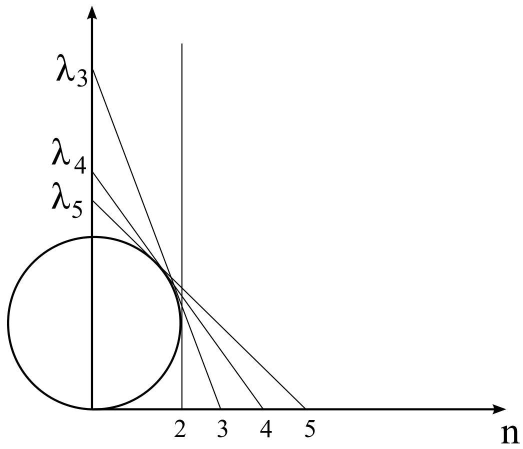
Theoretische Physik
Serie 7

Übung 7.1 Balmer'sche Formel

Diese Aufgabe ist nicht mehr als eine verzichtbare Kuriosität zum Ursprung der Formel

$$\omega_{mn} \propto \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \tag{1}$$

($n, m = 1, 2, \ldots, n > m$) für die Spektrallinien des H-Atoms. Der Mathematik- und Zeichenlehrer Balmer trug die beobachteten Wellenlängen $\lambda_n = \lambda_{mn}$ für $m = 2$, $n = 3, 4, 5, 6$ als Strecken auf einer Geraden ab (vertikal in der Figur). In der resultierenden Anordnung erkannte er folgende geometrische Konstruktion wieder:



Sie war ihm bekannt, weil sie die Grösse λ_n einer kreisförmigen Säule und deren Durchmesser $2m$ aus der Perspektive eines Betrachters im Abstand n in Verbindung bringt. Zeige, dass die Konstruktion mit (1) übereinstimmt, und verallgemeinere sie dabei gleich auf beliebiges, aber festes m.

Übung 7.2 Sommerfeld-Quantisierung und Korrespondenzprinzip

a) Das Wasserstoff-Atom wird als ein Kepler-Problem mit dem Coulomb-Potential $V(r) = -e^2/r$ genähert. Aus den verallgemeinerten Quantenbedingungen $W_k = 2\pi\hbar n_k$, ($k = r, \theta, \varphi$: Kugelkoordinaten, sehe (6)) herleite den Drehimpuls $\vec{L}$, das Quadrat L^2 und die Energie E von gebundenen Bahnen (d.h. $E < 0$) als Funktion von (n, l, n_φ) wobei $l \equiv n_\varphi + n_\theta$ und $n \equiv n_r + l$. Gebe die gesamte Entartung der Energie E_n, wenn n festgelegt ist.

b) Zeige, dass das Korrespondenzprinzip gilt: Nämlich, dass die klassische Schwingungsfrequenz $\omega(n)$ annähernd mit der Bohrschen Frequenz $\hbar^{-1}(E(n) - E(n-1))$ übereinstimmt. Voraussetzung der Näherung ist $d^2E/dn^2 \ll dE/dn$.

Hinweis: Berechne die (klassische) Periode $T(E)$ der Bahn und zeige

$$\omega(n) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dn}\,.$$

Wiederholung und Ergebnisse für das Kepler-Problem: (aus QMI § 1.4 von G. M. Graf.) Eine gebundene Bahn eines Hamiltonschen System $H = p^2/2m + V(q)$ mit einem Freiheitsgrad ist durch seine Energie E charakterisiert, oder stattdessen durch die (reskalierte) Wirkung

$$n := \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p \, dq \tag{2}$$

eine reelle Zahl ≥ 0. Die Bahn ist quantentheoretisch zulässig, falls n eine ganze Zahl ($n = 0, 1, 2, \ldots$) ist.

Beispiele: 1. Sei ein ein-dimensionaler Harmonische Oszillator der Energie $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 q^2$. Die Bahnkurve des Systems ist eine Ellipse im Phasenraum (q, p). Die Wirkung der Bahnkurve ist durch

$$\oint p dq = -\sqrt{2mE}\sqrt{\frac{2E}{m}}\frac{1}{\omega_0}\int_0^{2\pi} \sin^2\theta d\theta = -\frac{2\pi E}{\omega_0} \tag{3}$$

gegeben (mit $q(\theta) = \sqrt{\frac{2E}{m}}\frac{1}{\omega_0}\cos\theta$ und $p(\theta) = \sqrt{2mE}\sin\theta$, also $dq = -\sqrt{\frac{2E}{m}}\frac{1}{\omega_0}\sin\theta d\theta$). Also die Quantenbedingung liefert $E_n = n\hbar\omega_0$.

2. Sei ein Teilchen, dass sich frei längs einem Kreis bewegt (Phasenkoordinaten (φ, p_φ), $0 \leq \varphi < 2\pi$). Der Drehimpuls $p_\varphi = L$ ist erhalten und aus der Wirkung

$$\oint p_\varphi d\varphi = 2\pi L, \tag{4}$$

erhaltet man die Bohr'sche Quantenbedingung: $L_n = \hbar n$.

Die Bedingung (2) lässt sich auf vollständig separable Systeme mit f Freiheitsgraden erweitern: Solche, für welche die zeitunabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung

$$H(q,p) = H\left(q_1, ..., q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, ..., \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E \equiv \alpha_1$$

eine vollständige Lösung der Form

$$S(q_1, ..., q_f, \alpha_1, ..., \alpha_f) = \sum_{k=1}^{f} S_k(q_k, \alpha_1, ..., \alpha_f)$$

besitzt. Dabei sind $(\alpha_1, ..., \alpha_f) = \alpha$ Erhaltungsgrössen. Im $2f$-dimensionalen Phasenraum verläuft die Bewegung auf dem Schnitt von f durch α bestimmte Flächen

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}(q, \alpha) = \frac{\partial S_k}{\partial q_k}(q_k, \alpha), \quad (k = 1, ..., f). \tag{5}$$

Für festes k definiert die Gleichung einen (topologischen) Kreis in der (q_k, p_k)-Ebene, falls die Bewegung beschränkt ist. Die f-dimensionale Schnittfläche ist deren kartesisches Produkt und somit ein Torus. Die Sommerfeld-Bedingung ist anwendbar: Sie zeichnet als erlaubt diejenigen Tori (und nicht spezielle, darin verlaufende Bahnen) aus, für welche

$$W_k(\alpha) := \oint p_k dq_k = 2\pi\hbar n_k, \quad (n_k = 0, \pm 1, \pm 2, ...), \tag{6}$$

für alle $k = 1, ..., f$ wo p_k durch (5) gegeben ist. Dies bestimmt $(\alpha_1, ..., \alpha_f)$ als Funktion der n_k und insbesondere die möglichen Energien $E_{n_1,...,n_f}$.

Anwendung: Das zwei-Körperproblem (Ergebnisse aus der Serie 4). Nach Vernachlässigung der Schwerpunktsbewegung und Verwendung von Kugelkoordinaten (r, θ, φ) für die Relativbewegung

$$\vec{x} = r\vec{e_r}, \quad \dot{\vec{x}} = \dot{r}\vec{e_r} + r\dot{\theta}\vec{e_\theta} + r^2 \sin^2\theta\dot{\varphi}\vec{e_\varphi},$$

lautet deren kinetische Energie

$$T = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2\theta\dot{\varphi}^2),$$

mit kanonischen Impulsen

$$p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta}, \quad p_\varphi = mr^2 \sin^2\theta\dot{\varphi}.$$

Der Drehimpuls ist

$$\vec{L} = m\vec{x} \wedge \vec{p} = p_\theta\vec{e_\theta} - \frac{p_\varphi}{\sin\theta}\vec{e_\theta},$$

also

$$\vec{L} \cdot \vec{e_3} = p_\varphi, \quad \vec{L}^2 = p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta}.$$

Die Hamiltonfunktion lautet

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_r^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\theta}\right) + V(r)$$

und die Hamilton-Jacobi Gleichung

$$\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial S}{\partial \varphi}\right)^2\right]\right\} + V(r) = E \equiv \alpha_1 (= \alpha_r)$$

ist vollständig separabel. Der Ansatz

$$S = S_r(r) + S_\theta(\theta) + S_\varphi(\varphi)$$

führt auf

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S_\varphi}{\partial \varphi} &= \alpha_\varphi \\
\left(\frac{\partial S_\theta}{\partial \theta}\right)^2 + \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2\theta} &= \alpha_\theta^2 \\
\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{\alpha_\theta^2}{r^2} &= 2m(E - V(r)).
\end{aligned}$$

Damit können wir die Wirkungen $W_k(\alpha)$, $(k = r, \theta, \varphi)$ berechnen:

$$\begin{aligned}
W_\varphi(\alpha) &= 2\pi\alpha_\varphi, \\
W_\theta(\alpha) &= 2\int_{\theta_{\min}=\pi-\theta_{\max}}^{\theta_{\max}} \sqrt{\alpha_\theta^2 - \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2\theta}}d\theta = 2\pi(\alpha\theta - \alpha\varphi), \\
W_r(\alpha) &= 2\int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}}dr.
\end{aligned}$$

Übung 7.3 Das Schalenmodell der Atome

Die Sommerfeld-Quantisierung lässt sich strikt nicht auf ein Atom mit mehr als einem Elektron anwenden, da es aufgrund der Wechselwirkungen zwischen ihnen als Hamiltonsches System nicht separabel ist. Näherungsweise stellt man sich jedes Elektron in einem radialen Potential $V(r)$ vor, das nebst der Kernanziehung auch die Abstossung der restlichen Elektronen summarisch beschreibt. Die Energieniveaus eines solchen Elektrons tragen zwei Quantenzahlen $n_r = 1, 2, \cdots$, $l = 0, 1, \cdots$, und sind $(2l+1)$-fach entartet durch Weglassung der Quantenzahl n_φ. Statt n_r wird oft die Quantenzahl $n = n_r + l$ verwendet und die Niveaus mit $E_{n,l}$ bezeichnet. Pauli (1925) formuliert das Ausschlussprinzip:

- Es gibt eine zusätzliche Quantenzahl, die nur zwei Werte annimmt (also: die Entartung von $E_{n,l}$ ist $2(2l+1)$).
- Jeder Quantenzustand (bestimmt durch eine Kombination aller Quantenzahlen) kann nur durch ein Elektron besetzt werden.

Der Grundzustand des Atoms ergibt sich durch sukzessive Besetzung der Quantenzustände nach steigenden Energien $E_{n,l}$. Empirische Regel (Janet 1927, Madelung 1936)

- $E_{n,l}$ wächst mit $n + l$.
- Bei gleichen $n + l$ wächst $E_{n,l}$ mit n.

Ordne die Paare (n, l) in einer Tabelle an. In welcher Reihenfolge werden diese mit Elektronen gefüllt? Bezeichne sie mit n und einem Buchstaben s, p, d, f für $l = 0, 1, 2, 3$ (z.B. $(n = 2, l = 1) = 2$p) und übersetze die Reihenfolge in diese Notation. "Erkläre" ferner die Längen der Zeilen im Periodensystem der Elemente: 2, 8, 8, 18, 18, 32 (im letzten Fall unter Einbezug der Lanthaniden).
Hinweis: Eine neue Zeile beginnt immer dann, wenn erneut Zustände mit $l = 0$ besetzt werden.

Übung 7.4 De Broglie Wellen und Bohrsche Quantisierung

Betrachte ein freies Teilchen auf dem Kreis (Bsp. 2 der Übung 7.2). Verlange, dass seine de Broglie Welle stationär sei. Welche Quantisierungsbedingung erhält man? Vergleiche sie mit der Sommerfelds.

Übung 7.5 Compton-Effekt

Der Compton-Effekt stellt einen direkten Nachweis der Wellen-Teilchen Dualität des Lichts dar: Bei der Streuung von Röngenstrahlen an (ruhenden) Elektronen ändert sich der Impuls der Lichtquanten $\hbar\vec{k} \mapsto \hbar\vec{k}'$ (Teilcheneigenschaft) und der Impuls der Elektron $\vec{p} = \vec{0} \mapsto \vec{p}'$. Zeige, dass die Wellenlänge $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$ der Strahlung (Welleneigenschaft) sich wie folgt

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2} \tag{7}$$

ändert, wobei θ der Winkel zwischen $\vec{k}$ und $\vec{k}'$ ist.
Hinweis: Die relativistische kovariante Beziehung (Einstein 1917) zwischen dem 4er-Implus $(E/c, \vec{p})$ und dem 4er-Wellenvektor $(\omega/c, \vec{k})$ lautet

$$\begin{pmatrix} E/c \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} w/c \\ \vec{k} \end{pmatrix}, \quad \text{bzw. } p^\mu = \hbar k^\mu.$$

Benutzte die Energie-Impuls Erhaltung: $\hbar k^\mu + p^\mu = \hbar k'^\mu + p'^\mu$.

Übung 7.6 Zum Compton-Effekt*

(i) In der Übung 7.5 wurde die Änderung der Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung bei Streuung an einem ruhenden Elektron bestimmt, s. (7). Zugrunde liegt die Vorstellung eines Lichtquants (Photon). Zeige: Falls das Elektron einen anfänglichen Impuls p in Richtung der einfallenden Strahlung hat, so beträgt die Änderung

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar + 2\lambda p}{E/c - p} \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2} \,. \tag{8}$$

(ii) Berechne die Änderung gemäss klassischen Vorstellungen und zeige, dass (8) mit $\hbar = 0$ resultiert.
Hinweis: Für $p = 0$ ist $\lambda' = \lambda$; für $p \neq 0$ passe man das Bezugssystem an.
(iii) Argumentiere qualitativ, worin sich die Ergebnisse aus (ii) und aus (7) experimentell unterscheiden.
Hinweis: Vergleiche die Diskussion des photoelektrischen Effekts.