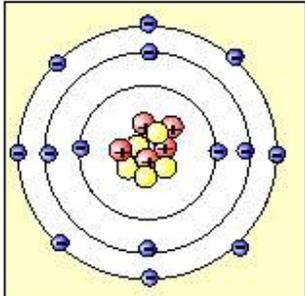
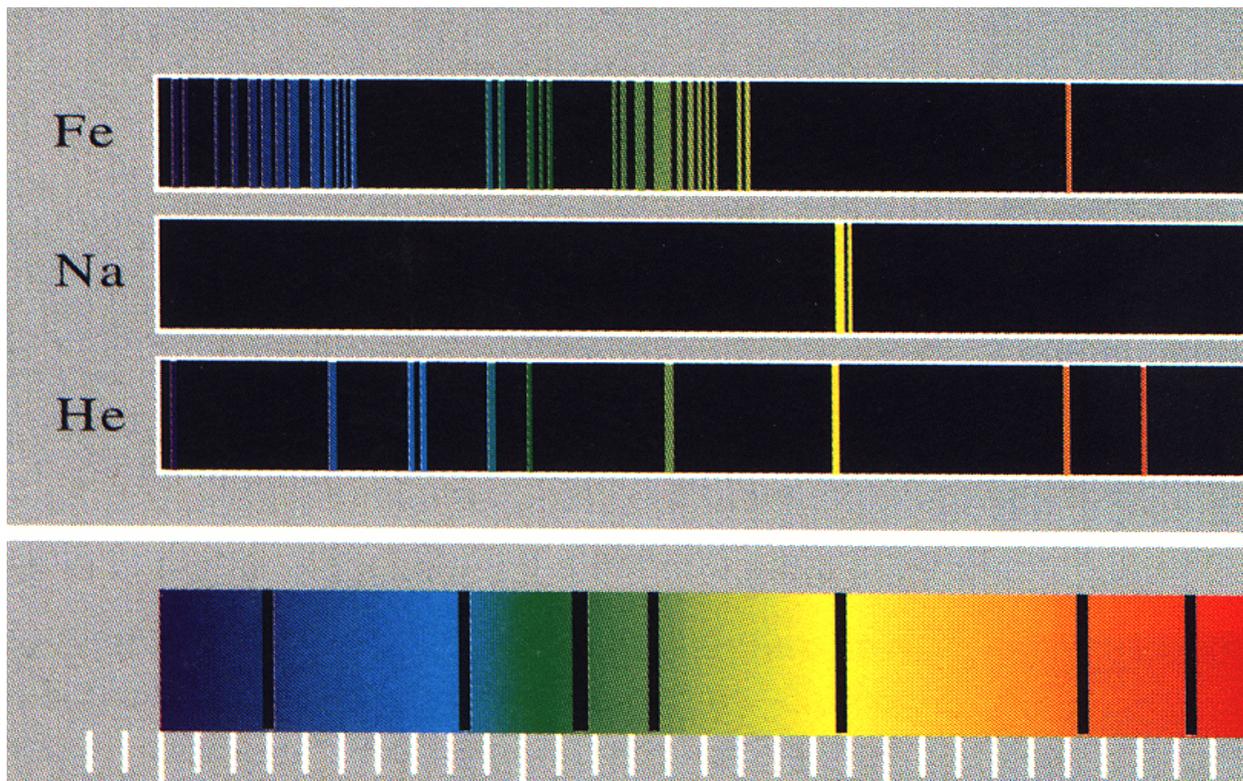


# Bohrsches Atommodell / Linienspektren

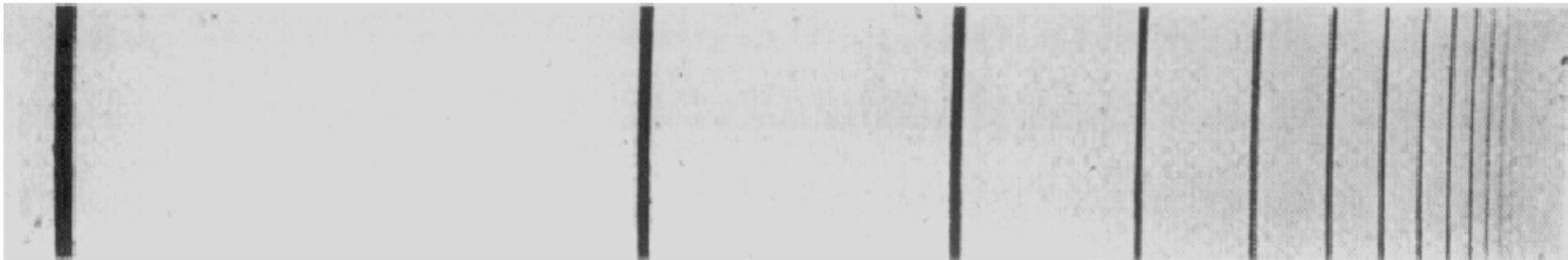
<p><b>Bohr</b> ca 1915 Dänemark Nils Bohr * 1885 + 1962</p>	<p>Die Bohrsche Erweiterung enthält folgende Aussagen:</p>  <ol style="list-style-type: none"><li>1. Schalen: <u>Elektronen umkreisen den Atomkern in ganz bestimmten Abständen.</u></li><li>2. Energie: <u>Elektronen haben auf äußeren Schalen mehr Energie als auf den weiter innen liegenden Schalen..</u></li></ol>
---	--



# Quantenstruktur der Atome: Atomspektren

Emissionslinienspektren von Wasserstoffatomen im sichtbaren Bereich

„Balmer Serie“ (1885):  $1 / \lambda = K (1/4 - 1/n^2)$



$H_{\alpha}$   
656.28

$H_{\beta}$   
486.13

$H_{\gamma}$   
434.05

$H_{\delta}$   
410.17

$H_{\epsilon}$   
nm

$\lambda$  ←

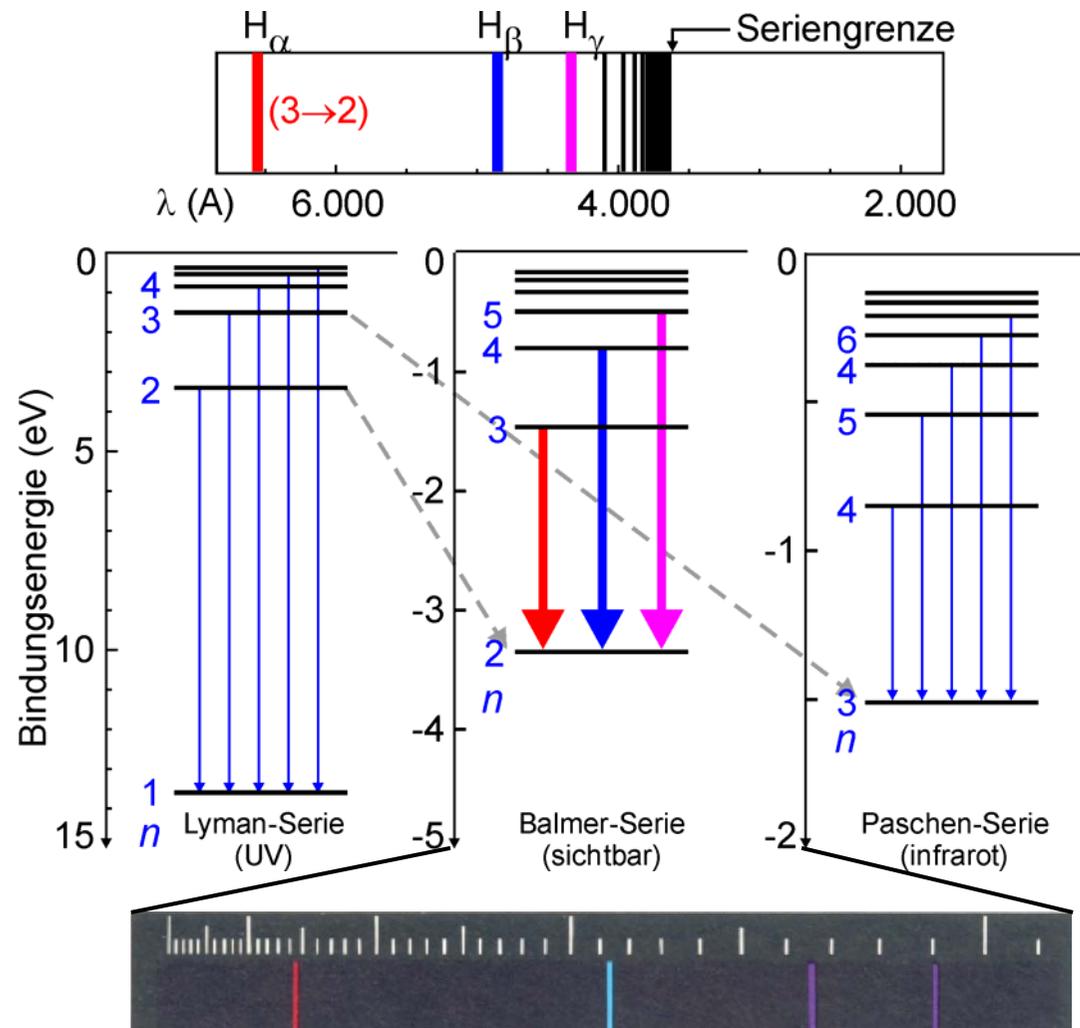
allgemein:

$$1 / \lambda = Ry (1/n_i^2 - 1/n_k^2)$$

Ry = 109678 cm<sup>-1</sup> Rydbergkonstante

# Energieniveaus des Wasserstoffatoms

Lyman (UV), Balmer (sichtbarer Bereich) und Paschen (Infrarot)



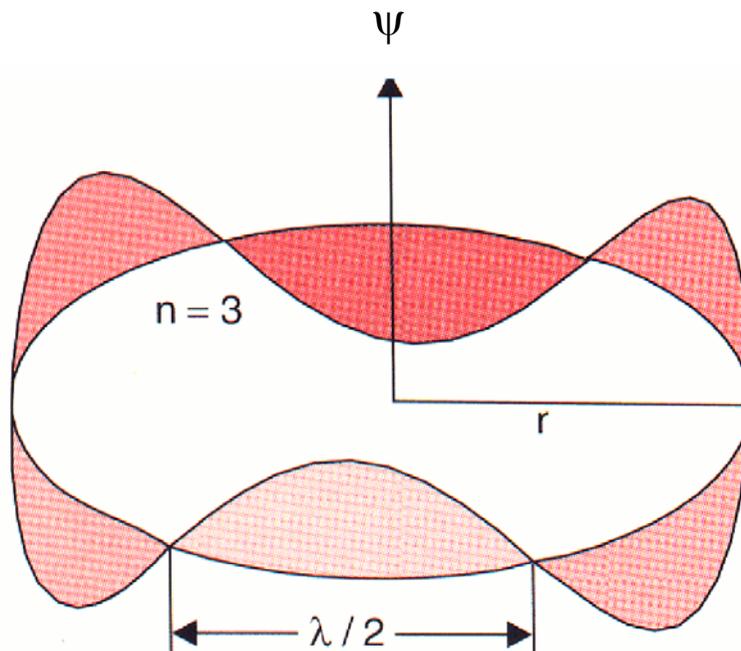
## Bohrsches Atommodell (1913)

Elektron: Stehende de Broglie Welle

Idee: stationärer Zustand – stehende Welle

Folgerung: Radius, Energie ...gequantelt

„Schalenstruktur“ der Atomhülle



Die Postulate von NIELS BOHR:

1. Ein Elektron in einem Atom bewegt sich auf einer Kreisbahn um den Kern im COULOMB-Potential des Kerns und gehorcht den Gesetzen der klassischen Mechanik.
2. Anstelle von unendlich vielen möglichen Kreisbahnen nach der klassischen Mechanik, bewegt sich ein Elektron nur auf solchen Bahnen, für die der Bahndrehimpuls ein ganzzahliges Vielfaches des PLANCK'schen Wirkungsquantums ist.  $L = n \hbar$
3. Ungeachtet der Tatsache, daß ein Elektron eine konstante Beschleunigung erfährt (Kreisbewegung !), emittiert es keine elektromagnetische Strahlung. Die totale Energie bleibt konstant.
4. Ein Elektron strahlt nur elektromagnetische Energie ab, wenn es seine Bahn der Energie  $E_i$  ändert und in eine Bahn der Energie  $E_k$  überwechselt. Die Frequenz  $\nu$  der emittierten Strahlung ist dann gleich  $\nu = (E_i - E_k) / h$ .

## Grundprinzipien Quantenmechanik

- **Diskrete Energiezustände in Atomen (und Molekülen ...)**
  - **Linienpektren**
  - **Franck-Hertz Versuch**
- **Beugungseffekte für Elektronen**

### → **Welleneigenschaften von Teilchen**

- **Spektrum der Schwarzkörperstrahlung**
- **Photoeffekt**
- **Compton-Effekt**

### → **Teilcheneigenschaften der elektromagnetischen Strahlung**

## Grundprinzipien Quantenmechanik

Generell gilt: Alle Teilchen besitzen Welleneigenschaften, und alle Wellen besitzen Teilcheneigenschaften

$$\text{Licht} \rightarrow p = h/\lambda \qquad E = h\nu$$

Postulat von de Broglie (1924): „Materiewellen“

$$\text{Materie} \rightarrow \lambda = h/p$$

$$\lambda = h/\sqrt{2mE_{kin}}$$

De Broglie-Wellenlänge

$$E = E_{pot} + E_{kin} = h\nu$$

## Welle-Teilchen Dualismus

de Broglie – Wellenlänge existiert für alle Teilchen und Körper

aber: bei makroskopischen Körpern sehr klein

Beispiele:     Masseteilchen 1 g bei  $v = 1\text{m/s} \rightarrow \lambda \sim 10^{-30}\text{ m}$   
                  Erde  $6 \cdot 10^{24}\text{ kg}$  bei  $v = 3 \cdot 10^4\text{ m/s} \rightarrow \lambda \sim 3 \cdot 10^{-63}\text{ m}$   
                  Mensch 70 kg bei  $v = 2\text{ m/s} \rightarrow \lambda \sim 4 \cdot 10^{-36}\text{ m}$

**→ Wellennatur macht sich nicht bemerkbar**

Beispiel:      $\text{H}_2$ :  $3 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$  bei  $v = 2 \cdot 10^{-3}\text{ m/s}$  ( $0^\circ\text{C}$ ) **→**  $\lambda = 10^{-10}\text{ m}$

**→ in der Größenordnung der Molekülabmessungen  
Wellennatur macht sich bemerkbar**

# Anschauliche Motivation: Energieniveaus im Bohrschen Atommodell

(mit sehr viel Vorsicht zu geniessen ...)

Das Elektron ist eine stationäre Elektronenwelle  
(nichts bewegt sich, daher keine Energieabstrahlung!).

Damit sich die umlaufende Welle nicht selbst  
auslöscht, muss konstruktive Interferenz nach einem  
Umlauf vorherrschen, d.h.:

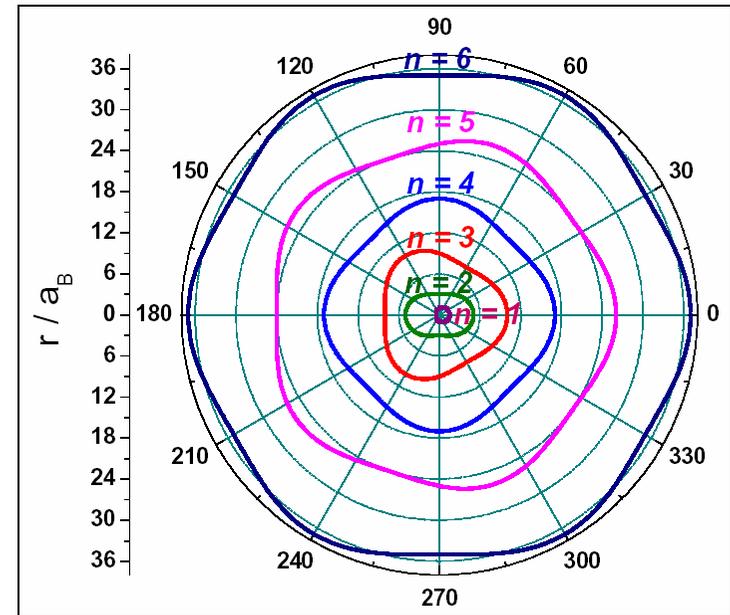
$$2\pi r_B = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

↑  
Bohrradius

$$pr_B = l = n\hbar$$

↑  
Drehimpuls

Quantisierung des Drehimpuls



➡ Motivation für eine Wellentheorie der Quantenmechanik ➡ Schrödingergleichung

## Energieniveaus im Bohrschen Atommodell

(ergibt sich auch bei quantenmechanisch korrekter Herleitung)

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^2(Ze)^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} chR_\infty$$

$$\Delta E = E_n - E_m = Z^2 chR_\infty \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$R_\infty = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$$

Rydberg-Konstante

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{\nu}{c} = \frac{\Delta E}{hc} = Z^2 R_\infty \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

## Welle-Teilchen Dualismus

de Broglie – Wellenlänge existiert für alle Teilchen und Körper

aber: bei makroskopischen Körpern sehr klein

Beispiele:      Masseteilchen 1 g bei  $v = 1\text{m/s} \rightarrow \lambda \sim 10^{-30}\text{ m}$   
                    Erde  $6 \cdot 10^{24}\text{ kg}$  bei  $v = 3 \cdot 10^4\text{ m/s} \rightarrow \lambda \sim 3 \cdot 10^{-63}\text{ m}$   
                    Mensch 70 kg bei  $v = 2\text{ m/s} \rightarrow \lambda \sim 4 \cdot 10^{-36}\text{ m}$

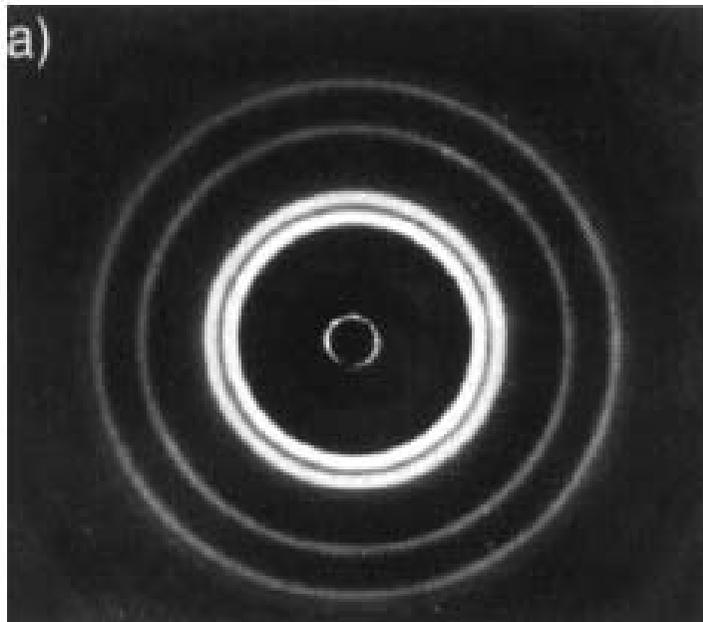
→ Wellennatur macht sich nicht bemerkbar

Beispiel:       $\text{H}_2$ :  $3 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$  bei  $v = 2 \cdot 10^{-3}\text{ m/s}$  ( $0^\circ\text{C}$ )  $\rightarrow \lambda = 10^{-10}\text{ m}$

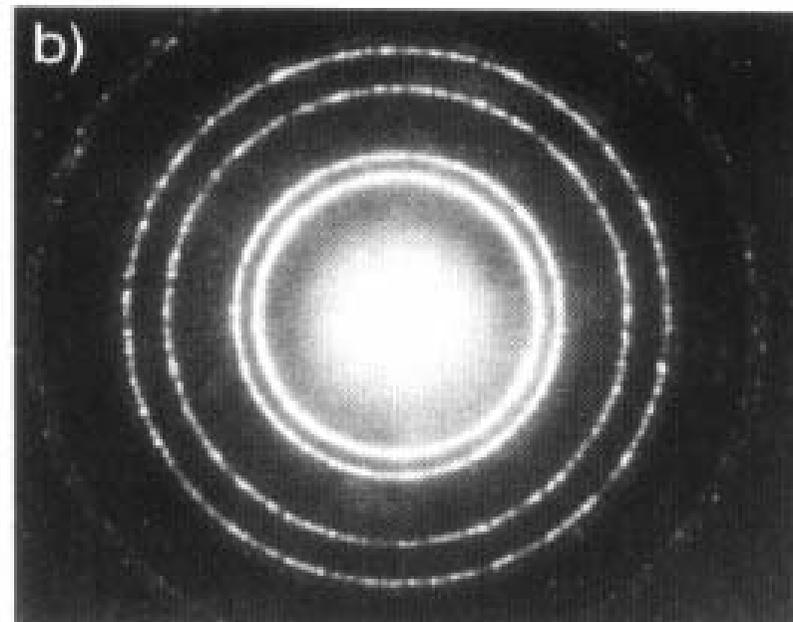
→ in der Größenordnung der Molekülabbmessungen  
Wellennatur macht sich bemerkbar

## Elektronenbeugung

Beim Durchgang durch eine multikristalline dünne Schicht (Aluminium Puder - Kristallorientierung zufällig). Erzeugen sowohl **Röntgenstrahlen** wie **Elektronen** entsprechender Wellenlänge kreisförmige Beugungsmuster

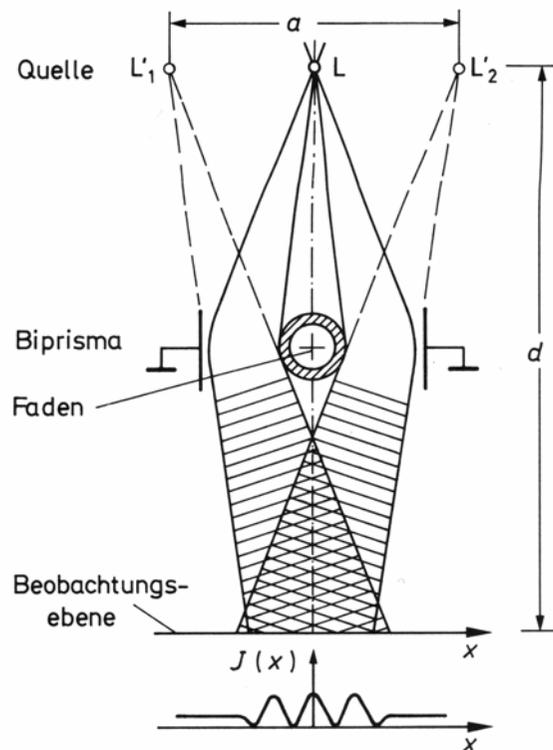
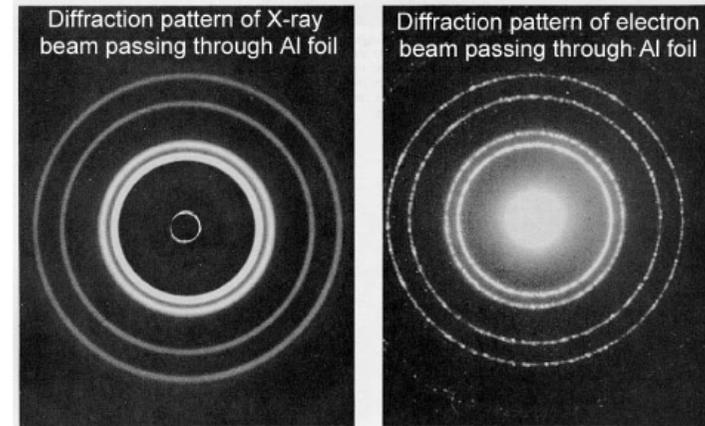


**Elektronen**

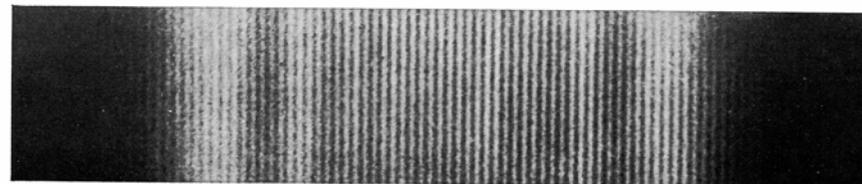


**Photonen**

Es besteht eine vollständige Analogie der Beugung von Licht und der Materiewellenbeugung, siehe zum Beispiel das Beugungsbild von Röntgenstrahlen (links) oder von Elektronenstrahlen (rechts) durch Aluminium-Folie.



Somit können optische Experimente mit Materiewellen durchgeführt werden. Das Experiment von Möllenstedt von 1956 (links) realisiert z.B. ein Biprisma.



Beugungsbild hinter dem Möllenstedtschen Biprisma

## Kleine Historie der Materiewellenoptik:

- 1921-1926 experimenteller Nachweis der Elektronenbeugung (Davisson & Germer)
- 1953 erstes Elektronenstrahlinterferometer mit analogem Aufbau zum Mach-Zehnder-Interferometer
- 1960 Elektronenstrahlinterferometer an künstlich erzeugten Spalten (Jönsson)
- 1974 Interferenz von Neutronen an einem Silizium-Einkristall (Rauch, Treimer, Bonse)
- 1991 Interferenz von ganzen Helium- und Natrium-Atomen (Carnal & Mlynek, Keith et al.)
- ab 1999 Molekülinterferometer mit C60- und C70-Atomen (Arndt & Zeilinger)

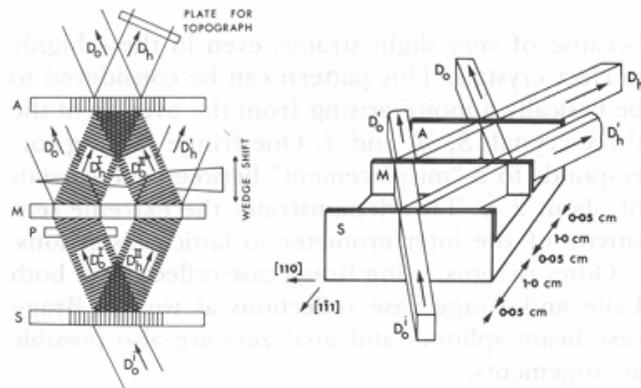


Fig. 1. Right: shape and dimensions of the single-crystal block cut as an interferometer for copper  $K\alpha$  radiation and the silicon 220 reflection.  $S$  beam splitter crystal,  $M$  transmission mirrors,  $A$  analyzer crystal. Left: schematic diagram showing beam paths.  $D_0^i$  incident beam.

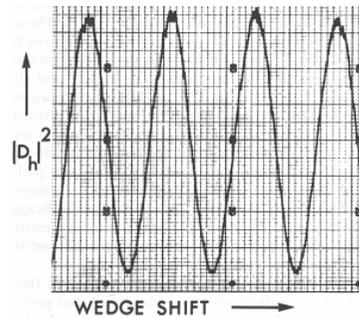
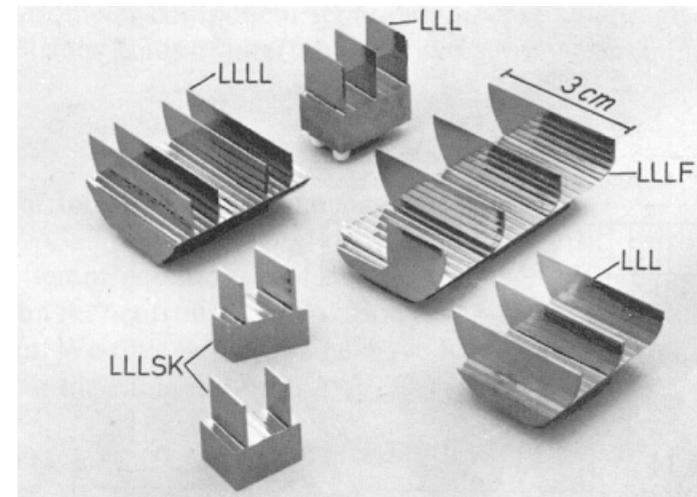
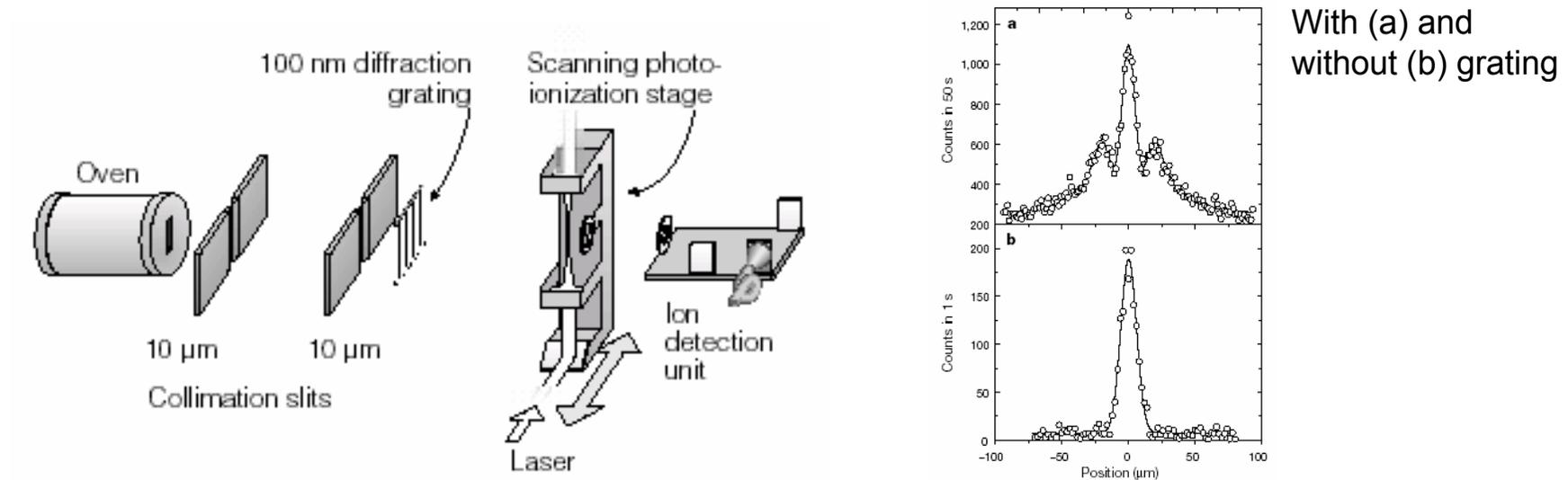


Fig. 2. Intensity variation  $|D_h|^2$  when the wedge is shifted as shown in Fig. 1.

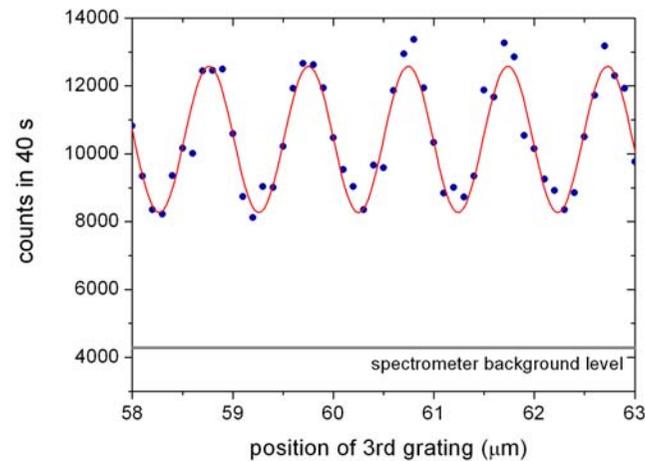


Verschiedene Neutroneninterferometer

Es besteht keine prinzipielle Grenze der Beobachtung von Materiewelleninterferenz

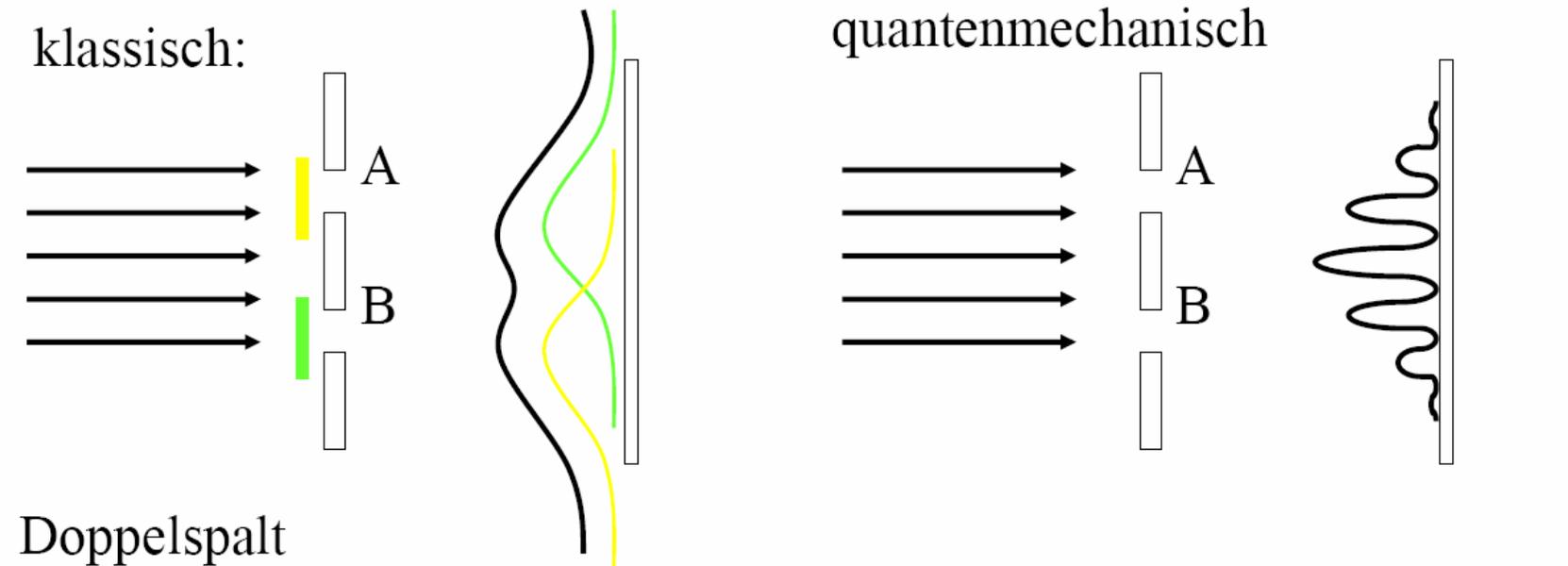


Interferenz von C<sub>60</sub> Molekülen, M. Arndt et al., NATURE 401, 680 (1999)



Interferenz von Biomolekülen, M. Arndt et al.

## Welle-Teilchen Dualismus



→ Welle „spaltet sich auf“ und interferiert nach Passage von A und B

aber Elektronenstrahl?

Elementarteilchen (einschließlich Photonen) unteilbar

→ jedes Elektron kann nur einen Spalt passieren

→ Intensitätsverteilung = Summe der Einzelverteilungen (klassisch)

aber Interferenzbild beobachtet

## Welle-Teilchen Dualismus

Beispiel: nur Spalt A :  $100 \text{ s}^{-1}$   
(Punkt  $P_1$ ) nur Spalt B :  $100 \text{ s}^{-1}$   
A + B :  $100 + 100 = 0 !$

Beispiel: nur Spalt A:  $100 \text{ s}^{-1}$   
(Punkt  $P_2$ ) A + B :  $100 + 100 = 400 \text{ s}^{-1}$

Wie kann das Öffnen oder Schließen von B die Elektronen beeinflussen, die A passieren ?

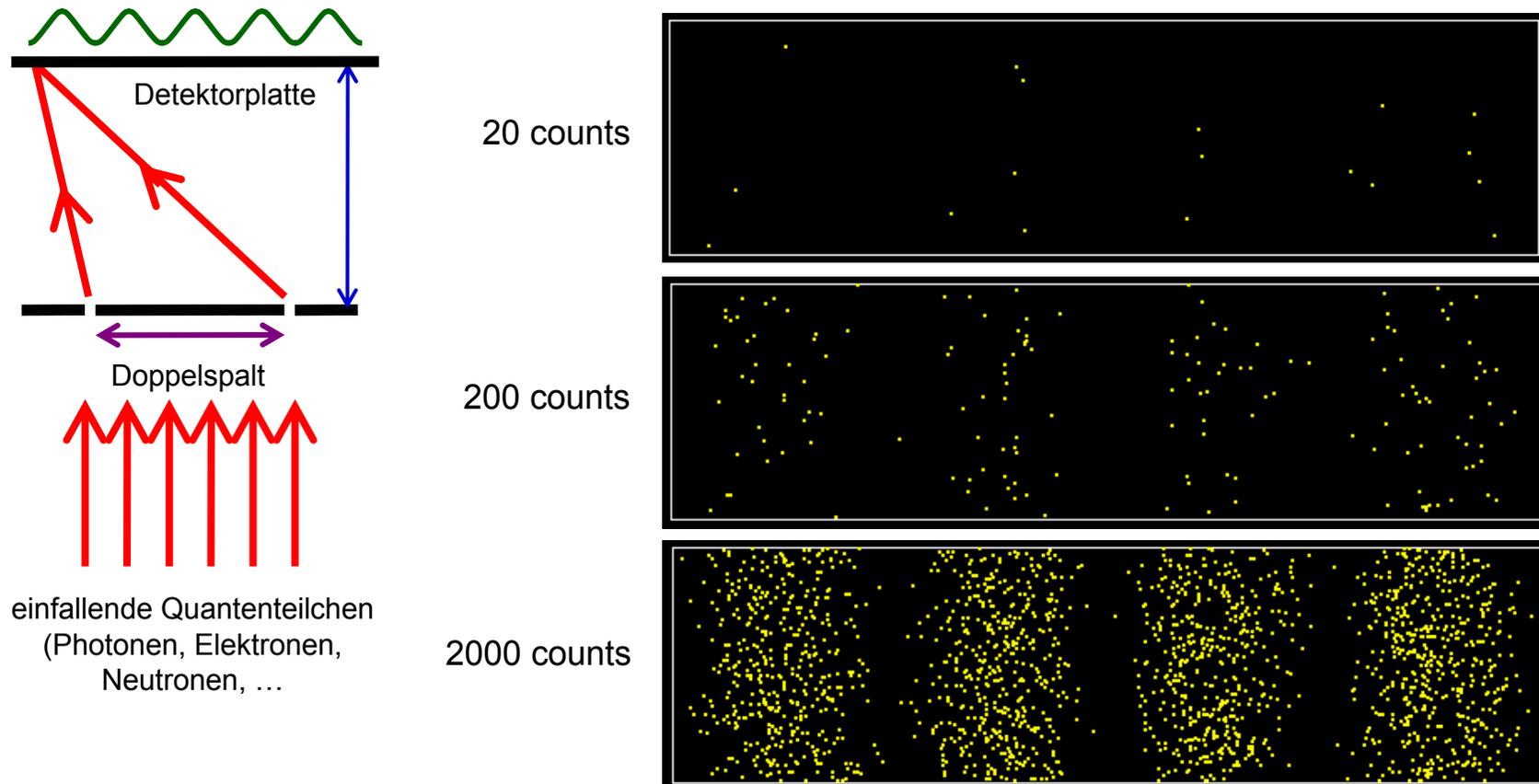
➔ Neuer mathematischer Formalismus erforderlich !

# Das Doppelspaltexperiment in der Quantenmechanik

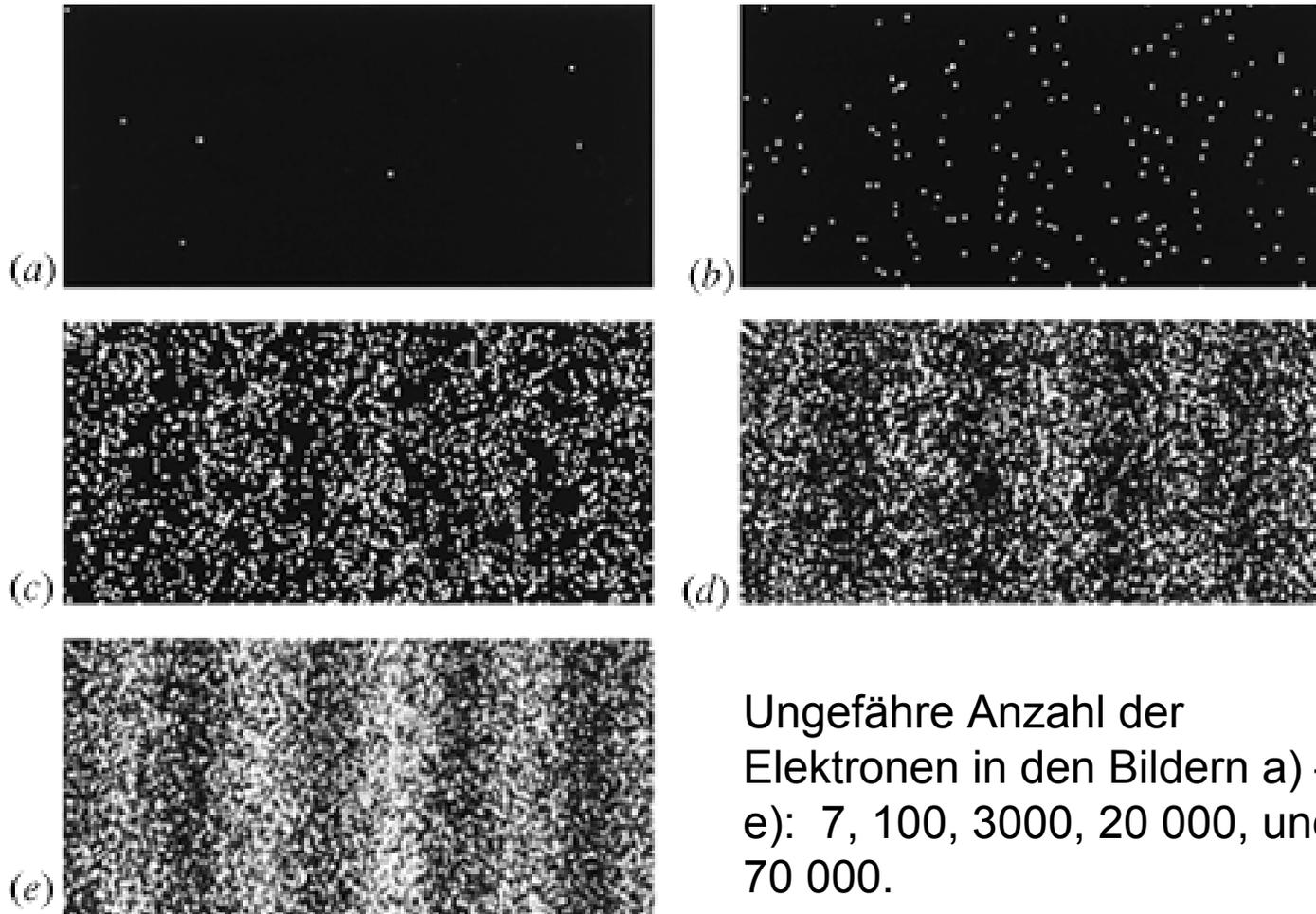
Hinter einer beugenden Struktur (z.B. einem Doppelspalt) weist ein Teilchendetektor einzelne Punktereignisse nach.

Die gemessene Auftreffwahrscheinlichkeit an einem bestimmten Punkt ein Ereignis zu bekommen ist jedoch ein Interferenzmuster.

Dies Interferenzmuster baut sich auf, selbst wenn immer nur ein Teilchen die Apparatur durchläuft.



## Elektronenbeugung am Doppelspalt: Einzelereignisse



Ungefähre Anzahl der  
Elektronen in den Bildern a) –  
e): 7, 100, 3000, 20 000, und  
70 000.

Interferenz jedes Elektrons mit sich selbst als Materiewelle

## Welle-Teilchen Dualismus

Jedes Teilchen wird durch eine Wellenfunktion  $\Psi(x,y,z,t)$  beschrieben  
→ Funktion von Raum und Zeit

Das Quadrat der Wellenfunktion entspricht der Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei einem beliebigen Wertesatz  $(x,y,z,t)$  anzutreffen.

$$|\Psi(x,y,z,t)|^2$$

### Wahrscheinlichkeitsamplitude

$\Psi$  kann komplexe Zahl sein → Eigenschaften einer Welle  
→ „Wellenfunktion“

## Welle-Teilchen Dualismus

Ereignis kann auf verschiedene Art zustande kommen  
(z.B. Flug durch A oder B)

→ Wahrscheinlichkeitsamplitude = Summe der Einzelamplituden  
bzw.:  $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$  (Superpositionsprinzip)

→ entspricht Regeln der klassischen Optik  
(Addition von Wellenamplituden)

→ **dieser Formalismus ist Grundlage der Quantenmechanik**

## Welle-Teilchen Dualismus

Formalismus wirft Fragen auf, die weitere physikalische Interpretation notwendig machen:

1 Elektron auf Doppelspalt → Wellenzug oder Wellenpaket, das sich zu gleichen Teilen auf Spalte aufteilt

nur Spalt A (B zugehalten) → Verschwinden des Interferenzmusters  
→ klassisches Resultat

d.h. Prinzip der Unteilbarkeit stimmt mit der Hypothese überein, dass Wellenintensität am Spalt A  $\equiv$  Wahrscheinlichkeit, Elektron an diesem Punkt zu finden.

und

Vorhandensein des Detektors beeinflusst das Ergebnis

## Simulationen zu Welle-Teilchen Dualismus:

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/en/>