

**TEIL 1**

Nachdenken/Nachlesen: Ein berühmtes Einstein-Zitat lautet: ‘Gott würfelt nicht’. In welchem Zusammenhang hat er dies gesagt? Ist die Aussage richtig?

**1. Vorbemerkungen**

Ziel des Kurses ist, sowohl die Mikrowelt zu beschreiben, also auch in die konzeptionell neue Theorie der Quanten einzuführen.

In dieser Vorlesungsreihe werden die Begriffe Quantentheorie, Quantenphysik und Quantenmechanik nicht unterschieden.

**1.1. Quantenphänomene**

Bis Ende des 19. Jahrhunderts konnte die ‘klassische Physik’ eine Vielzahl von Phänomenen quantitativ erklären, ohne etwas von Quantenphysik zu erahnen. Der Grund liegt darin, dass diese nur dann ‘direkt sichtbar’ wird, wenn das Plancksche Wirkungsquantum

$$\boxed{h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 4.13 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}} \quad (1)$$

**nicht** klein ist im Vergleich zu charakteristischen Größen des Systems, die die Dimension einer Wirkung haben. Im Grenzfall  $h \rightarrow 0$  geht die Quantenphysik in die klassische Physik über.

In periodischen mechanischen Systemen der Periode  $T$  ist die mit der Planckschen Konstante zu vergleichende Wirkung von der Größenordnung  $E \cdot T$ , wenn  $E$  die gesamte mechanische Energie ist (Vorsicht Nullpunkt!).

*Beispiele:*

a) *Erdbewegung um Sonne:*

$$S = E \cdot T \sim m_E \omega^2 r_{ES}^2 \cdot T \sim m_E r_{ES}^2 / T \sim 10^{40} \text{ J s} \sim 10^{73} \cdot h$$

*(Kinetische und potentielle Energie sind von der gleichen Größenordnung!)*

b) *Kleine Kugel schwingt an Spiralfeder (!):*

$$S = E \cdot T \sim 1 \text{ J} \cdot 1 \text{ s} \sim 10^{33} \cdot h$$

c) *Wasserstoffatom im Grundzustand: Elektron+Proton im Abstand  $r \sim 10^{-10} \text{ m}$ :*

$$S = E \cdot T \sim E_p \cdot T \sim \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot T$$

Die Umlaufzeit kann man aus der Gleichgewichtsbedingung zu

$$T^2 = \frac{16\pi^3 \epsilon_0 m_e r^3}{e^2}$$

bestimmen. Einsetzen der Elementarladung  $e$ , der Elektronmasse  $m_e$  etc. liefert:

$$S \sim \frac{\sqrt{\pi} e}{\sqrt{\epsilon_0}} \cdot \sqrt{m_e r} \sim 10^{-33} \text{ J s} \approx h$$

Der mikroskopische Aufbau der Materie wird also von der Quantenphysik bestimmt.

Trotzdem ist aber die Quantenmechanik auch in unserer makroskopischen Welt von fundamentaler Bedeutung. Ohne sie wären Atome instabil, können wir weder die Schwarzkörperstrahlung einer Glühlampe noch die Linienspektren einer Gasentladung verstehen, und auch der schon im Altertum bekannte Magnetismus kann nicht erklärt werden.

Alle makroskopischen Substanzeigenschaften, die im 19. Jahrhundert empirisch-phänomenologisch behandelt wurden, sind eine Folge der Quantenmechanik: Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, Dichte, elektrische Leitfähigkeit ...

Die Quantentheorie ist die Grundlage aller Theorien der Teilchen und ihrer Wechselwirkungen. Sie findet Anwendung in allen Disziplinen der Physik, von der Elementarteilchenphysik bis zur Kosmologie. In der Erweiterung Quantenfeldtheorie sind sowohl Teilchen als auch Felder 'quantisiert' (Photon) und können 'vernichtet' und 'erzeugt' werden. Moderne Experimente haben die Voraussagen von quantenmechanischen Berechnungen mit einer Genauigkeit von bis zu  $10^{-12}$  bestätigt.

*Beispiel:*

*magnetisches Moment des Elektrons:*

$$\begin{aligned} \mu/\mu_B(\text{Theorie}) &= 1.001159652149 \pm 0.000000000028 \\ \mu/\mu_B(\text{Experiment}) &= 1.001159652186 \pm 0.000000000004 \end{aligned}$$

Heute kann man quantenmechanische Effekte auch gezielt nutzbringend einsetzen, z.B. in der Messtechnik: Josephson-Effekt, quantisierter Hallwiderstand, Interferometrie (!) ...

Phänomenologisch macht sich die Quantenphysik insbesondere durch die Quantisierung (!) von Materie (Atome) und Energie (Spektren) und die Zufälligkeit (Radioaktivität) bemerkbar.

Da wir mit unseren Sinnen keinen direkten Zugang zu quantenmechanischen Vorgängen haben, ist diese Theorie nicht 'anschaulich', sondern erscheint oft befremdlich und paradox. Viele fundamentale Erkenntnisse sind deshalb erst in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts gewonnen worden, obwohl die Grundlagen schon in den 20er Jahren gelegt worden waren, z.B. die Bellsche Ungleichung .

## **1.2. Geschichtlicher Überblick**

Meilensteine der Atom- und Quantenphysik (Experimente E, Theorie T, Phänomenologie P) bis 1950:

-400	T	Atommodell von Demokrit
1808	E,P	Dalton: Gesetz der konstanten Proportionen in der Chemie
1811	E,T	Gasgesetze, kinetische Gastheorie von Avogadro u. a.
1868	P	Mendelejew: Periodensystem
1885	P	Balmer-Formel für Wasserstoff-Spektrallinien
1896	E	Becquerel: Radioaktivität
1897	E	Thomson: Elektron identifiziert durch $q/m$
1900	T	Plancksches Strahlungsgesetz
1905	T	Erklärung des Photoeffektes durch Einstein
1911	E	Millikan: Ladungsquantelung
1911	E	Rutherford-Streuung: Atomkern
1913	T	Bohrsches Atommodell
1922	E	Stern und Gerlach: Elektronspin
1926	T	Schrödinger-Gleichung
1927	T	Heisenbergsche Unschärferelation.
1928	T	Dirac-Gleichung (relativistisch): Anti-Elektron
1932	E	Positron-Nachweis in Nebelkammer durch Anderson
1948	T	Quantenelektrodynamik (Elektronen $\leftrightarrow$ Photonen)

Als Geburtsjahr der Quantentheorie gilt das Jahr 1900, in dem Planck die spektrale Energiedichte der Hohlraumstrahlung mit einer Quantisierungshypothese berechnete und die nach ihm benannte Konstante  $h$  einführte. Die zu erklärenden experimentellen Daten waren schon einige Jahre früher gesammelt worden.

Im folgenden wird - von einigen 'Abstechern' abgesehen - der Stand der Physik am Anfang des 20. Jahrhunderts wiedergegeben. Dieses Wissen war also die Grundlage für die Entwicklung der Quantentheorie.

## 2. Atome

Heute wissen wir, dass alle Materie aus **Atomen** besteht, die etwa  $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA}$  (Angström) groß und keineswegs unteilbar sind. Wir versuchen sie uns unter Zuhilfenahme klassischer Modellvorstellungen so zu veranschaulichen: Sie sind aus einem sehr kleinen (näherungsweise punktförmigen), schweren, positiv geladenen **Kern** aus herumfliegenden **Elektronen** mit insgesamt exakt der gleichen (aber negativen) Ladung aufgebaut. Den Zusammenhalt bewirkt die elektromagnetische Wechselwirkung. Die Elektronen sind sehr leicht; die Atommasse ist im wesentlichen gleich der Kernmasse. Der Kern besteht aus **Nukleonen**, deren zwei Ladungsvarianten **Neutron** und **Proton** etwa die gleiche Masse  $m_N = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 931 \text{ MeV}/c^2$  haben. Proton und Elektron tragen eine (negative) Elementarladung.

Terminologie:

$Z$  = Zahl der Protonen = **Ordnungszahl** = Zahl der Elektronen im neutralen Atom

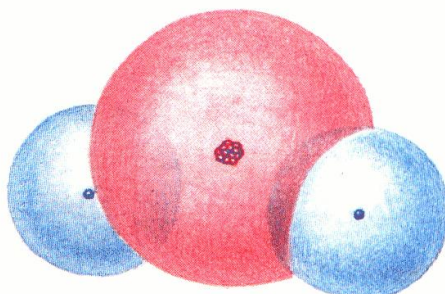
$N$  = Zahl der Neutronen

$A = Z+N$  = Zahl der Nukleonen = **Massenzahl** = **Atomgewicht**

In guter Näherung gilt für die Atommasse:

$$m_{\text{Atom}} \approx m_{\text{Kern}} \approx Z \cdot m_p + N \cdot m_n \approx A \cdot m_N \quad (2)$$

Wesentliche Atomeigenschaften sind also durch ganze Zahlen beschreibbar!



Atome können sich zu Molekülen oder Festkörpern chemisch verbinden. Relevant ist hier einzig die Atomhülle, so dass die chemischen Eigenschaften durch  $Z$  bestimmt werden.

Das leichteste und einfachste ist das Wasserstoffatom mit  $A = Z = 1$ . Große Kerne sind instabil, daher ist  $Z$  auf etwa 100 nach oben beschränkt. Die Zahl der Neutronen und Protonen ist bei größeren Kernen etwa gleich.

IA																		VIII									
1 H Hydrogen 1.00794																		2 He Helium 4.002602									
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012182	<b>PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS</b>																5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.00674	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.9984032	10 Ne Neon 20.1797				
11 Na Sodium 22.989768	12 Mg Magnesium 24.3050																	13 Al Aluminum 26.981539	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosph. 30.973762	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.4527	18 Ar Argon 39.948				
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955910	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Mangan. 54.93805	26 Fe Iron 55.847	27 Co Cobalt 58.93320	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge German. 72.61	33 As Arsenic 74.92159	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.80										
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybd. 95.94	43 Tc Technet. (97.9072)	44 Ru Ruthen. 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.757	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29										
55 Cs Cesium 132.90543	56 Ba Barium 137.327	57-71 Lanthanides	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.9479	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.08	79 Au Gold 196.96654	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98037	84 Po Polonium (208.9824)	85 At Astatine (209.9871)	86 Rn Radon (222.0176)										
87 Fr Francium (223.0197)	88 Ra Radium (226.0254)	89-103 Actinides	104 (Rf) Ruther. (261.1089)	105 (Ha) Hahnium (262.1144)	106 Sg Seaborg. (263.1186)	107 Ns Nielsbohr. (262.1231)	108 Hs Hassium (265.1306)	109 Mt Meitner. (266.1378)																			
57 La Lanthan. 138.9055	58 Ce Cerium 140.115	59 Pr Praseody. 140.90765	60 Nd Neodym. 144.24	61 Pm Prometh. (144.9127)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.965	64 Gd Gadolin. 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dyspros. 162.50	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967	Lanthanide series												
89 Ac Actinium (227.0278)	90 Th Thorium 232.0381	91 Pa Protactin. 231.03588	92 U Uranium 238.0289	93 Np Neptunium (237.0482)	94 Pu Plutonium (244.0642)	95 Am Americ. (243.0614)	96 Cm Curium (247.0703)	97 Bk Berkelium (247.0703)	98 Cf Californ. (251.0796)	99 Es Einstein. (252.0830)	100 Fm Fermium (257.0951)	101 Md Mendel. (258.0984)	102 No Nobelium (259.1011)	103 Lr Lawrenc. (262.1098)	Actinide series												

Elektronen der Atomhülle können von außen energetisch angeregt werden; dadurch entstehen **Ionen** oder **angeregte Atome**, die durch Lichtaussendung wieder in den **Grundzustand** übergehen.

Im folgenden werden grundlegende Experimente zum Nachweis der Atome und zur Messung atomarer Größen rekapituliert.

## 2.1. Reaktionschemie

Messungen der Massen der bei chemischen Reaktionen verbrauchten Substanzen im 18. Jahrhundert lieferten die Grundlage für das **‘Gesetz der konstanten Proportionen’**, das John Dalton 1808 formulierte:

“Das *Massenverhältnis* der verbrauchten Reaktanden ist bei einer bestimmten chemischen Reaktion *konstant*.”

Beispiel:

1 kg Manganoxid Mn O:

$m_1 = 0.7744 \text{ kg}$  (Mangan Mn),

$m_2 = 0.2256 \text{ kg}$  (Sauerstoff O<sub>2</sub>).

Verhältnis

$$r = \frac{m_1}{m_2} = 3.43 \left[ = \frac{55}{16} \right]$$

Man beobachtet auch das Entstehen von Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MnO<sub>2</sub> etc., wobei die Sauerstoffmassenanteile wie die Mengenanteile, also wie 2:3:4 ... anwachsen.

Dalton bezog alle Massen auf Wasserstoff und führte das Atomgewicht<sup>1</sup> ein. Er folgerte:

- Alle chemischen Elemente bestehen aus chemisch unteilbaren Atomen
- Alle Atome eines Elementes sind gleich.
- Bei einer chemischen Verbindung treten ganzzahlige *Mengenverhältnisse* auf.

Ferner stellte man fest (William Prout, 1815), dass das Verhältnis in der Regel durch kleine *ganze* Zahlen beschrieben werden kann.

Beispiel:

a) 1 kg Wasser H<sub>2</sub>O:

$m_1 = 0.889 \text{ kg}$  (Sauerstoff O<sub>2</sub>),

$m_2 = 0.111 \text{ kg}$  (Wasserstoff H<sub>2</sub>).

Verhältnis

$$r = \frac{m_1}{m_2} = \frac{8}{1} \left[ = \frac{16}{2 \cdot 1} \right]$$

Im vorherigen Beispiel ist das ganzzahlige Verhältnis nicht so leicht zu identifizieren...

Bemerkungen:

- Direkter können die *Mengenverhältnisse* über die Gasvolumina der Reaktionspartner bestimmt werden, s. u. Joseph-Louis Gay-Lussac kam etwa zur gleichen Zeit wie Dalton aufgrund von Experimenten mit Gasen zu ähnlichen Ergebnissen.
- die Ganzzahligkeit der *Massenverhältnisse* ist eine Konsequenz auch des Kernaufbaus (Kernmasse = A · Nukleonmasse)!

## 2.2. Gaskinetik

Die allgemeine Gasgleichung

$$pV = N_A k T \quad (3)$$

wurde zu Beginn des 19. Jahrhunderts aufgestellt. Sie gilt bei hohen Temperaturen für *alle* Gase, unabhängig von der Art der Gasteilchen! Amadeo Avogadro postulierte 1811, dass die kleinsten Gasteilchen Moleküle sind. Die **Avogadrokonstante**  $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$  gibt die **feste** Zahl der Moleküle in einem **Mol** eines Gases an, definiert durch das **Molvolumen** von 22.4 l bei Standardbedingungen. Man beachte:  $N_A \cdot m_N = 1 \text{ g}$ ; das Mol ist also so definiert, dass 1 Mol atomares Wasserstoffgas eine Masse von 1 g besitzt, für schwerere Kerne tritt ein Faktor *A* hinzu, bei Molekülen muss man die zugehörigen Atomgewichte addieren.

<sup>1</sup>Heute: Relative Atommassen werden auf 1/12 des Kohlenstoffatoms (mit A=12) bezogen

Die Herleitung des Gasgesetzes erfolgte mit einem Modell punktförmiger Teilchen (Atome), unterstützt also die Atomhypothese.

### 2.3. Messungen der Atomgröße

Die wichtigste Frage ist die nach der Größe  $r$  ('Radius') der Atome.

Da man sie offenbar nicht direkt sehen kann, auch nicht unter dem Mikroskop, müssen sie klein sein ( $r < 1 \mu\text{m}$ ).

Hier werden verschiedene Methoden zur Messung von  $r$  angedeutet:

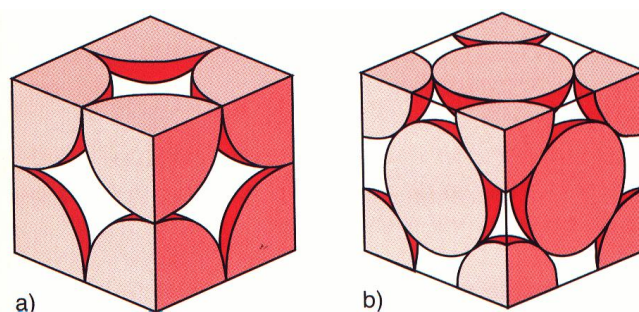
a) Eng verbunden ist die Frage nach der Zahl der Atome pro Volumen bzw. pro Molvolumen; das ist die Avogadrokonstante  $N_A$ ! Diese kann man z.B. mit Hilfe der Elektrolyse bestimmen, wenn man die Elementarladung kennt. In einem dicht gepackten Festkörper oder einer Flüssigkeit gilt dann unter Annahme kugelförmiger Atome:

$$\frac{4\pi}{3} r^3 = \frac{M_M}{\rho N_A} \quad (4)$$

$M_M$  bezeichnet die Molmasse und  $\rho$  ist die spezifische Dichte des Stoffes. Man findet  $r \sim 10^{-10} \text{ m}$ .

b) Van-der-Waals-Gleichung für reale Gase. Die Größe  $b$  im Korrekturterm  $V \rightarrow V - b \cdot N$  ist ein Maß für das Eigenvolumen der Moleküle.

c) Röntgenbeugung an Kristallen. Man bestimmt den Abstand  $a$  der Gitterzellen, den kleinsten Einheiten des Festkörpers. Die Kristallstruktur bestimmt den exakten Zusammenhang zwischen  $a$  und  $r$ : Nobelpreise: Max von Laue 1914, William Henry and William Lawrence Bragg (Vater und Sohn)



1915.

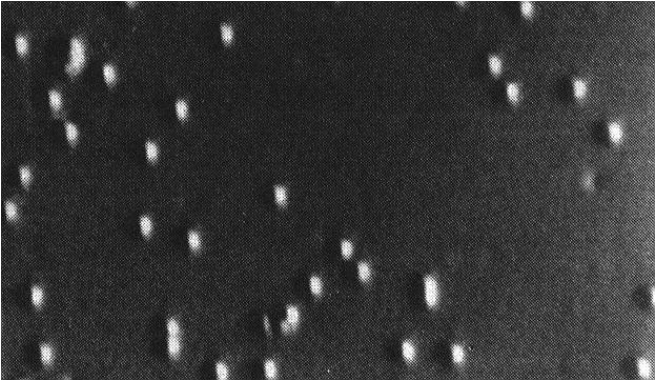
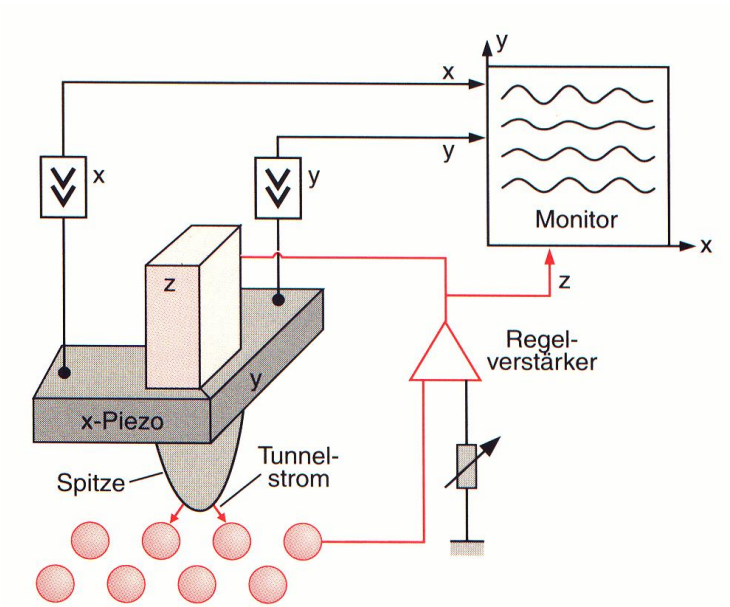
d) Das in den 80er Jahren des 20. Jahrhunderts entwickelte Rastertunnelmikroskop<sup>2</sup> erlaubt es, Oberflächen abzutasten und so einzelne Atome sichtbar zu machen: Die Spannung zwischen Spitze und Oberfläche lässt bei Abständen im Angström-Bereich einen messbaren Strom fließen. Gerd Binnig und Heinrich Rohrer erhielten 1986 dafür den Nobelpreis.

*Beispiel:*

*Xenon-Atome auf Nickeloberfläche*

### 2.4. Strahlung von Atomen

<sup>2</sup>Der Tunneleffekt ist ein quantenmechanisches Phänomen, s. spätere Vorlesungen



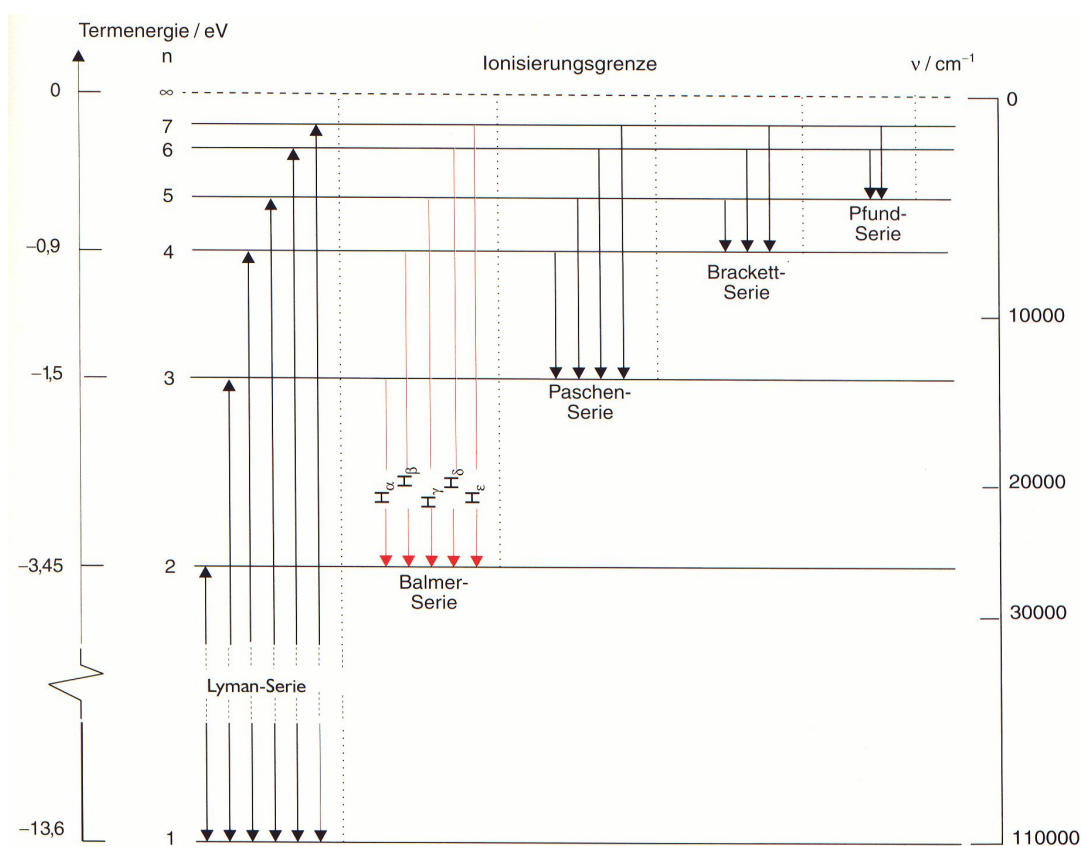
### 2.4.1. Gase

Gasatome kann man durch Stöße oder Einstrahlen von Licht anregen. Im Absorptionsspektrum und im Emissionsspektrum findet man die gleichen diskreten Spektrallinien.

**VERSUCH:** Linienspektren (Prisma und/oder Gitter)

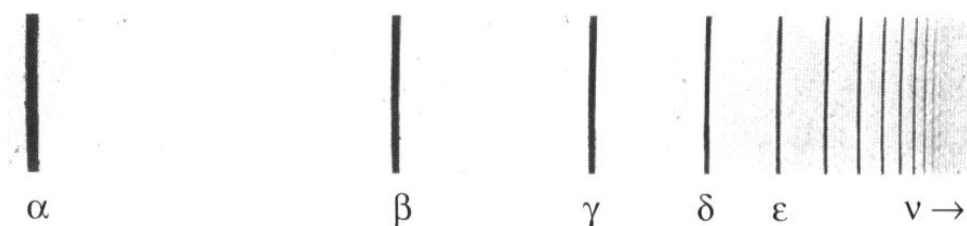
*Beispiel: atomarer Wasserstoff:*

*Termschema (Energieniveaus): Die verschiedenen 'Serien' sind nach ihren Entdeckern benannt. Rechts*



*ist die inverse Wellenlänge aufgetragen. Man beachte den 'Bruch' in der Skala!*

*Besonders wichtig ist die im Sichtbaren liegende Balmer-Serie :*



Die Größenordnungen der auftretenden Energiedifferenzen und Wellenlängen sind also 1 eV bzw. 1 μm.



Balmer fand 1888 eine empirische Formel für die beobachteten Wellenlängen:

$$\frac{1}{\lambda_{12}} = Ry \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots \quad n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots \quad (5)$$

Diese Balmer-Formel kann die Messungen sehr gut reproduzieren.

$$Ry = 109678/\text{cm} \quad (6)$$

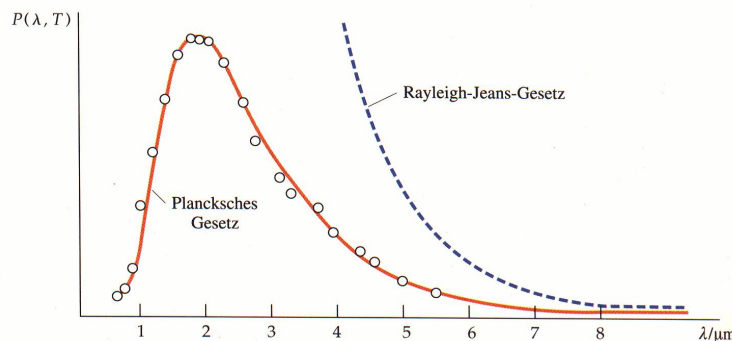
ist die Rydbergkonstante. Diese diskreten Spektren sind unabhängig von der Wärmebewegung<sup>3</sup> und offenbar eine Eigenschaft der einzelnen Atome.

Beachte: Balmer kannte noch nicht den (quantenmechanischen) Zusammenhang zwischen Energien und Wellenlänge bzw. Frequenz, wie er in obiger Abbildung verwendet wird!

Verstehen konnte man diese Resultate seinerzeit nicht. Warum sollte es diskrete Spektren geben? Woher kommt die Balmer-Formel? Warum gibt es einen stabilen Grundzustand, in dem das Atom nicht strahlt?

### 2.4.2. Festkörper

Die von heißen Festkörpern ausgesandte Strahlung (Schwarzkörperstrahlung, Hohlraumstrahlung) hat ganz andere Eigenschaften. Das Wellenlängenspektrum ist kontinuierlich:



Aber auch dies konnte man nicht verstehen. Die klassische Thermodynamik führt auf die als Rayleigh-Jeans-Gesetz bezeichnete spektrale Energiedichte (Energie pro Volumen und Wellenlänge)

$$\rho_{\lambda}(\lambda, T) = \frac{8\pi k T}{\lambda^4} \quad (7)$$

für die Hohlraumstrahlung, die bei kleinen Wellenlängen divergiert (Ultraviolett katastrophe).

Geht man davon aus, dass auch Festkörper aus Atomen bestehen, muss man folgern, dass dieses Spektrum durch Zusammenwirken aller Atome zustande kommt.

<sup>3</sup>bis auf eine Dopplerverschmierung