Karlsruhe Institute of Technology

3. Atomphysik

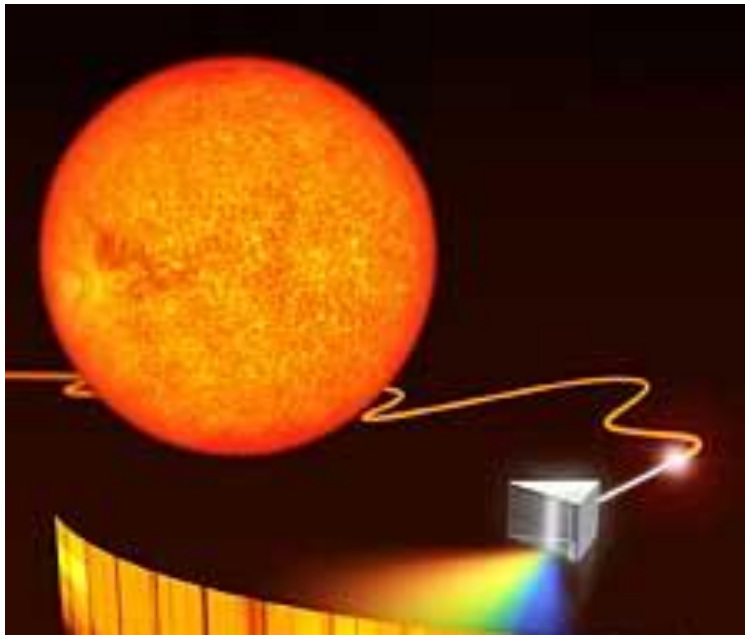
Prof. David Hunger

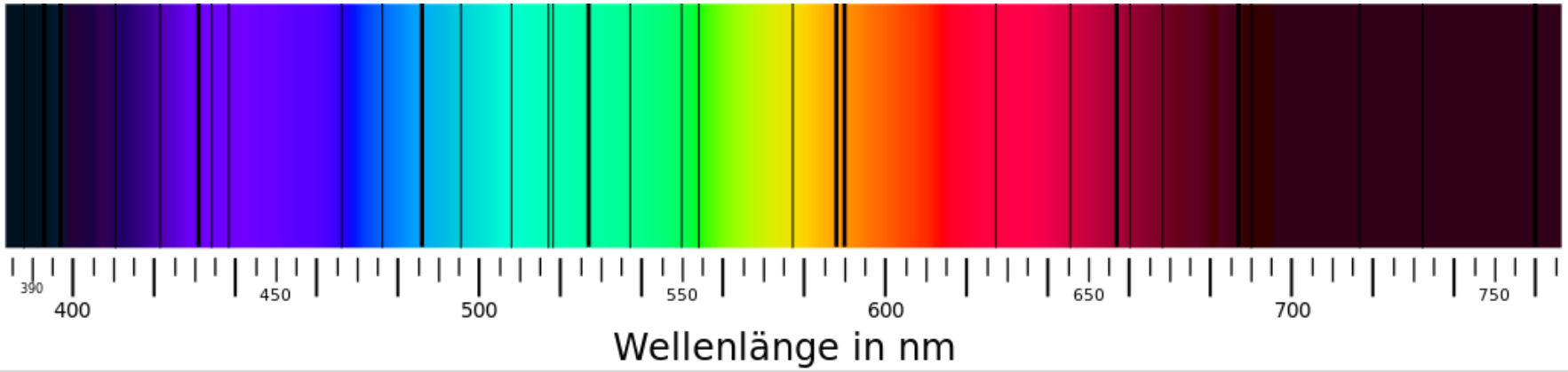
Physikalisches Institut, KIT Fakultät für Physik

3.3. Der Welle Teilchen Dualismus bei Atomen und Elektronen

Fraunhofer Linien im Sonnenspektrum

1814 Joseph von Fraunhofer

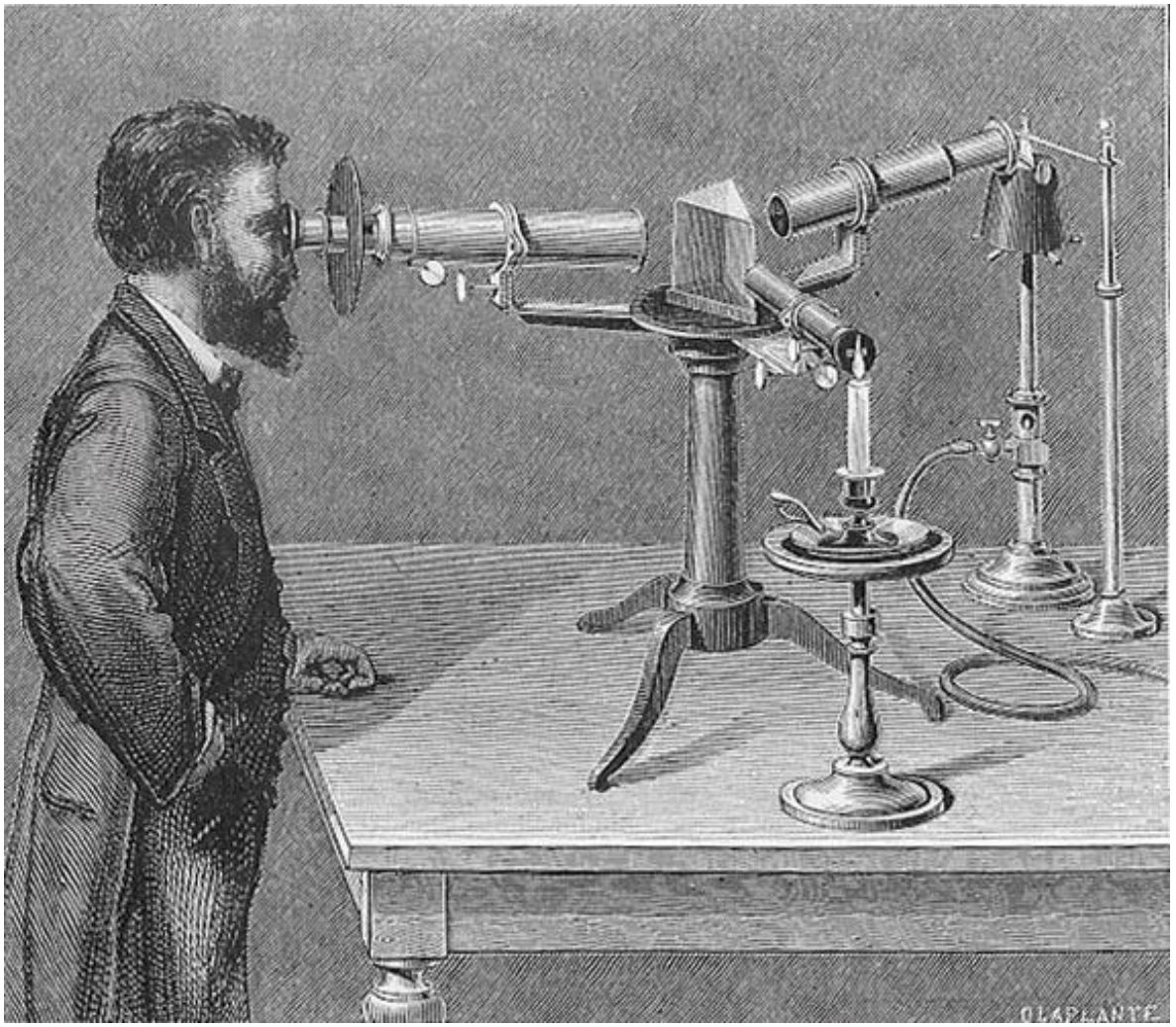




Wikipedia

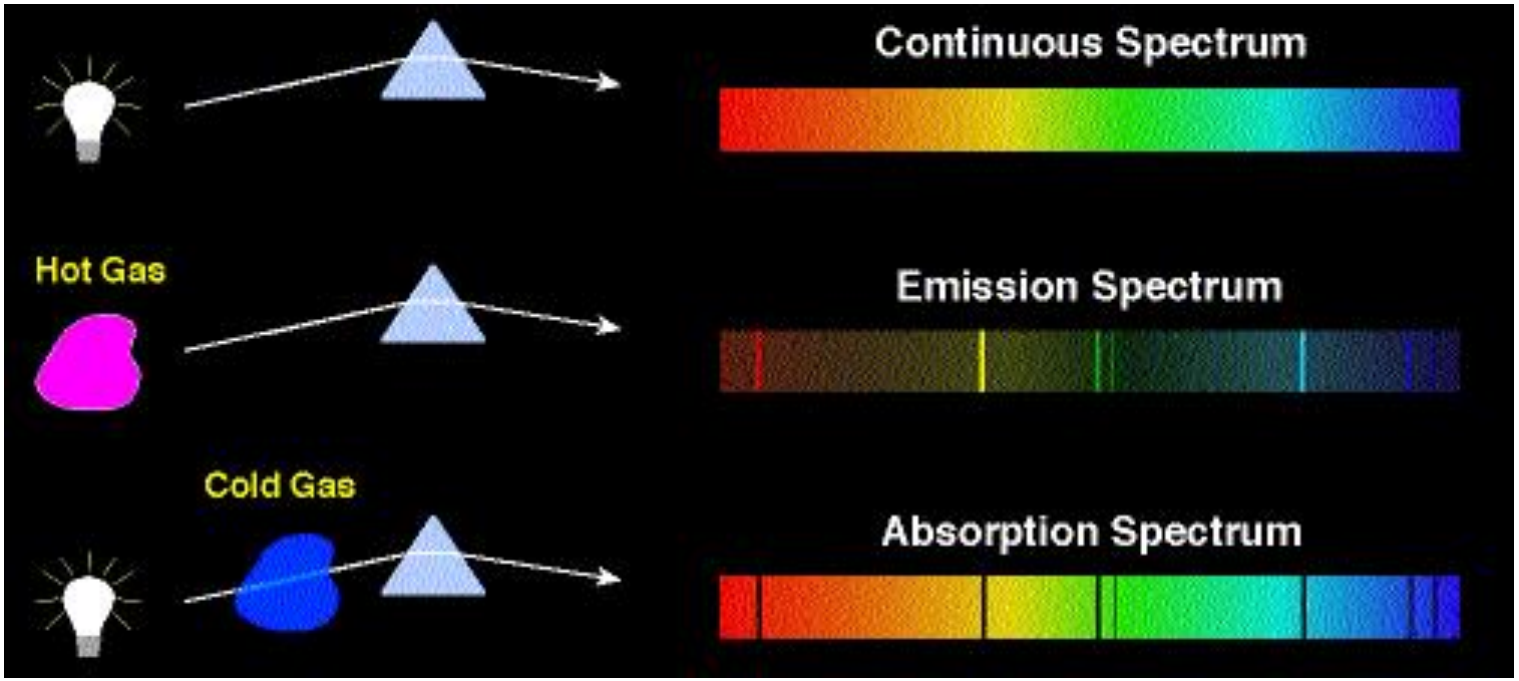
Kirchhoff und Bunsen

1860 Spektralanalyse

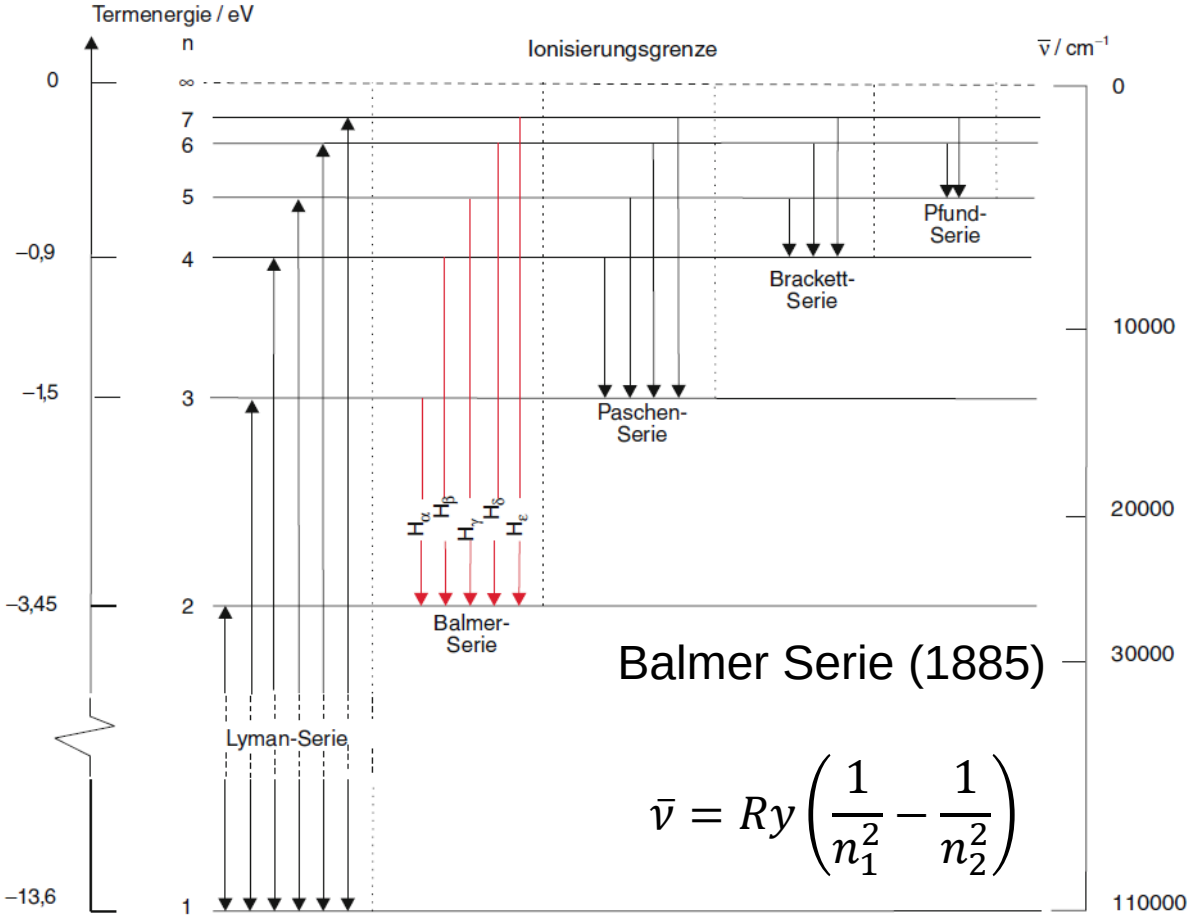


Wikipedia

Spektroskopie

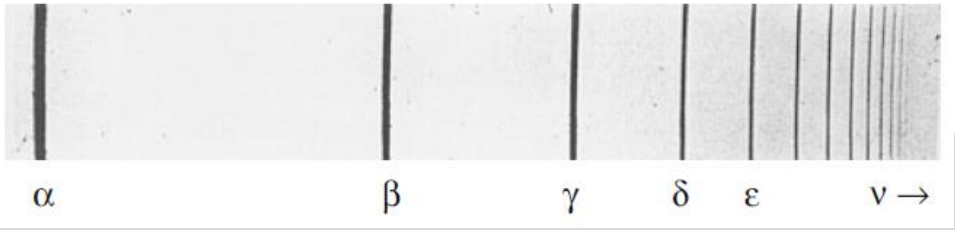


Termschema des H-Atoms



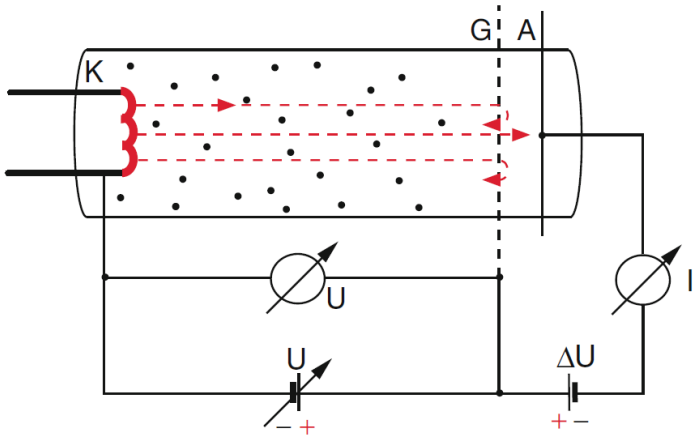
Balmer Serie (1885)

$$\bar{\nu} = Ry\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$



Franck-Hertz Versuch

Untersuchung der Strom-Spannungkennlinie von Röhren mit Gasfüllung



- Elektronen durchfliegen Quecksilberdampf
- Elektronenstrom zeigt periodische Maxima

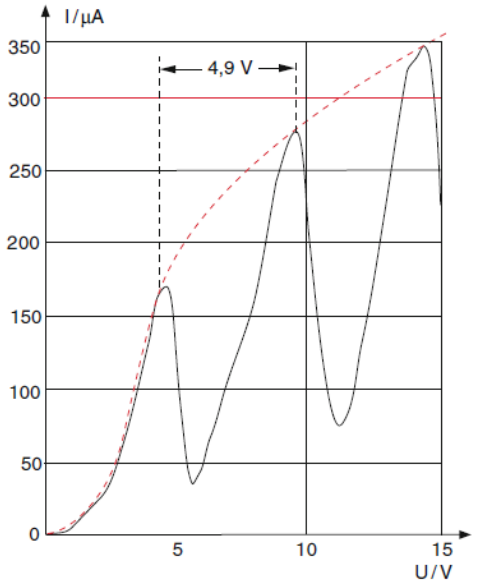
Erklärung

- Inelastische Stöße

$$e^- + Hg \rightarrow Hg^*(E_a) + e^- - \Delta E_{kin}$$

- Elektronen verlieren bei bestimmten kinetischen Energien diese an die Hg Atome durch Anregung

  → Nachweis diskreter Anregungsenergien in Atomen durch Stöße



Nobelpreis 1925

James Franck

Gustav Hertz

Bohrsches Atommodell

Niels Bohr (1885 – 1962): Atommodell (1913)

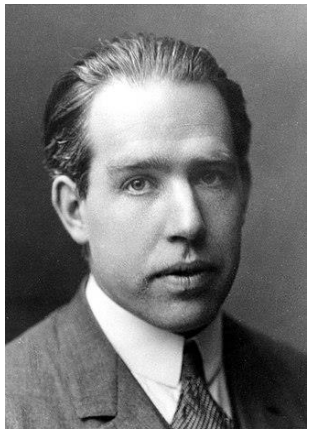


Bild: Wikipedia

Bohr‘sche Postulate

- diskrete, stationäre Bahnen, auf denen Elektronen strahlungslos umlaufen
- beim Übergang zwischen zwei Bahnen wird die Energiedifferenz in Form von Photonen aufgenommen / abgegeben

$$\Delta E = h\nu = E_n - E_m$$

- Bahndrehimpuls ist gequantelt

$$l_n = |\vec{r} \times \vec{p}| = m_e v r_n = n\hbar, \quad n = 1,2,3$$

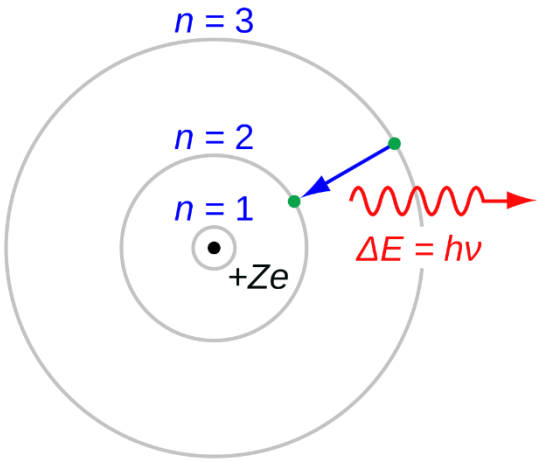


Bild: Wikipedia

Nutzt klassische Vorstellungen

Beruht auf Postulaten, liefert keine Erklärung

In einigen Details nicht richtig

Welle-Teilchen Dualität bei Atomen & Elektronen

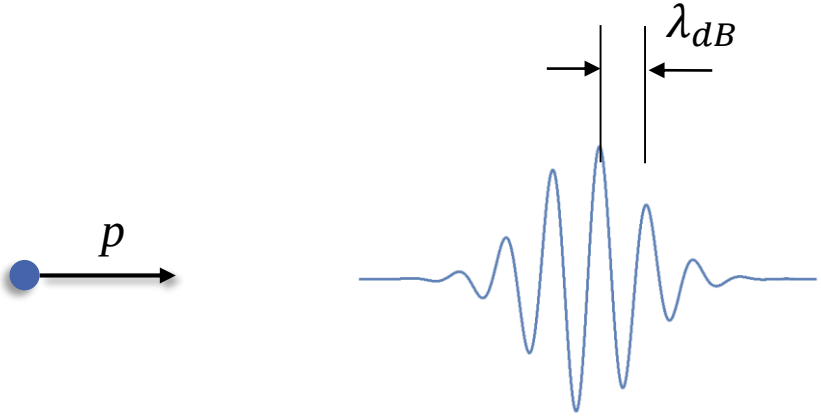
Louis de Broglie (1924): Duale Welle-Teilchen Beschreibung auch für Elektronen & Neutronen

- verwende Beziehung $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ wie bei Licht

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}}$$ de Broglie Wellenlänge

- Für Teilchen mit thermischer Energie $E_{kin} = \frac{3}{2}k_B T$

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}$$



Welle-Teilchen Dualität bei Atomen & Elektronen

Beispiele

- thermisches Elektron (300K) $\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{3mk_BT}} = 6nm$
- Elektron nach 1V Beschleunigung $\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = 0.12nm \approx a_0$
- Elektron beschleunigt auf 1GeV $\lambda_{dB} = \frac{hc}{E} = 1.2fm$

- H Atom (300K) $\lambda_{dB} = 0.15nm \approx a_0$
- lasergekühltes ^{87}Rb Atom (100nK) $\lambda_{dB} = 1\,\mu m$

- Fussball (v=20m/s) $\lambda_{dB} = 10^{-35}m$

Bohr‘sches Atommodell - II

Erklärung für die Quantisierungsbedingung

- Beschreibe Elektron mit Materiewelle → stehende Welle

  $2\pi r = n\lambda_{dB}$, n = 1,2,3...

Aus Kräftegleichgewicht Zentripetalkraft = Coulomb Kraft

folgt Bahnradius

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m_e Z e^2} = \frac{n^2}{Z} a_0 \quad \text{mit Bohr Radius } a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = 0.5\text{Å}$$

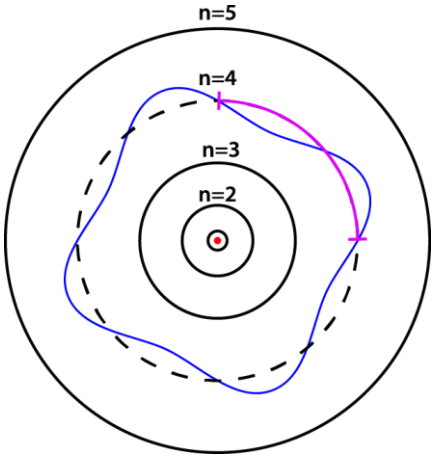


Bild: Leifi Physik

Energieniveaus

$$E_n = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

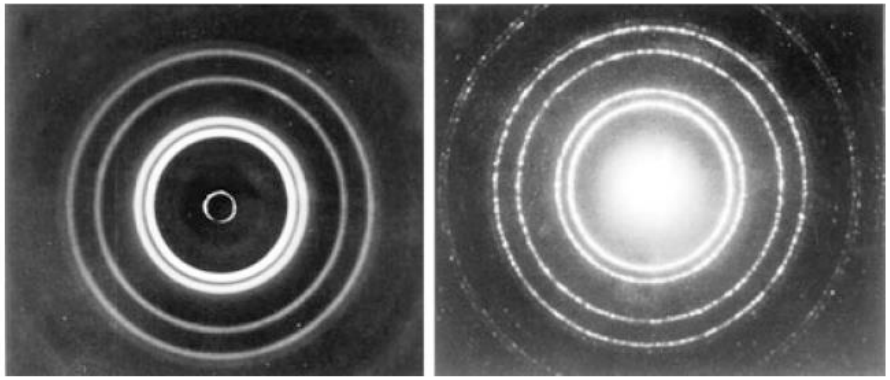
mit $F_z = F_C \rightarrow m_e v_n^2 / r_n = Ze^2 / 4\pi\epsilon_0 r_n^2$

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m_e Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -Z^2 Ry^* \frac{1}{n^2}$$

mit Rydbergkonstante $Ry^* = Ry\, h\, c = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = 13.6\ eV$

Experimentelle Evidenz von Materiewellen

Röntgenbeugung Elektronenbeugung



Beugung von Elektronen an dünnen kristallinen Filmen

= natürliches Beugungsgitter

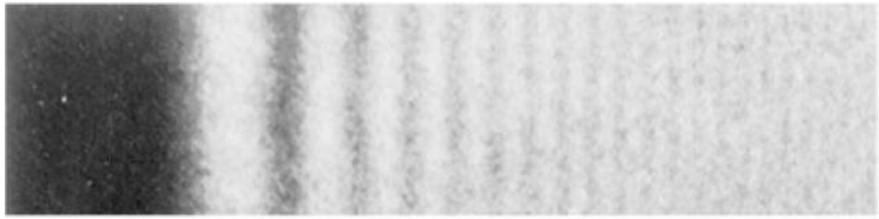
- Interferenzmuster in Übereinstimmung mit deBoglie Wellenlänge der Elektronen und Bragg-Bedingung

Beugung an einer Kante

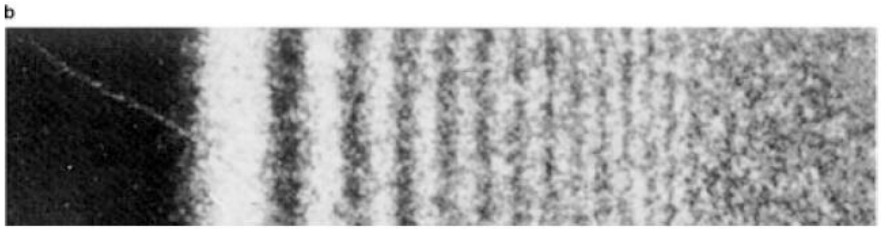
- gleiche Struktur für gleiches λr_0

r_0 Abstand Detektorplatte - Kante

Lichtbeugung

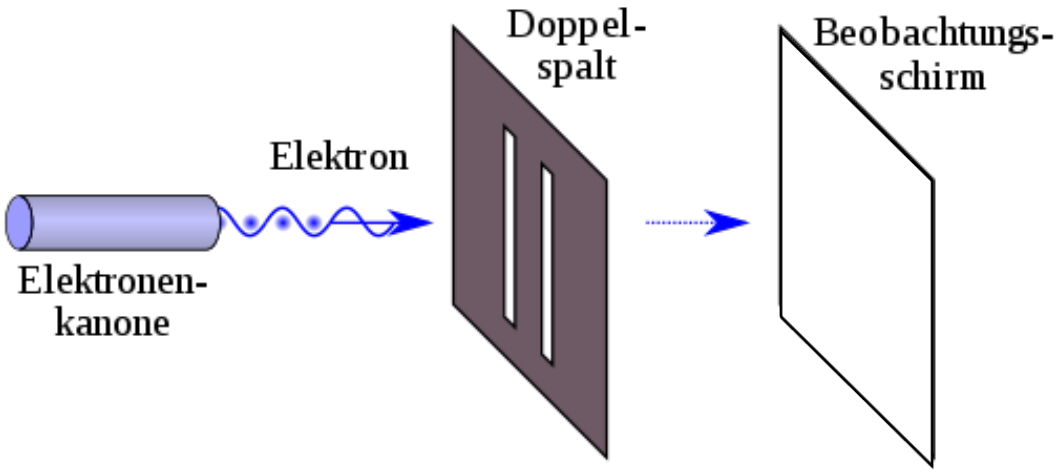


Elektronenbeugung

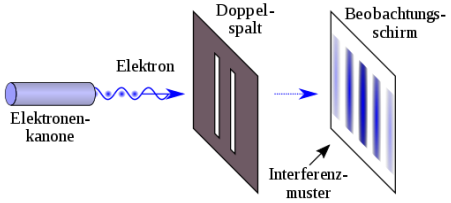


Erstes Experiment: Davisson, Germer (1927)

Doppelspalt Experiment mit Elektronen

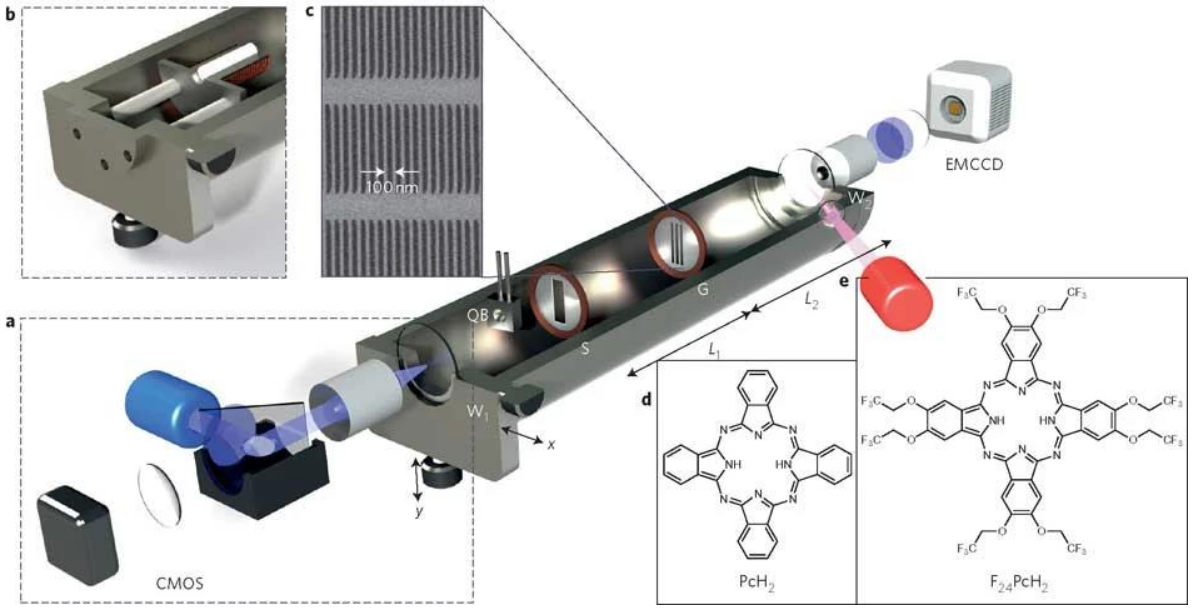


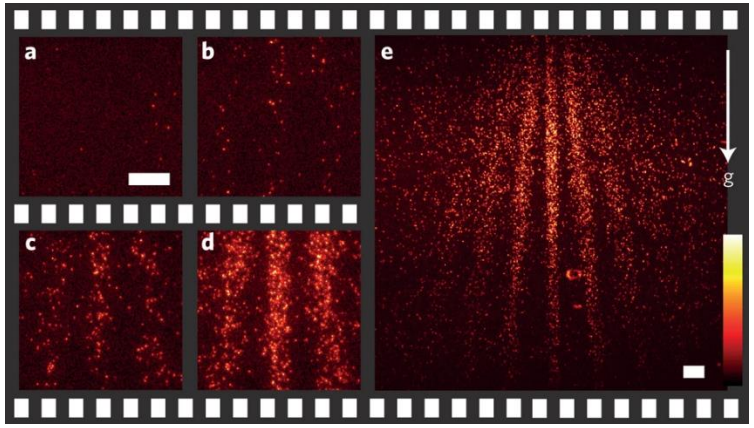
Doppelspalt Experiment mit Elektronen



Video: Bach et al., New J. Phys 15, 033018 (2013)

Beugung & Interferenz von Molekülen



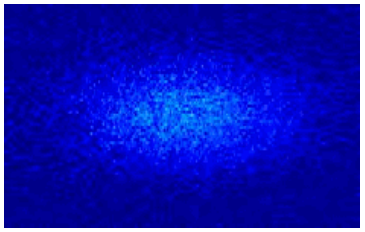


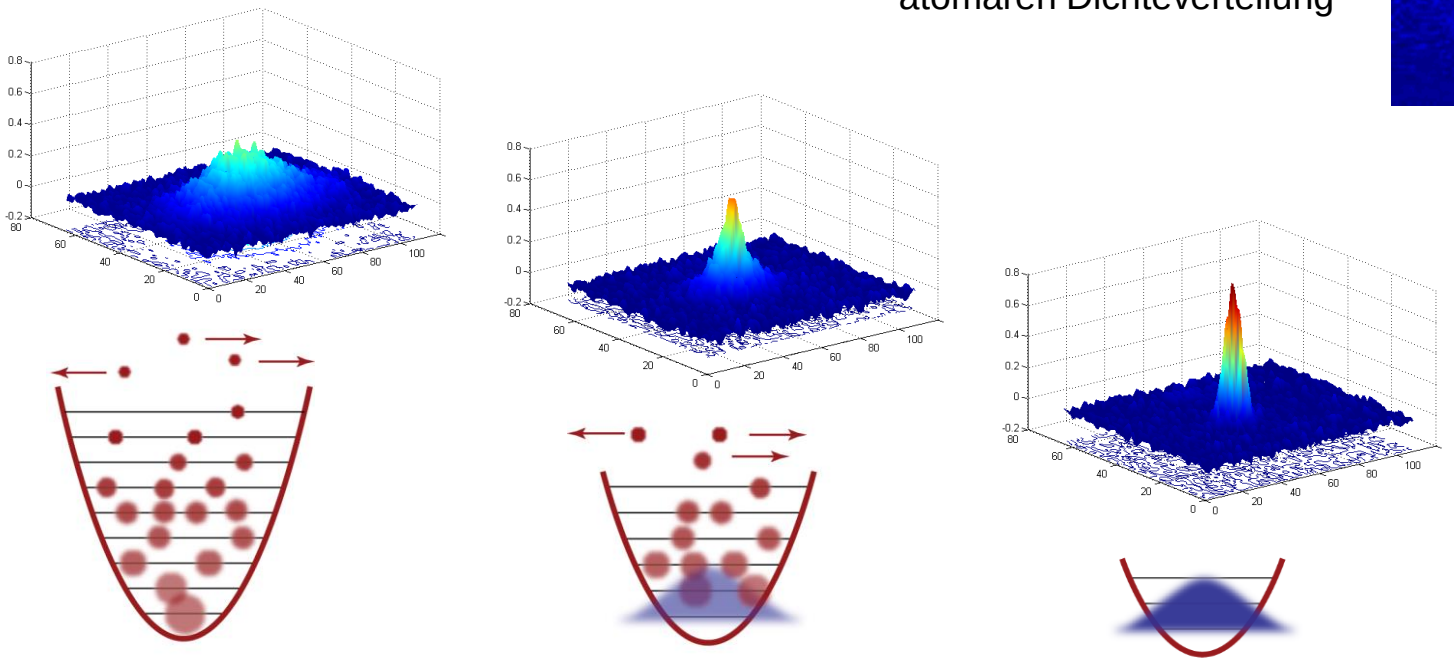
Massenrekord für Materiewellen Interferometer (2019)
- Molekulare Masse 28kDa,
- 2000 Atome, Durchmesser 6nm
- $\lambda_{dB} = 50fm$

Bose Einstein Kondensat (BEC)

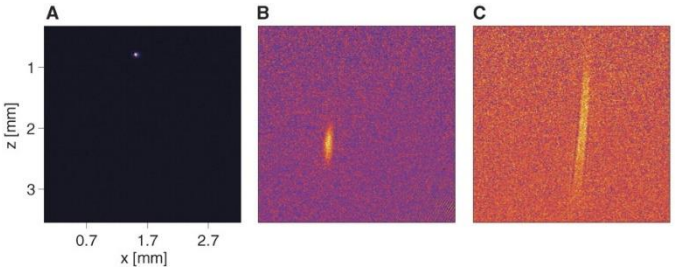
Viele Atome bilden eine makroskopische Materiewelle

Schattenbilder der atomaren Dichteverteilung

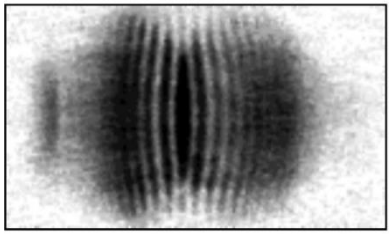




Größtes BEC unter Schwerelosigkeit: 1mm
[Zoest et al., Science 321, 1540 (2010)]



Interferenz zweier BECs



Materiewellen und Wellenfunktion

Materiewelle für freies Teilchen mit Masse m, Geschwindigkeit v

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(\omega t - kx)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

Für Licht- wie Materiewellen gilt

Teilchen-	Wellen-
$E = h\nu = \hbar\omega,$	
$\vec{p} = \hbar\vec{k},$	$\lvert k\rvert = 2\pi/\lambda$

eigenschaften

Wellen- und Teilchenaspekte bei Quantenteilchen

„Intensität“ der Welle (Quadrat der Amplitude) am Ort x bestimmt die Wahrscheinlichkeit der Beobachtung w(x)

Komplexe Wellenfunktion

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(\omega t - kx)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

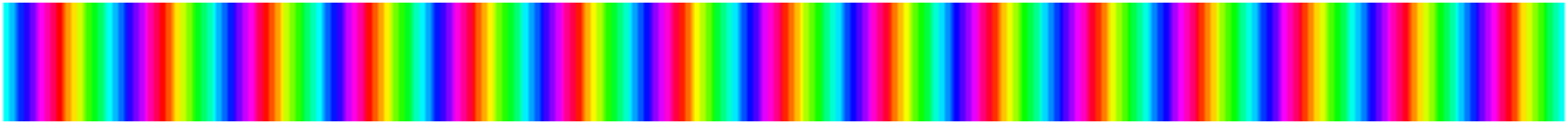
Reelle Welle $A\sin(\omega t - kx)$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2 = A\sin^2(kx - \omega t)$

  → es gäbe Orte, an denen das Teilchen häufig, und Orte an denen es nie aufgefunden würde

Komplexe Welle $A\, e^{i(\omega t - kx)}$

$y = A$ Betrag (konstant), Phase Farbkodiert



- Besser geeignet: keine räumliche Modulation der Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Materiewellen und Wellenfunktion

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(\omega t - kx)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

Phasengeschwindigkeit aus $\frac{d}{dt}(\omega t - kx) = 0 \rightarrow \frac{dx}{dt} = v_{ph} = \frac{\omega}{k}$

- e.m. Wellen: $v_{ph} = \frac{\omega}{k} = c = const.$
- Materiewellen: $E = E_{kin} = p^2/2m$

  mit $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k \rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

$\frac{dv_{ph}}{d\omega} = \frac{1}{k} \neq 0$ die Phasengeschwindigkeit hängt vom Wellenvektor ab! → Dispersion

Teilchengeschwindigkeit $v_T = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$

$$v_{ph} = \frac{1}{2} v_T$$

unterschiedlich!

Wellenpakete

Materiewelle nur bedingt geeignet

- Unterschied Phasen / Teilchengeschwindigkeit
- Welle unendlich ausgedehnt, Teilchen eher lokalisiert

Wellenpaket: Überlagerung unendlich vieler Wellen

- Bsp: Wellenzahl im Intervall $k = k_0 \pm \Delta k$

$$\psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta} \psi_0(k) e^{i(\omega t - kx)} dk$$

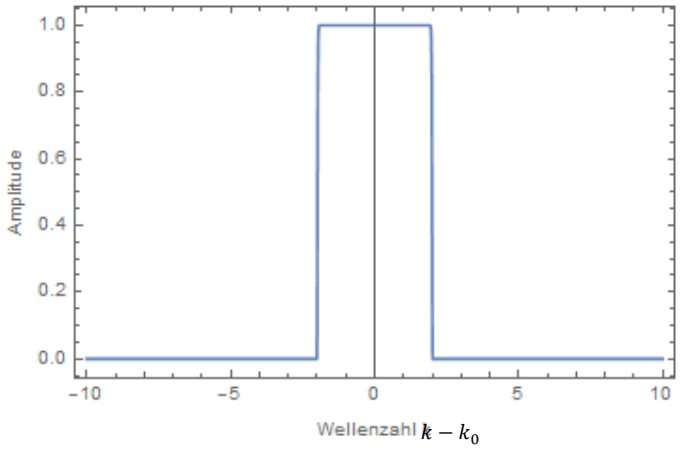
- wenn $\Delta k \ll k_0$ kann $\omega(k) \approx \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} (k - k_0) + \ldots$ genähert werden
- falls Amplituden $\psi_0(k) = const \rightarrow \psi_0(k) = \psi_0(k_0)$

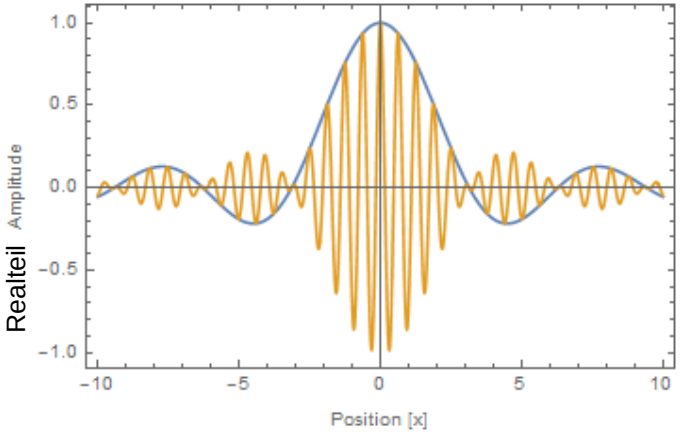
mit $\kappa = k - k_0$, $u = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} \cdot t - x = \omega' t - x$:

$$\psi(x,t) = \psi_0(k_0) e^{i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} e^{iu\kappa} d\kappa$$

- Integration liefert

$$\psi(x,t) = 2\psi_0(k_0) \frac{\sin\left(\frac{(\omega' t - x)\Delta k}{2}\right)}{\omega' t - x} e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}$$





Wellenpakete

- Lokalisiert bei $x_m = \omega' t$
- Maximum bewegt sich mit Gruppengeschwindigkeit

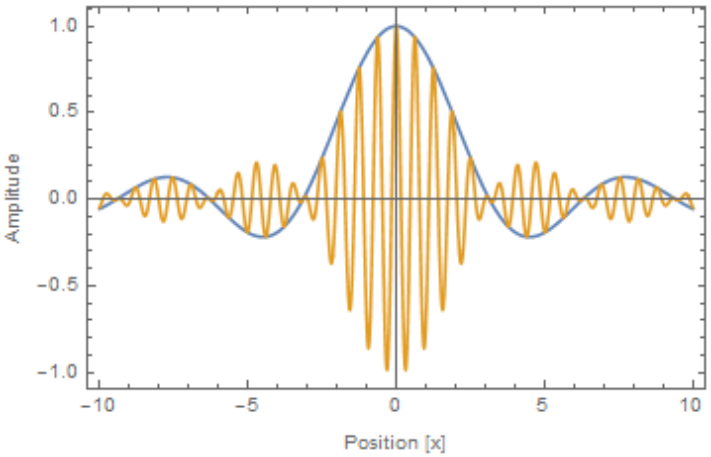
$$v_g = \frac{dx_m}{dt} = \omega' = \frac{d\omega}{dk} = v_T$$

→ Gruppengeschwindigkeit = Teilchengeschwindigkeit

- Wellenvektor k_0 des Gruppenzentrums bestimmt Teilchenimpuls $p_T = \hbar k_0$

- Breite gegeben durch Nullstellen der Einhüllenden

$$u \cdot \Delta k = \pm 2\pi \rightarrow \quad \Delta x = \frac{4\pi}{\Delta k} \geq \frac{2\pi}{k_0} = \lambda_{dB}$$



Wahrscheinlichkeitsinterpretation

- Die Wellenfunktion $\psi(x,t)$ kann komplexe Werte & negative Werte annehmen → nicht direkt mit Messgrößen verknüpfbar
- Das Wellenpaket läuft auseinander (Dispersion), ändert seine Form
- Ein elementares Teilchen (z.B. Elektron) ist unteilbar, die Wellenfunktion kann aber aufgeteilt werden

  → Wellenfunktion beschreibt nicht direkt das Teilchen

Max Born (1927): Statistische Interpretation

- Wahrscheinlichkeit muss reelle positive Zahl sein

  Die Wahrscheinlichkeit $W(x,t)dx$, dass sich ein Teilchen zur Zeit t im Ortsintervall $[x, x+dx]$ befindet, ist proportional zum Absolutquadrat $|\psi(x,t)|^2$der Wellenfunktion $\psi(x,t)$

$$W(x,t)dx = |\psi(x,t)|^2 dx$$

- $|\psi(x,t)|^2$ Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort x zur Zeit t
- Normierung: Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu finden muss 1 sein

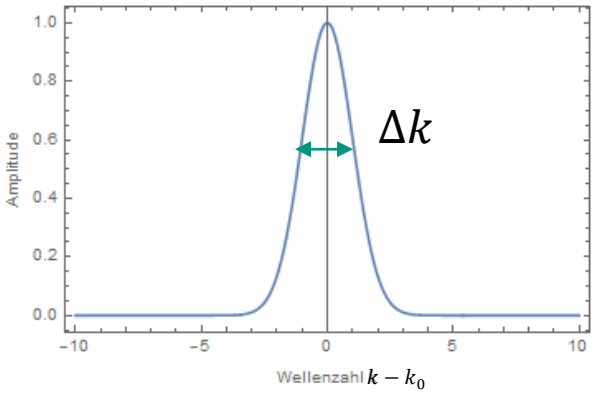
$$\int_{x=-\infty}^{x=\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Heisenberg‘sche Unschärfe Relation

Gauß-verteilte Amplituden

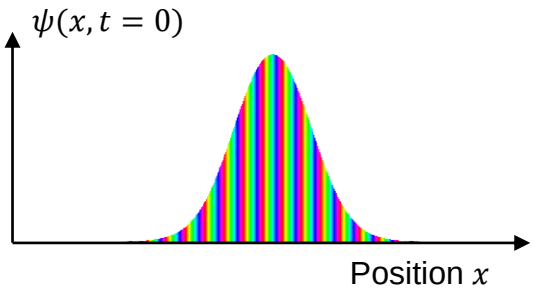
$$\psi_0(k) = \psi_0(k_0)e^{-a^2(k-k_0)^2/4},\ \Delta k = 1/a$$

$$\psi(x,t) = \psi_0(k_0)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2(k-k_0)^2/4} e^{i(kx-\omega t)}dk$$



- Integration liefert

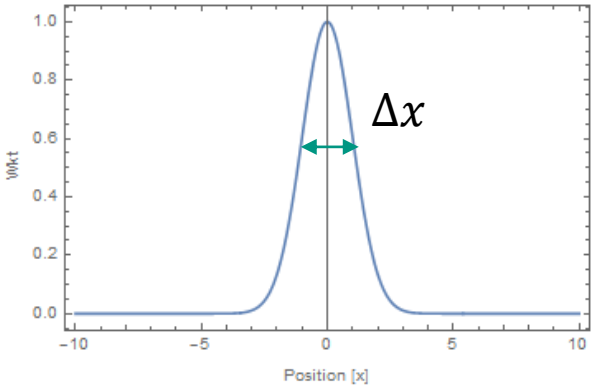
$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} \cdot e^{ik_0 x}$$



- Normierte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\, e^{-2x^2/a^2}$$

- Für $x_{1,2} = \pm\frac{a}{2}$ ist $|\psi|^2$ auf $1/\sqrt{e}$ des Maximalwerts abgefallen → $a = \Delta x$ volle Breite
- Für $k_{1,2} = k_0 \pm \Delta k/2$ ist $\left|\psi_0(k_{1,2})\right|^2$ auf $\psi_0^2(k_0)/\sqrt{e}$ abgefallen



Heisenberg‘sche Unschärferelation

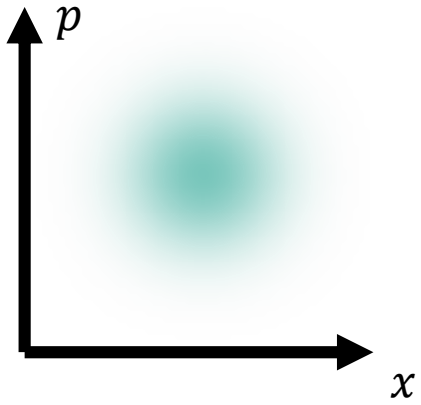
- Das Produkt aus räumlicher Breite Δx des Wellenpaketes und der Breite Δk des Wellenzahlintervalls der zugrundeliegenden Materiewellen ist gleich 1

  $$\Delta x \cdot \Delta k = 1$$

- Ergebnis analog zur Optik (Beugung, Fourier Optik)
- mit $p_x = \hbar k$ folgt

  $$\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar$$

- ein gaußförmiges Wellenpaket hat das minimale Produkt $\Delta x \cdot \Delta p_x$, alle anderen liefern Werte $> \hbar$



$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ Heisenberg‘sche Unschärferelation

- Analoge Unschärferelation für Energie und Zeit

$\Delta E \cdot \Delta t \quad h$

Analogie zur Optik

Beugung von Elektronen am Spalt

- Spalt mit Breite $\Delta x = b$
- Elektronen mit Impuls $\vec{p} = \{0, p_y, 0\}$
- Ebene Welle → x unendlich ausgedehnt
- Nach Transmission ist x -Koordinate auf $\Delta x = b$ begrenzt; daraus folgt Impulsunschärfe

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{b}$$

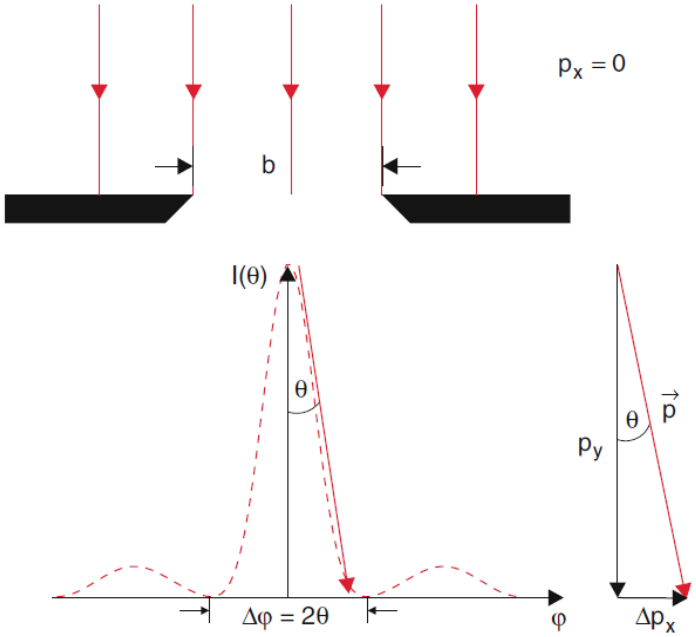
→ Elektronen können in Winkelbereich $\Delta\theta$ angetroffen werden mit

$$\sin\theta = \frac{\Delta p_x}{p} \geq \frac{h}{b \cdot p}$$

- Alternativ: Beschreibung durch Beugung der Materiewelle mit $\lambda_{dB} = \frac{h}{p}$ am Spalt
- zentrales Beugungsmaximum mit Fußpunktsbreite

$$\Delta\varphi = 2\theta$$

- aus Beugung in der Optik: $\sin\theta = \frac{\lambda_{dB}}{b} = \frac{h}{b \cdot p}$



Dispersion von Wellenpaketen

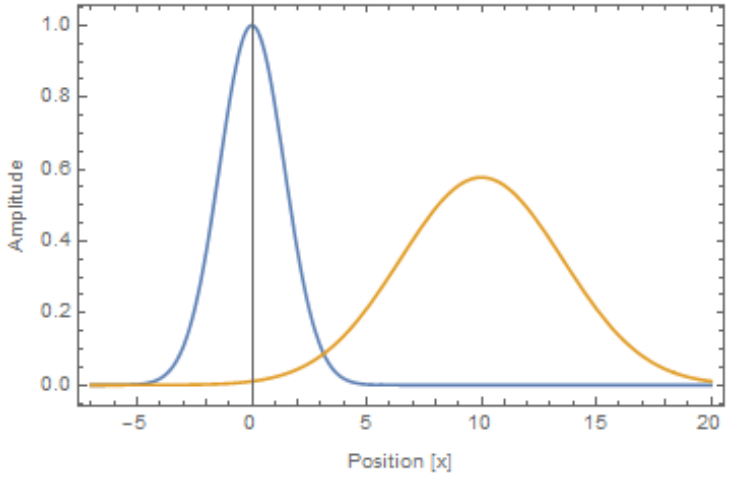
- Gruppengeschwindigkeit $v_g = p/m$
- Anfangsimpuls p kann nur mit Genauigkeit $p \pm \Delta p$ bestimmt werden
- Daraus folgt Unschärfe der Gruppengeschwindigkeit

$$\Delta v_g = \frac{1}{m}\Delta p = \frac{1}{m}\frac{\hbar}{\Delta x_0}$$

- Unsicherheit des Orts wächst wegen Unsicherheit in der Geschwindigkeit an

$$\Delta x(t) = \Delta x_0 + \Delta v_g \cdot t = \Delta x_0 + \frac{\hbar}{m\Delta x_0}t$$

- Fläche unter dem Wellenpaket bleibt gleich (Normierung) → Maximalwert nimmt ab



Stehende Wellen

Systeme mit festen, diskreten Frequenzen

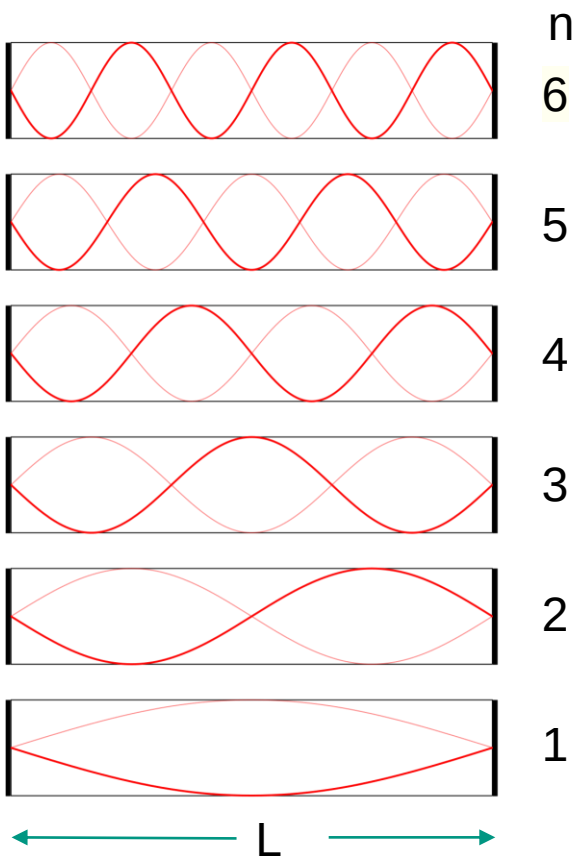
z.B. Akustik: Reflexion an Wänden führt zu stehender Schallwelle

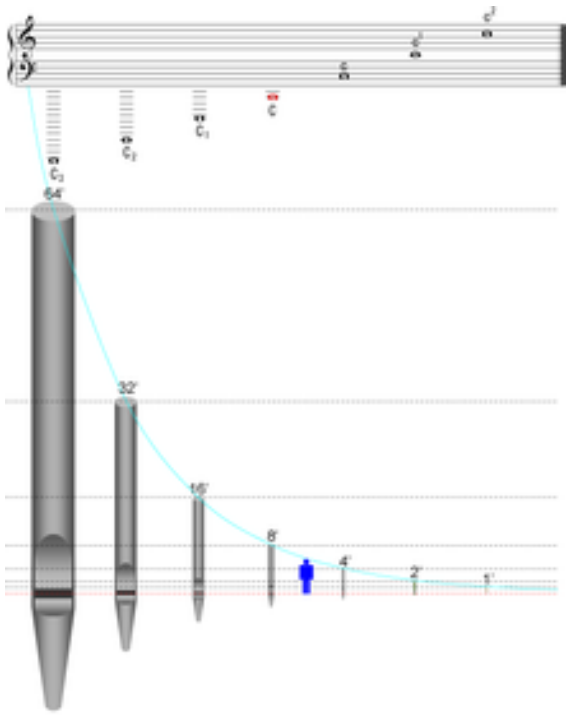
→ Resonanz

- Resonanzbedingung

$$n\frac{\lambda}{2} = L$$

$$\nu = \frac{2L}{v_{ph}}$$





Stehende Materiewellen

- Teilchen im Potentialkasten (unendlich hohe Wände)
- Reflexion an Wänden führt zu stehender Materiewelle

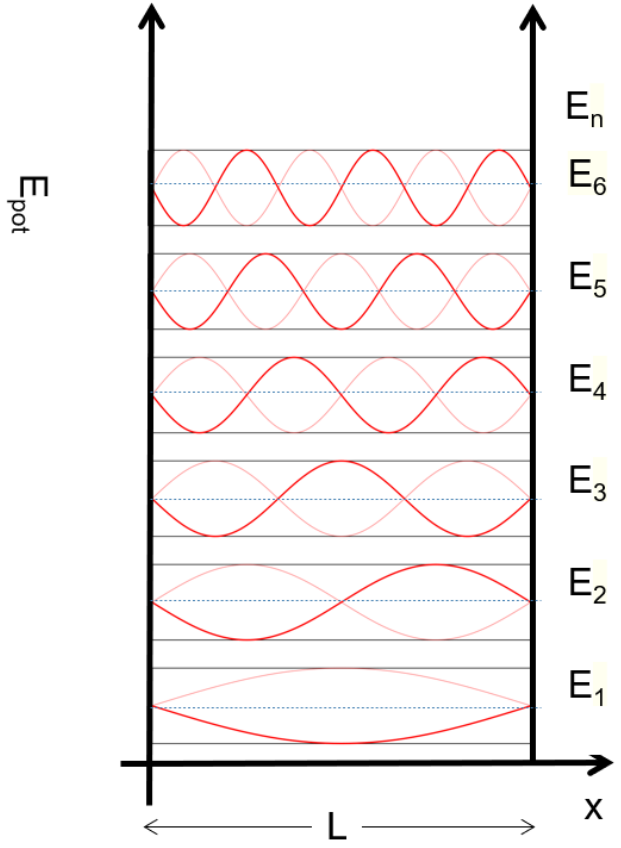
Bedingung: $n\frac{\lambda}{2} = L$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\rightarrow p = \frac{n}{2}\frac{h}{L}$$

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\rightarrow E = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$$

diskrete Energien $E_n \sim \propto n^2$

→ stehende Materiewellen liefern diskrete Energieniveaus