

# Physik IV

für Lehramtskandidaten

Sommersemester 2000

Prof. Dr. Joachim Mnich

III. Phys. Inst. III B

RWTH Aachen

Satz: Lena Trippe

Version: 18.10.2001

## Inhaltsangabe:

1. Teilchen-Welle-Dualismus
2. Schrödinger-Gleichung
3. Aufbau der Atome
4. Quantentheorie der Atome
5. Röntgenstrahlung
6. Laser
7. Moleküle und Festkörper
8. Kernphysik
9. Elementarteilchenphysik
10. Astrophysik und Kosmologie

### Literaturhinweise:

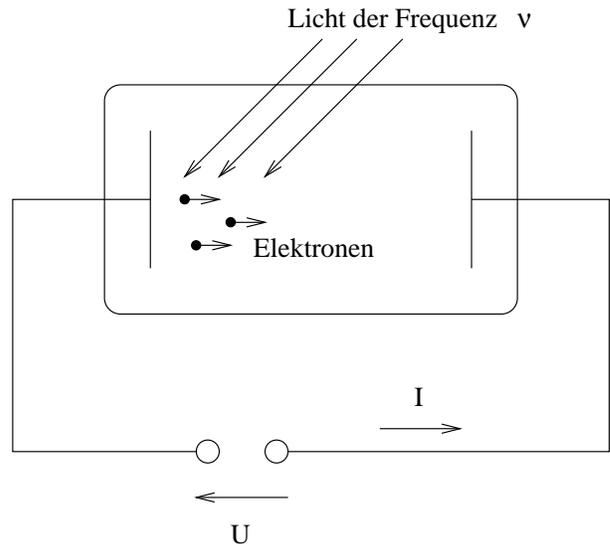
- J.W. Rohlfs: Modern Physics from  $\alpha$  to Z  
Verlag J. Wiley & sons
- W. Demtröder: Experimentalphysik 3 (Atome, Moleküle und Festkörper  
Experimentalphysik 4 (Kern-, Teilchen und Astrophysik)  
Springer Verlag
- G. Otter und R. Honecker: Atome, Moleküle, Kerne; Band I und II  
Teubner Verlag
- A. Alonso und E.J. Finn: Band III Quantum and statistical physics  
Addison-Wesley Verlag
- G. Lindstöm und R. Langkau: Physik kompakt: Quantenphysik  
Vieweg Verlag

# 1 Teilchen-Welle-Dualismus

## 1.1 Der Photoeffekt

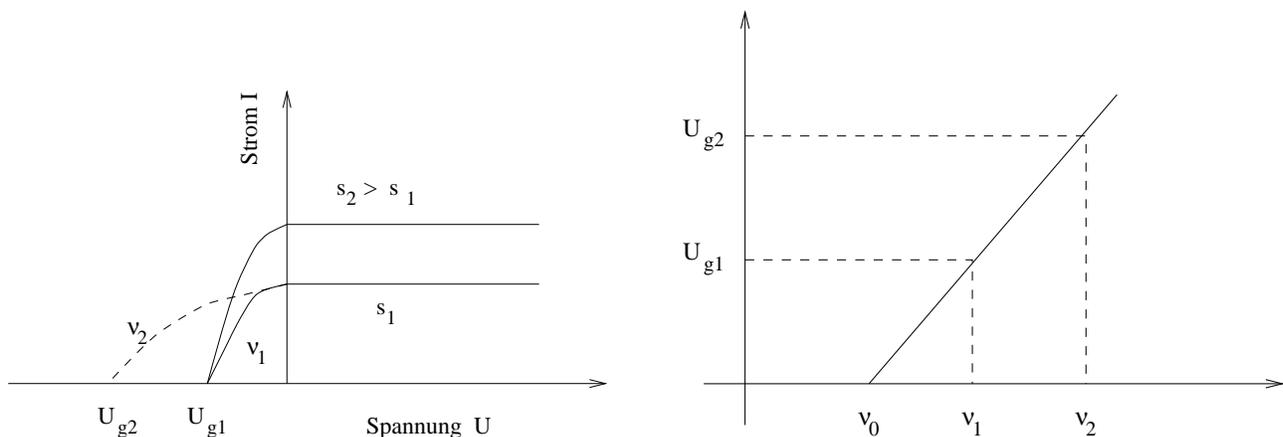
Versuch:

Eine Metallplatte wird mit kurzwelligem Licht (UV) bestrahlt. Elektronen treten aus der Oberfläche aus und erreichen eine zweite Metallplatte. Der zwischen den beiden Platten fließende Strom  $I$  wird als Funktion der angelegten Spannung  $U$  gemessen:



Versuchsergebnisse:

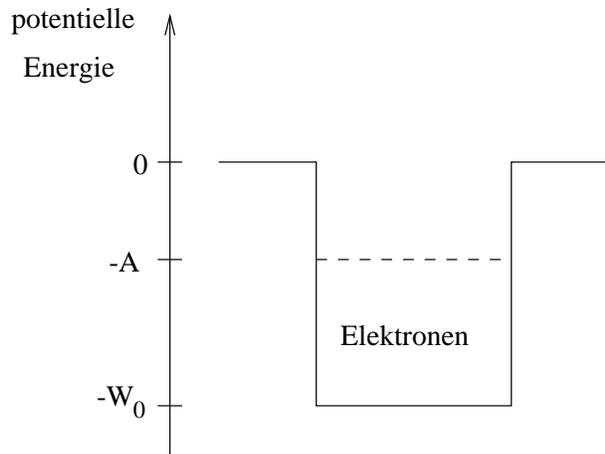
1. Der Strom  $I$  ist proportional zur Intensität des Lichtstrahls
2. Die Grenzspannung  $U_g$  und damit die kinetische Energie der Elektronen ist unabhängig von der Lichtintensität  $s$
3. Die Grenzspannung  $U_g$  ist proportional zur Frequenz des Lichtes  $\nu$
4. Es gibt eine Grenzfrequenz  $\nu_0$  unterhalb derer auch bei hohen Spannungen  $U$  kein Strom fließt
5. Die Grenzfrequenz  $\nu_0$  ist materialabhängig
6. Auch bei Bestrahlung mit sehr kleinen Intensitäten mit Frequenzen  $\nu > \nu_0$  fließt sofort ein (kleiner) Strom



Erklärung durch Albert Einstein, der dafür 1921 den Nobelpreis für Physik erhielt:

Licht besteht aus Quanten der Energie  $E = h\nu$ , genannt Photonen. Ein Photon kann ein

Elektron aus der Metalloberfläche lösen, falls seine Energie ausreicht, die Bindungsenergie zu überwinden.



Darstellung der Bindungsenergie der Elektronen durch Potentialtopf: Die Elektronen müssen mindestens die Energie  $E_0 = h\nu_0 = A$  aufnehmen, um aus dem Metall auszutreten. Bei höherer Energie, d.h. größerer Frequenz  $\nu$ , verbleibt die kinetische Energie  $h\nu - A$  um gegen die angelegte Spannung  $U$  anzulaufen.

$$eU_g = h\nu - A$$

$\implies$  **Licht besteht aus Teilchen (Photonen) der Energie  $E = h\nu$**

Das Plancksche Wirkungsquantum  $h$ :

$h$  ist eine Naturkonstante. Ihr Wert bestimmt die charakteristische Größe von Effekten der Quantentheorie. Sie hat die Einheit Energie  $\times$  Zeit:

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

In der Atom-, Kern und Elementarteilchenphysik messen wir Energien praktischerweise in eV, keV, MeV, ..., wobei  $e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ As}$  die Elementarladung ist. Beachte:  $1 \text{ J} = 1 \text{ Ws} = 1 \text{ VAs}$ . Damit können wir  $h$  auch schreiben als

$$h = 4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$$

Beispiel: Sichtbares Licht hat Wellenlängen zwischen 400 nm und 700 nm. Für das rote Licht eines Helium-Neon-Lasers ist  $\lambda = 633 \text{ nm}$ :

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{633 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = 4.74 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

Energie der Photonen:

$$E = h\nu = 4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eVs} \cdot 4.74 \cdot 10^{14} \text{ 1/s} = 1.96 \text{ eV}$$

Relativistische Beziehungen für Energie und Impuls:

Teilchen der Ruhemasse  $m_0$  und Geschwindigkeit  $v$ :

Abkürzungen:  $\beta = v/c$   $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$

$$E = mc^2 = \gamma m_0 c^2 \quad p = mv = \gamma m_0 \beta c \quad \implies \quad E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

Beweis:

$$E^2 = m_0^2 c^4 + m_0^2 c^4 \gamma^2 \beta^2 \quad \gamma^2 \beta^2 = \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} = \frac{1}{1 - \beta^2} - \frac{1 - \beta^2}{1 - \beta^2} = \gamma^2 - 1$$

$$E^2 = m_0^2 c^4 (1 + \gamma^2 - 1) = (m_0 \gamma c^2)^2 = (mc^2)^2$$

Kinetische Energie:

$$E_k = E - m_0 c^2 = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} - m_0 c^2 \neq \frac{p^2}{2m} \quad (!!!)$$

Photonen bewegen sich mit Lichtgeschwindigkeit  $c$ . Wie groß ist ihre Ruhemasse  $m_0$ ?

$\beta = 1$  und  $\gamma \rightarrow \infty$ , aber die Energie der Photonen  $E = h\nu = \gamma m_0 c^2$  ist endlich! Also muß gelten  $m_0 = 0$ .

**$\implies$  Photonen haben keine Ruhemasse**

## 1.2 Der Compton-Effekt

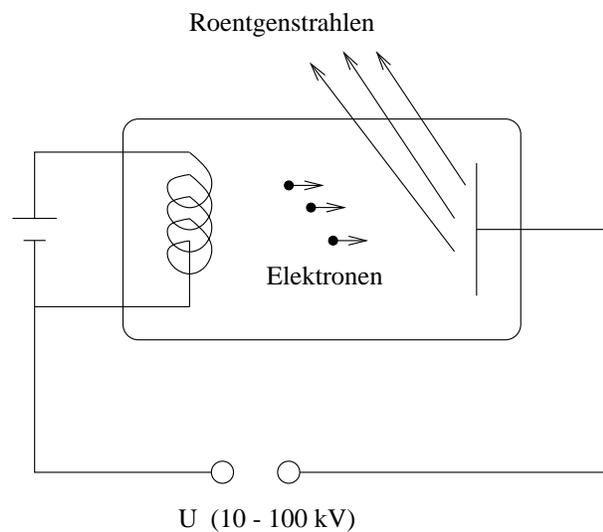
Impuls der Photonen Mit  $m_0 = 0$  gilt  $E^2 = p^2 c^2 \implies p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

**$\implies$  Photonen haben den Impuls  $p = \frac{h}{\lambda}$**

Diese Behauptung wird in der Streuung von Photonen an quasi-freien Elektronen überprüft (A.H. Compton 1923)

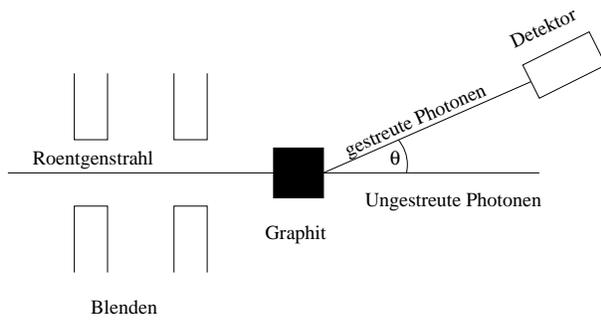
Benutze Röntgenstrahlung mit hoher Frequenz, d.h. hoher Energie, (10 – 100 keV), so daß die Bindungsenergie der Elektronen (einige eV) vernachlässigt werden kann.

Erzeugung von Röntgenstrahlen:

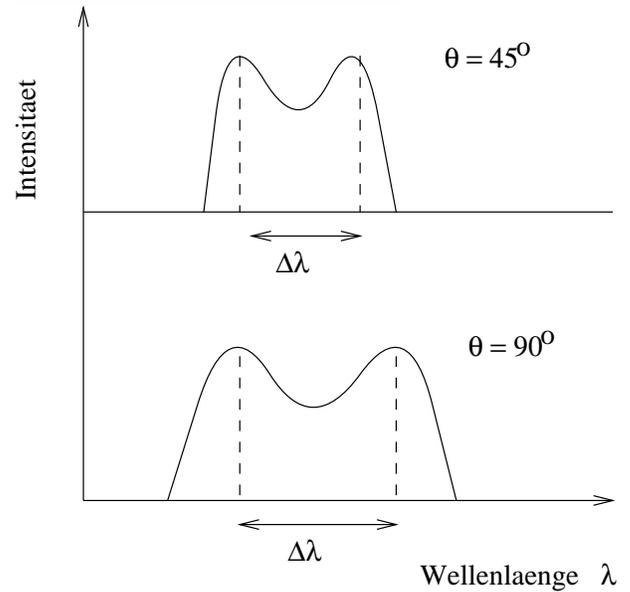


Elektronen aus einer Glühkathode werden in einem elektrischen Feld bis zur Energie  $E = eU$  beschleunigt und auf eine Wolfram-anode geschossen. Die Elektronen werden abgebremst und geben ihre kinetische Energie als Strahlung ab (Bremsstrahlung). Die maximale Energie der emittierten Photonen ist  $E_{\max} = h\nu_{\max} = eU$ , falls der Energieübertrag in einem einzigen Bremsvorgang passiert, sonst gilt  $h\nu < eU$ .

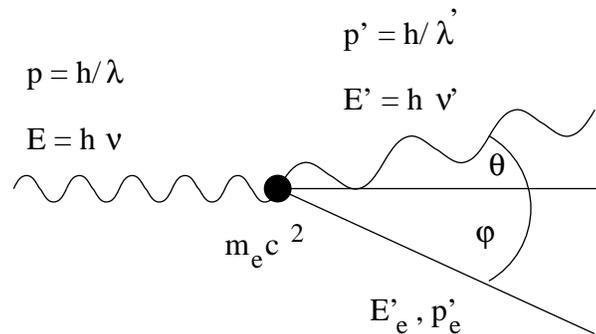
## Versuchsaufbau zur Compton-Streuung:



## Gemessene Photonspektren:



Das Spektrum der gestreuten Photonen wird gemessen, d.h. die Intensität als Funktion der Wellenlänge. Neben der Wellenlänge der Röntgenquelle  $\lambda$  tritt ein weiteres Maximum bei einer grösseren Wellenlänge  $\lambda'$  auf. Die Differenz  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$  hängt von Streuwinkel  $\Theta$  ab. Erklärung der Beobachtung, besonders der Winkelabhängigkeit, durch elastischen Stoß eines Photons mit einem Elektron:



Zunächst Impulserhaltung: Der Impuls wird aufgeteilt in die Komponenten parallel und senkrecht zur Richtung des einfallenden Photons:

$$p = p' \cos \theta + p'_e \cos \varphi \quad \text{oder} \quad p'_e \cos \varphi = p - p' \cos \theta$$

$$0 = p' \sin \theta - p'_e \sin \varphi \quad p'_e \sin \varphi = p' \sin \theta$$

Quadrieren und Addieren ergibt:

$$p_e'^2 = p^2 - 2pp' \cos \theta + p'^2 \cos^2 \theta + p'^2 \sin^2 \theta = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta$$

Multipliziere mit  $c^2$  und benutze, daß für das masselose Photon gilt  $E = pc$  bzw.  $E' = p'c$

$$p_e'^2 c^2 = E^2 + E'^2 - 2EE' \cos \theta \quad (*)$$

Jetzt Energieerhaltung:

$$E + m_e c^2 = E' + E'_e \quad \implies E'_e = E - E' + m_e c^2$$

$$E_e'^2 = (E - E')^2 + 2(E - E')m_e c^2 + m_e^2 c^4$$

$$E_e'^2 - m_e^2 c^4 = E^2 + E'^2 - 2EE' + 2(E - E')m_e c^2$$

Gleichsetzen mit (\*) eliminiert  $E'_e$  und  $p'_e$ :

$$-2EE' \cos \theta = -2EE' + 2(E - E')m_e c^2 \quad \implies EE'(1 - \cos \theta) = (E - E')m_e c^2$$

$$1 - \cos \theta = \frac{E - E'}{EE'} m_e c^2 = \left( \frac{1}{E'} - \frac{1}{E} \right) m_e c^2 = \left( \frac{\lambda'}{hc} - \frac{\lambda}{hc} \right) m_e c^2$$

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 2.43 \cdot 10^{-12} \text{ m} \quad \text{Compton-Wellenlänge des Elektrons}$$

Die maximale Änderung der Wellenlänge tritt auf bei Rückstreuung des Photons  $\theta = 180^\circ$ :  $\Delta\lambda = 2\lambda_c$ . Das entspricht dem maximalen Energieübertrag auf das Elektron. Compton-Streuung kann auch am Atomkern auftreten. Auf Grund der großen Masse der Kerne ist aber die Wellenlängenänderung sehr viel kleiner, z.B. ist die Masse eines Kohlenstoffkerns im Graphit etwa  $m_C \approx 20\,000 m_e$ . Analogie: Elastischer Stoß an einer starren Wand.

Der Teilchencharakter des Lichtes, oder allgemeiner elektromagnetischer Wellen, ist durch viele andere Experimente und Beobachtungen bestätigt, z.B. Wärmestrahlung schwarzer Körper, Gravitationsrotationsverschiebung.

### 1.3 Wellencharakter der Teilchen

Louis de Broglie schlug 1924 vor, die duale Beschreibung des Lichts auf alle Teilchen zu verallgemeinern und den Teilchen Welleneigenschaften zuzuordnen. Die Wellenlänge eines Teilchens mit dem Impuls  $p = mv$  ist:

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

$$\hbar = h/2\pi \quad \text{und} \quad \text{Wellenzahl } k = 2\pi/\lambda$$

Beispiele:

1. Wellenlänge eines Elektrons mit kinetischer Energie  $E_k = 10 \text{ eV}$ . Weil  $E_k$  sehr viel kleiner ist als die Ruheenergie des Elektrons  $m_e c^2 = 511 \text{ keV}$  können wir klassisch rechnen

$$E_k \approx \frac{p^2}{2m_e} \quad \implies p = \sqrt{2m_e E_k}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_k}} = \frac{4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}}{\sqrt{2 \cdot 511 \text{ keV}/c^2 \cdot 10 \text{ eV}}} = \frac{4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eVs} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{\sqrt{2 \cdot 511 \text{ keV} \cdot 10 \text{ eV}}} =$$

$$3.9 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\lambda = 3.9 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

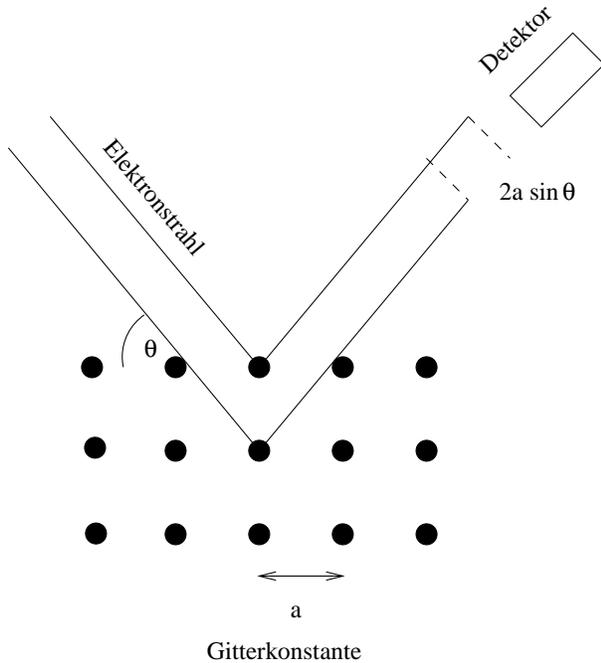
Das ist die Größenordnung von Atomdurchmessern

2. Makroskopischer Körper der Masse 1 g und der Geschwindigkeit 1 m/s

$$\lambda = \frac{6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{10^{-3} \text{ kg m/s}} = 6.6 \cdot 10^{-31} \text{ m} \quad (!!!)$$

Der Wellencharakter von Teilchen spielt nur bei atomaren und subatomaren Phänomenen eine Rolle.

Experimentelle Bestätigung der Materiewellen im Experiment von Davisson und Germer (1928):



Beobachtetes Interferenzmuster der Intensität der detektierten Elektronen entspricht Beugungsmuster am Raumgitter des Kristalls.

konstruktive Interferenz  $2a \sin \theta = n\lambda$   
destruktive Interferenz  $2a \sin \theta = (n + \frac{1}{2})\lambda$   
( $n = 1, 2, 3, \dots$ )

## 1.4 Darstellung einer Teilchenwelle

Dazu führen wir die komplexe Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r}, t)$  ein. Eine ebene Welle wird beschrieben durch

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

$$\text{Wellenzahlvektor } \vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} \quad \text{Ortsvektor } \vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Mit  $E = h\nu = \hbar\omega$  und  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  ergibt sich:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$$

Die Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r}, t)$  enthält alle physikalischen Informationen über das Teilchen, ist aber keine eigentliche Meßgröße. Aus der Quantenmechanik folgt, daß nur der absolute Betrag der Wellenfunktion  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  meßbar ist.

$\Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \equiv |\Psi|^2$  gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte  $dW/dV$  an, daß Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{r}$  zu finden. Die Wahrscheinlichkeit ist gegeben durch  $dW = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ . Ein Beispiel dafür sind die Interferenzmuster im Davisson-Germer-Experiment.

Für eine ebene Welle  $\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$  gilt

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t)^*\Psi(\vec{r}, t) = |A|^2 = \text{const}$$

d.h. das Teilchen hat zu jeder Zeit die gleiche Aufenthaltswahrscheinlichkeit an jedem Ort des Raumes. Lokalisierbare Teilchen müssen wir durch Wellenpakete beschreiben. Ein Wellenpaket läßt sich durch Überlagerung ebener Wellen aufbauen. Betrachte ein Teilchen, daß sich in  $x$ -Richtung ausbreitet  $\Psi(x, t) = \phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ . Der Ortsanteil des Wellenpaketes setzt sich zusammen aus der Überlagerung aller möglichen ebenen Wellen mit Wellenzahlen  $k_x = k$ :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk f(k) e^{ikx}$$

Die Amplituden  $f(k)$  sind die Fouriertransformierte des Wellenpaketes:

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi(x) e^{-ikx}$$

Geschwindigkeit des Wellenpaketes:

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit eines Wellenpaketes ist die Gruppengeschwindigkeit  $v_g$  des Wellenpaketes  $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

$$\omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{mc^2}{h} = \gamma \frac{m_0 c^2}{h} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} = \gamma\beta \frac{m_0 c}{\hbar}$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\omega}{d\beta} \bigg/ \frac{dk}{d\beta} = \beta c = v$$

Die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpaketes entspricht der Geschwindigkeit des Teilchens.

Die Phasengeschwindigkeit  $v_p = \lambda\nu = \frac{h}{p} \frac{E}{h} = \frac{\gamma m_0 c^2}{\gamma\beta m_0 c} = \frac{c}{\beta} = \frac{c^2}{v} > c$   
hat keine physikalische Bedeutung.

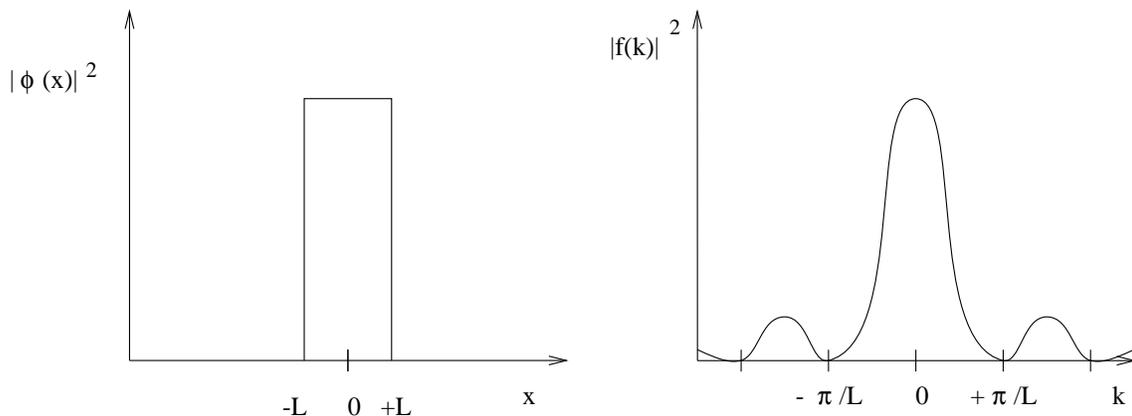
## 1.5 Die Unschärferelation von Heisenberg

Aus dem Teilchen-Well-Dualismus folgt, daß man den Impuls in einer gewählten Richtung und den Ort in der gleichen Richtung prinzipiell nie gleichzeitig beliebig genau messen kann. Für das Produkt der Unschärfen auf Impuls und Ort gilt

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

Die Unschärferelation ist ein Naturgesetz und kann nicht umgangen werden.

Wir betrachten ein Teilchen, das innerhalb  $-L \leq x \leq +L$  eine konstante Aufenthaltswahrscheinlichkeit hat. Das Wellenpaket, das dieses Teilchen beschreibt, ist ebenfalls in  $-L \leq x \leq +L$  lokalisiert.



Die Fouriertransformierte  $f(k)$  gibt die Beiträge der ebenen Wellen mit Wellenzahl zum Paket an. Wir können abschätzen, daß Wellenzahlen  $-\pi/L \leq k \leq +\pi/L$  Beiträge liefern, also

$$\Delta k \Delta x \approx (\pi/L)L = \pi \quad \text{und mit } \Delta p = \hbar \Delta k \text{ folgt } \Delta p \Delta x = \pi \hbar > \hbar.$$

Wenn das Wellenpaket stärker lokalisiert ist, verbreitert sich die Verteilung der Wellenzahlen. Zur Beschreibung eines perfekt lokalisierten Teilchen werden unendlich viele  $k$ -Werte benötigt,

der Impuls dieses Teilchens ist daher völlig unbestimmt. Umgekehrt, wenn das Teilchen durch eine einzige ebene Welle mit der Wellenzahl  $k$  beschrieben wird, ist es nicht lokalisierbar, das heißt die Ortsunschärfe ist unendlich groß (siehe Kapitel 1.4).

Bei Gaußverteilung des Wellenpakets gilt die Unschärferelation in der Form  $\Delta p_x \Delta x = \hbar$ .

## 2 Die Schrödinger-Gleichung

### 2.1 Aufstellen der Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist die Wellengleichung für Materiewellen, die nichtrelativistische Teilchen beschreiben. Sie wurde um 1923 von Erwin Schrödinger aufgestellt. Die Gleichung ist nicht herleitbar, sondern kann nur plausibel gemacht werden und muß dann im Experiment bestätigt werden. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung liefern

- die Wellenfunktionen  $\Psi(\vec{r}, t)$  des Teilchens
- und die möglichen Energien  $E$ .

Nichtrelativistischer Energiesatz:

Die Gesamtenergie ist die Summe aus kinetischer Energie  $T$  und potentieller Energie  $V$ :

$$E = T + V(x, t) \quad T = \frac{m}{2}v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Wir betrachten wieder den einfachsten Fall einer Materiewelle, eine ebene Welle in  $x$ -Richtung

$\Psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$  und bilden die Ableitung nach der Zeit und die zweite Ortsableitung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar}E \Psi & \implies E &= +i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \frac{1}{\Psi} \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi & \implies p^2 &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \frac{1}{\Psi} \end{aligned}$$

Wir vergleichen dieses Resultat mit dem Energiesatz  $E = T + V = p^2/2m + V$  und erhalten die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi$$

Offenbar gilt folgende Zuordnung für Energie und Impuls:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \text{grad} = -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Eigenschaften der Schrödinger-Gleichung:

- es tritt nur die einfache Ableitung nach der Zeit auf, im Gegensatz zur Schwingungsgleichung
- komplexe Differentialgleichung, daher sind auch die Lösungen komplex
- lineare, homogene Differentialgleichung und somit gilt das Superpositionsprinzip:  
wenn  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$  Lösungen sind, dann ist auch  $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  eine Lösung

Die Schrödinger-Gleichung beschreibt nichtrelativistische Probleme. Ihre Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit den Beobachtungen an Teilchen und Teilchensystemen (Atome, Moleküle, Kerne, ...).

Bei vielen Problemen hängt das Potential nur vom Ort und nicht von der Zeit ab:  $V = V(x)$ . In diesen Fällen läßt sich die Gleichung vereinfachen, indem man die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion abspaltet:  $\Psi(x, t) = \phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \phi(x)\xi(t)$ . Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung

ergibt:

$$i\hbar \left( -\frac{i}{\hbar} E \right) \phi(x) \xi(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} \right) \xi(t) + V(x) \phi(x) \xi(t)$$

$$E\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V(x) \phi(x)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + [E - V(x)] \phi(x) = 0$$

Für den allgemeinen, dreidimensionalen Fall erhält man die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung zu (mit der Abkürzung  $\Delta\Phi(\vec{r}) = \frac{\partial^2 \phi(\vec{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(\vec{r})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi(\vec{r})}{\partial z^2}$ ):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\phi + (E - V) \phi = 0$$

## 2.2 Der Tunneleffekt

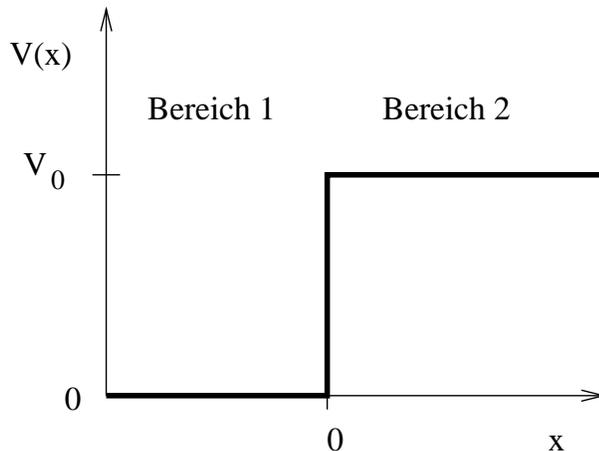
Wir behandeln jetzt Beispiele für die Anwendung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung. Daher betrachten wir nur zeitliche konstante Potentiale und den Ortsanteil der Wellenfunktion  $\phi(x)$ .

### Potentialstufe

Bereich 1 ( $-\infty < x < 0$ )  $V_1 = 0$

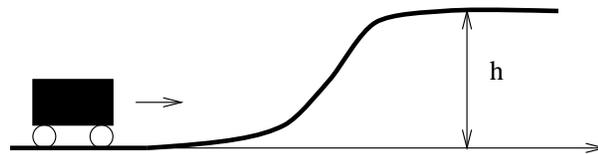
Bereich 2 ( $0 \leq x < +\infty$ )  $V_2 = V_0$

Ein Teilchen (Wellenpaket) mit dem Impuls  $p$  und der Masse  $m$  bewege sich auf die Potentialstufe zu.



Das klassische Analog ist ein Körper der Masse  $m$  und der kinetischen Energie  $T$ , der reibungsfrei gegen eine Erhebung rollt. Um hinaufzukommen, muß seine kinetische Energie  $T$  ausreichen, um den Unterschied der potentiellen Energie zu überwinden

$$T = \frac{p^2}{2m} > V_0 = mgh.$$



Im klassischen Fall kann der Körper für  $T < V$  niemals die Potentialstufe überwinden. In der Quantenmechanik ist dies mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit möglich!

Bereich 1

$$E = T_1 + V_1 \Rightarrow T_1 = \frac{p_1^2}{2m}$$

Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + E\phi = 0$$

Bereich 2

$$E = T_2 + V_2 = T_2 + V_0 \quad \Rightarrow \quad T_2 = \frac{p_2^2}{2m} = E - V_0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + (E - V_0)\phi = 0$$

Lösung der Differentialgleichung:

Die Gleichung  $\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \alpha \phi = 0$  hat die Lösungen  $\phi = Ae^{\pm i\sqrt{\alpha}x}$  und die allgemeine Lösung ist  $\phi = Ae^{+i\sqrt{\alpha}x} + Be^{-i\sqrt{\alpha}x}$ .

Für reelle Werte von  $\sqrt{\alpha}$  ist die physikalische Bedeutung der allgemeinen Lösung die Überlagerung einer ebenen Welle in  $+x$ -Richtung und einer ebenen Welle in  $-x$ -Richtung, also eine einlaufende und eine reflektierte Welle.

Durch Vergleich mit der Schrödinger-Gleichung erhalten wir für die beiden Bereiche:

$$\alpha_1 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p_1^2}{\hbar^2} = k_1^2 \quad \alpha_2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = \frac{p_2^2}{\hbar^2} = k_2^2$$

I.) Wir betrachten zunächst den Fall  $E > V_0$ , d.h.  $\alpha_2 > 0$  und  $\sqrt{\alpha_2}$ ,  $p_2$  und  $k_2$  sind reell

$$\begin{aligned} \phi_1 &= Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x} & \phi_2 &= Ce^{+ik_2x} + De^{-ik_2x} \\ & & D &= 0 \text{ weil es hier keine rücklaufende Welle geben kann!} \\ & & \phi_2 &= Ce^{+ik_2x} \end{aligned}$$

Die Konstanten  $A, B, C$  werden durch Stetigkeitsbedingungen ermittelt:

$$\begin{aligned} \phi_1(x=0) &= \phi_2(x=0) & \implies & A + B = C \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial x}(x=0) &= \frac{\partial \phi_2}{\partial x}(x=0) & \implies & ik_1A - ik_1B = ik_2C \quad \implies A - B = \frac{k_2}{k_1}C \\ B &= \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) A & C &= \left( \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right) A \end{aligned}$$

Lösung:

$$\phi(x) = \begin{cases} A \left( e^{+ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x} \right) & x \leq 0 \\ \text{einlaufend} & \text{reflektiert} \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{+ik_2x} & x > 0 \\ \text{durchgehend} \end{cases}$$

Für  $V_0 = 0$  gilt  $k_1 = k_2$  und es gibt keine Reflexion. Wie zu erwarten läuft die Welle ungestört weiter. Für  $V_0 > 0$  tritt stets eine reflektierte Welle auf.

Der Koeffizient  $A$  wird durch Normierung der Wellenfunktion bestimmt:

$$\int dV |\phi(x, y, z)|^2 = \iiint dx dy dz |\phi(x, y, z)|^2 = 1$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum anzutreffen, ist gleich 1. Für unser eindimensionales Problem wäre also:

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

II.) Jetzt diskutieren wir den quantenmechanisch interessanten Fall  $E < V_0$ . Die Lösung für  $x < 0$  ändert sich nicht, aber  $\alpha_2 < 0$ . Damit wird  $\sqrt{\alpha_2} = k_2$  imaginär. Wir setzen  $\sqrt{\alpha_2} = i\kappa$ , sodaß  $\kappa$  reell ist, und erhalten:

$$\phi_2(x) = Ce^{+ik_2x} = A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{+ik_2x} = A \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa} e^{-\kappa x}$$

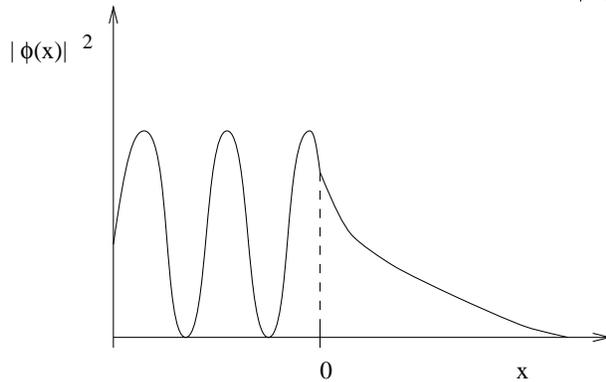
Offenbar dringt die Welle in die Potentialstufe ein. Für die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich  $x > 0$  ergibt sich

$$|\phi_2(x)|^2 = \phi^*(x)\phi(x) = |A|^2 \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2 e^{-2\kappa x} = |A|^2 \left| \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa} \right|^2 e^{-2\kappa x} = |A|^2 \frac{4k_1^2}{k_1^2 + \kappa^2} e^{-2\kappa x}$$

Mit  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$  erhält man für  $x > 0$ :

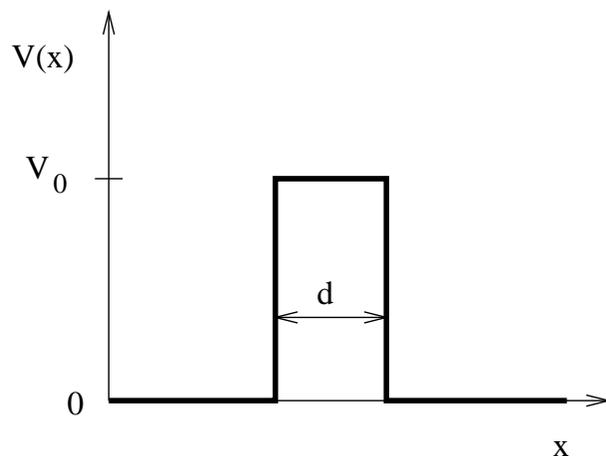
$$|\phi_2(x)|^2 = |A|^2 \frac{4E}{V_0} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}x} > 0$$

Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\phi_2(x)|^2$  für  $V_0 > E$ :



Im Bereich der Potentialstufe fällt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit exponentiell ab. Die Eindringtiefe ist  $1/\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . Die Eindringwahrscheinlichkeit hängt vom Verhältnis  $E/V_0$  ab. Vor der Potentialstufe bildet sich eine stehende Welle aus.

Ergänzung der Potentialstufe zum Potentialwall:



Klassisch kann das Teilchen für  $E < V_0$  die Potentialbarriere  $V_0$  nicht durchdringen. Das Beispiel der Potentialstufe zeigt aber, daß ein Eindringen in den Potentialwall erlaubt ist. Daher ist auch ein Fortschreiten der Welle jenseits der Barriere zuzulassen, d.h. wir erwarten, daß das Teilchen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit den Potentialwall durchdringen kann. Beachte: die Unschärferelation lässt für eine kurze Zeit die Verletzung des Energiesatzes zu:  $\Delta E \Delta t = \hbar$

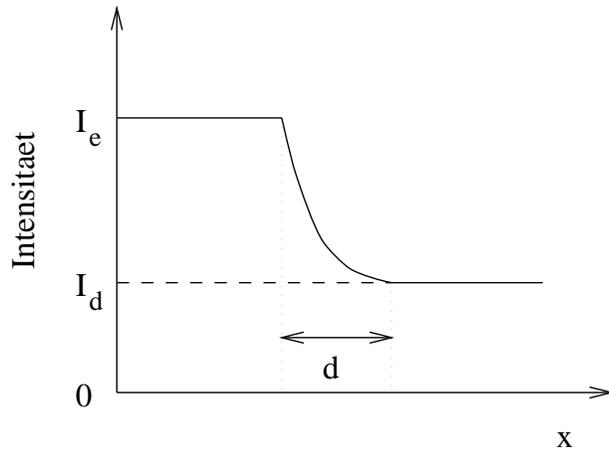
Die Rechnung erfolgt analog zur Potentialstufe: aufteilen in 3 Bereiche und benutzen der Stetigkeitsbedingungen an den Rändern der Barriere.

Ergebnis der Rechnung:

Die Intensität der durchgelassenen Welle fällt exponentiell mit der Wallbreite und der Differenz  $V_0 - E$  ab. Man erhält für das Verhältnis der einlaufenden  $I_e$  und durchgelassenen  $I_d$  Intensitäten

$$\frac{I_d}{I_e} \propto e^{-2\kappa d} = e^{-2\frac{d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$

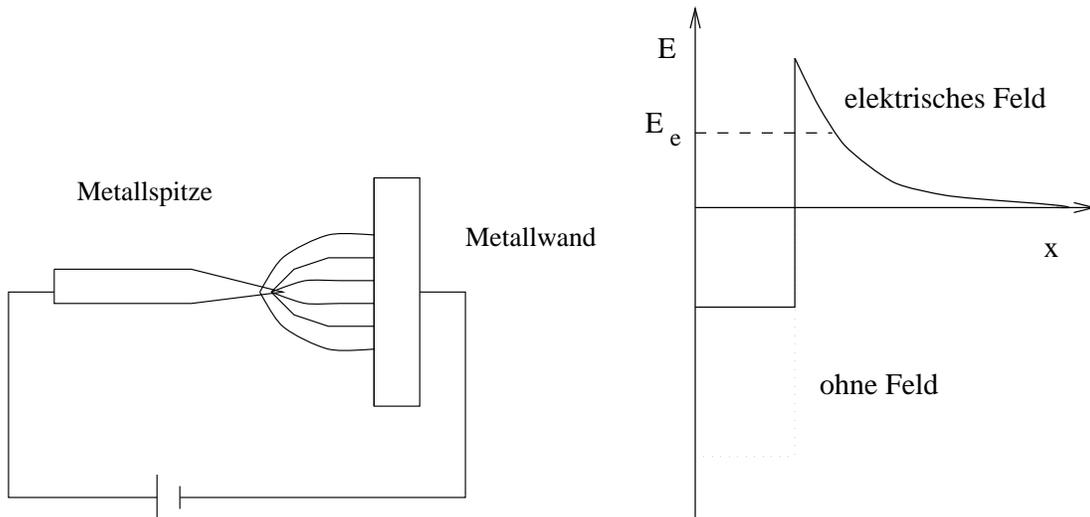
(für  $\kappa d \gg 1$ , d.h. große Wallbreite)



$\implies$  Teilchen mit der Energie  $E$  können eine Potentialbarriere  $V_0 > E$  durchdringen (durchtunneln).

Beispiele für den Tunneleffekt

a) Feldemission von Elektronen aus einer Metallspitze

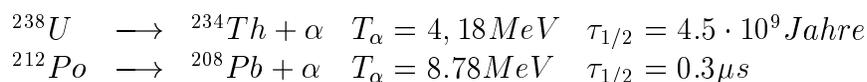


Die Elektronen sind in der Metallspitze gebunden (Potentialtopf). Durch Anlegen einer äußeren Spannung entsteht eine Potentialbarriere, die von den Elektronen durchtunnelt werden kann, so dass sie die Metallspitze verlassen können.

Anwendung: Rastertunnelmikroskop

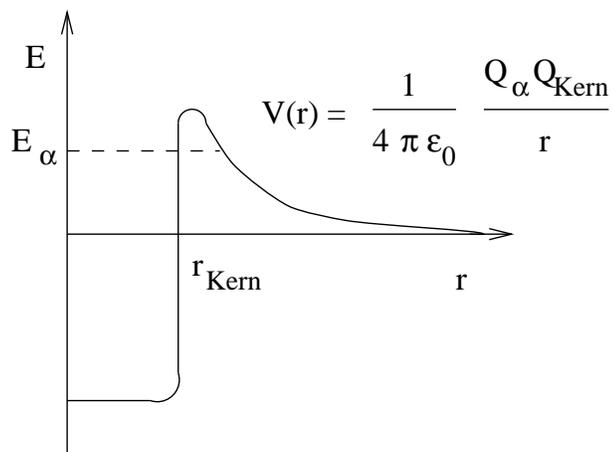
b)  $\alpha$ -Zerfall schwerer Kerne

Ein  $\alpha$ -Teilchen ist der Kern eines Heliumatoms und besteht aus zwei Protonen und zwei Neutronen (genauere Erklärung später). Dieser Kern ist besonders stabil. Viele schwere, instabile Kerne zerfallen durch Aussenden eines  $\alpha$ -Teilchens, z.B.

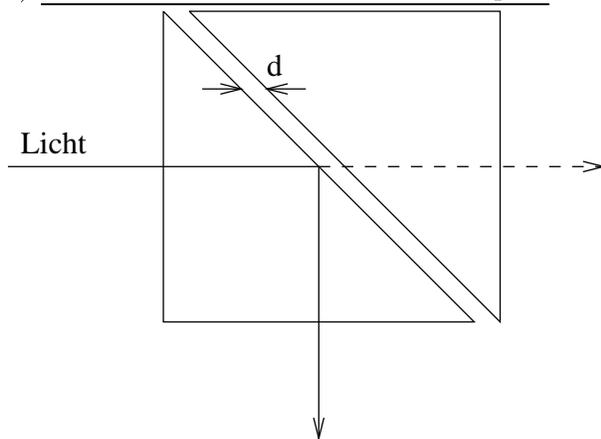


Die kinetische Energie der  $\alpha$ -Teilchen  $T_\alpha$  ist sehr ähnlich, aber die Lebensdauer der Kerne ist sehr unterschiedlich und variiert über viele Größenordnungen. Der Tunneleffekt liefert die Erklärung, siehe z.B. J.W. Rohlfs für eine quantitative Rechnung:

Im Kern können sich  $\alpha$ -Teilchen aus den Kernbausteinen (Protonen oder Neutronen) bilden. Auf Grund der anziehenden Kernkräfte befindet sich das  $\alpha$ -Teilchen in einem Potentialtopf. Außerhalb des Kerns gibt es ein Coulomb-Potential (abstoßende elektrische Kräfte). Die Tunnelwahrscheinlichkeit, und damit die Zerfallswahrscheinlichkeit des Kerns hängt exponentiell von der Energie der  $\alpha$ -Teilchen  $E_\alpha$  ab!



### c) Klassischer Tunneleffekt in der Optik



Der Tunneleffekt ist eine Konsequenz des Wellencharakters. Es gibt ihn auch in der Optik:

Licht wird in einem Prisma totalreflektiert. Nähert man ein zweites Prisma, so wird Licht durchgelassen, sobald der Abstand in die Größenordnung der Wellenlänge  $\lambda$  kommt, also  $\frac{d}{\lambda} \approx 1$  oder  $dk \approx 1$ . Vergleiche mit dem Term  $\kappa d$  im quantenmechanischen Fall.

## 2.3 Quantisierung der Energie

Wir betrachten das Beispiel eines Teilchens, das sich nur im Bereich  $0 \leq x \leq a$  aufhalten soll. Außerhalb soll die Aufenthaltswahrscheinlichkeit 0 sein. Das können wir durch folgendes Potential erreichen:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{Potentialkasten}$$

Die stationäre Schrödinger-Gleichung im Bereich  $0 \leq x \leq a$  lautet:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + [E - V(x)]\phi(x) = 0 \implies \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} E \phi(x) = 0$$

Mit der Abkürzung  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$  lautet die allgemeine Lösung:

$$\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Randbedingungen: wegen  $|\phi(x)|^2 = 0$  für  $x < 0$  und  $x > a$  gilt:

a)  $\phi(0) = 0 \implies A + B = 0$

Eingesetzt:  $\phi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin(kx)$

b)  $\phi(a) = 0 \Rightarrow 2iA \sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots$   
 $n = 0$  ist nicht möglich, da dann gilt:  $k = 0$  und  $\phi(x) = 0$  für alle  $x$ !

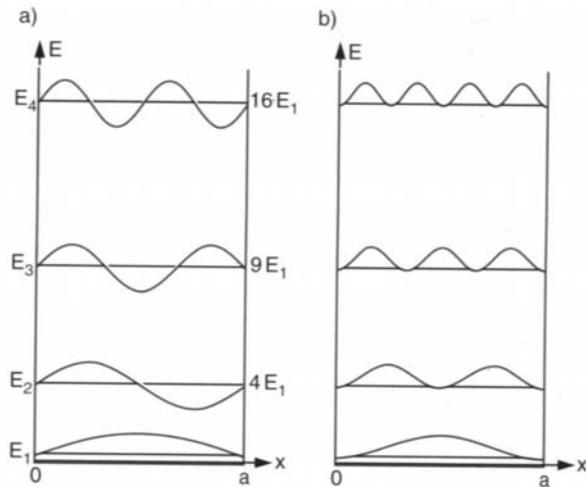
$\Rightarrow$  Nur die Wellenzahlen  $k_n = \frac{\pi}{a}n, n = 1, 2, 3, \dots$  sind erlaubt!

Die möglichen Energiewerte sind:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2$$

Die minimal mögliche kinetische Energie des Teilchens ist nicht Null!  
 Durch die Ortsbeschränkung (Heisenberg) ist der minimale Energiewert

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2}$$



**Abb. 4.16a,b.** Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$  des Teilchens

# 3 Der Aufbau der Atome

## 3.1 Die Größe der Atome

Der Atombegriff wurde schon im Altertum von Demokrit eingeführt (atomos = unteilbar). Allerdings gab es keine konkreten Vorstellungen über ihr Wesen. Den ersten experimentellen Hinweis auf die Existenz von Atomen lieferte die Chemie:

J. Dalton um 1800: Gesetz der konstanten Proportionen, z.B. Sauerstoffanteile in Stickstoff-Sauerstoffverbindungen.  $N_2O$ ,  $NO$ ,  $N_2O_3$ ,  $NO_2$  verhalten sich wie 1 : 2 : 3 : 4.

Die erste Größenabschätzung für Atome stammt aus der van der Waals Gleichung für reale Gase:

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right) (V - b) = RT \quad \text{b: Korrektur durch Eigenvolumen der Gasatome, entspricht 4-fachem Atomvolumen}$$

⇒ Radien der Atome  $\approx 1 - 2 \cdot 10^{-10} \text{m}$

Bestätigung durch z.B. Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallgittern. Heute kann man einzelne Atome „sehen“ und zwar in Rastertunnel- und Rasterkraftmikroskopen.

Entdeckung des Elektrons durch Thompson (1897):

- alle Atome enthalten Elektronen
- das Elektron ist  $\approx 2000$  mal leichter als das leichteste Atom
- Elektronen sind elektrisch negativ geladen, Atome aber neutral

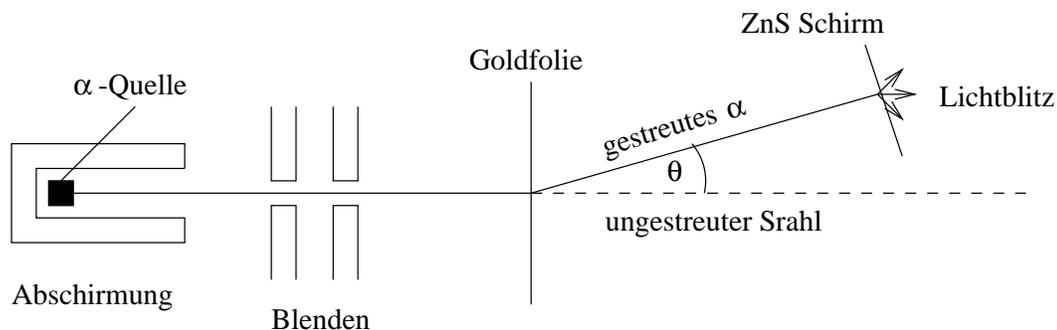
Erstes Atommodell von Thompson:

Atome sind Kugeln, die mit positiv geladener Materie gefüllt sind. Darin eingebettet sind die Elektronen.

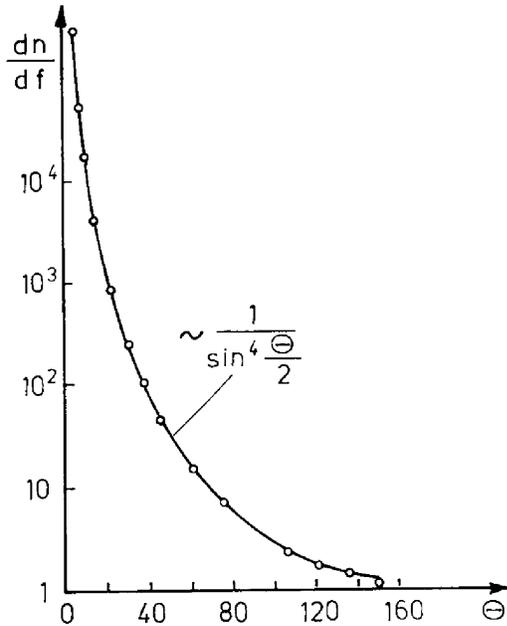
Problem: Schwere Atome sind kaum größer als leichte, z.B. ist das Uranatom 236 mal schwerer als das Wasserstoffatom!  
Wie ist die Materie im Atom verteilt?

## 3.2 Das Rutherford Streuexperiment

Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an den Atomen einer dünnen Goldfolie. Versuchsaufbau:

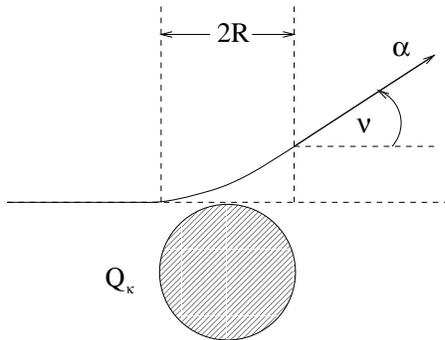
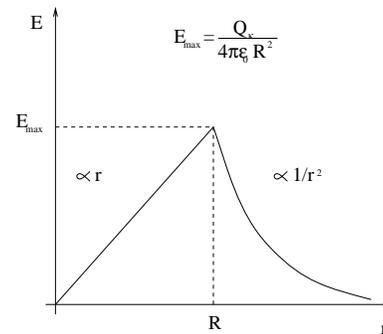


Versuchsergebnis: Zahl der detektierten  $\alpha$ -Teilchen als Funktion des Streuwinkels  $\theta$ :



Die meisten  $\alpha$ -Teilchen durchdringen die Goldfolie ungestört. Einige wenige werden jedoch stark abgelenkt, auch Rückstreuung ( $\theta = 180^\circ$ ) tritt auf. Die Zahl der gesteuerten  $\alpha$ -Teilchen folgt einem  $\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$  Verlauf. Das ist nicht verträglich mit der Vorstellung, dass das Atom eine homogen gefüllte, positiv geladene Kugel ist. Warum? Wir machen hier eine grobe Abschätzung des zu erwartenden Ablenkungswinkels:

Elektrisches Feld einer geladenen Kugel:



Wir nehmen an, dass die maximale Kraft  $F_{max} = Q_\alpha \cdot E_{max}$  über eine Strecke von zwei Atomradien auf das  $\alpha$ -Teilchen wirkt ( $Q_\alpha = +2e$ ). Das  $\alpha$ -Teilchen erhält dann den transversalen Impuls

$$\Delta p = F_{max} \cdot \Delta t = 2e \frac{Q_\kappa}{4\pi\epsilon_0 R^2} \frac{2R}{v_\alpha} = \frac{eQ_\kappa}{\pi\epsilon_0 R v_\alpha}$$

Die Geschwindigkeit des  $\alpha$ -Teilchens ist  $v_\alpha = \frac{p}{m_\alpha}$  und weil die kinetische Energie  $T_\alpha = \frac{p^2}{2m_\alpha} = \frac{v_\alpha^2 m_\alpha}{2} = 5MeV$  sehr viel kleiner ist als die Ruheenergie,  $m_\alpha c^2 = 3.7GeV$ , dürfen wir nicht-relativistisch rechnen. Für den Ablenkungswinkel erhalten wir dann

$$\theta \approx \frac{\Delta p}{p} = \frac{eQ_\kappa}{\pi\epsilon_0 R v_\alpha} \cdot \frac{1}{m_\alpha v_\alpha} = \frac{eQ_\kappa}{2\pi\epsilon_0 R T_\alpha}$$

Wenn man Zahlenwerte einsetzt (Gold  $Q_\kappa = 79e$ ,  $R = 10^{-10}m$ ) erhält man

$$\theta = 0,02^\circ!!!$$

Das Rutherford-Experiment ist in Übereinstimmung mit der Erwartung für die Streuung an einer punktförmigen Ladung, dem Atomkern. Das Experiment wird beschrieben durch die Rutherford'sche Streuformel (Herleitung in Kap. 3.3):

$$\frac{dn}{d\Omega} = n \cdot N \cdot d \cdot \left( \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{16\pi\epsilon_0 T_\alpha} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\frac{\theta}{2})}$$

- $n$  Zahl der  $\alpha$ -Teilchen
- $\Omega$  Raumwinkel
- $N$  Dichte der Goldatome
- $d$  Dichte der Folie

Rutherford'sches Atommodell:

Atome bestehen aus einem positiv geladenen Atomkern, dessen Radius sehr viel kleiner ist als der des Atoms. Praktisch die gesamte Masse ist im Atomkern konzentriert. Um diesen Kern sind Elektronen angeordnet.

Rutherford konnte nur eine obere Grenze für den Kernradius angeben. Bei einem zentralen Stoß ( $\theta = 180^\circ$ ) wird die kinetische Energie des  $\alpha$ -Teilchens vollständig in potentielle Energie umgewandelt und der kürzeste Abstand der  $\alpha$ -Teilchen zum Kern erreicht. Da die Streuformel auch für  $\theta = 180^\circ$  experimentell bestätigt wurde, muß der Atomkern kleiner als dieser Abstand sein:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{r} = T_\alpha \Rightarrow r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{T_\alpha}$$

Für den Kern des Goldatoms und mit  $T_\alpha = 5\text{MeV}$  folgt dann

$$r_{\text{Gold}} < 3 \cdot 10^{-14} \text{m}$$

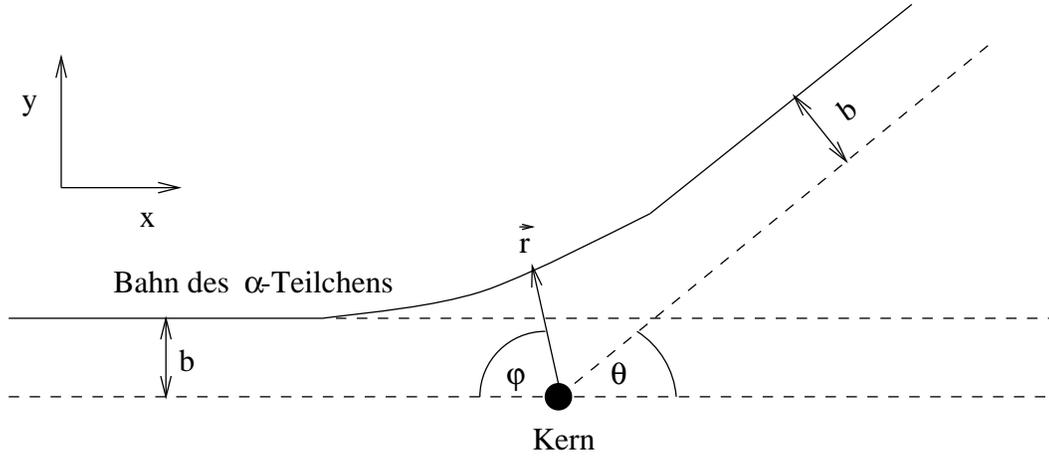
Eine andere Abschätzung für die maximale Größe der Atomkerne erhält man aus der de Broglie Wellenlänge der  $\alpha$ -Teilchen:  $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_\alpha T_\alpha}} = 6 \cdot 10^{-15} \text{m}$ . Um eine Struktur des Kerns zu sehen, braucht man „Licht“ mit einer Wellenlänge, die kleiner ist, als diese Struktur. Da Rutherford keine Struktur sah, folgt also  $r_{\text{Gold}} \leq 6 \cdot 10^{-15} \text{m}$ . Später stellte man bei der Streuung höherenergetischer Elektronen an Kernen fest, dass der Goldkern tatsächlich einen Radius von etwa  $r_{\text{Gold}} = 6 \cdot 10^{-15} \text{m}$  hat.

Merke:  $r_{\text{Atom}} \approx 10^{-10} \text{m}$     $r_{\text{Kern}} \approx 10^{-15} \text{m}$

Atom- und Kernradien sind nicht scharf definiert. Atomradien sind gegeben durch die Verteilung der Bahnen, auf denen die Elektronen die Kerne umkreisen, Kernradien sind bestimmt durch die Verteilung der Kernbausteine: Protonen (Ladungsverteilung) und Neutronen. Diesen Fragen werden wir uns im Folgenden widmen.

### 3.3 Herleitung der Rutherford'schen Streuformel

Wir betrachten die Ablenkung eines  $\alpha$ -Teilchens an einem punktförmigen Kern der Ladung  $Q_\kappa = Ze$ . Wir nehmen an, dass der Kern viel schwerer ist als das  $\alpha$ -Teilchen und sich nicht bewegt:



Zunächst berechnen wir die Abhängigkeit des Streuwinkels  $\theta$  vom Stoßparameter  $b$  (= minimaler Abstand zum Kern, wenn das Teilchen nicht gestreut werden würde). Die Coulombkraft  $\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{r^2} \frac{\vec{r}}{r}$  hat die gleiche Form, wie die Gravitationskraft. Deshalb bewegt sich das  $\alpha$ -Teilchen auf einer Hyperbel mit dem Kern im Brennpunkt. Für die Kraft in  $y$ -Richtung auf das  $\alpha$ -Teilchen am beliebigen Bahnpunkt  $\vec{r}$  gilt:

$$F_y = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{r^2} \cdot \sin \varphi = m_\alpha \frac{dv_y}{dt} \quad v_y: \text{Geschwindigkeit des } \alpha\text{-Teilchens in } y\text{-Richtung}$$

Wir benutzen jetzt die Drehimpulserhaltung. Vor dem Stoß, d.h. bei  $x = -\infty$ , hat das  $\alpha$ -Teilchen die Geschwindigkeit  $v_0$  und relativ zum Kern den Drehimpuls  $L = m_\alpha v_0 b$ . An einem beliebigen Bahnpunkt ist  $L = m_\alpha r^2 \frac{d\varphi}{dt} = m_\alpha v_0 b$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} = \frac{1}{v_0 b} \frac{d\varphi}{dt}$$

Eingesetzt erhält man: 
$$\frac{dv_y}{dt} = \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_\alpha v_0 b} \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt}$$

Wir integrieren über den gesamten Zeitraum des Stoßvorganges. Es gilt:

vor dem Stoß:  $\varphi = 0$  und  $v_y = 0$

nach dem Stoß:  $\varphi = \pi - \theta$  und  $v_y = v_0 \cdot \sin \theta$ ,

denn wegen der Energieerhaltung ist nach dem Stoß wieder  $T_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha v_0^2$

$$\int \frac{dv_y}{dt} dt = v_0 \sin \theta$$

$$\int \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} dt = \int \sin \varphi d\varphi = -\cos(\pi - \theta) + \cos 0 = 1 + \cos \theta$$

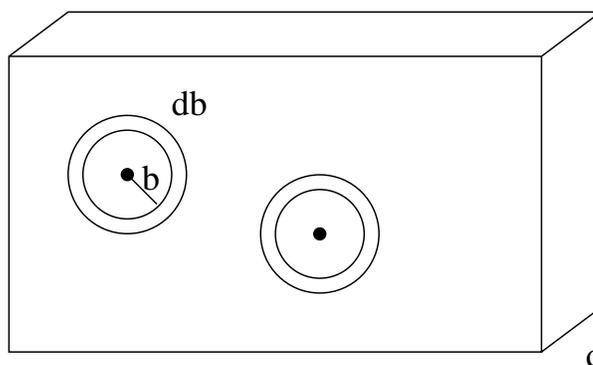
$$\Rightarrow \frac{\sin \theta}{1 + \cos \theta} = \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_\alpha v_0^2 b} = \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{8\pi\epsilon_0 T_\alpha} \frac{1}{b}$$

$$= \tan \frac{\theta}{2}$$

$$\Rightarrow b = \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{T_\alpha} \cot \frac{\theta}{2}$$

Das ist ein eindeutiger Zusammenhang zwischen  $b$  und  $\theta$ . Der Streuwinkel  $\theta$  wächst mit abnehmendem Stoßparameter  $b$ .

Der Stoßparameter  $b$  ist experimentell nicht Stoß für Stoß zugänglich. Wir müssen unser Streuexperiment daher statistisch beschreiben. Dazu führen wir den wichtigen Begriff des Wirkungsquerschnitts ein. Wir denken uns die Goldfolie aufgebaut aus Streuzentren (Targets), um die man für jeden Stoßparameter  $b$  einen Kreis der Breite  $db$  konstruieren kann. Die  $\alpha$ -Teilchen fliegen auf die Targets und wenn sie einen



Fläche F

Ring ( $b, db$ ) treffen, werden sie um den Streuwinkel  $\theta(b)$  abgelenkt. Die Fläche des Ringes  $d\sigma$  heißt differentieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma = 2\pi b db$

Der Wirkungsquerschnitt hat die Einheit einer Fläche, also  $m^2$ . Man benutzt in der Kern- und Elementarteilchenphysik die Einheit  $1 \text{ barn} = 1b = 10^{-28} m^2$ , bzw.  $mb, \mu b, \dots$

Die Gesamtfläche aller Ringe ( $b, db$ ) in der Folie ist

$$d\Sigma = N \cdot F \cdot d \cdot d\sigma \quad \text{mit } N = \text{Zahl der Kerne/Volumen}$$

Falls  $n$   $\alpha$ -Teilchen zufällig verteilt auf die Fläche F treffen, ist die Zahl der  $\alpha$ -Teilchen, die zufällig den Stoßparameter  $b$  haben

$$dn = \frac{d\Sigma}{F} \cdot n = n \cdot N \cdot d \cdot 2\pi \cdot b \cdot db$$

Einsetzen von  $b$  und mit

$$\frac{db}{d\theta} = -\frac{Q_\alpha Q_\kappa}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{\epsilon_0} \frac{1}{T_\alpha} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

Wir ignorieren das negative Vorzeichen, weil uns der Betrag von  $db$  interessiert!

folgt

$$dn = n \cdot N \cdot d \cdot 2\pi \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{T_\alpha} \cot \frac{\theta}{2} \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{T_\alpha} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta$$

$$\frac{dn}{d\theta} = n \cdot N \cdot d \cdot \pi \left( \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{T_\alpha} \right)^2 \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin^3 \frac{\theta}{2}}$$

Diese  $dn$   $\alpha$ -Teilchen werden auf die Fläche  $df = 2\pi(r \sin \theta)r d\theta = 2\pi r^2 \sin \theta d\theta$  gestreut. Wir führen noch den Raumwinkel  $\Omega$  ein durch normieren auf  $r^2$

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$$

Jetzt schreiben wir die Winkelfunktion um auf  $\frac{\theta}{2}$

$$\sin \theta = 2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$$

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

und erhalten die Rutherford'sche Streuformel:

$$\frac{dn}{d\Omega} = n \cdot N \cdot d \left( \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{16\pi\epsilon_0 T_\alpha} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

Da wir nur einen Streuprozess pro  $\alpha$ -Teilchen zugelassen haben, gilt diese Formel nur für dünne Folien (keine Mehrfachstreuung).

Die Rutherford-Formel divergiert für  $\theta \rightarrow 0$ , d.h. für  $b \rightarrow \infty$ . Hier ist die Gleichung aber nicht mehr anwendbar, da für große Stoßparameter  $b$  die Ladung des Kerns durch die Elektronen abgeschirmt wird. Abweichungen treten auch für  $\theta \rightarrow 180^\circ$  auf, wenn die Energie der  $\alpha$ -Teilchen ausreicht, die Substruktur der Kerne aufzulösen.

Ausgedrückt als differentiellen Wirkungsquerschnitt läßt sich die Rutherford'sche Formel auch unabhängig von den Versuchsbedingungen  $n, N, d$  schreiben

$$dn = n \cdot N \cdot d \cdot d\sigma$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{Q_\alpha Q_\kappa}{16\pi\epsilon_0 T_\alpha} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

### 3.4 Atomspektren

Wir wenden uns nun der Aufklärung der Bahnen der Elektronen in Atomen zu. Dabei spielt die Untersuchung von Atomspektren eine entscheidende Rolle. Zunächst beschreiben wir kurz die experimentelle Anordnung:

Prismenspektralapparat:

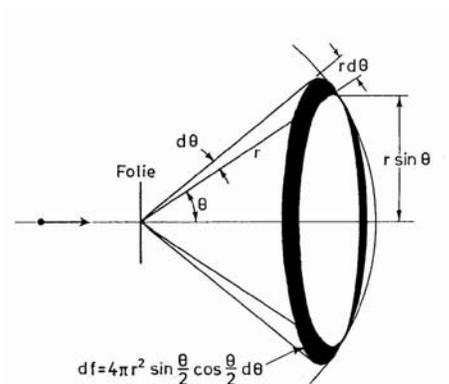
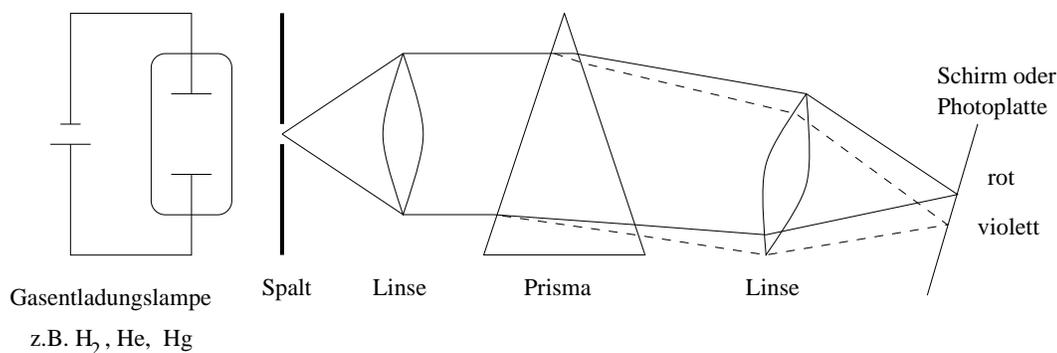
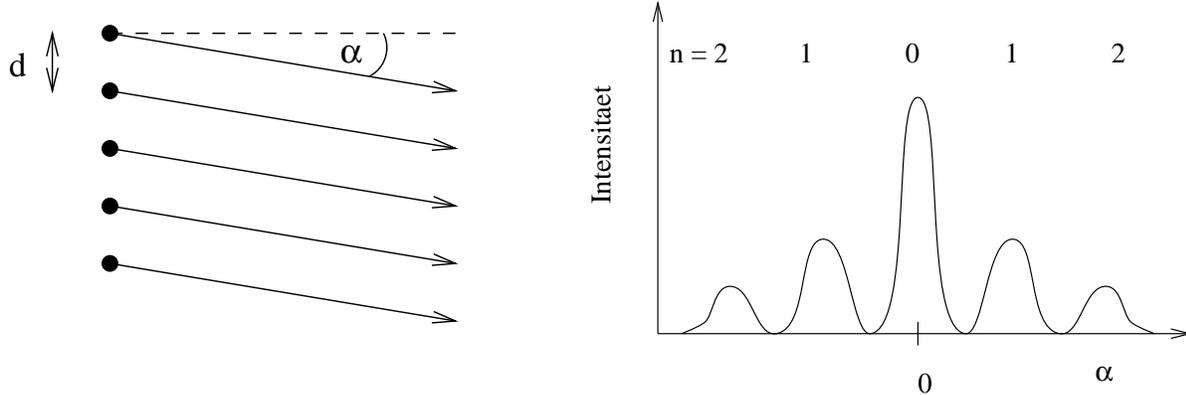


Fig. 2.6: Zur Definition des Raumwinkels.

Mit den beiden Linsen wird ein Bild des Spalts auf dem Schirm oder der Photoplatte erzeugt. Da der Brechungsindex von der Wellenlänge  $\lambda$  abhängt,  $n = n(\lambda)$  zerlegt das Prisma das Licht der Lampe. Kurze Wellenlängen (violetteres Licht) werden stärker abgelenkt als große (blaues Licht).

Anstelle des Prismas benutzt man auch Gitter:



Konstruktive Interferenz falls  
 $d \sin(\alpha) = n\lambda \quad n = 0, 1, 2, \dots$

Intensitätsverteilung bei Beleuchtung mit  
 einer Wellenlänge

Atome eines stark verdünnten Gases werden durch elektrische Entladung zum Leuchten angeregt. Man findet ein Spektrum, das aus einzelnen Linien besteht. Das steht im Gegensatz zu Festkörpern, die ein kontinuierliches Spektrum aussenden, z.B. bei Erwärmung (schwarzer Strahler).

- Das Linienspektrum ist charakteristisch für ein Gas, allgemein für jedes chemische Element
- Emissions- und Absorptionslinien sind (teilweise) identisch

## Beispiele:

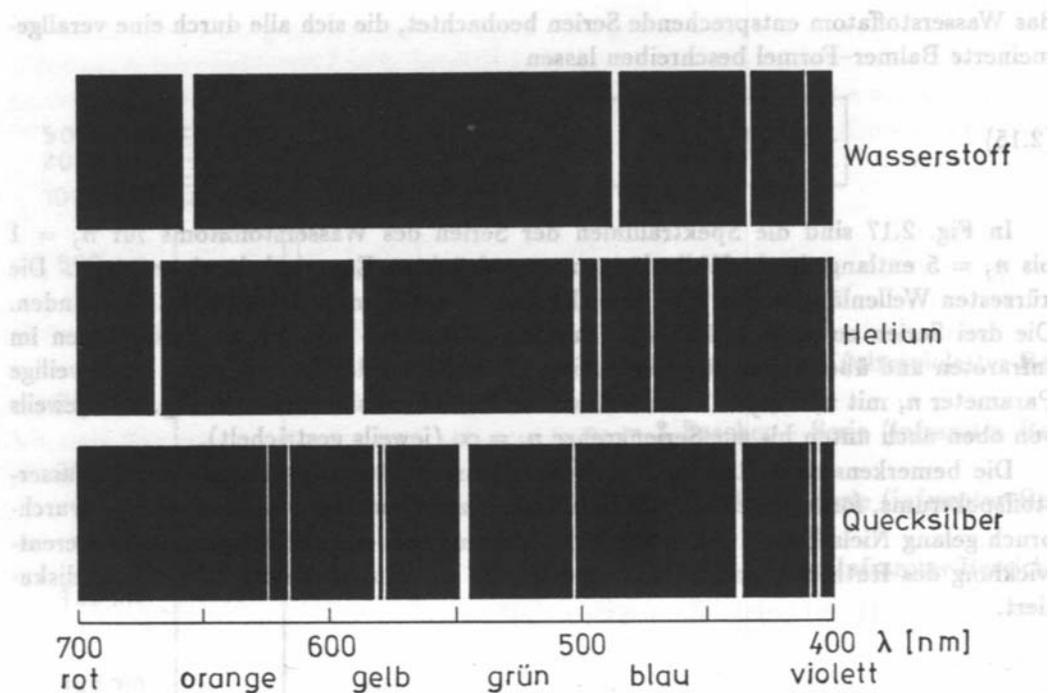


Fig. 2.14: Emissionslinienspektren von Atomen.

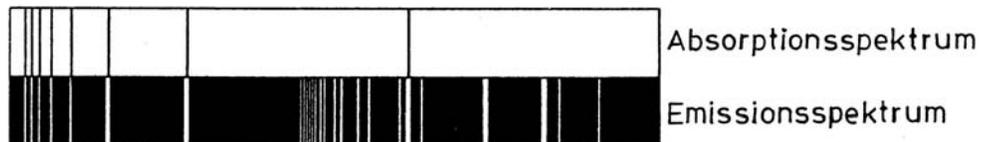


Fig. 2.16: Emissions- und Absorptionsspektrum von Natriumdampf.

Das Linienspektrum ist wie ein Fingerabdruck, unverwechselbar für jedes chemische Element, d.h. Atom. Spektralanalysen haben sehr vielfältige Anwendungen, z.B. kann man damit die chemische Zusammensetzung sehr weit entfernter Sterne bestimmen!

### Das Wasserstoffspektrum

Wasserstoff ist das leichteste und einfachste Atom: 1 Elektron und 1 Proton.

Johann Balmer fand 1885 empirisch eine Gesetzmäßigkeit für Linien im sichtbaren Bereich des Wasserstoffspektrums

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, \dots \quad \text{Balmer-Serie}$$

$R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  ist die Rydberg-Konstante

Später wurden im Infraroten und Ultravioletten weitere Serien entdeckt:

$$\begin{aligned} \text{UV: } \frac{1}{\lambda} &= R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3, \dots \quad \text{Lyman-Serie} \\ \text{IR: } \frac{1}{\lambda} &= R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, \dots \quad \text{Paschen-Serie} \\ \frac{1}{\lambda} &= R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6, \dots \quad \text{Brackett-Serie} \\ \frac{1}{\lambda} &= R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 6, 7, \dots \quad \text{Pfund-Serie} \end{aligned}$$

⇒ Eine Theorie des Wasserstoffatoms muss die magische Formel erklären:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad m, n = 1, 2, 3, \dots \quad m < n$$

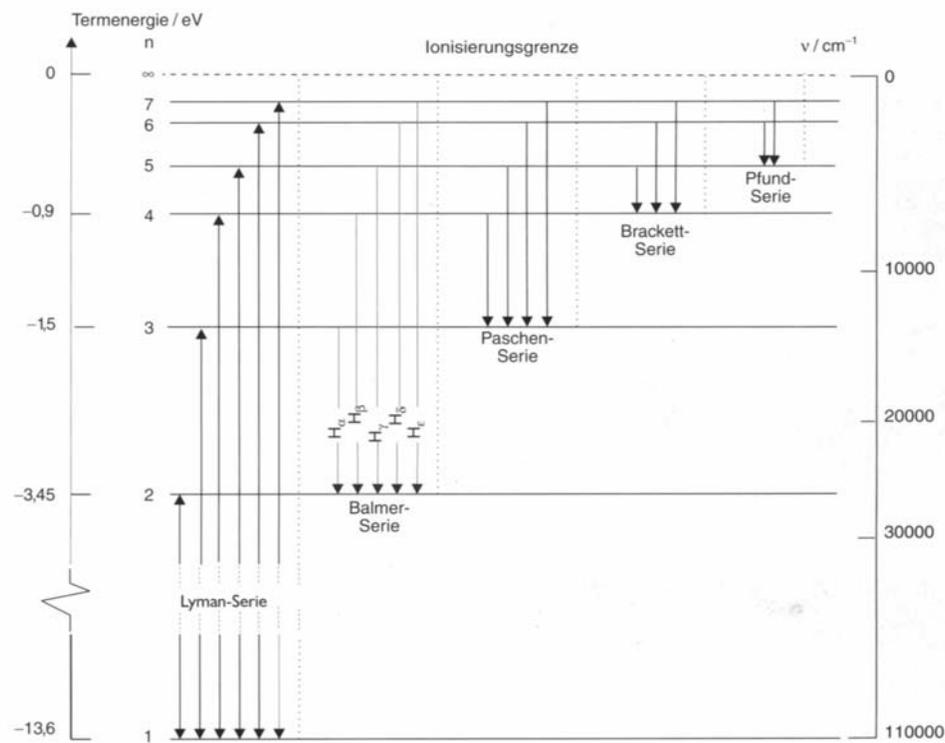


Abb. 3.27. Vereinfachtes Termschema des H-Atoms mit den verschiedenen Emissions- bzw. Absorptionsserien

### 3.5 Das Bohrsche Atommodell

Niels Bohr (1913): Planetenmodell des Atoms

Die Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen (oder Ellipsen) um den Kern in dessen Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad Z: \text{Kernladungszahl (Wasserstoff } Z = 1)$$

Postulate:

1. Die Elektronen laufen auf den Kreisbahnen ohne Energie abzustrahlen  
Klassisch: eine beschleunigte Ladung strahlt elektromagnetische Wellen und damit Energie ab. Elektronen würden nach  $\approx 10^{-16} \text{ s}$  in den Atomkern fallen!

- Es sind nur bestimmte, diskrete Bahnen erlaubt.  
Die erlaubten Radien folgen aus der Quantelung des Drehimpulses  
 $L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$  Hauptquantenzahl
- Übergänge erfolgen unter Aussendung elektromagnetischer Wellen bzw. durch Absorption:  
 $\Delta E = h\nu$   
Liefert die Erklärung für die diskreten Atomspektren.

Wir berechnen aus den Bohrschen Postulaten die erlaubten Bahnen und Energieniveaus des Wasserstoffatoms.

Annahmen:  $m_k \gg m_e$ ,  $E \ll m_e c^2$ , Kreisbahnen

Zentrifugalkraft = Coulombkraft

$$m_e \omega^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2}$$

Drehimpulserhaltung:

$$L = m_e \omega r^2 = n\hbar \quad \Rightarrow \quad \omega = \frac{n\hbar}{m_e r_n^2}$$

Eingesetzt folgt:

$$m_e \left( \frac{n\hbar}{m_e r_n^2} \right)^2 r_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{n^2 \hbar^2}{m_e r_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\boxed{r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} n^2}$$

Der 1. Bohrsche Radius ist

$$r_1 = r_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} = 0,53 \cdot 10^{-10} m \quad \text{Radius des H-Atoms}$$

Das Bohrsche Modell erklärt die Größe der Atome!

Energieniveaus:

$E_n = T + V$  T: kinetische Energie

$$= \frac{1}{2} m_e \omega^2 r_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n} \quad \text{Einsetzen des Kräftegleichgewichtes}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n} \quad \text{Virialsatz } T = -\frac{1}{2}V !$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n} \quad \text{Einsetzen von } r_n \text{ ergibt dann:}$$

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 m_e \frac{1}{n^2}} = -13,6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Mit  $E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$  schreiben wir  $\frac{1}{\lambda} = \frac{-E_n}{hc} = -R \frac{1}{n^2}$  und finden für R

$$R = \frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1,097 \cdot 10^7 m^{-1}$$

Das Bohrsche Modell erklärt die Linien des Wasserstoffspektrums!

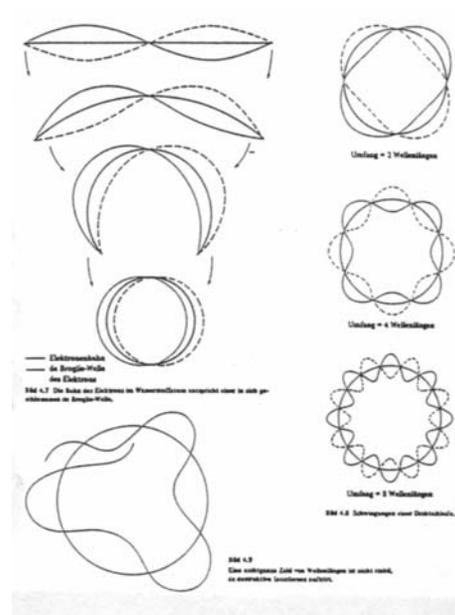
Für den genauen Wert von R muss man die Mitbewegung des Kerns berücksichtigen und die Elektronenmasse  $m_e$  durch die reduzierte Masse  $m' = \frac{m_e \cdot m_k}{m_e + m_k}$  ersetzen.

Nochmals zurück zur Quantelung des Drehimpulses. Die Beschreibung des Elektrons als Teilchenwelle liefert die Erklärung.

$$n\hbar = L = pr = \frac{h}{\lambda} r = \frac{\hbar}{\lambda} 2\pi r \quad \Rightarrow \quad \boxed{2\pi r = n\lambda}$$

Nur solche Bahnen sind erlaubt, deren Umfang ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge des Elektrons ist (stehende Wellen). Alle anderen Wellenlängen interferieren weg und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons auf solchen Bahnen verschwindet.

Die Wellennatur des Elektrons bestimmt die Größe der Atome!



Die Feinstrukturkonstante  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137} \quad \text{dimensionslos!}$$

Sie bestimmt die Stärke elektromagnetischer Wechselwirkungen von Elementarteilchen (siehe unten). Sie heißt auch Kopplungskonstante der Quantenelektrodynamik.

Damit können wir für die Energieniveaus des H-Atoms schreiben:

$$E_n = -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 \frac{1}{n^2}$$

### 3.6 Wasserstoffähnliche Spektren

Das Bohrsche Atommodell ist nicht für komplizierte Atome mit Kernladungszahl  $Z > 1$  geeignet. Dort sind  $Z$  Elektronen an den Kern gebunden (Vielkörperproblem!). Das Bohrsche Modell lässt sich aber anwenden auf Atome, die bis auf ein Elektron ionisiert sind. Beispiele  $He^+$ ,  $Li^{++}$ ,  $C^{5+}$  usw. Um die erlaubten Bahnen auszurechnen, muss man die Ladung des Wasserstoffkerns

( $+1e$ ) ersetzen durch  $+Ze$ . Daraus folgt

$$E_n = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \frac{Z^2}{n^2} = -13,6\text{eV} \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

Beispiel Uran  $Z = 92$ :  $E_1 = -13,6\text{eV} \cdot 92^2 = -115\text{keV}$

Sehr hohe Bindungsenergie auf der innersten Bahn (Röntgenstrahlung!)

Das Bohrsche Modell ist auch anwendbar auf:

- Myonische Atome

Das Myon  $\mu$  ist ein instabiles Elementarteilchen mit genau den gleichen Eigenschaften wie das Elektron, nur mit viel höherer Masse:  $m_\mu = 106\text{MeV}/c^2 \approx 200m_e$ . In myonischen Atomen wird das Elektron durch ein Myon ( $\mu^-$ ) ersetzt.

$$r_n(\mu) = \frac{1}{200}r_n(e) \quad E_n(\mu) = 200E_n(e)$$

- Positronium

Wasserstoffähnliches Atom, das aus einem Elektron ( $e^-$ ) und einem Positron ( $e^+$ ) gebildet wird. Das Positron ist das Antiteilchen des Elektrons mit gleicher Masse, aber umgekehrter Ladung  $+e$ . Positronium ist instabil, weil sich Elektron und Positron vernichten:

$$e^+ + e^- \rightarrow \gamma\gamma \quad E_\gamma = 511\text{keV}$$

# 4 Quantentheorie der Atome

## 4.1 Lösung der Schrödinger-Gleichung für den Wasserstoff

Unzulänglichkeiten des Bohrschen Modells:

- klassisches Bild der Elektronen als Teilchen
- feste Bahnen und scharfe Energien und Impulse des Elektrons, im Widerspruch zur Unschärferelation
- ad hoc Postulate
- versagt für komplizierte Atome  $Z > 1$
- beschreibt selbst Linienspektren des Wasserstoffs nicht vollständig

Wir benötigen eine quantenmechanische Beschreibung der Atome unter Berücksichtigung der Wellennatur der Elektronen

⇒ **Schrödinger-Gleichung**

- beinhaltet die Quantisierung der Energieniveaus
- liefert zusammen mit dem Pauli-Prinzip (siehe unten) den Schlüssel für das Verständnis des Atomaufbaus und des Periodensystems
- allerdings ist das Vielkörperproblem für  $Z > 1$  nicht exakt lösbar

Stationäre Schrödinger-Gleichung für den Wasserstoff:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(\vec{r}) + [E - V(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \text{ (Coulomb)}$$

Das Potential hängt nur vom Abstand  $r = |\vec{r}|$  ab (kugelsymmetrisches Potential), deshalb führen wir Kugelkoordinaten ein:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi & y &= r \sin \vartheta \sin \varphi & z &= r \cos \vartheta \\ \Psi &= \Psi(r, \vartheta, \varphi) & \vartheta &: \text{Polarwinkel} & \varphi &: \text{Azimutalwinkel} \end{aligned}$$

Der Nullpunkt des Koordinatensystems liegt im Schwerpunkt des Systems Kern-Elektron. Wegen  $m_K \gg m_e$  liegt dieser sehr nah am Kern. Die genauere Rechnung erfordert wieder Ersetzung der Elektronenmasse durch die reduzierte Masse.

Die Lösung dieser Gleichung wird in Büchern vorgeführt (z.B. Otter-Honecker, Demtröder oder Rohlf). Wir wollen hier nur das Ergebnis diskutieren.

Auf Grund des kugelsymmetrischen Potentials kann man folgenden Lösungsansatz machen:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \phi(\varphi) \cdot \Theta(\vartheta)$$

Bei der Separation der Differentialgleichungen treten Separationskonstanten auf, die wir mit  $l(l+1)$  und  $m_l$  bezeichnen.

Beispiel Radialgleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \left[ E - V(r) - \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}}_{\text{Rotationsenergie } E_{rot} = \frac{L^2}{2I}} \right] \frac{R}{r} = 0$$

Mit  $I = m_e r^2$  für das Trägheitsmoment erhält man

$$\boxed{L^2 = l(l+1)\hbar^2} \quad \text{Drehimpuls (vergl. Bohr: } L^2 = n^2 \hbar^2 \text{ für eine angenommene Kreisbahn)}$$

Die Größe  $l$  ist eine positive ganze Zahl, die von  $0, 1, \dots, (n-1)$  läuft und  $n$  ist die Quantenzahl, die mit der Gesamtenergie der Bahn verknüpft ist, wie im Bohrschen Atommodell:

Azimuthalgleichung:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2} + m_l^2 \phi = 0 \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad \text{Wellenfunktion muss periodisch sein in } \varphi$$

Nach diesen Vorbemerkungen ist es plausibel, dass die Lösungen der Schrödinger-Gleichung, d.h. die möglichen Wellenfunktionen  $\Psi$ , von den drei Quantenzahlen  $n, l, m_l$  abhängen:

$$\boxed{\Psi(r, \vartheta, \varphi) = \Psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)}$$

- Hauptquantenzahl  $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$   
gibt für wasserstoffähnliche Atome die Energie des Elektrons an, wie im Bohrschen Modell:  
$$E_n = -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 \frac{1}{n^2}$$
  
Bei Atomen mit mehreren Elektronen ist das nur eine Näherung.
- Bahndrehimpulsquantenzahl  $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$   
bestimmt den Drehimpuls des Elektrons auf seiner Bahn  
(genauer: der zugeordneten Wellenfunktion)
- Magnetische Quantenzahl  $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$   
gibt die Komponente des Drehimpulses entlang einer äußeren Achse an, z.B. in Richtung eines äußeren Magnetfeldes.

Diese Quantenzahlen charakterisieren die Bahn (Wellenfunktion) eines Elektrons im Atom (gilt auch für  $Z > 1$ ).

Wieviele Zustände gibt es zu jeder Hauptquantenzahl  $n$ ?

$$\begin{aligned} l &= 0, & 1, & 2, & \dots, & (n-1) \\ m_l &= 0, & -1, 0, +1, & -2, -1, 0, +1, +2, & \dots, & -(n-1), \dots, -1, 0, +1, \dots, +(n-1) \end{aligned}$$

d.h.  $2l + 1$  Zustände pro  $l$ -Wert und damit insgesamt  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$  Zustände für jeden Energiewert  $E_n$  (Entartung).

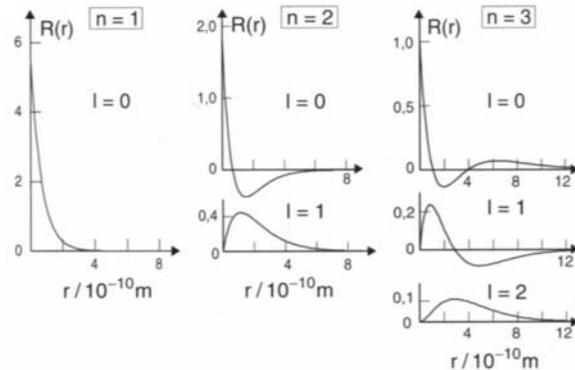
Wie sehen die Funktionen  $\Psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$  aus?

Für  $n \leq 3$  und der Abkürzung  $a_0 = r_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m_e}$  lauten sie:

**Tabelle 5.2.** Die normierten vollständigen Eigenfunktionen eines Elektrons im Coulombpotential  $V(r) = -Z \cdot e^2 / (4\pi\epsilon_0 r)$

$n$	$l$	$m$	Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \vartheta$
2	1	$\pm 1$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \vartheta$
3	1	$\pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{81\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3\cos^2 \vartheta - 1)$
3	2	$\pm 1$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	$\pm 2$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$

Graphische Darstellung des Radialteils  $R = R_{n,l}(r)$  (für  $Z = 1$ ):



**Abb. 5.3.** Die Radialfunktionen  $R_{n,l}(r)$  des Wasserstoffatoms für die Hauptquantenzahlen  $n = 1, 2, 3$ . Die Ordinate ist in Einheiten von  $10^{-8} \text{ m}^{-3/2}$  aufgetragen

NB: Die Lösungen  $\Psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$  sind Produkte von Laguerre-Polynomen  $R_{n,l}(r)$  und Kugelflächenfunktionen  $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ .

Erstaunlicherweise hängt für ein Ein-Elektronensysteme die Energie nicht vom Drehimpuls ab, d.h. nur von  $n$  und nicht von  $l$ . Das gilt allgemein für Potentiale der Form  $V \propto \frac{1}{r}$ .

Für  $n = 1$  ist der Bahndrehimpuls Null, d.h. das Elektron kreist nicht um den Kern (radial-symmetrische Aufenthaltswahrscheinlichkeit).

Für  $n = 1$  ist das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei  $r = r_B$ . Die Bahn des Elektrons ist aber diffus!

Beweis: Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Volumen  $dV$ :

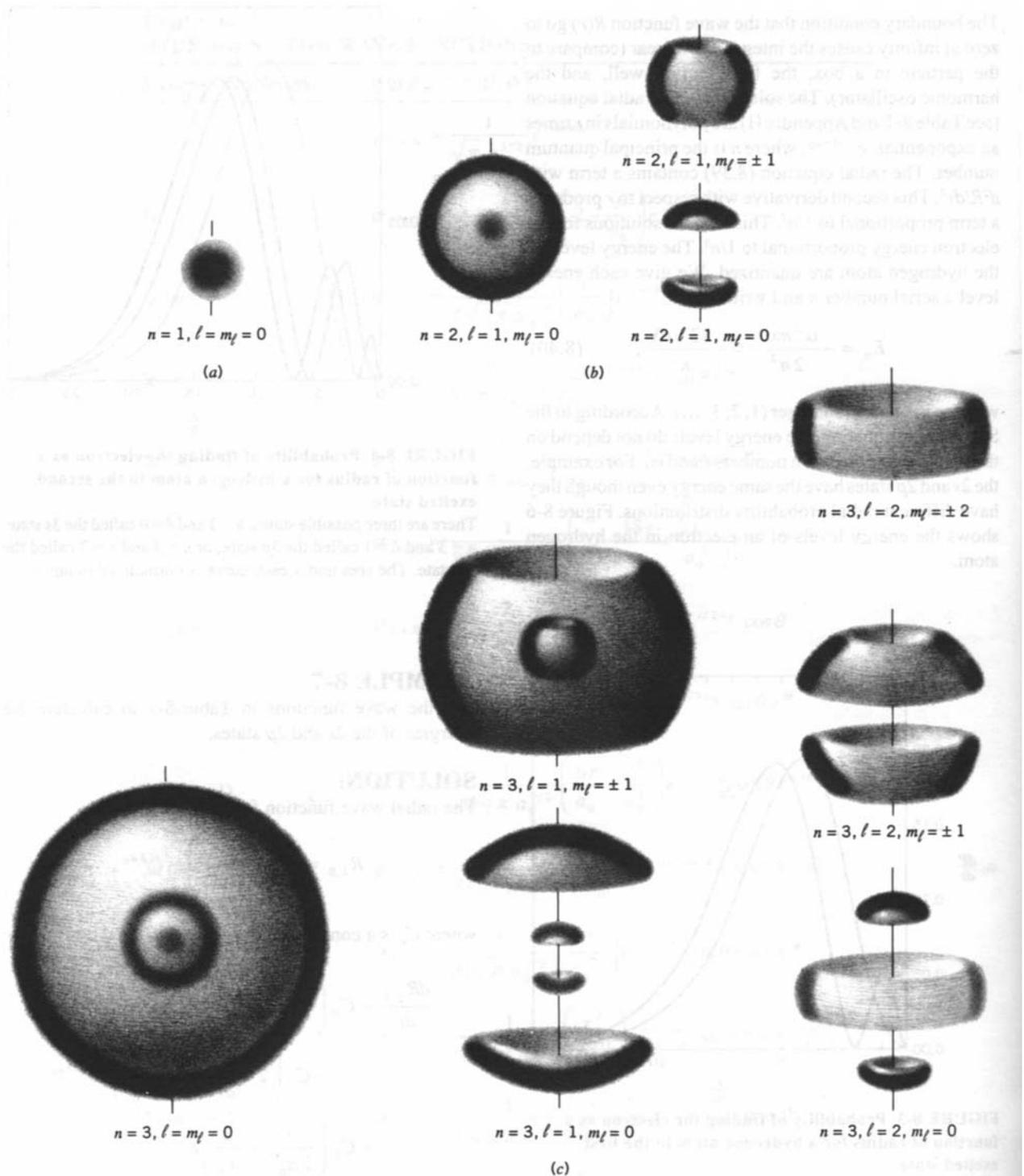
$$|\Psi|^2 dV = |\Psi|^2 dx dy dz = |\Psi|^2 r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi \quad (\text{Kugelkoordinaten})$$

Da  $\Psi = \Psi(r)$  können wir über  $\vartheta$  und  $\varphi$  integrieren

$$P(r) dr = |\Psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{1}{\pi r_B^3} e^{-\frac{2r}{r_B}} 4\pi r^2 dr = \frac{4}{r_B^3} r^2 e^{-\frac{2r}{r_B}} dr$$

$$\frac{d}{dr} P(r) = \frac{4}{r_B^3} \left[ 2r - \frac{2r^2}{r_B} \right] e^{-\frac{2r}{r_B}} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \text{Maximum bei } r = r_B$$

Graphische Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi|^2$  des Elektrons im Wasserstoffatom:



**FIGURE 8-5 Sketches of  $|\psi|^2$  for the hydrogen atom in three dimensions:** (a) the  $n = 1$  state, (b) the  $n = 2$  states, and (c) the  $n = 3$  states. After R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, Wiley (copyright © 1985).

Die Quantenzahlen  $l$  und  $m_l$  werden auch häufig mit lateinischen bzw. griechischen Buchstaben bezeichnet ( $\rightarrow$  Periodensystem)

$l = 0$	s sharp	$ m  = 0$	$\sigma$
$l = 1$	p principel	$ m  = 1$	$\pi$
$l = 2$	d diffuse	$ m  = 2$	$\delta$
$l = 3$	f fundamental	$ m  = 3$	$\varphi$
$l = 4, 5, \dots$	g, h, ...	$ m  = 4$	$\gamma$

(Namen stammen aus der Spektroskopie)

Darstellung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms:

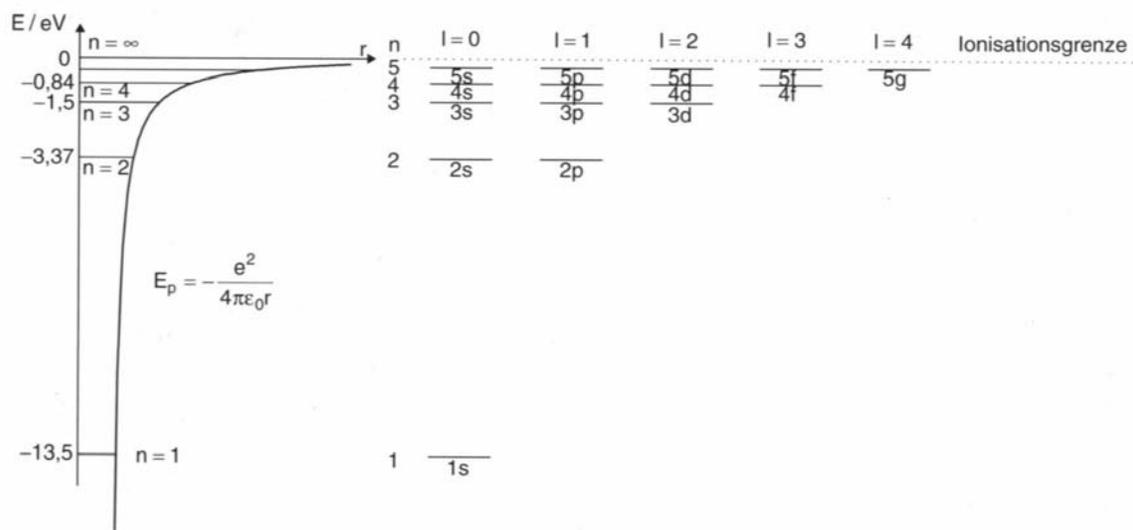


Abb. 5.5. Termschema des H-Atoms entsprechend den Energiewerten in (5.18). Die Energieskala ist maßstabsgetreu

## 4.2 Drehimpulse in der Quantenmechanik

Aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung für das H-Atom finden wir, dass der Betrag des Bahndrehimpulses nur folgende Werte annehmen kann:

$$\boxed{L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad \text{oder} \quad |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar} \quad l = 0, 1, \dots, n-1$$

Diese Quantisierung des Drehimpulses gilt nicht nur für das H-Atom, sondern allgemein für jeden Bahndrehimpuls in der Quantenmechanik!

Damit ist auch die Rotationsenergie quantisiert

$$E_{rot} = \frac{1}{2} \frac{L^2}{I} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} \quad I: \text{Trägheitsmoment}$$

Dies gilt natürlich auch allgemein und nicht nur für den Wasserstoff sondern auch für andere Atome und Moleküle.

Wir wollen jetzt die Komponente des Drehimpulses in einer beliebigen Richtung betrachten. Dazu legen wir das Koordinatensystem so, dass diese, jetzt ausgezeichnete Richtung, der z-Achse entspricht.

Wie erhält man den Drehimpuls  $\vec{L}$  aus der Wellenfunktion?

Den Transversalimpuls  $\vec{p}$  erhalten wir durch Anwendung der Operation

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (\text{Impulsoperator } \hat{p})$$

auf die Wellenfunktion:  $\hat{p}\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi = p\Psi$

$$\text{Für den Drehimpuls gilt } \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$

Ganz analog definieren den Drehimpulsoperator  $\hat{L} = -i\hbar \vec{r} \times \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$ . Das Betragsquadrat des Drehimpulses,  $\vec{L}^2 = L^2$ , erhalten wir durch zweimalige Anwendung des Drehimpulsoperators auf die Wellenfunktion:  $\hat{L}^2\Psi = \left(-i\hbar \vec{r} \times \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\right)^2 \Psi = l(l+1)\hbar^2\Psi$ .

Demnach ergibt sich die z-Komponente des Drehimpulses  $L_z = xp_y - yp_x$  durch Anwendung des Operators  $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)$ . Nach Einführung von Polarkoordinaten lässt sich dieser Operator einfacher schreiben als

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \text{also} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = L_z \Psi$$

Das vergleichen wir mit der Azimuthalgleichung, die aus der Separation der Schrödinger-Gleichung entstanden ist:

$$\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi + m_l^2 = 0$$

Offenbar gibt also die magnetische Quantenzahl  $m_l$  die Komponente des Drehimpulses in z-Richtung an:

$$\boxed{L_z = m_l \hbar} \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Die z-Komponente des Drehimpulses kann also nur ganz bestimmte Werte annehmen. Auch das gilt ganz allgemein für alle Drehimpulse in der Quantenmechanik.

### Beispiel für $l = 2$

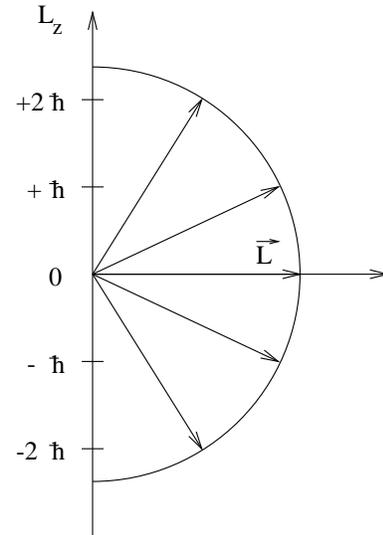
$$|\vec{L}| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

Es sind nur 5 Einstellungen dieses Drehimpulses bezüglich der z-Achse möglich.

$$L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$$

Beachte, dass keine Parallelstellung des Drehimpulses zur z-Achse möglich ist, da  $L_z$  immer kleiner ist als  $L$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar > m_l\hbar$$



Welche Werte haben die x- und y-Komponenten des Drehimpulses?

Diese Komponenten sind unscharf und können nicht gemessen werden. Betrachten wir dazu noch mal den Drehimpuls in Komponentenschreibweise:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$$

Die gleichzeitige scharfe Messung von  $L_x, L_y, L_z$  würde bedeuten, dass die Orte  $x, y, z$  und die Impulse  $p_x, p_y, p_z$  gleichzeitig scharf gemessen werden. Das aber widerspricht der Heisenbergschen Unschärferelation! Wir können deshalb nur  $L^2$  und  $L_z$  bestimmen, nicht aber  $L_x$  und  $L_y$ . Mathematisch ausgedrückt: Die Lösungen der Schrödinger-Gleichungen sind Eigenfunktionen der Operatoren  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  (mit den Eigenwerten  $l(l+1)$  und  $m_l$ ), nicht aber die Operatoren  $L_x$  und  $L_y$ .

NB: Man kann natürlich noch die Kombination  $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$  messen!

### Zusammenfassung Drehimpulse in der Quantenmechanik:

- Der Betrag des Bahndrehimpulses ist quantisiert und kann die Werte annehmen

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

- Die Komponente des Drehimpulses entlang einer Achse, üblicherweise legt man die z-Achse des Koordinatensystems so, hat scharf definierte quantisierte Werte

$$L_z = m_l\hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

- Diese Quantisierungsachse wird durch die Versuchsbedingungen vorgegeben, z.B. äußeres Magnetfeld. Die anderen Komponenten des Drehimpulsvektors sind nicht messbar.
- Auch in der Quantenmechanik gilt die Erhaltung des Drehimpulses. Regeln für die Addition von Drehimpulsen werden später besprochen.

## 4.3 Magnetisches Moment

Klassische Elektrodynamik:

Ein Kreisstrom  $I$  bildet einen magnetischen Dipol mit dem magnetischen Dipolmoment

$$\vec{\mu} = I \cdot A \cdot \vec{n} \quad \begin{array}{l} A: \text{Kreisfläche} \\ \vec{n}: \text{Einheitsvektor senkrecht zu } A \end{array}$$

Für das Drehmoment  $\vec{\tau}$  und die potentielle Energie  $V$  dieses Dipols in einem äußeren Magnetfeld  $\vec{B}$  gilt:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \quad V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

### Bohrsches Atommodell:

Wie groß ist das magnetische Moment des Elektrons auf seiner Kreisbahn um den Kern?

$$\text{Kreisstrom } I = -e \frac{v}{2\pi r} = -e \frac{\omega}{2\pi}$$

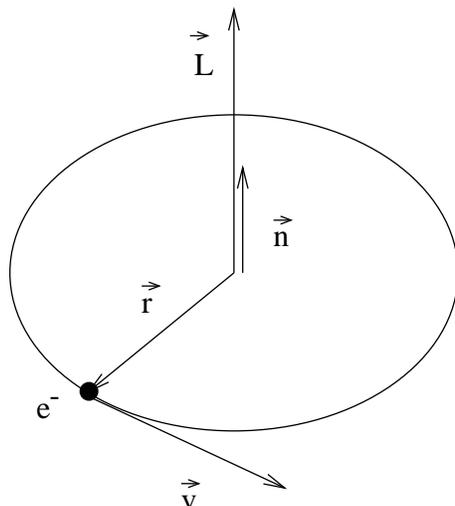
(Ladung  $\times$  Umlauffrequenz)

mit  $A = \pi r^2$  erhält man also

$$\vec{\mu} = -e \frac{\omega}{2\pi} \pi r^2 \vec{n} = -\frac{e\omega r^2}{2} \vec{n}$$

und mit dem Drehimpuls  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \omega r^2 \vec{n}$  können wir schreiben

$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}}$$



Diese Relation, die wir aus rein klassischen Betrachtungen erhalten haben, gilt nun wieder allgemein in der Quantenmechanik. Wie wir gesehen haben, ist in der Quantentheorie der Atome der Bahndrehimpuls eine wohldefinierte, messbare Größe, im Gegensatz zum Bahnradius oder der Kreisfrequenz!

Da das Elektron negativ geladen ist, sind  $\vec{\mu}$  und  $\vec{L}$  antiparallel.

Wie der Drehimpuls ist natürlich auch das magnetische Moment  $\vec{\mu}$  quantisiert. Für den Betrag gilt:

$$|\vec{\mu}| = \frac{e}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

Die Größe  $\boxed{\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$  heißt Bohrsches Magneton. Typische Magnetfelder in Experimenten sind von der Größenordnung  $1 \text{ Tesla} = 1 \text{ T} = 1 \frac{\text{Vs}}{\text{m}^2}$ . Deshalb benutzt man für  $\mu_B$  häufig die Einheit  $\boxed{\mu_B = 0,58 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}}}$

Für die z-Komponente des magnetischen Moments gilt

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e}{2m_e} m_l \hbar \quad \begin{array}{l} m_e: \text{Elektronenmasse} \\ m_l: \text{magn. Quantenzahl} \end{array}$$

$$\boxed{\mu_z = -m_l \mu_B} \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Die z-Komponente des magnetischen Moments ändert sich also in Einheiten des Bohrschen Magnetons. Jetzt wird auch der Name magnetische Quantenzahl verständlich.

## 4.4 Der Spin des Elektrons

Die Schrödinger-Gleichung, so wie wir sie für das Wasserstoffatom aufgestellt und gelöst haben, kann nicht alle beobachteten Spektrallinien und deren Aufspaltung in äußeren Feldern, erklären. Dazu haben Gouldsmith und Uhlenbach 1925 den Eigendrehimpuls oder Spin S des Elektrons postuliert. Wie der Bahndrehimpuls ist der Spin quantisiert und es gelten die Relationen:

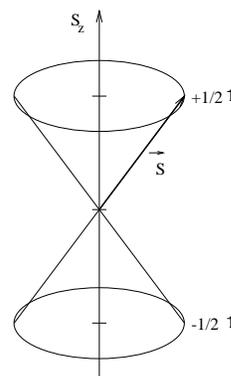
$$\boxed{|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad s_z = m_s\hbar} \quad s: \text{Spinquantenzahl}$$

Das Elektron hat einen halbzahligen Spin  $s = \frac{1}{2}$  und  $m_s$  kann  $2s + 1 = 2$  Werte annehmen  $m_s = \pm\frac{1}{2}$

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$$

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

Man sagt, das Elektron ist ein Spin  $\frac{1}{2}$  Teilchen. Man hat viele andere Elementarteilchen gefunden, die einen Eigendrehimpuls besitzen. Sie werden eingeteilt in Teilchen mit halbzahligen Spin ( $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ ), genannt Fermionen, und Teilchen mit ganzzahligen Spin ( $s = 0, 1, 2, \dots$ ), genannt Bosonen.



Zurück zum Elektron:

Das magnetische Moment, das durch den Eigendrehimpuls erzeugt wird, ist wiederum proportional zum Spin

$$\boxed{|\vec{\mu}_s| = g_s \mu_B \sqrt{s(s+1)}}$$

Allerdings findet man, dass der Faktor  $g_s$  (Landé-Faktor) den Wert

$$\boxed{g_s = 2,0023 \dots \approx 2}$$

hat im Gegensatz zum Bahndrehimpuls, für den ja gilt  $|\vec{\mu}| = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$ .

Hier stoßen wir endgültig an die Grenzen der klassischen Physik. Der Versuch, den Spin des Elektrons und sein magnetisches Moment durch eine Analogie einer rotierenden, geladenen und homogenen Kugel zu erklären, versagt. Zunächst einmal haben wir keinerlei Anhaltspunkt für eine räumliche Ausdehnung des Elektrons, wir können es als punktförmig annehmen. Experimente der Hochenergiephysik schränken den Radius des Elektrons auf  $r < 10^{-18}m$  ein. Weiter würde sich für eine homogene, geladene Kugel der Landé-Faktor zu 1 ergeben.

Wir betrachten die mit  $\omega$  um eine Achse rotierende homogene Kugel (Massendichte  $\rho_M$ , Ladungsdichte  $\rho_Q$ ).

Der Beitrag des Volumenelementes  $dV$  zum Drehimpuls ist

$$dL = \omega \cdot \rho_M \delta^2 dV$$

und zum magnetischen Moment

$$d\mu = \rho_Q \cdot dV \cdot \frac{\omega}{2\pi} \pi \delta^2 = \frac{1}{2} \omega \rho_Q \delta^2 dV$$

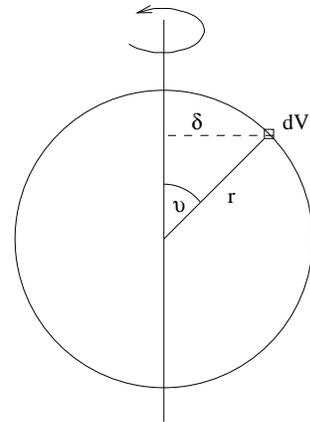
Die Integration über

$$\delta^2 dV = r^2 \sin^2 \vartheta r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = r^4 \sin^3 \vartheta dr d\vartheta d\varphi$$

liefert in beiden Fällen  $\frac{2}{5} R^2 V$  ( $V = \frac{4}{3} \pi R^3$ , Kugelvolumen),

also

$$L = \omega \frac{2}{5} m R^2 \quad \text{und} \quad \mu = \frac{1}{2} \omega \frac{2}{5} Q R^2 \quad \text{oder} \quad \frac{\mu}{L} = \frac{Q}{2m}$$

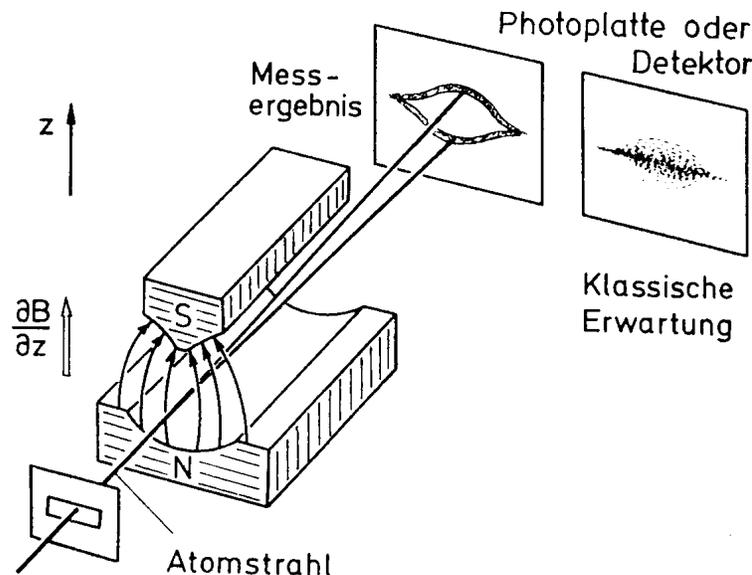


Der Spin ist wie Masse und Ladung eine intrinsische Eigenschaft der Teilchen

Der Spin des Elektrons und der Wert des Landé-Faktors findet seine Erklärung in der relativistischen Theorie, die von Dirac um 1928 aufgestellt wurde. Die Dirac-Gleichung, also die relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung, fordert auch die Existenz des Positrons, des Antiteilchens des Elektrons, bzw. die Existenz von Antimaterie allgemein.

Stern-Gerlach Experiment:

Der experimentelle Beweis für den Eigendrehimpuls des Elektrons, sowie seine Quantisierung, gelingt mit dem Experiment von Stern und Gerlach (1922). Ein Strahl aus Silberatomen wird durch ein stark inhomogenes Magnetfeld geleitet. Für Silberatome gilt, dass der Drehimpuls und damit das Magnetische Moment durch den Spin eines (des äußersten) Elektrons gegeben ist. Nach dem Durchlaufen des Feldes werden die Atome auf einer Photoplatte nachgewiesen. Das inhomogene Magnetfeld stellt ein Potential  $V = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}$  dar und damit erfahren die Atome eine Kraft  $\vec{F} = -\text{grad}V$  mit einer Komponente  $F_z = (\vec{\mu}_s)_z \cdot \frac{\partial B}{\partial z}$ .



Die klassische Erwartung wäre, dass alle möglichen Orientierungen des magnetischen Momentes vorkommen, die Kraft auf die Atome deshalb alle Werte zwischen  $-|\vec{\mu}_s| \frac{\partial B}{\partial z}$  und  $+|\vec{\mu}_s| \frac{\partial B}{\partial z}$  annehmen kann und die Atome deshalb einen Fleck auf der Photoplatte bilden.

Hingegen sammeln sich die Atome in zwei Streifen, was bedeutet, dass die Komponente des magnetischen Momentes, die wir untersuchen und z-Komponente nennen, nur zwei Werte annimmt. Weil die Zahl der möglichen Werte aber  $2s + 1$  ist, folgt daraus, dass der Drehimpuls der Silberatome (und damit der Spin des Elektrons)  $s = \frac{1}{2}$  ist.

Gesamtdrehimpuls des Wasserstoffatoms:

Der Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  ist die Vektorsumme aus Bahndrehimpuls  $\vec{L}$  und Eigendrehimpuls  $\vec{S}$  des Elektrons. Der Gesamtdrehimpuls bleibt erhalten, nicht notwendigerweise  $\vec{L}$  oder  $\vec{S}$ .

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

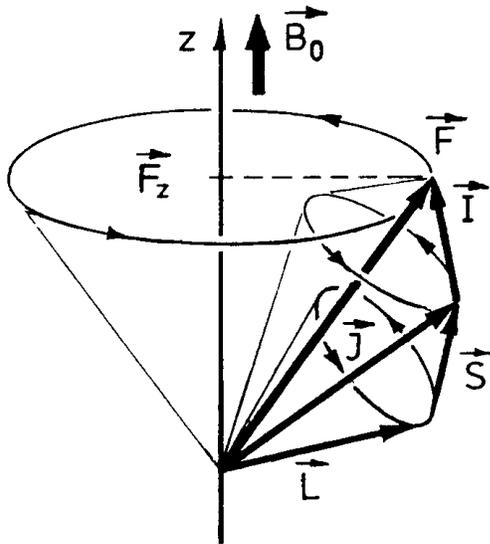
Der Gesamtdrehimpuls ist quantisiert, nach den Regeln, die wir schon für  $\vec{L}$  oder  $\vec{S}$  gefunden haben. Für den Betrag von  $\vec{J}$  gilt:

$$|\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

Die möglichen Werte für  $j$  sind  $j = |l - s|, |l - s| + 1, \dots, |l + s|$ , wobei  $l$  und  $s$  natürlich die Beträge von Bahndrehimpuls und Spin angeben:  $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ ,  $|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ .

Für die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses gilt:

$$J_z = m_j \hbar \quad \text{mit} \quad m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$



Die Vektoren  $\vec{L}$  und  $\vec{S}$  präzedieren so um den Vektor  $\vec{J}$ , dass sich ein fester Wert für den Betrag von  $\vec{J}$  einstellt und eine feste z-Komponente  $J_z$ . Der Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  präzediert wie üblich um die z-Achse.

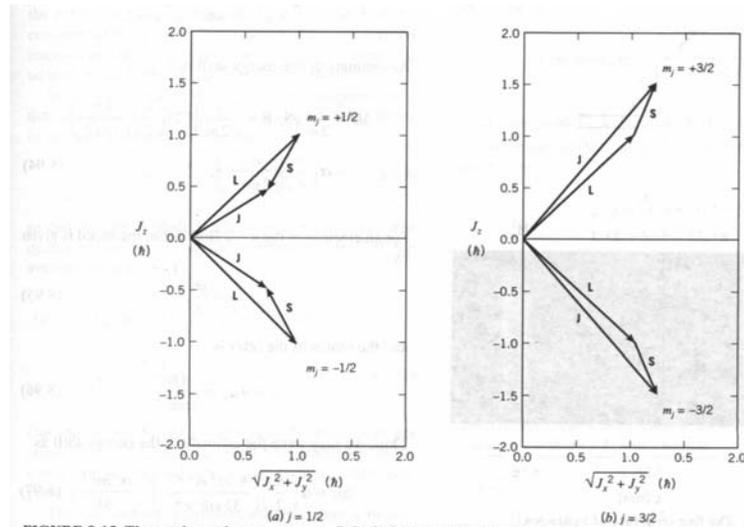
Beispiel für  $l = 1$ , d.h. p-Zustand des H-Atoms:

Die möglichen Werte für den Betrag des Gesamtdrehimpulses sind gegeben durch  $j = l - s, l + s$  (wegen  $s = \frac{1}{2}$ ), also  $j = \frac{1}{2}$  und  $j = \frac{3}{2}$ . Für die z-Komponente finden wir dann die Einstellmöglichkeiten:

$$j = \frac{1}{2} : \quad m_j = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

$$j = \frac{3}{2} : \quad m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$$

Graphische Darstellung:



**FIGURE 8-15** The total angular momentum,  $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ , for a  $p$  state electron. The total angular momentum is the vector sum of the orbital ( $\mathbf{L}$ ) and the intrinsic ( $\mathbf{S}$ ) angular momentum. For a  $p$  state,  $\ell=1$ , corresponding to an orbital angular momentum of  $\sqrt{2}\hbar$ . The electron spin quantum number is  $1/2$ , corresponding to an intrinsic angular momentum of  $\sqrt{3}\hbar/2$ . The two possibilities for the total angular momentum quantum number are (a)  $j=1/2$  or (b)  $3/2$  corresponding to  $J=\sqrt{3}\hbar/2$  or  $\sqrt{15}\hbar/2$ . The smaller value of  $J$  corresponds to  $\mathbf{L}$  and  $\mathbf{S}$  being approximately antialigned, and the larger value of  $J$  corresponds to  $\mathbf{L}$  and  $\mathbf{S}$  being approximately aligned.

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

$$|\vec{J}| = J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, |j_1 + j_2|$$

3. Komponente  $J_z = m_j \hbar$

$$m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$

Die hier am Beispiel des H-Atoms besprochenen Regeln für die Addition von Drehimpulsen gelten allgemein für beliebige Drehimpulse in der Quantenmechanik, Bahndrehimpulse oder Spins  $\vec{J}_1$  und  $\vec{J}_2$ !

## 4.5 Der Zeeman-Effekt

P. Zeeman entdeckte 1896, dass Spektrallinien von Atomen im Magnetfeld aufspalten. Wir verstehen diesen Effekt natürlich jetzt als Folge der Quantisierung des magnetischen Moments. Zustände mit unterschiedlicher magnetischer Quantenzahl  $m_l$ , die normalerweise die gleiche Energie haben (Entartung), erhalten eine zusätzliche potentielle Energie

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B_z = +m_l \mu_B B_z$$

Die Richtung des  $\vec{B}$ -Feldes, die ausgezeichnete Richtung, legen wir entlang der z-Achse. Jetzt ergeben sich für eine Bahndrehimpulsquantenzahl  $l$  insgesamt  $2(l+1)$  Energiezustände. Die Differenz dieser Energieniveaus ist wegen  $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ :  $\Delta E = \mu_B B$ .

Beispiel für  $l = 1$  und  $l = 2$ :

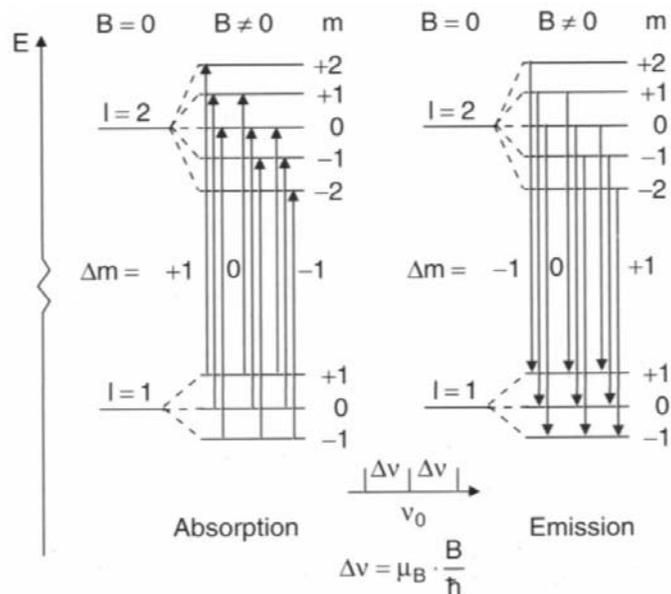


Abb. 5.12. Termschema für Zeeman-Übergänge mit  $\Delta m = \pm 1, 0$  in Absorption und Emission

Der Energieunterschied  $\Delta E$  ist unabhängig von den Quantenzahlen  $n, l, m_l$ , d.h. die Aufspaltung der Energieniveaus im  $\vec{B}$ -Feld wird zu äquidistanten Linien führen.

$$\Delta\nu = \mu_B \frac{B}{\hbar}$$

Welche Übergänge sind möglich?

Dazu müssen wir berücksichtigen, dass das Photon einen Spin besitzt:

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \text{ mit } s = 1.$$

Für die z-Komponente des Photospins gilt  $m_s = \pm 1$ . Der Wert  $m_s = 0$  ist für das Photon nicht erlaubt. Der Grund liegt in der speziellen Relativitätstheorie: weil das Photon keine Masse hat, gibt es kein System in dem das Photon in Ruhe ist. Die Werte  $m_s = -1$  und  $m_s = +1$  entsprechen links- bzw. rechts-zirkular polarisierbarem Licht.

Die Drehimpulserhaltung, die auch in der Quantenphysik gilt, führt dazu, dass nur bestimmte Änderungen der Quantenzahlen  $l$  und  $m_l$  erlaubt sind. Normalerweise erfolgen Übergänge durch elektrische Dipolstrahlung. Aufgrund des Spins des Photons gelten folgende Auswahlregeln für die erlaubten Übergänge bei Emission oder Absorption.

$$\Delta n \neq 0 \quad \Delta l = \pm 1 \quad \Delta m_l = 0 \quad \text{oder} \quad \Delta m_l = \pm 1$$

Da die Aufspaltung der Energiezustände  $\Delta E$  überall gleich groß ist, beobachtet man im Magnetfeld die Aufspaltung in drei Linien

$$\begin{aligned}\nu_1 &= \nu_0 - \frac{\mu_B B}{h} \\ \nu_2 &= \nu_0 \\ \nu_3 &= \nu_0 + \frac{\mu_B B}{h}\end{aligned}$$

$\nu_0$ : Frequenz der Linie ohne Magnetfeld

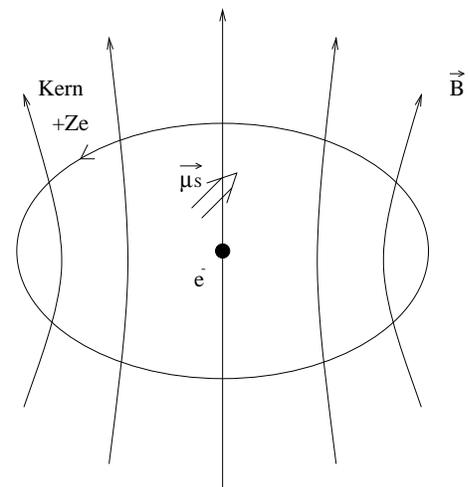
Wir haben hier den normalen Zeeman-Effekt besprochen und den Spin und das magnetische Moment des Elektrons nicht berücksichtigt. Das ist näherungsweise richtig für Atome, bei denen sich der Spin der Elektronen zu Null addiert, z.B. bei 2 Elektronen in der äußersten Schale, bei denen der Spin entgegengesetzt steht  $\uparrow\downarrow$ .

Ist dies nicht der Fall, so tritt der anomale Zeeman-Effekt auf, der eine komplizierte Aufspaltung der Linien zeigt.

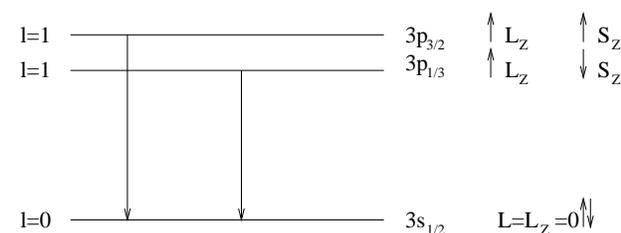
## 4.6 Spin-Bahn-Kopplung (Feinstruktur)

Bereits ohne Anlegen eines äußeren Magnetfeldes kann man bei genauem Hinsehen eine Aufspaltung der Linien beobachten, die sogenannte Feinstruktur, für  $l > 0$ . Der Grund dafür ist die Wechselwirkung des magnetischen Moments durch den Elektronenspin mit dem Magnetfeld, das durch die Bahnbewegung des Elektrons erzeugt wird.

Wir können uns das „halbklassisch“ vorstellen, indem wir uns in das Ruhesystem des Elektrons setzen. Der Kern mit der Ladung  $+Ze$  „umkreist“ das Elektron und erzeugt ein Magnetfeld am Ort des Elektrons. Die Energie hängt nun wieder davon ab, ob die z-Komponente des Elektronenspins (bzw. des magnetischen Moments) parallel oder antiparallel zu diesem  $\vec{B}$ -Feld steht. Die Energieaufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung hängt also von Betrag und Orientierung von  $\vec{L}$  und  $\vec{s}$  ab, d.h. vom Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$ .



Beispiel: Doppellinie des gelben Natriumlichtes:



⇒ 2 mögliche Übergänge

Im Zustand  $l = 0$  gibt es keine resultierende Kreisbewegung des Elektrons und daher kein Magnetfeld, durch das das Energieniveau aufgespalten wird.

Die Feinstrukturaufspaltung ist proportional zu  $\alpha^2$ , daher der Name Feinstrukturkonstante.

Hyperfeinstruktur: Auch das Proton besitzt einen Spin ( $s = \frac{1}{2}$ ). Die Wechselwirkung mit dem Spin des Elektrons führt zu einer Aufspaltung des Grundzustandes des H-Atoms. Der Übergang zwischen beiden Zuständen ( $\lambda = 21\text{cm}$ ) wird zum Nachweis für Wasserstoff im Weltall benutzt!

## 4.7 Das Periodensystem der Elemente

Atome mit mehr als einem Elektron sind wesentlich komplizierter als das Wasserstoffatom. Der Grund ist, dass die Elektronen nicht nur mit dem Kern, sondern auch untereinander wechselwirken. Im Gegensatz zur Beschreibung des Sonnensystems, bei der wir in guter Näherung die Masse der Planeten gegenüber der Sonne vernachlässigen dürfen, ist hier die Summe der Elektronenladungen gleich der Kernladung.

Trotzdem kann man näherungsweise die Elektronen durch Wellenfunktionen beschreiben, die denen des H-Atoms sehr ähnlich sind. Das für uns wichtige Resultat ist, dass diese Wellenfunktionen durch die gleichen 4 Quantenzahlen charakterisiert sind. Zusätzlich zu unserem Resultat aus der Schrödinger-Gleichung (Kap. 4.1) müssen wir noch die Einstellung des Elektronenspins  $m_s$  bezüglich einer vorgewählten Achse berücksichtigen:

$$\boxed{n, l, m_l, m_s}$$

Die zu klärende Frage lautet nun: Welche Werte nehmen diese Quantenzahlen für die Elektronen eines Atoms im Grundzustand an?

Die Antwort liegt im Pauli-Prinzip:

Ein atomarer Zustand kann höchstens ein Elektron aufnehmen. Zwei Elektronen in einem Atom können nicht in allen Quantenzahlen  $n, l, m_l, m_s$  übereinstimmen.

Das Pauli-Prinzip ist die Konsequenz eines quantenmechanischen Phänomens, das mit der Symmetrie der Wellenfunktionen von Elektronen zusammenhängt. Betrachten wir die Wellenfunktion für ein System von 2 Elektronen, z.B. das Helium-Atom:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad \vec{r}_1, \vec{r}_2 \text{ sind die Ortsvektoren der beiden Elektronen}$$

Die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dann gegeben durch  $\frac{dP}{dV} = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ . Die beiden Elektronen sind identisch und ununterscheidbar. Deshalb ändert sich  $\frac{dP}{dV}$  nicht, wenn man die beiden Elektronen vertauscht, also

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2$$

Bezüglich des Austausches der beiden Teilchen haben wir also zwei Möglichkeiten für die Wellenfunktion:

symmetrisch:  $\Psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = +\Psi_S(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$

asymmetrisch:  $\Psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\Psi_A(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$

Diese Lösungen setzen sich wie folgt aus den einzelnen Wellenfunktionen der beiden Elektronen  $\Psi_a(\vec{r}_1), \Psi_b(\vec{r}_2)$  zusammen:

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) + \Psi_b(\vec{r}_1)\Psi_a(\vec{r}_2)]$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) - \Psi_b(\vec{r}_1)\Psi_a(\vec{r}_2)]$$

$a$  und  $b$  bezeichnen hier die beiden Sätze der vier Quantenzahlen  $n, l, m_l, m_s$ , die die Wellenfunktion der beiden Elektronen charakterisieren. Der Faktor  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  dient zur Normierung.

Es gilt nun:

Zwei identische Bosonen (ganzzahliger Spin) haben eine symmetrische Wellenfunktion ( $\Psi_s$ ) und zwei identische Fermionen (halbzahliger Spin) haben eine antisymmetrische Wellenfunktion ( $\Psi_A$ ).

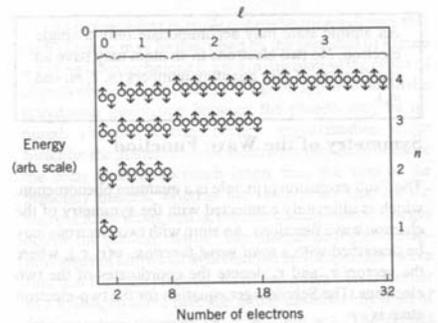
Aus diesem quantenmechanischem Prinzip, zusammen mit obigen Überlegungen, folgt nun das Pauli-Prinzip. Zwei Elektronen können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen, d.h.  $a = b$ , ohne dass die Gesamtwellenfunktion  $\Psi_A$  verschwindet.

Zurück zum Aufbau der Atome:

Das Pauli-Prinzip führt zu einer Schalenstruktur des Atomaufbaus. Die Energie der Zustände ist hauptsächlich durch die Quantenzahl  $n$  gegeben, durch Spin-Bahn-Kopplung und Wechselwirkungen der Elektronen auch durch  $l$ . Die verfügbare Zahl der Plätze für ein bestimmtes  $n$ , d.h. eine Schale, ist  $2n^2$ .

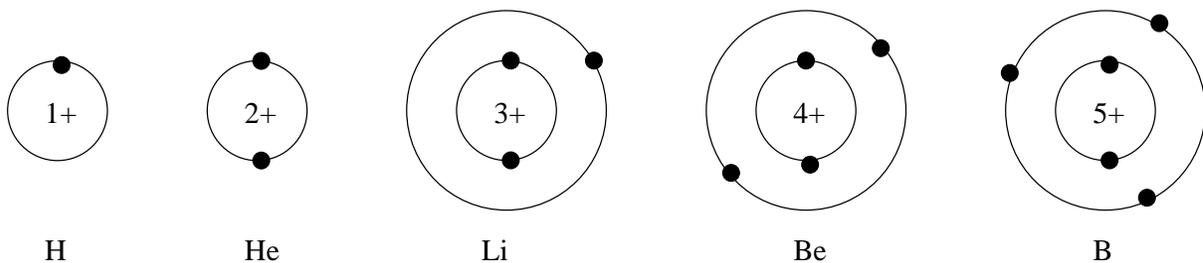
### Elektronenschalen

n	Schale	max. Anz. von $e$	Konfiguration
1	K	2	$1s^2$
2	L	8	$2s^2 2p^6$
3	M	18	$3s^2 3p^6 3d^{10}$
4	N	32	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$

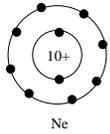


**FIGURE 9-2 Pauli exclusion principle for an atom with a very large number of electrons ( $Z \gg 1$ ).** Each electron resides in the lowest energy state available and only one electron is allowed in each quantum state. The energy of each state is strongly dependent on the principle quantum number  $n$  and somewhat dependent on the orbital angular momentum quantum number  $l$ .

Bildliche Darstellung:

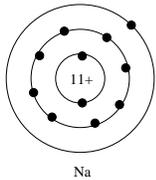


Achtung: Die Bahnen der Elektronen sind diffus! Diese Diagramme, sowie die Schalenstruktur überhaupt, sind natürlich so zu verstehen, dass es sich dabei um Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten handelt!



Die Besetzung der äußersten Schale bestimmt die chemischen Eigenschaften eines Atoms (Elements), z.B.: Neon hat wie Helium eine komplett besetzte, abgeschlossene Schale. Deshalb ähneln sich diese chemischen Elemente. Es sind reaktionsträge Edelgase.

Das Gegenteil ist z.B. beim Natrium der Fall. Dort ist wie beim Lithium nur ein Elektron auf der äußeren Schale. Dieses Elektron wird bei chemischen Reaktionen gerne abgegeben. Das Bestreben, die äußere Schale aufzufüllen erklärt das chemische Verhalten der Elemente und chemische Verbindungen wie  $Na^+Cl^-$ .



Damit verstehen wir auch die Abhängigkeit des Atomvolumens und der Ionisationsenergie von der Kernladungszahl  $Z$ :

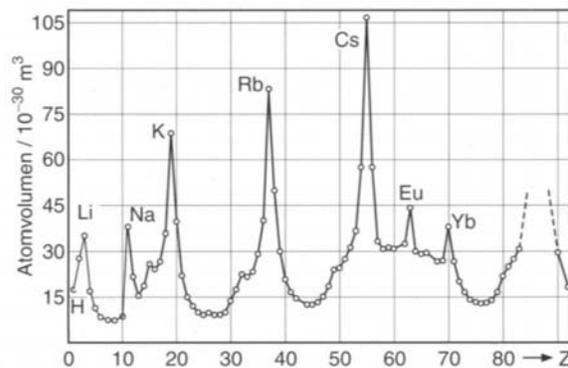


Abb. 6.16. Variation der Atomvolumina mit der Kernladungszahl  $Z$

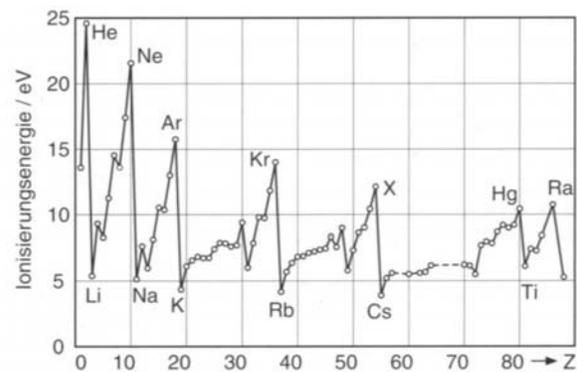


Abb. 6.17. Variation der Ionisierungsenergie mit der Kernladungszahl  $Z$

Bei den Alkalimetallen (Li, Na, K...) wird mit dem Auffüllen neuer Schalen begonnen. Durch Hinzufügen eines Elektrons ( $Z + 1$ ) reduziert sich der Radius. Das kann man qualitativ dadurch verstehen, dass die Elektronen auf den inneren Bahnen die Kernladung abschirmen und deshalb die beiden Elektronen in der äußeren Schale eine effektive Kernladung von  $+2e$  verspüren (Bohr:  $r_n \propto \frac{1}{Z}$ ). Die Ionisationsenergie, d.h. die Energie die nötig ist, das äußerste Elektron eines Atoms zu entfernen, zeigt die gleiche Periodizität. Dieses Elektron ist bei den Alkalimetallen leicht zu entfernen, während die äußeren Elektronen den abgeschlossenen Schalen der Edelgase (He, Ne, Ar, ...) besonders fest gebunden sind.

In der Reihenfolge der Besetzung der Schalen, d.h. beim Aufbau des Periodensystems der Elemente, gibt es einige Unregelmäßigkeiten und andere Merkmale. Wir können hier nur auf einige Aspekte kurz eingehen.

1) Bei Argon ( $Z = 18$ ) ist die dritte Schale (M-Schale) vollständig mit Elektronen im s- und p-Zustand gefüllt, d.h. für  $l = 0$  und  $l = 1$ . Obwohl noch 10 Elektronen in die  $3d$  Schale passen würden, also  $l = 2$ , beginnt beim nächsten Element Kalium (K) bereits das Besetzen der vierte Schale. Erst ab dem Scandium ( $Z = 21$ ) werden die  $3d$  Zustände aufgefüllt (Übergangselemente). Ähnliche Verhältnisse treten auf bei Besetzung der fünfte Schale (ab Rubidium) und den höheren. Offenbar ist es u.U. energetisch günstiger die nächste Schale mit s-Elektronen

zu besetzen als Elektronen mit hohem Drehimpuls in der gleichen Schale hinzuzufügen. Der umgekehrte Fall liegt z.B. bei Chrom und Kupfer vor, die sich ein Elektron aus der M-Schale zurückholen.

Elektronenkonfiguration der Elemente bis  $Z = 54$ :  
(aus dem Buch von Otter und Honecker)

Atom Nr. Z	Element	Schalen	Schalen					Grundzustand bei L-S-Kopplung	Ionisierungsenergie eV
			K n=1 s	L n=2 s p	M n=3 s p d	N n=4 s p d	O n=5 s p		
1	Wasserstoff	H	1					$2S_{1/2}$	13,60
2	Helium	He	2					$1S_0$	24,58
3	Lithium	Li	2	1				$2S_{1/2}$	5,39
4	Beryllium	Be	2	2				$1S_0$	9,32
5	Bor	B	2	2	1			$2P_{1/2}$	8,30
6	Kohlenstoff	C	2	2	2			$3P_0$	11,26
7	Stickstoff	N	2	2	3			$4S_{3/2}$	14,54
8	Sauerstoff	O	2	2	4			$3P_2$	13,61
9	Fluor	F	2	2	5			$2P_{3/2}$	17,42
10	Neon	Ne	2	2	6			$1S_0$	21,56
11	Natrium	Na	2	2	6	1		$2S_{1/2}$	5,14
12	Magnesium	Mg	2	2	6	2		$1S_0$	7,64
13	Aluminium	Al	2	2	6	2	1	$2P_{1/2}$	5,98
14	Silicium	Si	2	2	6	2	2	$3P_0$	8,15
15	Phosphor	P	2	2	6	2	3	$4S_{3/2}$	10,55
16	Schwefel	S	2	2	6	2	4	$3P_2$	10,36
17	Chlor	Cl	2	2	6	2	5	$2P_{3/2}$	13,01
18	Argon	A	2	2	6	2	6	$1S_0$	15,76
19	Kalium	K	2	2	6	2	6	$2S_{1/2}$	4,34
20	Calcium	Ca	2	2	6	2	6	$1S_0$	6,11
21	Scandium	Sc	2	2	6	2	6	$2D_{3/2}$	6,56
22	Titan	Ti	2	2	6	2	6	$3F_2$	6,83
23	Vanadium	V	2	2	6	2	6	$4F_{3/2}$	6,74
24	Chrom	Cr	2	2	6	2	6	$7S_3$	6,76
25	Mangan	Mn	2	2	6	2	6	$6S_{5/2}$	7,43
26	Eisen	Fe	2	2	6	2	6	$5D_4$	7,90
27	Kobalt	Co	2	2	6	2	6	$4F_{9/2}$	7,86
28	Nickel	Ni	2	2	6	2	6	$3F_4$	7,63
29	Kupfer	Cu	2	2	6	2	6	$2S_{1/2}$	7,72
30	Zink	Zn	2	2	6	2	6	$1S_0$	9,39
31	Gallium	Ga	2	2	6	2	6	$2P_{1/2}$	6,00
32	Germanium	Ge	2	2	6	2	6	$3P_0$	7,88
33	Arsen	As	2	2	6	2	6	$4S_{3/2}$	9,81
34	Selen	Se	2	2	6	2	6	$3P_2$	9,75
35	Brom	Br	2	2	6	2	6	$2P_{3/2}$	11,84
36	Krypton	Kr	2	2	6	2	6	$1S_0$	14,00
37	Rubidium	Rb	2	2	6	2	6	$2S_{1/2}$	4,18
38	Strontium	Sr	2	2	6	2	6	$1S_0$	5,69
39	Yttrium	Y	2	2	6	2	6	$2D_{3/2}$	6,38
40	Zirkon	Zr	2	2	6	2	6	$3F_2$	6,84
41	Niob	Nb	2	2	6	2	6	$6D_{1/2}$	6,88
42	Molybdän	Mo	2	2	6	2	6	$7S_3$	7,13
43	Technetium	Tc	2	2	6	2	6	$6D_{9/2}$	7,23
44	Ruthenium	Ru	2	2	6	2	6	$5F_5$	7,37
45	Rhodium	Rh	2	2	6	2	6	$4F_{9/2}$	7,46
46	Palladium	Pd	2	2	6	2	6	$1S_0$	8,33
47	Silber	Ag	2	2	6	2	6	$2S_{1/2}$	7,57
48	Cadmium	Cd	2	2	6	2	6	$1S_0$	8,99
49	Indium	In	2	2	6	2	6	$2P_{1/2}$	5,79
50	Zinn	Sn	2	2	6	2	6	$3P_0$	7,33
51	Antimon	Sb	2	2	6	2	6	$4S_{3/2}$	8,64
52	Tellur	Te	2	2	6	2	6	$3P_2$	9,01
53	Jod	I	2	2	6	2	6	$2P_{3/2}$	10,44
54	Xenon	Xe	2	2	6	2	6	$1S_0$	12,13

Übergangselemente

Übergangselemente

Fortsetzung der Elektronenkonfiguration für Elemente mit  $Z > 54$ :

Atom Nr. Z	Element	Schalen	Schalen												Ionisierungs- energie eV		
			N n=4				O n=5				P n=6					Q n=7	
			s	p	d	f	s	p	d	f	s	p	d	s			
55	Cäsium	Cs	2	6	10		2	6				1					3,89
56	Barium	Ba	2	6	10		2	6				2					5,21
57	Lanthan	La	2	6	10		2	6	1			2					5,61
58	Cer	Ce	2	6	10	2	2	6				2					5,6
59	Praseodym	Pr	2	6	10	3	2	6				2					5,46
60	Neodym	Nd	2	6	10	4	2	6				2					5,51
61	Promethium	Pm	2	6	10	5	2	6				2					
62	Samarium	Sm	2	6	10	6	2	6				2					5,6
63	Europium	Eu	2	6	10	7	2	6				2					5,67
64	Gadolinium	Gd	2	6	10	7	2	6	1			2					6,16
65	Terbium	Tb	2	6	10	9	2	6				2					5,98
66	Dysprosium	Dy	2	6	10	10	2	6				2					6,8
67	Holmium	Ho	2	6	10	11	2	6				2					
68	Erbium	Er	2	6	10	12	2	6				2					6,08
69	Thulium	Tm	2	6	10	13	2	6				2					5,81
70	Ytterbium	Yb	2	6	10	14	2	6				2					6,22
71	Lutetium	Lu	2	6	10	14	2	6	1			2					6,15
72	Hafnium	Hf	2	6	10	14	2	6	2			2					5,5
73	Tantal	Ta	2	6	10	14	2	6	3			2					7,7
74	Wolfram	W	2	6	10	14	2	6	4			2					7,98
75	Rhenium	Re	2	6	10	14	2	6	5			2					7,87
76	Osmium	Os	2	6	10	14	2	6	6			2					8,7
77	Iridium	Ir	2	6	10	14	2	6	9								9,2
78	Platin	Pt	2	6	10	14	2	6	9			1					9,0
79	Gold	Au	2	6	10	14	2	6	10			1					9,22
80	Quecksilber	Hg	2	6	10	14	2	6	10			2					10,43
81	Thallium	Tl	2	6	10	14	2	6	10			2	1				6,11
82	Blei	Pb	2	6	10	14	2	6	10			2	2				7,42
83	Wismuth	Bi	2	6	10	14	2	6	10			2	3				7,29
84	Polonium	Po	2	6	10	14	2	6	10			2	4				8,43
85	Astatin	At	2	6	10	14	2	6	10			2	5				9,5
86	Radon	Rn	2	6	10	14	2	6	10			2	6				10,75
87	Francium	Fr	2	6	10	14	2	6	10			2	6				4
88	Radium	Ra	2	6	10	14	2	6	10			2	6				5,28
89	Actinium	Ac	2	6	10	14	2	6	10			2	6	1			
90	Thorium	Th	2	6	10	14	2	6	10			2	6	2			
91	Protactinium	Pa	2	6	10	14	2	6	10	2		2	6	1			
92	Uran	U	2	6	10	14	2	6	10	3		2	6	1			
93	Neptunium	Np	2	6	10	14	2	6	10	4		2	6	1			
94	Plutonium	Pu	2	6	10	14	2	6	10	6		2	6				
95	Americium	Am	2	6	10	14	2	6	10	7		2	6				
96	Curium	Cm	2	6	10	14	2	6	10	7		2	6	1			
97	Berkelium	Bk	2	6	10	14	2	6	10	8		2	6	1			
98	Californium	Cf	2	6	10	14	2	6	10	10		2	6				
99	Einsteinium	Es	2	6	10	14	2	6	10	11		2	6				
100	Fermium	Fm	2	6	10	14	2	6	10	12		2	6				
101	Mendelevium	Mv	2	6	10	14	2	6	10	13		2	6				
102	Nobelium	No	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6				
103	Lawrencium	Lw	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	1			
104																	

Seltene Erden

Übergangselemente

Actiniden

2) Man beobachtet, dass es energetisch günstiger ist, den Spin in nicht abgeschlossenen Schalen parallel zu stellen. Man kann zeigen, dass diese Elektronen so im Mittel einen größeren Abstand haben. Das verringert die gegenseitige Coulombabstoßung und reduziert daher das Energieniveau.

Dies wird durch die Hundsche Regel ausgedrückt:

Im Grundzustand eines Atoms hat der Gesamtspin den maximalen Wert, der mit dem Pauli-Prinzip vereinbar ist.

Spinkonfigurationen der zehn leichtesten Elemente:

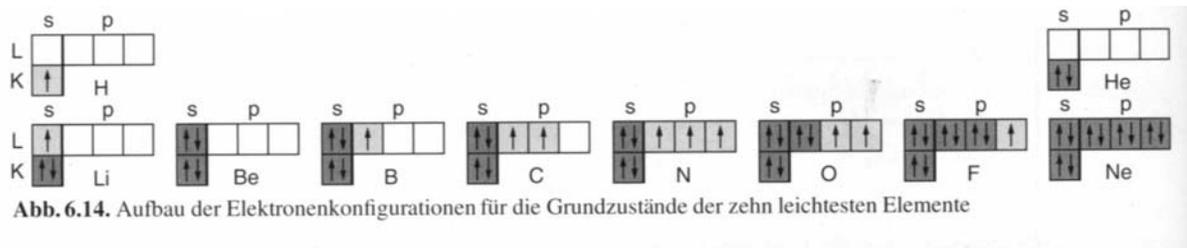
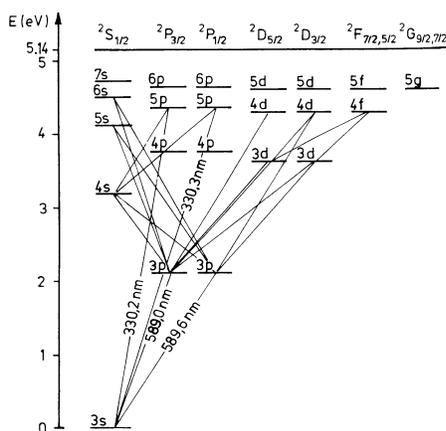


Abb. 6.14. Aufbau der Elektronenkonfigurationen für die Grundzustände der zehn leichtesten Elemente

3) Ende des Periodensystems: Das Periodensystem bricht ab, weil Atome mit großer Kernladungszahl (ab  $Z > 92$ ) instabil sind. Sie zerfallen durch Aussendung von  $\alpha$ -Strahlung oder durch Spaltung. Bis zum Element  $Z = 105$  (Hahnium) sind die Elektronenkonfigurationen ermittelt. Die Elemente bis zur Ordnungszahl 109 sind zwar kernphysikalisch nachgewiesen, sie zerfallen aber so schnell, dass über ihre Elektronenhüllen wenig bekannt ist.

Zum Abschluss besprechen wir noch kurz das Termschema des Natrium-Atoms. Das Natrium hat abgeschlossene K- und L-Schalen und das elfte Elektron befindet sich im  $3s$ -Zustand. Die zehn inneren Elektronen schirmen das Potential des Kerns ab und ihre Drehimpulse addieren sich zu Null, d.h. wir sprechen von einem wasserstoffähnlichen Atom. Dieser Atomrumpf ist aber ausgedehnt, deshalb ist die Entartung aufgehoben. Besonders s- und p-Zustände unterscheiden sich stark in der Energie (unterschiedliche mittlere Kernabstände!). Die s-Zustände zeigen keine Feinstrukturaufspaltung. Alle Zustände mit  $l > 0$  sind gemäß  $j = l \pm \frac{1}{2}$  aufgespalten.

Einige Übergänge für elektrische Dipolstrahlung sind auch eingezeichnet. Besonders intensiv sind die Übergänge  $3p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2}$  und  $3p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$ , die die gelbe Natrium-Doppellinie verursachen.



Bemerkung zur Notation:

Die vollständige spektroskopische Termbezeichnung ist

$$n^{2s+1}L_J$$

Dabei steht  $n$  für die Hauptquantenzahl,  $s$  für den Gesamtspin der Elektronen  $L = S, P, D, F, \dots$  für den Bahndrehimpuls ( $l + 0, 1, \dots$ ) und  $J$  für den Gesamtdrehimpuls.

## 5 Röntgenstrahlung

Die chemischen Eigenschaften der Elemente sowie das Spektrum im sichtbaren, ultravioletten (UV) und infraroten (IR) Licht, d.h. bei Energien bis zu einigen eV, werden durch die Konfiguration der äußeren Elektronen bestimmt. Zum Verständnis des Röntgenlichtes ( $h\nu$  einige keV oder höher) muss man die Elektronen in den inneren Schalen der schweren Elemente betrachten.

In einer Röntgenröhre wird Röntgenlicht durch Beschuss von z.B. einer Wolframanode ( $Z = 74$ ) mit beschleunigten Elektronen erzeugt. Die Elektronen werden abgebremst und geben ihre kinetische Energie in Form von elektromagnetischer Strahlung ab (Bremsstrahlung). Man beobachtet für Wolfram (W) folgendes Spektrum für verschiedene Beschleunigungsspannungen:

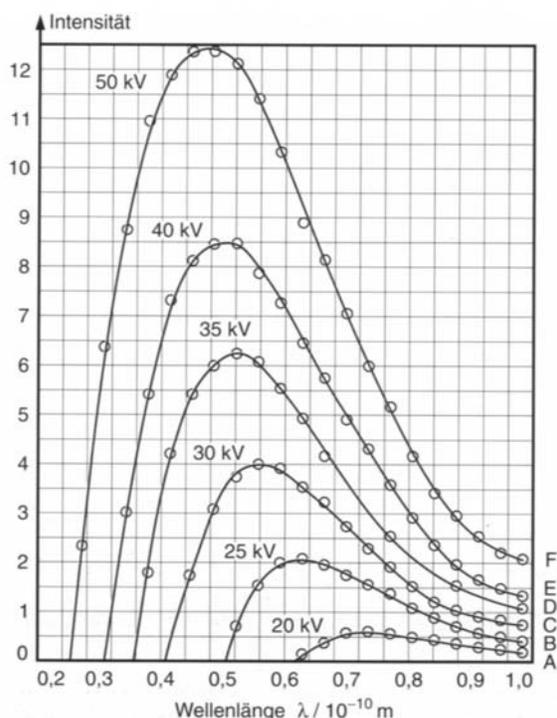
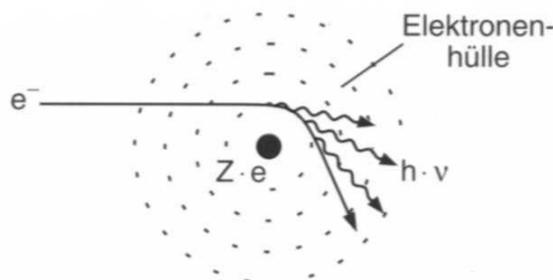


Abb. 7.27. Spektrale Intensitätsverteilung der Bremsstrahlung einer Wolframanode für verschiedene Spannungen  $U$

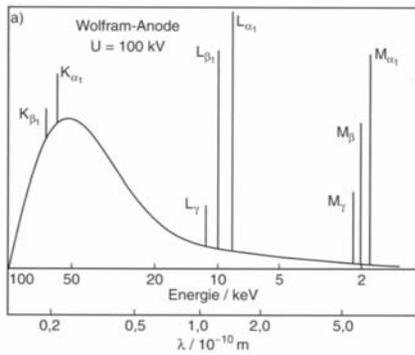
Solche kontinuierlichen Spektren erklären sich durch Ablenkung der Elektronen im Coulombfeld des Kerns. Die Ablenkung stellt eine Beschleunigung dar, und eine beschleunigte elektrische Ladung strahlt elektromagnetische Strahlung aus, also ein oder mehrere Photonen:



Aus der Energieerhaltung folgt die maximale Frequenz des Röntgenlichtes, d.h. wenn die Abbremsung durch Aussendung eines einzigen Photons erfolgt:

$$\begin{aligned} \text{Grenzfrequenz:} \quad \nu_G &= \frac{eU}{h} \\ \text{bzw. Grenzwellenlänge:} \quad \lambda_G &= \frac{hc}{eU} \end{aligned}$$

Ab einer bestimmten Energie der Elektronen treten Linien auf, die dem kontinuierlichen Bremspektrum überlagert sind.



Um diese charakteristische Strahlung zu erhalten, muss die Energie groß genug sein, um Elektronen aus den inneren Schalen auf freie Plätze in höheren Schalen zu befördern oder das Atom zu ionisieren. Beim Auffüllen des so frei gewordenen Platzes fallen Elektronen aus höheren Schalen herunter und senden Photonen aus, die das Linienspektrum erzeugen.

- z.B.:  $K_\alpha$ -Linie von L-Schale auf K-Schale ( $n = 2 \rightarrow n = 1$ )  
 $K_\beta$ -Linie von M-Schale auf K-Schale ( $n = 3 \rightarrow n = 1$ )  
 $L_\alpha$ -Linie von M-Schale auf L-Schale ( $n = 3 \rightarrow n = 2$ )

Zur Berechnung der Energien bzw. Wellenlängen erinnern wir uns an die Energieniveaus von Atomen mit  $Z > 1$ , die bis auf ein Elektron ionisiert sind.

$$E_n = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \frac{Z^2}{n^2} = -13,6 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2}$$

Wenn aber mehr als ein Elektron vorliegt, oder wie im vorliegenden Fall das Atom neutral ist, wird ein Elektron durch die anderen von der Kernladung abgeschirmt, besonders durch solche auf inneren Bahnen. Pauschal kann man das durch einen Abschirmungsparameter  $\sigma$  berücksichtigen, der von  $n$  aber auch  $Z$  abhängt  $E_n = -13,6 \text{ eV} \frac{(Z-\sigma)^2}{n^2}$ .

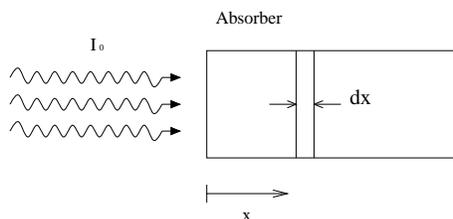
H. Moseley fand 1913/14 empirisch einen Zusammenhang für die charakteristischen Linien der Röntgenstrahlung:

$$E = h\nu = 13,6 \text{ eV} (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad \begin{array}{l} m > n \text{ K-Linien } \sigma \approx 1, \\ \text{L-Linien } \sigma \approx 7,4 \text{ usw.} \end{array}$$

Mit Hilfe des Moseleyschen Gesetzes hat man die Kernladungszahlen vieler Elemente bestimmt.

## 5.1 Absorption von Röntgenstrahlung

Allgemein beschreiben wir Absorption durch die Abnahme der Intensität  $I(x)$ .



In der dünnen Schicht  $dx$  des Absorbers nimmt die Intensität um den Betrag  $I(x + dx) - I(x) = dI(x)$  ab. Diese Abnahme ist proportional zur Intensität  $I(x)$  und der Schichtdicke  $dx$ .

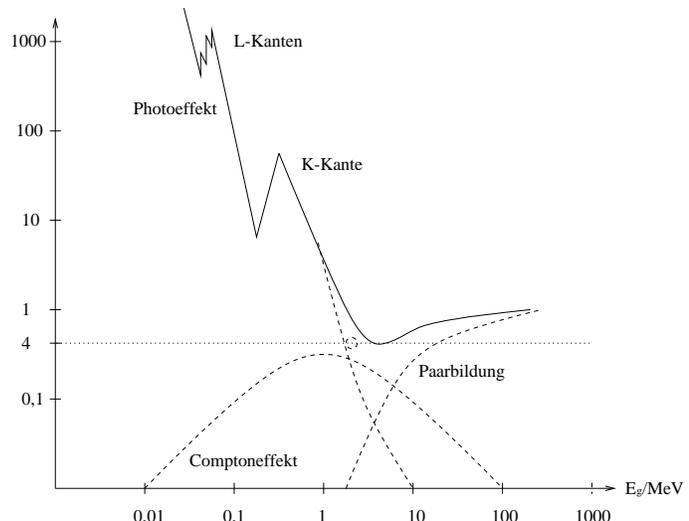
$$dI(x) = -\mu I(x) dx$$

Durch Integration folgt daraus:

$$I(x) = I_0 e^{-\mu x} \quad \text{exponentieller Abfall}$$

Der Absorptionskoeffizient  $\mu$  hängt von der Energie (Wellenlänge) der Strahlung und dem Material ab. Die Wechselwirkung der Photonen der Röntgenstrahlung mit der Materie geschieht durch 3 Prozesse:

- Photoeffekt in inneren Schalen
- Comptoneffekt
- Paarbildung



Bei niedrigen Energien ( $\lesssim 100\text{keV}$ ) tritt im wesentlichen der Photoeffekt auf. Der Absorptionskoeffizient nimmt sehr schnell mit der Photonenergie ab. Sobald die Energie ausreicht, um Elektronen aus einer weiter innen liegenden Schale zu schlagen, gibt es eine Erhöhung von  $\mu$ . Dies führt zu der Kantenstruktur (K-Kante, L-Kanten, usw.).

Ab etwa 0,5 MeV überwiegt die Compton-Streuung. Die Photonen geben Energie an Elektronen mit vergleichsweise kleiner Bindungsenergie ab:  $e^- + \gamma \rightarrow e^- + \gamma$ .

Ab etwa 5 MeV überwiegt die Paarbildung. Im Feld eines Kernes wandelt sich das Photon in ein Elektron-Positron-Paar um:



Der gesamte Absorptionskoeffizient setzt sich zusammen aus diesen 3 Anteilen

$$\mu = \mu_{Photo} + \mu_{Compton} + \mu_{Paar}$$

Die Materialabhängigkeit ist im wesentlichen gegeben durch die Kernladungszahl  $Z$ , d.h. durch die Zahl der Elektronen:

$$\mu \propto Z^4$$

Diese Tatsache wird in der Medizin für Röntgenaufnahmen genutzt. Organisches Gewebe enthält hauptsächlich  ${}^1_1\text{H}$ ,  ${}^{6,7}_8\text{C}$ ,  ${}^{7,8}_8\text{O}$ . Knochen enthalten viel Calcium ( ${}^{20}_{20}\text{Ca}$ ). Daher werden die Röntgenstrahlen in den Knochen viel stärker absorbiert.

Massenschwächungskoeffizient  $\mu' = \frac{\mu}{\rho}$  ( $\rho$  = Dichte) als Funktion der Photonenergie für einige Materialien:

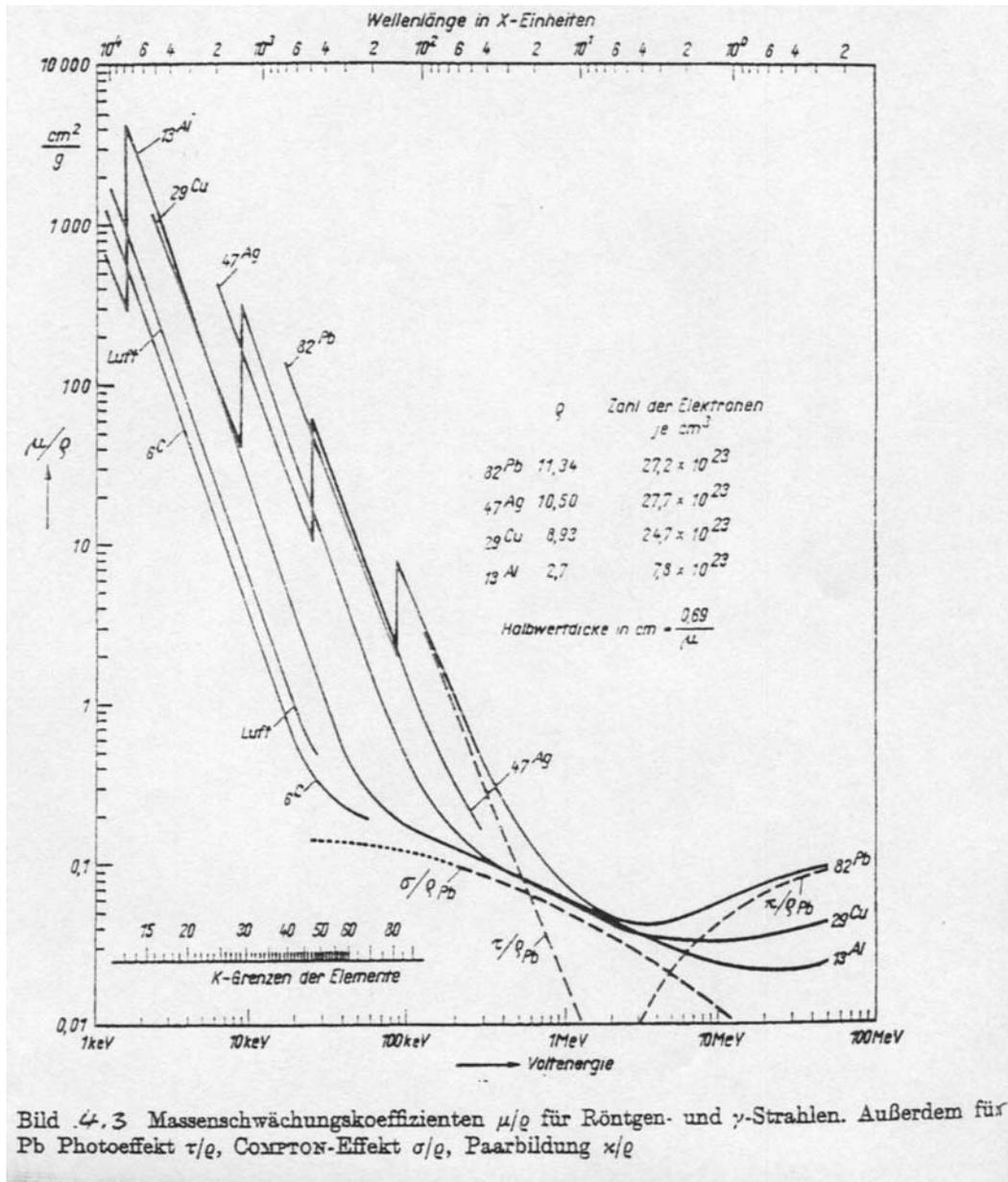


Bild 4.3 Massenschwächungskoeffizienten  $\mu/\rho$  für Röntgen- und  $\gamma$ -Strahlen. Außerdem für Pb Photoeffekt  $\tau/\rho$ , Compton-Effekt  $\sigma/\rho$ , Paarbildung  $\kappa/\rho$

Für chemische Verbindungen berechnet sich der Massenabsorptionskoeffizient aus denen der einzelnen Atome, gewichtet mit ihrem Massenanteil.

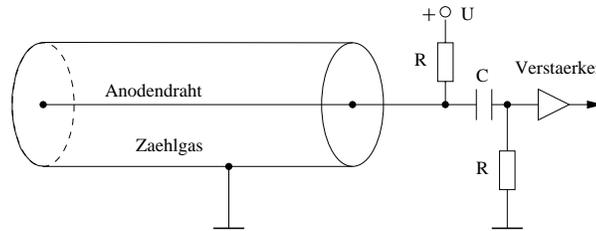
## 5.2 Energiemessung von Röntgenstrahlung

Wie kann man die Energie von Röntgen-Quanten oder von Photonen mit noch höherer Energie messen?

1. Messung der Wellenlänge durch Bragg-Reflexion (Kap. 1.3)  
Diese Methode funktioniert natürlich nur solange die Wellenlänge der Photonen nicht sehr viel kleiner ist als die Gitterkonstante, d.h. Atomabstände.

## 2. Messung der Energie durch Proportionalzählrohr, Szintillationszähler, Halbleiterzähler

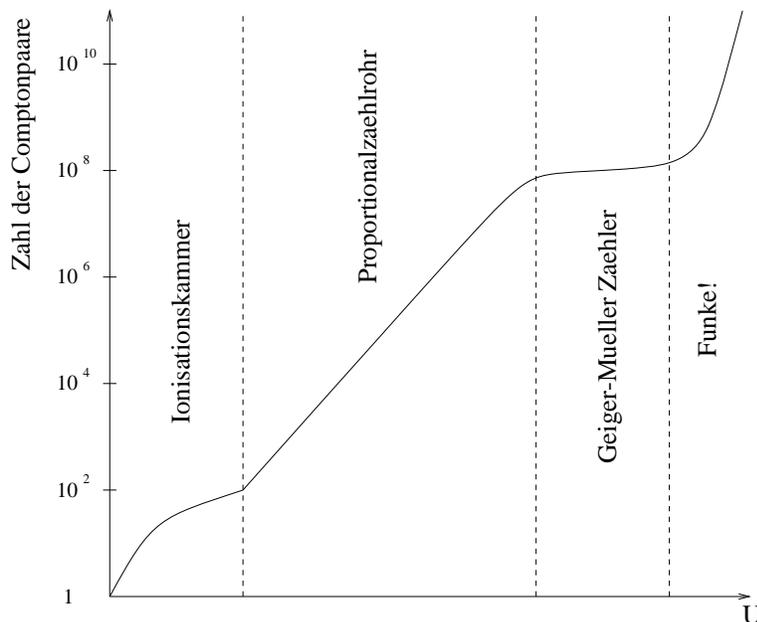
Proportionalzählrohr: ( $U \approx 1 - 10kV$ )



Das elektrische Feld im Inneren des Rohres ist  $E = \frac{U}{\ln \frac{r_a}{r_i}} \frac{1}{r}$ .  $r$  ist der Abstand vom Anodendraht, der im Zentrum des Rohres ist.  $r_a$  ist der Radius des Rohres,  $r_i$  ist der Radius des Drahtes, typisch  $10\mu m - 50\mu m$ .

Durchfliegt ein geladenes Teilchen das Zählgas, so ionisiert es die Atome und wird dabei abgebremst. Es verliert die Energie pro Wegstrecke  $\frac{dE}{dx} < 0$ . Durch das angelegte elektrische Feld driften die Elektronen und die Gasionen zum Draht bzw. zum Rohr. In der Nähe des Anodendrahts wird die Feldstärke sehr groß. Die Elektronen werden beschleunigt bis sie ihrerseits wieder Elektronen aus Atomen schlagen, die wiederum beschleunigt werden usw. Die so entstehende Lawine kann man elektrisch auf dem Draht nachweisen (Ladungsmessung).

Schematische Abhängigkeit der Zahl der erzeugten Ionenpaare von der angelegten Spannung.



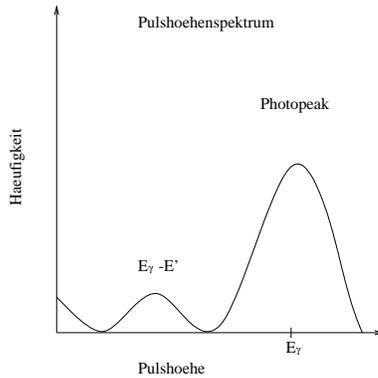
Die Spannung  $U$  hängt von der Gasart, dem Druck und dem Drahtdurchmesser ab.

Typische Werte:  $U \approx 1 - 10kV$

Im Proportionalbereich ist die gemessene Ladung in etwa proportional zum Energieverlust  $\frac{dE}{dx}$  des geladenen Teilchens, daher kann dessen Energie gemessen werden. Zur korrekten Energiemessung muss das geladene Teilchen im Proportionalrohr gestoppt werden. Bei höheren angelegten Spannungen wird das elektrische Feld durch die Präsenz der positiven Gasionen so reduziert, dass eine Sättigung eintritt (Geiger-Müller-Bereich). Bei weiterer Erhöhung der Spannung wird das Gas leitend und es bildet sich ein Funke aus.

Durch Wechselwirkungen mit der Materie geben Photonen Energie an geladene Teilchen (Elektronen) ab, so dass man auch Photonenenergien messen kann:

- Photoeffekt:



Die Energie des Photons wird vollständig an ein Elektron abgegeben, dessen kinetische Energie dann von dem Proportionalrohr gemessen wird. Beim Auffüllen der Lücke in der Elektronenhülle entstehen Photonen (Fluoreszenzquanten). Wenn diese ebenfalls im Gas wechselwirken, wird die volle Energie des einfallenden Photons gemessen (Photopeak). Wenn Fluoreszenzquanten entweichen, entstehen weitere Maxima im Spektrum.

- Comptoneffekt:

Das Photon gibt Energie an ein Elektron ab. Die Wellenlänge des Photons ändert sich dabei um

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos \Theta) \quad \lambda_c = \frac{h}{m_e c} \text{ Comptonwellenlänge}$$

Die kinetische Energie der gestoßenen Elektronen hängt vom Streuwinkel  $\Theta$  des Photons ab, d.h. die Elektronen werden ein kontinuierliches Spektrum besitzen. Man findet für die kinetische Energie des Elektrons:

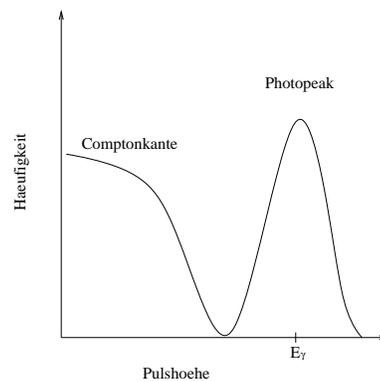
$$E_k = E_\gamma \frac{\eta(1 - \cos \Theta)}{1 + \eta(1 - \cos \Theta)} \quad \eta = \frac{E_\gamma}{m_e c^2}$$

(Beweis siehe Übung)

Das Elektron kann nicht die gesamte Energie des Photons  $E_\gamma$  übernehmen. Die maximale kinetische Energie (max. Änderung der Wellenlänge des Photons) wird für  $\Theta = 180^\circ$  erreicht:

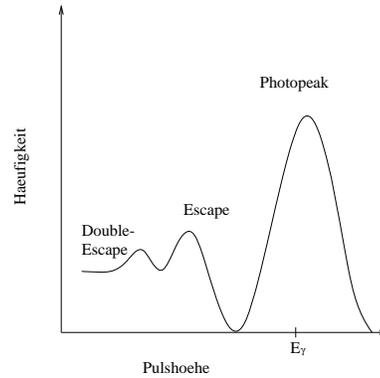
$$E_k^{max} = E_j \frac{2\eta}{1 + 2\eta} < E_\gamma$$

Wenn das gestreute Photon nicht mehr wechselwirkt, wird also maximal  $E_k^{max}$  nachgewiesen (Comptonkante).



- Paarbildung ( $\gamma \rightarrow e^+ + e^-$ ):

Die Energie des Photons wird in Ruheenergie ( $2m_e c^2$ ) und kinetische Energie von Elektron und Positron umgewandelt. Nach dem das Positron abgebremst wurde, zerstrahlt es mit einem Elektron der umgebundenen Materie

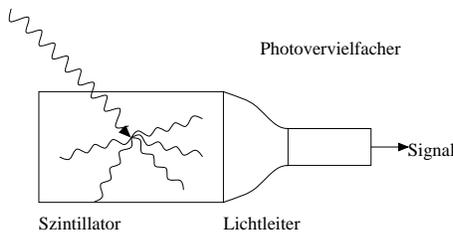


Wenn diese Photonen nicht mehr mit dem Detektormaterial wechselwirken reduziert sich die gemessene Energie um  $m_e c^2$  bzw.  $2m_e c^2$  (Escape-Peak, Double-Escape-Peak).

Normalerweise finden alle drei Prozesse im Detektormaterial statt und das beobachtete Pulshöhenspektrum enthält alle hier beschriebenen Charakteristika. Die Ausprägung von Photopeak, Compton-Kante und Escape-Peak hängt natürlich von der Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors für Photonen ab, d.h. wegen  $I(x) = I_0 e^{-\mu x}$  vom verwendeten Material und der Geometrie.

Für Proportionalrohre benutzt man Gase mit hohem  $Z$ , z.B. Argon.

Bei hohen Energien verwendet man meistens Szintillatoren. Das sind Festkörperkristalle wie  $NaJ$  oder  $BGO$  ( $Bi_4Ge_3O_{12}$ ). Es gibt auch organische Verbindungen (Plastik).



Das einfallende Photon regt die Elektronen im Kristall an, d.h. sie werden auf Zustände höherer Energie gehoben. Durch Aussendung von Licht, d.h. Photonen im Bereich von eV, fallen die Elektronen wieder in den Grundzustand zurück. Diese Photonen werden in einem Photovervielfacher nachgewiesen. Der Trick beim Szintillator ist, dass das Material für das eigene Licht durchlässig sein muss!

Die zugrundeliegenden Wechselwirkungen des einfallenden, hochenergetischen Photons mit dem Szintillator sind die gleichen wie im Proportionalrohr. Daher gelten hier auch die oben beschriebenen Strukturen in dem Pulshöhenspektrum. Der Vorteil des Szintillators gegenüber der Proportionalkammer ist die hohe Dichte des Detektormaterials und damit die große Nachweiswahrscheinlichkeit für Photonen.

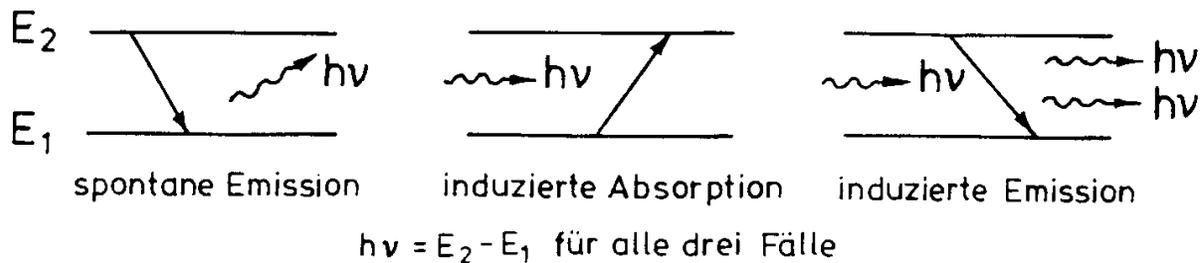
# 6 Laser

LASER: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Ein MASER arbeitet nach dem gleichen Prinzip im Mikrowellenbereich ( $\lambda = 10^{-5}m - 10^{-1}m$ ).

## 6.1 Prinzip des Lasers

Es basiert auf der induzierten Emission von Photonen. Es gibt drei grundlegende Prozesse der Wechselwirkung von Photonen und Elektronen in Atomen:



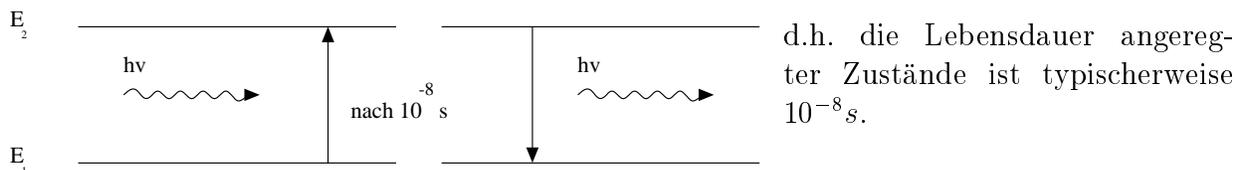
Induzierte Emission kann nur erreicht werden, wenn sich mehr Elektronen im Zustand 2 als im Zustand 1 aufhalten  $N_2 > N_1$  (Besetzungsumkehr). Normalerweise ist aber  $N_1 \gg N_2$ . Im thermischen Gleichgewicht sind die Besetzungszahlen durch die Boltzmann-Verteilung gegeben:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{(E_1-E_2)}{kT}} \quad k = 8,617 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}} \text{ Boltzmann-Konstante}$$

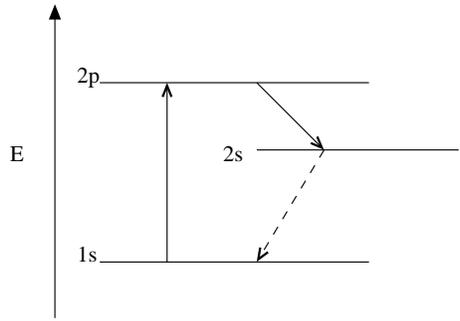
Z.B. ist im Wasserstoratron  $E_2 - E_1 = 10,2\text{eV}$  und bei einer Temperatur von  $T = 1000\text{K}$  ist  $\frac{N_2}{N_1} = 4 \cdot 10^{-52}$ !

Besetzungsumkehr kann durch optisches Pumpen auf einen metastabilen Zustand erreicht werden:

Normalerweise fällt ein angeregtes Elektron nach sehr kurzer Zeit, typisch  $10^{-8}\text{s}$ , wieder auf den Ausgangszustand zurück.



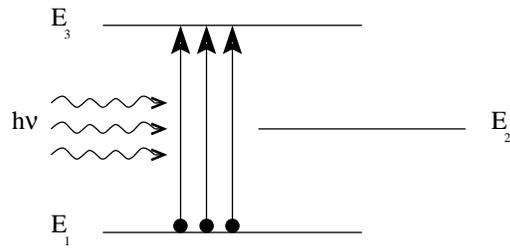
Es gibt nun Zustände, auf denen sich das Elektron wesentlich länger aufhalten kann, weil der Übergang in den Grundzustand durch Auswahlregeln verboten (genauer genommen: stark unterdrückt) ist, z.B.:



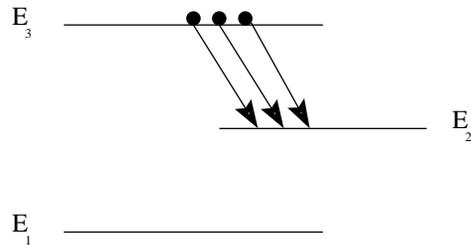
Der Übergang  $2s \rightarrow 1s$  ist stark unterdrückt, da für elektrische Dipolstrahlung die Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$  gilt. Der Übergang  $\Delta l = 0$  (Umklappen des Spins!) ist etwa  $10^5$  mal seltener!

**⇒ Funktionsweise des 3-Niveau Lasers**

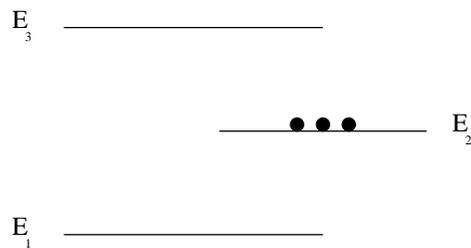
1. Anregung der Atome, z.B. durch Einstrahlung von  $h\nu = E_3 - E_1$



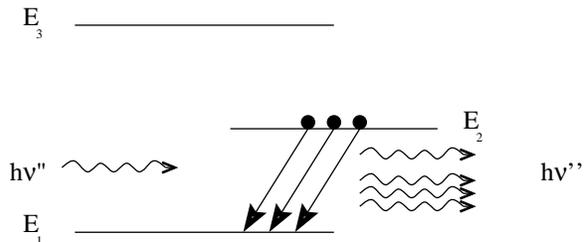
2. Innerhalb von  $\approx 10^{-8}s$  gehen die Elektronen in den metastabilen Zustand  $E_2$  über, unter Aussendung von Licht  $h\nu' = E_3 - E_2$  oder auch strahlungslos durch Stöße der Atome.



3. Es sind sehr viele Atome vorhanden, bei denen Elektronen in einem metastabilen Zustand sind (Lebensdauer  $\approx 10^{-3}s$ ) Besetzungsumkehr



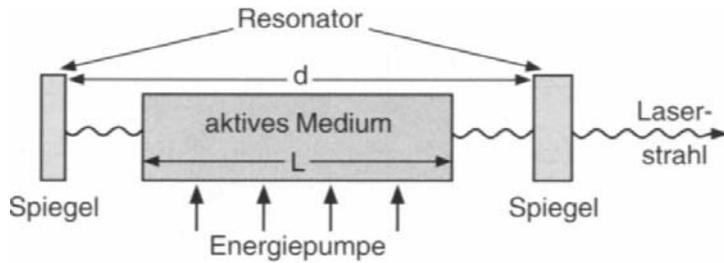
4. Durch Einstrahlung weniger Photonen  $h\nu'' = E_2 - E_1$  wird die Emission weiterer Quanten induziert. In kurzer Zeit kehren die Elektronen aller Atome wieder in den Grundzustand zurück. Induzierte Emission = Lichtverstärkung



Bei spontaner Emission sind die einzelnen Photoemissionen unabhängig voneinander: Strahlung in alle Richtungen, Phasen der Wellen sind beliebig zueinander (inkohärente Strahlung).

Bei induzierter Emission haben die erzeugten Photonen die gleiche Richtung und stehen mit dem eingestrahlteten Photon in einer festen Phasenbeziehung (kohärente Strahlung).

## 6.2 Aufbau eines Lasers



Zur Auskopplung des Laserlichts ist ein Spiegel halbdurchlässig.

Abb. 8.1. Aufbauprinzip eines Lasers

Ein Laser besteht im wesentlichen aus drei Komponenten:

- Dem aktiven Medium, in dem durch Energiezufuhr eine Besetzungsinversion erzeugt wird, z.B. *He-Ne* Gas, Rubinkristall, Halbleiter, ...
- Der Energiepumpe, die die Besetzungsinversion erzeugt, z.B. Blitzlampe, Gasentladung, Laser
- Dem optischen Resonator, bestehend aus zwei Spiegeln. Der Abstand  $d$  der Spiegel ist so abgestimmt, dass sich eine stehende Welle ausbildet:  

$$2d = \frac{\lambda}{n} m, \quad n: \text{Brechungsindex} \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

Eigenschaften des Laserlichts:

- räumlich kohärent: alle austretenden Wellenzüge schwingen mit gleicher Phase
- zeitlich kohärent: die Phasen der Wellenzüge bleiben entlang des Strahls unverändert. Das bewirkt, dass das Laserlicht sehr monochrom ist ( $\frac{\Delta\nu}{\nu} \approx 10^{-15}$ )
- starke Bündelung des Lichtes: durch die zwei parallelen Spiegel werden nicht-parallele Strahlen nicht verstärkt

Beispiel für einen Laser: der Helium-Neon-Laser

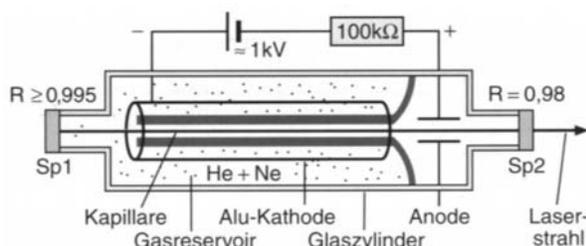


Abb. 8.8. Aufbau eines He-Ne-Lasers

Ein Glasrohr ( $\phi \sim 1\text{cm}$ ) ist mit einem Gemisch von *He* und *Ne* (7:1) gefüllt. Durch Gasentladung werden die *He*- und *Ne*-Atome durch Stöße mit Elektronen angeregt. Insbesondere entlang der Längsachse, an der die Feldstärke hoch ist (Kapillare).

## Termschemata von $He$ und $Ne$ :

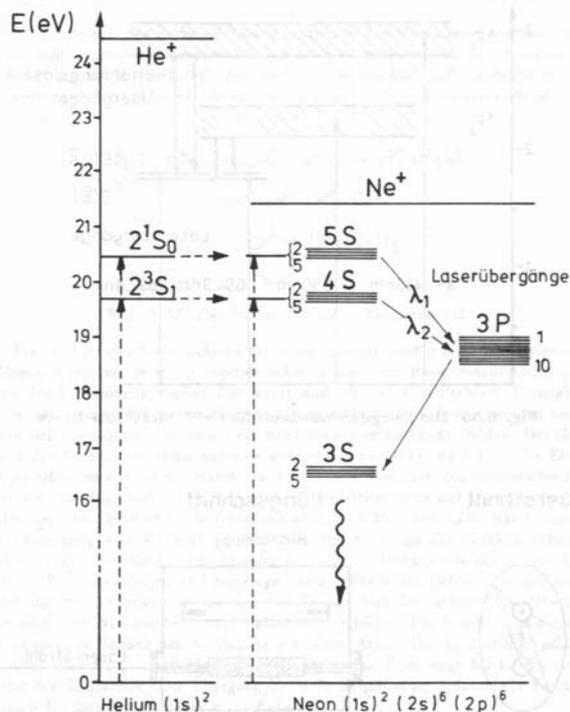


Fig. 6.54: Das Energieniveauschema für den Helium-Neon-Laser.

Einige der angeregten  $He$ -Atome fallen auf die metastabilen  $2^1s$  und  $2^3s$  Zustände. Diese können nicht für den Laserbetrieb benutzt werden, weil die  $1s$  Zustände noch wesentlich stärker benutzt sind, d.h. keine Besetzungsumkehr. Durch Stöße mit Neon-Atomen können diese metastabilen Zustände die Energie auf Neon-Atome übertragen. Das funktioniert besonders gut mit Neon, da es Anregungszustände mit fast der gleichen Energie besitzt, z.B.:

$$Ne : E_{5S} - E_{2P} = 20,66\text{eV}$$

$$He : E_{2S} - E_{1S} = 20,61\text{eV}$$

Damit erreicht man eine Besetzungsinversion beim Neon: die  $5s$  und  $4s$  Zustände sind stärker bevölkert als z.B. der  $3p$  Zustand. Diese Übergänge kann man durch Auswahl des Spiegelabstandes für Laserlicht nutzen. Besonders häufig nutzt man den Übergang  $5s \rightarrow 3p$  aus:  $\lambda_1 = 632,8\text{nm}$ .

Der Übergang  $3p \rightarrow 3s$  erfolgt durch spontane Lichtemission und der  $3s$  Zustand wird durch Stöße mit den Wänden abgebaut (deshalb dünnes Rohr!)

Es gibt viele verschiedene Lasertypen:

- Gaslaser:  $He-Ne$ ,  $CO_2$ ,  $Ar$
- Festkörperlaser: Rubin, Neodym - YAG ( $Nd - Y_3Al_5O_{12}$ )
- Farbstofflaser: bestehen aus Farbmolekülen (z.B. Rhodamin), die in einer Flüssigkeit (z.B. Äthylenglykol) gelöst sind.

Farbstofflaser und einige Festkörperlaser haben den Vorteil, dass die Wellenlänge des Laserlichts innerhalb eines bestimmten Bereichs kontinuierlich verändert werden kann. Die Auswahl der Wellenlänge erfolgt durch optische Methoden (Spiegel, Gitter). Dies ist möglich, weil sich in Festkörpern die diskreten Energieniveaus der Atome zu kontinuierlichen Bändern aufweiten.

Laser haben heute eine große Bedeutung:

- CD-Spieler, Strichcodeleser

- Bohren, Fräsen, Schneiden
- Medizin
- Entfernungsmessung, z.B. Erde-Mond

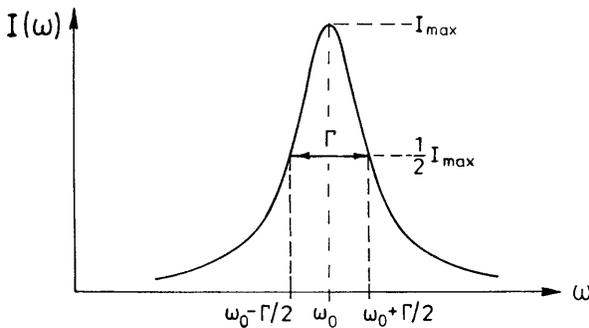
### 6.3 Breite der Spektrallinien

#### I Natürliche Linienbreite

Angeregte Zustände haben eine endliche Lebensdauer. Für einige Übergänge der elektrischen Dipolstrahlung ist die mittlere Lebensdauer  $\tau \approx 10^{-8} s$ , bei unterdrückten Übergängen ist sie sehr viel höher. Nach der Heisenbergschen Unschärferelation bedeutet dies aber, dass die Energie des angeregten Zustands nicht beliebig genau definiert ist bzw. nicht beliebig genau gemessen werden kann. Die Unschärfe der Energie  $\Delta E$  ist:

$$\Delta E \cdot \tau = \hbar$$

Die Energie des emittierten Photons ist deshalb nicht beliebig scharf definiert (Wellenpaket!). Wenn man die Energie vieler solcher Photonen mit sehr hoher Genauigkeit messen könnte, würde man folgende Intensitätsverteilung finden:



Lorentz-Kurve  

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

$$\omega = 2\pi\nu, \quad \Gamma = \frac{1}{\tau}$$
 (Ableitung siehe Otter/Honecker)

Die natürliche Linienbreite ist sehr klein, z.B. für  $\tau = 10^{-8} s$  ergibt sich

$$\underline{\underline{\Delta E = \frac{\hbar}{\tau} = \hbar\Gamma = 6,6 \cdot 10^{-8} eV}}$$

#### II Doppler-Verbreiterung

Die Temperaturbewegung der Atome führt zu einer Dopplerverschiebung des emittierten Lichts

$$\nu = \nu_0 \left( 1 + \frac{u}{c} \right) \quad u: \text{ Geschwindigkeitskomponente des Atoms entlang der Richtung des emittierten Photons (für } u \ll c \text{)}$$

Die thermische Bewegung der Atome wird durch die Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschrieben:

$$f(u)du = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} e^{-\frac{Mu^2}{2kT}} du \quad M: \text{ Masse des Atoms} \quad T: \text{ Temperatur}$$

Die thermische Bewegung der Atome bewirkt demnach eine Gauß-Verteilung der Frequenzen (Energien) um den Mittelwert  $E_0 = h\nu_0$ . Durch Einsetzen von  $u = (\nu - \nu_0) \frac{c}{\nu_0}$ ,  $du = \frac{c}{\nu_0} d\nu$  in die

rechte Seite und Umschreiben auf  $E = h\nu$  erhält man

$$I(E)dE = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(E-E_0)^2}{2\sigma^2}} dE \quad \text{mit } \sigma = \sqrt{\frac{kT}{Mc^2}} E_0$$

Die Verbreiterung der Linien auf Grund der Temperatur Bewegung ist also gegeben durch die Breite der Gauß-Glocke  $\sigma$ .

Achtung: Häufig definiert man als Linienbreite den Abstand  $\Gamma$  der beiden Punkte, bei denen die Gauß-Kurve auf die Hälfte des Maximalwerts abgefallen ist (FWHM: Full Width Half Maximum)

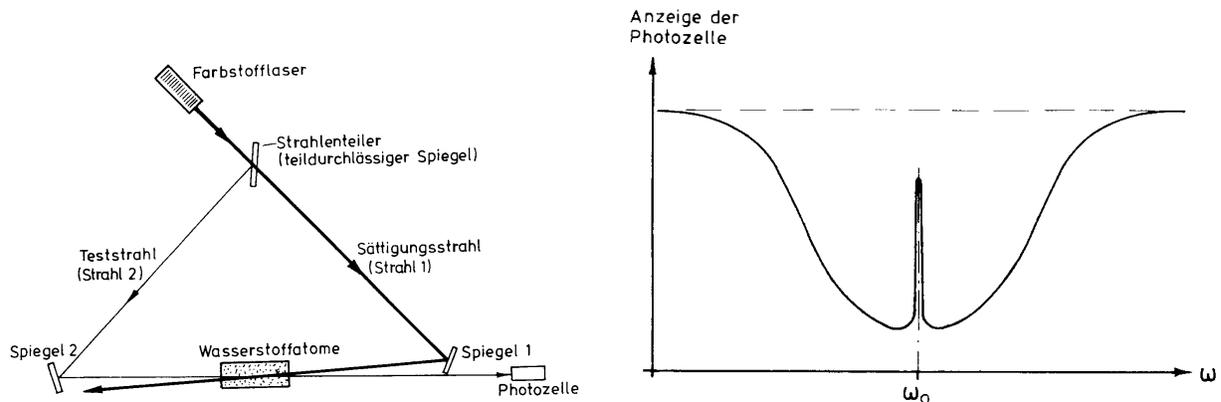
$$\Gamma = 2\sqrt{2\ln(2)}\sigma \approx 2,4\sigma$$

Die Doppler-Verbreiterung ist wesentlich größer als die natürliche Linienbreite, z.B. findet man für die  $H_\alpha$ -Linie ( $E_0 = 1,89\text{eV}$ ) des H-Atoms ( $Mc^2 = 938\text{MeV}$ ) bei  $T = 300\text{K}$ :

$$\sigma = 5,3 \cdot 10^{-6} E_0 = 10^{-5} \text{eV}$$

Eine Verbreiterung von ähnlicher Größenordnung wird durch Stöße der Atome verursacht. Sie hängt vom Gas und vom Druck ab.

### III Messung der natürlichen Linienbreite



Die Intensität des Teststrahl wird durch Absorption durch die H-Atome geschwächt. Die absorbierte Intensität folgt dabei der Doppler-Verbreiterung der Linie durch die thermische Bewegung der Atome. In der Nähe der Frequenz  $\omega_0$  tragen nur Atome bei, für die die Dopplerverschiebung Null ist, d.h. Atome die sich gar nicht oder senkrecht zum Laserstrahl bewegen. Diese Atome sind aber bereits zum großen Teil durch den wesentlich intensiveren Sättigungstrahl angeregt, d.h. stehen zur Absorption des Teststrahls nicht mehr zur Verfügung. Nur wenn die Laserfrequenz auf  $\omega_0$  abgestimmt ist, regen beide Strahlen die gleichen Atome an. Die Breite des Maximums bei  $\omega_0$  ist demnach allein durch die natürliche Linienbreite bestimmt.

## 7 Moleküle und Festkörper

Mit Ausnahme der Edelgase  $He, Ne, Ar, Xe, Rn$  treten alle anderen Atome im Allgemeinen gebunden in Molekülen und Festkörpern auf. Die beobachteten Strukturen reichen von einfachsten Molekülen aus zwei Atomen (z.B.  $H_2, O_2, CO$ ) bis hin zu sehr komplexen Molekülen (z.B.  $10^{10}$  Atome in einem DNS Molekül) oder Festkörperkristallen.

### 7.1 Bindungsarten

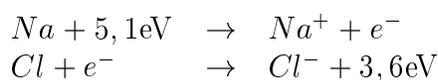
Bindung von Atomen tritt auf, wenn die Gesamtenergie der Atome im gebundenen Zustand niedriger ist, als wenn die Atome einzeln vorliegen. Dies wird realisiert durch das Arrangieren der (äußeren) Elektronen in Energiezuständen, die niedriger sind als diejenigen von einzelnen, separierten Atomen.

Klassifizierung von Molekülbindungen:

Typ	Mechanismus	Beispiel
Ionisch	Elektronenübertrag	$NaCl$
Kovalent	Teilen von Elektronen, mehrere Atome	$H_2$
H-Brückenbindung		DNS
van der Waals	Dipolanziehung	Wasser
Metallisch	Teilen von Elektronen, über sehr viele Atome	Metalle, Halbleiter

#### a) Ionenbindung

Wir betrachten als Beispiel  $NaCl$ . Im Bestreben abgeschlossene P-Schalen zu erhalten, gibt das Natrium sein äußeres Elektron an das Chlor ab. Die Ionisationsenergie für Natrium ist  $5,1\text{eV}$ , während man  $3,6\text{eV}$  gewinnt, wenn man dem Chlor-Atom ein Elektron hinzufügt (Elektronaffinität). Für weit entfernte  $Na^+$ - und  $Cl^-$ -Ionen sieht die Energiebilanz wie folgt aus:

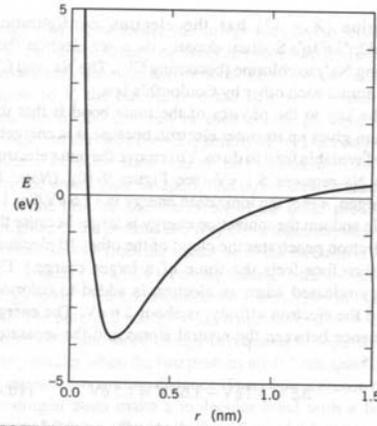


Die Bindung beruht nun auf der elektrostatischen Anziehung der entgegengesetzt geladenen Ionen. Die potentielle Energie zwischen den beiden Ionen als Funktion des Abstandes setzt sich zusammen aus drei Anteilen: Differenz von Ionisationsenergie und Elektronaffinität, elektrostatische Anziehung, sowie Abstoßung der Elektronenhüllen:

$$V(r) = 1,5\text{eV} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + C \frac{e^{-ar}}{r}$$

( $C, a$  sind Konstanten)

Die Abstoßung bei kleineren Abständen, beschrieben durch den Term  $C \frac{e^{-ar}}{r}$ , kann man auch als Folge des Pauli-Prinzips auffassen. Bei sehr kleinen Abständen überlappen die Wellenfunktionen der Elektronen. Da deren Wellenfunktion antisymmetrisch sein muss, werden sie zum Teil auf höhere Energieniveaus gezwungen.



**FIGURE 10-3 Molecular potential.** Total energy (ionization + affinity + Coulomb attraction + Pauli exclusion principle) versus separation distance  $r$  between  $\text{Na}^+$  and  $\text{Cl}^-$ .

Für  $\text{NaCl}$  findet man die minimale potentielle Energie (Bindungsenergie)

$$E_b = -3,6\text{eV} \quad \text{bei einem Abstand von } r = 2,4 \cdot 10^{-10}\text{m} \quad (\text{für ein } \text{NaCl}\text{-Molekül}).$$

Für einen  $\text{NaCl}$ -Kristall findet man  $E_b = -6,4\text{eV}$  und  $r = 2,8 \cdot 10^{-10}\text{m}$ .

Elektrisches Dipolmoment:

Zwei ungleichnamige Ladungen  $Q$  im Abstand  $d$  besitzen ein elektrisches Dipolmoment

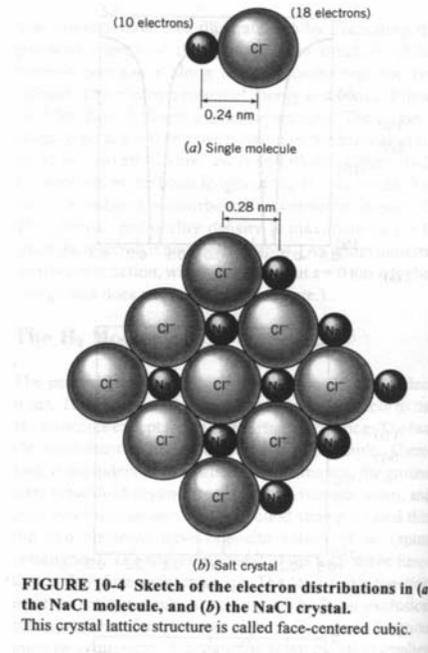
$$P = Qd$$

Für das  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$ -Molekül würden wir also ein Dipolmoment von

$$\begin{aligned} P &= e \cdot d \\ &= 1,6 \cdot 10^{-19}\text{As} \cdot 2,4 \cdot 10^{-10}\text{m} \\ &= 3,8 \cdot 10^{-29}\text{Asm} \end{aligned}$$

erwarten. Experimentell findet man aus der Verschiebung der Energieniveaus im elektrischen Feld:  $P = 3,0 \cdot 10^{-29}\text{Asm}$ . Da man den Abstand der beiden Atome sehr gut messen kann, interpretiert man den experimentellen Wert von  $P$  so, dass der effektive Wert der Ladung nicht  $e$  sondern  $0,8e$  ist. Anders ausgedrückt: Das äußere Elektron hält sich im Mittel 80% der Zeit beim Chlor auf, den Rest der Zeit beim Natrium.

Skizzen eines  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$ -Moleküls und der Struktur eines  $\text{NaCl}$ -Kristalls:



**FIGURE 10-4 Sketch of the electron distributions in (a) the  $\text{NaCl}$  molecule, and (b) the  $\text{NaCl}$  crystal.** This crystal lattice structure is called face-centered cubic.

Ionenkristalle sind Nichtleiter. Die Elektronen sind an die Atome gebunden und deshalb gibt es keine frei beweglichen Ladungsträger. In Flüssigkeiten gelöste Ionenkristalle leiten den elektrische Strom, weil sich die Ionen selbst, z.B.  $\text{Na}^+$  und  $\text{Cl}^-$ , relativ frei in der Flüssigkeit bewegen können.

## b) Kovalente Bindung

Diese Bindungsart zeichnet sich dadurch aus, dass sich mehrere Atome ein oder mehrere äußere Elektronen teilen, in dem Bestreben äußere Schalen aufzufüllen.

Das aller einfachste Beispiel ist das  $H_2^+$ -Molekülion, bestehend aus 2 Wasserstoffkernen und einem Elektron. Für dieses Molekül kann die Schrödinger Gleichung exakt gelöst werden (siehe z.B. Demtröder oder Otter-Honecker).

$H_2^+$ -Lösung:

Wellenfunktion des Elektrons

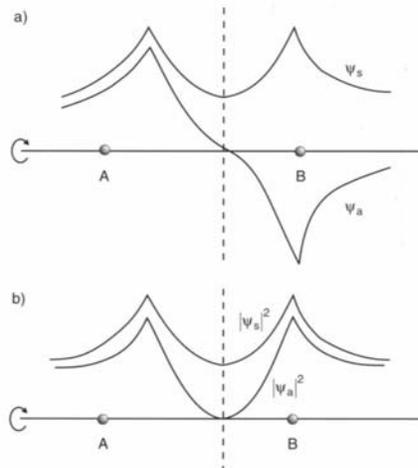


Abb. 9.8a,b. Schnitt durch die zylindersymmetrischen Funktionen (a)  $\psi_s$  und  $\psi_a$ ; (b)  $|\psi_s|^2$  und  $|\psi_a|^2$

Energie als Funktion des Protonenabstandes R:

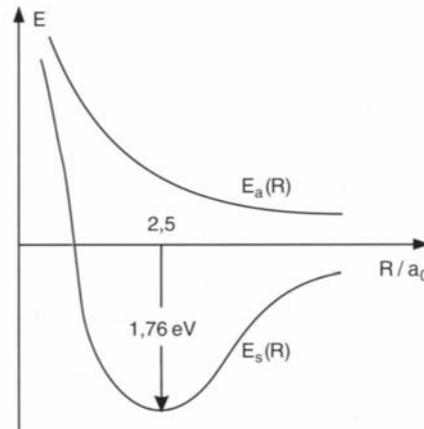


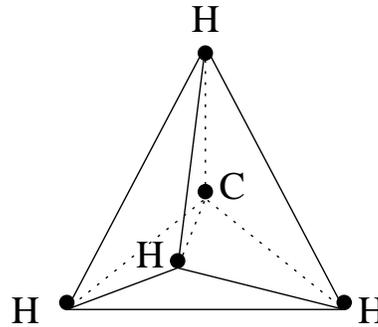
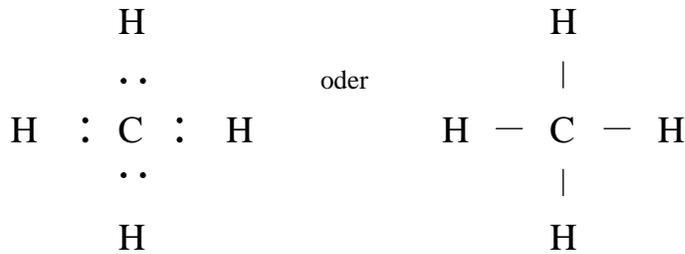
Abb. 9.9. Potentialkurven  $E_s(R)$  und  $E_a(R)$  für die symmetrische Elektronendichteverteilung  $|\psi_s(R)|^2$  und für die antisymmetrische Verteilung  $|\psi_a(R)|^2$

Es gibt zwei Lösungen für die Wellenfunktion, von denen eine ( $\Psi_s$ ) einem gebundenen Zustand entspricht. Zwei Effekte tragen zur Bindung bei:

- Die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons zwischen den beiden Kernen reduziert deren Abstoßung. Beide Protonen werden durch das Elektron in die Mitte gezogen.
- Das Elektron hat mehr Raum als in einem  $H$ -Atom. Deshalb wird seine Ortsunschärfe größer und die Impulsunschärfe kleiner. Das führt zu einer Reduzierung der kinetischen Energie  $T = \frac{p^2}{2m_e}$ .

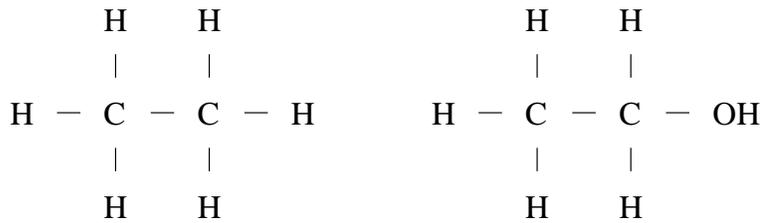
Bei  $H_2$ -Molekülen sind zwei Elektronen vorhanden, die sich auch bevorzugt zwischen den Kernen aufhalten. Weil sie sich praktisch im gleichen Energiezustand befinden, sind wegen des Pauli-Prinzips ihre Spins entgegengesetzt ( $\uparrow\downarrow$ ).

Andere einfache Beispiele für kovalente Bindungen sind die Gase  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO_2$ . Sehr wichtig sind die kovalenten Bindungen des Kohlenstoffs, die die Grundlage der organischen Chemie bilden. Im Kohlenstoffatom ist die L-Schale mit vier Elektronen genau zur Hälfte besetzt. Deshalb ist eine Bindung mit vier Wasserstoffatomen möglich. Das einfachste organische Molekül ist das Methan  $CH_4$ :



Das Methan-Molekül bildet einen Tetraeder mit dem Kohlenstoffatom in der Mitte und den vier Wasserstoffatomen an den Ecken.

Auf der Eigenschaft des Kohlenstoffs, vier Elektronen für kovalente Bindungen zur Verfügung zu halten, beruht die organische Chemie mit ihren komplexen, vielseitigen Molekülen, z.B.:



Äthan,

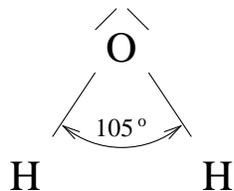
Äthanol ,....

Die Bindungsenergien pro Molekül liegen bei der kovalenten Bindung, ebenso wie bei der Ionenbindung, in der Größenordnung von eV, also den Bindungsenergien der äußeren Elektronen eines Atoms. Auch bei der kovalenten Bindung ist die elektrische Leitfähigkeit gering.

Kovalente Bindung kann zur Kristallbildung führen, z.B. der Diamant, der aus Kohlenstoff besteht. Häufiger werden Festkörper aber durch van der Waals Bindungen der Moleküle aufgebaut.

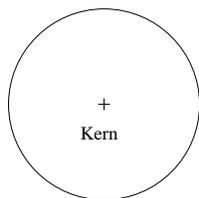
### c) Van der Waals Bindung

Diese Bindung beruht auf der Anziehung elektrischer Dipole. Symmetrisch aufgebaute Moleküle ( $\text{H}_2, \text{N}_2, \text{O}_2, \dots$ ) haben kein permanentes elektrisches Dipolmoment. Es gibt aber Moleküle, die ein solches besitzen, z.B. das Wasserstoffmolekül:

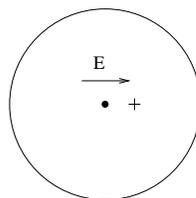


Das Molekül ist abgewinkelt, die beiden  $\text{H}$ -Atome bilden einen Winkel von  $105^\circ$ . Die Elektronenaffinität des Sauerstoffs bewirkt, dass sich die Elektronen der  $\text{OH}$ -Bindung im Mittel näher beim Sauerstoffatom aufhalten.

Ein induziertes Dipolmoment entsteht durch Verschiebung der Ladungen in einem äußeren elektrischen Feld.



Elektronenhuelle



Dipolmoment  $\vec{p} = \alpha \vec{E}$   
 $\alpha$ : Polarisierbarkeit  
 $\vec{E}$ : elektrisches Feld

Die potentielle Energie eines elektrischen Dipols ist  $V = -\vec{p}\vec{E}$ , analog zur potentiellen Energie eines magnetischen Dipols. Van der Waals Bindungen treten nun dadurch auf, dass sich die Moleküle gegenseitig auf Grund von Schwingungen ein Dipolmoment induzieren. Das Dipolmoment eines Moleküls induziert ein Dipolmoment im Nachbarmolekül und umgekehrt. Das Feld eines Dipols ist  $E \propto \frac{1}{r^3}$ , deshalb gilt für die potentielle Energie:

$$V \propto E^2 \propto \frac{1}{r^6} \quad \text{oder wegen } \vec{F} = -\text{grad}(V) \quad F \propto \frac{1}{r^7}$$

Die van der Waals Kräfte fallen sehr schnell mit dem Abstand ab; diese Bindungen haben nur eine kurze Reichweite. Außerdem sind die Bindungsenergien klein  $0,01\text{eV} - 0,1\text{eV}$ . Wasser ist eine Ausnahme (permanenter Dipol!) und hat deshalb einen relativ hohen Siedepunkt, z.B. im Vergleich zu  $H_2, O_2, CO_2, \dots$

#### d) Metallische Bindung

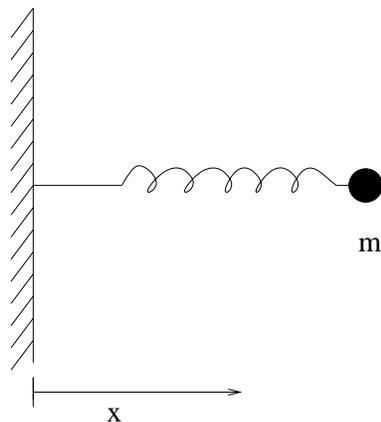
Hier handelt es sich um eine kovalente Bindung, bei der es aber nicht gelingt abgeschlossene Schalen zu finden. Sie tritt bei Metallen und Halbleitern auf. Die Bindungselektronen sind nicht auf einige Atome verteilt, sondern über sehr viele (makroskopische Ausdehnung von Kristallen). In Metallen sind diese Elektronen frei beweglich, was die elektrische Leitfähigkeit erklärt. Näheres: siehe Festkörperphysik.

## 7.2 Molekülschwingungen und Rotationen

Moleküle senden sehr komplizierte Spektren aus, die aus Gruppen von eng benachbarten Linien bestehen (Bänder). Der Grund ist, dass neben den Anregungen der Elektronenhüllen auch Schwingungen und Rotationen der Moleküle angeregt werden können.

#### a) Schwingungen

Klassischer harmonischer Oszillator:



$$\begin{aligned} \vec{F}_r &= -D\vec{x} & \vec{F}_x &= -m\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} \\ \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{D}{m}x &= 0 & \omega_0^2 &= \frac{D}{m} \\ \text{Potentielle Energie:} & & & \\ V(x) &= -\int_0^x F_r d\xi = D \int_0^x \xi d\xi = \frac{1}{2}Dx^2 \\ & \text{(für } V(x=0) = 0) & & \end{aligned}$$

Quantenmechanische Beschreibung eines harmonischen Oszillators durch stationäre Schrödinger Gleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + [E - V(x)]\phi(x) = 0$$

Für das Potential setzen wir das klassische Resultat  $V(x) = \frac{1}{2}Dx^2$  ein. Wir erhalten diese Form des Potentials, wenn wir eine Taylorentwicklung des Ansatzes für die potentielle Energie eines

Moleküls als Funktion des Atomabstandes für kleine Auschläge um das Minimum machen. Zur Erinnerung: Formel für eine Taylorentwicklung der Funktion  $f(x)$  um die Stelle  $x = x_0$ :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x - x_0)^n}{n!} \left[ \frac{d^n f}{dx^n} \right]_{x=x_0}$$

Das Einsetzen des Potentialansatzes in die Schrödinger Gleichung ergibt:

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \left[ E - \frac{1}{2} D x^2 \right] \phi(x) = 0}$$

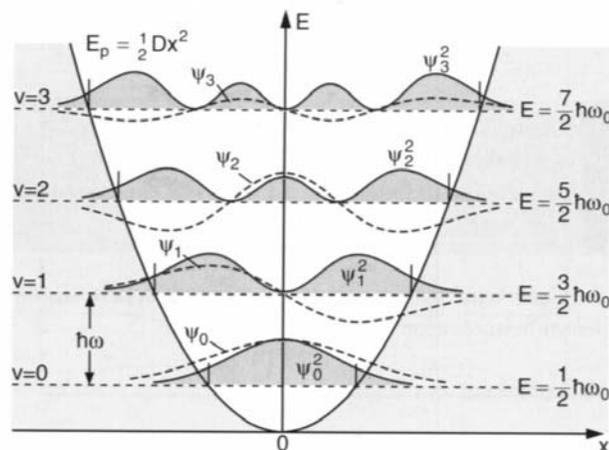
Die Lösungen dieser Gleichung sind hermitesche Polynome, die von einer Quantenzahl  $n$  abhängen,  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= C e^{-y^2} & y &= \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x & \omega_0 &= \sqrt{\frac{D}{m}} \\ \phi_2(x) &= C y e^{-y^2} \\ \phi_3(x) &= C \left[ y - \frac{1}{4} \right] e^{-y^2} \\ \phi_4(x) &= C \left[ y^3 - \frac{3y}{4} \right] e^{-y^2} \\ &\dots \end{aligned}$$

Die Quantenzahl charakterisiert die erlaubten Energieniveaus. Die erlaubten Energien sind gequantelt.

$$\boxed{E_n = \left[ n + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_0}$$

Quantenmechanischer, harmonischer Oszillator:  
Wellenfunktionen und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten



**Abb. 4.19.** Äquidistante Energieniveaus und Quadrate der Wellenfunktion im Parabelpotential des harmonischen Oszillators

Beachte, dass für  $n = 1$  das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei  $x = 0$  liegt. Beim

klassischen Oszillator ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den Umkehrpunkten maximal, denn dort ist die Geschwindigkeit Null. Dieser klassische Fall ergibt sich aus der quantenmechanischen Beschreibung für große Quantenzahlen  $n$  (Korrespondenzprinzip).

Z.B. für  $n = 11$

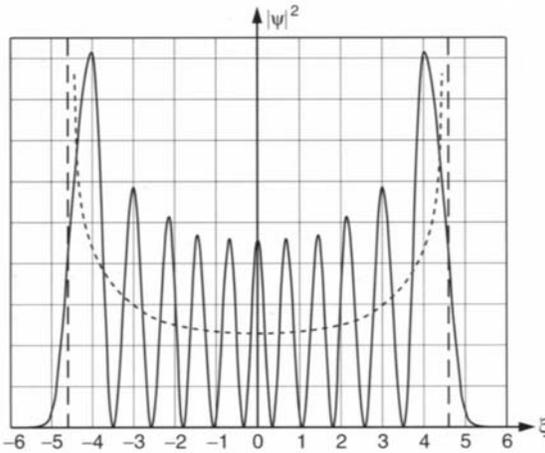


Abb. 4.20. Klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit als Mittelwert der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte für große Schwingungsquantenzahlen  $v$ , hier für  $v = 10$ . Die Abszisse ist in Einheiten von  $\xi = x \cdot \sqrt{m\omega/\hbar}$  aufgetragen

Klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$W(x) = \frac{dt}{T} = \frac{1}{v(x)T} dx$$

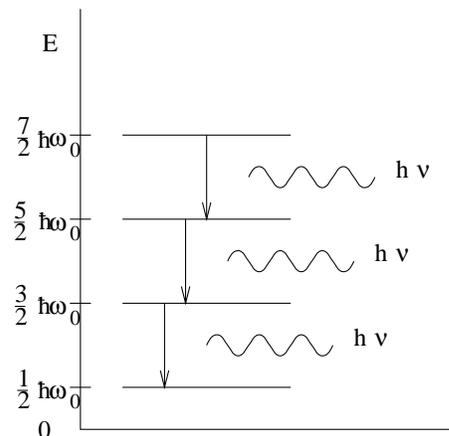
T: Schwingungsdauer

$$v(x) = \frac{dx}{dt}$$

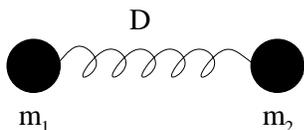
Diese Energieniveaus sind äquidistant:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0 = h\nu_0$$

Im Gegensatz zum klassischen Oszillator besitzt der quantenmechanische Oszillator eine Nullpunktsenergie  $E_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  die dem System nicht entnommen werden kann!



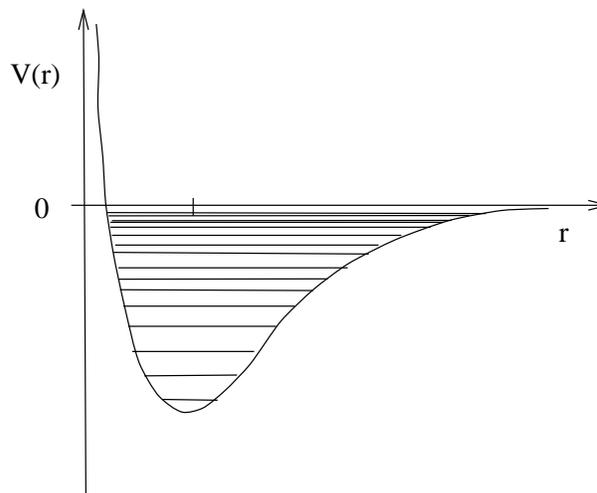
Näherungsweise können wir die Schwingungen der Moleküle als solch einen quantenmechanischen, harmonischen Oszillator beschreiben, z.B. für ein 2-atomiges Molekül.



Die Eigenfrequenz ergibt sich aus  $\omega_0 = \frac{D}{M}$ , wobei  $M = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$  die reduzierte Masse des Systems ist. Die Federkonstante erhalten wir aus der Taylorentwicklung des Potentials um das Minimum.

Für größere Ausschläge, d.h. große  $n$  gilt diese Näherung nicht mehr (der Oszillator ist nicht mehr harmonisch) und die Energieabstände sind nicht mehr äquidistant. Sie werden beliebig klein, wenn man sich der Dissociationsenergie nähert ( $V = 0$ ):

Die Energien für Schwingungsanregungen von Molekülen liegen in der Größenordnung  $\Delta E \approx 0,1\text{eV}$ , das entspricht infrarotem Licht. Elektromagnetische Wellen werden allerdings nur ausgesandt (bzw. absorbiert), wenn es zu einer Änderung des elektrischen Dipolmoments kommt (Auswahlregel  $\Delta n = \pm 1$ ). Bei symmetrischen Molekülen  $H_2, O_2$ , etc. und anderen Molekülen ohne Dipolmoment erfolgt die Anregung durch Stöße.

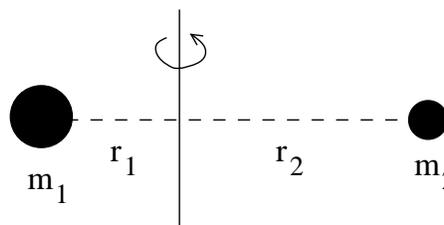


### b) Rotationen

Neben den Schwingungen, d.h. periodischen Änderungen des Atomabstandes, können bei Molekülen auch Rotationen angeregt werden. Einfachstes Beispiel ist die Rotation eines 2-atomigen Moleküls um den gemeinsamen Schwerpunkt:

Für die Rotation gilt

$$E_{rot} = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{L^2}{2I}$$



Das Trägheitsmoment ist  $I = \int r^2 dm$  oder  $\sum_i m_i r_i^2$  für diskrete Massenverteilungen. Für eine Rotation um den gemeinsamen Schwerpunkt gilt  $I = \mu d^2$  ( $d = r_1 + r_2$ ,  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ ). Wie jeder Drehimpuls in der Quantenmechanik ist auch der Drehimpuls bei Molekülrotation quantisiert (Bahndrehimpuls).

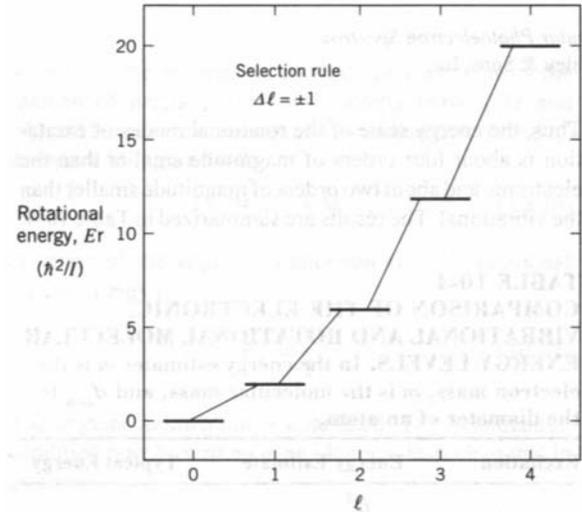
$$|\vec{L}| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Die möglichen Anregungsniveaus haben deshalb die folgenden Werte:

$$E_{rot} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

und für die Differenzen der Energiestufen erhält man

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{I}(l+1)$$



**FIGURE 10-9 Rotational energy levels of a molecule.** The energy units are the reduced Planck's constant squared divided by the moment of inertia of the molecule. The energy levels are proportional to  $l(l+1)$ , where  $l$  is the molecular angular momentum quantum number. The selection rules for transitions between levels are  $\Delta l = \pm 1$ . The order of magnitude of the photon energy from a typical transition is  $10^{-3}$  eV.

Die Anregungsenergien für Molekülrotationen liegen im Bereich von  $10^{-3}$  eV. Elektromagnetische Strahlung wird wiederum nur ausgesendet, falls es zu einer Änderung des elektrischen Dipolmoments kommt. (entspricht Mikrowellen)

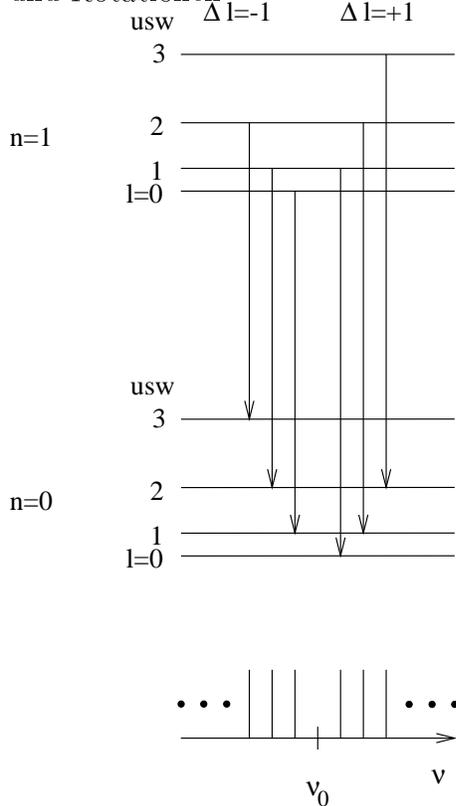
### 7.3 Molekülspektren

Die Anregungen von Molekülschwingungen und Rotationen überlagern sich. Hinzu kommen natürlich noch die Anregungen der Elektronenhülle. Für eine gegebene Anregung der Hülle ( $E_e$ ) hängt die Energie des Moleküls von den Quantenzahlen  $n$  (Schwingung) und  $l$  (Rotation) ab:

$$E_{nl} = E_e + \left(n - \frac{1}{2}\right) h\nu_0 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

$$\approx \text{eV} \quad \approx 0,1\text{eV} \quad \approx 0,001\text{eV}$$

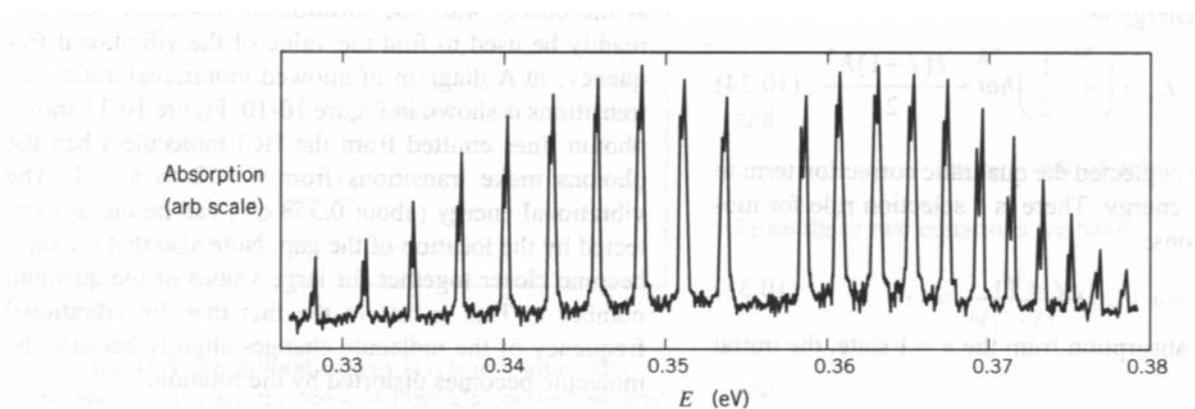
## Energieniveaus der Schwingungen und Rotationen



Frequenzspektren

Die Energieniveaus der Rotationsanregungen liegen sehr viel dichter beieinander als die der Schwingungen, d.h. es bildet sich ein Band aus eng beieinanderliegenden Linien. Wegen der Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$  gibt es bei  $\nu_0$  eine Lücke im Frequenzspektrum. Die Frequenzen  $\nu < \nu_0$  ( $\Delta l = -1$ ) nennt man P-Zweig, und  $\nu > \nu_0$  R-Zweig.

Ein Beispiel ist das Schwingungs- und Rotationsspektrum des  $HCl$ -Moleküls: Man beobachtet jeweils zwei Linien auf Grund der Präsenz der beiden Chlorisotope  $^{35}Cl$  und  $^{37}Cl$ . Die Energieabstände sind nicht genau äquidistant. Das Molekül wird durch die Rotation verzerrt und damit ändert sich die Eigenfrequenz der Schwingung  $\omega_0$ .



**FIGURE 10-11 Vibrational-rotational photon lines from the HCl molecule.**

The transitions are from the vibrational first excited state ( $n = 2$ ) to the vibrational ground state ( $n = 1$ ). The transitions obey the angular momentum selection rule,  $\Delta l = \pm 1$ . Each photon line is split in two due to the presence of both  $^{35}Cl$  and  $^{37}Cl$ . After R. L. Sproull and W. A. Phillips, *Modern Physics: The Quantum Physics of Atoms, Solids, and Nuclei*, Wiley (copyright © 1985).

Im Allgemeinen sind Molekülspektren komplizierter, und zwar aus folgenden Gründen:

a) Kompliziertere Moleküle haben mehrere Schwingungsmoden. Ein aus  $N$  Atomen bestehendes Molekül kann auf

$$3N - f_T - f_R = 3N - 3 - f_R$$

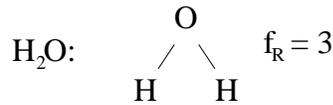
( $f_T = 3$  Translationsfreiheitsgrade des Schwerpunktes  
 $f_R$  Rotationsfreiheitsgrade)

Arten schwingen.

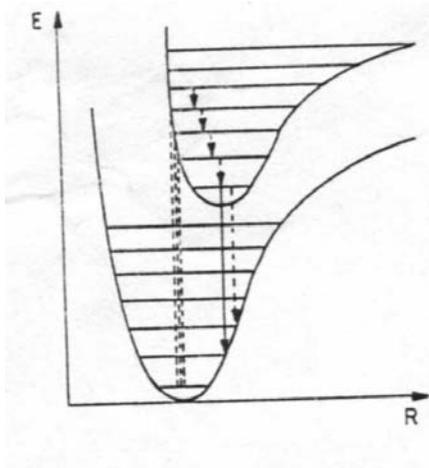
Beispiel:  $CO_2$   $O = C = O$ :  $3 \cdot 3 - 3 - 2 = 4$  Schwingungsmoden

b) Moleküle haben bis zu drei Rotationsfreiheitsgrade

z.B.  $H_2$ :



c) Anregungen der Elektronenhülle:

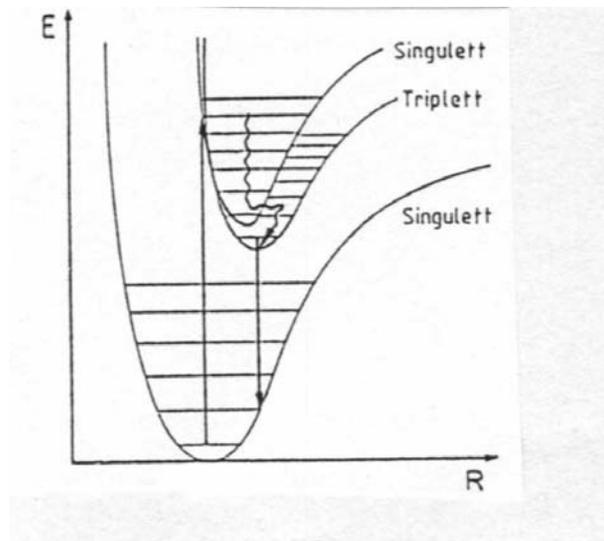


Werden Elektronen eines Moleküls angeregt, so ändert sich oft auch der Abstand, bei dem das Minimum des Potentials vorliegt; meist vergrößert er sich. Die Anregung des Elektrons erfolgt so schnell, dass sich der Molekülabstand nicht anpassen kann. Das Molekül wird auch zum Schwingen angeregt. Durch Stöße mit Nachbarn baut sich diese Schwingungsanregung meist ab, bevor das Elektron in den Grundzustand zurückfällt. (Franck-Condon-Prinzip)

Anregungs- und Emissionsenergie sind in diesem Fall verschieden. Der Stoff kann seine Emissionswellenlänge nicht absorbieren (Fluoreszenz). Dieses Verhalten wird beim Szintillator ausgenutzt.

Manchmal kann das Elektron im angeregten Zustand durch Stöße in einen überlappenden, metastabilen Zustand übergehen, z.B. ein Triplettzustand. Dieser hat eine lange Lebensdauer und die Anregung klingt nur langsam ab.

Phosphoreszenz



## 7.4 Spezifische Wärme

Die spezifische Wärmekapazität  $C$  eines Stoffes ist definiert als die Wärme  $Q$ , die ein Mol pro Änderung der Temperatureinheit aufnehmen kann

$$C = \frac{1}{N} \frac{dQ}{dT} \quad N: \text{Zahl der Mole}$$

Die Wärmekapazität hängt vom thermodynamischen Prozess ab. Wir betrachten hier Wärmekapazitäten bei konstantem Volumen, d.h. keine äußere Arbeit:

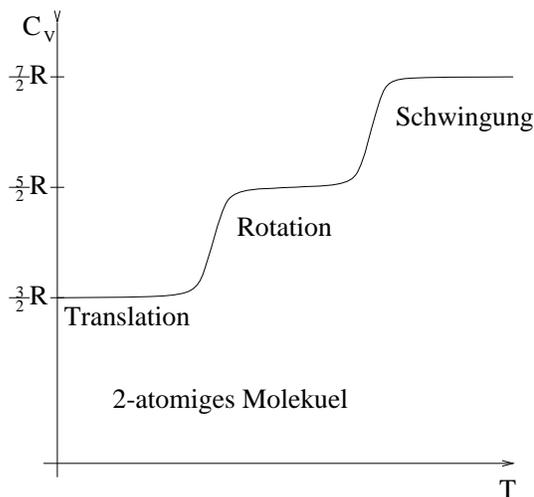
$$C_V = \left. \frac{1}{N} \frac{dQ}{dT} \right|_{V=const}$$

Aus der Wärmelehre wissen wir, dass für ideale, einatomige Gase (Edelgase) gilt:

$$C_V = \frac{3}{2}R \quad R = kN_L = 8,31 \frac{J}{Kmol} \text{ Gaskonstante}$$

Der Grund ist, dass einatomige Moleküle drei Translationsfreiheitsgrade besitzen und jedem die innere Energie  $U = \frac{1}{2}kT$  zugeordnet ist. (Mittelwert pro Molekül!)

Für Gase aus mehratomigen Molekülen ist die Wärmekapazität größer, weil die Anregung von Rotationen und Schwingungen die innere Energie erhöht. Der Temperaturverlauf von  $C_V$  für ein zweiatomiges Gas ist nebenstehend skizziert:



### Erklärung des Temperaturverlaufs

a) Bei niedrigen Temperaturen sind nur Translationen der Moleküle möglich. Diese Energiezustände sind nicht quantisiert und es bedarf keiner Mindestenergie (Wir betrachten ein makroskopisches Gasvolumen!). Die Wärmekapazität ist daher die eines einatomigen Gases  $C_V = \frac{3}{2}R$ .

b) Bei höheren Energien können Rotationszustände angeregt werden:  $E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$ . Die Mindestenergie zur Anregung einer Rotation ( $l=0 \rightarrow l=1$ ) ist deshalb  $E_{min} = \frac{\hbar^2}{I}$

Rotationen können nur angeregt werden, wenn die Temperatur hoch genug ist  $kT \geq \frac{\hbar^2}{I}$  und ein zweiatomiges Molekül hat dann bei der Temperatur  $T$  im Mittel die Rotationsenergie ( $f_{rot} = 2$ ):  $E_{rot} = f_{rot} \frac{1}{2}kT = kT$

Für einen typischen Wert von  $E_{min} = \frac{\hbar^2}{I} \approx 10^{-3}eV$  findet man  $T \gtrsim 12K$ . Rotationen werden also schon bei sehr tiefen Temperaturen angeregt! Die Wärmekapazität steigt ab dieser Temperatur auf  $C_V = \frac{5}{2}R$ . Der Übergang ist nicht scharf, weil gemäß der Boltzmann-Verteilung

Rotationsniveaus bereits bei niedrigeren Temperaturen besetzt sind bzw. erst bei höheren besetzt werden.

c) Bei noch höheren Temperaturen können auch Schwingungen angeregt werden. Ein zweiatomiges Molekül besitzt einen Schwingungsmodus. Einem Schwingungsmodus entsprechen zwei Freiheitsgrade, weil sich die Energie einer Schwingung aus potentieller und kinetischer Energie zusammensetzt (im Gegensatz zur Rotation).

Die mittlere Schwingungsenergie eines zweiatomigen Moleküls bei der Temperatur  $T$  beträgt deshalb

$$\underline{E_{osz} = 2 \cdot \frac{1}{2}kT = kT}$$

Die Schwingungsenergien sind quantisiert

$$E_n = \left( n - \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Wir haben gesehen, dass die Differenz der Energieniveaus typischerweise von der Größenordnung  $\Delta E \approx 0,1 \text{ eV}$  ist.

Schwingungen werden deshalb erst bei viel höheren Energien als Rotationen angeregt.

$$\begin{aligned} kT &\geq \hbar\omega_0 \\ \Rightarrow T &\gtrsim 1200 \text{ K} \end{aligned}$$

Oft dissoziieren die Moleküle bereits bei tieferen Temperaturen.

## 7.5 Quantenstatistik

Bevor wir uns näher mit der metallischen Bindung und den Eigenschaften von Festkörpern (Metallen, Halbleitern) befassen, müssen wir uns zunächst mit der Statistik in der Quantentheorie befassen. In der klassischen, statistischen Thermodynamik wird die Verteilung der inneren Energie eines Systems auf die Teilchen, aus denen es besteht, behandelt. Aus dem zweiten Gesetz der Thermodynamik folgt, dass jede Verteilung der Gesamtenergie des Systems auf die  $N$  Teilchen (Moleküle) gleich wahrscheinlich ist. Damit erhält man die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen die Energie  $E$  besitzt aus der Maxwell-Boltzmann-Verteilung:

$$f_{MB} = C e^{-\frac{E}{kT}}$$

Die Konstante  $C$  wird aus der Normierungsbedingung  $\int dE C e^{-\frac{E}{kT}} = 1$  bestimmt

Bei der Ableitung der Maxwell-Boltzmann-Verteilung werden zwei wichtige Annahmen gemacht:

1. Die Teilchen sind unterscheidbar, d.h. der Austausch der Energien zweier Teilchen ergibt einen anderen Zustand.
2. Eine beliebige Anzahl von Teilchen darf eine bestimmte Energie  $E$  besitzen.

Beide Annahmen sind in der Quantentheorie verletzt!

Beispiel: Die Wellenfunktion der Elektronen in einem Atom ( $Z > 1$ ) überlappen. Die Elektronen sind dadurch ununterscheidbar. Außerdem dürfen nicht beliebig viele Elektronen die gleiche Energie besitzen (Pauli-Prinzip).

Wie muss man die Maxwell-Boltzmann-Verteilung für ununterscheidbare Teilchen abändern?  
Wir müssen zwischen Bosonen und Fermionen differenzieren.

ununterscheidbare Bosonen: ganzzahliger Spin  $s = 0, 1, 2, \dots$

Zwei ununterscheidbare Bosonen haben eine symmetrische Wellenfunktion.

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) + \Psi_a(\vec{r}_2)\Psi_b(\vec{r}_1)] \quad \text{Der Normierungsfaktor } \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ folgt aus der Bedingung } \int dV |\Psi_S|^2 = 1$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte, dass die beiden Bosonen im gleichen Quantenzustand sind, also  $a = b$ , ist

$$|\Psi_S|^2 = \frac{1}{2} |[\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_a(\vec{r}_2) + \Psi_a(\vec{r}_2)\Psi_a(\vec{r}_1)]|^2 = 2|\Psi_a(\vec{r}_1)|^2|\Psi_a(\vec{r}_2)|^2$$

Wären die beiden Bosonen unterscheidbar, so ergäbe sich (keine Symmetrieforderung)

$$\Psi = \Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_a(\vec{r}_2) \rightarrow |\Psi|^2 = |\Psi_a(\vec{r}_1)|^2|\Psi_a(\vec{r}_2)|^2$$

Zwei ununterscheidbare Bosonen haben demnach eine doppelt so hohe Wahrscheinlichkeit sich im gleichen Quantenzustand zu befinden wie zwei unterscheidbare. Allgemein: In einem System mit  $n$  ununterscheidbaren Bosonen ist diese Wahrscheinlichkeit um einen Faktor  $n!$  größer. Wenn ein Zustand bereits mit  $n$  Bosonen besetzt ist, ist die Wahrscheinlichkeit ein weiteres ununterscheidbares hinzuzufügen um den Faktor  $n + 1$  erhöht:

$$W_{a \rightarrow b}^{Boson} = (n_b + 1)W_{a \rightarrow b} \quad \begin{array}{l} W_{a \rightarrow b}^{Boson} \text{ Übergangswahrscheinlichkeit } a \rightarrow b \text{ für} \\ \text{ununterscheidbare Bosonen} \\ W_{a \rightarrow b} \dots \text{ für unterscheidbare Teilchen} \\ n_b \text{ Zahl der Bosonen im Zustand } b \end{array}$$

Das Verhältnis der Besetzungszahlen  $\frac{n_a}{n_b}$  im thermischen Gleichgewicht ergibt sich aus den reziproken Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$\begin{aligned} \frac{n_a}{n_b} &= \frac{W_{b \rightarrow a}^{Boson}}{W_{a \rightarrow b}^{Boson}} = \frac{n_a + 1}{n_b + 1} \frac{W_{b \rightarrow a}}{W_{a \rightarrow b}} \quad \text{mit } \frac{W_{b \rightarrow a}}{W_{a \rightarrow b}} = e^{-(E_a - E_b)/kT} \text{ Maxwell-Boltzmann} \\ &= \frac{n_a + 1}{n_b + 1} \frac{e^{-\frac{E_a}{kT}}}{e^{-\frac{E_b}{kT}}} \\ &\Rightarrow \frac{n_b + 1}{n_b} e^{-\frac{E_b}{kT}} = \frac{n_a + 1}{n_a} e^{-\frac{E_a}{kT}} \end{aligned}$$

Die linke und rechte Seite dieser Gleichung hängen jeweils nicht von der Besetzungszahlen oder der Energie des anderen Zustandes ab. Da das für alle Zustände gelten muss, kann dieser Ausdruck nur ein Parameter sein, der von der Temperatur abhängt:

$$\frac{n_a + 1}{n_a} e^{-\frac{E_a}{kT}} = A(T) \equiv A$$

Nach  $n_a$  aufgelöst erhalten wir

$$n_a = \boxed{f_{BE} = \frac{1}{Ae^{\frac{E_a}{kT}} - 1}} \quad \text{Bose-Einstein-Verteilung}$$

Für ein Gas von Photonen ist  $A = 1$ . Die Bose-Einstein-Verteilung ist in der Planckschen Strahlungsformel für einen schwarzen Strahler enthalten (Ableitung siehe z.B. Rohlf).

$$\frac{dR}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \quad \text{Strahlungsleistung pro Fläche und Wellenlängeneinheit}$$

Ununterscheidbare Fermionen: halbzahliger Spin  $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

Zwei ununterscheidbare Fermionen haben eine antisymmetrische Wellenfunktion

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) - \Psi_a(\vec{r}_2)\Psi_b(\vec{r}_1)]$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sie im gleichen Quantenzustand sind, ist Null ( $|\Psi_A|^2 = 0$ , für  $a = b$ ). Also ist die Übergangswahrscheinlichkeit  $W_{a \rightarrow b}^{Fermion} = 0$ , wenn  $n_b = 1$  ist. Falls  $n_b = 0$  ist, dann entspricht die Übergangswahrscheinlichkeit derjenigen unterscheidbarer Teilchen. Zusammengefasst:

$$W_{a \rightarrow b}^{Fermion} = (1 - n_b)W_{a \rightarrow b}$$

Für das Verhältnis der Besetzungszahlen finden wir also:

$$\begin{aligned} \frac{n_a}{n_b} &= \frac{W_{b \rightarrow a}^{Fermion}}{W_{a \rightarrow b}^{Fermion}} = \frac{1 - n_a}{1 - n_b} \frac{W_{b \rightarrow a}}{W_{a \rightarrow b}} = \frac{1 - n_a}{1 - n_b} \frac{e^{-\frac{E_a}{kT}}}{e^{-\frac{E_b}{kT}}} \\ &\Rightarrow \frac{1 - n_b}{n_b} e^{-\frac{E_b}{kT}} = \frac{1 - n_a}{n_a} e^{-\frac{E_a}{kT}} \end{aligned}$$

Mit dem gleichen Argument wie bei den Bosonen folgt, dass beide Seiten einem nur von der Temperatur abhängigen Parameter gleichen müssen

$$\frac{1 - n_a}{n_a} e^{-\frac{E_a}{kT}} = A(T) \equiv A$$

Nach  $n_a$  aufgelöst erhalten wir

$$n_a = \boxed{f_{FD} = \frac{1}{Ae^{\frac{E_a}{kT}} + 1}} \quad \text{Fermi-Dirac-Verteilung}$$

Für A kann man schreiben  $A = e^{-\frac{E_F}{kT}}$ , also

$$f_{FD} = \frac{1}{e^{\frac{E_a - E_F}{kT}} + 1} \quad E_F: \text{Fermi-Energie}$$

Die Funktion  $f_{FD}$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass der Zustand  $a$  mit der Energie  $E_a$  besetzt ist, z.B. in einem Gas aus Elektronen.

## Vergleich der Verteilungsfunktionen

	Maxwell-Boltzmann	Bose-Einstein	Fermi-Dirac
Verteilung	$f_{MB} = \frac{1}{Ae^{\frac{E}{kT}}}$	$f_{BE} = \frac{1}{Ae^{\frac{E}{kT}} - 1}$	$f_{FD} = \frac{1}{Ae^{\frac{E}{kT}} + 1}$
Teilchen-Typ	unterscheidbar	identische Bosonen	identische Fermionen
Spin	beliebig	0, 1, 2, ...	1/2, 3/2, 5/2, ...
Max. Anz. von Teilchen pro Zustand	kein Grenzwert	kein Grenzwert	1
Beispiel	Ideale Gase	thermische Strahlung	Elektronen im Metall

Die drei Funktionen unterscheiden sich nur durch den Term  $0, \pm 1$  im Nenner. Dieser Term ist wichtig bei kleinen Energien  $Ae^{\frac{E}{kT}} \lesssim 1$ , bei denen quantenphysikalische Unterschiede zwischen Fermionen und Bosonen auftreten. Bei hoher Energie gehen die Verteilungen ineinander über.

Die oben diskutierten Verteilungen geben mögliche Besetzungszahlen bzw. -wahrscheinlichkeiten für Energiezustände an. Um ein quantenmechanisches Gas von Teilchen zu beschreiben, müssen wir noch die Zustände bestimmen, die zur Verfügung stehen. Wir betrachten Teilchen in einem Kasten mit den Kantenlängen  $L_x, L_y$  und  $L_z$ . Im eindimensionalen Problem eines Teilchens im Potentialkasten haben wir gesehen, dass wir nur die Wellenzahlen  $k = n\frac{2\pi}{L}$  mit  $n = \pm 1, \pm 2$  erlauben (periodische Randbedingung). Verallgemeinert auf unser dreidimensionales Problem folgern wir, dass nur solche Wellenzahlvektoren  $\vec{k}$  erlaubt sind, für die gilt

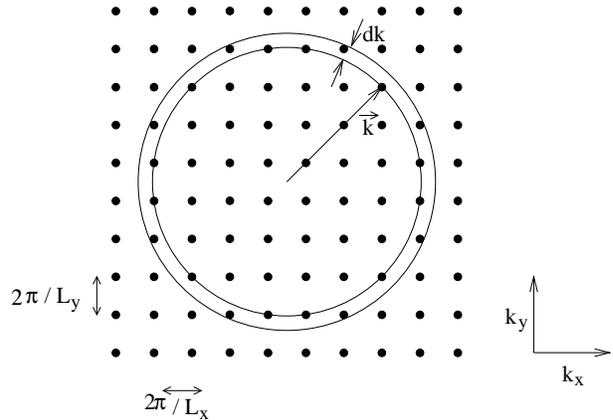
$$k_x = \frac{2\pi}{L_x}n_x, k_y = \frac{2\pi}{L_y}n_y, k_z = \frac{2\pi}{L_z}n_z$$

$$n_x, n_y, n_z = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Im  $\vec{k}$ -Raum bilden diese Wellenvektoren ein Punktgitter. Wir wollen die erlaubten  $\vec{k}$ -Werte zählen. Jedem  $k$ -Wert kann man ein Volumen

$$V_k = \frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y} \frac{2\pi}{L_z} = \frac{8\pi^3}{V}$$

zuordnen. Die Dichte der erlaubten Werte im  $\vec{k}$ -Raum ist daher  $\rho_k = \frac{1}{V_k} = \frac{V}{8\pi^3}$ . Punkte mit gleichem Betrag des Wellenzahlvektors  $|\vec{k}| = k$  liegen auf einer Kugeloberfläche, im Grenzfall  $k \gg \frac{2\pi}{L_x}, \frac{2\pi}{L_y}, \frac{2\pi}{L_z}$ . Die Zahl der  $|\vec{k}|$ -Werte in einer Kugelschale der Dicke  $dk$  ist deshalb  $\rho_k \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{1}{2} \frac{V}{\pi^2} k^2 dk$ .



Wir betrachten jetzt nichtrelativistische Teilchen der Masse  $m$ :

$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  und aus  $\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}$  folgt  $dk = \frac{m}{\sqrt{2mE\hbar}} dE$  und damit für die Zahl der  $|\vec{k}|$ -Werte im Energieintervall  $E$  bis  $E + dE$ :

$$Z(E)dE = V \frac{m^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^2}} \sqrt{E} dE$$

Die Zahl der verfügbaren Plätze steigt also proportional zu  $\sqrt{E}$ . Wir betrachten jetzt ein Gas aus „freien“ Elektronen, d.h. wir vergessen für einen Moment ihre Wechselwirkung durch die

elektrische Ladung. Elektronen sind Fermionen mit zwei Spinzuständen, d.h. jeder  $\vec{k}$ -Wert kann doppelt besetzt werden. Die Zahl der Plätze ist also

$$Z_e(E)dE = 2 \cdot Z(E)dE = V \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} m^{3/2} \sqrt{E} dE$$

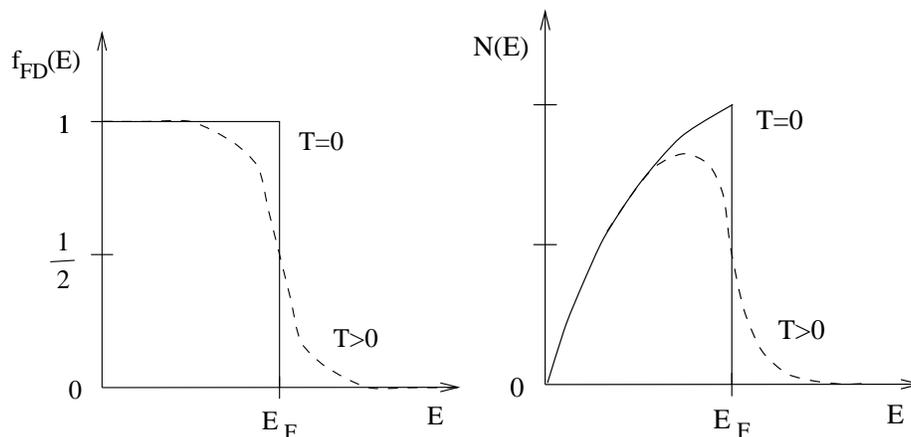
Die Benutzung der zur Verfügung stehenden Plätze wird durch die Fermi-Dirac-Verteilung bestimmt, die als Funktion der Temperatur die Wahrscheinlichkeit angibt mit der ein Platz besetzt ist. Die Zahl der Elektronen, die sich im Energieintervall  $E$  bis  $E + dE$  befinden ist also:

$$N(E)dE = f_{FD}(E) \cdot 2 \cdot Z(E)dE$$

Wir betrachten das Gas jetzt bei der Temperatur  $T = 0$ . Hier gilt:

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \stackrel{T \rightarrow 0}{=} \begin{cases} 1 & \text{für } E < E_F \\ 0 & \text{für } E > E_F \end{cases}$$

Alle zur Verfügung stehenden Zustände bis zur Fermi-Energie  $E_F$  sind besetzt, d.h. das Elektronengas nimmt die energetisch günstigste Konfiguration ein. Für  $T > 0$  werden auch Plätze oberhalb der Fermi-Kante besetzt.

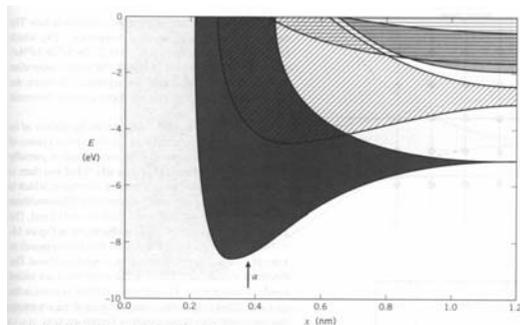


## 7.6 Das Bändermodell

Bei vielen Atomen führt das Verteilen der äußeren Elektronen auf wenige Atome (wie bei der kovalenten Bindung) nicht zu abgeschlossenen Schalen. Diese Atome bilden oft Kristalle, d.h. die Atome sind über große Distanzen regelmäßig angeordnet. Es besteht eine langreichweitige Ordnung (typisch  $N_L = 6 \cdot 10^{23}$  Atome). Die Bindungselektronen sind über viele Atome verteilt und nicht mehr einzelnen Atomen oder Atomgruppen zuzuordnen, im Gegensatz zur kovalenten Bindung.

Was passiert nun, wenn man sehr viele Atome nahe zusammen bringt? Sobald die Wellenfunktionen der äußeren Elektronen überlappen, tritt das Pauli-Prinzip in Kraft und diese Elektronen dürfen nicht mehr die gleichen Quantenzahlen besitzen. Elektronen, die in entfernten Atomen die gleiche Energie besaßen, müssen jetzt verschiedene Energiezustände einnehmen, die Energieniveaus spalten sich auf (das tritt schon im einfachsten Fall des  $H_2$ -Moleküls auf). Wenn wir nun ein Kristall aus sehr vielen Atomen betrachten, so werden die Energieniveaus in sehr viele Energieniveaus aufgespalten, die sehr dicht beieinander liegen. Man spricht von Energiebändern.

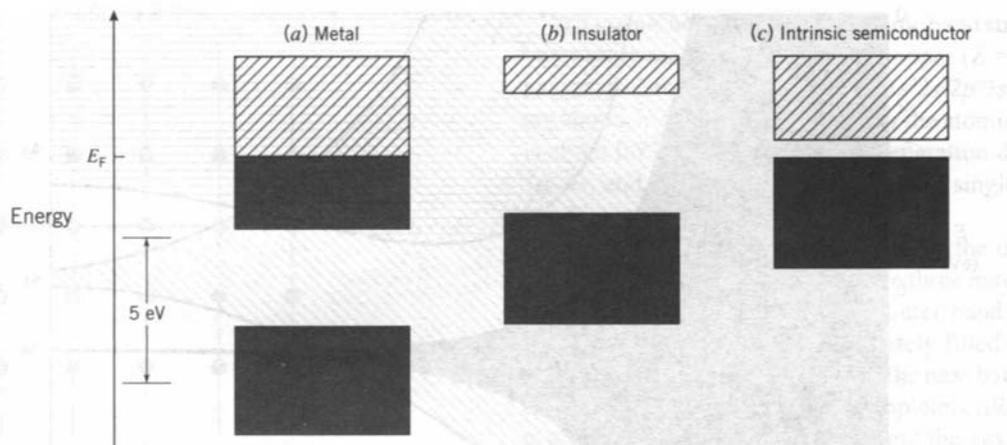
Das ist hier am Beispiel von Natrium erläutert:



**FIGURE 14-4 Outer energy bands in sodium.**  
The Schrödinger equation is solved for a sodium crystal treating the distance between atoms as a variable ( $x$ ). At large distances the energy levels are separated, but at small distances they overlap. This explains the conductivity of metals. After J. C. Slater, "Electronic Energy Bands in Metals," *Phys. Rev.* 45, 794 (1934).

Die Energieniveaus sind in Abhängigkeit des Atomabstandes aufgetragen. Im Grundzustand ist der 3s-Zustand mit einem Elektron besetzt. Dieses Niveau weitet sich zu einem breiten Band. Die Aufspaltung der höheren Niveaus setzt bereits bei größeren Abständen ein. Beim Gleichgewichtsabstand  $a$  sind die inneren Niveaus nicht aufgespalten und die Elektronen sind noch den einzelnen Atomen zugeordnet.

Die Bänder eines Festkörperkristalls sind also quasikontinuierliche Energieniveaus. Bänder können sich überlagern oder es gibt Lücken zwischen den Bändern, d.h. Energien, denen keine quantenmechanischen Zustände entsprechen und die daher von Elektronen nicht eingenommen werden können. Das höchstenergetische, vollständig mit Elektronen besetzte Band nennt man Valenzband, das darüberliegende nicht- oder nur teilweise-gefüllte Band heißt Leitungsband. Die Struktur der Bänder bestimmt die Eigenschaften der Festkörper:



**FIGURE 14-7 The generic band structure of solids.**

(a) In a metal, the outer band is partially filled. (b) In an insulator, the outer band is completely full and is separated from the next band by several electronvolts. (c) In an intrinsic semiconductor, the outer band is completely full but is separated from the next band by a relatively small energy. The boundary between filled states and empty states is the Fermi energy ( $E_F$ ).

Metalle sind gute elektrische Leiter, weil sie ein nur teilweise besetztes Leitungsband besitzen. Die Elektronen in diesem Band können auf Grund der vielen freien Plätze durch Stöße Energie aufnehmen und sich so frei im Festkörper bewegen. Nichtleiter haben ein leeres Leitungsband und eine große Lücke zwischen Valenz- und Leitungsband. Die Elektronen können deshalb keine Bewegungsenergie aufnehmen. Bei Halbleitern ist diese Energielücke kleiner. Hier können Elektronen durch thermische Anregung in das Leitungsband gebracht werden (siehe unten).

Wodurch wird die Besetzung der Bänder bestimmt? Wir können die Elektronen in den Bändern als Gas betrachten, das sich in einem Potentialtopf befindet. Die Dichte der Zustände für die Elektronen ist dann

$$\rho(E)dE = 2 \cdot \frac{Z(E)}{V}dE = \frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}dE$$

Die Dichte der Elektronen pro Energieeinheit ist dann

$$\frac{dn}{dE} = \rho(E) \cdot f_{FD} = \frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$

Um die Gesamtzahl der Elektronen zu erhalten, integrieren wir über  $E$ . Das geht besonders einfach für  $T = 0$ :

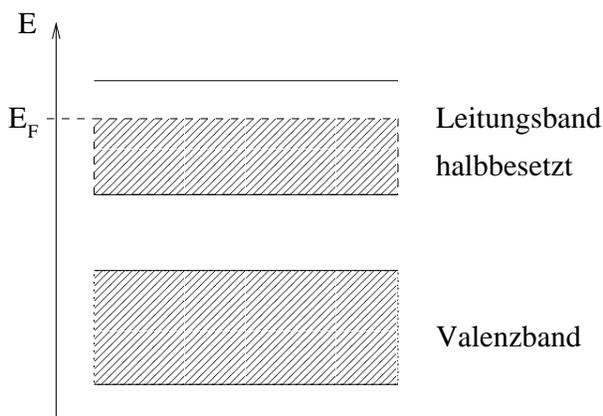
$$n = \int_0^\infty \rho(E) f_{FD} dE = \frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{2\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3} E_F^{\frac{3}{2}}$$

Das lösen wir nach der Fermi-Energie auf und erhalten

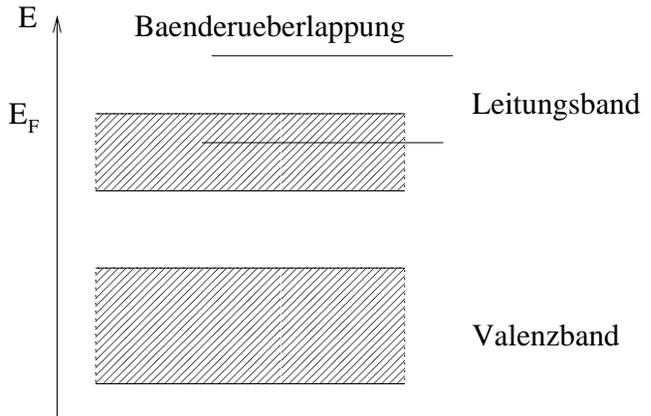
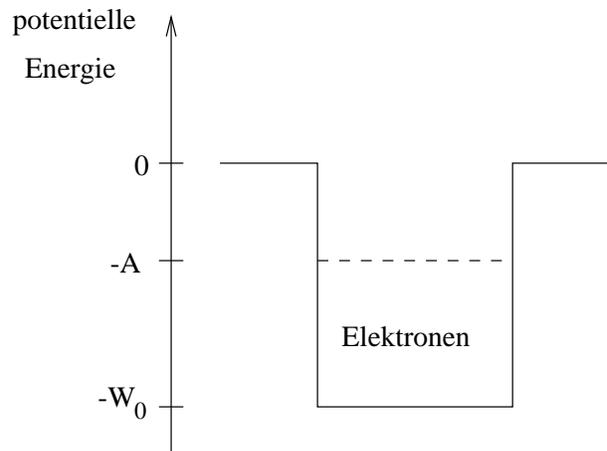
$$E_F = \frac{(3T^2)^{\frac{2}{3}} \hbar^2}{2m} n^{\frac{2}{3}} \quad n: \text{Dichte der Elektronen}$$

Für einen Stoff mit einem Ladungselektron (z.B.  $Na, Cu$ ) und einem Atomabstand von  $0,3nm$  ist  $E_F \approx 4eV$ .

Bei Metallen gibt es zwei Möglichkeiten:



Ein Elektron pro Atom im Leitungsband (Ag, Au, Cu)

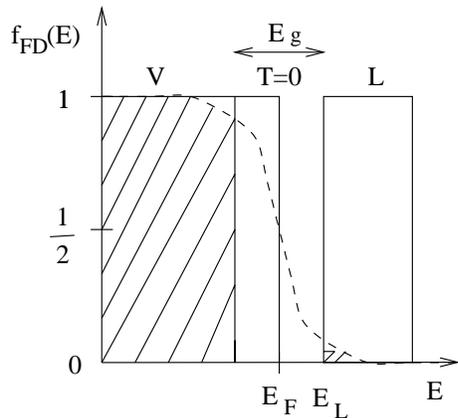


Ein gefülltes und ein leeres Band überlappen  
Typisch für Atome mit zwei Elektronen/Atom im obersten Band (Erdalkalimetalle)

Die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit von Metallen ist relativ gering. Sie steigt mit sinkender Temperatur, weil Gitterschwingungen abnehmen und somit die Bewegung der Elektronen weniger stören.

Isolatoren sind durch einen großen Abstand zwischen Leitungs- und Valenzband gekennzeichnet-

net, z.B.  $E_g = 5,3\text{eV}$  für Diamant.



Bei  $T = 0$  ist die Leitfähigkeit Null, da sich keine Elektronen im Leitungsband befinden. In Wirklichkeit wird die Leitfähigkeit niemals exakt Null, weil Störstellen des Kristallgitters Veränderungen der Bandstruktur hervorrufen und zur Leitfähigkeit beitragen.

Bei  $T > 0$  werden einige wenige Elektronen vom Valenz- in das Leitungsband befördert. Die Fermi-Energie liegt in der Mitte der verbotenen Zone. Neben den Elektronen im L-Band tragen auch die jetzt freien Plätze im Valenzband, sogenannte Löcher, zur Leitfähigkeit bei. (Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren)

Halbleiter unterscheiden sich von Isolatoren nur dadurch, dass die Breite der verbotenen Zone kleiner ist. Man macht die etwas willkürliche Unterscheidung:

$$\begin{aligned} E_g \leq 2\text{eV} & \quad \text{Halbleiter} \\ E_g > 2\text{eV} & \quad \text{Isolator} \end{aligned}$$

Beispiele für Halbleiter sind die Elemente der vierten Gruppe des Periodensystems: Silizium  $E_g = 1,14\text{eV}$ , Germanium  $E_g = 0,67\text{eV}$ . Auch Verbindungen von Elementen der dritten und fünften Gruppe wie  $GaAs$  sind Halbleiter.

Wir wollen jetzt die Temperaturabhängigkeit eines Halbleiters (oder Isolators) diskutieren.

$$\begin{aligned} j &= \sigma \cdot E & \text{Stromdichte} &= \text{Leitfähigkeit} \cdot \text{elektr. Feld} \\ &= n \cdot Q \cdot v_D \cdot E & n & \text{Dichte der Ladungsträger mit Ladung } Q \\ & & v_D & \text{Driftgeschwindigkeit der Ladungsträger} \end{aligned}$$

Durch Stöße mit den Atomen des Gitters ändern die Elektronen oder Löcher dauernd ihre Richtung. Es stellt sich ein Gleichgewicht ein und die Ladungsträger driften mit der Geschwindigkeit  $v_D$  (im Mittel) entlang des angelegten Feldes  $E$ :  $v_D = \mu \cdot E$ . Man nennt  $\mu$  die Beweglichkeit. Sie ist unterschiedlich für Elektronen und Löcher und hängt auch von der Temperatur ab. Wir erhalten also für die Leitfähigkeit den Ausdruck  $\sigma = nQ\mu$ . Da sich die Anteile von Elektronen und Löchern addieren, ergibt sich

$$\begin{aligned} \sigma &= n \cdot e \cdot |\mu_+| + n \cdot e \cdot |\mu_-| \\ &\approx n \cdot e \cdot |\mu_-| \end{aligned}$$

Die Beweglichkeit der Löcher ist i.A. kleiner ( $|\mu_+| < |\mu_-|$ ), deshalb vernachlässigen wir sie hier.

Die Zahl der Elektronen pro Volumen im Leitungsband ist gegeben durch

$$n = \int_{E_L}^{\infty} \rho(E) f_{FD}(E, T) dE$$

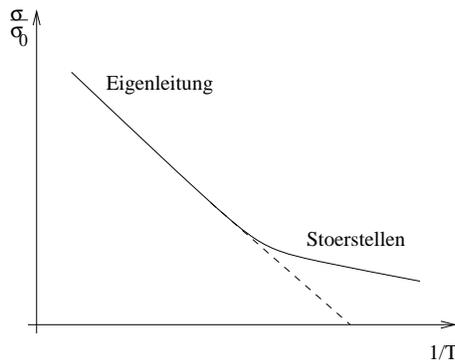
Für Temperaturen  $kT \ll E_g$  können wir näherungsweise annehmen, dass sich alle Elektronen des Leitungsbandes an der unteren Kante aufhalten  $E \approx E_L$ , d.h. die Integration entfällt und wir erhalten

$$n \propto \frac{1}{e^{\frac{E_L - E_F}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{E_L - E_F}{kT}} = e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (E_L - E_F = \frac{1}{2}E_g \gg kT)$$

Die Zahl der Ladungsträger steigt sehr stark mit der Temperatur an:

Wir vernachlässigen daher noch die nicht so starke Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit  $\mu$  und erhalten

$$\sigma(T) = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad \text{oder} \quad \ln \frac{\sigma}{\sigma_0} = -\frac{E_g}{2kT}$$



Man spricht von Eigenleitung, wenn die Elektronen-Loch-Paare durch thermische Übergänge vom Valenz- ins Leitungsband befördert werden. Bei kleineren Temperaturen ist die Eigenleitung gering und es überwiegen die Effekte durch Störstellen im Kristall.

## 7.7 Diode und Transistor

Durch Störstellen im Kristall werden die Bandstruktur und damit die Eigenschaften des Festkörpers verändert. Das gezielte Einbauen von Störstellen nennt man Dotierung. Eine sehr wichtige technische Anwendung ist das Dotieren von 4-wertigen Halbleitern (Si, Ge) mit 5-wertigen Atomen (P, As: n-Typ) oder mit 3-wertigen Atomen (Al, Ga: p-Typ):

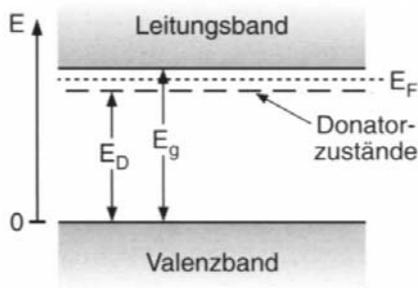


Abb. 14.13. Termschema der Donatorniveaus

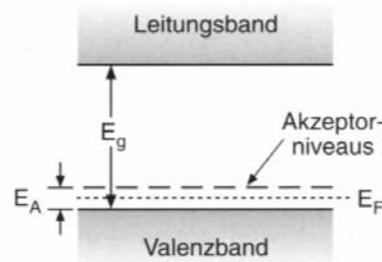
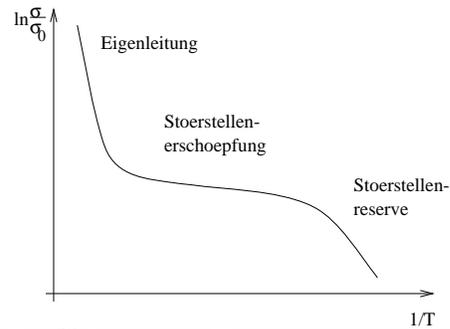


Abb. 14.14. Akzeptorniveaus im Bandschema

In n-Typ Halbleitern haben die Störstellen ein äußeres Elektron mehr als die Atome des Gitters. Dieses Elektron befindet sich auf einem Energieniveau, das sehr nahe am Leitungsband ist (typisch:  $E_g - E_D \approx 0,01\text{eV}$ ) und kann deshalb leicht in das Leitungsband befördert werden. Umgekehrt haben in p-Typ Halbleitern die Störstellen ein Elektron weniger. Das führt zur Ausbildung von Energieniveaus knapp oberhalb des Valenzbandes. Auch hier können Elektronen

aus dem Valenzband leicht auf diese Akzeptorniveaus gebracht werden. Sie hinterlassen Löcher im Valenzband, die den elektrischen Strom leiten können. Der relative Anteil der Fremdatome in dotierten Halbleitern ist klein ( $10^{-4} - 10^{-8}$ ).

Die Leitfähigkeit eines p- oder n-dotierten Halbleiters als Funktion der Temperatur sieht schematisch aus wie auf der Skizze rechts.

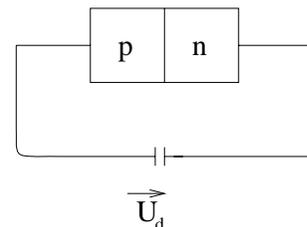


Bringt man einen p- und einen n-dotierten Halbleiter in Kontakt, so besteht in der Übergangszone ein großes Gefälle der Konzentration von Elektronen im Leitungsband und Löcher im Valenzband. Die Elektronen diffundieren deshalb in den p-Teil, in dem sie die Löcher auffüllen. Es entsteht um die pn-Grenze eine Schicht mit wenig freien Ladungsträgern (Verarmungszone). Die p-Seite der Grenzschicht lädt sich negativ auf (Elektronenüberschuss) und die n-Seite positiv (Elektronenmangel). Diese Raumladung hat ein elektrisches Feld zur Folge und damit einen Strom. Das thermische Gleichgewicht ist nun erreicht, wenn dieser Feldstrom den Diffusionsstrom genau ausgleicht.

$$I_D + I_F = 0$$

Was passiert, wenn man eine äußere Spannung an den pn-Übergang anlegt?

Im Falle, dass  $U_a$  positiv ist, ist das dadurch entstehende elektrische Feld  $E_a$  an dem pn-Übergang dem durch die Raumladung bedingten Feld entgegengesetzt.



Das resultierende elektrische Feld am pn-Übergang wird also kleiner und kann die Diffusion nicht mehr kompensieren. Es fließt ein Strom (Flussrichtung). Dieser Strom steigt exponentiell mit der äußeren Spannung an, bis die Diffusionsspannung  $U_D$  abgebaut ist, danach linearer Anstieg.

Für den Fall, dass  $U_A < 0$  ist, wird die Verarmungszone weiter verbreitert. Elektronen werden aus dem n-Teil, Löcher aus dem p-Teil abgesaugt. Die angelegte Spannung liegt am pn-Über-

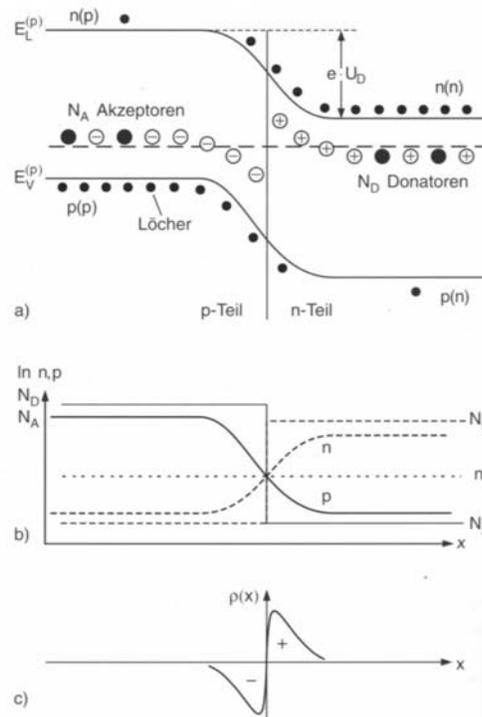


Abb. 14.16a-c. p-n-Übergang. (a) Bandschema bei miteinander verbundenen p- und n-Halbleitern; (b) Dichteverlauf der freien Elektronendichte  $n(x)$  und der Löcherdichte  $p(x)$  sowie der Donatordichte  $N_D(x)$  und der Akzeptordichte  $N_A(x)$ ; (c) Raumladungsverlauf  $\rho_{el}(x)$

gang an, Elektronen können nicht mehr vom n- in den p-Teil diffundieren und Löcher nicht in die andere Richtung. Es fließt noch ein kleiner Strom (Sperrstrom), der durch die Löcher im n-Teil und Elektronen im p-Teil transportiert wird. Deren Konzentration ist allerdings gering.

Der pn-Übergang wirkt also als Diode, die den elektrischen Strom nur in eine Richtung durchläßt. Die Kennlinie einer Halbleiterdiode ist rechts skizziert. Wenn man die Sperrspannung erhöht, kommt es zu einem plötzlichen Anstieg des Stromes (Durchbruchspannung  $U_S$ ).

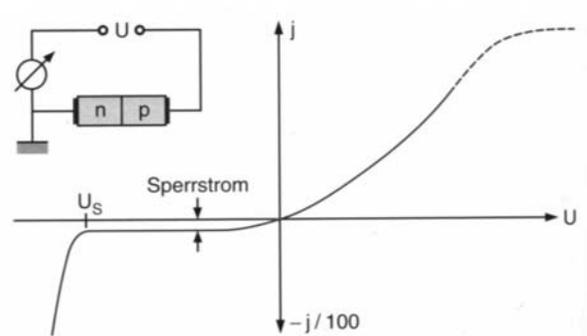


Abb. 14.18. Strom-Spannungs-Charakteristik der p-n-Diode. Man beachte den 100-fach gespreizten Ordinatenmaßstab für negative Ströme

Das läßt sich dadurch verstehen, dass das Potential der oberen Kante des Valenzbandes im n-Teil soweit angehoben wird, dass es über der unteren Kante des Leitungsbandes im p-Teil ist.

Elektronen können dann die Verarmungszone durchtunneln. Das wird technisch für Spannungsstabilisatoren ausgenutzt.

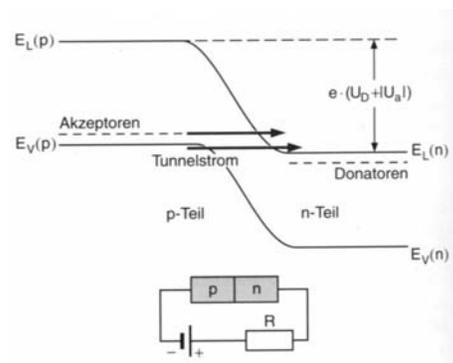


Abb. 14.19. Tunneldiode

Eine weitere sehr wichtige technische Anwendung von dotierten Halbleitern ist der Transistor. Er besteht aus zwei hintereinander geschaltete pn-Übergängen (nnp oder pnp).

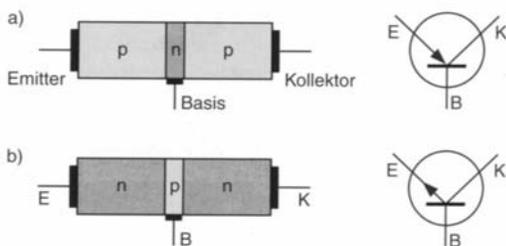


Abb. 14.24. (a) pnp-Transistor und (b) npn-Transistor mit ihren Schaltzeichen

Bei Anlegen einer Spannung zwischen Emitter und Kollektor ist einer der beiden pn-Übergänge in Sperrrichtung geschaltet, d.h. dieser pn-Übergang ist von Ladungsträgern verarmt.

Wenn man nun den anderen pn-Übergang in Durchlassrichtung polt, z.B. zwischen Emitter und Basis, und die Basis genügend dünn macht, so wird auch der pn-Übergang zwischen Basis und Kollektor mit Ladungsträgern gefüllt und damit leitend.

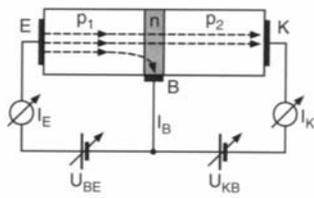


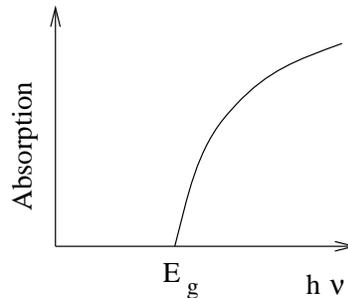
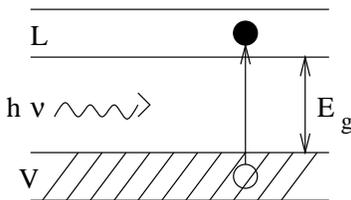
Abb. 14.25. Zur Funktionsweise des pnp-Transistors

Der Transistor wird als Schalter- und Verstärkerelement eingesetzt. Durch die Spannung  $U_{BE}$  kann der Strom  $I_K$  ein- und ausgeschaltet werden. Entsprechend der elektrische Schaltung kann ein kleiner Strom zwischen Basis und Emitter einen großen Strom zwischen Emitter und Kollektor steuern.

## 7.8 Andere Themen der Festkörperphysik

### a) Optische Eigenschaften von Festkörpern

Den Abstand zwischen Valenz- und Leitungsband bei Halbleitern und Isolatoren kann man durch Bestrahlung mit Licht variabler Wellenlänge bestimmen. Ab einer bestimmten Frequenz wird das Licht absorbiert, weil Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband angehoben werden.

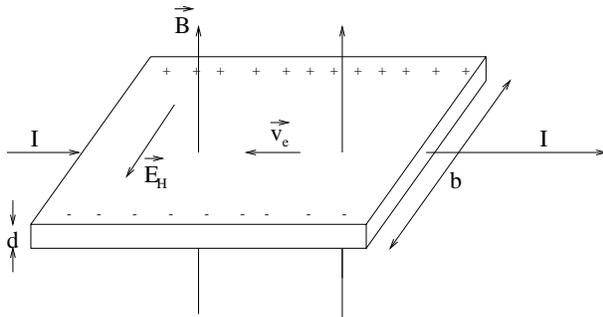


Isolatoren haben Bandlücken  $E_g > 2\text{eV}$ , d.h. sie sind für sichtbares Licht meist durchsichtig und werden erst im UV-Bereich durchsichtig. Halbleiter, für die  $E_g < 2\text{eV}$  gilt, sind schon im sichtbaren Wellenlängenbereich undurchsichtig.

Bemerkung: Wir bezeichnen hier als Isolatoren Kristalle mit großem  $E_g$  wie z.B. Diamanten. Andere Isolierstoffe wie Glas, Keramik, Plastik etc. sind anders aufgebaut (amorph, mikrokristallin, ...) und für sie gelten unsere Überlegungen nicht.

Metalle sind für alle Wellenlängen undurchsichtig. Auf Grund des teilweise gefüllten Leitungsbandes mit vielen freien Plätzen können die Elektronen beliebig kleine Frequenzen absorbieren.

### b) Halleffekt



Wir betrachten eine Platte aus Metall oder Halbleiter (Breite  $b$ , Diche  $d$ ), durch die der elektrische Strom  $I$  fließt.

$$I = j \cdot b \cdot d = nqv \cdot bd$$

$j$  Stromdichte,  $n$  Dichte der Ladungsträger,  $v$  Geschwindigkeit der Elektronen (Löcher)

Die Platte befindet sich in dem Magnetfeld  $\vec{B}$  dessen Feldlinien senkrecht auf der Platte stehen. Auf die Ladungsträger wirkt daher die Lorentzkraft

$$\vec{F}_L = q \cdot \vec{v} \times \vec{B}$$

Die Ladungsträger sammeln sich auf einer Seite des Plättchens. In der Skizze ist das für Elektronen dargestellt. Dadurch entsteht ein elektrisches Feld  $\vec{E}_H$ , das die Kraft  $\vec{F}_H = q \cdot \vec{E}_H$  auf die Ladungsträger erzeugt. Im Gleichgewicht heben sich die beiden Kräfte auf

$$\vec{F}_L + \vec{F}_H = 0 = q \cdot \vec{v} \times \vec{B} + q \cdot \vec{E}_H \rightarrow \boxed{\vec{E}_H = -\vec{v} \times \vec{B}}$$

Die von Elektronen und Löchern erzeugten Hallfelder  $\vec{E}_H$  sind entgegengesetzt! Wir gehen jetzt zu den Beträgen über und berechnen die an den Seiten der Platte anliegende Hallspannung  $U_H = E_H \cdot b$

$$U_H = b \cdot vB = b \frac{I}{nqbd} B = \frac{1}{qn} \frac{BI}{d} = R_H \frac{BI}{d}$$

Die Hallkonstante  $R_H$  ist positiv für positive Ladungsträger (Löcher) und negativ für Elektronen. Sind gleichviele Elektronen wie Löcher vorhanden und haben sie die gleiche Beweglichkeit, so ist  $R_H = 0$ !

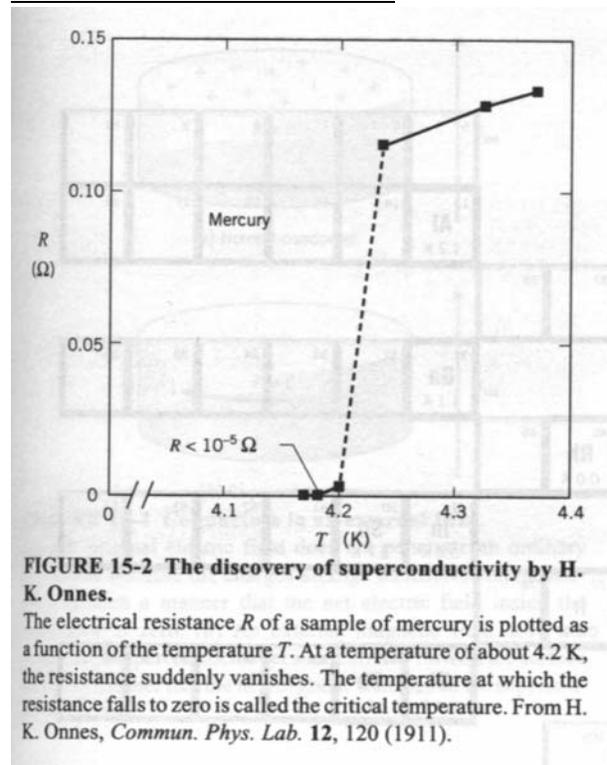
Der Halleffekt wird zur Bestimmung von Art und Konzentration der Ladungsträger benutzt. Bei bekanntem  $R_H$  kann der Halleffekt zur genauen Messung von Magnetfeldern benutzt werden (Hallsonde).

### c) Supraleitung

Bei Abkühlung unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_C$  verlieren einige Metalle plötzlich ihren elektrischen Widerstand vollständig und leiten den elektrischen Strom ohne Verluste (Supraleitung)

## Widerstand einer Hg-Probe:

Der Effekt wurde 1911 von H. Onnes an Quecksilber entdeckt ( $T_C = 4,2K$ ). Heute hat man Supraleitung an ca. 30 Elementen und vielen Legierungen beobachtet. Die höchste Sprungtemperatur aller Metalle hat Niob mit  $T_C = 9,3K$ .



Magnetfelder können nicht in Supraleiter eindringen (Meissnereffekt), weil durch den ungehinderten Stromfluß ein Gegenfeld aufgebaut wird, das das äußere Feld kompensiert. Die Supraleitung bricht zusammen, wenn das äußere Magnetfeld oder die Stromdichte im Supraleiter kritische Werte überschreiten.

Die Erklärung der Supraleitung geschieht durch Cooper-Paare: Elektronen finden sich zu lose gebundenen Paaren zusammen. Durch antiparallele Stellung des Spins bilden sie Spin 0 Bosonen, die sich ungehindert (keine Streuung mit dem Atomgitter) durch den Kristall bewegen können. Eine genauere theoretische Behandlung der Supraleitung erfolgt in der Festkörperphysik.

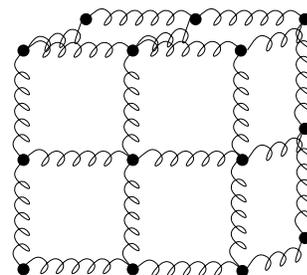
Die Supraleitung findet heute viele technische Anwendungen, besonders der Bau von Magneten mit sehr hoher Feldstärke und ohne ohmsche Verluste. Man kann sehr schnelle und verlustarme Schalter bauen (Josephson-Junctions).

Heute kennt man Materialien mit hohen Sprungtemperaturen (Hochtemperatur-Supraleiter, Bednorz/Müller 1985), die noch oberhalb der Verdampfungstemperatur von  $N_2$  supraleitend werden:

z.B.  $Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10} T_C = 125K$

d) Spezifische Wärme von Festkörpern

Die Atome in einem Festkörperkristall sind durch elektrische Kräfte gebunden. Atome oder Atomgruppen können Schwingungen um die Ruhelage ausführen und zwar in alle drei Raumrichtungen. Rotationen und Translationen gibt es nicht.



Jeder Schwingungsmodus kann die mittlere Energie  $2 \cdot \frac{1}{2}kT$  pro Atom aufnehmen. Die mittlere Energie eines Atoms ist also  $E_{osz} = 3 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2}kT = 3kT$ . Für die innere Energie  $U$  eines Festkörpers gilt also

$$U = N \cdot N_L \cdot 3kT \quad N \text{ Zahl der Mole}$$

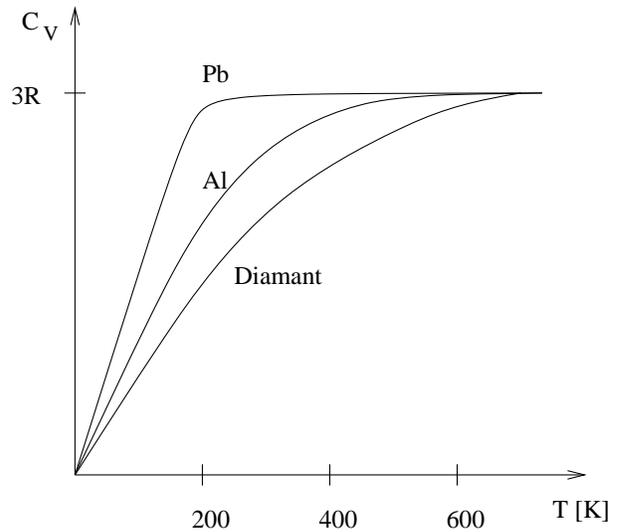
$$= N \cdot 3RT \quad N_L = 6,02 \cdot 10^{23}$$

Für die spezifische Wärme (bei konstantem Volumen) von Festkörpern gilt daher

$$C_V = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = 3R$$

Der Temperaturverlauf für verschiedene Festkörper ist nebenstehend skizziert. Wie wir es schon bei Molekülen gesehen haben, sind auf Grund der Quantisierung die Schwingungen bei niedrigen Temperaturen nicht voll angeregt. Die vollständige Anregung erfolgt für schwerere Atome bei kleinen Temperaturen.

Gitterschwingungen werden Phononen genannt.

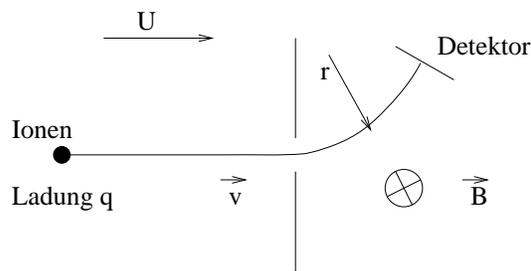


# 8 Kernphysik

## 8.1 Kernbausteine

Nachdem wir die Struktur der aus Elektronen gebildeten Atomhüllen aufgeklärt und die sich daraus ergebenden Eigenschaften (chemisch, physikalisch, ...) besprochen haben, werden wir uns der genaueren Untersuchung der Atomkerne zu. Verglichen mit den Atomen sind die Kerne sehr klein ( $\approx 10^{-15}m$ ), aber praktisch die gesamte Masse ist darin konzentriert. Die Größe der Kerne bestimmt man durch Streuung mit  $\alpha$ -Teilchen (Rutherford) oder Elektronen (Hofstadter). Die Masse der Atome (Kerne) wird in Massenspektrometern bestimmt:

Ionisierte Atome werden in einem elektrischen Feld beschleunigt und anschließend in einem homogenen Magnetfeld abgelenkt. Aus dem gemessenen Krümmungsradius kann die Masse (und Ladung) der Ionen bestimmt werden:



$$\begin{array}{llll} \text{kinetische Energie} & T = \frac{1}{2}mv^2 & \text{Lorentzkraft} & \vec{F}_L = q\vec{v} \times \vec{B} \rightarrow F_L = qvB \\ & = qU & \text{Trägheitskraft} & F_T = m\frac{v^2}{r} \end{array}$$

$$F_L = F_T \rightarrow qvB = m\frac{v^2}{r}$$

$$r = \frac{mv}{qB} \sqrt{\frac{2qU}{m}} = \sqrt{\frac{2mU}{B^2q}}$$

Wenn man die Kernladungszahl  $Z$  der Atome mit der so gemessenen Atommasse  $A$  vergleicht, findet man, dass folgendes gilt

$$A > Z \quad (\text{Ausnahme Wasserstoff } A = Z)$$

$A$  ist die Atommasse gemessen in Einheiten der Masse des Wasserstoffkerns.

Der Kern des Wasserstoffs besteht aus einem Proton, das positiv geladen ist. Der Betrag der Ladung ist exakt gleich der Ladung des Elektrons  $q_p = -q_e$ . Die komplizierteren Atomkerne müssen offenbar neben den  $Z$  Protonen, die die Ladung der Elektronen neutralisieren, noch andere elektrisch neutrale Bausteine enthalten. Dieses neutrale Teilchen wurde 1932 von Chadwick in der Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Berillium entdeckt, das Neutron  $n$ . Es besitzt, wie das Proton, einen Spin  $s = \frac{1}{2}$  und seine Masse ist der des Protons sehr ähnlich:

$$\begin{array}{ll} m_p & = 938,3 \text{ MeV}/c^2 \quad (= 1,672 \cdot 10^{-27} \text{ kg}) \\ m_n & = 939,6 \text{ MeV}/c^2 \\ m_n - m_p & = 1,3 \text{ MeV}/c^2 \end{array}$$

Abgesehen von dieser kleinen Massendifferenz, sowie der Bindungsenergie (siehe unten), entspricht die Atommasse  $A$  der Anzahl der Nukleonen ( $Z$  Protonen plus  $N$  Neutronen)  $A = Z+N$ .

Für Atomkerne führen wir die folgende Schreibweise ein:

$${}^A_Z(\text{Kern}), \text{ z.B. } {}^1_1\text{H}, {}^4_2\text{He}, {}^{12}_6\text{C}, {}^{235}_{92}\text{U}$$

Zu jeder Atomsorte (Element) gibt es eine Reihe von Kernen, die sich durch die Zahl der Neutronen unterscheiden: Isotope stehen am gleichen Ort im Periodensystem (gleiches Z). Im Gegensatz dazu sind Isobare Kerne mit gleicher Anzahl von Kernbausteinen (gleiches A).

Beispiel: Neben dem normalen Wasserstoff  ${}^1_1H$  gibt es noch das Deuterium  ${}^2_1H$  (relative Häufigkeit  $1,5 \cdot 10^{-4}$ ) und das instabile Tritium  ${}^3_1H$ .

Für genauere Betrachtungen werden Kern- und Atommassen in atomaren Masseneinheiten u angegeben. Die Referenz ist die Masse des Kohlenstoffatoms  ${}^{12}_6C$  :

$$\underline{1u} = \frac{1}{12}m_c = 1,66 \cdot 10^{-27} kg = 931,50 \frac{\text{MeV}}{c^2}$$

## 8.2 Kernkraft und Bindungsenergie

Bis auf die elektrische Ladung und die kleine Massendifferenz sind das Proton und das Neutron identische Teilchen. Man nennt sie auch Nukleonen. Zwischen den Nukleonen wirkt die starke, anziehende Kernkraft, die eine Konsequenz der starken Wechselwirkung ist (siehe Elementarteilchenphysik). Die Kernkraft sorgt für die Stabilität der Kerne. Sie unterscheidet nicht zwischen Proton und Neutron und wirkt nur über kurze Distanzen.

Protonen und Neutronen unterliegen dem Pauli-Prinzip. Das würde die gleiche Anzahl von Neutronen und Protonen in den Kernen bevorzugen. Demgegenüber steht jedoch die elektrische Abstoßung der Protonen. Stabile Kerne enthalten deshalb mehr Neutronen als Protonen. Man kennt 254 stabile Kerne, der schwerste ist  ${}^{209}_{83}Bi$ , der 83 Protonen und 126 Neutronen enthält.

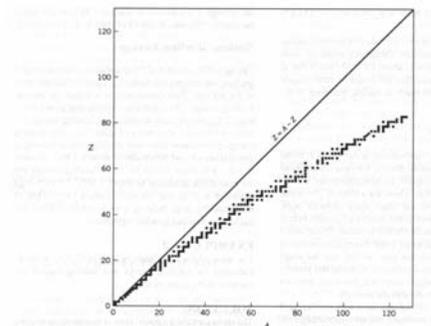


FIGURE 11-2 Number of protons (Z) versus number of neutrons (A - Z) for stable nuclei.

Die Kernkraft, die die Atomkerne zusammenhält, bewirkt eine negative potentielle Energie des Kerns im Vergleich zu den separierten, einzelnen Kernbausteinen. Das entspricht einer positiven Bindungsenergie, die gemäß  $E = mc^2$  dazu führt, dass die Masse eines stabilen Kerns kleiner ist, als die Summe der Massen der Kernbausteine.

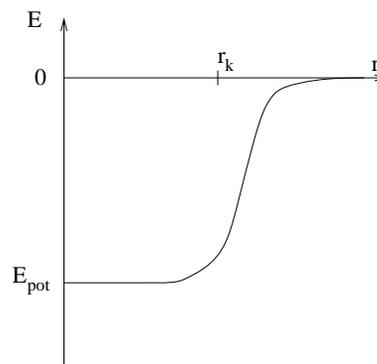
Beispiel Deuteriumkern (Deutron)

$$m_d = m_p + m_n + E_{pot}$$

$$m_d + E_B = m_p + m_n$$

Mit  $m_d = 1875,6 \frac{\text{MeV}}{c^2}$  und den Werten für  $m_p$  und  $m_n$  (Kap. 8.1) folgt

$$E_B = 2,2 \text{ MeV}$$



Die Bindungsenergie der Kerne sind von der Größenordnung einige MeV pro Nukleonen.

Zum Vergleich:	äußere Elektronen der Atome	einige eV
	innere Elektronen schwerer Atome	10 – 100keV
	Bindungsenergie der Nukleonen	einige MeV

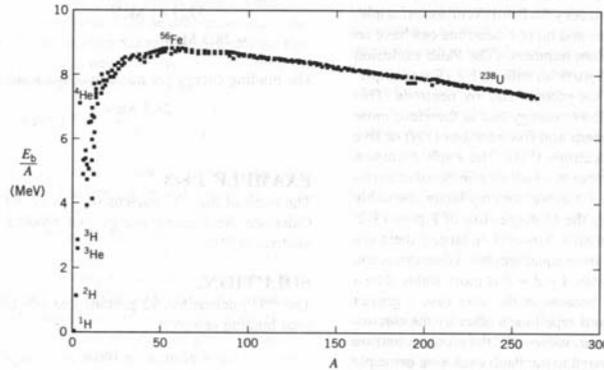


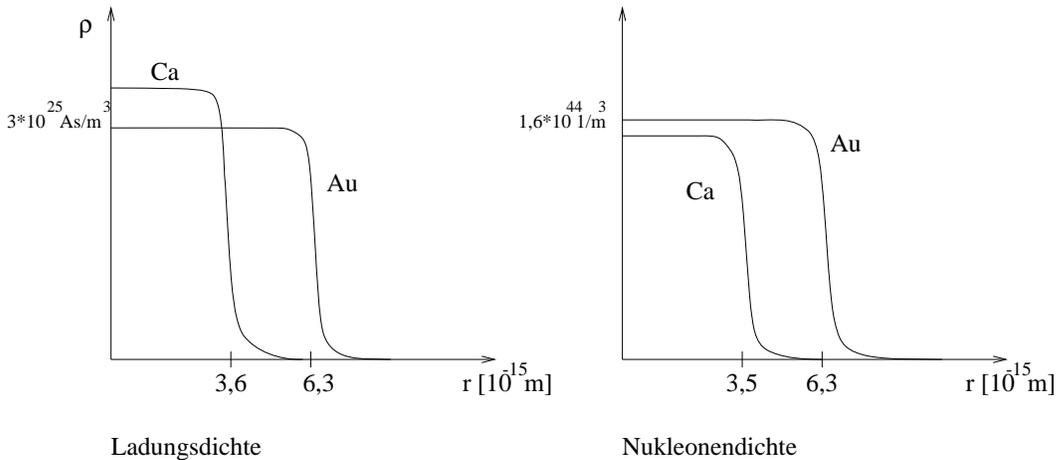
FIGURE 11-3. Binding energy per nucleon versus atomic mass number ( $A$ ).

Die Bindungsenergie pro Nukleonen als Funktion der Massenzahl zeigt Spitzen bei  ${}^4_2\text{He}$ ,  ${}^{16}_8\text{O}$ ,  ${}^{40}_{20}\text{Ca}$ , ... die deshalb sehr stabile Kerne sind. Das absolute Maximum wird bei  ${}^{56}_{26}\text{Fe}$  erreicht. Daraus folgt, dass es prinzipiell zwei Möglichkeiten gibt, durch Umwandlungen von Kernen Energie zu gewinnen:

Kernfusion:	Verschmelzen leichter Kerne	$A < 56$
Kernspaltung:	Spalten eines schweren Kernes	$A > 56$

### 8.3 Kernradius und Kernmodelle

Die Größe eines Atomkerns kann man durch Streuung mit hochenergetischen Teilchen ermitteln. Bei der Streuung mit Elektronen erhält man die Ladungsverteilung im Kern, den die Elektronen spüren nur die elektrische Anziehung der Protonen und nicht die Kernkraft. Bei der Streuung der mit Neutronen erhält man dagegen die Verteilung der Nukleonen:



Man findet ähnliche Ergebnisse für die Verteilung der Protonen (Ladungsdichte) und der Nukleonen. Der Radius der Kerne ist nicht scharf definiert (quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeiten). Als Kernradius bezeichnet man die Stelle, an der die Dichte der Nukleonen auf die Hälfte gesunken ist. Im Inneren des Kerns ist die Dichte konstant. Auch für Kerne mit

verschiedenen  $A$  und  $Z$  sind die Dichten sehr ähnlich. Offenbar sind die Nukleonen im Kern dicht gepackt.

### Tröpfchenmodell des Kerns:

Aus dem oben gesagten folgt, dass das Volumen  $V$  des Kerns proportional zu  $A$  ist oder mit  $V = \frac{4}{3}\pi R^3$  erhält man den Zusammenhang:

$$\text{Kernradius: } \boxed{R = R_0 A^{\frac{1}{3}}} \quad R_0 \approx 1,3 \cdot 10^{-15} m \text{ experimentell ermittelter Wert}$$

Für die Massendichte im Kern erhalten wir

$$\underline{\rho_K} = \frac{M}{V} \approx \frac{m_p \cdot A}{\frac{4}{3}\pi R_0^3 A} = \underline{1,8 \cdot 10^{17} \frac{kg}{m^3}} \quad (H_2O : 10^3 \frac{kg}{m^3})$$

Die Bindungsenergie der Kerne können wir nicht analytisch berechnen. Zum einen handelt es sich ja wieder um ein Vielkörperproblem und zum anderen ist das Potential der Kernkraft nicht so einfach wie das Coulomb-Potential im Wasserstoffproblem. Wir beschreiten daher einen empirischen Weg.

In Analogie zu einem Wassertropfen können wir uns die Bindungsenergie zusammengesetzt denken aus einem Beitrag, der proportional zur Zahl der Nukleonen  $A$  ist, abzüglich eines Termes proportional zur Oberfläche ( $\propto A^{2/3}$ ), der der Tatsache Rechnung trägt, dass diese Nukleonen weniger Nachbarn haben (Oberflächenspannung):

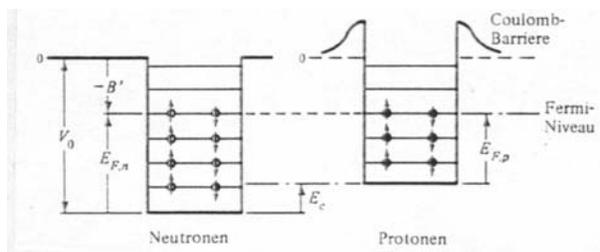
$$E_b = C_1 A - C_2 A^{2/3}$$

Weiterhin müssen wir die Coulomb-Abstoßung der Protonen berücksichtigen. Das Potential ist proportional zu  $Z^2$  und zu  $1/R$ , also

$$E_b^{Coulomb} = -C_3 \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}}$$

Das sind Beiträge, die auch im Rahmen der klassischen Physik plausibel sind.

Protonen und Neutronen unterliegen aber als Fermionen dem Pauli-Prinzip! Die Nukleonen können also nicht alle auf dem niedrigsten Energieniveau liegen. Wir müssen sie daher als Fermi-Gas behandeln wie die Elektronen in einem Festkörperkristall:



Potentiale der Neutronen und Protonen: Getrennt für beide Nukleonensorten werden die Zustände bis zur Fermi-Energie aufgefüllt.

Die Fermi-Energie berechnet sich zu:

$$E_F = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \hbar^2}{2m} n^{\frac{2}{3}} \text{ und die mittlere Energie zu (Übung)}$$

$$\langle E \rangle = \frac{5}{3} E_F \text{ (für } T = 0, \text{ da alle Kerne im Grundzustand sind)}$$

Diese mittlere kinetische Energie der Nukleonen reduziert die Bindungsenergie und zwar um die Summe aus den Beiträgen von Neutronen  $\langle E_N \rangle$  und Protonen  $\langle E_Z \rangle$ .

$$\begin{aligned}
 E_b^{Pauli} &= - \langle E(Z, N) \rangle = N \langle E_N \rangle + Z \cdot \langle E_Z \rangle \quad \text{mit } m = m_p \approx m_n \\
 &= \frac{(3\pi^2)^2 \hbar^2}{2} \frac{1}{m} \left[ N \cdot \left( \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} + Z \cdot \left( \frac{Z}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \quad V = \frac{4}{3} \pi R_0^3 A \\
 &= \frac{(3\pi^2)^2 \hbar^2}{2} \frac{1}{m} \frac{1}{\left( \frac{4}{3} \pi \right)^{\frac{2}{3}} R_0^2} \frac{N^{\frac{5}{3}} + Z^{\frac{5}{3}}}{A^{\frac{2}{3}}} \\
 &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{=const}
 \end{aligned}$$

Uns interessiert der Beitrag zu  $E_b$ , falls Neutronen und Protonen nicht gleichmäßig aufgefüllt werden, also  $N \neq Z$ .

Mit  $\epsilon = N - Z$  und  $A = N + Z$  folgt  $N = \frac{A}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon}{A} \right)$ ,  $Z = \frac{A}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon}{A} \right)$

$$\frac{N^{\frac{5}{3}} + Z^{\frac{5}{3}}}{A^{\frac{2}{3}}} = \left( \frac{A}{2} \right)^{\frac{5}{3}} \frac{1}{A^{\frac{2}{3}}} \left[ \left( 1 + \frac{\epsilon}{A} \right)^{\frac{5}{3}} \left( 1 - \frac{\epsilon}{A} \right)^{\frac{5}{3}} \right]$$

Mit der Näherung  $(1+x)^n \approx 1 + nx + \frac{1}{2}n(n+1)x^2$  für kleine  $x$  gilt dann

$$\dots = \frac{A}{2^{\frac{2}{3}}} \left( 1 + \frac{5}{3} \frac{\epsilon}{A} + \frac{5}{9} \frac{\epsilon^2}{A^2} + 1 - \frac{5}{3} \frac{\epsilon}{A} + \frac{5}{9} \frac{\epsilon^2}{A^2} \right) = \frac{1}{2^{\frac{2}{3}}} \left( 2A + \frac{10}{9} \frac{\epsilon^2}{A} \right)$$

Der erste Term ist proportional zu  $A$  und damit schon in der Volumenenergie  $E_b = C_1 A$  enthalten. Durch das Pauli-Prinzip erhalten wir außerdem noch einen Beitrag für  $N \neq Z$ :

$$E_b^{asym} = -C_4 \frac{(N - Z)^2}{A}$$

Zum Schluss kann man noch einen kleinen Term hinzufügen, der der Tatsache Rechnung trägt, dass Kerne mit einer geraden Zahl Protonen und einer geraden Zahl Neutronen besonders stabil sind, während ungerade Neutronen- und Protonenzahlen eine Reduktion der Bindungsenergie zur Folge haben

$$E_g = \frac{1}{\sqrt{A}} \begin{cases} +C_5 & \text{für gerade - gerade} \\ -C_5 & \text{für ungerade - ungerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Zusammengefasst erhält man die Weizäcker-Formel, die näherungsweise die Bindungsenergie der Kerne beschreibt. Die Zahlenwerte der Konstanten  $C_1 \dots C_5$  sind aus Untersuchungen an vielen Kernen durch eine Anpassungsrechnung bestimmt worden

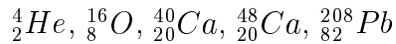
$$\boxed{\frac{E_b}{\text{MeV}} = 16 \cdot A - 18 \cdot A^{\frac{2}{3}} - 0,711 \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} - 23,7 \frac{(N - Z)^2}{A} \pm 11,2 \cdot \frac{1}{\sqrt{A}}}$$

Schalenmodell des Kerns:

Bei genauerer Betrachtung der gemessenen Bindungsenergie als Funktion der Proton- und Neutronzahl findet man besonders hohe Werte für  $E_b$  bei den sogenannten magischen Zahlen:

$N, Z = 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126$  (Der Kern mit  $Z = 126$  existiert nicht)

Die Bindungsenergie ist besonders hoch, wenn sowohl  $Z$  als auch  $N$  magische Zahlen sind, z.B.:



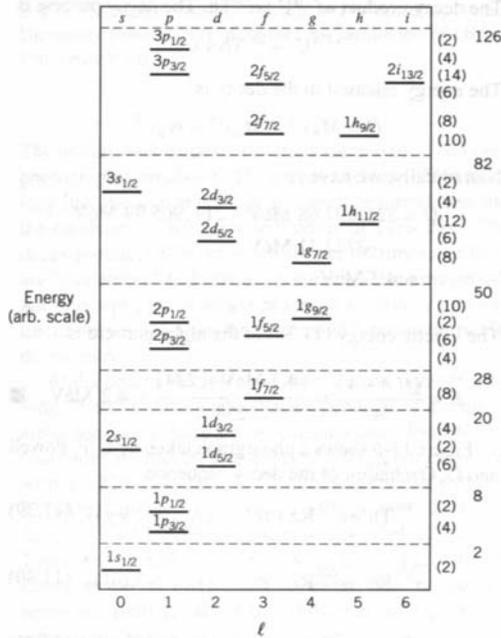
Das ist analog zur Atomphysik. Dort haben wir gesehen, dass die Ionisationsenergie für Atome mit abgeschlossenen Schalen, den Edelgasen, besonders hoch ist. Die magischen Zahlen für die Zahl der Elektronen sind: 2, 10, 18, 36, 54, 86

Im Schalenmodell des Kerns stellen wir uns die Nukleonen vor, die sich im Kernpotential bewegen. Die Zustände der Nukleonen werden durch Quantenzahlen charakterisiert. In der Kernphysik wird die Hauptquantenzahl  $n$  so definiert, dass sie die Zustände mit gleichem Bahndrehimpuls mit steigender Energie numeriert:  $1s, 2s, 3s, \dots, 1p, 2p, 3p, \dots$

Die Einschränkung für die Bahndrehimpulsquantenzahl  $l \leq n - 1$  gilt hier nicht (anderes Potential!), d.h. es gibt die Zustände  $1p, 1d, 1f, \dots$

Der Gesamtdrehimpuls eines Nukleons im Kern ist die Summe aus dem Bahndrehimpuls und dem Spin  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ . Die s-Zustände haben also  $j = \frac{1}{2}$ , die p-Zustände  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ , die d-Zustände  $j = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$  usw.

Man beobachtet eine relativ starke Abhängigkeit der Kernkräfte vom Spin, d.h. es gibt für große Werte von  $l$  eine große „Feinstruktur“-Aufspaltung. Für gleiches  $l$  ist die Energie des Zustandes kleiner, wenn  $\vec{L}$  und  $\vec{S}$  parallel stehen.



**FIGURE 11-4 Schematic diagram of the nuclear shell model.**  
 The numbers in parenthesis indicate the number of nucleons per subshell. The numbers on the far left indicate the total number of nucleons in filled subshells.

Nebenstehend ist eine schematische Darstellung der Energieniveaus für Protonen oder Neutronen gezeigt. Die magischen Zahlen entsprechen relativ großen Lücken in den Energieniveaus.

Im Tröpfchenmodell nehmen wir an, dass alle Nukleonen im Kern stark gekoppelt sind. Im Schalenmodell behandeln wir sie als unabhängige Teilchen, die sich in einem Potential bewegen. Beide Ansätze haben Vor- und Nachteile und werden in komplizierten Kernmodellen verknüpft.

## 8.4 Kernzerfälle

Zerfälle instabiler Atomkerne wurden zum erstenmal 1896 von Becquerel an Uran beobachtet (Radioaktivität). Der spontane Zerfall von Atomkernen ist ein zufälliger Prozess. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein instabiler Kern in dem Zeitintervall  $dt$  zerfällt, hängt weder von der Vorgeschichte noch von der Umgebung ab. Diese Wahrscheinlichkeit  $W$  ist allein eine Eigenschaft des Kernes und durch die Wellenfunktion der Nukleonen gegeben

$$W = \lambda \cdot dt \quad \lambda : \text{Zerfallskonstante}$$

Die (mittlere) Zahl der Kerne, die in dem Zeitintervall  $dt$  zerfallen, ist deshalb gleich der Zahl der Kerne  $N$  mal dieser Zerfallswahrscheinlichkeit. Für die Abnahme der Zahl der Kerne gilt deshalb:

$$N(t + dt) - N(t) = dN = -N(t) \cdot \lambda \cdot dt$$

$$\text{oder} \quad \boxed{\frac{dN}{N} = -\lambda dt}$$

Diese Differentialgleichung lösen wir durch Integration von  $t = 0$  bis zur Zeit  $t$ :

$$\int_{N(t=0)=N_0}^{N(t)} \frac{dN'}{N'} = -\lambda \int_0^t dt' \quad \Rightarrow \quad \ln \frac{N(t)}{N_0} = -\lambda t$$

$$\boxed{N(t) = N_0 e^{-\lambda t}} \quad \text{Zerfallsgesetz}$$

Die Lebensdauer eines Kerns ist definiert als  $\tau = \frac{1}{\lambda}$  und gibt die Zeit an, nach der die Zahl der Kerne auf  $\frac{1}{e}$  gesunken ist. Als Halbwertszeit bezeichnet man die Zeit, nach der noch die Hälfte der Kerne übrig ist:

$$N(t = T_{\frac{1}{2}}) = \frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T_{\frac{1}{2}}}$$

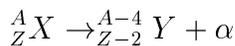
$$\Rightarrow \boxed{T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{\lambda} = 0,693 \cdot \tau}$$

Halbwertszeiten umspannen einen weiten Bereich und reichen von  $\approx 10^{-3} s$  bei künstlich erzeugten Transuranen ( $Z > 92$ ) bis hin zu Zeiten in der Größenordnung des Alters des Universums, z.B. hat  ${}_{92}^{238}U$  die Halbwertszeit  $T_{\frac{1}{2}} = 4,46 \cdot 10^9 \text{ Jahre}$ .

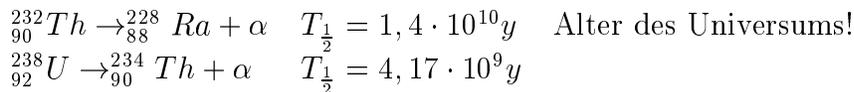
Man unterscheidet drei Arten von Zerfällen instabiler Atomkerne:

#### $\alpha$ -Zerfall:

Die  $\alpha$ -Teilchen bestehen aus 2 Protonen und 2 Neutronen. Dieser Kern hat eine besonders hohe Bindungsenergie  $E_B = 28,3 \text{ MeV}$ . Schwere Kerne zerfallen deshalb häufig dadurch, dass sich im Kern ein  $\alpha$ -Teilchen formiert, das die Potentialbarriere durchtunneln kann (Seite 14). Allgemein sieht der Zerfall so aus:



Beispiele für  $\alpha$ -Zerfälle von auf der Erde vorkommenden, schweren Kernen sind



Es gibt vier verschiedene Zerfallsserien, die bei stabilen Blei- oder Wismut-Isotopen enden. Die  $\alpha$ -Teilchen haben kinetische Energien im Bereich  $4 - 10 \text{ MeV}$ . Die Energie, die beim Zerfall freigesetzt wird, der sogenannte Q-Wert, ist

$$Q = (m_Y - m_X - m_\alpha)c^2$$

Der  $\alpha$ -Zerfall kann nur erfolgen, wenn  $Q > 0$  ist. Der Endzustand besteht aus zwei Teilchen (Zweikörperzerfall). Da der Ausgangskern in Ruhe ist, gilt  $\vec{p}_Y + \vec{p}_\alpha = 0$ . Wegen  $Q \ll m_\alpha c^2$  können wir nicht relativistisch rechnen

$$Q = \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{p_Y^2}{2m_Y} = \frac{p_\alpha}{2m_\alpha} \left( 1 + \frac{m_\alpha}{m_Y} \right)$$

Die kinetische Energie der  $\alpha$ -Teilchen  $T_\alpha$  ist daher

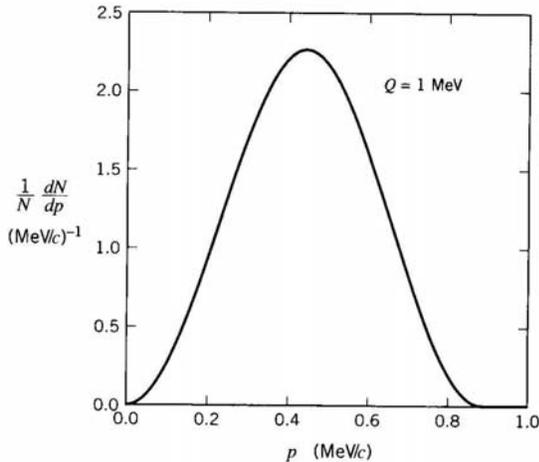
$$T_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} = Q \frac{m_Y}{m_Y + m_\alpha} = Q \cdot \frac{A-4}{A} \approx Q \quad \text{für große } A$$

Da es sich um einen Zwei-Körperzerfall handelt, sind die  $\alpha$ -Teilchen monoenergetisch. Die Reichweite von  $\alpha$ -Strahlen ist kurz. Bei einer Energie von  $5 \text{ MeV}$  ist die Reichweite  $4 \text{ cm}$  in Luft und  $30 \mu\text{m}$  in Wasser!

### $\beta$ -Zerfall:

Die  $\beta$ -Strahlung besteht aus Elektronen ( $\beta^-$ ) oder Positronen ( $\beta^+$ ). Das einfachste Beispiel ist der Zerfall eines freien Neutrons. Ein Neutron wandelt sich unter Aussendung eines Elektrons in ein Proton um. Dieser Zerfall ist möglich, weil  $m_n > m_p + m_e$ . Der Q-Wert ist  $Q = m_n - m_p - m_e = 939,6\text{MeV} - 938,3\text{MeV} - 0,5\text{MeV} = 0,8\text{MeV}$ . Die Lebensdauer eines freien Neutrons beträgt  $\tau = 889\text{s}$  ( $T_{\frac{1}{2}} = 616\text{s}$ ).

Beispiel für ein Impulsspektrum der Elektronen aus  $\beta$ -Zerfall (für  $Q = 1\text{MeV}$ ):

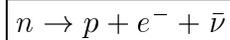


**FIGURE 11-7 Electron momentum distribution from beta decay.**

The shape of the spectrum is characteristic of a final state with three particles. The spectrum is plotted for a reaction  $Q$  value of 1 MeV, corresponding to a maximum electron momentum of about 0.85 MeV/c.

Das beobachtete Spektrum ist nicht verträglich mit dem Zwei-Körperzerfall  $n \rightarrow p + e$ . Man würde monoenergetische Elektronen erwarten. Es muss ein drittes Teilchen im Endzustand erzeugt werden, das Impuls und Energie wegträgt. Aus diesen Gründen postulierte Pauli 1931 die Existenz des Neutrinos  $\nu$ .

Im  $\beta^-$ -Zerfall des Neutrons wird ein Antineutrino ( $\bar{\nu}$ ) erzeugt:



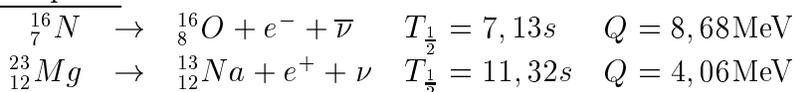
Das Neutrino ist ein Fermion ( $s = \frac{1}{2}$ ), trägt aber keine elektrische Ladung und hat keine Masse (bzw. eine sehr kleine Masse  $m_\nu < 2\text{eV}$ ). Das Neutrino spürt die Kernkraft nicht und kann nur über die schwache Wechselwirkung mit Materie wechselwirken. Im Mittel können Neutrinos Lichtjahre von Blei durchdringen, bevor es zu einer Wechselwirkung kommt.

Das Neutrino wurde 1956 von Reines und Cowan entdeckt. In Kernreaktoren werden sehr viele Antineutrinos produziert. In ihnen konnte gelegentlich der inverse Neutron-Zerfall  $\bar{\nu} + p \rightarrow n + e^+$  durch Nachweis von  $e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$  beobachtet werden.

In instabilen Kernen kommt es zu Umwandlungen eines Neutrons zu einem Proton, oder umgekehrt, d.h. zu  $\beta^-$ - bzw.  $\beta^+$ -Zerfällen:

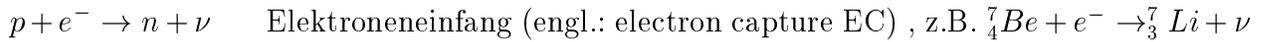


### Beispiele:



Kerne, die durch  $\beta^+$ -Strahlung zerfallen, können auch durch Einfang eines Elektrons der inne-

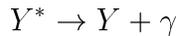
ren Schalen zerfallen:



Das eingefangene Elektron hinterläßt ein Loch in einer inneren Schale (meist K-Schale), das durch Aussendung von (Röntgen)-Licht wieder aufgefüllt wird. Manchmal wird dieses Photon sofort wieder absorbiert und schlägt ein Elektron aus der Hülle (Auger-Elektron).

$\gamma$ -Zerfall:

Nach einem  $\alpha$ - oder  $\beta$ -Zerfall verbleibt der Tochterkern in einem angeregten Zustand. Analog zur Elektronenhülle wird diese Anregung durch Aussenden eines oder mehrerer Photonen abgebaut



Die Energie der  $\gamma$ -Quanten ist im MeV Bereich.

### Eigenschaften einiger häufig verwendeter radioaktiver Stoffen

Quelle	Halbwertszeit (Jahr)	Zerfallstyp	Strahlung	Energie (keV)
${}^{22}\text{Na}$	2,60	$\beta^+$ , EC	Positron	546 (max)
			Gamma	511
			Gamma	1275
${}^{55}\text{Fe}$	2,73	EC	Gamma	5,89
			Gamma	6,49
			Gamma	14,4
${}^{60}\text{Co}$	5,27	$\beta^-$	Elektron	318 (max)
			Gamma	1173
			Gamma	1332
${}^{90}\text{Sr}$	28,5	$\beta^-$	Elektron	546 (max)
			Elektron	2284 (max, von ${}^{90}\text{Y}$ )
${}^{207}\text{Bi}$	32,2	EC	Gamma	70
			Gamma	1064
			Gamma	1770
			Elektron	976 (Auger)
			Elektron	482 (Auger)
			Elektron	1048 (Auger)
			Elektron	482 (Auger)
${}^{241}\text{Am}$	432	$\alpha$	Alpha	5486
			Alpha	5443
			Gamma	60
			Gamma	18
			Gamma	14
			Gamma	14

## 8.5 Definition der Einheiten für radioaktive Strahlung

Die Einheit der Aktivität ist das Becquerel (Bq)

$$1\text{Bq} = 1 \frac{\text{Zerfall}}{\text{Sekunde}}$$

Oft gibt man die Aktivität von Quellen auch in der alten Einheit Curie (Ci) an:

$$1Ci = 3,7 \cdot 10^{10} Bq$$

1Ci entspricht etwa der Aktivität von einem Gramm Radium, inklusive der Zerfälle der Tochterkerne.

Die biologische Schädlichkeit radioaktiver Strahlung beruht auf der Veränderung von Molekülen durch Stöße der Teilchen mit den Elektronen und Kernen. Ein Maß für das Zerstören von Molekülen ist der Energieverlust der Strahlung. Die Energie, die in einem Kilogramm biologischer Masse absorbiert wird nennt man absorbierte Strahlungs-dosis mit der Einheit Gray (Gy).

$$1Gy = 1 \frac{J}{kg} = 6,24 \cdot 10^{12} \frac{MeV}{kg}$$

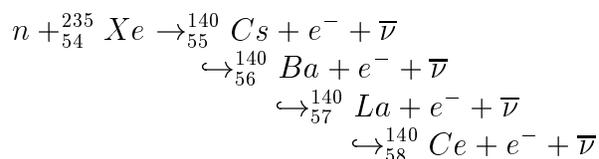
Der biologische Schaden hängt aber nicht nur von der absorbierten Strahlungsenergie ab, sondern auch von der Art der Strahlen.  $\alpha$ -Teilchen sind besonders schädlich. Man definiert eine Äquivalente Strahlungs-dosis, die einen Schädigungsfaktor Q beinhaltet. Die Einheit ist Sievert (Sv).

$$1Sv = 1Gy \cdot Q$$

	Strahlung	Q
Die mittlere natürliche Strahlungs-dosis, die eine Person auf der Erde empfängt ist 0,4 – 4mSv im Jahr. Der empfohlene, maximale Wert ist 50mSv. Eine tödliche Dosis ist ca. 3Sv.	Photonen	1
	Elektronen/Positronen	1
	Protonen (10MeV)	1
	Protonen (1GeV)	2
	Neutronen (thermisch)	3
	Neutronen (schnell)	10
	$\alpha$ -Teilchen	20

## 8.6 Kernspaltung und Kernfusion

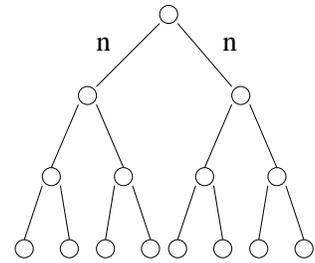
Die Bindungsenergie pro Nukleon von schweren Kernen ( $A > 56$ ) nimmt mit  $A$  ab. Durch Spaltung sehr schwerer Kerne wird daher Energie freigesetzt. Die Spaltung kann durch Bestrahlung mit Neutronen erreicht werden. Der Kern fängt das Neutron ein und wird dadurch sehr instabil. Die Kernspaltung wurde 1939 durch O.Hahn und F.Strassmann beobachtet, L.Meitner und O.Frisch fanden die Erklärung:



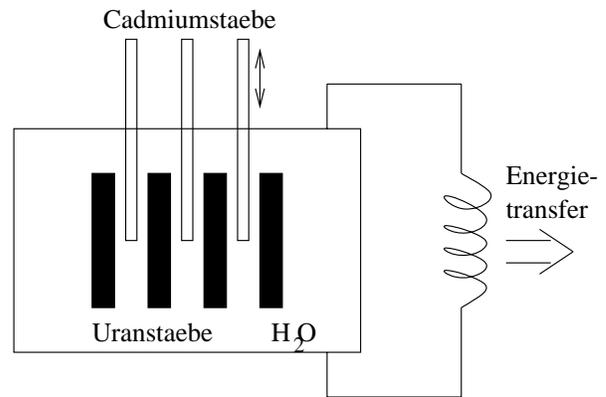
Pro  ${}_{92}^{235}U$ -Kern werden etwa 200MeV Energie frei. Einige Kerne wie  ${}_{92}^{235}U$  oder  ${}_{94}^{239}Pu$  werden durch langsame (thermische) Neutronen gespalten ( $T \approx 10^{-2} - 100eV$ ), andere wie  ${}_{92}^{238}U$  oder  ${}_{90}^{232}Th$  nur durch schnelle ( $T \approx 1MeV$ ). Bei den allerschwersten Kernen wie  ${}_{98}^{254}Cf$  kann die Spaltung spontan erfolgen.

Bei der Spaltung von  ${}^{235}_{92}\text{U}$  werden im Mittel 2,4 Neutronen erzeugt, die wiederum Kerne spalten können. Wenn die Wahrscheinlichkeit, dass eines der Neutronen absorbiert wird und eine weitere  ${}^{235}_{92}\text{U}$  Spaltung auslöst, größer ist als  $\frac{1}{2,4}$ , dann kommt es zu einer Kettenreaktion:

Das ist z.B. der Fall, wenn man eine kritische Masse  ${}^{235}_{92}\text{U}$  zusammenbringt  
 $\Rightarrow$  Atombombe!

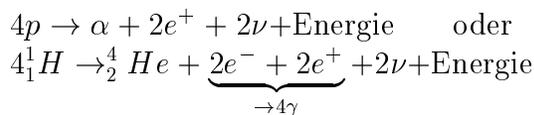


In Kernreaktoren findet dieser Spaltungsprozess kontrolliert statt. Durch Cadmium oder Bor, die einen großen Einfangquerschnitt für Neutronen haben, kann man den Neutronenfluß steuern. Das gelingt, weil einige Neutronen erst Sekunden nach der Spaltung freigesetzt werden. Das Wasser dient zugleich als Kühlmittel für den Wärmetransport und als Moderator, der die Neutronen abbremst.



In normalen Druckwasserreaktoren benötigt man  ${}^{235}\text{U}$ . Natürlich vorkommendes Uran besteht aber hauptsächlich (99,3%) aus  ${}^{238}\text{U}$  und nur zu 0,7% aus  ${}^{235}\text{U}$ . In Reaktoren benötigt man angereichertes Uran ( $\gtrsim 10\%{}^{235}\text{U}$ ). Die Trennung der Isobare ist aber chemisch nicht möglich, sondern erfolgt z.B. in Zentrifugen, die den Massenunterschied ausnutzen.

Eine noch effektivere Methode Energie aus Kernumwandlungen zu gewinnen ist die Fusion leichter Kerne. Die Kernfusion ist die Energiequelle der Sonne und der meisten Sterne. Die Nettoreaktion ist



Dabei wird pro erzeugtem Heliumkern die Energie von

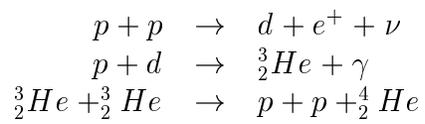
$$Q = 4m_H - m_{He} = 27\text{MeV} \quad \text{frei!}$$

Da die Neutrinos einen Teil der Energie forttragen, sind etwa 25MeV davon nutzbar. Damit es zur Kernfusion kommt, muss die Coulomb-Abstoßung der Kerne überwunden werden. Dazu ist eine kinetische Energie notwendig, die sehr hohen Temperaturen entspricht ( $> 10^7\text{K}$ )! Das Beherrschen dieser extremen Bedingungen ist das große Problem, um die Kernfusion, außer in der Wasserstoffbombe, auch zur kontinuierlichen Energieerzeugung zu nutzen.

In Sternen erfolgt die Erzeugung von Helium aus Wasserstoff über zwei Hauptprozessketten:

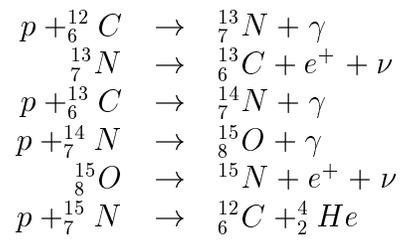
pp Zyklus  $T < 10^8 K$

---



Kohlenstoffzyklus (CNO)  $T > 10^8 K$

---



Die Temperatur im Inneren der Sonne ist  $15 \cdot 10^6 K$ , d.h. der pp-Zyklus ist der dominierende Prozess. Die Sonne scheint seit etwa  $5 \cdot 10^9$  Jahren. Der Vorrat an Wasserstoff reicht noch für weitere ca.  $5 \cdot 10^9$  Jahre...

# 9 Elementarteilchenphysik

## 9.1 Die Bausteine der Materie

Die Elementarteilchenphysik beschäftigt sich mit den fundamentalen Bausteinen der Materie und deren Wechselwirkungen. Diese elementaren Bausteine sind punktförmige Gebilde, d.h. ohne räumliche Ausdehnung, denen Eigenschaften wie Masse, Spin, Ladung etc. zugeordnet sind. Um die Physik der kleinsten Dimensionen zu untersuchen, z.B. die Punktförmigkeit der Teilchen, benötigen wir möglichst hohe Energien:  $\lambda = \frac{h}{p}$ . Daher bezeichnet man dieses Gebiet auch als Hochenergiephysik. Die benutzten Apparaturen sind Teilchenbeschleuniger (Elektronen, Protonen) und Detektoren, die die Kollisionsprodukte untersuchen. Beispiele für Teilchenbeschleuniger sind:

Beschleuniger	Typ	Energie	
LEP	Elektron-Positron Ringbeschleuniger	bis 200GeV	1989 - 2000
SLD	Elektron-Positron Linearbeschleuniger	91GeV	1989 - 1998
Tesla	Elektron-Positron Linearbeschleuniger	bis 800GeV	in Planung
HERA	Elektron-Proton	$E_e = 30\text{GeV}, E_p = 820\text{GeV}$	seit 1992
Tevatron	Proton-Antiproton	$E_p = 1000\text{GeV}$	seit 1987
LHC	Proton-Proton	$E_p = 7000\text{GeV}$	ab 2005

Kandidaten für Elementarteilchen, die wir bisher kennengelernt haben:

- Das Elektron ( $e^-$ ) und sein Antiteilchen, das Positron ( $e^+$ )
- Das Neutrino ( $\nu$ ) und sein Antiteilchen, das Antineutrino ( $\bar{\nu}$ )

Das Elektron und das Neutrino bezeichnet man auch als Leptonen, weil sie leicht sind:  $m_e = 511 \frac{\text{keV}}{c^2}$ ,  $m_\nu < 3 \frac{\text{eV}}{c^2}$ . Für das Neutrino kann man zur Zeit nur eine obere Massengrenze angeben. Es gibt aber ganz neue Hinweise, dass das Neutrino eine sehr kleine Masse besitzt, der Größenordnung  $\approx 10^{-3} \frac{\text{eV}}{c^2}$ .

Die Leptonen spüren die Kernkraft nicht, d.h. sie nehmen nicht an der starken Wechselwirkung teil. Bis heute hat man in Streuexperimenten an den Beschleunigern keine Abweichung von der Punktförmigkeit der Leptonen gefunden. Das bedeutet, dass  $R_{e,\nu} < 10^{-18}m$  ist.

Nukleonen (Neutron und Proton):

Diese Teilchen gehören zur Gruppe der Hadronen, was schwer bedeutet. Die Nukleonen, wie alle Hadronen, sind nicht elementar!

In Streuexperimenten mit hochenergetischen Elektronen hat man herausgefunden, dass die Ladung in einem Proton auf drei punktförmige Teilchen verteilt ist. Auch im Neutron, das ja insgesamt neutral ist, finden sich drei dieser punktförmigen, geladenen Teilchen. Man nennt sie Quarks. In den Nukleonen gibt es zwei verschiedene Quarks, das up-Quark ( $u$ ) und das down-Quark ( $d$ ):

$$\begin{array}{ll}
 u: \text{Ladung } +\frac{2}{3}e & \text{Proton } p = uud \quad Q_p = +1e \\
 d: \text{Ladung } -\frac{1}{3}e & \text{Neutron } d = udd \quad Q_n = 0
 \end{array}$$

Auch von den Quarks nehmen wir heute noch an, dass sie elementar sind. Ihre Größe kann ebenfalls auf  $R_q < 10^{-18}m$  beschränkt werden.

Quarks haben ebenfalls einen Spin  $s = \frac{1}{2}$ . Neben ihrer drittelzahligen elektrischen Ladung tragen Quarks, im Gegensatz zu Leptonen, noch eine Farbladung (rot, grün oder blau). Diese Farbladung ist dafür verantwortlich, dass Quarks an der starken Wechselwirkung teilnehmen. Eine weitere Konsequenz ist, dass freie Quarks nicht existieren, sondern immer in Hadronen gebunden sind. Neben den Nukleonen kennt man heute sehr viele andere, instabile Hadronen, die aus Quarks bestehen: entweder drei Quarks wie bei Nukleonen oder Quark und Antiquark. Ein Beispiel ist das Pion  $\pi^-$ :  $u\bar{d}$   $m_\pi = 140\text{MeV}$ .

Weil freie Quarks nicht existieren, kann ihre Masse nicht genau bestimmt werden. Die Massen der Hadronen sind durch die Bindungsenergie bestimmt:

$$m_u \approx m_d \approx \text{einige MeV}$$

Alle bekannte Materie des Universums besteht aus diesen vier fundamentalen Bausteinen:

$$\text{Leptonen} : \begin{pmatrix} \text{Neutrino} \\ \text{Elektron} \end{pmatrix} \quad \text{Quarks} : \begin{pmatrix} \text{up - Quark} \\ \text{down - Quark} \end{pmatrix}$$

Da alle diese Teilchen einen Spin  $s = \frac{1}{2}$  haben, wird Materie also aus Fermionen aufgebaut.

An Beschleunigerexperimenten hat man inzwischen zu jedem dieser vier Fermionen zwei weitere Kopien gefunden. Diese Kopien unterscheiden sich durch nichts voneinander, außer der Masse. Z.B. ist das Myon ( $\mu$ ) nichts anderes, als ein schweres Elektron:  $m_\mu = 106 \frac{\text{MeV}}{c^2} \approx 200m_e$ . Die fundamentalen Fermionen werden entsprechend ihrer Masse in drei Generationen (oder Familien) eingeteilt. Man weiß heute durch Experimente am LEP Beschleuniger, dass es nicht mehr als die drei bekannten Generationen gibt. Warum es diese drei Generationen gibt, ist allerdings noch nicht geklärt. Es könnte etwas damit zu tun haben, dass es im Universum Materie, aber keine Antimaterie gibt.

Jedem geladenen Lepton ( $e, \mu, \tau$ ) ist ein Neutrino zugeordnet  $\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$ , die unterschiedliche Teilchen sind! Deshalb geben wir jetzt auch dem Elektron-Neutrino, das wir im Neutronzerfall kennengelernt haben, einen Index:

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e.$$

Jeder Leptonfamilie ist eine Leptonzahl zugeordnet, die getrennt nach Familie erhalten ist (ladungsartige Quantenzahl). Antiteilchen haben einen negativen Wert. Die Fermionen der II. und III. Generation sind instabil und zerfallen in die leichten Fermionen der I. Generation.

Beispiel: das Myon hat eine Lebensdauer von  $\tau = 2,2\mu\text{s}$

$$\begin{array}{ccccccc} \mu^- & \rightarrow & e^- & +\bar{\nu}_e & \nu_\mu & \mu^+ & \rightarrow & e^+ & \nu_e & \bar{\nu}_\mu \\ \text{Elektronzahl:} & 0 & = & +1 & -1 & 0 & & 0 & = & -1 & +1 & 0 \\ \text{Myonzahl:} & +1 & = & 0 & 0 & +1 & & +1 & = & 0 & 0 & +1 \end{array}$$

Ähnliches gilt für die Quarks, doch ist hier die entsprechende Quantenzahl nicht streng erhalten, weil Übergänge zwischen den Generationen möglich sind.

Liste der fundamentalen Fermionen:

		Ladungen			Masse $[m_p]^*$	
		elektrisch	schwach*	Farbe		
Leptonen						
I	Neutrino $\nu_e$	0	+1/2	–	$< 2 \text{ eV}/c^2$	$< 2 \cdot 10^{-9}$
	Elektron e	–e	–1/2	–	$511 \text{ keV}/c^2$	$0.5 \cdot 10^{-3}$
II	Neutrino $\nu_\mu$	0	+1/2	–	$< 170 \text{ keV}/c^2$	$< 1.8 \cdot 10^{-4}$
	Myon $\mu$	–e	–1/2	–	$106 \text{ MeV}/c^2$	0.1
III	Neutrino $\nu_\tau$	0	+1/2	–	$< 18 \text{ MeV}/c^2$	$< 2 \cdot 10^{-2}$
	Tau $\tau$	–e	–1/2	–	$1.8 \text{ GeV}/c^2$	1.9
Quarks						
I	Up u	$+2/3 e$	+1/2	rgb	$\approx 3 \text{ MeV}/c^2$	$3 \cdot 10^{-3}$
	Down d	$-1/3 e$	–1/2	rgb	$\approx 6 \text{ MeV}/c^2$	$6 \cdot 10^{-3}$
II	Charm c	$+2/3 e$	+1/2	rgb	$\approx 1.2 \text{ GeV}/c^2$	1.3
	Strange s	$-1/3 e$	–1/2	rgb	$\approx 100 \text{ MeV}/c^2$	0.1
III	Top t	$+2/3 e$	+1/2	rgb	$175 \text{ GeV}/c^2$	187
	Bottom b	$-1/3 e$	–1/2	rgb	$\approx 4.5 \text{ GeV}/c^2$	4.8

\*  $T_3$  des schwachen Isospins

\* Protonmasse  $m_p = 938.3 \text{ MeV}/c^2 \approx 1 \text{ GeV}/c^2$

Jedes dieser Fermionen besitzt natürlich noch ein Antiteilchen, z.B.  $e^+$ ,  $\mu^+$ ,  $\tau^+$  oder  $\bar{\nu}_e$ ,  $\bar{\nu}_\mu$ ,  $\bar{\nu}_\tau$ . Die Antiteilchen der Quarks haben auch Antifarbe  $\bar{r}$ ,  $\bar{g}$ ,  $\bar{b}$ !

## 9.2 Die fundamentalen Wechselwirkungen

Nachdem wir die fundamentalen Bausteine identifiziert haben, befassen wir uns nun mit ihren Wechselwirkungen (WW). Wir haben bisher vier verschiedene WW zwischen Materie kennengelernt, die wir hier der Reihe nach diskutieren wollen:

### A) Gravitation

Sie spielt keine Rolle bei Prozessen der Atom-, Kern- oder Elementarteilchenphysik, weil sie viel zu schwach ist im Vergleich zu den anderen WW. Beispiel des Wasserstoffatoms:

$$F_G = \gamma \frac{m_e m_p}{a_0^2} \quad \gamma = 6,67 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{kg s}^2} \quad \text{Gravitationskraft}$$

$a_0$ : Bohrscher Radius

$$F_C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_e \cdot Q_p}{a_0^2} = \alpha \hbar c \frac{1}{a_0^2} \quad \text{Coulombkraft}$$

Das Verhältnis ist

$$\frac{F_G}{F_C} = \frac{1}{\alpha} \frac{\gamma}{\hbar c} m_p m_e$$

Die Größe  $m_{Pl} = \sqrt{\frac{\hbar c}{\gamma}}$  hat offenbar die Dimension einer Masse. Man nennt sie die Planck-Masse:

$$m_{Pl} = 2,18 \cdot 10^{-8} \text{ kg} = 1,22 \cdot 10^{19} \frac{\text{GeV}}{c^2}$$

Eingesetzt folgt also für das Verhältnis von Gravitations zu Coulombkraft im Wasserstoffatom:

$$\frac{F_G}{F_C} = \frac{1}{\alpha} \frac{m_p m_e}{m_{Pl}^2} = 137 \frac{0,934 \text{ GeV} \cdot 0,511 \cdot 10^{-3} \text{ GeV}}{1,22 \cdot 10^{38} \text{ GeV}} = 3,2 \cdot 10^{-40}$$

So wie die Feinstrukturkonstante  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$  die Stärke der elektromagnetischen WW charakterisiert, gibt der Term  $\frac{m_p m_e}{m_{Pl}^2}$  offenbar die Stärke der Gravitation an. Es ist evident, dass wir die Effekte der Gravitation nicht mehr vernachlässigen können, wenn wir Massen der Größenordnung  $m_{Pl}$  bzw. Energien der Größenordnung  $m_{Pl}c^2$  betrachten.

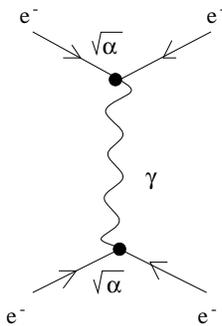
Allerdings existiert noch keine überzeugende Quantentheorie der Gravitation. Deshalb ist die Gravitation auch nicht Teil des Modells, mit dem die WW der Teilchen quantenmechanisch beschrieben werden. Auf makroskopischer Ebene ist die Gravitation die dominierende WW, weil sie immer anziehend ist. Deshalb gibt es keine Abschirmung und alle Einzelbeiträge summieren sich auf.

## B) Elektromagnetische WW

In der Maxwell'schen Theorie werden elektrische und magnetische Kräfte auf eine gemeinsame theoretische Grundlage gestellt, die elektromagnetische WW.

In der Quantentheorie werden WW von Teilchen durch den Austausch von Quanten, d.h. Teilchen, beschrieben. Im Falle der elektromagnetischen WW heißt die Theorie Quantenelektrodynamik (QED).

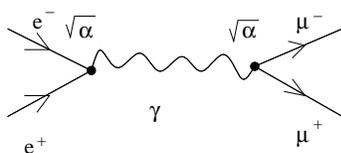
Veranschaulicht werden WW in Feynman-Diagrammen dargestellt, z.B. die Streuung zweier Elektronen:



Im Fall der QED ist das Austauschquant das uns bekannte Photon ( $\gamma$ ). Das Photon koppelt an die elektrische Ladung der Teilchen ( $\propto \sqrt{\alpha}$ ). Die Kraftwirkung wird vermittelt durch Emission und Absorption von Photonen.

Diese Photonen sind virtuell, d.h. sie werden unter kurzfristiger Verletzung von Energie- und Impulserhaltung (Unschärferelation!) erzeugt und wieder vernichtet.

Feynman-Diagramme dienen nicht nur zur Veranschaulichung, sondern auch als Hilfsmittel zur Berechnung von z.B. Wirkungsquerschnitten. Ein anderes, einfaches Beispiel für einen Prozess der QED ist die Reaktion  $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ :



Man berechnet den Wirkungsquerschnitt zu

$$\sigma_{(e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-)} = \frac{4\pi\alpha^2}{3s}; \text{ mit } \sqrt{s} = E_{cms} \text{ Schwerpunktsenergie}$$

Die deBroglie Wellenlänge der Teilchen verkleinert sich mit Zunahme der Energie  $\lambda = \frac{h}{p} \approx \frac{hc}{E}$  für  $E \gg m_0c^2$ . Der Wirkungsquerschnitt (Fläche!) einer solchen Reaktion ist daher proportional zu  $\frac{1}{E_{cms}^2} = \frac{1}{s}$ .

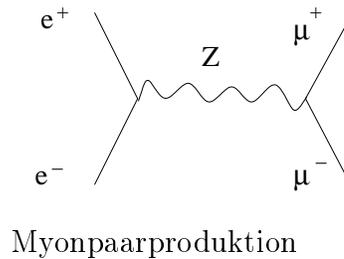
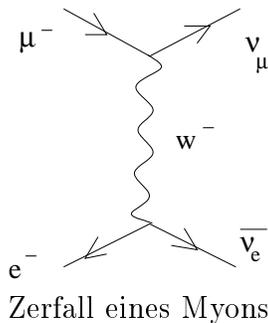
## schwache WW

Diese WW ist verantwortlich für z.B. den Neutron-Zerfall  $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ . Alle Fermionen tragen eine schwache Ladung.

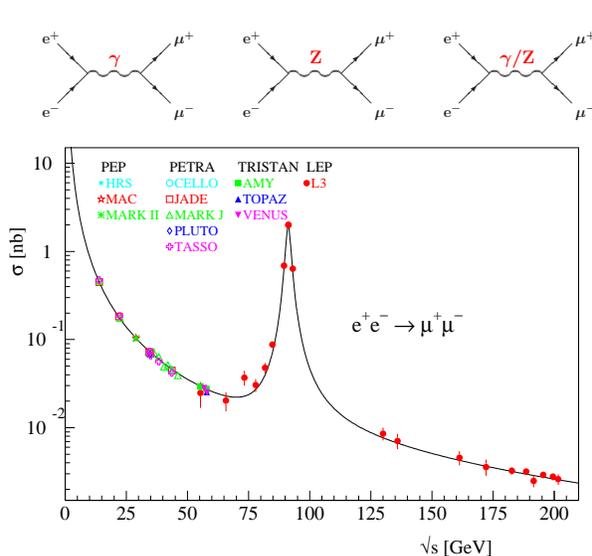
Die Austauschteilchen der schwachen WW sind die geladenen  $W^+$ ,  $W^-$  und das ungeladene Z-Boson. Sie haben wie das Photon den Spin  $s = 1$ . Sie wurden 1983 am CERN entdeckt (C. Rubbia). Im Gegensatz zum Photon besitzen sie eine sehr große Masse

$$m_{W^\pm} = 80,5 \frac{\text{GeV}}{c^2} \quad m_Z = 91,2 \frac{\text{GeV}}{c^2}$$

Beispiele für Feynman-Graphen der schwachen WW:



Auf Grund der sehr hohen Massen der Austauschteilchen ist diese WW sehr schwach, jedenfalls für Energien  $E \ll m_W c^2$ , und von kleiner Reichweite. Die Unschärferelation erlaubt es nur für kurze Zeit  $\Delta t = \frac{\hbar}{m_W c^2}$ , dass man sich die Ruheenergie für das W-Boson aus dem Vakuum borgt.



## D) Starke WW

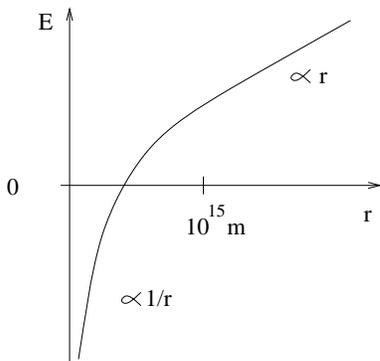
Die Quarks tragen zusätzlich zur elektrischen und schwachen Ladung auch noch eine sogenannte Farbladung. Der Name stammt aus der Analogie mit der Farbenlehre. Es gibt drei verschiedene Farbladungen rot, grün und blau (kurz: rgb), die zusammen addiert weiß, d.h. keine Farbladung ergeben. In einem Proton oder einem Neutron sind immer drei Quarks, die drei unterschiedliche Farben tragen, so dass das Nukleon insgesamt farblos ist. Zum Beispiel könnte ein Proton zu einem bestimmten Zeitpunkt aus einem roten und blauen u-Quark und einem grünen d-Quark

bestehen:  $p = (u_r u_b d_g)$ . Antiquarks tragen Antifarben, z.B. besteht ein Pion  $\pi^-$  aus einem roten  $u^-$  und einem antiroten Antiquark  $\pi^- = (u_r \bar{d}_{\bar{r}})$  oder auch  $(u_g \bar{d}_{\bar{g}})$  oder  $(u_b \bar{d}_{\bar{b}})$ .

Man kann nur farbneutrale Objekte beobachten!

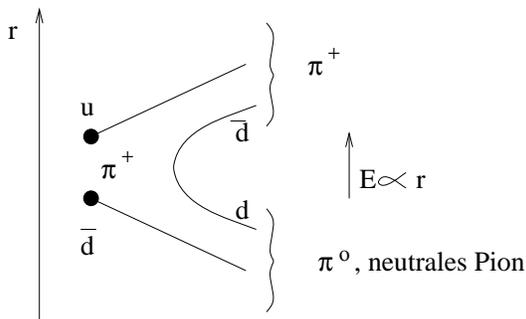
Alle Hadronen bestehen entweder aus drei verschiedenen Farben, drei verschiedenen Antifarben oder Farbe-Antifarbe. Freie Quarks, also freie Farbladungen, sind bisher nicht beobachtet worden.

Dieses Phänomen liegt an einer besonderen Eigenschaft der starken WW. Das Potential wächst z.B. zwischen zwei Quarks linear mit dem Abstand, d.h. die Kraft ist konstant.



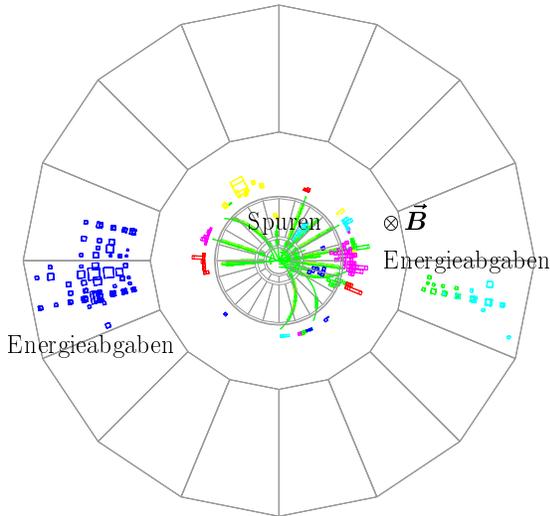
Wenn man versucht zwei Quarks auseinander zuziehen, dann steigt die benötigte Energie immer weiter an. Irgendwann hat man genügend Energie aufgebracht um ein Quark-Antiquark-Paar zu erzeugen. Diese verbinden sich sofort mit den anderen Quarks zu gebundenen Systemen (Hadronen). Man nennt dieses Phänomen Confinement.

Beispiel:



Wenn man an Hochenergiebeschleunigern Quarkpaare erzeugt, z.B.  $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}$ , beobachtet man deshalb nicht die Quarks in dem Detektor sondern Bündel von Hadronen, sogenannte Jets.

Beispiel  $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}$  bei  $\sqrt{s} = m_Z c^2$ :

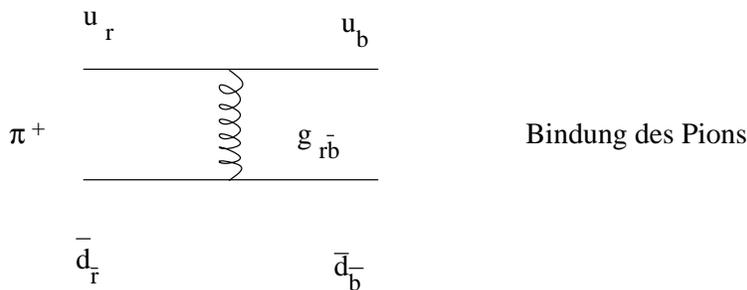


Die Richtung des Elektrons und des Positrons ist senkrecht zur Zeichenebene. Es entstehen ca. 20 geladene und mehrere ungeladene Hadronen. Die geladenen Hadronen hinterlassen Spuren in der zentralen Driftkammer, die durch ein Magnetfeld, das parallel zur  $e^+e^-$ -Achse ist, gekrümmt werden. Hinter der Driftkammer wird die Energie der neutralen und geladenen Hadronen in Kalorimetern gemessen, die z.B. aus Szintillatoren bestehen.

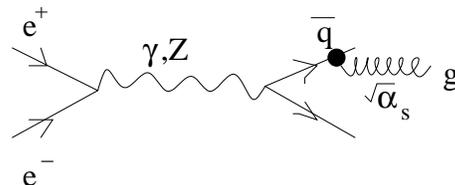
Die Kernkraft verstehen wir nun als eine Art van-der-Waals Kraft durch die starke WW. Die Nukleonen sind zwar farbneutral, tragen aber im Inneren räumlich getrennte Farbladungen. Außerhalb der Nukleonen gibt es deshalb noch ein Restfeld, ähnlich dem elektrischen Dipolfeldes des  $H_2O$ -Moleküls, das allerdings rasch mit dem Abstand abfällt. Die Kernkraft ist die Konsequenz dieses Restfeldes durch die Farbladungen im Inneren der Nukleonen.

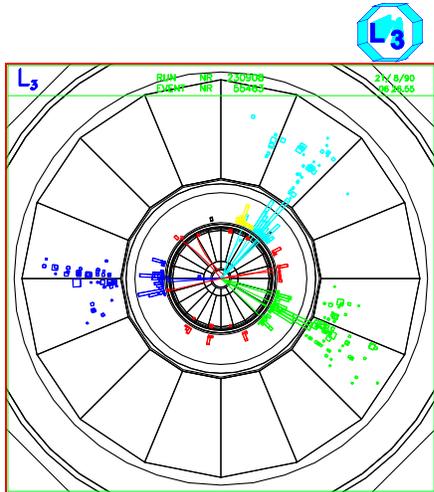
Die starke WW wird durch Austausch von Gluonen (glue = Leim) vermittelt. Gluonen (g) tragen eine Farbe und eine Antifarbe, z.B. kann ein Gluon rot und antiblau sein. Da es acht linear unabhängige Kombinationen der drei Farben und drei Antifarben gibt, gibt es acht verschiedene Gluonen.

Beispiel für ein Feynman-Diagramm der starken WW:



Weil das Gluon nicht farblos ist, kann es ebenfalls nicht frei existieren. Oft wird in der Produktion eines Quarkpaares auch ein Gluon abgestrahlt. Dann kommt es zu 3-Jet Ereignissen z.B.  $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}g$





Die Rate dieser Ereignisse kann man benutzen, um die Kopplungsstärke der starken WW zu messen:  $\alpha_s$ . Sie hängt stark von der Energie ab. Man findet für  $E = m_Z c^2$

$$\alpha_s(m_Z) = 0,12$$

also wesentlich größer als die QED Kopplungskonstante!

Gluonen sind masselos und haben den Spin  $s = 1$

⇒ Materie besteht aus Fermionen  $s = \frac{1}{2}$   
WW werden durch Bosonen  $s = 1$  vermittelt

Zusammenfassung der Austauschbosonen:

Wechselwirkung	Teilchen	Spin [ $\hbar$ ]	Ladungen			Masse
			elektrisch	schwach	Farbe	
Gravitation	?					
Elektromagnetismus	Photon $\gamma$	1	0	0	–	0
Schwache Wechselwirkung	Z Boson	1	0	1	–	91.2 GeV/ $c^2$
	$W^\pm$ Bosonen	1	$\pm e$	1	–	80.4 GeV/ $c^2$
Starke Wechselwirkung	Gluon g	1	0	0	8 Komb.	0

Es sei hier noch angemerkt, dass bis auf das Photon alle anderen Bosonen selbst eine Ladung tragen und daher an sich selbst koppeln.

Inzwischen ist es gelungen, die elektromagnetische und die schwache WW auf eine gemeinsame theoretische Grundlage zu stellen, das Glashow-Salam-Weinberg Modell (GSW). Es bestehen Relationen zwischen den Kopplungskonstanten (Analogie zur Maxwell'schen Theorie). Das Ziel bleibt, alle WW inklusive der Gravitation auf eine gemeinsame Grundlage zu stellen, d.h. sie von dieser einzigen fundamentalen WW abzuleiten, die nur noch eine Kopplungskonstante des freien Parameters enthält (Grand Unified Theory GUT).

### 9.3 Symmetrien

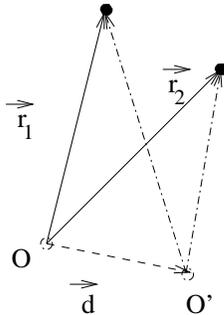
Nach unserem heutigen Verständnis der Physik basieren diese fundamentalen WW auf Symmetrien, genauer lokalen Eichsymmetrien. Diese Symmetrien bilden die mathematische Grundlage für ihre Beschreibung. Im Folgenden wollen wir versuchen, das Grundkonzept zu verstehen.

Erhaltungssätze in der Physik können auf Symmetrien zurückgeführt werden. Dies ist die Aussage des Noether-Theorems:

Einer kontinuierlichen Symmetrie eines physikalischen Systems entspricht ein Erhaltungssatz (E. Noether).

Symmetrie bedeutet, dass es eine Größe gibt, die nicht messbar ist. Beispiel ist die Symmetrie einer Kugel. Die Observablen in einem Experiment mit einer Kugel hängen nicht von ihrer Orientierung ab. Das heißt, die Orientierung der Kugel ist nicht messbar!

In der theoretischen Mechanik wird gezeigt, dass die Erhaltungssätze für Energie, Impuls und Drehimpuls auf kontinuierliche Symmetrien der Raum-Zeit zurückzuführen sind. Als Beispiel wollen wir hier den Impulssatz ableiten:



Wir betrachten ein beliebiges Potential zwischen zwei Punkten  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$ :  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ . Dieses Potential ist unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems, d.h. es ändert sich nicht, wenn der Ursprung von  $O$  nach  $O'$  gelegt wird:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{d}, \vec{r}_2 - \vec{d})$$

für beliebiges  $\vec{d}$ .

Das ist die Translationssymmetrie, die zur Konsequenz hat, dass man keine absolute Position im Raum festlegen (messen) kann. Die Tatsache, dass  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{d}, \vec{r}_2 - \vec{d})$  für alle  $\vec{d}$  ist, bedeutet, dass  $V$  nur von der relativen Koordinate  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$  abhängen kann:

$$V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \Rightarrow \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_1} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}_2}$$

Mit dem Newtonschen Gesetz  $\vec{F} = -\text{grad}V = \frac{d\vec{p}}{dt}$  folgt

$$\frac{d\vec{p}_1}{dt} = -\frac{d\vec{p}_2}{dt} \rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2) = 0} \quad \text{Impulserhaltung}$$

Auf ähnliche Art und Weise kann man die anderen Erhaltungssätze der Mechanik ableiten:

Symmetrie	nicht messbare Größe	Erhaltungsgröße
Translation im Raum	absolute Position	Impuls
Rotation im Raum	absolute Richtung	Drehimpuls
Translation in der Zeit	absolute Zeit	Energie

In der Quantenmechanik können wir nur das Absolutquadrat der Wellenfunktion  $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$  beobachten. Man kann zeigen, dass man deshalb die Wellenfunktion eines Teilchens der Ladung  $q$  mit einem Phasenfaktor multiplizieren darf  $\Psi' = \Psi \cdot e^{-i\alpha q}$ . Die Phase  $\alpha$  ist nicht messbar und dieser Symmetrie entspricht die Erhaltung der elektrischen Ladung!

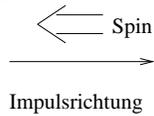
Bisher haben wir nur globale Symmetrien betrachtet. Beispielsweise war die Phase  $\alpha$  eine Konstante, die wir überall und zur gleichen Zeit um den gleichen Betrag geändert haben. Eine viel schärfere Forderung ist die lokale Symmetrie oder lokale Eichinvarianz, d.h., dass die Phase von Ort und Zeit abhängen darf  $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$ , ohne die Form der physikalischen Gleichungen zu ändern. Eine solche lokale Symmetrie erfordert die Existenz eines Feldes, in unserem Beispiel des geladenen Teilchens, die Existenz des elektromagnetischen Feldes. Die Quanten dieses Fel-

des, in unserem Fall also das Photon, sind die Austauschteilchen der WW. Bildlich gesprochen transportiert dieses Feld bzw. Teilchen die Information über die Phasen  $\alpha(\vec{r}, t)$  an verschiedenen Raum-Zeit Punkten.

Zusammenfassend basiert also die Quantentheorie der elektromagnetischen WW auf der Invarianz der physikalischen Gleichungen gegenüber lokalen Rotationen im Phasenraum

$$\Psi' = \Psi e^{-i\alpha(\vec{r}, t)q}$$

Ganz ähnlich verhält es sich mit den anderen WW. Die schwache WW basiert auf der Tatsache, dass man die Fermionen in Dubletts anordnen kann. Genauer: die Komponenten der Fermionfelder, bei denen der Spin entgegengesetzt zur Impulsrichtung ist, die linkshändig genannt werden, z.B.:



$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e^- \end{pmatrix}_L \quad \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu^- \end{pmatrix}_L \quad \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau^- \end{pmatrix}_L \quad \begin{pmatrix} u \\ d' \end{pmatrix}_L \quad \begin{pmatrix} c \\ s' \end{pmatrix}_L \quad \begin{pmatrix} t \\ b' \end{pmatrix}_L$$

Die Symmetrieoperationen sind Rotationen in diesen Dubletts

$$\Psi'_L = \Psi_L e^{-i\alpha_i(\vec{r}, t)\tau_i} \quad i = 1, 2, 3 \quad \tau_i: \text{Pauli-Matrizen}$$

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

⇒ drei Bosonen:  $Z$ ,  $W^+$ ,  $W^-$

Schließlich die starke WW: Hier können wir die Quarks entsprechend ihrer Farbladung in Triplets anordnen und die Invarianz ist die Rotation in dem dreidimensionalen Raum

$$\begin{pmatrix} u_r \\ u_g \\ u_b \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} d_r \\ d_g \\ d_b \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} c_r \\ c_g \\ c_b \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} s_r \\ s_g \\ s_b \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} t_r \\ t_g \\ t_b \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} b_r \\ b_g \\ b_b \end{pmatrix}$$

$$\Psi' = \Psi e^{-i\alpha(\vec{r}, t)\frac{\lambda_i}{2}} \quad i = 1, \dots, 8 \quad \lambda_i \text{ sind } 3 \times 3\text{-Matrizen}$$

⇒ 8 Bosonen, die Gluonen

Diese drei Operationen bilden Gruppen, die durch Matrizen repräsentiert werden:

Operation	Gruppe	Matrizen
$e^{i\alpha(\vec{r}, t)q}$	U(1)	unitär, eindimensional
$e^{i\alpha_i(\vec{r}, t)\tau_i}$	SU(2)	unitär, 2-dimensional, Spur Null
$e^{i\alpha_i(\vec{r}, t)\lambda_i}$	SU(3)	unitär, 3-dimensional, Spur Null

Natürlich kann man sich viele andere Symmetrieoperationen überlegen. Offenbar sind aber genau die drei oben skizzierten Symmetrien und die entsprechenden Wechselwirkungen in der Natur realisiert, jedenfalls soweit wir es heute experimentell verifizieren können. Man nennt

das hier beschriebenen Standardmodell der Elementarteilchenphysik auch kurz

$$U(1) \times SU(2) \times SU(3)$$

Ziel ist es, eine Symmetrie zu finden, die bei sehr hohen Energien die WW der Teilchen beschreibt und aus der die drei Symmetrien hervorgehen, die wir heute beobachten.

### Das Higgs-Boson

Ein Problem haben wir bis jetzt umgangen, nämlich die Massen der W- und Z-Bosonen. Diese Massen sind nicht kompatibel mit dem Konzept der lokalen Eichinvarianz. Wir haben gefordert, dass wir die Phasen  $\alpha(\vec{r}, t)$  überall frei wählen dürfen, auch an weit entfernten Orten. Das Feld, das diese Phasen verknüpft, muss also eine unendliche Reichweite haben, d.h. die WW muss eine unbegrenzte Reichweite haben wie z.B. die elektromagnetische. Auf Grund der Unschärferelation  $\Delta E \cdot \Delta t = \hbar$  kann man sich eine endliche Masse (Ruheenergie) nicht beliebig lange aus dem Vakuum borgen. Anders ausgedrückt: eine unendliche Reichweite der WW erfordert masselose Quanten!

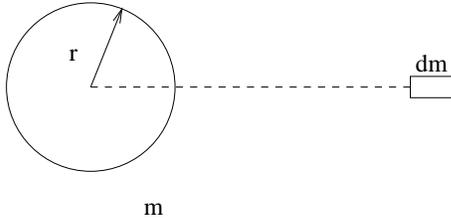
In unserem Standardmodell ist die mathematische Lösung die Einführung eines neuen Feldes, das Higgs-Feld. Damit gelingt die Wiederherstellung der Symmetrie bei hohen Energien, während sie bei niedriger Energie spontan gebrochen ist.

Dem Higgs-Feld entspricht ein Teilchen des Standardmodells, das bisher noch nicht beobachtet werden konnte. Nach ihm wird intensiv gesucht und wir vermuten, dass seine Masse im Bereich  $100 \frac{\text{GeV}}{c^2} < m_H < 200 \frac{\text{GeV}}{c^2}$  liegt.

# 10 Astrophysik und Kosmologie

## 10.1 Sterne und Sternentwicklung

Sterne entstehen aus Ansammlungen von Wasserstoff im Weltraum, die sich durch die eigene Schwerkraft zusammenziehen. Dabei wird Gravitationsbindungsenergie frei, die den Stern aufheizt. Wir betrachten die Masse  $dm$ , die aus dem Unendlichen auf die Masse  $m$ , Radius  $r$  gebracht wird:



$dV = -\gamma \frac{m dm}{r} = -dE_B$  freiwerdende Bindungsenergie. Wir rechnen sehr vereinfacht mit einer konstant bleibenden Dichte  $\rho$ :

$$m = \rho \frac{4\pi}{3} r^3$$

$$\Rightarrow r = \left( \frac{3}{4\pi} \frac{m}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\Rightarrow dE_B = \gamma \sqrt[3]{\frac{4\pi\rho}{3}} m^{\frac{2}{3}} dm$$

Bei der Formation eines Sterns der Masse  $M$  und des Radius  $r$  wird also die Bindungsenergie

$$\underline{E_B} = \int_0^M dE_B = \gamma \sqrt[3]{\frac{4\pi\rho}{3}} \int_0^M m^{\frac{2}{3}} dm = \gamma \sqrt[3]{\frac{4\pi\rho}{3}} \frac{3}{5} M^{\frac{5}{3}} = \underline{\frac{3}{5} \frac{M^2}{R}} \text{ frei.}$$

Im Fall der Sonne sind das etwa  $E_B = 4 \cdot 10^{41} J$ . Das entspricht der Energieproduktion der Sonne von einigen Millionen Jahren. Da die Sonne aber ein Alter von ca.  $5 \cdot 10^9$  Jahren hat, ist die Gravitationsenergie nicht die Quelle der Sonnenenergie!

Für Wasserstoffansammlungen mit  $m \gtrsim 10^{-2} M_\odot$  (Sonnenmasse  $M_\odot = 2 \cdot 10^{30} kg$ ) reicht die Temperaturerhöhung im Sterninneren, durch die freiwerdende Bindungsenergie, um die Fusion von Wasserstoff zu Helium in Gang zu setzen. Der Jupiter ( $m \approx 2 \cdot 10^{27} kg$ ) wäre fast zum Stern geworden!

Die hohe Temperatur, die durch die Kernfusion in aufrechterhalten wird, baut einen hohen Druck auf, der mit dem Gravitationsdruck im Gleichgewicht steht. Näherungsweise kann man den Druck nach der idealen Gasgleichung berechnen  $pV = nRT$ . Für den Kern der Sonne erhält man  $p \approx 2 \cdot 10^{15} Pa = 2 \cdot 10^{10} atm$ .

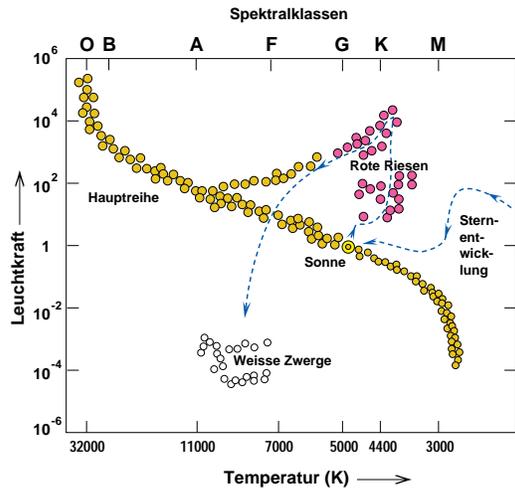
Sterne verbringen die meiste Zeit ihres Daseins damit Wasserstoff in Helium umzuwandeln. Je massereicher ein Stern ist, desto höher ist die Temperatur im Inneren. Eine höhere Temperatur bedeutet aber, dass die Kernfusion sehr viel schneller abläuft, weil auf Grund der Maxwell-Boltzmann-Verteilung viel mehr Protonen genügend hohe kinetische Energie haben, um die Coulomb-Abstoßung zu überwinden. Massenreiche Sterne haben eine größere Leuchtkraft und ein kürzeres Leben, weil sie ihren Wasserstoff schneller verbrauchen. Näherungsweise gilt:

$$\frac{L}{L_\odot} \approx \left( \frac{M}{M_\odot} \right)^4$$

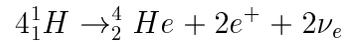
normiert auf die Parameter der Sonne ☉

Sterne werden in einem Hertzsprung-Russel-Diagramm klassifiziert. Die Leuchtkraft eines Ster-

nes, hier bezogen auf die Sonne, wird aufgetragen über die Oberflächentemperatur, die aus der beobachteten Spektralklasse ermittelt wird. Sterne strahlen in guter Näherung wie schwarze Körper.



Die allermeisten Sterne befinden sich auf der sogenannten Hauptreihe, wie z.B. die Sonne. Das sind die Sterne, die Wasserstoff in Helium verwandeln.

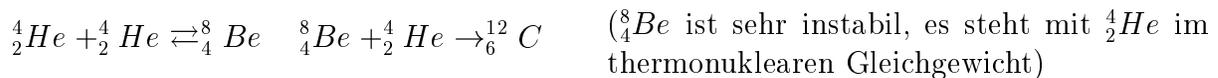


Sie befinden sich in einem relativ stabilen Gleichgewicht. Die Hauptreihe wird begrenzt einerseits, weil bei zu leichten Objekten wie dem Jupiter die Kernfusion nicht in Gang gesetzt werden kann. Auf der anderen Seite verbrauchen massive Sterne ihren Wasserstoffvorrat sehr schnell und haben nur eine sehr kurze Lebensdauer.

y95366Mnich

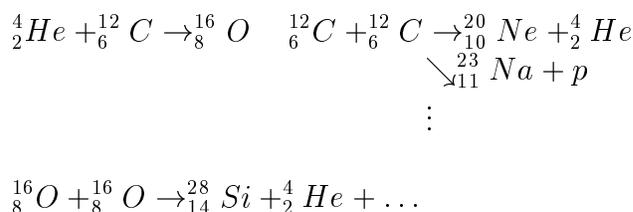
Was passiert nun, wenn ein Stern seinen H-Vorrat aufgebraucht hat (Genauer: wenn im Inneren des Sterns die H-Konzentration unter einen kritischen Wert gefallen ist)?

Das Innere des Sterns zieht sich zusammen, weil der thermische Druck nicht mehr aufrecht erhalten werden kann. Dabei erhöht sich die Temperatur im Inneren (Gravitation!), bis es zur Fusion von Heliumkernen kommt und sich ein neues Gleichgewicht einstellt:



Dieses neue Gleichgewicht im Sterninneren, bei erhöhtem Druck und Dichte, erfordert eine höhere Energieproduktion. Der erhöhte Strahlungsdruck führt dazu, dass sich die äußere, noch sehr wasserstoffreiche Hülle aufbläht und dabei abkühlt. Der Stern wird zum roten Riesen. Z.B. wird die Sonne in dieser Phase in ca.  $5 \cdot 10^9$  Jahren die inneren Planeten verschlucken und sich etwa bis zur Erdbahn ausdehnen! Rote Riesen verlieren auch einen großen Teil ihrer Masse in Form von Wasserstoff, der in den Weltraum abgegeben wird. Das Heliumbrennen ist nicht so ergiebig. Deshalb, und durch die höhere Energieproduktion, dauert das Heliumbrennen wesentlich kürzer als das Wasserstoffbrennen.

Nach der Heliumfusion können weitere Phasen folgen, in denen schwerere Elemente erzeugt werden z.B.



Das geht so lange gut, bis der Stern beim Eisen  ${}^{56}_{26}\text{Fe}$  angekommen ist. Schwerere Kerne können zwar noch durch Einfang von Protonen, Neutronen,  $\alpha$ -Teilchen etc. gebildet werden, das dem Stern allerdings Energie entzieht.

Was passiert nun, wenn der Stern keine Energie mehr durch Kernfusion gewinnen kann? Das Schicksal ist durch die Masse bestimmt, die der Stern auf der Hauptreihe hatte.

I)  $\approx 0,5 - 8M_{\odot}$ : Die Kernfusion stoppt bereits beim Kohlenstoff und Sauerstoff. Dieser CO-Stern zieht sich zusammen, erhitzt sich und stößt seine äußeren Schichten ab. Es entsteht ein weißer Zwerg (hohe Oberflächentemperatur, kleine Leuchtkraft auf Grund der kleinen Oberfläche). Weiße Zwerge haben typischerweise einen Radius von  $10^7 m$ , d.h. etwa die Größe der Erde!

Weiße Zwerge werden stabilisiert durch den Fermi-Druck der Elektronen. Dieser Druck entsteht, weil eine Verkleinerung des Sternvolumens eine Erhöhung der Dichte der Elektronen zur Folge hat. Die Fermi-Energie und damit die mittlere Energie der Elektronen steigt aber mit der Dichte  $n$ :  $E_F = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{2m} n^{2/3}$ . Ein weißer Zwerg ist ein riesiger CO-Kristall!

Weiße Zwerge strahlen ihre Energie langsam ab und kühlen aus. Ihre Lebensdauer ist typisch  $10^{10}$  Jahre.

II)  $\gtrsim 8M_{\odot}$ : Hier laufen die Kernfusionen bis hinauf zum Eisen. Die Überbleibsel solcher massiven Sterne haben eine Masse, die größer ist als die Chandrasekhar-Grenze:  $M_{Ch} \approx 1,4M_{\odot}$ . Oberhalb dieser Grenze können weiße Zwerge nicht existieren, weil der Fermi-Druck der Elektronen nicht ausreicht, um den Gravitationskollaps zu stoppen. Das Leben eines solchen Sterns endet in einer Supernova-Explosion bei der gigantische Energiemengen in sehr kurzer Zeit ( $\approx$  einige Sekunden!) freigesetzt werden; typisch  $10^{48} J$  ( $\approx$  Ruhemasse der Sonne!). Supernovae leuchten für ein paar Wochen so hell wie eine ganze Galaxie. Bei der Explosion wird viel Materie in den Weltraum abgegeben. Alle Elemente auf der Erde, die schwerer sind als Helium, stammen aus Supernova-Explosionen. Beim Kollaps des Sterns geschieht im freien Fall. Dabei erhöht sich die Fermi-Energie der Elektronen so weit, das sie Protonen in Neutronen umwandeln können.  $p + e^+ \rightarrow n + \nu_e$

99% der Energie einer Supernova wird in wenigen Sekunden in Form von Neutrinos freigesetzt, die einzigen Teilchen, die den dichten Kern des Sterns durchdringen können!

Der Stern besteht jetzt im wesentlichen nur noch aus Neutronen. Sobald sich die Neutronen sehr nahe kommen, baut sich wiederum ein Fermi-Druck auf, der den Stern stabilisieren kann. Ein mögliches Resultat einer Supernova-Explosion ist also ein Neutronenstern mit einem typischen Radius von 10km. Mit anderen Worten: ein gigantischer Atomkern aus Neutronen! Effekte der allgemein Relativitätstheorie auf einem Neutronenstern sind von der Größenordnung 1 (z.B. Rotverschiebung, Lichtablenkung).

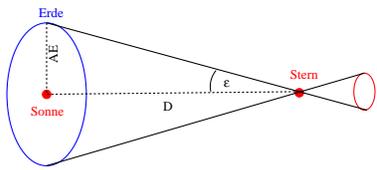
Wenn die Masse des Reststerns größer ist als etwa  $2 - 3M_{\odot}$  kann auch der Fermi-Druck der Neutronen den Gravitationskollaps nicht mehr stoppen. Soviel wir heute wissen, gibt es keinen Effekt, der den Gravitationsdruck kompensieren und den Stern stabilisieren könnte. Das Objekt

wird zu einer Singularität in der Raum-Zeit, ein schwarzes Loch.

## 10.2 Strukturen im Universum

Um die Anordnung von Sternen im Weltraum zu bestimmen, muss man neben der Winkelposition auch die Entfernung messen, was natürlich viel schwieriger ist. Es gibt viele Verfahren, die für unterschiedliche Entfernungen anwendbar sind und gegeneinander kalibriert werden müssen (kosmische Leiter). Hier sind drei der wichtigsten Methoden beschrieben.

A) Die Entfernung sehr naher Sterne kann man durch Messung ihrer Parallaxe vor dem kosmischen Hintergrund bestimmen.



Dazu benutzt man die größtmögliche Ortsänderung, nämlich die Erdumlaufbahn. Der mittlere Abstand Erde-Sonne ist  $150 \cdot 10^6 \text{ km}$ , genannt astronomische Einheit (AE). Die Entfernung eines Sterns, der eine Parallaxe  $\varepsilon$  von einer Bogensekunde hat, wird Parsec genannt.

$$\varepsilon = 1'' = \frac{2\pi}{360 \cdot 60 \cdot 60} \approx 4,8 \cdot 10^{-6}$$

$$1 \text{ Parsec} = 1 \text{ pc} = \frac{1 \text{ AE}}{1''} = 3,1 \cdot 10^{13} \text{ km} = 3,26 \text{ Lichtjahre (Ly)}$$

Der nächste Nachbar der Sonne ist  $\alpha$ -Centauri in einer Entfernung von  $4,3 \text{ Ly} = 1,3 \text{ pc}$ . Diese Methode funktioniert bis zu Distanzen von einigen 100pc.

B) Für größere Abstände benutzt man Sterne, deren absolute Leuchtkraft  $L$  bestimmt werden kann (Standardkerzen). Aus der beobachteten, scheinbaren Leuchtkraft  $L_S$  bestimmt man den Abstand  $d$ :  $L_S = \frac{L}{4\pi d^2}$ . Das bekannteste Beispiel sind die  $\delta$ -Cepheiden. Das sind pulsierende Riesensterne  $M \approx 6 - 10 M_\odot$ ,  $L = 10^3 - 10^5 L_\odot$ . Der Radius, die Oberflächentemperatur und die Leuchtkraft dieser Sterne oszilliert mit einer Periode, die mit der Masse, und damit der absoluten Leuchtkraft, anwächst.

Der Zusammenhang wurde 1908 von H. Leawitt bei Sternen in der großen Magellanschen Wolke entdeckt. Und 1923 konnte E. Hubble damit nachweisen, dass der Andromeda-Nebel außerhalb der Milchstraße liegt (Entdeckung der Galaxien!).

Der Zusammenhang zwischen Leuchtkraft und Periode muss kalibriert werden. Leider gibt es keine  $\delta$ -Cepheiden in unserer Nachbarschaft, die trigonometrisch vermessen werden könnten. Man braucht deshalb viele komplizierte Zwischenschritte.

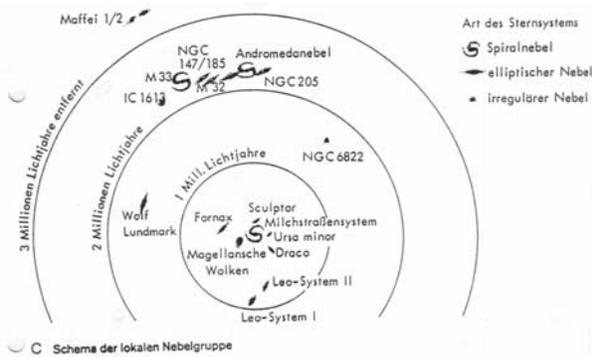
Die Methode der  $\delta$ -Cepheiden ist bis  $\approx 20 \text{ Mpc}$  anwendbar (Hubble Space Telescope).

C) Supernovae

Doppelsternsysteme, bei denen zwei Sterne gravitationell gebunden sind, sind recht häufig. Es gibt nun solche Systeme, bei denen ein weißer Zwerg Masse von seinem (nahen) Begleiter abzieht. Wenn dieser weiße Zwerg dabei die Chandrasekhar-Masse erreicht, kommt es zu einer charakteristischen Supernova, sogenannter Typ Ia.

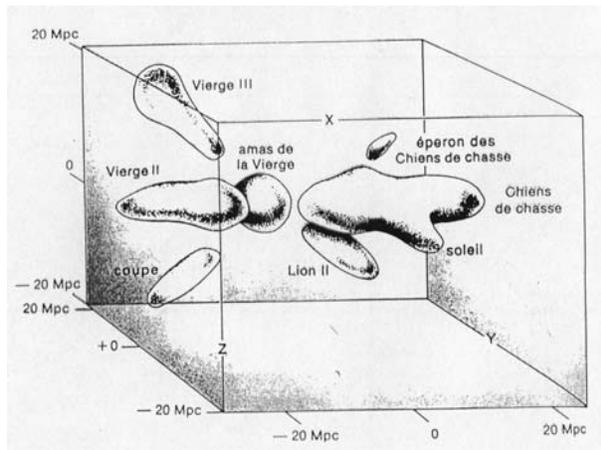
Da diese Supernovae genau an der Chandrasekhar-Grenze passieren, ist die freigesetzte Energie bzw. die absolute Leuchtkraft immer gleich (innerhalb etwa  $\pm 40\%$ ). Sie können daher als Standardkerzen dienen und zwar zu 1000 Mpc ( $3 \cdot 10^9$  Ly!). Auch bei Supernova Ia muss zunächst die absolute Leuchtkraft kalibriert werden durch andere Distanzmessungen. Die Leuchtkraft ist i.w. gegeben durch  $\beta^+$ -Zerfälle in der Hülle:  ${}^{56}\text{Ni} \rightarrow {}^{56}\text{Co} \rightarrow {}^{56}\text{Fe}$  mit  $T_{\frac{1}{2}} = 6,1\text{d}$  bzw.  $78\text{d}$ .

Mit Hilfe der Entfernungsmessungen kann man sich nun ein dreidimensionales Bild des Universums machen. Sterne sind in Galaxien angeordnet. Es gibt verschiedene Typen: Spiralgalaxien, elliptische, irreguläre ...). Wir befinden uns in einer Spiralgalaxie, die wir Milchstraße nennen. Sie ist eine dünne Scheibe mit ca. 10 kpc Radius und 3 kpc Dicke. Die nächste Spiralgalaxie ist Andromeda in einer Entfernung von 0,7 Mpc =  $2 \cdot 10^6$  Ly.

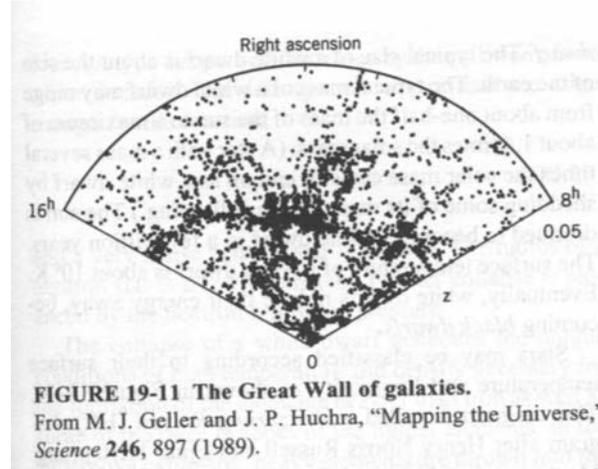


Galaxien bilden Gruppen; z.B. sieht die nähere Umgebung der Milchstraße so aus (Polardiagramm)

Die Gruppen der Galaxien bilden Haufen, sogenannte Cluster, und Superhaufen. Auf einer Skala von  $\pm 20$  Mpc ( $= 60 \cdot 10^6$  Ly) sieht unsere Umgebung etwa so aus:



Andere Darstellungsweise:



In einer Theorie der Entstehung des Universums muss auch die Bildung solcher Strukturen erklärt werden.

### Dunkle Materie

Galaxien sind Systeme, die durch Gravitation gebunden sind, genau wie das Sonnensystem. Deshalb rotieren die Sterne um das Zentrum ihrer Galaxie. Die Sonne, die etwa 10 kpc vom Zentrum der Milchstraße entfernt ist, hat eine Bahngeschwindigkeit von  $2,5 \cdot 10^5 \frac{m}{s}$ . (Zum Vergleich: die Bahngeschwindigkeit der Erde um die Sonne ist  $3 \cdot 10^4 \frac{m}{s}$ ). Im Verlauf ihrer Existenz ( $5 \cdot 10^9 a$ ) hat die Sonne das Zentrum etwa 41 mal umrundet. Das Alter der Sonne ist also 41

galaktische Jahre.

Aus der Rotationsgeschwindigkeit von der Sonne kann man die eingeschlossene Masse der Milchstraße  $M_G$  berechnen:

$$\begin{aligned} \text{Zentrifugalkraft} &= \text{Gravitationskraft} \\ \frac{m_{\odot} v^2}{r} &= \gamma \frac{m_{\odot} M_G}{r^2} \\ \boxed{M_G} &= \frac{r v^2}{\gamma} \end{aligned}$$

Es stellt sich heraus, dass diese Masse  $M_G$  wesentlich größer ist, als die Masse  $M_L$ , die man aus der Leuchtkraft der Sterne abschätzen kann.

Das gleiche gilt für alle anderen Galaxien. Man kann die Geschwindigkeit einzelner Sterne relativ zur Erde  $v$  aus der Doppler-Verschiebung der Linienspektren bestimmen, z.B. des Wasserstoffs:

$$Z = \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda} = \frac{\sqrt{1 + \beta}}{\sqrt{1 - \beta}} - 1 = \beta + \frac{1}{4}\beta^2 + \dots \quad \beta = \frac{v}{c}$$

$\lambda'$  beobachtete,  $\lambda$  emittierte Wellenlänge

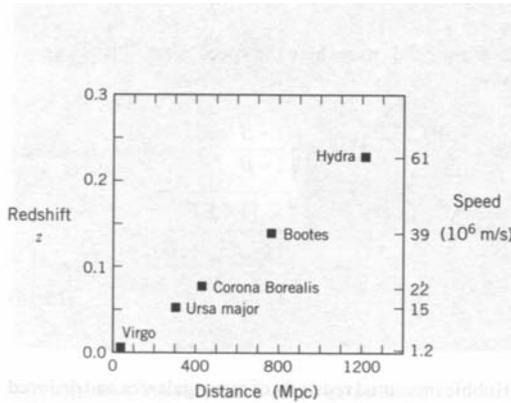
Aus der relativen Geschwindigkeit kann man nun die Rotationsgeschwindigkeit des Sterns um das Zentrum der Galaxie und damit die eingeschlossene Masse ableiten. Man findet immer, dass die so bestimmte Masse  $M_G$  einer Galaxie viel größer ist, als die „leuchtende“ Masse  $M_L$

$$M_G \approx 10 - 20 M_L$$

Das ist der entscheidende Hinweis, dass es dunkle Materie geben muss. Allerdings wissen wir nicht genau, in welcher Form sie vorliegt (Braune Zwerge wie Jupiter, Neutrinomassen, neue unbekannte Elementarteilchen).

### 10.3 Entwicklung des Universums

Im Jahr 1929 entdeckte E. Hubble, dass sich die Galaxien von uns entfernen (Rotverschiebung der Spektren), und zwar um so schneller, je weiter die Galaxie entfernt ist.



**FIGURE 19-7 Experimental evidence for Hubble's law.** The amount of redshift of radiation from a distant galaxy is proportional to the distance to the galaxy.

Das Hubble-Gesetz sagt, dass die Fluchtgeschwindigkeit  $v$  proportional zur Entfernung  $d$  ist

$$v = H_0 \cdot d$$

Hubble-Konstante

$$H_0 \approx 70 \frac{\text{km/s}}{\text{Mpc}}$$

Das Hubble-Gesetz gilt nur für große Distanzen. In Galaxiehaufen wird die Fluchtgeschwindigkeit durch Eigenbewegung der Galaxien überlagert. Z.B. bewegt sich Andromeda auf uns zu.

### Kosmologisches Prinzip

Das kosmologische Prinzip sagt, dass auf grossen Distanzen das Universum für jeden Beobachter gleich aussieht. Das Universum hat kein Zentrum.

Mit anderen Worten: Wir nehmen an, dass die Erde kein irgendwie ausgezeichneter Ort im Universum ist und dass Beobachtungen, die wir machen, wie z.B. das Hubble-Gesetz überall im Universum gemacht werden. Das können wir natürlich nicht überprüfen!

Wir schließen also, dass von lokalen Störungen abgesehen, sich zwei beliebige Punkte im Universum, z.B. zwei Galaxien, voneinander entfernen. Das Universum dehnt sich aus. Von Einstein stammt die zweidimensionale Analogie der Oberfläche eines Ballons, der aufgeblasen wird.

Die Hubble-Konstante hat die Dimension einer inversen Zeit:

$$H_0 = 70 \frac{\text{km/s}}{\text{Mpc}} = \frac{70 \text{ km/s}}{10^6 \cdot 3,1 \cdot 10^{13} \text{ km}} \approx \frac{0,7}{\pi 10^{17} \text{ s}}$$

$$H_0 = \frac{1}{1,5 \cdot 10^{10} \text{ a}}$$

Das ist ein Hinweis auf das Alter des Universums. Wenn wir  $H_0$  als konstant annehmen, waren offenbar vor 15 Milliarden Jahren alle Galaxien am gleichen Ort. Seit dem Urknall (engl. Big Bang) expandiert das Universum.

Wir wollen die zeitliche Entwicklung des Universums etwas genauer betrachten. Wir nehmen an:

- Das Universum ist homogen und isotrop (kosmologisches Prinzip). Das gilt für große Distanzen.
- Die Gravitation ist die einzige Wechselwirkung, die auf kosmologische Distanzen wirkt.

Dann wird die zeitliche Entwicklung des Universums durch die Friedmann-Gleichung beschrieben:

$$H^2(t) \equiv \left( \frac{\dot{R}}{R} \right)^2 = \frac{8\pi}{3} \cdot \gamma \varrho - h \frac{c^2}{R^2}$$

$H(t)$ : Hubble-Parameter, der heutige Wert ist die Hubble-Konstante  $H_0$

$R(t)$ : Größe des Universums

$\varrho(t)$ : mittlere Massendichte

$\gamma$ : Gravitationskonstante

$k$ : Krümmung des Raums

Der erste Term  $\frac{8\pi}{3}\gamma\varrho$  ist leicht verständlich. Er beschreibt die Verlangsamung der Expansion  $H(t) = \frac{1}{R} \frac{dR}{dt}$  durch die Gravitation, die von der Massendichte  $\varrho$  abhängt. Das ist völlig analog zur Abbremsung eines Steins, der im Schwerfeld der Erde nach oben geworfen wird.

Der zweite Term  $k \frac{c^2}{R^2}$  ist nur mit Hilfe der allgemeinen Relativitätstheorie ableitbar. Der Parameter  $k$  beschreibt die Krümmung des Raums und er kann drei Werte annehmen:  $k = 0, -1, +1$ . Für  $k = 0$  fällt dieser Term weg und wir haben ein flaches Universum, in dem die Euklidische Geometrie gilt, d.h. der uns allen geläufige Fall.

Die Fälle  $k = -1$  und  $k = +1$  beschreiben ein offenes bzw. geschlossenes Universum, in dem die euklidische Geometrie nicht gilt!

Wir führen jetzt die kritische Dichte  $\varrho_c$  und den Dichteparameter  $\Omega$  ein und schreiben die Friedmann-Gleichung um:

$$\varrho_c = \frac{3H^2}{8\pi\gamma}, \Omega = \frac{\varrho}{\varrho_c} \Rightarrow H^2(\Omega - 1) = k \frac{c^2}{R^2}$$

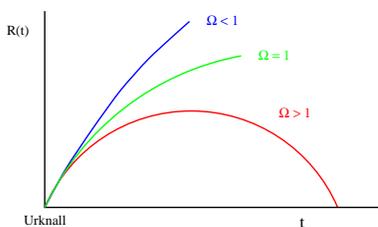
Offenbar wird die Geometrie des Universums, d.h. von  $k$ , durch den Dichteparameter  $\Omega$  bestimmt.

$\Omega < 1 \Rightarrow k = -1$  offenes Universum

$\Omega = 1 \Rightarrow k = 0$  flaches, euklidisches Universum

$\Omega > 1 \Rightarrow k = +1$  geschlossenes Universum

Die zeitliche Entwicklung des Universums für die drei Fälle sieht so aus:



$\Omega \leq 1$ : das Universum expandiert für alle Zeiten

$\Omega > 1$ : es erreicht einen Umkehrpunkt, ab dem es beginnt zu kollabieren

Der heutige Wert der kritischen Dichte beträgt

$$\varrho_c \approx 7 \cdot 10^{-27} \frac{kg}{m^3} = 4 \frac{\frac{GeV}{c^2}}{m^3} = \frac{4m_p}{m^3}$$

Aus Abschätzungen der gesamten, leuchtenden Materie erhält man für den Massenparameter  $\Omega_L = \frac{\varrho_L}{\varrho_c} \approx 0,01$ . Das würde bedeuten, dass wir in einem offenen Universum leben. Wir wissen aber aus der Dynamik der Galaxien und Galaxienhaufen, dass es viel mehr nichtleuchtende, dunkle Materie gibt. Der Wert  $\Omega = 1$ , der von vielen Physikern bevorzugt wird, kann deshalb

nicht ausgeschlossen werden. Daher können wir heute nicht endgültig entscheiden, in welchem der drei möglichen Universen wir leben.

Für das Alter gilt

$$\begin{array}{ll} \Omega \ll 1 & H(t) = H_0 = \text{const} \quad \tau = \frac{1}{H_0} \quad \text{z.B. nur leuchtende Materie} \\ \Omega = 1 & H(t) \quad \tau = \frac{2}{3} \frac{1}{H_0} \end{array}$$

Bemerkungen: Wir haben die Friedmann-Gleichung ohne kosmologische Konstante diskutiert. Sie wurde von Einstein eingeführt, um ein statisches Universum zu behalten und nach Hubbles Entdeckung wieder zurückgenommen. Heute diskutiert man sie wieder als eine Art Druck, der der Gravitation entgegenwirkt. Sehr neue experimentelle Beobachtungen scheinen darauf hinzudeuten, dass es tatsächlich eine kosmologische Konstante gibt.

## 10.4 Die Geschichte des Universums von $t = 0$ bis heute

Wir können die Geschichte nicht wirklich bei  $t = 0$  beginnen. Das Universum war zu diesem Zeitpunkt ein Punkt mit unendlich hoher Energiedichte und Temperatur. Im Verlauf der Expansion nimmt diese Energiedichte ab und das Universum kühlt ab. Wichtige Stationen in der Entwicklung (aus dem Buch von Rohlf):

### Geschichte des Universums

Zeit (1/H)	Größe (k=0)	T	Energie/ Teilchen	Energiedichte	Physik
$10^{-43} \text{ s}$	$10^{-35} \text{ m}$	$10^{32} \text{ K}$	$10^{19} \text{ GeV}$	$10^{123} \text{ GeV}/\text{m}^3$	Planck
$10^{-38} \text{ s}$	$10^{-29} \text{ m}$	$10^{29} \text{ K}$	$10^{16} \text{ GeV}$	$10^{111} \text{ GeV}/\text{m}^3$	Vereinigung der Wechselwirkungen
$10^{-12} \text{ s}$	$10^{-3} \text{ m}$	$10^{16} \text{ K}$	1TeV	$10^{59} \text{ GeV}/\text{m}^3$	Electroweak unification
$10^{-6} \text{ s}$	$10^3 \text{ m}$	$10^{13} \text{ K}$	1GeV	$10^{47} \text{ GeV}/\text{m}^3$	Bildung von Hadronen
1s	$10^8 \text{ m}$	$10^{10} \text{ K}$	2MeV	$10^{37} \text{ GeV}/\text{m}^3$	Neutronen „erstarren“, $e^+$ verschwinden
$10^2 \text{ s}$	$10^{11} \text{ m}$	$10^9 \text{ K}$	100keV	$10^{31} \text{ GeV}/\text{m}^3$	Bildung von Atomkernen
$10^{13} \text{ s}$	$10^{22} \text{ m}$	$3 \cdot 10^3 \text{ K}$	0,3eV	$10^9 \text{ GeV}/\text{m}^3$	Atome, Galaxien und Sterne entstehen
$5 \cdot 10^{17} \text{ s}$	$10^{26}$	3K	$2 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$	$4 \cdot 10^{-4} \text{ GeV}/\text{m}^3$	heute

- $10^{-43} \text{ s}$ : Das ist der frühestmögliche Zeitpunkt, zu dem wir eine vage Aussage machen können. Die Temperatur ist  $10^{23} \text{ K}$ , das entspricht einer mittleren Energie der Teilchen von  $E \approx kT = 10^{19} \text{ GeV}$ . In diesem Stadium spielt die Gravitation zwischen den Teilchen eine Rolle, die wir aber nicht quantenmechanisch beschreiben können.
- $10^{-38} \text{ s}$ : In diesem Energiebereich vermuten wir, dass die drei bekannten Wechselwirkungen elektromagnetisch, schwach und stark durch eine gemeinsame beschrieben werden.
- $10^{-12} \text{ s}$ : Von jetzt an befinden wir uns auf sicherem Boden. Die Temperatur ist  $T = 10^{16} \text{ K}$  was einer Energie von  $E = kT = 1000 \text{ GeV}$  entspricht. Das sind Bedingungen, wie wir sie an Beschleunigern studieren können. Wir kennen alle Teilchen und ihre Wechselwirkungen. Materie und Antimaterie wird erzeugt und vernichtet (thermisches Gleichgewicht)

z.B.  $e^+e^- \leftrightarrow \gamma\gamma$ ,  $\nu\bar{\nu} \leftrightarrow Z$ ,  $q\bar{q} \leftrightarrow gg$  etc.

Ein sehr wichtiger Punkt ist, dass wir annehmen, dass es zu diesem Zeitpunkt noch genau soviel Materie wie Antimaterie gab. Heute besteht das Universum aber ausschließlich aus Materie. Es gibt zwei Erklärungen:

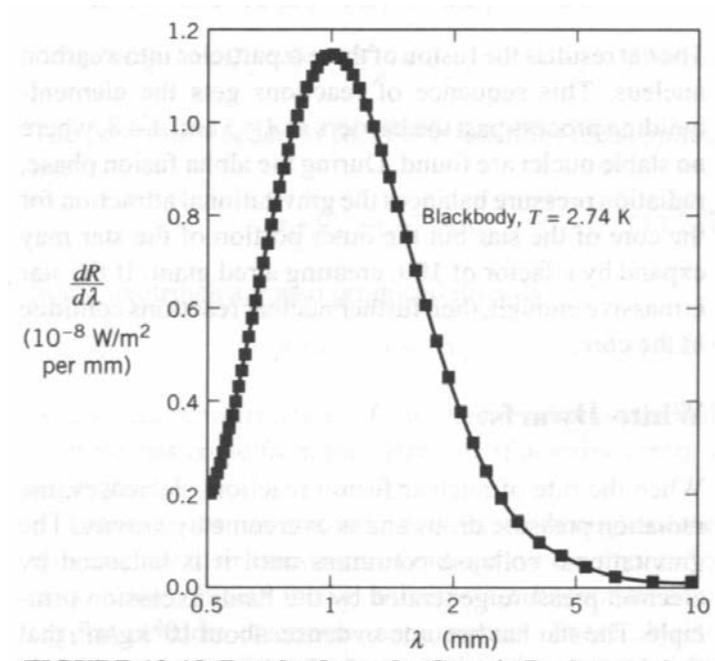
a) Es gab damals bereits einen winzig kleinen Überschuss an Materie

$$\frac{N_{Fermion} - N_{Antifermion}}{N_{Fermion}} \approx 10^{-10}$$

b) Fermionen und Antifermionen haben leicht unterschiedliche Wechselwirkungen. Um das aber theoretisch zu erklären benötigt man mindestens drei Generationen der Fermionen. Das ist z.Z. die einzige, plausible Erklärung, die wir für die Existenz der drei Kopien der Fermionen haben.

- $t = 10^{-6}s$ :  $kT = 1\text{GeV}$  Von jetzt an können freie Quarks nicht mehr existieren. Die Quarks und Antiquarks haben annihilert und es verbleibt ein kleiner Überschuss an Quarks. Diese Quarks sind in Nukleonen gebunden. Es gibt gleich viel Neutronen wie Protonen.
- $t = 1s$ : Die Temperatur ist auf  $kT = 2\text{MeV}$  gefallen. Von nun an spielt der Massenunterschied zwischen Neutron und Proton eine Rolle. Die Reaktion  $e^+ + n \rightarrow \bar{\nu}_e + p$  hat eine größere Wahrscheinlichkeit (Wirkungsquerschnitt) als  $e^- + p \rightarrow \nu_e + n$ . Freie Neutronen sind aber instabil, sie zerfallen mit  $T_{\frac{1}{2}} = 616s \approx 10\text{min}$  in Protonen. Die Zahl der Neutronen wird sinken, bis es zur Bildung von Atomkernen kommen kann.  
Auch das Gleichgewicht  $e^+e^- \leftrightarrow \gamma\gamma$  verlagert sich zu den Photonen. Es bleibt wiederum ein kleiner Überschuss an Elektronen. Die Photonen bilden die kosmische Hintergrundstrahlung, die noch heute nachweisbar ist.
- $t = 10^2s$ : Die Temperatur beträgt  $kT = 100\text{keV}$ . Die Energie der Protonen und Neutronen ist jetzt soweit gefallen, dass es zur Bildung von Atomkernen kommen kann. Viele Neutronen sind aber inzwischen zerfallen, so dass die Zahl der Protonen etwa dreimal höher ist.  
Ein für unsere Existenz sehr entscheidender Punkt ist, dass es keine stabilen Kerne mit  $A = 5$  oder  $A = 8$  gibt. Das ist der Grund dafür, dass die Kernsynthese nur zur Bildung von  ${}^4_2\text{He}$  führt. Auch Deuterium und  ${}^3_2\text{He}$  werden meistens in  ${}^4_2\text{He}$  umgewandelt. Das Universum besteht nach der Kernsynthese aus 74% H und 26% He, andere Kerne wie  ${}^7_3\text{Li}$  kommen nur in Spuren vor. Alle schweren Elemente sind nicht im Urknall, sondern viel später in den Sternen entstanden!
- $t = 10^{13}s$ :  $\approx 10^6 a$ . Die Temperatur ist  $kT = 0,3\text{eV}$ . Jetzt erst kann es zur Bildung von Atomen kommen. Das Universum wird auch für die kosmische Hintergrundstrahlung durchsichtig. An Stellen mit erhöhter Dichte beginnt die Formation von Sternen und Galaxien. Die ersten Sterne beginnen nach  $\approx 10^9 a$  zu leuchten.
- heute: Die Temperatur beträgt  $T = 2,7\text{K}$ . Das Universum ist immer noch erfüllt von der kosmischen Hintergrundstrahlung. Das ist die Strahlung eines perfekten schwarzen Körpers, der inzwischen auf  $2,7\text{K}$  abgekühlt ist. Die Strahlung ist bei der Vernichtung von Materie und Antimaterie entstanden. Die Zahl der Photonen ist etwa  $10^{10}$  mal höher als die Zahl der Protonen im heutigen Universum, sie ist also ein Maß für die Materie-Antimaterie Asymmetrie.  
Ein sehr interessantes, aktuelles Forschungsgebiet ist die genaue Analyse der Hintergrundstrahlung. In ihr müssen sich die Dichtfluktuation im frühen Universum wiederfinden, die

letztendlich zur Ausbildung der Strukturen (Sterne, Galaxien, Haufen) geführt haben. In einem perfekt homogenen Universum wäre es niemals zur Ausbildung von Sternen gekommen.



**FIGURE 19-13 Results from the Cosmic Background Explorer (COBE) satellite.**  
After J.C. Mather et al., *Astro Jour.* 354, L37 (1990).