

900 Wellen, Strahlen und Teilchen

Modelle im Sinn von Konzepten spielen in der Physik eine zentrale Rolle. Schon zu Beginn des Grundkurses mussten immer bestimmte Annahmen gemacht werden, um die Aufgaben zu lösen. Die Bedeutung von Modellen in der Physik wird aber gerade dort besonders sichtbar, wo komplexe oder auch kleinste Systeme betrachtet werden. Bei den kleinsten Systemen (Moleküle, Atome, Atomkernen) können sich die Modelvorstellungen nicht mehr auf alltägliche Erfahrungen abstützen. Die Beschreibung von Atomen z.B. erfordert hoch abstrakte Konzepte. Dabei ist es eine experimentelle Tatsache, dass die Physik der kleinsten Teilchen eine ganz andere ist, als die Physik im Kapitel 100. Nicht, dass sich die Theorien widersprechen, sondern die Vorstellung von Massenkügelchen mit klar definiertem Aufenthaltsort und klar definierter Geschwindigkeit und Impuls funktioniert als Konzept nicht mehr. Die klassische Mechanik ist ein Grenzfall für im Vergleich zur atomaren Welt grosse Massen und Dimensionen. Dieses Kapitel zwingt also zu einem Überdenken der grundlegenden Modellvorstellungen in der Physik.

In den ersten Unterkapiteln (910, 920) wird mit den elektromagnetischen Wellen an das Kapitel 800 angeknüpft. Die elektromagnetischen Wellen eignen sich sehr gut, um physikalische Modellvorstellungen exemplarisch darzustellen. Im Unterkapitel Optik (910) wird mit einem geometrischen Modell gestartet, der Strahlenoptik. Im Rahmen dieses einfachen Modells lässt sich gut erklären, wie eine Linse ein Bild abbildet. Warum es aber überhaupt zur Lichtbrechung kommt oder warum es Farben gibt, kann mit diesem Modell nicht erklärt werden. Dafür wird ein Wellenmodell benötigt. Allerdings lässt sich damit nicht erklären, warum Licht in Quanten auftritt oder bestimmte Elemente immer dieselben Spektrallinien besitzen. Dafür muss sowohl für das Licht als auch für die Materie ein Quantenmodell zu Hilfe genommen werden. Dies führt zur Betrachtung der Atome (930) und der Kerne und Teilchen (940).

Die Lernziele sind:

1. Verschiedene Modellvorstellungen für Wellen, Strahlen und Teilchen beschreiben und die Näherungen begründen können
2. Abbildung mit dünner Linse geometrisch konstruieren können
3. Wellenoptische Phänomene mit eigenen Worten erklären können
4. Auswirkungen der Axiome der Quantenmechanik auf die Physik beschreiben und mit Beispielen belegen können
5. Physikalische Grundgrößen des radioaktiven Zerfalls kennen

Inhalt

Lernziele

910 geometrische Optik

911 Reflexion und Refraktion

Theorie

Im Kapitel 800 wurde aus den elektromagnetischen Feldgleichungen die Wellengleichung für elektromagnetische Wellen hergeleitet. Diese partielle Differentialgleichung beschreibt die Ausbreitung des Wellenfeldes im Raum. Die Geometrie des Wellenfeldes hängt dabei von der Form der Quelle, aber auch von der Materieverteilung im Raum und der Begrenzung des Raums (Randwerte) ab. Für die Lösung von optischen Problemen muss jedoch nicht zwingend die Wellengleichung gelöst werden. Es bieten sich für spezielle Aufgaben einfache Verfahren an. In diesem Abschnitt sind die geometrische Betrachtungsweisen. Als Basis dazu dienen sogenannte Strahlen. Im geometrischen Sinn sind Strahlen Objekte, welche an einem Punkt beginnen und dann geradlinig ins unendliche gehen. Physikalisch gesehen geben Strahlen die Ausbreitungsrichtung des Lichtes an (Fig.1.).

*Wellen-
gleichung*

Lichtstrahlen

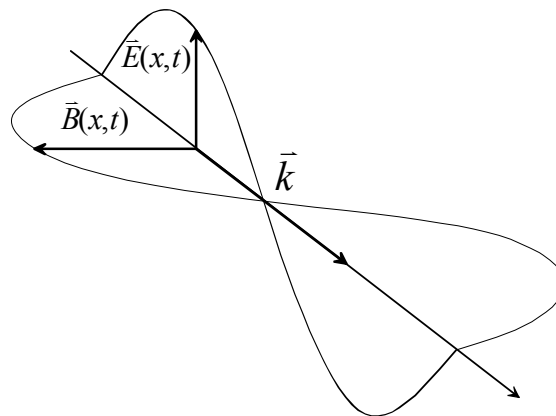


Fig.1. Darstellung einer elektromagnetischen Welle

Aus den Maxwellgleichungen lässt sich erkennen, dass magnetisches Feld und elektrisches Feld senkrecht zueinander stehen. Zudem stehen die Felder im freien Raum senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung, welche durch den Wellenvektor \vec{k} gegeben ist. Somit handelt es sich um Transversalwellen. Da die Ausbreitungsrichtung der Welle auch der Strahlrichtung entspricht, definiert der Wellenvektor \vec{k} auch die Strahlrichtung. Damit ist die Lösung der Wellengleichung mit dem Begriff des Lichtstrahls verknüpft.

Strahlrichtung

Im Vakuum gehen von einer punktförmigen Lichtquelle Kugelwellen aus. Die Wellenvektoren zeigen dann radial von der Quelle weg. Bei ebenen Wellen hingegen sind die Wellenfronten parallel zueinander. Die Wellenvektoren stehen senkrecht auf den Wellenfronten und zeigen somit alle in die gleiche Richtung. Ein solches Wellenfeld wird durch parallele Strahlen dargestellt. Für die folgenden Betrachtungen reicht die Beschreibung eines Wellenfeldes durch Strahlen aus.

*Kugelwellen**ebene
Wellen*

Licht kann an polierten, metallischen Oberflächen (Spiegel) reflektiert werden. Eine Erklärung für Reflexion oder Absorption an Grenzflächen würde ein elektrodynamisches Wellenmodell liefern. An dieser Stelle wird auf eine Erklärung dieser Phänomene verzichtet. Für die Strahlrichtungen kann experimentell festgestellt werden, dass der Einfallswinkel gleich dem Ausfallswinkel ist: $\alpha_1 = \alpha_2$.

Reflexion

Bei optisch transparenten Medien lässt sich ein weiteres Phänomen beobachten. Ein Lichtstrahl, welcher schief auf eine Grenzfläche zwischen zwei Medien (e.g. Luft und Wasser) trifft, wird gebrochen (abgelenkt). Dieser Prozess wird Refraktion genannt und kommt bei optischen Linsen zum Einsatz. Eine Erklärung dafür liefert das Wellenmodell und wird im Abschnitt 921 gegeben. Experimentell kann ein Zusammenhang zwischen den Winkeln gefunden werden, es gilt:

Refraktion

$$\frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2} = \frac{c_1}{c_2} = \frac{n_2}{n_1} \quad (\text{Eq.1})$$

Dabei sind α_i die Winkel zwischen Strahlrichtung und Lot (Senkrechte auf Grenzfläche). In der Formel stecken die Wellenausbreitungsgeschwindigkeiten c_i für die beiden Materialien. Anstelle dieser lässt sich auch der Brechungsindex (auch Brechzahl genannt) verwenden:

*optisches
Lot*

$$n = \frac{c_{\text{Vakuum}}}{c_{\text{medium}}} = \sqrt{\epsilon_r \cdot \mu_r} \quad (\text{Eq.2})$$

Sie berechnet sich durch das Verhältnis von Lichtgeschwindigkeit im Vakuum zur Lichtgeschwindigkeit im Medium.

Ein Spezialfall ist die sogenannte Totalreflexion. Sie entsteht, wenn der Strahl von einem optisch dichteren Medium (hoher Brechungsindex) in ein optisch weniger dichtes Medium (kleiner Brechungsindex) übertritt. Sei α_1 der Winkel zwischen Strahl und Lot im optisch dichteren Medium und α_2 derjenige im optisch weniger dichten Medium. Für den Winkel α_2 resultiert dann:

*Total-
Reflexion*

$$\alpha_2 = \arcsin\left(\frac{n_1}{n_2} \cdot \sin \alpha_1\right) \quad (\text{Eq.3})$$

Da das Medium mit n_1 dichter ist, wird das Verhältnis n_1/n_2 grösser als 1. Somit muss $\sin \alpha_1$ entsprechend kleiner sein, damit das Produkt im Definitionsbereich des arcsin liegt. Dies liefert die Bedingung für den Grenzwinkel, oberhalb diesem die Totalreflexion auftritt:

*Grenz-
Winkel*

$$1 = \frac{n_1}{n_2} \cdot \sin \alpha_1 \rightarrow \alpha_1 = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \quad (\text{Eq.4})$$

Dies würde gemäss Eq.1. bedeuten, dass $\sin \alpha_2 = 1$ ist, also $\alpha_1 = 90^\circ$. Bemerkenswert ist, dass im Fall der Totalreflexion das Licht zu praktisch 100% reflektiert wird.

Bereits im sichtbaren Wellenlängenbereich (700-400 nm) variieren die Brechungsindizes leicht. Dies liegt an der Wellengeschwindigkeit im Medium, welche von der relativen Dielektrizitätszahl ϵ_r abhängt. Diese ist, wie in Abschnitt 851 (Aufgabe 4) festgestellt, eine Funktion der Frequenz. Deshalb sind auch die Refraktionswinkel leicht von der Wellenlänge abhängig (Regenbogen!).

Dispersion

Tab.1 Brechungsindizes für einige Materialien und Wellenlängen

Wellenlänge		434nm	486nm	589nm	656nm	768nm
Wasser		1.340	1.337	1.333	1.331	1.329
Quarzglas		1.467	1.463	1.458	1.456	1.4539
Diamant	2.417					
Glycerin	1.455					

Aufgaben

A1. Bestimmen Sie den kritischen Winkel für Refraktion in Luft für

- a) Wasser b) Glycerin c) Quarzglas d) Diamant

A2. Ein Lichtstrahl trifft in einem Winkel von 45° auf eine Wasseroberfläche. In welchem Winkel wird der Lichtstrahl gebrochen, wenn es sich um blaviolett bzw. rotes Licht handelt?

A3. Ein Lichtimpuls eines He-Ne-Laser ($\lambda = 632.8\text{nm}$) treffe auf eine 1 cm dicke Platte aus Quarzglas. Um welche Streckendifferenz verschiebt sich ein Wellenberg der Lichtwelle gegenüber einem gleichzeitig gestarteten Wellenberg, welcher nur Luft durchquert?

912 Abbildung mit dünnen Linsen

Theorie

Für einfache, projektive Abbildungen, wie sie bei der *Camera obscura* oder auch bei konventionellen Röntgenverfahren auftreten, lässt sich Bildorientierung und Vergrößerung auf die Strahlensätze zurück führen. Auch bei dünnen Linsen reicht die Betrachtung von wenigen, speziellen Strahlen für die Konstruktion des Bildes. Linsen können konvex (Sammellinsen) oder konkav (Streulinsen) geschliffen sein. Der Schliff gibt der Linsenoberfläche eine spezielle Krümmung. Diese gekrümmte Oberfläche bricht das Licht so, dass sich die Strahlen in einem Brennpunkt treffen. Die Distanz zwischen Linse und Brennpunkt wird Brennweite f genannt. Sammellinsen haben dabei eine positive Brennweite, der Brennpunkt liegt von der Lichtquelle aus gesehen hinter der Linse, Streulinsen hingegen haben eine negative Brennweite, es existiert bei ihnen ein fiktiver Brennpunkt vor der Linse. Für dünne Linsen gilt folgendes Kriterium: Die Distanz von der Linsenmitte zu Objekt und Bild und die Brennweite müssen deutlich grösser sein als die Dicke der Linse.

Für die Konstruktion eines Strahlengangs (Fig.2) müssen zwei spezielle Strahlen gezeichnet werden. Der Mittelpunktstrahl ist derjenige Strahl, welcher durch die Mitte der Linse geht. Dieser Strahl wird nicht abgelenkt und bei dünnen Linsen auch nicht verschoben. Ein Strahl, welcher auf der einen Seite der Linse parallel zur optischen Achse ist, geht nach der Linse durch den Brennpunkt. Die optische Achse steht dabei senkrecht auf der Linsenebene.

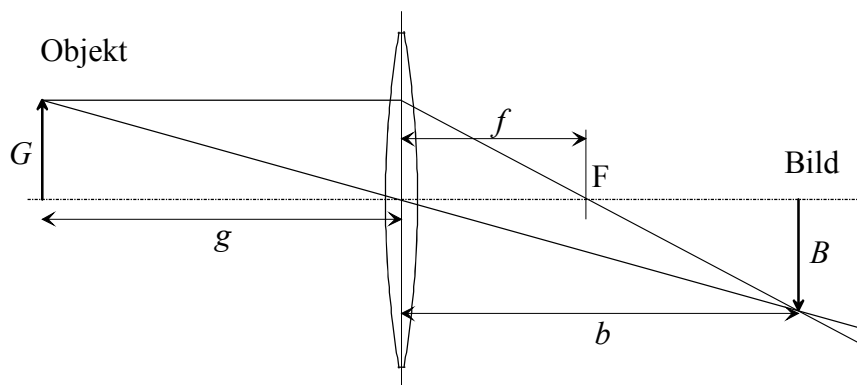
*geometrische Optik**Streu- und Sammellinsen**Brennpunkt, Fokus**dünne Linsen**Konstruktion des Strahlengangs*

Fig.2. Konstruktion eines Strahlengangs: G ist die Objektgrösse, B die Bildgrösse, g die Objektweite und b die Bildweite. Der Punkt F ist der Brennpunkt (Fokus) und f die Brennweite.

Die Brennweite f wird bei dünnen Linsen durch die Krümmungsradien r_1 bzw. r_2 der beiden Oberflächen und den Brechungsindex bestimmt. Es gilt:

$$D = \frac{1}{f} \approx (n-1) \cdot \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (\text{Eq.5})$$

*Krümmungs-
Radien*

Die Grösse D wird Brechkraft genannt. Die Einheit ist $m^{-1} = \text{dpt}$ (Dioptrie). Zwischen Bildweite b , Gegenstandsweite g und der Brennweite f gilt für dünne Linsen näherungsweise folgender Zusammenhang:

Dioptrien

$$\frac{1}{g} + \frac{1}{b} \approx \frac{1}{f} \quad (\text{Eq.6})$$

Der Abbildungsmassstab ist durch den Strahlensatz gegeben;

*Abbildungs-
Massstab*

$$\frac{B}{G} = \frac{b}{g} \quad (\text{Eq.7})$$

Aufgaben

A1. Prüfen Sie durch eine geeignete Konstruktion nach, dass die Formeln Eq.6 und Eq.7 gelten.

A2. Eine Linse aus Glas ($n = 1.45$) soll einseitig so geschliffen werden, dass eine Brennweite von 20 cm entsteht.

- a) Wie gross muss der Krümmungsradius sein?
- b) Wie ändert sich die Brennweite, wenn bei gleichem Krümmungsradius Plexiglas ($n = 1.49$) verwendet wird?

A3. Ein 12 mm grosser Gegenstand wird durch eine Sammellinse abgebildet. Bei einer Gegenstandsweite von 50 mm entsteht in einem bestimmten Abstand zur Linse ein scharfes, 36 mm grosses Bild.

Ermitteln Sie durch eine geeignete Konstruktion die Brennweite der Linse und kontrollieren Sie durch Berechnung das Resultat.

Lösungen

L1. -

L2.

(a)

$$\frac{1}{f} \approx (n-1) \cdot \left(\frac{1}{r_1} \right) \rightarrow r_1 \approx (n-1) \cdot f$$

$$= \underline{9cm}$$

(b)

$$f \approx \frac{1}{(n-1) \cdot \left(\frac{1}{r_1} \right)} = \frac{r_1}{n-1} = \underline{18.37cm}$$

L3.

Kontrolle durch Berechnung:

$$f \approx \frac{1}{\frac{1}{g} + \frac{1}{b}} = \frac{1}{\frac{1}{g} + \frac{G}{gB}} = \underline{37.5mm}$$

913 para-axiale Optik und Matrix-Formulierung der Gausschen Optik

Theorie

Die Berechnung von Linsensystemen kann durch eine geeignete Formulierung der entsprechenden Gleichungen bewältigt werden. Dabei werden für die para-axiale Optik folgende Näherungen gemacht: Für Lichtstrahlen nahe an der optischen Achse (im Vergleich zur Brennweite der Linsen) kann für den Winkel θ , welcher die Abweichung von der optischen Achse beschreibt, angenommen folgendes werden: $\sin \theta \approx \tan \theta \approx \theta$.

Zur Beschreibung von Abbildungen bzw. des Strahlenganges kann folgendes Koordinatensystem gewählt werden: Die x - y - Ebene beschreibt die Ebene senkrecht zur optischen Achse (also die Objekt- oder Bildebene), die z - Achse fällt mit der optischen Achse zusammen. Die Längen können dabei als dimensionslos behandelt werden, da die Längen in x - oder y -Richtung über den Strahlensatz mit der z - Richtung gekoppelt, also skaliert sind.

In einem ersten Schritt soll die Translation entlang der optischen Achse betrachtet werden. Dabei wird an der Stelle z_1 von einem Strahl ausgegangen, der im Winkel θ_1 zur optischen Achse in der y - z - Ebene verläuft. Es gilt dann für die in z - Richtung zurückgelegte Distanz ζ in:

$$\begin{aligned} y_2 &= y_1 + \zeta \theta_1 \\ \theta_2 &= \theta_1 \end{aligned}$$

Diese Gleichungen können in Matrix-Form geschrieben werden, wobei die Winkel jeweils noch mit dem Brechungsindex n multipliziert bzw. ζ durch n dividiert wird (da dies für die späteren Berechnungen von Vorteil ist):

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ n\theta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \zeta/n \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ n\theta_1 \end{pmatrix} = T \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ n\theta_1 \end{pmatrix} \quad (\text{Eq.1})$$

Die Translationsmatrix T beschreibt somit die Verschiebung von z_1 nach $z_1 + \zeta$.

In einem nächsten Schritt kann nun eine Linsenoberfläche mit dem Krümmungsradius r_1 betrachtet werden (Fig.1). Das Brechungsgesetz von Snellius (Abschnitt 911) nimmt folgende Form an:

$$n_1 \sin(\phi + \theta_1) = n_2 \sin(\phi + \theta_2)$$

Wegen den kleinen Winkeln kann geschrieben werden:

$n_1 \phi + n_1 \theta_1 = n_2 \phi + n_2 \theta_2$. Mit $\phi = y_1 / r_1$ folgt:

Näherungen in der para-axialen Optik

Koordinatensystem und Relationen

Translation

Translations-Matrix

gekrümmte Oberfläche

$$n_2 \theta_2 = n_1 \theta_1 - \frac{(n_2 - n_1) \cdot y_1}{r_1} \quad (\text{Eq.2})$$

Und wegen $z_1 = z_2$:

$$y_2 = y_1 \quad (\text{Eq.3})$$

*Gleichungen
für gekrümmte
Oberfläche*

Die Gleichungen Eq.2 und Eq.3 können in Matrixform geschrieben werden, es lässt sich somit die Brechungsmatrix R für den Übergang von einem Medium mit n_1 zu einem Medium mit n_2 definieren:

*Brechungs-
matrix*

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ n_2 \theta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{n_1 - n_2}{r_1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} \quad (\text{Eq.4})$$

Für die Beschreibung einer allgemeinen Abbildung kann die Propagation der Strahlen durch eine Matrix M beschrieben werden. So resultiert für eine Translation und eine Brechung an einer gekrümmten Oberfläche:

*Abbildungs-
matrix*

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ n_2 \theta_2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} = RT \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} \quad (\text{Eq.5})$$

Es gilt $\det(R) = \det(T) = 1 = \det(M)$, die Matrizen sind also normiert.

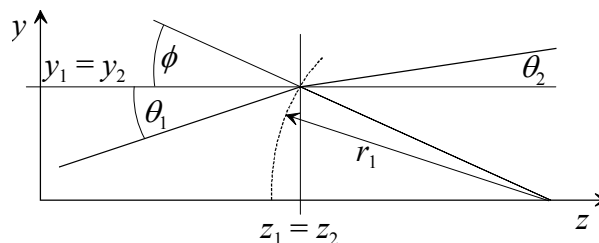


Fig.1. Strahlengang an einer gekrümmten Oberfläche

Aufgaben

A1. Welche Brechungsmatrix resultiert für $n_1 = n_2$: Was ist die Bedeutung?

A2. Für eine Linse mit dem Brechungsindex $n_2 = n$ in Luft (Brechungsindex $n_1 = 1$) soll die Abbildungsmatrix M hergeleitet werden. Hinweis: Die Matrix kann als folgendes Matrixprodukt geschrieben werden: $M = R_2 T R_1$. Skizzieren Sie zuerst eine zu Fig.1 korrespondierende Abbildung.

Lösungen

L1.

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ n_2 \theta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{n_1 - n_2}{r_1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} = \mathbf{I} \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix}$$

Winkel bzw. Strahlrichtung bleiben gleich, es gibt keine Brechung.

L2.

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ n_2 \theta_2 \end{pmatrix} = \mathbf{R}_2 \mathbf{TR}_1 \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{n-1}{r_2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \zeta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1-n}{r_1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{\zeta \cdot (1-n)}{nr_1} & \frac{\zeta}{n} \\ (n-1) \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) - \frac{\zeta \cdot (1-n)^2}{nr_2 r_1} & 1 + \frac{\zeta \cdot (n-1)}{nr_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ n_1 \theta_1 \end{pmatrix}$$

Folgende weitere Vereinfachung ist möglich: Für dünne Linsen gilt:

$\zeta \ll |r_1 - r_2|$. Zudem ist $(1-n)^2$ deutlich kleiner als 1. Somit kann näherungsweise geschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{\zeta \cdot (1-n)}{nr_1} & \frac{\zeta}{n} \\ (n-1) \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) - \frac{\zeta \cdot (1-n)^2}{nr_2 r_1} & 1 + \frac{\zeta \cdot (n-1)}{nr_2} \end{pmatrix} \approx$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ (n-1) \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f} & 1 \end{pmatrix}$$

Wobei f die Brennweite der Linse ist, korrespondierend zu Eq.5, Abschnitt 912.

920 Wellenoptik

921 Interferenz und Huygensches Prinzip

Theorie

Im Rahmen der geometrische Optik kann zwar verstanden werden, wie ein Objekt durch eine Linse abgebildet wird, aber bereits beim Brechungsindex liefert das Strahlenmodell keine ausreichende Basis für eine befriedigende Erklärung. Auch die Beugung von Licht an optischen Gitter erklärt das Strahlenmodell nicht. Dazu muss die Ausbreitung von Licht durch Wellenfelder beschrieben werden. Für die folgenden Betrachtungen genügen zwei Spezialfälle von Wellenausbreitung. Der eine Spezialfall sind ebene Wellen. Der Wellenvektor \vec{k} ist überall gleich gross und hat die gleiche Richtung. Der zweite Spezialfall sind Kugelwellen. Die Wellenvektoren zeigen in diesem Fall radial von der Lichtquelle weg.

Der Einfachheit zuliebe betrachten wir hier ein skalares Wellenfeld der Form $u = \hat{u}(\vec{r}) \cdot \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$ mit $|\vec{k}| = 2\pi / \lambda$ und $\omega = 2\pi\nu$. Überlagern sich nun die Wellenfelder u_1 und u_2 von zwei verschiedenen Quellen, so entsteht Interferenz. Je nach Phasenverschiebung können sich die beiden Wellenfelder aufheben oder verstärken. Das resultierende Wellenfeld ist gegeben durch $u(\vec{r}, t) = u_1(\vec{r}, t) + u_2(\vec{r}, t)$.

Werden nun die Wellenfelder von vielen punktförmigen Lichtquellen überlagert, so können beliebige Wellenfelder erzeugt werden. Umgekehrt kann man sich ein beliebiges Wellenfeld aus unendlich vielen Kugelwellen zusammengesetzt vorstellen (Huygensches Prinzip):

$$u(\vec{r}, t) \approx \sum_i \frac{\hat{u}_i}{r_i} \cdot \cos(\vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega t + \varphi_i) \quad (\text{Eq.8})$$

Dabei ist für alle Partialwellen die Frequenz $\nu = 2\pi\omega$ die gleiche (natürlich wäre hier die Verwendung beliebiger Frequenzen ein noch allgemeinerer Ansatz).

Mit dem Huygenschen Prinzip kann nun die Lichtbrechung erklärt werden. Dafür betrachten wir Wellenfronten von Ebenen Wellen, welche unter dem Winkel α_1 auf eine Grenzfläche zwischen zwei Medien trifft (Fig.3). Die von der Grenzfläche ausgehenden Wellen denken wir uns als unendlich viele Kugelwellen, welche sich zu neuen Wellenfronten nach der Grenzfläche superponieren.

*geometrische
Optik vs.
Wellenoptik*

*skalares
Wellenfeld*

*Superposition
von
Wellenfeldern*

*Erklärung für
Refraktion*

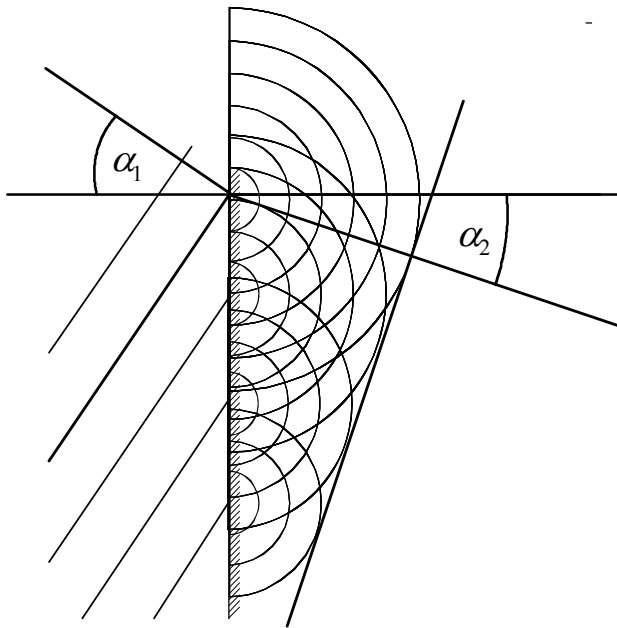


Fig.3. Brechung von Wellenfronten an einer Grenzfläche zwischen zwei Medien.

Wenn sich die Wellen sich im neuen Medium weiter bewegen, ändert sich die Wellengeschwindigkeit mit dem Brechungsindex: $c_{\text{medium}} = c_{\text{Vakuum}} / n_2$. Dies hat auch eine Änderung der Wellenlänge zur Folge. Wenn die Frequenz gleich bleibt, resultiert für die neue Wellenlänge

*Brechungs-
Index*

$$\lambda_2 = c_{\text{Vakuum}} / (n_2 \cdot \nu).$$

Gilt $n_2 > n_1$, so ist die Wellenlänge im zweiten Medium kleiner als im ersten. Dadurch werden die Wellenfronten gekippt.

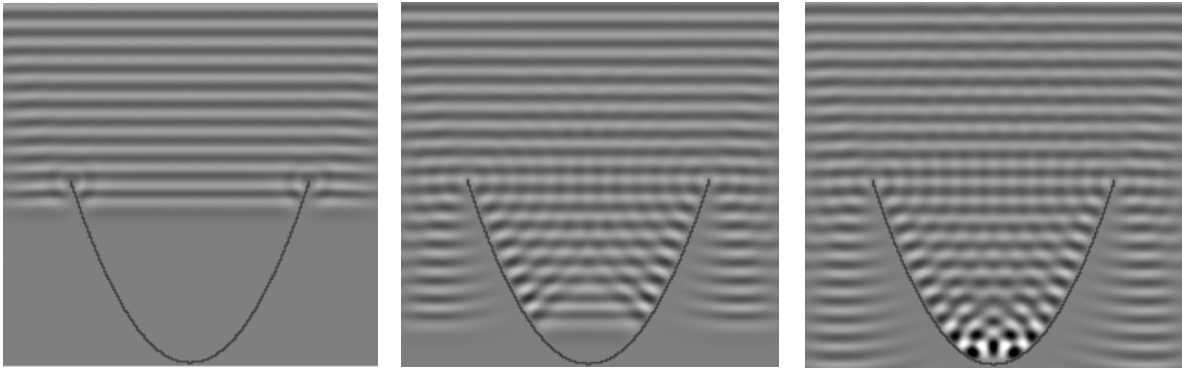


Fig.4. Reflexion von Wellenfronten in einem Parabolspiegel: Zu erkennen ist die konstruktive Interferenz beim Brennpunkt. 2-Dim. Simulation mit Finite Differenzen Methode.

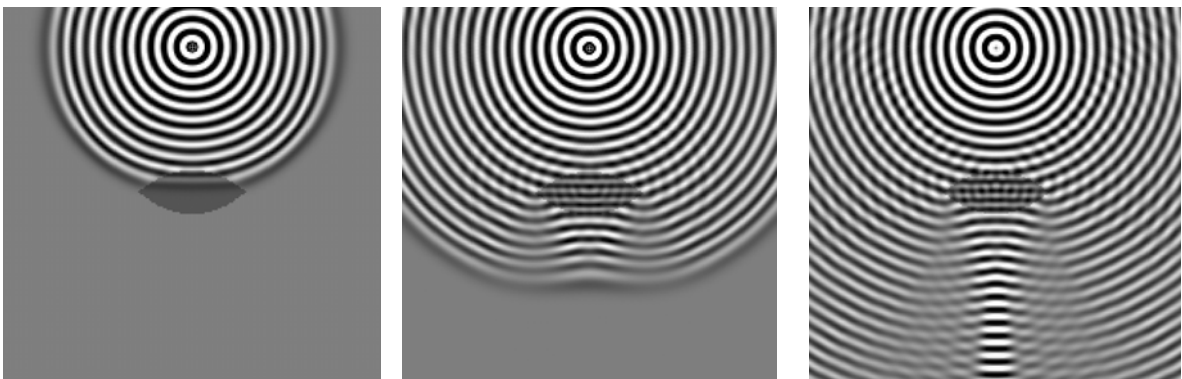


Fig.5. Fokussierungseffekt einer bikonvexen Linse: Die Fokuszone hinter der Linse ist relativ gross, da die Wellenlänge im Vergleich zum Linsendurchmesser gross ist. 2-Dim. Simulation mit Finite Differenzen Methode.

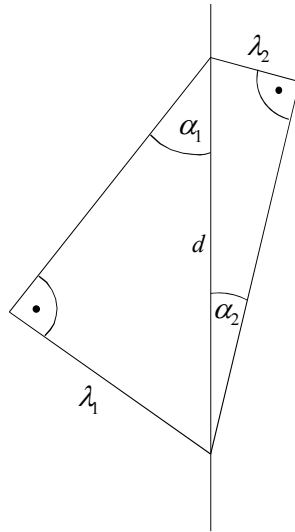
Aufgaben

A1. Zeigen Sie ausgehend von Fig.3, dass das Brechungsgesetz Eq.1 gilt.

A2. Zwei punktförmige Lichtquellen mit einem Abstand d (Vektor \vec{d} senden in der x - y -Ebene Kreiswellen mit gleicher Wellenlänge λ aus. Stellen Sie die Bedingen für die Orte in der x - y -Ebene auf, an denen maximale konstruktive Interferenz auftritt.

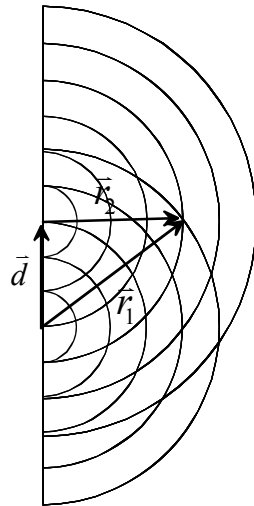
Lösungen

L1.



Aus $\sin \alpha_1 = \frac{\lambda_1}{d}$ und $\sin \alpha_2 = \frac{\lambda_2}{d}$ folgt $\frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{\frac{c_{\text{Vakuum}}}{n_1 \cdot v}}{\frac{c_{\text{Vakuum}}}{n_2 \cdot v}} = \frac{n_2}{n_1}$

L2.



$r_1 - r_2 = n\lambda$ mit $n \in \mathbb{Z}_0^+$ und $\bar{r}_1 - \bar{r}_2 = \bar{d}$

922 Beugung am Gitter

Theorie

Trifft eine ebene Lichtwelle auf ein optisches Gitter, so lässt sich hinter dem Gitter ein Beugungsbild beobachten. Dabei entstehen an bestimmten Positionen helle Lichtpunkte. Die Positionen der sogenannten Beugungsmaxima lässt sich für die Fernfeldnäherung (Abstand von Beugungsbild zu Gitter sehr viel grösser als Wellenlänge und Gitterabstand) einfach berechnen. Zu diesem Zweck sollen zwei Gitterpunkte betrachtet werden, welche die Lichtwelle streuen. Von diesen zwei Punkten gehen in der Ebene Kreiswellen aus. Im Fernfeld überlagern sich zwei Strahlen, welche wegen des grossen Abstandes fast parallel von den Gitterpunkten weglaufen (Fig.6).

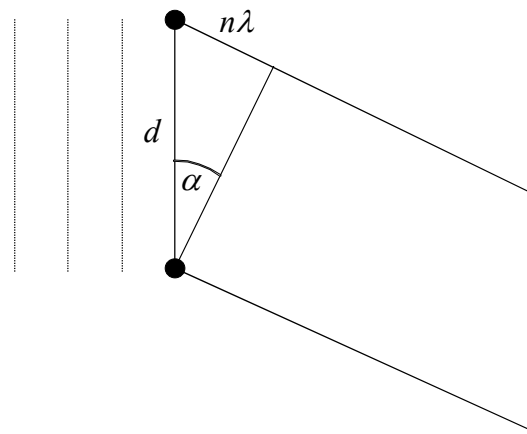
*Beugungsbild**Fernfeld*

Fig.6. Darstellung der Beugung am zwei Gitterpunkten.

Zur konstruktiver Interferenz kommt es, wenn sich nun ein Wellenberg des einen Strahls mit einem Wellenberg des anderen Strahls überlagert. Dies ist der Fall, wenn die Phasendifferenz $n\lambda$ beträgt. Somit gilt die Bedingung für konstruktive Interferenz:

Bedingung für konstruktive Interferenz

$$\sin \alpha_n = \frac{n\lambda}{d} \quad (\text{Eq.9})$$

Für zwei streuende Gitterpunkte bzw. die Beugung am Doppelspalt ergibt sich ein Beugungsbild in der Form eines Hell-Dunkel-Musters. Für ein optisches Gitter mit sehr vielen Punkten entstehen durch Überlagerung sehr vieler Wellen im Beugungsbild relativ scharfe Punkte. Der Anteil an dif-

fuser Streuung gibt somit auch Auskunft über Gitterdefekte. Mit der Bedingung Eq.9 kann bei bekannter Wellenlänge die Gitterkonstante bestimmt werden. Dieser Umstand und die weitere, im Beugungsbild enthaltene Information wird in der Kristallographie zur Bestimmung der Kristallstruktur verwendet. Da Kristalle atomare bzw. molekulare Gitter, muss für eine genügend grosse Beugungsaufspaltung Strahlung mit einer Wellenlänge im Bereich von wenigen nm verwendet werden, also Röntgenstrahlung.

Anwendungen

*Kristall-
Struktur-
bestimmung*

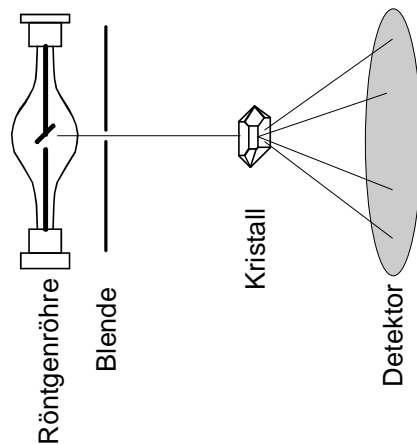


Fig.7. Röntgendiffraktion am Kristall: Ein dünner Röntgenstrahl wird auf einen Kristall geschossen. Das Beugungsbild wird mit einem Detektor erfasst.

Aufgaben

A1. Die Wellenlänge eines Lasers soll mittels Beugungsexperiment bestimmt werden. Dabei wird ein Gitter ($d = 1.5 \mu\text{m}$) in einer Entfernung von 1.0 m zu einem Leuchtschirm angebracht.

- a) Welche Wellenlänge besitzt der Laser, wenn die Distanz von Primärstrahl zum nächstgelegenen Beugungspunkt (1. Maximum) 45 cm beträgt?
- b) Welche Distanz zwischen Primärstrahl und nächsten Beugungspunkt (1. Maximum) ist zu erwarten, wenn die Wellenlänge des Lasers 440 nm betragen würde?

A2. Wie gross ist ein Gitterebenenabstand, wenn bei einer Strahlung mit der Wellenlänge $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ für die erste Beugungsordnung ein Beugungswinkel von 5° resultiert?

Lösungen

L1.

(a)

$$\lambda = \frac{d \cdot \sin \alpha_n}{n} = d \cdot \sin \alpha_1 =$$
$$= d \cdot \sin \left(\arctan \left(\frac{45}{100} \right) \right) = \underline{615.55 \text{ nm}}$$

(b)

$$s_n = l \cdot \tan \alpha_n = l \cdot \tan \left(\arcsin \left(\frac{n\lambda}{d} \right) \right)$$

$$s_1 = \underline{0.3068 \text{ m}}$$

(mit $l = 1 \text{ m}$)

L2.

$$d = \frac{\lambda}{\sin \alpha_1} = 1.77 \text{ nm}$$

mit 1.54 \AA 0.154 nm

930 Quantenmechanische Modelle

931 Wechselwirkung von Atomen mit Licht

Experiment

Im sichtbaren Bereich der elektromagnetischen Strahlung entspricht eine bestimmte Farbe einer bestimmten Wellenlänge. Rot liegt im Bereich von $\lambda = 600\text{nm}$, grün bei ca. $\lambda = 500\text{nm}$ und der blau-violette Bereich liegt bei 430nm . Das Auftreten von Farben lässt sich noch halbwegs mit der elektromagnetischen Wellentheorie erklären. Wenn nun Atome zum Leuchten angeregt werden (chemisch: Flammenfarben, physikalisch: Gasentladungen), dann treten für ein bestimmtes Element charakteristische Spektrallinien auf. Typisches Beispiel ist das Natriumatom mit einer prominenten Spektrallinie bei 589 nm. Das bedeutet, dass alle angeregten Atome auf die gleiche Weise Energie abstrahlen.

Eine andere Beobachtung lässt sich mit kürzer werdender Wellenlänge bei elektromagnetischen Wellen machen. Die Energie im Strahlungsfeld ist nicht kontinuierlich verteilt. Es können Energiequanten gemessen werden. Besonders ausgeprägt kann dies bei Röntgenstrahlung (λ im Bereich eines Atomdurchmessers) beobachtet werden. Trotzdem hat VON LAUE 1911 mit seinen Röntgendiffraktionsexperimenten am Kristall auch die Wellennatur der Röntgenstrahlung bewiesen. Somit lässt sich experimentell sowohl der Teilchen- als auch der Wellencharakter von elektromagnetischer Strahlung beobachten. Die Energiequanten werden Photonen (Lichtteilchen) genannt.

Zwischen Energie eines einzelnen Photons und der Wellenlänge der entsprechenden elektromagnetischen Welle gibt es einen Zusammenhang. Experimentell lässt sich feststellen, dass rotes Licht keine Fluoreszenzstrahlung im grünen oder blauen Bereich auslösen kann, jedoch blaues oder ultraviolettes Licht sehr wohl bei Einstrahlung auf geeignete Substanzen rote Fluoreszenz-Strahlung erzeugt (e.g. UV-Strahlung auf Yttriumsulfat). Photonen im roten Wellenlängenbereich scheinen somit nicht genügend Energie zu haben, um den Prozess auszulösen.

Theorie

Weder ein klassisches Wellen- noch ein Teilchenmodell kann die oben beschriebenen Phänomene befriedigend erklären. Licht ist weder eine klassische elektromagnetische Welle noch sind die Photonen klassische Teilchen. Licht hat sowohl Wellen- als auch Teilchencharakter. In diesem Zusammenhang wird vom Welle-Teilchen-Dualismus gesprochen.

Farbe und Wellenlänge

Spektrallinien

Energie-Quanten

Fluoreszenz

Experimentell lässt sich zeigen, dass die Energie eines Photons E_γ von der Frequenz ν der entsprechenden elektromagnetischen Welle abhängig ist:

*Wellen-
Teilchen-
Dualismus*

$$E_\gamma = h\nu \quad (\text{Eq.10})$$

Die Proportionalitätskonstante $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ wird Plancksches Wirkungsquantum genannt. Es kann auch die Kreisfrequenz ω verwendet werden: $E_\gamma = h/(2\pi) \cdot 2\pi\nu = \hbar\omega$.

*Plancksches
Wirkungs-
quantum*

Auch der Impuls p eines Photons ist durch eine Welleneigenschaft bestimmt. Der Impuls ist gemäss der sogenannten de Broglie-Beziehung durch die Wellenlänge λ bzw. durch die Wellenzahl k gegeben:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (\text{Eq.11})$$

Aufgaben

A1. Berechnen Sie die Energie eines einzelnen Photons für eine Radiowelle mit einer Wellenlänge von 1 m und eine Mikrowelle mit einer Wellenlänge von 1 cm. Warum werden in diesem Wellenlängenbereich immer klassische Wellenfelder gemessen / beobachtet?

A2. Die Energie für die erste Ionisation beträgt bei Cäsium 3.9 eV (= $6.24 \cdot 10^{-19} \text{ J}$). Mit welcher Wellenlänge müsste auf ein Cäsium-Atom eingestrahlt werden, damit ein einzelnes Photon diesen Prozess auslösen kann?

A3. Die Ionisationsenergie für ein Wasserstoffatom beträgt 13.6 eV ($21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J}$).

- a) Wenn das Hüllenelektron sich in einer Kreisbahn um den Kern bewegen würde, wie gross wäre der Abstand zu diesem?
- b) Welche Geschwindigkeit hätte das Elektron?

Lösungen

L1.

$$\text{Radiowelle: } E_\gamma = h\nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} = \underline{1.98 \cdot 10^{-25} \text{ J}}$$

$$\text{Mikrowelle: } E_\gamma = h\nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} = \underline{1.98 \cdot 10^{-23} \text{ J}}$$

Die Energie eines einzelnen Photons ist so klein, dass sie nicht gemessen werden kann. Wenn also eine elektromagnetische Welle (Radiosignal) gemessen wird, werden sehr viele Photonen detektiert. Diese vielen Photonen bilden ein praktisch kontinuierliches Wellenfeld. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Photons ist durch das Wellenfeld gegeben. Bei sehr vielen Photonen wird ein statistisches Mittel gemessen.

L2.

$$E = h\nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} = \underline{3.175 \cdot 10^{-7} \text{ m}} = \underline{317.5 \text{ nm}}$$

L3.

(a)

$$E_\gamma = q \cdot \int_{r_1}^{\infty} E(r) \cdot dr = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \int_{r_1}^{\infty} \frac{1}{r^2} \cdot dr = (-) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r_1}$$

$$r_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot E_\gamma} = \underline{1.059 \cdot 10^{-10} \text{ m}}$$

(b)

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2} \rightarrow v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot m_e r}} = \underline{1.52 \cdot 10^6 \text{ m/s}}$$

932 Wellenmechanische Beschreibung des freien Teilchens

Experimente

Der Welle-Teilchen-Dualismus lässt sich nicht nur bei Photonen, sondern auch bei anderen kleinen Teilchen beobachten. So kann ein Beugungsbild beobachtet werden, wenn ein Elektronenstrahl auf einen Kristall geschossen wird. Wird die Bahngeschwindigkeit eines Elektrons als klassisches Teilchen in der Hülle eines Atoms berechnet, so resultiert ein hoher Wert (Abschnitt 931, Aufgabe 3). Das Elektron wäre eine beschleunigte Ladung und würde gemäss den Gesetzen der Elektrodynamik (Maxwellgleichungen) Energie abstrahlen. Atome wären also keine stabilen Gebilde.

Die Abstrahlung von Energie lässt sich beim Abbremsen von schnellen Elektronen gut beobachten. Wenn in einer Röntgenröhre (Fig.1) Elektronen mit einer Spannung von 100 kV beschleunigt werden, so erreichen diese eine kinetische Energie von $E_{kin} = qU = 1.6022 \cdot 10^{-14} J = 100keV$ (keV = Kiloelektronenvolt).

*Welle-Teilche-
Dualismus bei
Elektronen*

*Abstrahlung
von
beschleunigten
Ladungen*

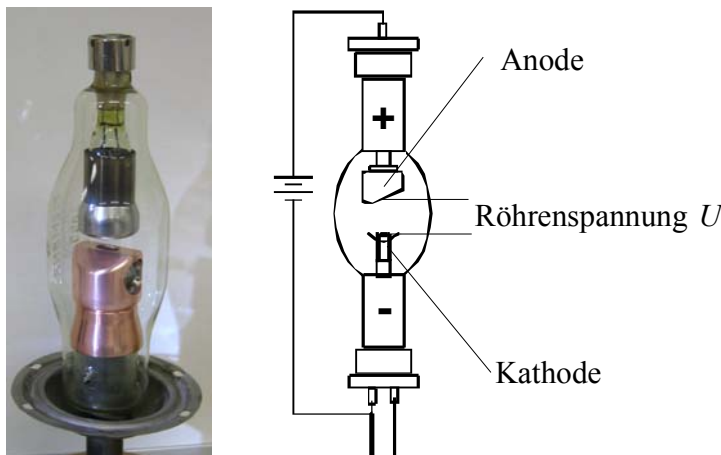
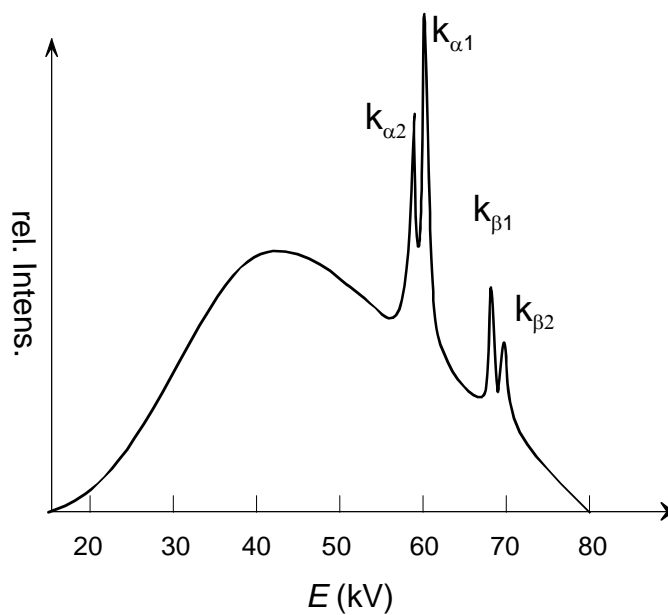


Fig.1. Aufbau einer Röntgenröhre (Stehanoide): Rechts Anode unten, links Anode oben

Treffen diese Elektronen auf die Wolframanode der Röntgenröhre, so werden die Elektronen durch Stösse abgebremst. Würde das Elektron mit einem Stoss zum Stillstand kommen, würde die Energie in Form eines Photons mit einer Energie von 100 keV abgestrahlt. In Realität machen aber die Elektronen sehr viele Stösse mit Wolframatomen. Entsprechend wird eine breite Energieverteilung im Röntgenspektrum beobachtet (Fig.2).

*Brems-
Strahlung*



Spektrum einer Röntgenröhre

Fig.2. Röntgenspektrum: Neben der breiten Energieverteilung (Bremsberg) sind auch charakteristische Linien zu erkennen. Diese entsprechen Übergängen in der Elektronenhülle des Atoms.

Mit zunehmender Röhrenspannung nimmt die Energie der Photonen zu. Die Energie der Photonen lässt sich über die Diffraktion an einem Kristall bestimmen.

Mit dem sogenannten Transmissionselektronenmikroskop (TEM) können an dünnen Schichten eines Kristalls Beugungsbilder erzeugt und ausgemessen werden (Fig.3). Dabei treten wie bei der Röntgenröhre bei Anliegen einer Hochspannung (und je nach Kathodentyp bei Heizen derselben) Elektronen aus und werden beschleunigt. Die zu untersuchende Probe dient dann quasi als Anode.

Transmissions-Elektronen-Mikroskopie

Die Energie der beschleunigten Elektronen kann durch Beugung am Kristall bestimmt werden. Dabei gilt für die Energie genau gleich wie für Photonen: $E = eU = h\nu$ mit der Elementarladung $e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$. Somit ergibt sich die Frequenz ν :

Energie und Frequenz eines Elektrons

$$\nu = \frac{eU}{h} \quad (\text{Eq.12})$$

Aus der de Broglie-Beziehung $p = h/\lambda$ folgt zudem:

Wellenlänge eines Elektrons

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{Eq.13})$$

für nicht-relativistische Elektronen ($v \ll c$) kann für $p = m_e \cdot v$ gesetzt werden. Es resultiert mit $eU = mv^2 / 2$ für die Wellenlänge eines beschleunigten Elektrons im nicht-relativistischen Fall:

$$\lambda = \frac{h}{m_e \cdot v} = \frac{h}{m_e \cdot \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}} = \frac{h}{\sqrt{2m_e \cdot eU}} \quad (\text{Eq.14})$$

Sind die Gitterkonstanten d des untersuchten Kristalls bekannt, kann nun aus der Beugungsformel Eq.9 im Abschnitt 9.2.2 auf die Wellenlänge der Elektronen zurückgeschlossen werden:

$$\lambda = d \cdot \frac{\sin \alpha_n}{n}$$

Oder aus der Röhrenspannung lässt sich der zu erwartende Winkel zwischen Primärstrahl und den Reflexen im Beugungsbild vorhersagen:

$$\lambda = d \cdot \frac{\sin \alpha_n}{n} = \frac{h}{\sqrt{2m_e \cdot eU}} \rightarrow \alpha_n = \arcsin \left(\frac{nh}{d \cdot \sqrt{2m_e \cdot eU}} \right)$$

Wellenlänge im nicht-relativistischen Fall

Wellenlänge eines Elektrons aus Beugungsbild



Elektronen-Beugung

Fig.3. Elektronen-Beugungsbild an einem BiOCl- Kristall

Theorie

Aus den experimentellen Beobachtungen können folgende Schlüsse gezogen werden. Die Energie eines Elektrons (im Allgemeinen die Energie eines Teilchens mit Masse m) ist durch $E = \hbar\omega$ und der Impuls durch $p = \hbar k$ gegeben. Da der Wellencharakter von Elektronen (Teilchen) ebenfalls experimentell nachweisbar ist, definieren wir eine Wellenfunktion für ein freies Teilchen (Axiom):

*Axiom
Wellenfunktion*

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{Eq.15})$$

Hier wird eine eindimensionale Wellenfunktion verwendet (mit $i^2 = -1$), was für die folgenden Betrachtungen vollend ausreicht. Wird die Wellenfunktion nun einmal nach der Zeit abgeleitet, so resultiert:

*Ableitungen
der Wellen-
Funktion*

$$\frac{d\psi}{dt} = -i\omega \cdot e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \cdot \psi \quad (\text{Eq.16})$$

Bei zweimaliger Ableitung nach x ergibt sich:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \cdot e^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \cdot \psi \quad (\text{Eq.17})$$

Beim Vergleich von zeitlicher mit räumlicher Ableitung fällt auf, dass die Wellenfunktion einmal mit ω , im anderen Fall mit k^2 multipliziert wird. Mit der kinetischen Energie $E_{kin} = p^2 / 2m$ lässt sich nun eine Art Energievergleich anstellen. Die Energie eines freien Teilchens ist ja gegeben durch $E = \hbar\omega$. Wenn $E = E_{kin}$ ist, dann gilt auch $E\psi = (p^2 / (2m)) \cdot \psi$. Wird die Wellenfunktion durch ihre Ableitungen ersetzt, dann ergibt sich folgende Differentialgleichung:

*kinetische
Energie*

*Energie-
Vergleich*

$$-\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (\text{Eq.18})$$

also:

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (\text{Eq.19})$$

Die Gleichung Eq.19 erinnert an eine Wellengleichung. Es handelt sich um die nach ERWIN SCHRÖDINGER benannte Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen. Eine ausführliche Erläuterung zu dieser Gleichung folgt im Abschnitt 933.

*Schrödinger-
Gleichung*

Aufgaben

A1. An einer Röntgenröhre liege eine Spannung von 20 kV an.

- a) Welche Wellenlänge haben die Elektronen kurz vor dem Auftreffen auf die Anode?
- b) Welche Energie könne die Photonen maximal haben, welche aus der Röhre kommen?
- c) Können im Röntgenspektrum charakteristische Linien beobachtet werden, wenn die Energiedifferenz bei diesem Übergang bei 60 keV liegt? (Begründung)

A2. In einem Elektronenmikroskop werden Elektronen mit einer Spannung von 50 kV beschleunigt. Im Beugungsbild (auf dem Fluoreszenzschirm) lässt sich zwischen zwei Beugungspunkten ein Beugungswinkel von 1.5° bestimmen.

- a) Wie gross ist die Gitterkonstante?
- b) Wie ändert sich der Beugungswinkel, wenn die Spannung erhöht wird?

Lösungen

L1.

(a) $v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}} = 8.39 \cdot 10^7 \text{ m/s} \rightarrow$ es darf näherungsweise nicht-relativistisch gerechnet werden!

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e \cdot eU}} = \underline{8.67 \cdot 10^{-12} \text{ m}}$$

(b)

$$E_p = 20 \text{ keV} = \underline{3.2 \cdot 10^{-15} \text{ J}}$$

(c) Nein, die kinetische Energie der Elektronen ist 20 keV und damit deutlich unterhalb der für die Anregung notwendigen Energie von 60 keV.

L2. Die Geschwindigkeit der Elektronen beträgt $v = 1.33 \cdot 10^8 \text{ m/s}$, der

$$\text{Faktor } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} = 1.117.$$

In grober Näherung kann noch nicht-relativistisch gerechnet werden. Die Beugungspunkte sind Orte, wo viele Elektronen auftreffen. Wenn die Aufenthaltswahrscheinlichkeit durch eine Wellenfunktion beschrieben wird, kann die Beugungsformel verwendet werden. Mit der Beugungsformel Eq.9 ergibt sich:

$$d = \frac{n\lambda}{\sin \alpha_n} = \frac{h}{\sin \alpha_1 \cdot \sqrt{2m_e \cdot eU}} = \underline{2.1 \cdot 10^{-10} \text{ m}}$$

933 Tunneleffekt und Unschärferelation

Theorie

In der klassischen Mechanik werden einem Teilchen für eine bestimmte Zeit einen scharfen Aufenthaltsort zugeordnet. In der Newtonschen Mechanik beruht die Beschreibung der Bewegung eines Teilchens auf den aus Zeit und Ort abgeleiteten Grössen Geschwindigkeit und Beschleunigung. Die Arbeit in der Mechanik besteht vor allem aus dem Aufstellen und dem Lösen von Bewegungsgleichungen. In der Newtonschen Mechanik wird die Bewegungsgleichung über eine Kräftebilanz gefunden. Ein anderer Ansatz wäre eine Energiebetrachtung, wie sie in Abschnitten 323 und 411 gemacht wurde. Wird dem Teilchen eine bestimmte Energie E zugeordnet, so kommen für die Bewegung des Teilchens nur bestimmte Bahnen in Frage, je nach Umgebung. Die Umgebung wirkt dabei via Wechselwirkungen (Potential, Unterkapitel 320) auf das Teilchen ein (e.g. Anziehung von elektrisch geladener Teilchen oder die Gravitation). Eine Energiebetrachtung liefert also eine Beschreibung möglicher Aufenthaltsorte eines Teilchens.

Für Elektronen und andere sehr kleine Teilchen zeigt sich aber bereits experimentell, dass diesen Teilchen unter Umständen zu einer bestimmten Zeit kein scharfer Aufenthaltsort zugewiesen werden kann. Dieser Sachverhalt wird durch die Heisenbergsche Unschärferelation beschrieben: Wird bei einem Teilchen gleichzeitig der Ort x und der Impuls p gemessen, so gilt: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar = 1.05457 \cdot 10^{-34}$ Js. Wird also zum Beispiel der Impuls scharf bestimmt ($\Delta p = 0$), dann ist der Ort des Teilchens nicht bestimmbar ($\Delta x \rightarrow \infty$). Für makroskopische Teilchen tritt diese Unschärfe praktisch nicht in Erscheinung, da bei einer Masse von wenigen Mikrogrammen und bei Durchmessern von wenigen Mikrometern die Abweichungen Δx und Δp vernachlässigbar werden. Somit lässt sich in der makroskopischen Welt bereits sehr kleinen Partikeln (z.B. einem Staubkorn) zu jedem Zeitpunkt einen scharfen Ort zuordnen. Unsere Erfahrungen stellen somit keinen Widerspruch zur Unschärferelation dar, vielmehr ist das auf unseren Alltagsbeobachtungen aufgebaute Bild von Teilchen ein Grenzfall für grosse Massen. Das bedeutet aber auch, dass die Vorstellung von Teilchen in der klassischen Mechanik nicht auf die kleinsten Teilchen übertragbar ist – das Bild von Teilchen muss also grundsätzlich revidiert werden, wenn mikroskopische Systeme wie Atome oder Atomkerne beschrieben werden sollen. Diese Aussage lässt sich anhand der Atomphysik bekräftigen. Die klassische Mechanik vermag nicht befriedigend erklären, weshalb die in der Hülle eines Atoms gebundenen Elektronen im stationären Zustand nur auf ganz bestimmten Energieniveaus anzutreffen sind.

Vergleich zur klassischen Mechanik

Heisenbergsche Unschärferelation

Um das Verhalten von kleinsten Teilchen zu erfassen, kann folgender Ansatz gewählt werden: Anstelle eines exakten Aufenthaltsortes soll die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens betrachtet werden (Dies beinhaltet ein fundamentales Postulat der Quantenmechanik). Als einfaches, einführendes Beispiel wird ein eindimensionaler Raum mit der Ortsgoodinate x betrachtet. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit pro Längenelement dx (Wahrscheinlichkeitsdichte) sei proportional zu einer Orts- und zeitabhängigen Funktion $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Teilchen im Abschnitt zwischen x und $x + dx$ aufhält, ist gegeben durch $\rho(x,t) \cdot dx$. Die Bildung des Betragsquadrates der Funktion ψ verhindert, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei der Berechnung negativ oder komplex wird. Das bedeutet also, dass für die Funktion $\psi(x,t)$ vorerst keine besonderen Einschränkungen gelten. Der Grund für die Wahl von $\psi(x,t)$ liegt in der Berechenbarkeit über die Schrödingergleichung. Diese liefert über eine Energiebetrachtung eine Bedingung, welche die Funktion $\psi(x,t)$ erfüllen muss. Um dieses Konzept zu veranschaulichen, soll ein Teilchen (e.g. Elektron) mit der Masse m betrachtet werden, welches die Energie E besitzt. Dieses Teilchen soll sich in einem stationären Zustand befinden. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist nun mit der zeitunabhängigen Funktion $\psi = \psi(x)$ verknüpft ($\rho(x) = |\psi(x)|^2$). Die Wechselwirkung des Teilchens mit der Umgebung soll durch die potentielle Energie E_p beschrieben werden.

*Aufenthalts-
wahrschein-
lichkeit*

*stationäre
Zustände*

Für solche stationären Zustände liefert nun die zeitunabhängige Schrödingergleichung¹ die Bedingungen für die Funktion $\psi(x)$:

¹ Diese Gleichung ist nach dem Physiker Erwin Schrödinger benannt, welcher 1926 die theoretischen Grundlagen dazu lieferte. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung kann in der Form $H\psi = E\psi$ geschrieben werden. Der auf die Funktion ψ

angewandte Operator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + E_p$ wird Hamilton-Operator genannt und

bezieht sich auf die Energie im System. In der räumlichen Ableitung im ersten Teil des Operators steckt der Impuls, welchem der Operator $\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx}$ zugeordnet wird

(mit $i^2 = -1$). Der Zusammenhang von Impuls p zur kinetischen Energie E_{kin} ergibt sich analog zur klassischen Mechanik: $E_{kin} = p^2 / 2m$. Die gesamte Energie $E = E_{kin} + E_{pot}$ eines Teilchens ist in der klassischen Mechanik gleich der Summe von kinetischer und potentieller Energie. In der Schrödingergleichung widerspiegelt sich dies in der Anwendung von Operatoren auf die Funktion ψ . Dies wird in der Quantenmechanik als Korrespondenzprinzip bezeichnet: Den Grössen in der klassischen Mechanik entsprechen in der Quantenmechanik Operatoren.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} [\psi] = (E_p - E) \cdot \psi \quad (\text{Eq.20}) \quad \text{Schrödinger-Gleichung}$$

Die Funktion $\psi(x)$ wird durch die Teilchenmasse und durch die Energiedifferenz ($E_p - E$) bestimmt. Die Energie des Teilchens und die Wechselwirkungen mit der Umgebung bestimmen somit auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens. Dies steht in Analogie zur klassischen Mechanik, wo die Energie des Teilchens ebenfalls für die möglichen Aufenthaltsorte ausschlaggebend ist.

Um die Lösung der Gleichung (Eq.20) zu finden, ist es hilfreich, diese etwas anders darzustellen:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m \cdot (E_p - E)}{\hbar^2} \cdot \psi = \kappa\psi \quad (\text{Eq.21})$$

Um das Vorzeichen von κ zu bestimmen, wird nun folgender spezielle Fall betrachtet: Es sei die Energie des Teilchens $E > E_p$. In diesem Fall besitzt die Gleichung Eq.21 die Form $\psi'' = -k^2\psi$. Dies entspricht der Form von Eq.5 im Abschnitt 412. Dementsprechend kann der dort verwendete Ansatz für die Lösungsfunktion wieder verwendet werden:

*analytische
Lösung*

$$\psi(x) = \hat{\psi} \cdot \sin(kx + \varphi) \quad (\text{Eq.22})$$

Die Funktion stellt für die stationäre Betrachtung nun keine zeitliche, sondern eine räumliche Schwingung mit der Amplitude $\hat{\psi}$ dar (mit einer allgemeinen Phasenverschiebung φ). Die räumliche Periode (Wellenlänge) dieser Oszillation ist durch $\lambda = 2\pi / k$ und somit durch die Energie des Teilchens gegeben. Dieser Umstand steht in völliger Analogie zu den elektromagnetischen Wellen, wo die Wellenlänge λ durch die Energie E_γ eines Photons gegeben ist: $\lambda = hc / E_\gamma$ mit $h = 2\pi \cdot \hbar$. Wird das Konzept auf nicht-stationäre Zustände erweitert, so resultiert aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung (Abschnitt 932) eine Wellenfunktion der Form $\psi(x, t) = \hat{\psi} \cdot \sin(kx \pm \omega t)$. Das verleitet zur Aussage, ein Elektron sei kein Teilchen, sondern eine Welle. Diese Interpretation ist aber zu einfach, zumal das Betragsquadrat von ψ lediglich mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens verknüpft ist. Elektronen sind also weder Teilchen noch Wellen im klassischen Sinn. Immerhin kann anhand von Eq.22 die Unschärferelation veranschaulicht werden: In der zugehörigen DGL (Eq.21) wurde ein scharfer, also genauer Energiewert für das Teilchen eingesetzt. Damit ist in diesem eindimensionalen Problem auch der Impuls genau

*Wellen-
funktion*

definiert. Da die sin-Funktion von $-\infty$ bis $+\infty$ geht, ist der Ort des Teilchens beliebig unscharf. Ein begrenzten Wellenberg hingegen müsste durch Superposition vieler einzelner Sinusschwingungen mit unterschiedlichen Frequenzen erzeugt werden. Das bedeutet, die Energie hat dann keinen scharfen Wert mehr.

Eine andere Situation stellt der Fall $E < E_p$ dar. Die Gleichung Eq.106 besitzt nun die Form $\psi'' = +k^2\psi$. Gesucht ist also eine Funktion, welche bei zweimaligem Ableiten bis auf einen konstanten Faktor sich selbst ergibt. Diese Bedingung wird durch $\psi(x) = \hat{\psi} \cdot e^{kx}$ erfüllt. Dabei darf k selbst positiv oder negativ sein. Im Fall eines negativen Werts für k resultiert eine exponentielle Abnahme mit zunehmendem Wert für x . Dieses Resultat kann durchaus plausibel erklärt werden. Ein Teilchen dürfte sich eigentlich gar nicht im Bereich aufhalten, wo das Potential grösser ist als die Teilchenenergie. Gemäss den Gesetzen der Quantenmechanik kann das Teilchen dies, allerdings nimmt die Wellenfunktion und somit auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit exponentiell ab. Je höher der Wert für E_p ist, desto grösser wird k und desto schneller fällt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ab.

*Lösungen
für $+k^2$*

Aufgaben

A1. Untersuchen Sie die Heisenbergsche Unschärferelation anhand der Wellenfunktion $\psi(x) = \sum_k \sin(kx)$: Wählen Sie eine Anzahl Summanden mit verschiedenen Werten für k und berechnen Sie die Summe. Verwenden Sie dazu ein Tabellenkalkulationsprogramm oder CAS. Wie könnte ein räumlich begrenztes Teilchen aus einer Summe von Wellenfunktionen gebildet werden?

A2. Implementieren Sie in ein Tabellenkalkulationsprogramm ein Lösungsverfahren für die folgende Differentialgleichung:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E_p(x) - E) \cdot \psi$$

Dabei soll vorerst $E_p(x) < E$ konstant sein. Wählen Sie die Werte so, dass sich für die Darstellung von $\psi(x)$ möglichst einfache Wertebereiche ergeben. Bauen Sie nun eine Potentialbarriere in ihr Modell ein: Dies bedeutet, dass nun die Werte von $E_p(x)$ in einem bestimmten Bereich $a < x < b$ ansteigt. Welche Fälle gibt es?

Lösungen

L1. Durch Überlagerung (Interferenz!) vieler Partialwellen kann bei guter Wahl von k lokal ein Wellenberg entstehen.

Partial-Wellen

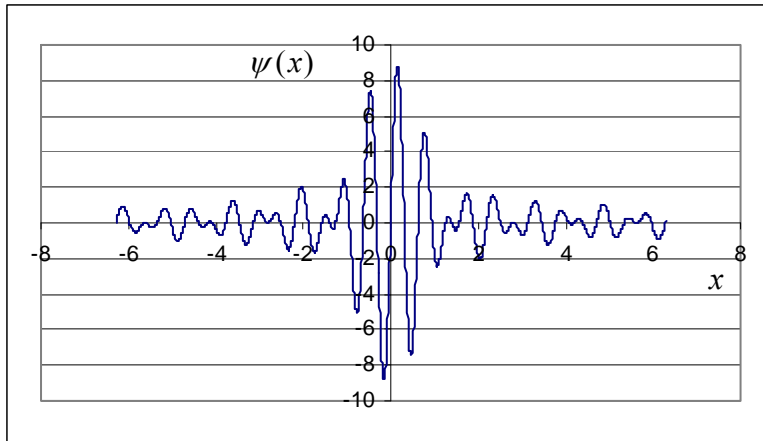


Fig.3. Aus Partialwellen gebildeter Wellenberg

Für Fig.3 wurde folgende Wahl getroffen: $k_n = 8 + (n - 1) \cdot 0.5$ mit $n \in \{1,2,3,4,5,6,7,8,9\}$.

L2. Es kann eine Berechnungstabelle programmiert werden, wie sie im Abschnitt 623 zur Anwendung kommt:

Berechnungs-Tabelle für numerische Lösung

Tab.1. Numerisches Verfahren zur Lösung einer DGL 2. Ordnung: Die Grössen ψ' und ψ'' sind hier nicht die Ableitungen im strengen Sinn, sondern deren Approximationen ($\Delta\psi / \Delta x$ bzw. $\Delta\psi' / \Delta x$).

x	$\psi(x)$	ψ'	ψ''	$E_p(x)$
0	$\psi_0 = \psi(0)$ *	$\psi'_0 = \psi'(0)$ *	$\psi''_0 = (E_p(0) - E) \cdot \psi_0$	$E_p(0)$
$0 + \Delta x$	$\psi_1 = \psi_0 + \psi'_0 \cdot \Delta x$	$\psi'_1 = \psi'_0 + \psi''_0 \cdot \Delta x$	$\psi''_1 = (E_p(\Delta x) - E) \cdot \psi_1$	$E_p(\Delta x)$
$0 + 2 \cdot \Delta x$	$\psi_2 = \psi_1 + \psi'_1 \cdot \Delta x$	$\psi'_2 = \psi'_1 + \psi''_1 \cdot \Delta x$	$\psi''_2 = (E_p(2 \cdot \Delta x) - E) \cdot \psi_2$	$E_p(2 \cdot \Delta x)$
$0 + 3 \cdot \Delta x$	$\psi_3 = \psi_2 + \psi'_2 \cdot \Delta x$	$\psi'_3 = \psi'_2 + \psi''_2 \cdot \Delta x$	$\psi''_3 = (E_p(3 \cdot \Delta x) - E) \cdot \psi_3$	$E_p(3 \cdot \Delta x)$
...
$0 + n \cdot \Delta x$	$\psi_n = \psi_{n-1} + \psi'_{n-1} \cdot \Delta x$	$\psi'_n = \psi'_{n-1} + \psi''_{n-1} \cdot \Delta x$	$\psi''_n = (E_p(n \cdot \Delta x) - E) \cdot \psi_n$	$E_p(n \cdot \Delta x)$

*) sind als Randbedingungen festzulegen.

In Fig.4 sind die Resultate der numerischen Berechnung mittels des in Tab.1 gezeigten Verfahrens gezeigt. Entsprechend Teilauftrag B wurde eine Potentialbarriere im Bereich $30 < x < 40$ eingebaut. Auffällig sind die numerischen Fehler, welche sich durch ein Anwachsen der Schwingungsamplituden mit zunehmendem x -Wert zeigen.

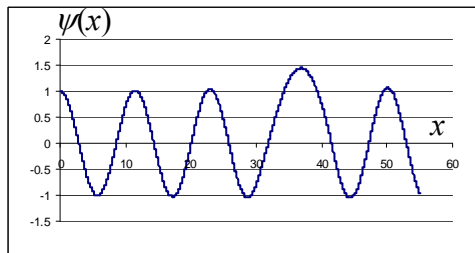


Fig.9a

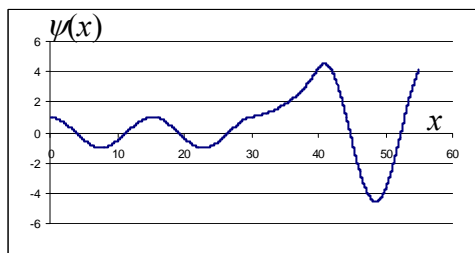
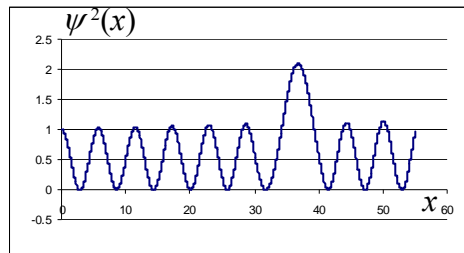


Fig.9b

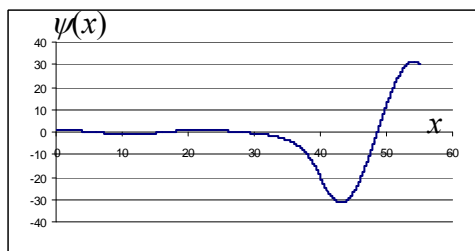
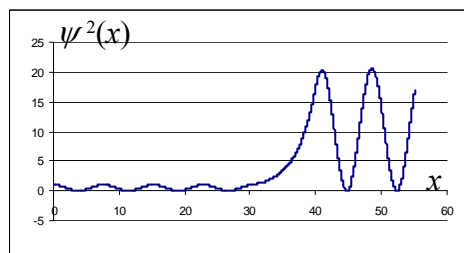


Fig.9c

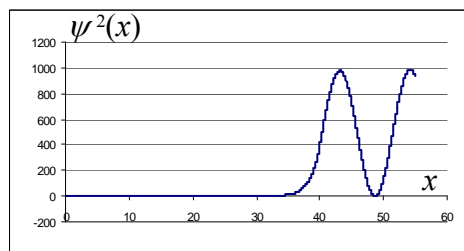


Fig.4. Numerische Berechnung von $\psi(x)$ und $\psi^2(x)$: Randwerte $\psi_0 = 1$ und $\psi'_0 = 0$, $E_p(0 < x < 30) = -0.2 = E_p(x > 40)$, $E_p(30 < x < 40) = 0$ (a) $E = 0.1$; (b) $E = -0.03$; (c) $E = -0.12$; Schrittweite $\Delta x = 0.01$.

Bezüglich einer Interpretation im Rahmen der Quantenphysik muss betont werden, dass die Wellenfunktionen in Fig.9 primär einfach einmal Lösungen einer Differentialgleichung sind. Auf welcher Seite sich ein Teilchen mit höherer Aufenthaltswahrscheinlichkeit befindet, ist von den Randwertbedingungen und dem gewählten Energiewert E abhängig. Je nach dem, welcher Wert $\psi(a)$ annimmt, ändert sich der Verlauf für $\psi(a < x < b)$ markant. Immerhin sind für die zwei Gebiete (ausserhalb und innerhalb der Barriere für $E < E_p$) die zwei verschiedenen Lösungstypen zu erkennen. Auch zu Erkennen ist, dass für $E < E_p$ ψ^2 auf keiner Seite vollend verschwindet (besonders gut in Fig.9b zu erkennen). Dies würde in der Quantenmechanik dem Tunneleffekt entsprechen: Befindet sich ein Teilchen auf der einen Seite einer Wand, so ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf der anderen Seite nicht einfach null (aber je nach Dicke der Barriere sehr klein). Der Effekt ist auch von der Masse m des Teilchens abhängig. In Eq.21 wird die Energiedifferenz $E_p - E$ damit multipliziert. Damit wird der exponentielle Abfall bzw. Anstieg auch stärker und somit die Differenz der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten zwischen den beiden Seiten grösser. Die Simulation von Tab.1 lässt sich leicht erweitern, so dass der Einfluss der Teilchenmasse studiert werden kann.

*Inter-
pretation*

*Einfluss der
Teilchen-
masse*

934 Teilchen im Potentialtopf

Theorie

Ein interessanter Fall ergibt sich für ein Teilchen im Potentialtopf. Dabei kann für das Potential folgende Funktion verwendet werden:

$$E_p(x) = \begin{cases} E_a > E & \text{für } x^2 > a^2 \\ E_i < E & \text{für } x^2 < a^2 \end{cases} \quad (\text{Eq.23})$$

Im Innern des Topfs ($-a < x < a$) kommt die Lösungsfunktion Eq.22 zur Anwendung, während ausserhalb dieses Bereichs $\psi(x)$ exponentiell abfällt (Fig1). Sind die Wände des Potentialtopfs unendlich hoch, so hat $\psi(x)$ an der Stelle a bzw. $-a$ den Wert null: $\psi(a) = \psi(-a) = 0$ (Fig.2). Dies gilt auf beiden Seiten der Wand, da $\psi(x)$ stetig differenzierbar sein muss. Daraus ergeben sich die Bedingungen für die Energie bzw. für die Werte von k , welche Teilchen in stationären Zuständen im Potentialtopf besitzen:

*Rand-
Bedingungen*

$$k_n = \frac{\pi \cdot n}{2a} \quad (\text{Eq.24})$$

mit $n \in \mathbb{N}$.

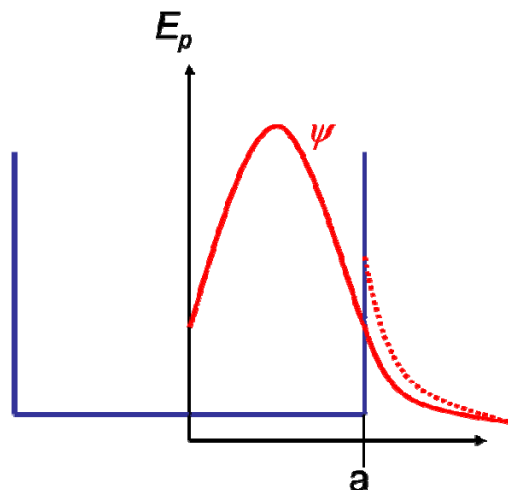


Fig.1. Wellenfunktion in endlich hohem Potentialtopf: Ausserhalb der Potentialwände fällt die Wellenfunktion exponentiell ab.

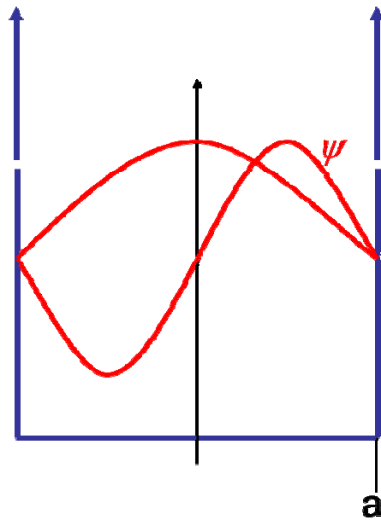


Fig.1. Wellenfunktion in unendlich hohem Potentialtopf.

Aufgaben

A1. Ein Metallkristall besteht aus einer regelmässigen Anordnung von Atomen. Ein eindimensionaler Kristall lässt sich durch Atome beschreiben, welche in x -Richtung Translations-Symmetrie besitzen. Dies äussert sich auch in einer Elektronendichte, welche als periodische Funktion beschrieben werden kann.

- Suchen Sie eine Schrödingergleichung, welche einen stationären Zustand eines Elektrons in einem eindimensionalen Metallgitter beschreibt. Begründen Sie ihre Annahmen.
- Lösen Sie die in (a) aufgestellte Gleichung numerisch.

Lösungen

L1. (a) Die einfachste Variante ist ein Potential, welches durch eine Sinus- oder Cosinusfunktion angenähert wird. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet dann:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} [\psi] = (\hat{u} \cdot (1 - \cos(\xi x)) - E) \cdot \psi$$

Das verwendete Potential $E_p(x) = \hat{u} \cdot (1 - \cos(\xi x))$ ist so gewählt, dass das Null-Niveau die Grenze für gebundene Zustände ist.

(b) Die nachfolgenden Diagramme zeigen die Ergebnisse der numerischen Berechnung für die vereinfachte Gleichung:

$$\frac{d^2}{dx^2} [\psi] = ((1 - \cos(\xi x)) - E) \cdot \psi$$

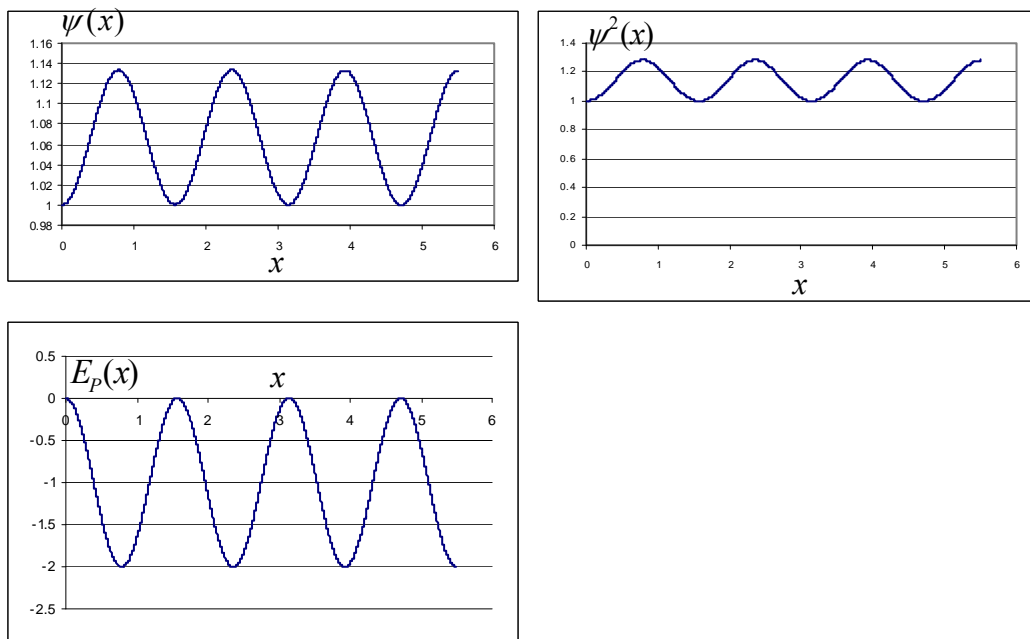


Fig.5. Simulation eines Elektrons in einem periodischen Potential: $E = 1.035$, $\xi = 4$.

Das Resultat ist abhängig von den Randwerten. Diese müssten im Rahmen für eine sinnvolle Simulation gezielt gewählt werden!

Beliebige Potentialformen können durch eine Fourier-Reihe (Kapitel 400) angenähert werden. In Fig.6 sind die Resultate für die folgende Gleichung gezeigt:

$$\frac{d^2}{dx^2}[\psi] = \left(\left(1 - \sum_n a_n \cos(\xi_n x) \right) - E \right) \cdot \psi$$

Für das Potential wurde für die Frequenzen und Amplituden folgender Ansatz gewählt:

$$\xi_n = n \cdot \xi_0 \quad \text{und} \quad a_n = \frac{1}{n^2}$$

mit $n = 1, 2, 4$.

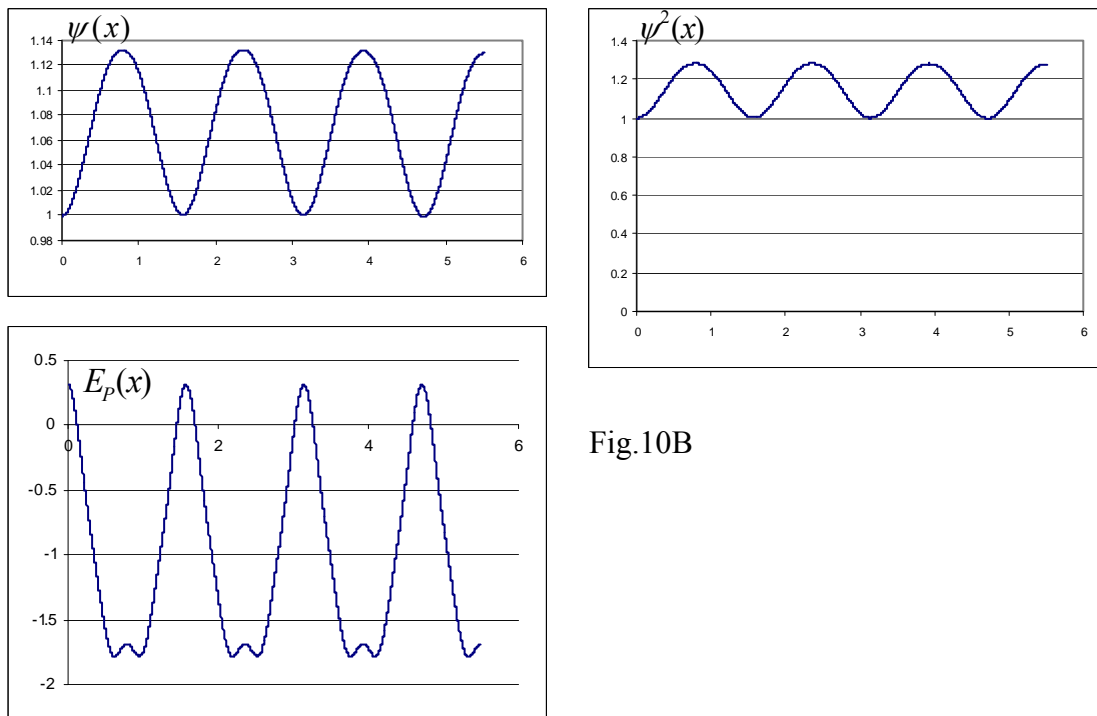


Fig.10B

Fig.6. Simulation mit $E = -1.031$.

935 Wasserstoff-Atom

Theorie

Um nun auch ein System zu verstehen, wie zum Beispiel das Wasserstoffatom, müsste die Schrödingergleichung in drei Dimensionen aufgestellt und gelöst werden. Auf eine detaillierte Darstellung wird hier verzichtet, zumal die Theorie dazu in vielen Lehrbüchern der Quantenphysik zu finden ist. Zudem soll dieser Auftrag nicht mit Mathematik und Theorie überfrachtet werden, da der Schwerpunkt auf der numerischen Berechnung einfacher eindimensionaler Probleme liegt. Gerade da liefert aber das Wasserstoffatom ein schönes Beispiel.

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom lässt sich durch Separation lösen. Dies bedeutet, die Wellenfunktion ψ kann als Produkt dreier Teilfunktionen geschrieben werden. In Kugelkoordinaten ergeben sich ein radialer Anteil sowie zwei Teile, welche von den Winkeln ϑ und ϕ des Kugelkoordinatensystems abhängen:

$$\psi(r, \vartheta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\phi) \quad (\text{Eq.25})$$

Der radiale Teil $R(r)$ lässt sich als Lösung zur folgenden Gleichung bestimmen:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) R = 0 \quad (\text{Eq.26})$$

Hier ist m die Masse eines Elektrons und e die Elementarladung. Es wird dafür angenommen, der Kern sei unendlich schwer. Die Teilchenenergie ist immer noch E , das Potential wird durch den Term e^2/r beschrieben (Coulomb-Potential im cgs-System!).

Ohne hier auf die Lösungsfunktion (Eq.25) näher einzugehen sein noch eine interessante Eigenschaft der Lösungen der Schrödingergleichung erwähnt: Die Lösungen $R_{nl} \cdot \Theta_{l|m} \cdot \Phi_m$ besitzen diskrete, scharfe Energieeigenwerte (analog dem Teilchen im Potentialtopf, Abschnitt 934). Diese werden als sogenannte Hauptquantenzahlen n bezeichnet. Die Lösungsfunktionen werden zudem durch zwei weitere Quantenzahlen l und m charakterisiert. Zu jeder Hauptquantenzahl gibt es n mögliche Werte von l , nämlich $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Zu jedem gegebenen l gibt es zudem $2l+1$ mögliche Werte für m , nämlich $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. In der Spektroskopie wurden diesen Zuständen (Eigenfunktionen) eines Elektrons in der Hülle folgende Namen

Schrödinger-Gleichung für 3-Dim. Raum

Separation

radialer Teil der Wellenfunktion

Energie-Eigenwerte

gegeben: Zustände mit der Hauptquantenzahl n und den Nebenquantenzahlen $l = 0$ und $m = 0$ werden als s-Orbitale (für *sharp*) bezeichnet, solche mit $l = 1$ werden als p-Orbitale (für *principal*) bezeichnet. Die d-Orbitale (für *diffuse*) sind Zustände mit $l = 2$. Es gibt fünf pro Hauptquantenzahl. Im realen Atom zeigen diese Orbitale leichte Differenzen bei der Energie (daher der Name).

*Haupt- und
Neben-
quantenzahlen*

Der Grundzustand (energetisch tiefster Zustand) im Wasserstoffatom beginnt mit einem 1s-Orbital. Gemäss den Quantenregeln sind auf diesem Energieniveau keine weiteren Zustände zu finden. Es folgt als nächst höherer Zustand das 2s-Orbital. Auf diesem Energieniveau existieren drei verschiedene 2p-Orbitale. Das nächst höhere Orbital ist ein 3s-Orbital, zu welchem drei 3p- und fünf 3d-Orbitale kommen.

Orbitale

Das Konzept wurde auf alle Atome übertragen. Die zu einem bestimmten n gehörende Orbitale werden in Schalen zusammengefasst, da bei allen Atomen die entsprechenden Orbitale zwar nicht den gleichen Energieeigenwert haben, jedoch energetisch nahe zusammen liegen. Die unterste Schale, bestehend aus dem 1s-Orbital wird K-Schale genannt. Die nächst höhere Schale ist die L-Schale, bestehend aus einem 2s- und drei 2p-Orbitalen. Ihr folgt die M-Schale.

Schalen

Aufgaben

A1. Suchen Sie numerische Lösungen zu der folgenden Gleichung:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{dR}{dr} + \left(E + \frac{1}{r} \right) \cdot R = 0$$

Variieren Sie die Randwertbedingungen: Welche Lösungen machen für ein Wasserstoffatom sinn?

Lösungen

L1. Die numerische Integration kann analog zu Abschnitt 933, Tab. 1 (L2) durchgeführt werden. Eine andere Variante ist die Verwendung eines Solvers (geht auch mit graphischen Modelleditoren), unter Anwendung der folgenden Zerlegung in 2 DGL 1. Ordnung:

$$R' = S \text{ und } S' = -(2/r) \cdot S - (E + 1/r) \cdot R$$

*radialer Teil
für Coulomb-
potential*

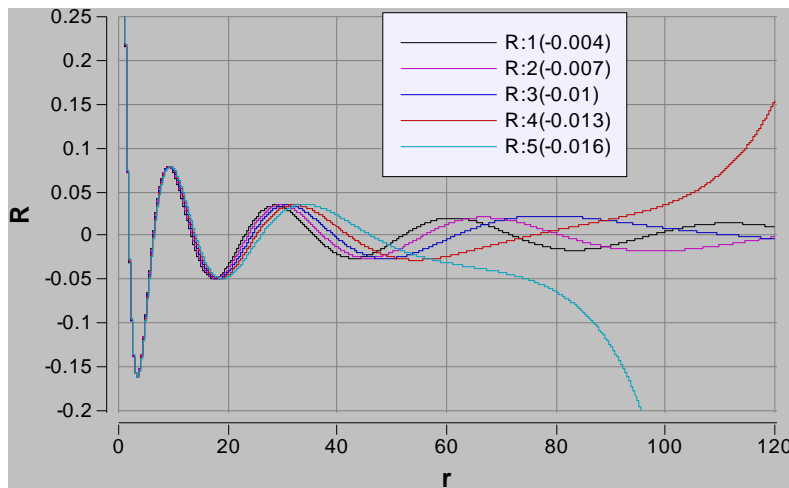


Fig.7. Radialer Anteil $R(r)$ der Wellenfunktion eines Teilchens ($m = 1$ au, $e = 1$ au, $\hbar=1$) im Coulomb-Potential: Die Singularität bei $x = 0$ muss numerisch aufgefangen werden. Randbedingungen $R_0 = 1$ und $R'_0 = 0$, Schrittweite $\Delta x = 0.001$ au.

Die radiale Funktion in Fig.7 hat ihren grössten Wert bei $x = 0$. Dies würde im Wasserstoffatom einem s-Orbital entsprechen. Durch eine andere Wahl der Randbedingungen können auch Funktionen erzeugt werden, welche bei $x = 0$ verschwinden. Somit sind verschiedene Lösungskategorien möglich, was mit den s-, p- und d-Orbitalen korrespondieren würde. Die Orbitale (gebundene Zustände) im Wasserstoffatom kennzeichnen sich allerdings durch bestimmte Energieeigenwerte aus. In der Simulation in Fig.11 wurde dieser variiert ($-0.004 < E < -0.016$ au). Somit ist auch hier die in Fig.7 dargestellte Funktion primär eine numerische Lösung einer Differentialgleichung.

Trotzdem zeigt Fig.7 einige Charakteristiken von Wellenfunktionen, wie sie bei Atomen auftreten. So muss die Funktion für $x \rightarrow \infty$ verschwinden (Normierbarkeit). Bei den Simulationen mittels Tab.1 kann es geschehen, dass die Funktion plötzlich bei grossen x -Werten ansteigt: Nur für bestimmte Werte von E wird die Wellenfunktion im unendlichen 0.

Orbitale

*Normier-
barkeit*

936 Elektronen in Leitern, Halbleitern und Isolatoren

Theorie

Das Verhalten von Elektronen ist wichtig für diverse physikalische Eigenschaften von Festkörpern (e.g. elektrische Leitfähigkeit, Phänomene von Halbleitern etc.). In Anbetracht der enormen Bedeutung von Halbleiterelementen wie Dioden und Transistoren in der Elektrotechnik, Elektronik und technischen Optik sollte zumindest ein qualitatives Verständnis der zugrunde liegenden physikalischen Gesetzmässigkeiten geschaffen werden. Dafür wird im Folgenden ein stark vereinfachtes Modell eines Festkörpers (Kristall) betrachtet.

In einem ersten Schritt betrachten wir einen 1-dimensionalen Kristall mit der Länge (Grösse) L . Wir nehmen zudem an, dass sich ein Elektron nur in diesem Kristall, also im Gebiet innerhalb der Länge L bewegen kann (um Elektronen aus einem Metall heraus zu bekommen, muss eine Austrittsarbeit geleistet werden, z.B. durch Anlegen einer hohen elektrischen Spannung). Im Prinzip wird hier ein grosser Potentialtopf mit der Dimension $L = 2a$ betrachtet (analog Abschnitt 934). Gemäss Abschnitt 934 erfüllen die Wellenfunktionen im stationären Fall die Bedingung:

$$k_n = \frac{\pi \cdot n}{2a} = \frac{\pi}{L} \cdot n \quad (\text{Eq.1})$$

Ist die Dimension L im Vergleich zur Wellenzahl k sehr gross, liegen die Wellenzahlen k_n sehr dicht beieinander, vergleichbar zu den Partialschwingungen (Obertönen) von stehenden Wellen auf einer Seite oder in einer Orgelpfeife (s. Abschnitt 613). Die Energieeigenwerte ε_n (Energien zu den Zuständen mit der Wellenzahl k_n) ergeben sich aus der Beziehung zwischen Energie und Impuls $E_n = p^2 / (2m)$ aus dem Quadrat der Wellenzahl (931):

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{(\hbar\pi)^2}{2mL^2} \cdot n^2 \quad (\text{Eq.2})$$

Die Energieeigenwerte als Funktion der Wellenzahl k liegen also auf einer Parabel (Fig.1). Nun ist aber ein Kristall nicht einfach ein rechteck-förmiger Potentialtopf, sondern eigentlich eine periodische Anordnung von Atomen oder Molekülen. Im Fall eines Metall-Kristalls („Metalle sind alle Kristalle“ – stimmt im Fall von metallischen Gläsern nicht) sind es Metallatome, welche sich durch ihre Eigenschaft auszeichnen, leicht Elektronen abzugeben. Deshalb kann man sich einen Kristall als

*Bedeutung von Halbleitern**Modell eines 1-dim. Kristalls**Energie-Eigenwerte**Kristall-Gitter*

Metall-Kristall

regelmässiges (d.h. translations- und punkt-symmetrisches) Gitter von positiv geladenen Atomrümpfen in einem Art Elektronengas vorstellen. Die exakte (analytische) Be-rechnung der Lösungen für die Schrödinger-Gleichung für dieses Problem ist unmöglich, weshalb auf Näherungsverfahren zurückge-griffen werden muss (z.B. Hartree-Fock). Im Prinzip können wir uns ein einzelnes Elektron vorstellen, welches in einem periodischen Potential mit im Vergleich zu den Maxima am Rand sehr hohen Potentialwänden bewegt (Fig.1). Das periodische Potential kann also als eine Art Störung im Potentialtopf aufgefasst werden, wobei dieses Störpotential die elektrische Wirkung aller Atomrümpfe und den anderen Elektronen beschreibt. Es werden somit nicht die stark an in den Atomen gebundenen Elektronen beschrieben, sondern Elektro-nen, die nur schwach durch das periodische Potential beeinflusst werden, aber im „grossen“ Potentialtopf gefangen sind.

Periodisches Störpotential

Befinden sich N Atome innerhalb der Länge L , so ergibt sich eine Gitterperiode von $u = L/(N+1)$. Für grosse N können wir schreiben $u \approx L/N$, also $L = Nu$. Näherungsverfahren (Störungsrechnungen, auch welche hier nicht weiter eingegangen wird) liefern ein interessantes Resultat: Solange die Wellenzahl k_n weit weg befindet von den perio-dischen Vielfachen $n \cdot \pi / u$, liegen die Energieeigenwerte ε_n gemäss Eq.2 auf einer Parabel – die Elektronen scheinen quasi unbeeinflusst vom periodischen Potential. Sobald jedoch die die Wellenzahl k_n sich den periodischen Vielfachen $n \cdot \pi / u$ nähert, weicht die Beziehung von Wellenzahl und Energieeigenwert für die Lösungsfunktionen stark von der quadratischen Abhängigkeit ab (Fig.1). Auf der Energie-Achse ergeben sich Lücken an den Stellen:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\pi n}{u} \right)^2 \quad (\text{Eq.3})$$

Bei diesen Energieeigenwerten sind also keine stationären Zustände möglich, es handelt sich um „verbotene“ Zonen oder sogenannte Bandlücken. Dazwischen befinden sich dicht beieinander liegende Zustände, sog. Bänder (zwischen den relativ grossen Werten von $\varepsilon_{\text{Lücke}} \propto 1/u$ haben sehr viele Werte $\varepsilon_n \propto 1/L$ Platz, da $L \gg u$ ist).

Bandlücken

Auch in unserem Kristall-Modell gilt das Pauli-Prinzip, d.h. es darf ein Zustand jeweils nur von einem Elektron besetzt werden bzw. pro Energieeigenwert können jeweils zwei Elektronen mit unter-schiedlichem Spin sich aufhalten. Wie beim Wasserstoffatom (Abschnitt 935) werden so die Zustände von unten hin zu den höheren Energien aufgefüllt. Im Festkörper beginnt dies bei den diskreten Zuständen der stark an die Atome gebundenen Elektronen (welche nicht in unserem vereinfachten Modell

Elektronen-Bänder

beschrieben werden) hin zu den immer zahlreicheren, zunehmend quasi-kontinuierlichen Zuständen in den Elektronenbändern.

Sind in einem Kristall alle Bänder bis zu einer bestimmten Band-lücke gefüllt (Fig.2), befinden sich alle Elektronen in stationären Zuständen. Es besteht quasi kein Platz für eine Zustandsänderung. Wird nun eine elektrische Spannung an diesen Festkörper angelegt, verändert sich das Potential. Ist diese Potentialänderung klein im Verhältnis zur Bandlücke, können keine Elektronen im Kristall transportiert werden, es handelt sich um einen elektrischen Isolator.

*Elektrischer
Isolator*

Anders verhält es sich, wenn ein Band nur teilweise mit Elektronen „gefüllt“ ist (sog. Leitungsband, Fig.2). Die Energiedifferenz zum nächst höheren, leeren Zustand ist nun so klein, dass ein geringes Potential ausreicht, um Elektronen im Gitter bewegen zu können (wobei es sich dann streng genommen nicht mehr um stationäre Zustände handelt und die zeitabhängige Schrödingergleichung betrachtet werden müsste). Diese Materialien sind elektrisch leitend.

*Elektrischer
Leiter*

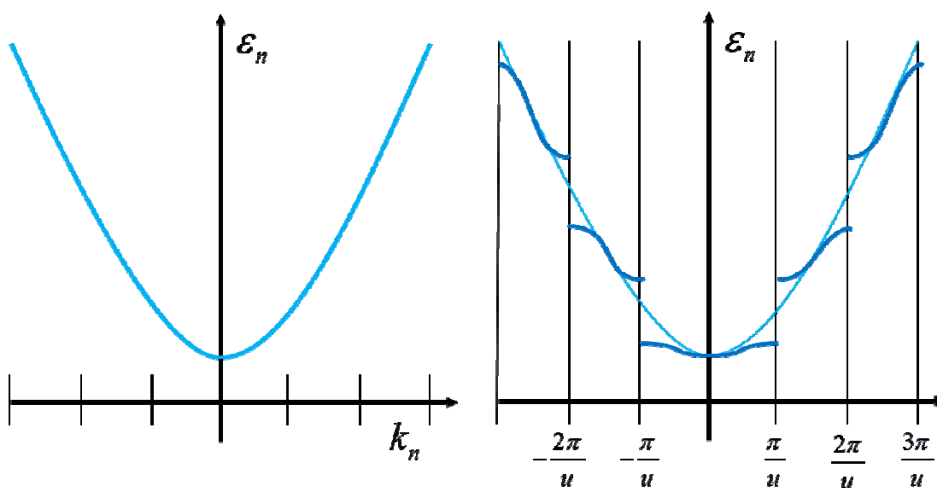


Fig.1. Mögliche Energieeigenwerte in einem Potenzialtopf ohne (links) und mit (rechts) periodischem Störpotential.

Grösse und Lage von Bandlücken sind von der elementaren Zusammensetzung bzw. vom Kristallgitter abhängig. Bei einigen Elementen wie Silicium (Bandlücke 1.1 eV) oder Germanium (0.7 eV) sind die Bandlücken so klein, dass sogar die thermische Anregung von Elektronen ausreichen kann, um sie über die Bandlücke hinweg vom vollen Valenzband in das bei einer Temperatur von 0 K leere Leitungsband zu befördern. Solche Materialien sind folglich bei 0 K Isolatoren. Hingegen steigt (im Gegensatz zu den Metallen) ihre elektrische Leitfähigkeit mit zunehmender Temperatur an. Für (homo-gen) dotiertes Silicium ist der reziproke Wert des elektrischen Widerstandes R nicht-linear proportional zur Temperatur T :

$$\frac{1}{R} \propto T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{E_{Gap}}{kT}}$$

Besondere technische Bedeutung kommt den dotierten Halbleitern zu. Dotierung bedeutet, dass in ein Kristallgitter aus einem bestimmten Element (e.g. Ge, Si) Fremdatome eingebracht werden. Im Fall von Si können z.B. Bor-Atome oder Phosphor-Atome eingebracht werden. Si-Atome besitzen 4 Valenzelektronen, folglich gehen die Si-Atome Bindungen mit 4 Bindungspartnern (also anderen Si-Atomen) ein. Werden nun B-Atome (typischerweise 1 Fremdatom auf 10^4 - 10^6 Si-Atome), so fehlt den B-Atomen ein Valenzelektron. Elektrisch ist ein solche Kristall immer noch neutral, aber aus quantenmechanischen Gründen würden die B-Atome gerne Elektronen aufnehmen (Elektronen-Akzeptoren, p-Dotierung). Werden hingegen P-Atome eingebracht, haben diese mit ihren 5 Valenzelektronen eines zu viel (Elektronen-Donator, n-Dotierung). Das Einbringen von Fremdatomen (Störstellen) erzeugt zusätzliche, örtlich gebundene Energieniveaus. Die Niveaus liegen im Allgemeinen in der für den undotierten Kristall ansonsten vorhandenen Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband. Die im Vergleich zu undotierten Halbleitern geringeren Energiedifferenzen dieser „Zwischenniveaus“ zum Valenz- bzw. Leitungsband begünstigen den Übergang von Elektronen in einen angeregten Zustand – es können so bewegliche Ladungsträger zur Verfügung gestellt werden.

Durch zusammenbringen von p- und n-dotierten Halbleitern entstehen sog. Dioden. Diese Bauelemente sind in der Elektrotechnik und Elektronik u.a. als Gleichrichtelemente oder Leuchtdioden von grosser Wichtigkeit.

Halbleiter

*Elektrische
Leitfähigkeit
von
Halbleitern*

*Dotierte
Halbleiter*

p-Dotierung

n-Dotierung

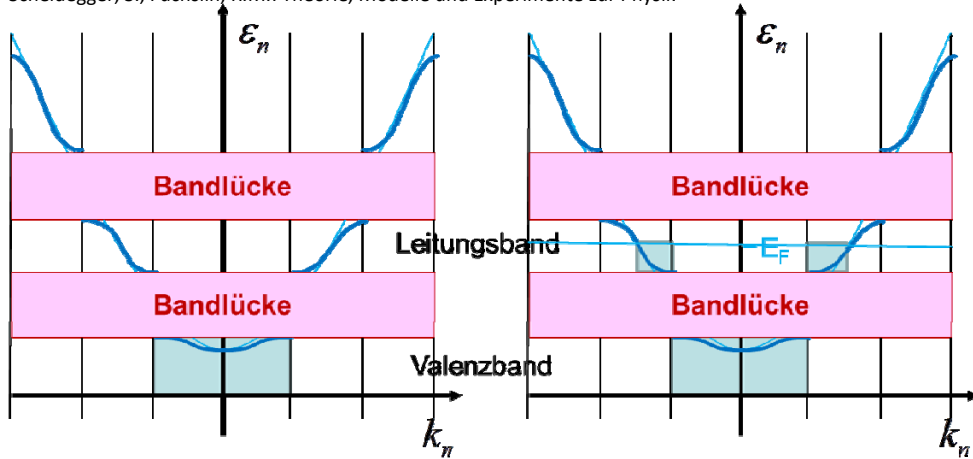


Fig.2. Elektronen-Besetzung in Metallen und Isolatoren: Bei $T = 0$ K wird die Energie des obersten besetzten Zustandes als Fermi-Energie (E_F) bezeichnet.

Aufgaben

- A1. Ein Elektron habe eine Energie von 1 eV (1 Elektronenvolt = $1.6 \cdot 10^{-19}$ J).
- Wie viele Maxima der Wellenfunktion haben in einem 1-dim. Kristall mit einer Grösse von 0.1 mm Platz?
 - Wie gross ist die „Wellenlänge“?
- A2. Bei welcher Temperatur würde die thermische Energie eines Elektrons theoretisch ausreichen, um eine Bandlücke von 1.1 eV zu überwinden?
- A3. Um welchen Faktor ändert sich der elektrische Widerstand, wenn ein homogen dotierter Halbleiter (Si) von 270 K auf 300 K, von 290 K auf 300 K und von 200 K auf 300 K erwärmt wird?
- A4. Was geschieht, wenn ein p-dotierter und ein n-dotierter Halbleiterkristall (exakt) zusammen gebracht werden? Erklären Sie anhand eines physikalischen Modells, wie nach dem zusammenbringen sich die räumliche elektrische Ladungsverteilung ändert (transientes Verhalten). Gibt es anschliessend einen stationären Zustand? Wie könnte ein solches Modell in eine Computersimulation umgesetzt werden?

Lösungen

$$\text{L1. (a) } n = \sqrt{2m\epsilon_n} \cdot \frac{L}{\pi\hbar} \approx 1.64 \cdot 10^5 \text{ Anz. Max.} = \frac{n}{2} \approx 0.82 \cdot 10^5 ;$$

$$\text{(b) } \lambda = \frac{2L}{n} \approx 2.44 \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

$$\text{L2. } \overline{E_{kin}} = \frac{1}{2} \overline{mv^2} = \frac{3}{2} kT = E_{gap} \rightarrow T = \frac{2E_{gap}}{3k} \approx 850 \text{ K} ;$$

Da aber dies für den Erwartungswert der Translationsenergie gerechnet ist (Eq.3, 711), können wegen der Maxwell-Boltzmann-Verteilung bereits bei deutlich tieferen Temperaturen Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband gelangen.

$$\begin{aligned} \text{L3. } \frac{R_2}{R_1} &= \frac{T_1^{3/2} e^{-\frac{E_{gap}}{kT_1}}}{T_2^{3/2} e^{-\frac{E_{gap}}{kT_2}}} = \left(\frac{T_1}{T_2} \right)^{3/2} \cdot e^{\frac{E_{gap}}{k} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)} = \\ &= 0.197 \text{ (270K} \rightarrow \text{300K)} \\ &= 0.219 \text{ (290K} \rightarrow \text{300K)} \\ &= 3.195 \cdot 10^{-10} \text{ (200 K} \rightarrow \text{300 K)} \end{aligned}$$

L4. s. Vorlesung

940 Kerne und Teilchen

941 Kernmodelle

Theorie

Auch für Atomkerne, wie für alle mikroskopischen Systeme, könnte ein Schalenmodell gesucht werden, wie es in Abschnitt 935 beschrieben wurde. Tatsächlich emittieren angeregte Kerne bei ganz bestimmten Energien Strahlung. Für das Schalenmodell wird nicht ein Coulombpotential verwendet, sondern es wird von einem trogförmigen Potential ausgegangen (Fig.1). Der im Abschnitt 934 beschriebene Potentialtopf wäre eine Approximation dafür.

Schalen-Modell

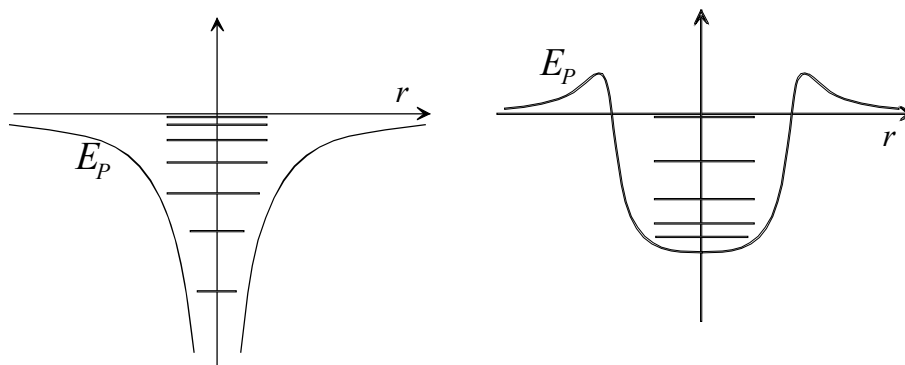


Fig.1 Schematische Darstellung der Energieniveaus in einem Coulomb-Potential (links) und einem Kernpotential (rechts).

Während im Coulomb-Potential die Zustände mit zunehmender Energie weiter auseinander liegen, ist es beim Kernpotential umgekehrt. Für das Teilchen im rechteckigen Potentialtopf (Abschnitt 934) gilt gemäss Eq.24: $k^2 = \pi^2 / (2a)^2 \cdot n^2$. Die Energie nimmt also quadratisch mit n zu.

Energie-Niveaus

Typisch für Kernpotentiale sind auch die Potentialwände. Entfernt sich ein Proton zu weit vom Kern, wirken enorme abstossende elektrostatische Kräfte, hingegen verschwinden die entgegen gesetzt wirkenden, also anziehenden Kernkräfte.

Im Unterschied zu den Atomen besteht aber der Atomkern aus einer Anzahl etwas gleich schwerer Teilchen, nämlich Protonen und Neutronen. Dieser Umstand hat dazu geführt, dass nebst dem Schalenmodell auch andere, einfachere Modelle existieren. Während ein Schalenmodell die Energieübergänge zu erklären vermag, genügt zumindest teilweise zur Beantwortung der

Frage nach der Stabilität von Atomkernen ein sogenanntes Tröpfchenmodell. Dieses kann mit der extrem kurzen Reichweite der Kernkräfte gerechtfertigt werden. Im Kern wechselwirken die Nukleonen (Protonen, Neutronen) über den Austausch von Teilchen. Das funktioniert, wenn die Nukleonen sehr nahe beieinander sind. Man könnte sich also die Nukleonen als eine Art klebrige Tröpfchen vorstellen.

*Tröpfchen-
Modell*

Da sich im Atomkern positiv geladene Protonen und elektrisch neutrale Neutronen befinden, stoßen sich diese enorm ab. Die Abstossungsenergie ist proportional zur Kernladungszahl Z . Der Radius r eines Kerns ist durch die Nukleonenzahl A bestimmt: $r \propto \sqrt[3]{A}$ (das Volumen ist proportional zu A). Für die Coulomb-Energie resultiert:

*Coulomb-
Energie*

$$E_C = a_C \cdot Z^2 \cdot A^{-\frac{1}{3}} \quad (\text{Eq.27})$$

Wenn nun Nukleonen als klebrige Tröpfchen betrachtet werden, so sind die Nukleonen an der Oberfläche weniger stark gebunden, weil sie weniger Bindungspartner haben. Die Oberfläche eines kugelförmigen Kerns ist proportional zu $r^{2/3}$ und somit zu $A^{2/3}$. Für die Energie resultiert:

*Oberflächen-
Energie*

$$E_S = a_S A^{\frac{2}{3}} \quad (\text{Eq.28})$$

Beide Energien, E_C und E_S verringern die Bildungsenergie. Zur Bindungsenergie trägt vor allem die Kondensationsenergie bei. Sie ist die frei werdende Energie, wenn Nukleonen aneinander "kleben" bleiben. Diese Energie ist proportional zum Volumen und somit zur Nukleonenzahl A :

*Konden-
sations-
Energie*

$$E_V = a_V A \quad (\text{Eq.29})$$

Für die Energiebilanz gilt $E_B = E_V - E_C - E_S$. Ob ein Kern stabil ist, hängt von den Proportionalitätskonstanten a_V , a_C und a_S ab. Hinzu kommen noch weitere Energiebeiträge, welche von dem Verhältnis von Anzahl Neutronen und Protonen bestimmt wird. Das Tröpfchenmodell erklärt erstaunlich gut die Orte der stabilen Kerne in der Nuklidkarte.

*Nuklid-
Karte*

Die verschiedenen Kernkonfigurationen können in der Nuklidkarte (Fig.2) aufgetragen werden. Dabei wird auf der Ordinate die Anzahl Neutronen und auf der Abszisse die Anzahl Protonen angegeben.

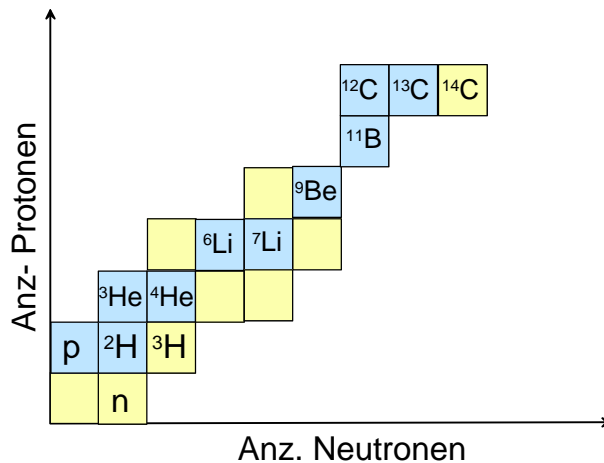


Fig.2. Ausschnitt aus der Nuklidkarte: Die blauen Felder stellen die stabilen Kernkonfigurationen dar.

Aufgaben

A1. Da Atomkerne durch einen Potentialtopf beschrieben wird, wie ihn Fig.12 zeigt, nimmt die Ladungsdichte am Kernrand schnell ab. Auch wenn ein scharfer Kernrand nicht definierbar ist, so lassen sich Kernen doch typische Radien zuordnen. Aus Streuexperimenten ist bekannt, dass die Kernradien näherungsweise berechnet werden können durch:

$$R = r_0 \cdot A^{\frac{1}{3}}$$

mit der Nukleonenzahl A und $r_0 = (1.3 \pm 0.1) \cdot 10^{-15} \text{ m}$.

- Berechnen Sie die Radien für die Kerne von ^{16}O , ^{24}Mg und ^{40}K .
- Berechnen Sie die Dichte von Kernmaterie unter der Annahme, dass innerhalb des Kernradius die Dichte konstant sei. Verwenden Sie, dass ein zwölftel des Gewichts eines Kern von ^{12}C $1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ist.

Lösungen

L1.

(a) ^{16}O : 3.28 fm, ^{24}Mg : 3.75 fm, ^{40}K : 4.45 fm

(b) $\rho = 1.8 \cdot 10^{17} \text{ kg / m}^3$

942 Der radioaktive Zerfall

Theorie

Die Stabilität eines Atomkern ist von der Anzahl Protonen und Neutronen abhängig. Sowohl Kern mit einem massiven Neutronenüberschuss als auch Kerne mit einem Protonenüberschuss sind nicht stabil. Bei leichten Kernen liegen die stabilsten Konfigurationen bei ca. gleicher Anzahl Neutronen und Protonen. Bei schweren Kernen wirkt ein leichter Neutronenüberschuss stabilisierend. Liegt ein Protonenüberschuss vor, so kann durch Umwandlung eines Protons in ein Neutron unter Umständen eine stabile Kernkonfiguration erreicht werden. Die Verwandlung eines Protons in ein Neutron geschieht durch die Umwandlung eines u-Quarks in ein d-Quark ($\langle uud \rangle \rightarrow \langle udd \rangle$). Dabei wird eine positive Ladung in Form eines Positrons frei (β^+ -Zerfall). Bei der Umwandlung eines Neutron in ein Proton ($\langle uud \rangle \rightarrow \langle udd \rangle$) hingegen wird eine negative Ladung in Form eines Elektrons frei: Es handelt sich um einen β^- -Zerfall. Bei schweren Kernen (ab ^{146}Sm) kommt eine weitere Zerfallsart hinzu. Es werden direkt Pakete von 2 Neutronen und 2 Protonen (α -Teilchen) aus dem Kern ausgestossen (α -Zerfall).

Für ein Zerfallsprozesses (also einer Kernumwandlung) lassen sich nur Aussagen über die Wahrscheinlichkeit des Eintretens machen, nicht jedoch über den genauen Zeitpunkt. Trotzdem lässt sich der radioaktive Zerfall auch deterministisch beschreiben. Dabei wird von einer grossen Anzahl Kerne ausgegangen. Zudem ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Kern während eines bestimmten Zeitintervalls dt zerfällt, unabhängig von den Nachbarkernen. Die Anzahl Kerne dN , welche pro Zeitintervall dt zerfallen ist somit abhängig von der Anzahl vorhandener Kerne $N(t)$:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N \quad (\text{Eq.30})$$

Die Lösung dieser bestens bekannten Differentialgleichung ist gegeben durch $N(t) = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$. Für praktische Anwendungen hat sich anstelle der Kernzahl eine andere Grösse etabliert: Die Aktivität A . Darunter wird die Anzahl Zerfälle pro Sekunde verstanden, die Einheit ist Becquerel (Bq): $A(t) = \dot{N}$. Aus der Definition ergibt sich für die Aktivität $A(t) = -\lambda N(t)$. Somit gilt auch: $\dot{A} = -\lambda A$ bzw. $A(t) = A_0 \cdot e^{-\lambda t}$.

*Zerfallsarten**deterministische Beschreibung**Definition der Aktivität*

Für kleine Kernzahlen gibt Eq.30 nur so etwas wie ein mittleres Verhalten wieder. Eine realistischere Variante müsste den Zerfallsprozess als stochastisches Ereignis modellieren. Solche Verfahren werden als Monte-Carlo-Simulationen (MC-Methode) bezeichnet. Eine solche Simulation lässt sich mit einem Tabellenkalkulationsprogramm realisieren. Für den radioaktiven Zerfall kann folgendes Vorgehen gewählt werden: Jedem Kern wird eine Zustandsvariabel s zugeordnet. Solange der Kern existiert, gilt $s = 1$. Der Kern gilt als zerfallen, wenn $s < 1$ ist. Ob ein Kern zerfällt, wird über einen Zufallsgenerator bestimmt, welcher die Zufallszahl r im Intervall $[0,1]$ liefert. Das Kriterium, ob ein Kern zerfällt, ist gegeben durch eine Überlebenswahrscheinlichkeit p : Wenn $r > p$ ist, so zerfällt der Kern, es gilt $s(t + \Delta t) = s(t) - 1$. Für $r < p$ hingegen gilt: $s(t + \Delta t) = s(t)$. Das Verfahren muss auf jeden einzelnen Kern angewendet werden.

Monte-Carlo-Simulation

Aufgaben

A1. Das Nuklid ^{99m}Tc besitzt eine Halbwertszeit von 6h.

- a) Wie gross ist die Zerfallskonstante λ ?
- b) Wie viele Prozent des ^{99m}Tc sind nach 10 h zerfallen?
- c) Wie gross war die Anfangsaktivität einer Probe, wenn nach 31 h die Aktivität noch 100 MBq beträgt?

A2. Simulieren Sie den Zerfall von ^{131}I (Tochternuklid ^{131}Xe , physikalische Halbwertszeit 8.04 Tage) mittels Monte-Carlo-Methode (MC-Methode). Verwenden Sie dazu ein Tabellenkalkulationsprogramm.

Berechnen Sie den gleichen Zerfall analytisch. Vergleichen Sie die Resultate: Wie gross sind die Fehler, von welchen Parametern hängen sie ab? Wie gut ist die MC –Simulation mit Excel?

A3. Strontium 90 (^{90}Sr) zerfällt mit einer Halbwertszeit von 29.12 Jahren in Yttrium 90 (^{90}Y), welches seinerseits mit einer Halbwertszeit von 64 Stunden zerfällt.

Modellieren Sie die Zerfallsreihe bzw. den Doppelzerfall mit einem graphischen Modelleditor. Zu Beginn sollen 10^6 ^{90}Sr - Kerne und keine ^{90}Y -Kerne vorliegen: Wie lange dauert es, bis ein Zerfallsgleichgewicht vorliegt, d.h. die Aktivität des ^{90}Sr gleich derjenigen von ^{90}Y in der Quelle ist? Wie hoch ist dann die Aktivität?

A4. In einem Kernreaktor werden durch Neutronen (bei ^{235}U durch thermische Neutronen) Atomkerne gespalten. Dabei wird aus der Spaltung der Kerne Energie freigesetzt. Bei jeder Spaltung werden auch wieder Neutronen frei, welche grundsätzlich (bei ^{235}U nach Moderation) zur Spaltung weiterer Kerne zur Verfügung stehen (Kettenreaktion). Wird ein Kernreaktor abgeschaltet (also der Neutronenfluss im Reaktor gestoppt), produziert der Reaktor weiter Wärme, wobei die Heizleistung unmittelbar nach abschalten ca. 5-10% der Reaktorleistung beträgt (Fig.A). Diese Wärme fällt durch den Zerfall instabiler Spaltprodukte (z.B. ^{133}Te zu ^{133}I) an. Die Brennstäbe erzeugen selbst dann noch Wärme, wenn sie z.B. bei Brennstoffwechsel einige Tage nach dem Abschalten aus dem Reaktor entfernt werden. Deshalb müssen die Brennstäbe weiter (in einem Abklingbecken) gekühlt werden. Ist die Kühlung ungenügend, können die Brennstäbe schmelzen und Radioaktivität kann in die Umwelt freigesetzt werden, wie z.B. in Fukushima 2011.

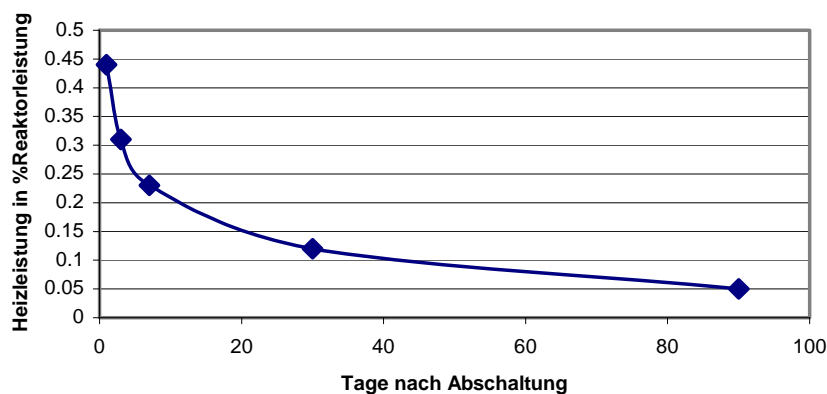


Fig.A. Heizleistung nach Reaktorabschaltung

In dieser Aufgabe soll der Prozess der Wärmeentwicklung in einem Abklingbecken modelliert werden. Dabei soll ein Viertel eines Inhaltes eines Reaktors mit einer Leistung von 4 GW in einem nicht gekühlten Becken gelagert werden. Dabei kann die Heizleistung durch die Formel von Way & Wigner (Ansatz: Potenzfunktion) berechnet werden, der Einfachheit halber soll aber hier eine Exponentialfunktion angesetzt werden: $P(t) = P_0 \cdot e^{-kt}$.

a) Wie viel Energie würde im Schnitt pro Kernzerfall in Wärme umgesetzt, wenn nach Abschalten des Reaktors die Heizleistung 5% der Reaktorleistung (bezogen auf 25% des Inhaltes = 1 GW) betrage und die Summe der Aktivitäten aller Nuklide 10^{17} Bq betrage?

- b) Welche Gesamtaktivität wäre (bei 5% von 1GW) vorhanden, wenn pro Zerfall im Mittel 100 keV in Wärme umgewandelt würde?
- c) Welchen Wert hat die Zeitkonstante k für den Zeitraum ab 7 Tage? (als Schätzwert Mittelwert aus den letzten drei Datenpunkten /d, 30d und 90 d nehmen)
- d) Welche Gleichungen beschreiben die Änderungen der Wärmemenge im Abklingbecken unterhalb bzw. bei 100°C?
- e) Wie schnell würde sich ein Abklingbecken mit 2000 m³ Wasser zu Beginn pro Tag aufheizen, wenn P_0 etwa 0.2% von 25% der Reaktorleistung (25% des Brennstoffes), also 2 MW betragen würde? Wie lange würde es mindestens gehen, bis das Becken zu sieden beginnt?
- f) Skizzieren Sie die verschiedenen, möglichen Szenarien, wenn nicht oder wenn forciert gekühlt würde.

Lösungen

L1.

$$(a) \lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = \underline{0.1155h^{-1}}$$

$$(b) \frac{A(t)}{A_0} = e^{-\lambda t} = 0.315 \rightarrow \underline{68.49\%}$$

$$(c) A_0 = \frac{A(t)}{e^{-\lambda t}} = A(t) \cdot e^{+\lambda t} = \underline{3.589GBq}$$

L2. Im Folgenden wird eine MC-Simulation vorgestellt, welche mit 150 Kernen startet. Es wird der Zerfall dieser Kerne über 15 Zeitschritte berechnet. Die Zeitschrittgrösse Δt berechnet sich aus der Überlebenswahrscheinlichkeit p und der Zerfallskonstante λ . Es gilt gemäss Eq.98: $p = e^{-\lambda \cdot \Delta t}$. Somit ist die Schrittgrösse gegeben durch:

*Berechnung
der
Schrittweite*

$$\Delta t = -\frac{\ln(p)}{\lambda} \quad (\text{Eq.31})$$

Die Zerfallskonstante λ kann über die Halbwertszeit $T_{1/2}$ bestimmt werden: $\lambda = \ln(2)/T_{1/2}$. In Fig.2 ist das Resultat einer MC-Simulation ($p = 0.75$, $T_{1/2} = 8$ Tage) zu sehen.

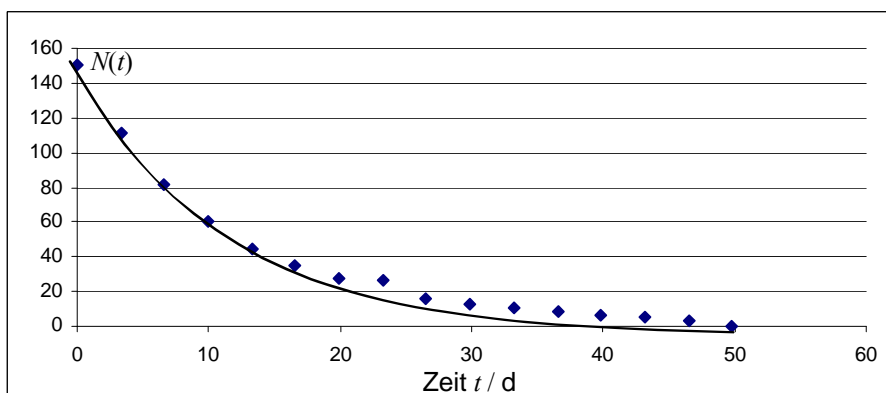


Fig.2. MC-Simulation ($p = 0.75$, $T_{1/2} = 8$ Tage): Im Diagramm eingezeichnet ist zusätzlich die analytische Lösung. Berechnung mit Excel.

Bezugnehmend auf den zweiten Teil der Aufgabe ist nun die Frage, wie stark die MC-Simulation von der deterministischen Beschreibung (Eq.30) abweicht. In Fig.3 ist die relative Abweichung zwischen den durch die MC-Simulation gerechneten Werten N_{MC} und den analytisch berechneten Werten N_{ana} gegeben ($(N_{MC} - N_{ana})/N_{ana}$).

*Vergleich
zwischen
MC-
Simulation
und deter-
ministischer
Beschreibung*

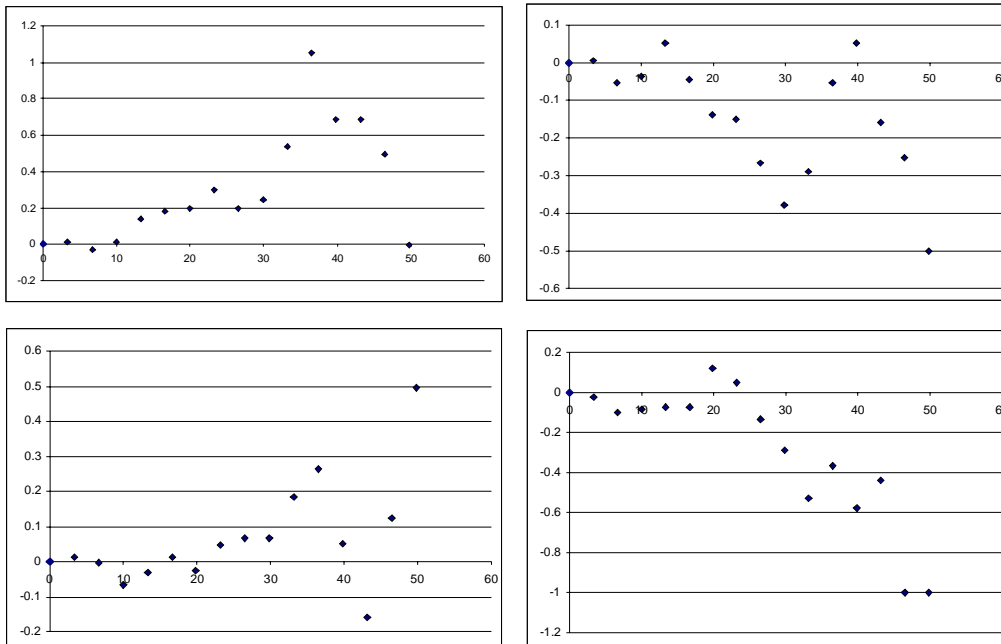
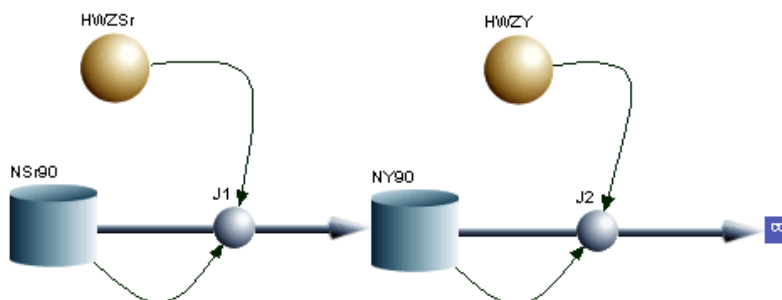


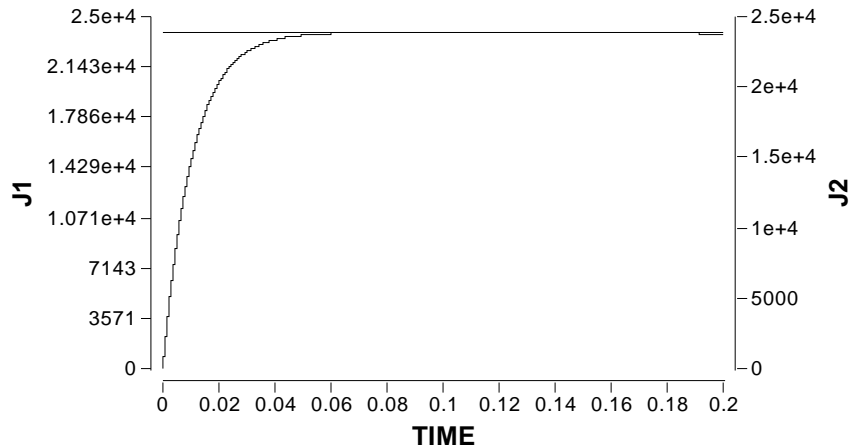
Fig.3. Relative Abweichung zwischen analytischer Berechnung und MC-Simulation: Es werden die Resultate von vier Simulationsdurchgängen gezeigt.

Die in Fig.3 dargestellten Resultate von vier Durchgängen zeigen von Fall zu Fall verschiedene Werte. Es wird also nicht das generelle Verhalten eines Systems (in diesem Fall die exponentielle Abnahme von $N(t)$), sondern einer von unendlich vielen möglichen Verläufen wiedergegeben. Allerdings lässt sich ein Trend in allen vier Beispielen beobachten: Bei grossen Werten für N sind die Abweichungen klein. Für grosse Anzahl von Kernen liefert also die *MC*-Simulation das exponentielle Verhalten des Systems.

L3. Flussdiagramm:



Entwicklung der Aktivitäten: Nach etwa 22 Tagen ist das Zerfallsgleichgewicht erreicht, obwohl die Anzahl ^{90}Sr -Kerne stets viel grössere ist als die Anzahl ^{90}Y -Kerne. Die Aktivität ist dann je ca. 24 kBq.



L4.

$$\text{a) } E_{Therm} = \frac{P_{in}}{A} = 5 \cdot 10^{-10} \text{ J}$$

$$\text{b) } A = \frac{P_{in}}{E_{Therm}} = \frac{5 \cdot 10^7 \text{ W}}{1.6022 \cdot 10^{-14} \text{ J}} = 3.12 \cdot 10^{21} \text{ Bq}$$

$$\text{c) } k \approx \frac{1}{2} \left[\frac{\ln(P(t_1)/P(t_2))}{t_2 - t_1} + \frac{\ln(P(t_2)/P(t_3))}{t_3 - t_2} \right] \approx 0.02 \text{ d}^{-1} = 2.31 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$$

d)

$$\frac{dQ}{dt} = P_0 \cdot e^{-kt} - \kappa \cdot (T - T_u) - L_V \cdot \frac{dm}{dt}$$

$$\frac{dm}{dt} = \begin{cases} 0 & \text{für } T < 100^\circ\text{C} \\ \frac{P_{in} - \kappa \cdot (T - T_u)}{L_V} & \text{für } T = 100^\circ\text{C} \end{cases}$$

e) Initialer Anstieg

$$\left[\frac{dQ}{dt} \right]_{t=0} = P_0 \rightarrow \left[\frac{dT}{dt} \right]_{t=0} = \frac{P_0}{m_0 c_p} \approx 20 \text{ K/d} \rightarrow 5 \text{ d}$$

943 Kernspin und Magnetresonanz

Theorie

Eine Reihe von Atomkernen (e.g. ^1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{19}F , ^{23}Na) besitzen einen sogenannten Eigendrehimpuls oder Spin. Eine einfache Vorstellung ist, dass diese Kerne um eine kernfeste Achse rotieren. Da sich im Kern drin geladene Teilchen befinden, resultiert ein beobachtbares magnetisches Moment. Allerdings entspricht diese durch das mechanische Bild eines Kreisel beeinflusste Vorstellung nicht wirklich der Realität, da die Nukleonen nicht Kügelchen sind. Korrekter ist die Analogie zu den Hüllenelektronen im Atom. Wie für die Elektronen müsste die Schrödingergleichung nun für die Nukleonen im Kernpotential gelöst werden. Im Gegensatz zum elektrischen Potential in der Atomhülle kommen nun aber noch Kern-Wechselwirkungen hinzu (siehe Abschnitt 941), wodurch sich die Potentialform beträchtlich von derjenigen in der Atomhülle unterscheiden. Unabhängig davon lassen sich aber genau wie bei den Bahndrehimpulsen in der Atomhülle bei Kernen Drehimpuls-Eigenschaften zuordnen. Das magnetische Dipolmoment $\bar{\mu}$ kann über das gyromagnetische Verhältnis γ einem Drehimpuls \bar{L} (Abschnitt 522) zugeordnet werden, wie es vergleichsweise durch einen elektrischen Kreisstrom erzeugt würde:

$$\bar{\mu} = \gamma \bar{L} \quad (\text{Eq.1})$$

Das gyromagnetische Verhältnis γ ist eine kernspezifische Grösse. Im Unterschied zu einem klassischen Kreisel können aber nicht beliebige Drehimpulse auftreten, da diese mit den Lösungen der Schrödingergleichung (Eigenzustände) gekoppelt sind. Die möglichen Beiträge des Drehimpulses sind (in z -Richtung eines durch den Spin festgelegten Koordinatensystems) gequantelt:

$$L_z = \hbar m \quad (\text{Eq.2})$$

Hierbei ist m die magnetische Quantenzahl, welche die Werte $I, I-1, \dots, -I$ annehmen kann. I ist die Spinquantenzahl, welche kernspezifisch ist und halb- oder ganzzahlig sein kann. Die Gesamtzahl der Eigenzustände eines Kerns beträgt somit $2I+1$. Kerne, wie ^1H , ^{13}C , ^{31}P weisen eine Spinquantenzahl $I = 1/2$ auf (halbzahlige Spins). Ihre Eigenzustände des Drehimpulses sind durch $m = +1/2$ und $m = -1/2$ charakterisiert, die magnetischen Momente sind gegeben durch:

$$\mu_z = \gamma \hbar m = \pm \frac{1}{2} \cdot \gamma \hbar \quad (\text{Eq.3})$$

*Kernspin**Dipolmoment
und gyro-
magnetisches
Verhältnis**magnetische
Quantenzahl
und Sin-
Quantenzahl*

Das magnetische Dipolmoment kann somit zwei Richtungen bezüglich der z - Achse annehmen.

Die beiden Energie-Eigenzustände, welche $m = +1/2$ und $m = -1/2$ entsprechen, sind im magnetfeldfreien Raum entartet, d.h. beide Zustände sind auf dem gleichen Energieniveau (Normierung $E_m = 0$). Dies ändert sich in einem statischen Magnetfeld. Weist ein solches Feld die Flussdichte B_0 in z - Richtung auf, so resultiert:

$$E_m = -\mu_z B_0 = -\gamma \hbar m \cdot B_0 \quad (\text{Eq.4})$$

*Energie-
Eigen-
zustände*

Im thermischen Gleichgewicht sind die Besetzungszahlen dieser beiden Energieniveaux nicht gleich, der Energetisch günstigere Zustand ist stärker besetzt.

*Besetzung
der Energie-
niveaux*

Durch Zufuhr von Energie können Übergänge zwischen den beiden Zuständen erzeugt werden. Dabei klappen die magnetischen Momente um. Werden elektromagnetische Wechselfelder für die Energiezufuhr verwendet, so ist deren Frequenz ω_0 über die folgende Beziehung zur Energie der Photonen bestimmt (siehe Abschnitt 931): $E = \hbar \omega_0$. Entspricht diese Energie gerade $2 \cdot E_m$ (Energiedifferenz bei Umklappen des Spins), also $\hbar \omega_0 = 2\gamma \hbar m \cdot B_0$, so resultiert (für $m = \pm 1/2$):

$$\omega_0 = \gamma B_0 \quad (\text{Eq.5})$$

*Larmor-
Frequenz*

Für Protonen (also ^1H - Kerne) in den für MR- Tomographen üblichen Magnetfeldstärken von 0.5T bzw. 1.5T betragen die Frequenzen $\nu_0 = \omega_0 / (2\pi)$ ca. 21 MHz bzw. 64 MHz, d.h. für die Anregung werden Radiowellen benötigt. Das gyromagnetische Moment beträgt für Protonen $\tilde{\gamma} = \gamma / (2\pi) = 42.58 \text{ MHz / Tesla}$.

*Zeitab-
hängige
Phänomene
(Dynamik)*

Die Spinorientierung gegenüber der z - Achse ist gequantelt, da es sich um Eigenzustände, also Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-gleichung (analog Abschnitt 934 / 935) handelt. Werden nun aber die die Spins ausgelenkt (durch ein zusätzliches Drehmoment), so stellt sich ein zeitliches Verhalten ein – die Spins bewegen sich analog einem Kreisel. Dieses Verhalten kann näherungsweise durch die Gesetze der klassischen Mechanik beschrieben werden. Analog zur zeitlichen Änderung des Drehimpulses in Abschnitt 522 gilt für die zeitliche Änderung des magnetische Moment bei Einwirkung eines Magnetfeldes \vec{B} :

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma \cdot (\vec{\mu} \times \vec{B}) \quad (\text{Eq.6})$$

Werden die magnetischen Momente aller Kerne in einem Volumen einer makroskopischen Probe aufsummiert, so resultiert die Kernmagnetisierung

$\vec{M} = \sum_i \vec{\mu}_i$. Für diese gilt analog zu Eq.6:

*Bewegungs-
Gleichung*

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \cdot (\vec{M} \times \vec{B}) \quad (\text{Eq.7})$$

In karthesischen Koordinaten resultiert:

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma \cdot (M_y B_z - M_z B_y)$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma \cdot (M_z B_x - M_x B_z)$$

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma \cdot (M_x B_y - M_y B_x)$$

Bei Kernresonanzexperimenten setzt sich im Allgemeinen das Magnetfeld \vec{B} aus einem statischen Feld $\vec{B}_0 = (0, 0, B_z = B_0)$ und zeitabhängigen Feldern $\vec{B}(t) = (B_x(t), B_y(t), 0)$ in der xy -Ebene senkrecht zu \vec{B}_0 zusammen.

Die Gleichung Eq.7 beschreibt das System nicht vollständig. Durch Wechselwirkungen der Spins untereinander (Spin-Spin- Wechselwirkung) und der Spins mit den umgebenden Atomen und Molekülen (Spin- Gitter- Wechselwirkung) werden sogenannte Relaxationseffekte induziert. Dies führen zu einer Dämpfung des Systems. Felix BLOCH (1946) nahm an, dass diese Effekte als Prozesse 1. Ordnung beschrieben werden können. Die Bloch'schen Gleichungen resultieren, wenn lineare Terme mit den charakteristischen Zeitkonstanten T_1 und T_2 eingeführt werden:

*Relaxations-
Phänomene*

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma \cdot (M_y B_z - M_z B_y) - \frac{1}{T_2} \cdot M_x$$

*Bloch'sche
Gleichungen*

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma \cdot (M_z B_x - M_x B_z) - \frac{1}{T_2} \cdot M_y$$

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma \cdot (M_x B_y - M_y B_x) - \frac{1}{T_1} \cdot (M_z - M_0)$$

Diese Gleichungen beschreiben nun die Bewegung der makroskopischen Magnetisierung unter der Wirkung eines stationären magnetischen Feldes in z - Richtung und eines zeitabhängigen Feldes in xy - Richtung. Die Relaxationsmechanismen bewirken, dass das System nach einer Störung wieder in einen thermodynamischen Gleichgewichtszustand übergeht, indem die in x - und y - Komponente der Magnetisierung verschwindet und die z - Komponente den thermo-dynamischen Gleichgewichtswert erreicht. Die Zeitkonstanten T_1 und T_2 werden als longitudinale und transversale Relaxationszeiten bezeichnet, da sie die Dämpfung entlang der z - Richtung bzw. senkrecht dazu in der xy - Ebene charakterisieren.

Die zeitlich ändernde Magnetisierung kann (nach Anregung) in einer sogenannten Empfängerspule ein Signal induzieren. Befindet sich die Probe (oder der Patient!) in einem Gradientenfeld (Gradient entlang der z - Richtung), so ist in der Frequenz des induzierten Signals die z - Position kodiert. Durch Anwendung gezielter Pulse und Gradienten können die räumlichen unterschiedlichen Volumen mit je nach Gewebe oder Material unterschiedlicher Protonendichte als Bild dargestellt werden. Bei geeigneten Anregungssequenzen können auch T_1 - oder T_2 - gewichtete Bilder entstehen, da sich diese Zeitkonstanten für verschiedene Gewebetypen im Körper unterscheiden (z.B. für Corpus Callosum $T_1 = 380$ ms; $T_2 = 80$ ms, für Cerebellum $T_1 = 585$ ms; $T_2 = 90$ ms)

*Magnet-
resonanz-
Tomographie*

Aufgaben

A1. Die Bewegung der Kernmagnetisierung soll mit dem Computer simuliert werden. Implementieren Sie die Bloch'schen Gleichungen in ein Systemdynamik-Programm (z.B. Berkeley-Madonna).

- a) Wie wirken sich die Relaxationszeiten T_1 und T_2 auf die dreidimensionale Bewegung der Magnetisierung aus?
- b) Welche frequenzabhängige Wirkung hat ein zeitlich oszillierendes Magnetfeld in x - bzw. y - Richtung auf das System?

Lösungen

L1. Da die Frequenz der benötigten Radiowellen im MHz- Bereich liegen, also eine Periodendauer im μs - bzw. ns- Bereich haben, jedoch die Relaxationszeiten im Bereich von 100 – 1000 ms, empfiehlt sich für eine Simulation nur zur Darstellung der Spin- Bewegung eine Re-skalierung der Frequenz durch Verwendung von $\tilde{\gamma} = \gamma / (2\pi) = 42.58 \text{ Hz / Tesla}$.

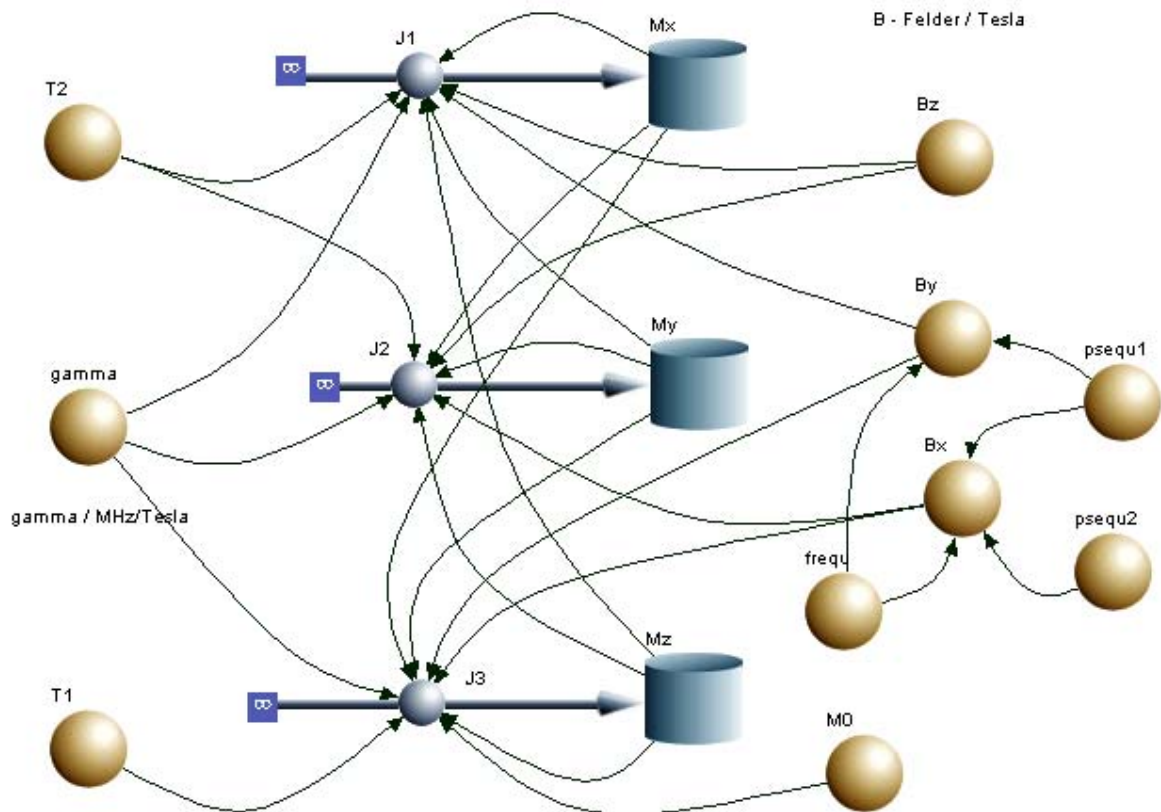


Fig.1. Berkeley-Madonna Flowchart / Integratorstruktur für Bewegungsgleichungen

Tab.1. System-Gleichungen

<pre> {Reservoirs} d/dt (Mx) = + J1 INIT Mx = 0 d/dt (My) = + J2 INIT My = 0 d/dt (Mz) = + J3 INIT Mz = 0.001 {Flows} J1 = gamma*(My*Bz- Mz*By)-Mx/T2 J2 = gamma*(Mz*Bx- Mx*Bz)-My/T2 J3 = gamma*(Mx*By- My*Bx)-(Mz-M0)/T1 </pre>	<pre> {Functions} T2 = 0.08 T1 = 0.38 gamma = 42.58*2*PI Bx = 0*sin(frequ*time)*psequ1+0.01*sin(frequ*time)*psequ2 By = 0.01*cos(frequ*time)*psequ1 Bz = 1 M0 = 0.001 psequ1 = squarepulse(0.1,0.02) frequ = 20 psequ2 = squarepulse(0.5,0.02) </pre>
--	---

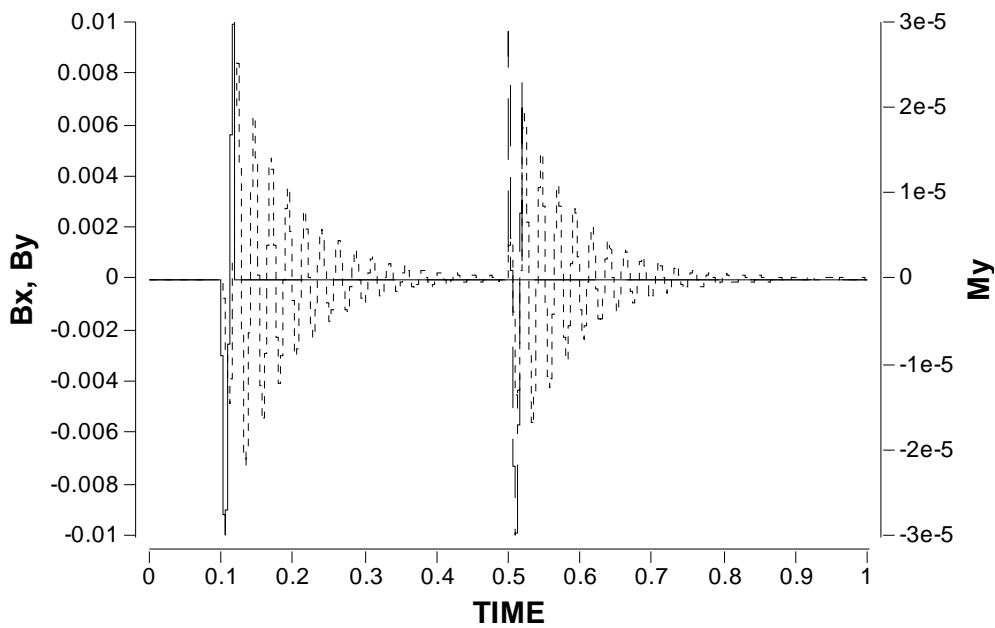


Fig.2. Magnetisierung in y- Richtung als Funktion der Zeit: Die Anregung erfolgt mit zwei RF- Pulsen, der erste in y- Richtung, der zweite in x- Richtung polarisiert. Parameter gem. Tab.1.

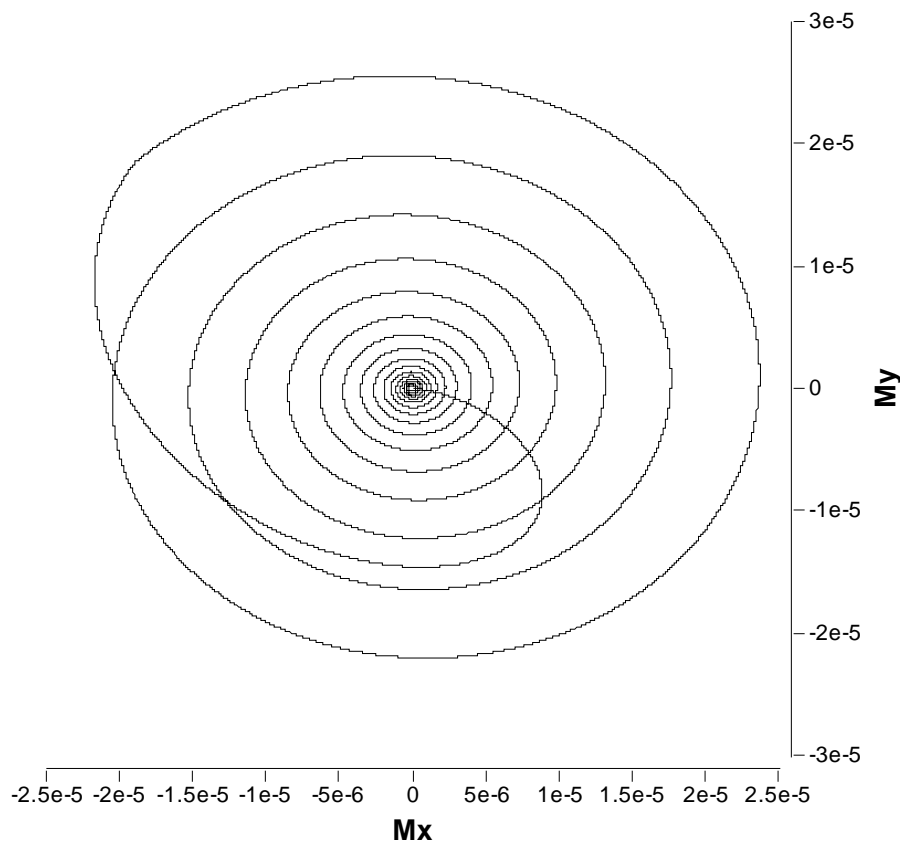


Fig.3. Die Bewegung der Magnetisierung in der xy - Ebene: Parameter gem. Tab.1.

000 Anhänge**010** Mathematische Grundlagen

011. Anhang 1: Die Ableitung von Potenzfunktionen

In diesem Abschnitt sollen die Ableitungen von Funktionen der Form $f(t) = t^n$ untersucht werden (mit $n \in \mathbb{N}$). Für $n = 0$ (horizontale Gerade) kann die Ableitung einfach bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{d}{dt} [t^0] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{(t + \Delta t)^0 - (t)^0}{\Delta t} \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{1 - 1}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [0] = 0 \end{aligned}$$

Dies ist in Übereinstimmung mit der Steigung, welche für eine horizontale Gerade an jeder Stelle null ist. Auch für $n = 1$ muss nicht wirklich die Grenzwertbildung gemacht werden:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{d}{dt} [t^1] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{(t + \Delta t)^1 - (t)^1}{\Delta t} \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{t + \Delta t - t}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{\Delta t}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [1] = 1 \end{aligned}$$

Die Steigung der Geraden $f(t) = t$ ist eins. Für $n = 2$ ergibt sich folgende Rechnung:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{d}{dt} [t^2] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{(t + \Delta t)^2 - (t)^2}{\Delta t} \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{t^2 + 2t \cdot \Delta t + \Delta t^2 - t^2}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{2t \cdot \Delta t + \Delta t^2}{\Delta t} \right] = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [2t + \Delta t] = 2t \end{aligned}$$

Die Steigung einer Parabel an der Stelle t ist also $2t$. Damit kann auch für eine stetig ändernde Steigung diese am Punkt t berechnet werden.

Auch für $n = 3$ lässt sich die Ableitung gut berechnen:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{d}{dt} [t^3] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{(t + \Delta t)^3 - (t)^3}{\Delta t} \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{t^3 + 3t^2 \cdot \Delta t + 3t \cdot \Delta t^2 + \Delta t^3 - t^3}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{3t^2 \cdot \Delta t + 3t \cdot \Delta t^2 + \Delta t^3}{\Delta t} \right] = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [3t^2 + 3t \cdot \Delta t + \Delta t^2] = 3t^2 \end{aligned}$$

Für eine beliebige Potenz $n \in \mathbb{N}$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{d}{dt} [t^n] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{(t + \Delta t)^n - (t)^n}{\Delta t} \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{t^n + nt^{n-1} \cdot \Delta t + \dots + \dots + nt \cdot \Delta t^{n-1} + \Delta t^n - t^n}{\Delta t} \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{nt^{n-1} \cdot \Delta t + \dots + \dots + nt \cdot \Delta t^{n-1} + \Delta t^n}{\Delta t} \right] = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [nt^{n-1} + \dots \cdot \Delta t + \dots + \dots \cdot \Delta t^{n-3} + nt \cdot \Delta t^{n-2} + \Delta t^{n-1}] = nt^{n-1} \end{aligned}$$

Somit erhalten wir eine allgemeine Regel für die Ableitung (welche im Übrigen auch für $n \in \mathbb{R}$ gilt!):

$$\frac{d}{dt} [t^n] = n \cdot t^{n-1}$$

Die Regel lässt sich problemlos auf Funktionen der Form $f(t) = at^n$ erweitern:

$$\frac{d}{dt} [at^n] = a \cdot \frac{d}{dt} [t^n] = an \cdot t^{n-1}$$

Für Summen gilt zudem:

$$\frac{d}{dt} [f(t) + g(t)] = \frac{df}{dt} + \frac{dg}{dt}$$

012. Anhang 2: Die Ableitung von Exponentialfunktionen

Von der Funktion $f(x) = a^x$ sei die Ableitung gesucht:

$$\frac{d}{dx}[a^x] = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[\frac{a^{x+\Delta x} - a^x}{\Delta x} \right] \quad (\text{Eq.A1})$$

Durch Umformen ergibt sich:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[\frac{a^{x+\Delta x} - a^x}{\Delta x} \right] &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[a^x \cdot \left(\frac{a^{\Delta x} - a^0}{\Delta x} \right) \right] \\ &= a^x \cdot \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[\left(\frac{a^{\Delta x} - a^0}{\Delta x} \right) \right] \end{aligned}$$

In der Klammer steht gerade die Ableitung von a^x an der Stelle $x = 0$. Somit können wir schreiben:

$$\frac{d}{dx}[a^x] = a^x \frac{d}{dx}[a^x]_0 \quad (\text{Eq.A2})$$

Wir suchen nun diejenige Basis a , für welche die Ableitung bei $x = 0$ gerade 1 ergibt, also:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[\frac{a^{\Delta x} - a^0}{\Delta x} \right] = 1 \quad (\text{Eq.A3})$$

Die Gleichung Eq.A3 lässt sich erfüllen für $a^{\Delta x} - 1 = \Delta x$ bzw. $a^{\Delta x} = \Delta x + 1$. Auflösen nach a ergibt:

$$a = (\Delta x + 1)^{\frac{1}{\Delta x}} \quad (\text{Eq.A4})$$

Durch Substitution mit $\frac{1}{\Delta x} = n$ resultiert:

$$a = \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n \quad (\text{Eq.A5})$$

Für $n \rightarrow \infty$ ergibt sich für Eq.A5 gerade die Eulersche Zahl $e = 2.7182818\dots$

Somit gilt für die Ableitung von $f(x) = e^x$:

$$\frac{d}{dx}[e^x] = e^x \quad (\text{Eq.A6})$$

Für $f(x) = e^{cx}$ gilt:

$$\frac{d}{dx}[e^{cx}] = c \cdot e^{cx} \quad (\text{Eq.A7})$$

013. Anhang 3: Die Produkt-Regel

Soll das Produkt von zwei (zeitabhängigen) Funktionen (nach der Zeit t) abgeleitet werden, zum Beispiel für die zeitliche Ableitung des Impulses die veränderliche Masse $m(t)$ und die Geschwindigkeit $v(t)$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}[m(t) \cdot v(t)] &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{m(t + \Delta t) \cdot v(t + \Delta t) - m(t) \cdot v(t)}{\Delta t} \right] = \\
 &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{m(t + \Delta t) \cdot v(t + \Delta t) - m(t) \cdot v(t)}{\Delta t} + \frac{m(t) \cdot v(t + \Delta t)}{\Delta t} - \frac{m(t) \cdot v(t + \Delta t)}{\Delta t} \right] \\
 &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{m(t + \Delta t) \cdot v(t + \Delta t) - m(t) \cdot v(t + \Delta t) + m(t) \cdot v(t + \Delta t) - m(t) \cdot v(t)}{\Delta t} \right] \\
 &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[v(t + \Delta t) \cdot \left(\frac{m(t + \Delta t) - m(t)}{\Delta t} \right) + m(t) \cdot \left(\frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} \right) \right] \\
 &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [v(t + \Delta t)] \cdot \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{m(t + \Delta t) - m(t)}{\Delta t} \right] + m(t) \cdot \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} \right] \\
 &= v(t) \cdot \dot{m}(t) + m(t) \cdot \dot{v}(t)
 \end{aligned}$$

014. Anhang 4: Beweis zur Formel von Euler

Funktionen können in Form einer sogenannten Taylorreihe entwickelt werden. Für eine Funktion $f(x)$ lässt sich schreiben:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} \cdot (x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!} \cdot (x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} \cdot (x - x_0)^n + R_n$$

(Eq.A8)

R_n heisst das Restglied von Lagrange. Die Taylorreihe ergibt sich für $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = 0$. Für die Entwicklung der Sinusfunktion um die Stelle $x_0 = 0$ resultiert:

$$\begin{aligned} \sin x &= \sin(x_0) + \frac{d}{dx} [\sin(x)]_{x=0} \cdot (x - x_0) + \frac{d^2}{dx^2} [\sin(x)]_{x=0} \cdot \frac{(x - x_0)^2}{2} + \dots \\ &= \sin(0) + \cos(0) \cdot x - \sin(0) \cdot \frac{x^2}{2!} - \cos(0) \cdot \frac{x^3}{3!} + \dots \\ &= x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots \end{aligned}$$

Für die Cosinus-Funktion ergibt sich bei Entwicklung um $x_0 = 0$:

$$\begin{aligned} \cos x &= \cos(x_0) + \frac{d}{dx} [\cos(x)]_{x=0} \cdot (x - x_0) + \frac{d^2}{dx^2} [\cos(x)]_{x=0} \cdot \frac{(x - x_0)^2}{2} + \dots \\ &= \cos(0) - \sin(0) \cdot x - \cos(0) \cdot \frac{x^2}{2!} + \sin(0) \cdot \frac{x^3}{3!} + \dots \\ &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \end{aligned}$$

Als nächstes soll $f(x) = e^{ix}$ in einer Taylorreihe entwickelt werden (mit $i^2 = -1$):

$$\begin{aligned} e^{ix} &= e^{ix_0} + \frac{d}{dx} [e^{ix}]_{x=0} \cdot (x - x_0) + \frac{d^2}{dx^2} [e^{ix}]_{x=0} \cdot \frac{(x - x_0)^2}{2} + \dots \\ &= e^{i \cdot 0} + i e^{i \cdot 0} \cdot x + i^2 e^{i \cdot 0} \cdot \frac{x^2}{2!} + i^3 e^{i \cdot 0} \cdot \frac{x^3}{3!} + i^4 e^{i \cdot 0} \cdot \frac{x^4}{4!} + i^5 e^{i \cdot 0} \cdot \frac{x^5}{5!} + \dots \\ &= 1 + ix - \frac{x^2}{2!} - i \cdot \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + i \cdot \frac{x^5}{5!} - \frac{x^6}{6!} - i \cdot \frac{x^7}{7!} + \dots \end{aligned}$$

mit $i^3 = -i$, $i^4 = (-1)^2 = +1$, $i^5 = i \cdot i^4 = i$ etc. Durch sortieren nach Termen mit geraden und ungeraden Potenzen resultiert:

$$\begin{aligned} e^{ix} &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots + i \cdot \left[x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots \right] \\ &= \cos x + i \sin x \end{aligned} \tag{Eq.A9}$$

Durch einsetzen von $x = \pi$ ergibt sich daraus auch die fundamentale Beziehung:

$$e^{i\pi} = -1 \tag{Eq.A10}$$

Die Beziehung Eq.A9 ist in der Physik wichtig, da Schwingungs- und Wellenfunktionen geschrieben werden können als:

$$u(x, t) = \hat{u} \cdot e^{i(kx - \omega t)} \tag{Eq.A11}$$

Der Vorteil dieser Schreibweise liegt bei den einfachen Rechenregeln für Exponentialfunktionen.

020 Strukturen und Definitionen in der Physik

021. Anhang 11: Die Festlegung der SI- Einheiten

Die SI- Einheiten (Système International des Unités bzw. International System of Units) können aufgrund von sieben festgelegten Konstanten definiert werden:

1. Die Hyperfeinaufspaltung des Grundzustandes in einem ^{133}Cs – Atom entspricht exakt einer Frequenz von 9192631770 Hz.
2. Die Lichtgeschwindigkeit in Vakuum ist exakt 299792458 m/s (→ Abschnitt 852)
3. Die Plancksche Konstante h ist exakt 6.62606×10^{-34} Js (→ Abschnitt 931)
4. Die Elementarladung e ist exakt 1.60217×10^{-19} C (→ Abschnitt 932)
5. Die Boltzmann-Konstante ist exakt 1.38065×10^{-23} J/K (→ Abschnitt 711)
6. Die Avogadro-Konstante N_A ist exakt 6.02214×10^{23} mol $^{-1}$ (→ Abschnitt 711)
7. Die Lichtausbeute einer monochromatischen Strahlungsquelle bei $540 \cdot 10^{12}$ Hz ist exakt 683 lm/W

Daraus lassen sich folgende Definitionen für sieben Basiseinheiten ableiten:

1. Die Sekunde s ist die Einheit der Zeit: $[t] = \text{s}$. Die Sekunde lässt sich durch die Frequenz der Hyperfeinaufspaltung des Grundzustandes in einem ^{133}Cs – Atom bei einer Temperatur von 0 K definieren: $\nu = 9192631770 \text{ s}^{-1}$.
2. Der Meter m ist die Einheit der Länge: $[s] = \text{m}$. Es ist durch die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum definiert, wenn diese in m/s ausgedrückt wird (also $c = 299792458 \text{ m/s}$).
3. Das Kilogramm kg ist die Einheit der Masse: $[m] = \text{kg}$. Es lässt sich über die Planck-Konstante definieren: $h = 6.62606 \times 10^{-34} \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}$

4. Das Ampère A ist die Einheit der elektrischen Stromstärke: $[I] = \text{A}$. Es lässt sich definieren durch die Elementarladung $e = 1.60217 \times 10^{-19} \text{ C} = 1.60217 \times 10^{-19} \text{ As}$.

5. Das Kelvin K ist die Einheit der thermodynamischen Temperatur: $[T] = \text{K}$. Es lässt sich über die Boltzmann-Konstante definieren:
 $k = 1.38065 \times 10^{-23} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 / (\text{K} \cdot \text{s}^2)$

6. Das Mol mol ist die Einheit für die Menge einer Substanz eines definierten Stoffes: $[N] = \text{mol}$. Es ist über die Avogadro-Konstante definiert: $N_A = 6.02214 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

7. Das Candela cd ist die Einheit der Lichtstärke: $[I] = \text{cd}$. Sie lässt sich über die Lichtausbeute einer monochromatischen Strahlungsquelle bei $540 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$ definieren, diese ist exakt $683 \text{ lm/W} = 683 \text{ cd} \cdot \text{sr} \cdot \text{s}^3 / (\text{m}^2 \cdot \text{kg})$. Dabei ist zu beachten, dass die Einheit lumen (lm) die Einheit für den Lichtstrom darstellt. Der Lichtstrom ist definiert als die von einer Strahlungsquelle abgegebene Strahlungsleistung, gewichtet mit der spektralen Empfindlichkeit des menschlichen Auges. Die Lichtstärke bezeichnet den in Richtung des Raumwinkels Ω abgestrahlte Lichtstrom. Die Leuchtdichte bezeichnet den Lichtstrom pro Fläche, als cd/m^2 und ist ein Mass für die wahrgenommene Helligkeit.