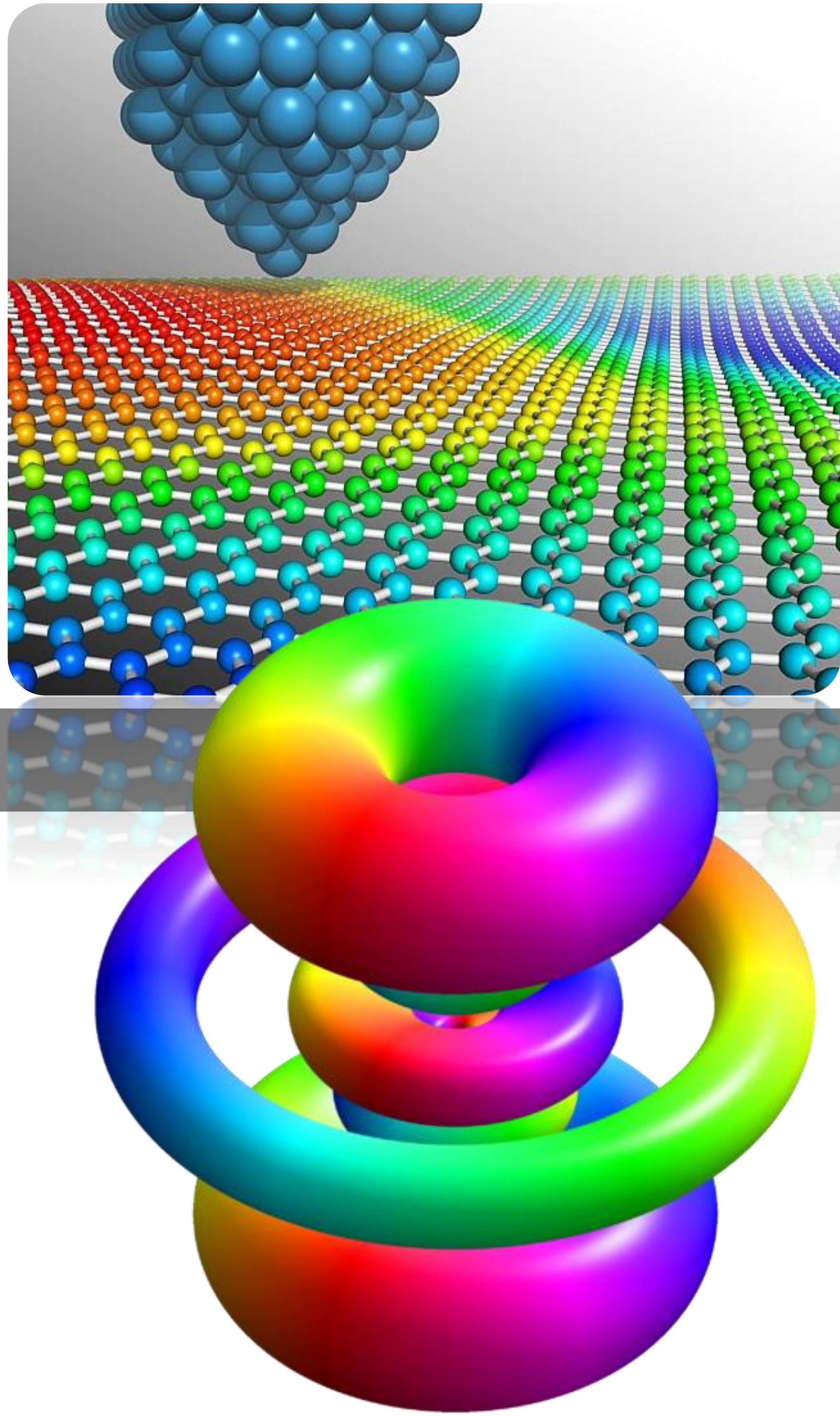
Karlsruher Institut für Technologie

Atome & Kerne

Sommersemester 2019

Vorlesung # 9, 21.05.19



Guido Drexlin, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik

Elemente der Quantenmechanik

- Tunneleffekt
- Rastertunnelmikroskop

Das Wasserstoff-Atom

- QM des H-Atoms (Grundzüge)
- quantisierte Drehimpulse
- Raumquantisierung

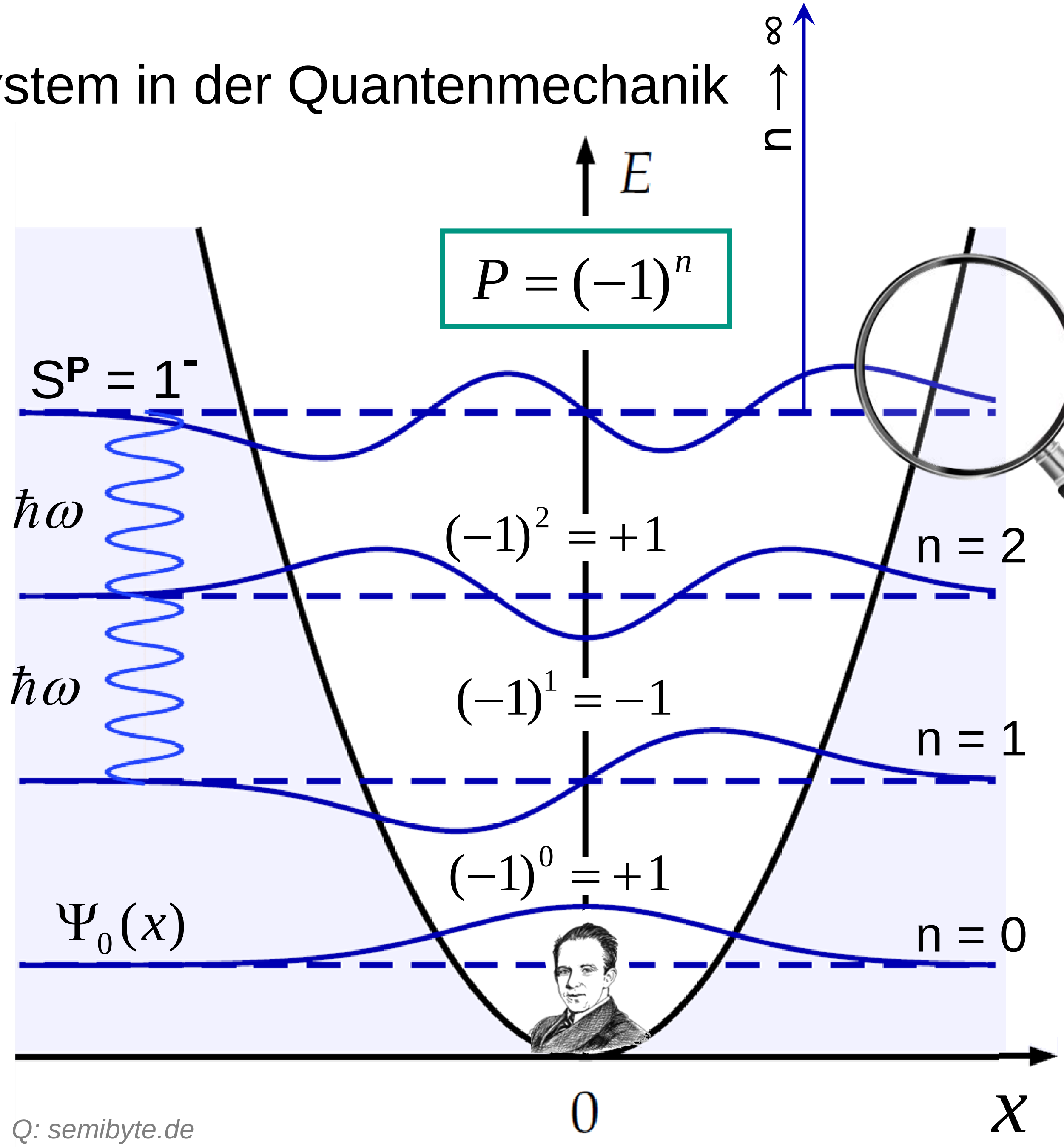
QM-Harmonischer Oszillator

- Grundlegendes System in der Quantenmechanik

Aufenthalts-wahrscheinlichkeit

~ $|\Psi_n(x)|^2$

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)}$$



Tunneln = Eindringen in klassisch verbotene Bereiche

Nullpunktsenergie: $\frac{\hbar\omega}{2}$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Elemente der Quantenmechanik

- Erwin Schrödinger: Gleichung zur QM-Beschreibung von Systemen

Schrödinger-Gleichung

- zeitabhängig:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \cdot \Psi$$

- zeitunabhängig (stationär):

$$\hat{H}\ \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r})$$

Eigenwerte

$\hat{H}$ = Hamilton-Operator

$\Psi(x)$ Eigenfunktion

Messungen in der QM

- Wahrscheinlichkeitsdichte ρ :

$$\rho(\vec{r},t) = |\,\Psi(\vec{r},t)\,|^2$$

- Superpositionsprinzip :

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot \varphi_i(\vec{r},t)$$

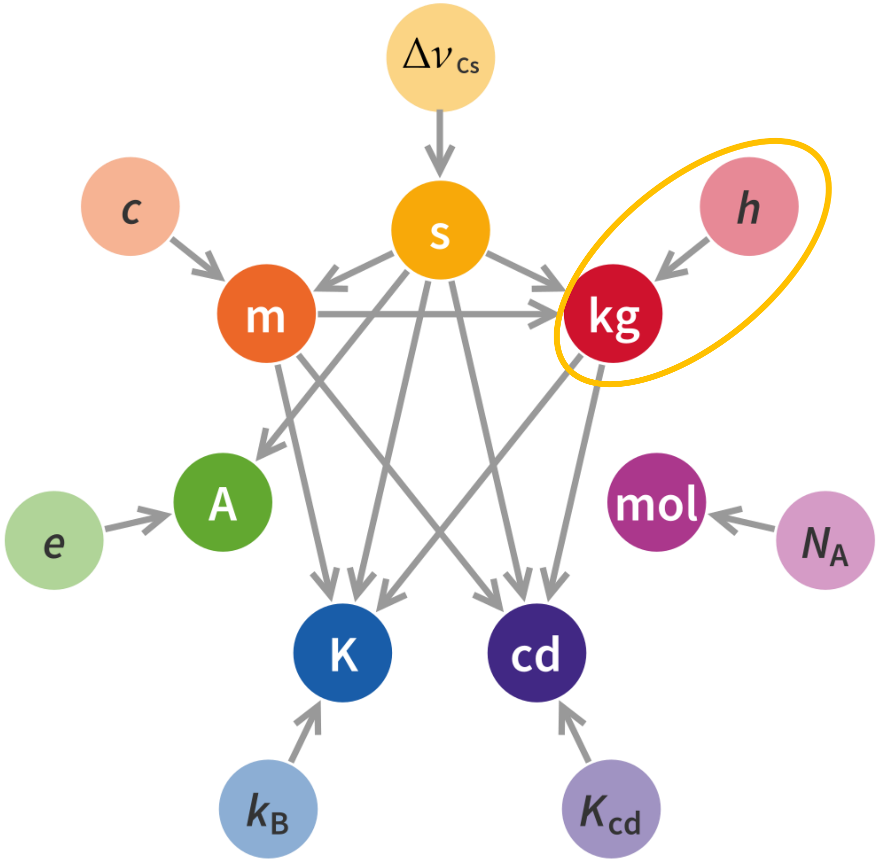
- Interpretationen
  Kollaps
  many worlds
  Dekohärenz

SI Einheiten – das „neue“ Kilogramm

- seit 20.5.2019 – Neudefinition der SI Einheiten

$6.62607015\times10^{-34}\ \mathrm{kg\cdot m^2\cdot s^{-1}}$

AKTUELL



INSTRUMENTATION AND MEASUREMENT | NEWS

New definition of the kilogram comes into force

17 May 2019 Michael Banks

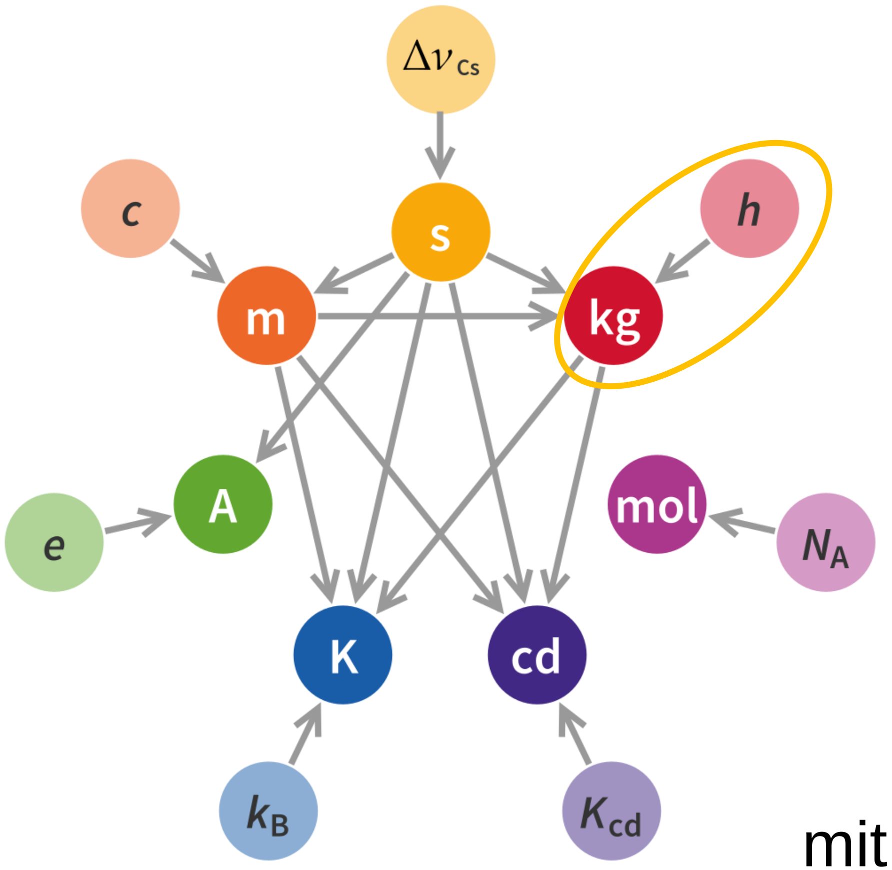
All change: work on the redefinition of the kilogram was carried out using a Kibble balance. (Courtesy: BIPM)

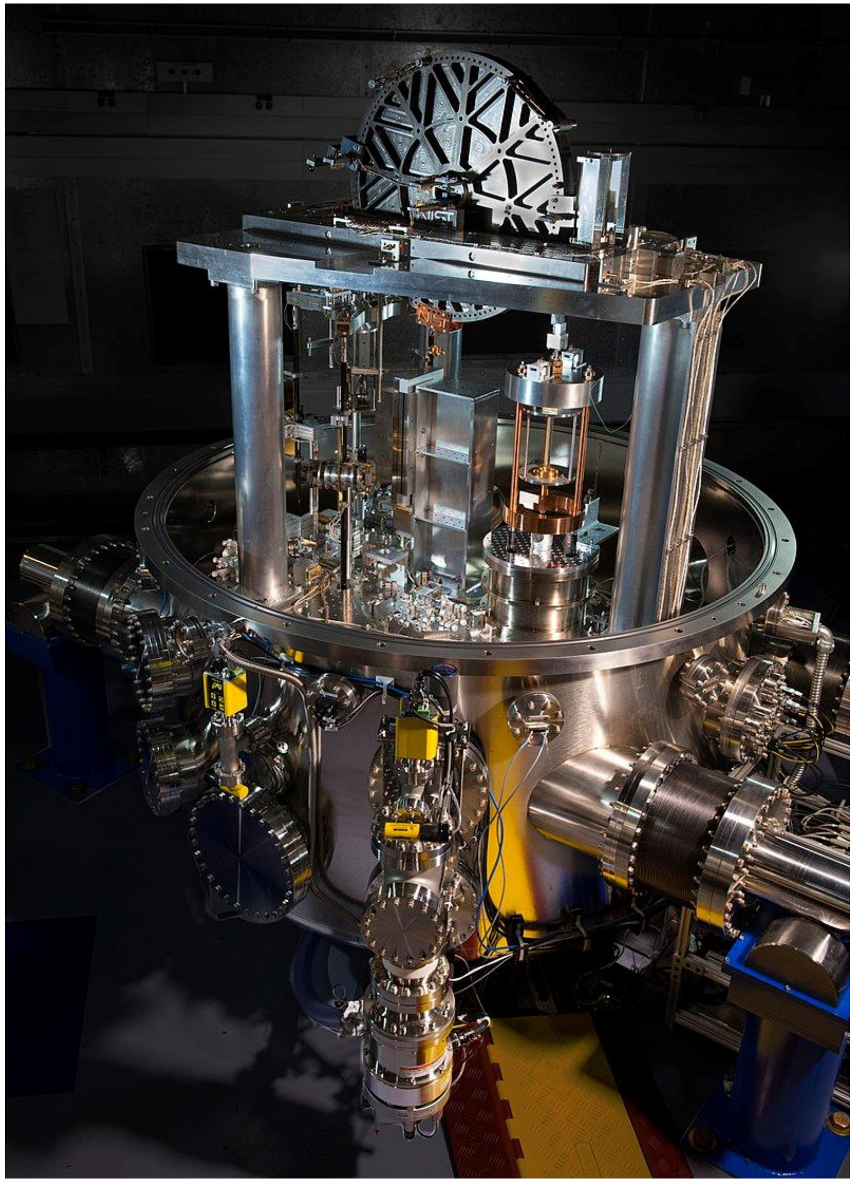
SI Einheiten – kg nun auf Basis von h

- seit 20.5.2019 – Neudefinition der SI Einheiten

  Planck-Konstante auf 9 ppb gemessen

  Neudefinition der SI-Einheiten

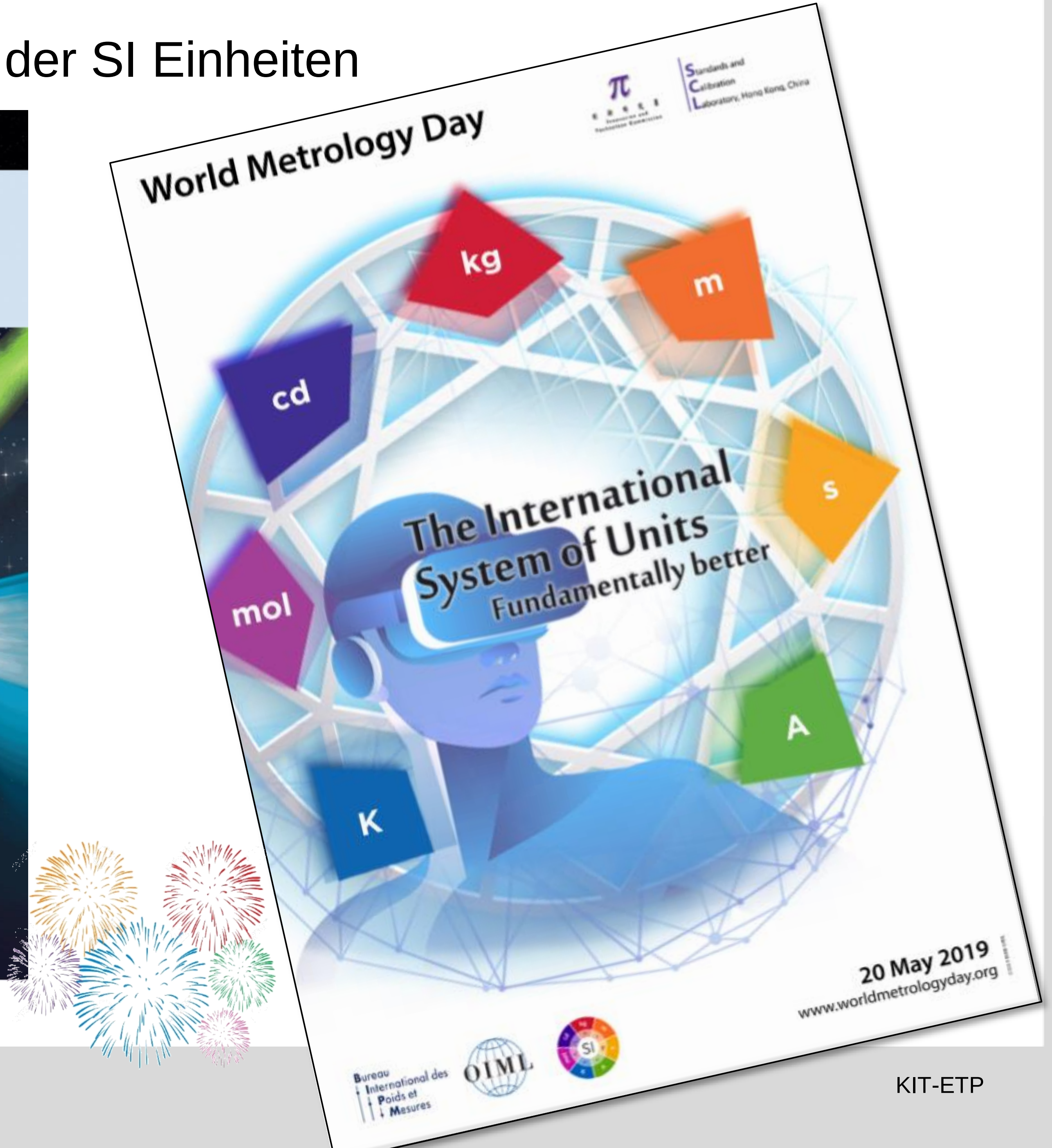




Messung
mit Kibble-Waage

Welt-Metrologie-Tag 2019

- seit 20.5.2019 – Neudefinition der SI Einheiten



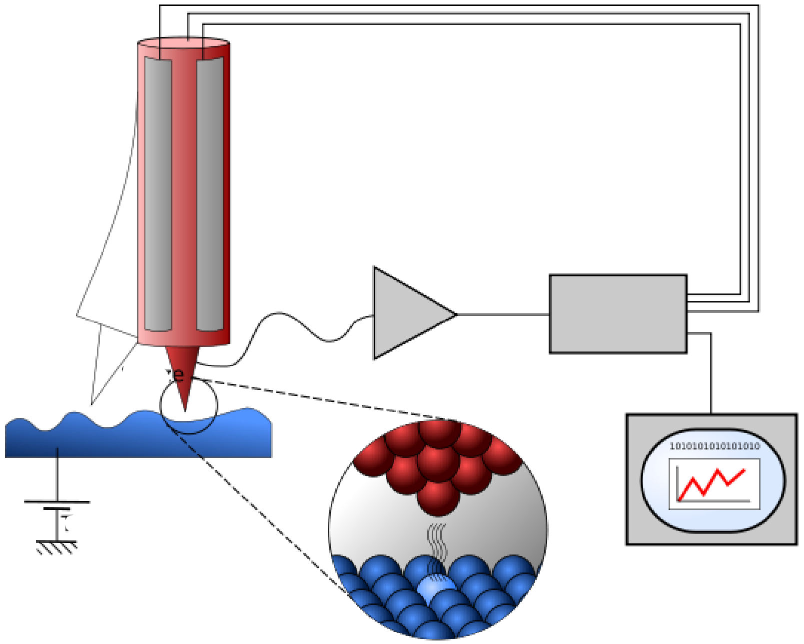
s. Zusatz-Info

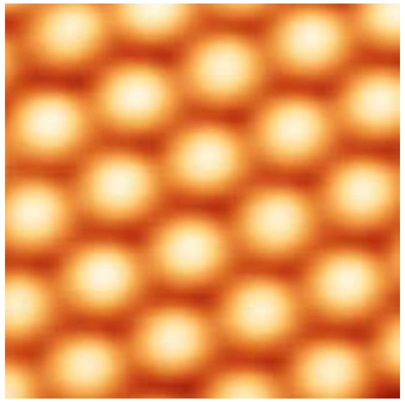
5.4 Tunneleffekt

- **Tunneleffekt**: Quantenobjekt kann endliche Potenzialbarriere auch dann durchdringen, wenn dies klassisch verboten ist, da E < V(r)

  - Beispiele:

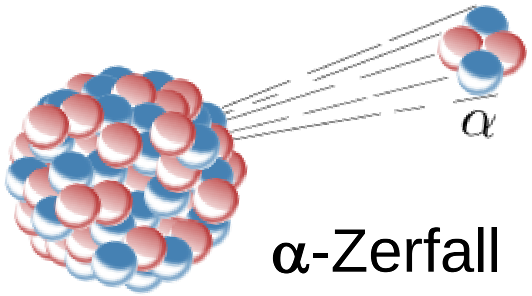
ATOME



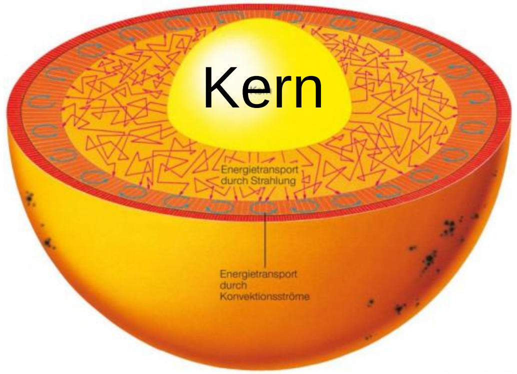


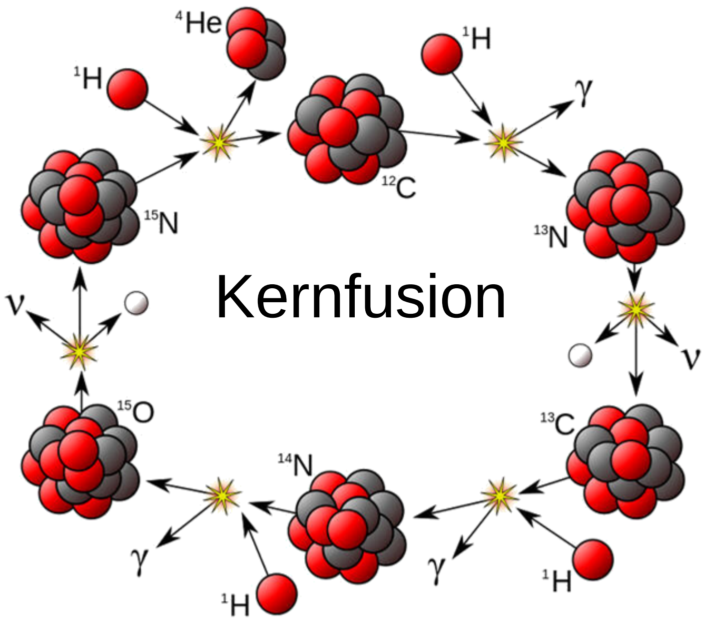
Rastertunnelmikroskop

KERNE



α-Zerfall

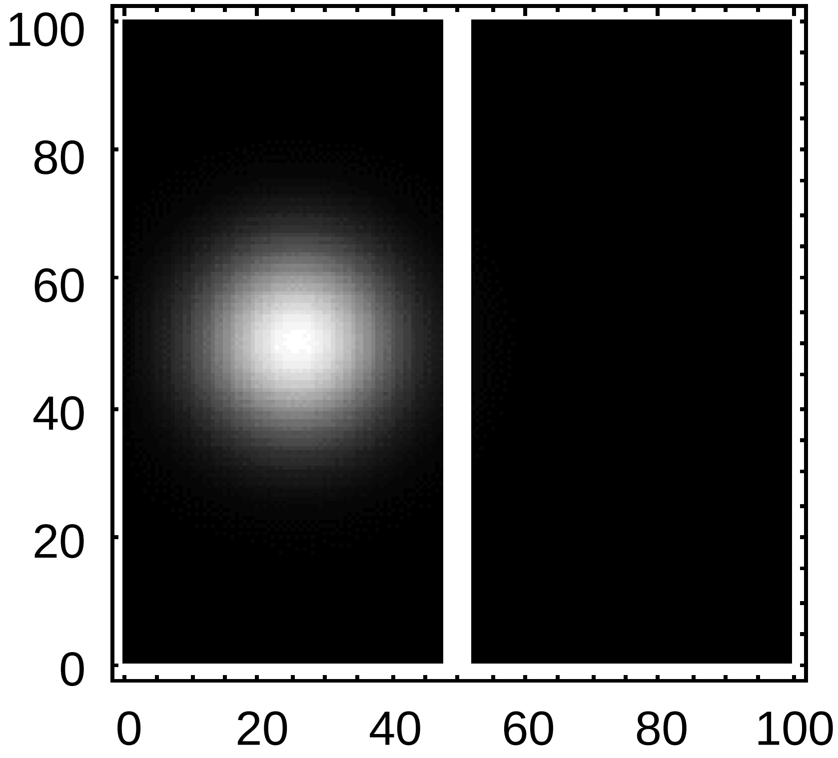




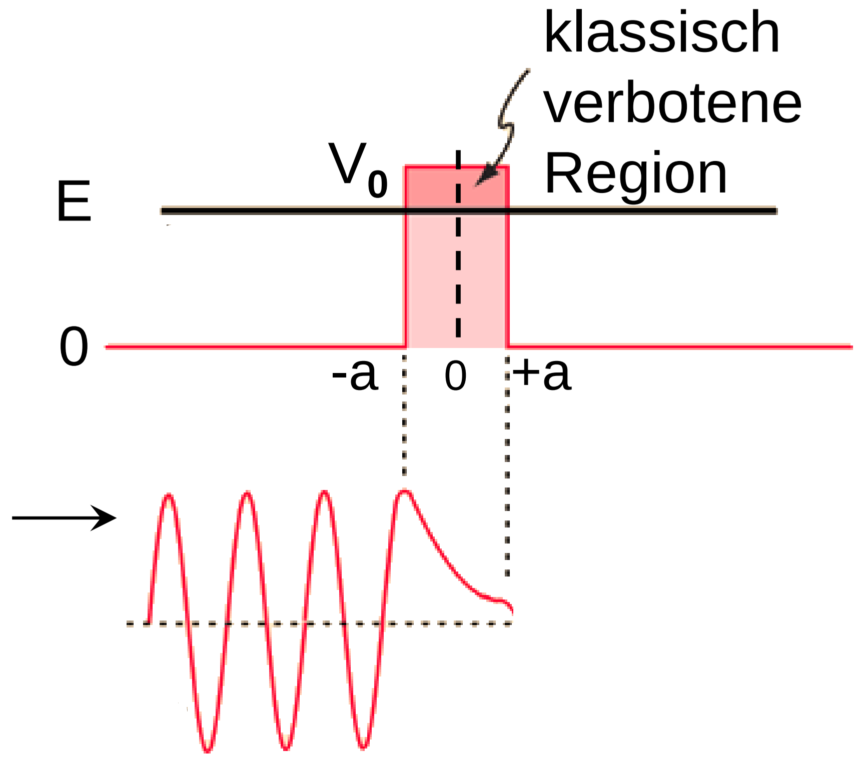
Kernfusion

Durchtunneln einer Barriere

- **Tunneleffekt:** Bestimmung der Transmissionswahrscheinlichkeit T durch Barriere
  - Potenzialbarriere V_0 in [-a,+a]
  - Quantenobjekt (Masse m) mit $E < V_0$



Elektron an einer Barriere



- ebene Welle in Region vor Barriere

Durchtunneln einer Barriere

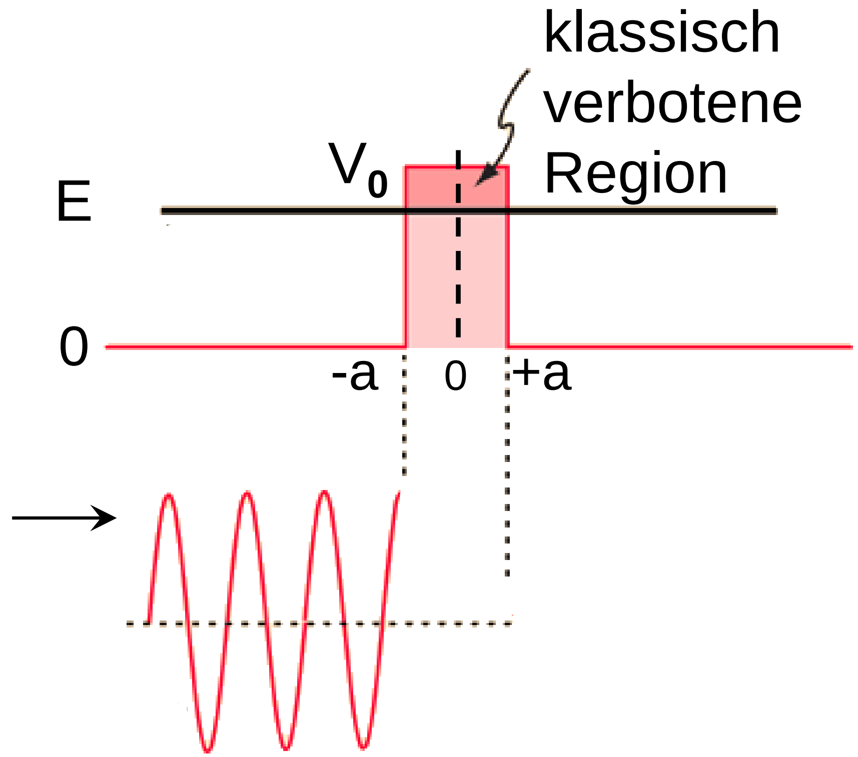
- **Tunneleffekt:** Bestimmung der Transmissionswahrscheinlichkeit T durch Barriere

$$\Psi(x) = A \cdot e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx}$$

einlaufend
Amplitude A = 1

reflektiert
Rückstreuung R < 1

(komplexer)
Rückstreukoeffizient R



einlaufende Welle

$\Psi_{ein}(x,t)$

$\Psi_{ref}(x,t) \longleftarrow$

reflektierte Welle

Durchtunneln einer Barriere

- **Tunneleffekt:** Bestimmung der Transmissionswahrscheinlichkeit T durch Barriere

$$\Psi(x) = A \cdot e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx}$$

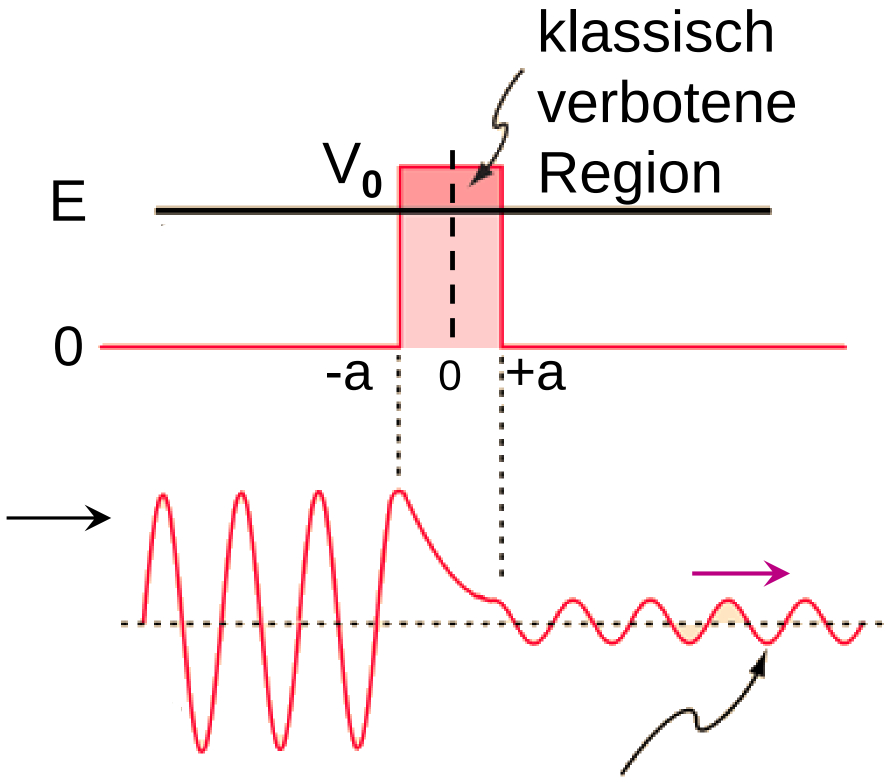
- transmittierte Welle hinter Barriere:

$$\Psi_{trans}(x) = T \cdot e^{ikx}$$

(komplexer) Transmissionskoeffizient T

- Kontinuitätsgleichung (Teilchenzahl bleibt erhalten)

$$|T|^2 + |R|^2 = 1$$



einlaufende Welle $\Psi_{ein}(x,t)$

transmittierte Welle $\Psi_{trans}(x,t)$

$\Psi_{ref}(x,t)$ ←

reflektierte Welle

Durchtunneln einer Barriere

- **Tunneleffekt**: Bestimmung von T

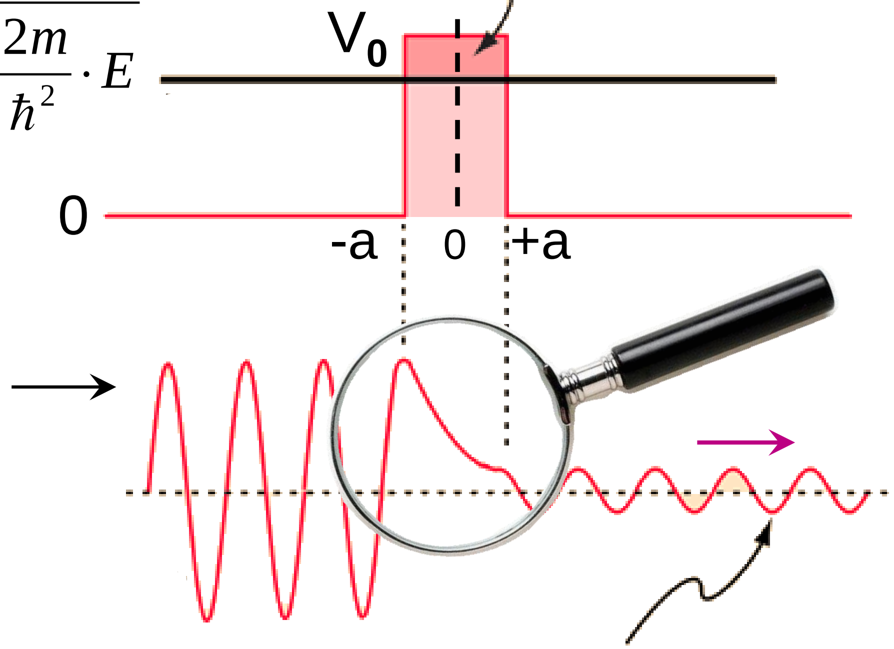
  - Schrödinger-Gleichung lösen

  - Wellenfunktion innerhalb Barriere: exponentiell abfallend

$$\Psi_{Barriere}(x) = \alpha \cdot e^{\kappa \cdot x} + \beta \cdot e^{-\kappa \cdot x}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot (V_0 - E)}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E}$$



einlaufende Welle $\Psi_{ein}(x,t)$

transmittierte Welle $\Psi_{trans}(x,t)$

$\Psi_{ref}(x,t)$ ←

reflektierte Welle

- bestimme die 4 Koeffizienten T, R, α und ß durch die Anforderung der **Stetigkeit** von $\Psi(x)$ und $\Psi'(x)$ an Stellen x = -a und x= +a

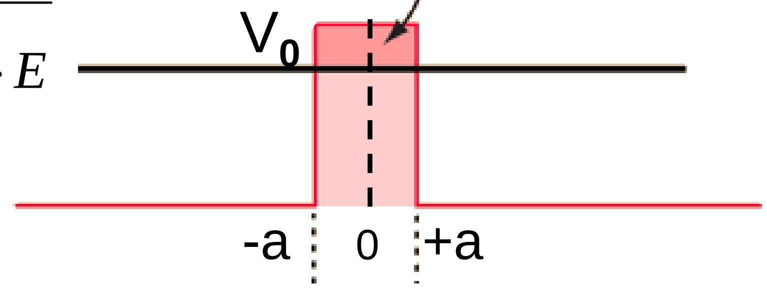
Durchtunneln einer Barriere

- **Tunneleffekt:** Bestimmung von T

  - energieabhängiger Transmissions-Koeffizient durch rechteckige Barriere mit $2a$ Breite:

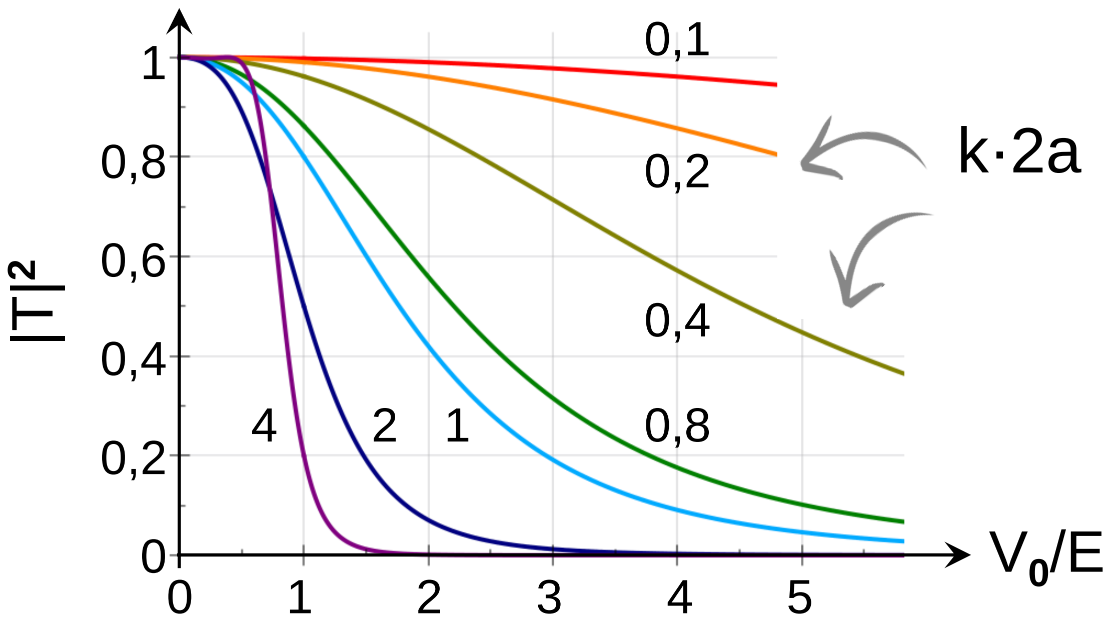
$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\cdot(V_0 - E)}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\cdot E}$$



$$\boxed{T(E) = e^{-2\cdot\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\cdot(V_0 - E)}\cdot 2a}}$$

  - kleines T wenn
    $V_0 \gg E$
    $a \gg \lambda$
    hohe und breite Barriere

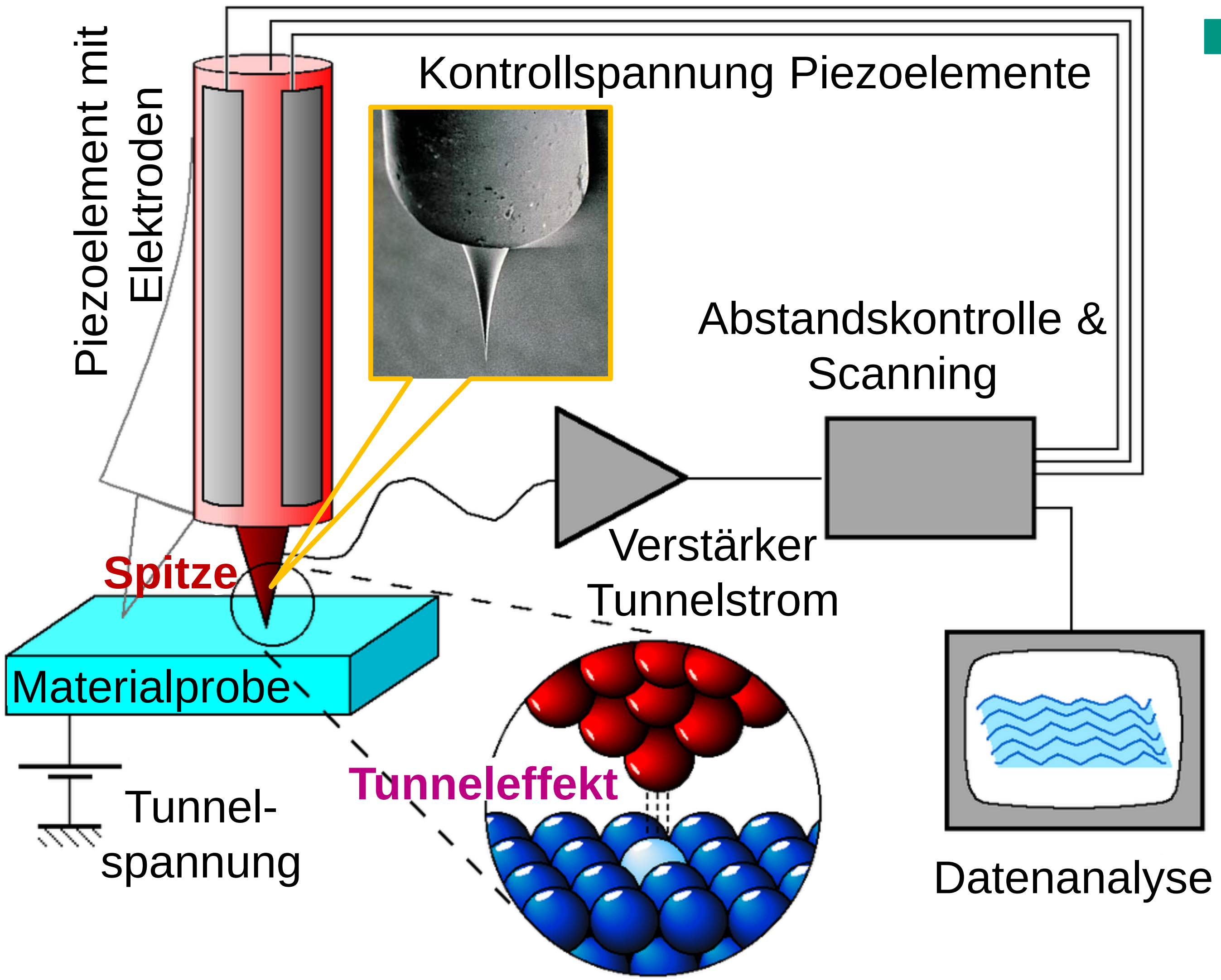


  - bei V(x) über Barriere integrieren (z.B. α-Zerfall)

Anwendung - Rastertunnelmikroskop

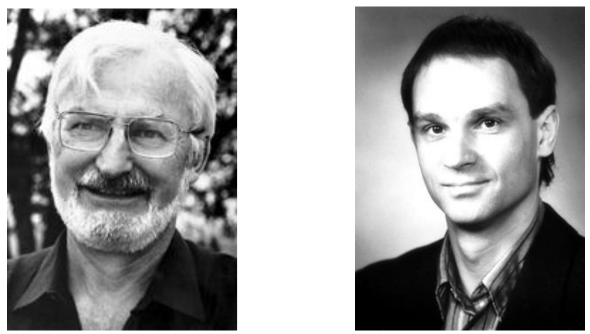
Karlsruhe Institute of Technology

- Aufgaben eines **Rastertunnelmikroskops**: Abbildung von atomaren Prozessen (bzw. Eigenschaften) einer Festkörper-Oberfläche



- Prinzip: Messung des **Tunnelstroms** zwischen Sondenspitze und Substrat-oberfläche

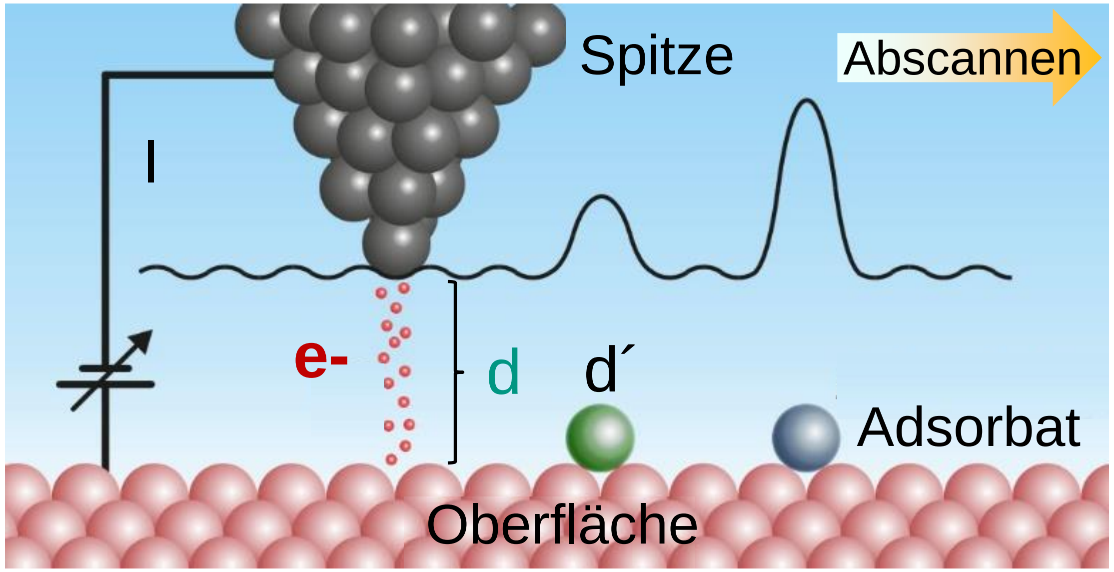
Nobelpreis 1986



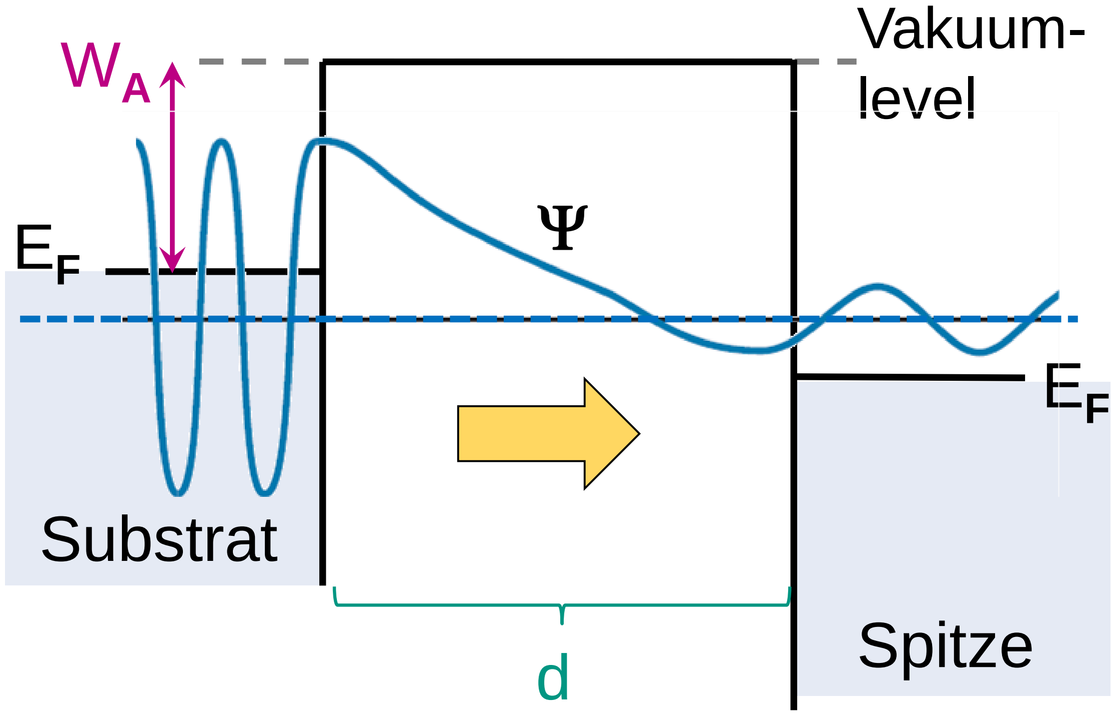
Heinrich Rohrer Gerd Binning

Anwendung - Rastertunnelmikroskop

- Größe des **Tunnelstroms** (I = 1 pA – 10 nA) von Elektronen zwischen Substrat und Sondenspitze (in einem UHV!) ist abhängig vom Abstand d
  - Strom nur durch Tunneleffekt der im Substrat in Energiebändern gebundenen e- (Austrittsarbeit einige eV, s. Photoeffekt)
  - Höhenprofil: beim Abscannen wird Tunnelstrom I konstant gehalten ⇨ Piezo-Elemente zum Verfahren der Sondenspitze (sub-nm-Bereich)

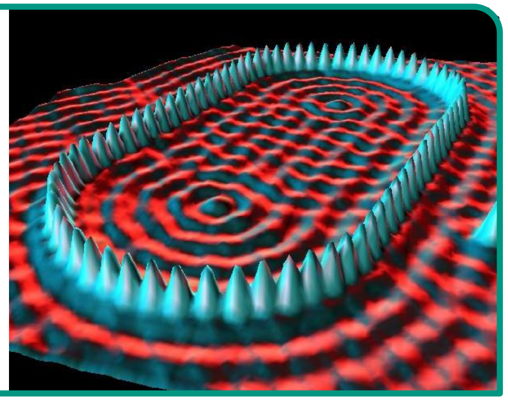


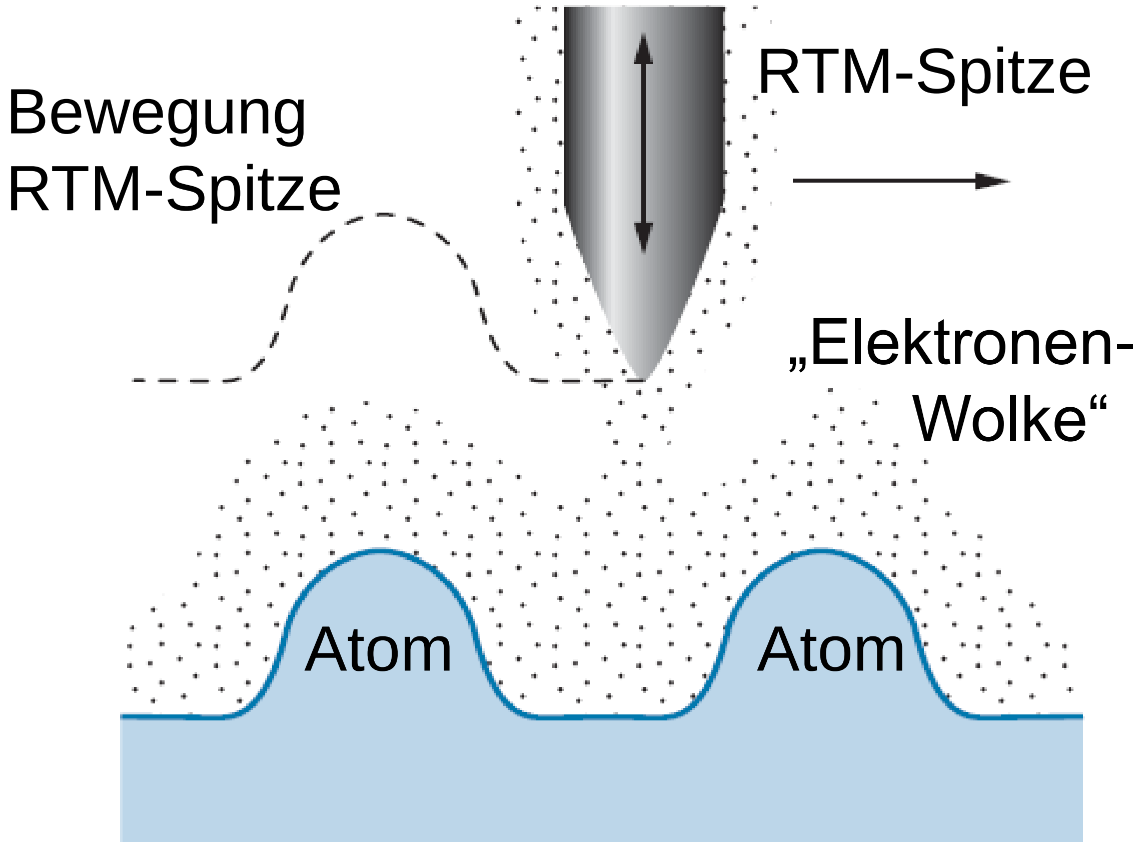
Spitze nur wenige nm oberhalb des Substrats positioniert



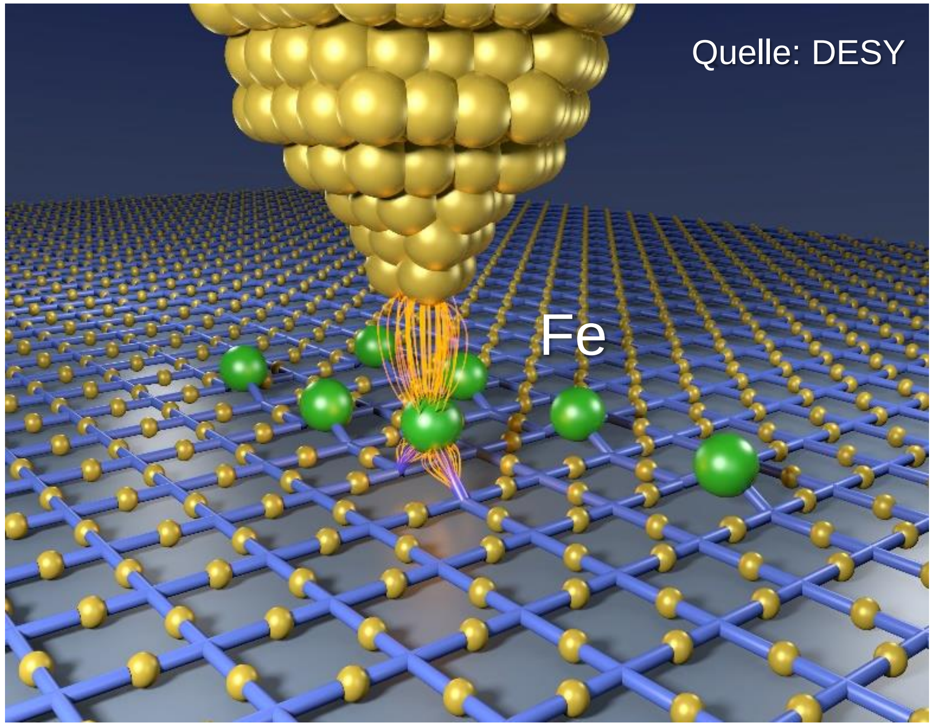
Anwendung - Rastertunnelmikroskop

- Rastertunnelmikroskope erreichen eine atomare Auflösung
  - Messgroße: Bestimmung der lokalen Elektronendichte an der Substrat- Oberfläche
  - Positionierung (Nanomanipulation über RTM-Sitze)





RTM-Anwendung: Fe-Atome positioniert auf Cu-Nitrit



Fun with Facts: Tunnelprozess

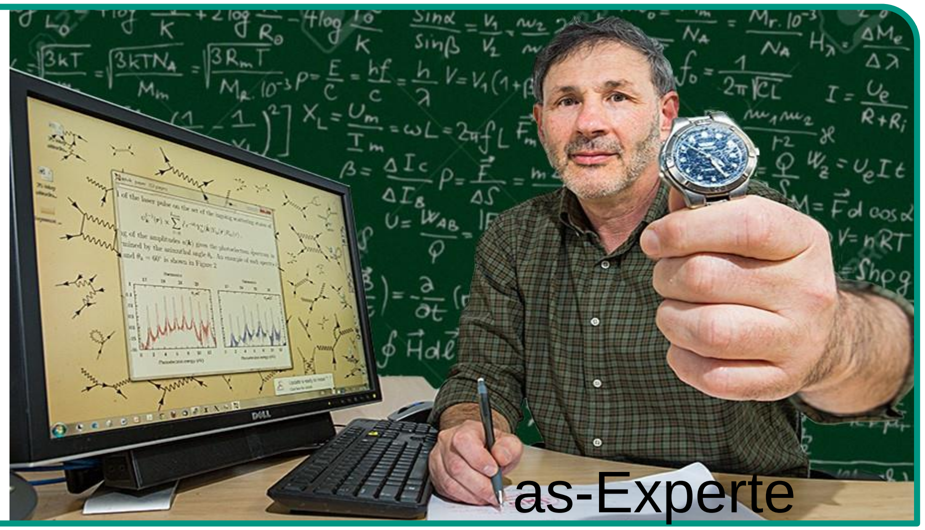
1 as = 10^{-18} s

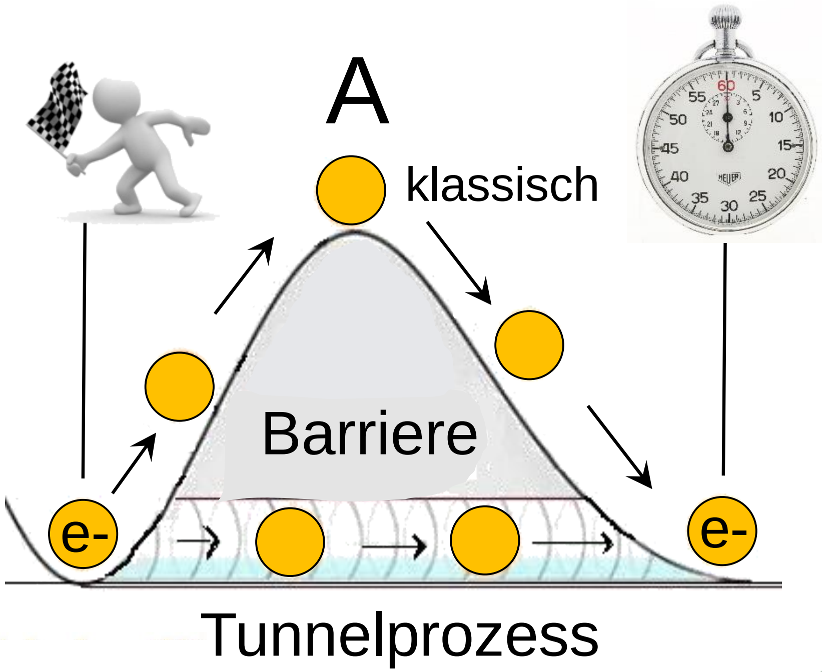
- **wie schnell ist ein Tunnelprozess?**

  A) Tunneln erfolgt instantan !

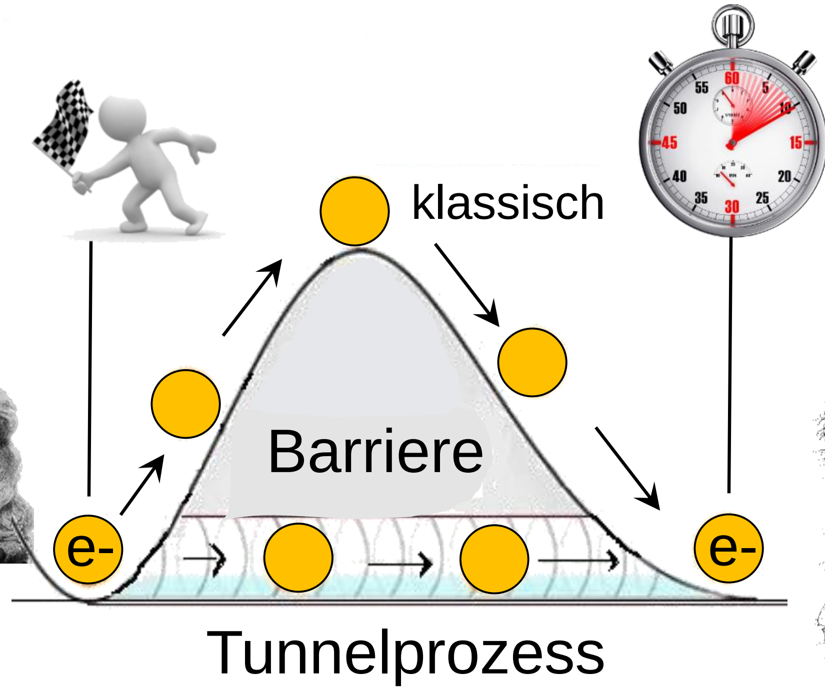
  B) Tunneln erfolgt mit v des Teilchens !

  C) Tunneln erfolgt mit v = c (Einstein) !





$\Delta T = 0$

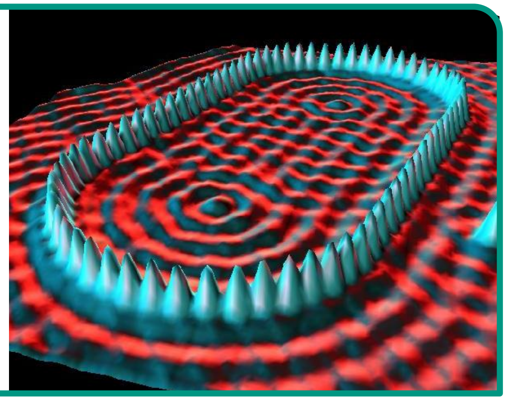


$\Delta T = d/v$

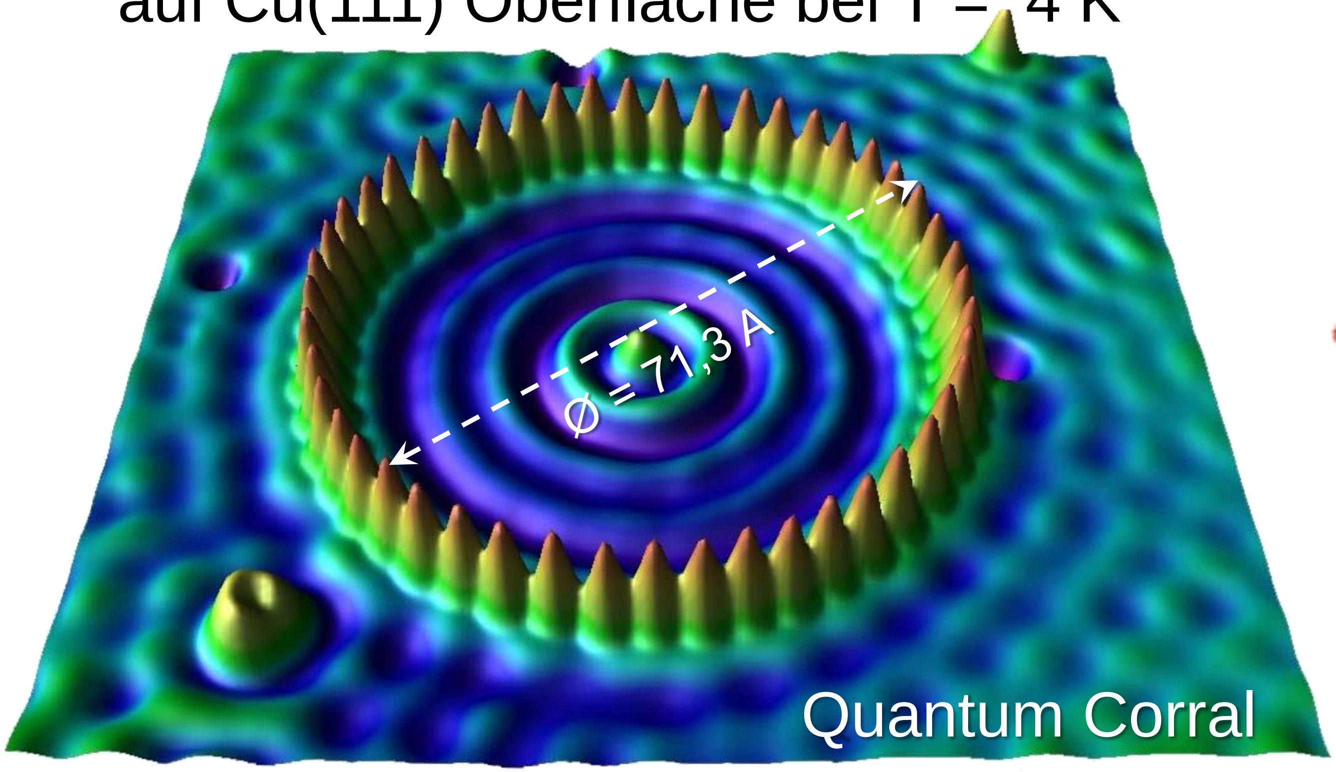
$\Delta T = d/c$

Anwendung - Rastertunnelmikroskop

- Rastertunnelmikroskope erreichen eine atomare Auflösung
  - 1993: ein Quanten-“Corral“ erzeugt stehende Elektronwellen auf einer Cu-Oberoberfläche – die ferromagnetischen Fe-Atome reflektieren Elektronwellen

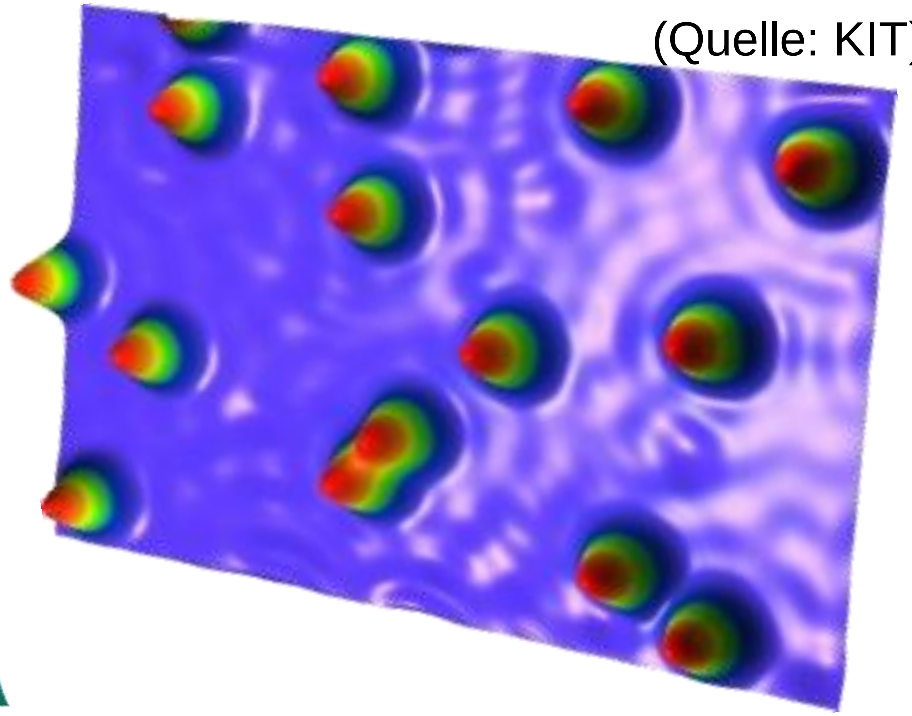


Ring aus 48 Fe-Atomen positioniert auf Cu(111) Oberfläche bei T = 4 K



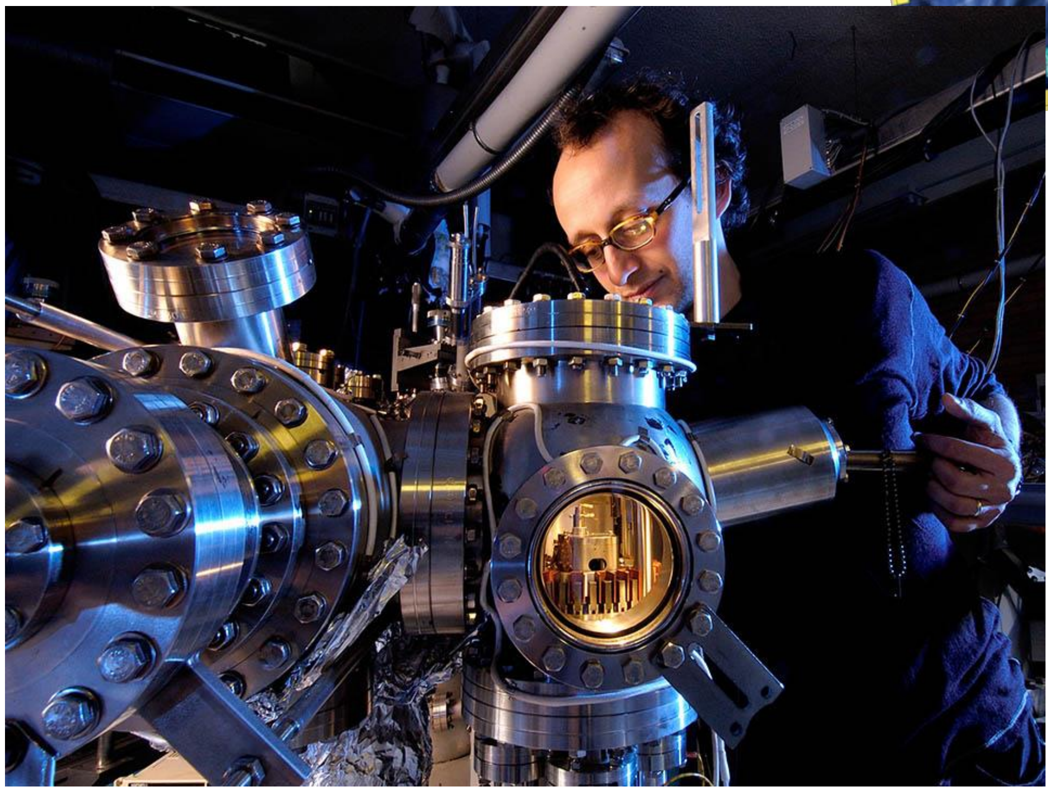
Holmium Atome auf Platin bei T = 1 K

(Quelle: KIT)

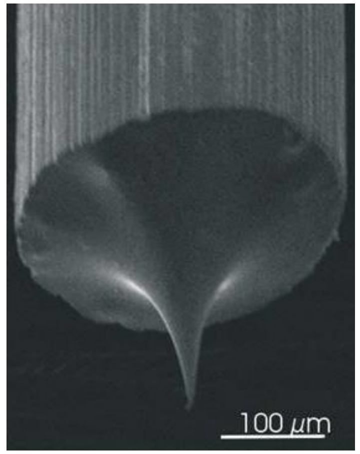


Anwendung - Rastertunnelmikroskop

- **Rastertunnelmikroskopie**:
  - Versuch im Fortgeschrittenen-praktikum
  - großer weltweiter Markt

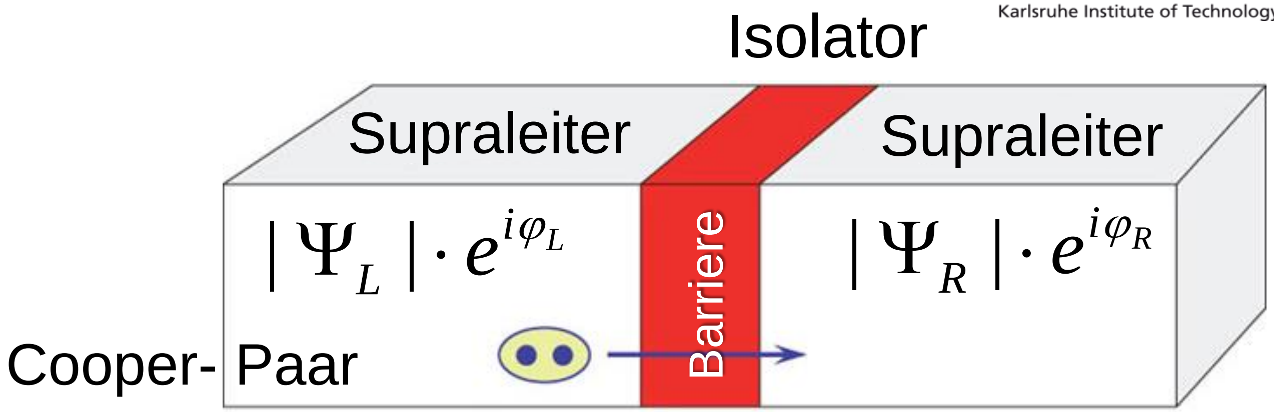


typischer Aufbau eines Rastertunnelmikroskops

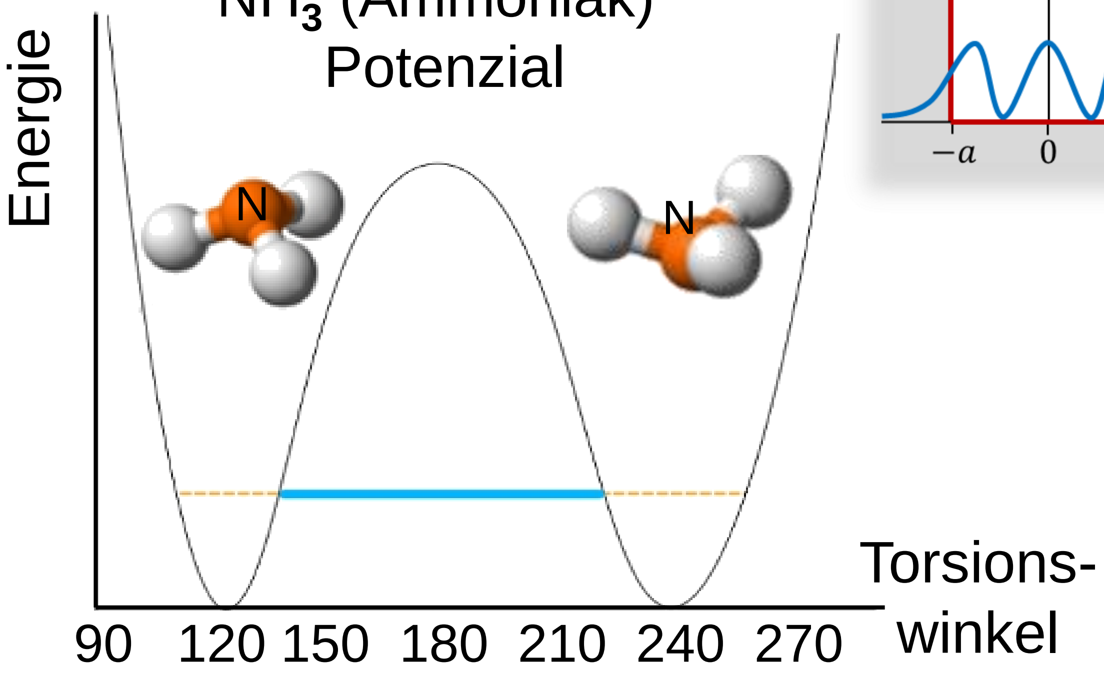


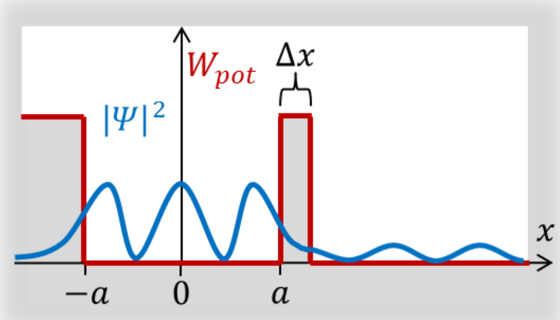
Tunneleffekt - Beispiele

Festkörper-
Josephson-Kontakt

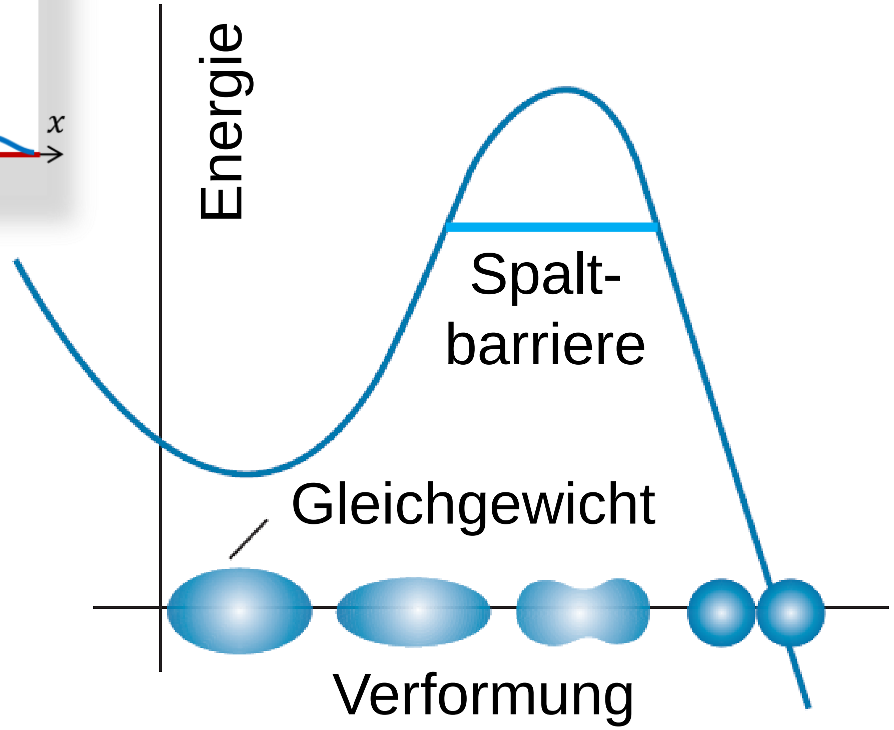


Moleküle-
Inversion
NH_3 (Ammoniak)
Potenzial

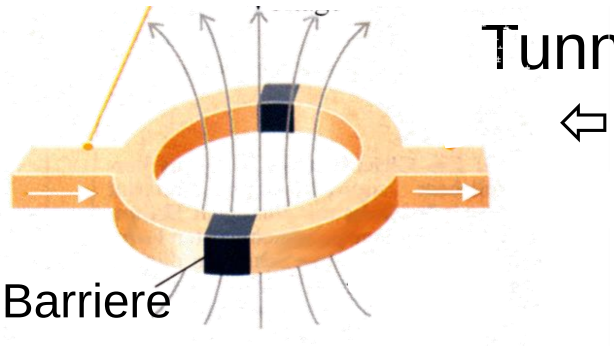




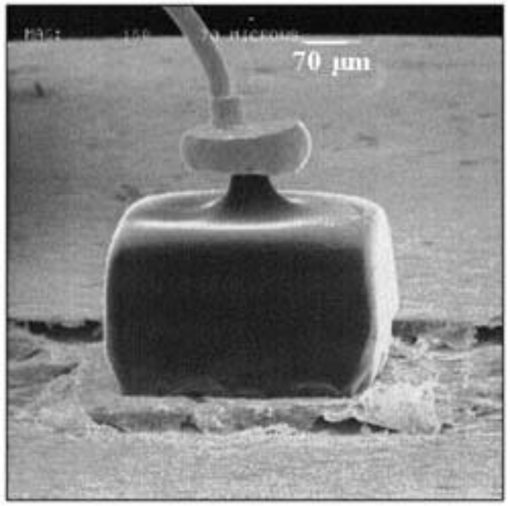
Kerne-
Kernspaltung

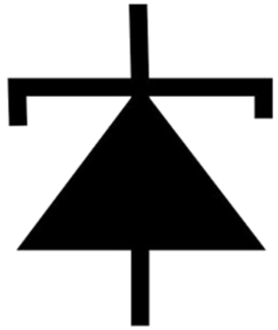


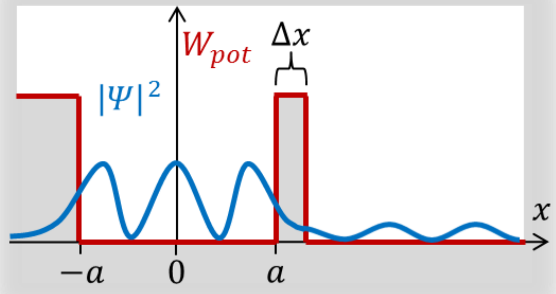
Tunneleffekt - Anwendungen



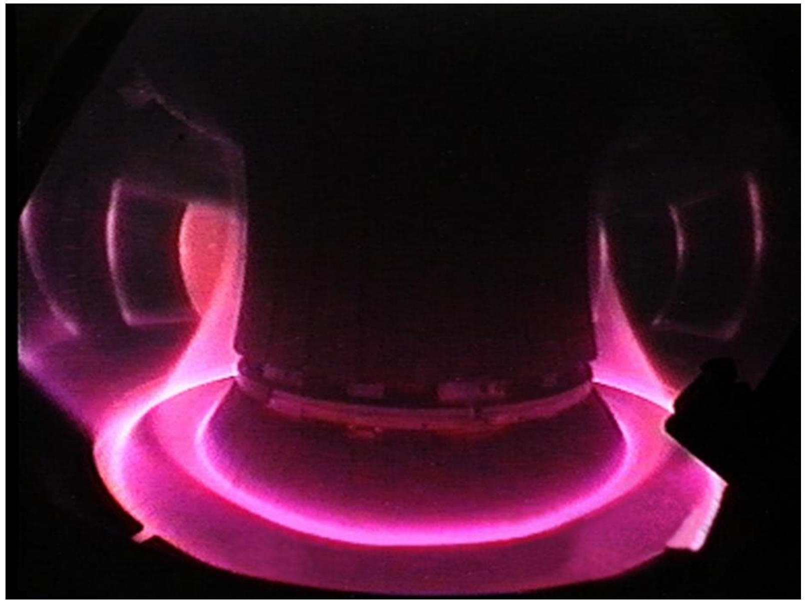
Festkörper-
Tunnel-Diode ⇨
⇦ SQUIDs



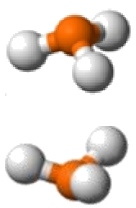


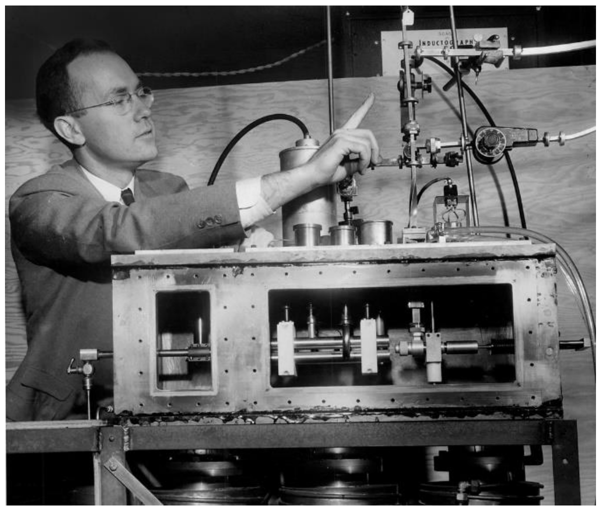


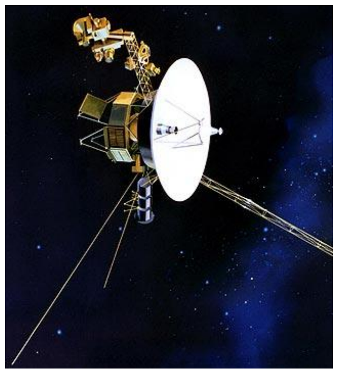
Kerne-
Plasmafusion



Moleküle-
MASER-Kommunikation

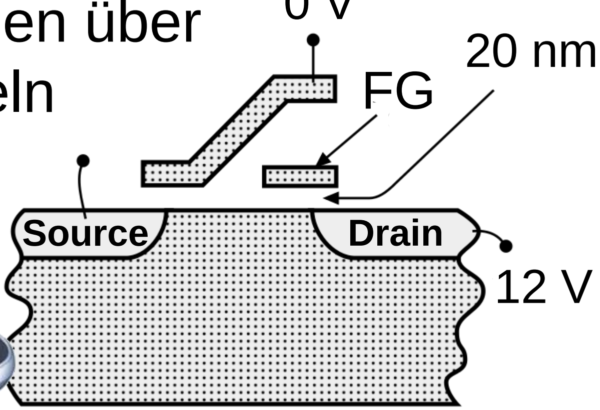




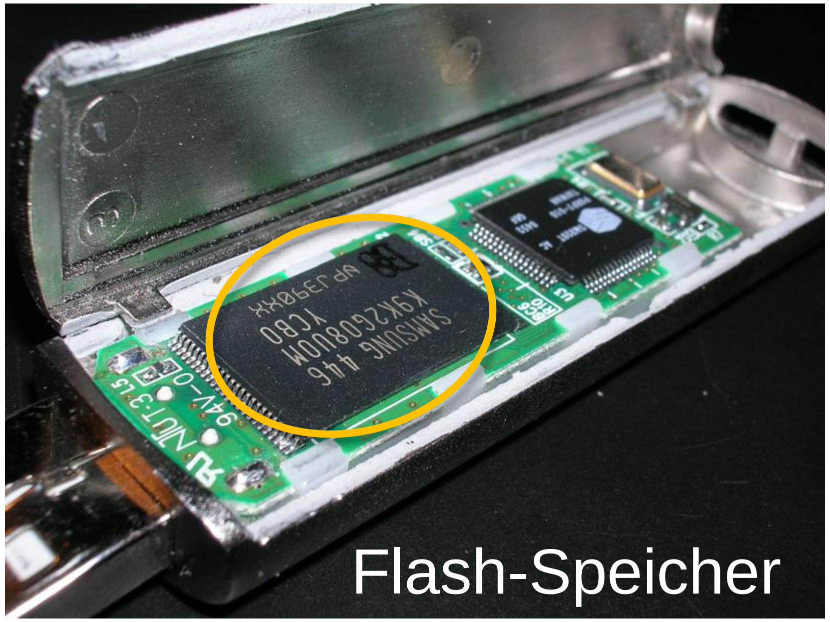


Tunneleffekt in Aktion

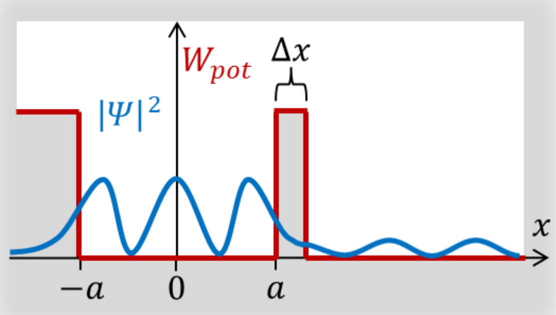
Löschen über Tunneln

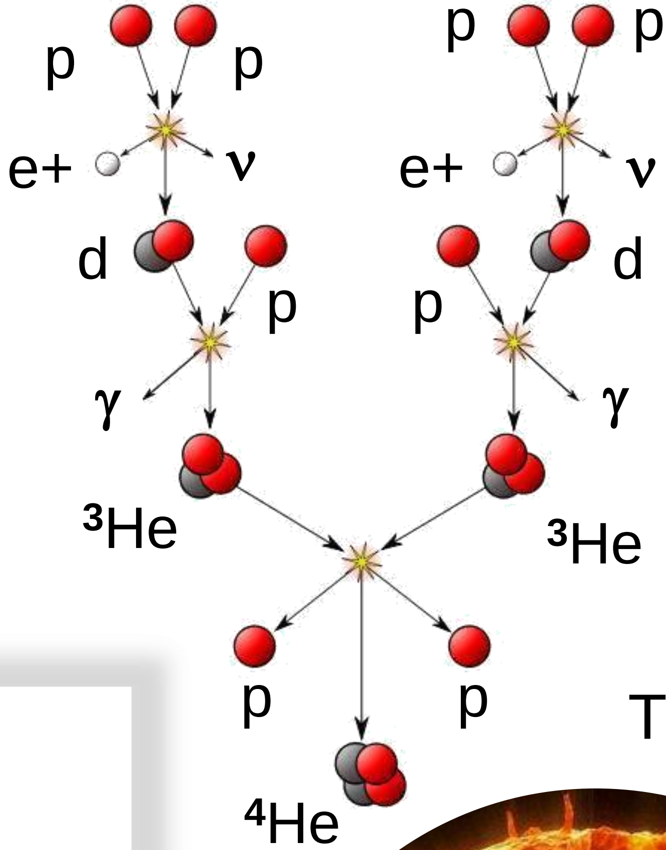


USB-Sticks, Speicherkarten

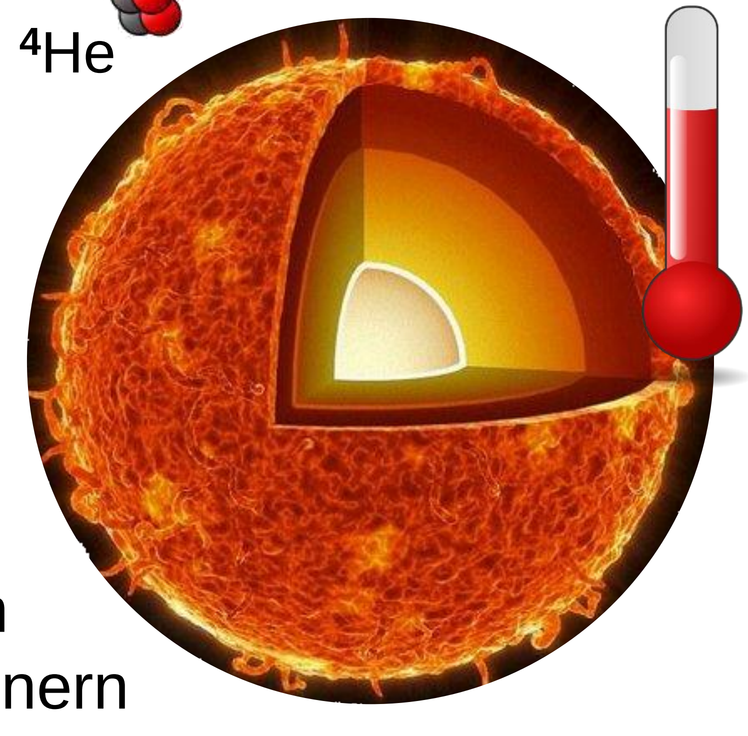


Q: Wikipedia





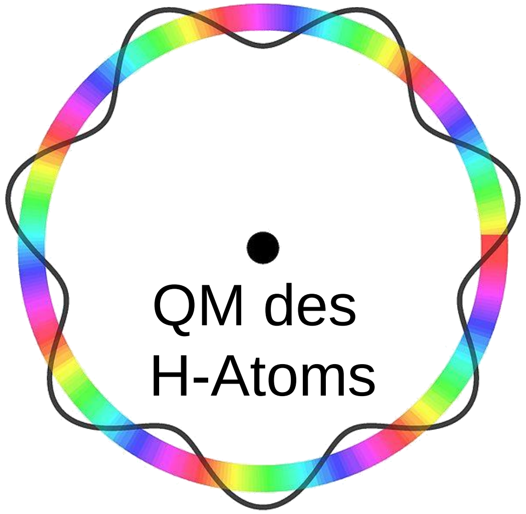
T ~ 15 Mio. K



Fusion im Sonneninnern

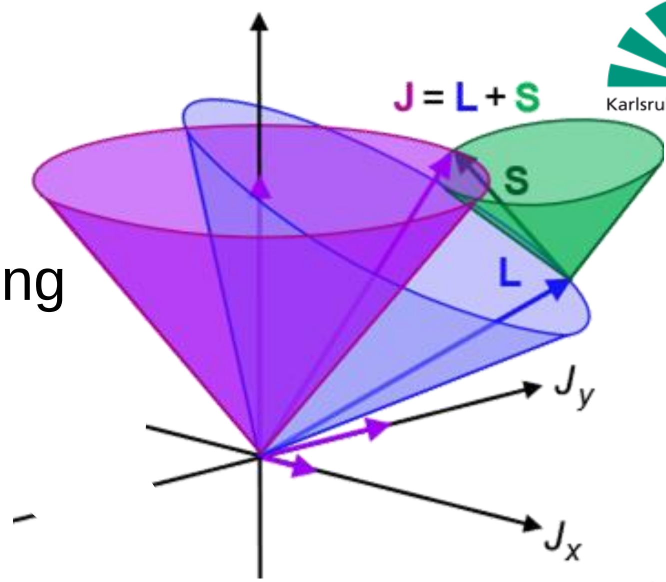
6. Das Wasserstoff-Atom

- Themengebiete

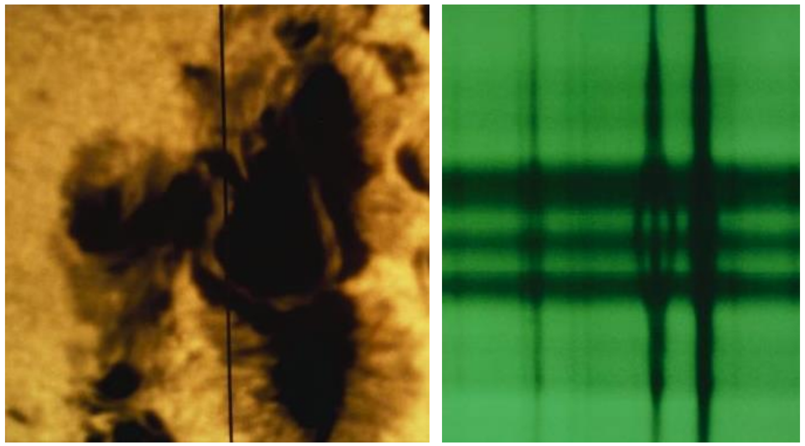


QM des H-Atoms

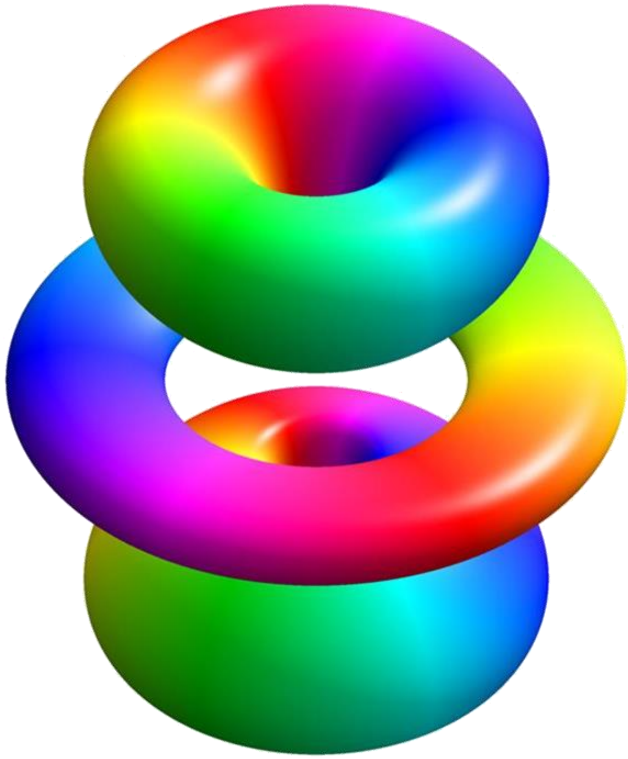
Feinstruktur &
Spin-Bahnkopplung



Schalenstruktur &
Termschema



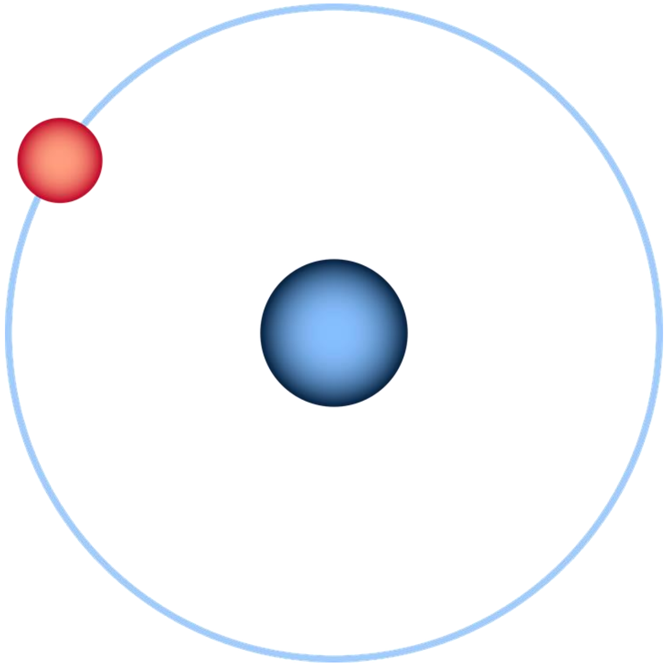
Bahn-und Spinmagnetismus



Hyperfeinstruktur

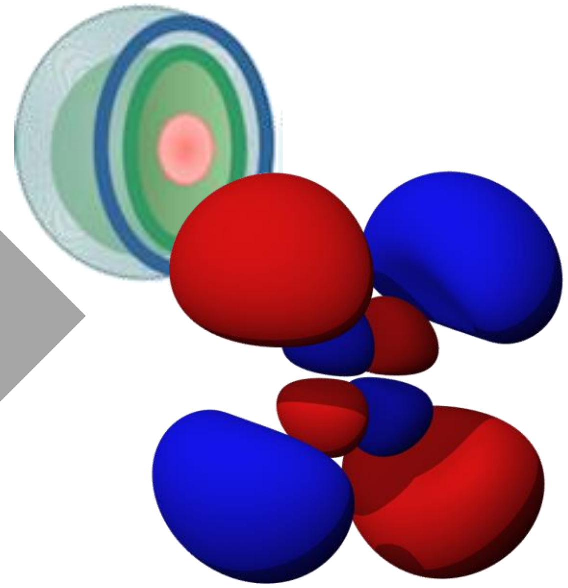
6.1 Quantenmechanik des H-Atoms

- **Schrödinger-Gleichung** für das H-Atom in 3 Dimensionen
  - Coulombfeld des Protons ist zentralsymmetrisch (~ -1/r)
  - benutze nichtrelativistische Schrödingergleichung
  - Ziel: räumliche Verteilung $\Psi(r, \theta, \phi)$ eines Elektron-Orbitals



Elektronen in
klass. Kreisbahn

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta + V$$



Elektronen in
Orbitalen mit Drehimpuls

Quantenmechanik des H-Atoms: Ansatz

Karlsruhe Institute of Technology

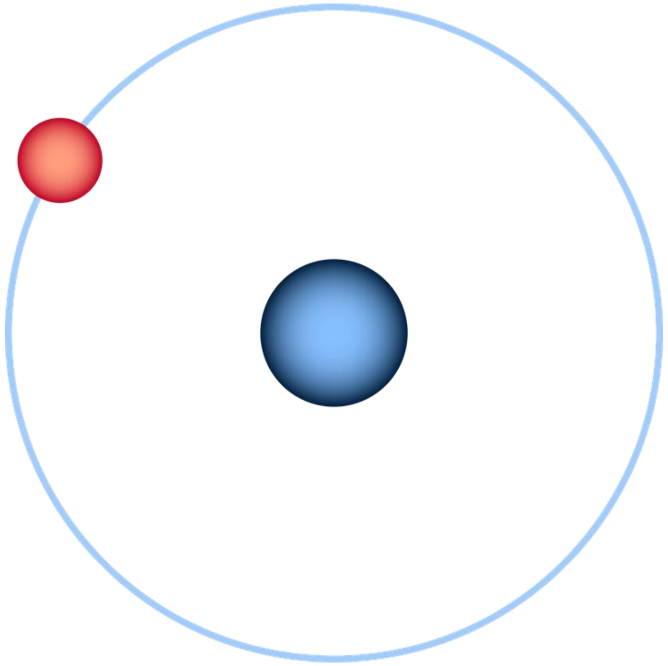
- **Schrödinger-Gleichung** für das H-Atom in 3 Dimensionen

  ⇨ Ansatz Wellenfunktion Ψ in **Kugel-Koordinaten**

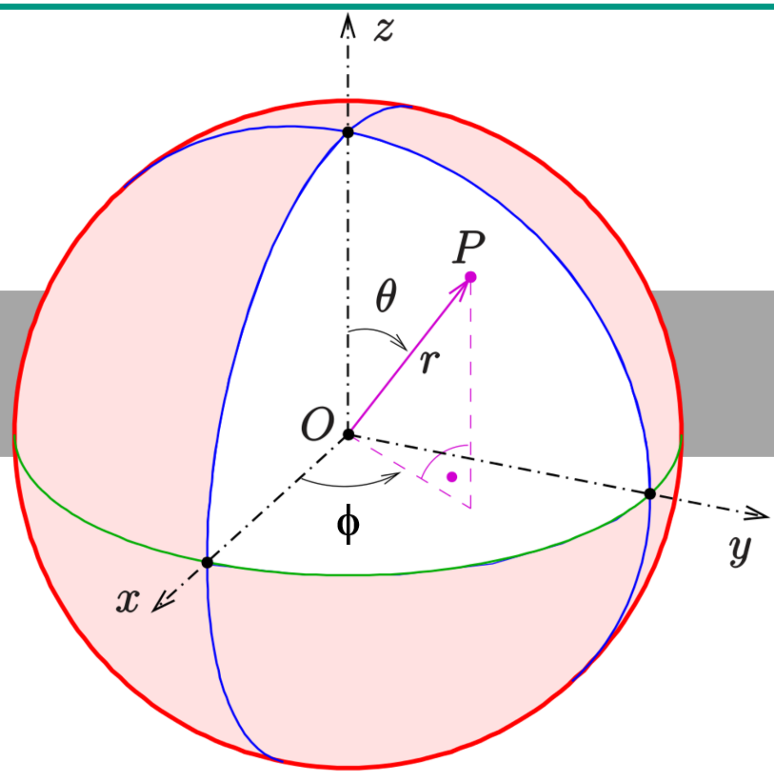
  zentral ist Separationsansatz in 2 unabhängige Anteile:

  Radialanteil $R_{nl}(r)$ und **Winkelanteil** $Y_{lm}(\theta,\phi)$

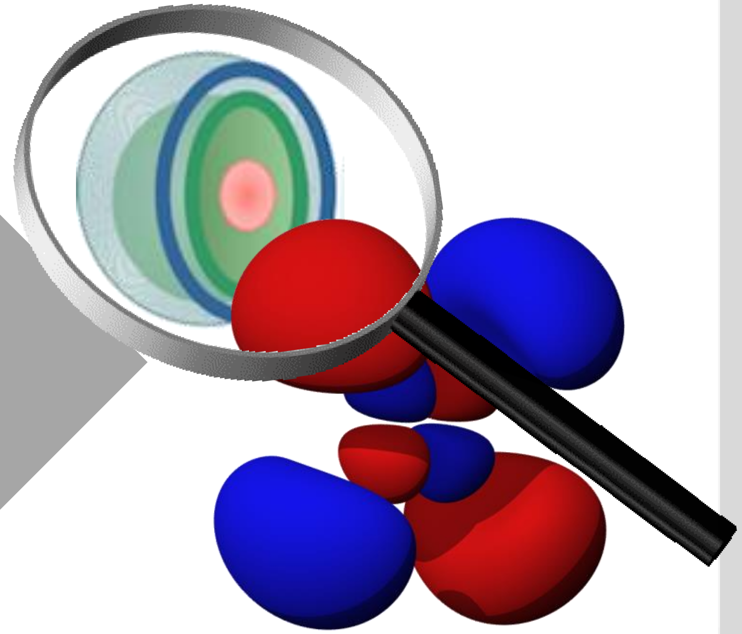
H-Atom Zusatz-Info



Elektronen in
klass. Kreisbahn



$$\Psi = \Psi(r,\theta,\phi)$$

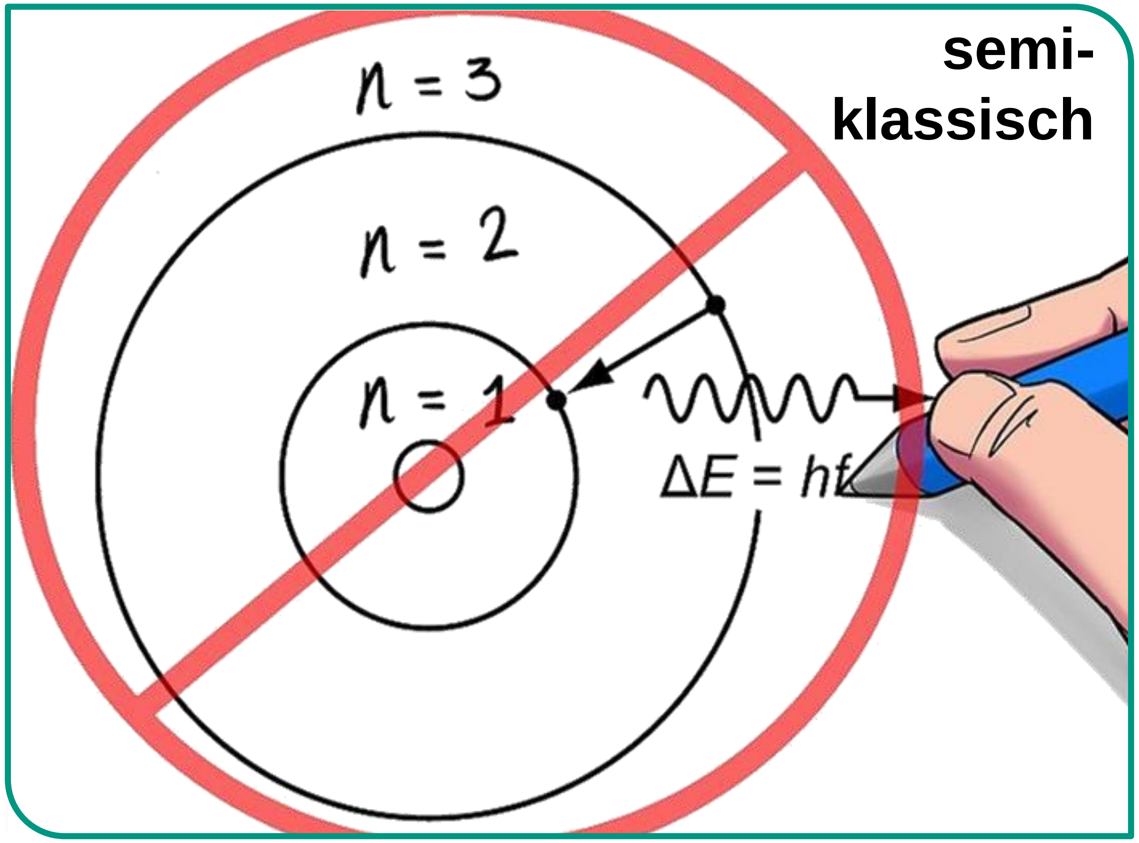


Elektronen in
Orbitalen mit Drehimpuls

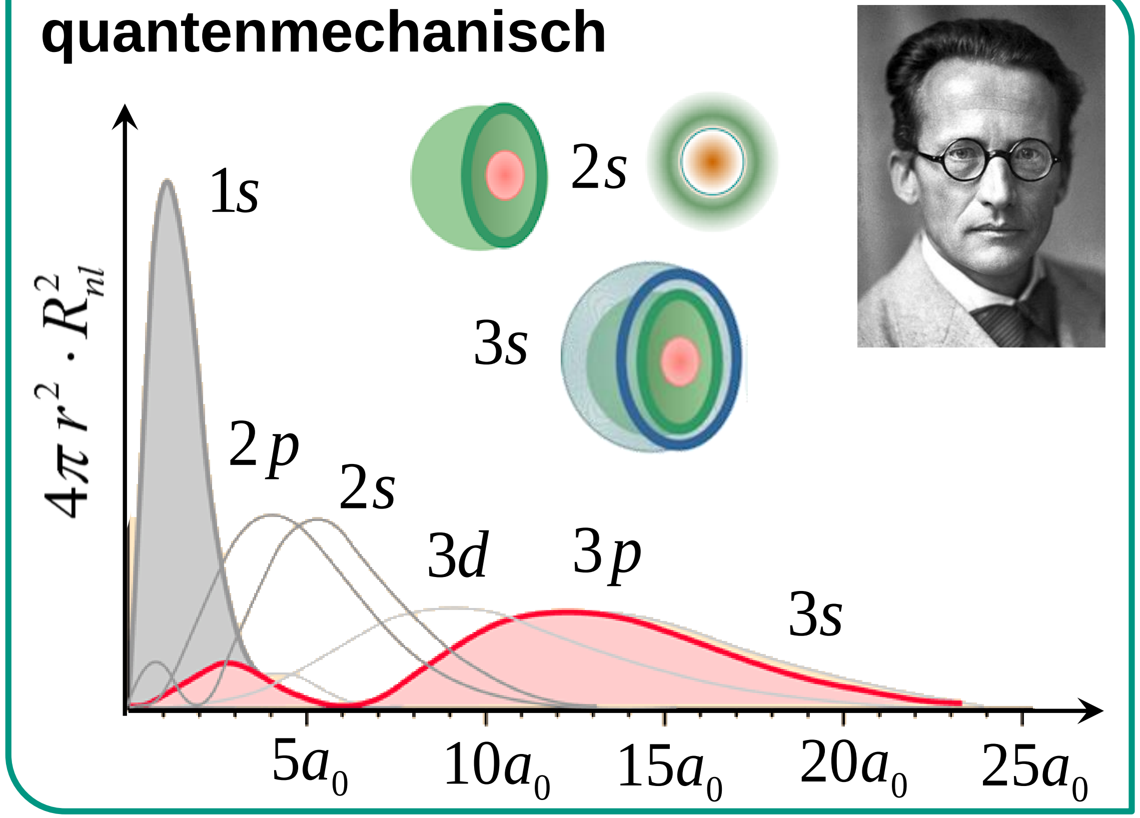
Radialfunktion – semi-klassisch & QM

- **Radialanteil R(r)** der Wellenfunktion:
  - $|R^2|$ beschreibt den Wahrscheinlichkeit ein Elektron in radialem Abstand r (in atomaren Einheiten a_0) vom Kern zu finden
  - R ist abhängig von **Hauptquantenzahl n** und **Bahndrehimpulszahl ℓ**

semi-klassisch

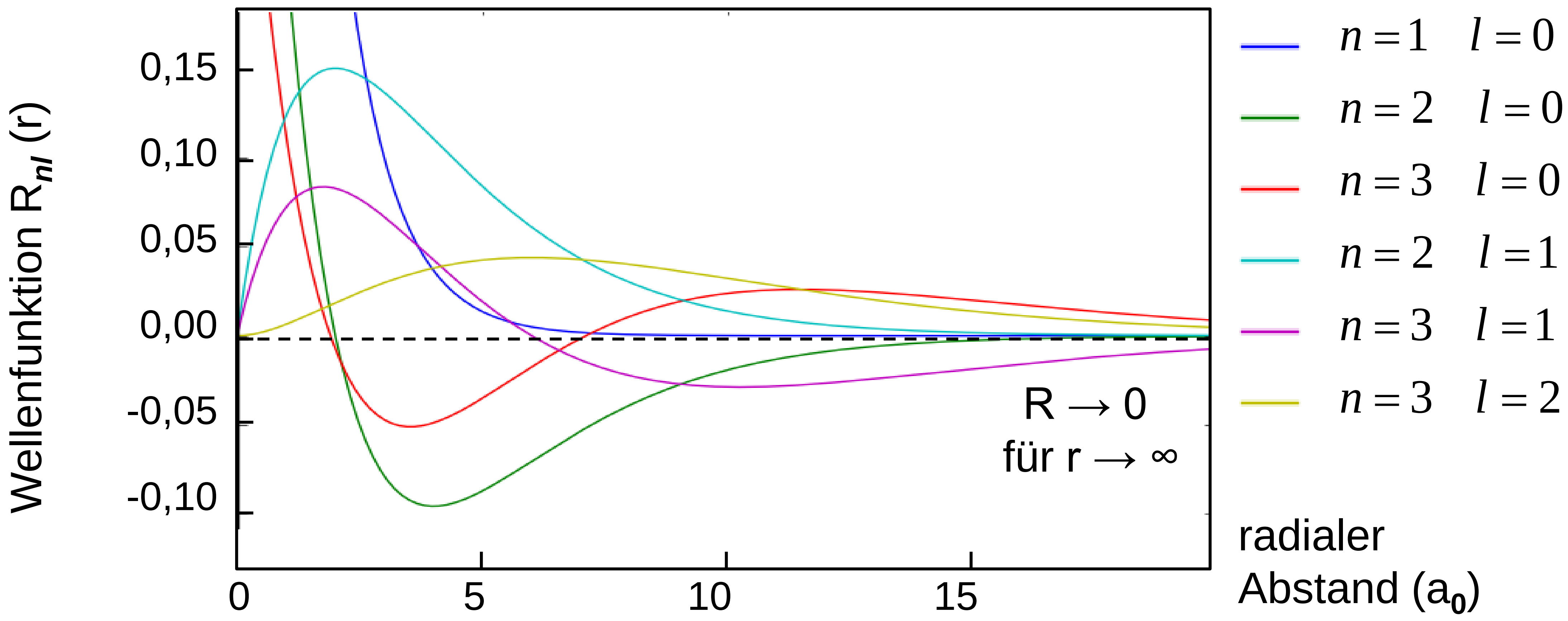


quantenmechanisch



Radialfunktion

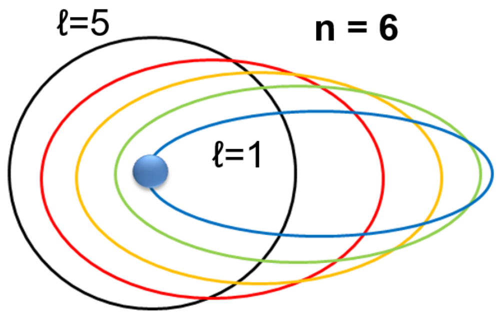
- **Radialanteil R(r)** der Wellenfunktion:
  - für Radius r → ∞ geht R → 0, d.h. endliche Größe eines Atoms
  - für festes n bewirkt Drehimpulszahl ℓ Änderung des mittleren Abstandes

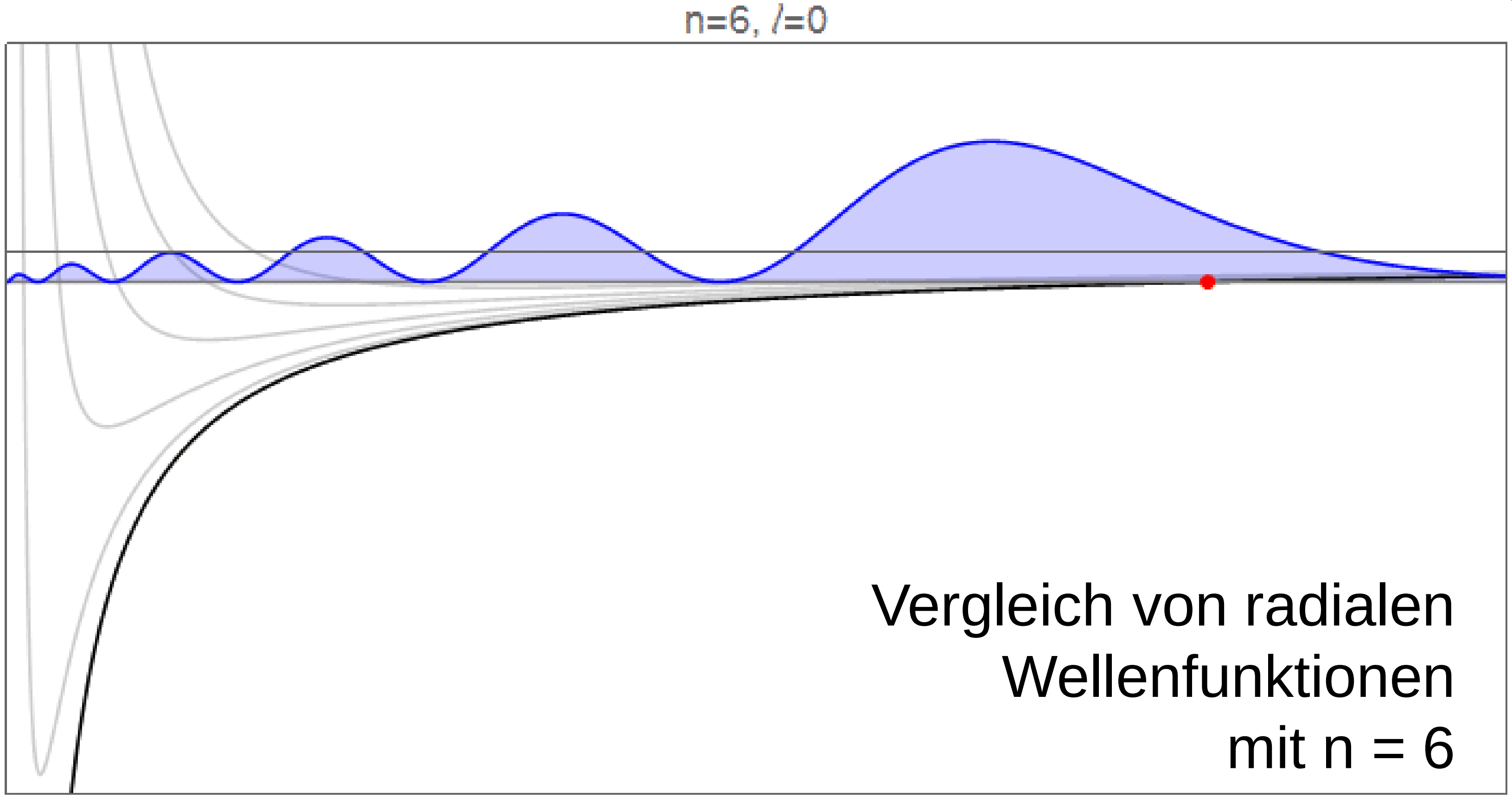


Radialfunktion

- **Radialanteil R** der Wellenfunktion- erlaubt Bestimmung der Elektron-Aufenthaltswahrscheinlichkeit über $|R_{nl}(r)|^2$

$$\boxed{P(r) = 4\pi \cdot r^2 \cdot \Psi(r) \cdot \Psi^*(r)}$$





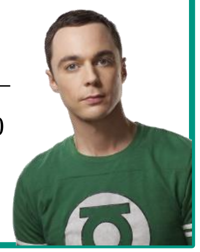
Vergleich von radialen Wellenfunktionen mit n = 6

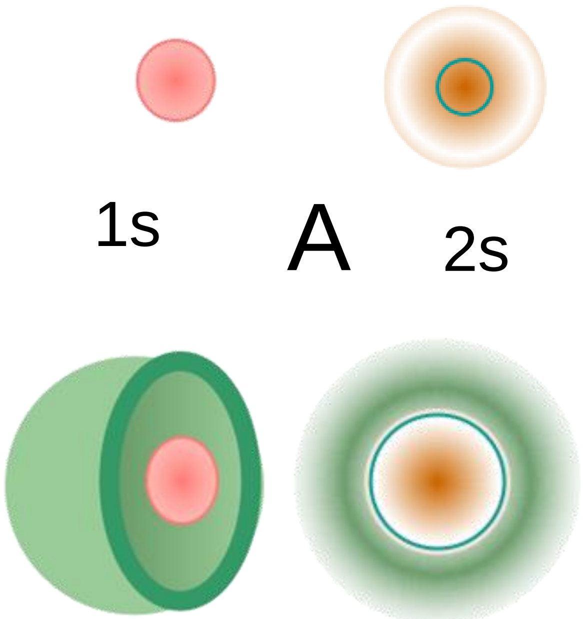
● klassische Umkehrpunkte

Fun with Facts: Radialfunktion

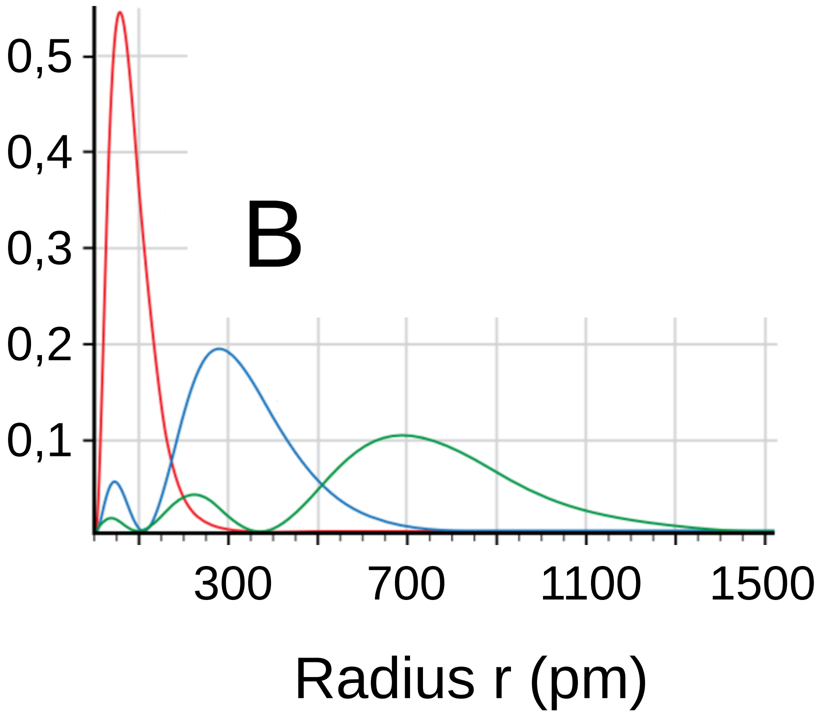
- **Größe der Wahrscheinlichkeit P für ein s-Elektron am Kern? P ist**
  - A) maximal, da $R_{nl}(r)$ dort maximal ist
  - B) minimal, da dort Radius r = 0 ist
  - C) nicht definiert für r = 0 in der QM (ħ)

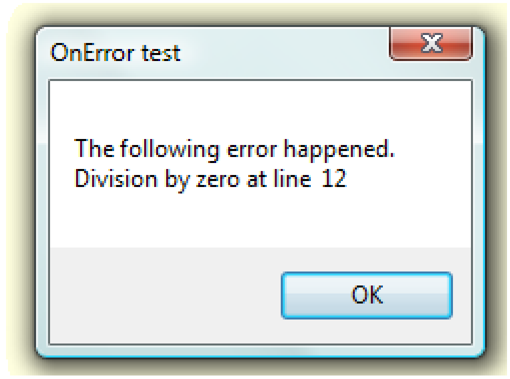
$$\Psi(1s) = \frac{2}{(a_0)^{3/2}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$





A





C

Einschub: Drehimpulse in der QM

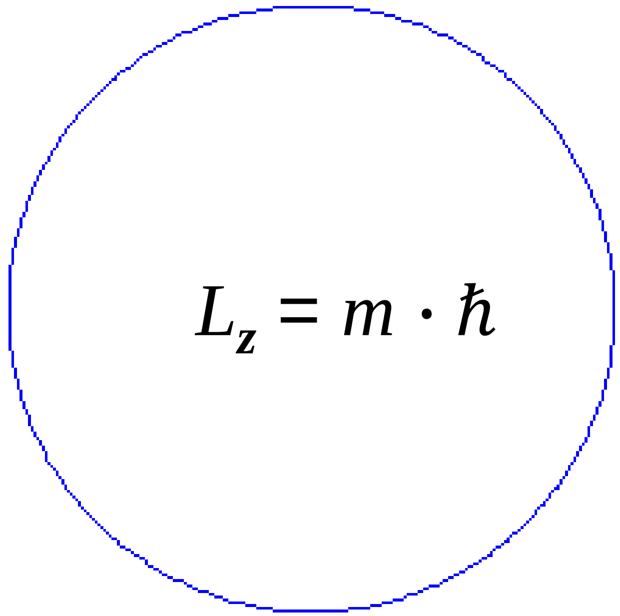
Karlsruhe Institute of Technology

- **Drehimpulse** in der QM sind quantisiert und werden als Operatoren $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ behandelt

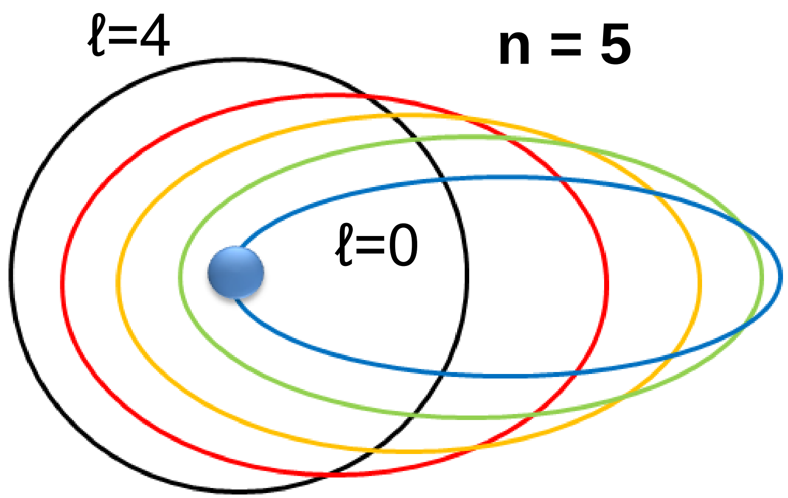
  - **Bahndrehimpuls L** eines Orbitals:

    L ist quantisiert da Elektronen Wellencharakter besitzen (de Broglie Materie-Welle), nun aber in x,y,z-Richtung

  - mögliche **Drehimpulsquantenzahl *ℓ***
    eines Orbitals mit n:



$$\boxed{l \leq n-1}$$



Drehimpulsquantenzahl ℓ &
Hauptquantenzahl *n*
(folgt aus Lösung der Radialgleichung)

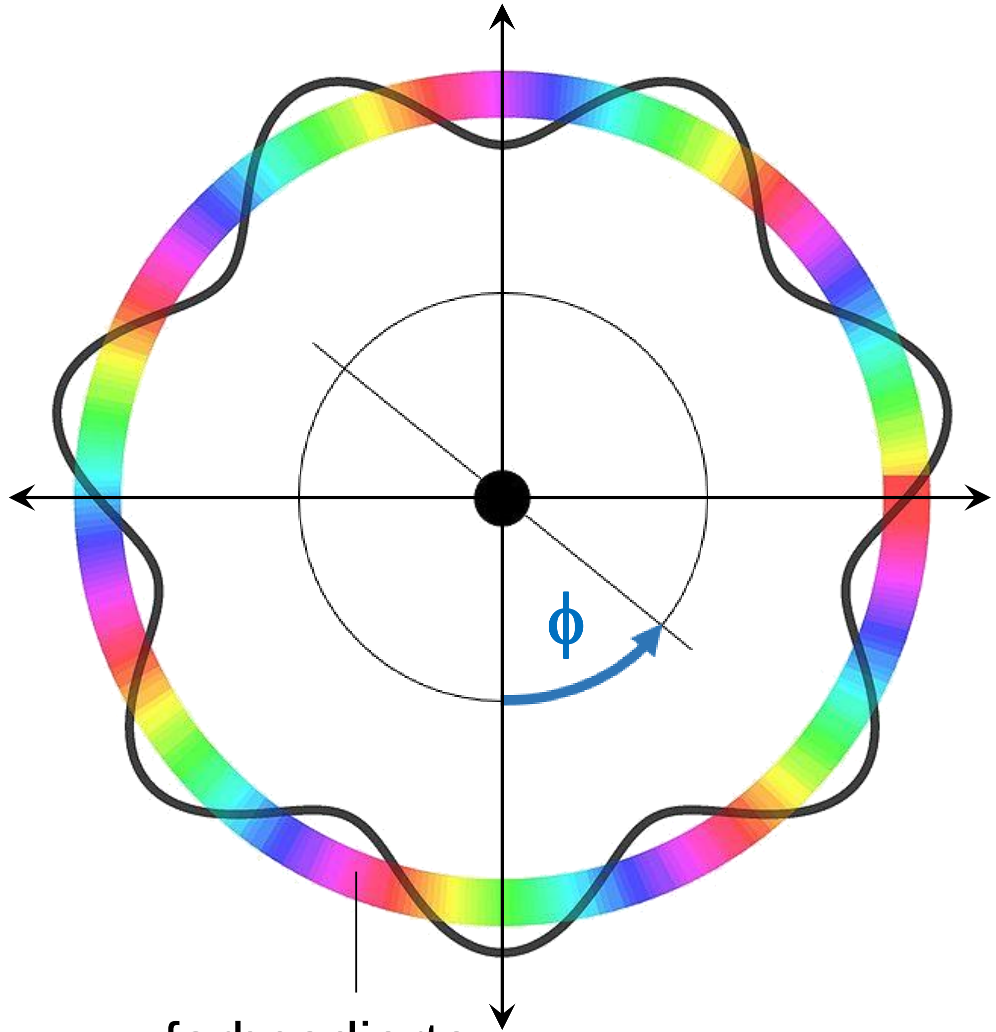
Einschub: Drehimpulse in der QM

- **Drehimpulse** in der QM sind quantisiert

  - **„magnetische“ Quantenzahl m**:
    Elektronwelle mit Phasenfaktor

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{i \cdot m \cdot \phi}$$

  - erfordert Festlegung einer
    Achse (hier: bezüglich der Phase)
    ⇨ „**Raumquantisierung**“, dazu
    Übergang zum Vektorbild (z-Achse)



farbcodierte
Phase δ

s. Haken-Wolf
Kap. 10.2 *Drehimpuls-Eigenfunktionen* (S. 161 – 167)

Einschub: Drehimpulse in der QM

- Drehimpulse (auch in der QM) visualisiert in Vektordarstellung

Eigenwertgl. für Drehimpuls-Operator L²:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$L^2\,\Psi = \hbar^2 \cdot l \cdot (l+1)\,\Psi$$

$$\boxed{L = \sqrt{l \cdot (l+1)}\,\hbar}$$

$$l = 0, 1, 2, \ldots$$

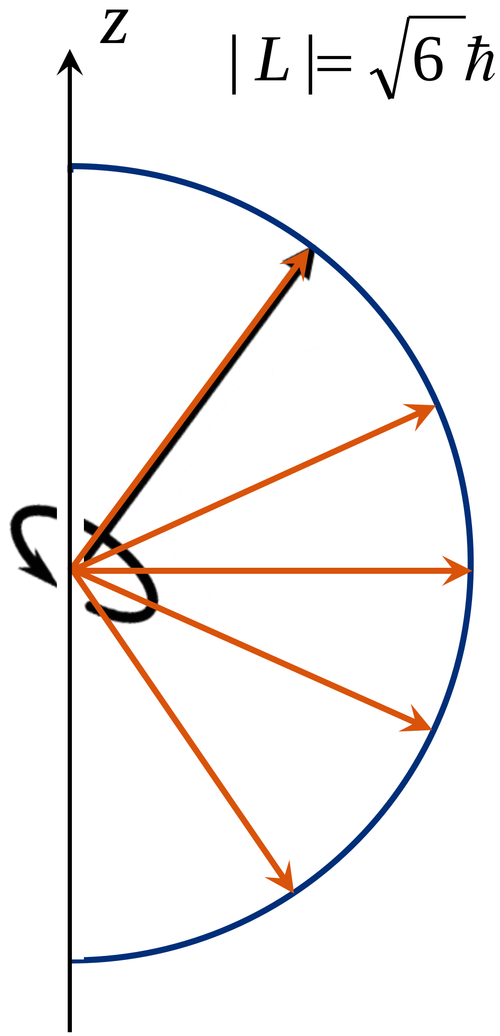
l: Azimuthalquantenzahl

Drehimpulsquantenzahl

Nebenquantenzahl

⇨ legt die Form des Orbitals fest (s. S. 37)

Quantenzahl $l = 2$



Einschub: Drehimpulse in der QM

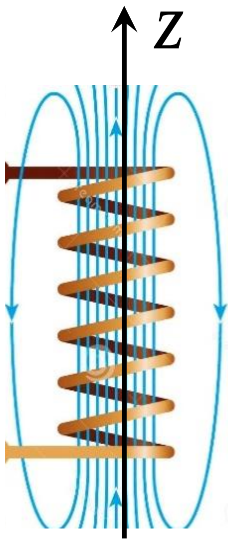
- Drehimpulse (auch in der QM) visualisiert in Vektordarstellung

Quantenzahl $l = 2$

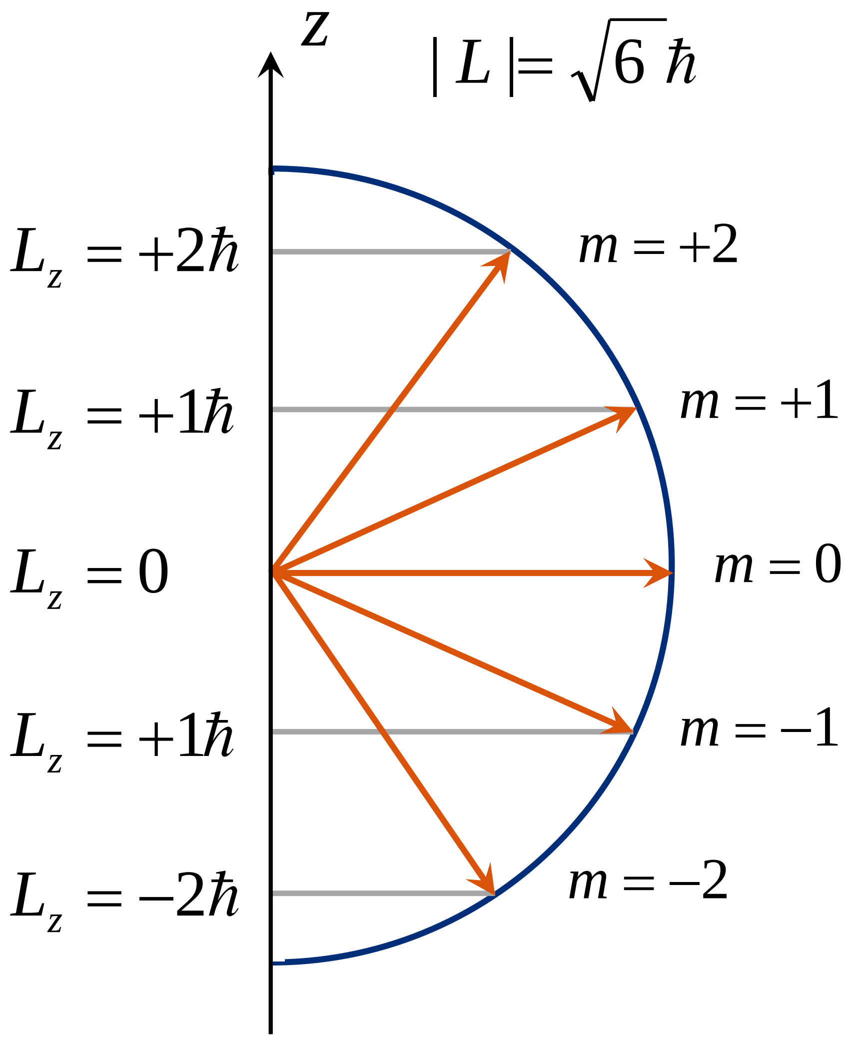
- **„magnetische" Quantenzahl m**:

$$m = \frac{L_z}{\hbar}: \quad -l, -(l-1), \ldots, 0, \ldots, (l-1), l$$

$$\boxed{-l \leq m \leq +l}$$



B-Feld später als Quantisierungsachse



Einschub: Drehimpulse - Vertauschung

- in der QM wird Verhalten von Drehimpulsen beschrieben durch Vertauschungsrelationen

  - Drehimpulsoperator (L^2)

    $$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

    vertauscht mit einzelner Komponente

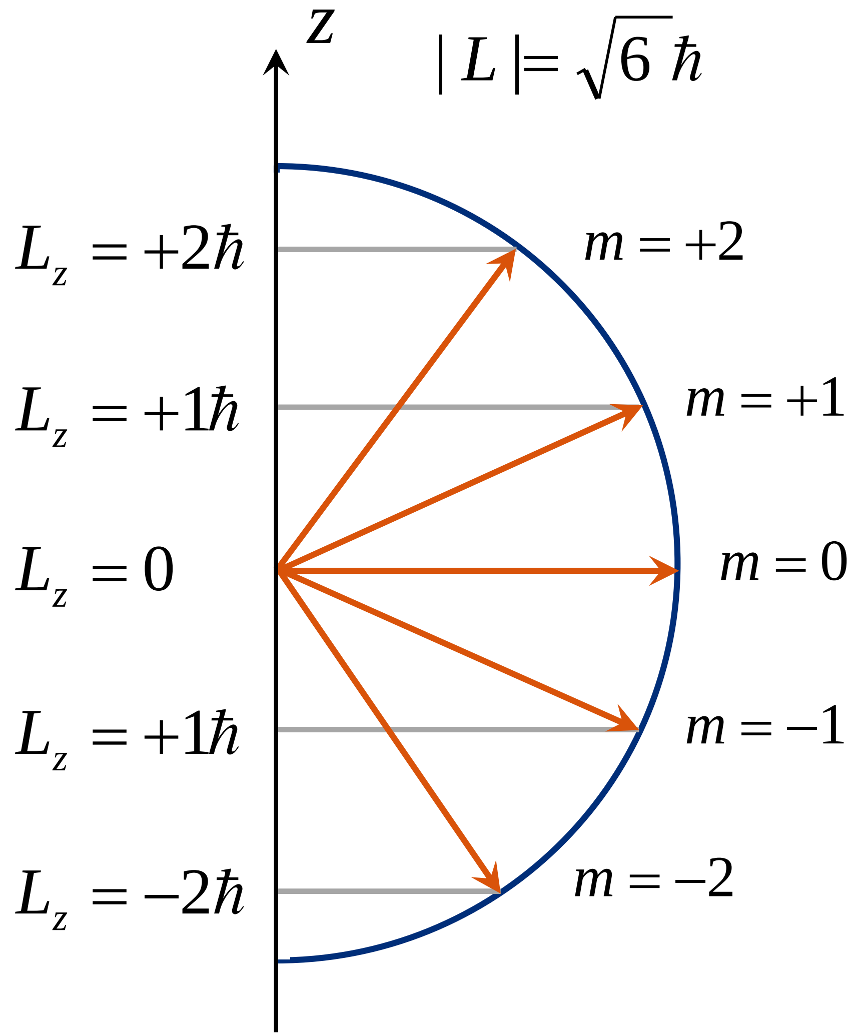
    L_z : $[L^2, L_z] = 0$

    L_y : $[L^2, L_y] = 0$

    L_x : $[L^2, L_x] = 0$

  - in einem System ist nur der Gesamtdrehimpuls L^2 & eine Komponente (z.B. L_z) bestimmbar

Quantenzahl $l = 2$

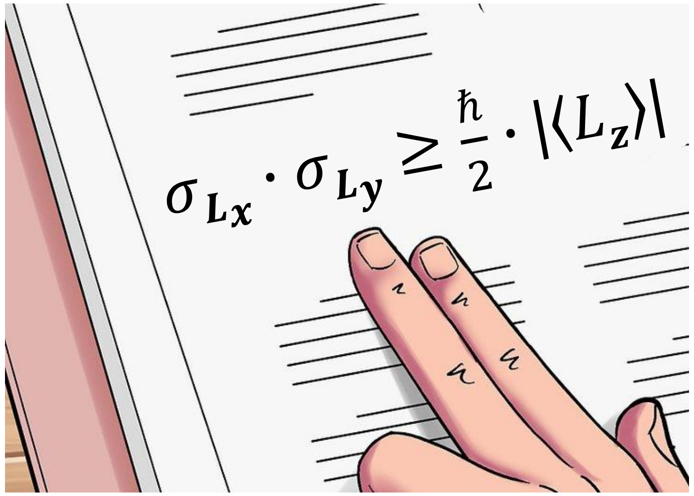


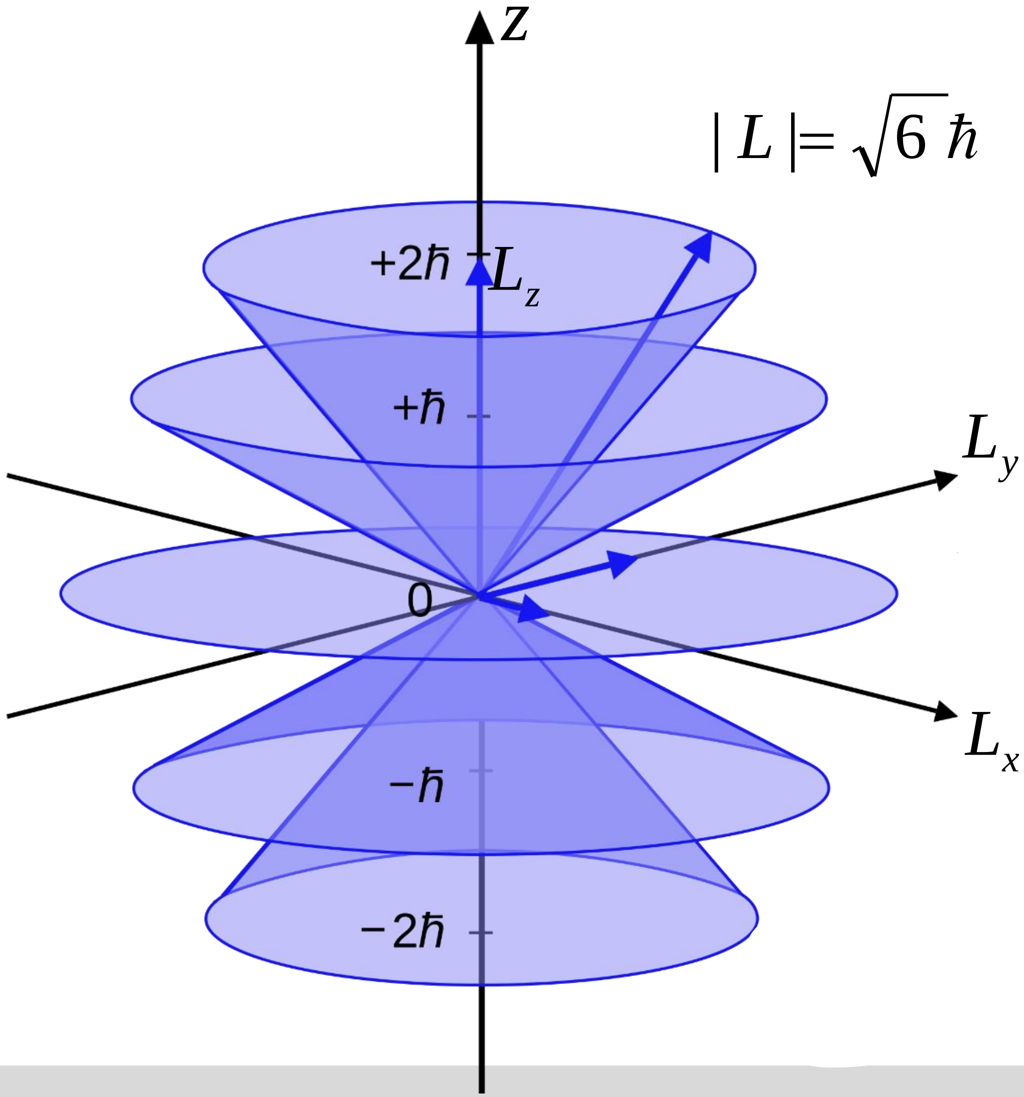
Einschub: Drehimpulse & Präzession

- **Einstellmöglichkeiten** für einen Drehimpuls L für die Quantenzahl ℓ = 2

  - nach Festlegung von |L| und L_z sind L_x und L_y nicht bestimmbar und liegen auf Kegelmänteln

  - die Observablen L_z und L_x sowie L_z und L_y sind komplementär (d.h. Operatoren kommutieren nicht)



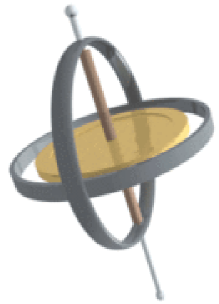


Einschub: Drehimpulse & Präzession

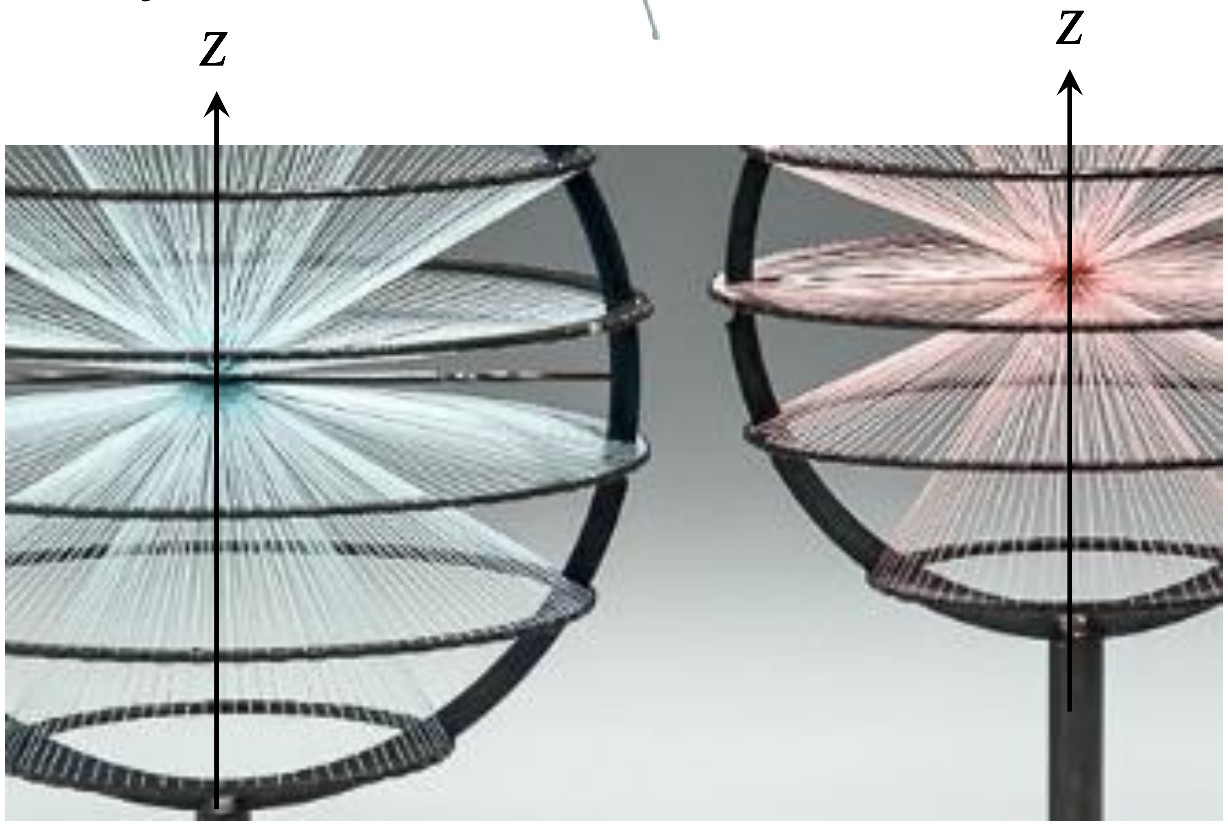
- **Einstellmöglichkeiten** für einen Drehimpuls L und seine Komponenten

  - „**Raumquantisierung**“ durch Wahl der Achse von L_z

  - Präzessionsbewegung von L_x und L_y kann zeitlich nicht aufgelöst werden (Heisenberg)



klassisch



L_x und L_y:
Präzession um z-Achse

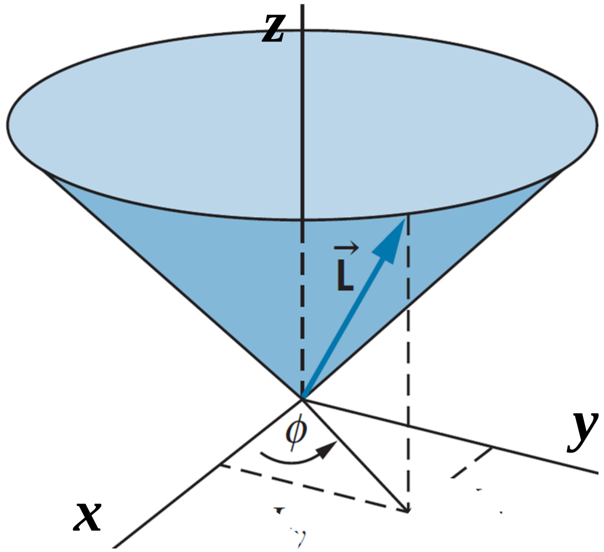
Fun with Facts - Präzession

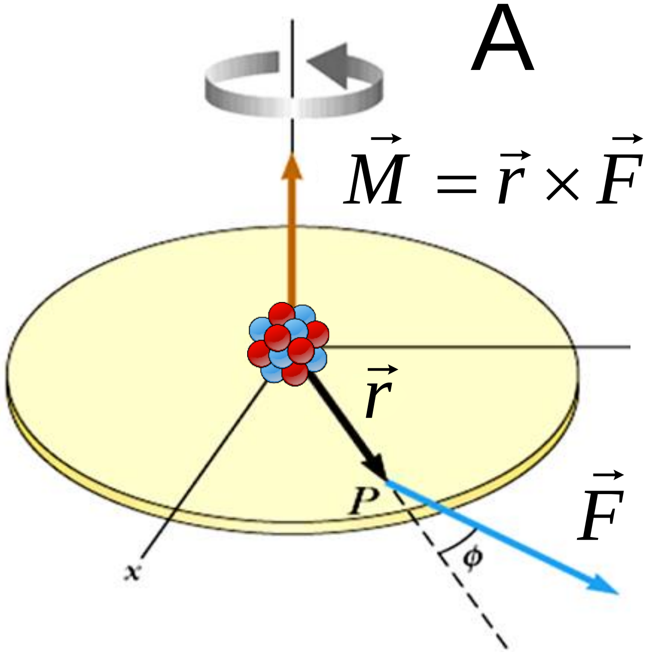
- **Weshalb präzessiert L um z-Achse?** Durch die…

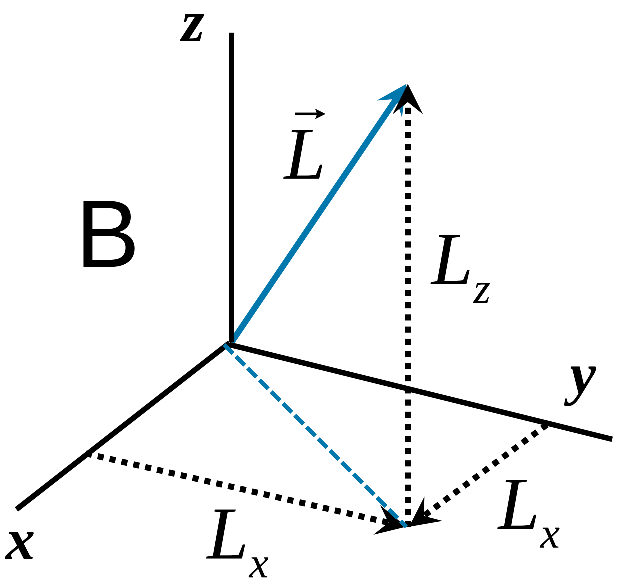
  A) …Einwirkung des Kern-Drehmoments $\vec{M}$

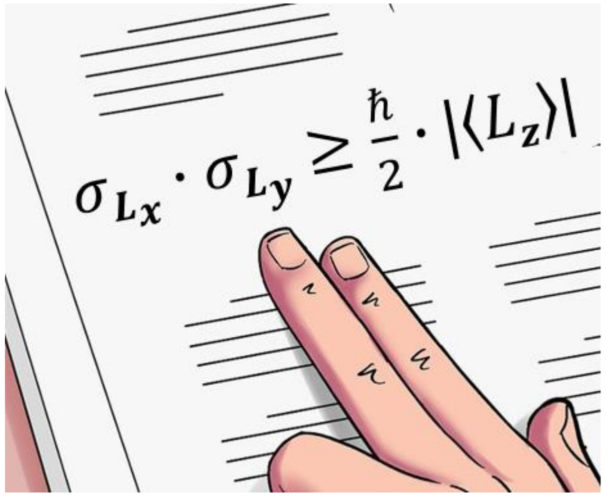
  B) …Erhaltung des Gesamt-Drehimpulses $\vec{L}$

  C) …Inkompatibilität der Observablen (L_z vs. $L_{x,y}$)





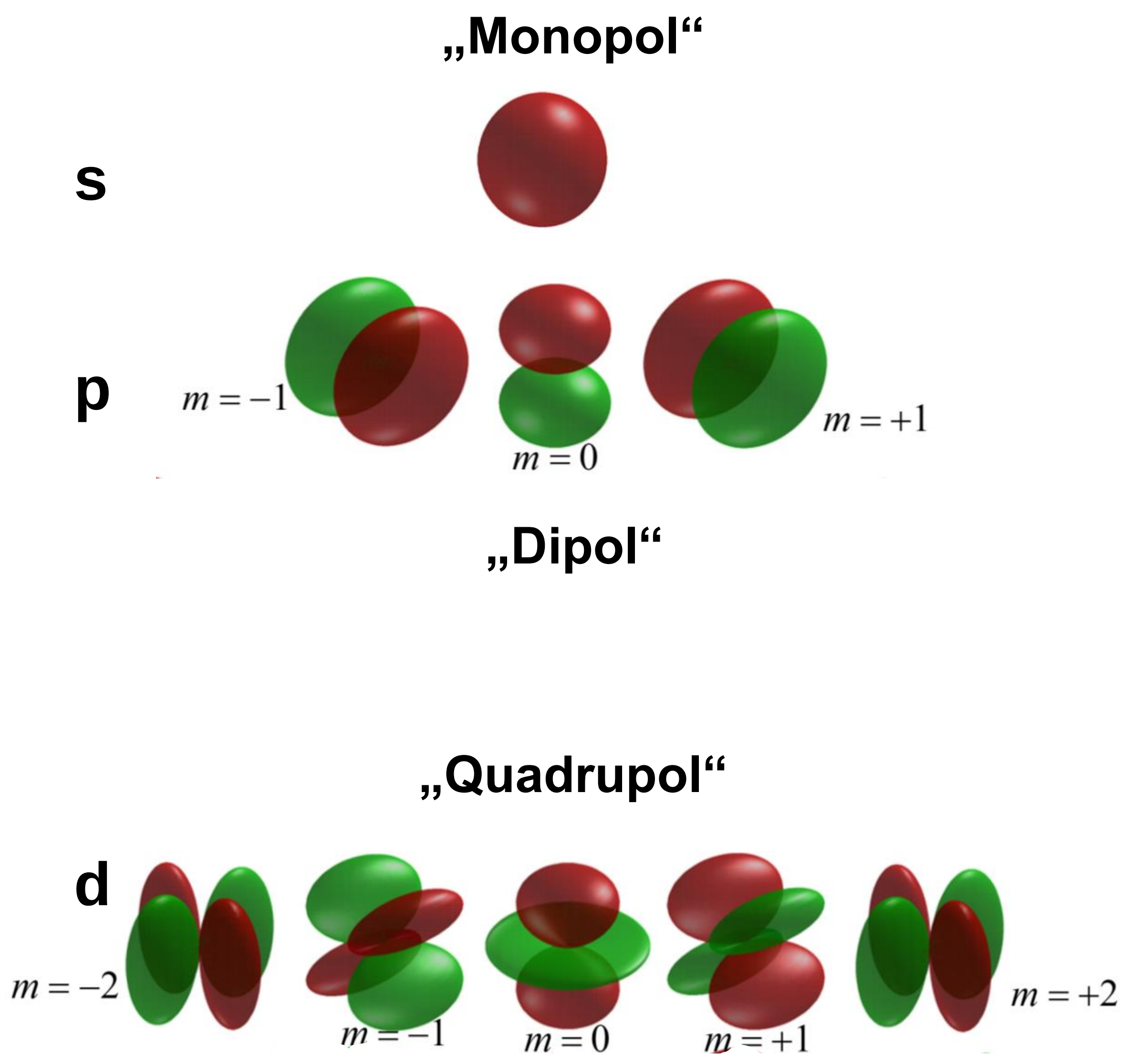




C

Wellenfunktionen des H-Atoms

Orbital	n	*l*	m_l
1s	1	0	0
2s	2	0	0
2p	2	1	0
2p	2	1	±1
3s	3	0	0
3p	3	1	0
3p	3	1	±1
3d	3	2	0
3d	3	2	±1
3d	3	2	±2



Elektronenorbitale

- Gesamtwellenfunktionen Ψ_{nlm}

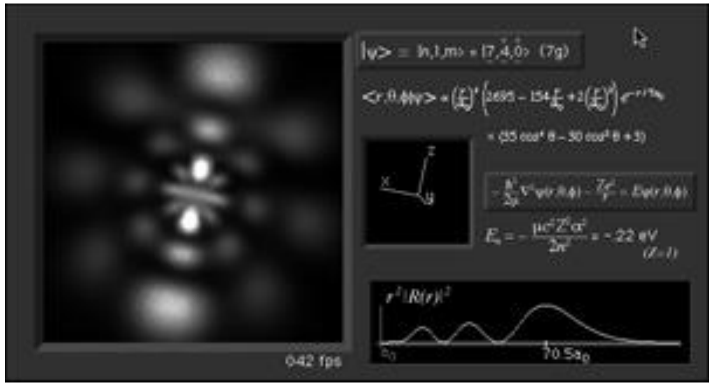
$$\Psi(1s) = \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-r/a_0}$$

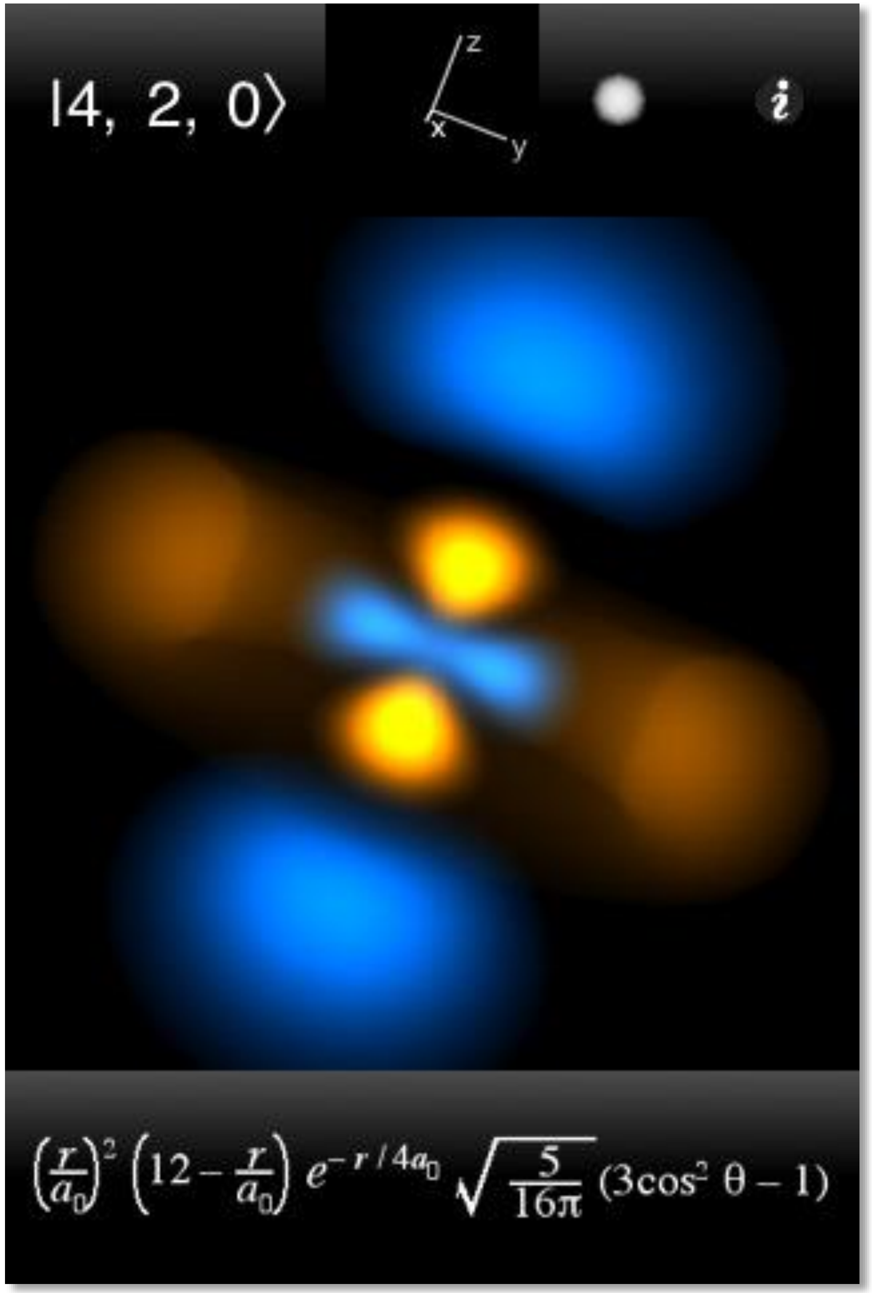
$$\Psi(2s) = \Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \cdot e^{-r/2a_0}$$

$$\Psi(2p) = \Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-r/2a_0} \cdot \cos\theta$$

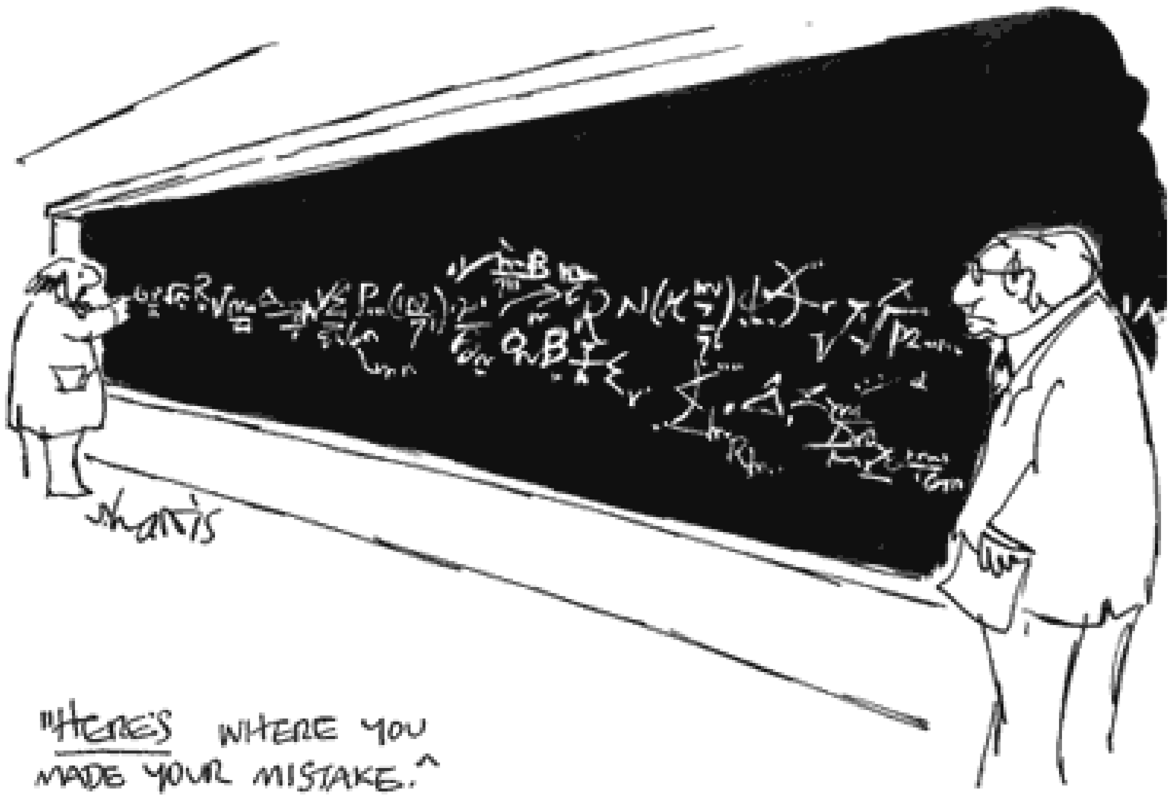
Atoms in a Box

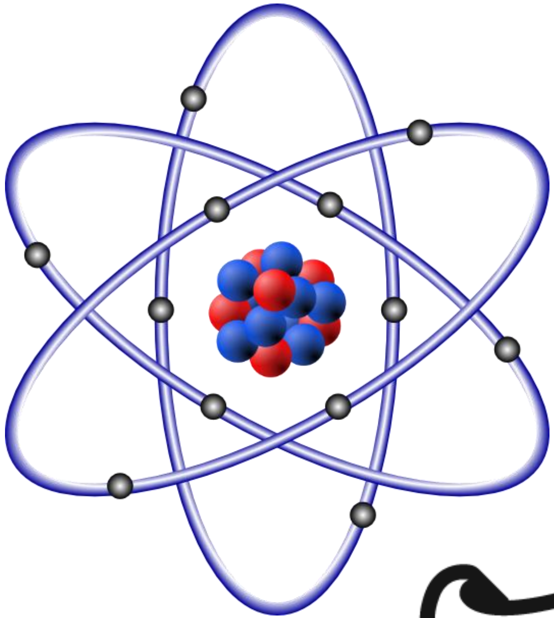
Q: Dauger Research





Winkelterm H-Atom 2019





Moderne Experimental-physik – I