

# Atome, Moleküle & Kerne

Sommersemester 2024

Vorlesung # 9, 16.05.24

Thomas Müller, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik

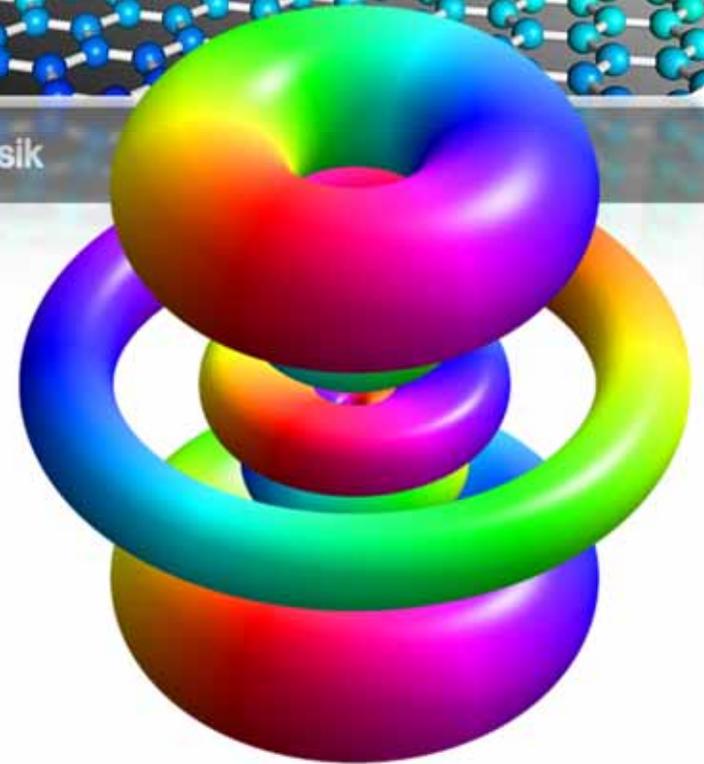
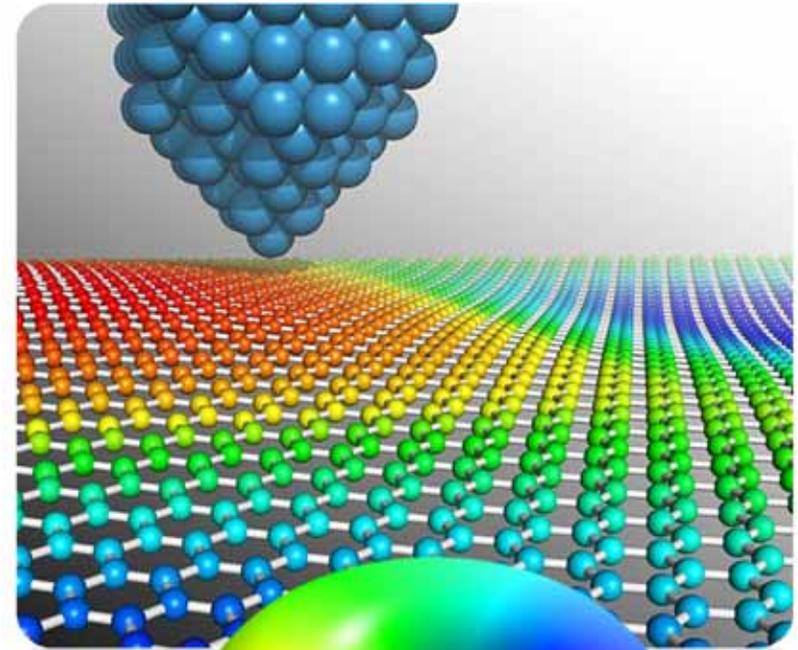
## 5. Elemente der Quantenmechanik

### 5.4 Tunneleffekt

Rastertunnelmikroskop

## 6. Das Wasserstoff-Atom

### 6.1 QM des H-Atoms (Grundzüge)



# Wh: QM-Harmonischer Oszillator

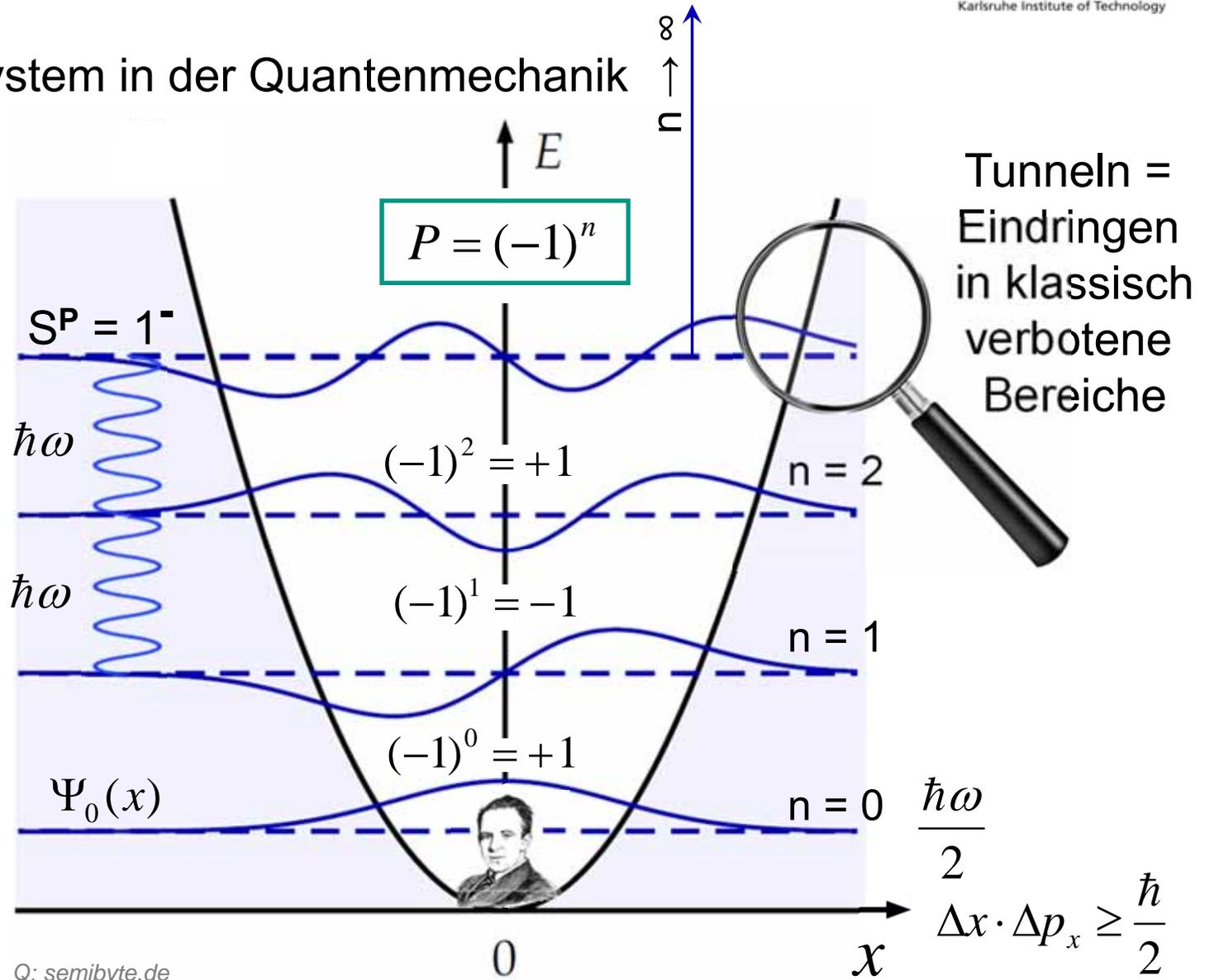
- Grundlegendes System in der Quantenmechanik

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

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

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

Nullpunktsenergie:



# Wh: 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  $\rho$  :

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

- Superpositionsprinzip :

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

- Interpretationen  
Kollaps  
*many worlds*  
Dekohärenz



# Experimentelle Anwendung: das „neue“ Kilogramm

- 2019: Neudefinition der SI Einheiten



$$6.62607015 \times 10^{-34} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$



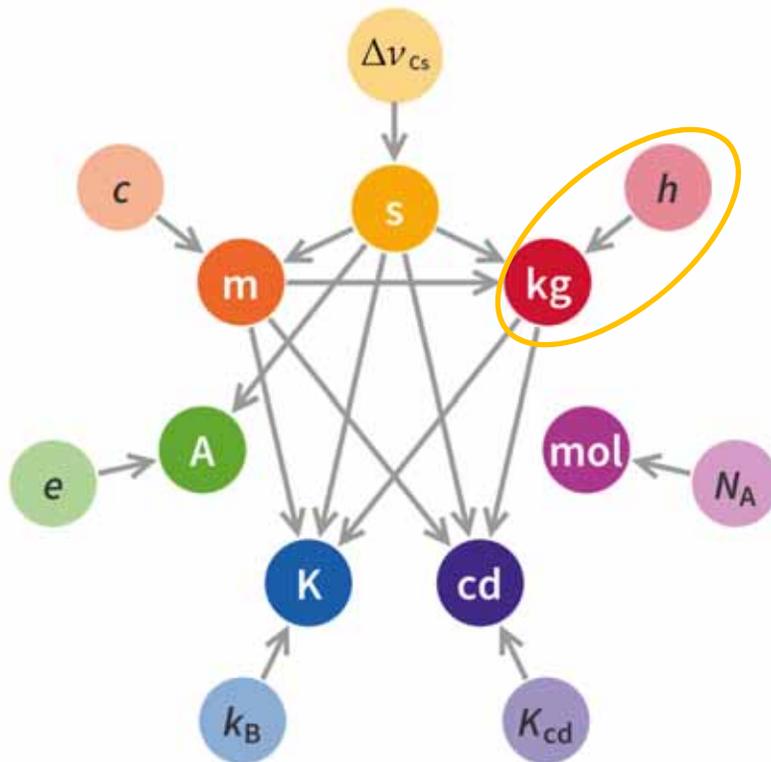
INSTRUMENTATION AND MEASUREMENT | NEWS

## 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)

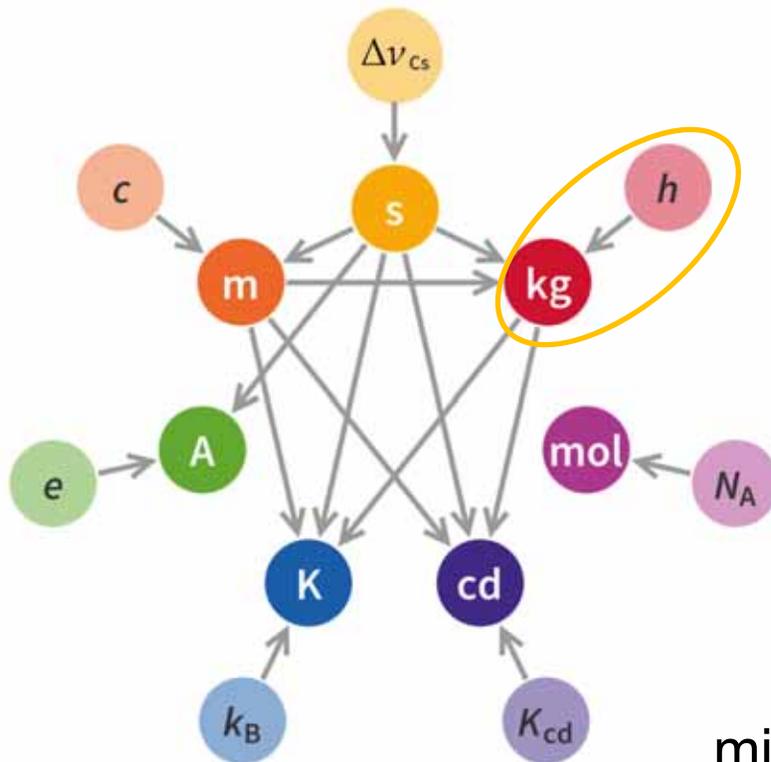


# SI Einheiten – kg nun auf Basis von $h$

- seit 20.5.2019 – Neudefinition der SI Einheiten

Planck-Konstante auf 9 ppb gemessen

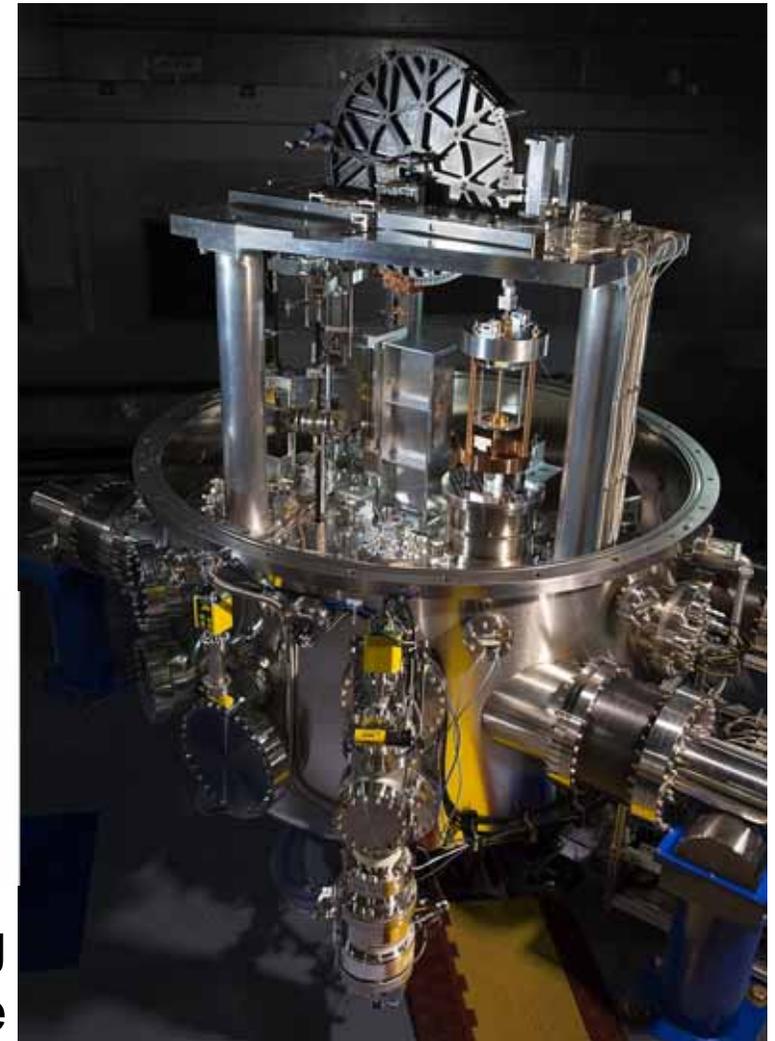
Neudefinition der SI-Einheiten



h



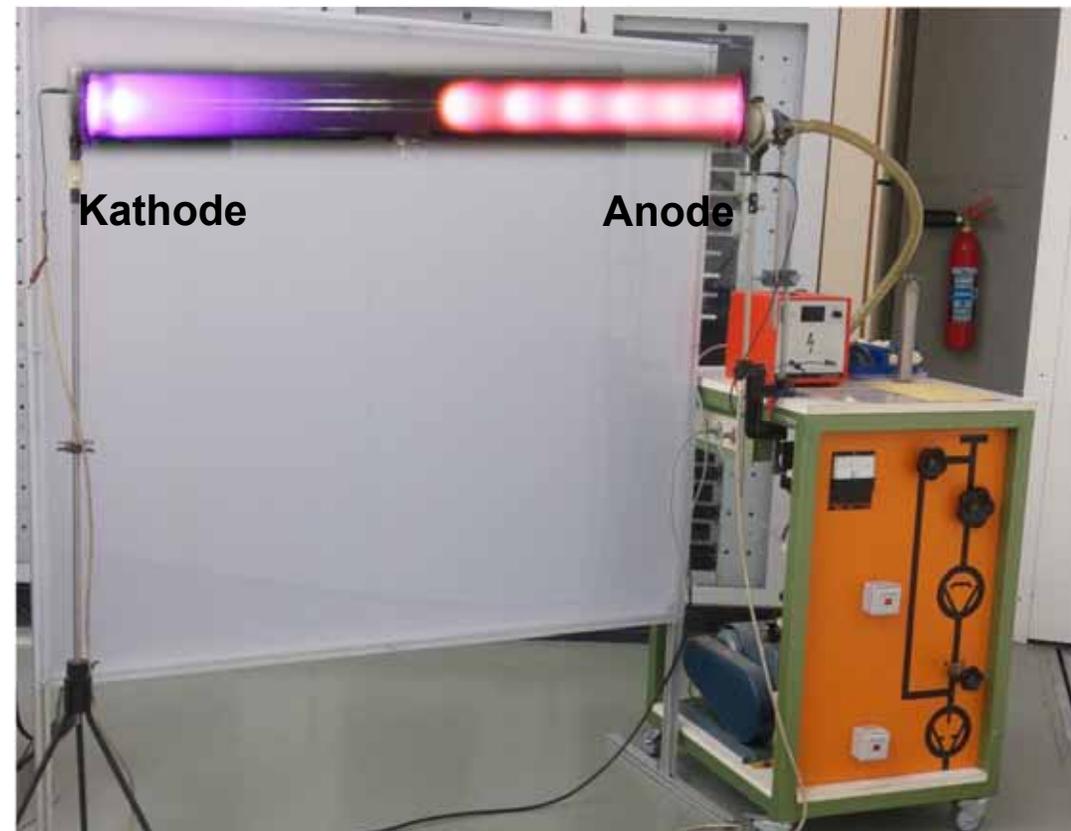
Messung  
mit Kibble-Waage



# Demonstration: selbstständige Gasentladung

## ■ Gasentladung in luftgefülltem Rohr (Kanalstrahlen):

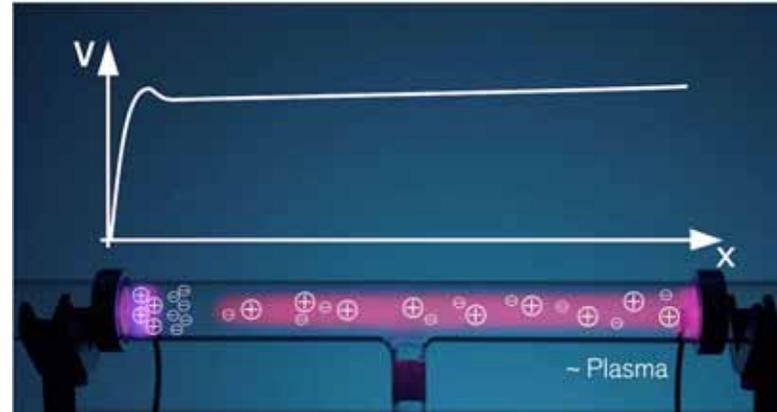
- Elektronen fließen durch Rohr, das mit dünner Luft (80% N<sub>2</sub>) gefüllt ist
- Stoßanregung (zumeist Stickstoff)



# Experiment: selbstständige Gasentladung

## ■ Erläuterung

1. Erzeugung von Elektron-Ion-Paaren zB durch Höhenstrahlung
2. Ion driftet zur Kathode, schlägt Elektronen heraus
3. Elektronen driften Richtung Anode und regen Gasatome/moleküle durch Stöße an
4. Gasatome/moleküle gehen in den Grundzustand, emittieren Licht
5. Bei sehr niedrigem Druck regen driftende Elektronen Gasatom/molekül erneut an



Gasdruck  
hoch

**Kathode**

**Anode**



Gasdruck  
niedrig

Schöne Erklärung und Quelle dieser Abb.:

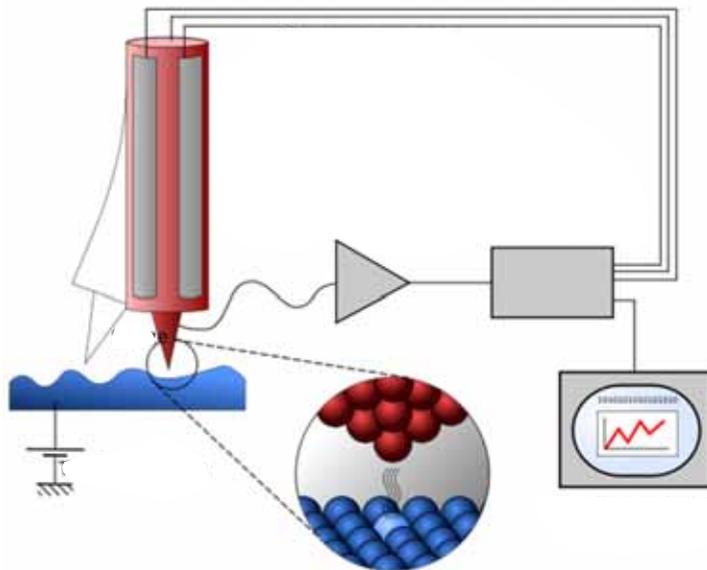
<https://www.physik.uni-konstanz.de/vs/themen/atom-und-quantenphysik/gasentladung/kanalstrahlroehre/>

# 5.4 Tunneleffekt

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

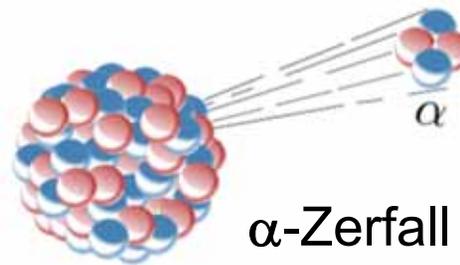
- Beispiele:

ATOME



Rastertunnelmikroskop

KERNE



$\alpha$ -Zerfall



Kernfusion im Sonneninneren

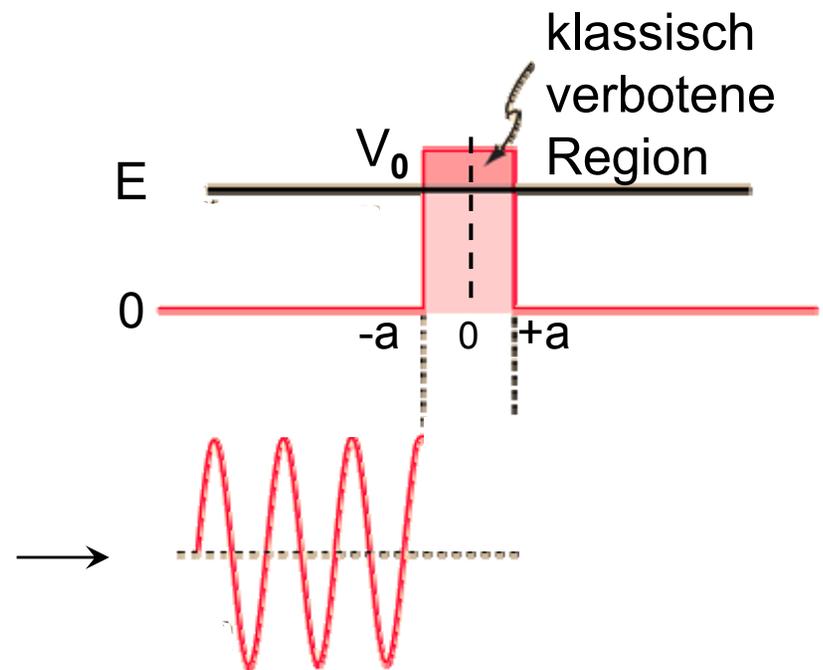
*“In der Quantenwelt ist es möglich, sich durch eine energetisch verbotene Zone schnell hindurchzumogeln.” (Richard Feynman)*

# Durchtunneln einer Barriere

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

- Potenzialbarriere  $V_0$  in  $[-a, +a]$
- Quantenobjekt (Masse  $m$ ) mit  $E < V_0$

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  $A = 1$

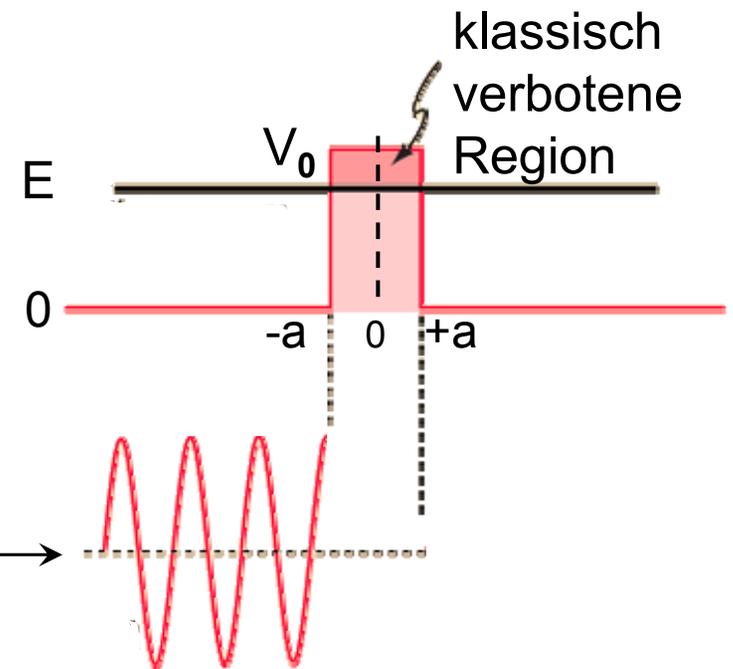
reflektiert  
Rückstreuung  $R < 1$

einlaufende Welle

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

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

reflektierte Welle



# Durchtunneln einer Barriere

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

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

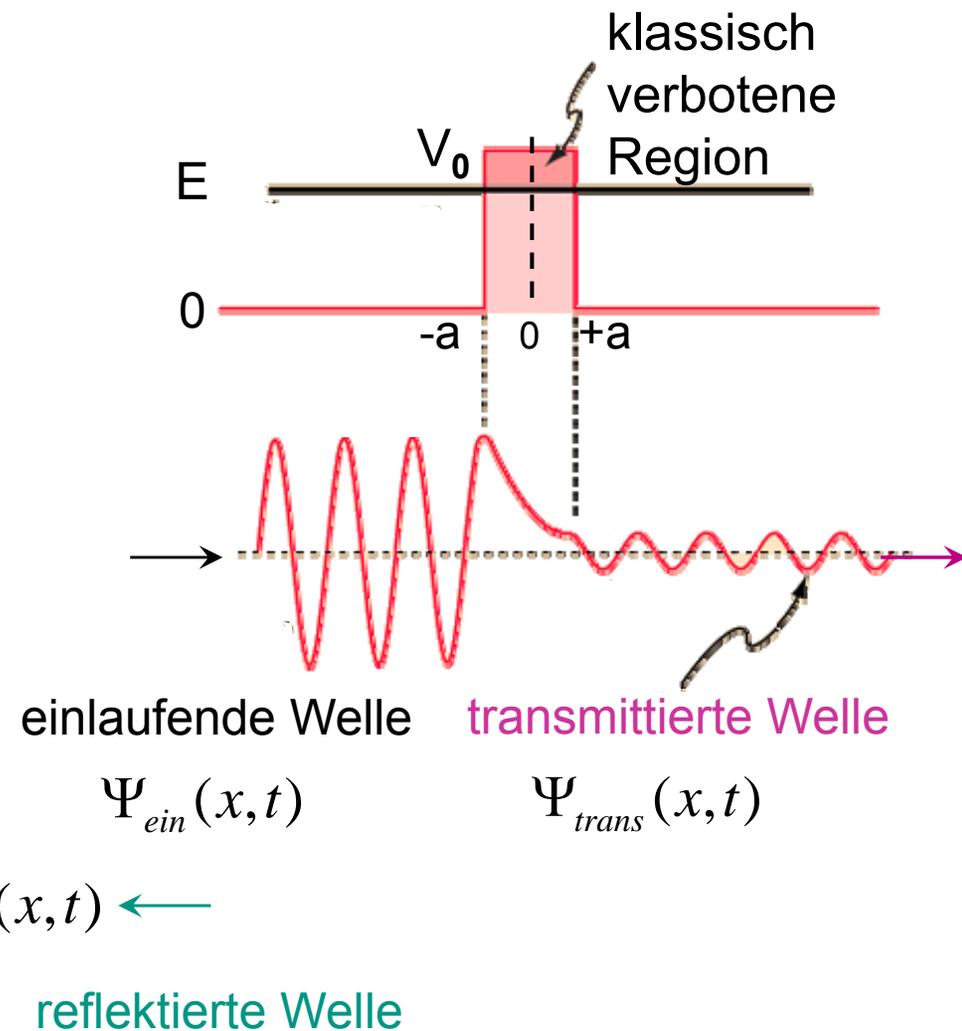
- **transmittierte** Welle hinter Barriere:

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

Transmissionskoeffizient  $T$

- Kontinuitätsgleichung  
(Teilchenzahl bleibt erhalten)

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



# Durchtunneln einer Barriere

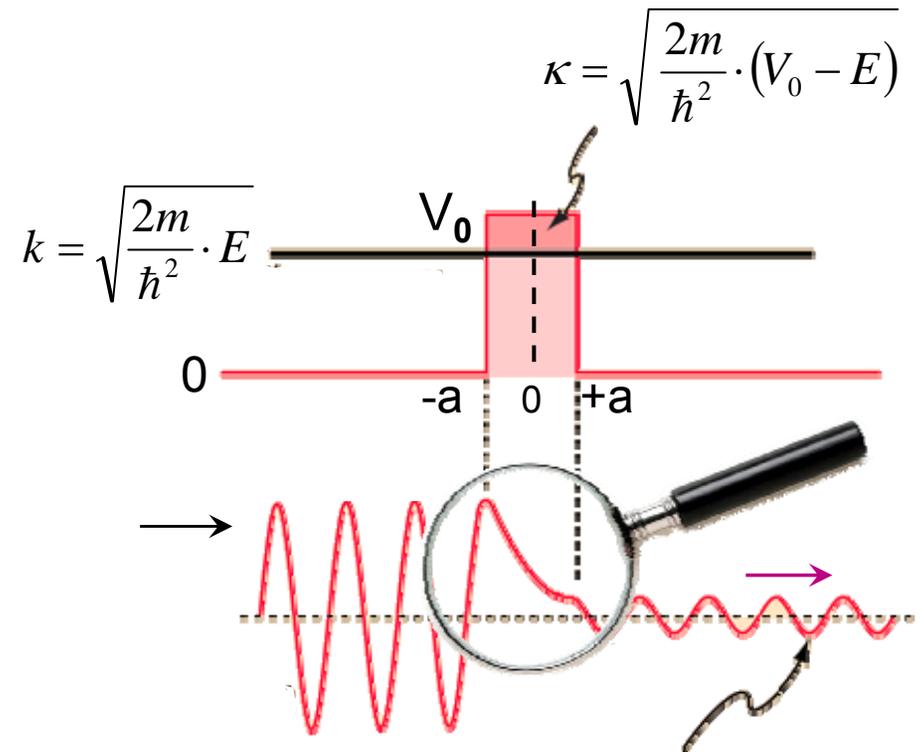
## ■ **Tunneleffekt:** Bestimmung von T

- Schrödinger-Gleichung lösen
- Wellenfunktion innerhalb Barriere: exponentiell abfallend

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

## ■ bestimme die 4 Koeffizienten

T, R,  $\alpha$  und  $\beta$  durch die Anforderung der **Stetigkeit** von  $\Psi(x)$  und  $\Psi'(x)$  an Stellen  $x = -a$  und  $x = +a$



einlaufende Welle

transmittierte Welle

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

$$\Psi_{\text{trans}}(x, t)$$

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

reflektierte Welle

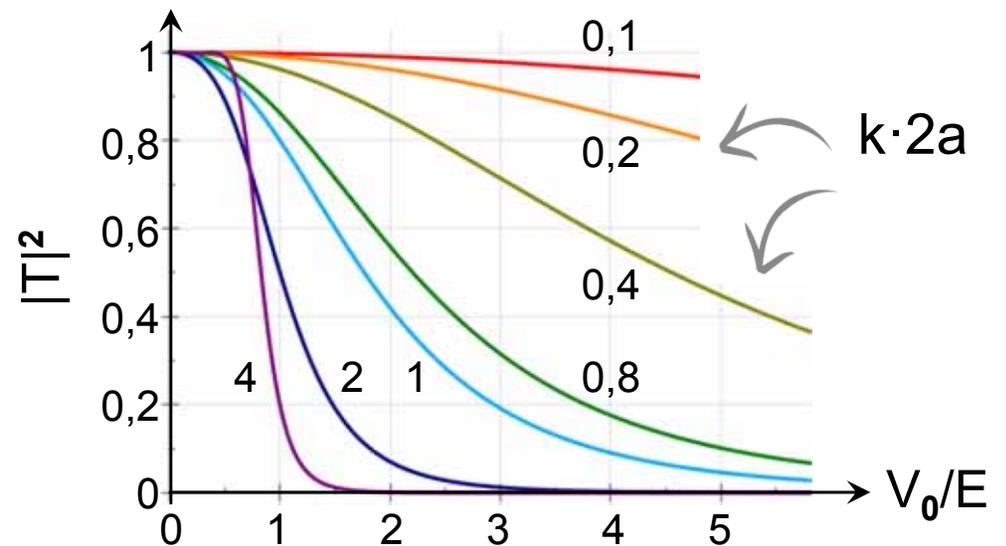
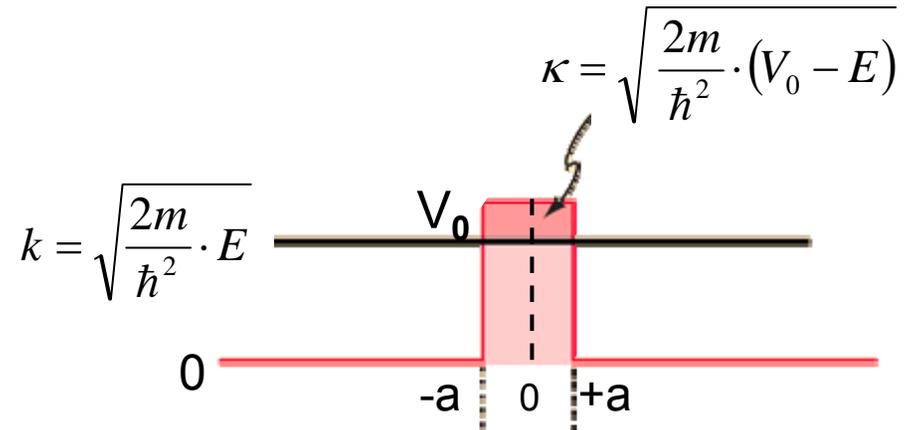
# Durchtunneln einer Barriere

## ■ Tunneleffekt: Bestimmung von T

Transmissions-Koeffizient

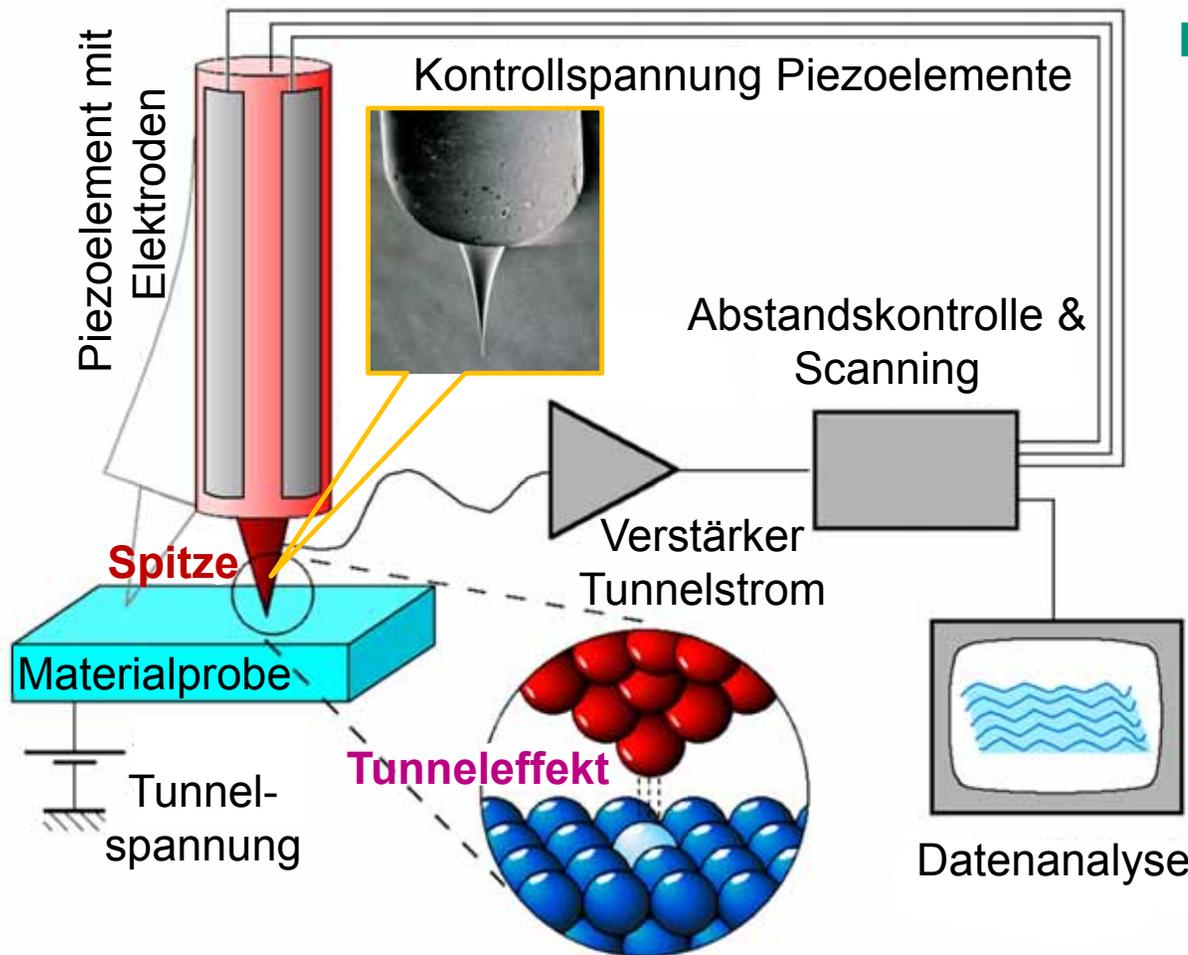
$$T(E) = e^{-2 \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \cdot (V_0 - E)} \cdot 2a}$$

- kleines T wenn
  - $V_0 \gg E$       hohe und
  - $a \gg \lambda$       breite Barriere
- bei  $V(x)$  über Barriere integrieren (z.B.  $\alpha$ -Zerfall)



# Anwendung - Rastertunnelmikroskop

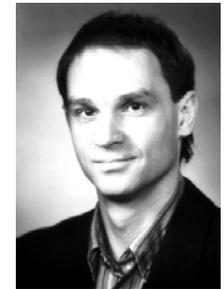
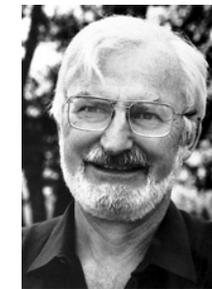
- Aufgaben eines **Rastertunnelmikroskops**: Abbildung von atomaren Prozessen (bzw. Eigenschaften) einer Festkörper-Oberfläche



- Prinzip: Messung des **Tunnelstroms** zwischen Sondenspitze und Substratoberfläche



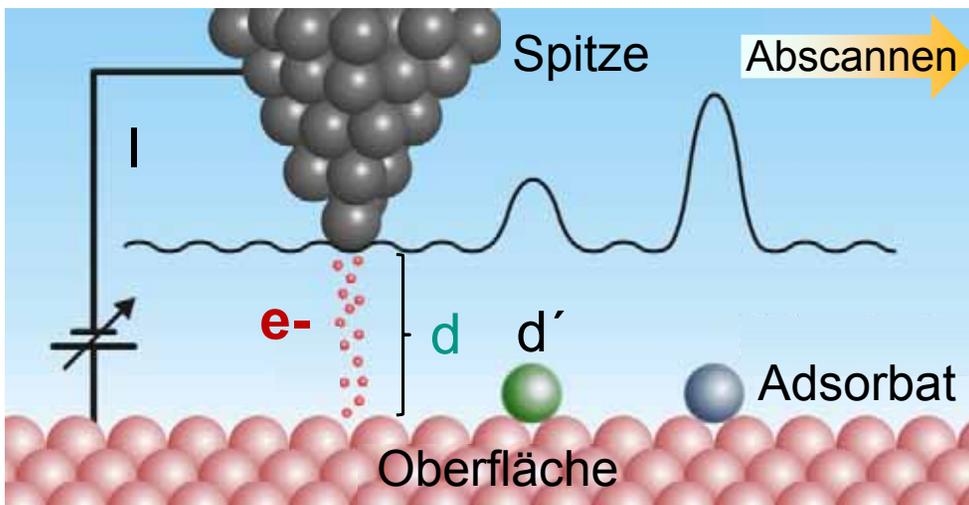
Nobelpreis  
1986



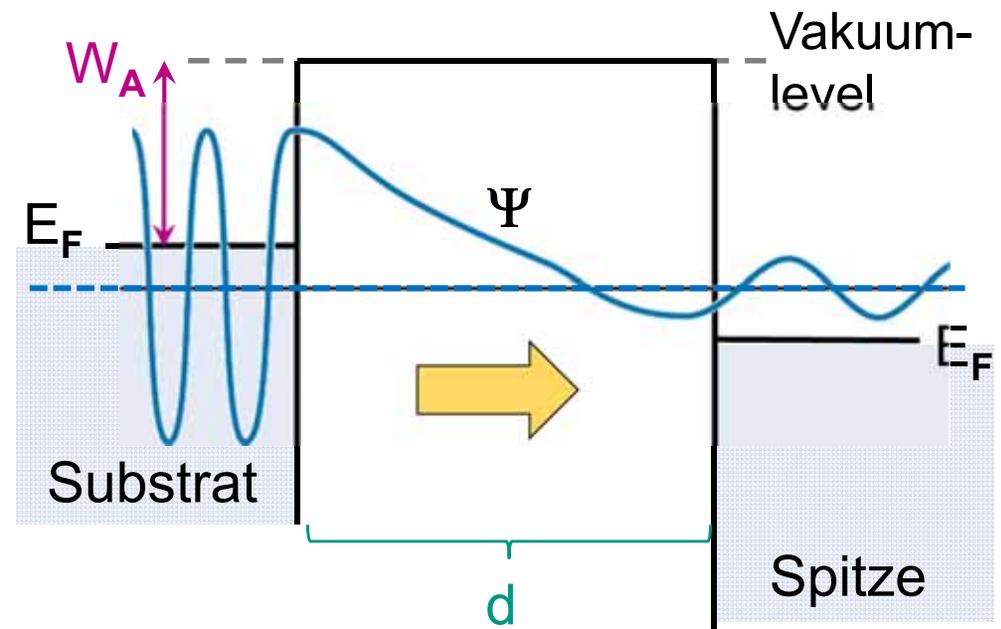
Heinrich Rohrer Gerd Binnig

# Anwendung - Rastertunnelmikroskop

- Größe des **Tunnelstroms** ( $I = 1 \text{ pA} - 10 \text{ nA}$ ) 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)
  - **Höhenprofil**: beim Abscannen wird Tunnelstrom  $I$  konstant gehalten
    - ⇒ Piezo-Elemente zum Verfahren der Sondenspitze (sub-nm-Bereich)

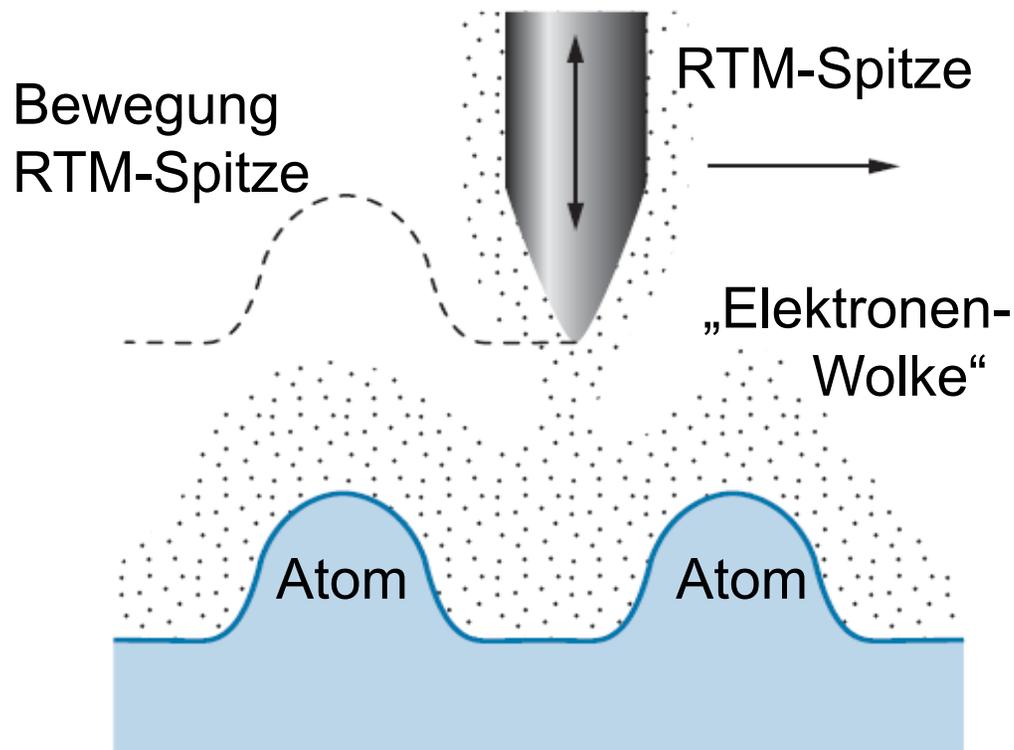
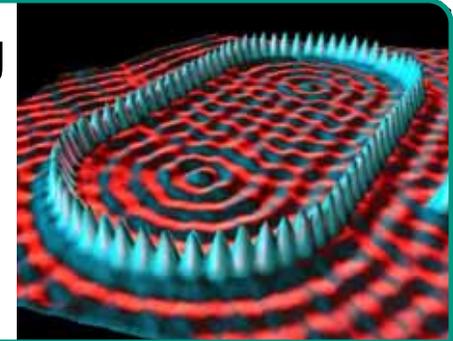


Spitze nur wenige nm oberhalb des Substrats positioniert

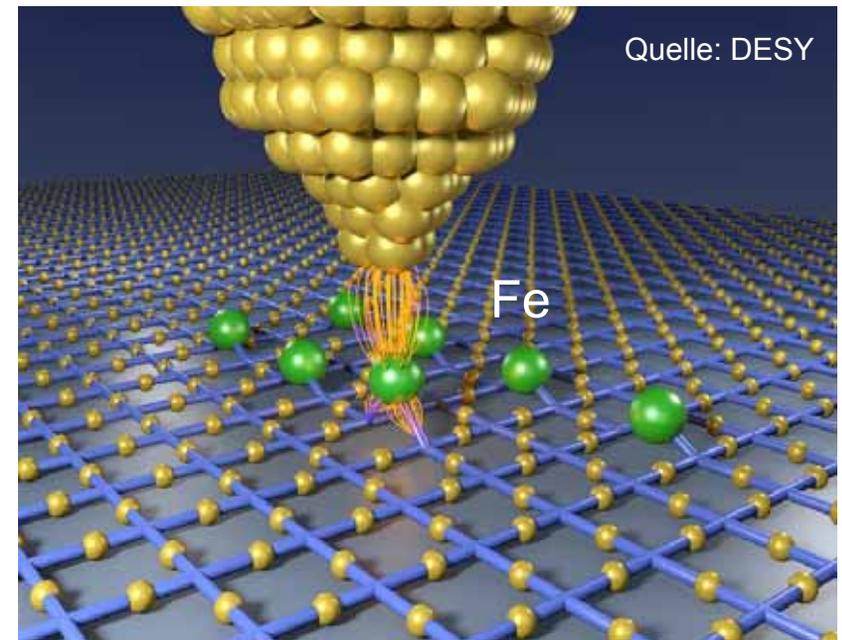


# Anwendung - Rastertunnelmikroskop

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

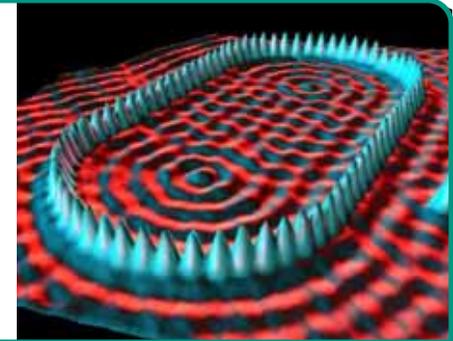


RTM-Anwendung: Fe-Atome positioniert auf Cu-Nitrit

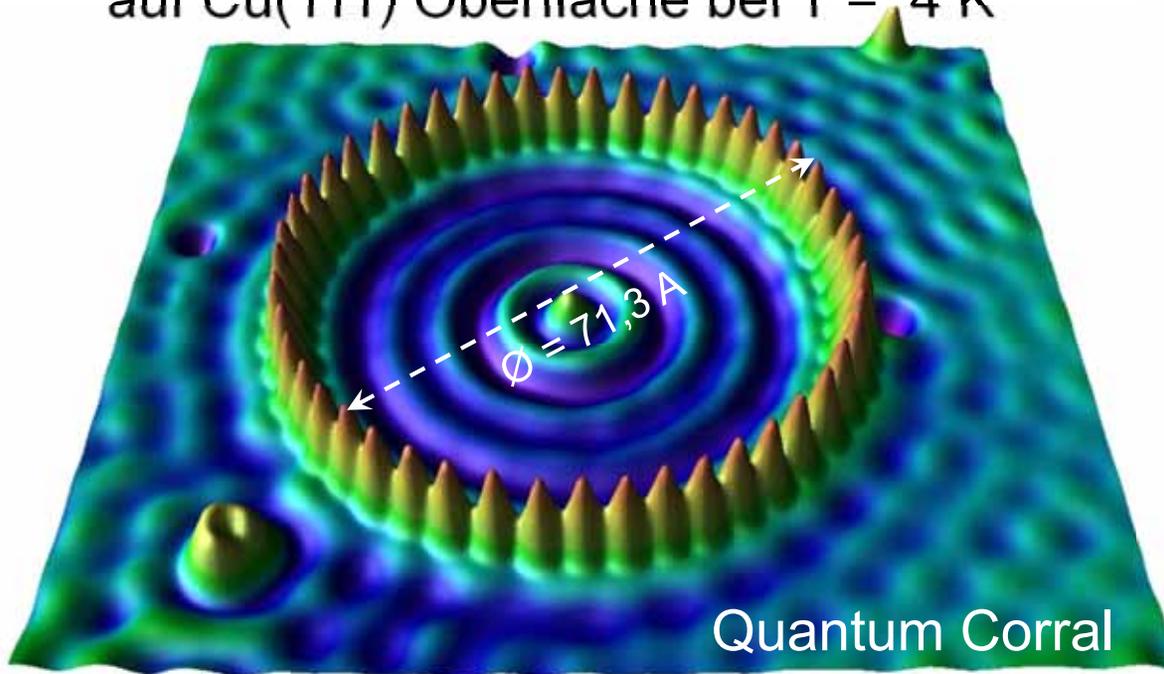


# Anwendung - Rastertunnelmikroskop

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

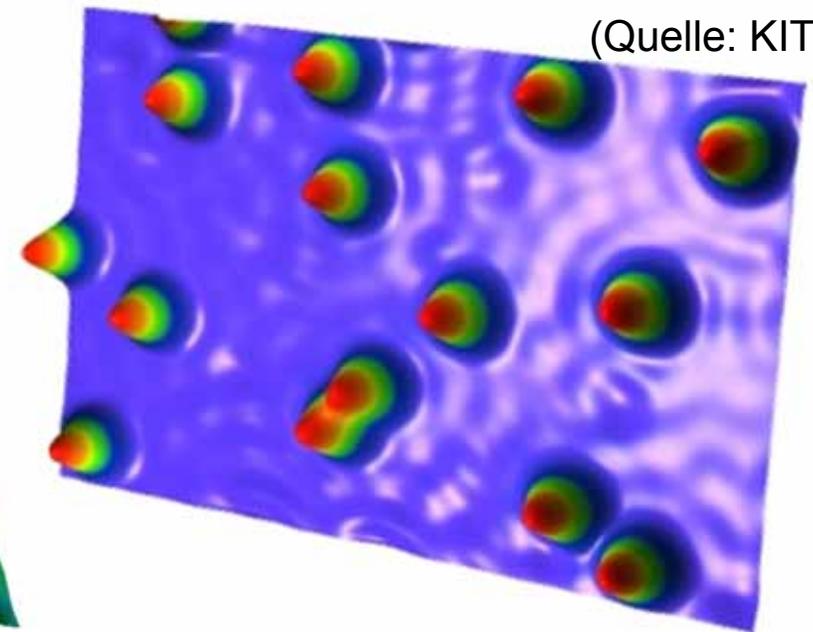


Ring aus 48 Fe-Atomen positioniert auf Cu(111) Oberfläche bei  $T = 4 \text{ K}$



Holmium Atome auf Platin bei  $T = 1 \text{ K}$

(Quelle: KIT)



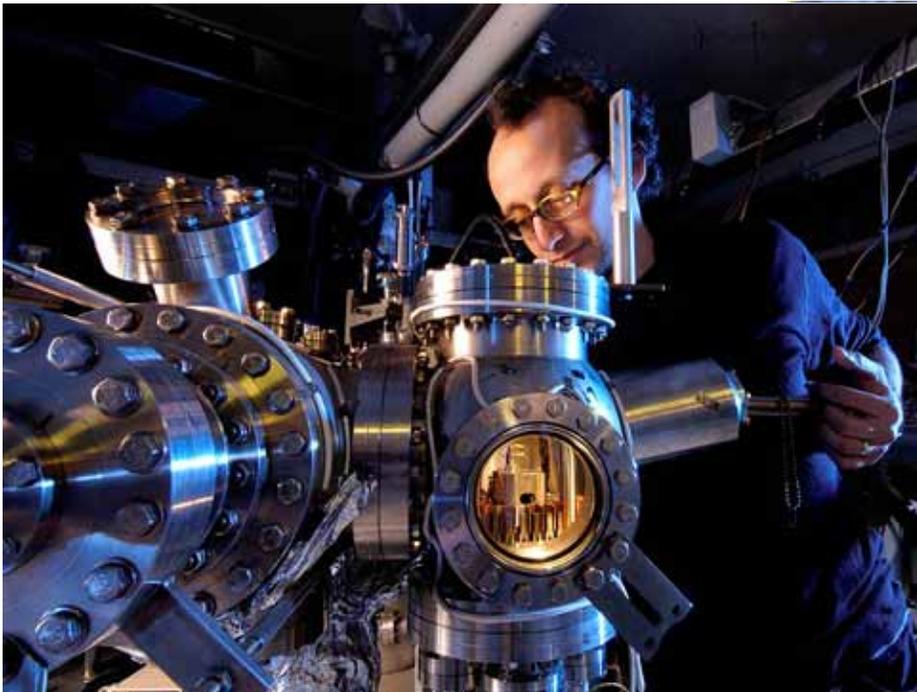
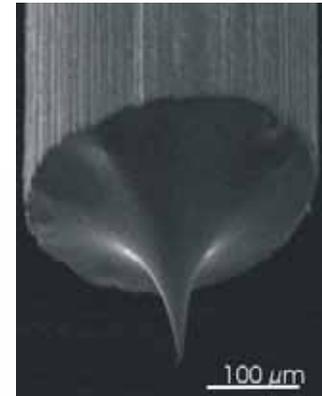
# Anwendung - Rastertunnelmikroskop

## ■ Rastertunnelmikroskopie:

- Versuch im Fortgeschrittenen-praktikum
- großer weltweiter Markt

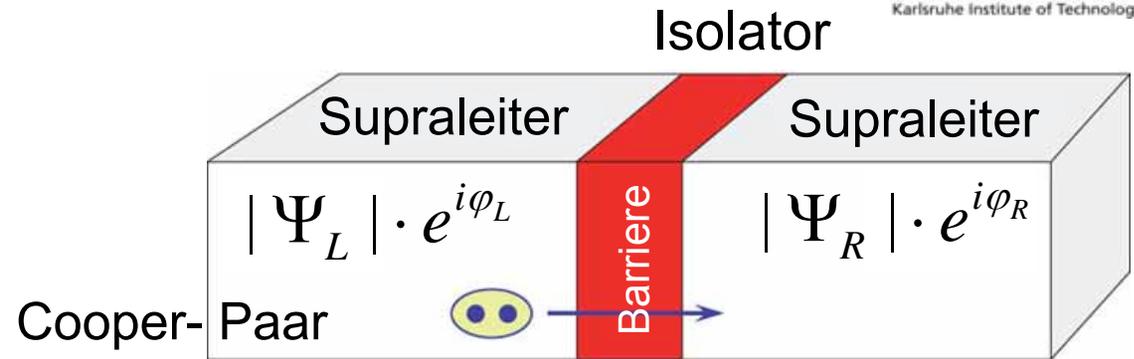


typischer Aufbau eines Rastertunnelmikroskops

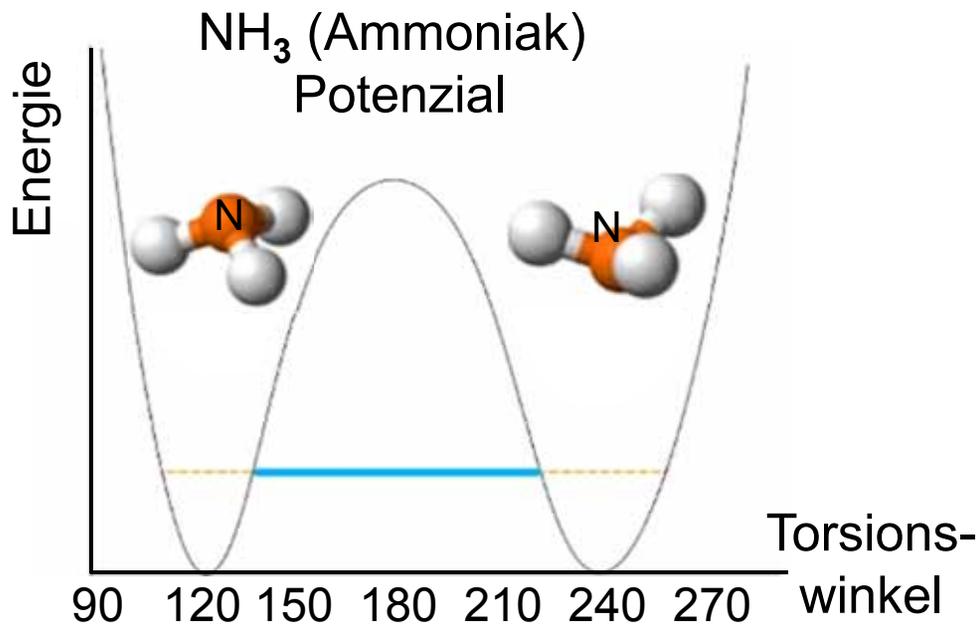


# Tunneleffekt - weitere Beispiele

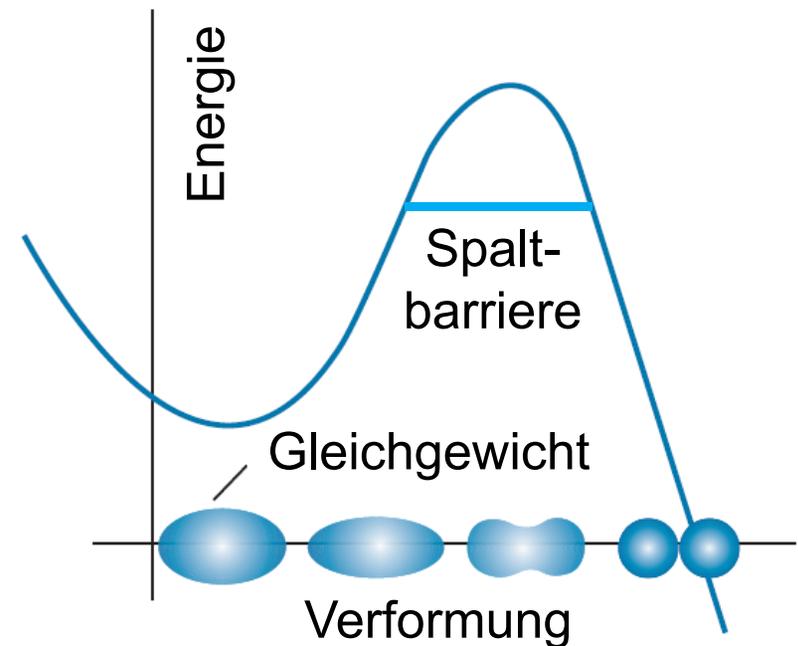
**Festkörper:**  
Josephson-Kontakt



**Moleküle;**  
Inversion



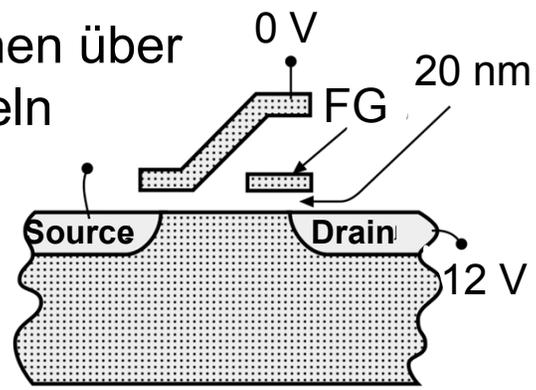
**Kerne:**  
Kernspaltung



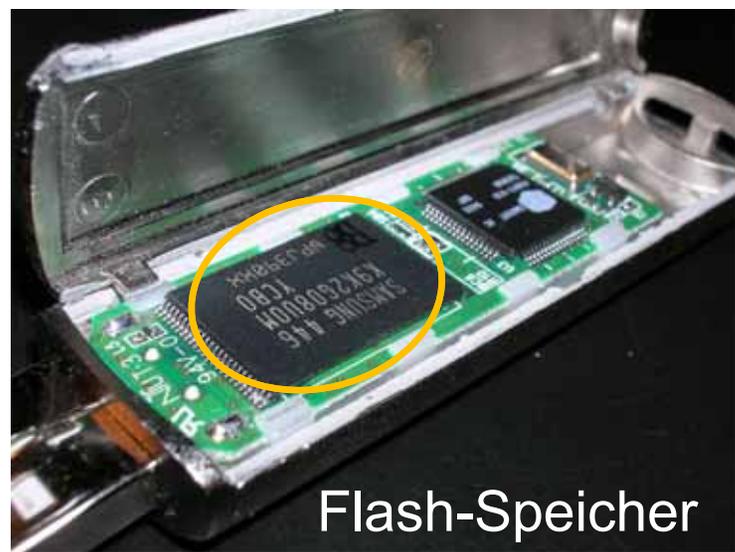
# Tunneleffekt in Aktion



Löschen über Tunneln

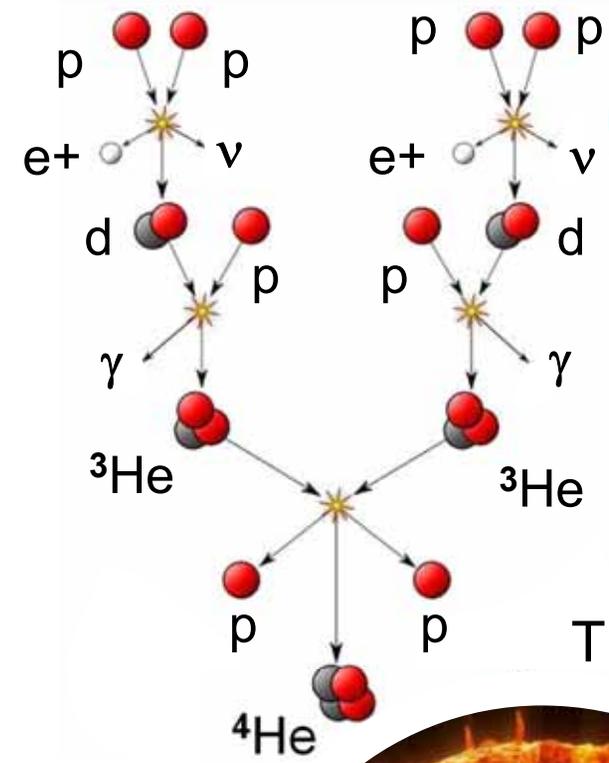


USB-Sticks, Speicherkarten

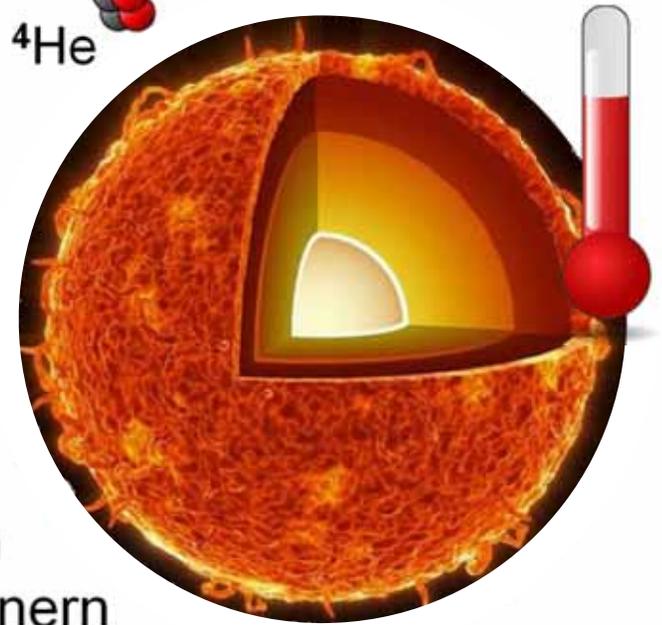


Flash-Speicher

Q: Wikipedia



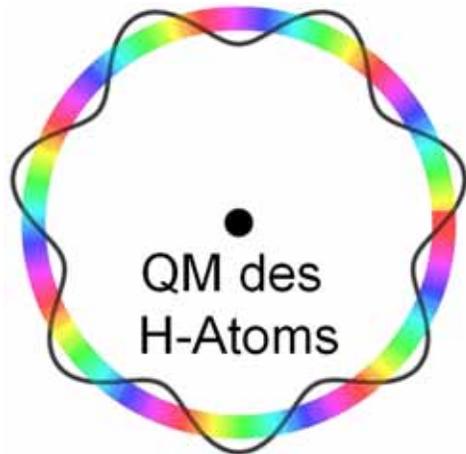
$T \sim 15 \text{ Mio. K}$



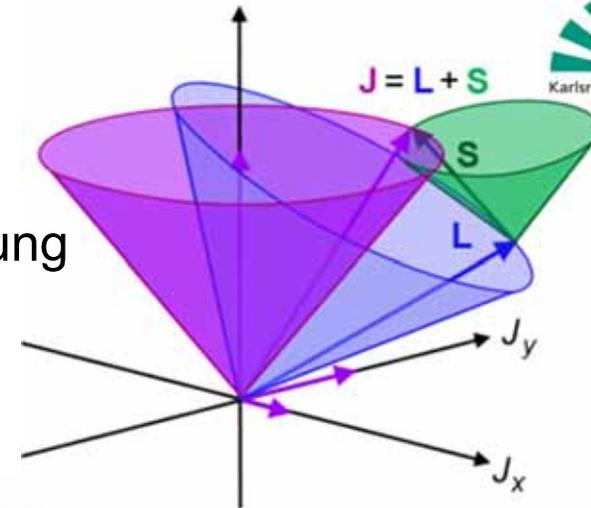
Fusion im Sonneninnern

# 6. Das Wasserstoff-Atom

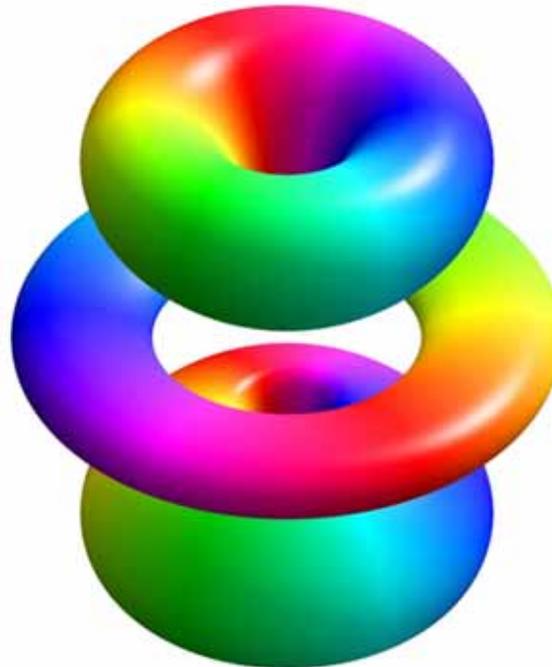
## ■ Themengebiete



Feinstruktur & Spin-Bahnkopplung



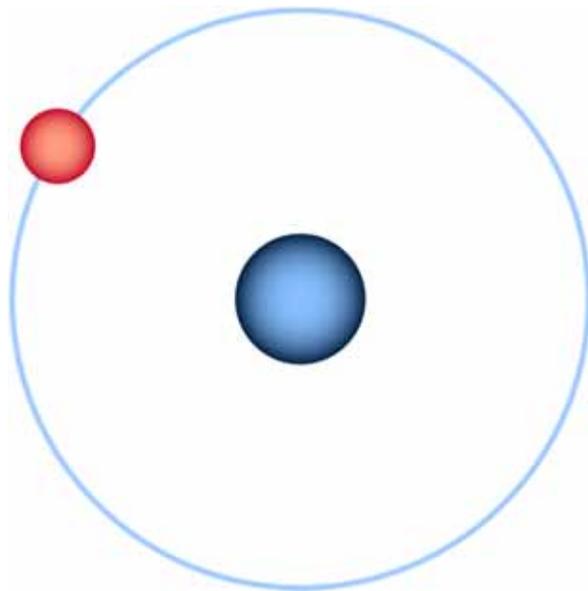
Schalenstruktur & Termschema



Bahn-und Spinmagnetismus

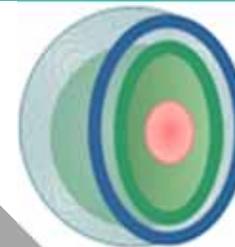
# 6.1 Quantenmechanik des H-Atoms

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

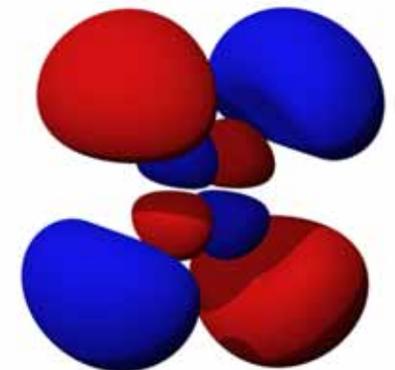


Elektronen in  
klass. Kreisbahn

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



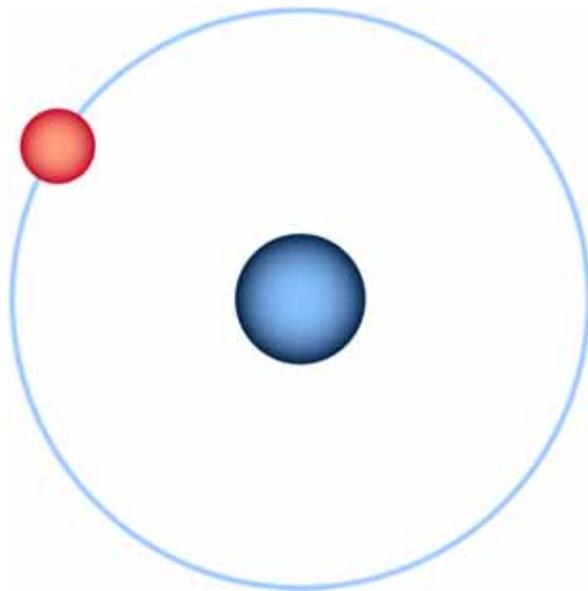
Radiale  
Wahrscheinlichkeits-  
dichte von Elektronen



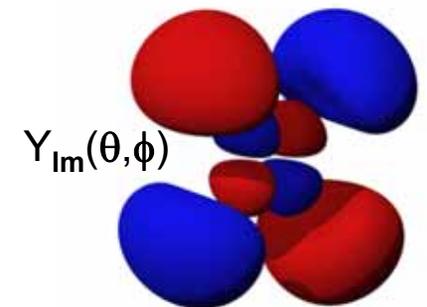
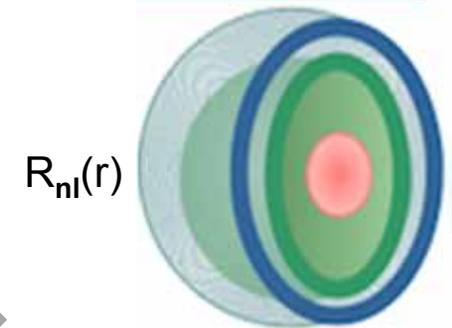
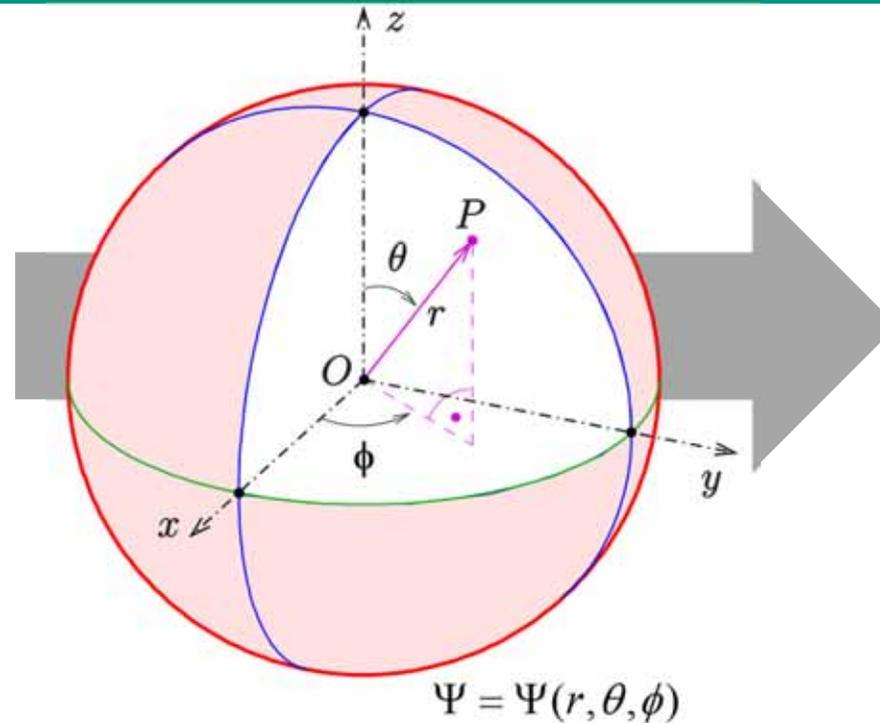
Orbitale von Elektronen  
mit Bahndrehimpuls

# Quantenmechanik des H-Atoms: Ansatz

- **Schrödinger-Gleichung** für das H-Atom in 3 Dimensionen
  - ⇒ Ansatz Wellenfunktion  $\Psi$  in **Kugel-Koordinaten**
  - zentral ist Separationsansatz in 2 unabhängige Anteile:  
**Radialanteil**  $R_{nl}(r)$  und **Winkelanteil**  $Y_{lm}(\theta, \phi)$



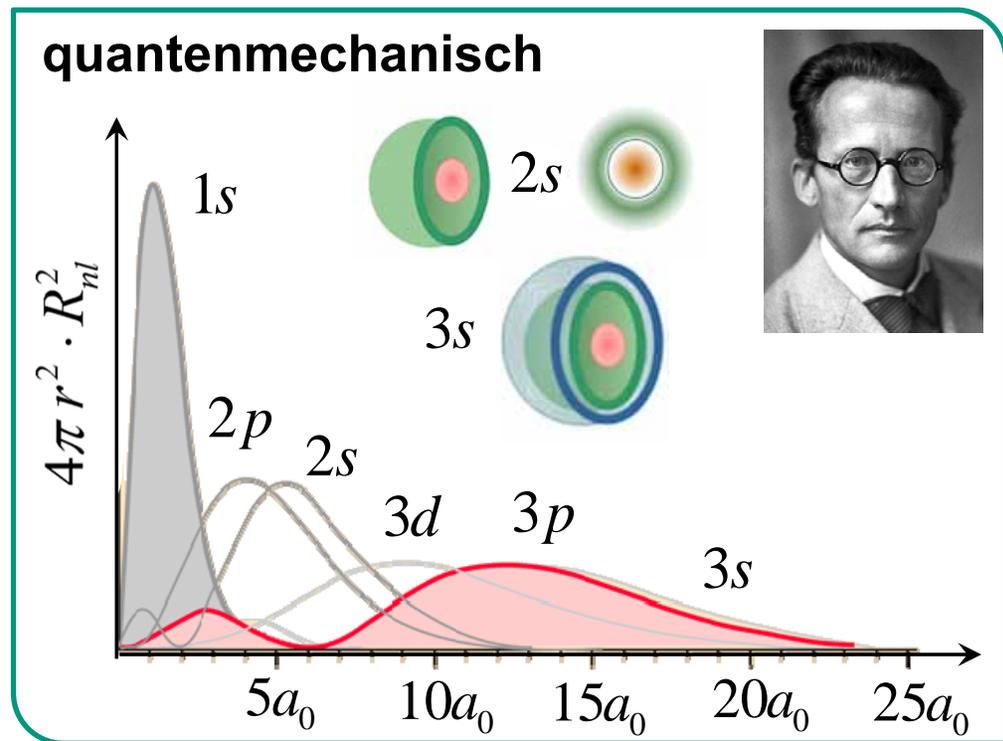
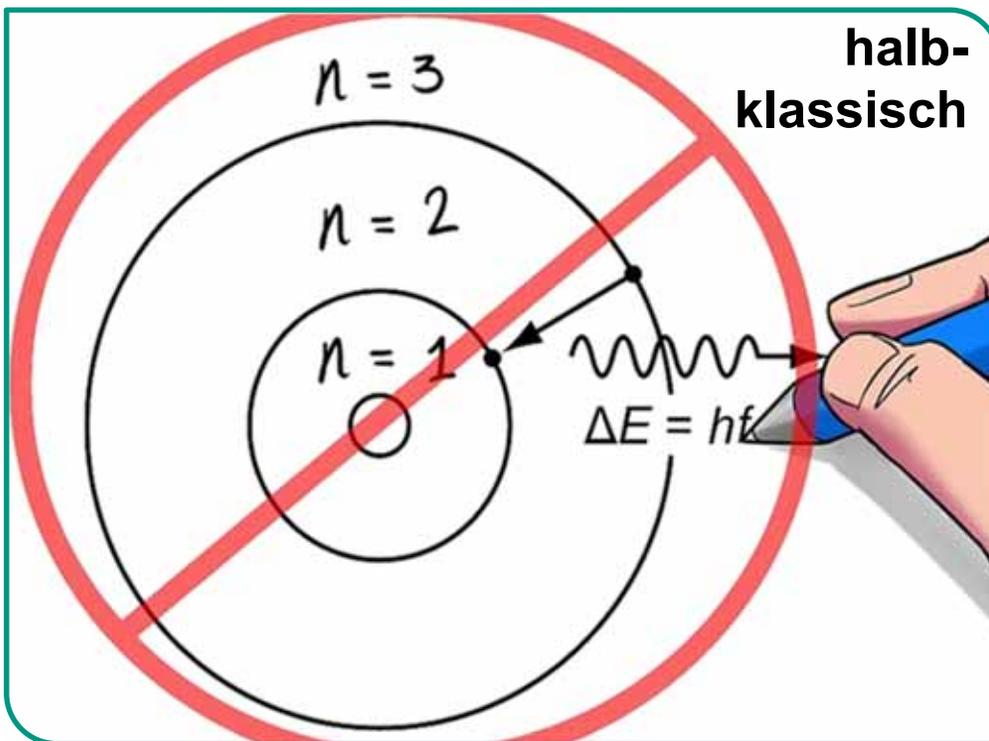
Elektronen in  
klass. Kreisbahn



# Radialfunktion – semi-klassisch & QM

## ■ Radialanteil $R(r)$ der Wellenfunktion:

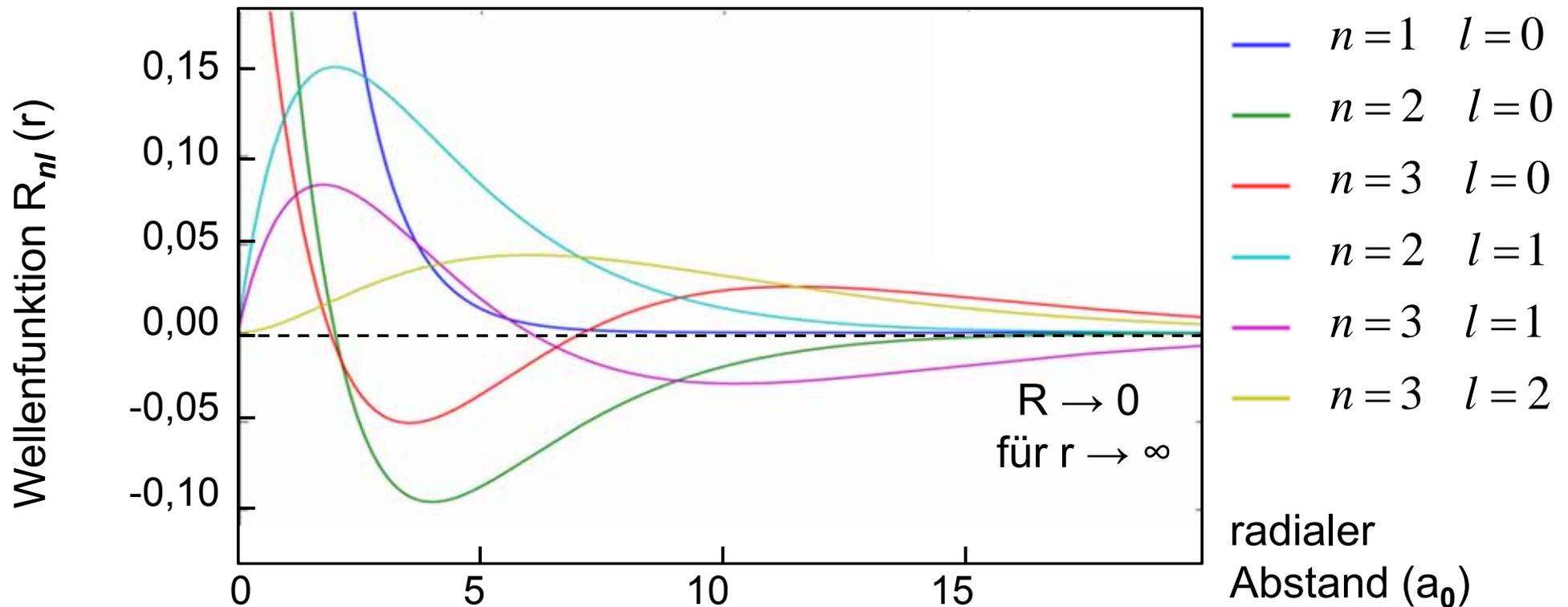
- $|R^2|$  beschreibt die Wahrscheinlichkeit ein Elektron in radialem Abstand  $r$  (in atomaren Einheiten  $a_0$ ) vom Kern zu finden
- $R$  ist abhängig von **Hauptquantenzahl  $n$**  und **Bahndrehimpulszahl  $\ell$**



# Radialfunktion

## ■ Radialanteil $R(r)$ der Wellenfunktion:

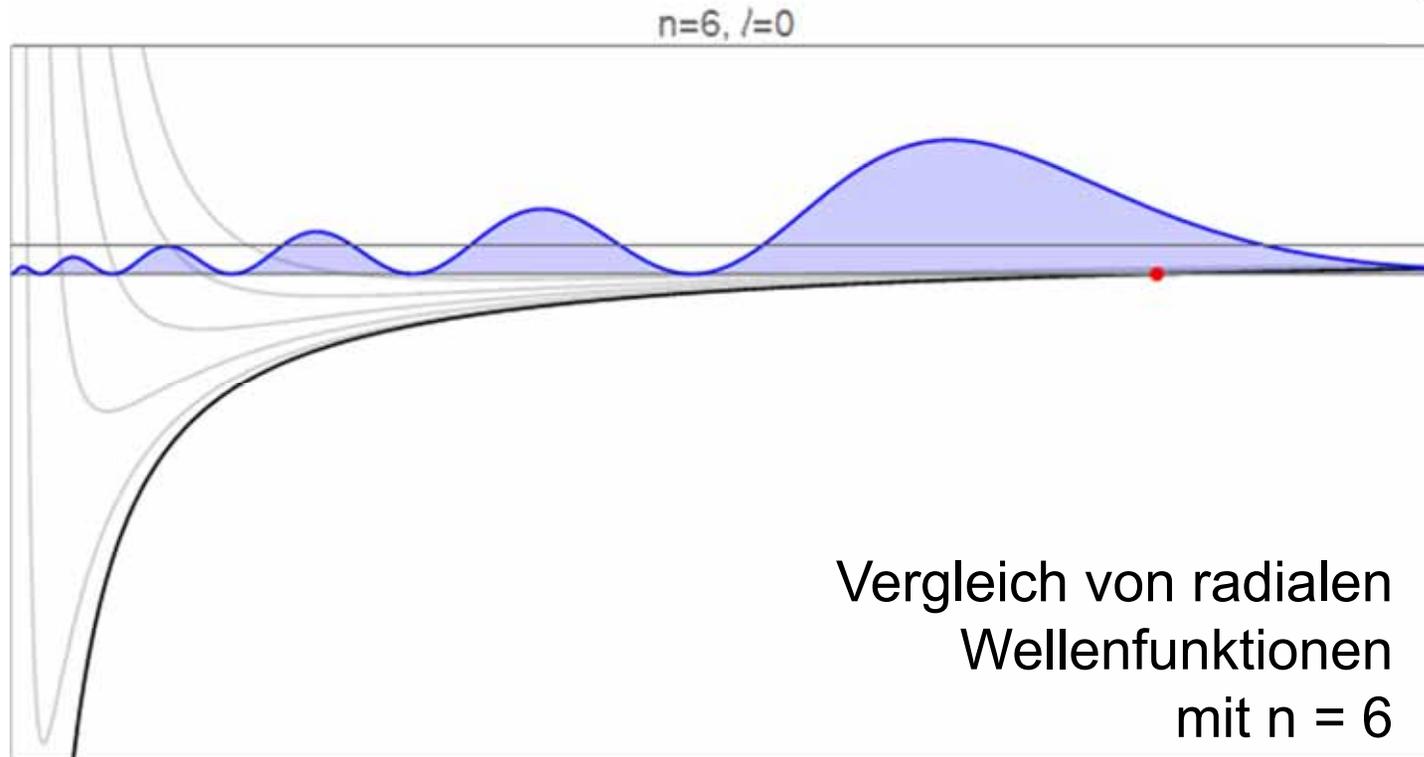
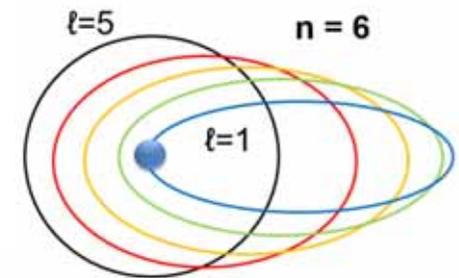
- für Radius  $r \rightarrow \infty$  geht  $R \rightarrow 0$ , d.h. endliche Größe eines Atoms
- für festes  $n$  bewirkt Drehimpulszahl  $l$  Änderung des mittleren Abstandes



# Radialfunktion

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

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



Vergleich von radialen  
Wellenfunktionen  
mit  $n = 6$

●  
klassische  
Umkehrpunkte

# Elektronenorbitale

## ■ Gesamtwellenfunktionen $\Psi_{nlm}$

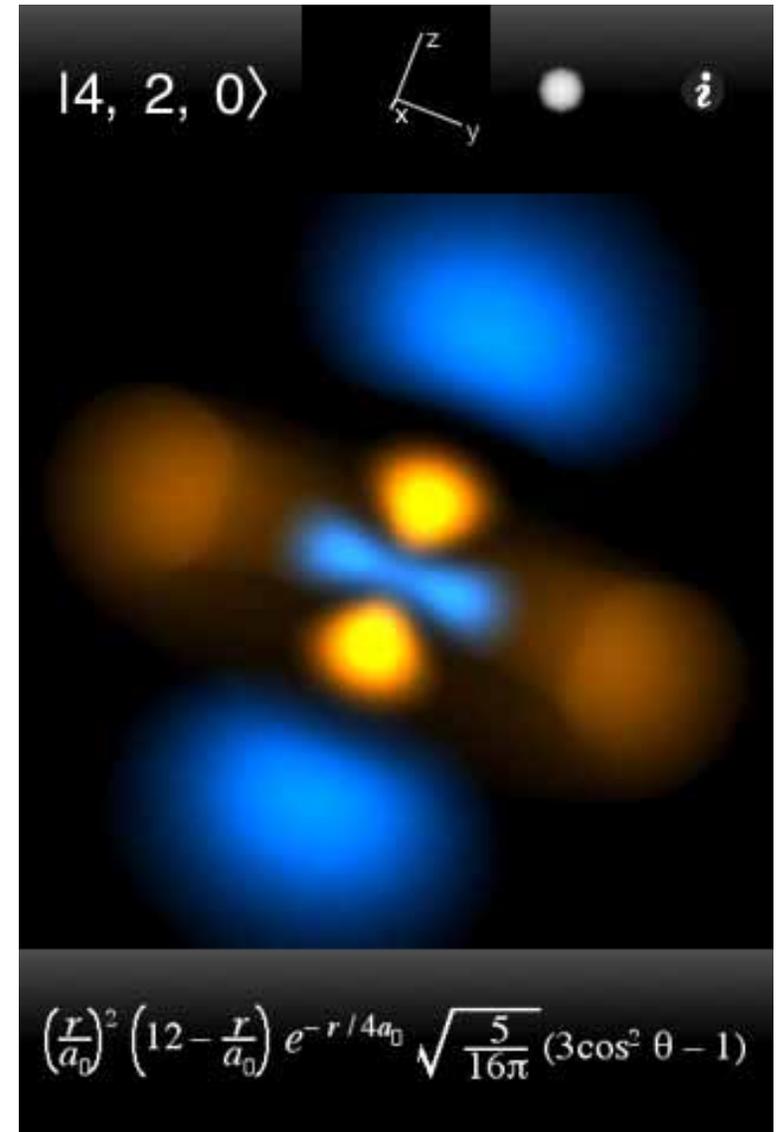
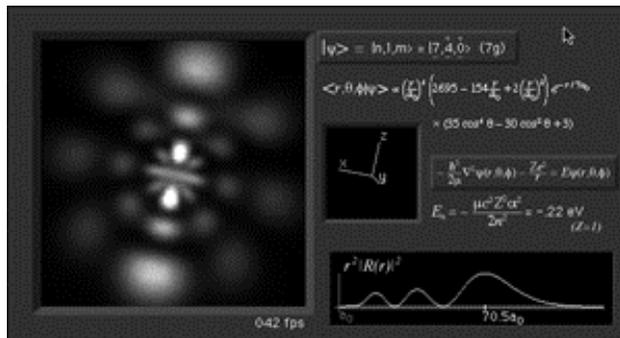
$$\Psi(1s) = \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-r/a_0}$$

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

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

## Atoms in a Box

Q: Dauger Research



# Winkelterm H-Atom 2019

