$ und $p\bar{p}$ beobachtet worden. Im Wirkungsquerschnitt ist e^+e^- aber weitaus am größten.

2.16 Die Paarvernichtung

Im Vakuum ist ein Positron stabil, d.h. es lebt genau wie das Elektron unendlich lang. Trifft es auf ein Elektron, kann es aber mit diesem zusammen verschwinden und in elektromagnetische Strahlung übergehen. Aufgrund der Impulserhaltung ist der Prozeß $e^+e^- \rightarrow \gamma$ wieder nicht möglich, aber folgende Prozesse sind es:

$$\begin{aligned} e^+ + e^- + \text{Kern} &\rightarrow \gamma + \text{Kern}, \\ e^+ + e^- &\rightarrow 2\gamma, \\ e^+ + e^- &\rightarrow 3\gamma. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Diese drei Vernichtungsprozesse werden beobachtet, die ebenso erlaubten $e^+e^- \rightarrow n\gamma$ mit $n \geq 4$ sind so selten, daß sie praktisch nicht vorkommen. Die Vernichtung in ein Photon geschieht z.B. beim Durchfliegen eines schnellen Positrons durch eine Bleifolie. Werden Positronen durch Bremsstrahlung und Ionisation in Materie abgebremst, und das soweit bis ihre kinetische Energie sehr klein gegen mc^2 ist, können sie von einem Elektron eingefangen werden und mit diesem ein gebundenes System bilden, das sogenannte Positronium. Das Positronium ist eine Art Wasserstoffatom, aber nicht stabil. Im Grundzustand lebt es im Mittel 10^{-10} s , und im Zerfall entstehen zwei monochromatische Photonen, jedes hat die Energie $mc^2 = 511 \text{ keV}$. Die Anwendung dieser Paarvernichtung in der Medizin (PET) nimmt ständig zu.

2.17 Photoeffekt im Röntgengebiet

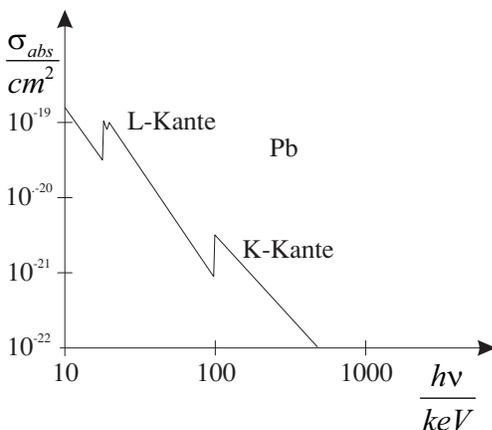


Abbildung 2.26: Absorptionsquerschnitt von Röntgenquanten am Bleiatom

Mit Photoeffekt, RAYLEIGH-, THOMSON- und COMPTON-Streuung und Paarbildung haben wir nun alle wesentlichen Wechselwirkungen zwischen Photonen und Materie behandelt. Nachzutragen ist, daß der Photoeffekt nicht nur im sichtbaren Teil des Spektrums, sondern auch im Ultravioletten und im Röntgengebiet eine große Rolle spielt. Gemäß

$$h\nu = E_{\text{kin}}(e) + A$$

kann man durch Bestimmung des Energiespektrums der aus dünnen Folien herausgeschlagenen Photoelektronen etwas über die Bindungsenergien der Elektronen im Material lernen. Dieses „Photoelektronenspektroskopie“ spielt heute eine bedeutende Rolle in der Atom-, Molekül- und Festkörperphysik. Man lernt daraus z. B., daß die fest gebundenen Elektronen in der inneren Schale diskrete Werte für die Auslösearbeit A liefern, die lose gebundenen Elektronen im Festkörper aber Bänder der Breite einiger eV haben.

Der Wirkungsquerschnitt für den Photoeffekt sinkt mit steigender Photonenenergie. Immer wenn mit zunehmender Photonenenergie neue Photoelektronen aus einer fest gebundenen Schale ausgelöst werden können, steigt der Wirkungsquerschnitt sprunghaft an. Abb. 2.26 zeigt den Absorptionsquerschnitt von Röntgenquanten für ein Bleiatom, er beruht in diesem Energiebereich ausschließlich auf dem Photoeffekt. Die Sprünge heißen L-Kante, K-Kante usw., je nach der Schale, die dem Photoeffekt gerade zugänglich ist. Aus der Lage der K-Kante in Blei liest man ab, daß die innersten Elektronen in Blei mit einer Energie von ca. 90 keV gebunden sind. Der Wirkungsquerschnitt σ_{abs} beschreibt die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Photons in einer Bleischicht. In dicker Schicht gilt nach Glg. (2.61) auf Seite 44: $N(x)/N(0) = e^{-n\sigma x}$. D. h. nach einer durchquerten Länge von $1/n\sigma$ sinkt die Intensität eines Röntgenstrahls auf e^{-1} ihrer Anfangsintensität. Diese Dicke, auch Absorptionslänge l_A genannt, beträgt

bei einer Photonenenergie von 100 keV in Blei

$$l_A = \frac{1}{n\sigma} = \frac{a}{N_A \rho \sigma} = \frac{207 \text{ g/mol}}{6 \cdot 10^{23} / \text{mol} \cdot 11,35 \text{ g/cm}^3 \cdot 2 \cdot 10^{-21} \text{ cm}^2} = 0,015 \text{ cm} . \quad (2.72)$$

Nach einer Schichtdicke von $x = 1 \text{ mm}$ bleibt nur $e^{-x/l_A} = 0,0014$ der Anfangsintensität übrig. Der Rest wird durch den Mechanismus des Photoeffektes absorbiert. Des heißt aber nicht, daß alle Phototelektronen das Bleiblech verlassen. Die meisten bleiben durch Stöße mit anderen Elektronen darin stecken und erwärmen das Blei.

2.18 Zusammenfassung zur Wechselwirkung von Photonen mit Materie

Abschwächung von Photonen in Materie heißt Absorption und Streuung, ein Photon kann entweder durch Absorption oder durch Streuung aus dem Strahl herausgenommen werden. Photoeffekt und Paarbildung gehören zur Absorption, das Photon verschwindet dabei und bei den drei Arten der Streuung wird das Photon aus seiner ursprünglichen Richtung abgelenkt.

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon durch einen von N Prozessen aus dem einlaufenden Strahl entfernt wird, wird durch den Wirkungsquerschnitt für diesen Prozeß beschrieben. An jedem Streuzentrum kann ein Photon durch den ersten, zweiten ... oder N -ten Prozeß verlorengehen. Die Wahrscheinlichkeit, durch irgendeinen davon verlorenzugehen, ist die Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten pro Streuzentrum:

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_N . \quad (2.73)$$

Wie schon zuvor erwähnt, heißt diese Summe, wenn über alle Abschwächungsmöglichkeiten summiert wird, totaler Wirkungsquerschnitt. Abb. 2.27 zeigt in doppelt-logarithmischer Darstellung⁵ über zehn Zehnerpotenzen die einzelnen und die totalen Wirkungsquerschnitte von Photonen an Kohlenstoff. Zusätzlich zu den zwei diskutierten Streuprozessen (COMPTON: Elektron wird aus dem Atomverbund gelöst. THOMSON: Elektron bleibt auf seinem Platz und Rückstoßimpuls wird vom gesamten Atom aufgenommen) und den beiden Absorptionsprozessen sind zwei weitere Absorptionsprozesse eingetragen: Paarbildung an den Hüllenelektronen,

$$\gamma + e^- \rightarrow e^- + e^+ + e^- , \quad (2.74)$$

statt am Kern, und der Kernphotoeffekt, zu dem Prozesse gehören wie z. B.:

$$\gamma + {}^{12}\text{C} \rightarrow {}^{11}\text{C} + n . \quad (2.75)$$

Die Wirkungsquerschnitte als Funktion der Quantenenergie sind für eine Vielzahl von Elementen gemessen und für eine Vielzahl von Anwendungen interessant. Man sieht daran auch, wieviel Energie in einem bestrahlten Material

⁵Originalarbeit: HUBBELL et al., J. Phys. Chem. Ref. Data, Band 9 (1980) Seite 1023

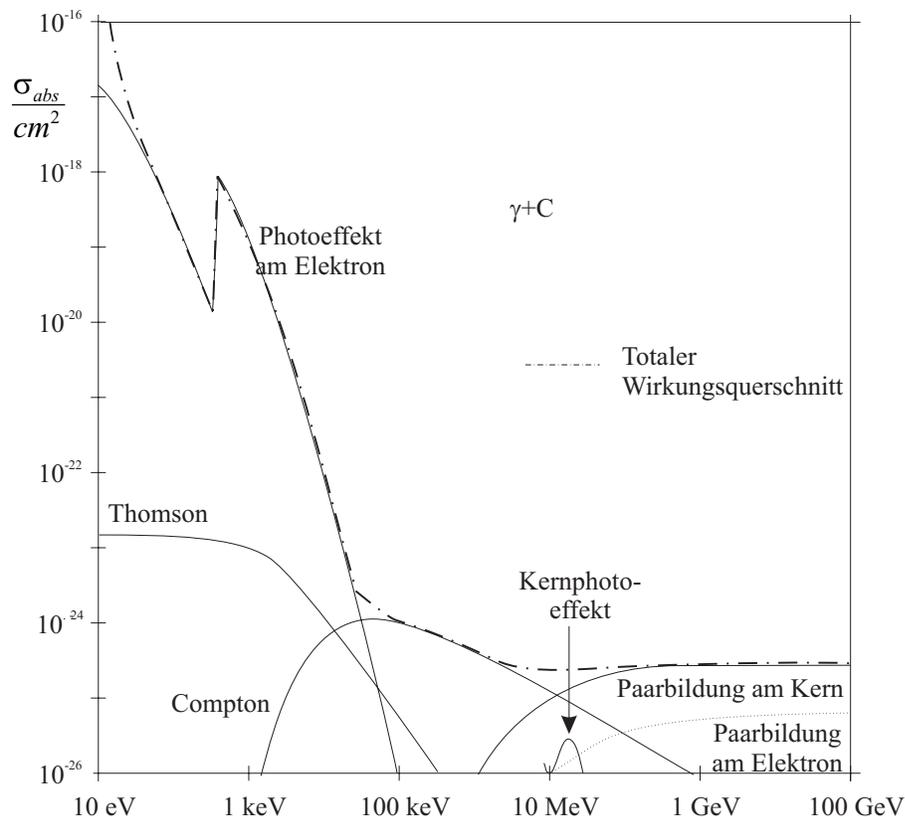


Abbildung 2.27: Wirkungsquerschnitte für das Photon am Beispiel des Kohlenstoffs mit den dazugehörigen Wirkungsquerschnitt.

stecken bleibt, um darin chemische oder biologische Reaktionen durchzuführen.

Außer den Abschwächungswirkungsquerschnitten σ sind oft die Abschwächungskoeffizienten μ , die Massenabschwächungskoeffizienten μ/ρ oder die Abschwächungslängen l_A in Tabellen und Diagrammen zusammengestellt. Aber alle diese Größen sind auf triviale Weise miteinander verknüpft:

$$\mu = n\sigma = \frac{N_A \rho}{A} \sigma \quad [\text{Dimension: m}^{-1}] \quad (2.76)$$

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{N_A}{A} \sigma \quad [\text{Dimension: m}^2/\text{kg}] \quad (2.77)$$

$$l_A = \frac{1}{n\sigma} = \frac{1}{\mu} \quad [\text{Dimension: m}] \quad (2.78)$$

Darin ist n die Zahl der Atome pro Volumen, N_A die Avogadrokonstante, ρ die Dichte und A die Atommasse in Gramm pro mol. In den Anwendungen verwendet man am häufigsten μ/ρ . Für chemische Verbindungen gilt die Formel

$$\frac{\mu}{\rho} = \sum_i w_i \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i, \quad (2.79)$$

wobei $(\mu/\rho)_i$ die Koeffizienten für die einzelnen Elemente und w_i ihre Gewichtsanteile in der Verbindung sind ($\sum_i w_i = 1$). Tabellen für μ/ρ sind deshalb nützlicher als Tabellen für μ . Aber Vorsicht: Glg. (2.79) gilt nur in Energiebereichen, wo sich die Einflüsse der chemischen Bindung nicht mehr bemerkbar machen. Bei sichtbarem Licht machen sich diese aber sehr nachdrücklich bemerkbar. Die Verteilung der Bindungsenergien der Leitungselektronen im metallischen Blei ist völlig anders als die der am losesten gebundenen Elektronen in Bleiglas. Eine 0,5 mm dicke Bleifolie ist undurchsichtig, ein 2,5 mm dickes Kristallglas mit 20 Gewichtsprozenten Blei läßt die Farbe des darin befindlichen Weines bestens erkennen! Glg. (2.79) gilt sicher ab etwa 1 keV sehr gut.

2.19 Die schwere Masse des Photons

Ein Photon trägt die Energie $h\nu$ und folglich die Masse $h\nu/c^2$. Als träge Masse wird diese im COMPTON-Effekt deutlich, dort zeigt das Photon seinen Impuls und damit seine Trägheit. Nach dem Äquivalenzprinzip muß das Photon auch eine schwere Masse haben und von der Schwerkraft beeinflusbar sein. Kommt eine elektromagnetische Welle der Wellenlänge λ auf einen schweren Körper, z.B. die Erde, zu, wird λ verkleinert, die Welle wird blauverschoben. Für ein Photon aus der Welle ist das leicht herleitbar. Der schwere Körper sei kugelsymmetrisch und besitze eine Masse M und den Radius R . Dann hat ein Photon in großer Entfernung

$$E_{\text{kin}} = h\nu \quad , \quad E_{\text{pot}} = 0, \quad (2.80)$$

und nach der Ankunft auf der Oberfläche des schweren Körpers

$$E_{\text{pot}} = -\frac{\gamma M h\nu}{c^2 R} \quad , \quad E_{\text{kin}} = h\nu'. \quad (2.81)$$

γ ist die Gravitationskonstante. Die Photonen fliegen im freien Fall, deshalb gilt Energieerhaltung und daraus folgt

$$\begin{aligned} h\nu' - h\nu &= \frac{\gamma M h\nu}{c^2 R} \\ \Rightarrow \frac{\Delta\nu}{\nu} &= \frac{\gamma M}{c^2 R} \quad (\text{Frequenzerhöhung}) \end{aligned} \quad (2.82)$$

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx -\frac{\gamma M}{c^2 R} \quad (\text{Blauverschiebung}) \quad (2.83)$$

Das genau Umgekehrte gilt, wenn ein Photon einen Stern verläßt, für seine Wellenlänge und die Frequenz weit vom Stern entfernt gilt:

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = -\frac{\gamma M}{c^2 R} \quad (\text{Frequenzerniedrigung}) \quad (2.84)$$

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx \frac{\gamma M}{c^2 R} \quad (\text{Rotverschiebung}) \quad (2.85)$$

Beim Sonnenlicht sind solche Verschiebungen unsichtbar klein, sie liegen in der Größenordnung 10^{-6} . Spektrallinien im Absorptionsspektrum der Sonne sind aber „Doppler-verbreitert“. Die lichtabsorbierenden Atome bewegen sich aufgrund der hohen Temperaturen so schnell, daß die Dopplerverschiebungen

der Frequenzen viel größer sind als 10^{-6} . Weiße Zwerge sind Sterne mit viel größerer Dichte als die der Sonne. Sirius B hat einen Wert von M/R , aufgrund dessen man $\Delta\lambda/\lambda = 5,9 \cdot 10^{-5}$ erwartet. Beobachtet wird $6,6 \cdot 10^{-5}$, was die Gravitationsrotverschiebung von Licht auf $\approx 10\%$ genau zu bestätigen scheint.

1960 gelang es POUND und REBKA, die Gravitationsrotverschiebung im Labor nachzuweisen, indem sie Photonen der Energie 14 keV über eine Höhendifferenz von 22,5 m nach oben schickten. Es galt, damit eine Verschiebung von $2,5 \cdot 10^{-15}$ nachzuweisen, was den Einsatz eines kurz zuvor (1958) von MÖSSBAUER entdeckten Effektes erforderte, der rückstoßfreien Kernresonanzabsorption. Bei den 14 keV-Photonen handelt es sich um eine Kernspektrallinie aus ^{57}Fe . Genau wie es in der Atomhülle Elektronensprünge unter Aussendung eines Photons gibt, so im Atomkern Protonen- und Neutronensprünge. Wird dabei eine Energie $h\nu_0$ frei, so hat das Photon nicht die Energie $h\nu = h\nu_0$ sondern wegen des Kernrückstoßes etwas weniger. Mit der Kernmasse M und Viererimpulserhaltung gilt, einen ruhend emittierenden Kern angenommen:

$$\begin{aligned} h\nu_0 &= \frac{1}{2}Mv^2 + h\nu \\ 0 &= \frac{h\nu}{c} - Mv \\ \Rightarrow h\nu &= h\nu_0 \left(1 - \frac{h\nu_0}{2Mc^2}\right). \end{aligned} \quad (2.86)$$

Läuft dieses Photon durch einen ^{57}Fe -Absorber, kann es dort nicht absorbiert werden, denn um dem Kern eine Energie $h\nu_0$ zuzuführen, müßte es mit dem gleichen Argument wie oben eine kinetische Energie

$$h\nu' = h\nu_0 \left(1 + \frac{h\nu_0}{2Mc^2}\right) \quad (2.87)$$

tragen. Die Spektrallinien im Kern sind sehr scharf, im Fall der 14-keV-Linie des ^{57}Fe beträgt die „natürliche Linienbreite“ nur etwa

$$\left(\frac{\Delta\nu}{\nu}\right)_{\text{nat}} \approx 10^{-12} \quad (2.88)$$

Bei $h\nu_0/2Mc^2 \approx 10^{-7}$ gibt es für das Photon keine Chance, wieder in einem ^{57}Fe -Kern absorbiert zu werden. Bei tiefen Temperaturen hat MÖSSBAUER aber entdeckt, daß es diese „Resonanzabsorption“ doch gibt, und bei der kleinsten Dopplerverschiebung ist sie wieder weg, wie in Abb. 2.28 skizziert: Die Breite der Absorptionskurve als Funktion der Geschwindigkeit zwischen Fe-Quelle und Fe-Absorber beträgt $0,3 \text{ mm sec}^{-1}$. Also ist $\Delta v/c = 10^{-12}$ und damit nach dem Dopplereffekt $\Delta\nu/\nu = 10^{-12}$. Die Begründung für diesen „MÖSSBAUER-Effekt“ ist festkörperphysikalischer Natur. Die Rückstoßenergie, die auf den Kern übertragen wird, ist klein gegen seine „Bindungsenergie“ im Kristallgitter. Der Rückstoßimpuls kann deshalb nicht vom einzelnen Kern, sondern nur vom Kristall als Ganzem aufgenommen werden und dessen Masse ist $\approx 10^{23}M$. Im Gravitationsexperiment von POUND und REBKA wird nun der Absorber 22,5 m höher als der Emitter aufgestellt und wieder eine Geschwindigkeitskurve wie in Abb. 2.28 aufgenommen. Sie ist nicht um Null symmetrisch, sondern 2,5 Tausendstel ihrer Breite nach links verschoben. Um diese Rotverschiebung der

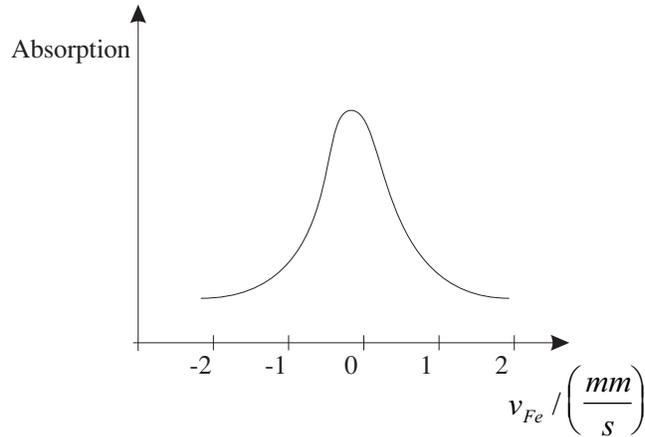


Abbildung 2.28: Absorption durch MÖSSBAUER-Effekt in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit des Fe-Atoms.

Gravitation auszugleichen, muß Doppler-blauverschoben werden. POUND und REBKA bestätigten den Erwartungswert für die Frequenzverschiebung mit

$$\frac{\Delta\nu(\text{experimentell})}{\Delta\nu(\text{theoretisch})} = (1,05 \pm 0,10) . \quad (2.89)$$

2.20 Lichtablenkung am Sonnenrand

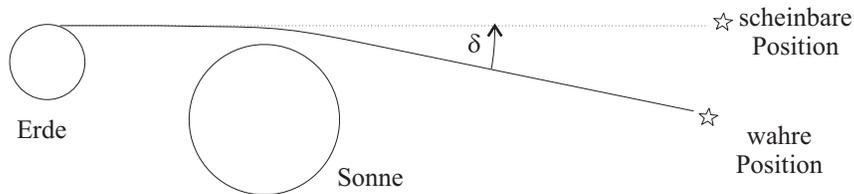


Abbildung 2.29: Winkelablenkung eines Lichtstrahls bei Vorbeiflug an der Sonne

Die schwere Masse eines Photons sollte auch bewirken, daß es beim Vorbeiflug an einem schweren Körper abgelenkt wird. Abb. 2.29 zeigt diesen Effekt für das Licht eines Sternes, der zum Zeitpunkt einer Sonnenfinsternis direkt am Sonnenrand steht. Wird zu diesem Zeitpunkt seine Position gemessen und diese mit der normalen Position verglichen, ergibt sich eine Winkelverschiebung von δ . Man kann diese mit NEWTON'scher Mechanik ausrechnen und erhält mit

$$\delta_{\text{Newton}} = \frac{2\gamma M}{c^2 R} = 0,88'' \quad (2.90)$$

einen halb so großen Wert wie er nach EINSTEINS allgemeiner Relativitätstheorie vorhergesagt und durch Messungen bei Sonnenfinsternissen auch experimentell bestätigt wurde

$$\delta = 2 \delta_{\text{Newton}} = 1,75'' . \quad (2.91)$$

Dieser Faktor 2 ist keine Eigenschaft des Photons, sondern eine Eigenschaft der Sonne, genauer gesagt der Gravitation schwerer Körper. In der allgemeinen Relativitätstheorie werden Längen und Zeiten abhängig von Gravitationspotentialen, was nicht Inhalt dieser Vorlesung ist.

Man nennt

$$R_S = \frac{2\gamma M}{c^2} \quad (2.92)$$

den SCHWARZSCHILDradius eines Körpers. Die Sonne hat einen SCHWARZSCHILDradius, der viel kleiner als ihr Radius ist. Für die behandelten relativistischen Effekte gelten folgende Formeln:

$$\text{Rotverschiebung : } \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{R_S}{2R}, \quad (2.93)$$

$$\text{Lichtablenkung : } \delta = \frac{2R_S}{R}, \quad (2.94)$$

aber immer nur wenn $R \gg R_S$. In der Nähe von Körpern, deren Dichte so groß ist, daß ihr Radius von gleicher Größenordnung wie ihr SCHWARZSCHILDradius ist, sind die entsprechenden Formeln komplizierter. Ein Grund dafür ist, daß nicht nur von der Masse selbst, sondern auch von der Energie, die im Feld um die Masse herum enthalten ist, Gravitationswirkung ausgeht.

2.21 Interferenz von Photonen

An diese Stelle gehört die Erinnerung, daß Licht eine Welle ist. Ohne Welleneigenschaften keine Interferenz, keine Beugung, keine Röntgenstrukturanalyse. Photonen können miteinander interferieren. Genauer gesagt kann jedes Photon mit sich selbst interferieren. Solange der Weg des Photons nicht eingeschränkt wird, sind wir gezwungen zu sagen, daß sich das Photon aufteilt und auf vielen Wegen läuft und daß es sich erst bei beobachteter Absorption (oder Streuung) wieder in ein einzelnes Teilchen verwandelt.

Im Sinne von beobachtbarer Energie sind Photonen unteilbar. Halbierung der Lichtintensität heißt Halbierung der Quantenintensität mit konstanter Energie pro Quant. Ein Photon ist kein klassisches Wellenpaket mit

$$W_0 = \iiint \frac{1}{2} \varepsilon_0 \vec{E}_0^2 dV = \hbar\omega. \quad (2.95)$$

Im Optik-Teil der Vorlesung wurde das Interferenzmuster am Doppelspalt mit rotem Laserlicht gezeigt. Wird nur Spalt 1 beleuchtet, gilt mit Spaltbreite $d \ll$ Wellenlänge λ für die Intensität I auf dem Beobachtungsschirm in grosser Entfernung hinter dem Spalt

$$I(\theta) = I_1 \approx \text{const.} \quad (2.96)$$

wie in Abb. 2.30 gezeigt. Bei Beleuchtung von nur Spalt 2 ergibt sich ebenfalls $I(\theta) = I_1$. Wenn wir genau wissen, durch welchen der beiden Spalte das Licht gelaufen ist (realisierbar z. B. durch Beleuchten beider Spalte mit doppelter

Intensität und abwechselndes Abdecken jedes der beiden Spalte für je die Hälfte der Zeit), ergibt sich

$$I(\theta) = 2 I_1 . \quad (2.97)$$

Sind beide Spalte gleichzeitig geöffnet, so dass ich von jedem einzelnen Photon nicht weiss ob es durch Spalt 1 oder Spalt 2 gelaufen ist, ergibt sich mit dem Spaltabstand D

$$I(\theta) = 4 I_1 \cos^2(\pi D \sin \theta / \lambda), \quad (2.98)$$

was zwar im Mittel über alle Winkel gleich $2I_1$ ist, aber das Streifenmuster der Abb. 2.30 zeigt.

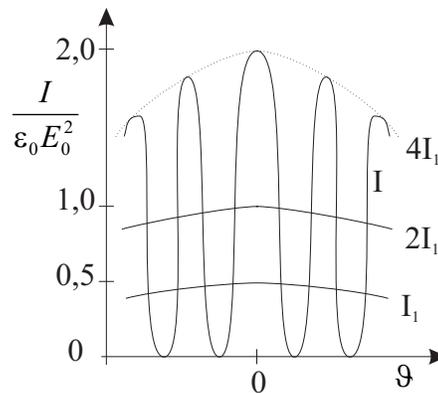


Abbildung 2.30: Intensitätsverteilung am Einzel- und Doppelspalt

Das Doppelspaltexperiment ist das Urbild aller Interferenz- und Beugungseffekte und deshalb auch geeignet, die Quantenaspekte auf die einfachstmögliche Weise zu demonstrieren. Laufen die Photonen durch Spalt 1, ergibt sich die Verteilung I_1 , laufen sie durch 2, entsteht ebenfalls I_1 . Laufen sie abwechselnd durch 1 und 2, ergibt sich $2I_1$ und nicht I . Die einzige widerspruchsfreie Erklärung ist im Falle der Kurve I zu sagen, daß die Photonen durch beide Spalte laufen. Die Photonen oder jedes einzelne Photon? Die Antwort heißt leider jedes einzelne Photon. In einem klassischen Experiment hat TAYLOR 1909 das Beugungsbild eines dünnen Drahtes mit sehr schwachen monochromatischem Licht fotografiert. Sehr schwach hieß Belichtungszeit 3 Monate und immer nur ein Photon auf der Reise zwischen Lichtquelle und Film. Und das ergab das selbe Beugungsbild wie bei intensivem Licht und Belichtungszeit $\frac{1}{100}$ Sekunde. Nicht nur TAYLORS Experiment, alle späteren Erfahrungen zeigen, daß einzelne Photonen „mit sich selbst interferieren können“. Kann ein Photon zwischen Lichtquelle und fotografischer Platte auf verschiedenen Wegen laufen, so interferieren diese Wege und legen fest, ob dieses Photon mit großer oder kleiner Wahrscheinlichkeit im Punkt P ankommt.

2.22 Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Interferenz

Bei Emission und Absorption⁶ besteht Licht aus Photonen der unteilbaren Energie $\hbar\omega$. Dazwischen wird die Ausbreitung des Lichtes im Raum korrekt durch die MAXWELLSchen Gleichungen beschrieben, in denen $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und $\vec{B}(\vec{r}, t)$ kontinuierlich variierende und linear zu überlagernde Feldstärken sind.

Diese Aussagen scheinen sich zu widersprechen. Aber die Natur ist nun eben so, wir müssen uns damit abfinden. Abfinden und dem Widerspruch einen Namen geben: „Welle-Teilchen-Dualismus“ des Lichtes. Abfinden und wenn möglich in eine brauchbare Sprache bringen, mit deren Hilfe wir den Dualismus „verstehen“. Verstehen heißt, soweit damit vertraut sein, daß die Ergebnisse von Experimenten mit ähnlichen oder schwierigeren Gegebenheiten (4 Spalte statt 2 oder ein ganzer Kristall) richtig vorhergesagt werden. Diese brauchbare Sprache, die heute übliche Interpretation des Welle-Teilchen-Dualismus, ist die Wahrscheinlichkeitsinterpretation. Ich erläutere sie an Hand des Doppelspaltexperimentes. Bei Beleuchtung nur eines Spaltes sehen wir auf dem Beobachtungsschirm

$$I = \left(\frac{dN}{dt dA} \right)_1 \cdot \hbar\omega . \quad (2.99)$$

Bei kohärenter Beleuchtung beider Spalte gilt in der Näherung $\sin \theta = \theta$:

$$I = \frac{dN}{dt dA} \cdot \hbar\omega = 4 \left(\frac{dN}{dt dA} \right)_1 \cdot \hbar\omega \cdot \cos^2(\pi D\theta/\lambda) . \quad (2.100)$$

Auf dem Beobachtungsschirm, der im Abstand R hinter dem Doppelspalt in der xy -Ebene liegt, hat ein Flächenelement die Größe $dA = R \cdot d\theta \cdot dy$. Insgesamt in der Messzeit T treffen N_0 Photonen auf den Schirm, d. h.

$$\int \int_A \frac{dN}{dt dA} \cdot T \cdot R d\theta dy = N_0 . \quad (2.101)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein einzelnes dieser N_0 Photonen irgendwo auf den Schirm trifft, ist 1. Die Wahrscheinlichkeit dP , daß dieses Photon in einem Streifen zwischen θ und $\theta + d\theta$ auf dem Schirm auftritt, ist

$$\begin{aligned} dP &= \frac{dP}{d\theta} d\theta = \frac{1}{N_0} \cdot \frac{dN}{dt dA} \cdot T \cdot R d\theta dy \\ &= \text{const} \cdot \cos^2 \frac{\pi D\theta}{\lambda} \cdot d\theta , \end{aligned} \quad (2.102)$$

und diese Wahrscheinlichkeit für ein einzelnes Photon ist eine kontinuierliche und keine gequantelte Funktion von θ .

Die kontinuierlichen MAXWELLSchen Gleichungen beschreiben exakt die Wahrscheinlichkeitsverteilung eines Photons. Die Wahrscheinlichkeit, dass das

⁶oder auch bei der COMPTON-Streuung, wo das Rückstoßelektron verrät, dass und wo ein Photon vorbeigekommen ist.

Photon durch Spalt 1 flog, ist 50% und ebenso 50 % , dass es durch Spalt 2 flog. Die Wahrscheinlichkeiten sind den Quadraten der Maxwell'schen Feldstärken proportional. Und an diesem Quadrat liegt es, daß kohärente und inkohärente Überlagerung zweier Wellen verschiedene Ergebnisse geben.

$$\text{An einem Spalt allein : } dP_1 = \text{const} \cdot E_1^2 \quad (2.103)$$

$$dP_2 = \text{const} \cdot E_2^2 \quad (2.104)$$

$$\text{An zwei Spalten inkohärent : } dP = \text{const} \cdot (E_1^2 + E_2^2) \quad (2.105)$$

$$\text{An zwei Spalten kohärent : } dP = \text{const} \cdot (E_1 + E_2)^2 \quad (2.106)$$

Die elektrische Feldstärke spielt die Rolle einer „Wahrscheinlichkeitsamplitude“, und die Wahrscheinlichkeit ist das Quadrat dieser Amplitude.

Im Film wird gezeigt, wie bei kleiner Intensität einzelne Photonen zufällig verteilt nach einem Doppelspalt auf einen Beobachtungsschirm auftreffen. Erst nach dem Auftreffen sehr vieler Photonen ergibt sich für das Auge eine $\cos^2(\pi D\theta/\lambda)$ -Verteilung.

Kapitel 3

Wellen und Wellenpakete

Dieses Kapitel ist ein Nachtrag zu dem, was in Physik I und II über Schwingungen und Wellen gesagt wurde. Da Schwingungen ausführlich behandelt wurden, hier darüber nur ein mathematischer Nachtrag. Wir beschränken uns auf Schwingungen mit einem Freiheitsgrad, also solche, die durch eine einzige Funktion $y = y(t)$ beschrieben werden.

3.1 Fourieranalyse periodischer Schwingungen

Eine Funktion $y = y(t)$ heißt periodisch, wenn

$$y(t + T) = y(t) \quad (3.1)$$

gilt. T heißt die Periode, $\nu = 1/T$ die Frequenz und

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T} \quad (3.2)$$

die Kreisfrequenz. Periodische Funktionen beschreiben ungedämpfte Schwingungen, und es soll hier gleich sein, ob die elektrische Ladung in einer Antenne, ein Pendel im Schwerfeld oder das Magnetfeld in der Spule eines Schwingkreises schwingt. Eine Schwingung heißt *harmonisch*, wenn sie einem Sinus oder Cosinus folgt:

$$y = y_0 \cos(\omega t + \alpha) . \quad (3.3)$$

Die Schwingung eines Pendels im Schwerfeld ist nur für kleine Amplituden harmonisch, bei größeren Amplituden ist sie unharmonisch, aber immer noch periodisch. Unter Einfluß von Reibung wird sie *gedämpft*, d.h. unperiodisch. Für das Rechnen mit Schwingungen ist oft die komplexe Schreibweise nützlich. Im Fall der harmonischen Schwingung:

$$\hat{y} = \hat{y}_0 e^{i\omega t} , \quad \hat{y}_0 = y_0 e^{i\alpha} \quad (3.4)$$

$$y = \operatorname{Re} \hat{y} = \operatorname{Re} y_0 e^{i\omega t + i\alpha} = y_0 \cos(\omega t + \alpha) . \quad (3.5)$$

Den Konventionen der Elektrotechnik folgend, will ich hier alle komplexen Größen mit einem $\hat{}$ kennzeichnen. Die physikalische Schwingung y ist der

Realteil der Schwingung \hat{y} , gleichgültig ob diese harmonisch, periodisch oder gar aperiodisch ist.

Jede periodische Funktion der Periode $T = 2\pi/\omega$ läßt sich in eine unendliche Reihe harmonischer Funktionen entwickeln. FOURIER 1822:

$$\hat{y}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{g}_n e^{in\omega t} \quad (3.6)$$

Die FOURIERkoeffizienten \hat{g}_n dieser FOURIERreihe ergeben sich aus \hat{y} durch ein Integral über die Periode T:

$$\hat{g}_n = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \hat{y}(t) e^{-in\omega t} dt \quad (3.7)$$

für alle n einschließlich Null. Der Beweis für Glg. (3.7) läuft über die *Orthogonalitätsrelation* der trigonometrischen Funktionen:

$$\int_t^{t+T} e^{i(m-n)\omega t} dt = \delta_{mn} T \quad (3.8)$$

$$\frac{1}{T} \int \hat{y} e^{-im\omega t} dt = \frac{1}{T} \int \sum_n \hat{g}_n e^{in\omega t} e^{-im\omega t} dt = \frac{1}{T} \sum_n \hat{g}_n \delta_{mn} T = \hat{g}_m \quad (3.9)$$

Die Vertauschung von Integral und Summe gilt für alle stückweise glatten periodischen Funktionen, das gehört in die Mathematik. Die Bedeutung der FOURIERreihe liegt natürlich darin, daß die Summe in Glg. (3.6) nicht von $-\infty$ bis $+\infty$ zu laufen braucht, um eine sehr gute Approximation der Funktion \hat{y} zu erhalten.

Ins Reelle übersetzt:

$$\begin{aligned} y &= \operatorname{Re} \hat{y} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\operatorname{Re} \hat{g}_n \cdot \cos n\omega t - \operatorname{Im} \hat{g}_n \cdot \sin n\omega t) \\ &= \operatorname{Re} \hat{g}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (\operatorname{Re} \hat{g}_n + \operatorname{Re} \hat{g}_{-n}) \cos n\omega t + \sum_{n=1}^{\infty} (-\operatorname{Im} \hat{g}_n + \operatorname{Im} \hat{g}_{-n}) \sin n\omega t \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_1^{\infty} (a_n \cos n\omega t + b_n \sin n\omega t) . \end{aligned} \quad (3.10)$$

mit

$$\begin{aligned}
 a_n &= \operatorname{Re}(\hat{g}_n + \hat{g}_{-n}) = \frac{1}{T} \operatorname{Re} \int \hat{y}(e^{-in\omega t} + e^{in\omega t}) dt \\
 &= \frac{1}{T} \int \operatorname{Re} \hat{y} \cdot 2 \cos n\omega t dt = \frac{2}{T} \int y \cos n\omega t dt \quad n = 0, 1, 2, \dots \\
 b_n &= \operatorname{Im}(-\hat{g}_n + \hat{g}_{-n}) = \frac{1}{T} \operatorname{Im} \int \hat{y}(-e^{-in\omega t} + e^{in\omega t}) dt \\
 &= \frac{1}{T} \int \operatorname{Im}(\hat{y} \cdot 2i \sin n\omega t) dt = \frac{2}{T} \int \operatorname{Im}(i\hat{y}) \sin n\omega t dt \\
 &= \frac{2}{T} \int \operatorname{Re} \hat{y} \sin n\omega t dt = \frac{2}{T} \int y \sin n\omega t dt \quad n = 1, 2, \dots
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Soll $\hat{y} = y$ reell sein, dann läßt sich auch die Schreibweise nach Glg. (3.6) mit komplexen Harmonischen verwenden. Die komplexen FOURIERkoeffizienten \hat{g}_n haben dann die spezielle Eigenschaft

$$\hat{g}_{-n} = \hat{g}_n^* \tag{3.12}$$

wobei \hat{g}_n^* das Konjugiert-Komplexe von \hat{g}_n ist. Beweis direkt aus Glg. (3.6):

$$\begin{aligned}
 \hat{y} \text{ reell} &\Leftrightarrow \hat{y} = \hat{y}^* \\
 \sum \hat{g}_n e^{in\omega t} &= \sum \hat{g}_n^* e^{-in\omega t}
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

multipliziert mit $e^{-im\omega t}$ und über T integriert

$$\hat{g}_m = \hat{g}_{-m}^* \quad \text{q.e.d.} \tag{3.14}$$

Diese Form ist in den Anwendungen am häufigsten: die Schwingung wird durch eine reelle Funktion $y(t)$ beschrieben, und in ihrer Reihenentwicklung stehen komplexe Harmonische $e^{in\omega t}$ mit komplexen FOURIERkoeffizienten der Eigenschaft $\hat{g}_n = \hat{g}_{-n}^*$. Der Zusammenhang mit den a_n und b_n aus Glg. (3.10) lautet dann:

$$\begin{aligned}
 a_n &= 2 \operatorname{Re} \hat{g}_n & \hat{g}_n &= \frac{1}{2}(a_n - ib_n) \\
 b_n &= -2 \operatorname{Im} \hat{g}_n & \hat{g}_{-n} &= \frac{1}{2}(a_n + ib_n)
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

FOURIERanalyse heißt Bestimmung der FOURIERkoeffizienten einer Schwingung und Beschreibung der Schwingung durch diese Koeffizienten. Die Gesamtheit der Koeffizienten bildet das Spektrum der Schwingung. Die Bestimmung der Koeffizienten / des Spektrums kann mathematisch durch Glg. (3.7) oder messtechnisch mit einem FOURIERanalysator erfolgen. Ein FOURIERanalysator für elektrische Schwingungen ist z.B. ein variabler Bandpassfilter, der nur eine Frequenz und ein schmales Frequenzband darum herum „passieren lässt“ und für alle anderen Frequenzen einen sehr hohen Widerstand hat.

3.2 Beispiele von Fourieranalysen und -synthesen

Als erstes Beispiel soll hier der „Sägezahn“ analysiert werden. Er entspricht in etwa der Schwingungsform einer gestrichenen Saite, z.B. auf einer Violine. Der

Bogen nimmt die Saite ein Stück mit, je nach Stärke, mit der er gestrichen wird. Dann löst sich die Saite ab, springt zurück und wird dann wieder vom Bogen erfaßt. Die dazugehörige periodische Funktion heißt

$$y(t) = A \frac{t}{T} \quad \text{in} \left[-\frac{T}{2}, +\frac{T}{2}\right] \quad (3.16)$$

Die Berechnung des FOURIERSpektrums läuft wie folgt:

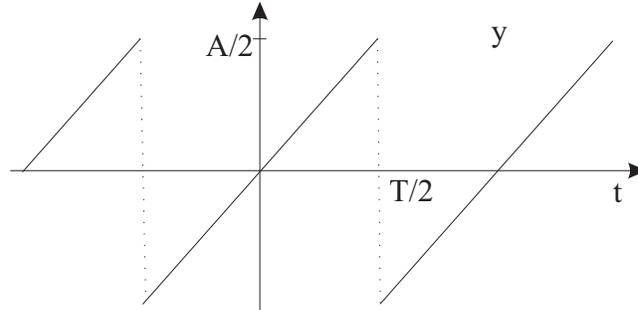


Abbildung 3.1: „Sägezahn“ als Beispiel für die FOURIERanalyse

$$\hat{g}_n = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} A \frac{t}{T} e^{-in2\pi t/T} dt = A \int_{-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} h e^{\lambda h} dh \quad (3.17)$$

mit $h = t/T$ und $\lambda = -in2\pi$. Damit wird für $n \neq 0$:

$$\begin{aligned} \hat{g}_n &= A \left[\left(\frac{h}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2} \right) e^{\lambda h} \right]_{-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} = A \left[\left(\frac{1}{2\lambda} - \frac{1}{\lambda^2} \right) e^{\frac{\lambda}{2}} - \left(-\frac{1}{2\lambda} - \frac{1}{\lambda^2} \right) e^{-\frac{\lambda}{2}} \right] \\ &= \frac{A}{2\lambda} \left(e^{\frac{\lambda}{2}} + e^{-\frac{\lambda}{2}} \right) - \frac{A}{\lambda^2} \left(e^{\frac{\lambda}{2}} - e^{-\frac{\lambda}{2}} \right) \\ &= \frac{A}{-4in\pi} \cdot 2 \cos \pi n - \frac{A}{-4\pi^2 n^2} \cdot \underbrace{2i \sin \pi n}_0 = \frac{iA(-1)^n}{2\pi n} \\ \Rightarrow a_n &= 0, \quad b_n = \frac{A(-1)^{n+1}}{n\pi} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Für $n = 0$ ist $\hat{g}_0 = 0$.

$$y(t) = \frac{A}{\pi} \left(\sin \omega t - \frac{1}{2} \sin 2\omega t + \frac{1}{3} \sin 3\omega t - \dots \right) \quad (3.19)$$

Abb. 3.2 zeigt die Funktionen

$$y_N = \frac{A}{\pi} \sum_{n=1}^N \frac{(-1)^{n+1}}{n} \sin n\omega t \quad (3.20)$$

als Approximationen des Sägezahns für $N = 4, 10, 20$ und 40 .

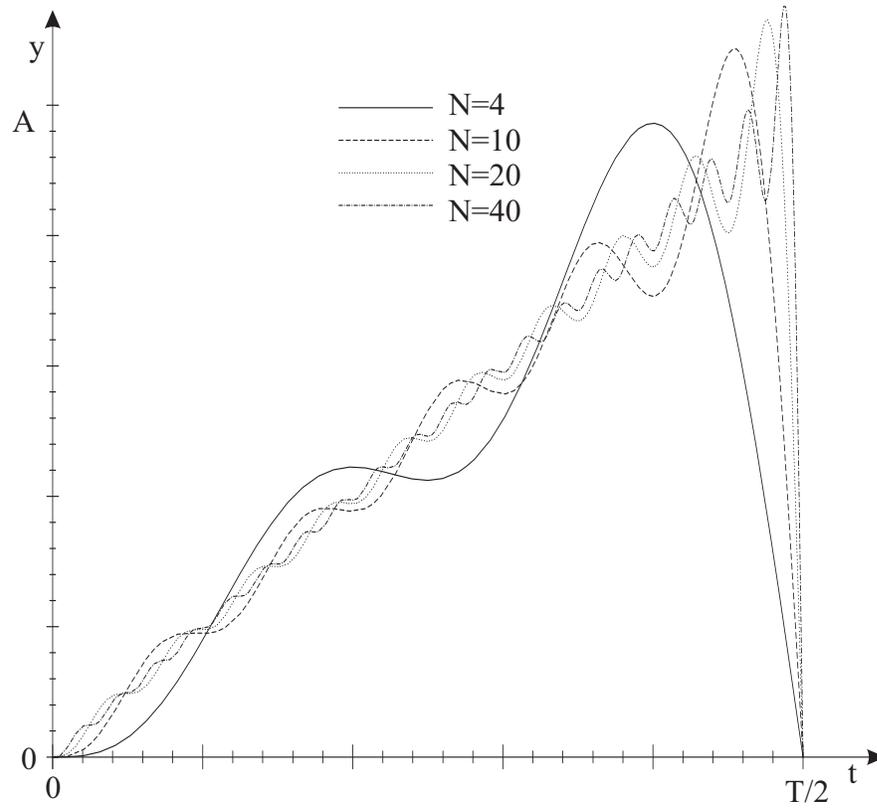


Abbildung 3.2: FOURIERanalyse des „Sägezahns“

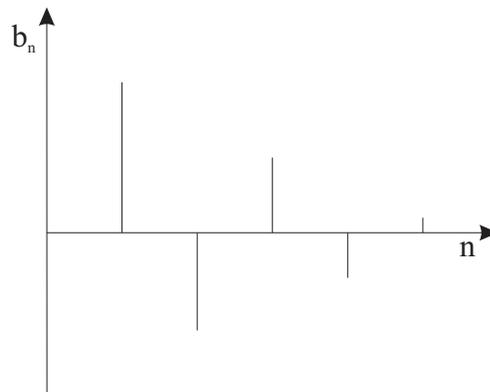


Abbildung 3.3: Frequenzspektrum des „Sägezahns“

Abb. 3.3 zeigt das Frequenzspektrum des Sägezahns, wie hier ausgerechnet und wie auch z. B. mit einem Bandpassfilter-Analysator zu messen. Die „Spektrallinien“ entsprechen $n = 1, 2, 3 \dots$ bzw. $\omega = \omega_1, 2\omega_1, 3\omega_1 \dots$, wenn $\omega_1 = 2\pi/T$ die „Grundfrequenz“ des Sägezahns ist. Das menschliche Ohr reagiert nicht auf die Phasenunterschiede von 180° zwischen $\sin \omega_0 t, \sin 2\omega_0 t$ usw., sondern nimmt nur die relativen Intensitäten $b_1^2 : b_2^2 : b_3^2 : \dots$ wahr. Die Grundfrequenz ω_1 bestimmt die Tonhöhe der Schwingung, und das Verhältnis $b_1^2 : b_2^2 : b_3^2 : \dots$ die Klangfarbe, wobei für die Violine nachzutragen ist, daß nicht wie in Abb. 3.3 $b_n^2 = 1/n^2$ ihren Klang bestimmt, sondern der Resonanzboden das Spektrum entscheidend verändert.

Wie in der Elektrizität gilt auch in der Akustik der quadratische Zusammenhang zwischen Amplitude und Intensität. Bei fester Frequenz ist die Intensität:

$$I = \frac{dW}{dt dA} = v_s \cdot \frac{dW}{dV} = v_s \cdot \frac{1}{2} \rho u_0^2 = \frac{v_s}{2} \rho \omega^2 x_0^2 \quad (3.21)$$

Dabei ist v_s die Schallgeschwindigkeit, ρ die Dichte des Trägermediums, x_0 die Ortsamplitude und u_0 die Geschwindigkeitsamplitude der Schwingung im Trägermedium. Wegen der logarithmischen Empfindlichkeit des Ohres gibt man meist nicht I an, sondern

$$L = 10 \cdot \log \frac{I}{I_0} \quad (3.22)$$

Dabei ist I_0 frequenzabhängig und wird bei $\nu = 2000$ Hz zu $I_0 = 10^{-12} \text{ Wm}^{-2}$ gesetzt. Die dimensionslose Zahl L heißt Lautstärke und erhält die künstliche Einheit 1 Phon.

Das Ohr ist ein FOURIERanalysator, der nur Amplitudenquadrate abliefern, aber sonst mit phantastischen Eigenschaften: Frequenzbereich $\approx 20 - 20000$ Hz (Faktor 1000); Auflösungsvermögen je nach Frequenzbereich bis zu $\nu/\Delta\nu \approx 300$, d.h. zwei Töne mit um 0,3% verschiedenen Frequenzen werden im günstigsten Fall noch als verschieden erkannt; dynamischer Bereich $\approx 10^{-12} \text{ Wm}^{-2}$ bis 1 Wm^{-2} (Faktor 10^{12} von der Hörschwelle bis zur Schmerzgrenze, entsprechend 0 bis 120 Phon).

Als zweites mathematisches Beispiel soll die periodische Rechteckschwingung in Abb. 3.4 FOURIERanalysiert werden. Die Amplitude sei A , die Periode T und die Breite B mit $0 < B < T$.

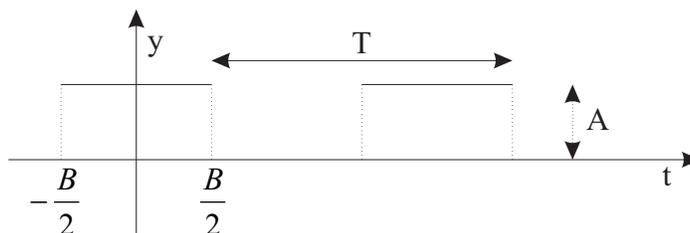


Abbildung 3.4: Rechteckfunktion

$$y(t) = \begin{cases} A & \text{für } -\frac{B}{2} \leq t \leq +\frac{B}{2} \\ 0 & \text{für } \frac{B}{2} \leq t \leq T - \frac{B}{2} \end{cases} \quad (3.23)$$

Für $n \neq 0$ ist

$$\begin{aligned} \hat{g}_n &= \frac{1}{T} \int_{-\frac{B}{2}}^{\frac{B}{2}} A e^{-in2\pi t/T} dt = \frac{A}{T} \cdot \frac{T}{-in2\pi} \left[e^{-in2\pi t/T} \right]_{-\frac{B}{2}}^{+\frac{B}{2}} \\ &= \frac{iA}{2\pi n} \left[e^{-in\pi B/T} - e^{+in\pi B/T} \right] = \frac{iA}{2\pi n} \cdot (-2i) \sin \frac{n\pi B}{T} \\ &= \frac{A}{\pi n} \sin \frac{n\pi B}{T}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Und für $n = 0$ ist $\hat{g}_0 = \frac{1}{T} \int_{-\frac{B}{2}}^{+\frac{B}{2}} A dt = AB/T$. Damit ist

$$y(t) = A \left[\frac{B}{T} + \sum_{n=-\infty, n \neq 0}^{\infty} \frac{\sin n\pi \frac{B}{T}}{n\pi} e^{in\omega t} \right] = \frac{AB}{T} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin n\pi \frac{B}{T}}{n\pi \frac{B}{T}} \cdot 2 \cos n\omega t \right]. \quad (3.25)$$

Die Reihe besteht nur aus Cosinus-Termen, weil $y(t)$ eine gerade Funktion ist. Genau wie die Sägezahn-Reihe als ungerade Funktion nur aus Sinus-Termen bestand. In Abb. 3.5(a) und Abb. 3.5(b) zeigen wir das Spektrum der a_n für zwei Fälle: $B/T = 1/2$ und $B/T = 1/10$. Trägt man vertikal $a_n/4B$ und horizontal $\omega/\frac{\pi}{B}$ auf, ergibt sich in beiden Fällen das gleiche Spektralbild, nur liegen bei kleinerem Verhältnis $B : T$ die Spektrallinien dichter.

$$\frac{B}{T} = \frac{1}{2} \rightarrow y = A \left[\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \cos \omega t - \frac{2}{3\pi} \cos 3\omega t + \dots \right] \quad (3.26)$$

$$\frac{B}{T} = \frac{1}{10} \rightarrow y = A \left[\frac{1}{10} + 2 \frac{\sin \pi \frac{B}{T}}{\pi \frac{B}{T}} \cos \omega t + \dots \right] \quad (3.27)$$

Bleibt B konstant und wird T immer größer, rücken die Linien immer dichter zusammen. Anschaulich folgt daraus, daß im Grenzfall $T \rightarrow \infty$ ein kontinuierliches Spektrum entsteht. D.h. das Spektrum eines einzigen Rechteckimpulses der Breite B wird aussehen wie in Abb. 3.6, wobei noch zu klären bleibt, wie der Absolutwert der Amplituden $a(\omega)$ mit A zusammenhängt. Dies folgt im übernächsten Abschnitt.

3.3 Amplituden- und Intensitätsspektrum

In der Optik ist $dW/dt dA = \varepsilon_0 c \vec{E}^2$, und der zeitliche Mittelwert davon ist $I = \overline{dW/dt} dA = \varepsilon_0 c \overline{E_0^2}/2$, wenn $\vec{E} = \vec{E}_0 \cos \omega t$ eine harmonische schwingende Feldstärke ist. In der Akustik ebenso, $I = v_s \rho u_0^2/2 = v_s \rho \omega^2 x_0^2/2$, dabei ist die Intensität wieder das zeitliche Mittel einer Energieflußdichte, und u_0 und x_0 sind Geschwindigkeits- und Ortsamplituden einer harmonischen Schwingung

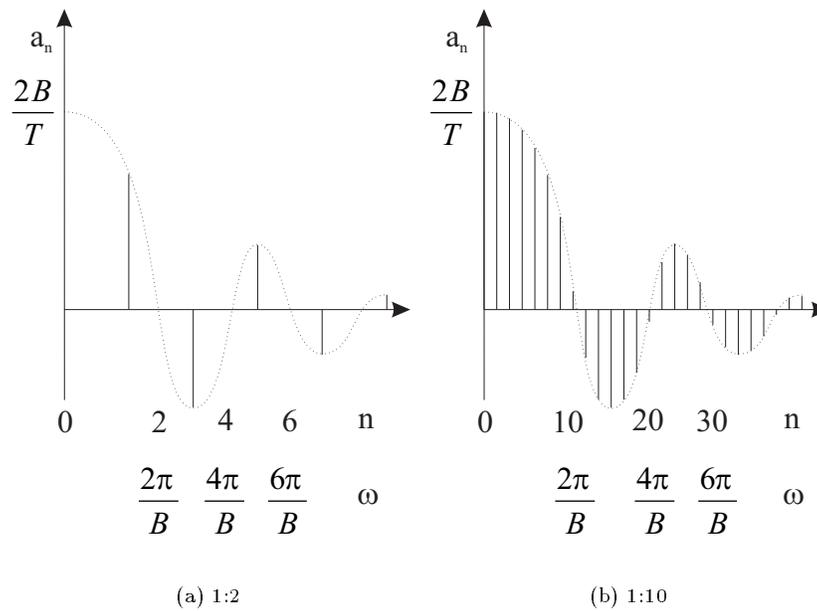


Abbildung 3.5: Frequenzspektrum der Rechteckfunktion

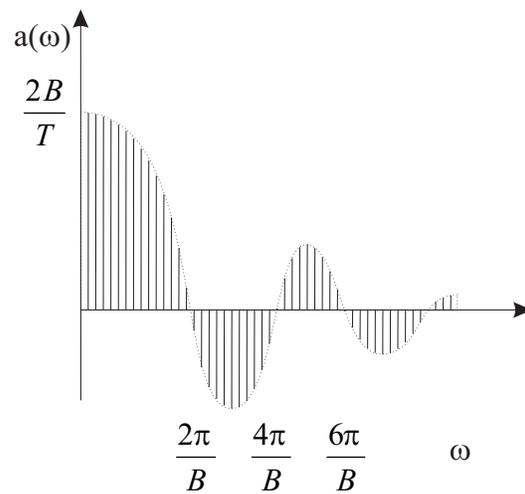


Abbildung 3.6: Übergang zum FOURIERintegral

mit der Kreisfrequenz ω . Immer gilt der quadratische Zusammenhang zwischen Amplitude und Intensität. Wie lautet dieser Zusammenhang bei periodischen und nicht-harmonischen Schwingungen? Sei $y = y(t)$ periodisch, $I \propto y^2(t)$ mit

hier nicht weiter interessierenden Proportionalitätskonstanten.

$$y = \text{reell} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{g}_n e^{in\omega t}, \quad \hat{g}_n = \hat{g}_{-n}^*, \quad (3.28)$$

$$y^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{g}_n \hat{g}_m e^{i(n+m)\omega t}.$$

Bei der Mittelung über die Zeit sind alle Beiträge Null außer $n + m = 0$, d. h. $m = -n$, denn $1/T \cdot \int 1 dt$ über eine Periode ist 1.

$$\overline{y^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{g}_n \hat{g}_{-n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{g}_n \hat{g}_n^* = \boxed{\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\hat{g}_n|^2} \quad (3.29)$$

Wichtiges Ergebnis: Das zeitliche Mittel des Amplitudenquadrates ist die Summe der Betragsquadrate der FOURIERkoeffizienten. Deshalb bilden die $|\hat{g}_n|^2$ das „Intensitätsspektrum“ der Schwingung. Mit a_n und b_n :

$$\overline{y^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\hat{g}_n|^2 = \frac{a_0^2}{4} + \sum_{n=1}^{\infty} |\hat{g}_n|^2 + |\hat{g}_{-n}|^2 = \frac{a_0^2}{4} + 2 \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{a_n^2}{4} + \frac{b_n^2}{4} \right] \quad (3.30)$$

3.4 Aperiodische Schwingungen und das Fourierintegral

Das Frequenzspektrum einer periodischen Schwingung besteht aus diskreten Spektrallinien, i. a. aus unendlich vielen. Besteht das Spektrum einer Schwingung aus einer einzigen Frequenz, so handelt es sich um eine harmonische Schwingung, die unendlich lange andauert.

Aperiodische Schwingungen und insbesondere Schwingungen endlicher Dauer haben ein Spektrum, das nicht aus diskreten Frequenzen, sondern aus Frequenzbändern oder einem breiten Kontinuum von Frequenzen besteht. Die Analyse solcher Schwingungen erfordert die Mathematik der FOURIERintegrale.

Jede¹ nichtperiodische Funktion $\hat{y}(t)$ läßt sich als FOURIERintegral schreiben:

$$\hat{y}(t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{g}(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (3.31)$$

Darin ist das „Frequenzspektrum“ $\hat{g}(\omega)$ der Funktion $\hat{y}(t)$:

$$\hat{g}(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{y}(t) e^{-i\omega t} dt \quad (3.32)$$

Die beiden Relationen zwischen $\hat{y}(t)$ und $\hat{g}(\omega)$ sehen denen für die FOURIERreihe periodischer Funktionen in Glg. (3.6) und Glg. (3.7) sehr ähnlich. Im Grenzfalle sehr großer Perioden T nähert sich die unendliche Summe über sehr viele

¹im ganzen Intervall $(-\infty, +\infty)$ definiert und stückweise glatt

benachbarte diskrete Frequenzen einem Integral über ein Kontinuum von Frequenzen. Statt eines Beweises verweise ich nochmals auf Abb. 3.5(a) und 3.6, die diesen Grenzfall veranschaulichen. Da beim Integral die „FOURIERKoeffizienten“ $\hat{g}(\omega)$ mit $d\omega$ bewichtet werden müssen, um einen endlichen Integralwert \hat{y} zu erhalten, hat $\hat{g}(\omega)$ einer andere Dimension als \hat{g}_n in der FOURIERreihe. Aus $1/T$ in Glg. (3.7) wird dadurch $1/2\pi$, und aus Gründen der Symmetrie wird je ein Faktor $1/\sqrt{2\pi}$ in beide Relationen gesteckt. Ist die Funktion $\hat{y} = y$ reell, gilt:

$$\hat{g}(-\omega) = \hat{g}^*(\omega) , \quad (3.33)$$

und daraus folgt:

$$\begin{aligned} y &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left[\int_0^\infty \hat{g}(\omega) e^{i\omega t} d\omega + \int_{-\infty}^0 \hat{g}(\omega) e^{i\omega t} d\omega \right] \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left[\int_0^\infty \hat{g}(\omega) e^{i\omega t} d\omega + \int_0^\infty \hat{g}(-\omega) e^{-i\omega t} d\omega \right] \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_0^\infty [\hat{g}(\omega) e^{i\omega t} + \hat{g}^*(\omega) e^{-i\omega t}] d\omega \quad (3.34) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty [\operatorname{Re}\hat{g}(\omega) \cos \omega t - \operatorname{Im}\hat{g}(\omega) \sin \omega t] d\omega \\ &= \int_0^\infty [a(\omega) \cos \omega t + b(\omega) \sin \omega t] d\omega , \end{aligned}$$

mit:

$$\begin{aligned} a(\omega) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{Re}\hat{g}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty y(t) \cos \omega t dt , \\ b(\omega) &= -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{Im}\hat{g}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty y(t) \sin \omega t dt , \quad (3.35) \\ \hat{g}(\omega) &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} [a(\omega) - ib(\omega)] . \end{aligned}$$

Ähnlich wie bei der FOURIERreihe haben gerade Funktionen, d.h. solche mit $y(t) = y(-t)$ ein rein reelles $\hat{g}(\omega)$, d.h. $b(\omega) \equiv 0$, und ungerade Funktionen mit $y(t) = -y(-t)$ haben ein imaginäres $\hat{g}(\omega) \rightarrow a(\omega) \equiv 0$. Dies folgt direkt aus Glg. (3.32), reelles y vorausgesetzt. Soweit das FOURIERintegral als mathematisches Werkzeug zur Spektralanalyse einer nichtperiodischen Funktion.

3.5 Beispiele zum Fourierintegral

Wir betrachten vier Beispiele, als erstes eine Schwingung, die mit $\cos \Omega t$ nicht unendlich lange andauert, sondern wie in Abb. 3.7(a) nur über eine Dauer T . Der voreilige Schluß „diese Schwingung hat die Frequenz Ω “ gilt nur ungefähr.

$$y(t) = \begin{cases} 0 & -\infty < t < -\frac{T}{2} \\ A \cos \Omega t & -\frac{T}{2} < t < +\frac{T}{2} \\ 0 & \frac{T}{2} < t < \infty \end{cases} \quad (3.36)$$

$$\Rightarrow b(\omega) = 0, \quad y = \int_0^{\infty} a(\omega) \cos \omega t \, d\omega, \quad a(\omega) = \frac{A}{\pi} \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} \cos \Omega t \cos \omega t \, dt. \quad (3.37)$$

Mit $\cos \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)]$ wird daraus:

$$\begin{aligned} a(\omega) &= \frac{A}{2\pi} \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} [\cos(\omega - \Omega)t + \cos(\omega + \Omega)t] \, dt \\ &= \frac{A}{2\pi} \left[\frac{\sin(\omega - \Omega)t}{\omega - \Omega} + \frac{\sin(\omega + \Omega)t}{\omega + \Omega} \right]_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} \\ &= \frac{A}{\pi} \left[\frac{\sin(\omega - \Omega)\frac{T}{2}}{\omega - \Omega} + \frac{\sin(\omega + \Omega)\frac{T}{2}}{\omega + \Omega} \right]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Dieses Frequenzspektrum ist in Abb. 3.7(b) dargestellt. Es enthält nicht nur Ω ,

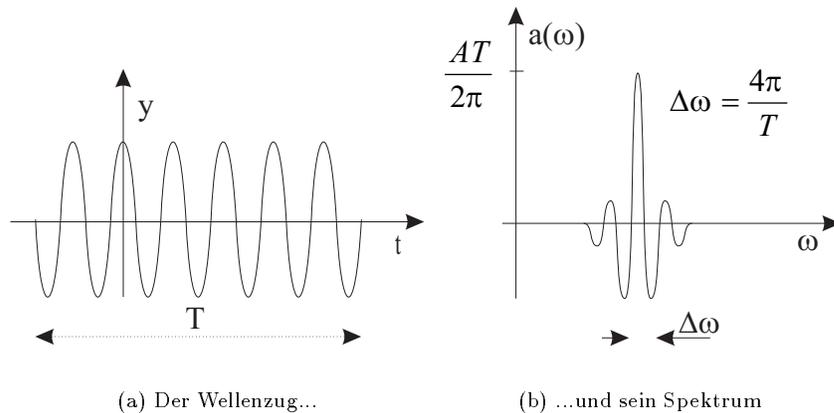


Abbildung 3.7: FOURIERintegral eines begrenzten Wellenzuges

sondern ein Band von Frequenzen um Ω herum. Als Maß für die Breite dieses Bandes können wir $\Delta\omega$ zwischen den beiden ersten Nulldurchgängen nehmen.

$$\frac{\Delta\omega}{2} \cdot \frac{T}{2} = \pi \quad \Rightarrow \quad \Delta\omega = \frac{4\pi}{T}. \quad (3.39)$$

Je länger die „harmonische“ Schwingung andauert, umso schmaler ist das Frequenzband um die Zentralfrequenz Ω .

Als zweites betrachten wir eine exponentiell schwach gedämpfte harmonische Schwingung, die zwar unendlich lange anhält, aber deren Amplitude wie in Abb. 3.8(a) exponentiell abnimmt:

$$y(t) = \begin{cases} 0 & -\infty < t < 0 \\ Ae^{-\gamma t} \cos \Omega t & 0 \leq t < \infty \end{cases} \quad (3.40)$$

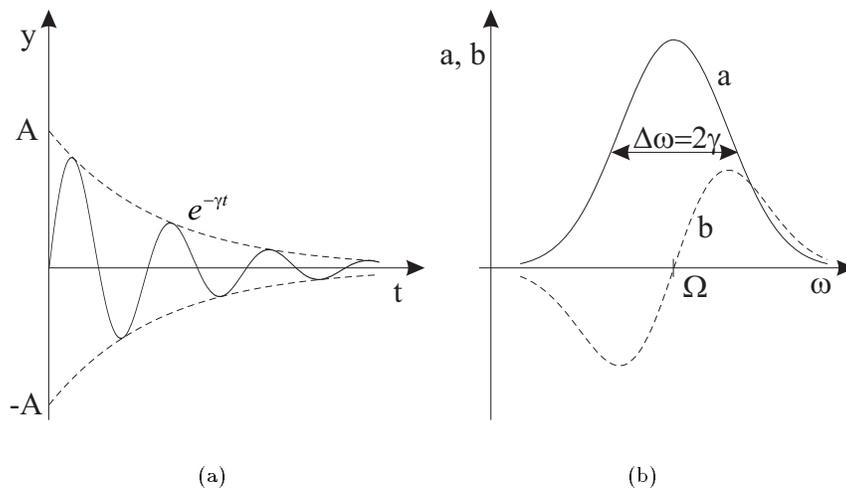


Abbildung 3.8: FOURIERintegral zur gedämpften Schwingung

Schwach gedämpft heißt $\gamma \ll \Omega$, diese Näherung soll am Ende der Rechnung ausgenutzt werden, um Schreibarbeit zu sparen.

$$\begin{aligned}
 y &= \operatorname{Re} \hat{y}, \quad \hat{y} = A e^{-\gamma t + i \Omega t}, \\
 \hat{g} &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\gamma t + i \Omega t - i \omega t} dt \\
 &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{-\gamma + i \Omega - i \omega} \left[e^{-\gamma t + i(\Omega - \omega)t} \right]_0^{\infty} = \frac{A/\sqrt{2\pi}}{\gamma + i(\omega - \Omega)}, \\
 \hat{y} &= \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i \omega t} d\omega}{\gamma + i(\omega - \Omega)}.
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

$$y = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma \cos \omega t - i(\omega - \Omega) i \sin \omega t}{\gamma^2 + (\omega - \Omega)^2} d\omega \equiv \int_0^{\infty} (a \cos \omega t + b \sin \omega t) d\omega. \tag{3.42}$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow a(\omega) &= \frac{A}{2\pi} \left[\frac{\gamma}{(\omega - \Omega)^2 + \gamma^2} + \frac{\gamma}{(\omega + \Omega)^2 + \gamma^2} \right], \\
 b(\omega) &= \frac{A}{2\pi} \left[\frac{\omega - \Omega}{(\omega - \Omega)^2 + \gamma^2} + \frac{-\omega - \Omega}{(\omega + \Omega)^2 + \gamma^2} \right].
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

Dies sind die exakten Resultate für die Spektralfunktionen a und b unabhängig von der Näherung $\gamma \ll \Omega$. Die Resultate enthalten zwei Summanden, weil in der Definition mit a und b das FOURIERintegral nur von 0 bis ∞ statt von $-\infty$ bis $+\infty$ läuft. Die Resultate sind in Abb. 3.8(b) dargestellt. Für $\gamma \ll \Omega$ und in der Nähe von Ω , d.h. mit der zusätzlichen Näherung $(\omega - \Omega) \ll \Omega$ dominiert jeweils

der erste Summand, und es gilt

$$a(\omega) \approx \frac{A}{2\pi} \frac{\gamma}{(\omega - \Omega)^2 + \gamma^2}, \quad b(\omega) \approx \frac{A}{2\pi} \frac{\omega - \Omega}{(\omega - \Omega)^2 + \gamma^2}, \quad (3.44)$$

$$a^2(\omega) + b^2(\omega) \approx \frac{A^2}{4\pi^2} \frac{1}{(\omega - \Omega)^2 + \gamma^2}.$$

In der Nähe von Ω haben die Spektralfunktion $a(\omega)$ und die Summe $a^2 + b^2$, die wir später als Intensitätsspektrum kennen lernen werden, die gleiche Form. Diese Form hat zwei Namen: LORENTZ-Kurve und BREIT-WIGNER-Kurve. Sie kennen sie als Näherung der Resonanzkurve einer erzwungenen Schwingung. Die Kurve ist symmetrisch um Ω und hat die Halbwertsbreite 2γ , d. h. $a(\Omega + \gamma) = a(\Omega - \gamma) = a(\Omega)/2$. Damit gilt hier wie im ersten Beispiel eine reziproke Beziehung zwischen Breite des Frequenzbandes und Dauer der Schwingung. $1/\gamma$ ist die mittlere Lebensdauer T der Schwingungsamplitude $y(t)$.

$$\Delta\omega = \frac{2}{T}. \quad (3.45)$$

Als drittes Beispiel betrachten wir einen einzigen Schwingungsaussschlag $y(t)$, der Einfachheit halber mit der schon bei der FOURIERreihe bekannten Rechteckform, in Abb. 3.9(a) nochmals aufgezeichnet: Um die Vorteile der geraden Funktion auszunutzen, legen wir $t = 0$ in die Mitte des Impulses.

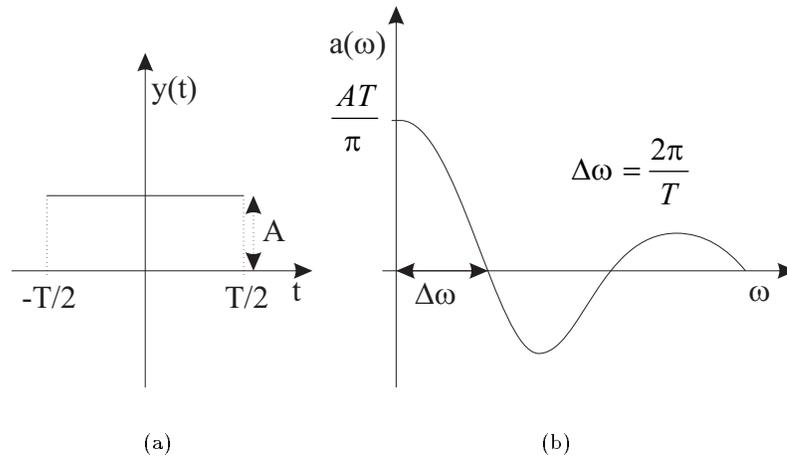


Abbildung 3.9: FOURIERintegral eines „Rechteckes“

$$y(t) = \begin{cases} 0 & -\infty < t < -\frac{T}{2} \\ A & -\frac{T}{2} < t < +\frac{T}{2} \\ 0 & +\frac{T}{2} < t < +\infty \end{cases} \quad (3.46)$$

$$\hat{g}(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} A e^{-i\omega t} dt = \frac{-A}{\sqrt{2\pi} \cdot i\omega} [e^{-i\omega t}]_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned}
\hat{g}(\omega) &= \frac{iA}{\omega\sqrt{2\pi}} \left[e^{-i\omega\frac{T}{2}} - e^{i\omega\frac{T}{2}} \right] = \frac{-iA}{\omega\sqrt{2\pi}} \cdot 2i \sin \frac{\omega T}{2} = A \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega} . \\
a(\omega) &= \frac{2A}{\pi\omega} \sin \frac{\omega T}{2} , \quad b(\omega) = 0 , \quad a(0) = \frac{2A}{\pi} \cdot \frac{T}{2} = \frac{AT}{\pi} , \\
y(t) &= \frac{2A}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin(\omega T/2)}{\omega} \cos \omega t \, d\omega .
\end{aligned}
\tag{3.48}$$

Die Spektralfunktion $a(\omega)$ für den Rechteckimpuls ist in Abb. 3.9(b) dargestellt. Wir kennen sie schon aus Abb. 3.6 als Grenzfall der periodischen, aber sehr seltenen, Wiederholung von Rechteckimpulsen. Definieren wir hier als Bandbreite $\Delta\omega$ den ersten Nulldurchgang von $a(\omega)$, gilt

$$\Delta\omega \cdot \frac{T}{2} = \pi \quad \Rightarrow \quad \Delta\omega = \frac{2\pi}{T} \tag{3.49}$$

Je kürzer der Puls, desto breiter das Frequenzspektrum. Das Spektrum ist hier nicht um einen Zentralwert Ω herum verteilt wie in den beiden ersten Beispielen, sondern es ist sehr breit.

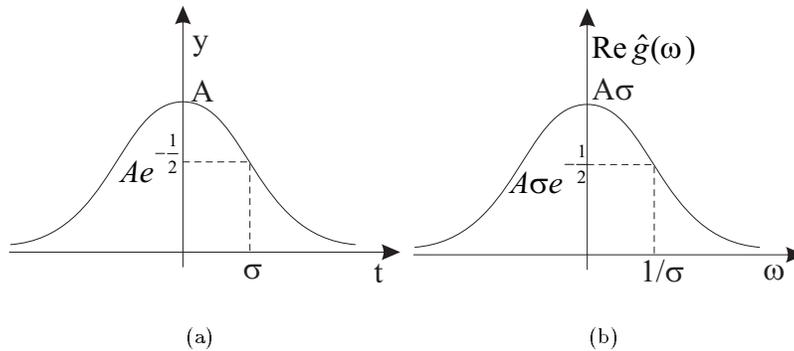


Abbildung 3.10: FOURIERintegral zur GAUSS-Funktion

Als letztes Beispiel ein einziger Schwingungsausschlag $y(t)$ mit der Form einer GAUSSkurve. Ihr FOURIERintegral ergibt eine Spektralfunktion, die wieder die genau gleiche Form einer GAUSSkurve hat. Wir legen $t=0$ in die Mitte des Impulses, siehe Abb. 3.10(a):

$$y = A e^{-t^2/2\sigma^2} \tag{3.50}$$

In dieser „Standarddarstellung“ der GAUSSfunktion ist A die Amplitude und σ die „Standardbreite“ oder Standardabweichung. An der Stelle $t = \sigma$ ist die Funktion auf $e^{-1/2} = 1/\sqrt{e} = 61\%$ der Amplitude abgesunken. Das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} A e^{-t^2/2\sigma^2} dt$ beträgt $\sqrt{2\pi} \cdot A\sigma$. Das Integral $\int_{-\sigma}^{+\sigma} A e^{-t^2/2\sigma^2}$ beträgt $0,683 \cdot \sqrt{2\pi} \cdot A\sigma$, d.h. innerhalb der Standardbreite liegen 68,3% der gesamten Fläche unter der Kurve. Die Kurve ist symmetrisch, der Mittelwert \bar{t} ist Null, und die mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert $\overline{(t - \bar{t})^2}$ ist σ^2 . Soweit die Eigenschaften der GAUSSkurve. Mittelwert und mittlere quadratische

Abweichung vom Mittelwert sind wie folgt definiert:

$$\bar{t} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} ty(t) dt}{\int_{-\infty}^{+\infty} y(t) dt} \quad (3.51)$$

$$\overline{(t - \bar{t})^2} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (t - \bar{t})^2 y(t) dt}{\int_{-\infty}^{+\infty} y(t) dt} \quad (3.52)$$

Die Spektralfunktion $\hat{g}(\omega)$ des GAUSSförmigen Impulses ist:

$$\hat{g}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{-t^2/2\sigma^2} e^{-i\omega t} dt . \quad (3.53)$$

Da $e^{-t^2/2\sigma^2}$ gerade ist, entfällt der Imaginärteil, und es gilt:

$$\hat{g}(\omega) = g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{-t^2/2\sigma^2} \cos \omega t dt . \quad (3.54)$$

Aus einer Integraltafel, z.B. BRONSTEIN-SEMENDJAJEW, entnimmt man:

$$\hat{g}(\omega) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot 2\sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma e^{-\omega^2 \sigma^2/2} = A\sigma e^{-\omega^2 \sigma^2/2} . \quad (3.55)$$

Dieses Spektrum ist wieder GAUSSförmig und in Abb. 3.10(b) dargestellt. Dabei sind wir in der Form $\hat{g}(\omega)$ geblieben, wo die Frequenzen von $-\infty$ bis $+\infty$ laufen. Die physikalischen Frequenzen sind natürlich nur positiv, und

$$a(\omega) = \sqrt{2/\pi} \cdot \hat{g}(\omega)$$

ist nur von $\omega = 0$ bis ∞ definiert. Als Breite $\Delta\omega$ von $a(\omega)$ können wir $\sigma_\omega = \sigma[\hat{g}(\omega)] = 1/\sigma[y(t)]$ nehmen, und mit $\sigma_t = \sigma = \sigma[y(t)]$ gilt

$$\sigma_\omega = \frac{1}{\sigma_t} . \quad (3.56)$$

Je breiter der Zeitimpuls, umso schmaler das Frequenzspektrum.

3.6 Die Unschärferelation zwischen Zeit und Frequenz

In allen vier Beispielen des vorhergehenden Abschnitts war die Breite des Frequenzspektrums umgekehrt proportional zur Dauer der Schwingung. Die Proportionalitätskonstante war immer von der Größenordnung 1.

- $\cos \Omega t$ der Dauer T : $\Delta\omega \cdot T = 4\pi$,
- Exponentiell gedämpfte Schwingung: $\Delta\omega \cdot 1/\gamma = 2$,
- Rechteckimpuls der Breite T : $\Delta\omega \cdot T = 2\pi$,
- GAUSSimpuls der Standardbreite σ_t : $\sigma_\omega \cdot \sigma_t = 1$.

Das Produkt aus Frequenzbandbreite und Schwingungsdauer ist konstant, und daß die Konstante in den vier Fällen leicht verschiedene Werte hat, liegt sowohl an den verschiedenen Schwingungsformen als auch an den verschieden benutzten Definitionen von „Breite“. Aber im Prinzip ist die Aussage immer die gleiche, und sie gilt allgemein: Nur eine unendlich lang andauernde harmonische Schwingung hat die Frequenzbandbreite Null.

Eine allgemein gültige Aussage für das Produkt aus Schwingungsdauer und Frequenzbandbreite lässt sich nur für die Intensitäten der Schwingung angeben. Dies liegt daran, daß die Standardbreite einer Funktion nach der Definition von Glg. (3.52) ein überall positives $y(t)$ erfordert. Amplituden können positiv und negativ sein. Amplitudenquadrate sind immer positiv und bedeuten Intensitäten. Was bedeutet nun Intensität bei den Spektralfunktionen?

Dazu müssen wir zunächst die Ergebnisse für die FOURIERreihe in Abschnitt 3.3 für aperiodische Schwingungen umschreiben. Es war:

$$I = k \cdot \overline{y^2} = k \sum_{n=-\infty}^{+\infty} |\hat{g}_n|^2 = k \left[\frac{a_0^2}{4} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{a_n^2}{2} + \frac{b_n^2}{2} \right) \right], \quad (3.57)$$

wenn $y = y(t)$ eine reelle periodische Schwingung ist. Bei einer aperiodischen Schwingung macht es keinen Sinn, nach einem zeitlichen Mittelwert zu fragen. Hier zählt nur $\int y^2 dt$, und mit den gleichen Bezeichnungen wie oben ist:

$$\begin{aligned} \int I_t(t) dt &= k \int_{-\infty}^{+\infty} y^2 dt = k \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{g}(\omega)|^2 d\omega = 2k \int_0^{\infty} |\hat{g}(\omega)|^2 d\omega \\ &= k \cdot \pi \int_0^{\infty} \left[\frac{a^2(\omega)}{2} + \frac{b^2(\omega)}{2} \right] d\omega = \int I_\omega(\omega) d\omega \end{aligned} \quad (3.58)$$

Die zeitliche Intensität über die Zeit integriert ist gleich der spektralen Intensität über das Spektrum integriert.

Im Fall der GAUSSform ist

$$y(t) = A e^{-t^2/2\sigma^2} \quad I_t(t) = k \cdot A^2 e^{-t^2/\sigma^2}. \quad (3.59)$$

Die Standardbreite von $y(t)$ ist σ , die von $y^2(t)$ ist $\sigma/\sqrt{2}$. Die Standardbreite von $g(\omega)$ ist $1/\sigma$, die Standardbreite von $I_\omega(\omega) = k\pi a^2(\omega)/2$ ist folglich $1/(\sigma\sqrt{2})$. Für die GAUSSfunktion gilt also

$$\sigma[y^2(t)] \cdot \sigma[|\hat{g}|^2(\omega)] = \frac{1}{2}. \quad (3.60)$$

Für andere Funktionen gilt Glg. (3.60) mit dem Ungleichheitszeichen, und allgemein gilt:

$$\sigma[y^2(t)] \cdot \sigma[|\hat{g}|^2(\omega)] \geq \frac{1}{2}. \quad (3.61)$$

Die grundlegende Bedeutung dieser Ungleichung (3.61) für die Wellenausbreitung von Quanten wurde 1927 von HEISENBERG erkannt. Die Ungleichung

heißt deshalb in der Quantenmechanik die HEISENBERG'sche *Unschärferelation*. An dieser Stelle der Vorlesung ist sie nur eine Eigenschaft beliebiger Schwingungen: Ist die Frequenz scharf, wohl definiert, dann ist der Zeitpunkt der Schwingung wenig gut definiert, unscharf, die Schwingung dauert lange an. Ist der Zeitpunkt der Schwingung scharf definiert, ist die Frequenz unscharf. Und was in diesem Zusammenhang lange oder kurze Dauer der Schwingung heißt, hängt noch von der Höhe der Frequenz ab.

In diesem Sinn hat sicher MOZART die Unschärferelation gekannt: Für Pikkoloflöte können schnelle Triller komponiert werden, für Kontrafagott nur langsame. Dazu eine Rechnung zur Veranschaulichung: Wie lange muss ein Ton der Frequenz ν [damit ist gemeint, dass die Mitte des tiefsten Frequenzbandes bei ν liegt] mindestens anhalten, damit er den gleichen Klang hat wie ein Dauerton dieser Höhe? Das Ohr hat im mittleren Frequenzbereich ein Auflösungsvermögen von $\nu/\Delta\nu \approx 100 \Rightarrow \Delta\omega \approx 10^{-2} \cdot \omega$. Gleicher Klang heisst $\Delta\nu < \nu/100$. Nach Glg. (3.39) gilt für die gesuchte Dauer

$$T = 4\pi/\Delta\omega = 2/\Delta\nu > 200/\nu .$$

Dies ist eine Sekunde für $\nu = 200$ Hz, für höhere Töne kürzer und für tiefere länger.

Zweites Beispiel: Ein bestimmtes angeregtes Atom hat eine mittlere Lebensdauer von 10^{-8} s. Danach sendet es Licht der Quantenenergie $\hbar\omega = 2$ eV aus. Dieses Licht ist nicht monochromatisch, sondern hat eine „natürliche Linienbreite“ von

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{\Delta\omega}{\omega} \approx \frac{2}{10^{-8} \text{ s}} / \frac{2 \text{ eV}}{\hbar} \approx 10^{-7} .$$

Folglich ist auch die Anregungsenergie des angeregten Atoms nicht scharf definiert, sondern nur mit $\Delta W/W \approx 10^{-7}$. Diese Aussagen werden wir später noch präzisieren, bzw. in die Wahrscheinlichkeitssprache der Quantenmechanik bringen.

3.7 Wellen in einer Raumdimension

Eine Welle ist die räumliche Ausbreitung einer periodischen Schwingung. Die räumliche Ausbreitung einer aperiodischen Schwingung werden wir später ein *Wellenpaket* nennen. Wellen in nur einer Raumdimension sind z.B. Wellen, die ein Seil entlanglaufen. Oder ebene Wellen im dreidimensionalen Raum x, y, z , die sich in x -Richtung ausbreiten und zu festem x und t unabhängig von y und z sind. Die Wellenamplitude a hängt von x und t ab, aber auf spezielle Weise:

$$\text{Schwingung } a(t) \rightarrow \text{Welle } a\left(t - \frac{x}{v}\right) ,$$

d. h. die Wellenamplitude ist nicht eigentlich Funktion von zwei Variablen x und t , sondern nur von einer, $t - x/v$. Meist schreibt man:

$$A = A(x, t) = a(x - vt) . \quad (3.62)$$

Die Welle ist mit A bezeichnet, und a heißt ihre Phasenfunktion. v heißt Phasengeschwindigkeit, und $\varphi = x - vt$ heißt Phase. Veranschaulicht ist dies in

Abb. 3.11.

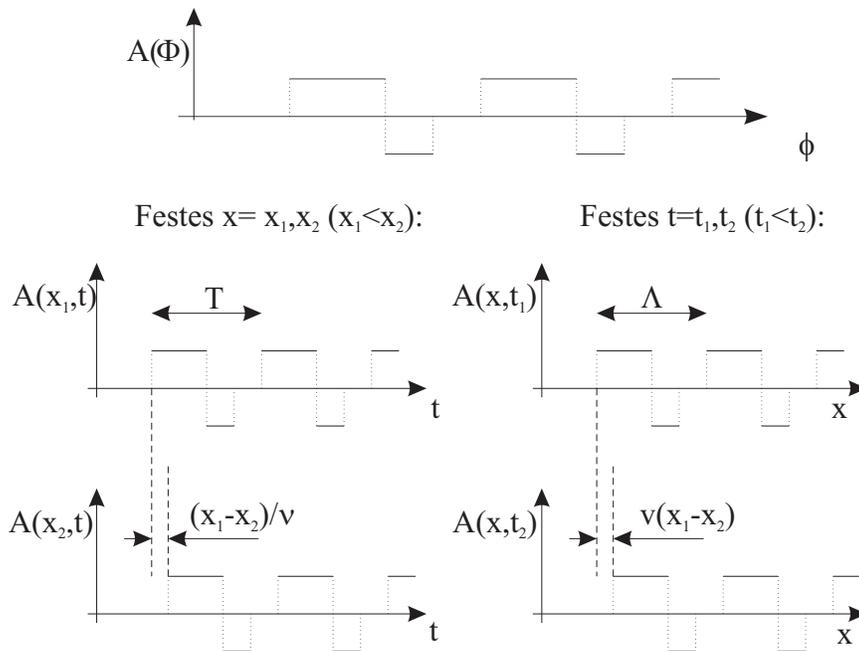


Abbildung 3.11: Ausbreitung einer Welle

Glg. (3.62) beschreibt eine nach rechts, d.h. zu positivem x hin laufende Welle. Eine nach links laufende Welle wird durch

$$A(x, t) = a(x + vt) \quad (3.63)$$

beschrieben. Die nach rechts laufende Welle erfüllt die partielle Differentialgleichung:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\partial A}{\partial x}, \quad (3.64)$$

die nach links laufende Welle:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial A}{\partial t} = +\frac{\partial A}{\partial x}, \quad (3.65)$$

und beide Wellen:

$$\boxed{\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}} \quad (3.66)$$

Beweis: $\partial A / \partial x = da / d\varphi$, $\partial A / \partial t = \pm v \cdot da / d\varphi$ je nach Richtung, $\partial^2 A / \partial x^2 = \partial^2 a / \partial \varphi^2$, $\partial^2 A / \partial t^2 = v^2 \cdot d^2 a / d\varphi^2$. Die drei Gleichungen, insbesondere Glg. (3.66) heißen *Wellengleichung*. Jede Funktion, die sie erfüllt, ist eine Welle. Die Wellengleichungen sind lineare Differentialgleichungen. Deshalb gilt das *Superpositionsprinzip*: Ist die Funktion $A_1(x, t)$ eine Welle und auch die

Funktion $A_2(x, t)$, dann ist $A_1 + A_2$ wieder eine Welle.

Zwischen Schwingungsdauer T bei festem x und Wellenlänge λ bei festem t gilt der einfache Zusammenhang:

$$v = \frac{\lambda}{T}. \quad (3.67)$$

Beweis: $A(x, t) = a(x - vt)$.

Periodisch heißt $A(x, t) = A(x + \lambda, t)$, $a(x - vt) = a(x + \lambda - vt)$,

und auch $A(x, t) = A(x, t - T)$, $a(x - vt) = a(x - vt - vT)$.

Daraus folgt $\lambda = vT$, q. e. d.

Die Wellengleichungen enthalten weder T noch λ , d.h. auch die Superposition von A_1 und A_2 zu verschiedenen T und λ ist eine Welle. Die Superposition einer nach rechts laufenden Welle und einer nach links laufenden weder Glg. (3.64), noch Glg. (3.65), aber Glg. (3.66). Eine solche Superposition heißt auch Welle, insbesondere stellt

$$A(x, t) = a(x - vt) + a(x + vt) \quad (3.68)$$

eine *stehende Welle* dar. Da stehende Wellen so interessant sind wie laufende, wollen wir im folgenden nur fordern, daß eine Welle Glg. (3.66) erfüllt; nur diese nennen wir *Wellengleichung*.

3.8 Wellen in drei Raumdimensionen

Eine Welle in einer Raumdimension erfüllt Glg. (3.66). Eine ebene Welle im dreidimensionalen Raum, die sich in x -Richtung ausbreitet, ebenfalls. Für sie gilt außerdem

$$\boxed{\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} \equiv \Delta A} \quad (3.69)$$

mit $A = A(x, y, z, t)$. Auch ebene Wellen in y - und z -Richtung und beliebige Superpositionen davon erfüllen Glg. (3.69). Weitere Beispiele sind *Kugelwellen*:

$$A(r, \vartheta, \varphi, t) = \frac{1}{r} a(r - vt). \quad (3.70)$$

Eine Kugelwelle, die sich von $(0, 0, 0)$ mit v kugelsymmetrisch nach außen ausbreitet, stellt man am besten in Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) dar. Kugelsymmetrie heißt Unabhängigkeit von ϑ und φ , und in diesem Fall heißt der Δ -Operator²:

$$\Delta A = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial A}{\partial r} \right) \quad (3.71)$$

Damit läßt sich nachrechnen, dass der Ansatz 3.70 die dreidimensionale Wellengleichung erfüllt, und der simpleere Ansatz $A(r, \vartheta, \varphi, t) = a(r - vt)$ nicht. Die allgemeinste ebene fortschreitende Welle heißt:

$$A(\vec{r}, t) = a(\vec{e} \cdot \vec{r} - vt) \quad (3.72)$$

²s. z. B. S. Großmann, Mathematischer Einführungskurs für die Physik

wobei $\vec{r} = (x, y, z)$ der Ortsvektor und \vec{e} der Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung ist. Beweis mit $\vec{e} = (\alpha, \beta, \gamma)$:

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = v^2 a'' , \quad \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = \alpha^2 a'' , \quad \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} = \beta^2 a'' , \quad \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} = \gamma^2 a'' . \quad (3.73)$$

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta A = a'' . \quad (3.74)$$

Damit ist Glg. (3.69) erfüllt. Punkte einer *Wellenfront*, d.h. alle Punkte \vec{r} mit konstanter Phase $\phi = \vec{e} \cdot \vec{r} - vt = \text{const}$, liegen zur gleichen Zeit t in einer Ebene $\vec{e} \cdot \vec{r} = \alpha x + \beta y + \gamma z = \text{const}$, die senkrecht auf \vec{e} steht, $\alpha dx + \beta dy + \gamma dz = \vec{e} \cdot d\vec{r} = 0$, $\vec{e} \perp d\vec{r}$.

3.9 Elektromagnetische Wellen als Beispiel

Hier soll nur gezeigt werden, dass für zwei Vektorfelder $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und $\vec{B}(\vec{r}, t)$, die die Maxwell'schen Gleichungen erfüllen, auch die Wellengleichung 3.69 gilt. Die vier *Maxwell'schen Gleichungen* für das elektrische und magnetische Feld lauten in differentieller Form im Vakuum:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E} &= 0 , & \operatorname{div} \vec{B} &= 0 , \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} , & \operatorname{rot} \vec{B} &= \frac{\partial \vec{E}}{c^2 \partial t} . \end{aligned} \quad (3.75)$$

Und weiter mit elementarer Vektoranalysis³:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 B_x}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} (-\operatorname{rot} \vec{E})_x = -\left(\operatorname{rot} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)_x = -c^2 (\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{B})_x \\ &= c^2 \left(-\frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\operatorname{div} \vec{B}}_0 + \operatorname{div} \operatorname{grad} B_x \right) = c^2 \Delta B_x . \end{aligned} \quad (3.76)$$

Ebenso ist

$$\frac{\partial^2 B_y}{\partial t^2} = c^2 \Delta B_y , \quad \frac{\partial^2 B_z}{\partial t^2} = c^2 \Delta B_z . \quad (3.77)$$

Und genauso:

$$\frac{\partial^2 E_i}{\partial t^2} = -c^2 \left(\operatorname{rot} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right)_i = c^2 \left(-\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{E} \right)_i = c^2 \Delta E_i , \quad i = x, y, z . \quad (3.78)$$

Zusammengefaßt:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = c^2 \Delta \vec{E} , \quad \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = c^2 \Delta \vec{B} , \quad (3.79)$$

mit der nicht ganz so elementaren Schreibweise $\Delta \vec{V} = (\Delta V_x, \Delta V_y, \Delta V_z)$. Alle sechs Komponenten erfüllen die Wellengleichung, und die Felder breiten sich mit $v = c$ aus. Auf ähnliche Weise, von den entsprechenden physikalischen Gesetzen ausgehend, lässt sich zeigen, daß longitudinale oder transversale Störungen in elastischen Medien oder Schallausbreitung in Gasen die Wellengleichung 3.69 erfüllen und deshalb zu Wellen führen.

³siehe S. Großmann, Mathematischer Einführungskurs in die Physik

3.10 Harmonische Wellen und Fourieranalyse

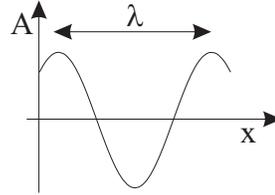


Abbildung 3.12: Momentanbild einer Welle

Wellen $A(x, y, z, t)$, deren Phasenfunktion $a(\vec{e} \cdot \vec{r} - vt)$ oder $a(r - vt)$ harmonisch ist, sind *harmonische Wellen*. Am festen Ort schwingen sie harmonisch mit $e^{i\omega t}$, wobei $\omega = 2\pi/T$, und zu fester Zeit t ist ihr Momentanbild e^{ikx} ebenfalls harmonisch wie in Abb. 3.12. Die Periode Λ heißt *Wellenlänge*, und $k = 2\pi/\Lambda$ heißt *Wellenzahl*:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\Lambda} \cdot \vec{e} , \quad (3.80)$$

$$\phi = k(\vec{e} \cdot \vec{r} - vt) = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t , \quad (3.81)$$

$$v = \frac{\omega}{k} = \frac{\Lambda}{T} . \quad (3.82)$$

Auch die Ortsperiode einer nichtharmonischen Welle wie in Abb. 3.11 heißt meist einfach *Wellenlänge*, wir wollen hier die Bezeichnung Λ beibehalten. Harmonische ebene Wellen und Kugelwellen schreiben sich wie folgt:

$$E(x, y, z, t) = A \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) , \quad (3.83)$$

$$K(r, \vartheta, \varphi, t) = \frac{A}{r} \cos(kr - \omega t) . \quad (3.84)$$

Genauso wie wir periodische Schwingungen in eine FOURIERreihe harmonischer Schwingungen entwickeln können, so eine Welle in eine Summe von harmonischen Wellen mit Wellenlängen λ , die ganzzahlige Bruchteile von Λ sind. Allerdings nur, wenn die Phasengeschwindigkeit v von λ unabhängig ist. Dann gilt für den Fall einer ebenen Welle mit der Periode T und der Ortsperiode Λ :

$$E(x, y, z, t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \hat{g}_n e^{in(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (3.85)$$

mit Wellenzahlen $nk = k_n = n \cdot 2\pi/\Lambda$ und Kreisfrequenzen $n\omega = \omega_n = n \cdot 2\pi/T$. Die Koeffizienten \hat{g} errechnen sich wie folgt:

$$\hat{g}_n = \frac{1}{\Lambda} \int_x^{x+\Lambda} E(x, y, z, t_0) e^{-in(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t_0)} dx \quad (3.86)$$

zu fester Zeit t_0 . Vorsicht: Diese FOURIERzerlegung und alles bisher gesagte einschließlich Abb. 3.11 gilt nur für den Fall, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit harmonischer Wellen unabhängig von ihrer Wellenlänge ist. Bei elektromagnetischen Wellen im Vakuum ist das streng der Fall, bei Schall in Luft in

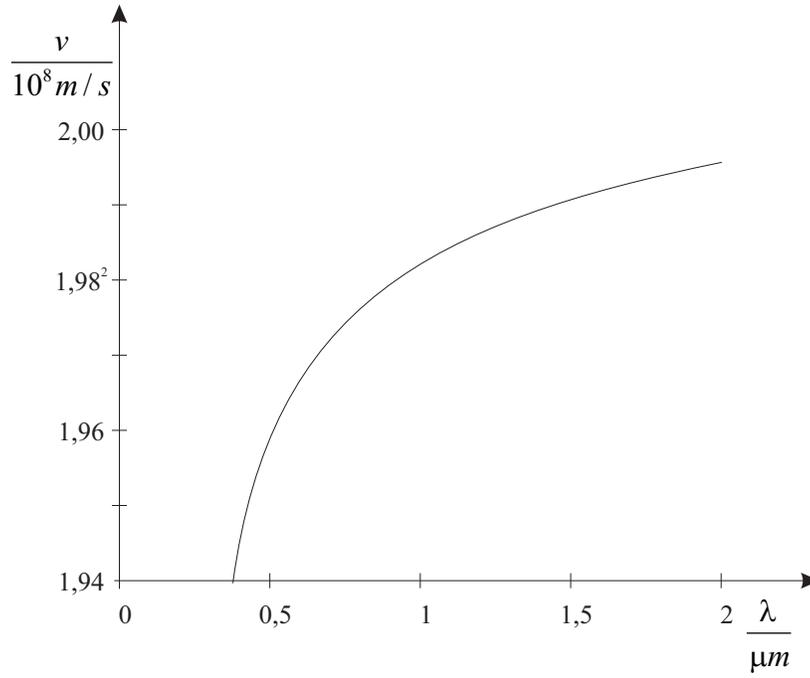


Abbildung 3.13: Licht in Glas

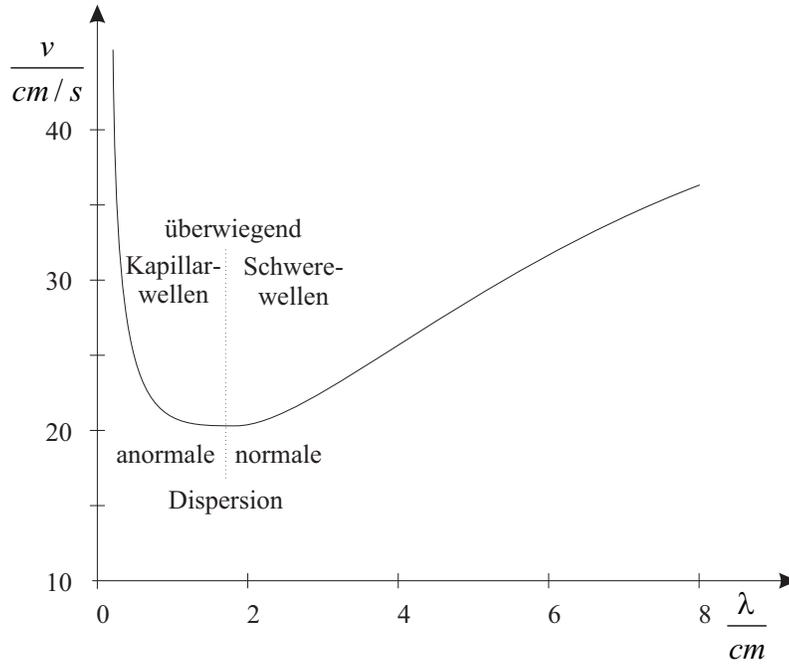


Abbildung 3.14: Oberflächenwellen auf Wasser

sehr guter Näherung. Elektromagnetische Wellen in Materie oder Wellen auf der Wasseroberfläche zeigen *Dispersion*, d.h. harmonische Wellen verschiedener Wellenlänge breiten sich verschieden schnell aus. $v = v(\lambda)$ darf dann nicht mehr *Ausbreitungsgeschwindigkeit*, sondern muss *Phasengeschwindigkeit* genannt werden. Wellen mit $v = \omega/k = \text{const}$ heißen *dispersionsfrei*, anderenfalls *dispersionsbehaftet*.

3.11 Dispersionsbehaftete Wellen

Abb. 3.13 zeigt die experimentellen Ergebnisse für die Phasengeschwindigkeiten von Licht in Glas und Abb. 3.14 für Oberflächenwellen auf dem Wasser. Bei Licht ergibt sich v aus:

$$v = v(\lambda) = \frac{c}{n(\lambda)} \quad (3.87)$$

mit Brechungszahlen n als Funktion der Wellenlänge. Für Wasserwellen im Tiefwasser (Tiefe $\gg \lambda$) gilt:

$$v = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi} + \frac{2\pi\sigma}{\lambda\rho}} \quad (3.88)$$

wobei g die Schwerebeschleunigung, σ die Oberflächenspannung und ρ die Dichte ist. Steigt v mit λ , spricht man von *normaler Dispersion*, fällt v mit λ , von *anormaler Dispersion*.

In beiden Fällen werden aus harmonischen Schwingungen harmonische Wellen, aber aus periodischen nichtharmonischen Schwingungen werden i.a. nichtperiodische Wellen, sogenannte Wellengruppen, Wellenzüge, *Wellenpakete*. Die zwei folgenden Beispiele zur Veranschaulichung sind mit $v(\lambda)$ aus dem rechten Teil von Abb. 3.14 durchgerechnet, d. h. für Wasserwellen mit $\lambda \geq 2$ cm.

Erstes Beispiel: $a(t) = A \cos \omega_1 t$ mit $\omega_1 = 2\pi \cdot 5 \text{ s}^{-1}$ führt zu einer Welle $a_1(x, t) = A \cos(2\pi x/\lambda_1 - \omega_1 t)$ mit $\lambda_1 = 6$ cm, denn $v = v(6 \text{ cm}) \approx 30$ cm/s. Zu $\omega_2 = 2\pi \cdot 10 \text{ s}^{-1}$ gehört ebenfalls eine harmonische Welle mit $\lambda_2 = 2,5$ cm und $v = v(\lambda_2) = 25$ cm/s. Die Überlagerung beider Schwingungen führt zur Überlagerung beider Wellen, aber das Wellenbild ist nicht mehr periodisch, genauer gesagt ist die Periode sehr viel größer als 6 cm. Abb. 3.15 veranschaulicht diese Resultate. Das Erscheinungsbild Abb. 3.15c ändert sich außerdem mit der Zeit, aber nach 0,2 s sieht es wieder gleich aus. Das Wellenbild sieht so unregelmäßig aus, dass es ungeeignet ist, den Begriff der *Gruppengeschwindigkeit* zu demonstrieren.

Die folgende Welle,

$$A(x, t) = \sum_{i=1}^6 g_i \cos \left[\frac{2\pi}{\lambda_i} (x - v(\lambda_i)t) \right], \quad (3.89)$$

wieder in Wasser, mit $\lambda_1 = 3,8$ cm, $g_1 = 1$, $\lambda_2 = 4,2$ cm, $g_2 = 1$, $\lambda_3 = 3,4$ cm, $g_3 = 0,67$, $\lambda_4 = 4,6$ cm, $g_4 = 0,67$, $\lambda_5 = 3$ cm, $g_5 = 0,2$ und $\lambda_6 = 5$ cm,

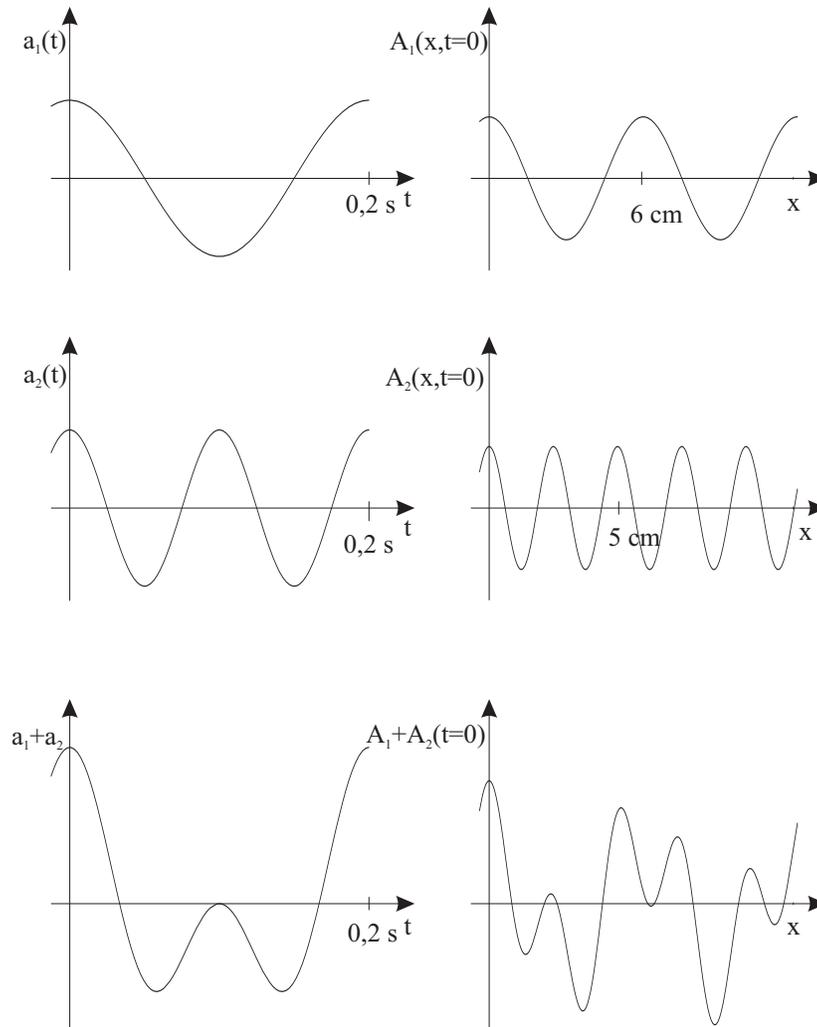


Abbildung 3.15: Überlagerung zweier Wellen

$g_6 = 0,2$. Dies ist ein ausreichend schönes Wellenpaket, um die Gruppengeschwindigkeit zu sehen. $v(\lambda)$ ist wieder aus Abb. 3.14 für Wasserwellen. Vier Momentaufnahmen sind in Abb. 3.16 gezeigt, für $t = 0; 0,2; 0,4$ und $0,6$ s. Man erkennt deutlich, daß ein Maximum innerhalb der Wellengruppe schneller läuft als die Gruppe als Ganzes. Der „Schwerpunkt“ der Gruppe ist gleich dem Maximum der Einhüllenden. Ein einzelnes Maximum, eine einzelne Phase läuft mit der *Phasengeschwindigkeit* v_φ , hier $v_\varphi = v(4\text{cm})$ aus Abb. 3.14 ≈ 26 cm/s. Die Gruppe läuft mit der *Gruppengeschwindigkeit* $v_g \approx 20$ cm/s. Die genaue Definition der Gruppengeschwindigkeit und ihre Berechnung aus $v_\varphi = v_\varphi(\lambda)$ folgt im nächsten Abschnitt. Der hier gezeigte Fall $v_g < v_\varphi$ gilt immer bei normaler Dispersion mit $dv_\varphi/d\lambda > 0$. Da die Maxima und Minima schneller laufen als die Gruppe, entstehen Maxima und Minima am Gruppenende und verschwinden im Gruppenkopf. Dies wird in einem Film sowohl an Hand einer

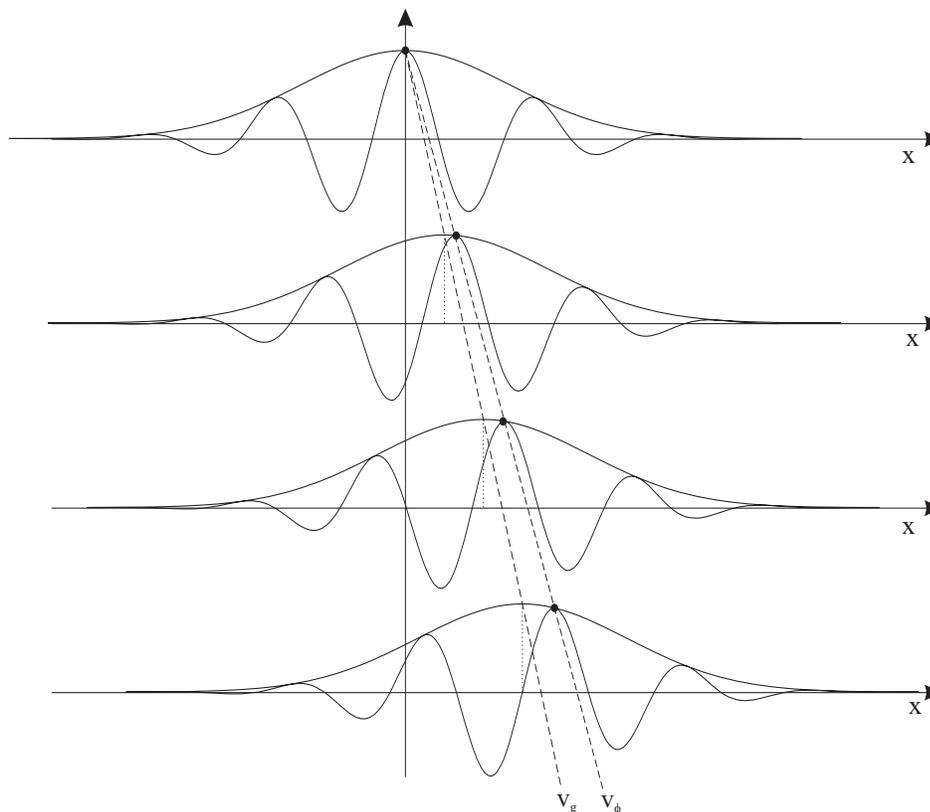


Abbildung 3.16: Phasengeschwindigkeit bei Wellenpaketen. Die vier Wellenbilder entsprechen der Welle in Gl. 3.89 zu Zeiten $t = 0$, $t = 0.2 \text{ s}$, $t = 0.4 \text{ s}$ und $t = 0.6 \text{ s}$.

gezeichneten mathematischen Wellengruppe ähnlich Abb. 3.16 als auch an Hand von Wasserwellen mit $\lambda \approx 70 \text{ cm}$ in einer 25 m langen Versuchsrinne gezeigt.

Bei anormaler Dispersion mit $dv_\varphi/d\lambda < 0$ ist $v_g > v_\varphi$, und innerhalb einer Wellengruppe entstehen Maxima am Gruppenkopf und verschwinden am Gruppenende. Bei dispersionsfreien Wellen mit $dv_\varphi/d\lambda = 0$ ist $v_g = v_\varphi$, und das Erscheinungsbild der Welle ändert sich nicht mit der Zeit. Dann gilt Abb. 3.11 für beliebige Wellengruppenform.

3.12 Wellenpakete

Unter *Wellenpaket* oder *Wellengruppe* verstehen wir die i. a. nichtperiodische Ausbreitung einer Amplitude $A(x, y, z, t)$ durch den Raum. Bei dispersionsbehafteten Wellen, auch dispersive Wellen genannt, kann eine solche nichtperiodische Gruppe durchaus auch aus einer periodischen Schwingung hervorgegangen sein. Für die folgende Diskussion beschränken wir uns wieder auf eine Raumdimension x , im Fall einer ebenen Welle, kann man sich das Koordinatensystem

so gedreht denken, dass $\vec{e} = \vec{e}_x$. Bei dispersionsfreien Wellen ändert sich das Bild des Wellenpaketes mit der Zeit nicht, bei dispersiven Wellen ändert es sich, wie in Abb. 3.17 dargestellt. Als Gruppengeschwindigkeit wird die Aus-

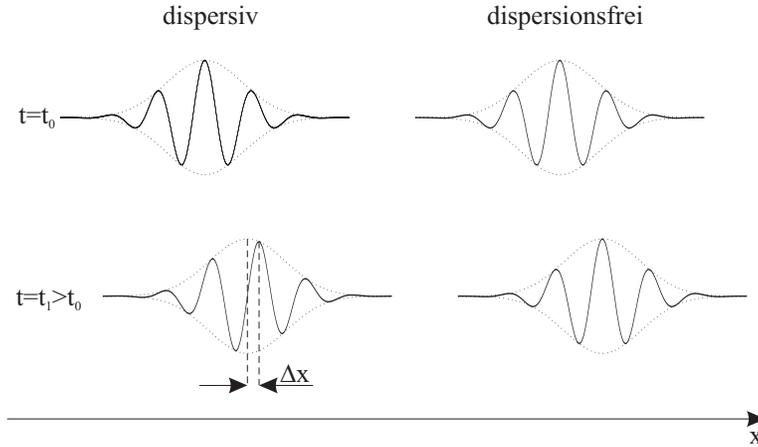


Abbildung 3.17: Gestalt eines Wellenpaketes

breitungsgeschwindigkeit v_g des Mittelpunktes des Wellenpaketes definiert.

Zu fester Zeit t , z. B. $t = 0$, kann man vom Momentanbild der Welle eine Wellenlängenspektralanalyse durchführen:

$$A(x, 0) = a(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{g}(k) e^{ikx} dk \quad (3.90)$$

$$\hat{g}(k) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(x) e^{-ikx} dx \quad (3.91)$$

wobei $\hat{g}(k) = \hat{g}^*(-k)$, wenn $a(x)$ reell. Dabei sind die e^{ikx} harmonische Momentanbilder, und $k = 2\pi/\lambda$ wie im Abschnitt über harmonische Wellen definiert. Ein einfacher Sonderfall eines Wellenpaketes ist die „fast harmonische Welle“ mit einem Wellenbild bei $t = 0$ wie in Abb. 3.18(a):

$$\hat{A}(x, 0) = \hat{a}(x) = A e^{-x^2/2\sigma_x^2} e^{ik_0 x} \quad (3.92)$$

Welches ist das Wellenlängen- bzw. das Wellenzahlspektrum dieses Paketes?

$$\hat{g}(k) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A e^{-x^2/2\sigma_x^2} e^{ik_0 x} e^{-ikx} dx \quad (3.93)$$

$$= \text{reell} = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/2\sigma_x^2} \cos(k - k_0)x dx \quad (3.94)$$

$$= A \sigma_x e^{-(k-k_0)^2 \sigma_x^2 / 2} \quad (3.95)$$

Dieses Wellenzahlspektrum ist in Abb. 3.18(b) dargestellt. Es ist eine GAUSSfunktion des Mittelwertes k_0 und der Standardbreite $\sigma_k = 1/\sigma_x$, das ist der Kehrwert der Standardbreite der Amplitudenfunktion $e^{-x^2/2\sigma_x^2}$ in

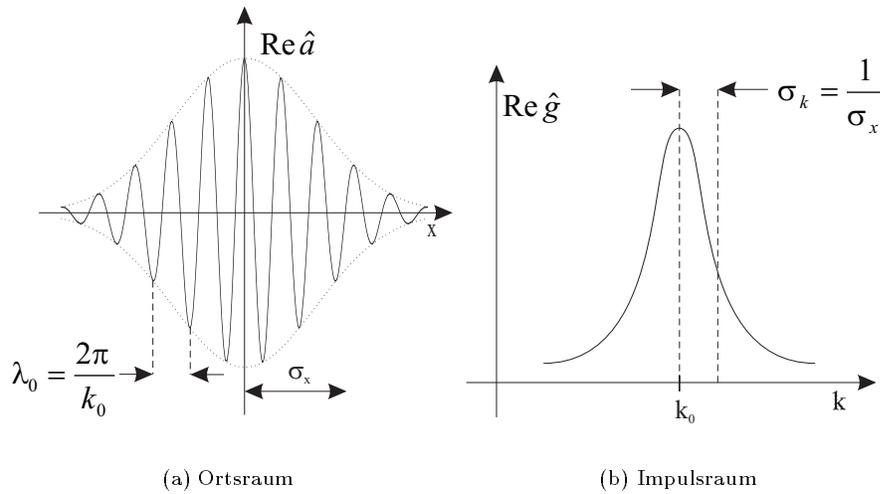


Abbildung 3.18: eine „fast harmonische Welle“

der fast harmonischen Welle.

Zurück zum allgemeinen Wellenpaket. Seine Momentaufnahme war in Glg. (3.90) spektral zerlegt worden. Jeder harmonische Anteil $\hat{g}(k)e^{ikx}$ hat eine feste Ausbreitungsgeschwindigkeit, die gleich der zu dieser Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$ gehörenden Phasengeschwindigkeit $v(\lambda)$ ist. Daraus folgt:

$$\begin{aligned} A(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik[x-v(\lambda)t]} dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx-\omega t)} dk \quad \text{mit } \omega = vk, \quad v = \frac{\omega}{k} = v(\lambda). \end{aligned} \quad (3.96)$$

So geschrieben ist $\omega = \omega(k)$ eine Funktion von k und $v = \omega(k)/k$.

Ein typisches Wellenpaket wird immer so ähnlich aussehen wie das in Abb. 3.18(a). Nicht so speziell mit GAUSSförmiger Amplitudenfunktion und GAUSSförmigem Wellenzahlspektrum, aber doch mit abfallender Wellenfunktion für $x \rightarrow \pm\infty$ und einem mehr oder weniger breiten Spektrum um $k = k_0$ herum. Mit dem Ansatz

$$A(x, t) = M(x, t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (3.97)$$

ist ein solches Paket beschrieben, wobei zunächst nur $M(x, 0)$, die Einhüllende der Momentaufnahme, vorgegeben ist. Bei hinreichend breitem $M(x, 0)$ ist das Spektrum $\hat{g}(k)$ eine hinreichend schmale Funktion um $k = k_0$ herum. Die Frage, die uns zur sauberen Definition der Gruppengeschwindigkeit führt, lautet: Wie

ändert sich $M(x, t)$ mit der Zeit?

$$\begin{aligned}
 A(x, 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dk \\
 A(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)} dk \\
 M(x, t) &= e^{-i(k_0 x - \omega_0 t)} A(x, t) \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k - k_0)x - i(\omega - \omega_0)t} dk .
 \end{aligned} \tag{3.98}$$

$\omega = \omega(k)$ ist eine Funktion von k . Diese kann an der Stelle $k = k_0$ in eine Taylorreihe entwickelt werden:

$$\omega = \omega_0 + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} \cdot (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} \cdot (k - k_0)^2 + \dots \tag{3.99}$$

Da nach Voraussetzung nur Wellenzahlen um k_0 herum im Spektrum vorkommen, verwenden wir die lineare Näherung und erhalten:

$$\begin{aligned}
 M(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k - k_0)x - i(k - k_0) \cdot d\omega/dk \cdot t} dk \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k - k_0)(x - d\omega/dk \cdot t)} dk .
 \end{aligned} \tag{3.100}$$

Wenn $d\omega/dk$ unabhängig von k ist, gilt:

$$M(x, t) = M\left(x - \frac{d\omega}{dk}t, 0\right) \tag{3.101}$$

d. h. $M(x, t)$ bewegt sich mit der *Gruppengeschwindigkeit* $v_g = d\omega/dk$ nach rechts und ändert seine Form nicht. Im allgemeinen ist v_g selbst wieder Funktion von k , d. h. im Integral kommen mehrere Gruppengeschwindigkeiten vor. Dann bewegt sich $M(x, t)$ nicht nur, sondern ändert mit der Zeit seine Form, das Wellenpaket „zerfließt“. Aber dieses *Zerfließen* geht langsamer als das Fortbewegen, und

$$\boxed{v_g = \frac{d\omega(k)}{dk}} \tag{3.102}$$

gilt als allgemeine Definition der Gruppengeschwindigkeit.

Ist $v_\varphi = v_\varphi(\lambda)$ gegeben, dann lässt sich Glg. (3.102) umschreiben:

$$\omega = v_\varphi k, \quad \frac{d\omega}{dk} = v_\varphi + k \frac{dv_\varphi}{dk} = v_\varphi + \frac{2\pi}{\lambda} \frac{dv_\varphi}{d\lambda} \frac{d\lambda}{dk}, \tag{3.103}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad \frac{d\lambda}{dk} = -\frac{2\pi}{k^2} = -\frac{\lambda^2}{2\pi}. \tag{3.104}$$

Damit ergibt sich

$$v_g(\lambda) = v_\varphi(\lambda) - \lambda \cdot \frac{dv_\varphi}{d\lambda}(\lambda) \tag{3.105}$$

Für dispersionsfreie Wellen gilt $v_g = v_\varphi$, solche mit normaler Dispersion haben $v_g < v_\varphi$, und solche mit anormaler Dispersion $v_g > v_\varphi$.

Als abschließendes Zahlenbeispiel sollen nochmals die Oberflächenwellen auf tiefem Wasser herhalten. Es war dort die Phasengeschwindigkeit

$$v_\varphi = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi} + \frac{2\pi\sigma}{\lambda\rho}} \quad (3.106)$$

mit der Erdbeschleunigung g , der Oberflächenspannung $\sigma = 0,073 \text{ N/m}$ und der Dichte ρ . Daraus folgt $v_\varphi(4\text{cm}) = 0,27 \text{ m/s}$. Und für v_g folgt:

$$\begin{aligned} \frac{dv_\varphi}{d\lambda} &= \frac{1}{2v_\varphi} \left(\frac{g}{2\pi} - \frac{2\pi\sigma}{\lambda^2\rho} \right) \\ v_g = v_\varphi - \lambda \frac{dv_\varphi}{d\lambda} &= \frac{g\lambda/2\pi + 3 \cdot 2\pi\sigma/\lambda\rho}{2v_\varphi} = 0,18 \frac{\text{m}}{\text{s}} \text{ bei } \lambda = 4 \text{ cm.} \end{aligned} \quad (3.107)$$

3.13 Die Unschärferelation zwischen Ort und Wellenlänge

Nur unendlich weit ausgedehnte harmonische Wellen haben eine einzige Wellenlänge, alle anderen bestehen aus der Überlagerung mehrerer Partialwellen mit verschiedenen Wellenlängen. Unendlich weit ausgedehnt heißt unbestimmt im Ort, die Welle befindet sich überall. Ist im entgegengesetzten Fall ein Wellenpaket sehr gut lokalisiert, d.h. ist sein σ_x in Abb. 3.18(a) sehr klein, dann ist sein Wellenlängenspektrum sehr breit. Nehmen wir zunächst die GAUSSsche Einhüllende der Abb. 3.18(b). Für die allgemeingültige Definition der Standardbreiten brauchen wir Amplitudenquadrate:

$$\begin{aligned} \hat{A}(x, 0) &= A e^{-x^2/2\sigma_x^2} e^{ik_0 x} \\ |\hat{A}(x, 0)|^2 &= A^2 e^{-x^2/\sigma_x^2} \\ |\hat{g}(k)|^2 &= A^2 \sigma_x^2 e^{-(k-k_0)^2 \sigma_x^2} \end{aligned} \quad (3.108)$$

und mit

$$\sigma_x = \sigma[|\hat{A}(x)|^2], \quad \sigma_k = \sigma[|\hat{g}(k)|^2] \quad (3.109)$$

erhalten wir:

$$\sigma_x \cdot \sigma_k \geq \frac{1}{2} \quad (3.110)$$

mit dem Gleichheitszeichen. Dies ist unabhängig von k_0 , d. h. von der Wellenlänge innerhalb des Wellenpaketes, Das Größerzeichen gilt – auch hier ohne Beweis – für alle Fälle nicht-GAUSScher Einhüllenden. $\sigma_k = 0$ heißt harmonische Welle, sie befindet sich überall, $\sigma_x = 0$ heißt präzise lokalisiertes Wellenpaket, sein Wellenlängenspektrum reicht von 0 bis $+\infty$. Beide Extreme sind Idealisierungen, die in der Natur nicht vorkommen. Alle „Wellen“, die man beobachtet, sind Wellenpakete mit $\sigma_\lambda \neq 0$, $\sigma_x \neq 0$, und immer gilt Glg. (3.110).

Kapitel 4

Materiewellen

Licht zeigt Wellen- und Teilcheneigenschaften. In der Diskussion der Photonen haben wir uns historisch von EINSTEINS Deutung des Photoeffektes 1905 bis zum COMPTONEffekt 1922, der Koinzidenzmessung von gestreutem Photon und rückgestreutem Elektron 1925 und der Paarerzeugung 1932 vorgearbeitet. Die Interpretation der Lichtwelle als Wahrscheinlichkeitsverteilung für Photonen wurde kurz angeschnitten, sie geht auf BORN 1926 zurück.

Zwanzig Jahre lang, von EINSTEIN 1905 bis DE BROGLIE 1924 hat anscheinend niemand näher untersucht, ob der bei Licht offenkundige Dualismus von Teilchen und Welle auch bei „Materieteilchen“, d. h. bei Objekten mit einer Ruhemasse $m_0 \neq 0$ sichtbar werden kann. Nach DE BROGLIES Doktorarbeit über Materiewellen 1924 verlief die Geschichte explosionsartig, mit den bahnbrechenden Arbeiten von HEISENBERG 1925, SCHRÖDINGER 1926 und BORN, HEISENBERG und JORDAN 1926 wurde innerhalb von zwei Jahren das gesamte Gebäude der heutigen Quantenmechanik aufgebaut.

Die ersten überzeugenden Interferenzerscheinungen von Elektronenwellen an Kristallen wurden 1927 von DAVISSON und GERMER, und unabhängig von ihnen 1928 von G. P. THOMSON gefunden.

4.1 DE BROGLIES Hypothese

DE BROGLIE stellte 1924 seine theoretische Doktorarbeit „Recherches sur la Théorie des Quanta“ fertig, in der er untersuchte, welche Eigenschaften Wellen haben müssten, die die Bewegung von Teilchen mit der Ruhemasse $m_0 \neq 0$ beschreiben. $m_0 \neq 0$ bedeutet „Materie“ im Gegensatz zum Licht mit $m_0(\gamma) = 0$, deshalb der heute übliche Name *Materiewellen*.

Ein freies Teilchen der Ruhemasse m_0 bewegt sich geradlinig mit der Geschwindigkeit \vec{v} , dem Impuls $\vec{p} = \gamma m_0 \vec{v}$ und der Energie $E = \gamma m_0 c^2$. Für Photonen und ihre Wellen galt Glg. (2.9), $E = \hbar\omega$, und daraus folgte mit dem Einheitsvektor \vec{e} in Photonenrichtung Glg. (2.12):

$$\vec{p} = \vec{e} \cdot \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} \vec{e} = \hbar k \vec{e} = \hbar \vec{k} . \quad (4.1)$$

Versucht man hypothetisch die gleichen Beziehungen

$$E = \hbar\omega = \gamma m_0 c^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (4.2)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} = \gamma m_0 \vec{v} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (4.3)$$

für Materieteilchen, so erhält man eine ebene Welle

$$\psi = \psi(x, y, z, t) = A e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - E \cdot t) / \hbar} . \quad (4.4)$$

Die Flächen konstanter Phase sind Ebenen senkrecht zur Teilchengeschwindigkeit, genauso wie Wellenfronten der Optik Ebenen senkrecht zur Richtung der Lichtstrahlen und der Photonen sind. Wir schreiben die Welle komplex und benutzen die in der Quantenmechanik dafür übliche Bezeichnung¹ ψ .

Was ist die *Phasengeschwindigkeit* von DE BROGLIES hypothetischer Welle?

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{\gamma m_0 c^2}{\gamma m_0 v} = \frac{c^2}{v} > c . \quad (4.5)$$

Die Phasengeschwindigkeit ist größer als die Lichtgeschwindigkeit, aber sie ist abhängig von v , d. h. wellenlängenabhängig. DE BROGLIE-Wellen sind also dispersiv, $dv_\varphi/dv < 0$, $dv_\varphi/dk < 0$, $dv_\varphi/d\lambda > 0$. Es liegt normale Dispersion vor, d. h. die Gruppengeschwindigkeit ist kleiner als die Phasengeschwindigkeit. Wie groß ist sie? Mit $v_g = d\omega/dk$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} v_g &= \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = \frac{1}{2E} \cdot 2pc^2 \\ &= \frac{pc^2}{E} = \frac{\gamma m_0 v c^2}{\gamma m_0 c^2} = v . \end{aligned} \quad (4.6)$$

Die *Gruppengeschwindigkeit* eines DE BROGLIESchen Wellenpaketes ist gleich der Geschwindigkeit eines Teilchens, dessen Bewegung dieses Paket beschreiben soll. Dies ist ein brauchbares und zugleich merkwürdiges Ergebnis: Die Welle bewegt sich nur dann mit dem Teilchen mit, wenn das Teilchen keinen scharfen Impuls $p = p_0$ hat, sondern wenn ein Paket aus einer Überlagerung von Impulsen um p_0 herum vorliegt. $p = p_0$ scharf hieße harmonische Welle mit $v_\varphi = c^2/v$. $p = p_0 \pm \sigma_p$ unscharf heißt Wellenpaket mit $v_g = v$.

4.2 Verhalten bei Lorentztransformationen

Wie ändert sich die *Wellenfunktion* ψ der Bewegung eines Materieteilchens, wenn wir diese Bewegung nicht im Inertialsystem $S(x, y, z, t)$, sondern in einem dagegen gleichförmig bewegten System $S'(x', y', z', t')$ beschreiben?

$$\psi = A e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - E t) / \hbar} , \quad \psi' = A' e^{i(\vec{p}' \cdot \vec{r}' - E' t') / \hbar} . \quad (4.7)$$

¹Das ^ über ψ sparen wir uns von jetzt ab, Materiewellen sind immer komplex. Auch schreiben wir die Energie im folgenden wieder als E , nicht mehr als W , weil keine Verwechslung mit der el. Feldstärke mehr möglich ist.

(ct, x, y, z) ist ein Vierervektor x_i . $x'_i = \sum_k L_{ik} x_k$. Auch $(E/c, p_x, p_y, p_z)$ ist ein Vierervektor p_i , und $p'_i = \sum_k L_{ik} p_k$. Das Viererprodukt $V_0 W_0 - \vec{V} \cdot \vec{W}$ zweier Vierervektoren $V_i = (V_0, \vec{V})$ und $W_i = (W_0, \vec{W})$ ist eine Invariante. Daraus folgt:

$$Et - \vec{p} \cdot \vec{r} = E't' - \vec{p}' \cdot \vec{r}' \quad , \quad \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t = \vec{k}' \cdot \vec{r}' - \omega't' \quad . \quad (4.8)$$

Die Phase einer DE BROGLIE-Welle ist relativistisch invariant. Wichtig ist das für Phasendifferenzen, denn konstruktive Interferenz zweier Teilwellen soll in jedem Inertialsystem konstruktive Interferenz sein.

4.3 Wie groß sind DE BROGLIES Wellenlängen?

Aus Glg. (4.3), $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, folgt:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}} \quad . \quad (4.9)$$

In dieser Form gilt Glg. (4.9) auch für Lichtteilchen. Für Materieteilchen mit $E = m_0 c^2$ ist $p = 0$, das Teilchen ruht, und seine Welle hat eine unendlich große Wellenlänge. Mit steigender Energie wird λ kleiner. Bei nichtrelativistischen Geschwindigkeiten $v \ll c$ ist $p = mv$ und

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad . \quad (4.10)$$

Bei gegebener Teilchengeschwindigkeit ist die Wellenlänge proportional zu $1/m$. Große Massen bedeuten kleine Wellenlängen. Es folgen ein paar Zahlenbeispiele:

1. Ein Auto im Straßenverkehr. $m = 10^3$ kg, $v = 50$ km/h = 14 m/s, $\lambda = h/mv = 5 \cdot 10^{-38}$ m. Diese Wellenlänge ist so winzig, selbst im Vergleich zu Atomkerndurchmessern von 10^{-15} m, dass Materiewellen im Straßenverkehr keine Rolle spielen und auch sonst nirgends in der makroskopischen Mechanik.
2. Ein Luftmolekül bei Zimmertemperatur. $m = 32$ u = $32 \cdot 931 \cdot 10^6$ eV/c², $E_{\text{kin}} = k \cdot 300$ K = 0,025 eV, $p = \sqrt{2mE_{\text{kin}}} = 3,9 \cdot 10^4$ eV/c, $\lambda = 3,2 \cdot 10^{-11}$ m. Auch diese Wellenlänge ist kleiner als die Größe der Moleküle von einigen 10^{-10} m. Beobachten von Luftmolekülen bei 300 K heißt integrieren über etwa 10 Wellenlängen, auch dabei werden Welleneffekte kaum sichtbar.
3. Elektronen in Kanalstrahlexperimenten à la 1900, $U = 50$ V, $E_{\text{kin}} = 50$ eV, $m = 511$ keV/c², $p = \sqrt{2mE} = 7150$ eV/c, $\lambda = h/p = 1,73 \cdot 10^{-10}$ m = 173 pm. Zur Erinnerung: der Gitterabstand zwischen zwei Ebenen in NaCl beträgt 281 pm. D. h. die Wellenlänge von 50 eV-Elektronen liegt in der Gegend von Kristallgitterabständen. Interferenzmaxima und -minima sollten sich zeigen, entweder beim Durchgang von diesen Elektronen durch dünne Kristallschichten oder bei Reflexion an Kristalloberflächen, wenn es Materiewellen gibt.

$$hc = 1,2398 \cdot 10^{-6} \text{ eV m} \quad . \quad (4.11)$$

Zu merken ist: Die Wellenlänge, die einem Impuls von 1 eV/c entspricht, beträgt 1,2398 μm .

4.4 Das DAVISSON-GERMER-Experiment

Die quantitative Bestätigung der DE BROGLIE-Beziehung $\lambda = h/p$ gelang DAVISSON und GERMER in den USA 1927 nach mehrjährigen Arbeiten über die Reflexion von Elektronen an Metalloberflächen. In den zwanzig Jahren nach

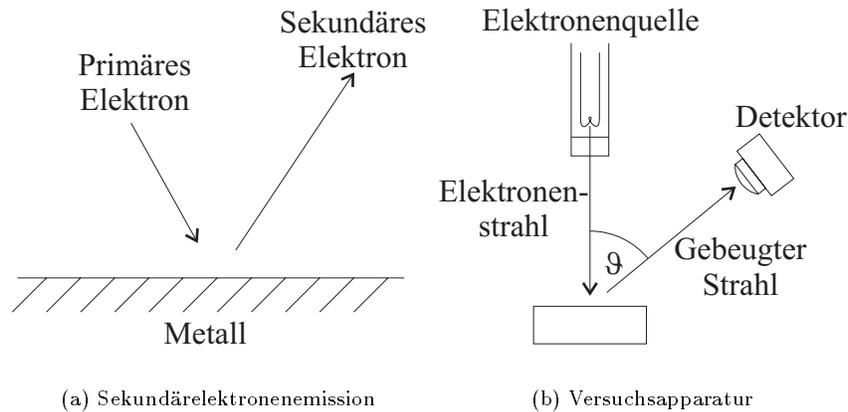


Abbildung 4.1: DAVISSON-GERMER-Versuch

EINSTEIN 1905 gab es zwar experimentell unzweideutiges Material über den Photoeffekt, aber EINSTEINS Photonenerklärung blieb den meisten Physikern unverständlich. Und die Vorstellung, dass Teilchen Welleneigenschaften haben könnten, war so absurd, dass auch Beobachtungen über seltsame Intensitätsmaxima beim Experimentieren mit *Kanalstrahlen*² durch dünne Folien nicht richtig gedeutet wurden. Seit etwa 1919 ist die Beobachtung bekannt, dass Sekundärelektronen, die von Elektronen gemäß Abb. 4.1(a) aus Metalloberflächen „herausgeschlagen“ werden, ein Energiespektrum zeigen, das unabhängig von der Primärenergie E_1 ein kleines Maximum bei $E_2 = E_1$ hat. Ein Teil der einfallenden Elektronen wird vom Metall wie von einem Spiegel reflektiert. DAVISSON arbeitete seit etwa 1920 an dieser Sekundärelektronenemission. Ihre Bedeutung für den Photovervielfacher wurde in Abschnitt 2.4 diskutiert, DAVISSON war Industriephysiker bei Western Electric und bei Bell Telephone in New York. Materiewellen machte er aus seinen Beobachtungen erst, als die Motivation dazu durch DE BROGLIES Arbeiten vorlag und BORN und andere ihn auf einer Tagung in England darauf hingewiesen hatten. Die Apparatur, mit der DAVISSON zusammen mit GERMER 1927 zum ersten Mal die Existenz von Materiewellen nachwies, ist in Abb. 4.1(b) skizziert. Elektronen, deren kinetische Energie E_1 von ca. 40 bis 100 eV variiert werden konnte, flogen durch Vakuum auf die Oberfläche eines Nickeleinkristalls.

Der Elektronendetektor war mit einem Gegenfeld ausgestattet und registrierte nur solche Sekundärelektronen mit $E_2 \approx E_1$. Sowohl der Winkel ϑ des Detektors als auch die Orientierung des Einkristalls relativ zum Primärelektronenstrahl wurden variiert. Bei senkrechtem Einfall auf die (1, 1, 1)-Ebene

²z. B. bei LENARD in Heidelberg

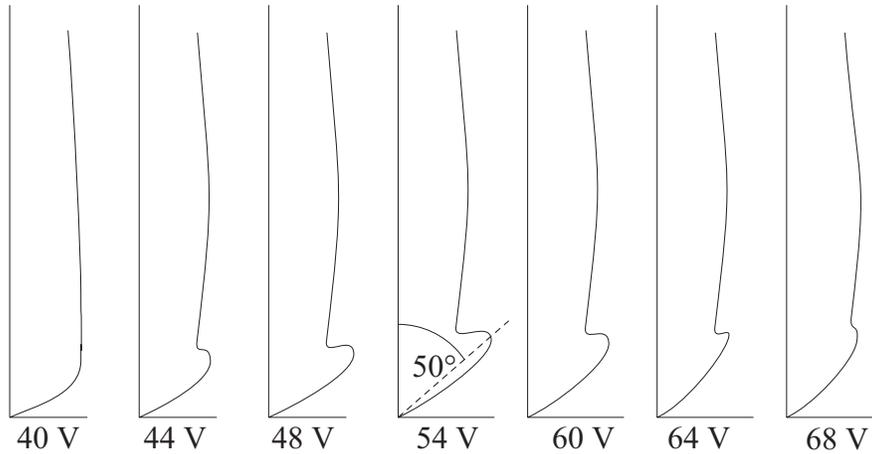


Abbildung 4.2: Intensitäten beim DAVISSON-GERMER-Experiment

des Kristalls ergaben sich schließlich Anfang 1927 die Intensitätsverteilungen in Abb. 4.2. Darin ist die Zahl der mit $E_2 \approx E_1$ reflektierten Sekundärelektronen dividiert durch die Zahl der Primärelektronen als Funktion von ϑ als Polardiagramm dargestellt. Da Elektronen im Metall Energie verlieren, sind sie bei vorgegebenem E_1 nur in wenigen Schichten des Kristalls monochromatisch. Zur Deutung des Intensitätsmaximums, das bei 54 eV und $\vartheta = 50^\circ$ am deutlichsten hervortritt, verwenden wir in Abb. 4.3 nur die alleroberste Schicht des Kristalls. Konstruktive Interferenz der reflektierten Elektronenwelle an benachbarten Atomen tritt ein, wenn

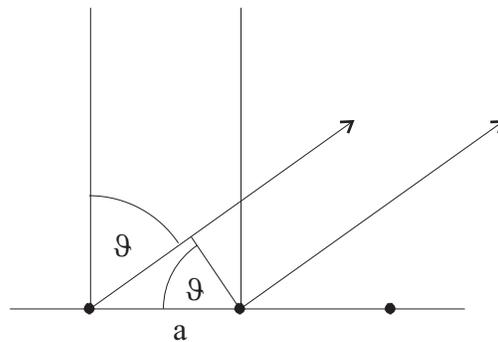


Abbildung 4.3: Elektroneninterferenz

$$a \sin \vartheta = n \lambda, \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (4.12)$$

Aus der Röntgenstrukturanalyse von Nickel ist $a = 215 \text{ pm}$ bekannt. Mit $n = 1$ und $\vartheta = 50^\circ$ folgt daraus:

$$\lambda = 215 \text{ pm} \cdot \sin 50^\circ = 165 \text{ pm} . \quad (4.13)$$

Nach DE BROGLIES Glg. (4.9) erwarten wir bei $E_{\text{kin}} = 54 \text{ eV}$:

$$p = \sqrt{2mE_{\text{kin}}} = \frac{\sqrt{2 \cdot 511 \text{ keV} \cdot 54 \text{ eV}}}{c} = 7400 \frac{\text{eV}}{c}, \quad (4.14)$$

$$\lambda = \frac{hc}{7400 \text{ eV}} = 167 \text{ pm},$$

in bester Übereinstimmung mit dem Experiment. Achtzehn weitere Intensitätsmaxima konnten zur Überprüfung von $\lambda \cdot p = h$ verwendet werden, alle bestätigten diese Relation im Rahmen der Messfehler.

Warum tritt in Abb. 4.2 das Maximum bei 54 eV deutlicher auf, als bei benachbarten Elektronenenergien, wo doch

$$a \sin \vartheta = \lambda \quad (4.15)$$

für alle Energien mit entsprechendem ϑ gilt? Dies liegt an der konstruktiven Interferenz benachbarter Atome in einer Schicht *und* auch mehrerer Schichten gemäß der BRAGGSchen Bedingung, vgl. Glg. (2.15):

$$2d \sin \varphi = \lambda \quad (4.16)$$

Abb. 4.4 skizziert diesen Sachverhalt. a und d sind Gitterkonstanten des Nickels,

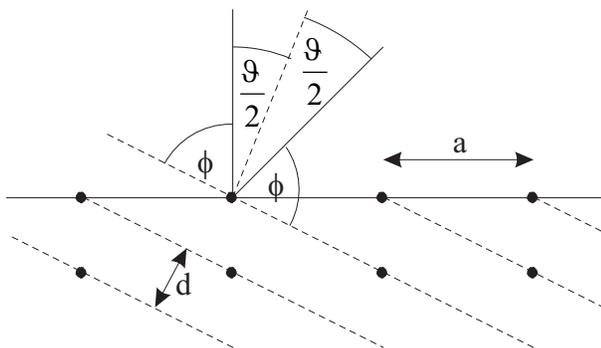


Abbildung 4.4: BRAGG bei DAVISSON-GERMER

$a = 215 \text{ pm}$ und $d = 91 \text{ pm}$. Damit beide Interferenzbedingungen gelten, muss $\varphi = \frac{\pi}{2} - \frac{\vartheta}{2}$ sein und

$$\lambda = a \sin \vartheta = 2d \sin \varphi$$

$$2a \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} = 2d \sin \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\vartheta}{2} \right) = 2d \cos \frac{\vartheta}{2} \quad (4.17)$$

$$\sin \frac{\vartheta}{2} = \frac{d}{a} = 0,423.$$

Daraus folgt $\vartheta = 50^\circ$, und mit $n = 1$ folgt $E_{\text{kin}} = 54 \text{ eV}$.

4.5 Demonstration des Experimentes von G. P. THOMSON

G. P. THOMSON (Sohn von J. J. THOMSON) arbeitete seit Bekanntwerden von DE BROGLIES Hypothese am experimentellen Nachweis von Materiewellen durch Elektronenbeugung in Kristallen. Die Methode, mit der er Ende 1927 erfolgreich war, entspricht der DEBYE-SCHERRER-Methode, die bei der Behandlung der Röntgenstrahlbeugung schon kurz erwähnt wurde: Ein Röntgen- oder jetzt Elektronenstrahl fliegt durch eine dünne polykristalline Schicht. Einkristallobereflächen innerhalb dieser Schicht liegen in verschiedenster Orientierung relativ zum einfallenden Strahl, und die BRAGGSche Reflexionsbedingung in Glg. (2.15),

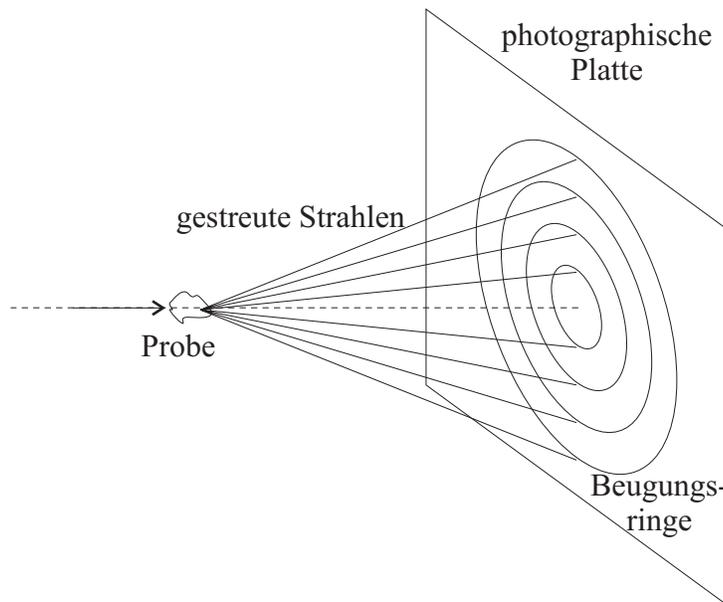


Abbildung 4.5: Schema des Experimentes von G. P. THOMSON

$$n \lambda = 2 d \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad (4.18)$$

ist für einen ganzen Kegel mit $\vartheta = \text{const}$, φ beliebig erfüllt, wobei ϑ der Polariswinkel und φ der Azimutwinkel des gebeugten Strahles relativ zum einlaufenden Strahl ist. Auf einem Nachweisfilm ergeben sich dann Kreise von Intensitätsmaxima, zu jedem ϑ nach obiger Glg. (2.15) ein Kreis, wie in Abb. 4.5 skizziert.

In der Vorlesung wird THOMSONS Experiment in einer Vakuumröhre mit Elektronen der kinetischen Energie zwischen 1 und 5 keV und einer sehr dünnen Graphitfolie vorgeführt. Auf einem Leuchtschirm sieht man deutlich zwei Kreisringe, deren Polariswinkel ϑ mit steigender Elektronenenergie kleiner werden. Bei 4 keV beobachtet man $\vartheta_1 = 5,2^\circ$ und $\vartheta_2 = 9,0^\circ$. Die Wellenlänge bei 4 keV

beträgt

$$\lambda = \frac{hc}{pc} = \frac{1,24 \cdot 10^{-6} \text{ eV m}}{\sqrt{2 \cdot 511 \cdot 4} \text{ keV}} = 1,94 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 19,4 \text{ pm} . \quad (4.19)$$

Mit $n = 1$ folgen aus der BRAGG-Glg. (2.15) zwei Gitterabstände:

$$d_1 = \frac{19,4 \text{ pm}}{2 \sin 2,6^\circ} = 214 \text{ pm} , \quad d_2 = \frac{19,4 \text{ pm}}{2 \sin 4,5^\circ} = 124 \text{ pm} . \quad (4.20)$$

Diese zwei Abstände sind aus der Strukturanalyse von Graphit durch Röntgenstrahlen bekannt (123 pm, 213 pm), womit die DE BROGLIE-Relation $\lambda = h/p$ für Elektronen bewiesen ist.

1930 gelang es STERN und anderen in Experimenten mit Atomstrahlen zu zeigen, dass auch Strahlen von H- und He-Atomen an Kristallgittern Beugungsbilder ergeben und dass für sie ebenfalls $\lambda = h/p$ gilt. h ist die universelle Konstante zwischen Wellenlänge und Teilchenimpuls, unabhängig von der Teilchenmasse.

4.6 Das Doppelspaltexperiment

Die Beugung einer Elektronenwelle an einer makroskopischen Beugungsstruktur gelang überzeugend 1960 in Tübingen, wo die Beugungsbilder von 40-keV-Elektronen an Einzel-, Doppel- und Mehrfachspalten der Breite $0,3 \mu\text{m}$ und des Abstandes $2 \mu\text{m}$ im Elektronenmikroskop aufgezeigt wurden. Weil die Beugung einer Welle am Doppelspalt als „Urbild aller Interferenzeffekte“ in unzähligen Gedankenexperimenten erhalten muss, soll hier auf die praktische Durchführung des Doppelspaltexperimentes mit Elektronen kurz eingegangen werden. Die weitaus meiste Arbeit steckt in der Herstellung der materiefreien Spalte in einer $50 \mu\text{m}$ dicken Kupferfolie. Die Folie wird durch Elektrolyse auf eine vorher mittels feinfokussiertem Elektronenstrahl präparierte Silber-Hochpolymer-Unterlage hergestellt. Die Beugungstreifen im Endergebnis sind in Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Wellenoptik in Glg. 1.16 und $\lambda = h/p$.

Um 1995 gelang es ZEILINGER in Wien, mit einem makroskopischen Doppelspalt das Interferenzmuster von C_{60} -Molekülen (Fullerenen), d. h. von Materiewellen mit $m = 720 \text{ u}$ zu beobachten, auch dies in voller Übereinstimmung mit $\lambda = h/p$.

4.7 Wellenfunktionen und die HEISENBERGsche Unschärferelation

DE BROGLIES Ansatz in Glg. (4.4),

$$\psi = \psi(x, t) = A e^{i(px - Et)/\hbar} , \quad (4.21)$$

ist eine Wellenfunktion. Die Bewegung von Teilchen mit m , v , p , E (in x -Richtung) kann nicht durch eine harmonische Welle beschrieben werden, weil

diese mit der Phasengeschwindigkeit $v_\varphi = c^2/v \neq v$ fortschreitet. Eine Überlagerung harmonischer Wellen zu

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(p)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(px-Et)/\hbar} \frac{dp}{\hbar} \quad (4.22)$$

hat jedoch die Gruppengeschwindigkeit $v_g = v$, wie in Abschnitt 4.1 bewiesen. Die Wellenfunktion in Glg. (4.22) hat eine Impulsunschärfe σ_p , die gleich der Standardbreite von $|\hat{g}(p)|^2$ ist und eine Ortsunschärfe σ_x gleich der Standardbreite von $|\psi(x)|^2$ zu fester Zeit t . Die jedem Wellenpaket eigene Unschärferelation

$$\sigma_p \cdot \sigma_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.23)$$

heißt bei Materiewellen die HEISENBERG'sche *Unschärferelation*. Die Erkenntnis, dass die Bewegung von Teilchen nicht durch harmonische Wellen, sondern durch Wellenpakete beschrieben werden muss und dass deshalb Ort und Impuls zwangsläufig nur unsharp definiert sind, geht auf HEISENBERG 1925 zurück. Nach allem heutigen Wissen beschreibt die Wellenfunktion in Glg. (4.22) die Bewegung eines freien Teilchens vollständig. Sie enthält die vollständige Information über die Bewegung eines Teilchens und beschreibt sowohl die Teilchen- wie die Wellenaspekte der Bewegung. Über den Welle-Teilchen-Dualismus gilt genau das gleiche, wie das in Abschnitt 2.22 gesagte über den Dualismus von Licht als Photonen und als Welle.

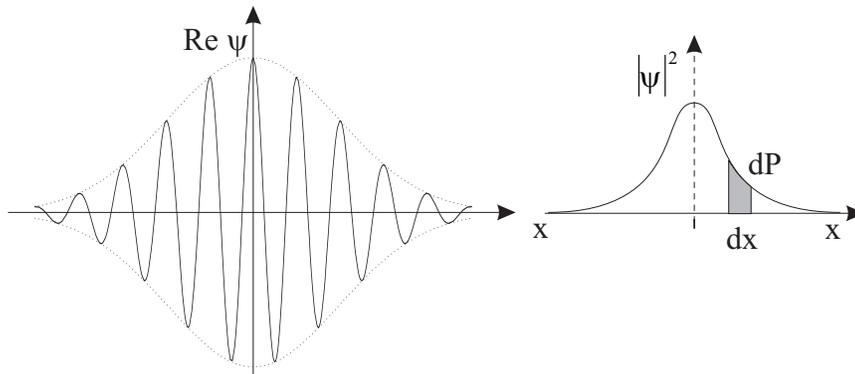


Abbildung 4.6: Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude

Was ist ψ ? Wir wollen die Frage zweiteilig beantworten, was ist der Zahlenwert von ψ und was ist die Natur von ψ ? In Übereinstimmung mit allen Beobachtungen wird $\psi(x, t)$ heute als Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür angesehen, in einem Messprozess das Teilchen zur Zeit t am Ort x anzutreffen.

$$|\psi(x, t)|^2 dx = dP \quad (4.24)$$

Darin ist dP die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Intervall $[x, x + dx]$ anzutreffen. Das Betragsquadrat von ψ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte und damit eine messbare Verteilung. Am GAUSS'schen Wellenpaket in

Abb. 4.6 veranschaulicht: Kenne ich von einem Teilchen zu gegebener Zeit t seine Wellenfunktion $\psi(x)$, so ergibt eine Messung der Ortskoordinate zu dieser Zeit irgendeinen nicht determinierten Messwert x , irgendwo zwischen $-x_0$ und $+x_0$. Messe ich viele Teilchen, die zu ihrer Messzeit alle durch die gleiche Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben sind, ergibt sich eine Verteilung der Messwerte x_1 gemäß $|\psi(x)|^2$ in Abb. 4.6. In diesem Sinne ist $|\psi(x)|^2$ eine messbare Funktion. Ein einziges Teilchen irgendwo zwischen $-x_0$ und $+x_0$ zu lokalisieren, hat die Wahrscheinlichkeit 1. Deshalb muss $\hat{g}(p)$ in Glg. (4.22) auf Seite 95 so gewählt werden, dass die *Normierungsbedingung* gilt:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1} \quad (4.25)$$

Im Gegensatz zum Betrag ist die Phase von ψ nicht messbar. Warum dann überhaupt Wellen? Dies liegt an der Fähigkeit zweier (oder mehrerer) Wellenfunktionen, überlagert zu werden. Im Doppelspaltexperiment wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Ankunftsorte der Elektronen auf dem Beobachtungsschirm beschrieben durch

$$\psi = \psi_1 + \psi_2, \quad (4.26)$$

wobei ψ_1 der Bewegung des Elektrons durch Spalt 1 und ψ_2 durch Spalt 2 entspricht. Wie beim Licht in Abschnitt 2.21 diskutiert, muss bei kohärenter Überlagerung beider Bewegungen erst die Amplitude addiert und dann quadriert werden. Mit $\psi_1 = |\psi_1|e^{i\varphi_1}$ und $\psi_2 = |\psi_2|e^{i\varphi_2}$ wird

$$\begin{aligned} |\psi_1 + \psi_2|^2 &= (\psi_1 + \psi_2)(\psi_1^* + \psi_2^*) \\ &= \psi_1\psi_1^* + \psi_2\psi_2^* + \psi_1\psi_2^* + \psi_1^*\psi_2 \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\operatorname{Re}(\psi_1\psi_2^*) \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1| \cdot |\psi_2| \cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Phasen sind nicht messbar. Aber Phasendifferenzen zwischen zwei überlagerten Wellen sind messbar – und sind verantwortlich für alle Interferenzeffekte. Die Tatsache, dass nur Phasendifferenzen und nicht absolute Phasen von Wellenfunktionen messbar sind, erklärt auch, warum man beim ersten Ansatz von DE BROGLIE-Wellen statt der relativistischen Gesamtenergie auch die kinetische Energie verwenden kann. Mit Ruhemasse m und Geschwindigkeit v_1 gilt:

$$\begin{aligned} p_1 &= \gamma_1 m v_1, \quad E_1 = \gamma_1 m c^2 = m c^2 + E_{\text{kin}1} \\ \psi_1 &= e^{i(p_1 x - E_1 t)/\hbar} = e^{i(p_1 x - E_{\text{kin}1} t)/\hbar} \cdot e^{-i m c^2 t/\hbar} \\ \tilde{\psi}_1 &= e^{i(p_1 x - E_{\text{kin}1} t)/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Zwei DE BROGLIE-Wellen mit benachbarten v_1 und v_2 haben eine Phasendifferenz von $\hbar(\varphi_1 - \varphi_2) = (p_1 x - p_2 x) - (E_1 t - E_2 t)$. Die entsprechenden Funktionen $\tilde{\psi}_1$ und $\tilde{\psi}_2$ haben die exakt gleiche Phasendifferenz, denn $E_{\text{kin}1} - E_{\text{kin}2} = E_1 - E_2$. In der nichtrelativistischen Grenze haben die $\tilde{\psi}$ eine Phasengeschwindigkeit

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{E_{\text{kin}}}{p} = \frac{m v^2/2}{m v} = \frac{1}{2} v \neq \frac{c^2}{v} \quad (4.29)$$

und eine Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE_{\text{kin}}}{dp} = \frac{d(mv^2/2)}{d(mv)} = v . \quad (4.30)$$

Aber Phasengeschwindigkeiten sind nicht beobachtbar, nur Gruppengeschwindigkeiten als Differenz von Phasengeschwindigkeiten. Deshalb sind die $\tilde{\psi}$ so gut wie die ψ .

Soviel zum Zahlenwert von ψ . ψ beschreibt Wahrscheinlichkeiten. Was ist die „Natur“ von ψ ? Alle Erklärungsversuche, ψ als Trägerwelle von Teilchen anzusehen, führen zu nichts. ψ ist von seiner Natur her das Teilchen selbst, und $\psi(\text{Elektron})$ ist ein anderes als $\psi(\text{Proton})$ oder $\psi(\text{Lichtquant})$ oder $\psi(\text{Auto})$. In diesem Sinne *ist* $\psi(\text{Lichtquant})$ die elektrische und magnetische Feldstärke. (\vec{E}, \vec{B}) besteht aus Photonen. Und das ψ eines beliebigen Materieteilchens ist ein Feld wie \vec{E} und \vec{B} mit Welleneigenschaften und mit Teilcheneigenschaften. Die Physik kennt mehrere verschiedene Typen von Feldern: Die Gravitation, das (\vec{E}, \vec{B}) -Feld, das Elektronfeld, das Protonfeld . . .

Die Tatsache, dass das Feld von Materieteilchen genau solche Welleneigenschaften hat wie das Photonenfeld ($\equiv \vec{E}, \vec{B}$), heißt dass Ort und Impuls eines Materieteilchens nie beide beliebig scharf definiert sind. Die Aussage, ein Teilchen befindet sich zur Zeit t_0 am Ort x_0 , heißt immer $x_0 \pm \sigma_x$. Und ebenso heißt Messung von p immer $p \pm \sigma_p$ mit $\sigma_p \cdot \sigma_x \geq \hbar/2$. Die Intervalle $\pm\sigma$ sind nicht nur Messfehler, sondern prinzipielle Unbestimmtheiten. Wegen des kleinen Zahlenwertes von \hbar spielt die HEISENBERG'sche Unschärferelation in der makroskopischen Physik keine Rolle. Hier sind die Messfehler immer größer als die naturgegebenen Unschärfen.

4.8 Das Auseinanderlaufen von Wellenpaketen

Ein Wellenpaket, das zur Zeit $t = 0$ aussieht wie z. B. in Abb. 4.6, wandert mit zunehmender Zeit nicht nur mit v_g nach rechts, sondern ändert dabei auch sein Aussehen. Zur Herleitung müssen wir die Funktion $\omega = \omega(k)$ nicht nur bis zur ersten Ordnung wie bei der Herleitung der Gruppengeschwindigkeit in Abschnitt 3.12 sondern bis zur zweiten Ordnung in eine Taylorreihe entwickeln. Das Wellenpaket sei GAUSS-förmig und stelle eine Materiewelle dar:

$$\hat{g}(k) = e^{-(k-k_0)^2/4\sigma_k^2}, \quad \psi(x, 0) = N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k-k_0)^2/4\sigma_k^2} e^{ikx} dk . \quad (4.31)$$

Dabei ist N so, daß

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1, \quad \text{und} \quad (4.32)$$

$$\psi(x, t) = N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k-k_0)^2/4\sigma_k^2} e^{i(kx-\omega t)} dk \quad \text{mit } \omega = \omega(k) . \quad (4.33)$$

In nichtrelativistischer Näherung ist mit abgespaltener Ruhemasse:

$$\begin{aligned}\omega &= \omega(k) = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}, \\ \frac{d\omega}{dk} &= \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v, \\ \frac{d^2\omega}{dk^2} &= \frac{d}{dk} \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{d(p/\hbar)} v = \hbar \frac{dv}{d(mv)} = \frac{\hbar}{m}.\end{aligned}\quad (4.34)$$

Relativistisch wäre $d\omega/dk = v$ und $d^2\omega/dk^2 = \hbar/\gamma^3 m$. Wegen $d^3\omega/dk^3 = 0$ besteht die Taylorreihe nur aus drei Termen:

$$\omega(k) = \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + v(k - k_0) + \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m} (k - k_0)^2, \quad (4.35)$$

und damit wird

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= N e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k-k_0)^2/(4\sigma_k^2)} e^{i(k-k_0)x - i(\omega - \omega_0)t} dk \\ &= N e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k-k_0)^2/(4\sigma_k^2)} e^{i(k-k_0)x - i v(k-k_0)t - i \frac{\hbar}{2m} (k-k_0)^2 t} dk \\ &= N e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k-k_0)^2 [1/4\sigma_k^2 + i \hbar t/2m]} e^{i(x-vt)(k-k_0)} d(k-k_0) \\ &= N e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \sqrt{2\pi\sigma^2} e^{-(x-vt)^2 \sigma^2/2},\end{aligned}\quad (4.36)$$

wobei σ gegeben ist durch

$$\frac{1}{2\sigma^2} = \frac{1}{4\sigma_k^2} + i \frac{\hbar t}{2m} \quad \Rightarrow \quad \sigma^2 = \frac{1}{1/(2\sigma_k^2) + i \hbar t/m}. \quad (4.37)$$

Zu fester Zeit t wird

$$\begin{aligned}|\psi(x)|^2 &= \psi\psi^* = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{\frac{1}{\sigma_k^2} + \frac{2i\hbar t}{m}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{\frac{1}{\sigma_k^2} - \frac{2i\hbar t}{m}}\right) \\ &= \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{(x-vt)^2 \frac{\frac{1}{\sigma_k^2} + \frac{1}{\sigma_k^2}}{\frac{1}{\sigma_k^4} + \frac{4t^2\hbar^2}{m^2}}}{\frac{1}{\sigma_k^4} + \frac{4t^2\hbar^2}{m^2}}\right) \\ &= \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{\frac{1}{2\sigma_k^2} + \frac{2t^2\hbar^2\sigma_k^2}{m^2}}\right),\end{aligned}\quad (4.38)$$

$$|\psi(x)|^2 = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{2\sigma_x^2}\right) \quad \text{mit} \quad \sigma_x = \sqrt{\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{t^2\hbar^2\sigma_k^2}{m^2}}. \quad (4.39)$$

Dies ist das gewünschte Ergebnis. Zur Zeit $t = 0$ ist $\sigma_x = 1/2\sigma_k$ wie vom GAUSSschen Wellenpaket bekannt. Zur Zeit $t > 0$ wird $\sigma_x > 1/2\sigma_k$, die Breite

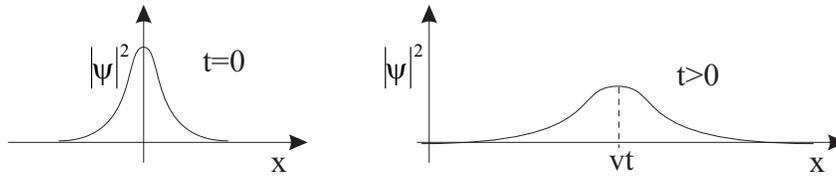


Abbildung 4.7: Zerfließen von Wellenpaketen

nimmt zu, und die Höhe nimmt wegen $\int |\psi|^2 dx = 1$ entsprechend ab. In Abb. 4.7 ist dies graphisch veranschaulicht. Wegen der Breitenzunahme und der damit verbundenen Höhenabnahme von $|\psi|^2$ wird die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen innerhalb eines vorgegeben Intervalls dx vorzufinden, immer kleiner, die Wahrscheinlichkeit dehnt sich über ein immer größeres x -Intervall aus. Die zwei Terme im Ergebnis Glg. (4.39) sind einfach zu verstehen: $1/2\sigma_k$ ist die Ortsunschärfe zur Zeit $t = 0$, und dazu addiert sich wegen $\sigma_k \neq 0$, $\sigma_v \neq 0$ eine zunehmende Unschärfe in $x = vt$: $\sigma(vt) = t\sigma(v) = t \cdot \sigma_p/m = t \cdot \hbar\sigma_k/m$. Ist die Geschwindigkeit v sehr ungenau bekannt, dann ist auch der Ort x nach der Zeit t entsprechend ungenau bekannt. Dabei geht es hier nicht um Messungenauigkeit, sondern um die prinzipielle Unschärfe.

Philosophischer formuliert: Bei der Beschreibung von Teilchenbewegungen durch Materiewellen gibt es keinen strengen Determinismus, und je weiter man in die Zukunft extrapoliert, umso weniger deterministisch ist das Verhalten (hier die Ortskoordinate) des beschriebenen Teilchens. Auch eine zweite erkenntnistheoretische Neuerung der Wellenmechanik läßt sich am Auseinanderfließen eines Materiewellenpaketes demonstrieren. Die Beschreibung ist nicht mehr ob-

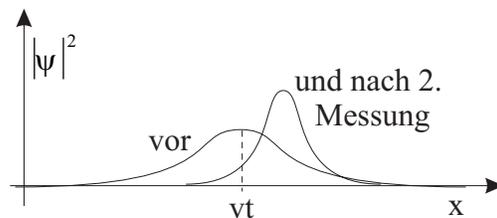


Abbildung 4.8: Beobachter und Wellenfunktion

ektiv, ψ enthält die Kenntnis des Beschreibenden. In Abb. 4.7 wurde zur Zeit $t = 0$ der Ort des Teilchens zu $x = 0 \pm \sigma_x$ bestimmt, damit liegt seine Wellenfunktion fest. Führt man viel später zur Zeit t eine weitere Messung durch, und zwar mit gleicher Genauigkeit, so verändert sich ψ zum Zeitpunkt dieser Messung, aus dem in Abb. 4.7 breitem $|\psi|^2$ wird wieder ein Schmales. Konsequenz: Jeder Messvorgang verändert ψ . Jede Messung heißt Beeinflussung des gemessenen Objektes, s. Abb. 4.8.

4.9 Drei- und vierdimensionale Wellenpakete

Die Wellenfunktion in Glg. (4.22)

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(p)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(p x - E t)/\hbar} \frac{dp}{\hbar} \quad (4.40)$$

beschreibt ein zwar in x irgendwie eingeschränktes aber in y und z unendlich weit ausgedehntes Wellenpaket. Es bewegt sich mit $v = dE/dp$ exakt in x -Richtung. Die Bewegung eines freien Teilchens durch den dreidimensionalen Raum beinhaltet normalerweise zur Zeit $t = 0$ nicht nur die Kenntnis von $x = x_0 \pm \sigma_x$, sondern entsprechend auch $y_0 \pm \sigma_y$ und $z_0 \pm \sigma_z$. Das Wellenpaket ist räumlich in x , y und z eingeschränkt. Daraus folgt aber genau wie durch die FOURIERANALYSE in einer Dimension, dass sein Impulsvektor (p_x, p_y, p_z) nicht gleich $(p_{x0} \pm \sigma_x, 0, 0)$ sein kann, sondern auch eine Unschärfe in p_y und in p_z haben muss. Im diskutierten Beispiel muss der Impulsvektor ein Spektrum

$$\left(p \pm \frac{\hbar}{2\sigma_x}, 0 \pm \frac{\hbar}{2\sigma_y}, 0 \pm \frac{\hbar}{2\sigma_z} \right) \quad (4.41)$$

besitzen. Weil p_y/p_x und p_z/p_x die Richtung des Wellenpaketes angeben, folgt daraus: Nur ein in y und z unendlich weit ausgedehntes Wellenpaket kann sich exakt in x -Richtung bewegen. Ist es in y und z eingeschränkt, ist die Richtung nur unsharp definiert. Das Wellenpaket enthält dann ein Richtungsspektrum um die x -Richtung herum. Dieses folgt aus den Spektren von p_y und p_z , und diese wiederum folgen aus der FOURIERANALYSE der y - und z -Verteilung des Wellenpaketes.

Die Mathematik der dreidimensionalen FOURIERANALYSE ist eine einfache Erweiterung der Analyse in einer Dimension. In Abschnitt 3.4 war schon eingeführt worden:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{g}(k) e^{ikx} dk, \quad \hat{g}(k) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (4.42)$$

In drei Dimensionen gilt:

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z) = (2\pi)^{-3/2} \int \hat{g}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3k, \quad (4.43)$$

$$\hat{g}(\vec{k}) = \hat{g}(k_x, k_y, k_z) = (2\pi)^{-3/2} \int \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r, \quad (4.44)$$

wobei die Dreifachintegrale jeweils über das gesamte Volumen im Orts- bzw. Impulsraum laufen. Ohne die Mathematik hier weiter zu vertiefen, folgt daraus die HEISENBERG'sche *Unschärferelation* für die Standardbreiten von $|\psi|^2$ und $|\hat{g}|^2$ in drei Dimensionen:

$$\boxed{\begin{aligned} \sigma(x) \cdot \sigma(p_x) &\geq \hbar/2 \\ \sigma(y) \cdot \sigma(p_y) &\geq \hbar/2 \\ \sigma(z) \cdot \sigma(p_z) &\geq \hbar/2 \end{aligned}} \quad (4.45)$$

Alle drei Relationen gelten unabhängig voneinander, d. h. bei beliebigen Wellenpaketen müssen alle drei eingehalten werden. Die Gleichheitszeichen gelten wieder nur für die GAUSSform. Die Bedeutung von $|\psi(x, y, z)|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte im Dreidimensionalen, d. h.

$$dP = |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz \quad (4.46)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumenelement $[x \pm dx/2, y \pm dy/2, z \pm dz/2]$ anzutreffen.

In der vierten Dimension, der Zeit, gilt das schon bei der Frequenzanalyse von Schwingungen gesagte: Nur eine unendlich lange andauernde Schwingung hat eine feste Frequenz, sonst gilt $\sigma_t \cdot \sigma_\omega \geq 1/2$. Wegen $E = \hbar\omega$ folgt daraus bei Materiewellen (ebenso natürlich beim Photon) die vierte HEISENBERG'sche Unschärferelation:

$$\sigma_t \cdot \sigma_E \geq \hbar/2 \quad (4.47)$$

Ein Wellenpaket, das nur eine endliche Zeit T lebt, z. B. zwischen Erzeugug und Absorption oder Zerfall, hat keine feste Energie E_0 , sondern ein Energiespektrum $E_0 \pm \hbar/T$. In einem Messprozess, der eine Zeitspanne Δt dauert, kann eine Energie nur auf $\pm \hbar/\Delta t$ genau ermittelt werden.

4.10 Beispiele für die HEISENBERG'sche Unschärferelation

4.10.1 Ortsbestimmung eines ruhenden Teilchens

Ruht ein Teilchen in einem vorgegebenen System, so ist $p = 0$ und zwar scharf, d. h. $\sigma_p = 0$.

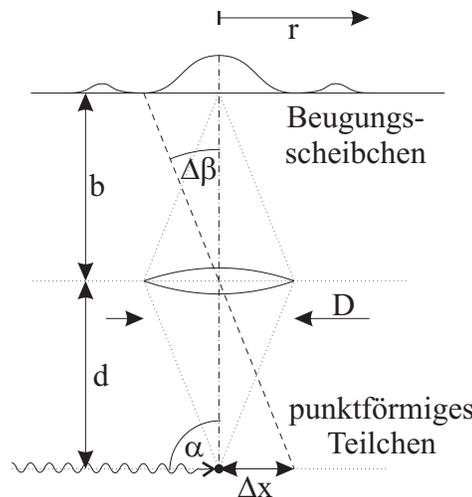


Abbildung 4.9: Abbildung mit dem Mikroskop

Mit einem Mikroskop kann man die x -Koordinate des Teilchens auf $\pm\sigma_x$ genau messen. Das Produkt $\sigma_x \cdot \sigma_p$ ist Null im Widerspruch zur Unschärferelation. Wie löst sich der Widerspruch auf? Dazu muss der Messprozess näher analysiert werden. Das Mikroskop ist in Abb. 4.9 schematisch dargestellt. Der Objektstand ist d , der Linsendurchmesser D . Die Beleuchtung des Teilchens erfolgt durch Photonen von links. Ein einzelnes gestreutes Photon gelangt dann in das Mikroskop, wenn es unter einem Winkel $\alpha = \pi/2 \pm D/2d$ gestreut wird ($D \ll d$). Nach Brechung durch die Linse gelangt es in die Bildebene und trifft dort an irgendeiner Stelle innerhalb des Beugungsscheibchens auf. Die Größe des Beugungsscheibchens ist durch die Auflösung des Mikroskopes gegeben. Ein Punkt wird nicht in einen Punkt, sondern in eine Kreisscheibe abgebildet, für deren Radius gilt:

$$r = 0,61 \frac{b \lambda}{0,5 D} \approx \frac{b \lambda}{D}. \quad (4.48)$$

Aus dieser Auflösung folgt die Genauigkeit, mit der durch Streuung eines einzelnen Photons die Koordinate x bestimmt werden kann:

$$\Delta x = \frac{d}{b} \cdot r = \frac{d\lambda}{D}. \quad (4.49)$$

Der Winkel α , unter dem das Photon in das Mikroskop eingetreten ist, bleibt dabei unbekannt.

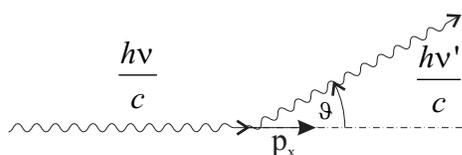


Abbildung 4.10: Photonenstoß beim Messprozess

Dieser Winkel bestimmt aber die Beeinflussung des Teilchens durch den Messprozess, wie in Abb. 4.10 skizziert. Vor dem Streuprozess hat das Teilchen den Impuls $\vec{p} = \vec{0}$, danach den Impuls \vec{p}' . Für die x -Komponente gilt:

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cdot \cos \vartheta + p'_x \quad (4.50)$$

Für ein schweres Teilchen mit $m \gg h\nu/c^2$ ist bei der COMPTON-Streuung $\nu' \approx \nu$, und für p'_x gilt:

$$p'_x = \frac{h\nu}{c} (1 - \cos \vartheta). \quad (4.51)$$

Im Fall des diskutierten Mikroskopes ist $\vartheta = \alpha = \pi/2 \pm D/2d$, und wegen $\cos(\pi/2 \pm \varepsilon) = \pm \sin \varepsilon \approx \pm \varepsilon$ folgt:

$$p'_x \approx \frac{h\nu}{c} (1 \pm \varepsilon), \quad \Delta p'_x \approx \frac{h\nu}{c} \cdot \frac{D}{2d}. \quad (4.52)$$

Das zu messende Teilchen ruht nach dem Messprozess nicht mehr, und die Unschärfe seiner Bewegung in x -Richtung ist wie oben hergeleitet durch ν , D und d bestimmt. Für das Produkt $\Delta x \cdot \Delta p_x$ gilt:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx d \cdot \frac{\lambda}{D} \cdot \frac{h\nu}{c} \cdot \frac{D}{2d} = \frac{h}{2} \quad (4.53)$$

denn $\nu \cdot \lambda = c$. Dieses Resultat nach der Ortsmessung durch ein einziges Photon ist in voller Übereinstimmung mit der Unschärferelation. Misst man mit mehreren Photonen gleicher Wellenlänge, z. B. mit $N/2$ von links und $N/2$ von rechts, damit das Teilchen im Mittel in Ruhe bleibt, verbessert sich die Ortsmessung auf

$$\Delta x = \frac{d \cdot \lambda}{D \cdot \sqrt{N}}, \quad (4.54)$$

denn die Mitte des Beugungsscheibchens wird nach elementarer Fehlerrechnung genauer bestimmt sein, desto häufiger man misst. Gleichzeitig wird der Impulsfehler immer größer, denn $h\nu D/2dc$ muss N mal quadratisch addiert werden. Daraus folgt:

$$\Delta p'_x = \frac{h\nu D}{2dc} \cdot \sqrt{N}, \quad \Delta x \cdot \Delta p'_x \approx \frac{h}{2}. \quad (4.55)$$

Das Produkt der Orts- und Impulsunschärfe hat den gleichen Wert wie bei der Ortsbestimmung mit nur einem Photon.

4.10.2 Beugung am Doppelspalt

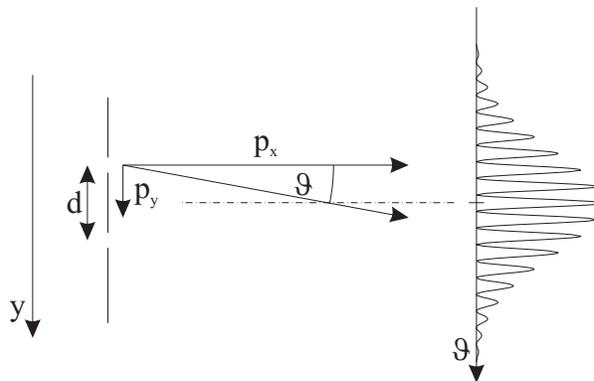


Abbildung 4.11: Unschärferelation am Doppelspalt

Ergibt sich nach einem Doppelspalt ein ausgeprägtes Interferenzmuster wie rechts in Abb. 4.11 gezeigt, so war die auf den Doppelspalt auffallende Welle kohärent, d. h. zwischen den Photonen der Wellenfunktion im Spalt 1 und denen im Spalt 2 bestand eine feste Phasendifferenz. Ist es unter diesen Voraussetzungen erlaubt zu fragen, durch welchen der beiden Spalte ein einzelnes Teilchen, das zum Interferenzmuster beigetragen hat, gelaufen ist? Die Beantwortung der Frage setzt einen Messvorgang der y -Koordinate dieses einen Teilchens voraus. Folgende Anforderungen bestehen an diesen Messvorgang:

1. $\Delta y \ll d$, der Fehler auf y muss sehr klein gegen den Spaltabstand sein, um zu sagen, durch welchen Spalt das Teilchen gegangen ist.
2. $\Delta \vartheta = \Delta p_y / p_x \ll \Delta \vartheta_{max}$, wobei $\Delta \vartheta_{max}$ der Winkelabstand zweier Maxima ist. Sonst wird durch den Messvorgang das Interferenzmuster zerstört. Der Winkelabstand ist λ/d . Also: $\Delta p_y \ll p_x \cdot \lambda/d$.

Das Produkt der zwei Forderungen ergibt:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \ll d \cdot p_x \cdot \frac{\lambda}{d} = p_x \lambda = \frac{h}{\lambda} \cdot \lambda = h . \quad (4.56)$$

$\Delta y \cdot \Delta p_y \ll h$ steht aber im Widerspruch zur HEISENBERG'schen Unschärferelation. Die Forderungen können nicht gleichzeitig erfüllt sein. Entweder ist 1 erfüllt, dann 2 nicht: Der Meßprozess hat ergeben, durch welchen Spalt das Teilchen flog und damit wird das Interferenzmuster zerstört. Die Wellenfunktion ψ ist sowohl Teilchen wie Welle. Das Hervorheben des Teilchenaspektes im Meßprozess (gute Ortsbestimmung) vermindert den Wellenaspekt (kein Interferenzbild). Oder 2 ist erfüllt, dann 1 nicht: der Meßprozess erhält das Interferenzbild (gute Winkelbestimmung) und beantwortet nicht die Frage, durch welchen Spalt das Teilchen flog (schlechte Ortsbestimmung). Hervorheben des Wellenaspektes verringert den Teilchenaspekt.

4.10.3 Beugung am Einzelspalt

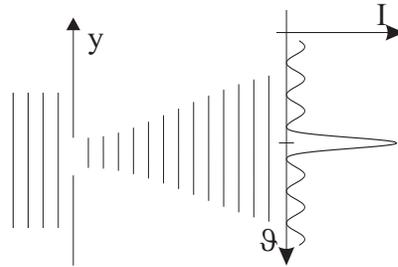


Abbildung 4.12: Unschärfe am Einzelspalt

Ein paralleler Elektronenstrahl oder Lichtstrahl (Welle ist Welle) in x -Richtung fällt auf einen in z -Richtung sehr langen parallelen Spalt der Breite D in y -Richtung. In großem Abstand $x \gg D$ ergibt sich ein Beugungsbild wie in Abb. 4.12. Wie groß ist die Winkelbreite des zentralen Intensitätsmaximums? Diese Breite folgt aus der Unschärferelation, denn für ein einzelnes Quant der Welle gilt:

$$\begin{aligned} \sigma(y) \cdot \sigma(p_y) &\geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \approx h \\ \Delta p_y &\approx \frac{h}{\Delta y} \approx \frac{h}{D}, \quad \Delta \vartheta = \frac{\Delta p_y}{p_x} \approx \frac{h/D}{h/\lambda} = \frac{\lambda}{D} . \end{aligned} \quad (4.57)$$

Das zentrale Maximum, das *Beugungsscheibchen* hat eine Winkelbreite von etwa λ/D . Dies ist aus Kapitel 1.6 bekannt, hier folgt es allein aus der Unschärferelation. Fragen wir genauer nach der Intensitätsverteilung des gebeugten Strahls nach Passieren des Spaltes auf einem Beobachtungsschirm, müssen wir eine Stufe genauer rechnen als mit der Unschärferelation, aber im Prinzip das gleiche tun, nämlich das Spektrum der p_y durch Fourieranalyse der y -Verteilung des

Wellenpaketes nach dem Spalt ausrechnen.

$$\psi(y) = \begin{cases} 0 & \text{für } y < -D/2 \\ A & \text{für } -D/2 \leq y \leq +D/2 \\ 0 & \text{für } D/2 < y \end{cases} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{g}(k_y)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_y y} dk_y ,$$

$$\hat{g}(k_y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(y) e^{-ik_y y} dy = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-D/2}^{+D/2} e^{-ik_y y} dy$$

$$= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-D/2}^{+D/2} \cos(k_y y) dy = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{A}{k_y} \sin\left(k_y \cdot \frac{D}{2}\right) .$$

(4.58)

Das Quadrat $|\hat{g}(k_y)|^2$ bestimmt die Wahrscheinlichkeitsverteilung, also die Intensität, der Winkel nach dem Spalt, denn

$$\vartheta = \frac{p_y}{p_x} = \frac{\hbar k_y}{\hbar k_x} = \frac{k_y \lambda}{2\pi} , \quad k_y = \frac{2\pi \vartheta}{\lambda}$$

$$\Rightarrow I(\vartheta) \propto |\hat{g}|^2 \propto \frac{\sin^2(\pi D \vartheta / \lambda)}{(\pi D \vartheta / \lambda)^2} .$$

(4.59)

Dies ist, mit anderen Mitteln gefunden, das gleiche Resultat wie in Kapitel 1.6 der Wellenoptik.

4.11 Beugungstheorie mit Fourierintegralen

Einfache Beugungsstrukturen wie Rechteckspalte, Mehrfachspalte, Kreisblenden ... sind zweidimensional. D. h. in einer Ebene gibt es Bereiche B , die eine einlaufende Welle passieren lassen, und solche A , wo die einlaufende Welle absorbiert wird. Auch Bereiche mit teilweiser Absorption sind möglich, was hier aber nicht diskutiert werden soll. In Abb. 4.13 läuft eine ebene Welle in x -Richtung

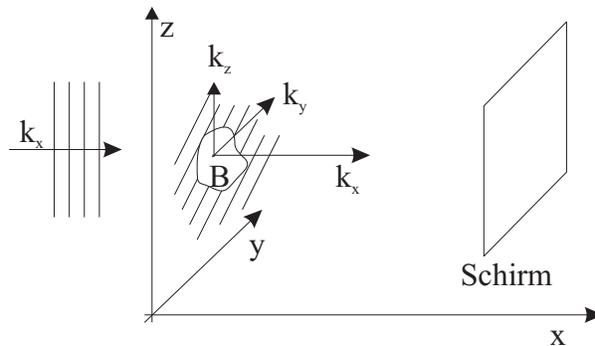


Abbildung 4.13: Beugungsstruktur

auf eine Blende B zu. In y - und z -Richtung ist sie „unendlich weit ausgedehnt“, d. h. ihre Ausdehnung ist groß gegen B . Das sichert die Kohärenz über ganz B hinweg. Außerdem ist sie fast monochromatisch, d. h. ihr k_x -Spektrum ist

schmal. Nur ein Teil der Welle passiert die Ebene $x = 0$, in der sich die beliebig geformte Blende B befindet. Nach der Blendenebene gilt:

$$\psi(y, z) = \begin{cases} a & \text{innerhalb } B, \\ 0 & \text{außerhalb } B. \end{cases} \quad (4.60)$$

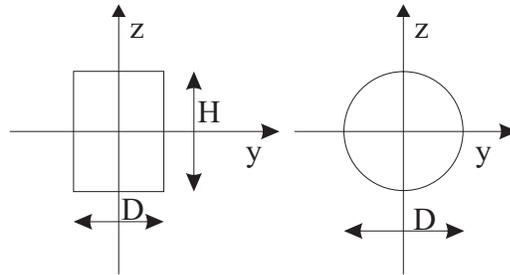
Die zweidimensionale FOURIERanalyse dieses so eingengten Wellenpaketes ergibt das Spektrum der k_y und der k_z nach Passieren der Blende und damit die Intensitätsverteilung der gebeugten Welle als Funktion der Winkel $\vartheta_y = k_y/k_x$ und $\vartheta_z = k_z/k_x$ in großer Entfernung x hinter der Blende. Groß heißt groß gegen die Ausdehnungen von B .

$$\begin{aligned} (\sqrt{2\pi})^2 \cdot \hat{g}(k_y, k_z) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy dz \psi(y, z) e^{-i(k_y y + k_z z)} \\ &= \int_B a \cdot e^{-i(k_y y + k_z z)} dy dz. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Der Faktor $\sqrt{2\pi}$ erscheint im Quadrat, weil hier zweidimensional integriert wird. Die Intensität ist

$$I(\vartheta_y, \vartheta_z) = \text{const} \cdot |\hat{g}(k_y, k_z)|^2. \quad (4.62)$$

Dieser Formalismus zur Berechnung von Beugungsverteilungen mit Hilfe der zweidimensionalen FOURIERanalyse geht auf KIRCHHOFF und FRAUNHOFER im vergangenen Jahrhundert zurück. Als Beispiele die Rechteckblende in Abb. 4.14(a) und die Kreisscheibe in Abb. 4.14(b). Im Fall des Rechteckes ist



(a) Rechteckblende

(b) Kreisblende

Abbildung 4.14: Blendenformen

die zweidimensionale FOURIERanalyse elementar durchzuführen:

$$\begin{aligned} \hat{g}(k_y, k_z) &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{D}{2}}^{+\frac{D}{2}} dy \int_{-\frac{H}{2}}^{+\frac{H}{2}} dz e^{-ik_y y} e^{-ik_z z} \\ &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{D}{2}}^{+\frac{D}{2}} e^{-ik_y y} dy \int_{-\frac{H}{2}}^{+\frac{H}{2}} e^{-ik_z z} dz \\ &= \frac{a}{2\pi} \cdot \frac{\sin(k_y D/2)}{k_y} \cdot \frac{\sin(k_z H/2)}{k_z}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Und für die Intensitätsverteilung folgt:

$$I = I(\vartheta_y, \vartheta_z) = \text{const} \cdot \frac{\sin^2(\pi D \vartheta_y / \lambda)}{(\pi D \vartheta_y / \lambda)^2} \cdot \frac{\sin^2(\pi H \vartheta_z / \lambda)}{(\pi H \vartheta_z / \lambda)^2}. \quad (4.64)$$

Für die Kreisblende ist die zweidimensionale FOURIERanalyse nicht elementar durchführbar. In Polarkoordinaten ϑ und φ ausgedrückt, hängt die Intensität nur von ϑ und nicht von φ ab, das Beugungsbild ist kreissymmetrisch wie aus Symmetrieüberlegungen nicht anders zu erwarten. Als Funktion von ϑ ergibt sich eine Intensitätsverteilung, die durch eine spezielle Funktion der mathematischen Physik ausgedrückt werden kann, die sogenannte BESSELfunktion J_1 . In einem Taschenbuch wie BRONSTEIN-SEMENDJAJEW ist $J_1(x)$ ebenso tabelliert wie $\sin x$ oder e^x . Die Intensitätsverteilung nach der Kreisblende heißt:

$$I = I(\vartheta) = \text{const} \cdot \left[\frac{J_1(\pi D \vartheta / \lambda)}{\pi D \vartheta / \lambda} \right]^2 \quad (4.65)$$

und ist in Abb. 4.15 dargestellt. Das Maximum liegt bei $\vartheta = 0^\circ$, das erste

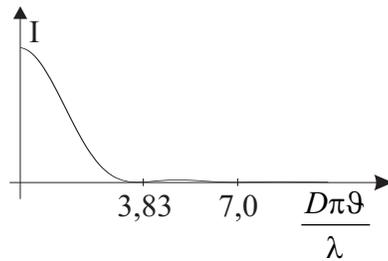


Abbildung 4.15: Intensitätsverteilung nach der Kreisblende

Minimum bei $\pi D \vartheta / \lambda = 3,83$, d. h. $\vartheta = 1,22 \cdot \lambda / D$:

$$\vartheta_{min} = 1,22 \cdot \frac{\lambda}{D}. \quad (4.66)$$

4.12 Die Größe der Atome

Das Wasserstoffatom ist ein gebundener Zustand zwischen einem Elektron mit der Ladung $Q = -e_0$ und einem Proton mit $Q = +e_0$. Die COULOMBSche Anziehungskraft bewirkt die Bindung. Das Elektron ist nach heutigem Wissen punktförmig, sein Radius ist kleiner als 10^{-18} m. Der Radius des Protons beträgt etwa 10^{-15} m, nach heutigem Wissen ist das Proton deshalb nicht punktförmig weil es aus drei „elementareren“ Teilchen, zwei u-Quarks und einem d-Quark zusammengesetzt ist. Für die folgende Diskussion nehmen wir Elektron e und Proton p als zwei Punkte an, deren Radien kleiner gleich 10^{-15} m sind. Die Größe des gebundenen Systems $H = (pe)$ folgt aus der Unschärferelation.

Das System pe kann verschiedene Energien enthalten. Die Zustände höherer Energie können durch Aussenden von Photonen in den Zustand kleinster Energie

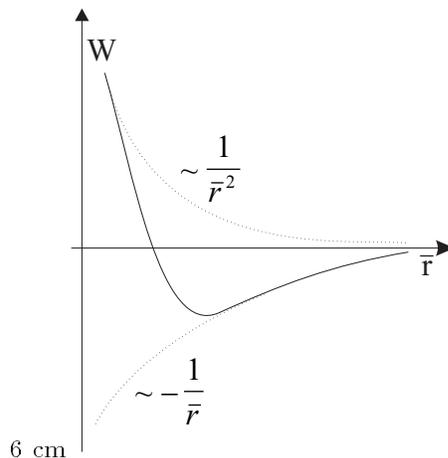


Abbildung 4.16: Energie eines Atoms

übergehen. Dieser heißt Grundzustand, und dessen räumliche Ausdehnung soll hier abgeschätzt werden. Solange keine äußeren Kräfte auf ein ruhendes Atom im Grundzustand einwirken, lebt es unendlich lange und

$$E = \text{const} \quad (4.67)$$

gilt unendlich genau, d. h. $\sigma_E = 0$. Außerdem bleibt der Schwerpunkt in Ruhe, $\vec{p}_e = -\vec{p}_p$. In nichtrelativistischer Näherung $pc \ll mc^2$ für Elektron und Proton gilt:

$$E = m_e c^2 + m_p c^2 + \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_p^2}{2m_p} + \frac{-e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \text{const} . \quad (4.68)$$

Dabei ist r der Abstand zwischen beiden „Punkten“ e und p. Wegen $p_e = p_p = p$ und $m_p \gg m_e$ ist $p^2/2m_p$ vernachlässigbar und

$$W = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{-e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \text{const} . \quad (4.69)$$

Dieses so definierte W ist negativ, die potentielle Energie $-e_0^2/4\pi\epsilon_0 r$ ist dem Betrage nach größer als die kinetische Energie $p^2/2m_e$. Aufgrund der Unschärferelation sind r und p nicht scharf definiert, das Elektron befindet sich in unregelmäßiger und undeterminierter Bewegung um das Proton herum. Bei aller Bewegung bleibt aber W konstant. Zu einem gegebenen W gibt es einen maximalen Impuls (für $r = \infty$) und einen minimalen Abstand (für $p = 0$). Ohne im einzelnen zu wissen, wie häufig jedes p und jedes r in der Bewegung vorkommt, können wir grob abschätzen, dass

$$p = \bar{p} \pm \bar{\sigma} \quad \text{mit} \quad \sigma_p \approx \bar{p} , \quad (4.70)$$

$$r = \bar{r} \pm \bar{\sigma}/2 \quad \text{mit} \quad \sigma_r \approx \bar{r}/2 . \quad (4.71)$$

$$\sigma_p \cdot \sigma_r \approx \bar{p} \cdot \frac{\bar{r}}{2} \approx \frac{\hbar}{2} , \quad (4.72)$$

$$\bar{p} \approx \frac{\hbar}{\bar{r}}, \quad (4.73)$$

$$W = \frac{\hbar^2}{2m_e \bar{r}^2} - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{r}}. \quad (4.74)$$

Zu jedem W gehört ein mittlerer Abstand \bar{r} zwischen Elektron und Proton. Abb. 4.16 zeigt diese Funktion $W = W(\bar{r})$. Bei kleinen \bar{r} dominiert $+\hbar^2/2m_e\bar{r}^2$, bei großen \bar{r} der negative Term, deshalb besitzt $W(\bar{r})$ ein Minimum. Größere Atome sind energiereicher, kleinere ebenfalls. Das Minimum wird eingenommen für $dW/d\bar{r} = 0 = -2\hbar^2/2m_e\bar{r}^3 + e_0^2/4\pi\epsilon_0\bar{r}^2$. Daraus folgt:

$$\bar{r}(W_{min}) = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e_0^2 m_e} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}. \quad (4.75)$$

Dieser Zahlenwert heißt BOHRscher *Radius* des Wasserstoffatoms. In der strengen quantenmechanischen Behandlung des Wasserstoffatoms hat er eine große Bedeutung. Hier besagt er nur: Das H-Atom hat eine Größe von etwa 10^{-10} m, und diese Größe folgt ausschließlich aus der Unschärferelation und aus den Zahlenwerten für \hbar , m_e , e_0 und ϵ_0 . Nils BOHR hatte dies bereits 1913 gefunden. Er argumentierte, dass der Bahndrehimpuls des Elektrons um das Proton gequantelt ist und im Grundzustand des Atoms den kleinstmöglichen Wert $L = p \cdot r = 1 \cdot \hbar$ annimmt. Dieses Argument ist gut, aber nicht richtig. Die weitere Quantenmechanik wird uns zeigen, dass im Grundzustand des Wasserstoffatoms $L = 0$ ist.

Kapitel 5

Die SCHRÖDINGER-Gleichung

5.1 Wellengleichungen für DE BROGLIE-Wellen

Die nach rechts laufende ebene harmonische Welle

$$\psi = \psi(x, t) = a e^{i(px - Et)/\hbar} , \quad (5.1)$$

erfüllt die Wellengleichungen Glg. (3.64) und Glg. (3.66) auf Seite 75 :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -v_\varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} , \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = v_\varphi^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} , \quad (5.2)$$

mit $v_\varphi = E/p$, wie bereits im Abschnitt 3.7 für beliebige harmonische Wellen gezeigt wurde, als wir das erste Mal über Wellengleichungen gesprochen haben. Glg. (3.66) mit den zweiten Ableitungen gilt sowohl für nach links als auch für nach rechts laufende harmonische und auch für stehende harmonische Wellen. Das im Kapitel über Materiewellen erwähnte Superpositionsprinzip: „Ist ψ_1 eine Lösung der Wellengleichung und ψ_2 auch, dann ist auch $\psi_1 + \psi_2$ eine Lösung“ gilt nur, wenn ψ_1 und ψ_2 beide die gleiche Phasengeschwindigkeit v_φ haben. Anderenfalls löst ψ_1 die Gleichung $\ddot{\psi} = v_1^2 \cdot \partial^2 \psi / \partial x^2$, ψ_2 löst $\ddot{\psi} = v_2^2 \cdot \partial^2 \psi / \partial x^2$, und die Summe löst keine derart einfache Differentialgleichung. Daraus folgt, daß ein DE BROGLIE-Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \int a(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp \quad (5.3)$$

die Glg. (3.66) nicht löst, denn zu jedem Impuls p gehört eine andere Geschwindigkeit $v_\varphi = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} / p$. Wie heißt statt Glg. (3.66) die einfachste Differentialgleichung für DE BROGLIE-Wellenpakete? Wir beantworten die Frage gleich in drei Raumdimensionen,

$$\psi = \psi(\vec{r}, t) = \int a(\vec{p}) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d^3 p , \quad (5.4)$$

mit $\vec{p} \cdot \vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$. Für die zweiten Ableitungen gilt

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \iiint a(\vec{p}) \left[\frac{i^2 p_x^2}{\hbar^2} \right] e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d^3 p , \quad (5.5)$$

entsprechend für die anderen räumlichen Ableitungen.

$$\begin{aligned}\Delta\psi &= \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \\ &= \iiint a(\vec{p}) \left[-\frac{p^2}{\hbar^2} \right] e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d^3p, \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} &= \iiint a(\vec{p}) \left[-\frac{E^2}{\hbar^2} \right] e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d^3p.\end{aligned}\quad (5.6)$$

Das Wellenpaket aus Glg. (5.4) beschreibt die Bewegung eines Teilchens mit fester Masse m , Impuls $\vec{p} \pm \sigma(\vec{p})$ und Energie $E \pm \sigma(E)$, wobei wie gehabt $\sigma(\vec{p})$ die drei Standardbreiten von $|a(\vec{p})|^2$ sind. E und \vec{p} haben bei fester Masse (Ruhemasse) m die feste Relation

$$E^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4. \quad (5.7)$$

Daraus folgt eine Wellengleichung

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - c^2\Delta\psi = -\frac{m^2 c^4}{\hbar^2}\psi} \quad (5.8)$$

für beliebige DE BROGLIE-Wellenpakete in Glg. (5.4) mit beliebigen Impulsverteilungen $a(\vec{p})$. Der Beweis:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - c^2\Delta\psi &= \iiint a(\vec{p}) \left[-\frac{E^2}{\hbar^2} + \frac{p^2 c^2}{\hbar^2} \right] e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d^3p \\ &= \iiint a(\vec{p}) \left[-\frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \right] e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)/\hbar} d^3p = -\frac{m^2 c^4}{\hbar^2}\psi,\end{aligned}$$

Die Wellengleichung 5.8 heißt *KLEIN-GORDON-Gleichung* für freie Teilchen. Sie beschreibt die kräftefreie Bewegung eines Teilchens im dreidimensionalen Raum relativistisch exakt. Die Lösungen sind die Wellenpakete aus Glg. (5.4) in beliebiger Raumrichtung mit beliebigen Impulsspektren.

5.2 Nichtrelativistische Näherung

Für langsame Bewegung von Teilchen mit $v \ll c$, $pc \ll mc^2$ ist

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m}. \quad (5.9)$$

In analoger Weise, wie wir in Glg. (5.8) aus Glg. (5.7) gewonnen haben, suchen wir jetzt nach einer Wellengleichung, die der obigen nichtrelativistischen Relation zwischen E und p entspricht. Die Phasen von DE BROGLIE-Wellen sind unbeobachtbar, das Paket

$$\tilde{\psi} = \tilde{\psi}(\vec{r}, t) = \iiint a(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - E_{\text{kin}}t)/\hbar} d^3p \quad (5.10)$$

beschreibt die Bewegung des Teilchens der Masse m ebensogut wie das in Glg. (5.4), das wurde in Abschnitt 4.7 gezeigt. Mit $E_{\text{kin}} \approx p^2/2m$ beschreibt das Paket in Glg. (5.10) die Bewegung in nichtrelativistischer Näherung:

$$\tilde{\psi}(\vec{r}, t) = \iiint a(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - p^2 t/2m)/\hbar} d^3p. \quad (5.11)$$

Für diese Pakete gilt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} &= \iiint a(\vec{p}) \left[-\frac{ip^2}{2m\hbar} \right] e^{i(\vec{p}\vec{r}-p^2t/2m)/\hbar} d^3p, \\ \Delta \tilde{\psi} &= \iiint a(\vec{p}) \left[-\frac{p^2}{\hbar^2} \right] e^{i(\vec{p}\vec{r}-p^2t/2m)/\hbar} d^3p,\end{aligned}\tag{5.12}$$

und damit gilt

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \tilde{\psi}}\tag{5.13}$$

Diese Wellengleichung heißt *Schrödingergleichung* für ein freies Teilchen der Masse m . Die Bewegung freier Teilchen im dreidimensionalen Raum wird in nichtrelativistischer Näherung durch sie beschrieben. Aber alles Wesentliche darüber wurde bereits im Abschnitt über Materiewellen gesagt. Die große Leistung SCHRÖDINGERS 1926 war es, Glg. (5.13) so zu erweitern, daß sie auch den Einfluß von Kräften auf bewegte Teilchen richtig erfaßt.

5.3 Teilchenbewegung mit Kräften

Teilchen, auf die eine äußere Kraft einwirkt, sind nicht frei, ihre klassische Bahn ist keine gleichförmig durchlaufene Gerade mehr, ihre Wellenfunktion ist kein DE BROGLIE-Paket mehr wie in den Gleichungen (5.10) und (5.11) und ihre Wellengleichung sind nicht mehr so einfach wie Glg. (5.13). Kräftefreie Bewegung heißt in der klassischen nichtrelativistischen Mechanik:

$$d\vec{p}/dt = 0, \tag{KI}$$

$$\vec{p} = m\vec{v} = \text{const}, \tag{KII}$$

$$\vec{r} = \vec{r}(0) + \vec{v}t. \tag{KIII}$$

Die gleiche Bewegung heißt in der Wellenmechanik:

$$i\hbar d\psi/dt = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi, \tag{WI}$$

$$a(\vec{p}) = \text{const}, \tag{WII}$$

$$\psi = \iiint a(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r}-p^2t/2m)/\hbar} d^3p. \tag{WIII}$$

Soweit haben wir die Wellenmechanik bis jetzt behandelt, die zuletzt aufgestellte Schrödingergleichung (5.13) heißt klassisch nur $d\vec{p}/dt = 0$. Was wir als nächstes brauchen und suchen, ist das wellenmechanische Analogon zu NEWTONS Axiom $d\vec{p}/dt = \vec{F}$. Diese Differentialgleichung für ψ wurde wie bereits erwähnt 1926 von Erwin SCHRÖDINGER gefunden. Hier und im folgenden bezeichnen wir mit ψ ein Wellenpaket der nichtrelativistischen Form aus Glg. (5.11) und schreiben ψ statt $\tilde{\psi}$.

Die Kräfte, deren Einfluß auf die Teilchen-/Wellenbewegung wir beschreiben wollen, sollen konservativ sein:

$$\vec{F} = -\nabla V \quad , \quad V = V(\vec{r}, t). \quad (5.14)$$

V heißt Potential, es darf auch von der Zeit abhängen. Die Einführung des Potentials in die Wellenmechanik ist ähnlich wie die Einführung des Brechungsindex in die Wellenoptik, auch dort ändert sich die Geschwindigkeit der Wellen. SCHRÖDINGERS Vorgehensweise war wie folgt:

$$W = \text{nichtrelativistische Gesamtenergie} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{p^2}{2m} + V.$$

Die Wellenfunktion $\psi = \psi(x, t)$ hängt wie $e^{-iWt/\hbar}$ von der Zeit ab.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{iW}{\hbar} \psi, \\ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= W\psi. \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\text{In Raumbereichen mit } V = 0 \text{ ist } i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = W\psi = \frac{p^2}{2m} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi.$$

$$\begin{aligned} \text{In Raumbereichen mit } V = V_0 \text{ ist } \frac{p^2}{2m} &= W - V_0 \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi &= i\hbar \frac{d\psi}{dt} - V_0 \psi. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Wenn $V = V(\vec{r}, t)$ im vierdimensionalen Raum variiert, folgt daraus:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r}, t) \psi} \quad (5.17)$$

Dies ist die eigentliche *Schrödingergleichung*, eine lineare Differentialgleichung für die Wellenfunktion ψ der Teilchenbewegung unter dem Einfluß des Potentials V . Diese partielle Differentialgleichung ist von erster Ordnung in der Zeit und von zweiter Ordnung in der Ortskoordinate. Sie wurde in den Jahren nach 1926 mit großem Erfolg auf die Atom-, Molekül-, Kern- und Festkörperphysik angewendet. Sie ist aber keine strenge „Theorie“, sie ist weder relativistisch invariant, noch hat das Potential in Theorien der Wechselwirkung zwischen elementaren Teilchen eine strenge Definition. Die SCHRÖDINGER-Gleichung hat ihren ganz speziellen Anwendungsbereich. Was wir heute Wellenmechanik und Quantenmechanik nennen, ist viel allgemeiner und strenger fundiert. Die Haupteinschränkungen für den Gültigkeitsbereich der SCHRÖDINGER-Gleichung sind:

1. Die zu beschreibende Bewegung ist nichtrelativistisch.
2. Teilchen werden weder erzeugt noch vernichtet.
3. Kräfte werden durch ein Potential pauschal erfaßt.

Glg. (5.17) heißt zeitabhängige Schrödingergleichung. Sie gilt innerhalb ihres eingeschränkten Bereiches für Wellenfunktionen jeder beliebigen Gesamtenergie W , da W nicht in der Gleichung vorkommt. Sie gilt deshalb auch für Bewegungen mit unscharfer Energie $W \pm \sigma(W)$, was ja streng genommen immer der Fall ist, wenn die Bewegung nicht unendlich lange andauert.

5.4 Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Nimmt man konstante Gesamtenergie als Näherung, d. h. $\sigma(W) = 0$, und ist das Potential $V(\vec{r})$ zeitunabhängig, d. h. $\partial V/\partial t = 0$, dann lassen sich in der partiellen Differentialgleichung (5.17) die Variablen separieren. „Separation der Variablen“ ist eine Standardtechnik zur Lösung partieller Differentialgleichungen. Man beginnt mit dem Ansatz:

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \tau(t) \quad (5.18)$$

und setzt dies in Glg. (5.17) ein:

$$i\hbar\phi \cdot \frac{d\tau}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi \cdot \tau + V \cdot \phi \cdot \tau \quad (5.19)$$

Division durch $\phi \cdot \tau$ ergibt

$$i\hbar \frac{d\tau/dt}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\phi}{\phi} + V. \quad (5.20)$$

Die linke Seite der Gleichung hängt nicht vom Ort \vec{r} ab und die rechte wegen $\partial V/\partial t = 0$ nicht von t. Beide Seiten hängen weder von t noch von \vec{r} ab und sind konstant.

$$i\hbar \frac{d\tau/dt}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\phi}{\phi} + V = C. \quad (5.21)$$

In der Mathematik partieller Differentialgleichungen heißt C die Separationskonstante. Hier können wir sie, wie schon in der heuristischen Herleitung der Schrödingergleichung(5.17), mit der nichtrelativistischen Gesamtenergie W gleichsetzen. Dann gilt:

$$\tau(t) = e^{-iWt/\hbar},$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) = [W - V(\vec{r})]\phi(\vec{r})} \quad (5.22)$$

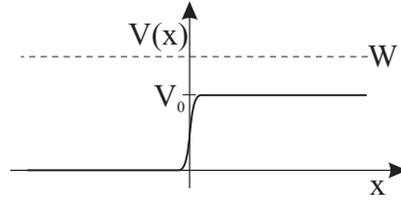
denn nur $e^{-iWt/\hbar}$ löst die gewöhnliche Differentialgleichung $i\hbar d\tau/dt = W\tau$. Glg. (5.22) heißt *zeitunabhängige Schrödingergleichung*. Im Falle eindimensionaler Bewegung (z.B. entlang der x -Achse) wird daraus eine gewöhnliche Differentialgleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = [W - V(x)]\phi(x). \quad (5.23)$$

Diese werden wir jetzt auf ein paar Beispiele anwenden.

5.5 Die Potentialstufe mit $W > V_0$

Beschrieben werden soll die eindimensionale Bewegung von Teilchen, die wie in Abb. 5.1 skizziert von links einfallend in $x = 0$ eine bremsende Kraft erfahren. Für $x < 0$ ist $p_1 = \sqrt{2mW}$ konstant, für $x > 0$ ebenfalls, $p_2 = \sqrt{2m(W - V_0)}$.

Abbildung 5.1: Potentialstufe mit $W > V_0$

Die Bremskraft soll über eine so kurze Strecke wirken, daß wir approximieren können:

$$V = V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & x \geq 0. \end{cases} \quad (5.24)$$

Die Differentialgleichung für die Bewegung ist Glg. (5.23),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' = [W - V(x)]\phi \quad (5.25)$$

die zeitunabhängige Schrödingergleichung in einer Dimension. Zeitunabhängigkeit heißt Beschreibung nicht eines Teilchens, für das ein mehr oder weniger schmales Wellenpaket zuständig wäre, sondern eines Stromes vieler Teilchen mit einer Quelle bei $x = -\infty$, der von $t = -\infty$ bis $t = \infty$ andauert. Die Lösung von Glg. (5.23) ist die der harmonischen Schwingung, eine beliebige Überlagerung von $\cos kx$ und $\sin kx$ mit zwei verschiedenen k -Werten:

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (5.26)$$

$$\hbar k_1 = \sqrt{2mW}, \quad \hbar k_2 = \sqrt{2m(W - V_0)}. \quad (5.27)$$

Die Anteile mit A und C beschreiben nach rechts laufende Wellen mit

$$\psi(x, t) = \phi(x) e^{-iWt/\hbar} = \text{const} \cdot e^{i(kx - \omega t)}, \quad (5.28)$$

und die mit B und D nach links laufende Wellen. Daraus ergibt sich $D = 0$, denn in $x = \infty$ befindet sich nach Voraussetzung keine Quelle. Die weiteren Konstanten werden durch die Stetigkeitsbedingungen

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \text{stetig in } x \in (-\infty, +\infty) \\ \phi'(x) &= \text{stetig in } x \in (-\infty, +\infty) \end{aligned} \quad (5.29)$$

festgelegt. Wäre $\phi'(x)$ unstetig an einer Stelle, z. B. in $x = 0$, wäre $\phi''(x)$ dort unendlich groß. Nach Glg. (5.23) ist ϕ'' aber überall endlich. Also ist $\phi'(x)$ stetig und damit auch $\phi(x)$. In $x = 0$ folgt daraus:

$$A + B = C, \quad ik_1A - ik_1B = ik_2C,$$

und damit:

$$A + B = \frac{k_1}{k_2}(A - B) \Rightarrow B\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) = A\left(\frac{k_1}{k_2} - 1\right),$$

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A, \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A, \quad (5.30)$$

$$\psi(x, t) = \frac{Ae^{-i\omega t}}{k_1 + k_2} \cdot \begin{cases} (k_1 + k_2)e^{ik_1 x} + (k_1 - k_2)e^{-ik_1 x} & x \leq 0 \\ 2k_1 e^{ik_2 x} & x \geq 0. \end{cases} \quad (5.31)$$

Dies ist die gesuchte Lösung. Links von $x = 0$ finden wir neben der nach rechts laufenden Welle auch eine nach links laufende. Ein Teil der auf die Bremskraft zulaufenden Teilchen wird reflektiert. Dies ist ein in der klassischen Mechanik nicht auftretender Effekt. Der Rest der Lösung, $p_1 = \hbar k_1 = \sqrt{2mW}$, $p_2 = \hbar k_2 = \sqrt{2m(W - V)}$, ist wie von der klassischen Mechanik erwartet. Welcher Anteil der Teilchen wird reflektiert?

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &= \frac{dN}{dx} = \text{Teilchendichte,} \\ |\psi|^2 \cdot \frac{dx}{dt} &= \frac{dN}{dt} = \text{Teilchenstrom} \\ &= \text{Zahl der Teilchen pro Zeiteinheit.} \end{aligned} \quad (5.32)$$

Daraus erhalten wir:

$$\begin{aligned} v_1 \cdot |A|^2 &= \text{Strom der von links auf } x = 0 \text{ auffallenden Teilchen,} \\ v_1 \cdot |B|^2 &= \text{Strom der im Bereich } x < 0 \text{ nach links laufenden Teilchen,} \\ v_2 \cdot |C|^2 &= \text{Strom der im Bereich } x > 0 \text{ nach rechts laufenden Teilchen.} \end{aligned}$$

Als Reflexionskoeffizienten R definiert man sinnvollerweise den Quotienten aus reflektiertem und einlaufendem Teilchenstrom:

$$R = \frac{v_1 |B|^2}{v_1 |A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2. \quad (5.33)$$

Der Transmissionskoeffizient

$$T = \frac{v_2 |C|^2}{v_1 |A|^2} = \frac{k_2}{k_1} \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (5.34)$$

gibt den Anteil der gebremst durch $x = 0$ durchlaufenden Teilchen wieder. Wie man leicht nachrechnet, gilt:

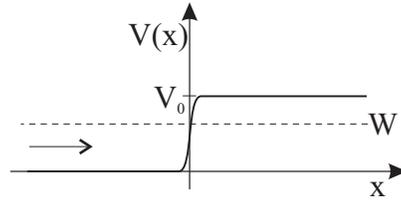
$$R + T = 1, \quad (5.35)$$

d. h. in der Potentialstufe verschwinden keine Teilchen. Die Ergebnisse in Glg. (5.33) und Glg. (5.34) sind die gleichen wie in der Optik für die Reflexion einer Lichtwelle am optisch dichteren Medium. Das Ergebnis ist gleich trotz verschiedener Herleitung, denn dort gilt als Wellengleichung nicht die nicht-relativistische Schrödingergleichung, sondern die wegen der nichtvorhandenen Ruhemasse des Photons notwendigerweise relativistisch korrekte MAXWELL-Wellengleichung. In der Optik ist $v_1 = c$, $v_2 = c/n$, $k_2/k_1 = n$, und es folgt:

$$R = \left(\frac{1 - n}{1 + n} \right)^2, \quad T = \frac{4n}{(1 + n)^2}, \quad (5.36)$$

ein Spezialfall der FRESNELSchen Formeln. Glas hat $n = 1,5$ und damit $R = 4\%$ bei senkrechtem Lichteinfall.

5.6 Die Potentialstufe mit $W < V_0$

Abbildung 5.2: Potentialstufe mit $W < V_0$

Unter den gleichen Voraussetzungen und mit den gleichen Näherungen und Methoden wie im letzten Abschnitt soll die Bewegung von Teilchen mit Quelle bei $x = -\infty$ und Geschwindigkeit $v_1 = \sqrt{2W/m}$, die auf ein Bremspotential

$$V = V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 > W & x \geq 0 \end{cases} \quad (5.37)$$

zulaufen, beschrieben werden. Die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung lautet hier:

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (5.38)$$

$$\hbar k_1 = \sqrt{2mW}, \quad \hbar \beta = \sqrt{2m(V_0 - W)}. \quad (5.39)$$

k_1 und β sind reell, d. h. für $x \geq 0$ sind nicht trigonometrische, sondern Exponentialfunktionen Lösung der Differentialgleichung. Ein exponentielles Ansteigen von $|\psi|^2$ mit $x \rightarrow \infty$ ist sinnlos, daraus folgt $C = 0$. Die Parameter B und D werden wieder mit den Stetigkeitsbedingungen für ϕ und ϕ' in $x = 0$ eliminiert:

$$A + B = D, \quad ik_1(A - B) = -\beta D,$$

$$A + B = -\frac{ik_1}{\beta}(A - B) \Rightarrow A\left(1 + \frac{ik_1}{\beta}\right) = B\left(\frac{ik_1}{\beta} - 1\right),$$

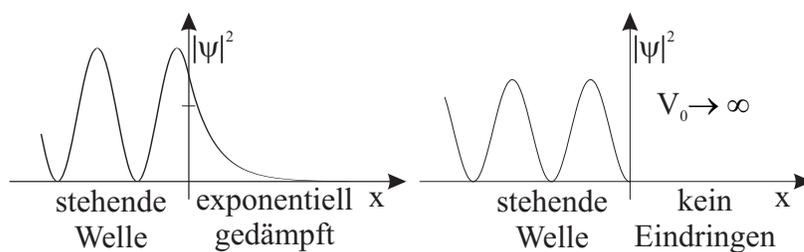
$$B = \frac{\beta + ik_1}{\beta - ik_1}A = \frac{k_1 - i\beta}{k_1 + i\beta}A, \quad D = A + B = \frac{2k_1}{k_1 + i\beta}A. \quad (5.40)$$

Die Wellenfunktion lautet also:

$$\psi(x, t) = \frac{Ae^{-i\omega t}}{k_1 + i\beta} \cdot \begin{cases} (k_1 + i\beta)e^{ik_1x} + (k_1 - i\beta)e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ 2k_1e^{-\beta x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (5.41)$$

und der Reflexionskoeffizient beträgt:

$$R = \frac{v_1|B|^2}{v_1|A|^2} = \left|\frac{k_1 - i\beta}{k_1 + i\beta}\right|^2 = 1. \quad (5.42)$$



(a) Aufenthaltswahrscheinlichkeit für den Fall endlicher Potentiale. Für $x < 0$ ergibt sich eine stehende Welle, für $x > 0$ eine exponentiell gedämpfte Welle.

(b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit für den Fall unendlicher Potentiale. Für $x < 0$ ergibt sich eine stehende Welle, für $x > 0$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit 0.

Abbildung 5.3: Aufenthaltswahrscheinlichkeit an der Potentialstufe

Alle Teilchen werden an dieser Potentialstufe reflektiert. Der einzige Unterschied zur klassischen Mechanik ist die Tatsache, daß die Teilchen mit einer von Null verschiedenen Wahrscheinlichkeit in den Bereich $x > 0$ eindringen, bevor sie reflektiert werden. Dieser Bereich ist klassisch verboten, wellenmechanisch ergibt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im verbotenen Bereich zu

$$|\psi|^2 = |\phi|^2 \propto e^{-2\beta x} . \quad (5.43)$$

Die „mittlere Eindringtiefe“ ist $\bar{x} = 1/2\beta = \hbar/\sqrt{8m(V_0 - W)}$. Nur für $V_0 \rightarrow \infty$ gibt es kein Eindringen mehr. Abb. 5.3(a) und Abb. 5.3(b) skizzieren die Teilchendichten $|\phi|^2$ als Funktion von x . Unter den gegebenen Voraussetzungen mit $\sigma(W) = 0$ ergibt sich für $x < 0$ eine stehende Welle. Unter realistischeren Voraussetzungen mit Wellenpaketen ist die Mathematik sehr viel komplizierter. Die Behandlung eines solchen Problems ist nur durch numerische Integration der zeitabhängigen Schrödingergleichung möglich.

5.7 Potentialwall und Tunneleffekt

Wie in den beiden letzten Abschnitten soll von $x = -\infty$ ausgehend eine monochromatische Welle mit $\sigma(W) = 0$ auf ein bremsendes Potential zulaufen, aber das Potential soll jetzt ein „Wall“ sein, wie in Abb. 5.4 dargestellt mit $W < V_0$.

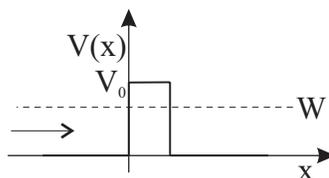


Abbildung 5.4: Potentialbarriere mit $W < V_0$ und Breite a .

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases} \quad (5.44)$$

Die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung lautet:

$$\phi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x \leq 0 \\ C e^{\beta x} + D e^{-\beta x} & 0 \leq x \leq a \\ E e^{ikx} + F e^{-ikx} & x \geq a \end{cases} \quad (5.45)$$

Aus $x = +\infty$ kommt keine nach links laufende Welle, deshalb muss $F = 0$ sein. Der Anteil mit C erstreckt sich nicht bis $x = +\infty$ und darf deshalb beteiligt sein. Die Lösung muß sowohl in $x = 0$ als auch in $x = a$ die Stetigkeitsbedingungen für ϕ und ϕ' erfüllen:

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik(A - B) &= \beta(C - D) \\ C e^{\beta a} + D e^{-\beta a} &= E e^{ika} \\ \beta(C e^{\beta a} - D e^{-\beta a}) &= ik E e^{ika} \end{aligned} \quad (5.46)$$

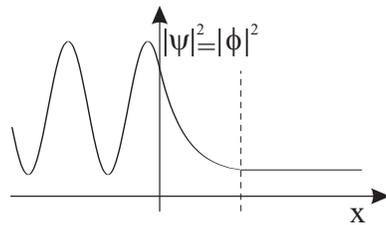


Abbildung 5.5: Wahrscheinlichkeitsdichte für den Tunneleffekt am Wallpotential

A ist eine beliebige Konstante und gibt den Teilchenstrom der Quelle bei $x = -\infty$ an. Die vier weiteren Konstanten B, C, D, E folgen aus dem obigen Gleichungssystem. $R = |B|^2/|A|^2$ gibt den Anteil der reflektierten Teilchen und $T = |E|^2/|A|^2$ den durchlaufenden Anteil an. In der klassischen Mechanik muß $R = 1$ und $T = 0$ sein. Die Wellenmechanik erlaubt, wie in Abb. 5.5 dargestellt, einen kleinen Transmissionsanteil. Dieser Effekt heißt Tunneleffekt nach der bildhaften Vorstellung, daß sich einige wenige der auf den Wall zulaufenden Teilchen einen Tunnel durch den Wall suchen und ihn finden. Der Tunneleffekt ist in der Kern-, Molekül- und Festkörperphysik weitverbreitet. Für den Fall $\beta a \gg 1$ wird $T \ll 1$, und das Ergebnis für T läßt sich in guter Näherung wie folgt darstellen, hier ohne Herleitung:

$$T \approx \frac{16k^2\beta^2 e^{-2\beta a}}{(k^2 + \beta^2)^2} \quad (5.47)$$

Für $\beta a \gg 1$ ist $e^{-2\beta a}$ eine sehr kleine Zahl. Der Vorfaktor $16k^2\beta^2/(k^2 + \beta^2)^2$ ist verglichen damit von der Größenordnung 1, wenn V_0 und W von selber

Größenordnung sind. Somit gilt:

$$\begin{aligned} \ln T &= \ln \frac{16k^2 \beta^2}{(k^2 + \beta^2)^2} - 2\beta a \approx 0 - 2\beta a \\ &= -\sqrt{\frac{8ma^2}{\hbar^2}} (V_0 - W) . \end{aligned} \quad (5.48)$$

Werden zwei Wälle mit $W < V_0$ hintereinander durchtunnelt wie in Abb. 5.6(a),

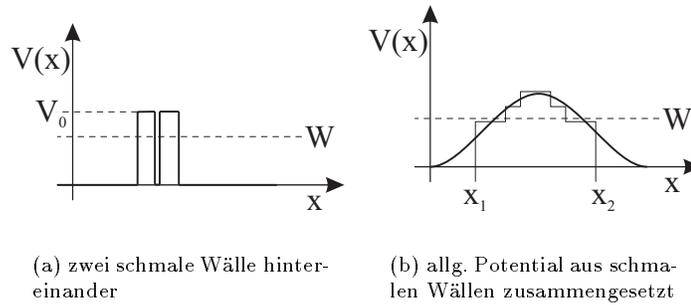


Abbildung 5.6: Übergang vom Rechteckpotential zum allgemeinen Potential

wobei es auf den Abstand zwischen beiden nicht wesentlich ankommt, wenn wir wieder nur Größenordnungsmäßig nach der Transmission T fragen, multiplizieren sich die Transmissionen durch jeden der beiden Wälle:

$$\begin{aligned} T &= T_1 \cdot T_2 \\ \ln T &= \ln T_1 + \ln T_2 \\ &= -2\beta a - 2\beta a = -2\beta \cdot 2a \end{aligned} \quad (5.49)$$

in Übereinstimmung mit der Transmission durch einen Wall der Breite $2a$. Liegt nun ein beliebig geformter Wall vor, der zwischen x_1 und x_2 durchtunnelt werden muß, d. h. dort ist $W < V(x)$, so können wir den Wall in N Rechteckwälle zerlegt denken und schreiben:

$$\begin{aligned} T &= \prod_{i=1}^N T_i \quad , \quad \ln T = \sum_{i=1}^N \ln T_i \\ \ln T &= - \sum_{x_i=x_1}^{x_2} \sqrt{8m[V(x_i) - W]} \frac{\Delta x_i}{\hbar} \\ &\approx -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{8m[V(x_i) - W]} dx . \end{aligned} \quad (5.50)$$

Darin sind x_1 und x_2 die Punkte mit $V(x) = W$, denn davor und danach ist $T \approx 1$. Auch Glg. (5.50) gilt nur der Größenordnung nach, d. h. auf einen Faktor 10 oder 100 genau. Das Ergebnis zeigt qualitativ die Eigenschaften der Potentialwalldurchdringung. Die erste erfolgreiche Anwendung von Glg. (5.50) geschah 1928 durch GAMOW, der damit die Halbwertszeiten von alpha-strahlenden Kernen erklärte, und diese Halbwertszeiten variieren von Kern zu Kern um bis zu 25 Zehnerpotenzen.

5.8 Beispiele für den Tunneleffekt

Wegen der Kleinheit von \hbar ist der Tunneleffekt für Objekte mit einer Masse der Größenordnung Kilogramm und Energien der Größenordnung Joule ohne die geringste praktische Bedeutung. Erst wenn es um Elektronen- oder Molekülmassen und Energien im eV-Bereich geht, werden Barrieren mit beobachtbaren Wahrscheinlichkeiten durchtunnelt. Auch mit Wasserwellen und Licht kann man den Tunneleffekt demonstrieren. Vom dichteren Medium (Glas) ins dünnere Medium (Luft) austretendes Licht wird totalreflektiert, wenn der Winkel zur Grenzflächennormalen größer als $\arcsin(1/n)$ ist, wie in Abb. 5.7(a) skizziert. Der Transmissionskoeffizient T ist dann gleich Null. Befindet sich aber nach einem dünnen Luftspalt der Größenordnung einiger Wellenlängen wieder Glas, so dringt ein Teil des Lichtes durch den Spalt hindurch. Im Spalt gilt übrigens weder Strahlenoptik noch Wellenoptik, die Wellenlängen dort sind imaginär.

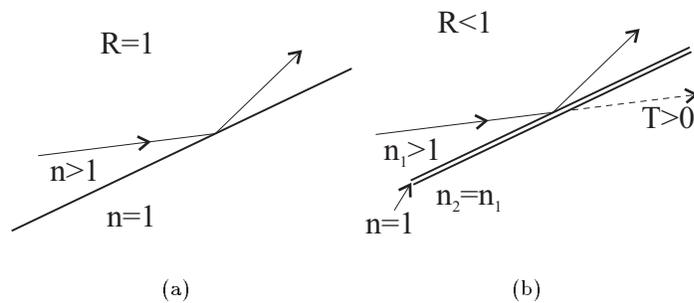


Abbildung 5.7: Tunneleffekt am Beispiel der Reflexion an Glas

Mit Oberflächenwellen auf Wasser kann man Totalreflexion bei schrägem Einfall auf eine Stufe in tieferes Wasser erreichen. Ein Graben von der Breite weniger Wellenlängen ergibt aber, daß ein Teil der Wellenintensität über den Graben hinwegläuft. Dieser Tunneleffekt für Wasserwellen wird in der Vorlesung mit einer Wellenwanne vorgeführt.

Ein Elektriker nützt den Tunneleffekt aus, wenn er einen Stromkontakt zwischen Kupferdrähten durch Verdrillen der beiden Drähte herstellt. Beide Oberflächen bestehen aus nichtleitendem Kupferoxid. Die Oberflächenschichten sind aber in der Praxis so dünn, daß die Elektronen von einem Leiter durch nichtleitendes Material hindurch in den anderen Leiter tunnelt, und bei angelegter Spannung fließt ein Strom durch die beiden Oxidschichten.

Ein nächstes Beispiel für den Tunneleffekt ist die Feldemission. Legt man an eine kalte Metalloberfläche ein sehr starkes elektrisches Feld der richtigen Polarität, so zieht dieses Elektronen aus dem Metall heraus. Normalerweise treten aus einem Metall keine Elektronen aus, weil dazu mindestens die Ablöseenergie A aufgebracht werden muss. Bisher hatten wir drei Möglichkeiten kennengelernt um doch Elektronen abzulösen: den Photoeffekt mit $h\nu > A$; die Sekundärelektronenemission, bei der primäre Elektronen, die auf die Me-

taloberfläche prallen, durch Stoß den gebundenen Elektronen so viel kinetische Energie mitgeben, daß diese entweichen können; und die Glühemission durch Aufheizen des Metalles, wobei die schnellsten Elektronen der Wärmebewegung im Schwanz der MAXWELLverteilung¹ genügend viel Energie zum Entweichen erhalten. Bei der Feldemission wird Abb. 5.8(a) durch das elektrische Feld in Abb. 5.8(b) verwandelt. A liegt in der Gegend um 3 eV. Bei Feldstärken von $|\vec{E}| = 10^9$ V/m haben wir eine Tunnellänge von $3 \cdot 10^{-9}$ m. Dies reicht für Transmissionskoeffizienten der Größenordnung 10^{-23} , und damit können einige der $6 \cdot 10^{23}$ Leitungselektronen pro mol ihren Tunnel finden. Spannungen von 100 kV an sehr feinen Spitzen mit Krümmungsradien im Bereich von 1/10 mm ergeben 10^9 V/m und damit beobachtbare Feldemission.

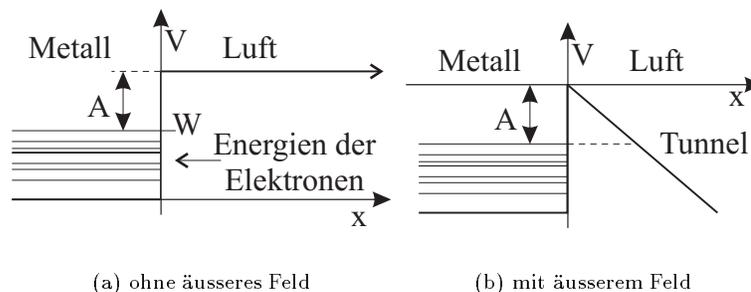


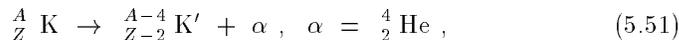
Abbildung 5.8: Feldemission an Metalloberflächen als Tunneleffekt. A bezeichnet die Ablösearbeit. Die zwei Teilbilder zeigen den Potentialverlauf in der Nähe der Oberfläche.

Eine Anwendung der Feldemission ist das Rastertunnelmikroskop, das von G. BINNING und H. ROHRER in den Jahren bis 1984 entwickelt wurde. Dafür erhielten die beiden Industriephysiker (IBM Zürich) 1986 den Nobelpreis. Mit dem Rastertunnelmikroskop lassen sich auf Festkörperoberflächen einzelne Atome sichtbar machen. Eine Weiterentwicklung ist das "Atomare Kraftmikroskop", bei dem der Tunnelstrom dazu benützt werden kann, um einzelne Atome oder Moleküle auf gekühlten Metalloberflächen zu bewegen und gezielt zu plazieren.

Als letztes Beispiel betrachten wir das historisch erste, die Beschreibung des α -Zerfalls von Atomkernen durch GAMOV 1928.

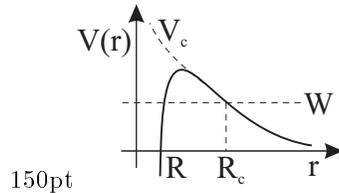
5.9 GAMOVs Theorie des Alpha-Zerfalls

Beim α -Zerfall handelt es sich um den Kernprozess



in dem ein Kern K der Protonenzahl (=Ladungszahl) Z und der Nukleonenzahl (=Massenzahl) A unter Aussenden eines Helium-Kerns zerfällt. Diese Heliumkerne heißen historisch α -Teilchen. In der Natur kommen viele verschiedene

¹Für Elektronen in Festkörpern gilt die FERMIVerteilung. Die hochenergetischen Teile beider Verteilungen sind aber gleich.

Abbildung 5.9: Potential beim α -Zerfall nach dem GAMOV-Modell

α -Strahler vor. Ein typisches Exemplar ist ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ = Radium 226 mit einer Halbwertszeit von 1622 Jahren und einer kinetischen Energie der α -Teilchen von 4.8 MeV. Die beobachteten Halbwertszeiten variieren von $3 \cdot 10^{-7}$ sec bei ${}^{212}_{84}\text{Po}$ bis $5 \cdot 10^9$ Jahren bei ${}^{238}_{92}\text{U}$. Bereits lange vor 1928 war der Zusammenhang zwischen Halbwertszeit und Energie der α -Teilchen bekannt, als sogenannte GEIGER-NUTTALL-Regel. Die Energie war durch die Reichweite von Alphas in Luft oder in einer Nebelkammer leicht messbar. Wenn man in einem Diagramm die Halbwertszeit $T_{1/2}$ gegen die Energie W aufträgt, und zwar als $\log T_{1/2}$ gegen $-1/\sqrt{W}$, dann erhält man eine Gerade. Dieser lineare Zusammenhang $\log T_{1/2} = A + B/\sqrt{W}$ ist eine Konsequenz des Tunneleffektes und soll im folgenden hergeleitet werden.

In GAMOVs Modell sind die α -Teilchen im „Mutterkern“ ${}^A_Z\text{K}$ vorgeformt. Die potentielle Energie $V(r)$ zwischen dem α -Teilchen und dem „Tochterkern“ ${}^{A-4}_{Z-2}\text{K}'$ ist in Abb. 5.9 skizziert. Für große Abstände r zwischen α und Tochterkern ist $V(r)$ ein reines abstoßendes Coulomb-Potential, für kleine Abstände $r < R$ überwiegt die starke Wechselwirkung, d. h. die starke Anziehungskraft zwischen den Nukleonen, die die Kerne zusammenhält. Dabei ist R etwa die Summe der Radien von Tochterkern und α -Teilchen. Proton und Neutron haben einen Radius von etwa $1 \cdot 10^{-15}$ m. Kerne sind Neutronen und Protonen in dichtesten Kugelpackungen mit einem Radius von

$$R(\text{Kern}) \approx 1 \cdot 10^{-15} \text{ m} \cdot \sqrt[3]{A} = A^{1/3} \text{ fm} . \quad (5.52)$$

Auf der in Abb. 5.9 gezeichneten Energieskala hat das α -Teilchen innen wie außen die nichtrelativistische Gesamtenergie $E_{\text{kin}} + V = W$. Dabei ist $V(r) = W$ für $r = R$ und $r = R_C$. Eine einfache Rechnung mit

$$V_C = \frac{Z_1 Z_2 \alpha \hbar c}{r} , \quad Z_1 = Z - 2 , \quad Z_2 = 2 , \quad \alpha = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} , \quad (5.53)$$

ergibt für ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ die Werte $R = 7,5$ fm und $R_C = 51$ fm. Nach Glg. (5.50) gilt größenordnungsmäßig für den Transmissionskoeffizienten T des tunnelnden α -Teilchens mit Masse $m(\alpha) = m$:

$$\begin{aligned} \ln T &= -\frac{1}{\hbar} \int_R^{R_C} \sqrt{8m(V - W)} dr \\ &= -\frac{1}{\hbar} \int_R^{R_C} \sqrt{8m\left(\frac{W R_C}{r} - W\right)} dr . \end{aligned} \quad (5.54)$$

Mit der neuen Variablen $x = r/R_C$ wird dies:

$$\begin{aligned}\ln T &= -\frac{R_C}{\hbar} \int_{R/R_C}^1 \sqrt{8mW \left(\frac{1}{x} - 1 \right)} dx \\ &= -\frac{\sqrt{8mWR_C}}{\hbar} \int_{R/R_C}^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx ,\end{aligned}$$

und mit $R_C = Z_1 Z_2 \alpha \hbar c / W$:

$$\ln T = -Z_1 Z_2 \alpha \sqrt{\frac{8mc^2}{W}} \int_{R/R_C}^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx . \quad (5.55)$$

Das bestimmte Integral nähern wir wegen $R/R_C = 7,5/51 \ll 1$ wie folgt an:

$$\begin{aligned}\int_{R/R_C}^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx &= \int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx - \int_0^{R/R_C} \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx \\ &\approx \frac{\pi}{2} - \int_0^{R/R_C} x^{-\frac{1}{2}} dx = \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{R_C}} .\end{aligned} \quad (5.56)$$

Dabei wird das Integral $\int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx$ leicht mit der Substitution $x = \sin^2 \vartheta$ zu $\pi/2$ bestimmt. Weiter folgt:

$$\begin{aligned}\ln T &\approx -Z_1 Z_2 \alpha \sqrt{\frac{8mc^2}{W}} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{R_C}} \right) \\ &= -\pi Z_1 Z_2 \alpha \sqrt{\frac{2mc^2}{W}} + 4\sqrt{Z_1 Z_2 \alpha} \sqrt{\frac{2mc^2 R}{\hbar c}} .\end{aligned} \quad (5.57)$$

Mit Zahlenwerten für ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ und nach Umrechnung vom natürlichen zum Zehnerlogarithmus ergibt sich:

$$\log T = -148 \sqrt{\frac{1 \text{ MeV}}{W}} + 32,5 . \quad (5.58)$$

Wie können wir den Transmissionskoeffizienten T in die Halbwertszeit $T_{1/2}$ verwandeln? Großes T heißt sicher kleines $T_{1/2}$ und umgekehrt. Quantitativ: Die Zeit t_0 zwischen zwei Stößen des im Mutterkern vorgeformten α -Teilchen beträgt $t_0 = 2R/v$. Dies ist $t_0 = 2R\sqrt{m/2W} = 10^{-21}$ sec für unser Beispiel. Die Zahl der Stöße an den Potentialwall pro Zeiteinheit ist $= 10^{21}$ pro sec, und die Rate (Wahrscheinlichkeit/Zeit) für eine erfolgreiche Durchtunnelung ist dann $\Gamma = T \cdot 10^{21}/\text{sec}$. Für die Halbwertszeit folgt daraus

$$T_{1/2} = \frac{1}{\Gamma} \cdot \ln 2 = 0,69 \cdot 10^{-21} \text{ sec} \cdot \frac{1}{T} \quad (5.59)$$

$$\log \left[\frac{T_{1/2}}{1 \text{ sec}} \right] = -21,2 - \log T = 148 \sqrt{\frac{1 \text{ MeV}}{W}} - 53,7 . \quad (5.60)$$

Obwohl wir die Zahlenwerte von ${}^{226}\text{Ra}$ verwendet haben, gilt Glg. (5.60) in etwa für alle α -Strahler, da R und W und damit v in $t_0 = 2R/v$ nur wenig variieren. Die Gerade weicht im Mittel um einen Faktor 10 bis 100 von den gemessenen Halbwertszeiten ab, gibt den Trend aber genau wieder. Und bei einer Variation über 10^{25} sind Abweichungen bis 10^2 für ein so einfaches Modell wie das von GAMOV 1928 verwendete ein großartiger Erfolg gewesen.

5.10 Gebundene Zustände im Rechteckpotential

Bisher haben wir Potentiale betrachtet, die keine Teilchen binden, sondern sie bremsen oder reflektieren. Abb. 5.10(a) zeigt das eindimensionale Rechteckpotential, oft auch Kastenpotential genannt:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \geq \frac{a}{2} \\ 0 & |x| < \frac{a}{2} \end{cases} \quad (5.61)$$

Ein Teilchen mit Masse m und kinetischer Energie $W < V_0$ wird an der rechten wie an der linken Stufe mit $R = 1$ reflektiert, sein Impuls ist abwechselnd $+\sqrt{2mW}$ und $-\sqrt{2mW}$. Wellenmechanisch haben wir hier erstmals eine Situation, in der die zeitunabhängige Schrödingergleichung die exakte Beschreibung liefert. Kurz nach dem Hineinwerfen in den Kasten und dem Abbremsen auf W wird genau genommen noch ein Wellenpaket benötigt. Da Wellenpakete aber schnell „zerfließen“, hat sich durch die vielen Reflexionen rechts und links bald ein stationärer Zustand ausgebildet, d. h. eine Wellenfunktion, die sich mit der Zeit nicht mehr ändert. W ist streng konstant, $\sigma(W) = 0$, die Lebensdauer des Zustandes ist unendlich. Streng genommen gilt das nur für das in Abb. 5.10(a) gezeichnete Potential mit $V = V_0$ bis $x = -\infty$ und $x = +\infty$. Ein Potential wie in Abb. 5.10(b) kann das Teilchen nicht unendlich lange halten, irgendwann würde es hinaustunneln.

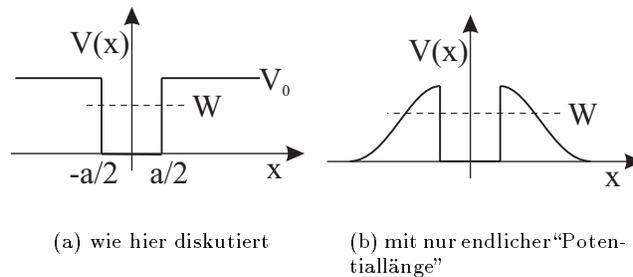


Abbildung 5.10: Kastenpotential

Das Kastenpotential ist eine gute Näherung z. B. für Elektronen in Festkörpern oder Neutronen in großen Atomkernen. Abgesehen davon ist es ein mathematisch einfaches Musterbeispiel für gebundene Zustände und für ihre Haupteigenschaft, die Quantelung der Energie W . Gebundene Zustände haben nicht alle möglichen Energien $W < V_0$, sondern nur diskrete Energiewerte $W = W_1, \dots, W_N$. Dies folgt nach ein paar Zeilen Rechnung von der zeitunab-

hängigen Schrödingergleichung 5.23 ausgehend; zunächst in einer Dimension:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) = [W - V(x)]\phi(x) , \quad (5.62)$$

$$\phi(x) = \begin{cases} A e^{\beta x} + B e^{-\beta x} & x \leq -\frac{a}{2} \\ C \cos kx + D \sin kx & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ E e^{\beta x} + F e^{-\beta x} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases} \quad (5.63)$$

$$\hbar\beta = \sqrt{2m(V_0 - W)} \quad , \quad \hbar k = \sqrt{2mW} . \quad (5.64)$$

Für die sechs zunächst freien Parameter $A \dots F$ gelten sieben Bedingungen:

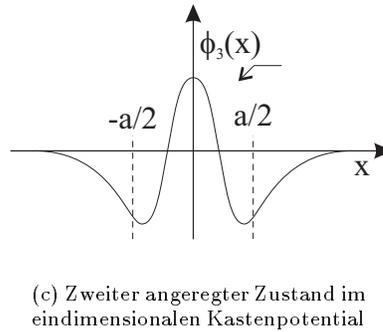
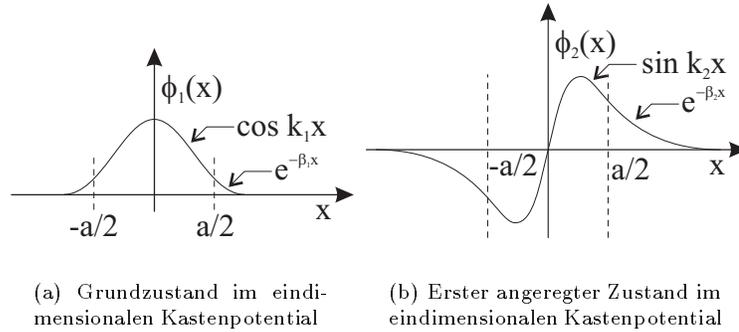


Abbildung 5.11: Die drei niedrigsenergetischen Zustände im eindimensionalen Kastenpotential mit $mV_0 a^2 / \hbar^2 = 32$.

1. $|\phi|^2$ endlich für $x \rightarrow -\infty$, d. h. $B = 0$,
2. ϕ stetig in $x = -\frac{a}{2}$,
3. ϕ' stetig in $x = -\frac{a}{2}$,
4. ϕ stetig in $x = \frac{a}{2}$,
5. ϕ' stetig in $x = \frac{a}{2}$,
6. $|\phi|^2$ endlich für $x \rightarrow \infty$, d. h. $E = 0$,

$$7. \int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx = 1.$$

Die letzte Bedingung bedeutet Normierung, d. h. das Teilchen befindet sich mit der Wahrscheinlichkeit 1 irgendwo im Intervall $(-\infty, +\infty)$. Sieben Gleichungen für sechs Unbekannte sind nicht für jeden Wert von W zu erfüllen. Nur für eine bestimmte Auswahl weniger Werte W_n gibt es je eine Lösung $\phi_n(x)$. In der Mathematik heißt die Lösung einer Differentialgleichung wie Glg. (5.62) unter vorgegebenen Randbedingungen ein Eigenwertproblem. W_n heißen Eigenwerte und die dazugehörigen Lösungen Eigenfunktionen.

In unserem Beispiel folgt die Existenz von Eigenwerten und Eigenfunktionen leicht anschaulich aus den obigen sieben Bedingungen, wie in Abb. 5.11(a) bis Abb. 5.11(c) gezeigt. Zum kleinsten Eigenwert W_1 gehört in $|x| \leq \frac{a}{2}$ ein Cosinus oder Sinus mit kleinstmöglicher Wellenzahl, also größtmöglicher Wellenlänge. Wegen der Symmetrie $V(x) = V(-x)$ muß $|\phi(x)|^2 = |\phi(-x)|^2$ sein, insbesondere $A = F$ oder $A = -F$. Deshalb sind die ϕ_n innerhalb des Kastens reine Sinus- oder Cosinunsfunktionen. Die längste Wellenlänge ergibt sich für den Cosinus in Abb. 5.11(a). Die zweitgrößte Wellenlänge, die in den Kasten hineinpaßt, gehört zu dem Sinus in Abb. 5.11(b), die drittgrößte wieder einem Cosinus.

Die Rechnung führt auf transzendente Gleichungen. Sie ist z. B. im Anhang G des Lehrbuches „Quantum Physics“ von Eisberg/Resnick durchgeführt. Abhängig von der Energie des Teilchens gibt es eine bestimmte Anzahl an gebundenen Zuständen, aber *immer* nur eine endliche Anzahl! Für den Fall $mV_0a^2/\hbar^2 = 32$ gibt es nur drei gebundene Zustände; ihre Eigenwerte heißen $W_1 = 0,0977 V_0$, $W_2 = 0,375 V_0$ und $W_3 = 0,810 V_0$. Die drei Eigenfunktionen sind in Abb. 5.11(a) ff gezeigt. Weiterhin gibt es eine unendliche Anzahl von Zuständen mit $W > V_0$, diese bilden „oberhalb“ des Kastens ein kontinuierliches Energiespektrum. Das Wesentliche über gebundene Zustände, ihre Wellenfunktionen und ihr Energiespektrum lernen wir mit sehr einfacher Mathematik an einem Spezialfall des Kastenpotentials kennen, am Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$, dem unendlich hohen Potentialkasten.

5.11 Das unendlich hohe Rechteckpotential

Es gilt Abb. 5.10(a) mit $V_0 \rightarrow \infty$. Der Grenzübergang drückt sich in den Lösungen des Eigenwertproblems in den Abbildungen 5.11(a)-5.11(c) durch immer geringere Eindringwahrscheinlichkeiten in die Bereiche $|x| > \frac{a}{2}$ aus, d. h. $\beta \rightarrow \infty$. Und die Lösungen

$$\phi(x) \rightarrow \begin{cases} 0 & x \leq -\frac{a}{2} \\ A \sin kx + B \cos kx & |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & x \geq \frac{a}{2} \end{cases} \quad (5.65)$$

$$\hbar k = \sqrt{2mW} \quad (5.66)$$

bleiben überall stetig. $\phi'(x)$ wird unstetig in $x = -a/2$ und $x = +a/2$. Das ist hier erlaubt, da $\phi''(x)$ durch V_0 an diesen Stellen unendlich werden kann. Die

Stetigkeitsbedingungen für $\phi(x)$ lauten:

$$\begin{aligned}\phi\left(\frac{a}{2}\right) &= A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0, \\ \phi\left(-\frac{a}{2}\right) &= -A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0.\end{aligned}\tag{5.67}$$

Durch Addition und Subtraktion folgt $A \sin(ka/2) = 0$ und $B \cos(ka/2) = 0$. Die Lösung $A = B = 0$ ist uninteressant, sie beschreibt null Teilchen im Kasten. Die Lösungen für ein Teilchen zerfallen in zwei Klassen:

1. $A = 0$ und $\cos(ka/2) = 0 \Rightarrow ka = \pi, 3\pi, 5\pi \dots$
2. $B = 0$ und $\sin(ka/2) = 0 \Rightarrow ka = 2\pi, 4\pi \dots$

Daraus folgen die Energieeigenwerte W_n :

$$\begin{aligned}k_n a &= n\pi, \quad n = 1, 2, 3 \dots \\ k_n &= \sqrt{\frac{2mW_n}{\hbar^2}} = n \frac{\pi}{a}, \quad W_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2,\end{aligned}\tag{5.68}$$

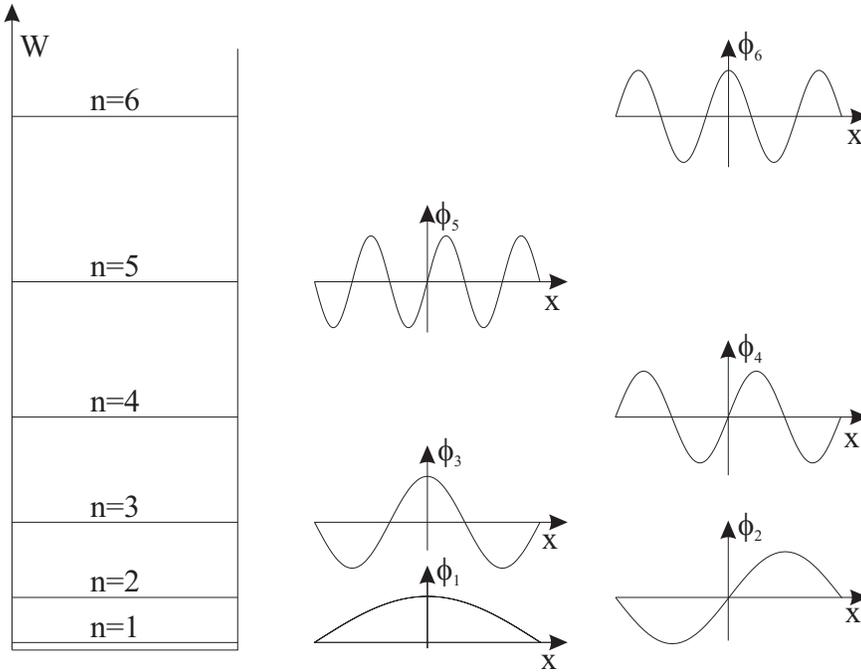
und die Eigenfunktionen $\phi_n(x)$:

$$\phi_n(x) = \begin{cases} 0 & |x| \geq \frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} & |x| \leq \frac{a}{2}, \quad n = 1, 3, 5 \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} & |x| \leq \frac{a}{2}, \quad n = 2, 4, 6 \dots \end{cases}\tag{5.69}$$

Die Normierungskonstanten $\sqrt{2/a}$ folgen einfach aus der Normierungsbedingung $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx = 1$, die zum Ausdruck bringt, daß sich genau ein Teilchen im Kasten befindet. Das Energiespektrum und die Wellenfunktionen sind in Abb. 5.12 gezeigt. Die Energieeigenwerte steigen quadratisch mit n . Das Spektrum der Eigenfunktionen besteht aus allen Funktionen $\cos kx$ und $\sin kx$, deren Vielfaches einer halben Wellenlänge gleich a ist. Die Zahl der Knoten von ϕ_n innerhalb des Kastens (Ränder mitgerechnet) ist $n + 1$. Ebenso sieht das Spektrum der Eigenschwingungen einer schwingenden Saite aus, die an beiden Enden fest eingespannt ist.

Was ist das Impulsspektrum eines der Zustände ϕ_n ? Die stehende Welle $\sqrt{2/a} \cos(n\pi x/a)$ kann als kohärente Überlagerung einer nach rechts laufenden Welle $\phi_n^r = \sqrt{1/2a} e^{i\pi n x/a}$ und einer nach links laufenden $\phi_n^l = \sqrt{1/2a} e^{-i\pi n x/a}$ angesehen werden. Diese Wellen haben Wellenzahlen $k_r = +n\pi/a$ und $k_l = -n\pi/a$, also Impulse $p_r = +\hbar n\pi/a$ und $p_l = -\hbar n\pi/a$.

Aber das Impulsspektrum von ϕ_n besteht nicht nur aus diesen beiden scharfen Impulsen, weil die Funktion $\cos(n\pi x/a)$ nicht von $x = -\infty$ bis $x = +\infty$ ausgedehnt ist. Außerhalb des Potentialtopfes ist $\phi_n(x) \equiv 0$. Das exakte Impulsspektrum folgt wie gehabt aus der Fouriertransformation der Wellenfunktion. Für $n = 1, 3, 5 \dots$ gilt:



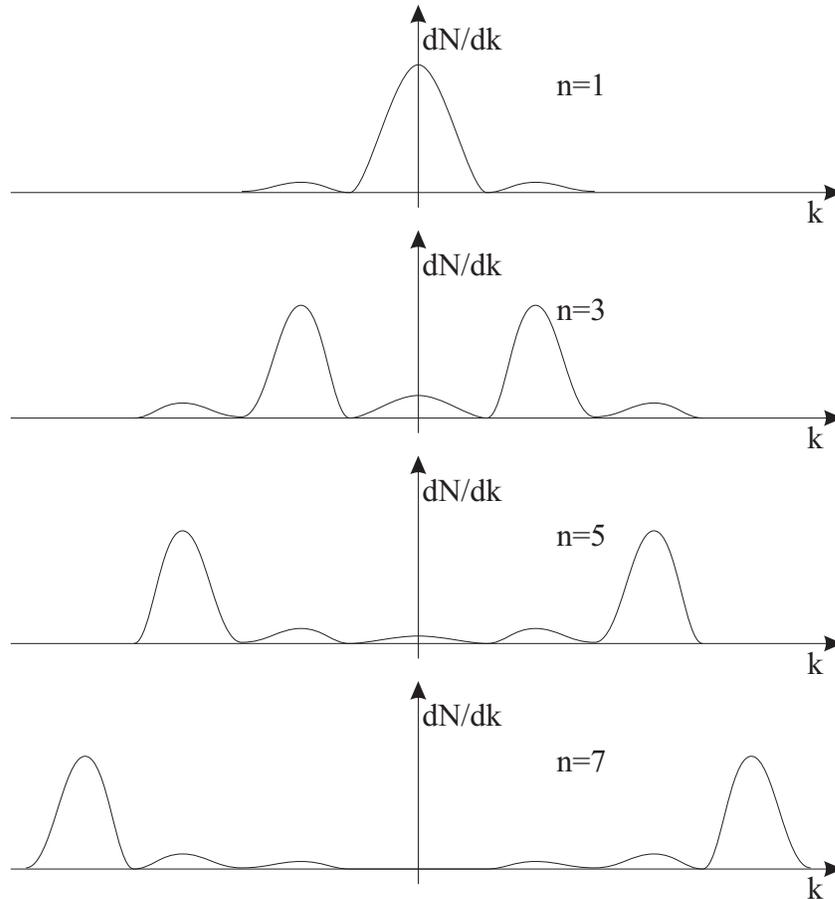


Abbildung 5.13: Impulsspektrum des unendlich hohen Kastenpotentials für $n=1,3,5,7$

Die Spektren sind in Abb. 5.13 maßstabsgetreu aufgetragen. Ab $n = 3$ erkennt man zwei Hauptimpulsbänder um die klassischen Erwartungswerte $k = \pm n\pi/a$ herum. Mit steigendem n bleibt die absolute Breite $\sigma(k)$ dieser Bänder konstant. Die relative Breite $\sigma(k)/k$ nimmt aber wie $1/n$ ab, die Bänder werden relativ gesehen immer schmaler.

5.12 Der Potentialkasten in drei Dimensionen

Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit dreidimensional variierenden Potentialen $V = V(x, y, z)$ sind schwieriger als in einer Dimension. Eine entscheidende Größe ist dabei der Drehimpuls der Teilchenbewegung, $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Da in keinem wellenmechanischen Zustand \vec{r} und \vec{p} gleichzeitig scharf definiert sein können, ist die Definition von \vec{L} zunächst nicht klar. Die Größen \vec{r} und \vec{p} sind aber nicht auf beliebige Weise unscharf, sie sind durch die Unschärferelation miteinander verknüpft. In der theoretischen Quantenmechanik kann man eine noch präzisere Verknüpfung als $\sigma(x) \cdot \sigma(p_x) \geq \hbar/2$ aufstellen, die sogenannte

Vertauschungsrelation zwischen dem \vec{r} -Operator und dem \vec{p} -Operator. Daraus folgt dann zwangsläufig eine wellenmechanische Definition des Drehimpulses und die wichtige Eigenschaft, daß der Drehimpuls gequantelt ist, genauer $L_z = m \cdot \hbar$ und $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ mit ganzen Zahlen $l \geq 0$ und ganzen Zahlen m mit $-l \leq m \leq l$. In Systemen, auf die kein äußeres Drehmoment wirkt, ist der Drehimpuls konstant. Dies gilt auch in der Wellenmechanik, d. h. Lösungen $\phi(x, y, z)$ der Schrödingergleichung mit $V(x, y, z)$ müssen Lösungen mit festem l und festem m sein. Aus diesem Grund gehört vor ein Studium der Schrödingergleichung ein ausgiebiges Studium des Drehimpulses. Dies wird in die Vorlesung Physik IV verschoben und dort zuerst an Hand des Wasserstoffatoms diskutiert.

In einer Dimension gibt es keinen Drehimpuls, deshalb war alles, was wir bisher näherungsweise oder exakt mit der Schrödingergleichung berechnet haben, unabhängig von einem Studium des Drehimpulses. Es gibt ein dreidimensionales Beispiel, dessen Lösungen wir hier angeben können ohne den Drehimpuls zu besprechen:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & (x, y, z) \in K \\ \infty & (x, y, z) \notin K \end{cases} \quad (5.71)$$

mit einem quader- oder würfelförmigen Kasten wie in Abb. 5.14 dargestellt.

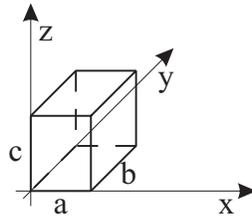


Abbildung 5.14: Kastenpotential in drei Dimensionen

Stehende Wellen in diesem Kasten müssen die Randbedingung $\phi(x, y, z) = 0$ an den sechs Randflächen erfüllen. Daraus folgt die Form der Wellenfunktionen und das Energiespektrum genau wie in Glg. (5.68) und Glg. (5.69). In einer Dimension, mit einem unendlichen Potentialkasten der von 0 bis a statt von $-a/2$ bis $+a/2$ reicht, gilt :

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} & 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.72)$$

mit $p_n = \hbar\pi n/a$, $W_n = n^2\hbar^2\pi^2/2ma^2$, $n = 1, 2, 3 \dots$. In drei Dimensionen ist²:

$$p_x = \frac{\pi\hbar n_x}{a}, p_y = \frac{\pi\hbar n_y}{b}, p_z = \frac{\pi\hbar n_z}{c}, \quad (5.73)$$

$$W(n_x, n_y, n_z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right), \quad (5.74)$$

$$\phi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \cdot \sin \frac{n_x\pi x}{a} \cdot \sin \frac{n_y\pi y}{b} \cdot \sin \frac{n_z\pi z}{c}. \quad (5.75)$$

Falls der Kasten ein Würfel ist, gilt $a = b = c$:

$$W(n_x, n_y, n_z) = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (5.76)$$

mit $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3 \dots$. Die minimale Energie beträgt

$$W_{\min} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \quad (5.77)$$

Durch Einsetzen kleiner Quantenzahlen findet man das Energiespektrum. Mit $W_0 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ ergibt sich:

$$W/W_0 = 3, 6, 9, 11, 12, 14 \dots \quad (5.78)$$

Im Gegensatz zum eindimensionalen Kasten, wo nach oben die Energieniveaux immer weiter auseinanderliegen, liegen sie im dreidimensionalen Kasten nach oben immer dichter. Zur gleichen Energie können verschiedene Zustände gehören, z. B. gehören zu $W = 6W_0$ die drei Zustände in Glg. (5.75) mit $(n_x, n_y, n_z) = (2, 1, 1), (1, 2, 1)$ und $(1, 1, 2)$. Man bezeichnet dieses Phänomen als Entartung. Energieniveaux der Energie W heissen entartet, wenn mehr als ein Zustand die gleiche Energie W besitzen.

5.13 Die Nullpunktsenergie

Ist ein Teilchen in einem endlichen Raumbereich durch Kräfte eingesperrt, besitzt es ein diskretes Energiespektrum. Für den Fall eindimensionaler Bewegung und des unendlichen Rechteckpotentials ist das Energiespektrum durch Glg. (5.60) gegeben:

$$W_n = n^2 \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

In zwei oder drei Dimensionen und mit anderen Potentialformen sieht das Spektrum anders aus, aber immer ist es gequantelt und immer ist $W_1 \neq 0$. D. h. das Einsperren in einen Raumbereich von endlicher Größe bedeutet notwendigerweise Bewegung. Es gibt keine absolute Ruhe. Auch bei der Temperatur $T = 0$ K sind alle Teilchen in einem Festkörper oder einer Flüssigkeit in ständiger Bewegung, der sogenannten Nullpunktsbewegung. Die dazugehörige kinetische Energie heißt Nullpunktsenergie. Ihr Wert folgt direkt aus der HEISENBERGSchen

²natürlich mit den in der Abb. 5.13 klargemachten Einschränkungen, was hier unter p_x, p_y, p_z zu verstehen ist.

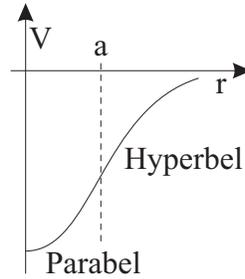


Abbildung 5.15: Potential einer homogenen geladenen Kugel

Unschärferelation zwischen Ort und Impuls. Am eindimensionalen Kasten vorgerechnet:

$$\sigma(x) \cdot \sigma(p_x) \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma(x) \approx \frac{a}{4}, \quad \sigma(p_x) \geq \frac{2\hbar}{a}. \quad (5.79)$$

Da der Mittelwert von p_x gleich Null ist, wie man in Abb. 5.13 mit $n = 1$ sieht, ist der Mittelwert von p_x^2 gleich $[\sigma(p_x)]^2$. Also ist die Nullpunktsenergie

$$W_1 = \frac{p_x^2}{2m} \geq \frac{4\hbar^2}{2ma^2} \quad (5.80)$$

in guter Übereinstimmung mit dem strengen Ergebnis $\pi^2\hbar^2/2ma^2$. Bei festem Neon ($T < 24$ K) beträgt die Nullpunktsenergie z. B. 6,8 meV je Atom. Ne-Atome bewegen sich am Temperaturnullpunkt mit $Mv^2/2 = 6,8 \cdot 10^{-3}$ eV, $v = 2,5 \cdot 10^5$ m/s.

Elektronen, die auf ein Volumen von typischer Atomgröße $a = 10^{-10}$ m eingeschränkt sind, haben darin eine Nullpunktsenergie W_1 , die wir unter den vereinfachenden Annahmen abschätzen wollen, daß das Volumen ein Würfel mit $V = a^3$ sei und das Potential ein unendliche hohes Kastenpotential. Nach Glg. (5.76) ist W_1 einfach ausrechenbar und liegt in der Größenordnung von 100 eV. D. h. die kinetischen Energien von Elektronen in den Grundzuständen von Atomen sind von dieser Größenordnung. Welche Nullpunktsenergie hätten Elektronen, die auf ein Volumen von Kerngröße $a = 10^{-14}$ m eingesperret sind? Vor der Entdeckung des Neutrons durch CHADWICK 1932 stellte man sich den Atomkern aus A Protonen und (A-Z) Elektronen aufgebaut vor. Die Größe der Kerne war durch RUTHERFORDS Experimente ungefähr bekannt. Aus Glg. (5.80) folgt eine Nullpunktsenergie der Elektronen im Kern von etwa 10^4 MeV. Das bedeutet aber $W_1 \gg mc^2$, d. h. die Voraussetzung nichtrelativistischer Näherung in der Schrödingergleichung ist grob verletzt und wir müssen relativistisch rechnen. Die Ergebnisse $p = \hbar k$ und $\phi_1 =$ langwelligste stehende Welle, die in die Länge a hineinpaßt, sind Prinzipien, die auch in der relativistischen Wellenmechanik gelten. Daraus folgt:

$$p_x = p_y = p_z \approx \pi\hbar/a \approx 60 \text{ MeV}/c. \quad (5.81)$$

Dies ist viel größer als mc und damit ist $W_1 = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} \approx cp_x \cdot \sqrt{3} \approx 100$ MeV. Die Nullpunktsenergie eines Elektrons im Kern würde etwa in dieser

Größenordnung liegen. Da auf Elektronen keine Kernkräfte wirken, käme nur die Coulomb-Anziehung der A Protonen für eine Bindung auf Kerndimensionen in Frage. Das Potential einer mit $A e_0$ homogen positiv geladenen Kugel vom Radius a ist in Abb. 5.15 skizziert. Für $r > a$ ist $V = -A e_0^2 / 4\pi \epsilon_0 r$. Dann ist $V(a) = -A e_0^2 / 4\pi \epsilon_0 a$, und ein altes Resultat der Elektrostatik liefert $V(0) = V(a) \cdot 3/2$. Mit $A = 100$ ist $V(0) = 20$ MeV. Ergebnis: Das Coulombpotential von 20 MeV ist nicht in der Lage, Elektronen mit kinetischen Energien von 100 MeV zu binden. Die Vorstellung, Elektronen im Kern durch elektrische Kraft zu binden, ist unhaltbar. Die Entdeckung des Neutrons klärte alles auf, seitdem besteht ein Kern (A, Z) aus Z Protonen und $(A-Z)$ Neutronen.

Eine letzte Zahlenwertabschätzung: Festes Neon hat experimentell $W_1 = 6,8 \cdot 10^{-3}$ eV pro Atom. Welchen Raumbereich bedeutet das in drei Dimensionen?

$$W_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2M a^2}, \quad a = \frac{2\pi \hbar c}{\sqrt{8m c^2 W_1/3}} = 6 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \quad (5.82)$$

Der Gitterabstand zweier Neon-Kerne im festen Neon ist $3,1 \cdot 10^{-10}$ m, d. h. die Nullpunktbewegung erfolgt über etwa 1/5 des Gitterabstandes. Das läßt sich bei einem Festkörper noch einsehen. Anders sind die Verhältnisse beim Helium in der Nähe von 0 K. Dort ist die Nullpunktsenergie größer als die Kristallbindungsenergie. Infolge dessen wird Helium nicht fest, es bleibt (unter normalem Druck) selbst bei $T = 0$ K eine Flüssigkeit.

5.14 Die Parität

Die bisher verwendeten Größen in der Wellenmechanik, Ortskoordinaten, Impulse, kinetische und potentielle Energien kommen auch in der klassischen Mechanik vor und bedeuten dort das gleiche. Der einzige Unterschied ist die prinzipielle Unschärfe in der Wellenmechanik. Neu in der Wellenmechanik ist eine Größe, die es in der klassischen Mechanik nicht gibt, die Parität eines Zustandes.

Im eindimensionalen unendlich tiefen Kasten gab es zwei Sorten von Zuständen. Ihre Wellenfunktionen lauten:

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 3, 5 \dots \quad (5.83)$$

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 2, 4, 6 \dots \quad (5.84)$$

Beide Sorten haben Symmetrieeigenschaften:

$$\phi_n(-x) = \phi_n(x), \quad n = 1, 3, 5 \dots \quad (5.85)$$

$$\phi_n(-x) = -\phi_n(x), \quad n = 2, 4, 6 \dots \quad (5.86)$$

Unabhängig vom Kastenpotential definieren wir in der Wellenmechanik: Ein Zustand hat die Parität $+1$, wenn:

$$\psi(-x, t) = \psi(x, t),$$

und hat die Parität -1 wenn:

$$\psi(-x, t) = -\psi(x, t).$$

Zusammengefaßt:

$$\psi(-x, t) = P \cdot \psi(x, t), \quad P = +1 \text{ oder } -1. \quad (5.87)$$

Nicht jede beliebige Wellenfunktion hat die Symmetrieeigenschaft der Glg. (5.87), die meisten Funktionen sind weder gerade noch ungerade. Gebundene Zustände $\psi(x, t) = \phi(x) e^{-iWt/\hbar}$ haben immer dann eine feste Parität, wenn das bindende Potential eine symmetrische Funktion ist, d. h. $V(x) = V(-x)$. Denn aus einem symmetrischen Potential folgt eine symmetrische Aufenthaltswahrscheinlichkeit des gebundenen Teilchens:

$$|\phi(-x)|^2 = |\phi(x)|^2. \quad (5.88)$$

Und daraus folgt:

$$\phi(-x) = \phi(x) e^{i\alpha}, \quad (5.89)$$

$$\phi(x) = \phi(-x) e^{i\alpha} = \phi(x) e^{2i\alpha}, \quad (5.90)$$

$$e^{2i\alpha} = 1, \quad e^{i\alpha} = \pm 1. \quad (5.91)$$

In eindimensionalen Problemen ist das Ergebnis, daß aus einem symmetrischen Potential Zustände fester Parität folgen, oft eine Rechenerleichterung. In dreidimensionalen Problemen kommt der Parität noch weitergehende Bedeutung zu, z. B. bei der Behandlung von Strahlungsübergängen $\text{Atom}^* \rightarrow \text{Atom} + \gamma$. Die Parität P ist in der Atomphysik und in jedem Prozess der elektromagnetischen Wechselwirkung eine Erhaltungsgrösse wie Energie, Impuls, Drehimpuls und elektrische Ladung. Eine Wellenfunktion im Dreidimensionalen hat eine feste Parität, wenn gilt:

$$\psi(-\vec{r}, t) = P \cdot \psi(\vec{r}, t). \quad (5.92)$$

Auch hier kann P nur die Werte +1 und -1 annehmen.

5.15 Der lineare harmonische Oszillator

Es gibt nur wenige Potentialfunktionen $V(x, y, z)$, die eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung mit analytischen Methoden erlauben. Numerisch findet man immer Lösungen, ganz gleich wie das Potential im Detail aussieht. Außer den bisher behandelten Stufenfunktionen sind auch $V(r) = k/r$, also das Coulombpotential, und $V(x) = kx^2$ analytisch lösbar. In der klassischen Mechanik gehört eindimensional zu

$$V(x) = \frac{C}{2} x^2, \quad x \in (-\infty, \infty) \quad (5.93)$$

ein harmonisch schwingendes Teilchen, denn aus diesem Potential folgt

$$m \cdot \frac{d^2 x}{dt^2} = -Cx, \quad x = x_0 \cos(\omega t - \phi), \quad \omega = \sqrt{\frac{C}{m}}, \quad (5.94)$$

mit Parametern x_0 und ϕ , die aus den Anfangsbedingungen folgen. Beispiel ist der Massenpunkt an einer Feder im Bereich kleiner Auslenkungen, wo das HOOKSche Gesetz gilt. Die Energie, die in der Schwingung steckt, beträgt

$$W = \frac{1}{2}mx^2 + V = V_{\max} = \frac{C}{2}x_0^2. \quad (5.95)$$

In der klassischen Physik ist jedes x_0 erlaubt und damit jede Energie W . Wir werden das Problem jetzt wellenmechanisch angehen und finden, daß nur diskrete Energiewerte

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.96)$$

im Energiespektrum des linearen, d. h. eindimensionalen, harmonischen Oszillators vorkommen.

Eine historische Zwischenbemerkung: Das Ergebnis in Glg. (5.96) wurde bereits 1925 von HEISENBERG gefunden, ein Jahr vor SCHRÖDINGERS Anwendung seiner Differentialgleichung auf Materiewellen. HEISENBERG benützte einen völlig anderen Ausgangspunkt, seine sogenannte Matrizenmechanik. Aus der Linearen Algebra ist bekannt, daß die Lösung der Matrixgleichung:

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \cdots \\ M_{21} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (5.97)$$

ebenfalls ein Eigenwertproblem darstellt, das nur diskrete Eigenwerte W_n und dazugehörige Eigenvektoren $(x_1, x_2, \dots)_n$ als Lösung hat. „Quantisierung als Eigenwertproblem“³ heißt Lösung durch Differentialgleichungen oder durch Matrizen. Unabhängig voneinander haben HEISENBERG und SCHRÖDINGER zwei verschiedene Wege zur Quantentheorie gefunden. Ein paar Jahre später wurde gezeigt, daß beide Wege äquivalente Darstellungen der gleichen Theorie sind, die wir heute Quantenmechanik nennen. Die Mathematik der Quantenmechanik ist die Funktionalanalysis, auch „Hilbertraum“ genannt. Die Schrödingergleichung heißt umgeschrieben:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \phi = W \cdot \phi. \quad (5.98)$$

Man sieht die formale Ähnlichkeit mit Glg. (5.97). Zurück zum harmonischen Oszillator:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \phi'' &= -\frac{C}{2} x^2 \phi + W \phi \\ \phi'' &= \left[\frac{mC}{\hbar^2} x^2 - \frac{2mW}{\hbar^2} \right] \phi \quad \text{für } x \in (-\infty, \infty). \end{aligned} \quad (5.99)$$

Diese Differentialgleichung ist linear, d. h. mit ϕ_n ist auch $N \cdot \phi_n$ eine Lösung. Als ersten Ansatz zur Lösung versuchen wir

$$\phi(x) = e^{-\alpha x^2/2} \quad (5.100)$$

$$\phi' = -\alpha x e^{-\alpha x^2/2}, \quad \phi'' = (\alpha^2 x^2 - \alpha) \phi. \quad (5.101)$$

³So der Titel von SCHRÖDINGERS Arbeit 1926, worin er seine Gleichung und Anwendungen veröffentlichte.

Dieser Ansatz löst Glg. (5.99), wenn $\alpha^2 = mC/\hbar^2$ und $\alpha = 2mW/\hbar^2$. Aus der ersten Bedingung folgt $\alpha = \sqrt{mC}/\hbar$ und mit

$$\omega = \sqrt{C/m} \quad (5.102)$$

wie im klassischen Analogon haben wir so die erste Lösung des Problems gefunden:

$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}, \quad W = W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad \phi_0(x) = N_0 e^{-\alpha x^2/2}. \quad (5.103)$$

Darin folgt die Normierungskonstante N_0 aus der bekannten Normierungsbedingung für die Wellenfunktion. Weitere Lösungen ergeben sich durch Polynome n -ter Ordnung vor $e^{-\alpha x^2/2}$:

$$\begin{aligned} \phi_n &= P_n e^{-\alpha x^2/2} \\ P_n &= x^n + A_1 x^{n-1} + \dots + A_n x^0 \end{aligned} \quad (5.104)$$

$$\begin{aligned} \phi_n' &= (P_n' - \alpha x P_n) e^{-\alpha x^2/2} \\ \phi_n'' &= (P_n'' - \alpha x P_n' + \alpha^2 x^2 P_n - \alpha P_n - \alpha x P_n') e^{-\alpha x^2/2} \\ &= \left(\frac{P_n''}{P_n} - 2\alpha x \frac{P_n'}{P_n} + \alpha^2 x^2 - \alpha \right) \phi_n. \end{aligned} \quad (5.105)$$

Eingesetzt in die Differentialgleichung 5.99 für ϕ ergibt sich die folgende Differentialgleichung für die Polynome $P_n(x)$:

$$\frac{P_n''}{P_n} - 2\alpha x \frac{P_n'}{P_n} + \alpha^2 x^2 - \alpha = \frac{mC}{\hbar^2} x^2 - \frac{2mW_n}{\hbar^2}. \quad (5.106)$$

Da diese Gleichung für jeden Wert von x gilt, müssen die Vorfaktoren in den x^2 -Termen gleich sein und α hat für jedes n den gleichen Wert wie für $n = 0$ in Glg. (5.103). Daraus folgt

$$P_n'' - 2\alpha x P_n' + \left(\frac{2mW_n}{\hbar^2} - \alpha \right) P_n = 0. \quad (5.107)$$

Für P_1 versuchen wir den Ansatz $P_1 = x$:

$$-2\alpha x + \frac{2mW_1}{\hbar^2} x - \alpha x = 0, \quad (5.108)$$

$$W_1 = \frac{3}{2}\hbar^2 \frac{\alpha}{m} = \frac{3}{2}\hbar\omega, \quad (5.109)$$

$$\phi_1(x) = N_1 x e^{-\alpha x^2/2}.$$

Die Lösung ϕ_0 hat die Parität $+1$, $\phi(-x) = \phi(x)$, denn die Gaußfunktion ist gerade. Die Lösung ϕ_1 hat die Parität -1 . Alle Zustände müssen feste Parität haben, da im Ansatz Glg. (5.93) das Potential $Cx^2/2$ symmetrisch ist. Deshalb muss man im Ansatz für P_2 den linearen Teil weglassen, $A_1 \neq 0$ würde die Symmetrie zerstören.

$$\begin{aligned} P_2 &= x^2 + A_2 \quad P_2' = 2x \quad P_2'' = 2. \quad \text{In Glg. (5.107):} \\ 2 - 4\alpha x^2 + \left(\frac{2mW_2}{\hbar^2} - \alpha \right) (x^2 + A_2) &= 0. \end{aligned} \quad (5.110)$$

Dies gilt für alle x , und der Koeffizientenvergleich liefert:

$$-4\alpha + \frac{2mW_2}{\hbar^2} - \alpha = 0 \Rightarrow W_2 = \frac{5}{2}\hbar^2 \frac{\alpha}{m} = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad (5.111)$$

$$2 + \left(\frac{2mW_2}{\hbar^2} - \alpha\right)A_2 = 0 \Rightarrow A_2 = -\frac{1}{2\alpha}$$

$$\phi_2(x) = N_2 \left(x^2 - \frac{1}{2\alpha}\right) e^{-\alpha x^2/2} . \quad (5.112)$$

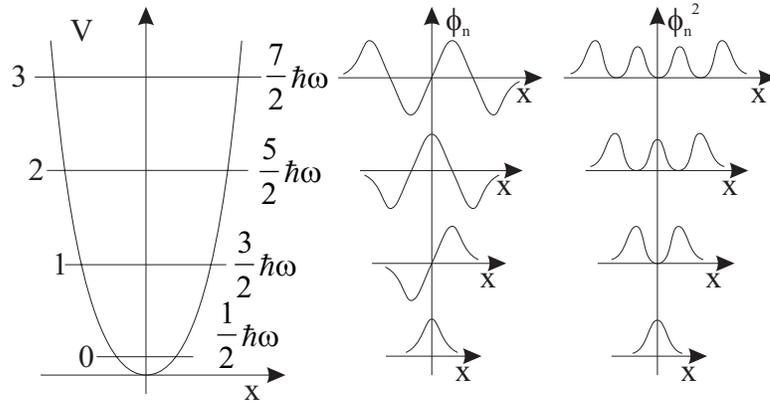


Abbildung 5.16: Energiespektrum, Wellenfunktionen und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des schwingenden Teilchens im harmonischen Oszillatorpotential

Damit sind Eigenwert und Eigenfunktion für den Zustand mit $n = 2$ gefunden. Die allgemeine Lösung lautet:

$$P_n = x^n + A_2 x^{n-2} + A_4 x^{n-4} + \dots \quad (5.113)$$

$$P'_n = n x^{n-1} + A_2 (n-2) x^{n-3} + \dots \quad (5.114)$$

$$P''_n = n(n-1) x^{n-2} + \dots \quad (5.115)$$

Terme bis x^{n-2} in die Differentialgleichung 5.107:

$$n(n-1)x^{n-2} - 2\alpha x(n x^{n-1} + A_2(n-2)x^{n-3}) + \left(\frac{2mW_n}{\hbar^2} - \alpha\right)(x^n + A_2 x^{n-2}) = 0 . \quad (5.116)$$

Der Koeffizientenvergleich vor x^n liefert:

$$-2\alpha n + \frac{2mW_n}{\hbar^2} - \alpha = 0 , \quad W_n = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega , \quad (5.117)$$

$$\phi_n(x) = N_n (x^n + \dots) e^{-\alpha x^2/2} . \quad (5.118)$$

Die Polynome $P_0 = 1$, $P_1 = x$, $P_2 = x^2 - 1/2\alpha \dots$ heißen Hermite'sche Polynome. Sie sind durch die Differentialgleichung 5.107 definiert, haben die Parität $(-1)^n$ und ihre Koeffizienten lassen sich alle nach dem Schema wie bei P_2 berechnen. Die Funktionalanalysis liefert elegantere Methoden zur Berechnung.

Die HERMITESCHEN Polynome $H_n(v)$ sind für dimensionslose Argumente v definiert, $x\sqrt{\alpha}$ ist dimensionslos. Die allgemeine Lösung des linearen harmonischen Oszillators lautet :

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (5.119)$$

wie schon in Glg. (5.96) behauptet, mit $\omega = \sqrt{C/m}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ und

$$\phi_n = N_n H_n(x\sqrt{\alpha}) e^{-\alpha x^2/2} \quad (5.120)$$

mit α , das nicht von n abhängt, $\alpha = \sqrt{mC}/\hbar = m\omega/\hbar$, wie in Glg. (5.103). Die Normierungskonstanten N_n folgen aus $\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^2 dx = 1$. Die HERMITESCHEN Polynome $H_n(v)$ haben genau n Nullstellen. Die stehenden Wellen ϕ_n , die sich im Oszillatorpotential ausbilden, haben deshalb genau n Knoten. Abb. 5.16 zeigt das Energiespektrum, die Wellenfunktionen und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des oszillierenden Teilchens. n heißt die Quantenzahl des Zustandes. Die Energieniveaus liegen äquidistant, ihr Abstand beträgt $\hbar\omega$, wobei ω die Kreisfrequenz der harmonischen Schwingung ist und genau den gleichen Wert hat wie in der klassischen Mechanik. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten haben n Knoten und $n + 1$ Maxima. Mit steigendem n dehnt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit über einen immer größeren x -Bereich aus, genau wie in der klassischen Mechanik, wo mit steigender Energie $W = Cx_0^2/2$ die Amplitude x_0 immer größer wird. Was ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit klassisch?

$$x = x_0 \sin \omega t \quad (5.121)$$

Die Dauer Δt , die das schwingende Teilchen im vorgegebenen Intervall Δx irgendwo zwischen $-x_0$ und x_0 verbringt, ist

$$\Delta t = \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta x = \frac{1}{\dot{x}} \Delta x \quad (5.122)$$

$$\dot{x} = \omega x_0 \cos \omega t = \omega x_0 \sqrt{1 - \sin^2 \omega t} = \omega \sqrt{x_0^2 - x^2} \quad (5.123)$$

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} = \frac{1}{\omega \sqrt{x_0^2 - x^2}} = \text{const} \frac{\Delta P}{\Delta x} \quad (5.124)$$

Diese Dauer Δt ist der Aufenthaltswahrscheinlichkeit ΔP proportional. In Abb. 5.17 ist dP/dx als Funktion von x gezeichnet. In $x = 0$ ist die Wahrscheinlichkeit am kleinsten, weil dort die Bewegung am schnellsten erfolgt. An den Umkehrpunkten ist sie am größten, weil dort die Bewegung einmal pro Schwingung kurz aufhört. Beim Zustand $\phi_0(x)$ ist $\Delta P/\Delta x = \phi_0^2$ in $x = 0$ maximal statt minimal. Aber ϕ_0 entspricht ja auch gerade der Ruhe. Die notwendige Nullpunktsbewegung $\phi(x, t) = \phi(x) e^{-i\omega t/2}$ nähert die klassische Ruhe so gut an, wie es in einem quantenmechanischen System möglich ist. Und mit steigendem n nähert sich ϕ_n^2 der klassischen Kurve in Abb. 5.17, wie in Abb. 5.18 für $n = 16$ gezeigt.

Annähern heißt hier Oszillieren um die klassische Kurve. Im Übergang $n \rightarrow \infty$ werden die Oszillationen so schnell, daß sie unmeßbar werden. In noch so

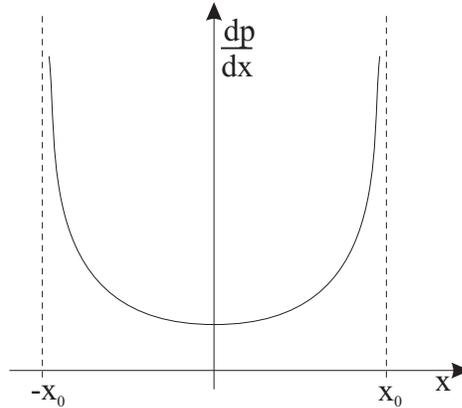


Abbildung 5.17: Klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit pro Ortsintervall $\Delta P/\Delta x$ als Funktion von x

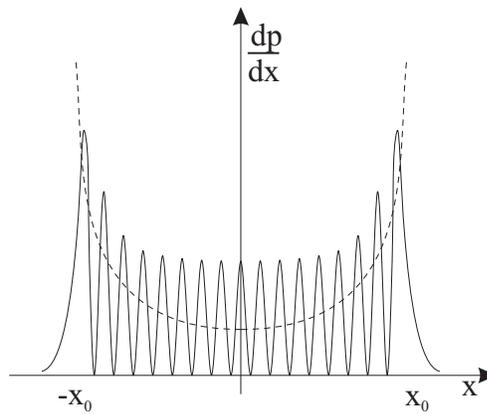


Abbildung 5.18: Übergang vom quantenmechanischen Ergebnis mit $n = 16$ für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zum klassischen.

kleinem Meßintervall Δx nimmt

$$\Delta P = \int_x^{x+\Delta x} \phi_n^2 dx \quad (5.125)$$

den klassischen Wert der gestrichelten Kurve an. Dies ist ein Beispiel für das sogenannte Korrespondenzprinzip der Quantenmechanik. Im Grenzwert großer Quantenzahlen sind die Ergebnisse der Quantenmechanik den Ergebnissen der klassischen Mechanik gleich. Eine Masse von $m = 1$ g schwingt harmonisch mit $\nu = 1$ Hz und $X_0 = 1$ cm. Die Quantenzahl dieses Zustandes errechnet sich zu $n = 3 \cdot 10^{27}$. Diese Quantenzahl ist so groß, dass das diskrete Energiespektrum dann aussieht wie das kontinuierliche mit $W = Cx_0^2/2$ und dass $\Delta P/\Delta x$ über eine Länge von 2 cm insgesamt $3 \cdot 10^{27}$ Knoten und Maxima hat. Das ist ein Knotenabstand von 10^{-29} m.

5.16 Schwingungen zweiatomiger Moleküle

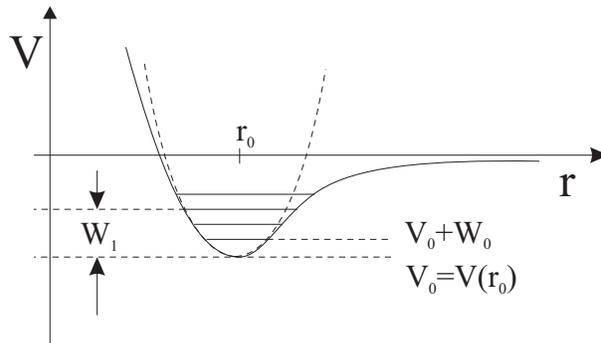


Abbildung 5.19: Potential bei der chemischen Bindung

Das Potential des harmonischen Oszillators entspricht näherungsweise dem Potential vieler Anwendungen in der Molekül- und Festkörperphysik. Als eine Anwendung betrachten wir die Schwingungen von Molekülen mit zwei Atomen wie H_2 zum Beispiel. Diese Moleküle werden durch elektromagnetische Kräfte zusammengehalten, über deren Details wir hier gar nichts brauchen. Für sehr kleine Abstände gibt es eine abstoßende Coulomb-Kraft, die von den positiv geladenen Kernen herrührt. Für große Abstände gibt es eine Anziehungskraft, experimentell durch die in der Reaktion $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + Q$ freiwerdende Energie von $Q = 460 \text{ kJ/mol}$ bewiesen und vorstellbar als Coulombkraft zwischen H^+ und H^- oder als Dipol-Dipol-Kraft zweier polarisierbarer neutraler Atome. Die glatte Interpolation zwischen einem für kleine r stark abstoßenden und einem für große r schwach anziehendem Potential ergibt eine Form wie in Abb. 5.19. r ist der Abstand der Kerne, und bei r_0 ist das Potential minimal. Um diesen Abstand r_0 herum wird sich die Nullpunktsbewegung des Grundzustandes mit der Nullpunktsenergie W_0 ausbilden. Für $V_0 = V(r_0)$ gilt: $V_0 + W_0 + Q = 0$. Zahlenwerte sind: $r_0 = 0,75 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ und $Q = 4,8 \text{ eV}$. Daraus wollen wir W_0 und W_1 berechnen. Um r_0 herum kann man das Potential parabolisch annähern: $V(r) = C(r - r_0)^2/2$, und die Bewegung zwischen nur zwei Massen ($m_e \ll m_p$) ist eindimensional. Deshalb können wir den linearen harmonischen Oszillator hernehmen. Da sich $W_0 \ll V_0$ herausstellen wird, ist

$$\frac{C}{2} \left(\frac{r_0}{2} \right)^2 = Q \quad (5.126)$$

eine passable Abschätzung für die Konstante C ; $C \approx 6,8 \cdot 10^{21} \text{ eV/m}^2$. Die Kreisfrequenz ω der Schwingung zwischen den beiden H-Atomen ergibt sich aus $\omega = \sqrt{C/m}$, wobei für m die reduzierte Masse der Relativbewegung einzusetzen ist, $m_{\text{rel}} = m_{\text{H}}/2$. Damit ist $\omega = 1,1 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$. Als Nullpunktsenergie ergibt sich $W_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \approx 0,37 \text{ eV}$. Damit ist die Anregungsenergie $W_1 - W_0 = \hbar \omega = 0,74 \text{ eV}$ bei Zimmertemperatur wesentlich grösser als die mittlere thermische Energie pro Freiheitsgrad. Daraus folgt, daß die Wärmebewegung bei Zimmertemperatur keine Schwingungen anregt. Es gibt dann nur drei Freiheitsgrade der Translation und zwei der Rotation, keinen der Schwingung. Bei Zimmertemperatur haben H_2 , N_2 und O_2 deshalb einen Adiabatenkoeffizienten $\kappa = 1,4$.