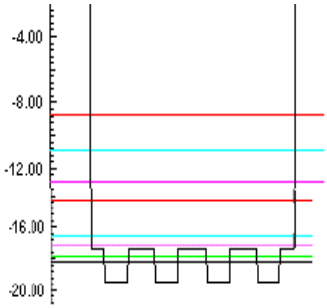
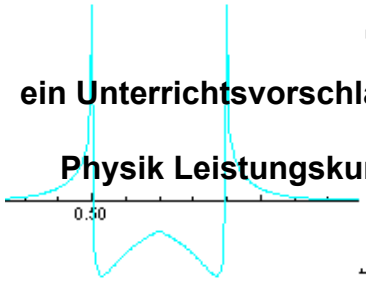
Mit der Schrödinger-Gleichung

vom H-Atom zum

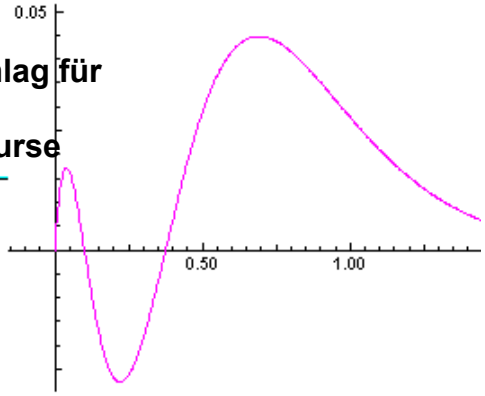
Festkörper



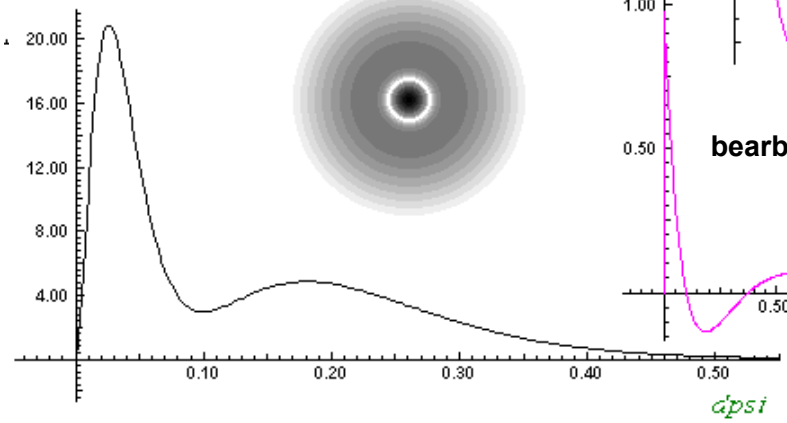


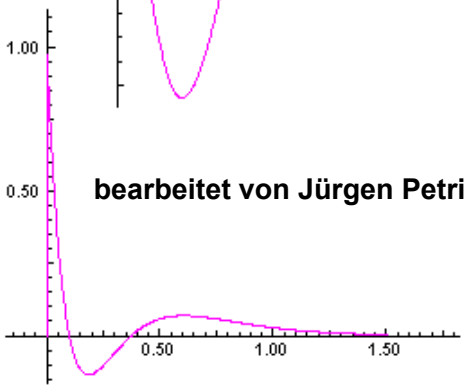
ein Unterrichtsvorschlag für

Physik Leistungskurse



entwickelt von Hans Niedderer





bearbeitet von Jürgen Petri

$$\frac{dpsi}{dr} = spsi$$

$$\frac{dspsi}{dr} = -26.25 \times (En - V) \times psi$$

unter Verwendung von Materialien

von Thomas Bethge, Hanna Cassens

und Stefan Deylitz

Institut für Didaktik der Physik

Universität Bremen 2000

Inhalt

Abstract 3

1 Einleitung 3

2 Didaktische Leitideen 4

3 Überblick und Gliederung 6

3.1 Abschnitt 1: Atombau und Spektrallinien 7
3.2 Abschnitt 2: Eigenzustände mechanischer Wellen 8
3.3 Abschnitt 3: ψ-Funktion und Schrödinger-Gleichung 9
3.4 Abschnitt 4: Einelektronensysteme I (H-Atom) 9
3.5 Abschnitt 5: Mehrelektronensysteme I (höhere Atome) 10
3.6 Abschnitt 6: Einelektronensysteme II (H_2^+-Molekülion) 11
3.7 Abschnitt 7: Mehrelektronensysteme II (Festkörper) 12

4. Inhaltliche Erläuterungen 13

4.1 Abschnitt 1: Atombau und Spektrallinien 13
4.1.1 Energiezustände statt Planetenbahnen im Atom 13
4.1.2 Klassischer und quantenmechanischer Zustandsbegriff 14

4.2 Abschnitt 2: Eigenzustände mechanischer Wellen 18
4.2.1 Stehende Seilwellen und Krümmungsbegriff 18
4.2.2 Die Modellierung stehender Seilwellen mit MODELLUS 23
4.2.3 Zwei- und dreidimensionale Eigenzustände 25
4.2.4 Zusammenfassung: Beschreibung von Eigenzuständen 27

4.3 Abschnitt 3: ψ-Funktion und Schrödinger-Gleichung 28
4.3.1 Die Analogie stehende Welle - gebundenes Elektron 28
4.3.2 Die Entwicklung der Schrödinger-Gleichung 29
4.3.3 Die Diskussion der Schrödinger-Gleichung 32
4.3.4 Die Interpretation der ψ-Funktion 34

4.4 Abschnitt 4: Einelektronensysteme I 38
4.4.1 Maßeinheiten 38
4.4.2 Ein- und dreidimensionale ψ-Funktionen 39
4.4.3 Die Software MODELLUS 40

4.4.4 Die Modellierung der SGL des H-Atoms mit MODELLUS 42
4.4.5 Auswertung der Ergebnisse 48
4.4.6 Die experimentelle Bestimmung von Atomradien 57
4.4.7 Nicht radialsymmetrische Zustände 64

4.5 Abschnitt 5: Mehrelektronensysteme I 70
4.5.1 Höhere Atome und Abschirmung der Kernladung 71
4.5.2 Die Modellierung des He-Atoms mit MODELLUS 72
4.5.3 Auswertung: Radius und Spektrum des He-Atoms 74
4.5.4 Lithium und weitere höhere Atome 78

4.6 Abschnitt 6: Einelektronensysteme II 84
4.6.1 Das H_2^+-Molekülion: Potential und Molekülbindung 84
4.6.2 Die Modellierung des H_2^+-Molekülions mit MODELLUS 86

4.7 Abschnitt 7: Mehrelektronensysteme II 91
4.7.1 Grundlagen der Modellierung von Festkörpern 91
4.7.2 Ein Potentialtopfmodell für Festkörper mit MODELLUS 94
4.7.3 Modellierung und physikalische Eigenschaften 99
4.7.4 Die Simulationssoftware ENERGY BAND CREATOR 103

5 Schülervorstellungen und Unterrichtsverlauf 105

5.1 Schülervorstellungen in der Atom- und Quantenphysik 105
5.2 Konsequenzen für die Bremer Konzeption zur Atomphysik 113
5.3 Unterrichtsverlauf: Überblick über mögliche Alternativen 118

6 Literatur- und Softwareverzeichnis 122

Anhang 124

A1 Tabellen und Abbildungen 124
A2 Beispiele für Aufgabenstellungen 145

Abstract

Die Bremer Konzeption zur Atomphysik basiert auf einer eindimensionalen Schrödinger-Gleichung, deren Lösungen Schüler auf dem PC graphisch ermitteln können. Die computerunterstützte Modellbildung erstreckt sich vom H-Atom bis zum Festkörper; sie kann mit der Software MODELLUS gegenüber früheren Darstellungen wesentlich vereinfacht werden. Ein weiterer Schwerpunkt liegt auf der Verknüpfung von empirischen Daten zu Atomradien, Spektren, Ladungsdichteverteilungen oder Festkörpereigenschaften mit einem zeitgemäßen, quantenphysikalischen und gleichzeitig anschaulichen theoretischen Atommodell.

Die Konzeption gliedert sich in sieben Abschnitte mit Grund- und Ergänzungsbausteinen, die in Umfang und Gestaltung ein breites Spektrum von Realisationsmöglichkeiten bieten. Die Kapitel 2 und 3 geben einen Überblick über die didaktischen Leitideen und die inhaltliche Gliederung der Konzeption. Kapitel 4 erläutert die spezifischen fachlichen Grundlagen ausführlich. In Kapitel 5 werden die aus empirischen Untersuchungen gewonnen bereichsspezifischen Erkenntnisse zu Schülervorstellungen und ihre Konsequenzen für die Bremer Konzeption dargestellt. Außerdem wird die Bandbreite möglicher Unterrichtsverläufe exemplarisch aufgezeigt. Abschließend werden als Anhang einige Unterrichtsmaterialien und Aufgaben bereitgestellt.

1 Einleitung

Die von Hans Niedderer entwickelte "Bremer Konzeption zur Atomphysik" für die Sekundarstufe II wird auf der Basis empirischer Unterrichtsforschung seit beinahe 20 Jahren kontinuierlich weiterentwickelt (vgl. die Arbeiten von Niedderer, Bayer, Bethge, Bormann, Cassens, Deylitz und Petri im Literaturverzeichnis). Sie hat in der Evaluation durch Deylitz (1999) und der damit verbundenen erstmaligen Realisation durch entsprechend fortgebildete Lehrer ihre grundsätzliche "Serienreife" bewiesen. Wichtige Anregungen bei der Entstehung der Konzeption stammen aus Arbeiten von Schreiner (1978), Koppelmann et.al. (1981) und Eckhardt (1982).

Die nachfolgende Darstellung der Konzeption unterscheidet sich von früheren Veröffentlichungen u.a. durch eine Konzentration auf die spezifischen Komponenten des Ansatzes, die Verwendung anderer Unterrichtssoftware und eine deutlichere Strukturierung. Die sieben Abschnitte der Konzeption gliedern sich in "Grundbausteine" und optionale Ergänzungen, die Spielräume eröffnen, da sie den roten Faden der Grundbausteine nicht unterbrechen.

Neben empirisch-fachdidaktischen Erkenntnissen liefern insbesondere die ständig erweiterten Möglichkeiten des Computers innovative Impulse. Die Modellierung der Schrödinger-Gleichung (SGL) kann mit der seit 1997 verfügbaren Software MODELLUS (für PC) anstelle der früher benutzten und über Jahre nur für den Mac verfügbaren Software STELLA wesentlich vereinfacht und verkürzt werden. Ergänzend oder alternativ kann spezifische Simulationssoftware, z.B. aus dem Paket VISUAL QUANTUM MECHANICS (VQM), eingesetzt werden.

2 Didaktische Leitideen

Die entwickelte didaktische Konzeption plädiert im Unterschied zu anderen Ansätzen zur Quantenphysik (s. z.B. Berg et.al. 1989) weiterhin für Anschaulichkeit im Bereich der Atome bei gleichzeitiger Abgrenzung gegen ein Planetenmodell. Das größte Hindernis stellen dabei nach empirischen Befunden (z.B. Bethge 1988) die Erwartungen der Schüler an die Beibehaltung der anschaulichen Begriffe Bahn und Bewegung auch in atomaren Dimensionen dar. Die intuitive Verknüpfung von Anschauung im Atom mit einer Bahnbewegung eines punktförmigen Elektrons soll in der Bremer Konzeption durch Vorstellungen über stationäre Zustände, ihre räumliche Ausdehnung und Dichteverteilung aufgebrochen werden.

Die Kernpunkte der Konzeption manifestieren sich in folgenden Leitideen:

- **Von Bohr zu Schrödinger**

Die Atomphysik der gymnasialen Oberstufe mündet häufig noch in einer mehr oder weniger vertieften Behandlung des Bohrschen Atommodells, einem Modell, das heute nur noch von wissenschaftshistorischem Interesse ist. Das Planetenmodell des Atoms bildet in der Bremer Konzeption lediglich den Ansatzpunkt; nicht zuletzt, weil eine aktive Auseinandersetzung mit dieser über Unterricht und Medien in der einen oder anderen Form in Schülerköpfen verankerten Vorstellung unerlässlich erscheint. Schwerpunkt und Ziel des Kurses ist ein Atommodell nach Schrödinger, in dem die Existenz von Zuständen quantisierter Energie eine unmittelbare Begründung findet und das den heutigen Stand der Physik berührt.

- **Computerunterstützte Modellbildung**

Die elementarisierte Schrödinger-Gleichung (SGL) wird als Aussage über die Krümmung der Zustandsfunktion ψ (Psi) formuliert. Mit einem anschaulichen Krümmungsbegriff und der Struktur der SGL lässt sich der Verlauf der ψ-Funktion verstehen und auch ohne Computer qualitativ konstruieren. Die Abhängigkeit der Krümmung $\psi''(r)$ von den Parametern Gesamtenergie E_n, Coulomb-Potential $V(r)$ und $\psi(r)$ drückt sich in der folgenden Form der stationären SGL aus:

$$\psi_n''(r) = -\, c_{SGL} \cdot (E_n - V(r)) \cdot \psi_n(r) \qquad (c_{SGL} = 8\pi^2 \cdot m / h^2)$$

Der Computer ist in mehrfacher Hinsicht ein wertvolles Hilfsmittel:

- zur Veranschaulichung der Bedeutung von ψ''
- zur Demonstration der Bedeutung von Randbedingungen
- zur Erarbeitung des Zustandsbegriffs
- zur konkreten Berechnung von Eigenwerten und Amplitudenfunktionen

Auf Potentialtopfmodelle für das H-Atom kann verzichtet werden.

- **Anwendungsorientierung**

Ein weiteres primäres Ziel ist die Erschließung von Anwendungen der SGL; vom H-Atom über Mehrelektronenatome bis zu den Grundlagen der Moleküle und Festkörper. Zur Erklärung physikalischer Eigenschaften und Kenngrößen werden z.T. anschauliche Analogien eingesetzt. Die Diskussion von Interpretationsfragen zur Quantenphysik beschränkt sich auf das Notwendige.

Erst die weitere Anwendung der beim H-Atom kennengelernten quantenphysikalischen Beschreibungsmethoden vom Helium bis auf die Ebene alltäglicher makroskopischer physikalischer Phänomene überzeugt viele Schüler, dass zahlreiche physikalische Phänomene nur im Lichte der Quantenphysik plausibel erklärbar sind und dass sie die "Welt der Quanten" auch direkt, mehr oder weniger im wörtlichen Sinne "berührt". Die nach dem einführenden Unterricht zur Quantenphysik mehrfach beobachtete Schülerhaltung, Quantenphysik beschreibe

bloß eine künstlich erzeugte, im Grunde unverständliche und daher vorläufige und nicht ernst zunehmende "verrückte Quantenwelt", kann dadurch korrigiert werden.

- **Schülerorientierung**

Begriffsbildung und Lernprozesse werden durch Phasen, in denen den Schülern Gelegenheit gegeben wird, eigene Ideen, Vorstellungen und Theorieansätze zu formulieren und zu diskutieren, besonders gefördert. (schülervorverständnis-orientierter Unterricht - SVU, Niedderer, Schecker 1982).

Nach den bisherigen Unterrichtserfahrungen hat das weitgehend selbständige und selbsttätige Modellieren und Lösen der SGL in verschiedenen Anwendungsfällen seitens der Schüler ebenfalls entscheidenden Einfluss auf Qualität und Stabilität der intendierten Lernwirkungen.

3 Überblick und Gliederung

Die Bremer Konzeption gliedert sich in sieben Abschnitte, die z.T. in Grund- und Ergänzungsbausteine unterteilt sind. Die Grundbausteine bauen systematisch aufeinander auf und beinhalten hauptsächlich spezifische Kernelemente der Konzeption. Die Ergänzungsbausteine bieten neben weiteren spezifischen Anteilen auch Standardthemen der Atomphysik.

Auf die Ergänzungsbausteine kann im Prinzip komplett verzichtet werden; sie beinhalten keine Voraussetzungen für spätere Abschnitte. In der Praxis wird man unter den spezifischen unterrichtlichen Schwerpunktsetzungen und Rahmen-bedingungen eine Auswahl treffen. In Umfang, Gestaltung und Platzierung bestehen in vielen Fällen große Spielräume.

Auch wenn es den Leitideen der Konzeption widerspricht, ist es natürlich möglich, die Bremer Konzeption z.B. nur in den Abschnitten 1-4 zu realisieren oder auf die Modellierung der SGL bzw. den Einsatz des Computers zu verzichten und statt dessen etwa nur fertige Lösungen zu diskutieren. Weitere Hinweise zu den unterrichtlichen Gestaltungsmöglichkeiten finden sich in Kap. 5.3.

Aus der Quantenphysik sollten bereits folgende Themen behandelt worden sein:

- Interferenz von Elektronen, De Broglie-Relation
- Photoeffekt, Einstein-Relation
- Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation

Umfang und Gestaltung des Grundbausteins 2 zu stehenden Wellen hängen stark von den Vorkenntnissen der Schüler ab: Die Schüler benötigen neben den üblichen Grundlagen aus klassischer Physik, Differentialrechnung und PC-Handhabung zum Verständnis der SGL und zur Beschreibung stationärer Zustände einige mathematisch-physikalische Kenntnisse, die ihnen u.U. nicht vertraut sind:

- die Begriffe Krümmung einer Funktion und Differentialgleichung
- Eigenschwingungen, stehende Wellen (z.B. schwingende Saiten oder Membrane, stehende Seil- oder Schallwellen) und ihre mathematische Beschreibung (Amplitudenfunktion, Differentialgleichung)

3.1 Abschnitt 1: Atombau und Spektrallinien

Vorlauf

- Als "Vorlauf " zur Bremer Konzeption kann die historische Entwicklung der Idee des Atoms vom antiken Griechenland bis "Rutherford" skizziert werden. In diesem Zusammenhang kann auch das individuelle Vorwissen der Schüler zu Atommodellen beleuchtet werden.

Grundbaustein 1: Atombau und Spektrallinien

- Den Einstieg in die UE bildet die Untersuchung des Wasserstoff-Spektrums (Balmer-Lampe). Die gefundenen Spektrallinien werden über die Einstein-Relation mit diskreten Energieniveaus und "Quantensprüngen" in Atomen in Verbindung gebracht.
- Das Bohrsche Atommodell von 1913 wird - aufbauend auf dem Rutherfordschen Modell - als erste Erklärung der Spektrallinien in seinen Leistungen und Problemen skizziert.
- Die Entwicklung der Quantentheorie erfordert ab 1926 ein anderes Atommodell, u.a. da diskrete Elektronenbahnen in Atomen die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation (HU) verletzen Diese Tatsache liefert die Begründung und Motivation für den weiteren Unterrichtsgang.
- Die Entwicklung eines adäquaten Atommodells führt - nachdem Louis de Broglie 1924 eine Wellenlänge für Elektronen postuliert hat - im Jahr 1926 auf eine

Wellengleichung für gebundene Elektronen. Diese Gleichung, die Schrödinger-Gleichung, bildet die Basis für ein quantenmechanisches Atommodell. Die Erarbeitung einer einfachen Form dieser Gleichung, ihre Analyse, das Auffinden und Interpretieren ihrer Lösungen in verschiedenen Anwendungen werden den Schülern als Inhalt und Ziel des nachfolgenden Unterrichts angekündigt.

- Als Alternative zu klassischen Teilchenbahnen in atomaren Dimensionen wird - sofern noch nicht im Kontext der HU geschehen - der quantenmechanische Zustandsbegriff, wonach einem Quantenobjekt nicht mehr alle klassischen Observablen gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit zugesprochen werden dürfen, dargestellt. Für Atome führen die Spektren auf eine Beschreibung mit stationären Energieeigenzuständen, deren räumliche Verteilung nicht mit einer wie immer gearteten Bahnbewegung von in Relation zum Atom winzigen Materiekügelchen verknüpft werden darf.

3.2 Abschnitt 2: Eigenzustände mechanischer Wellen

Grundbaustein 2: Stehende Seilwellen und Krümmungsbegriff

- Mit einem Elektromotor werden stehende Wellen auf einem Seil mit zunächst konstanter und dann - im Hinblick auf ein veränderliches Potential in der Atomphysik - variierender Massenverteilung angeregt. Bei bestimmten Frequenzen ergeben sich jeweils, ähnlich den Schwingungen einer Saite, diskrete stationäre Schwingungszustände. Anhand dieser Zustände wird der Begriff des Eigenzustands veranschaulicht.
- Die Wellengleichung der stehenden Seilwellen, deren Lösungen die beobachtbaren Zustände beschreiben, wird vorgestellt und erläutert. Gleichzeitig wird der Krümmungsbegriff eingeführt. Die in der Wellengleichung auftretende 2 Ableitung der Amplitudenfunktion wird als Krümmung der Amplituden- bzw. Zustandsfunktion interpretiert.

Ergänzungsbaustein 2A: Zweidimensionale Eigenzustände

- Das Phänomen stehende Wellen / Eigenschwingungen und die Beschreibung von Eigenzuständen werden am Beispiel eines von einem Lautsprecher angeregten sandbestreuten Tamburins vertieft.

Ergänzungsbaustein 2B: Dreidimensionale Eigenzustände

- Im Hinblick auf Analogiebetrachtungen zum Atom werden dreidimensionale stehende Schallwellen in einer Glaskugel untersucht.

Ergänzungsbaustein 2C: Modellierung stehender Seilwellen

- Die Eigenzustände eines Seils mit anderen Massenverteilungen werden von den Schülern experimentell ermittelt und zum Vergleich mit dem Computer modelliert. Dazu müssen die Schüler natürlich in die Handhabung der Software eingeführt werden.

3.3 Abschnitt 3: ψ-Funktion und Schrödinger-Gleichung

Grundbaustein 3: ψ-Funktion und Schrödinger-Gleichung

- Die Analogie "stehende Wellen - stationäre Energiezustände im Atom" wird ausgearbeitet und diskutiert.
- Zwei Interpretationen der ψ-Funktion, die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung und die Ladungsdichteverteilung werden vorgestellt und diskutiert.
- Eine eindimensionale SGL wird aus bisher bekannten Formeln entwickelt. Dabei wird auch das Coulomb-Potential am Beispiel des H-Atoms diskutiert und angemessen interpretiert.
- Die SGL wird mit Hilfe des Krümmungsbegriffs analysiert. Über halbquantitative Zusammenhänge lassen sich Lösungen mit wichtigen Charakteristika der ψ-Funktionen bereits ohne Rechner qualitativ konstruieren.

3.4 Abschnitt 4: Einelektronensysteme I

Grundbaustein 4: Das Wasserstoff-Atom

- Eine kurze Einführung in die Software MODELLUS wird gegeben (falls nicht unter Abschnitt 2 bereits geschehen)
- Die SGL des H-Atoms (eindimensional, s-Zustände) wird mit der Software MODELLUS (oder einer anderen geeigneten Software wie z.B. STELLA) modelliert. Dabei sind wichtige Details wie die Umrechnung in sinnvolle Einheiten (eV, Nanometer). die Randbedingungen und das 1/r Verhalten des Coulomb-Potentials zu beachten.
- Die Schüler suchen die Eigenzustände (z.B. n = 1 bis 4) selbsttätig unter Anwendung des Krümmungsbegriffs. Im nächsten Schritt lassen sie den Computer die normierten ψ^2-Funktionen berechnen.
- Mit der eindimensionalen SGL erhält man die korrekten, in den Lehrbüchern für viele Überlegungen zugrunde gelegten radialen Dichteverteilungsfunktionen. Die ermittelten ψ-Funktionen unterscheiden sich allerdings um den Faktor 1/r von den Radialteilen der Lösungen der dreidimensionalen SGL. Der Unterschied wird geklärt, damit man die Lösungen der SGL zur Grundlage

anschaulicher Vorstellungen von der räumlichen Gestalt des Atoms machen kann.

- Diskussion und Interpretation der ψ^2-Funktionen: Anwendung der vorgestellten Interpretationen, klassisch verbotener Bereich, Stabilität des Atoms; Zusammenhang zwischen den errechneten Energiewerten und gemessenen Spektren.

Ergänzungsbaustein 4A: experimentelle Bestimmung von Atomradien

- Verschiedene Methoden zur experimentellen Bestimmung des Atomradius werden vorgestellt und mit Varianten der theoretischen Radiusdefinition auf Basis der ψ-Funktion verglichen. In diese Diskussion können auch die Bohrschen Radien einbezogen werden.

Ergänzungsbaustein 4B: Franck-Hertz-Versuch

- Dieses Experiment kann auch genutzt werden, um zu testen, welche anschaulichen Vorstellungen sich die Schüler von der Energieübertragung von beschleunigten zu gebundenen Elektronen etc. machen. (Es kann auch bereits im Rahmen von Abschnitt 1 behandelt werden.)

Ergänzungsbaustein 4C: Modellierung wasserstoffähnlicher Ionen

- Insbesondere das He^+-Ion eignet sich gut um die Auswirkungen eines veränderten Potentials auf Eigenwerte, Eigenzustände und Spektrallinien zu untersuchen. In diesem Zusammenhang kann zur Vertiefung der quantenphysikalischen Zustandsbeschreibung der Begriff der Lokalisationsenergie, der häufig am unendlich hohen Potentialtopf dargestellt wird, behandelt werden.

Ergänzungsbaustein 4D: nicht radialsymmetrische Zustände, Pauli-Prinzip

- U.a. werden Abbildungen und Formeln von s, p, d und f-Orbitalen diskutiert, hinsichtlich Symmetrieeigenschaften (Knotenflächen) verglichen und in anschauliche Beziehung zu den Quantenzahlen n, l und m gesetzt.
- Anschließend wird der Aufbau des Periodensystems unter Einbeziehung des Pauli-Prinzips erklärt. Die Schalenstruktur der Atomhülle wird erläutert. Der Spin kann in Analogie zur Polarisation von Photonen als ausgezeichnete Feldrichtung des Elektrons dargestellt werden. (Teile dieses Ergänzungsbausteins können auch unter Abschnitt 5 behandelt werden.)

3.5 Abschnitt 5: Mehrelektronensysteme I

Grundbaustein 5: Das Helium-Atom

- Zunächst werden grundsätzliche Überlegungen zur gegenseitigen Abstoßung der Elektronen bzw. zur Abschirmung der Kernladung bei Mehrelektronen-

systemen vorgenommen. Mit der Interpretation der ψ-Funktion als Ladungsdichteverteilung werden Abschirmungseffekte plausibel veranschaulicht.

- Anschließend wird am einfachsten Fall des He-Atoms erarbeitet, wie die gegenseitigen Abschirmungseffekte in der SGL berücksichtigt werden können. Dies führt auf ein dem Hartree-Verfahren ähnliches Modell ohne Spin.
- Die Schüler suchen die Eigenzustände, wobei sie neben der Energie nun gleichzeitig die Normierungskonstante, die den Abschirmungseffekt durch das 2. Elektrons auf maximal eine Elementarladung begrenzt, iterativ ermitteln müssen. Arbeitsteilig können neben dem Grundzustand auch angeregte s-Zustände modelliert werden, wodurch sich die Zahl der gleichzeitig zu iterierenden Parameter allerdings auf 4 erhöht. Evtl. kann auch schon das Lithium-Atom einbezogen werden.
- Die ermittelten Werte für Zustandsenergien, Atomradien und Spektrallinien werden im Vergleich mit Literaturdaten diskutiert.

Ergänzungsbaustein 5A: Modellierung weiterer höherer Atome

- Lithium, Berylium, sowie angeregte/ ionisierte Bor- und Kohlenstoffatome können ebenfalls mit MODELLUS modelliert werden, da nur s-Zustände zu berücksichtigen sind. Theoretisch gibt es gegenüber dem He-Atom keine Erweiterungen. Praktisch ist die Modellierung jedoch zunehmend schwieriger und zeitaufwendiger, da entsprechend mehr Parameter gleichzeitig iteriert werden müssen. Aspekte der Schalenstruktur der Atomhülle können vertieft werden.

Ergänzungsbaustein 5B: Röntgen-Strahlung

- Abschirmungseffekte und Strukturen der Atomhülle werden an dieser Stelle vertieft. (Dieses Thema kann je nach inhaltlicher Schwerpunktsetzung auch an anderer Stelle behandelt werden.)

3.6 Abschnitt 6: Einelektronensysteme II

Grundbaustein 6: Das H_2^+-Molekül

- Durch Addition eines zweiten "Coulombtrichters" im Abstand a wird in der SGL das Potential des H_2^+-Molekül (eindimensional) auf einfache Weise realisiert. Mit MODELLUS lassen sich die ψ-Funktionen dieses Systems für verschiedene Kernabstände a mit einem dem H-Atom vergleichbarem Aufwand ermitteln.
- Mit der Interpretation der ψ-Funktion als Ladungsdichteverteilung wird die Molekülbindung unmittelbar plausibel. Die Abhängigkeit der Bindungsenergie vom Kernabstand a kann untersucht werden. Weiterführende physikalische Aspekte wie die Aufspaltung der Energieniveaus in einen bindenden und einen antibindenden Zustand können die Schüler ebenfalls selbst entdecken.

3.7 Abschnitt 7: Mehrelektronensysteme II

Grundbaustein 7: ψ-Funktion und Festkörper

- Für den Bereich Festkörper kann auch Simulationssoftware verwendet werden - z.B. ENERGY BAND CREATOR aus dem Paket VQM - , die das automatische Auffinden der Eigenzustände ermöglicht. Der Übergang vom diskreten Energieniveau, über die Aufspaltung in 2, 3, 4 usw. Niveaus bis zum kontinuierlichen Energieband kann von den Schülern entdeckt werden.
- Aus Lage, Abstand und Breite der Energiebänder können neben elektrischen z.B. auch sichtbare optische Eigenschaften wie Farbabsorptionsverhalten und Durchsichtigkeit diskutiert werden.

Ergänzungsbaustein 7A: Quantengehege

- Die Erklärung und Diskussion von rastertunnelmikroskopischen Aufnahmen, die Ladungsdichteverteilungen in sog. "Quantengehegen" auf Festkörperoberflächen zeigen (s. z.B. http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/ SCIENCE Vol. 262, 10/93 oder FAZ 03.11.93), bietet sich im Rahmen der Bremer Konzeption ebenfalls an.

Weitere technologisch relevante Untersuchungen etwa zu Quantendots in der Halbleitertechnologie oder einzelnen Atomen bzw. Ionen in einer Paul-Falle können im Rahmen der Bremer Konzeption zur Atomphysik sinnvoll aufgegriffen werden.

Andere, für die Bremer Konzeption nicht spezifische Themen der Atom- und Festkörperphysik wie Laser oder Halbleiter können direkt angeschlossen werden.

4. Inhaltliche Erläuterungen

Im Folgenden werden die für die Bremer Konzeption spezifischen Elemente der UE unter vorwiegend physikalischer Perspektive genauer beschrieben. Auf die Darstellung hinlänglich bekannter Themen der Atomphysik wie z.B. Spektral-untersuchungen, Franck-Hertz-Versuch oder Röntgen-Strahlung wird verzichtet.

4.1 Abschnitt 1: Atombau und Spektrallinien

4.1.1 Energiezustände statt Planetenbahnen im Atom

Der Titel des Abschnitts ist identisch mit dem Titel des Buches, indem Sommerfeld 1919 u.a. die Bohr-Sommerfeldsche Atomtheorie entfaltet. Der Buchtitel weist darauf hin, dass die Verknüpfung von Spektrallinien mit der Struktur der Atomhülle damals noch keine Selbstverständlichkeit war. Die Beschreibung von Spektral-linien des Wasserstoffs durch die Balmer-Formel war zwar schon seit 1885 bekannt. Aber erst nach der "Entdeckung" des Planckschen Wirkungsquantums 1899 und speziell der Einsteinschen Photonenhypothese von 1905 ergab sich diese Verknüpfung.

Vor diesem Hintergrund werden die durch Bohr vorgenommenen Änderungen am von Rutherford 1911 aus Streuversuchen entwickelten, elektrodynamisch stabilen Kern-Hülle-Modell des Atoms verständlich. Die Bohrschen Postulate von 1913 stehen im Widerspruch zur klassischen Physik, sie erklären aber zumindest für das H-Atom die experimentellen Tatsachen gut.

Sommerfeld schrieb bereits 1928 einen "wellenmechanischen Ergänzungsband" zu "Atombau und Spektrallinien". Die Bohr-Sommerfeldsche Atomtheorie war 1928 bereits von der weiteren Entwicklung der Quantentheorie überholt.

U.a. war nach der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation (HU) von 1926 die Angabe einer Elektronenbahn nicht mehr möglich. Man kann inzwischen davon ausgehen, dass eine solche Bahn nicht nur experimentell nicht zugänglich ist, sondern definitiv nicht existiert. Dies kann man leicht nachrechnen, in dem die HU auf ein auf die Größenordnung des Atomdurchmessers lokalisiertes Elektron anwendet. Spätestens ab dem Jahr 1926 mussten folglich Alternativen zum

Bohrschen Atommodell entwickelt werden. Zielperspektive für den Unterricht ist demnach die Entwicklung eines quantenmechanischen, mit der HU zu vereinbarenden Atommodells.

Für Quantenobjekte tritt eine Beschreibung mit der sogenannten Zustandsfunktion ψ an die Stelle von klassischen Teilchenbahnen mit prinzipiell jederzeit beliebig genau bestimmten Werten für Observablen wie Ort, Impuls, kinetische oder potentielle Energie. Quantenobjekte kann man - wegen der HU - prinzipiell nicht in einen Zustand bringen, in dem alle klassischen Observablen gleichzeitig auch bloß theoretisch beliebig exakt bestimmt wären.

Die stets gleichen, durch Messungen beliebig reproduzierbaren Energieänderungen (Quantensprünge) in Atomen legen die Vermutung nahe, dass es in Atomen stabile "Energiezustände" mit eindeutig bestimmter Energie gibt, bzw. dass die existierenden Atome stabile "Energiezustände" von Elektronen und Atomkernen sind! Versucht man aber den Ort etwa des Elektrons im H-Atom genauer als auf die Größenordnung des Atomdurchmessers festzulegen, wird der stabile Zustand des Atoms und damit das Atom zerstört. In einem Energieeigenzustand des Atoms gibt es keinen genauer bestimmten Ort des Elektrons.

Um für die stabilen "Energiezustände" sowohl eine theoretische Beschreibung als auch eine anschauliche und plausiblere alternative Vorstellung zu zwar weit verbreiteten, aber im atomaren Bereich dennoch unzulässigen Bahnvorstellungen für Elektronen zu erarbeiten, ist ein Exkurs über Eigenschwingungen bzw. stehende Wellen hilfreich. Zuvor werden klassischer und quantenmechanischer Zustandsbegriff noch einmal einander gegenüber gestellt.

4.1.2 Klassischer und quantenmechanischer Zustandsbegriff

In der klassischen Mechanik ist der Zustand eines Systems zur Zeit t durch die Angabe aller Impulskoordinaten $p_i(t)$ und Ortskoordinaten $x_i(t)$ der zum System gehörenden Teilchen vollständig bestimmt. Kennt man die das System determinierenden Gesetzmäßigkeiten (Hamilton-Funktion) sowie die Anfangsbedingungen $p_i(t_0)$ und $x_i(t_0)$, so ist die zeitliche Entwicklung des Systems

eindeutig festgelegt. Die Observablen Impuls und Ort können als objektive, zu jedem Zeitpunkt uneingeschränkt gegebene Eigenschaften jedes Teilchens des Systems aufgefasst werden. Daher lässt sich die Bahnkurve des Teilchens angeben.

In der Quantentheorie wird der Zustand eines Systems durch eine i.a. komplexwertige Wellenfunktion Ψ oder durch einen Vektor $|\Psi\rangle$ repräsentiert. Die physikalischen Observablen werden durch (Differential-)Operatoren definiert. Hat man die Schrödinger-Gleichung für dieses System aufgestellt, so ist die zeitliche Entwicklung eines gegebenen Zustands $|\Psi\rangle$ weiterhin über diese SGL streng determiniert. Die - im klassischen Sinne - Eigenschaften Ort und Impuls eines Systems z.B. sind jedoch durch den Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ grundsätzlich nicht uneingeschränkt und unabhängig voneinander gegeben:

Die Eigenschaft eines bestimmten Impulses p_1 etwa kann man dem System nur zusprechen, wenn der Zustand $|\Psi\rangle$ des Systems gerade der entsprechende Impulseigenzustand $|\Phi_1\rangle$ des Systems ist. Die Anwendung des Impulsoperators P auf $|\Phi_1\rangle$ ergibt dann gerade den Wert p_1:

$$P\,|\Phi_1\rangle = p_1\,|\Phi_1\rangle \qquad (4.1.1)$$

Im allgemeinen Fall lässt sich $|\Psi\rangle$ als Summe aller möglichen Impulseigenzustände des Systems $|\Phi_j\rangle$ gewichtet mit Koeffizienten c_j beschreiben:

$$|\Psi\rangle = \Sigma\, c_j\,|\Phi_j\rangle \qquad \text{mit } c_j = \langle\Phi_j|\Psi\rangle \text{ (Skalarprodukt)} \qquad (4.1.2)$$

Die Anwendung des Operators P auf den Vektor $|\Psi\rangle$ ergibt dann:

$$P\,|\Psi\rangle = \Sigma\, c_j\, p_j\,|\Phi_j\rangle \qquad (4.1.3)$$

Eine wiederholte Impulsmessung ergibt im Fall, dass das System sich etwa im Eigenzustand $|\Phi_1\rangle$ befindet stets den selben Wert p_1.

Im allgemeinen Fall ist der Ausgang der Messung insofern unbestimmt, dass nicht vorhergesagt werden kann, welches p_j des möglichen Impulsspektrums am System gemessen wird bzw., in welchen Zustand $|\Phi_j\rangle$ das System übergeht. Über den

Ausgang einer Messung lassen sich im Fall, dass das System nicht in einem Eigenzustand vorliegt, nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen. Alle Zustandsvektoren sind auf den Betrag 1 normiert, so dass gilt:

$$<\Psi|\Psi> = 1 \quad (\text{entspricht } |\Psi|^2 = 1) \text{ und } \Sigma\, |c_j|^2 = 1 \qquad (4.1.4)$$

so dass $|c_j|^2$ die Wahrscheinlichkeit für das Messergebnis p_j angibt.

Grundsätzlich unterscheiden sich die Eigenfunktionen bzw. Eigenzustände eines bestimmten Operators von denen eines anderen Operators, beispielsweise für den Impulsoperator P_X und den Ortsoperator X. Daraus folgt, dass ein System, dass sich in einem Impulseigenzustand befindet, sich nicht gleichzeitig in einem Ortseigenzustand befinden kann. Eine Messung kann den Zustand $|\Psi>$ nicht gleichzeitig in einen Impuls- und einen Ortseigenzustand überführen.

Waren in einem klassischen System Ort und Impuls jederzeit gleichzeitig genau festgelegt und dadurch als Systemeigenschaften definierbar, so ist einem quantenphysikalischen System zu einem bestimmten Zeitpunkt höchstens eine der beiden Größen Impuls und Ort als Eigenschaft mit eindeutig definiertem Wert zuzuordnen. Ob man in dem hier beschriebenen Sinn bestimmte Eigenschaften einem quantenphysikalischen System gleichzeitig zusprechen kann, hängt vom Kommutator der betreffenden Operatoren (= Differenz der Anwendungsergebnisse bei vertauschter Reihenfolge) ab. Dies ist nur möglich, wenn dieser Kommutator Null ergibt. Beispielsweise gilt:

$$(P_X X - X P_X)\, |\Psi> = i\, h/ 2\pi\, |\Psi> \qquad (4.1.5)$$

Anders ausgedrückt: Je nachdem, in welcher Reihenfolge man die Operatoren auf einen Zustand anwendet, kommt grundsätzlich ein anderes Ergebnis heraus. Das Kommutativgesetz gilt hier nicht. In einem solchen Fall ist nur die zuletzt gemessene Eigenschaft (im klassischen Sinn) dem System in dem dann vorliegenden Zustand zuzusprechen.

Liegt ein Ensemble von Systemen vor, die sich z.B. alle im gleichen Basiszustand $|\Phi_j>$ befinden, so werden bei einer Ortsmessung die Messwerte für das Ensemble um den sogenannten Erwartungswert für den Ort streuen. Entsprechendes gilt

umgekehrt. Dies ist nichts anderes als die Aussage der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation.

Der entscheidende Unterschied zwischen klassischer Physik und Quantenphysik lässt sich noch einmal wie folgt zusammenfassen: In der klassischen Physik sind sowohl die zeitliche Entwicklung des Systems als auch die Systemeigenschaften vollständig determiniert. In der Quantenphysik ist zwar die "ungestörte" zeitliche Entwicklung streng determiniert, jedoch gilt dies nicht für die Eigenschaften (Observablen) und ihre zeitliche Entwicklung. Quantenobjekte sind also keine klassischen Teilchen: Es gibt keine Bahnkurven, welche "Eigenschaften" sie gerade "besitzen", ist von dem Zustand abhängig, in dem sie sich befinden bzw. in den sie qua Präparation bzw. Messung gebracht wurden.

Tab. 4.1.1: Klassischer und quantenmechanischer Zustand eines Elektrons

Klassischer Zustand des Elektrons	**Quantenmechanischer Zustand**
Allen Observablen kann jederzeit und gleichzeitig ein prinzipiell unbeschränkt genauer Wert unabhängig von einer Messung zugesprochen werden. Der momentane Zustand des Elektrons ist durch seinen Ort und seinen Impuls exakt definiert. Eine Messung hat prinzipiell keinen Einfluss auf den Zustand. Observablen: Ladung: -e Masse: m Energie: E(t) Impuls: p(t) Ort: x(t) .... Veranschaulichung: Winziges geladenes Kügelchen, das auf einer bestimmten Bahn durch den Raum fliegt bzw. das sich in Ruhe befindet	Zu einem bestimmten Zeitpunkt hat nur ein Teil der prinzipiell messbaren Observablen des Elektrons einen exakt definierten Wert. Die Zustandsfunktion beinhaltet die Übergangswahrscheinlichkeiten für Zustände mit scharf bestimmten Observablen (Eigenzustände mit Eigenwerten). Durch Messungen von Observablen werden Eigenzustände erzeugt bzw. vernichtet. Beispiel: stationärer Energieeigenzustand n Observablen: Ladung: -e Masse: m Energie: E_n Impulsverteilung: $\psi(p)$ Ortsverteilung: $\psi(x)$ ..... Veranschaulichung: stationäre, bewegungslose, kontinuierliche Verteilung unterschiedlicher Dichte (s. unten)

4.2 Abschnitt 2: Eigenzustände mechanischer Wellen

4.2.1 Stehende Seilwellen und Krümmungsbegriff

- **Stehende Wellen**

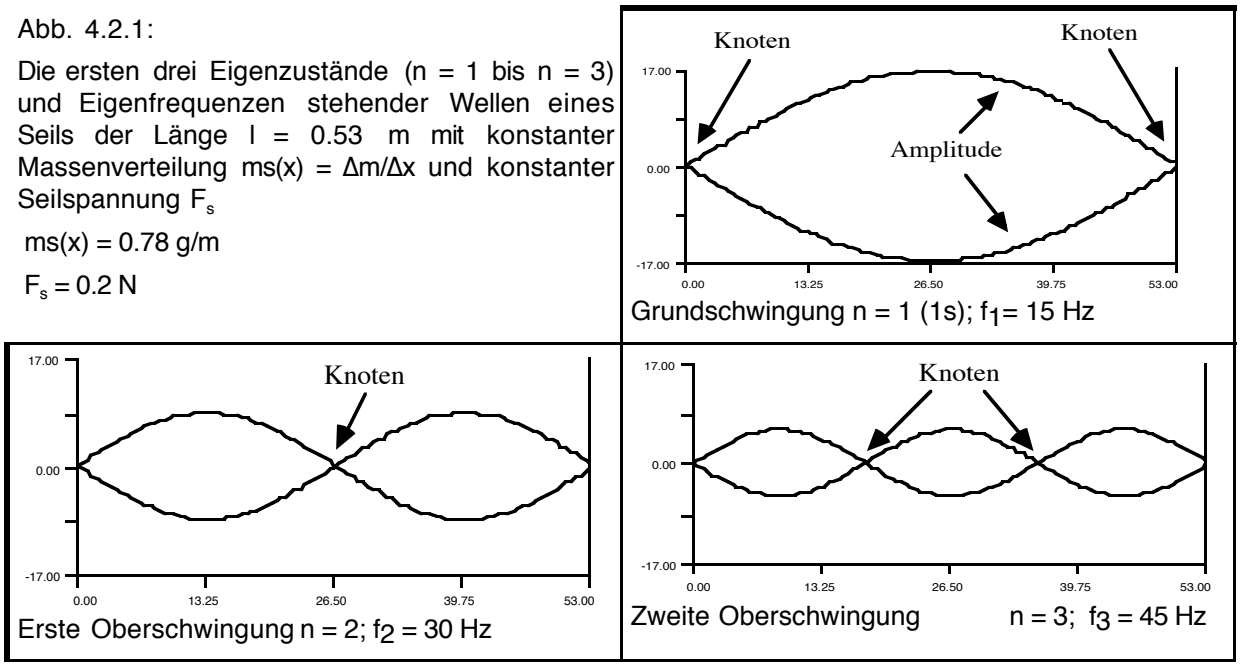
Stehende Wellen können in einem räumlich begrenzten, schwingungsfähigen Medium entstehen. Ein sehr anschauliches Beispiel ist ein eingespanntes Seil, das an einem Ende mit der Frequenz f angeregt wird, so dass sich eine Welle mit der Phasengeschwindigkeit c und der Wellenlänge λ auf ihm ausbreitet und am anderen Ende reflektiert wird. Bei der Überlagerung von hin- und rücklaufender Welle entsteht bei bestimmten Resonanzfrequenzen eine stehende Welle. Man spricht auch von einer Eigenschwingung oder einem Eigenzustand.

Der Rand des schwingenden Mediums (das Seilende) führt im Prinzip keine Bewegung aus. Die Seilenden sind gleichzeitig sogenannte Knoten - genauer gesagt Knotenpunkte. Zwischen den Kontenpunkten bilden sich sogenannte Schwingungsbäuche. Die Verlaufsfunktion des maximalen Ausschlags des Seils heißt Amplitudenfunktion y. Sie ist die Einhüllende der Seilbewegung. Da sie symmetrisch zur x-Achse ist, genügt die Angabe einer Funktion, z.B. nur der positiven. Diese Funktion beschreibt keine Bewegung, sie ist zeitlich konstant.

Abb. 4.2.1:
Die ersten drei Eigenzustände (n = 1 bis n = 3) und Eigenfrequenzen stehender Wellen eines Seils der Länge l = 0.53 m mit konstanter Massenverteilung ms(x) = Δm/Δx und konstanter Seilspannung F_s

ms(x) = 0.78 g/m

F_s = 0.2 N



Die Grundschwingung, bzw. der Grundzustand, ist dadurch gekennzeichnet, dass zwischen den beiden (Knoten-)Punkten, die das Seil einspannen, keine weiteren Knoten existieren. Der Grundzustand wird mit n = 1 bezeichnet. Die Eigenfrequenzen tragen als Index die Zustandszahl (z.B. f_1 = 15 Hz).

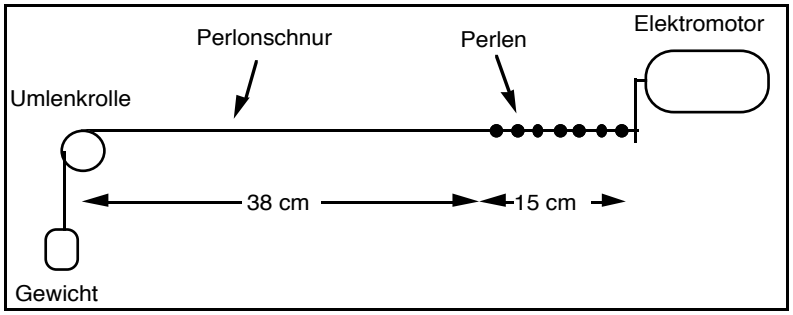
- **Stehende Wellen und inhomogene Medien**

Ein Seil variierender Massenverteilung ms(x) = Δm/Δx - ein "inhomogenes Seil" - ist anderen Bedingungen unterworfen. Daher sollten sich andere Eigenzustände mit anderen Eigenfrequenzen und Amplitudenfunktionen ergeben.

Im Experiment wurde ein 0.53 m langes "Stufenseil" benutzt, eine Perlonschnur, die für x ≤ 0.38 m eine Massenbelegung von 0.78 g/m (nur Perlonschnur) und für x > 0.38 m von 8.0 g/m (Perlonschnur mit aufgefädelten, nicht verschiebbaren Perlen) hat. Diese Massenverteilung wurde mit einer Waage ermittelt. Die konstante Seilspannung wurde mittels einer über eine Umlenkrolle an einem Seilende befestigte Masse von 20 g erreicht. Auf der anderen Seite war das Seil mit einem kleinen Elektromotor verbunden, dessen Anregungsfrequenz gesteuert werden konnte.

Durch die inhomogene Massenverteilung zeigen die Eigenfrequenzen keinen konstanten Abstand mehr - die Frequenzen des homogenen Seils waren f_1 = 15 Hz; f_2 = 30 Hz; f_3 = 45 Hz. Bei den höheren Eigenzuständen befinden sich die Knoten im Bereich größerer Massenbelegung.

Abb. 4.2.2: Schema des Versuchsaufbaus zum "Stufenseil"

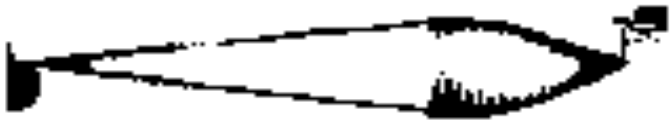
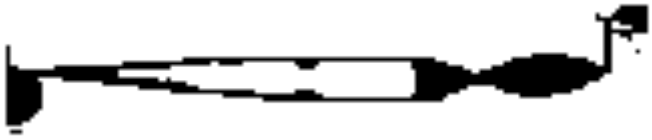


Weitere wichtige Unterschiede lassen sich über den Krümmungsbegriff (s. unten) ausdrücken: Die Krümmung des Seils ist im Bereich hoher Massenbelegung größer als im Bereich kleiner Massenbelegung. Die Krümmung des Seils lässt

einen Rückschluss auf die Massenverteilung zu und umgekehrt. Analoge Überlegungen werden in der Atomphysik eine wichtige Rolle spielen.

Näturlich können auch Seile mit anders konstruiertem ms(x) untersucht werden (mehr als zwei Sufen oder quasi kontinuierlich veränderlicher Verlauf.

Abb. 4.2.3: Die ersten drei Eigenzustände des "Stufenseils" (Fotos von y(x), Messwerte für f)

Zustandszahl n	Eigenfrequenz f_n	Amplitudenfunktion $y_n(x)$
n = 1	f_1 = 8,6 Hz	
n = 2	f_2 = 20 Hz	
n = 3	f_3 = 27 Hz	

- **Der Begriff des diskreten Eigenzustands**

Abb. 4.2.3 beinhaltet bereits die wichtigsten Kennzeichen eines diskreten Eigenzustands eines physikalischen Systems. Jeder dieser Zustände hat einen eigenen Namen, symbolisiert durch die Zustandszahl - üblicherweise n - und evtl. weitere Nummern bzw. Quantenzahlen, einen bestimmten Eigenwert - z.B. eine Eigenfrequenz f_n oder eine Eigenenergie E_n - und eine spezielle Zustandsfunktion mit einer zeitunabhängigen Amplitudenfunktion y(x) bzw. $\psi(r)$ in der Atomphysik.

Die Gestalt der Amplitudenfunktion hat bei klassischen stehenden Wellen eine sekundäre Bedeutung, gewinnt jedoch in der Atom- und Quantenphysik als Maß für Verteilungen und Wahrscheinlichkeiten große physikalische Bedeutung. Entsprechend der jeweiligen Anforderung der physikalischen Situation und dem

mathematischen Abstraktionsvermögen der Schüler bieten sich mehrere Möglichkeiten zur Kennzeichnung der Amplitudenfunktion:

- Angabe der Zahl der Knoten oder der Bäuche
- Bei zweidimensionalen stehenden Wellen: Zeichnen der Knotenlinien
- Zeichnung von Hand gemäß Beobachtung
- Angabe der mathematischen Funktion $y_n(x)$ (bzw. $\psi_n(r)$ in der Atomphysik)
- Graphische Darstellung der Funktion $y_n(x)$ von Hand
- Graphische Darstellung der Funktion $y_n(x)$ mit dem Computer

- **Amplitudenfunktion, Differentialgleichung und Krümmung**

Ein genaueres Verständnis und die Möglichkeit der Konstruktion und Modellierung der stehenden Seilwellen erfordert eine Wellengleichung, d.h. die Differentialgleichung (DGL) des Systems. In der hier betrachteten DGL wird die 2. Ableitung y''(x) der Amplitudenfunktion mit der Amplitudenfunktion y(x) selbst verknüpft. (Der die Schwingung beschreibende Faktor $\cos(\omega t)$, der auf die Wellengleichung der Form $y''(x,t) = c^{-2} \cdot \ddot{y}(x,t)$ führt, wird im Folgenden entsprechend der Beschränkung auf die zeitunabhängige SGL in der Atomphysik nicht betrachtet.)

Die 2. Ableitung einer Funktion beschreibt deren Steigungsänderung und wird als Krümmung interpretiert. Differentialgeometrisch exakt ist die Krümmung K einer Funktion y(x) als $K = y'' \cdot (1+ y'^{2})^{-1/3}$ definiert. Für nicht zu große Auslenkungen ist y'' der dominierende Faktor.

Abb. 4.2.4:

Die Kurve y(x) zeigt in Punkt 1 eine größere Steigung y_1' als y_2' in Punkt 2. Die Steigung nimmt ab, die Krümmung ist negativ. In Punkt 3 ist die Krümmung kleiner, die Steigung ändert sich weniger stark.

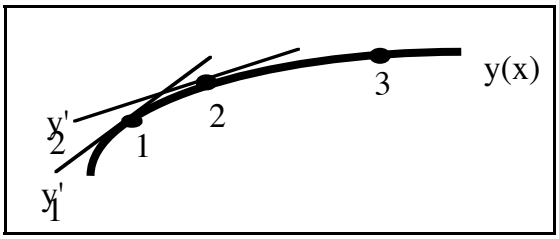
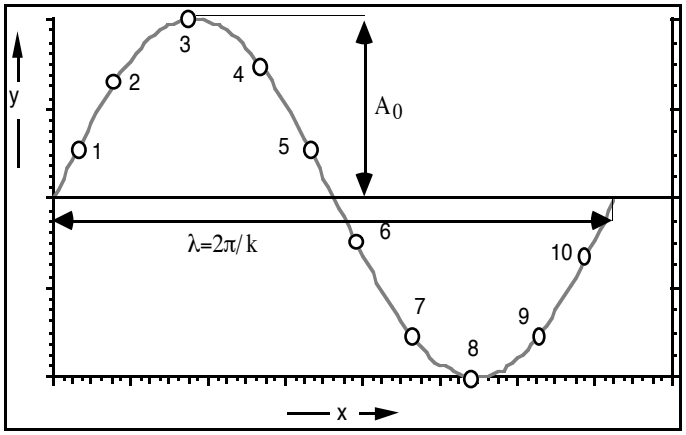


Abb. 4.2.5:

Die Abbildung zeigt eine Sinuskurve: In der Umgebung von Punkt 1 ist die Krümmung betragsmäßig gering, die Funktion kann mit einer Geraden angenähert werden. Zwischen 2 und 3 nimmt die Krümmung zu, der Graph neigt sich zunehmend stärker. In 3 ist die Krümmung betragsmäßig maximal. Ihr Vorzeichen ist negativ, weil sich die Kurve mit dem Uhrzeigersinn dreht. In 8 ist die maximale Krümmung in entgegengesetzter Richtung erreicht. Ihr Vorzeichen ist positiv, weil sich die Kurve gegen den Uhrzeigersinn dreht.



Für eine stehende Seilwelle hat bei homogener Massenverteilung die Amplitudenfunktion $y_n(x)$ des Zustands n beispielsweise folgende Form:

$$y_n(x) = A_n \cdot \sin(k_n \cdot x) \qquad (4.2.1)$$

Die maximale Amplitude A und die Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ sind zwei zustandsspezifische Konstanten. Die zweite Ableitung ergibt sich zu:

$$y''_n(x) = -A_n \cdot k_n^2 \cdot \sin(k_n \cdot x) \qquad (4.2.2)$$

bzw.

$$y''_n(x) = -k_n^2 \cdot y_n(x) \qquad (4.2.3)$$

Gl. 4.2.3 ist die DGL für die Amplitudenfunktion der stehender Seilwellen. Interpretiert als Bestimmungsgleichung für die Krümmung der Amplitudenfunktion sieht man:

- Amplitude y_n und Krümmung y''_n haben entgegengesetztes Vorzeichen.
- Je größer die Amplitude desto größer die Krümmung.

Diese beiden Aussagen charakterisieren die typische Gestalt einer "sinusartigen" Kurve. Mit der Relation $\lambda = c / f$ zwischen Wellenlänge λ, Frequenz f und Phasengeschwindigkeit c lässt sich Gl. 4.2.3 wie folgt umschreiben:

$$y''_n(x) = -4\pi^2 \cdot f_n^2 / c^2 \cdot y_n(x) \qquad (4.2.4)$$

Die Geschwindigkeit c der sich zur stehenden Welle überlagernden laufenden Wellen wird durch die Massenverteilung ms(x) auf dem Seil und die Spannkraft F_S des Seils bestimmt. Es gilt (vgl. z.B. Gerthsen 1989, 150 f):

$$c^2 = F_s / ms \qquad (4.2.5)$$

Gl. 4.2.4 wird damit zu:

$$y''_n(x) = - 4\pi^2 \cdot f_n^2 \cdot ms(x)/F_S \cdot y_n(x) \qquad (4.2.6)$$

DGL 4.2.6 gilt auch für nicht sinusförmige stehende Seilwellen, und somit auch für den Fall inhomogener Massenverteilung. Sie enthält neben den Eigenfunktionen y_n auch die Eigenwerte f_n des Systems. Die Eigenzustände des Systems sind damit vollständig determiniert. Außerdem ergeben sich Aussagen über die Krümmung.

Da y(x) auf der rechten Seite mit ms(x) und mit f^2 multipliziert wird, ist die Krümmung y"(x) im Bereich hoher Massenbelegung und mit zunehmender Frequenz größer. Dieses Ergebnis stimmt mit dem Experiment (s. oben) überein.

In dieser Form lässt sich die DGL einfach auf dem Rechner modellieren.

4.2.2 Die Modellierung stehender Seilwellen mit MODELLUS

Mit MODELLUS lassen sich DGLen numerisch schrittweise lösen. Die ohne Rechner mathematisch aufwendig zu bestimmenden Amplitudenfunktionen stehender Seilwellen mit inhomogener Massenverteilung können direkt graphisch dargestellt werden. Die Modellierung erfolgt in einer der üblichen Schreibweise ähnlichen Form. Die wichtigsten Einschränkungen sind:

- Es können nur DGLen erster Ordnung eingegeben werden. Höhere Ableitungen müssen in Zwischenschritten vorgenommen werden. (Der Differentialquotient muss links stehen.)
- Die Zeichen ' und " können nicht verwendet werden.
- Es können keine tiefgestellten Indizes eingegeben werden.
- Aus dem Griechischen steht nur das π zur Verfügung.
- Einheiten können nicht eingegeben werden.

Weitere Informationen zur Arbeit mit MODELLUS werden in Kap. 4.4 gegeben.

Ein Stufenseil ist relativ einfach zu modellieren (Abb. 4.2.6): Mit Gl. 4.2.6 lassen sich die Amplitudenfunktionen und Eigenfrequenzen zu den Eigenzuständen des Seils finden. Die DGL ist in zwei Schritten einzugeben. Die Massendichte ms(x) wird über eine if-Bedingung realisiert. Die noch nicht festgelegten Parameter f und F_s fragt das Programm nach Fertigstellung des Modells zusammen mit den Startwerten für y und sy automatisch ab. Zuvor müssen noch die laufende Variable x sowie der Wertebereich für x (z.B. 0.0 bis 0.6) und die Schrittweite für das numerische Verfahren (z.B. 0.003) im entsprechenden Fenster festgelegt werden.

Aus dem Experiment ist klar, dass die gesuchten Funktionen am linken und am rechten Seilende einen Knoten haben. Die Randbedingungen lauten für das 0.53 m lange Seil: y(0) = 0 und y(0.53) = 0. Der Anfangswert für die Steigung sy ist im Prinzip beliebig ≠ 0 wählbar. Er beeinflusst das Maximum der Amplitude, aber nicht den Kurvenverlauf. I.d.R. wählt man zunächst sy(0) = 1. Will man die modellierte Amplitudenfunktion an das Experiment anpassen, kann man dies mit anderen Werten für sy erreichen.

Die Frequenz f muss ausgehend von den experimentellen Werten nun systematisch mit "try and refine" so verändert werden, dass die Bedingung y (0.53) = 0 erfüllt wird. Bei zu großen Werten schneidet der Funktionsgraph die x-Achse zu früh, da ein größeres f eine größere Krümmung bewirkt, so dass die Kurve früher wieder zur x-Achse geführt wird. Bei zu kleinen Werten ist es entsprechend umgekehrt.

Abb. 4.2.6: Stufenseil mit MODELLUS: Modell und Parameter für die ersten drei Eigenzustände

$$\frac{dy}{dx} = sy$$

$$\frac{dsy}{dx} = -4 \times \Pi^2 \times f^2 \times \frac{ms}{Fs} \times y$$

if(x<=0.37) then (ms=0.00078)

if(x>0.37) then (ms=0.008)

Parameters

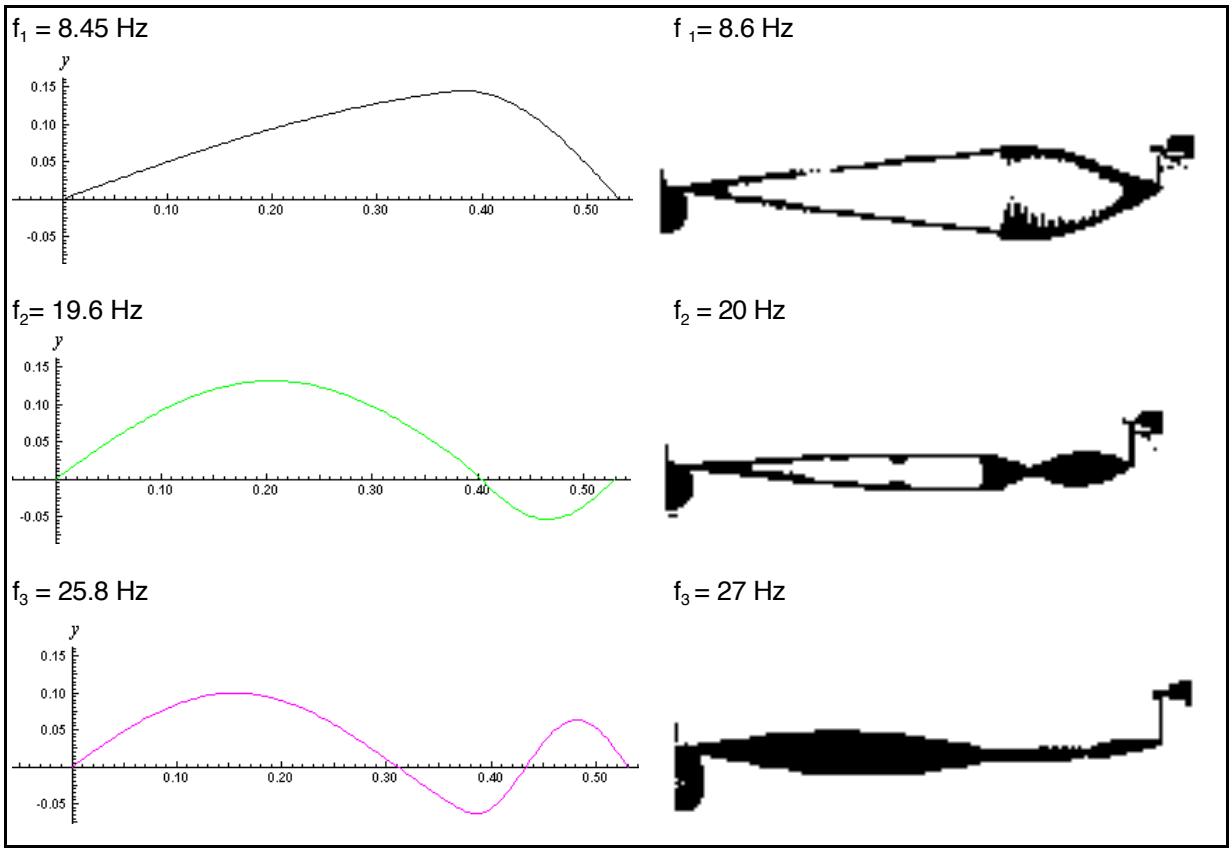
	case 1	case 2	case 3
f	8.45	19.6	25.8
Fs	0.2	0.2	0.2

Initial values

	case 1	case 2	case 3
y	0	0	0
sy	0.5	1	1

(ms in kg/m, f in Hz und F_s in N)

Abb. 4.2.7: Stufenseil: Modellierte (links) und experimentell bestimmte (rechts) Amplitudenfunktionen



Die Eigenwerte in Modell und Experiment stimmen in akzeptabler Näherung überein. Im Experiment treten natürlich die üblichen Fehlerquellen auf.

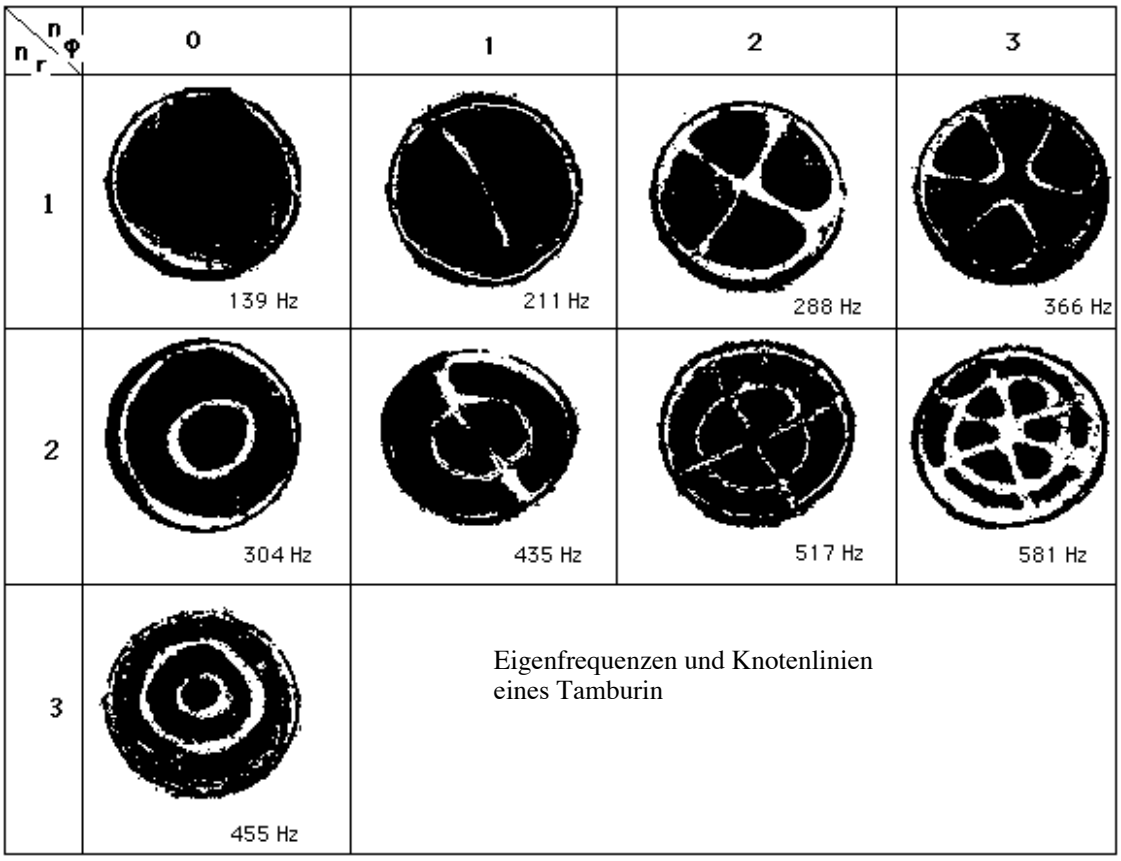
4.2.3 Zwei- und dreidimensionale Eigenzustände

Ein Tamburin wird mit einem Frequenzgenerator und einem Lautsprecher zu Eigenschwingungen angeregt. Fixiert man das Tamburin einige cm über der (hingelegten) Lautsprecherbox und streut Sand auf die Membran bilden sich bei bestimmten Frequenzen Muster aus. An Stellen, an denen sich die Sandkörner sammeln, bewegt sich die Membran nicht. Diese Stellen haben die Form von Linien oder Kreisen. Es handelt sich um die Knotenlinien der Amplitudenfunktion.

Die Eigenzustände werden mit zwei Zustandszahlen, n_r und n_φ bezeichnet. Alle Zustände mit gleichem n_φ zeigen ein ähnliches Knotenlinienbild. Z.B. besitzen alle Zustände mit $n_\varphi = 0$ radialsymmetrische Knotenlinien; alle Linien verlaufen kreis-

förmig um den Mittelpunkt. Alle Bilder mit $n_r = 1$ zeigen einen Kreis (ganz außen), alle mit $n_r = 2$ zwei Kreise, alle mit $n_r = 3$ drei Kreise usw..

Abb. 4.2.8: Eigenzustände des Tamburins: Knotenlbilder von 0 Hz bis 581 Hz

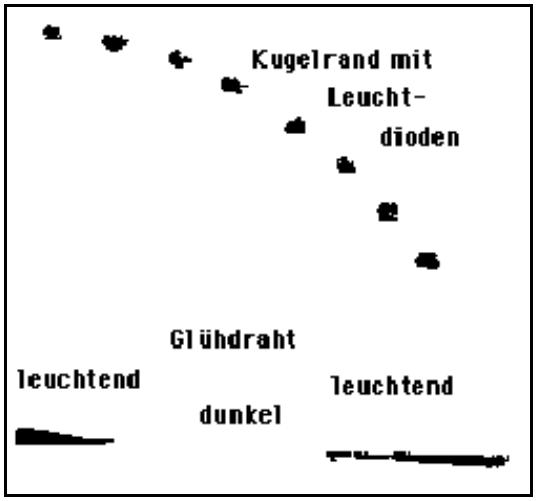


Das Tamburin ist ein zweidimensionales System; es entstehen Knotenlinien. In einem dreidimensionalen System wie z.B. einer Glaskugel, in der die Luft über einen Lautsprecher zum Schwingen angeregt wird, bilden sich Knotenflächen.

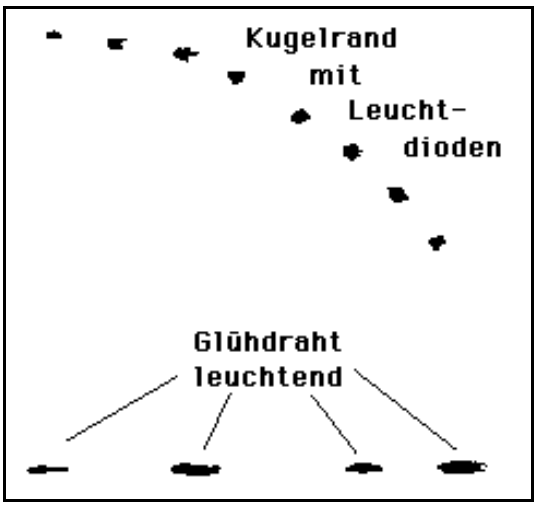
Zur Untersuchung wird ein Draht über eine Öffnung der Kugel durch ihren Mittelpunkt geführt. In den (Bewegungs-)Knotenflächen ist die Luft in Ruhe. Wird der Draht von Strom durchflossen, fängt er an Schnittstellen mit Knotenflächen an zu glühen, da die ruhende Luft an diesen Stellen den Draht weniger kühlt. Auch hier bilden sich nur bei bestimmten Frequenzen Knotenflächen. Da es sich um radialsymmetrische Zustände handelt, reicht eine Zustandszahl zur Festlegung aus. Die Kugelknotenflächen sind radialsymmetrisch um den Kugelmittelpunkt im Abstand der glühenden Punkte angeordnet.

Abb. 4.2.9: Kugelsymmetrische Eigenzustände in der Glaskugel (Fotos der Glühdrahtsonde):

Zustand n = 1: f_0 = 3.1 kHz
nur Knoten an Rand und Mittelpunkt



Zustand n = 3: f_2 = 9.9 kHz
2 weitere Kugelknotenflächen



4.2.4 Zusammenfassung: Beschreibung von Eigenzuständen

- Jedes schwingende Medium (Seil, Tamburin, Luft in Glaskugel) besitzt bestimmte Eigenfrequenzen f_n, bei denen sich stehende Wellen ausbilden. Ist die Bedingung für eine stehende Welle erfüllt, spricht man von einem Eigenzustand des Systems. "Zustand" ist hier ein physikalisch definierter Begriff.
- Jeder Eigenzustand wird entsprechend seiner Symmetrieeigenschaften durch eine, zwei oder drei Zustandszahlen bezeichnet. Er ist bereits durch seine Knotenbilder eindeutig charakterisiert.
- Weitere Zustandsinformation ist in der Amplitudenfunktion enthalten: Sie ist die Einhüllende der Wellenbewegung; sie ist zeitlich konstant (keine Bewegung!).
- Die vollständige Beschreibung eines Systems lässt sich durch Angabe von Zustandszahlen, Eigenfrequenzen und Amplitudenfunktionen (graphisch oder als mathematische Funktion) darstellen. Bei mehreren Dimensionen wird eine anschauliche graphische Darstellung natürlich schwieriger.

Tab. 4.2.1: Eigenschaften ein-, zwei- und dreidimensionaler stehender Wellen / Eigenzustände

Stehende Wellen	**Eindimensional**	**Zweidimensional**	**Dreidimensional**
Beispiel	Seilwellen	Tamburin	Schall in Glaskugel
Knotenart	Punkte	Linien	Flächen
Knotensysteme	Ein System	Zwei Systeme, z.B. Kreise und Geraden	Drei Systeme, z.B. Kugelflächen, Ebenen, Doppelkegel
Zustandszahlen	eine, z.B. n	zwei, z.B. n, m	drei, z.B. n, m, l

4.3 Abschnitt 3: ψ-Funktion und Schrödinger-Gleichung

4.3.1 Die Analogie stehende Welle - gebundenes Elektron

In Kap. 4.2.1 wurde der Begriff des diskreten Eigenzustands an einem klassischen System (schwingendes Seil) erläutert. Die Übertragung dieser Beschreibung von Eigenzuständen des Seils auf Atome liefert folgende Ergebnisse:

- Elektronen sind im Atom in stationären Eigenzuständen gebunden; diese lassen sich wie die Eigenzustände stehender Wellen mit Zustandszahlen durchnummerieren. In der Quantenphysik spricht man von Quantenzahlen.
- Jeder dieser Eigenzustände ist durch einen Eigenwert charakterisiert, bei stehenden Wellen durch die Frequenz f, beim gebundenen Elektron durch die Gesamtenergie E des Elektrons.
- Es gibt eine DGL zur Beschreibung von gebundenen Elektronen, die eine ähnliche Struktur besitzt, wie die DGL stehender Wellen: Die zweite Ableitung einer Amplitudenfunktion wird mit der Amplitudenfunktion selbst verknüpft. In der Quantenphysik wird diese Funktion mit dem Buchstaben ψ (Psi) bezeichnet, Die DGL heißt Schrödinger-Gleichung (SGL).
- Die ψ-Funktion ist ebenfalls räumlich und zeitlich konstant.

Einige sehr wichtige Unterschiede seien an dieser Stelle schon festgehalten:

- Die ψ-Funktion selbst ist nicht direkt beobachtbar oder messbar. Lediglich das reelle Betragsquadrat $|\psi|^2$ der i.a. komplexen Zustandsfunktionen kann mit Messergebnissen dargestellt werden.
- Die ψ-Funktion darf nicht als Einhüllende einer Bewegung im Atom interpretiert werden. Da lediglich $|\psi|^2$ beobachtbar ist, kann man stationären Zuständen in Atomen keine Schwingung oder Wellenbewegung zuordnen, auch wenn $\psi(r)$ häufig als Wellenfunktion bezeichnet wird! Die Zustandsfunktion $\psi(r)$ ist die Amplitudenfunktion einer zeitabhängigen Zustandsfunktion $\Psi(r,t)$. Die Zeitabhängigkeit ist jedoch komplex ($e^{-i\omega t}$). Bei der Berechnung von $|\Psi(r,t)|^2$ ergibt sich: $e^{-i\omega t} \cdot e^{+i\omega t} = 1$, d.h. $|\psi(r)|^2 = |\Psi(r,t)|^2$. Die Frage der Zeitabhängigkeit spielt also für die Interpretation von ψ und den Ausgang von Messungen keine Rolle. Da es keine Elektronenbewegung gibt, sind stationäre Zustände strahlungsfrei.
- Es gibt im Atom keinen materiellen "Rand", der die Randbedingungen für das Elektron bzw. die Amplitudenfunktion definiert. Das Elektron wird durch ein "Kraftfeld", das Coulomb-Potential, das im Unendlichen asymptotisch gegen Null strebt, "eingesperrt". Entsprechend kann man fordern, dass die ψ-Funktion eines stationären Zustands "irgendwann" asymptotisch gegen Null strebt.

- Atome sind dreidimensionale Gebilde, entsprechend hat Schrödinger eine dreidimensionale Gleichung formuliert. Im Folgenden wird eine eindimensional vereinfachte Gleichung eingeführt. Dadurch wird die Modellierung auf die radialsymmetrischen, sogenannten s-Zustände beschränkt.

Tab. 4.3.1: Die Analogie stehende Welle - gebundenes Elektron

EIGENZUSTAND n	
Stehende Seilwelle	**Stationäres Elektron**
Frequenz f_n	Energie E_n
Amplitude $y_n(x)$	Amplitude $\psi_n(r)$
Eindimensional: Knotenpunkte	Dreidimensional: Knotenflächen
Randbedingung: Knoten	Randbedingung: $\psi \Rightarrow 0$
Materieller Rand	Begrenzendes Potential (Kraftfeld)
Inhomogene Massenverteilung ms(x)	Radiusabhängiges Potential V(r)
$y_n''(x) \sim -f_n^2 \cdot m'(x) \cdot y_n(x)$	$\psi_n''(r) \sim -(E_n - V(r)) \cdot \psi_n(r)$
y_n : Einhüllende der Seilbewegung	ψ_n: Keine Bewegung im Zustand
y_n: Direkt beobachtbar	Nur $\lvert \psi_n \rvert^2$ interpretier- und messbar

Die Eigenzustände $\psi(r)$ der Gesamtenergie E sind, wie unter 4.1.2 dargestellt, keine Eigenzustände des Ortes, des Impulses oder der kinetischen Energie. Jede entsprechende Messung würde den Energieeigenzustand vernichten. (Lediglich eine Komponente des Drehimpulses und das Gesamtdrehimpulsquadrat können gleichzeitig mit der Gesamtenergie uneingeschränkt bestimmt werden.)

4.3.2 Die Entwicklung der Schrödinger-Gleichung

Im Folgenden wird die SGL mit den Schülern bekannten Formeln aus Mechanik, Wellenlehre und Quantenphysik entwickelt, wobei es sich eher um ein zielgerichtetes Probieren handelt, das - vergleichbar den ad-hoc-Postulaten des Bohrschen Atommodells - durch seinen Erfolg legitimiert ist.

Eine ähnliche Darstellung findet sich z.B. bei Kuhn (1990, 428). Grundsätzlich kann man die SGL auch wie Schrödinger aus Prinzipien der Hamiltonschen Mechanik als wellenmechanische Gleichung ableiten und sie dann quantenmechanisch reinterpretieren (s. z.B. Fick 1979, 54 ff und 92).

Abb. 4.3.1: Zur Entwicklung der SGL benutzte Beziehungen und Deutungen

- klassische Mechanik: $E_{kin} = 1/_2\, m \cdot v^2$; $p = m \cdot v$; $E = E_{kin} + E_{pot}$
- stehende Wellen: $y''(x) = -k^2 \cdot y(x)$ bzw. $y''(r) = -4\pi^2 \cdot \frac{1}{\lambda^2} \cdot y(r)$
- elektrisches Feld: $F_c(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o} \cdot \frac{q_1 . q_2}{r^2}$; $V(r) = \int F_c(r)dr$
- Quantenphysik: $\lambda = h / p$
- Quantenphysikalische Gleichungen wie $\lambda = h / p$ oder die SGL erkennt man an der Planckschen Konstante h. Die Konstante h verknüpft Größen des klassischen Teilchenbilds mit klassischen Wellengrößen. Gleichungen wie die SGL oder die de Broglie-Beziehung können als Übersetzungsgleichungen vom Teilchen- ins Wellenbild gedeutet werden.
- Das Potential V(r) wird als "Kraftfeld" um den Atomkern, das auf das Elektron wirkt, gedeutet. Es wird anstelle von E_{pot} im Energiesatz verwendet.

Ausgangspunkt ist die DGL stehender Seilwellen

$$y''(x) = -k^2 \cdot y(x) \qquad (4.2.3)$$

die sich auch umschreiben lässt als

$$y''(x) = -4\pi^2 \cdot \frac{1}{\lambda^2} \cdot y(x) \qquad (4.3.1)$$

Aufgrund der oben dargestellten Analogie wird für die ψ-Funktionen eine Gl. 4.2.6 ähnliche DGL erwartet. Gl. 4.3.1 ist eindimensional, das Atom ist aber dreidimensional. Die gesuchte SGL zur Berechnung der ψ-Funktionen gilt daher nur für radialsymmetrische Zustände, die allein Funktionen des Atomradius r sind.

Aus der Quantenphysik des freien Elektrons ist die de Broglie-Beziehung bekannt:

$$\lambda = h / p \qquad (4.3.2)$$

Durch Kombination von Gl. 4.3.2 mit Gl. 4.3.1 erhält man für freie Elektronen eine quantenphysikalische DGL, in der die Plancksche Konstante h auftaucht:

$$\psi''(r) = -4\pi^2 \cdot \frac{p^2}{h^2} \cdot \psi(r) \qquad (4.3.3)$$

Zu einer Gleichung mit der Energie als Parameter gelangt man, indem man die klassischen Beziehung

$$E_{kin} = 1/_2\, m \cdot v^2 = p^2/_{2m} \qquad (4.3.4)$$

nutzt. Man erhält die SGL für ein freies Elektron:

$$\psi''(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot E_{kin} \cdot \psi(r) \qquad (4.3.5)$$

E_{kin} entspricht in diesem Fall der Gesamtenergie des Elektrons.

Im Atom wird das Elektron zusätzlich durch das Coulomb-Potential V(r) des Kerns gebunden. Im klassischen Teilchenbild würde man von einer potentiellen Energie $E_{pot}(r)$ des Elektrons bzgl. des Atomkerns sprechen. In der Quantenphysik spricht man von einem Potential V(r), das als auf das Elektron wirkendes "Kraftfeld" gedeutet wird. Durch diese Deutung, die die Koordinate r nicht als Ort des Elektrons interpretiert, werden u.a. die starken partikelmechanischen Assoziationen des Begriffes potentielle Energie vermieden (vgl. Kap. 5.2). Trotzdem gilt der Energieerhaltungssatz für die Gesamtenergie E des Elektrons entsprechend in der Form

$$E = E_{kin} + V(r) \qquad (4.3.6)$$

Durch Einsetzen von Gl. 4.3.6 in Gl. 4.3.5 erhält man die gesuchte DGL,

die eindimensionale, stationäre SGL als Grundgleichung der Atomphysik

$$\psi''(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot (E - V(r)) \cdot \psi(r) \qquad (4.3.7)$$

Ist die Energie der Eigenwert E_n eines Eigenzustandes n, so beschreibt die SGL die Eigenfunktion ψ_n dieses Zustands. Die SGL lautet dann:

$$\psi_n''(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot (E_n - V(r)) \cdot \psi_n(r) \qquad (4.3.8)$$

Das radialsymmetrische Potential V(r) ist natürlich unabhängig vom Zustand n.

In der Atomphysik ist es zweckmäßig, den Nullpunkt des Potentials ins "Unendliche" zu legen: Das Potential V(r) entspricht z.B. für das H-Atom der Arbeit, die erforderlich ist, um eine Ladung -e aus dem "Unendlichen" auf den Radius r an die Ladung +e heranzuführen. Dabei wird die (positive) Energie frei, die

aufgewandt werden muss, um das Atom umgekehrt zu ionisieren. Die Bindungsenergie E des Elektrons trägt also ebenfalls ein negatives Vorzeichen.

V(r) errechnet sich aus der Coulomb-Kraft F_c zwischen Elektron und Proton zu:

$$V(r) = -\int_{\infty}^{r} F_C(r') \cdot dr' = -\int_{\infty}^{r} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{(-e)\cdot e}{r'^2} \cdot dr' = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \qquad (4.3.9)$$

Da gegen die positive r-Richtung integriert wird, steht vor dem Integral ein Minus.

Die eindimensionale, stationäre SGL des H-Atoms lautet:

$$\psi_n''(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot \left(E_n + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}\right) \cdot \psi_n(r) \qquad (4.3.10)$$

4.3.3 Die Diskussion der Schrödinger-Gleichung

Entsprechend den Amplitudenfunktionen stehender Seilwellen sind die radialsymmetrischen, nur von r abhängigen Lösungen der stationären SGL reelle Funktionen. (Bei nicht radialsymmetrischen Zuständen treten komplexe Winkelabhängigkeiten auf. Reelle Lösungen erhält man durch geeignete Superposition.)

Ein anschauliches mathematisches Verständnis der SGL gewinnt man über die Interpretation von ψ'' als Krümmung von ψ. Die zentrale Rolle spielt der Term (E - V(r)) (vgl. Abb. 4.3.3). Man erkennt aus Gl. 4.3.8:

- **E - V(r) > 0**
- Das 1/r- Verhalten eines Coulomb-Potentials V(r) ergibt wegen der Nullpunktsfestlegung im Unendlichen für kleine r sehr negative, d.h. sehr kleine Werte. Die Bindungsenergie E_n muss größer (weniger negativ) sein, dann ist die Differenz positiv. Krümmung ψ'' und ψ haben in diesem Bereich folglich entgegengesetztes Vorzeichen. Die Funktion krümmt sich zur r-Achse hin. Dadurch ergibt sich das "sinusartige" Verhalten von ψ in diesem Bereich.
- Für $\psi = 0$ ist die Krümmung 0. Da ψ beim Nulldurchgang das Vorzeichen wechselt, wechselt auch ψ'' das Vorzeichen. Die Knoten von ψ sind also Wendepunkte.
- In den Maxima von ψ ist die Krümmung (innerhalb eines Bauches) am größten.

- Mit wachsendem Energieeigenwert (höheren Zuständen) wächst - über den gesamten Verlauf betrachtet - die Krümmung, genauer gesagt die mittlere oder "globale" Krümmung von ψ. Die Knotenabstände werden - verglichen mit den entsprechenden Bereichen tieferer Zustände - kleiner. Die Zahl der Knoten wächst in höheren Zuständen.
- Mit wachsende Potential V(r), d.h. zunehmender Entfernung vom Kern nimmt (E - V(r)) und damit die "lokale" Krümmung einer jeden ψ-Funktion kontinuierlich ab. Die Knotenabstände innerhalb der Funktion werden größer, die Bäuche werden entsprechend unsymmetrisch. Der Einfluss von $\psi(r)$ auf die Krümmung verstärkt die Asymmetrie , bzgl. der Knotenabstände verschwindet dieser Einfluss im Mittel näherungsweise.

- **E - V(r) = 0**
- Die Krümmung von ψ ist 0. Da sie wegen des stetig wachsenden r hier das Vorzeichen wechselt, ist dieser Punkt ebenfalls Wendepunkt, und zwar der letzte Wendepunkt. Denn es folgt für

- **E - V(r) < 0**
- Krümmung ψ'' und ψ haben gleiches Vorzeichen. Die Funktion krümmt sich von der r-Achse weg. Das "sinusartige" Verhalten von ψ geht in ein exponentielles Verhalten über. Bei einem Eigenzustand muss sich die Funktion asymptotisch der r-Achse nähern.

Aus den aufgelisteten Überlegungen lässt sich der qualitative Verlauf der ψ-Funktion schon in wesentlichen Punkten konstruieren. Der Computer vollzieht bei der numerischen Lösung der SGL eine ähnliche Analyse. Die Arbeitsweise das Rechners kann auf diese Weise verständlich gemacht werden.

Die physikalische Bedeutung des Punktes E - V(r) = 0 wird in Kap. 4.4.5 geklärt.

Abb. 4.3.2: $\psi(r)$ konstruiert aus der SGL über die Krümmung

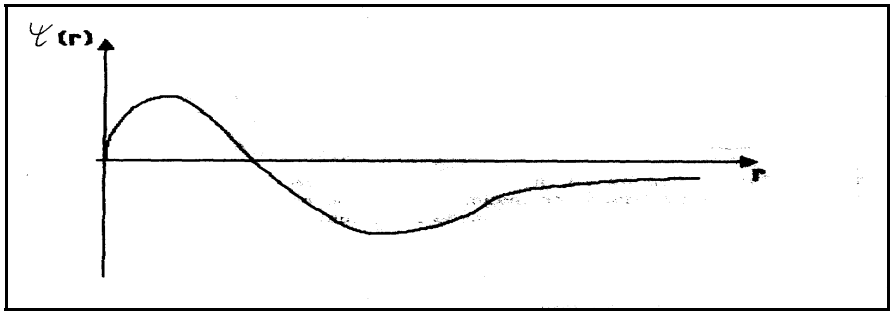
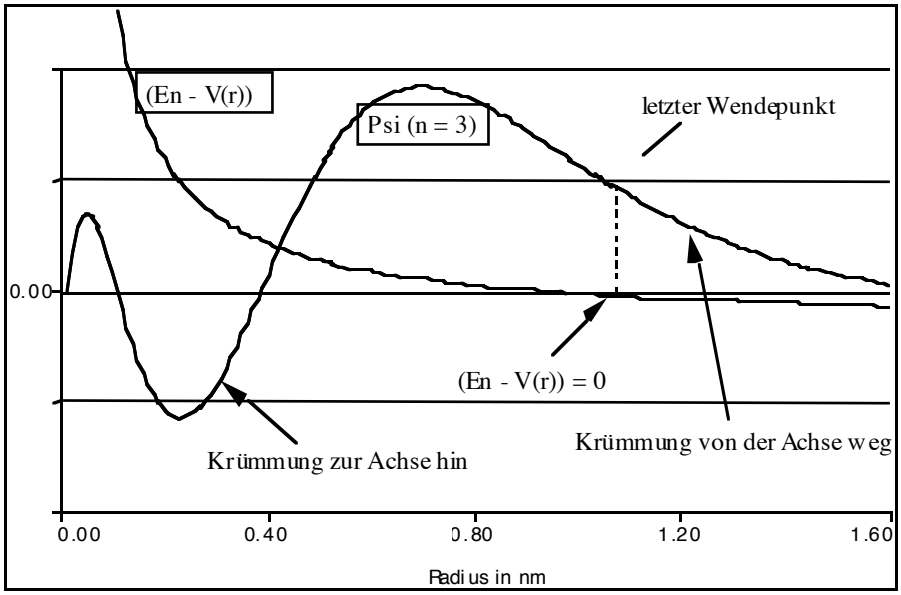


Abb. 4.3.3: Zum Einfluss der Krümmung auf den Verlauf der ψ-Funktion



4.3.4 Die Interpretation der ψ-Funktion

- **Interpretation I : Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte**

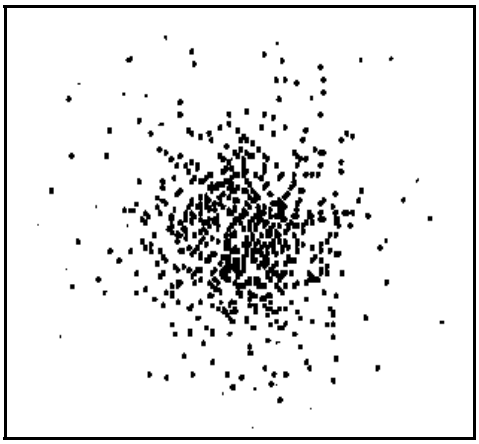
ψ(r) bezeichnet eine Verteilungsfunktion. Üblicherweise wird $|\psi|^2$ gemäß der Bornschen Deutung als Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung interpretiert, wobei i.d.R. auch im Atom von einer Aufenthalts- oder Antreffwahrscheinlichkeit des Elektrons gesprochen wird. Beide Begriffe sind jedoch irreführend, da sie suggerieren, dass sich das Elektron als verglichen mit dem Atomradius winziges "Kügelchen" im Atom befindet bzw. bewegt (vgl. Kap. 5.2). Man findet diese Begriffe auch in neuen Schulbüchern, die auf jede explizite Veranschaulichung von Elektronenbewegung durch "Punkte auf Bahnen" verzichten.

> "Das Quadrat der Zustandsfunktion gibt Auskunft über die **Antreffwahrscheinlichkeit** eines Elektrons in diesem kleinen Bereich. Werden die Beobachtungen oft wiederholt, so findet man, dass das Elektron am häufigsten in den Bereichen anzutreffen ist, die als Maxima der möglichen ψ^2 erscheinen. (...) Über den tatsächlichen Ort eines Elektrons zu einem bestimmten Zeitpunkt kann jedoch keine Aussage gemacht werden." (Bayer et. al. 1997, 221)

Nach 4.1.2 kann jedoch nicht behauptet werden, dass ein Elektron sich in einem stationären Energieeigenzustand etwa an einem Ort im Sinne der in Abb. 4.3.4a dargestellten Punkte befindet; auch dann nicht, wenn für ψ eine Darstellung als

Funktion des Ortes gewählt wird. Um das Elektron genauer zu lokalisieren, müsste man es z.B. mit einem Photon geeigneter Energie zur Wechselwirkung bringen, wodurch es in einen geänderten Zustand mit geringerer räumlicher Ausdehnung "gezwungen" würde. Verteilungen wie in Abb. 4.3.4a könnten lediglich aus den Ergebnissen vieler einzelner solcher Streuversuche an den Atomhüllen vieler Atome zur Überprüfung der theoretisch berechneten Kurven konstruiert werden.

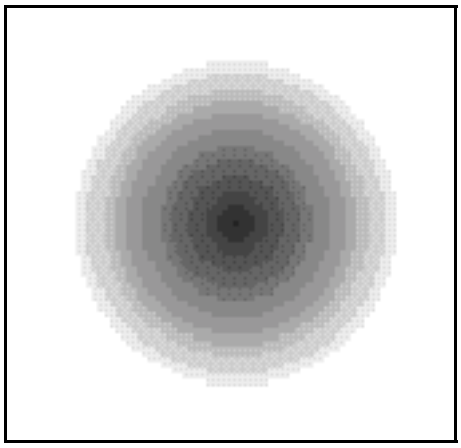
Abb. 4.3.4: Veranschaulichung von a) Lokalisationsahrscheinlichkeits- und b) Ladungsdichteverteilung des Elektrons im Grundzustand des H-Atoms



a)

Jeder Bildpunkt stellt eine Lokalisation des Elektrons dar. Messungen an vielen Atomen ergeben ein Bild, dessen Punktdichte proportional $|\psi|^2$ ist und die Wahrscheinlichkeit veranschaulicht, das Elektron im jeweiligen Volumenelement ΔV lokalisieren zu können.

Die Punktdichte nimmt nach außen exponentiell ab.



b)

Das Elektron nimmt den ganzen durch den Zustand n = 1 beschriebenen Raum ein. Die zweidimensionale Veranschaulichung zeigt die nach außen exponentiell abnehmende Ladungsdichte.

$e \cdot |\psi|^2 \cdot \Delta V$ gibt den Teil der Ladung des Elektrons im Volumen ΔV an. Dabei handelt es sich nur um eine Rechengröße. Bei Ladungsmessungen wird immer die gesamte Elementarladung gemessen.

Angemessener ist es $|\psi|^2$ als Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte zu bezeichnen: Der Begriff Lokalisation bringt den Bezug zum Messprozess deutlicher zum Ausdruck. $|\psi|^2\Delta V$ gibt dann die Wahrscheinlichkeit an, dass das Elektron - bei einer entsprechenden, das Atom i.d.R. zerstörenden Messung - in einen Zustand übergeht, bei dem es im Volumen ΔV lokalisiert ist. Man kann auch von einer Übergangswahrscheinlichkeitsdichte sprechen. In der Praxis ist es sehr schwierig mit Experimenten an einzelnen Atomen reproduzierbare Ergebnisse zu erhalten.

- **Interpretation II : Ladungsdichte**

Interessiert man sich primär für die ungestörten stationären Zustände in Atomen oder chemische Bindungen, ist eine Interpretation, in der das Elektron als gemäß seiner Zustandsfunktion kontinuierlich verteilt beschrieben wird, sinnvoller. In der Bremer Konzeption zur Atomphysik wird daher eine Interpretation von $e \cdot |\psi|^2$ als Ladungsdichteverteilung des Elektrons um den Atomkern bevorzugt.

Die kontinuierliche Verteilung der Elektronen gemäß $|\psi|^2$ in der Atomhülle ist ein auf entsprechende Anwendungsbereiche zugeschnittenes pragmatisches Rechen- und Veranschaulichungsmodell. Verglichen mit einem Planetenmodell und mit der Bornschen Deutung ist es für viele Belange von der Atomphysik bis zur Chemie zweckmäßiger und fruchtbarer. Elektronendichteverteilungen in Molekül- und Festkörperverbänden kann man auch experimentell gut ermitteln (s. Kap. 4.4.6).

Es wird hier nicht behauptet, Elektronen seien tatsächlich (keine kleinen Kügelchen, sondern) "verschmierte Ladungen" oder gemäß Schrödingers ursprünglicher Überzeugung laufende bzw. stehende Materiewellen. Vielmehr kann gerade in der Atom- und Quantenphysik deutlich werden, dass (anschauliche) Modelle immer bloß Analogien mit begrenztem Gültigkeitsbereich sind.

Eine kontinuierliche Ladungsdichteverteilung kann auch mit dem Begriff "Ladungswolke" veranschaulicht werden. Dieser Begriff ist insofern missverständlich, da man sich unter einer Ladungswolke ebenso wie unter einer Elektronenwolke auch einen der Bornschen Deutung gemäß Abb. 4.3.4a näher stehenden "Mückenschwarm von Elektronen" oder ein "Knäuel von Elektronenbahnen" vorstellen kann.

In Lehrbüchern der Chemie werden die genannten Begriffe und Modelle oft nicht in dem oben dargestellten Sinn voneinander abgegrenzt.

> "... Heisenberg erkannte aber 1927, daß es unmöglich ist, Bahnen der Elektronen anzugeben. Man kann nur den Raum bestimmen (...), in dem sich ein Elektron am häufigsten aufhält. Ein solcher Aufenthaltsraum läßt sich am besten mit einer "Wolke" verglichen, da er - wie eine wirkliche Wolke - nach außen nicht scharf abgegrenzt ist. Dort, wo sich das Elektron am häufigsten aufhält, ist ihre Dichte am größten. Man spricht darum sehr treffend von "**Elektronenwolken**" und meint damit den Raum, in dem sich ein bestimmtes Elektron bewegen kann." (Christen 1986, 42)

Für die Sek I gibt es vergleichbare Beispiele (mit entsprechenden Abbildungen) Man muss damit rechnen, dass Schüler der 13. Klasse ein ebenso unscharfes Spektrum von Vorstellungen und Begriffen in die Atomphysik mitbringen:

> "Obwohl Elektron und Atomkern sich also aufgrund ihrer gegensätzlichen Ladung anziehen, fällt das Elektron nicht auf den Kern. Es bewegt sich nämlich mit sehr hoher Geschwindigkeit im Raum um den Kern, der Elektronenhülle. Das Elektron kann überall in der Hülle angetroffen werden. Könnte man Momentaufnahmen des Atoms machen, befände sich das Elektron zu jedem Zeitpunkt an einer anderen Stelle. Je dichter die Punkte erscheinen, desto häufiger ist das Elektron in diesem Bereich zu finden. Die negative Ladung ist also über den gesamten Raumbereich verteilt. Man spricht von einer Elektronenwolke." (Bäuerle et. al. 1988, 117)

Die vorausgegangene Argumentation deckt sich weitgehend mit der von Herrmann & Laukemann (1994, 262 f). Auf die Einführung des von Herrmann & Laukemann aufgegriffenen Begriffs Elektronium wird hier aber verzichtet.

Zur Interpretation von $|\psi|^2$ bzw. $e \cdot |\psi|^2$ werden im Folgenden ausschließlich die Begriffe Lokalisationswahrscheinlichkeits- bzw. Ladungsdichteverteilung im oben beschriebenen Sinn konsequent verwendet. Die Verbindung der beiden diskutierten Interpretationen kann man z.B. mit folgendem Bild veranschaulichen: "Im stationären Zustand eines Atoms stelle ich mir das Elektron wie einen Luftballon vor. Steche ich in den Luftballon - lokalisiere ich das Elektron - so zieht er sich auf einen Punkt zusammen."

Bei Veranschaulichungen von $|\psi|^2$-Funktionen wie in Abb. 4.3.4 ist zu beachten, dass man sich auf räumliche Dichteverteilungen bezieht (s. Kap. 4.4.5).

Die räumliche Veranschaulichung der $|\psi|^2$-Funktionen erfolgt üblicherweise auch über den Orbitalbegriff. Radiale Dichteverteilungen suggerieren eine räumlich-anschauliche Schalenstruktur der Atomhülle. Sowohl das Orbital als auch die Schale sind begrifflich problematisch. Der Begriff Orbital ist es per se, da er vom Orbit, also der Umlaufbahn abgeleitet ist. Die Schalenstruktur der Atomhülle kann mit den Bohrschen Bahnen des H-Atoms verwechselt oder vermischt werden. Aus radialen Dichteverteilungen können falsche räumliche Vorstellungen entwickelt werden (vgl. Kap. 4.4.7 bzw. 5.2).

4.4 Abschnitt 4: Einelektronensysteme I

Die bereits am Beispiel des H-Atoms entwickelte eindimensionale, stationäre SGL

$$\psi_n''(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot \left(E_n + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}\right) \cdot \psi_n(r) \qquad (4.3.10)$$

kann mit Hilfe geeigneter Software modelliert und numerisch gelöst werden. Im Folgenden wird die von Vitor Duarte Teodoro in Lissabon entwickelte Software MODELLUS verwendet.

4.4.1 Maßeinheiten

Um Zeit und Aufwand beim Modellieren zu sparen ist es sinnvoll, die konstanten Faktoren in Gl. 4.3.10 in die in der Atomphysik gebräuchlichen Einheiten Elektronenvolt (eV) und Nanometer (nm) umzurechnen und explizit zu berechnen.

In SI-Einheiten haben die in Gl. 4.3.12 auftretenden Konstanten folgende Werte:

- Elektronenmasse: m = 9.109 e-31 kg
- Wirkungsquantum: h = 6.626 e-34 Js
- Elementarladung: e = 1.602 e-19 As
- Influenzkonstante: ε_o = 8.854 e-12 As $V^{-1}m^{-1}$

Für die Umrechnung in eV und nm gilt:

- 1 m = 1 e+09 nm
- 1 J = 6.241 e +18 eV bzw. 1 eV = 1.602 e-19 J

Für den Faktor $8\pi^2 m / h^2$ ergibt die Umrechnung von $J^{-1}m^{-2}$ in $eV^{-1}\,nm^{-2}$ gerundet den Wert 26.25 $eV^{-1}\,nm^{-2}$. Für $e^2 / 4\pi\varepsilon_o$ ergeben sich 1.44 eV nm. Die SGL lautet dann:

$$\boxed{\psi_n''(r) = -26.25\ eV^{-1}\,nm^{-2} \cdot \left(E_n + 1.44\ eV\ nm \cdot \frac{1}{r}\right) \cdot \psi_n(r) \qquad (4.4.1)}$$

Wie die folgenden Überlegungen zeigen, hat ψ selbst die Einheit $nm^{-1/2}$ bzw. $m^{-1/2}$:

4.4.2 Ein- und dreidimensionale ψ-Funktionen

Betrachtet man eine dreidimensionale SGL so ergeben sich ψ-Funktionen, die in sphärischen Koordinaten zusätzlich von den Winkeln θ und φ abhängen. Es gilt:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\ Y(\theta,\varphi) \qquad (4.4.2)$$

wobei $Y(\theta,\varphi)$ für die winkelabhängigen Anteile steht (s. z.B. Mayer-Kuckuk 1980, 59, ff). Zwischen dem Radialteil R(r) und den eindimensionalen Lösungen $\psi(r)$ besteht der Zusammenhang:

$$\psi\ (r) = r \cdot R(r) \qquad (4.4.3)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte P_V , das Elektron in einem Volumenelement $dr d\theta d\varphi$ zu lokalisieren gilt, wenn die Funktionen R und Y auf 1 normiert sind:

$$P_V\ dr d\theta d\varphi = |R(r)Y(\theta,\varphi)|^2\ dr d\theta d\varphi \qquad (4.4.4)$$

Für die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte P_r, das Elektron in einer Kugelschale der Dicke dr zu finden erhält man nach Integration über die Winkel:

$$P_r\ dr = |R(r)|^2\ r^2 dr \qquad (4.4.5)$$

Nach Gl. 4.4.3 gilt ebenfalls:

$$P_r\ dr = |\psi\ (r)|^2\ dr \qquad (4.4.6)$$

Aus diesen Überlegungen erkennt man:

- Die aus der eindimensionalen SGL und die aus der dreidimensionalen SGL berechneten radialen Dichtverteilungen P_r stimmen überein.
- Die räumlichen Verteilungsfunktionen R(r) ergeben sich aus den eindimensionalen Verteilungsfunktionen ψ (r) nach Division durch r.
- Eine räumliche Veranschaulichung von Atomen muss auf $|R(r)Y(\theta,\varphi)|^2$ basieren. Bei radialsymmetrischen Zuständen ist die Basis $|R(r)|^2$ bzw. $|\psi\ (r)|^2 / r^2$.
- Eindimensionale ψ-Funktionen haben die Einheit von $P_r^{1/2}$ also $nm^{-1/2}$ bzw. $m^{-1/2}$, die Funktionen $\psi(r,\theta,\varphi)$ haben die Dimension von $P_V^{1/2}$, also $nm^{-3/2}$ bzw. $m^{-3/2}$.

4.4.3 Die Software MODELLUS

MODELLUS ist eine Software, die mathematische Modelle mit einem numerischen Verfahren (Runge-Kutta 4) schrittweise berechnet. Unter der www-Adresse der Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, findet man u.a. folgende Informationen (Stand 07/2000):

1. Modellus enables students and teachers (high school and college) to use mathematics to create or explore models interactively.
2. Creating and exploring mathematical models is a fundamental task in many sciences. Modellus can help students experience minds-on learning while creating, simulating, and analyzing mathematical models interactively on the computer.
3. To set up a model, you just need to enter conventional mathematical equations and expressions (functions, differential equations and iterations). No programming language or special commands, either visual or written, are needed.
4. Constructing an animation of a the model is just as easy: choose objects, like images or vectors, and assign properties, like position or size. With an easy-to-use Windows user interface, graphs and tables are also just a mouse-click away.
5. Modellus can be used as an exploratory (the user explores models made by others) or as an authoring environment. Furthermore, models or any other window can be hidden and/ or protected.
6. Modellus comes with pre-constructed interactive exemples that illustrate many scientific concepts. There are also many others available on this website or from curriculum projects.

(...)

8. Modellus was created by Vitor Duarte Teodoro, with the colaboration of João Paulo Duque Vieira and Filipe Costa Clérigo. It was programmed by João Paulo Duque Vieira and Filipe Costa Clérigo.

Mittlerweile gibt es von MODELLUS die Version 2.0. Die Neuerungen sind für die Modellierung der SGL nicht wichtig, Version 1.0, die unter der Adresse, http://phoenix.sce.fct.unl.pt/modellus kostenlos heruntergeladen werden kann, reicht völlig aus. Die ohne Rechner mathematisch aufwendig zu bestimmenden ψ-Funktionen der eindimensionalen SGL können direkt graphisch dargestellt werden. Die Modellierung erfolgt in einer der üblichen Schreibweise ähnlichen Form. Die wichtigsten Einschränkungen sind:

- Es können nur DGLen erster Ordnung eingegeben werden. Höhere Ableitungen müssen in Zwischenschritten vorgenommen werden. Der Differentialquotient muss links stehen.
- Die Zeichen ' und " können nicht verwendet werden.
- Es können keine tiefgestellten Indizes eingegeben werden.
- Aus dem Griechischen steht nur das π zur Verfügung.
- Einheiten können nicht eingegeben werden.

Die Handhabung der Software ist relativ einfach, ein englischsprachiges Handbuch steht im Netz zur Verfügung. Einige ihrer Eigenschaften seien kurz aufgeführt:

- Das Fenster zur Eingabe der Modellgleichungen, das control-panel für die Berechnungen sowie das Eingabefenster für Parameterwerte und Startbedingungen öffnen sich beim Start automatisch.
- Bis zu je drei Fenster für Graphen und Tabellen erzeugt man über die Menüleiste. Fenster können verschoben und in ihrer Größe verändert werden.
- In Graphen und Tabellen kann man mehrere Parameter gleichzeitig darstellen. Die Skalenbereiche können manuell festgelegt oder mit "adjust " laufend oder abschließend optimal angepasst werden. Zusätzlich gibt es für die Graphen eine Lupenfunktion.
- Es können bis zu fünf Modellierungen mit verschiedenen Parametern gleichzeitig durchgeführt werden. Bei umfangreichen Modellen reduziert sich diese Zahl.
- Das control-panel ist wie bei einem Video- oder Casettenrecorder aufgebaut und zu handhaben.
- Der button "options" im control-panel öffnet das Eingabefenster für die laufende Variable, den Wertebereich der Berechnung und die Schrittweite des Iterationsverfahrens.
- Für Quadratwurzeln, Exponenten und e-Funktionen gibt es spezielle Buttons. Weitere verfügbare Funktionen und die Gestaltung von if-Bedingungen sind im Handbuch erläutert.
- Mit der Taste "/" wird ein waagrechter Bruchstrich erzeugt.
- Integrale werden in differentieller Form berechnet.
- Fehlende Rechenzeichen etc. reklamiert MODELLUS durch an entsprechender Stelle auftauchende Fragezeichen.
- Hat man das mathematische Modell komplett eingegeben, ist der Button "interpret" anzuklicken. Ist das Modell syntaktisch korrekt, trägt die Software automatisch die noch zu spezifizierenden Parameter und Startwerte ins Eingabefenster ein.
- Eine Fehlermeldung erhält man ggfls., wenn man die voreingestellte laufende Variable t nicht durch die im Modell enthaltene laufende Variable ersetzt hat.

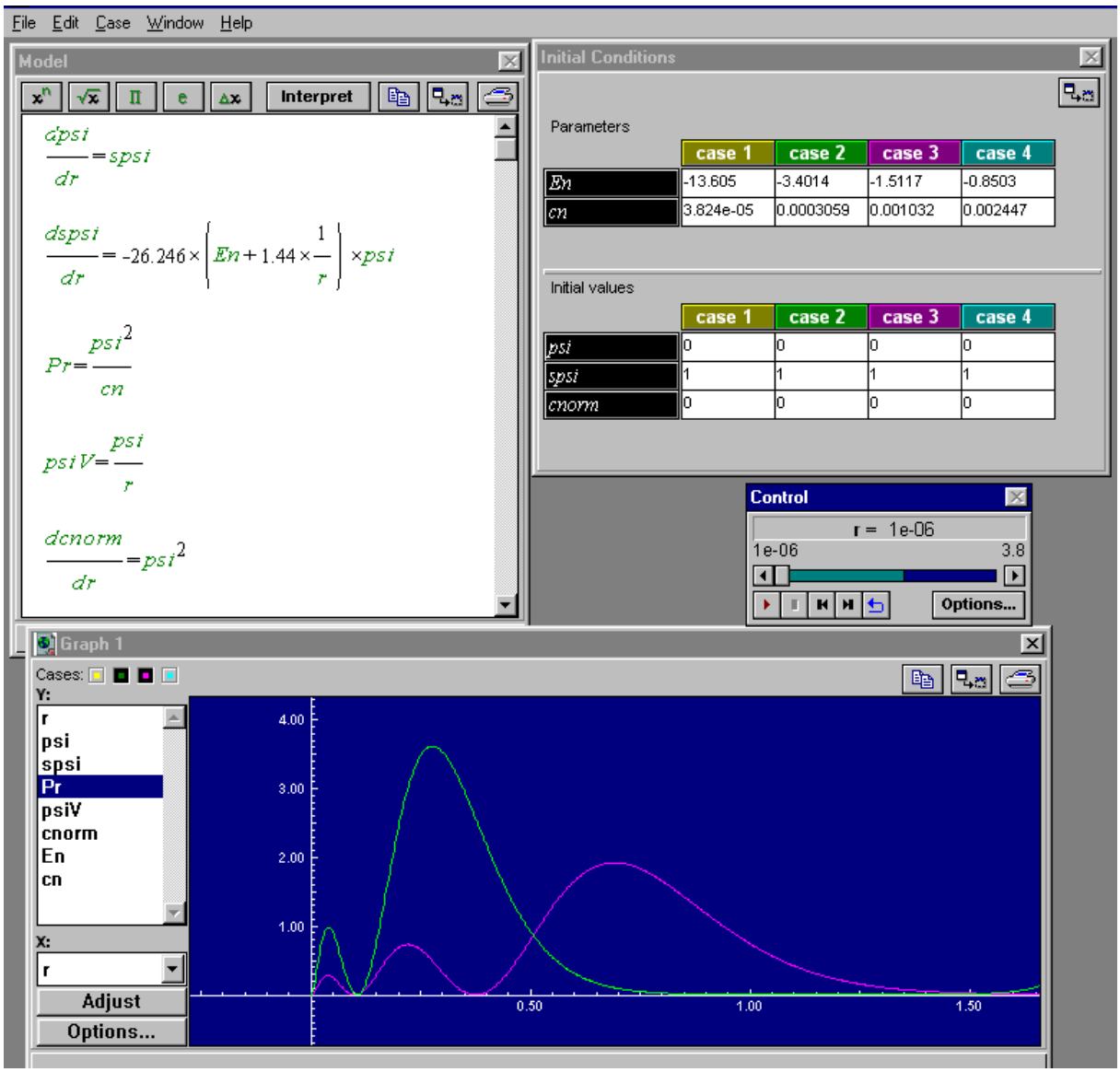
Hinsichtlich der SGL ist insbesondere zu beachten:

- Die laufende Variable t muss durch r ersetzt werden.
- Beim Coulomb-Potential darf keine Division durch 0 auftreten. Die Berechnung der Eigenfunktionen darf nicht bei r = 0 nm beginnen.
- Startwert der Berechnung, Modellierungsbereich, Schrittweite und Startbedingungen sind fallbezogen jeweils geeignet zu wählen.

4.4.4 Die Modellierung der SGL des H-Atoms mit MODELLUS

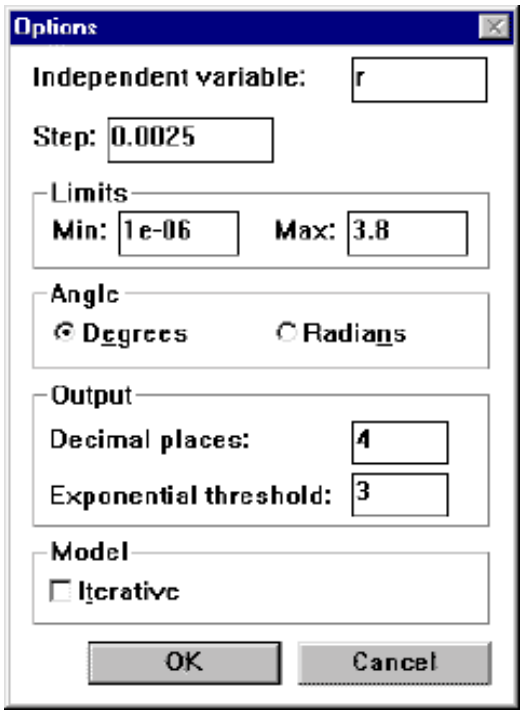
Abb. 4.4.1 veranschaulicht einige der genannten Eigenschaften von MODELLUS. Rechts in Mitte ist das control-panel abgebildet. Neben den Steuertasten und dem options-button werden auch der Stand der Iteration der laufenden Variable (hier r, zurückgesetzt auf den Startwert) und die Grenzwerte der Modellierung angezeigt.

Abb. 4.4.1: Modellierung der SGL für das H-Atom mit MODELLUS (mit Teilergebnissen)



Im Optionsfenster (Abb. 4.4.2a) sind zusätzlich u.a. die eingestellte Schrittweite, die in Tabellen ausgegebenen Dezimalstellen und die Zehnerpotenz, ab der zu einer Exponentialdarstellung übergegangen wird, zu erkennen.

Abb. 4.4.2 a: Optionsfenster



b: Modell des H-Atoms

$$\frac{dpsi}{dr} = spsi$$

$$\frac{dspsi}{dr} = -26.25 \times \left(En + 1.44 \times \frac{1}{r} \right) \times psi$$

$$Pr = \frac{psi^2}{cn}$$

$$psiV = \frac{psi}{r}$$

$$\frac{dcnorm}{dr} = psi^2$$

Abb. 4.4.2b zeigt "die Hauptsache", das mathematische Modell des H-Atoms:

- In den ersten beiden Zeilen ist die SGL in der Form von Gl. 4.4.1 wiederzuerkennen. Wegen oben genannter Softwareeigenschaften musste u.a. die erste Ableitung $\psi'(r)$ als Zwischenvariable spsi (Steigung psi) eingeführt werden.
- In der dritten Zeile wird die radiale Dichteverteilung P_r berechnet. Die zustandsabhängige Normierungskonstante c_n wird in der fünften Zeile als cnorm $= \int \psi^2 dr$ berechnet.
- In der vierten Zeile wird mit psiV die Funktion R(r), die für radialsymmetrische (winkelunabhängige) Zustände mit der entsprechenden dreidimensionalen ψ-Funktion übereinstimmt, nach Gl. 4.4.3 ermittelt. (Auf die Berechnung von R^2 wurde hier verzichtet.)

- **Randbedingungen und Auffinden der Eigenzustände**

Abb. 4.4.3 enthält bereits einen Teil Ergebnisse, nämlich die Energieeigenwerte En der ersten 4 s-Zustände des H-Atoms und die zum entsprechenden Zustand gehörenden Normierungskonstanten. Bevor erläutert wird, wie man diese Ergebnisse erhält, zunächst einige Anmerkungen zu den Anfangsbedingungen:

- psi = 0: Für das eindimensionale Problem muss man aufgrund des gegen -∞ strebenden Potentials und der gegebenen Radienverhältnisse von Kern und Hülle davon ausgehen, dass die radiale(!) Dichteverteilung und damit ψ in Kernnähe (1e-4 bis 1e-6 nm) einen Knoten haben.
- spsi =1: Als Anfangswert für die Steigung kann jeder Wert ≠ 0 gewählt werden, da spsi nur den Maßstab der ψ-Achse und damit die Normierungskonstante beeinflusst, nicht aber die Gestalt der ψ-Funktionen, die Radien oder die Eigenwerte.
- cnorm = 0: Wenn ψ bei 0 startet, gilt dies auch für die Normierungskonstante.

Abb. 4.4.3: Energieeigenwerte, Normierungskonstanten und Anfangsbedingungen

Initial Conditions

Parameters

	case 1	case 2	case 3	case 4
En	-13.605	-3.4014	-1.5117	-0.8503
cn	3.824e-05	0.0003059	0.001032	0.002447

Initial values

	case 1	case 2	case 3	case 4
psi	0	0	0	0
spsi	1	1	1	1
cnorm	0	0	0	0

Die Energieeigenwerte, die zugehörigen Zustandsfunktionen sowie die Normierungskonstanten hat man gefunden, wenn die zweite Randbedingung erfüllt ist, d.h. sich die ψ-Funktion ab einem bestimmten Radius asymptotisch der r-Achse nähert. Dazu muss die Energie systematisch variiert werden. Wegen der begrenzten

Genauigkeit des numerischen Verfahrens bleibt das Anschmiegverhalten der ψ-Funktionen aber auf einen bestimmten Radiusbereich begrenzt.

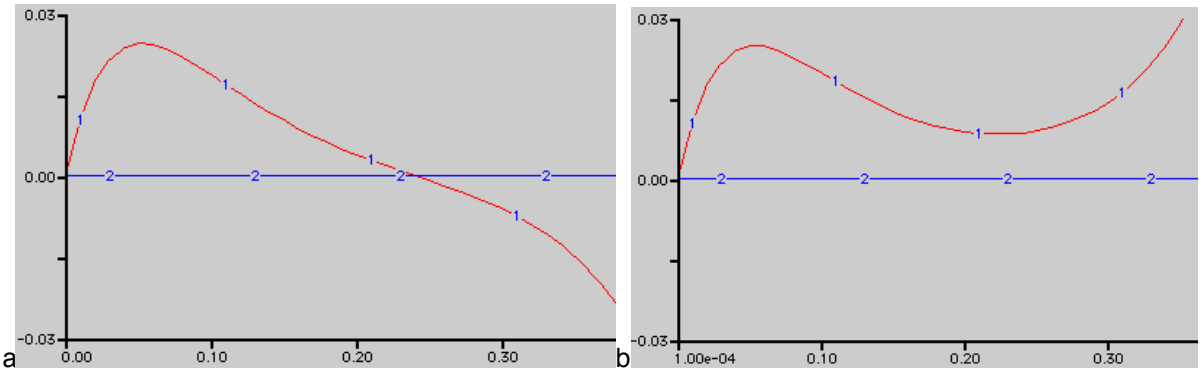
- Energieeigenwerte E_n

Zunächst muss man natürlich die Größenordnung der Energieeigenwerte des H-Atoms sowie seinen Radius ungefähr kennen. Sucht man den Grundzustand des H-Atoms, eine Funktion ohne Knoten (abgesehen von den Randbedingungen), zwischen -13 eV und - 14 eV und im Bereich unter 1 nm, erhält man beim ersten Versuch prinzipiell eines der in Abb. 4.4.4 dargestellten Resultate.

In Abb. 4.4.4a wurde ein zu hoher Energiewert E eingegeben, z.B. -13.4 eV. Die "globale (mittlere) Krümmung" der Funktion, die mit wachsendem E wächst (s. Kap. 4.3.3), ist zu groß, der Funktionsgraph schneidet die r-Achse und krümmt sich von ihr weg. In Abb. 4.4.4b wurde ein zu kleiner Wert eingegeben, z.B. -13.8 eV. Die "globale Krümmung" ist zu klein, der Funktionsgraph krümmt sich ebenfalls von der r-Achse weg, er erreicht sie in diesem Fall nicht.

Abb. 4.4.4: Auf der Suche nach dem Grundzustands des H-Atoms (ältere STELLA-Diagramme).

a: zu hohe Energie (zu hohe Krümmung) b: zu geringe Energie (zu geringe Krümmung)



Der über die SGL eindeutig festgelegte Zusammenhang zwischen Energie und "globaler Krümmung" (je größer - weniger negativ - E ist, desto größer die Krümmung) zeigt sich bei "falschen" Energiewerten anschaulich sehr deutlich. Damit steht eine einfache Suchstrategie für die Eigenzustände zur Verfügung.

Abb. 4.4.4b verdeutlicht auch, dass es unterhalb von -13.8 eV keinen Eigenzustand mehr geben kann. Der Funktionsgraph würde sich immer schneller von der r-Achse entfernen. Oberhalb von -13.4 eV ist hingegen damit zu rechnen, dass sich der Funktionsgraph mit weiter zunehmender Krümmung wieder zur r-Achse hinwendet. Weitere, höhere Energieeigenwerte können dort gefunden werden.

- Zustandsfunktionen ψ_n

Wenn man den Eigenwert E_n gefunden hat, hat man gleichzeitig auch die entsprechende Zustandsfunktion gefunden und umgekehrt.

- Normierungskonstante c_n

Die Werte für c_n entnimmt man einer zu cnorm erzeugten Tabelle: In dem Moment, bzw. bei dem Radius r, an dem ψ die r-Achse gerade tangiert, erreicht die Tabelle zu cnorm den Wert c_n (Auf eine Abbildung der Tabellen wird verzichtet).

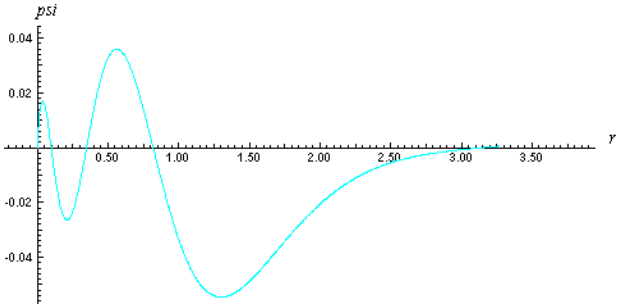
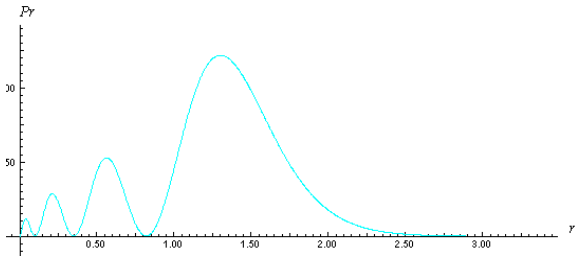
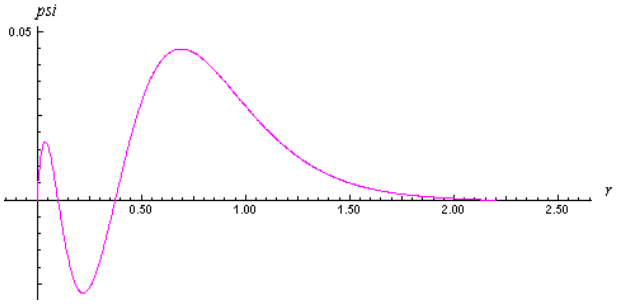
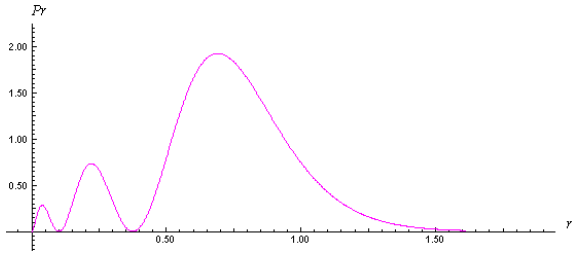
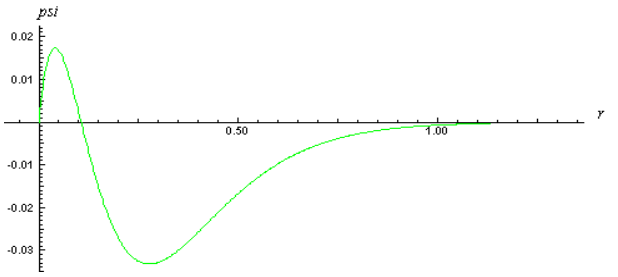
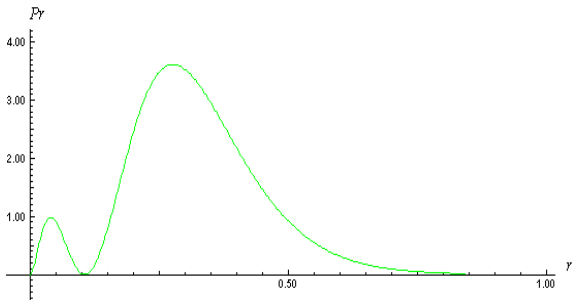
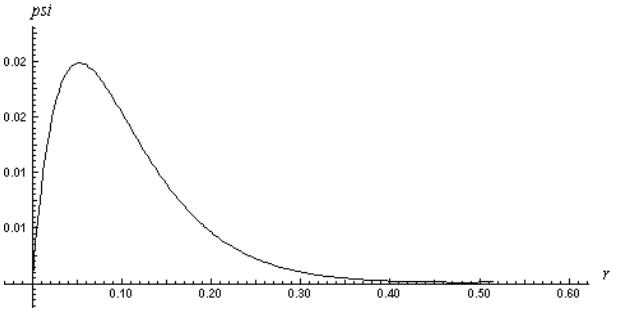
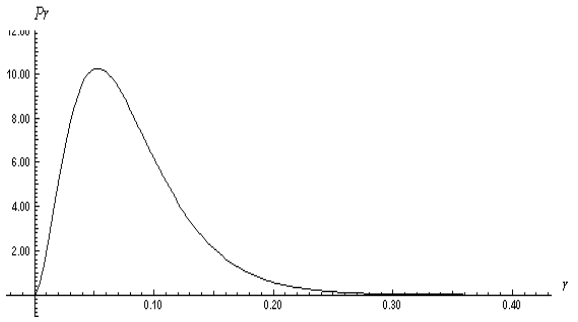
Der genaue Energieeigenwert ist von Starwert und Schrittweite des numerischen Rechenverfahrens abhängig. Der in Abb. 4.4.2a gewählte Startwert von 1e-06nm liegt an der unteren Grenze. Ein Startwert von 1e-04 nm ist ausreichend. Rückt man mit dem Startwert näher an Null (in den Atomkern) können es wegen sehr großen Änderungsraten des Potentials Probleme auftreten. Eine kleinere Schrittweite führt prinzipiell zu genaueren Ergebnisse. Eine zu kleine Schrittweite ist physikalisch nicht sinnvoll, vor allem aber unökonomisch, da der Gewinn an Genauigkeit auch in keinem Verhältnis zum Zeitbedarf steht. Je nach betrachteten Radiusbereich wird man Schrittweiten zwischen 1e-o4 und 1e-02 nm ausprobieren.

Die in Abb. 4.4.3 zu findenden, auf bis zu vier Stellen hinter dem Komma angegebenen Energieeigenwerte erzeugen das bestgenäherte asymptotische Verhalten, sie sind in dieser Genauigkeit aber nicht mehr physikalisch sinnvoll. (In MODELLUS 1.0 lassen sich maximal insgesamt fünf Ziffern eingeben, mit MODELLUS 2.0 kann noch genauer gerechnet werden.)

- **Überblick über die ersten vier Eigenzustände des H-Atoms**

Abb. 4.4.5 zeigt die ersten 4 mit MODELLUS berechneten eindimensionalen Zustandsfunktionen (s-Zustände) des H-Atoms und ihre radialen Dichteverteilungen. (Die Zustände n = 5 und n = 6 liegen bei - 0.55 eV bzw. -0.38 eV.)

Abb. 4.4.5: Die s-Zustände n = 1 bis n = 4 des H-Atoms (eindimensionale SGL)

Zustandsfunktionen $\psi(r)$	**radiale Dichteverteilungen $P_r(r)$**
n = 4 E_n = - 0.85 eV 	n = 4 E_n = - 0.85 eV 
n = 3 E_n = - 1.5 eV 	n = 3 E_n = - 1.5 eV 
n = 2 E_n = - 3.4 eV 	n =2 E_n = - 3.4 eV 
n = 1 E_n = - 13.6 eV 	n =1 E_n = - 13.6 eV 

4.4.5 Auswerung der Ergebnisse

- **Die Stabilität des Atoms**

Im Bohrschen Atommodell gibt es keine theoretische Begründung für diskrete Bindungsenergien. Aus experimentellen Beobachtungen musste Bohr die Energiequantelung als eine Bedingung für gebundene Elektronen postulieren. Die SGL beinhaltet demgegenüber diese Bedingung bereits in sich: Bei der Eigenwertsuche gibt es zwischen zwei nebeneinander liegenden Zuständen keinen weiteren, der die Randbedingung einer gegen Null strebenden Verteilungsfunktion erfüllt. Alle Funktionen, die etwa zwischen dem 1s- und 2s-Zustand liegen, laufen mit zunehmendem Abstand r gegen Unendlich. Sie können keine stationäre Lösung der SGL darstellen, da das Elektron mit größter Wahrscheinlichkeit unendlich weit vom Kern entfernt lokalisiert werden könnte. Ebenso erklärt sich auch das Vorhandensein eines niedrigsten Zustands, des Grundzustands. Alle ψ-Funktionen mit einer Energie unterhalb von -13.6 eV streben, noch bevor sie die r-Achse erreichen, gegen Unendlich, sie beschreiben kein gebundenes Elektron.

Der Grundzustand stellt die Verteilungsfunktion niedrigster Energie dar. Ein Atom in einem höheren Zustand strebt den Zustand niedrigster Bindungsenergie an und geht spontan in den Grundzustand über. Dabei strahlt es die "überschüssige" Energie als Photon ab. Ohne äußere Anregung bleibt das Atom im Grundzustand. Die Stabilität der Atome kann also durch ihre Bindungsenergie erklärt werden. Die Lebensdauer der angeregten Zustände liegt im Bereich von 10^{-08} s.

- **Lokalisationsenergie**

Die anziehende Wirkung des Potentials auf das Elektron legt die Vermutung nahe, dass sich das Elektron beliebig nahe um den Atomkern verteilt, um ein möglichst niedriges Energieniveau zu erreichen. Es gibt aber "etwas", das diesem Bestreben entgegenwirkt: In der SGL des H-Atoms erkennt man, dass der Term E-V, der - klassisch ausgedrückt - die kinetische Energie des Elektrons bezeichnet, bei einer gegebenen Gesamtenergie E in Kernnähe, d.h. für sehr kleines V(r) stark ansteigt (s. Kap. 4.3.3). Je enger man das Elektron am Kern "einsperrt" desto höher wird

seine sogenannte Lokalisationsenergie. Der Grund für die mit genauerer Lokalisation steigende Lokalisationsenergie findet sich in der HU: Eine geringere Ortsunschärfe des Elektrons bedingt eine größere Impulsunschärfe und damit eine entsprechend höhere mittlere kinetische Energie bzw. Lokalisationsenergie. Auf welchen Bereich ein Elektron im Grundzustand eines Atoms lokalisiert ist, wird damit zu der Extremwertaufgabe, bei gegebenen Potential den Radius minimaler Gesamtenergie zu berechnen. Beim H-Atom ergibt sich als Lösung der Grundzustand bei - 13.6 eV.

Erst die Potentiale höherer Atome mit mehreren Protonen führen auf Zustände mit tiefer liegenden Grundzuständen, räumlich enger begrenzten Verteilungsfunktionen und entsprechend höheren Lokalisationsenergien. Um das Elektron enger an den Kern zu binden, bedarf es sozusagen eines "stärkeren Kraftfelds", gebildet von mehreren Protonen.

Mit MODELLUS lassen sich die Eigenzustände der entsprechenden Ionen etwa von Helium oder Lithium genau wie beim H-Atom bestimmen; man berücksichtigt im Potential lediglich die mehrfache Kernladung. Dabei zeigt sich z.B., dass das um den Faktor zwei gegenüber dem H-Atom veränderte Potential für das He^+-Ion auf eine vierfach tiefere Energie des Grundzustands führt.

- **Spektrallinien**

Im sichtbaren Bereich findet man für das H-Atom vier Linien, drei starke (rot, türkis und blau) und eine mit geringer Intensität (violett), die sich nur unter idealen Bedingungen beobachten lässt.

Tab. 4.4.1: Sichtbares Spektrum des H-Atoms

Farbe	Wellenlänge l	Frequenz f	Photonenenergie h·f
rot	656 nm	457 GHz	1,89 eV
türkis	486 nm	617 GHz	2,55 eV
blau	434 nm	691 GHz	2,86 eV
violett	410 nm	731 GHz	3,02 eV

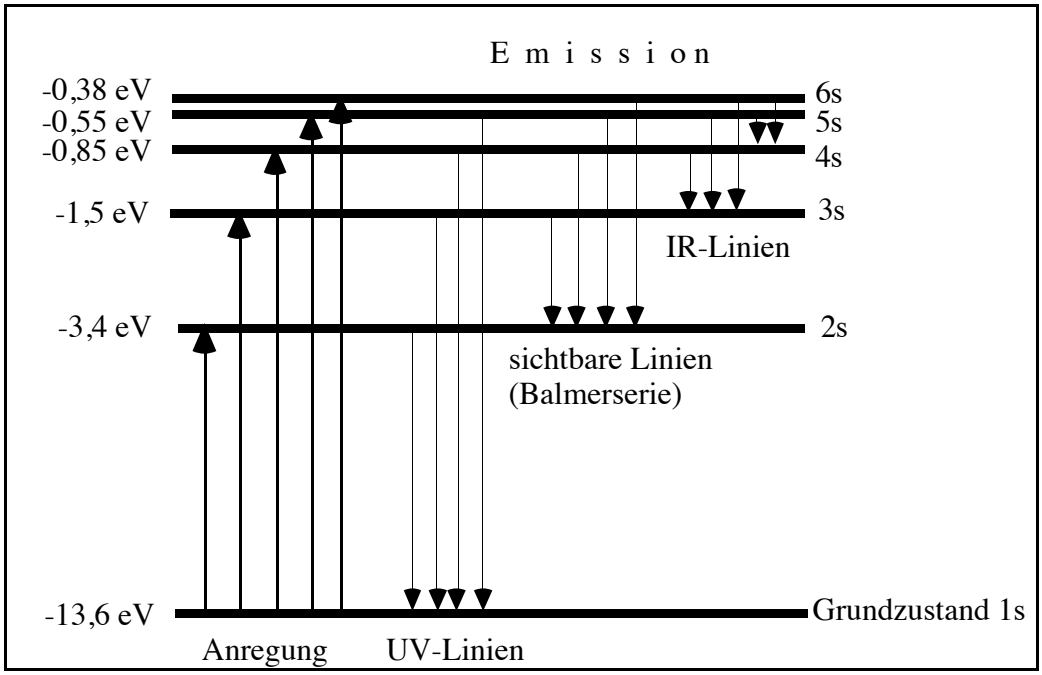
Die Energieniveaus des Wasserstoffs E_n haben folgende Werte:

E_1 = -13,6 eV E_2 = - 3,4 eV E_3 = -1,5 eV
E_4 = - 0,85 eV E_5 = - 0,55 eV E_6 = - 0,38 eV

Darüber gibt es weitere, relativ dicht zusammenliegende Niveaus. Beim Übergang von einem "angeregten" Zustand mit höherer Energie E_n zu einem Zustand mit niedrigerer Energie E_m entsteht nach der Einstein-Relation ein Photon der Energie

$$h \cdot f_{nm} = E_n - E_m = E_{nm} \qquad (n > m) \qquad (4.4.7)$$

Abb. 4.4.6: Anregung des H-Atoms und emittierte Linien



Das Atom muss bei der Emission nicht in den Grundzustand übergehen. Allerdings gibt es bestimmte sogenannte Auswahlregeln für die möglichen Zustandsübergänge. Übergänge zwischen s-Zuständen sind danach verboten. Insofern ist Abb. 4.4.6 nicht korrekt. Übergänge etwa zu nicht radialsymmetrischen p-Zuständen sind hingegen erlaubt. Beim H-Atom liegen die entsprechenden s- und p- Zustände jedoch auf dem gleichen Energieniveau - man spricht von einer Entartung des Energieniveaus. Für das Spektrum des H-Atoms (und nur des H-Atoms) ist die Vernachlässigung von Auswahlregeln daher irrelevant.

Bei einer Energiedifferenz von 1.5 eV bis 3.1 eV liegt die Wellenlänge der emittierten Photonen im sichtbaren Bereich zwischen ca. 800 nm und 400 nm. Übergänge auf den 2s-Zustand erfüllen diese Bedingung. So wird z.B. die rote Linie im H-Spektrum beim Übergang von 3s nach 2s erzeugt. Die Energiedifferenz beträgt $E_{3,2}$ = 1,89 eV, was einer Wellenlänge von λ = 656nm entspricht. Die Übergänge auf das Niveau 2 bilden für den Fall m = 2 die durch die Gleichung

$$E_{n,m} = h\, f_{Ry}\,(1/\,m^2 - 1/\,n^2) \qquad (n > m) \qquad (4.4.8)$$

beschriebene Balmer-Serie, mit der Rydberg-Frequenz f_{Ry} und $h \cdot f_{Ry}$ = 13.6 eV.

Aus den ermittelten Energieeigenwerten kann man nachprüfen, dass sich die einzelnen Niveaus entsprechend aus der Formel

$$E_n = -13.6\ \text{eV}\,(1/\,n^2) \qquad (4.4.9)$$

errechnen lassen, die Energie des Zustands n sich also um den Faktor $1/n^2$ vom Energieniveau des Grundzustands unterscheidet.

Die Mehrzahl der Übergänge im H-Atom liegt im UV- und IR-Bereich. Sie gehören zu entsprechenden Serien, z.B. der Lyman-Serie mit m = 1 (UV)

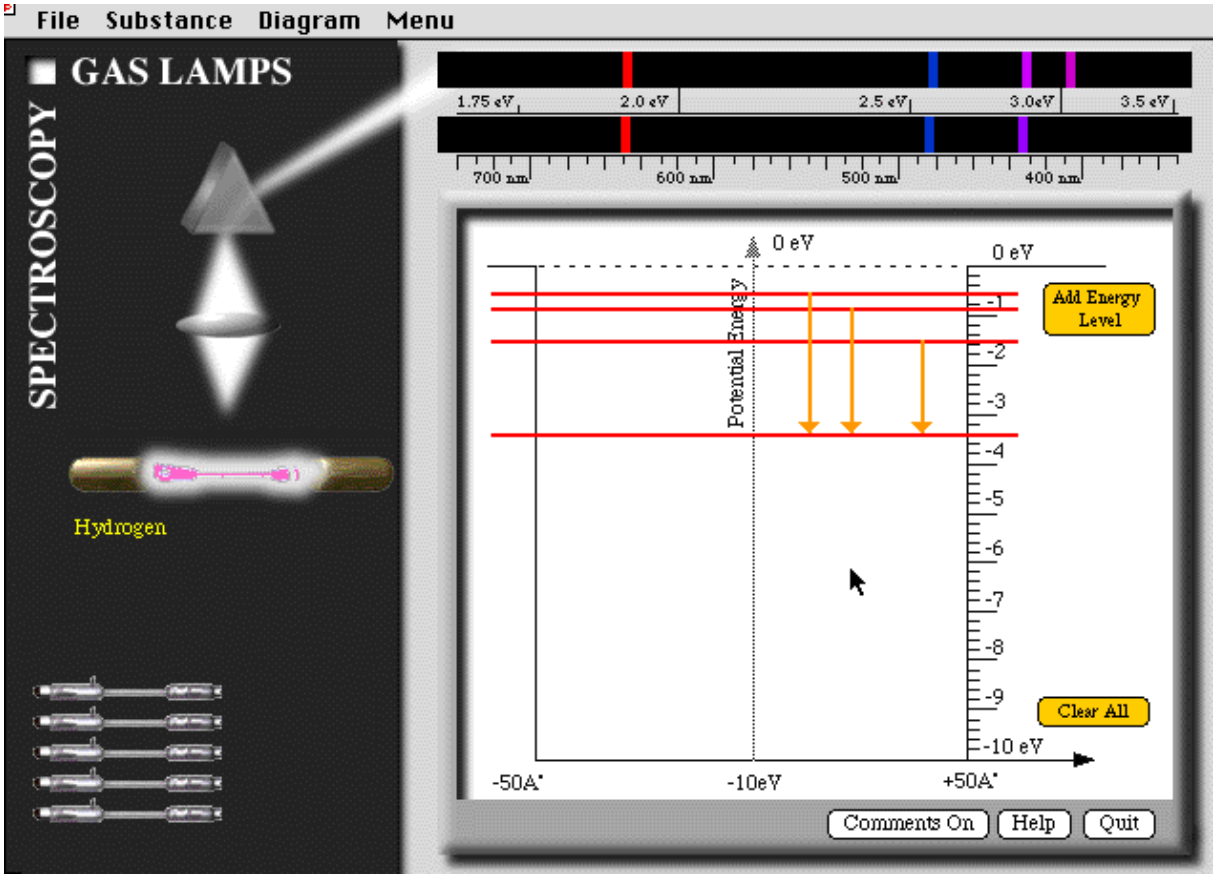
Tab. 4.4.2: Übergänge und Spektrallinien des H-Atoms

Infrarot	**Sichtbar**	**UV**
(6s - 5s) 7400 nm	(3s - 2s) 656 nm	(2s - 1s) 122 nm
(5s - 4s) 4050 nm	(4s - 2s) 486 nm	(3s - 1s) 103 nm
(6s - 4s) 2695 nm	(5s - 2s) 434 nm	(4s - 1s) 97 nm
(4s - 3s) 1875 nm	(6s - 2s) 410 nm	(5s - 1s) 95 nm
(5s - 3s) 1282 nm		(6s - 1s) 94 nm
(6s - 3s) 1094 nm		

Mit der Simulationssoftware SPECTROSCOPY aus dem Programm VISUAL QUANTUM MECHANICS (VQM) lassen sich u.a. die zu den sichtbaren Linien mehrerer Elemente gehörenden Energiedifferenzen auffinden und den Energieniveaus der jeweilige Elemente zuordnen, sofern man die Energieniveaus selbst kennt: In Abb. 4.4.7 befindet sich eine Wasserstoff-Lampe im Labor. Das Spektrum rechts oben zeigt die sichtbaren Linien. Das darunter liegende Spektrum mit

Wellenlängen- und Energieskala gibt die mit der Maus über "drag and drop" konstruierten Energiezustandsübergänge wieder. Mit Hilfe der z.B. aus der Modellierung mit MODELLUS bekannten Energieeigenwerte konnten bereits drei Spektrallinien rekonstruiert werden.

Abb. 4.4.7: Die Wasserstoff-Lampe in der Simulationssoftware SPECTROSCOPY aus VQM



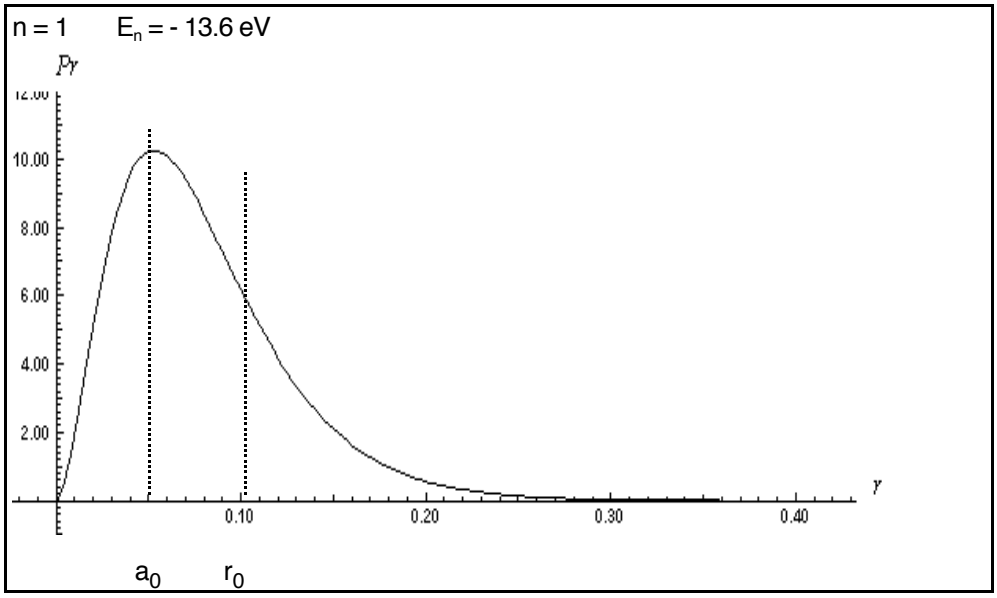
- **Atomradius und klassisch verbotener Bereich**

Ein eindeutiger Atomradius lässt sich wegen des asymptotischen Verhaltens der ψ-Funktion nicht angeben. Die Verteilungsfunktion kommt nach außen hin beliebig nahe an Null, verschwindet jedoch prinzipiell nicht vollständig.

In Abb. 4.4.8 ist an der $\psi^2(r)$-Funktion des Grundzustands der entsprechende Bohrsche Atomradius a_0 = 0.053 nm (Umlaufbahn des Elektrons) markiert. Man erkennt, dass er mit dem Maximum der Verteilungsfunktion zusammenfällt, die

Bohrsche Bahn entspricht dem Radius größter Lokalisationswahrscheinlichkeits- bzw. Ladungsdichte.

Abb. 4.4.8: Radiale Dichteverteilung, Bohrscher Radius a_0 und Wendepunkt r_0 der ψ-Funktion



Ein erheblicher Teil der Ladungsverteilung befindet sich innerhalb dieses Radius, der größte Teil jedoch außerhalb. Der Bohrsche Radius wird heute noch gelegentlich als atomare Längeneinheit und zur Definition des Atomradius verwendet. Da sich nach der Ladungsdichteinterpretation der größte Teil des Elektrons außerhalb a_o befindet, müssen auch andere Definitionen in Betracht gezogen werden. Der Radius eines Atoms kann als Bereich, innerhalb dessen man eine bestimmte Prozentzahl der Gesamtladung findet, definiert werden, z.B. 68 % oder 90 %. Bei Werten um 95 % käme man in Bereiche des dreifachen Bohrschen Radius. Experimentell hängt der gemessene Atomradius von der jeweiligen Messmethode ab. Einige der gängigsten und unten in Tab. 4.4.3 verwendeten Radiusdefinitionen über experimentelle Verfahren werden in Kap. 4.4.6 skizziert.

Aus theoretischer Sicht bietet sich zur Definition des Radius des H-Atoms auch der letzte Wendepunkt der ψ-Funktion an, der durch den Radius r_o mit $E_n - V(r_o) = 0$ gegeben ist (vgl. Kap. 4.3.3). Dieser Radius berechnet sich zu:

$$r_o = 1.44 \text{ eV nm} / 13.6 \text{ eV} = 0.106 \text{ nm} \qquad (4.4.10)$$

und beträgt gerade 2 a_o. Damit hätte man nach Abb. 4.4.8 auf jeden Fall den größten Teil des Elektrons ins Innere des Atoms definiert.

Physikalisch markiert der Punkt r_o den sogenannten klassisch verbotenen Bereich. Für $r > r_o$ wird E - V(r) nämlich negativ, was klassisch eine negative kinetische Energie bedeuten würde. Ein klassisches Elektron könnte nie in diesem Bereich lokalisiert werden. Quantenmechanisch ergibt sich gemäß Abb. 4.4.8 noch eine nicht zu vernachlässigende Lokalisationswahrscheinlichkeits- bzw. Ladungsdichte. Das Elektron dringt sozusagen ein Stück weit in den Coulomb-Potentialwall ein. Klassisch bzw. mit einer Veranschaulichung des Elektrons als auf Bahnen umherfliegendes Kügelchen ist dieser typische Quanteneffekt nicht zu verstehen. (Bei entsprechend schmalen Potentialbarrieren tritt der Tunneleffekt auf)

Tab. 4.4.3: Atom- und Ionenradien: Experimentelle (oben) und modellierte Werte (unten)

Element	Kovalenter Bindungsradius	aus gaskinetischer Theorie	in Kristallgitter	aus Wirkungs-querschnitt
H	0.032 nm	0.126 nm		
He		0.110 nm		0. 224 nm
Li	0.152 nm		0.151 nm	
Li^+			0.068 nm	

Element	Bohrscher Radius	Maximum der $\psi(r)$-Funktion	Letzter Wende-punkt der $\psi(r)$-Funktion	68% der Gesamt-ladung	90% der Gesamt-ladung
H	0.053 nm	0.053 nm	0.106 nm	0.093 nm	0.142 nm
He	--	0.025 nm	--	0.045 nm	0.070 nm
Li	--	0.150 nm	--	0.220 nm	0.300 nm
Li^+	--	0.020 nm	--	0.030 nm	0.050 nm

- **Die räumliche Struktur des H-Atoms**

Für eine adäquate räumliche Veranschaulichung des H-Atoms werden Quer-schnitte durch eine kontiuierliche (Ladungs)dichteverteilung betrachtet. Diese Querschnitte müssen auf Basis der Radialteile R(r) der Lösungen der dreidimensionalen SGL konstruiert werden. Nach Gl. 4.4.3 hängen die Funktionen

R(r) mit den eindimensionalen ψ-Funktionen über $R(r) = \psi(r) / r$ zusammen. Dadurch ergeben sich gegenüber radialen Betrachtungen signifikante Unterschiede: Die Verteilungsfunktion R(r) hat für r = 0 ein endliches Maximum und fällt dann exponentiell ab. Die räumlichen Dichteverteilungen $R^2(r)$ sind demnach ebenfalls am Kern maximal. Bei dreidimensionalen Veranschaulichungen kontinuierlicher Dichteverteilungen (Ladungsdichte) wird dies durch die dunkelste Färbung ausgedrückt, in Darstellungen der Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte hätte man die höchste Punktdichte. Die Dichte der Atomhülle nimmt also im Grundzustand (ebenso wie die Dichte der Erdatmosphäre) mit zunehmender Entfernung vom Zentrum des anziehenden Potentials kontinuierlich ab. Dies liegt daran, dass sich das Elektron mit zunehmender Entfernung r vom Kern auf ein mit r^3 wachsendes Volumen verteilt. Oder andersherum: Dass $R^2(r)$ am Kern ein Maximum hat liegt daran, dass das Elektron dort auf ein relativ winzigen Raumbereich konzentriert ist.

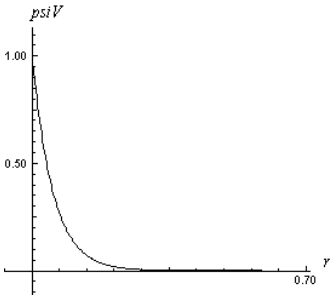
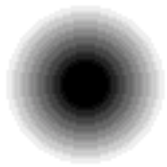
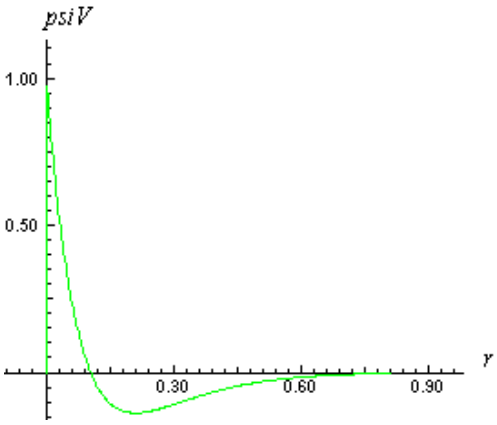
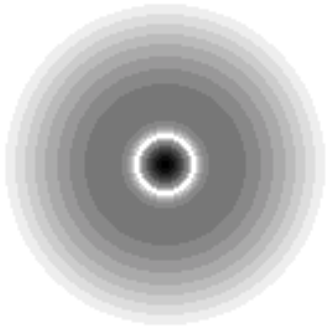
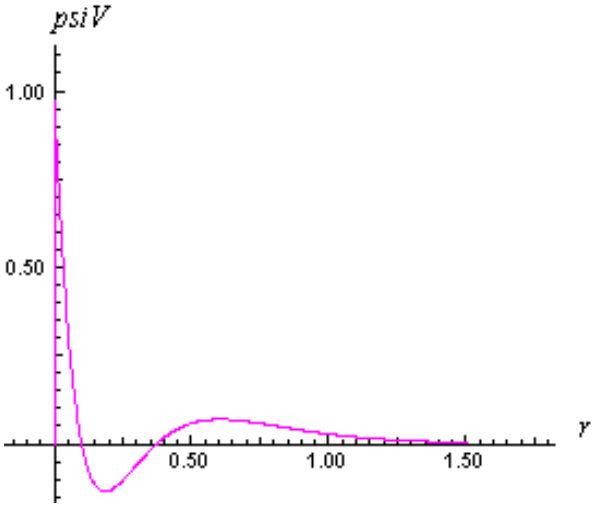
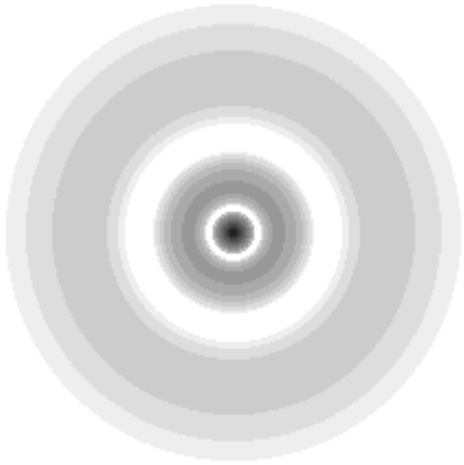
Die radialen Verteilungsfunktionen zeigen allerdings (s. die obigen Betrachtungen zum Atomradius), dass sich der größte Anteil der Elektronenhülle in der Kugelschale am Bohrschen Radius befindet und der Großteil der Elektronenhülle weiter außerhalb.

Bei angeregten Zuständen ergeben sich entsprechende Unterschiede. Bei den räumlichen Verteilungen werden die Bäuche nach außen hin niedriger, bei den radialen Verteilungen nehmen sie zu.

Klar ist, dass sich das Atom mit wachsender Zustandszahl unabhängig von der gewählten Radiusdefinition auf jeden Fall deutlich vergrößert. Die radiale Verteilungsfunktion erstreckt sich im Grundzustand etwa bis auf 0.25 nm, für n = 4 verzehnfacht sich der Bereich auf 2.5 nm.

Die geometrische Schalenstruktur der angeregten Zustände, die durch die Knoten der Verteilungsfunktion entsteht, bleibt beim H-Atom grundsätzlich erhalten. Genau wie der klassische verbotene Bereich bleiben "verbotene Radien" bei klassischen Veranschaulichungen des Elektrons unverständlich (vgl. Kap. 5.2).

Abb. 4.4.9: Der Radialteil R(r) der Lösungen der dreidimensionalen SGL des H-Atoms (s-Zustände) und die zugehörigen Veranschaulichungen von Ladungsdichteverteilungen (Querschnitt)

R(r) (= psiV) errechnet aus Lösungen der eindimensionalen SGL ψ(r): R(r) = ψ(r)/r	**Ladungsdichteverteilung e·R^2(r) (Schnitt) erstellt mit "e-Wolke" von H. Lüdicke**
n = 1 	n =1 
n = 2 	n = 2 
n = 3 	n = 3 

4.4.6 Die experimentelle Bestimmung von Atomradien

Wie oben ausgeführt, lässt sich ein definitiver Atomradius wegen des asymptotischen Verhaltens der ψ-Funktion nicht angeben. Empirisch hängt die Definition des Atomradius vom gewählten Messverfahren ab. Einige der gebräuchlichsten Definitionen und Verfahren sind im Folgenden aufgelistet:

- In einem Molekül (z.B. H_2) haben die Atome einen bestimmten Abstand voneinander. Der halbe Abstand wird **kovalenter Bindungsradius** des Atoms genannt.

- In Kristallen ordnen sich die Ionen regelmäßig in einer Gitterstruktur an. Der Abstand zweier Ionen ist in einfachsten Strukturen die Summe aus dem Radius der beiden Ionen. Man spricht hierbei von **Ionenradien**. Im allgemeinen lassen sich die Abstände aller Atome, die in einem Kristall angeordnet sind, aus Interferenzerscheinungen bestimmen.

- Liegt ein Element als atomares Gas vor, so gibt es wegen der Abstoßung zwischen zwei Atomen einen minimalen Abstand, auf den sich zwei Atome nähern können. Aus makroskopischen Messungen (z.B. dem Verhalten von Druck und Volumen eines Gases bei konstanter Temperatur) lässt sich das sogenannte **Kovolumen (oder Eigenvolumen**) der Atome und damit deren Radius bestimmen.

- Streut man z.B. Elektronen an Atomen, erhält man den sogenannten **Wirkungsquerschnitt**. Die Elektronen werden vom Atom wie von einem kugelsymmetrischen Gebilde abgelenkt. Aus dem Wirkungsquerschnitt lässt sich ein Atomradius bestimmen.

Allgemein lässt sich festhalten, dass man Atomradien nur vergleichen kann, wenn man sich auf die selbe Messmethode bezieht. Radien aus verschiedenen Messmethoden können deutlich voneinander abweichen.

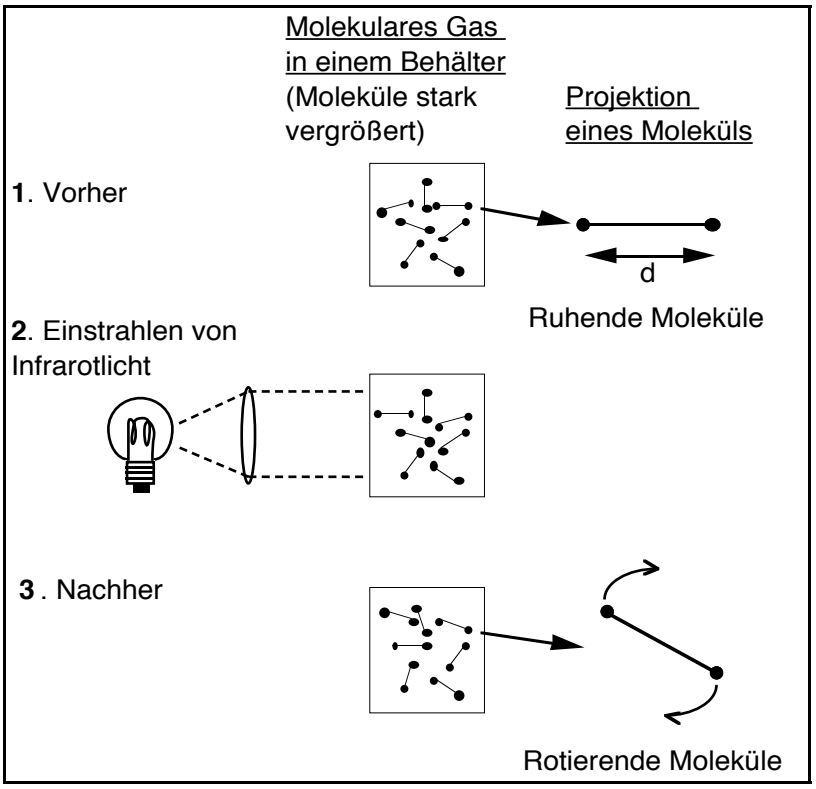
Verschiedene Elemente liegen bei Raumtemperatur in unterschiedlicher Form vor (atomar, molekular, metallisch, als Ionengitter), so dass ein direkter Vergleich der Radien oft nur unter hohem experimentellem Aufwand möglich wird.

- **Die Bestimmung des kovalenten Bindungsradius in Molekülen**

In einem zweiatomigen Molekül (z.B. H_2 --> H-H) sind die Atomkerne in einem bestimmten Abstand d voneinander getrennt. Der Abstand d der beiden Kerne zueinander soll experimentell bestimmt werden. Dazu werden die Atomkerne als Massepunkte bekannter Masse betrachtet. Da die Masse der Elektronen nur etwa den zweitausendsten Teil der Gesamtmasse des Moleküls ausmacht, können die Elektronen bei der Massenverteilung vernachlässigt werden.

Um das Molekül - vergleichbar einer quasi masselosen Stange mit schweren Kugeln an den Enden - in Rotation senkrecht zur Verbindungsachse zu versetzen, muss Energie übertragen werden. Molekülrotation lässt sich z.B. durch Einstrahlen von Infrarotlicht anregen. Die übertragene Energie erzeugt eine bestimmte Rotationsfrequenz, die bei bekannter Masse nur noch vom Abstand der beiden Atomkerne abhängt. Trägt man in einem Graphen die eingestrahlte Energie gegen die Rotationsfrequenz auf, lässt sich daraus der Abstand der beiden Atome ermitteln.

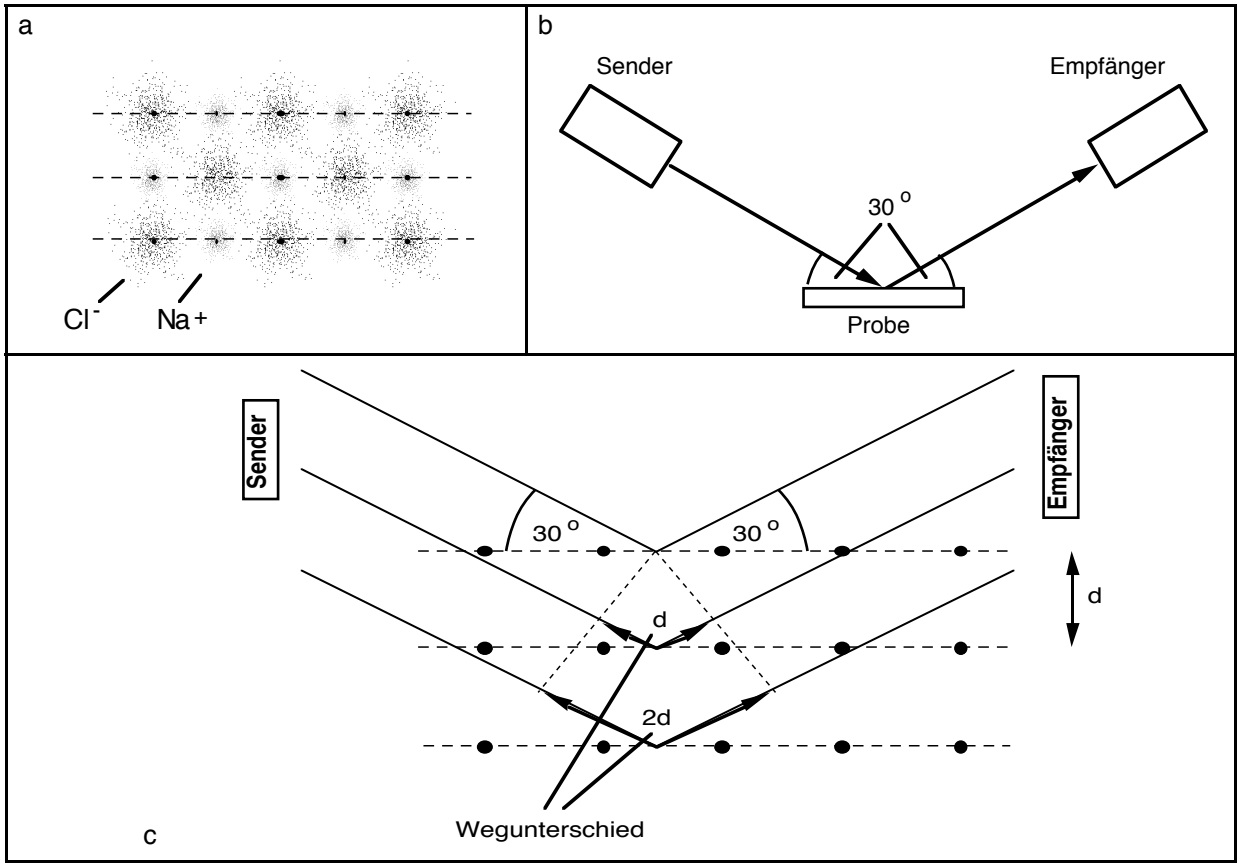
Abb. 4.4.10: Zur Bestimmung des kovalenten Bindungsradius



- **Die Bestimmung des Ionenradius in Kristallgittern**

Kristallgitter sind zur Bestimmung von Atom- oder Ionenabständen wegen ihrer völlig regelmäßigen Anordnung besonders günstig. Abb. 4.4.11.a zeigt die regelmäßige Struktur eines NaCl-Ionengitters. Die kleineren Ladungswolken gehören zu den positiven Na-Ionen, die größeren zu den negativen Cl-Ionen. Die Ionenschichten sind mit einer gestrichelten Linie angedeutet.

Abb. 4.4.11: Zur Bestimmung des Ionenradius in Kristallgittern



Der Abstand d, innerhalb dessen sich die Gitterstruktur wiederholt, lässt sich mit einem Röntgenstrahl ausmessen. Dieser wird - um besonders einfache geometrische Verhältnisse zu schaffen - unter einem Winkel von 30° auf den Kristall geschickt (s. Abb. 4.4.11.c, Ladungswolken wurden nicht dargestellt). Der Wegunterschied der an den Gitterebenen reflektierten Strahlung ergibt sich zu Vielfachen von $2 \cdot d \cdot \sin 30° = d$. Sind die Wellenlänge λ und der Abstand d (oder ein Vielfaches von d) gleich, ist die

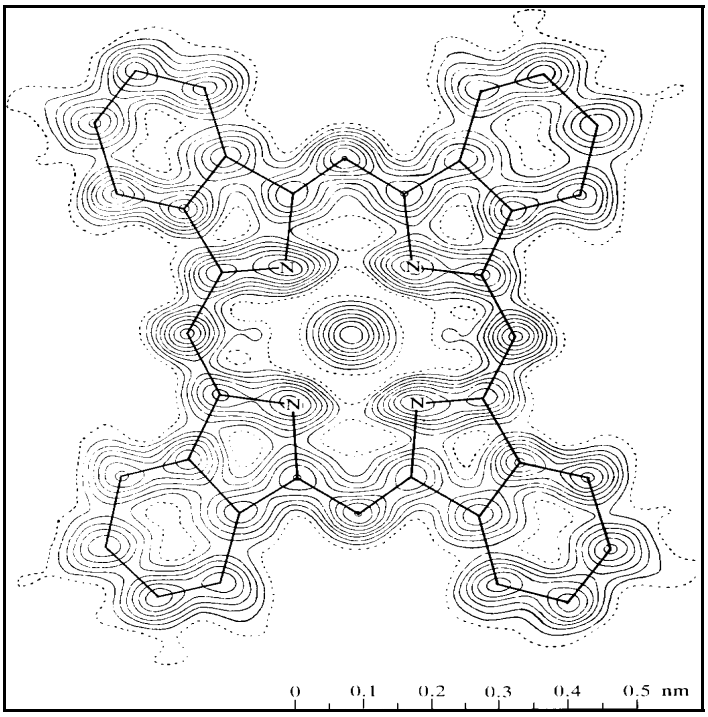
Bedingung für konstruktive Interferenz erfüllt und es entsteht aufgrund der periodischen Struktur der Probe unter einem Austrittswinkel von genau 30° eine Reflexion des Röntgenstrahls. Den Abstand zweier Ionen im Gitter erhält man, indem man die Wellenlänge des Röntgenstrahls solange variiert, bis man im Empfänger eine Reflexion registriert. Da die Gitterabstände im Bereich von zehntel Nanometern sind, muss auch die Wellenlänge der Strahlung in diesem Bereich liegen. Deshalb ist Röntgenstrahlung erforderlich.

Über die Bestimmung des Bindungsabstandes in Kristallgittern mit Hilfe von Röntgenbeugung lassen sich auch die kompletten Ladungsdichteverteilungen von einfachen Strukturen bis zu komplexen Molekülen aufzeichnen, vorausgesetzt, das zu untersuchende Molekül liegt in Form eines regelmäßig angeordneten Kristalls vor. Mit dem Röntgenstrahl werden die Intensitäten der Reflexionen dabei nicht nur unter einem sondern unter allen möglichen Einfallsrichtungen aufgezeichnet. Aus den gemessenen Intensitäten lässt sich durch ein mathematisches Verfahren das Bild der Ladungsverteilung im Molekül rekonstruieren.

Abb. 4.4.12:

Die Ladungsdichteverteilung von Nickel-Phthalocyanin

Die Linien geben Bereiche gleicher Ladungs- bzw. Elektronendichte an. Im jedem Mittelpunkt, um den sich eine Schar von Kreisen befindet, sitzt ein Atomkern. Die Elektronendichte nimmt von innen nach außen ab.



- **Das Simulationsprogramm vLab zur Röntgen-Beugung**

Mit dem im Rahmen einer 1. Staatsexamensarbeit zur Röntgen-Strukturanalyse im Unterricht erstellten Simulationsprogramm vLab (für PC) kann dieses Messverfahren simuliert werden: Ein Lithiunfluorid-Kristall muss in die Versuchsapparatur eingefügt werden (Abb. 4.4.13 links). Die Daten der Röntgenbeugung (Abb. 4.4.13 rechts) werden dann "ins Labor geschickt" und dort in Elektronendichten umgerechnet (Abb. 4.4.14 links). Die Daten können vermessen und mit theoretischen Kurven verglichen werden (Abb. 4.4.14 rechts).

Abb. 4.4.13: Aus dem Simulationsprogramm vLab zur Röntgen-Beugung an Kristallen

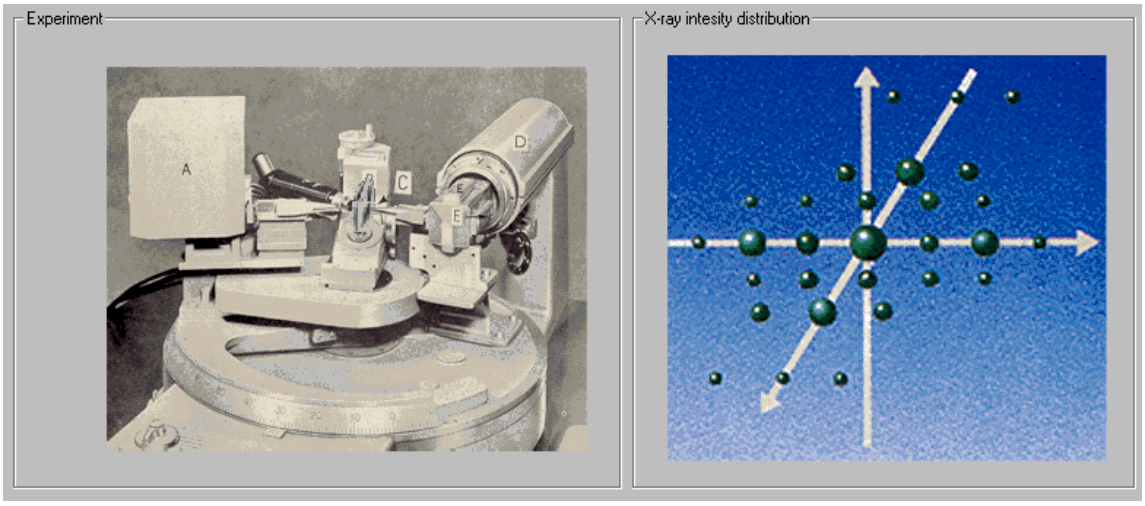
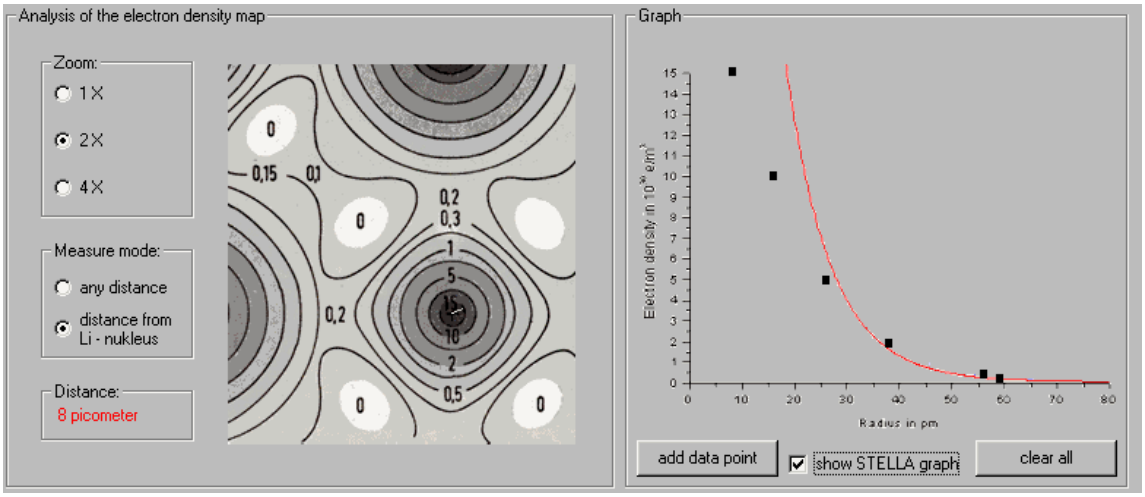


Abb. 4.4.14: Aus dem Simulationsprogramm vLab zur Röntgen-Beugung an Kristallen



- **Die Bestimmung des Atomradius in Gasen**

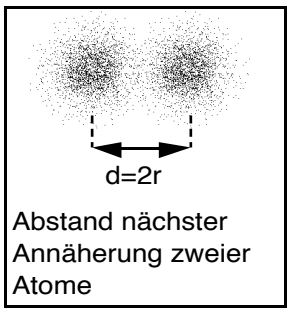
Über die reale Gasgleichung läßt sich das Eigenvolumen von atomaren Gasen ermitteln. Das Eigenvolumen ist der Raum, den die Atome in einem vorgegebenen Volumen selbst einnehmen, der einzelnen Atomen sozusagen nicht mehr zur Bewegung zur Verfügung steht. Die reale Gasgleichung (van der Waals -Gleichung) lautet:

$$(p + a \cdot V^{-2}) \cdot (V-b) = R \cdot T \qquad (4.4.11)$$

Sie beschreibt die Beziehung zwischen Druck p, Volumen V, und Temperatur T. R ist die allgemeine Gaskonstante, a und b sind zwei gasspezifische Konstanten.

Im Experiment ändert man das Volumen V bei konstant gehaltener Temperatur T. Man misst p und V und erstellt ein p-V-Diagramm. Nun versucht man die gemessene Kurve durch Gl. 4.4.11 zu beschreiben, indem man a und b so variiert, dass sie für ein bestimmtes Gas die experimentell gemessene p-V-Kurve möglichst gut wiedergeben. Der Parameter b ist dabei ein direktes Maß für das Eigenvolumen der Atome, daher wird b von V abgezogen; b vermindert das Volumen V des Gefäßes um das Eigenvolumen b der Atome. (Der Parameter a beschreibt die atomaren bzw. molekularen Kräfte der Gasteilchen untereinander). Aus dem Eigenvolumen b lässt sich der Atomradius r berechnen, da man die Teilchenzahl des Gases über die Masse das Gases genau genug kennt.

Abb. 4.4.15:
Der Atomradius lässt sich mit dem Abstand d = 2r nächster Annäherung zwischen zwei Atomen identifizieren. Ab dem Abstand d haben sich die Ladungswolken so stark durchdrungen, dass sich die Atome abstoßen.



Hinweis: Ionisierungsenergien von atomaren Gasen lassen sich experimentell relativ einfach mit einer dem Franck-Hertz-Versuch äquivalenten Versuchsanordnung (Elektron-Atom-Stoß) bestimmen.

- **Die Bestimmung des Streuradius bei Elektronenstreuung**

Durchläuft ein Elektronenstrahl ein atomares Gas, kollidiert ein Teil der Elektronen mit den Gasatomen. Die kollidierenden Elektronen werden gestreut. Ist die Wegstrecke der Elektronen durch das Gas so kurz, dass die Wahrscheinlichkeit eines zweiten Stoßes vernachlässigbar klein ist, ist das Verhältnis von gestreute zur Gesamtzahl der eingeschossenen Elektronen proportional zum Wirkungsquerschnitt σ, der die Größe eines zweidimensionalen "Atomscheibchens" angibt:

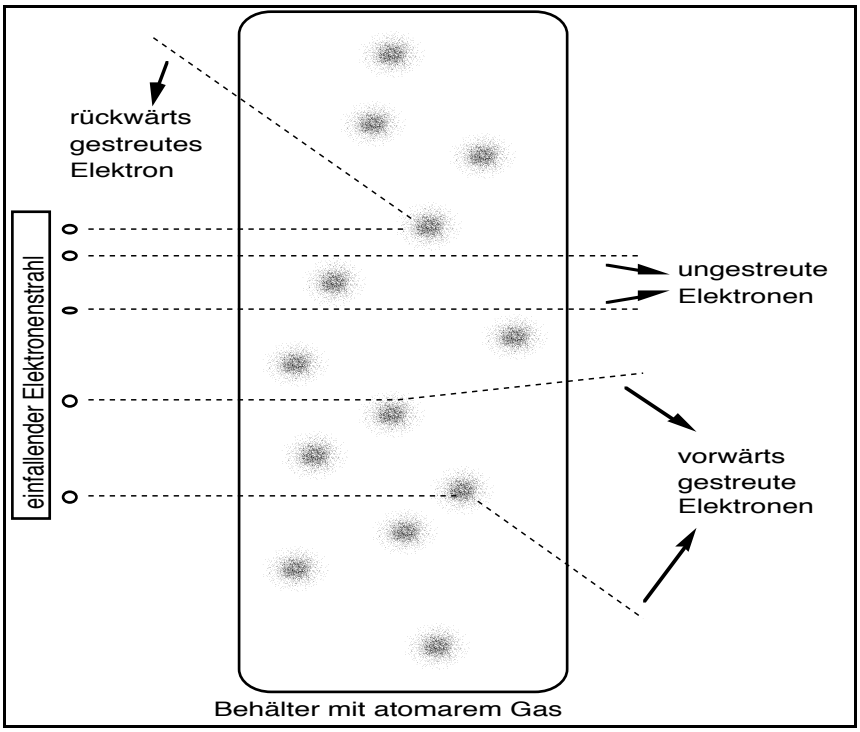
$$\sigma = \frac{Elektronen(gestreut)}{Elektronen(gesamt)} \cdot \frac{A_{gesamt}}{N_{Gasatome}} \qquad (4.4.12)$$

A_{gesamt} / $N_{Gasatome}$ ist die Gesamtfläche des bestrahlten Gases (Blickrichtung von vorne, also links in der Zeichnung) geteilt durch die Zahl der Atome in dieser Fläche. Aus dem Wirkungsquerschnitt σ kann man den Radius über

$$A_{Gasatom} = \sigma = 2\pi \cdot r^2 \qquad (4.4.13)$$

berechnen. σ ist die Fläche des Kreisscheibchens eines Atoms.

Abb. 4.4.16: Zur Bestimmung des Streuradius bei Elektronenstreuung



4.4.7 Nicht radialsymmetrische Zustände

Die radialsymmetrischen Zustände der Atomhülle werden als s-Zustände bezeichnet. Die verschiedenen oben dargestellten s-Zustände des H-Atoms wurden bisher allein durch ihre sogenannte Hauptquantenzahl n unterschieden. Die Energie E_n des Zustands n hängt nach Gl. 4.4.9 über $E_n = -13.6\ eV\ (1/n^2)$ direkt mit der Hauptquantenzahl n zusammen. Bei räumlichen Darstellungen dieser s-Zustände ergeben sich als Knotenflächen konzentrische Kugeln. Der Zustand n hat n-1 Kugelknotenflächen.

- **Haupt- und Nebenquantenzahlen**

Die Lösung der dreidimensionalen SGL führt auch auf nicht radialsymmetrische Verteilungsfunktionen. Bei dreidimensionalen Zuständen bzw. Verteilungsfunktionen benötigt man zur eindeutigen Kennzeichnung einer räumlichen Verteilung auch drei ganzzahlige Quantenzahlen. In der Atomphysik werden diese mit den Buchstaben n, l und m bezeichnet. Eine Verteilung ist also durch ein Tripel (n, l, m) gekennzeichnet. Die Quantenzahlen n, l und m treten bei der analytischen Lösung der SGL auf. Sie sind daher mathematisch miteinander verknüpft . Es gilt:

$$0 \leq l < n \qquad (4.4.13)$$

und

$$|m| \leq l \qquad (4.4.14)$$

d.h. ist z.B. l = 2, kann m nur die Werte -2, -1, 0, 1 und 2 annehmen.

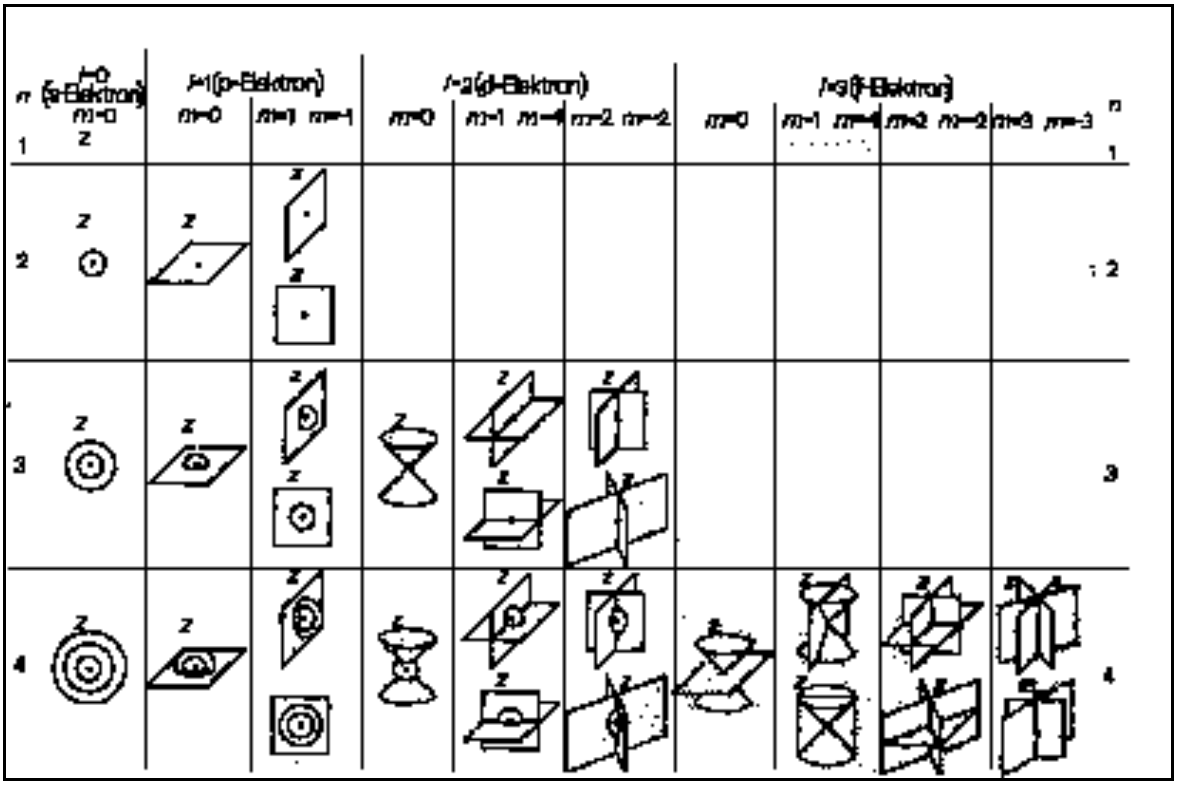
Die s-Zustände sind durch Tripel (n, 0, 0) gekennzeichnet. Sie sind als Zustände mit l = 0 eindeutig gekennzeichnet. Es gelten folgende Bezeichnungen:

l = 0: s -Zustände
l = 1: p-Zustände
l = 2: d-Zustände
l = 3: f-Zustände

Durch Gl. 4.4.13 und Gl. 4.4.14 ergibt sich, dass zu jeder Hauptquantenzahl n insgesamt n^2 mögliche Verteilungsfunktionen gehören.

Die Zustände s, p, d und f haben jeweils verschiedene Symmetrieeigenschaften: Bei p-Zuständen können statt bzw. zusätzlich zu den Kugelknotenflächen zentrale Knotenebenen auftreten. Sie sind symmetrisch bzgl. dieser Ebene. d- und f-Zustände haben 2 bzw. 3 weitere Knotenflächen. Neben Ebenen können auch Kegeloberflächen auftreten. Die Zahl der Knotenflächen eines Zustands beträgt n-1; m charakterisiert die Orientierung der Knotenflächen in einem vorgegebenen Koordinatensystem. Abb. 4.4.18 gibt einen Überblick über diese Zusammenhänge.

Abb. 4.4.18: Zustände, Quantenzahlen und Knotenflächen (nach Grehn 1982, 414)



Die Nebenquantenzahl l wird auch als Bahndrehimpulsquantenzahl bezeichnet, m heißt auch magnetische Quantenzahl oder Richtungsquantenzahl (zur Kennzeichnung der z-Komponente des Bahndrehimpulses). Die Bahndrehimpulsquantenzahl tritt bereits in der Bohr-Sommerfeldschen Theorie, die von Elektronenbahnen ausging, auf. In einem Atommodell nach Schrödinger sind diese Bezeichnungen besonders für Schüler missverständlich. Es empfiehlt sich, l und m lediglich als Nebenquantenzahlen zu bezeichnen und über Knotenflächen mit den Symmetrieeigenschaften der

Verteilungsfunktion in Beziehung zu setzen. Die Hauptquantenzahl n definiert zusätzlich die Energie des Zustands. Beim H-Atom ist jedes Energieniveau n^2-fach entartet, da es n^2 Verteilungen gibt. Bei höheren Atomen wird die Entartung durch die Wechselwirkungen der Hüllenelektronen untereinander aufgehoben. Bei gleicher Hauptquantenzahl liegen s-Niveaus am tiefsten, gefolgt von p-, d- und f-Niveaus.

- **Pauli-Prinzip**

Das Pauli-Prinzip von 1925 besagt:

- Alle Elektronenzustände im Atom unterscheiden sich in mindestens einer Quantenzahl.
- Die erlaubten Energieniveaus im Atom werden von unten nach oben mit Elektronen besetzt.

In Kap. 4.4.5 wurde bereits dargelegt, dass Elektronen im Atom möglichst tief liegende Energieniveaus einnehmen wollen. Das tiefste Energieniveau entspricht dem 1s-Zustand, der sich mir drei Quantenzahlen auch als (1,0,0) kennzeichnen lässt. Kommen bei höheren Atomen weitere Elektronen hinzu, können diese nicht alle das 1s-Niveau besetzen. Jeder Zustand (n, l, m) bietet zwei Elektronen Platz. Ab dem dritten Elektron werden die weiteren Energieniveaus von unten nach oben aufgefüllt. Nach dem Pauli-Prinzip müssen die beiden Elektronen im Zustand (n, l, m) sich noch in einer vierten Quantenzahl unterscheiden. Diese Quantenzahl s, die als Spinquantenzahl oder Eigendrehimpulsquantenzahl des Elektrons bezeichnet wird, kann nur die Werte +1/2 und -1/2 annehmen.

Der Begriff Spin ist didaktisch hier natürlich ebenfalls problematisch. Der Elektronen-spin ist der Polarisation von Photonen äquivalent. Er kann daher anstelle einer Eigenrotation auch allgemeiner mit einer ausgezeichneten Feldrichtung des Elektrons in sich selbst assoziiert werden. Diese "Vorzugsrichtung" zeigt sich in Magnetfeldern als magnetisches Moment. Der Spin des Elektrons wurde 1921 im Stern-Gerlach-Versuch nachgewiesen. Er tritt nicht bei der Lösung der SGL auf.

Mit Hilfe des Pauli-Prinzips erklären sich der Aufbau des Periodensystems in Gruppen von Elementen mit verwandten, durch die jeweilige Elektronenkonfiguration bestimmten chemischen Eigenschaften.

- **Schalenstruktur**

Alle Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl n besetzen i.d.R. relativ dicht beieinander liegende Energieniveaus. Die entsprechenden Elektronenzustände werden zu einer Schale zusammengefasst. Zu n = 1 gehört die K-Schale, zu n = 2 die L-Schale usw. bis zur Q-Schale. Zu jeder Schale gehören n^2 doppelt besetzte Zustände (n, l, m), also maximal $2n^2$ Elektronen. Durch die Nebenquantenzahl l ergeben sich Unterschalen, z.B. bilden alle 3s-, 3p- und 3d-Zustände jeweils Unterschalen der M-Schale. Chemische Elemente, bei denen alle benötigten Schalen oder zumindest Unterschalen maximal besetzt sind, sind chemisch relativ "träge". Bei den Edelgasen, wo gerade alle s- und p-Zustände der äußersten Schale voll besetzt sind, ist diese "Trägheit" am ausgeprägtesten. Die Elemente der benachbarten Gruppen, bei denen ein Elektron zur voll besetzten (Unter)Schale fehlt - Fluor, Chlor etc. - bzw., die eine neue Schale mit einem s-Elektron "eröffnen" - Wasserstoff und die Alkalimetalle -, sind besonders "aggressiv".

Zur Energie-Schalenstruktur korrespondiert (nur!) bei radialer Betrachtung eine geometrische Schalenstruktur, da alle radialen Verteilungsfunktionen mit Hauptquantenzahl n ihre Maxima in bestimmten Radiusbereichen haben (s. Kap. 4.5.4).

- **Orbitale**

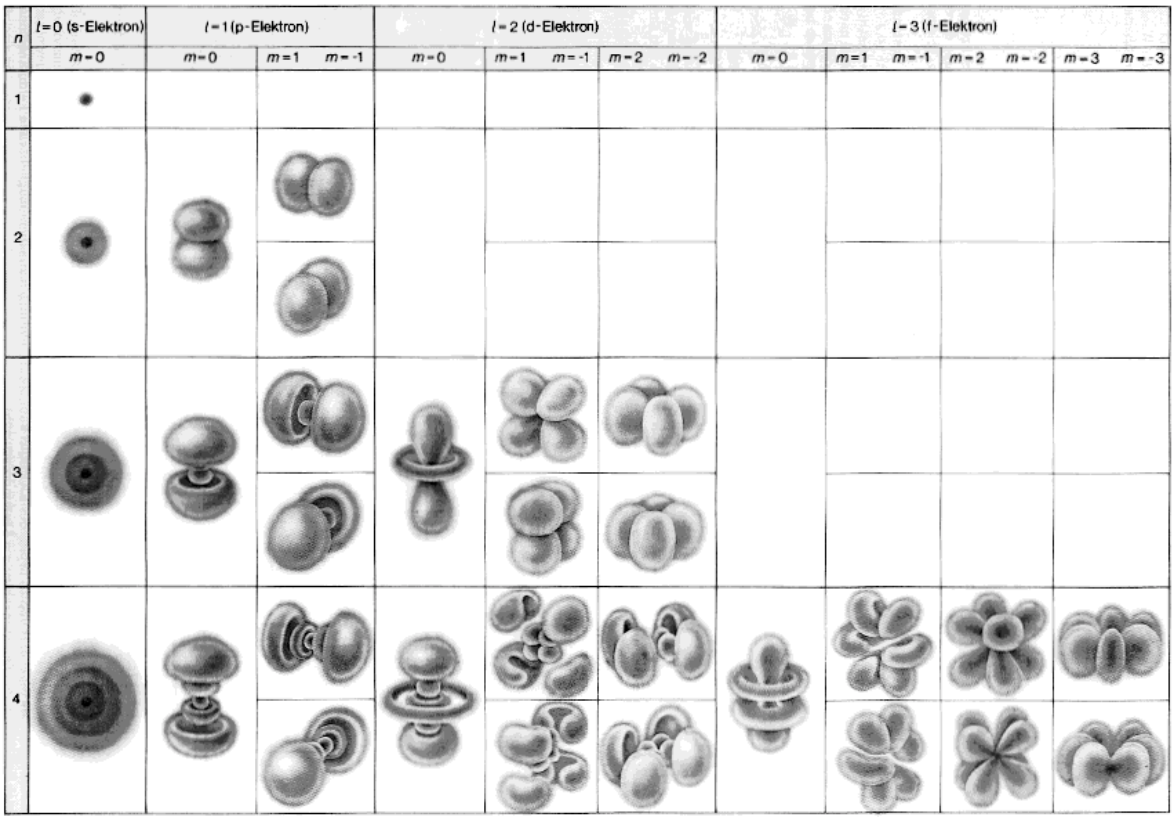
Obwohl der Begriff Orbital von Orbit wie Umlaufbahn abgeleitet ist, eignet sich das, was damit gemeint ist, gut zur räumlichen Veranschaulichung der Ladungsdichteverteilung der Elektrons und damit sozusagen der räumlichen Gestalt des Elektrons in den verschiedenen Zuständen der Atomhülle.

Zu den in Abb. 4.4.18 dargestellten, die Atomhülle strukturierenden Knotenflächen korrespondieren natürlich bestimmte Formen der Ladungsdichteverteilung. Da die

Verteilungsfunktionen exponentiell abklingen, ist eine räumliche Darstellung nicht trivial. Die in Abb. 4.4.19 zusammengefassten Darstellungen der Orbitale zeigen Flächen, die Räume begrenzen, innerhalb deren sich 90% der Dichteverteilung des Elektrons befinden. Auch wenn diese Bereiche durch Knotenflächen getrennt sind, wird die durch ψ^2 beschriebene gesamte Verteilung als ein Orbital bezeichnet.

Überlagert man alle Orbitale gleicher Hauptquantenzahl n und gleicher Nebenquantenzahl l - also z.B. die drei 2p-Orbitale oder alle fünf 3d-Orbitale, ergibt sich jeweils wieder eine radialsymmetrische Verteilung.

Abb. 4.4.19: Zustände, Quantenzahlen und Orbitale (nach: Grehn 1988, 411)



Diesen Effekt sowie die Lage der Knotenflächen kann man sich z.B. anhand der in Tab. 4.4.4 zusammengestellten ψ-Funktionen des H-Atoms klarmachen. Die Funktionen sind in Abhängigkeit von r und den kartesischen Koordinaten x, y, z dargestellt. Gegenüber den üblichen Darstellungen in reinen Kugelkoordinaten ist die Zuordnung zu den Knotenflächen dadurch wesentlich erleichtert.

Die Radien der Kugelknotenflächen der s- und p-Zustände beispielsweise ergeben sich direkt aus den Summen in den Klammern. Die Lage der Ebenen durch den Kugelmittelpunkte bei p-Zuständen ist ebenso leicht nachvollziehbar.

Quadriert man etwa die drei 2p- oder 3p-Funktionen aus Tab. 4.4.4 und addiert sie, so erhält man einen Term ($x^2 + y^2 + z^2$), der gerade r^2 ergibt. Die gesamte Verteilung wird damit wieder radialsymmetrisch , der Gesamtdrehimpuls verschwindet.

Tab. 4.4.4: Einige Zustandsfunktionen des H-Atoms

Zust.	(n, m, l)	Funktion	Zust.	(n,m,l)	Funktion
1s	1, 0, 0	$\psi = c \cdot e^{-\frac{r}{a}}$	$3p_z$	3, 1, +1	$\psi = c \cdot \left(\frac{z}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
2s	2, 0 ,0	$\psi = c \cdot \left(2 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3p_x$	3, 1, -1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$2p_x$	2, 1, +1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3p_y$	3, 1, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{y}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$2p_y$	2 ,1, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{y}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3d_{xy}$	3 ,2, +2	$\psi = c \cdot \left(\frac{x \cdot y}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$2p_z$	2, 1 ,-1	$\psi = c \cdot \left(\frac{z}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3d_{yz}$	3, 2 ,+1	$\psi = c \cdot \left(\frac{y \cdot z}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
3s	3, 0, 0	$\psi = c \cdot \left(27 - 18\frac{r}{a} + 2\frac{r^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$	$3d_{xz}$	3, 2, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{x \cdot z}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$a = \frac{\varepsilon_o \cdot h^2}{\pi \cdot e^2 \cdot m} = 0{,}053\,\text{nm}$: Radius des Maximums des Grundzustands = Bohrscher Radius c = jeweilige Normierungskonstante			$3dx_{2-y2}$	3 ,2, -1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x^2 - y^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
			$3d_{z2}$	3, 2, -2	$\psi = c \cdot \left(\frac{3z^2 - r^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$

4.5 Abschnitt 5: Mehrelektronensysteme I

Schon für den Fall eines Dreikörperproblems beim Helium-Atom (Atomkern, zwei Elektronen) lassen sich die Eigenzustände dieses Systems nur noch in einem Näherungsverfahren bestimmen. Das Standardverfahren ist das Hartree- bzw., wenn man zusätzlich den Elektronenspin berücksichtigt, das Hartree-Fock-Verfahren (s. z.B. Haken & Wolf 1993, 340 ff). Beim Hartree-Verfahren wird ein Elektron herausgegriffen und ausgehend von den Zustandsfunktionen des Einelektronenproblems und unter Einbeziehung der zusätzlichen Wechselwirkungen der übrigen Elektronen eine erste Näherungslösung für die SGL bestimmt. Mit dieser ersten Näherungslösung wird das begonnene iterative Verfahren so lange fortgesetzt, bis sich die weiteren Näherungslösungen nicht mehr verändern. Letztendlich erhält man in der SGL einen Korrekturterm im Potential, der die Wechselwirkungen mit allen übrigen Elektronen berücksichtigt. Beim Hartree-Verfahren wird jedoch ein das Pauli-Prinzip verletzender Produktansatz für die Gesamtzustandsfunktion des Systems gemacht, eine quantenmechanisch korrekte Lösung ist mathematisch wesentlich aufwendiger.

Im Folgenden wird ein dem Hartree-Verfahren ähnliches, von Hans Niedderer für die Modellierung radialsymmetrischer Zustände einiger höherer Atome entwickeltes iteratives Verfahren vorgestellt. Dabei wird für jedes Elektron eines Atoms eine eigene SGL aufgestellt, die im Potential die abschirmende Wirkung der Ladungsdichteverteilungen der übrigen Elektronen berücksichtigt. Das Modell vernachlässigt den Spin und ist gegenüber der korrekten quantenmechanischen Behandlung zusätzlich fehlerbehaftet, indem die darin vorgenommene Berechnung der Wechselwirkung der Elektronen streng genommen nur für die Kraft, nicht aber für das Potential gilt. Das Modell führt aber zu quantitativ befriedigenden Ergebnissen und verdeutlicht eine Reihe grundlegender physikalischer Phänomene bei höheren Atomen.

4.5.1 Höhere Atome und Abschirmung der Kernladung

Um den Zustand etwa des He-Atoms mit der Kernladung +2e zu beschreiben, werden die Zustände der beiden Elektronen, die der Kern an sich bindet, berechnet. Dabei beeinflussen sich die beiden gebundenen Elektronen aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung gegenseitig. Auf jedes einzelne Elektron wirkt nicht nur die Kernladung, sondern auch die Ladung des anderen Elektrons. Dadurch werden sich seine Bindungsenergie und seine Verteilungsfunktion im Vergleich etwa zum He^+-Ion deutlich ändern. Die gegenseitige Beeinflussung der beiden Elektronen und ihrer Verteilungsfunktionen wird mit Hilfe des folgenden "Gedankenexperiments" verdeutlicht:

Eine Sonde, die Wirkungen von Ladungen misst, nähert sich aus großer Entfernung einem He^+-Ion, das nur ein im Grundzustand befindliches Elektron an sich gebunden hat. Die wirksame Gesamtladung, die die sich nähernde Sonde misst, resultiert aus der Kernladung plus der Ladungsverteilung $-e \cdot \psi^2$ des bereits gebundenen Elektrons. Die negative Ladung des gebundenen Elektrons schirmt dabei einen Teil der positiven Kernladung ab. Weit vom ionisierten Atom entfernt entspricht die wirksame Ladung +1e, da eine positive Ladung vom gebundenen Elektron komplett abgeschirmt wird. Nähert sich die Sonde dem Kern, wird der Abschirmungseffekt geringer, da sie einen wachsenden Teil der Ladungsverteilung des gebundenen Elektrons durchdringt. Beim Abstand r vom Atomkern trägt der nur noch der innerhalb der Kugel mit dem Radius r liegende Anteil der Ladungsverteilung zur Abschirmung bei. In sehr geringem Abstand vom Kern wird die Wirkung der Kernladung +2e gemessen werden; die Ladungsverteilung des Elektrons bewirkt dann praktisch keine Abschirmung mehr.

Den von der Sonde festgestellten Abschirmungseffekt "spürt" in einen He-Atom mit zwei Elektronen auch das jeweils andere Elektron. Betrachtet man eines der beiden Elektronen, setzt sich das Gesamtpotential, das die Ladungsdichteverteilung dieses Elektrons determiniert, aus dem Kernpotential plus dem abschirmenden Potential des anderen Elektrons zusammen. Die gesamte Ladungsdichteverteilung des He-Atoms ergibt sich aus der Überlagerung der ψ^2-Funktionen beider Elektronen.

4.5.2 Die Modellierung des He-Atoms mit MODELLUS

In der SGL für ein Elektron des He-Atoms tritt neben dem Faktor 2 im Coulomb-Potential zusätzlich der durch das jeweils andere Elektron bedingte Abschirmungsfaktor auf. Dieser Faktor gibt den Bruchteil der Ladungsverteilung eines Elektrons an, der sich entsprechend der Dichteverteilung ψ^2 zwischen Kern und dem jeweiligen Radius r befindet. Es handelt sich also um den jeweiligen Wert des Integrals der auf 1 normierten ψ^2-Funktion.

Der iterative Modellierungsprozess besteht nun darin, die ψ-Funktion eines Eigenzustands bzw. ihren Energieeigenwert und seine Normierungskonstante gleichzeitig (!) zu bestimmen. Beim H-Atom konnte man die Normierungskonstante im Nachhinein separat bestimmen. Beim He-Atom muss sie parallel ermittelt werden, da sie über den Abschirmungsfaktor den Energieeigenwert unmittelbar beeinflusst. Zum Kriterium für den Energieeigenwert (asymptotisches Verhalten von ψ für großes r) kommt als zweites Kriterium hinzu, die Normierungskonstante so zu bestimmen, dass der Abschirmungsfaktor für großes r den Wert 1 erreicht.

In der Praxis ergibt sich das Problem, die richtige Größenordnung für Energie und Normierungskonstante zum Beginn des Iterationsverfahrens zu finden. Hinsichtlich der Energie wird man auf Literaturwerte (die letztlich ohnehin den Maßstab für die Qualität des Modells bilden) zurückgreifen. Die empfindlich von den gewählten Parametern des Modells abhängende Normierungskonstante kann allerdings je nach Zustand über mehrere Zehnerpotenzen variieren. Die richtige Größenordnung muss bei der erstmaligen Erstellung eines neuen Modells daher erst einmal gefunden werden.

Abb. 4.5.1a beinhaltet die in MODELLUS benötigten Modellgleichungen für den Grundzustand des He-Atoms: Die Zeilen 1 und 2 sowie 3 und 4 stellen die SGL je eines Elektrons in symmetrischer Weise dar. Der Abschirmungsfaktor wurde hier mit poc = part of charge (Teil der Ladung) abgekürzt. In den Zeilen 5 und 6 wird der Faktor poc jeweils über die Integration der normierten ψ^2-Funktion berechnet. In Zeile 7 wird die radiale Dichtverteilung berechnet. (Bei einer Messung von Ladungsdichte-

verteilungen kann wegen der Nichtunterscheidbarkeit der einzelnen Elektronen nur die Gesamtdichteverteilung aller Elektronen gemessen werden.)

Abb. 4.5.1b dokumentiert die ermittelten Energieeigenwerte und Normierungskonstanten für den Grundzustand sowie die weiteren Startbedingungen und Parameter des Modells. Im Grundzustand befinden sich beide Elektronen bei vernachlässigtem Spin in vollkommen identischen 1s-Zuständen; es ergeben sich für beide Elektronen die selben Energieeigenwerte. Man hätte das Modell für den Grundzustand so betrachtet auch auf eine SGL beschränken können. Im Hinblick auf eine systematische Darstellung und angeregte Zustände des Atoms mit unterschiedlichen Elektronenzuständen ist dies zunächst aber nicht sinnvoll. Bei mehr als zwei zu modellierenden Elektronen wird man in Anbetracht der beschränkten Kapazitäten von MODELLUS und um Zeit, Aufwand und Fehler zu vermeiden, möglichst "ökonomisch" modellieren.

Abb. 4.5.1: Das He-Atom mit MODELLUS (Grundzustand)

a

$$\frac{dpsi1}{dr} = spsi1$$

$$\frac{dspsi1}{dr} = -26.25 \times \left\{ En1 + 1.44 \times (2 - poc2) \times \frac{1}{r} \right\} \times psi1$$

$$\frac{dpsi2}{dr} = spsi2$$

$$\frac{dspsi2}{dr} = -26.25 \times \left\{ En2 + 1.44 \times (2 - poc1) \times \frac{1}{r} \right\} \times psi2$$

$$\frac{dpoc1}{dr} = \frac{psi1^2}{c1}$$

$$\frac{dpoc2}{dr} = \frac{psi2^2}{c2}$$

$$Pr = \frac{psi1^2}{c1} + \frac{psi2^2}{c2}$$

b

Parameters

	case 1
En1	-37.104
En2	-37.104
c1	4.3e-06
c2	4.3e-06

Initial values

	case 1
psi1	0
spsi1	1
psi2	0
spsi2	1
poc1	0
poc2	0

Independent variable: r

Step: 0.0005

Limits

Min: 1e-06 Max: 0.4

Da allein der Grundzustand modelliert wurde und sich die Verteilungsfunktionen gegenüber dem H-Atom erwartungsgemäß über einen geringeren Radiusbereich erstrecken (s. Kap. 4.4.5), wurde eine kleinere Schrittweite für die Iteration gewählt und der Iterationsbereich entsprechend verkürzt.

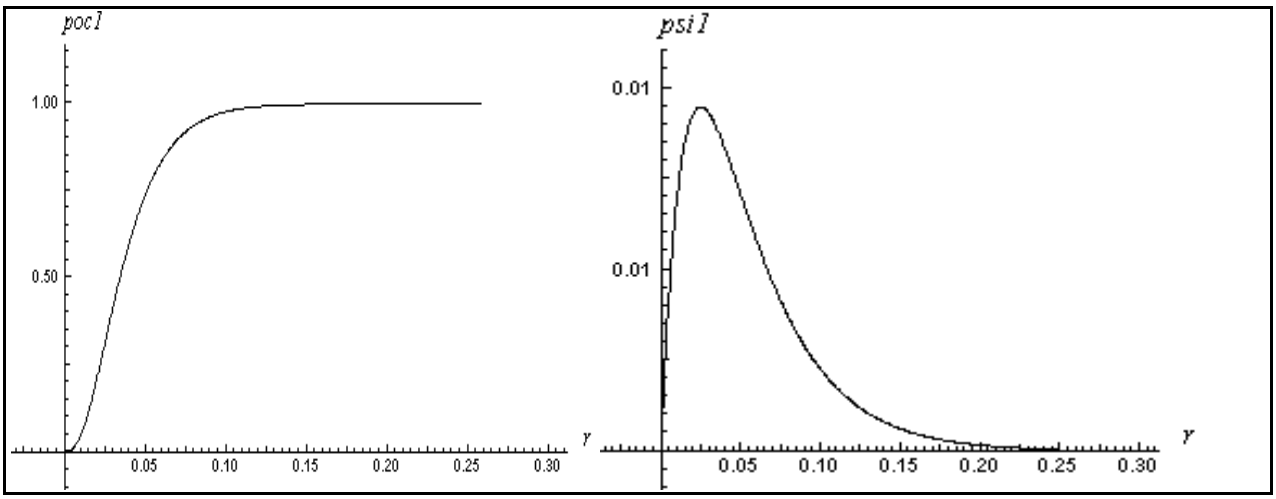
Auf die Berechnung und Darstellung von Funktionen R(r) und $R^2(r)$ wurde verzichtet. Für die hier betrachteten physikalischen Aspekte sind radiale Darstellungen ausreichend bzw. ausschlaggebend.

4.5.3 Auswertung: Radius und Spektrum des He-Atoms

- **Der Radius des He-Atoms**

In Abb. 4.5.2 sind der Verlauf des Abschirmungsfaktors, die ebenfalls für beide Elektronen gleiche ψ-Funktion des Grundzustands sowie die radiale Gesamtdichteverteilung dargestellt. Vergleicht man die Verteilungsfunktionen des He-Atoms mit den entsprechenden Funktionen des H-Atoms fällt sofort auf, dass sich die Maxima beim He-Atom zu wesentlich kleineren Radien verschieben. Mit 0.025 nm beim Helium und 0.053 nm beim Wasserstoff ist das Helium-Atom nur etwa halb so groß, wenn man eine entsprechende Definition des Atomradius zugrunde legt. Aus gaskinetischen Messungen erhält man ein Radienverhältnis He / H von 0.110 nm / 0.126 nm.

Abb. 4.5.2: Grundzustand $(1s)^2$ des He-Atoms: Verteilungsfunktion und Abschirmungsfaktor



- **Energien und Spektrallinien**

Um Aussagen über Energien und Spektren machen zu können müssen auch angeregte s-Zustände des Heliums modelliert werden. Da sich in angeregten Zuständen beide Elektronen in ihren Energien und Normierungskonstanten unterscheiden, wird die Suche der Eigenzustände gegenüber dem H-Atom wesentlich zeitaufwendiger. Es müssen nun vier Größen gleichzeitig iterativ bestimmt werden.

In den Modellgleichungen muss der Abschirmungsfaktor, den das Elektron im höheren s-Zustand bewirkt, über eine if-Bedingung modelliert werden: Da die ψ-Funktionen wegen der begrenzten Genauigkeit des numerischen Lösungsverfahrens sich nur über einen bestimmten Radiusbereich an die r-Achse schmiegen, wird der Abschirmungsfaktor entsprechend nur begrenzt den Wert 1 beibehalten. Für größere Radien muss er daher mittels einer if-Bedingung auf den Wert 1 festgesetzt werden.

Abb. 4.5.3: Zum Modell des angeregten He-Atoms (1s)(2s)

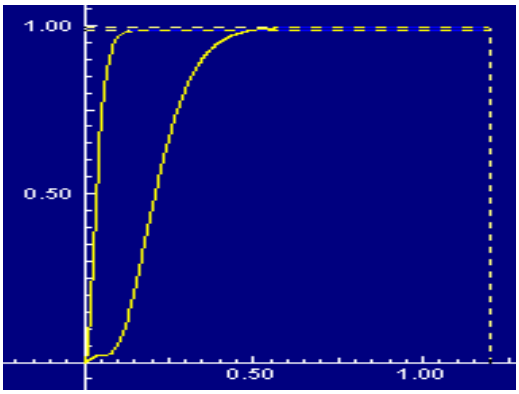
$$\frac{dpoc1}{dr} = Z$$

$$\text{if}(r <= 0.3)\ \text{then}\ \left(Z = \frac{psi1^2}{c1}\right)$$

$$\text{if}(r > 0.3)\ \text{then}\ (Z = 0)$$

$$\frac{dpoc2}{dr} = \frac{psi2^2}{c2}$$

$$Pr = Z + \frac{psi2^2}{c2}$$



Parameters

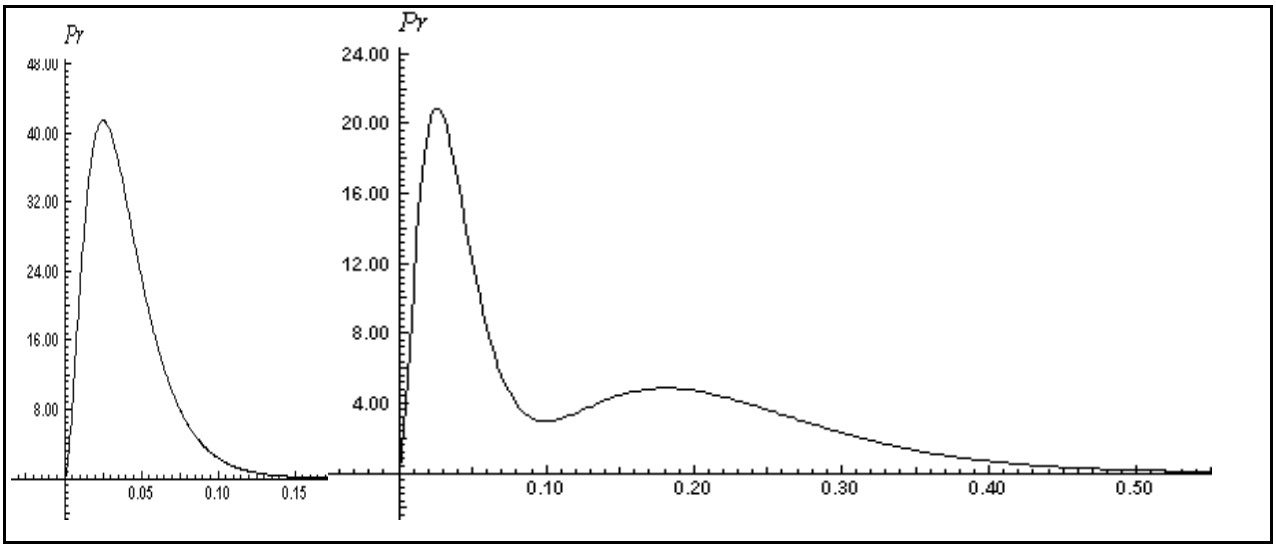
	case 1
En1	-53.804
En2	-4.9933
c1	5e-06
c2	9.8e-05

Step: 0.0005, Min.: 1e-06

Am Verlauf der Kurve poc2 erkennt man das kleine "Zwischenplateau", das dem ersten und kleineren Bauch der Kurve psi2 entspricht.

Abb. 4.5.4 stellt die radialen Dichteverteilungen der Zustände $(1s)^2$ und (1s)(2s) des Heliums nebeneinander. Beim Zustand liegt das $(1s)^2$ Maximum etwa doppelt so hoch, beide Elektronen verteilen sich im selben Radiusbereich. Im Zustand (1s)(2s) zeigt die Dichteverteilung ein deutliches 2. relatives Maximum. Zwischen den relativen Maxima treten in der Gesamtverteilung - i.G. zur nicht dargestellten, Verteilungsfunktion des angeregten Elektrons - keine Knoten mehr auf. Die Elektronenhülle des angeregten Zustands zeigt (nur!) in der radialen Betrachtung eine geometrische Schalenstruktur, die bei den weiteren höheren Atomen bereits im Grundzustand auftritt (s. unten).

Abb. 4.5.4: Radiale Dichteverteilungen bei Helium; links: Zustand $(1s)^2$, rechts: Zustand (1s)(2s)



Der Zustand (1s)(3s) lässt sich mit dem gleichen Modell ermitteln. Nimmt man noch das He^+-Ion hinzu, das sich - wie bereits in Kap. 4.4.5 erwähnt - analog dem H-Atom einfach modellieren lässt, erhält man für die Eigenzustände des Heliums mit MODELLUS eine Reihe von Energieeigenwerten.

Aus den Daten erkennt man, dass man mit dem relativ einfachen Modell in vernünftige Größenordnungen für die Energien des Heliums gelangt. Die größten Abweichungen ergeben sich für den Grundzustand. Dies erscheint plausibel, da die Wechselwirkung zweier "so eng benachbarter" Elektronen im Modell wegen der systematischen Fehler des Modells sicher am ungenauesten erfasst ist.

Tab. 4.5.1: Zustandsenergien von Helium: Modellierte Werte und Literaturwerte

Zustand	**E_1**	**E_2**	**Gesamtenergie**	**Literaturwert**
$(1s)^2$	-37.0 eV	-37.0 eV	- 74.0 eV	-79.0 eV
(1s)(2s)	- 53.8 eV	- 5.0 eV	- 58.8 eV	- 58.4 eV
(1s)(3s)	- 54.3 eV	- 1.9 eV	- 56.2 eV	- 55.9 eV
He-1^+	- 54.4 eV	----	- 54.4 eV	- 54.4 eV

An den Daten erkennt man ebenfalls, dass in den angeregten Zuständen, in denen die Verteilungsfunktion des höheren Zustands ihr Maximum weiter entfernt vom Kern hat - wodurch der Atomradius entsprechend zunimmt -, die Energie des inneren Elektrons deutlich absinkt. Vor dem Hintergrund der oben skizzierten Idee der Abschirmung ist dies unmittelbar plausibel. Die Gesamtenergie das Atoms erhöht sich natürlich mit zunehmender Anregung. Aus der Differenz zwischen der Gesamtenergie des Grundzustands und der Energie des einfachen Ions errechnet sich sofort die Ionisationsenergie für das 1. Elektron zu 24.6 eV (Literatur) bzw. 19.6 eV (MODELLUS). Für das 2. Elektron ergibt sich natürlich eine Ionisationsenergie von 54.4 eV.

Das Spektrum des He-Atoms ist aufgrund der in der Hülle auftretenden quantenmechanischen Wechselwirkungseffekte relativ kompliziert verglichen mit dem H-Atom (s. z.B. Haken & Wolf 1993, 303 ff). Es ist z.B. auch möglich, dass sich beide Elektronen auf einem höheren Niveau befinden. Weiterhin wird die Entartung der Energieniveaus aufgehoben. Die Auswahlregeln, die einen direkten Übergang zwischen s-Zuständen verbieten, können nicht mehr in allen Fällen vernachlässigt werden. Die sich aus Tab. 4.5.1 errechnenden Übergänge sind daher nicht direkt zu beobachten. Das 2p-Niveau, auf das Übergänge aus dem 3s-Niveau erlaubt sind, liegt nach Haken & Wolf (1993, 304) etwa 0.6 eV über dem 2s-Niveau. 3p- und 3d-Niveau liegen ca. 0.2 eV über dem 3s-Niveau.

Da die modellierten Energien in relevanten Größenordnungen ungenau sind, erscheint es nicht sinnvoll, bestimmte Linien des He-Spektrums den Energiedifferenzen aus den modellierten Zuständen zuzuordnen.

Im sichtbaren Bereich können z.B. mit der oben vorgestellten Software SPECTROSCOPY für Helium vier Linien identifiziert werden. Ihre Energiedifferenzen

liegen bei etwa 1.9 eV (rot), 2.2 eV (gelb), 2.6 eV (blau) und 3.2 eV (violett). Da es keinen Energiezustand zwischen den weit auseinander liegenden Niveaus 1s und 2s gibt, lässt sich nur schließen, dass die sichtbaren Linien aus Übergängen auf das 2s-Niveau oder aus dem 3s Niveau resultieren können.

4.5.4 Lithium und weitere höhere Atome

- **Zur Modellierung weiterer höherer Atome**

Das nächst höhere Atom mit drei Protonen und Elektronen ist das Metall Lithium. Entsprechend seinen drei Elektronen sind im Modell drei SGLen mit jeweils zwei Abschirmungsfaktoren berücksichtigt. Zwei Elektronen befinden sich im Grundzustand auf dem 1s-Niveau, das dritte Elektron muss gemäß dem Pauli-Prinzip in das nächst höhere Niveau, das 2s-Niveau. Bei Beryllium kommt ein viertes Elektron hinzu, das sich im Grundzustand den 2s-Zustand mit dem dritten Elektron teilt.

Quantitativ treten in den Modellen für Li und Be zwar zusätzliche SGLen und Abschirmungsfaktoren auf, qualitativ ergeben sich bei den Grundzuständen gegenüber dem He^+-Ion aber keine neuen Aspekte. Sobald man angeregte Zustände von Li und Be, die auch 3s-Zustände beinhalten, modelliert, wird die Modellkomplexität insofern gesteigert, als sechs Parameter gleichzeitig iterativ zu bestimmen sind. Da MODELLUS pro Modell nur drei Fenster für Graphen, die man für die Suche der ψ-Funktionen benötigt, zulässt, muss man sich die poc-Faktoren als Tabelle darstellen lassen.

Die nächst höheren Atome Bor und Kohlenstoff können nicht mehr im Grundzustand modelliert werden, da das fünfte und sechste Elektron nicht mehr im 2s-Zustand untergebracht werden können. Gemäß dem Pauli-Prinzip besetzen diese Elektronen nicht radialsymmetrische 2p-Zustände, die mit der eindimensionalen SGL nicht erfasst werden können. Es ist aber möglich Ionen und auf 3s- oder 4s-Niveaus angeregte Atome dieser Elemente zu berechnen. Insbesondere für die Ionen lassen sich noch Vergleichsdaten für Ionisationsenergien und Radien finden. Bei den angeregten Zuständen werden die Modelle sehr "unhandlich" und man erreicht die Kapazitätsgrenzen von MODELLUS.

- **Lithium**

Abb. 4.5.5 beinhaltet die wichtigsten Informationen und Ergebnisse zur Modellierung des Grundzustands von Lithium.

Abb. 4.5.5: Modell des Lithium-Atoms im Grundzustand: Gleichungen, radiale Dichteverteilung, Abschirmungsfaktoren, Energieeigenwerte und weitere Parameter

$$\frac{dpsi1}{dr} = spsi1$$

$$\frac{dpsi2}{dr} = spsi2$$

$$\frac{dpsi3}{dr} = spsi3$$

$$\frac{dspsi1}{dr} = -26.25 \times \left(En1 + 1.44 \times (3 - poc2 - poc3) \times \frac{1}{r} \right) \times psi1$$

$$\frac{dspsi2}{dr} = -26.25 \times \left(En2 + 1.44 \times (3 - poc1 - poc3) \times \frac{1}{r} \right) \times psi2$$

$$\frac{dspsi3}{dr} = -26.25 \times \left(En3 + 1.44 \times (3 - poc1 - poc2) \times \frac{1}{r} \right) \times psi3$$

$$\frac{dpoc1}{dr} = z1$$

$$\mathbf{if}(r <= 0.17)\ \mathbf{then} \left(z1 = \frac{psi1^2}{c1} \right)$$

$$\mathbf{if}(r > 0.17)\ \mathbf{then}\ (z1 = 0)$$

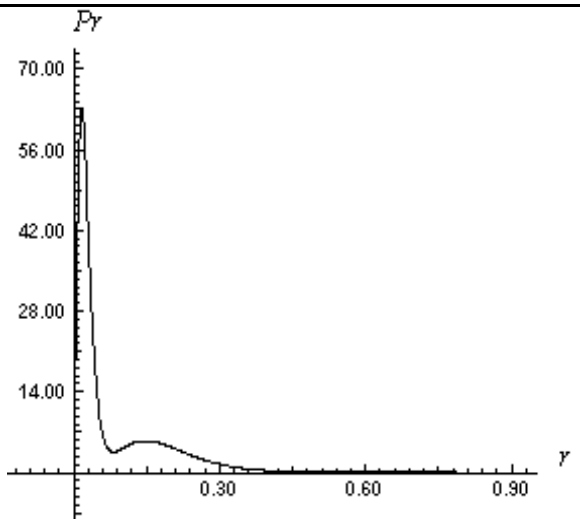
$$\frac{dpoc2}{dr} = z2$$

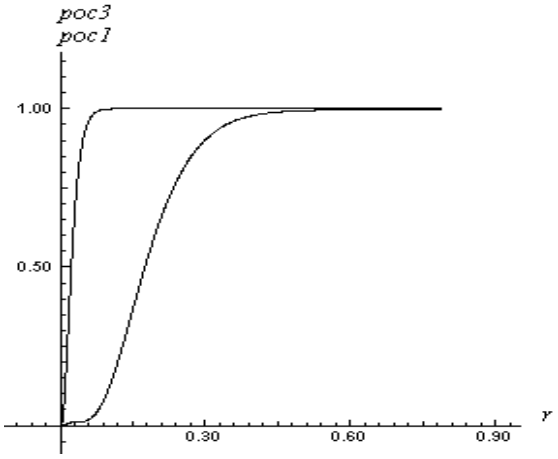
$$\mathbf{if}(r <= 0.17)\ \mathbf{then} \left(z2 = \frac{psi2^2}{c2} \right)$$

$$\mathbf{if}(r > 0.17)\ \mathbf{then}\ (z2 = 0)$$

$$\frac{dpoc3}{dr} = \frac{psi3^2}{c3}$$

$$Pr = z1 + z2 + \frac{psi3^2}{c3}$$





En1	-96.834
En2	-96.834
En3	-5.8425
c1	1.33e-06
c2	1.33e-06
c3	5.4e-05

Step: 0.001 Min.: 1e-06

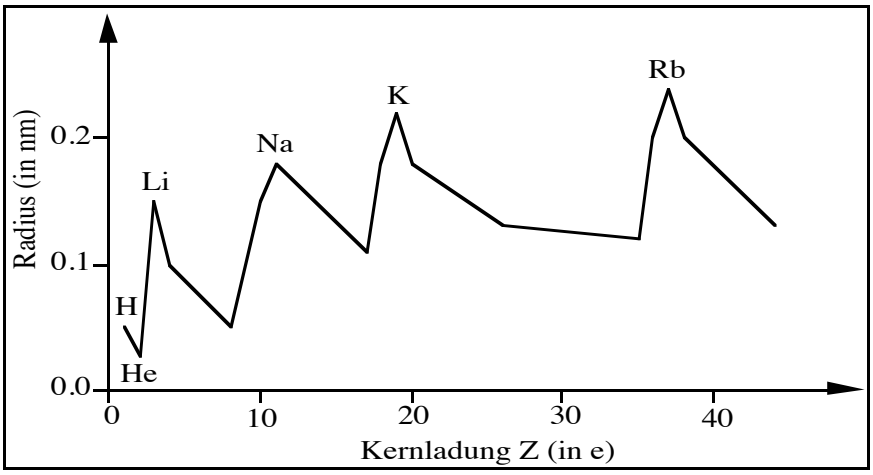
Wegen des dritten Elektrons im 2s-Niveau ist es klar, dass das Li-Atom im Grundzustand wesentlich größer als das He-Atom ist. Das äußere relative Maximum liegt bei ca. 0.15 nm, beim He waren es 0.025 nm.

Die ermittelten Energieeigenwerte von zweimal -96.83 eV und - 5.84 eV addieren sich zu - 199.5 eV. Die gemessenen Ionisationsenergien von 5.39 eV, 75.64 eV und 122.45 eV ergeben eine Grundzustandsenergie von -203.5 eV. Berechnet man die einfach und zweifach ionisierten Lithium-Ionen, gelangt man zu Ergebnissen entsprechender Qualität. Insgesamt ergibt das Modell auch in diesem Fall sehr befriedigende Ergebnisse.

Hinsichtlich der Spektrallinien bestehen die gleichen grundsätzlichen Probleme wie beim Helium-Atom. Konkrete Zuordnungen sind nicht möglich.

Abb. 4.5.6 zeigt schematisch den Verlauf des experimentell bestimmten Atomradius der ersten 45 Elemente. Die Ergebnisse der Messmethoden wurden so angepasst, dass ein Größenvergleich der Atome möglich ist. Bei Lithium, Natrium, Kalium und Rubidium steigt der Atomgröße, verglichen zu den vorherigen Elementen sprunghaft an, da das hinzukommende Elektron das nächst höhere s-Niveau, dessen Verteilungsfunktion sich weiter nach außen erstreckt, "eröffnet". Danach sinkt die Atomgröße wieder kontinuierlich ab. Die hinzukommenden Verteilungsfunktionen erstrecken sich über vergleichbare Radien, die steigende Kernladungszahl lokalisiert die Elektronen insgesamt aber auf engerem Raum.

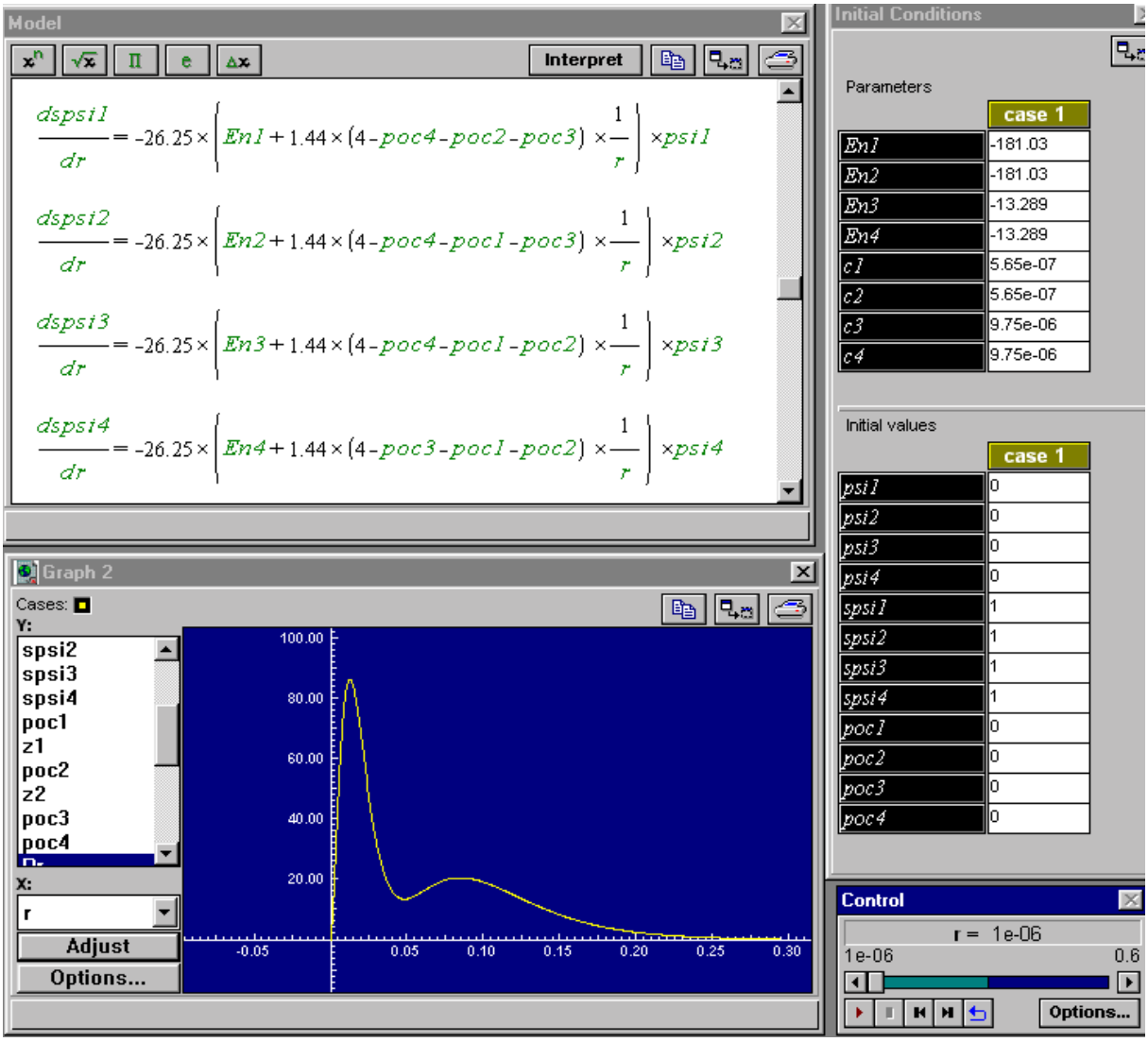
Abb. 4.5.6: Atomradien und Ordnungszahl (schematisch)



- **Beryllium**

Abb. 4.5.7 enthält einige Ergebnisse der Modellierung des Grundzustands von Beryllium. Man kann daran u.a. den verglichen mit Lithium etwa halbierten Atomradius sowie die berechnete Gesamtenergie von -386.64 eV ablesen. Die gemessenen Ionisationsenergien von 9.37 eV, 18.21 eV, 153.89 eV und 217.71 eV lassen auf eine Gesamtenergie von - 399.18 eV schließen. Verglichen mit Lithium fallen die Werte etwas schlechter aus, da wie beim Helium alle vorkommenden Niveaus doppelt besetzt sind (vgl. oben).

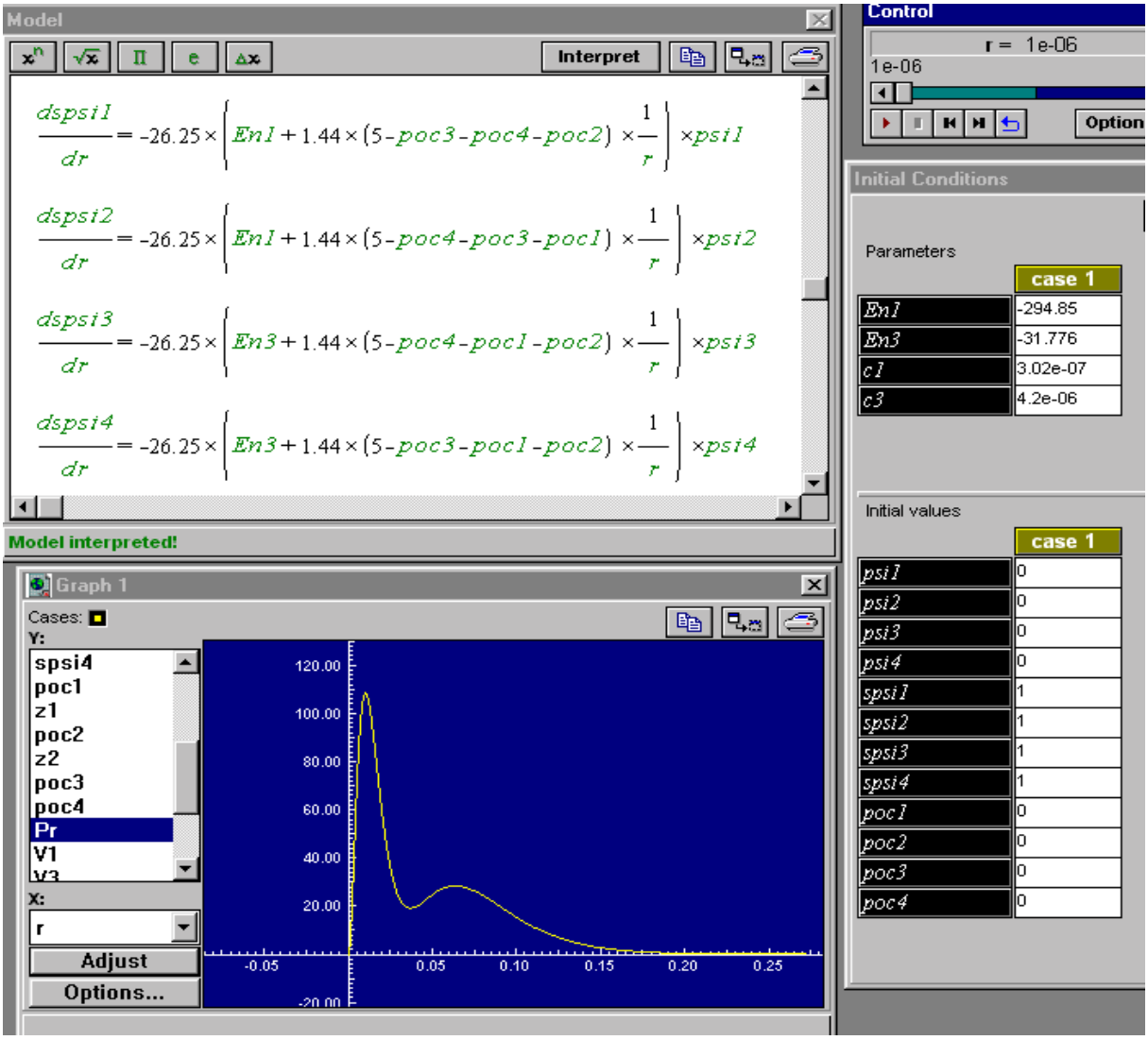
Abb. 4.5.7: Ausschnitte des Modells von Beryllium (Step: 0.0005))



- **Bor**

Beim einfachen Bor-Ion (Abb. 4.5.8) sinkt der Radius erwartungsgemäß noch etwas weiter. Die Gesamtenergie liegt bei -326.62 eV (Literaturwert -362. 67 eV)

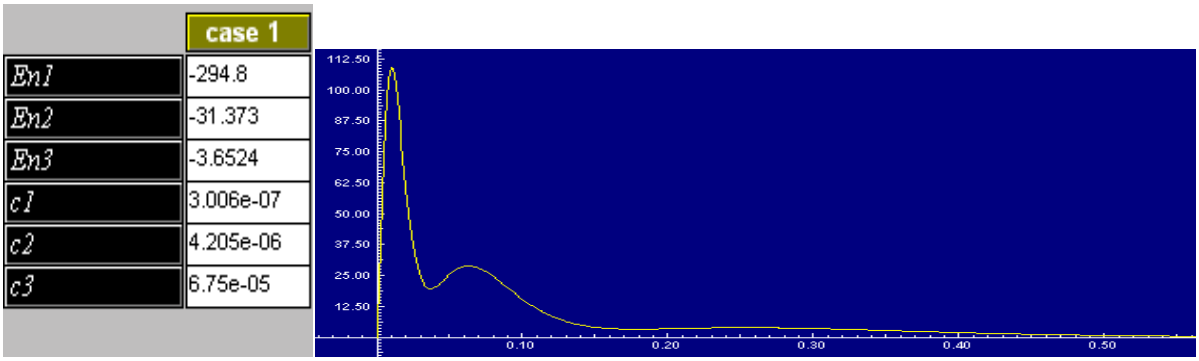
Abb. 4.5.8: Ausschnitte des Modells von Bor^{1+} (Step: 0.001, En1 = En2, En3 = En4)



Beim in den Zustand $(1s)^2(2s)^2(3s)$ angeregten Bor-Atom ergibt sich eine Gesamtenergie von -330 eV, die noch deutlich unter dem Literaturwert für den Grundzustand von Bor bei -371 eV liegt. Interessanter ist die durch die Besetzung des 3s-Zustands bedingte Ausdehnung des Atoms in den Bereich von 0.25 nm. Die radiale

Gesamtladungsdichteverteilung zeigt ein - wenn auch schwach ausgeprägtes - drittes relatives Maximum. Im Grundzustand würde ein solches mit einer deutlichen Radiuserweiterung verbundenes drittes Maximum erst bei Natrium auftreten (vgl. Abb. 4.5.6).

Abb. 4.5.9: Ausschnitte des Modells eines angeregten Bor-Atoms $(1s)^2(2s)^2(3s)$ (Step: 0.001))



- **energetische und geometrische Schalenstruktur**

Abb. 4.5.9 verdeutlicht den Zusammenhang zwischen der energetischen und einer geometrisch-anschaulichen Schalenstruktur der Atomhülle: Zu einer (energetischen) Schale werden alle Zustände gleicher Hauptquantenzahl n, welche die Energie in erster Näherung definiert, zusammengefasst. Die Schalen werden mit den Buchstaben K bis Q bezeichnet. 1s-Zustände gehören folglich zur K-Schale, 3s-Zustände zur M-Schale (vgl. Kap. 4.4.7). Da z.B. alle Elektronen in Zuständen mit n = 2 bzw. der L-Schale in erster Linie zum zweiten relativen Maximum der radialen Gesamtdichteverteilung beitragen, korrespondiert diese geometrisch-anschauliche "Zwiebelschale" der radialen Gesamtdichteverteilung zur energetischen L-Schale. In Abb. 4.5.9 gehören die drei erkennbaren relativen Maxima folglich zur K-, L-, und M-Schale.

Mit zunehmender Kernladungszahl rücken die geometrischen Schalen enger zusammen und näher an den Kern. Dieser Effekt drückt sich z.B. in den radialen Dichteverteilungen von Li, Be und Bor (s. oben), aber auch in Abb. 4.5.6 aus.

Bei räumlichen Verteilungsfunktionen verschwindet diese anschauliche Schalenstruktur in der Gesamtverteilung, lediglich beim H-Atom mit seinem einen Elektron bleibt sie erkennbar (vgl. Kap. 4.4.5).

4.6 Abschnitt 6: Einelektronensysteme II

Atome sind die Grundbausteine der Materie. Unter den Umweltbedingungen auf der Erde formieren sich die meisten Atome zu Molekülen (in Gasen und Flüssigkeiten) oder Festkörperstrukturen. Nur in Einzelfällen wie den Edelgasen findet man sie als monoatomares Gas. Im Folgenden wird untersucht, wie sich ein Molekül mit dem bisher dargestellten Modellierungsgerüst beschreiben und die Molekülbindung verstehen lässt.

Die Betrachtungen beschränken sich hier auf den einfachsten Fall des H_2^+-Molekülions. Die Behandlung von komplexeren atomaren Systemen ist generell mit dem Formalismus der SGL möglich, führt jedoch sehr schnell zu einem enormen mathematischen Aufwand. Einführende Überlegungen zu weiteren zweiatomigen Molekülen finden sich z.B. in Cassens (1992).

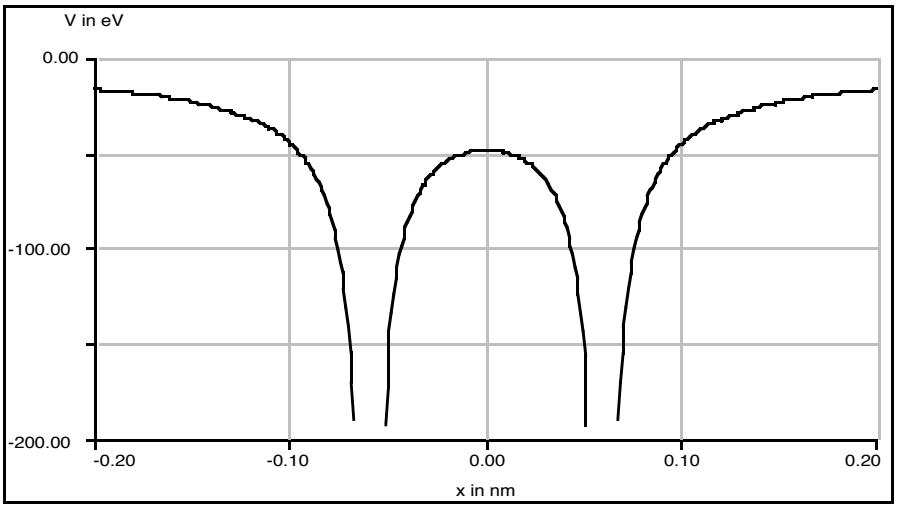
4.6.1 Das H_2^+- Molekülion: Potential und Molekülbindung

Das H_2^+-Molekülion besteht aus zwei Protonen im Abstand d als Atomkernen und einem gemeinsamen Elektron. Die Ladungsdichteverteilung des Elektrons erstreckt sich dabei um beide Kerne. Sie besitzt natürlich keine radiale Symmetrie mehr. Die Achse zwischen den beiden Kernen bildet eine ausgezeichnete Richtung im Raum.

Durch das Zentralpotential des Atomkerns war es bei Atomen möglich, radialsymmetrische Zustände mit einem relativ geringen Aufwand näherungsweise zu berechnen. Die Radialsymmetrie ermöglicht die Reduzierung des mathematischen Formalismus auf die Koordinate r. Ein Molekül besitzt diese Symmetrie wie gesagt nicht mehr. Zwei (oder mehrere) Atomkerne befinden sich in einem bestimmten Abstand voneinander. Allein dieser Umstand hat zur Folge, dass es keinen ausgezeichneten Nullpunkt der r- oder x- Achse mehr gibt. Bei den Atomen war dies der Atomkern. Man kann den Nullpunkt des Koordinatensystems zur Beschreibung eines zweiatomigen Moleküls in den Kern des einen oder des anderen Atoms setzen, die Mitte zwischen den beiden Kernen oder jeden beliebigen anderen Punkt wählen.

In Abb. 4.6.1 ist das Potential des H_2^+-Molekülions in eindimensionaler Form dargestellt. Die Potentialtiefe ist bei -200 eV abgeschnitten. Das Gesamtpotential ist die Summe der beiden Kernpotentiale. Der Nullpunkt ist hier in die Mitte zwischen beide Kerne gelegt, der Kernabstand d beträgt ca. 0.14 nm.

Abb. 4.6.1: Das Potential des H_2^+-Molekülions, eindimensional

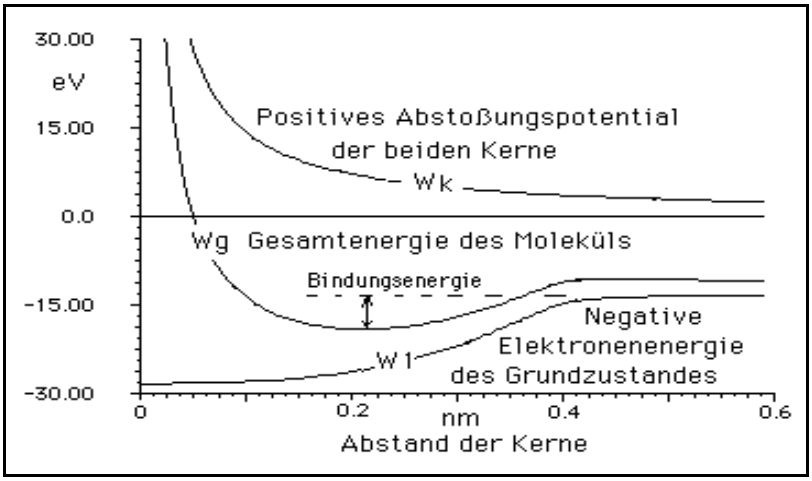


Bei großem Abstand d der Kerne (d > 0.6 nm) ist die gemeinsame ψ-Funktion des Elektrons etwa gleich der halben (!) Summe der ψ-Funktionen von zwei H-Atomen (es gibt ja nur ein Elektron). Man hat quasi zwei bzgl. des Atomkerns jeweils symmetrische Ladungsdichteverteilungen nebeneinander angeordnet. In der Mitte zwischen den Kernen wäre die Ladungsdichteverteilung aber fast Null. Es gibt praktisch keine Molekülbindung (s. unten).

Abb. 4.6.2 stellt die Bindungsenergie des Molekülions als Funktion des Kernabstands dar: Wird der Abstand d kleiner als etwa 0.4 nm, so sinkt die Elektronenenergie des Grundzustands gegenüber dem H-Atom deutlich ab. (Die Energie wird in dieser Graphik mit W abgekürzt.) Gleichzeitig wächst das positive Abstoßungspotential zwischen den Kernen. Aus der Summe beider Energien ergibt sich der Wert der Gesamtenergie. Diese Summe liegt in einem bestimmten Abstandsbereich unterhalb des Grundniveaus des H-Atoms von - 13.6 eV. Die Differenz zu - 13.6 eV bedeutet

eine Bindungsenergie für das Molekülion. Diese Bindung muss durch eine relativ hohe negative Raumladung zwischen den positiven Kernen bewirkt werden. Die ψ-Funktion des Elektrons muss zwischen den beiden Atomen entsprechend größere Werte annehmen (s. unten).

Abb. 4.6.2: Bindungsenergie des Molekülions und Kernabstand



Mit der Deutung der ψ-Funktion als statische Ladungsdichteverteilung ist die Molekülbindung unmittelbar verständlich. Würde man von einem winzigen, sich irgendwie um die Kerne bewegenden Elektron ausgehen, wäre eine stabile Molekülbindung hingegen vollkommen unplausibel.

Bei einem Kernabstand von etwa 0.2 nm ergibt sich die maximale Bindungsenergie. Sowohl für kleinere als auch für größere Abstände sinkt sie wieder.

4.6.2 Die Modellierung des H_2^+-Molekülions mit MODELLUS

Abb. 4.6.3 zeigt das (eindimensionale) Modell eines H_2^+-Molekülions auf Basis der SGL. Die Bezeichnung r für die laufende Variable wurde trotz fehlender Kugelsymmetrie beibehalten. Entscheidend sind die ab der dritten Zeile auftretenden Veränderungen gegenüber dem Modell des H-Atoms:

Die Atomkerne befinden sich an den Abständen r = a und r = b vom Nullpunkt der positiven r-Achse, d.h. links vom gesamten Ion (hier a > b) . Die Teilpotentiale sind bzgl. a und b symmetrisch. Dies erreicht man durch den Absolutbetrag abs von r-a bzw. r - b. Um an den Stellen r = a und r = b eine Division durch Null zu vermeiden, muss jeweils eine kleine Konstante ro, die sich nur an den Stellen a und b deutlich bemerkbar macht, zum Potential addiert werden. Der Wert von ro darf aber auch nicht zu klein gewählt werden, da an den Stellen a und b ansonsten sehr hohe Steigungsänderungen in ψ auftreten, die zu Problemen bei der schrittweisen numerischen Berechnung führen können. Für ro empfehlen sich Werte zwischen 0.001 nm und 0.0001 nm.

Die Gesamtenergie E_{Ges} des Molekülions ergibt sich aus der Summe der gefundenen Eigenenergien E_n und dem vom Abstand la - bl der Kerne abhängenden Abstoßungspotential V_{abst}.

Auf eine Berechnung und Darstellung von ein- und quasi dreidimensionalen ψ^2-Funktionen wird verzichtet. Die hier betrachteten physikalischen Aspekte lassen sich auch an den ψ-Funktionen diskutieren.

Abb. 4.6.3: Das Modell des H_2^+-Molekülions (im Original sind alle Zeilen untereinander)

$$\frac{dpsi}{dr} = spsi$$

$$\frac{dspsi}{dr} = -26.25 \times (En - V) \times psi$$

$$V = -1.44 \times \left(\frac{1}{ro + \mathbf{abs}(b - r)} + \frac{1}{ro + \mathbf{abs}(r - a)} \right)$$

$$Vabst = \frac{1.44}{\mathbf{abs}(b - a)}$$

$$Eges = Vabst + En$$

$$\frac{dcnorm}{dr} = psi^2$$

$$PSI = \frac{psi}{\sqrt{c}} \times \frac{1}{rab}$$

$$\mathbf{if}\left(r <= \frac{a}{2} + \frac{b}{2} \right) \mathbf{then}\ (rab = 10 \times ro + \mathbf{abs}(b - r))$$

$$\mathbf{if}\left(r > \frac{a}{2} + \frac{b}{2} \right) \mathbf{then}\ (rab = 10 \times ro + \mathbf{abs}(a - r))$$

Um zu Funktionen PSI zu gelangen, die den Lösungen einer dreidimensionalen SGL in etwa entsprechen, wird wiederum für jedes Atom eine Division durch r vorgenommen. Dazu wird in einer Näherung eine Variable rab definiert, die sich bis zum Mittelpunkt des Molekülions auf das Atom bei b und dann auf das Atom bei a bezieht. Der Faktor ro von 0.0001 nm wurde verzehnfacht, um PSI an den Stellen a und b nicht zu groß werden zu lassen, so dass sich noch sinnvolle graphische Darstellungen ergeben.

In Tab. 4.6.1 werden beispielhaft die beiden niedrigsten Zustände das Molekülions für Kernabstände von 0.6 und 0.2 nm berechnet. Legt man den Kern b weit genug vom Nullpunkt von r entfernt, kann man davon ausgehen, dass die bei der Modellierung des H-Atoms gegebene Startbedingung $\psi(0) = 0$ hier ebenfalls erfüllt ist. Die Startbedingung entspricht der Randbedingung, dass ψ für große r asymptotisch gegen Null geht. (Das H-Atom kann man natürlich ebenfalls auf diese Weise modellieren.)

Tab. 4.6.1: Parameter und einige Ergebnisse der modellierten Beispiele

Parameters	case 1	case 2	case 3	case 4
a	1.1	1.1	0.7	0.7
b	0.5	0.5	0.5	0.5
En	-15.981	-16.049	-17.545	-26.281
ro	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
c	167.53	158.63	71.23	2.17e+05

Step: 0.005 nm

Vabst (0.6) = 2.4 eV
Vabst (0.2) = 7.2 eV

Eges (0.6): - 13.58 eV , - 13.65 eV
Eges (0.2): - 10.35 eV , - 19.08 eV

Bei einem Kernabstand von 0.6 nm hat das Molekülion nach Abb. 4.6.2 keine Bindungsenergie. Betrachtet man die entsprechenden Werte in Tab. 4.6.1 liegt der tiefste Energiezustand für E_{ges} nur minimal unter dem Grundzustand des H-Atoms von -13.6 eV. Um einen direkten Vergleich zu haben, muss man allerdings das H-Atom ähnlich dem Molekülion modellieren, d.h. den Kern des H-Atoms an die Stelle r = b legen. Dies ist ohne weiteres möglich. Es ergeben sich keine relevanten Abweichungen. Demzufolge kann man bei d = 0.6 nm nicht mehr von einem stabilen Molekülion sprechen. Für d = 0.2 nm ergibt sich aus Tab. 4.6.1 für den tiefsten Zustand

hingegen eine Bindungsenergie von fast 5.5 eV. Man befindet sich im Bereich der Bindungslänge des stabilen H_2^+-Molekülions.

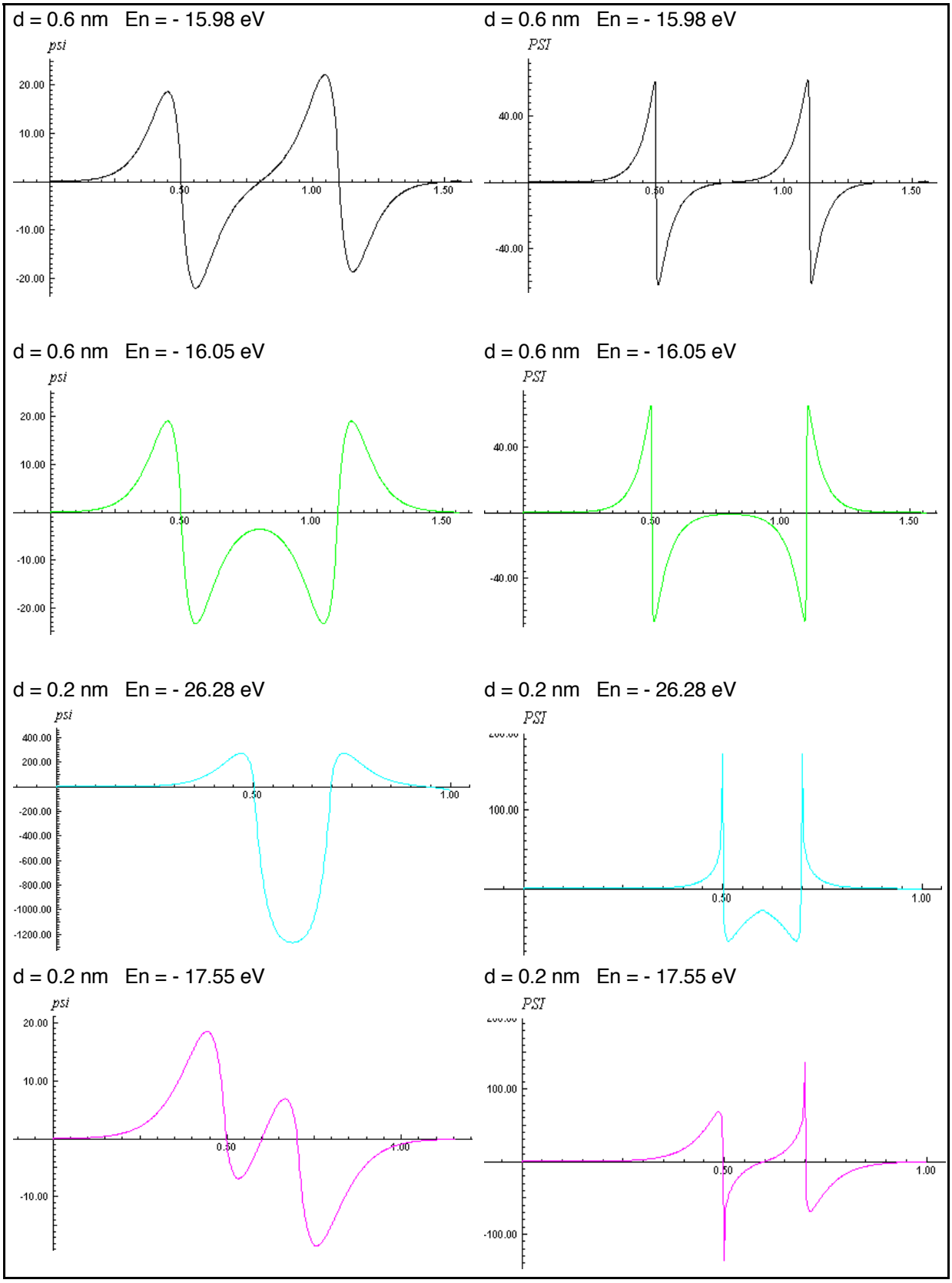
Abb. 4.6.4 zeigt die zugehörigen ψ-Funktionen sowohl bezogen auf eine eindimensionale SGL als auch näherungsweise für die dreidimensionale SGL eines räumlichen Molekülions. Die Lösungen der dreidimensionalen SGL stimmen bis auf den unerheblichen modellbedingten Vorzeichenwechsel an den Atomkernen qualitativ gut mit entsprechenden Darstellungen z.B. bei Haken & Wolf (1993, 409 f) überein. Die ψ-Funktionen bestätigen die oben aus den Energiewerten abgeleiteten Feststellungen.

Man erkennt in beiden Fällen einen bzgl. der Achse durch den Mittelpunkt des Molekülions symmetrischen und einen antisymmetrischen Zustand. Der symmetrische Zustand liegt energetisch tiefer und hat - wie man besonders deutlich im Fall d = 0.2 nm sieht - eine größeren Anteil der Ladungsdichteverteilung zwischen den Atomkernen. Es handelt sich beim niedrigsten, symmetrischen Zustand um einen bindenden Zustand, beim nächst höheren Zustand um einen sogenannten antibindenden Zustand.

An den Gesamtenergien der beiden jeweiligen Zustände erkennt man, dass der bindende Zustand unter dem Grundzustand des H-Atoms liegt, der antibindende liegt über dem Grundzustand des H-Atoms. Beim zweiatomigen System sind die entsprechenden Niveaus des H-Atoms in jeweils zwei Zustände aufgespalten. Dieser Effekt setzt sich beim Festkörper entsprechend fort (s. unten).

Betrachtet man die beiden eng benachbarten Zustände für d = 0.6 nm in der eindimensionalen Darstellung (Abb. 4.6.4 links), erkennt man, dass es sich auf beiden Seiten der Atomkerne jeweils ähnliche Anteile der Ladungsdichte befinden. Die Verteilungen ähneln noch sehr denen des H-Atoms. Beim symmetrischen, bindenden Zustand befindet sich nur wenig mehr Ladung zwischen den Atomkernen als beim antibindenden Zustand.

Abb. 4.6.4: ψ-Funktionen eindimensional ψ-Funktionen quasi dreidimensional



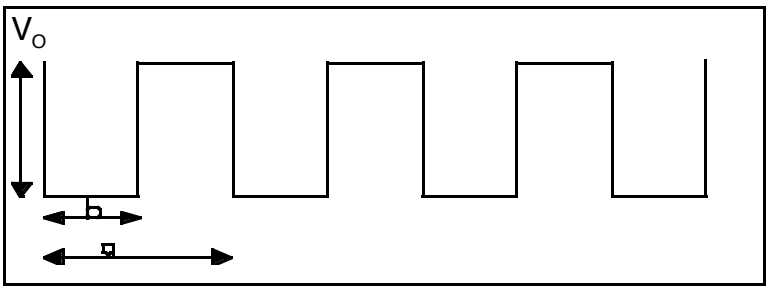
4.7 Abschnitt 7: Mehrelektronensysteme II

4.7.1 Grundlagen der Modellierung von Festkörpern

Ein Festkörper wird hier als System von positiven Ionen und den Valenzelektronen beschrieben, wobei die Ionen ein periodisches Strukturgerüst bilden und die Valenzelektronen sich in dem durch das Gerüst aufgespannten Raum verteilen. Es werden nur Zustände der äußeren, relativ schwach gebundenen Valenzelektronen untersucht, während die Rumpfelektronen zusammen mit den Kernen die positiven Ionen bilden. Aufgrund der großen Zahl der Valenzelektronen bei einem realen Festkörper kann für jedes dieser Elektronen in allen zu untersuchenden Zuständen näherungsweise das gleiche Potential angenommen werden, so dass ein Einelektronenansatz zur Lösung der SGL gerechtfertigt ist.

Bei vielen Festkörpern handelt es sich um räumlich isotrope Materialien, so dass eine eindimensionale Modellierung ausreichend ist, um ein Bild von den möglichen Eigenzuständen zu erhalten. Mit dem eindimensionalen Potentialtopfansatz werden auf der Ebene der Theorie die Ladungsdichteverteilung und Energieeigenwerte für verschiedene stationäre Zustände ermittelt. Näherungsweise wird das periodische Coulomb-Potential durch ein periodisches Rechteckpotential (Kroning-Penney-Potential) mit Minima an den Metallionen und Maxima in der Mitte zwischen zwei Ionen angenähert. Innerhalb eines Atomdurchmessers werden verschiedene Potentiale inner- und außerhalb des Atomrumpfs angesetzt (Stufenpotential), so dass der Verlauf des Coulomb-Potentials besser als mit einem einfachen Rechteckpotential angenähert wird.

Abb. 4.7.1: Kroning-Penney-Potential: Vo: Potentialschwelle
a: Abstand zweier Gitterionen; b: Ionenradius



Die Periodizitätslänge a ist durch die Gitterkonstante des Kristallgitters entlang der ausgezeichneten Achse unmittelbar bestimmbar, die Breite des Bereichs mit niedrigem Potential b wird mit dem doppelten Ionenradius des entsprechenden Metallions abgeschätzt:

- a und r_a: Der mittlere Abstand a zweier Atomkerne bei Raumtemperatur entlang einer Achse im Kristall entspricht dem Atomdurchmesser $2r_a$. Es wird der Kovalenzradius zugrunde gelegt: $a = 2r_a$
- b und r_i: Der Radius des Atomrumpfes wird mit dem Ionenradius r_i gleichgesetzt. Aus r_i wird die Breite des Potentialtopfes b nach $b = 2\ r_i$ bestimmt.
- Die Breite des Potentialwalls a - b wird nach $a - b = 2r_a - 2r_i$ bestimmt.

Die Höhe der Potentialstufen V_o ist im wesentlichen von der Ladung des Ions (gleichbedeutend mit der Zahl der Valenzelektronen pro Atom) und daneben von der relativen Größe des Atoms abhängig. Da diese beiden Parameter unmittelbar die Valenzelektronendichte und damit auch die Fermi-Energie bestimmen, könnte man die Höhe der Potentialschwellen über $^2/_3$ der Fermi-Energie (= Energie des höchsten Energieniveaus, das bei der Temeratur von 0 Kelvin noch besetzt ist) abschätzen. Wegen der einfacheren Durchschaubarkeit wird die Höhe der Potentialschwelle hier durch eine Berechnung auf der Basis der Coulomb-Potentiale von einzelnen Atomrümpfen gewonnen, obwohl die Ergebnisse evtl. etwas schlechter sind als bei der Annahme einer Potentialschwelle in der Höhe von $^2/_3$ der Fermi-Energie.

Berechnet man den Potentialverlauf über die Coulomb-Potentiale von Punktladungen, so kann zwar die Wahl der Bezugspunkte willkürlich erscheinen, der Charakter einer groben Abschätzung wird dadurch aber deutlicher .

Der Potentialverlauf wird für den Bereich außerhalb des Atomrumpfs durch die Addition der Coulomb-Potentiale V_1 und V_2 von zwei Punktladungen Q im Abstand $a = 2r_a$ ermittelt. Für den Bereich zwischen den beiden Punktladungen erhält man V(r) durch Addition der Colomb-Potentiale V_1 und V_2:

$$V_1(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q}{r}$$

$$V_2(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q}{2r_a-r}$$

$$V(r) = V_1 + V_2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{Q}{r} + \frac{Q}{2r_a-r}\right) \qquad (4.7.1)$$

An den zwei Bezugspunkten $2r_i = b$ und $2r_a = a$ werden die Potentiale V_i und V_a für die Ladung Q=1e berechnet. Das Potential V_i wird für das Innere des Atomrumpfs als konstant angesetzt und stellt den Nullpunkt dar. Die Differenz V_a-V_i dient zur Modellierung des Potentialwalls zwischen den Atomrümpfen, dessen Höhe durch

$$V_0 = 1/2\,(V_a - V_i) \qquad (4.7.2)$$

angenähert wird.

Es werden nur Hauptgruppenmetalle modelliert, bei denen alle Valenzelektronen zur äußeren Schale mit höchster Hauptquantenzahl gehören. Als Modellbeispiel für ein typisches Metall soll Natrium dienen. Natrium - wie die übrigen Alkalimetalle auch - liegt als Kristall im kubisch raumzentrierten Gitter vor. Die eindimensionale Modellierung erfolgt entlang einer Achse mit niedrigstmöglichen Kernabständen. Die Daten anderer Alkali- und Erdalkalimetalle werden zum Vergleich angegeben.

Es ergeben sich die folgende Parameter für die Alkalimetalle und Magnesium:

Tab. 4.7.1: Parameter für Potentialtopfmodelle einiger Hauptgruppenmetalle

Metall	r_a in nm	r_i in nm	a in nm	b in nm	a-b in nm	V_a in eV	V_i in eV	V_0 in eV
Lithium	0.152	0.076	0.304	0.152	0.152	18.95	25.26	3.16
Natrium	0.186	0.102	0.372	0.204	0.168	15.48	19.45	1.98
Cäsium	0.266	0.167	0.532	0.334	0.198	10.83	12.30	0.74
Magnesium	0.160	0.072	0.320	0.144	0.176	18.00	25.81	3.90

4.7.2 Ein Potentialtopfmodell für Festkörper mit MODELLUS

Quantitative eindimensionale Potentialtopfmodelle für Festkörper wie das Kröning-Penney-Modell nach Kap. 4.7.1 können mit MODELLUS - wenn auch nur in begrenztem Rahmen - erstellt werden. Spezielle vorgefertigte Simulationssoftware erweist sich hier häufig als ungeeignet. Die Vorteile von MODELLUS bestehen vor allem in der relative hohen Transparenz des Modellierungsverfahrens, da man von der gleichen SGL ausgeht, die bereits bei Atomen und Molekülen realisiert wurde, und in der hier benötigten großen Bandbreite in der Wahl der Modellparameter. Die Nachteile bestehen u.a. im relativ großen Schreibaufwand bei der Modellierung, im großen Zeitaufwand bei der selbsttätigen Eigenwertsuche und in der begrenzten parallelen graphischen Darstellungskapazität von MODELLUS.

Es ist natürlich ebenfalls möglich in MODELLUS entsprechend dem H_2^+-Molekülion weitere Coulomb-Potentialtöpfe aneinanderzureihen. Für H-Potentiale gibt es dann allerdings in der Realität kein Bezugsobjekt mehr. Systeme aus höheren Atomen mit mehreren Elektronen sind mit MODELLUS nicht mehr zu handhaben. Näherungen führen dann auf Rechteckpotentiale.

Am Beispiel eines gemäß Tab. 4.7.1 gestalteten Potentialtopfmodells für Natrium können die oben dargestellten Grundlagen umgesetzt und die Vor- und Nachteile von MODELLUS veranschaulicht werden.

Abb. 4.7.2a beinhaltet neben den schon aus den vorangegangenen Kapiteln vertrauten Modellgleichungen einen über mehrere if-Bedingungen realisierten Rechteck-Potentialverlauf für ein einzelnes Na-Atom als Element eines Festkörpers. Die Abb. 4.7.2b und c zeigen nur noch das für zwei bzw. vier Atome erweiterte Potential. Mit jedem Atom kommen zwei weitere if-Bedingungen hinzu.

Will man die Aufspaltung zweier Energieniveaus des einzelnen Atoms in zwei von je vier Niveaus gebildete und durch eine Energielücke getrennte Energiebänder bei vier Atomen zeigen, müssen mindestens drei der acht auftretenden Niveaus in einem separaten Modell berechnet werden. Denn in MODELLUS lassen sich maximal fünf

Zustände gleichzeitig darstellen und speichern. Für Potentialtöpfe aus mehr als fünf Atomen ist MODELLUS daher kaum geeignet.

Abb. 4.7.2: Potentialtopfmodell für ein, zwei und vier Natrium-Atome

a

$$\frac{dpsi}{dr} = spsi$$

$$\frac{dspsi}{dr} = -26.25 \times (En - V) \times psi$$

if$(r < 0.298)$ **then** $(V = 0)$

if$(r >= 0.298)$ **and** $(r < 0.4)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 0.4)$ **and** $(r < 0.568)$ **then** $(V = -19.45)$

if$(r >= 0.568)$ **and** $(r < 0.670)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 0.670)$ **then** $(V = 0)$

$$\frac{dcnorm}{dr} = psi^2$$

$$Pr = \frac{psi^2}{c}$$

b

if$(r < 0.298)$ **then** $(V = 0)$

if$(r >= 0.298)$ **and** $(r < 0.4)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 0.4)$ **and** $(r < 0.568)$ **then** $(V = -19.45)$

if$(r >= 0.568)$ **and** $(r < 0.772)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 0.772)$ **and** $(r < 0.940)$ **then** $(V = -19.45)$

if$(r >= 0.940)$ **and** $(r < 1.042)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 1.042)$ **then** $(V = 0)$

c

if$(r < 0.298)$ **then** $(V = 0)$

if$(r >= 0.298)$ **and** $(r < 0.4)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 0.4)$ **and** $(r < 0.568)$ **then** $(V = -19.45)$

if$(r >= 0.568)$ **and** $(r < 0.772)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 0.772)$ **and** $(r < 0.940)$ **then** $(V = -19.45)$

if$(r >= 0.940)$ **and** $(r < 1.144)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 1.144)$ **and** $(r < 1.312)$ **then** $(V = -19.45)$

if$(r >= 1.312)$ **and** $(r < 1.516)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 1.516)$ **and** $(r < 1.684)$ **then** $(V = -19.45)$

if$(r >= 1.684)$ **and** $(r < 1.786)$ **then** $(V = -17.47)$

if$(r >= 1.786)$ **then** $(V = 0)$

Tab. 4.7.2: Ermittelte Eigenwerte für Natrium (in eV) bei einer Schrittweite von 0.005 nm

Ein Atom	Zwei Atome		Vier Atome			
- 17.070	- 17.944	- 16.732	- 18.291	- 17.871	- 17.210	- 16.616
- 11.166	- 13.266	- 9. 735	- 14.306	- 12.802	- 10.926	- 8.734

Abb. 4.7.3 stellt die Potentialverläufe zusammen mit den Energieniveaus graphisch dar. Sie veranschaulicht die bereits an den Zahlen erkennbare im Verhältnis zur Breite

des zweiten Bandes von ca. 5.6 eV relativ schmale Lücke von ca. 2.3 eV. Dies liegt daran, dass die innere Potentialtopfschwelle V_O relativ niedrig im Vergleich zum Topfboden ist. Die höheren Zustände unterscheiden sich nur noch unwesentlich von Zuständen in einem einfachen Rechteck-Potentialtopf mit endlich hohen Wänden, in dem keine Bänderstruktur auftritt. Die Energieniveaus liegen dort nach oben hin lediglich zunehmend dichter. Man erkennt ebenfalls den bei der Aufspaltung der Niveaus auftretenden Effekt der Absenkung bzw. Anhebung von jeweils der Hälfte der Niveaus bzw. des Ausgangsniveaus. (In Abb. 4.7.3.c wurden die Graphiken aus zwei getrennten Modellen zusammenkopiert.)

Abb. 4.7.3: Potentialtöpfe und Energieniveaus für Natrium

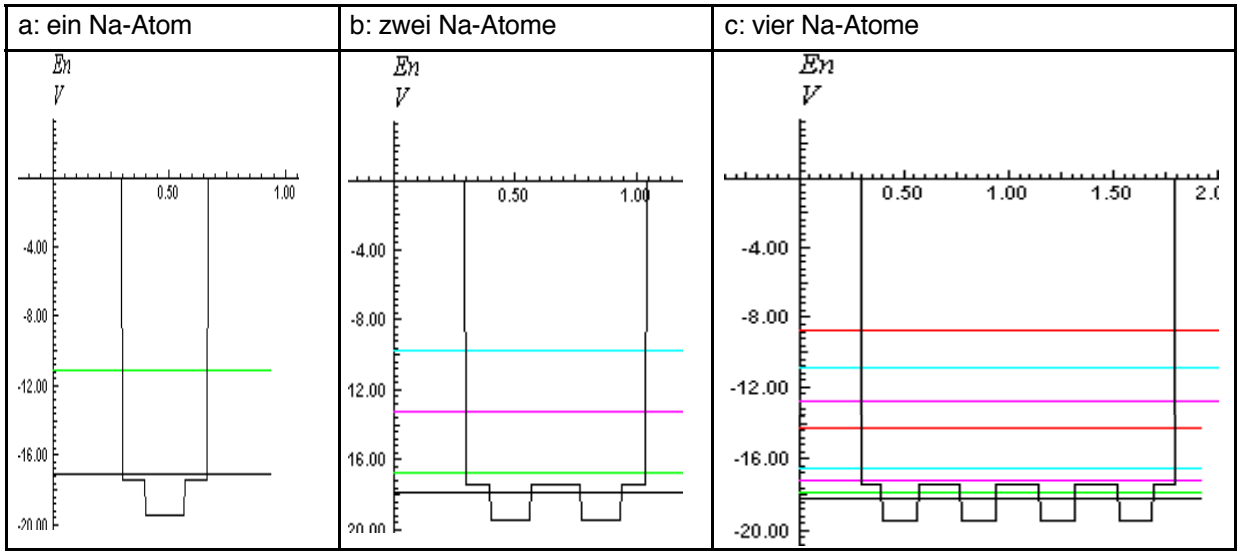
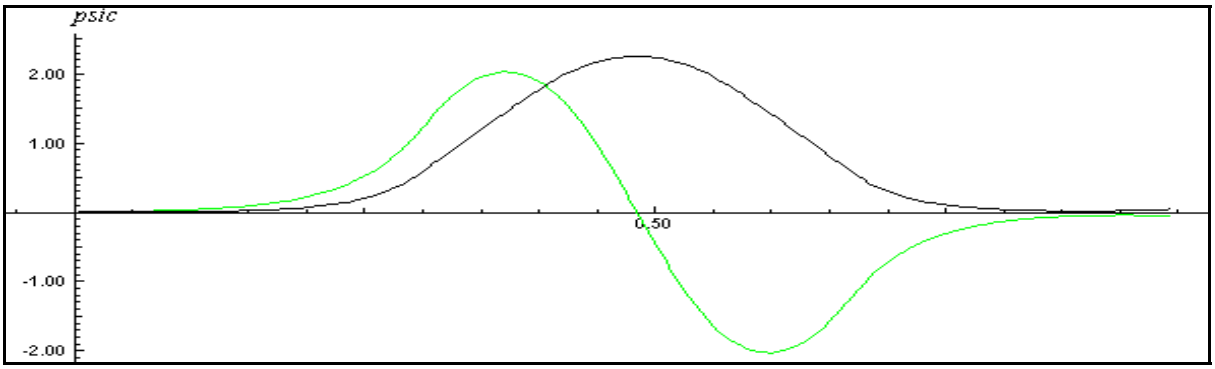


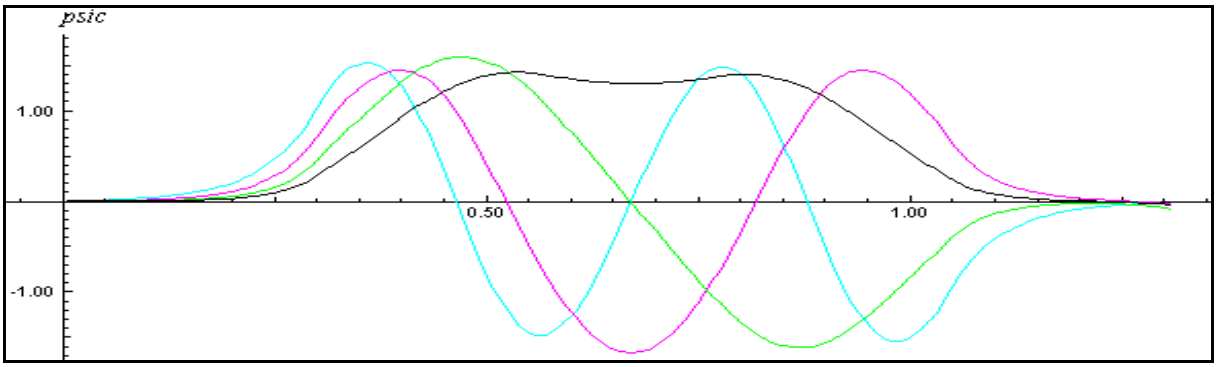
Abb. 4.7.4 zeigt die entsprechenden Zustandsfunktionen ψ, Abb. 4.7.5 die Dichteverteilungen ψ^2 (nur für die tieferen Zustände). Von Zustand zu Zustand wächst die Zahl der Knoten um einen. Daran sieht man auch, dass man bei der Modellierung keine Zustände übersprungen hat. Bei den niedrigsten Zuständen, die noch im Bereich der Schwelle des Potentialtopfs liegen, spiegelt sich diese Struktur des gesamten Topfs im Kurvenverlauf. Das beim Molekülion bereits erkennbare abwechselnde Auftreten von bzgl. der Topfmitte symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen setzt sich systematisch fort.

Abb. 4.7.4: Die Zustandsfunktionen ψ zu den für Natrium berechneten Energieniveaus

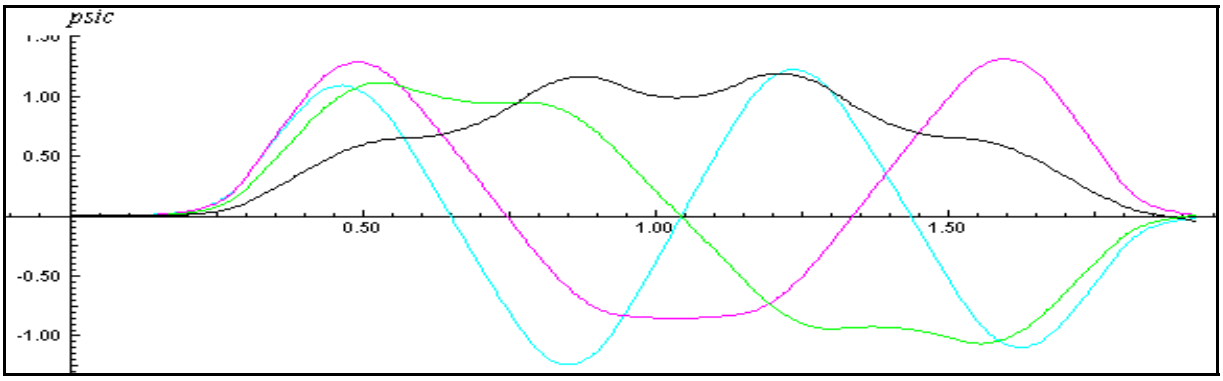
a: ein Na- Atom, Kern bei r = 0.48 nm



b: zwei Na-Atome, Kerne bei r = 0.48 und 0.85 nm



c: vier Na- Atome (Niveau 1 - 4 oben, Niveau 5 - 8 unten), Kerne bei r = 0.48 ; 0.85 ; 1.22 und 1.59 nm



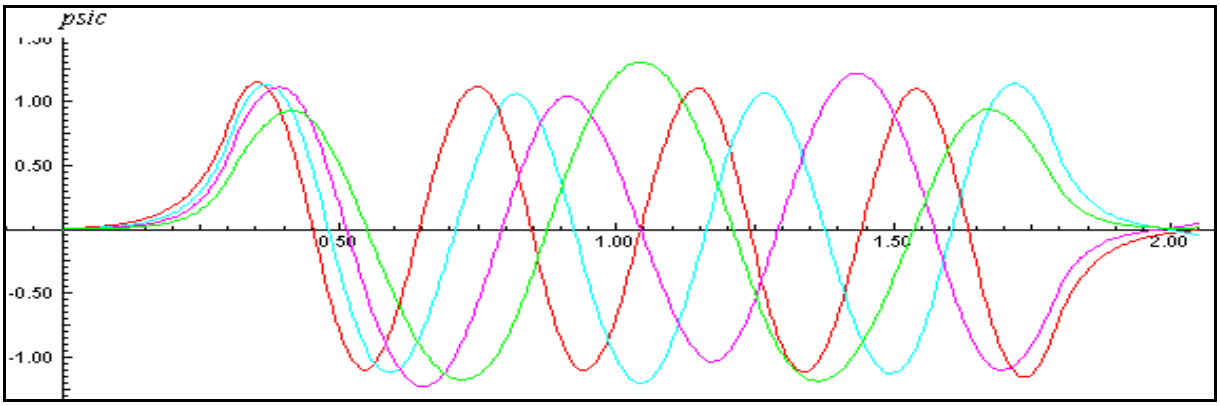
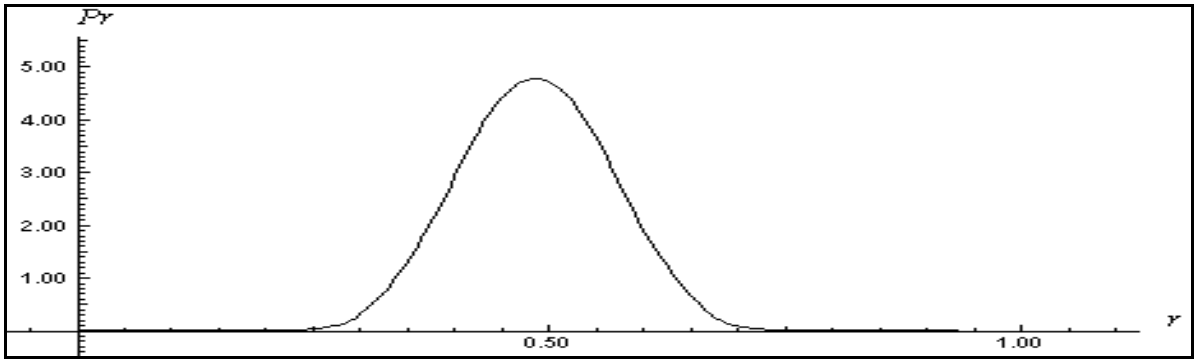
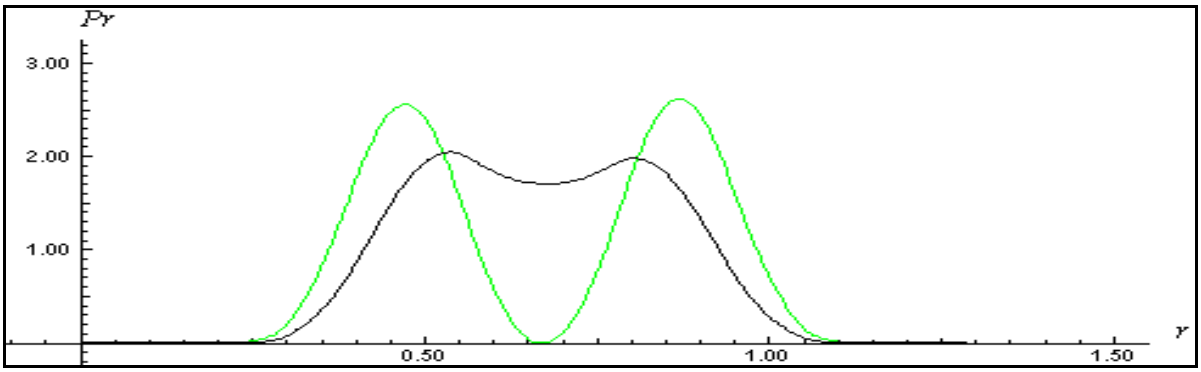


Abb. 4.7.5: Die Dichteverteilungen ψ^2 zu den für Natrium berechneten Energieniveaus

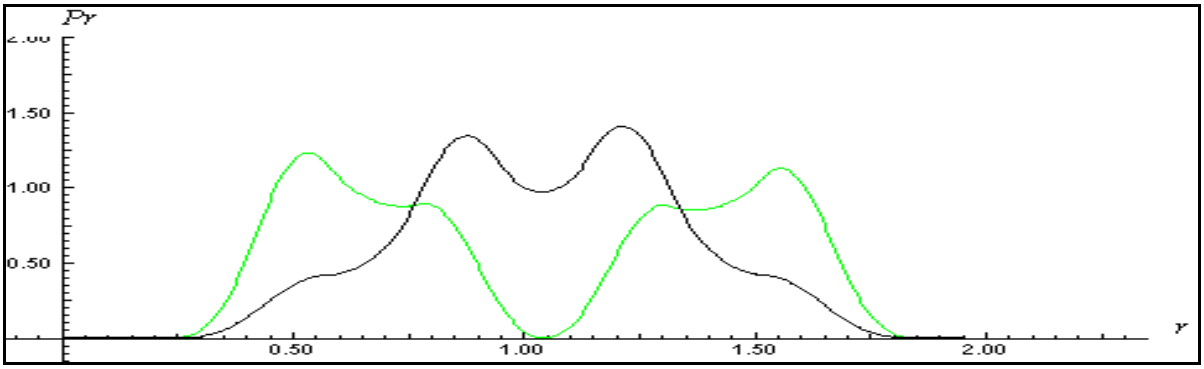
a: ein Na- Atom, Kern bei r = 0.48 nm

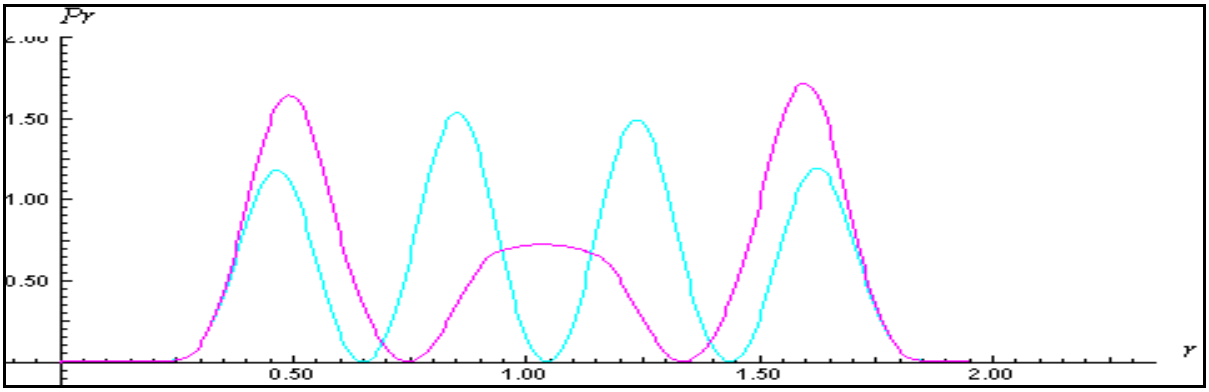


b: zwei Na-Atome, Kerne bei r = 0.48 und 0.85 nm



c: vier Na-Atome (Niveau 1 und 2 oben, 3 und 4 unten), Kerne bei r = 0.48 ; 0.85 ; 1.22 und 1.59 nm





4.7.3 Modellierung und physikalische Eigenschaften

Zur Interpretation der Ergebnisse muss man besetzte von unbesetzten Zuständen unterscheiden. Bei einem Festkörper, bei dem jeder Gitterbaustein die gleiche Anzahl von Elektronen zum Gesamtsystem beiträgt, kann es nur volle, halbvolle oder leere Bänder geben. Vergleicht man das einzelne Atom mit dem Festkörper, so sind im Festkörper genauso viele Bänder besetzt, wie im Atom einzelne Zustände besetzt sind. Bei einem Metallatom mit einem Valenzelektron ist die äußerste Schale nur mit einem Valenzelektron einfach besetzt. Beim entsprechenden Festkörper ist das entsprechende erste Band nur halb besetzt.

- **chemische Bindung**

Berücksichtigt man nur den energetischen Aspekt, so wird eine Bindung eintreten, wenn die Gesamtenergie des Festkörpers niedriger ist als die des freien Atoms. Die Modellierung zeigt, dass diese Voraussetzung zumindest für die Energie der Elektronen gegeben ist: Da nur die untere Hälfte des ersten Bandes besetzt wird, liegen alle Energieniveaus des Festkörpers unter dem des freien Atoms. Wiegt dieser Gewinn an elektronischer Energie die bei einem Festkörper zusätzlich auftretende Coulomb-Abstoßung auf, so kann eine Bindung eintreten. Berücksichtigt man auch die Dichteverteilung, spricht auch die Erhöhung der Ladungsdichte in den Bereichen zwischen den Ionen gegenüber dem Atom für eine Bindung. Die erhöhte Ladungsdichte zwischen den Ionen trägt zur Abschirmung der Ionen bei und vermindert ihre Coulomb-Abstoßung. Quantitativ zutreffende Ergebnisse können mit dem eindimensionalen Ansatz insbesondere hinsichtlich der Energie nicht erwartet werden können.

- **mechanische Eigenschaften**

Metalle sind u.a. durch Biegsamkeit gekennzeichnet, die sich erklären lässt, wenn man von einem mindestens zweidimensionalen Gitter ausgeht. Am Gesamtsystem ändert sich nur in den Randbereichen etwas, wenn eine Kristallebene gegen die benachbarte um einen Atomdurchmesser a verschoben wurde. Im Innern ist weder eine Änderung

des Potentialverlaufs noch der Eigenfunktion feststellbar. Die Zustände vor und nach der Verformung sind zwar energetisch gleichwertig, der Prozess der Verformung selbst erfordert aber eine Aktivierungsenergie. Während des Verformungsprozesses steigen die CoulombAbstoßungen der Ionen an, die Bindung zwischen Teilbereichen wird abgeschwächt. Bei einem biegsamen Stoff wird die Coulomb-Abstoßung der beiden Teilkristallite zu jedem Zeitpunkt durch die Absenkung der elektronischen Energie kompensiert. Bei einem spröden Stoff wäre dies nicht der Fall, so dass er unter einer Scherbelastung zerbrechen würde.

- **optische Eigenschaften**

Grundsätzlich können Aussagen zu potentiell möglichen optischen Übergängen getroffen werden. Inwieweit diese Übergänge tatsächlich zu optischer Absorption führen, wie stark und breit die Absorptionsbanden sein werden, kann nicht allein aus der Modellierung erklärt werden. Jeder Übergang zwischen einem besetzten und einem unbesetzten Zustand ist im Prinzip möglich.

Ein Metalldämpfe, z.B. Natriumdampf, zeichnet sich durch intensive und schmalbandige Absorptionen und Emissionen im sichtbaren Teil des Spektrums aus. Der Feststoff Natrium absorbiert und emittiert sehr breitbandig über den gesamten Teil des infraroten und sichtbaren Spektrums. Erst im Ultravioletten treten Absorptionslücken auf. Bei einem halbbesetzten Band - wie es für Natrium der Fall ist - ist eine quasikontinuierliche Absorption und Emission über einen Energiebereich von der Breite des Valenzbandes möglich, womit sowohl der Bereich des infraroten als auch des sichtbaren Spektrums abgedeckt wird. Das Auftreten einer Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband erklärt unmittelbar die Absorptionslücke im Ultravioletten, die bei Übergängen zwischen Valenz- und Leitungsband auftritt.

- **elektrische Eigenschaften**

Der zeitabhängige Vorgang der elektrischen Leitungsvorgänge ist mit einer stationären Betrachtung nicht erfassbar. Die Voraussetzungen, die ein Mikrosystem aufweisen muss, damit das makroskopische Material leitfähig sein kann, sind aber

bekannt. Voraussetzung für einen Ladungstransport ist die Beschleunigung der Elektronen durch Energieaufnahme. Damit Elektronen schon bei geringer thermischer Anregung und geringen äußeren Feldern anregbar sind, müssen in nur geringem Abstand von dem höchsten besetzten Zustand unbesetzte Zustände vorhanden sein. Dieses ist bei Systemen mit halbbesetzten Bändern (Metalle mit ungerader Valenzelektronenzahl pro Atom) immer der Fall.

Liegen Stoffe mit einer geraden Anzahl von Valenzelektronen pro Atom vor, erhält man bei einer eindimensionalen Modellierung immer eine Bandlücke zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen, so dass man erwarten sollte, dass alle diese Stoffe elektrische Nichtleiter sind. Dies widerspricht aber der Erfahrung: Auch Metalle mit zwei Valenzelektronen pro Atom, d.h. vollbesetztem Valenzband, sind gute Leiter. zur Erklärung müßte die Modellierung auch die y- und z-Komponente der Eigenzustände berücksichtigen. Dabei würde deutlich, das es Bänder geben kann, die energetisch mit den besetzten Bändern überlappen. Dadurch kann es auch bei Stoffen mit vollbesetzten Bändern zu elektrischer Leitfähigkeit kommen.

Photoleitfähigkeit kann erklärt werden, indem optische Anregung die Voraussetzungen für Leitfähigkeit schafft. Die Anregung der Valenzelektronen über eine schmale Bandlücke hinweg zeigt die vorhergesagte Charakteristik: Die Breite der Bandlücke ist verantwortlich für die Grenzfrequenz, oberhalb der Photoleitfähigkeit beobachtet wird.

- **Vergleich verschiedener Festkörper**

Eine Modellierung verschiedener Festkörper mit dem Potentialtopfansatz läuft auf die Variation der Periodizitätslänge und der Breite sowie Höhe der periodischen Potentialbarrieren hinaus. Dabei lassen sich folgende Ergebnisse der Modellierung für Systeme mit gleicher Anzahl an Atomen halbquantitativ zusammenfassen:

- Je größer die Periodizitätslänge, desto niedriger werden die Eigenwerte und desto dichter liegen sie beieinander.
- Je höher und breiter die Potentialbarrieren, desto schmaler werden die erlaubten Energiebänder.
- Je höher und breiter die Potentialbarrieren, desto ähnlicher wird die Ladungsdichteverteilung in den einzelnen Bereichen niedrigen Potentials.

In Verbindung mit dem stoffklassenspezifischen Verhalten der Feststoffe bedeutet dies:

- Alle **Alkalimetalle** zeigen ähnliche Stoffeigenschaften: sie sind weiche, biegsame Metalle mit silbrigem Glanz, sie sind gute elektrische Leiter. Ihre Bindungsenergien sind vergleichbar. Sie lassen sich durch ein periodisches Potential mit relativ niedrigen Barrieren, die genauso breit sind wie die Potentialminima, modellieren. Im Ergebnis weisen sie alle relativ breite Energiebänder auf, nur das erste Band ist halb besetzt. Die Ladungsdichteverteilung ist schwach periodisch.
- **Metalle mit mehreren Valenzelektronen** und damit einer höheren Ladung der Gitterionen weisen geringere Ionenradien und höhere Fermi-Energien auf. In der Modellierung wird dies durch breitere und geringfügig höhere Potentialbarrieren berücksichtigt. Diese Metalle weisen eine etwas ausgeprägtere Bänderstruktur auf als Alkalimetalle, allerdings kann die eindimensionale Modellierung nicht das Auftreten von Bandüberschneidungen bedingt durch die Dreidimensionalität des realen Kristalls erfassen. Elastische Verformbarkeit und Biegsamkeit dieser Metalle sind niedriger als die der Alkalimetalle. Die insgesamt höhere Ladungsdichte, ihre ausgeprägtere Periodizität und die Coulomb-Abstoßung wirken einer Veränderung der Gitterkonstante entgegen.
- Typische **Halbleiter** wie Silizium und Germanium zeigen erst bei Energiezufuhr elektrische Leitfähigkeit und absorbieren ab dem sichtbaren Spektralbereich. Die gerade Anzahl von Valenzelektronen bewirkt relativ kleine, hoch geladene Gitterionen und eine höhere Fermi-Energie. In der Modellierung wird dies durch relativ ausgeprägte Potentialbarrieren großer Breite und mittlerer Höhe berücksichtigt. In der Konsequenz sind die eng beieinander liegenden Zustände des ersten Bandes durch relativ hohe Ladungsdichten im Bereich der Potentialminima gekennzeichnet. Sie sind durch eine Energielücke von denen des zweiten Bandes getrennt. Die Zustände im zweiten Band weisen höhere Ladungsdichten im Bereich der Potentialbarrieren auf.
- **Salze** lassen sich für die Modellierung in die verschiedenen, positiven Gitterionen und die Valenzelektronen unterteilen. Das NaCl-Gitter z.B. besteht aus Gitterionen Na^{+}, den Gitterionen Cl^{7+} und acht Valenzelektronen pro Gitterbaustein. Das Potential, das auf ein einzelnes Valenzelektron wirkt, ist im Bereich der hoch geladenen, kleinen Chlorionen sehr niedrig und hoch im Bereich der Natriumionen. Vereinfachend werden für den gesamten Einflussbereich eines Ions (= Ionenradius) konstante Potentiale angenommen. In der Simulation erhält man entsprechend eine hohe Ladungsdichte im Bereich der Chlorionen und eine sehr geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Bereich der Natriumionen. Aufgrund der hohen Potentialunterschiede sind das höchste besetzte und das niedrigste unbesetzte Band durch eine breite Energielücke getrennt, alle Valenzbänder sind durch dicht beieinander liegende Energieeigenwerte der einzelnen Zustände gekennzeichnet. Salze sind aufgrund der hohen Bandlücke und der geringen Bandbreite bei voll besetzten Valenzbändern elektrische Nichtleiter. Optische Absorption zeigen sie erst bei höheren Frequenzen. Die Verformbarkeit ist aufgrund der starken Periodiziät der Ladungsverteilung sehr gering.

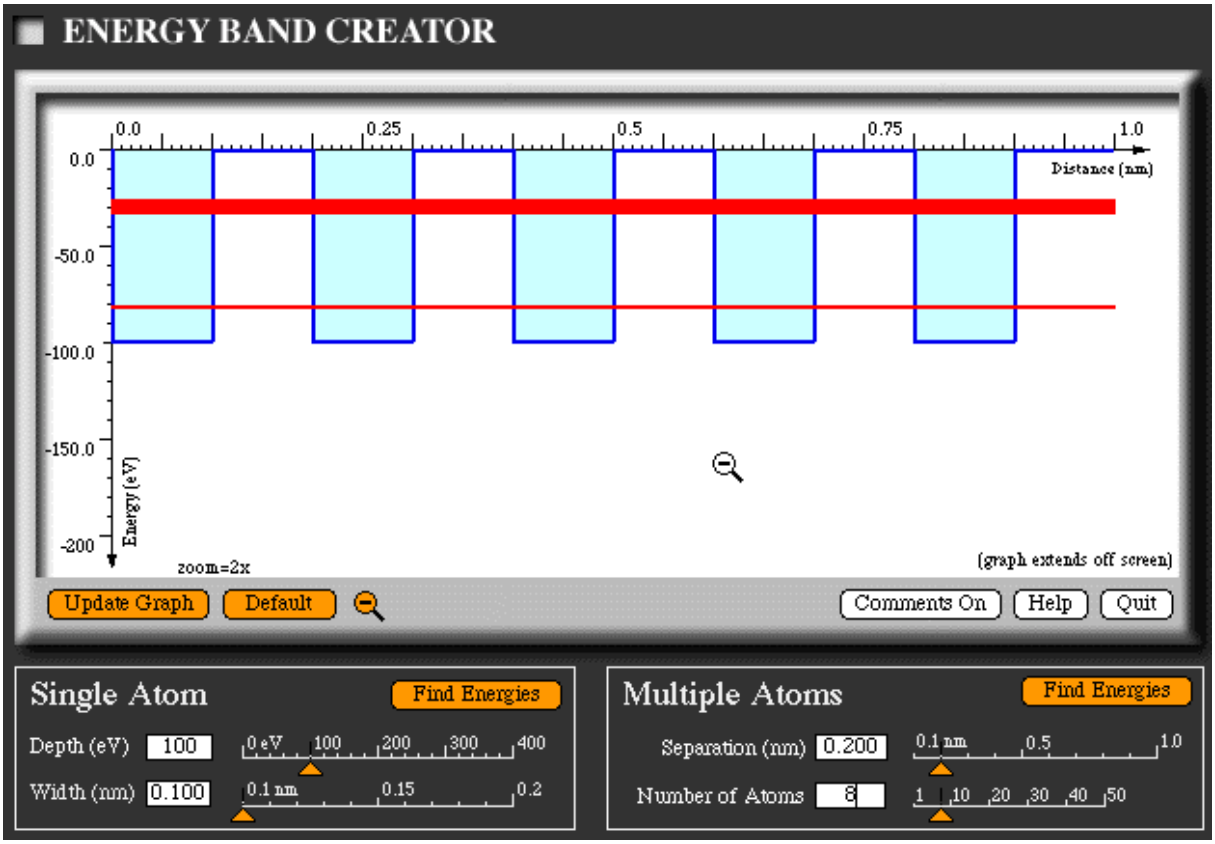
4.7.4 Die Simulationssoftware ENERGY BAND CREATOR

Die oben skizzierten Effekte der Aufspaltung von Energieniveaus und der Herausbildung einer Bänderstruktur können z.B. mit der Simulationssoftware ENERGY BAND CREATOR aus dem Programmpaket VISUAL QUANTUM MECHANICS relativ schnell , einfach und deutlich demonstriert werden.

In Abb. 4.7.6 sind die charakteristischen Eigenschaften der Software bereits zu erkennen: Es können bis zu 50 einfache Rechteck-Potentiale veränderbarer Tiefe und Breite in definierbarem Abstand aneinandergereiht werden. Die Tiefe des einzelnen Topfes beträgt maximal - 400 eV, die Breite liegt zwischen 0.1 und 0.2 nm, der Abstand zwischen 0.1 und 1.0 nm.

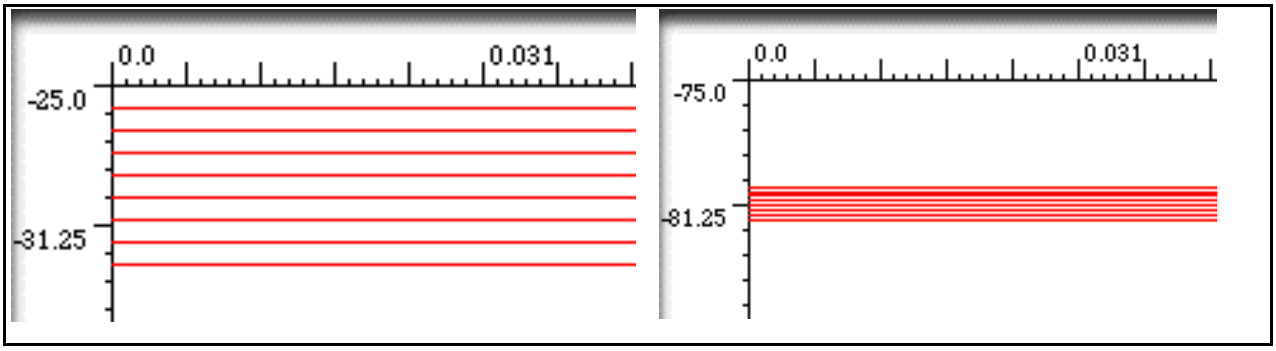
Im abgebildeten Beispiel wurden acht einzelne Töpfe mit einer Potentialtiefe von - 100 eV aneinandergereiht. Wegen der eingestellten zweifachen Vergrößerung sind nur noch fünf Töpfe dargestellt.

Abb. 4.7.6: Die Simulationssoftware ENERGY BAND CREATOR



Erhöht man die Vergrößerung weiter bis zum maximalen Faktor 16, ist auch im tiefsten Energieband (rechts) noch eine innere Struktur zu erkennen. Die Bänderstruktur tritt deutlich hervor, die Potentialschwelle zwischen einzelnen Teiltöpfen jeweils der Tiefe des gesamten Topfes entspricht. Breite und Abstand der Bänder sind genau bestimmbar.

Abb. 4.7.7: Die Energiebänder aus Abb. 4.7.6 in maximaler 16facher Auflösung



Das Programm ist sehr einfach und schnell zu handhaben. Die Nachteile bestehen darin, dass die Potentialbarrieren zwischen einzelnen Atomen nicht verändert werden können. Ein Potentialverlauf wie er oben für das Natrium beschrieben wurde, ist mit dieser Software nicht zu realisieren. Ein weiterer Nachteil besteht darin, dass Potentialtöpfe mit einer Tiefe von bis zu - 25 eV, wie sie oben diskutiert wurden, nicht befriedigend dargestellt werden können, da nur noch das tiefste Energieband realisiert wird.

Die Zustandsfunktionen können mit diese Software nicht dargestellt werden.

Für den Mac gibt es schon seit längerem u.a. das cT-Programm -QUANTUM WELL mit dem sich u.a. auch Kroning-Penney-Potentiale bis - 10 eV Tiefe "von Hand " konstruieren lassen und das auch die Zustandsfunktionen wiedergibt.

5 Schülervorstellungen und Unterrichtsverlauf

5.1 Schülervorstellungen in der Atom- und Quantenphysik

Umfangreichere empirische Untersuchungen zu Schülervorstellungen auf dem Gebiet der Atom- und Quantenphysik sind, verglichen etwa mit der Mechanik oder der E-Lehre, relativ dünn gesät. In der Sekundarstufe II wurden systematische Untersuchungen zu typischen konzeptuellen Schwierigkeiten von Schülern in der Atom- und Quantenphysik sowie individuellen Konzepten und Lernprozessen bisher nur an der FU-Berlin (Lichtfeldt 1992) und an der Universität Bremen (Bethge 1988, Petri 1996) durchgeführt. Es lässt sich feststellen, dass die Ergebnisse, soweit es die typischen Schwierigkeiten der Schüler mit quantenphysikalischen Konzepten und Vorstellungen betrifft, weitestgehend konsistent sind, so dass sich in diesem Bereich mittlerweile ein recht klares Bild ergibt. Hinsichtlich der für den Unterricht zu ziehenden Konsequenzen ergeben sich ebenfalls einige grundsätzliche Übereinstimmungen.

Im Folgenden werden die wichtigsten Untersuchungsergebnisse zu atom- und quantenphysikalischen Schülervorstellungen und den damit verknüpften Lernschwierigkeiten gegliedert nach zentralen Begriffen zusammengefasst.

- **Modell und Wirklichkeit**

Schüler neigen dazu, nicht zwischen Modell und Wirklichkeit zu unterscheiden und Eigenschaften makroskopischer Körper und diesbzgl. Alltagserfahrungen auf Quanten und Atome zu übertragen. In einem Unterricht zur Atomphysik, der über das Bohrsche Atommodell hinausgeht, lernen Schüler widersprüchliche Modelle kennen, und sie können nicht mehr alle Phänomene mit einem einzigen Modell erklären. Dies kann zu Frustrationen und zur Distanzierung vom Realitätsanspruch an Modelle führen.

Bei Bethge (1988), der das Vorverständnis von Schülern zur Atomphysik in Form von expliziten Konstrukten, die die typischen Schülervorstellungen auf diesem Gebiete repräsentieren, formuliert, zeigt sich dies in den sich widersprechenden Vorverständniselementen M1 und M2.

(M1) Modelle werden nicht als "Bilder" der Realität aufgefasst.

(M2) Modelle dienen der Veranschaulichung

M1 ist ein Zugeständnis der Schüler an die Physik. Da jedes anschauliche Modell schnell zu Widersprüchen mit Theorie oder Experiment führen kann, wenn es zu weit strapaziert wird, wählen die Schüler diesen Ausweg. Schüler sprechen gerne von Denkmodellen. Modelle können situationsgebunden sein, Schüler verwenden auch widersprüchliche Modelle im selben Kontext. In der Praxis steht der Veranschaulichungsgesichtspunkt M2 für die Schüler aber im Vordergrund.

- **Experiment und Messung**

Vor dem Unterricht zur Quantenphysik vertrauen Schüler den Messinstrumenten i.d.R. uneingeschränkt. Eine Wirkung der Messung auf die Messgröße sehen sie nicht. Sobald die Schüler die Unbestimmtheitsrelation kennen, ändert sich dies; allerdings gehen die Schüler häufig weiterhin davon aus, dass exakte Messwerte von Größen existieren, auch wenn sie aus bestimmten Gründen nicht gemessen werden können. Hierzu korrespondiert auch die lebensweltliche Bewegungsvorstellung der Schüler, die durch die Kontinuität der Ortskurve und die Identität des sich bewegenden Objekts unabhängig von der Beobachtung gekennzeichnet ist (s unten).

- **Energie**

Aufgrund der Energiequantelung erhält der Energiebegriff in der Quantenphysik - zumindest in fachwissenschaftlicher Sicht - einen neuen Aspekt. Die Energiequantelung ist für Schüler aber weitgehend unproblematisch, sei es in Verbindung mit diskreten Bahnen oder mit stationären Zuständen. Sie wird i.d.R. ohne weitere Begründung akzeptiert.

Aus Untersuchungen zur Mechanik ist bekannt, dass Schüler Kraft und Energie oft gleichsetzen. Energie wird demnach als allgemeine Wirkungsfähigkeit (wenn Energie da ist, muss was passieren, z. B. Photoeffekt) und Aktivität (z.B. Bewegung) aufgefasst. Problematisch kann dieser Aspekt in Verbindung mit der Teilchenvorstellung vom

Elektron werden, da sich beide Vorstellungen gegenseitig stabilisieren. Kinetische und potentielle Energie sind Eigenschaften des Elektrons, die seine Aktivität oder seine Wirkungsmöglichkeit bestimmen.

Die allgemeine Wirkungsfähigkeit kollidiert bei einigen Schülern mit der Energiequantelung, da sie nicht verstehen, dass nur bestimmte Energien eine Wirkung erzielen.

Schüler verwenden den Energiebegriff auch gerne zur Bilanzierung von Vorgängen, jedoch nicht im Sinne einer abstrakten Bilanzgröße, sondern zur Bilanzierung von Massen und Teilchenzahlen. Auf diese Weise können sie auf anschauliche Vorstellungen und Erklärungsprinzipien zurückgreifen, die nicht im Widerspruch zur physikalischen Beschreibung stehen. Außerdem gibt die Argumentation über den Energiebegriff den Schülern die Möglichkeit, ein Stück weit wieder die durch den Wahrscheinlichkeitsbegriff "verbotenen" kausalen Erklärungsmuster zu verwenden (s unten).

Lehrer "mögen" Schülerargumentationen über den Energiebegriff; Schüler stellen sich darauf ein. Wegen seiner anschaulichen Offenheit und Flexibilität eignet sich der Energiebegriff daher gut zur Kommunikation über quantenphysikalische Phänomene.

Bei Lernstudien zur Bremer Konzeption zur Atomphysik (Petri 1996) ist im Zusammenhang mit der Interpretation der ψ-Funktion als kontinuierliche Ladungsdichteverteilung eine nicht unproblematische anschauliche Verknüpfung von Energie und Ladung als "greifbare" flüssigkeitsartige Substanz, die bis zur absoluten Gleichsetzung gehen kann, festgestellt worden.

- **Elektron, Bahn und Bewegung**

In allen diesbzgl. Untersuchungen wird die starke Verankerung der Partikelvorstellung vom Elektron im Sinne eines winzigen, geladenen, sich schnell bewegenden Materiekügelchens in den Schülervorstellungen festgestellt.

Die Interferenzerscheinungen in Elektronenbeugungsexperimenten werden auf die wellenartige Fortbewegung einzelner (eiern) bzw. vieler Elektronen (schallwellenartig)

oder Wechselwirkungen untereinander (Stoß) zurückgeführt. An die Grenzen der Vorstellungsmöglichkeiten der Schüler gelangt man mit dem Ein-Elektron-Doppelspaltexperiment, in dem die Elektronen einzeln, nacheinander "unterwegs" sind und bei dem ein einzelnes Elektron offenbar durchbeide Spalte geht.

Der Bahnbegriff hat für alle Schüler große Bedeutung. Der lebensweltlich geprägte Bewegungsbegriff beinhaltet Kontinuität des Prozesses (alle Orte zwischen zwei Punkten werden eingenommen) und Identität des Objektes (es handelt sich unabhängig von einer permanenten Beobachtung um dasselbe Objekt). Die Bewegung der Elektronen ist entweder für die Entstehung der Wahrscheinlichkeitsverteilung notwendig, oder sie bezieht sich direkt auf (Kreis)Bahnen. Bethge (1988) formuliert zum Bahnbegriff für die Atomphysik folgende Vorverständniselemente:

(B1) Der Bahnbegriff wird zur Zustandsbeschreibung in der Quantenphysik abgelehnt; in der Quantenphysik "darf" keine Elektronenbahn angegeben werden.

(B2) "Bahnen" sind regelmäßige Bewegungen; das "Bahnverbot" bezieht sich auf diese Auslegung des Begriffs.

(B3) Die Begriffe "Bahn" und "Wahrscheinlichkeit" werden verbunden.

- Die Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Bahn wird angegeben.

- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf einem bestimmten Abschnitt einer Bahn wird angegeben.

- Die Bahnen sind "verschmiert".

(B4) Die Bewegung der Elektronen erfolgt auf Bahnen oder als Schwingung.

In der ersten Gruppe (B1 und B2, ca. 25%) dient der Bahnbegriff zur Unterscheidung von klassischer Physik und Quantenphysik. Dennoch bleibt die Bewegung für die Entstehung der Wahrscheinlichkeitsverteilung verantwortlich. Die Schüler gehen in B1 vermutlich von einem physikalischen Bahnbegriff aus. In diesem Fall kann dadurch ein unlösbarer Widerspruch entstehen. In B2 bezieht sich das Bahnverbot auf eine lebensweltliche Bahnauffassung, wonach nur regelmäßige geometrische Figuren als Bahnen betrachtet werden.

In B3 und B4 halten die Schüler an der Vorstellung definierter "Bahnen" fest. B3 kennzeichnet Vorstellungen, die bei der Behandlung der Atomhülle in Verbindung mit "Wahrscheinlichkeit" und "Wellenfunktion" auftreten.

Schüler, die den Bahnbegriff in der Quantenphysik ablehnen, kehren jedoch sehr häufig bei Fragen nach der Stabilität der Atome ins mechanische Bild zurück (Ausgleich der Coulomb-Anziehung bzw. Gravitation durch Kreisbewegung oder Fliehkraft). Die Bewegung des Elektrons wird als eine Art Kraft oder Energie verstanden, die der Coulomb-Anziehung entgegenwirkt. Das Problem der elektromagnetischen Abstrahlung beschleunigter Elektronen wird nur von wenigen Schülern gesehen. Dies widerspräche auch der Logik der Schüler, da die Bewegung der Elektronen ja gerade die notwendige Bedingung für die Stabilität des Atoms darstellt, und da beschleunigte Körper nach der Alltagserfahrung eher Energie gewinnen als verlieren. Das lebensweltliche Vorverständnis der Schüler zur Mechanik spielt hier also eine entscheidende Rolle.

- **Wahrscheinlichkeit**

Das Schülervorverständnis zum Wahrscheinlichkeitsbegriff wird ebenfalls von Bethge (1988) untersucht.:

(W1) Wahrscheinlichkeit als Interpretations- oder Übersetzungskalkül

(W2) Wahrscheinlichkeit als akausale Beschreibung

(W3) Wahrscheinlichkeit als Ungenauigkeit

Bethge zeigt, dass ca. 80% der Schüler sinnvoll mit dem Wahrscheinlichkeitsbegriff umgehen können (W1). Dies geschieht durch die Verknüpfung der Begriffe Wahrscheinlichkeit und Häufigkeit. Damit wird für die Schüler eine Übersetzungsmöglichkeit für den quantenphysikalischen Formalismus geschaffen. Interpretiert als relative Häufigkeit, liefert dieses Kalkül den Schülern die Möglichkeit, quantenphysikalische Phänomene (Interferenzerscheinungen, "verschmierte Bahnen", Orbitale) für sie sinnvoll zu deuten.

Ein Fall, an dem die Schüler mit der Interpretation der Wahrscheinlichkeitsverteilung als Häufigkeitsverteilung scheitern müssen, ist das schon erwähnte Ein-Elektron-Doppelspaltexperiment. Auch beim Wasserstoff-Elektron kommt es häufig zu Konflikten mit ihren Vorstellungen von Elektron und Bewegung.

In W2 und W3 kommt die Unzufriedenheit der Schüler mit der Quantenphysik zum Ausdruck. Schüler möchten den allmählichen Aufbau der Häufigkeitsverteilung kausal verstehen können. Dies ist jedoch in der Quantenmechanik nicht möglich.. Sie betrachten die Quantentheorie daher als vorläufig.

Bei W3 wird der Wahrscheinlichkeitsbegriff umgangssprachlich als Ungenauigkeit verstanden. Aussagen der Physik - hier insbesondere über Ort und Bahn des Elektrons - werden ungenau, was im Widerspruch zum Bild der Schüler von der Wissenschaft Physik als Grundlagenwissenschaft für alles, was in dieser Welt geschieht, steht. Im Falle von Ort und Bahn des Quants besteht eine mögliche Lösung darin, dass Schüler das Maximum der Verteilung mit dem genauen Wert, der in ihrem Denken existiert, identifizieren.

Auch Lichtfeldt (1992) stellt ein bleibendes Unbehagen von Schülern gegenüber dem Wahrscheinlichkeitsbegriff, verstanden als Ungenauigkeit, fest.

- **Atom**

Die nach wie vor dominierende Vorstellung vom Atom ist diejenige von auf (bestimmten) Bahnen um den Atomkern kreisenden Elektronen. Dies belegen alle durchgeführten Untersuchungen. Diese Modell wird i.d.R. als Bohrsches Atommodell bezeichnet. In seiner einfachsten Form stellt es ein zweidimensionales Pendant des Planetensystems dar.

Vor allem aus der Chemie kennen viele Schüler auch das Bild von auf kreisförmigen Schalen "sitzenden" Elektronen. Dieses Schalenmodell und das Planetenmodell werden von Schülern gerne vermischt oder verwechselt.

Unter dem Einfluss des Quantenphysikunterrichts sind mehrere Entwicklungsstadien möglich: Zunächst erhält das Atom räumliche Fülle, die Bahnen kreuzen sich ähnlich

einem Wollknäuel. In gewissem Sinn sind die Bahnen dann "unbestimmt", wie es die Unbestimmtheitsrelation verlangt. Durch die Einführung des Orbital- oder des Wahrscheinlichkeitsbegriffes werden die Bahnen dann selbst geweitet: das Elektron führt eine Wellenbewegung aus oder die Bahn "verschmiert", wodurch sie auch wiederum in gewissem Sinn "unbestimmt" wird.

Hinsichtlich der Bremer Konzeption zur Atomphysik wurde bei Petri (1996) festgestellt, dass die Schüler nach dem Unterricht - abhängig von der Intensität und Stabilität ihres individuellen Lernprozesses - kontextspezifische Fragen und Aufgabenstellungen auf der Basis verschiedener Atommodelle beantworten können oder zumindest wissen, dass man z.B. die Stabilität des Atoms in einem quantenphysikalischen Atommodell nicht mehr über die Kreisbewegung etc. erklären kann. Die Lernentwicklung zum Atommodell lässt sich als Prozess der Differenzierung, Neubildung und Integration mehrerer verschiedener Vorstellungen darstellen. Eine interne "Verwaltungsinstanz" setzt die verschiedenen Komponenten miteinander in Beziehung. Da alle neuen Modellvorstellungen in Abgrenzung zur anfangs bereits vorhandenen planetensystemartigen Vorstellung gebildet werden müssen, sind nicht alle entwickelten Vorstellungen gleich stark im kognitiven System des Schülers verankert. Je stärker eine Vorstellung im kognitiven System verankert ist, desto schwächer ist i.a. ihre Kontextgebundenheit. Die Ausgangsvorstellung (Planetenmodell) ist stark im kognitiven System verankert (hohe Stärke), sie wird deshalb mehr oder weniger unwillkürlich und spontan assoziiert. Die vom Schüler immer wieder in bewusster Abgrenzung neu zu bildenden alternativen Vorstellungen genießen als quantenphysikalische Vorstellungen aber - wenn der Unterricht sein Ziel erreicht hat indem sich diese Modelle aus Schülersicht bewährt haben - ein höheres Ansehen (hohen Status). Die relative Stärke einzelner Komponenten kann sich durch Übung und Gewöhnung aber insbesondere auch qua hohem Status allmählich in die intendierte Richtung verschieben.

Bei Petri (1996) wurde das Endergebnis der Lernentwicklung zur Atomvorstellung des Schülers Carl als "Endzustand des kognitiven Elementes Atom" bezeichnet.

Abb. 5.1.1: Der Endzustand von Carls kognitivem Element Atom (nach Petri 1996, 352)

Inhaltsebene

- Planetenmodell
- Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell

  Das Atom besteht aus dem Kern und den Elektronen. Die Elektronen befinden sich in durch die ψ-Funktion definierten Aufenthaltsräumen. Die Elektronen bewegen sich nicht.
- Ladungswolkenmodell

  Das Atom besteht aus dem Atomkern und der Elektronenladungswolke. Diese Wolke ist statisch. Die Elektronen sind in ein "verschmierten Etwas" aufgelöst.

Verwaltungsebene

- Beziehung

  Das Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell geht aus dem Planetenmodell in deutlicher Abgrenzung hervor. Die Bewegung des Elektrons wird "gestoppt". Die Aufenthaltsbereiche des Elektrons sind wesentlich größer (Orbital statt Orbit). Das Ladungswolkenmodell entsteht in weiterer Abgrenzung von beiden Modellen. Das Elektron als Teilchen wird in eine statische Ladungswolke aufgelöst.
- Stärke

  Ladungswolkenmodell < Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell < Planetenmodell

  Das Planetenmodell wird spontan assoziiert. Die anderen Modelle werden bewusst davon abgegrenzt. Diese Abgrenzung ist beim Ladungswolkenmodell wesentlich konsequenter, deutlicher und expliziter.
- Status

  Ladungswolkenmodell > Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell > Planetenmodell

  Das Ladungswolkenmodell ist als quantenphysikalisches Modell moderner und hat sich in vielen Bereichen als erfolgreich und dem Planetenmodell überlegen erwiesen. Es ist plastisch-anschaulicher und in vielen Fällen auch fruchtbarer als das Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell. Das Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell selbst hat als quantenphysikalisches Modell einen höheren Status als das Planetenmodell.

5.2 Konsequenzen für die Bremer Konzeption zur Atomphysik

Aus empirischen Untersuchungen zu Schülervorstellungen ergeben sich einige grundsätzliche didaktische Konsequenzen:

Bereits Bayer (1986) und Bormann (1987) betonen die Stabilität der lebensweltlich geprägten Schülervorstellungen vom Elektron bzw. vom Atom. Daraus resultiert das Bemühen der Schüler, neue Konzepte der Quantenphysik so zu deuten, dass sie in die ihnen vertrauten Vorstellungen integriert werden können. Gelingt dies nicht, kann es zu Frustrationsreaktionen kommen. Solche Effekte werden u.a. bei Bethge (1988) beschrieben. Bethge (1992) fordert daher die Behandlung einer Vielzahl von Phänomenen, so dass eine übergreifende Theorie entwickelt werden kann. Werden große Theoriebereiche anhand eines einzigen Standardphänomens eingeführt, wird dadurch die lebensweltliche Schülerlogik des "hier und jetzt" gefördert, die zu untereinander widersprüchlichen Erklärungen für verschiedene Phänomene führen kann.

Bethge (1992) mahnt außerdem Vorsicht mit mechanischen Analogien an, da diese den Schülervorstellungen so nahe kommen, dass die Schüler schwer zwischen Quantenphysik und Analogie differenzieren können.

Lichtfeldt (1992) fordert eine Gewöhnung der Schüler an die Unanschaulichkeit der Quantenphysik, insbesondere wird die Vorstellung von Materiewellen abgelehnt. Das mechanistische Denken der Schüler muss erschüttert werden, u.a. durch eine ausführliche Diskussion von Elektronenbeugungsexperimenten. Die Veränderung der Schülervorstellungen erfordert die Bewusstwerdung von Vorstellungen. Im Unterricht muss daher ein hoher Interaktionsanteil zwischen den Beteiligten gewährleistet sein.

Diesen Befunden sowie weiteren in Kap. 5.1 dargestellten vorverständnisbedingten Schwierigkeiten will die Bremer Konzeption zur Atomphysik Rechnung tragen. Dabei stehen Bestrebungen, eine sowohl den Schülern als auch der Quantenphysik angemessene Alternative zu den lebensweltlich geprägten und sehr stabilen Schülervorstellungen einer Bahnbewegung von Elektronen im Atom zu entwickeln und zu vermitteln, im Zentrum.

- **hoher Interaktionsanteil, Bewusstwerdung von Vorstellungen**

Die Bewusstwerdung und explizite Reflexion von Vorstellungen sind für die Etablierung einer solchen Alternative unabdingbar. Ein hoher Interaktionsanteil im Unterricht ergibt sich von daher fast zwangsläufig. Es empfiehlt sich, zu Beginn der UE die bei den Schülern bereits vorhandenen Atomvorstellungen und Begriffe zu ermitteln. Zu Beginn des 13. Schuljahres kann sich, abhängig vom bisherigen Chemie- und Physikunterricht und anderen Einflüssen, bereits ein relativ komplexes Bild von unterschiedlichen oder vermischten Modellvorstellungen ergeben. Eine (Bahn)bewegung von Elektronen kann - außer mit einem Planeten- oder Schalenmodell - auch bereits mit einem Orbitalmodell mit "Elektronenwolken" oder Aufenthaltswahrscheinlichkeiten verknüpft sein (vgl. Kap. 5.1 und 4.3.4).

Wissenschafts- und erkenntnistheoretische Positionen der Schüler zu reflektieren kann gerade in der Atom- und Quantenphysik hilfreich und notwendig sein, um Verständnisschwierigkeiten z.B. hinsichtlich von Messvorgängen (Einfluss der Messung auf den Zustand des Systems) und Akzeptanzproblemen bei Wahrscheinlichkeitsaussagen oder der Unbestimmtheitsrelation (ungenaue, vorläufige Physik?) zu begegnen.

Ein hoher Interaktionsanteil wird auch durch zahlreiche, z.T. das individuelle Schülervorverständnis zu Tage fördernde Gruppenarbeitsphasen gewährleistet.

- **Anwendungsorientierung**

Mit der Anwendungsorientierung, bei der u.a. die Ladungsdichteinterpretation der ψ-Funktion in einem breiten Phänomenbereich vom H-Atom bis zu Festkörpern benutzt wird, berücksichtigt die Bremer Konzeption die entsprechende Forderung von Bethge. Die Frustrationseffekte bei Schülern, verursacht durch den Indeterminismus bei Zustandsänderungen in der "Quantenwelt", werden nachweislich stark verringert, wenn Schüler die Relevanz und die Vorteile quantenphysikalischer Atommodelle gerade in den über das H-Atom hinausgehenden Anwendungen erfahren.

- **Anschaulichkeit**

Trotz der von Lichtfeldt geforderten Unanschaulichkeit in der Quantenphysik bietet die Bremer Konzeption zur Atomphysik den Schülern eine anschauliche Alternative zu einem Planetenmodell an. Damit setzt sie sich der von Bethge gesehenen Gefahr aus, dass die Schüler anschauliche Analogien als "vergrößerte Wirklichkeit" betrachten und sie mechanisch überinterpretieren. In früheren Unterrichtsversuchen wurde z.B. beobachtet, dass einige Schüler sich die Lokalisation eines Elektrons im Atom - also den Kollaps der Zustandsfunktion - nur begreiflich machen konnten, indem sie sich diesen Prozess entweder als Zusammenziehen einer Ladungswolke quasi mechanisch vorstellten oder ihn sich mit der Formel $E = mc^2$ im Sinne von "aus einer Energie-Ladungswolke wird ein massives Teilchen" erklärten.

Um diesen zwar nachvollziehbaren aber unangemessenen Ideen der Schüler entgegenzuwirken, wurde in Kapitel 4.3.4 auf den Begriff der Ladungswolke verzichtet. Der "Als-ob-Charakter" des anschaulichen Atommodells soll statt dessen durch eine Analogie verdeutlicht werden, die weniger Gefahr läuft, von den Schülern mit der Realität verwechselt zu werden. Die "Luftballonanalogie", die den Lokalisationsprozess und damit den Bezug zur experimentellen Situation mit beinhaltet, erscheint hierfür geeigneter. Die Schüler sollen durch dieses weit von physikalischen Fachbegriffen entfernte Bild darin bestärkt werden, es - trotz seiner Anschaulichkeit - im Sinne des Vorverständniselements M1 von Bethge (Kap. 5.1) nicht als Abbildung der Realität aufzufassen.

- **Zustandsbegriff**

Zur Erarbeitung einer anschaulichen Alternative zu Bahn- und Bewegungsvorstellungen in atomaren Dimensionen ist der Zustandsbegriff in der Bremer Konzeption von Anfang an zentral. Bei Deylitz (1999) wurden gegenüber Petri (1996) verstärkte Anstrengungen unternommen, den Zustandsbegriff den Schülern als Fachbegriff der Physik zu vermitteln. Eigenzustände können über graphische Darstellungen der Zustandsfunktionen und Kontenflächen veranschaulicht werden. Bei mechanischen stehenden Wellen können Eigenzustände bzw. die Knotenflächen-

systeme unmittelbar sichtbar gemacht werden (Kap. 4.2). In Kap. 4.1.2 wurden die Besonderheiten des quantenmechanischen Zustandsbegriffes und die Unterschiede zu stehenden Wellen noch einmal herausgearbeitet. Dies ist auch im Unterricht - auf angemessenem Niveau - unbedingt zu leisten.

- **Ladungsdichteverteilung und ψ-Funktion**

Die Interpretation der Zustandsfunktion ψ als kontinuierliche, bewegungslose Ladungsdichteverteilung erscheint auf Schulniveau als die einzig tragfähige Konsequenz zur Bildung einer anschaulichen Atomvorstellung. Die räumliche Ausdehnung des Elektrons entspricht der Größe des Atoms. Den Schülern muss deutlich werden, dass die Vorstellung von Elektron als winzigem Materiekügelchen nicht einfach - d.h. ohne Berücksichtigung der experimentellen Situation - in den Dimensionsbereich von wenigen Nanometer und darunter extrapoliert werden darf.

Als Zugeständnis an die auch in Schulbüchern überwiegend verwendete Aufenthalts- oder Antreffwahrscheinlichkeitsinterpretation wird diese Deutung ebenfalls unter dem Namen Lokalisationswahrscheinlichkeitsdeutung diskutiert. Begriffe wie "Aufenthalt" sind bzgl. unangemessener Vorstellungen (Korpuskelbewegung) sehr suggestiv. Der Begriff der Lokalisation bringt den Zusammenhang mit einem den stationären Zustand irreversibel zerstörenden Wechselwirkungs- bzw. Messprozess deutlicher zum Ausdruck. Das Elektron muss durch eine entsprechend starke Wechselwirkung in einen Zustand von verglichen mit dem Atomradius kleiner räumlicher Begrenzung gezwungen werden.

Die zugehörigen Abbildungen mit Punkltdichteverteilungen (s. Abb. 4.3.4.a) müssen intensiv dahingehend erläutert werden, dass sie nicht wie z.B. Interferenzbilder am Doppelspalt gewonnen werden können, und dass es sich nicht um eine Elektronen-wolke oder "Momentaufnahmen" der Bewegung eines einzelnen Elektrons handelt.

Bei den angeregten s-Zuständen des H-Atoms konnte beobachtet werden, dass Schüler, die von einer Bewegung des Elektron im Atom ausgingen, meinten, das Elektron würde sich jeweils nur im durch den äußersten Bauch der ψ-Funktion

beschriebenen Bereich aufhalten. Denn wie sollte das Elektron die Nullstellen der ψ-Funktion überqueren, wenn es sich dort per Definition nie aufhalten darf? Entsprechend betrachteten diese Schüler die einzelnen Bäuche der ψ-Funktion auch als getrennte Orbitale, vermutlich mit bedingt dadurch, dass der Orbitalbegriff wegen seiner Nähe zum Orbit ohnehin Bahnbewegungen um den Atomkern nahelegt. Die kontinuierliche Ladungsdichteinterpretation ist hier im Vorteil. Mit den Nullstellen der ψ-Funktion ergeben sich keine anschaulichen Probleme. Bei nicht radial-symmetrischen Orbitalen kann die Ladungsdichtedeutung ebenfalls "Punkte sammeln", da diese Orbitale keine "Planetenbahnen" mehr zulassen.

Entscheidende Punkte sammelt diese Deutung bei der Veranschaulichung der Teilabschirmung der Kernladung durch innere Elektronen sowie bei der Molekülbindung: Eine kontinuierlich um den Kern verteilte negative Ladung schirmt besser ab und eine hohe negative Ladungsdichte zwischen den Kernen bindet das H_2^+-Molekülion plausibler zusammen, als ein um einen bzw. zwei Kerne "flitzendes" Korpuskel (Kap. 4.5.1 bzw. 4.6.2). Ebenso ist auch die Behandlung des Festkörpers geeignet, einem Atommodell nach Schrödinger bei Schülern hohes Ansehen zu verschaffen. Hier sei noch einmal speziell an das in Kap. 3.7 erwähnte "Quantengehege" auf Festkörperoberflächen erinnert.

- **Potentialbegriff**

Wie bereits in Kap. 4.3.2 dargestellt, wird in der Bremer Konzeption zur Atomphysik konsequent von einem Potential, unter dessen Einfluss ein Elektron steht, gesprochen. Die Einführung eines effektiven Potentials zur Kennzeichnung der vorliegenden "Kräfteverhältnisse" ist in der elementaren Atom- und Quantenphysik durchaus üblich. Der Potentialbegriff scheint ebenfalls geeignet, um auch bzgl. von Veranschaulichungen des Atoms den Unterschied zu einem Planetenmodell für Schüler herauszustellen. Den Schülern wird bei der Erarbeitung der Schrödinger-Gleichung explizit bewusst gemacht, dass der Begriff der potentiellen Energie des Elektrons (genau wie der Begriff der kinetischen Energie) unangemessene partikel-

mechanische anschauliche Assoziationen weckt. In quantitativen Betrachtungen wird ausschließlich das Symbol V verwendet.

Die Vorteile einer Potentialvorstellung gemäß eines Kraftfeldes um den Atomkern erweisen sich z.B. bei der Diskussion des klassisch verbotenen Bereiches der ψ-Funktion, für den gilt $E - V < 0$ (Kap. 4.4.5). Ein klassisch gedachtes, sich in diesen Bereich aufhaltendes Elektron hätte hier paradoxer Weise eine seine Gesamtenergie übersteigende potentielle Energie bzw. eine negative kinetische Energie.

5.3 Unterrichtsverlauf: Überblick über mögliche Alternativen

• Zum Thema Zeitbedarf

Die jüngsten Unterrichtserprobungen der Bremer Konzeption zur Atomphysik erstreckten sich jeweils über ca. 75 Unterrichtsstunden. In dem meisten Fällen wird nicht annähernd soviel Zeit für dieses Themengebiet zur Verfügung stehen. Als Richtschnur wird von 8 - 10 Unterrichtswochen ausgegangen, woraus sich für einen Leistungskurs maximal 50 Schulstunden errechnen. Wegen Klausurterminen und anderer Schulveranstaltungen werden davon noch einige Stunden abzuziehen sein. In der Praxis wird man daher gezwungen sein, einige der in Kap. 4 dargestellten Inhaltsbereiche zu kürzen oder auch ganz wegzulassen.

Durch eine Einteilung in Grund- und Ergänzungsbausteine soll diese Auswahl ermöglicht und erleichtert werden. Allerdings liegen für die gegenüber der Deylitz (1999) zugrunde liegenden Version des Konzeptes vorgenommenen Veränderungen noch keine Unterrichtserfahrungen vor. Dies betrifft insbesondere den neu gestalteten Abschnitt 1 und die Software MODELLUS, durch deren Einsatz eine Zeitersparnis von der ca. einer Unterrichtswoche erwartet wird. Insofern sind die unten dargestellten Verlaufsübersichten hinsichtlich des Zeitbedarfs zusätzlich relativ unsicher.

- **Zum Thema Grundkurse**

Für Grundkurse liegen bisher weder Unterrichtserfahrungen noch ein ausgearbeitetes Konzept vor. Wesentliche Aspekte der physikalischen Inhalte sollten aber auch dort zu vermitteln sein. Sicher wird man bei der Behandlung von stationären Zuständen und Schrödinger-Gleichung (SGL) deutliche Abstriche machen und sich auf wenige grundsätzliche qualitative und halbquantitative Zusammenhänge beschränken. Evtl. kann man auf den Einsatz von Modellbildungssoftware ganz verzichten und nur die Ergebnisse der Lösung der SGL diskutieren und interpretieren. Eine interessante Alternative (und Ergänzung für den Leistungskurs) bieten zwei kleine von J. Küblbeck entwickelte Lernprogramme zur Schrödinger-Gleichung. (download kostenlos unter: http://wpex40.physik.uni-wuerzburg.de/~wr/neue_medien_pu.html). Auf jeden Fall sollte natürlich auch im Grundkurs eine anschauliche Alternative zum Bohrschen Atommodell entwickelt werden. Die Anwendungsorientierung und schülervorverständnisorientiertes Arbeiten blieben grundsätzlich ebenfalls unberührt. Man sollte sich also nach Möglichkeit u.a. nicht allein auf das H-Atom beschränken.

- **Vorschläge für den Unterrichtsverlauf**

Die abschließende Tabelle basiert auf der inhaltlichen Gliederung aus Kap. 3 in sieben Unterrichtsabschnitte, die z.T. noch in Grund- und Ergänzungsbausteine untergliedert sind. Für jeden Teilabschnitt wurde ein Zeitbedarf abgeschätzt. Soweit wie möglich wurden Erfahrungswerte aus bisherigen Realisationen zugrunde gelegt. Zusätzlich wurde ein Zeitbedarf für Klausuren und deren Vorbereitung einkalkuliert. Je nach Lerngruppe (Leistungsvermögen, Interessen, Schwierigkeiten, etc.), Unterrichtsstil und Arbeitsmethoden werden sich natürlich weitere Abweichungen in Umfang, Themenfolge und Behandlungstiefe ergeben.

Die Tabelle enthält neben der unter Normalbedingungen zu umfangreichen Vollversion (Max.) von 80 Schulstunden eine sich auf einige Grundzüge beschränkende und auf ganze Abschnitte verzichtende Minimalversion (Min.) von 35 Schulstunden und einen Vorschlag für eine "Normalversion" (Nor.) von 45 Schulstunden. Alternative Gewichtungen und weitere Abstufungen sind möglich.

Die Themenfolge orientiert sich primär an physikalisch inhaltlichen Aspekten. Unter allgemeinen oder fachspezifischen methodisch-didaktischen Aspekten empfiehlt sich an einigen Stellen u.U. eine abweichende Vorgehensweise; z.B. kann

- in Abschnitt 2 der Einstieg auch über den sehr anschaulichen und einprägsamen Versuch mit dem Tamburin erfolgen.
- die Erarbeitung der Analogie mechanische Eigenschwingungen - Atome an mehreren Stellen einen Vorgriff auf die Atomphysik nahe legen.
- die in Abschnitt 3 angesetzte Interpretation der ψ-Funktion ganz oder teilweise nach Abschnitt 1 vorgezogen oder hinter die Modellierung des H-Atoms verlegt werden.

- **Rückmeldung erbeten**

Es ist nicht bekannt, ob und inwieweit die Bremer Konzeption zur Atomphysik oder Teile von ihr außerhalb der empirisch begleiteten Realisationen etwa von einzelnen Lehrerinnen und Lehrern mit Hilfe der bisher veröffentlichten Materialien bereits ausprobiert wurden. Erfahrungsberichte, Fragen, Hinweise, Anregungen und Kritik von Lehrerinnen und Lehrern, die die Bremer Konzeption zur Atomphysik in der einen oder anderen Variante realisiert haben bzw. realisieren möchten, sind (nicht nur vor diesem Hintergrund) sehr willkommen.

Tab. 5.3.1: Alternativen zum Unterrichtsverlauf

Unterrichtsabschnitt	Max.	Min.	Nor.
Abschnitt 1: Atombau und Spektrallinien	**9**	**7**	**7**
• Befragung/ Gespräch zum Vorwissen zu Atommodellen	1	1	1
• Historische Entwicklung (Antike bis Rutherford)	2	-	-
• Untersuchung des Wasserstoff-Spektrums (Balmer-Lampe) Deutung mit E = h f (Existenz diskreter Energieniveaus)	2	2	2
• Leistung und Kritik der Bohrschen Postulate, Widerspruch zur HU als Motiv für neues Atommodell, Schrödinger: Idee von de Broglie auf Elektronen im Atom übertragen	2	2	2
• Unterschied: Klassische Teilchen und Quantenobjekte, Zustandsbegriff und -funktion, Eigenzustände, Übergänge	2	2	2
Abschnitt 2: Eigenzustände mechanischer Wellen	**9**	**4**	**5**
• Demonstrationsexperiment zu stehenden Seilwellen, Eigenzustände bei homogener und inhomogener Massenverteilung	2	2	2

• Differentialgleich., Krümmungsbegriff, Bezug zur Atomphysik	2	2	2
• Eigenzustände des Tamburins, Bezug zum Atom	1	-	1
• Untersuchung stehender Schallwellen, Bezug zum Atom	1	-	-
• Einführung in MODELLUS	1	-	-
• Experimente und Modellierung zu stehenden Seilwellen	2	-	-
Abschnitt 3: ψ-Funktion und Schrödinger-Gleichung	**7**	**6**	**6**
• Die Analogie stehende Wellen - Eigenzustände des Atoms	1	1	1
• Interpretation der ψ-Funktion	2	2	2
• Erarbeitung und Diskussion der SGL	4	3	3
Abschnitt 4: Einelektronensysteme I (H-Atom)	**18**	**11**	**12**
• Einführung in MODELLUS	0	1	1
• Modellierung der SGL, Bestimmung der Eigenzustände	4	4	4
• Diskussion der Ergebnisse	4	3	3
• Experimentelle Bestimmung von Atomradien	2	-	1
• Franck-Hertz-Versuch (qualitativ)	2	1	1
• Modellierung wasserstoffähnlicher Ionen	2	-	-
• nicht radialsymmetrische Zustände, Periodensystem	4	2	2
Abschnitt 5: Mehrelektronensysteme I (Höhere Atome)	**15**	**-**	**8**
• Überlegungen zur Abschirmung, Erweiterung des Modells	2	-	2
• Arbeitsteilige Modellierung u. Auswertung von He und evtl. Li	5	-	4
• Röntgen-Strahlung	2	-	2
• Modellierung weiterer höherer Atome	6	-	-
Abschnitt 6: Einelektronensysteme II (H_2^+-Molekülion)	**5**	**4**	**4**
• Vorüberlegungen und Erarbeitung des Modells	2	2	2
• Modellierung und Auswertung einiger Zustände	3	2	2
Abschnitt 7: Mehrelektronensysteme II (Festkörper)	**7**	**-**	**4**
• Potentialtopfnäherung, Modellierung (2) oder Simulation (1)	3	-	2
• Erklärung physikalischer Eigenschaften	2	-	1
• Quantengehege/Rastertunnelmikroskop	2	-	1
1 bis 2 Klausuren mit Vorbereitung	**10**	**3**	**4**
Summe der Stunden	**80**	**35**	**50**

6 Literatur- und Softwareverzeichnis

Bayer, H. (1986): Schülervorstellungen beim Übergang vom Bohrschen zum wellenmechanischen Atommodell. In W. Kuhn (Hrsg.), Vorträge Physikertagung Gießen, Fachausschuss Didaktik der Physik, Gießen: DPG, S. 249-256.

Bayer, R. et.al. (1997): Impulse Physik 2, Klasse 12 - 13. Stuttgart: Klett.

Bäuerle, W. et.al. (1988): Umwelt: Chemie. Stuttgart: Klett.

Berg, A., Fischler, H., Lichtfeldt, M., et. al. (1989): Einführung in die Quantenphysik. Ein Unterrichtsvorschlag für Grund- und Leistungskurse. Berlin: Pädagogisches Zentrum.

Bethge, T. (1988): Aspekte des Schülervorverständnisses zu grundlegenden Begriffen der Atomphysik. Dissertation, Universität Bremen.

Bethge, T. (1992): Schülervorstellungen zu grundlegenden Begriffen der Atomphysik. In: Fischler, H. (Hrsg.): Quantenphysik in der Schule, Kiel: IPN, 215-233.

Bormann, M. (1987): Das Schülervorverständnis zum Themenbereich "Modellvorstellungen zu Licht und Elektronen". In W. Kuhn (Hrsg.), Vorträge Physikertagung Berlin, Fachausschuss Didaktik der Physik, Gießen: DPG, 475-481.

Cassens, H. (1992): Anwendungen quantenphysikalischer Erkenntnisse im Unterricht. In: Fischler, H. (Hrsg.): Quantenphysik in der Schule, Kiel: IPN, 114-133.

Christen, H. R. (1986): Chemie. Vom Experiment zur Theorie, Teil 2. Frankfurt a.M.: Diesterweg.

Deylitz, S. (1999): Lernergebnisse in der Quanten-Atomphysik. Evaluation des Bremer Unterrichtskonzepts. Berlin: Logos.

Eckhardt, H. (1982): Aufbau und Struktur der Atomhülle - Periodensystem und Bindung. Stuttgart: Klett.

Fick, E. (1979): Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie. 4. Aufl., Akademische Verlagsgesellschaft: Wiesbaden.

Gerthsen, C., et.al. (1989): Physik. 16. Aufl., Berlin et.al.: Springer.

Grehn, J. (1982): Metzler Physik. Gesamtband, 1. Aufl., Stuttgart: Metzlersche Verlagsbuchhandlung.

Grehn, J. (1988): Metzler Physik. Gesamtband, 2. Aufl., Stuttgart: Metzlersche Verlagsbuchhandlung.

Haken, H., Wolf, H.C. (1993): Atom- und Quantenphysik. Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen. 5. Aufl., Berlin et. al.: Springer .

Herrmann, F., Laukemann, M. (1994): Atomphysik in der Sekundarstufe I. Karlsruher Physikkurs. In: Physik in der Schule 32, 262 - 265.

Koppelmann, G. , et.al. (1981): Von Bohrschen Bahnen zu den Orbitalen (Eine Einführung mit Modellversuchen und Anschauungshilfen). In: Scharmann, A., Hofstaetter, A., Kuhn, W.(Hrsg.): DPG Vorträge der Frühjahrstagung 1981, Universität Gießen, 637-643.

Kuhn, W. (Hrsg.) (1990): Physik. Band II, 2. Teil: Klasse 12/13. Braunschweig: Westermann.

Lichtfeldt, M. (1992): Schülervorstellungen in der Quantenphysik und ihre möglichen Veränderungen durch Unterricht. Essen: Westarp

Meyer-Kuckuk, T. (1980): Atomphysik. 2. Aufl., Stuttgart: Teubner.

Niedderer, H. (1983): Mechanische Analogieexperimente für Wellenfunktionen in verschiedenen Potentialtöpfen. In: Scharmann, A., Hofstaetter, A., Kuhn, W. (Hrsg.): Vorträge auf der Physikertagung 1983, Universität Gießen, 516-524.

Niedderer, H. (1984): Stehende Seilwellen mit variabler Massendichte zur eindimensionalen Simulation der Psi-Funktion im H-Atom. Der Physikunterricht 15, Heft 1, 64-68

Niedderer, H. (1987): Die chemische Bindung im $H2^+$-Molekül - veranschaulicht und berechnet mit zwei einfachen Potentialtopfmodellen. In W. Kuhn (Hrsg.), Vorträge Physikertagung 1987 Berlin. 564-578. DPG, Fachausschuss Didaktik der Physik, Gießen.

Niedderer, H., Bethge, T., Schernau, M. (1987): Simulationsprogramme zum wellenmechanischen Atommodell. Universität Bremen.

Niedderer, H., Bethge, T., Cassens, H. (1990): A Simplified Quantum Model - a Teaching Approach and Evaluation of Understanding. In: P.L. Lijnse et. al. Eds.), Relating Macroscopic

Phenomena to Microscopic Particles - A Central Problem in Secundary Science Education (67-80). Utrecht: CD-ß Press.

Niedderer, H. (1991): Eine Unterrichtsfallstudie zur Atomphysik. In H. Wiesner (Hrsg.), Aufsätze zur Didaktik der Physik II. Bad Salzdetfurth: Franzbecker .

Niedderer, H. (1992): Atomphysik mit anschaulichem Quantenmodell, in: Fischler, H. (Hrsg.): Quantenphysik in der Schule, Kiel: IPN, 88-113

Niedderer, H. , Schecker, H. (1982): Ziele und Methodik eines wissenschaftstheoretisch orientierten Physikunterrichts. In: Der Physikunterricht, 16 (1/1982), 58-71.

Niedderer, H., Cassens, H., Petri, J. (1994): Anwendungsorientierte Atomphysik in der S II - Zustände und Orbitale von Atomen, Molekülen, Festkörpern. In: Physik in der Schule 32, 266 - 270.

Petri, J. (1996): Der Lernpfad eines Schülers in der Atomphysik - Eine Fallstudie in der Sekundarstufe II. Aachen: Verlag Mainz.

Petri, J., Niedderer, H. (1998a): A learning pathway in high-school level quantum atomic physics. Int. J. Sci. Educ., Vol. 20, No. 9, 1075-1088.

Petri, J., Niedderer, H. (1998b): Die Rolle des Weltbildes beim Lernen von Atomphysik - Eine Fallstudie zum Lernpfad eines Schülers. Zeitschrift für Didaktik der Naturwissenschaften ZfDN 4 (1998), Heft 3, 3 - 18.

Schreiner, J. (1978): Anschauliche Quantenmechanik. Frankfurt: Diesterweg.

MODELLUS (1997): Vitor Duarte Teodoro (für PC)
http://phoenix.sce.fct.unl.pt/modellus

STELLA (1996): High Performance Sytems. Hanover, NH. (PC und Mac)
http://www.hps-inc.com/

VISUAL QUANTUM MECHANICS (VQM) (1996): D. Zollman et.al. (PC und Mac)
http://www.phys.ksu.edu/perg/vqm

vLab (1998): Thorsten Klein (für PC)

e-Wolke (1997): Hermann Lüdicke (für Mac)

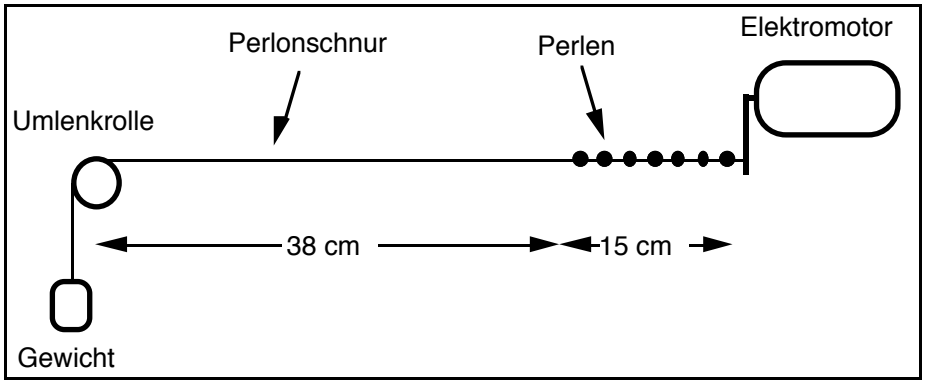
cT-Quantum Well (1987): B. Sherwood (für Mac)

Anhang

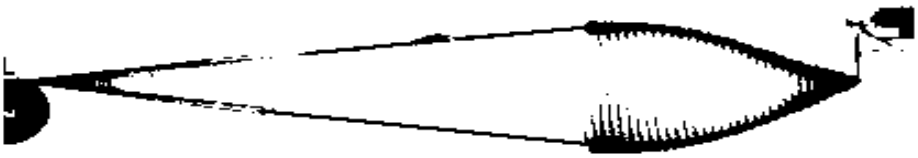
A.1 Tabellen und Abbildungen

- **Mechanische stehende Wellen**

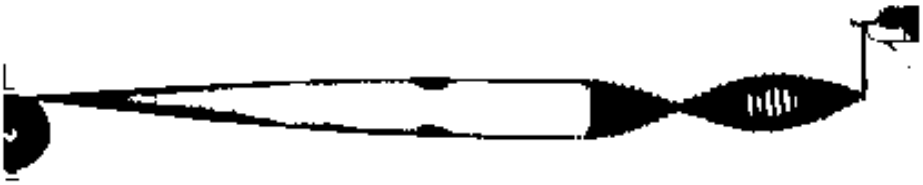
- Versuchsaufbau und Amplitudenfunktionen stehender Seilwellen



- y(x) als reales Foto des Experiments bei f = 8.6 Hz

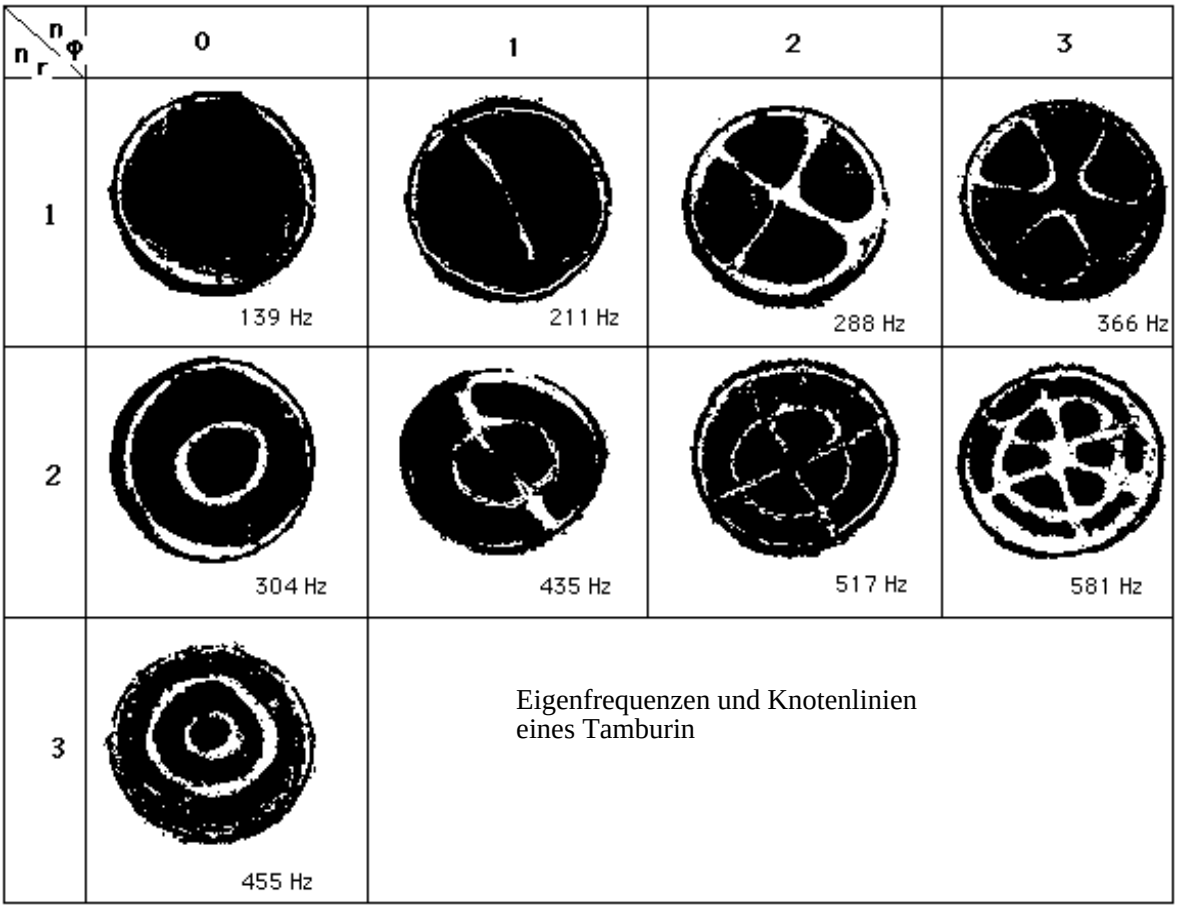


- y(x) als reales Foto des Experiments bei f = 20 Hz



- y(x) als reales Foto des Experiments bei f = 27 Hz

- Eigenfrequenzen und Knotenlinien eines Tamburins



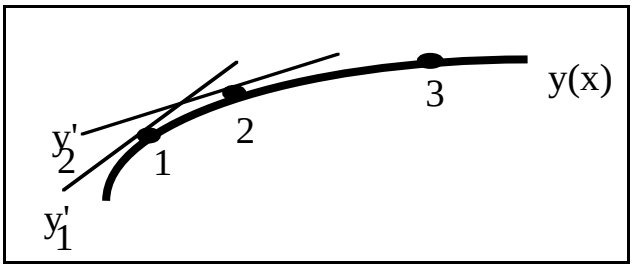
Eigenfrequenzen und Knotenlinien eines Tamburin

- Eigenschaften 1-, 2- und 3-dimensionaler stehender Wellen

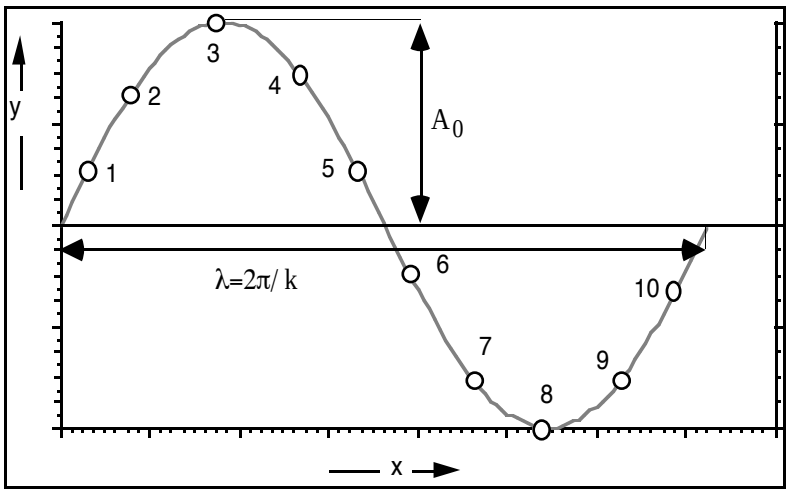
Stehende Wellen	Eindimensional	Zweidimensional	Dreidimensional
Beispiel	Seilwellen	Tamburin	Schall in Glaskugel
Knotenart	Punkte	Linien	Flächen
Knotensysteme	Ein System	Zwei Systeme, z.B. Kreise und Geraden	Drei Systeme, z.B. Kugelflächen, Ebenen, Doppelkegel
Zustandszahlen	eine, z.B. n	zwei, z.B. n, m	drei, z.B. n, m, l

- Krümmung

Die Kurve y(x) zeigt in Punkt 1 eine größere Steigung y_1' als y_2' in Punkt 2. Die Steigung nimmt ab, die Krümmung ist negativ. In Punkt 3 ist die Krümmung kleiner, die Steigung ändert sich weniger stark.



Die Abbildung zeigt eine Sinuskurve: In der Umgebung von Punkt 1 ist die Krümmung betragsmäßig gering, die Funktion kann mit einer Geraden angenähert werden. Zwischen 2 und 3 nimmt die Krümmung zu, der Graph neigt sich zunehmend stärker. In 3 ist die Krümmung betragsmäßig maximal. Ihr Vorzeichen ist negativ, weil sich die Kurve mit dem Uhrzeigersinn dreht. In 8 ist die maximale Krümmung in entgegengesetzter Richtung erreicht. Ihr Vorzeichen ist positiv, weil sich die Kurve gegen den Uhrzeigersinn dreht.



- Zur Analogie zwischen Amplitudenfunktionen der Eigenzustände stehender Seilwellen und stationären Zuständen in Atomen

EIGENZUSTAND n	
Stehende Seilwelle	**Stationäres Elektron**
Frequenz f_n	Energie E_n
Amplitude $y_n(x)$	Amplitude $\psi_n(r)$
Eindimensional: Knotenpunkte	Dreidimensional: Knotenflächen
Randbedingung: Knoten	Randbedingung: $\psi \Rightarrow 0$
Materieller Rand	Begrenzendes Potential (Kraftfeld)
Inhomogene Massenverteilung ms(x)	Radiusabhängiges Potential V(r)
$y_n''(x) \sim -f_n^2 \cdot m'(x) \cdot y_n(x)$	$\psi_n''(r) \sim -[E_n - V(r)] \cdot \psi_n(r)$
y_n : Einhüllende der Seilbewegung	ψ_n: Keine Bewegung im Zustand
y_n: Direkt beobachtbar	Nur $\lvert \psi_n \rvert^2$ interpretier- und messbar

- **Zustandsbegriff, ψ-Funktion, Schrödinger-Gleichung**

- Klassischer und quantenmechanischer Zustand eines Elektrons

Klassischer Zustand des Elektrons	**Quantenmechanischer Zustand**
Allen Observablen kann jederzeit und gleichzeitig ein prinzipiell unbeschränkt genauer Wert unabhängig von einer Messung zugesprochen werden. Der momentane Zustand des Elektrons ist durch seinen Ort und seinen Impuls exakt definiert. Eine Messung hat prinzipiell keinen Einfluss auf den Zustand. Observablen: Ladung: -e Masse: m Energie: E(t) Impuls: p(t) Ort: x(t) .... Veranschaulichung: Winziges geladenes Kügelchen, das auf einer bestimmten Bahn durch den Raum fliegt bzw. das sich in Ruhe befindet	Zu einem bestimmten Zeitpunkt hat nur ein Teil der prinzipiell messbaren Observablen des Elektrons einen exakt definierten Wert. Die Zustandsfunktion beinhaltet die Übergangswahrscheinlichkeiten für Zustände mit scharf bestimmten Observablen (Eigenzustände mit Eigenwerten). Durch Messungen von Observablen werden Eigenzustände erzeugt bzw. vernichtet. Beispiel: stationärer Energieeigenzustand n Observablen: Ladung: -e Masse: m Energie: E_n Impulsverteilung: $\psi(p)$ Ortsverteilung: $\psi(x)$ ..... Veranschaulichung: stationäre, bewegungslose, kontinuierliche Verteilung unterschiedlicher Dichte (s. unten)

- Zur Entwicklung der SGL benutzte Beziehungen und Deutungen

- klassische Mechanik: $E_{kin} = 1/_2\, m \cdot v^2$; $p = m \cdot v$; $E = E_{kin} + E_{pot}$
- stehende Wellen: $y''(x) = -k^2 \cdot y(x)$ bzw. $y''(r) = -4\pi^2 \cdot \frac{1}{\lambda^2} \cdot y(r)$
- elektrisches Feld: $F_c(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o} \cdot \frac{q_1 . q_2}{r^2}$; $V(r) = \int F_c(r)dr$
- Quantenphysik: $\lambda = h / p$
- Quantenphysikalische Gleichungen wie $\lambda = h / p$ oder die SGL erkennt man an der Planckschen Konstante h. Die Konstante h verknüpft Größen des klassischen Teilchenbilds mit klassischen Wellengrößen. Gleichungen wie die SGL oder die de Broglie-Beziehung können als Übersetzungsgleichungen vom Teilchen- ins Wellenbild gedeutet werden.
- Das Potential V(r) wird als "Kraftfeld" um den Atomkern, das auf das Elektron wirkt, gedeutet. Es wird anstelle von E_{pot} im Energiesatz verwendet.

- Die Schrödinger-Gleichung

Die eindimensionale, stationäre SGL als Grundgleichung der Atomphysik

$$\psi''(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot (E - V(r)) \cdot \psi(r)$$

bzw.

$$\psi''_n(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot (E_n - V(r)) \cdot \psi_n(r)$$

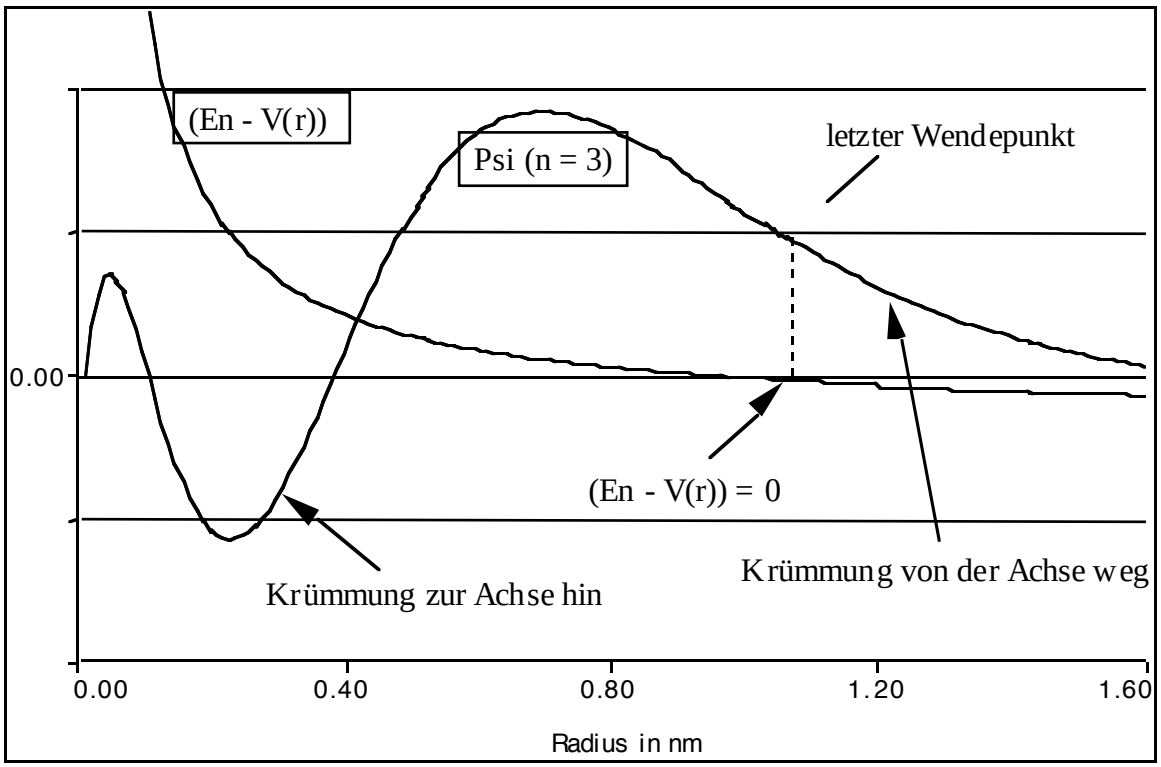
V(r) errechnet sich für das H-Atom aus der Coulomb-Kraft F_c zu:

$$V(r) = -\int_{\infty}^{r} F_C(r') \cdot dr' = -\int_{\infty}^{r} \frac{1}{4\pi\varepsilon_o} \cdot \frac{(-e) \cdot e}{r'^2} \cdot dr' = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Die eindimensionale, stationäre SGL des H-Atoms lautet:

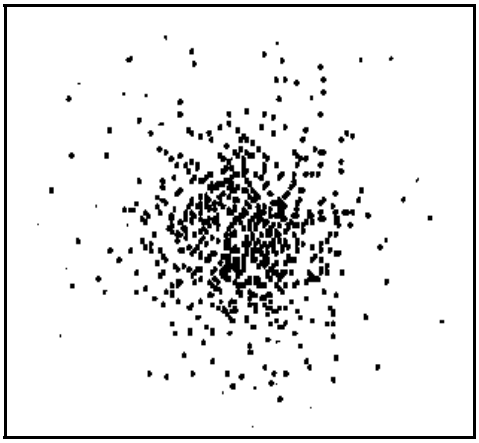
$$\psi_n''(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot \left(E_n + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}\right) \cdot \psi_n(r)$$

- Zum Einfluss der Krümmung auf den Verlauf der ψ-Funktion



- Veranschaulichung von a) Lokalisationsahrscheinlichkeits- und b) Ladungsdichteverteilung des Elektrons im Grundzustand des H-Atoms

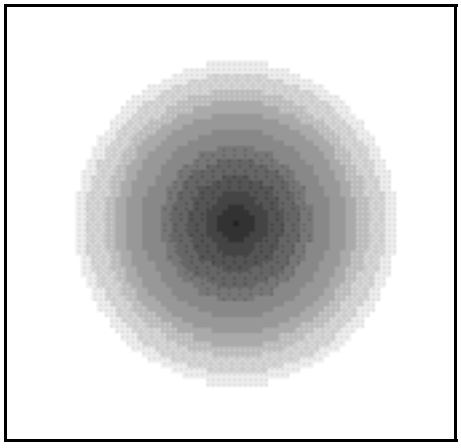
a)



Jeder Bildpunkt stellt eine Lokalisation des Elektrons dar. Messungen an vielen Atomen ergeben ein Bild, dessen Punktdichte proportional $|\psi|^2$ ist und die Wahrscheinlichkeit veranschaulicht, das Elektron im jeweiligen Volumenelement ΔV lokalisieren zu können.

Die Punktdichte nimmt nach außen exponentiell ab.

b)



Das Elektron nimmt den ganzen durch den Zustand n = 1 beschriebenen Raum ein. Die zweidimensionale Veranschaulichung zeigt die nach außen exponentiell abnehmende Ladungsdichte.

$e \cdot |\psi|^2 \cdot \Delta V$ gibt den Teil der Ladung des Elektrons im Volumen ΔV an. Dabei handelt es sich nur um eine Rechengröße. Bei Ladungsmessungen wird immer die gesamte Elementarladung gemessen.

- **Das H-Atom**

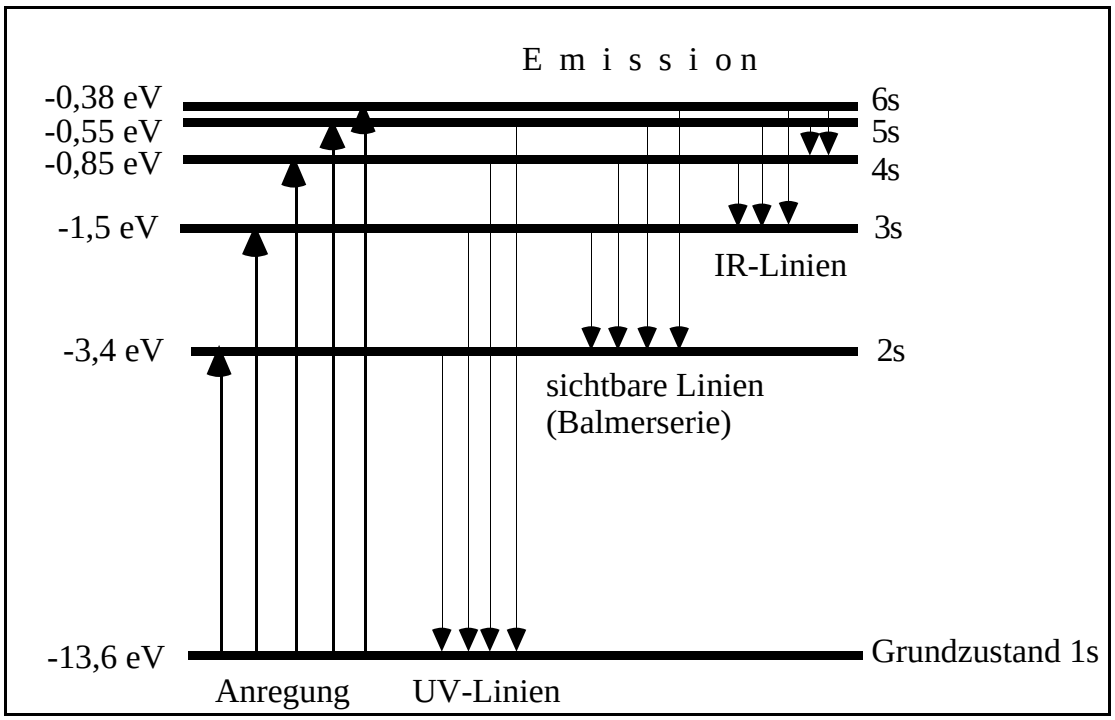
- Übergänge und Spektrallinien des H-Atoms

Infrarot	**Sichtbar**	**UV**
(6s - 5s) 7400 nm	(3s - 2s) 656 nm	(2s - 1s) 122 nm
(5s - 4s) 4050 nm	(4s - 2s) 486 nm	(3s - 1s) 103 nm
(6s - 4s) 2695 nm	(5s - 2s) 434 nm	(4s - 1s) 97 nm
(4s - 3s) 1875 nm	(6s - 2s) 410 nm	(5s - 1s) 95 nm
(5s - 3s) 1282 nm		(6s - 1s) 94 nm
(6s - 3s) 1094 nm		

- Sichtbares Spektrum des H-Atoms

Farbe	**Wellenlänge l**	**Frequenz f**	**Photonenenergie h·f**
rot	656 nm	457 GHz	1,89 eV
türkis	486 nm	617 GHz	2,55 eV
blau	434 nm	691 GHz	2,86 eV
violett	410 nm	731 GHz	3,02 eV

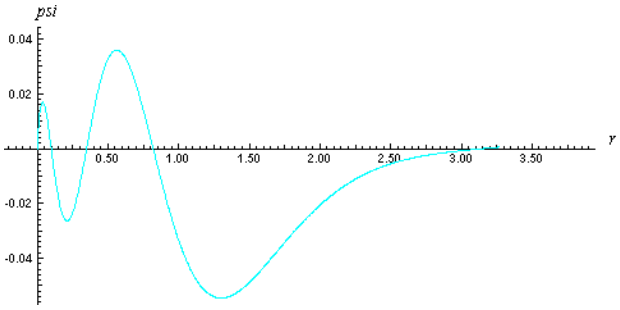
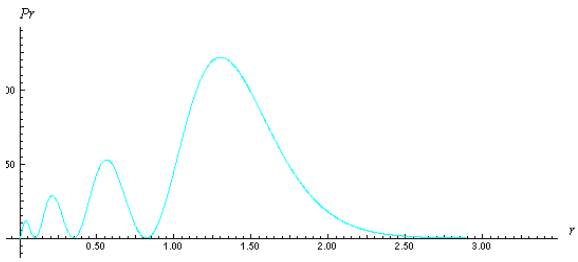
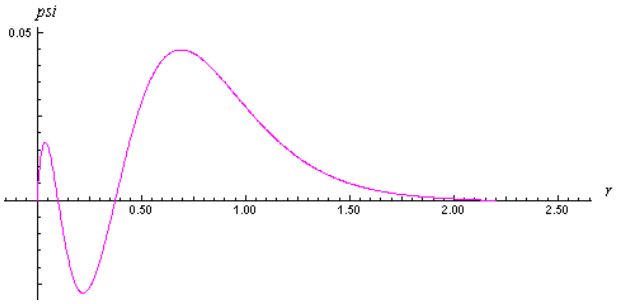
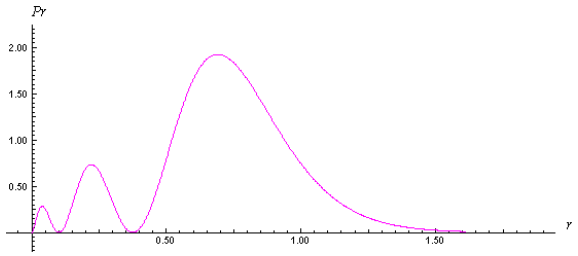
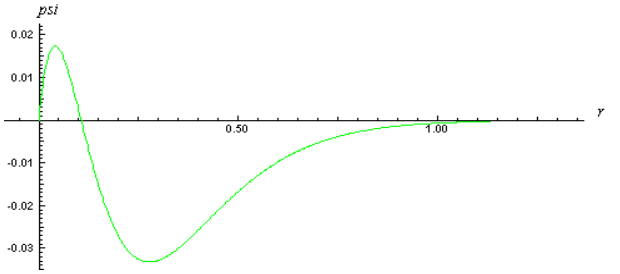
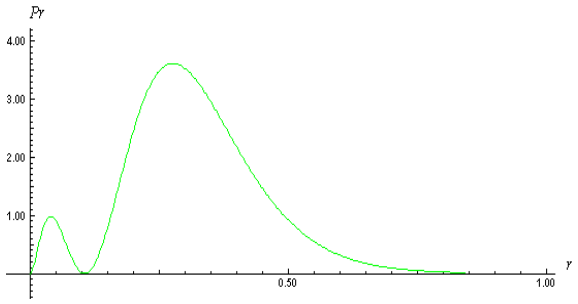
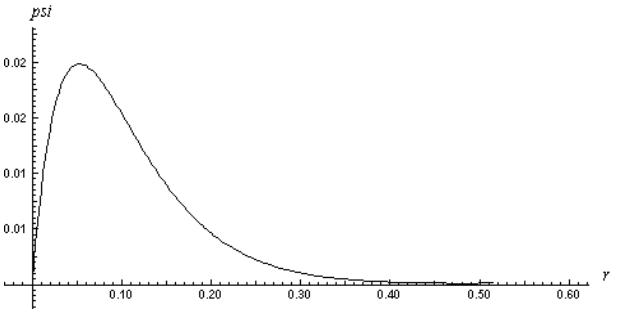
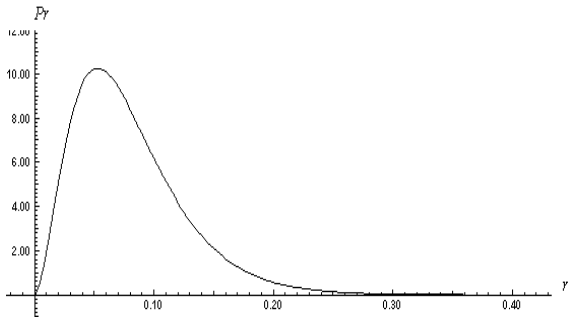
- Anregung und Emission



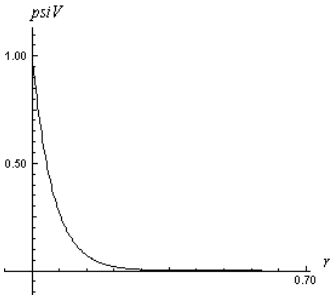
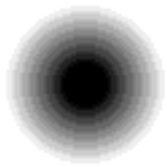
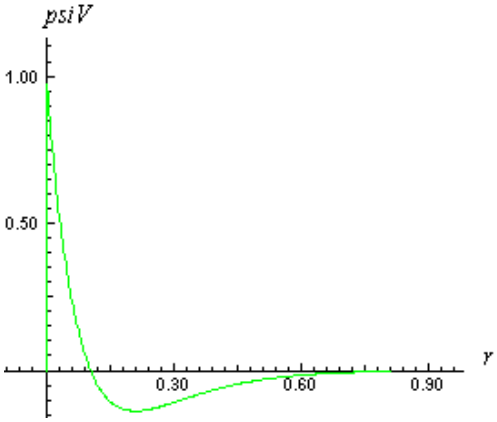
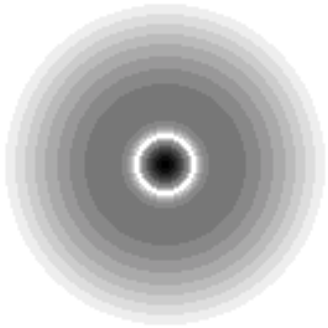
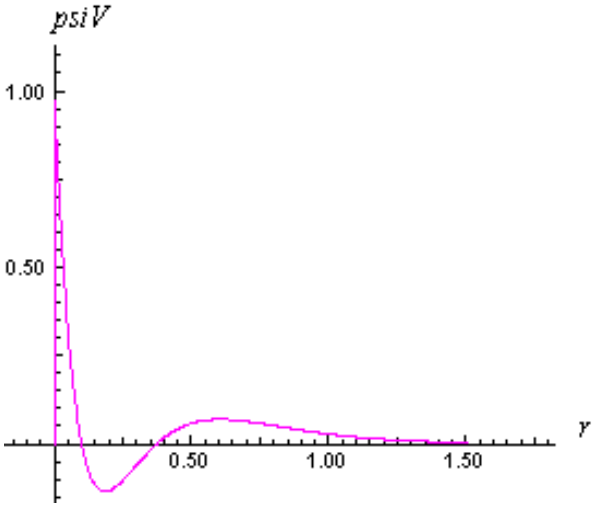
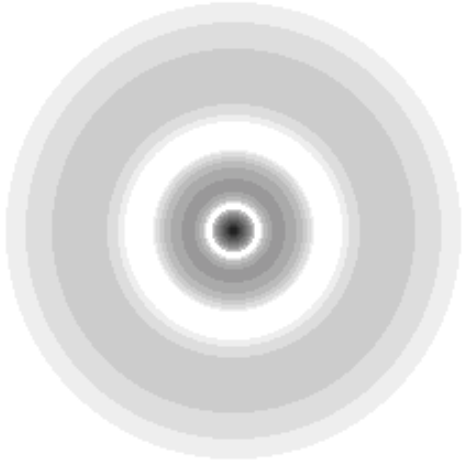
- Einige Zustandsfunktionen des H-Atoms

Zust.	(n, m, l)	Funktion	Zust.	(n,m,l)	Funktion
1s	1, 0, 0	$\psi = c \cdot e^{-\frac{r}{a}}$	$3p_z$	3, 1, +1	$\psi = c \cdot \left(\frac{z}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
2s	2, 0 ,0	$\psi = c \cdot \left(2 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3p_x$	3, 1, -1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$2p_x$	2, 1, +1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3p_y$	3, 1, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{y}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$2p_y$	2 ,1, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{y}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3d_{xy}$	3 ,2, +2	$\psi = c \cdot \left(\frac{x \cdot y}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$2p_z$	2, 1 ,-1	$\psi = c \cdot \left(\frac{z}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	$3d_{yz}$	3, 2 ,+1	$\psi = c \cdot \left(\frac{y \cdot z}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
3s	3, 0, 0	$\psi = c \cdot \left(27 - 18\frac{r}{a} + 2\frac{r^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$	$3d_{xz}$	3, 2, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{x \cdot z}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$a = \frac{\varepsilon_o \cdot h^2}{\pi \cdot e^2 \cdot m} = 0,053\,\text{nm}$: Radius des Maximums des Grundzustands = Bohrscher Radius c = jeweilige Normierungskonstante			$3dx_{2-y2}$	3 ,2, -1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x^2 - y^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
			$3d_{z2}$	3, 2, -2	$\psi = c \cdot \left(\frac{3z^2 - r^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$

- Die s-Zustände n = 1 bis n = 4 des H-Atoms (eindimensionale SGL)

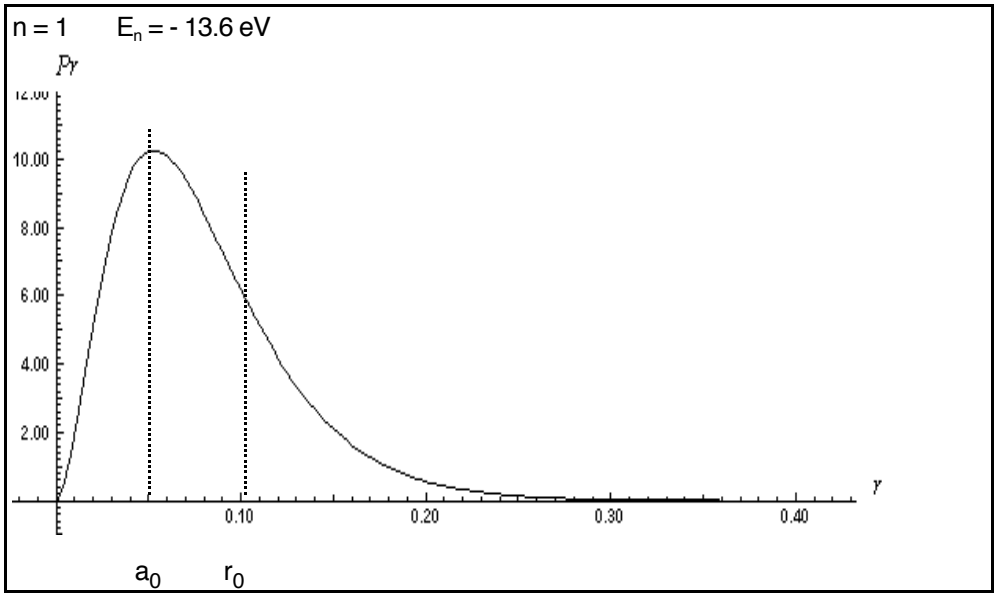
Zustandsfunktionen $\psi(r)$	**radiale Dichteverteilungen $P_r(r)$**
n = 4 E_n = - 0.85 eV 	n = 4 E_n = - 0.85 eV 
n = 3 E_n = - 1.5 eV 	n = 3 E_n = - 1.5 eV 
n = 2 E_n = - 3.4 eV 	n =2 E_n = - 3.4 eV 
n = 1 E_n = - 13.6 eV 	n =1 E_n = - 13.6 eV 

- Der Radialteil R(r) der Lösungen einer dreidimensionalen SGL des H-Atoms und Veranschaulichungen der zugehörigen Ladungsdichteverteilungen (s-Zustände)

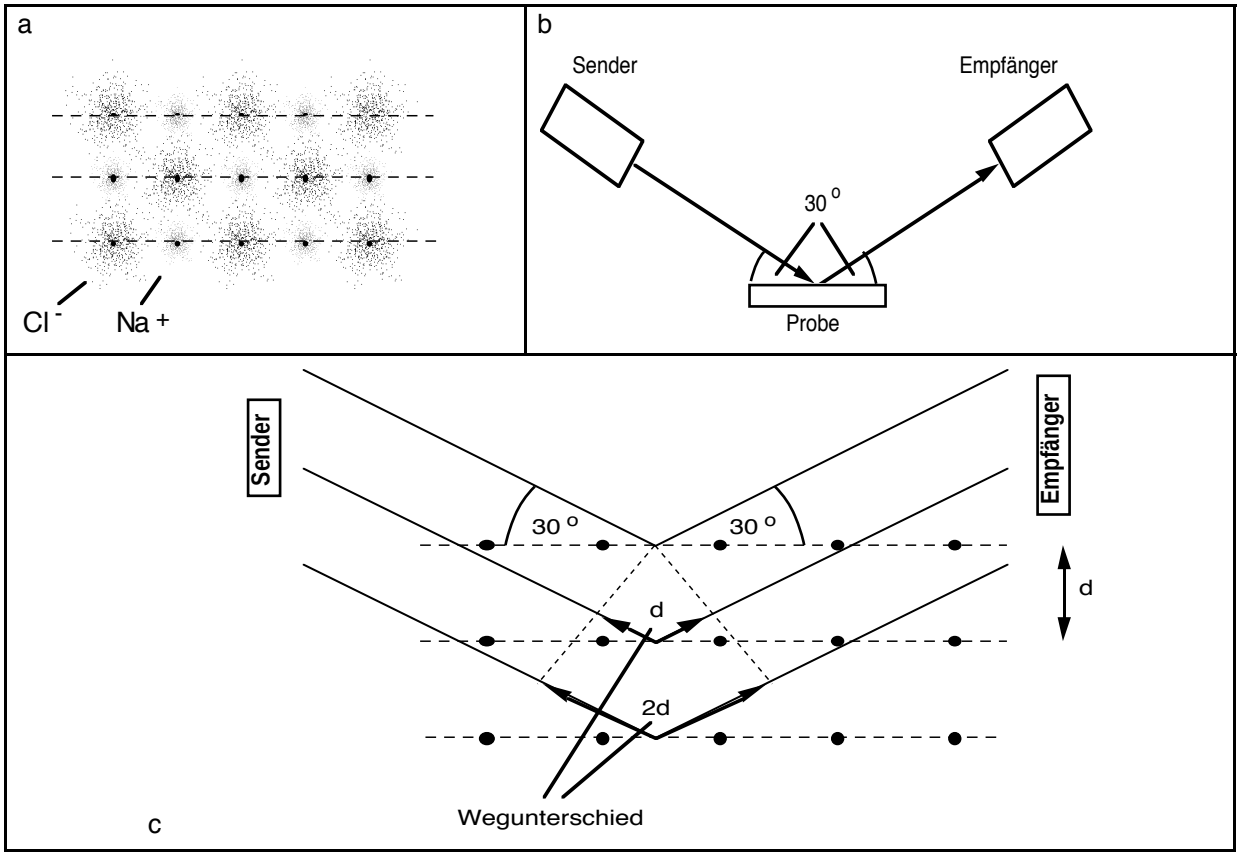
Radialtei R(r)	**Ladungsdichteverteilung $e \cdot R^2(r)$ (Schnitt)**
n = 1 	n =1 
n = 2 	n = 2 
n = 3 	n = 3 

- **Atomradien und Ionisierungsenergien**

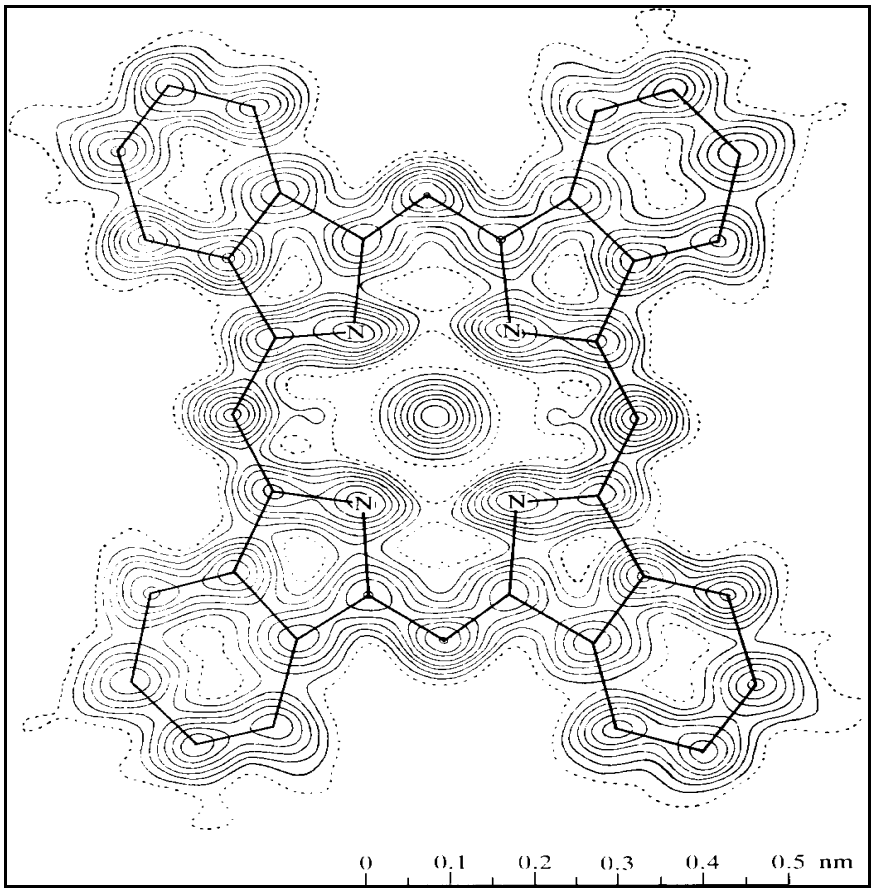
- Radiale Dichteverteilung, Bohrscher Radius a_0 und Wendepunkt r_0



- Zur Bestimmung des Ionenradius in Kristallgittern



- Die Ladungsdichteverteilung von Nickel-Phthalocyanin

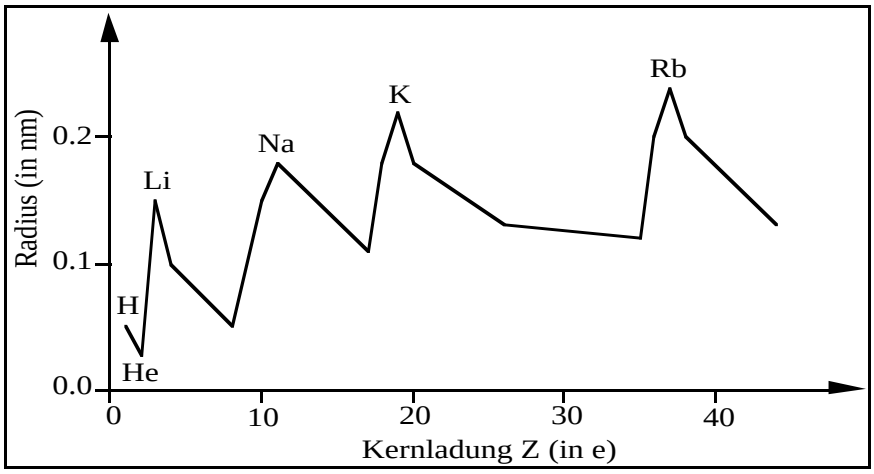


- Atom- und Ionenradien: Experimentelle (oben) und modellierte Werte (unten)

Element	Kovalenter Bindungsradius	aus gaskinetischer Theorie	in Kristallgitter	aus Wirkungs-querschnitt
H	0.032 nm	0.126 nm		
He		0.110 nm		0. 224 nm
Li	0.152 nm		0.151 nm	
Li^+			0.068 nm	

Element	Bohrscher Radius	Maximum der $\psi(r)$-Funktion	Letzter Wende-punkt der $\psi(r)$-Funktion	68% der Gesamt-ladung	90% der Gesamt-ladung
H	0.053 nm	0.053 nm	0.106 nm	0.093 nm	0.142 nm
He	--	0.025 nm	--	0.045 nm	0.070 nm
Li	--	0.150 nm	--	0.220 nm	0.300 nm
Li^+	--	0.020 nm	--	0.030 nm	0.050 nm

- Atomradien und Ordnungszahl (schematisch)



- Ionisierungsenergien einiger Atome und Ionen in eV

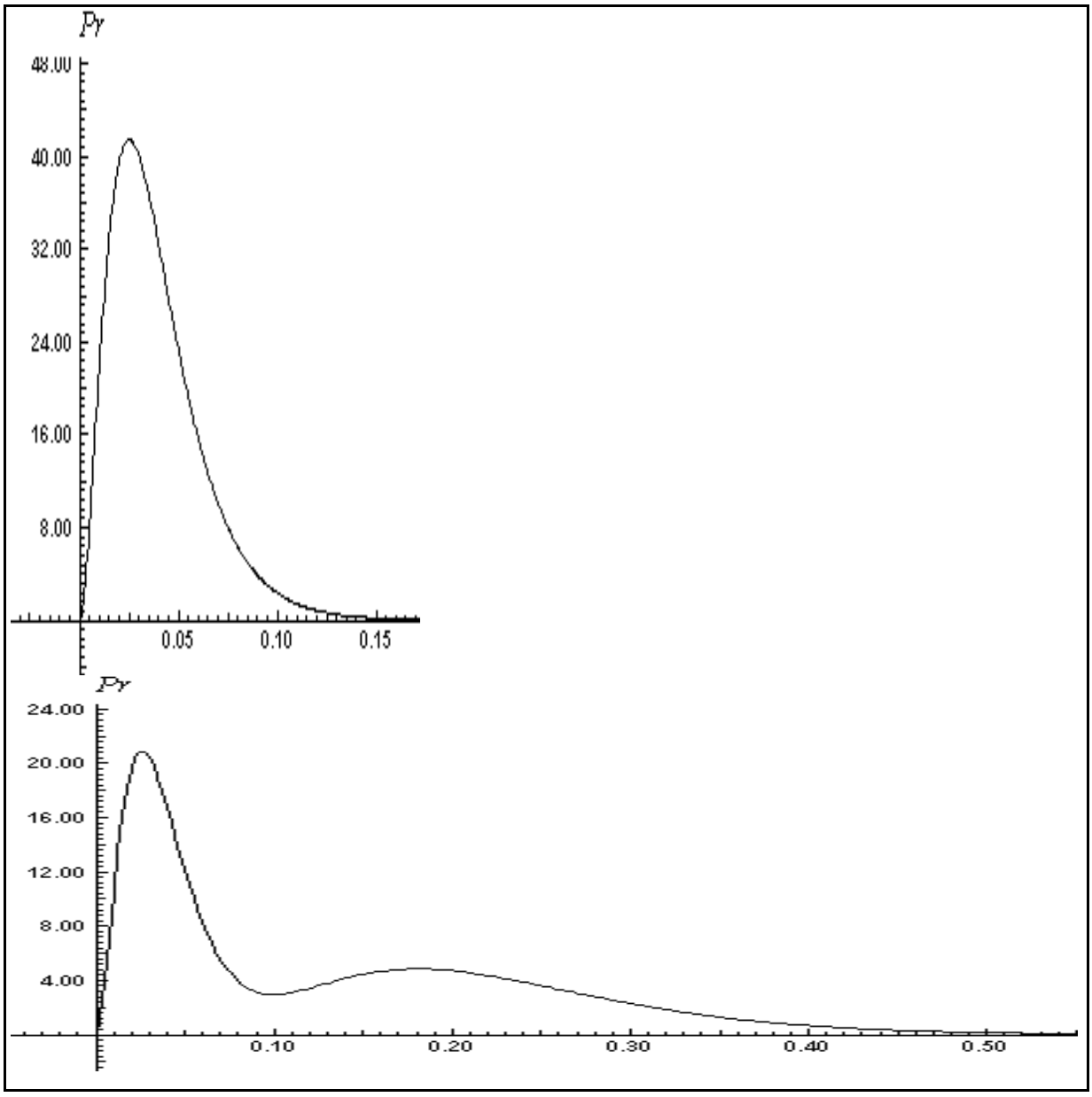
Z	Ladungszustand								
	1+	2+	3+	4+	5+	6+	7+	8+	.....
1 H	13.6								
2 He	24.6	54.4							
3 Li	5.4	75.6	122.5						
4 Be	9.3	18.2	153.9	217.7					
5 B	8.3	25.2	37.9	259.4	340.2				
6C	11.3	24.4	47.9	64.5	392.1	490.0			
7 N	14.5	29.6	47.5	77.5	97.9	552.1	667.0		
8 O	13.6	35.1	54.9	77.4	113.9	138.1	739.3	871.4	
9 F	17.4	35.0	62.7	.....					
10 Ne	21.6	41.0	63.5	.....					
11 Na	5.1	47.3	71.6	.....					
12 Mg	7.6	15.0	80.1	.....					
13 Al	6.0	18.8	28.4	.....					
14 Si	8.2	16.3	33.5	.....					
15 P	10.5	19.7	30.2	.....					
16 S	10.4	23.3	34.8	.....					
17 Cl	13.0	23.8	39.6	.....					
18 Ar	15.8	27.6	40.7	.....					
19 K	4.3	31.6	45.7	.....					
20 Ca	6.1	11.9	51.0	.....					

- **Höhere Atome**

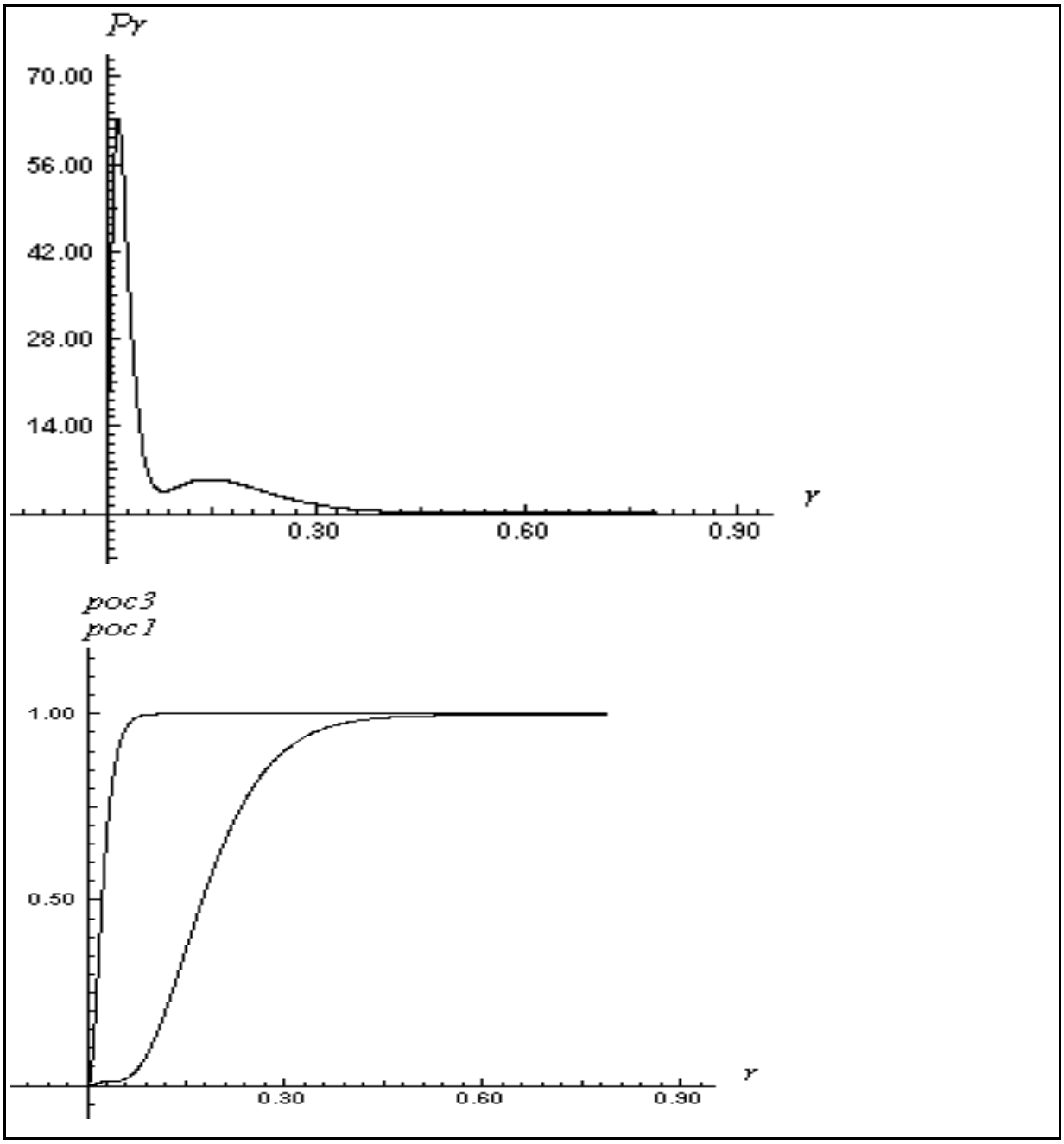
- Zustandsenergien von Helium: Modellierte Werte und Literaturwerte

Zustand	**E_1**	**E_2**	**Gesamtenergie**	**Literaturwert**
$(1s)^2$	-37.0 eV	-37.0 eV	- 74.0 eV	-79.0 eV
(1s)(2s)	- 53.8 eV	- 5.0 eV	- 58.8 eV	- 58.4 eV
(1s)(3s)	- 54.3 eV	- 1.9 eV	- 56.2 eV	- 55.9 eV
He-1^+	- 54.4 eV	----	- 54.4 eV	- 54.4 eV

- Radiale Dichteverteilungen von Helium: oben: Zustand $(1s)^2$, unten: (1s)(2s)



- Radiale Dichteverteilung Pr und Abschirmungsfaktor poc bei Lithium

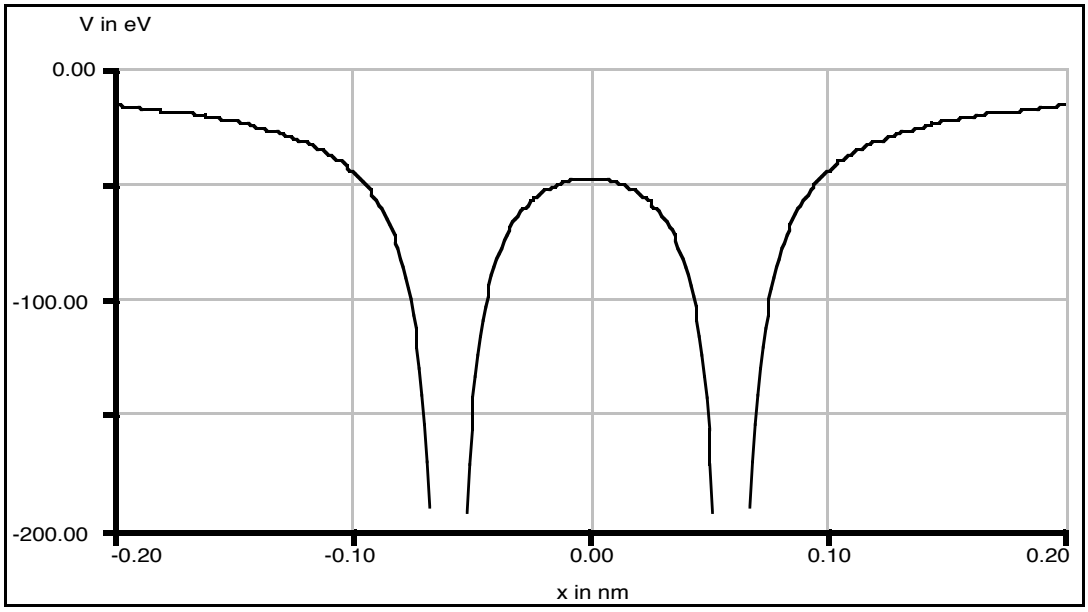


- Li-Atom im Grundzustand:

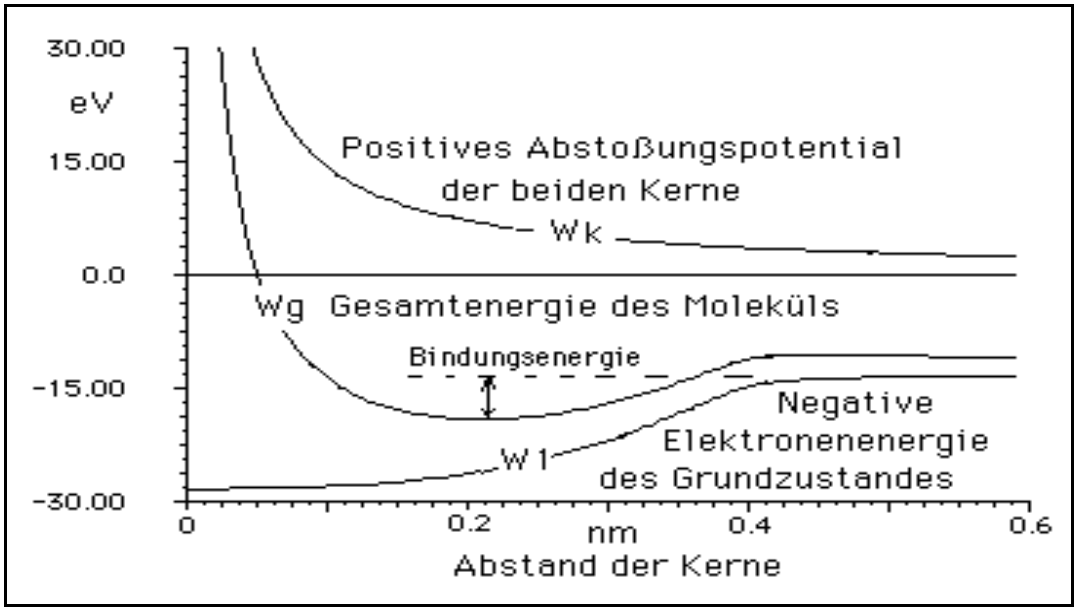
Äußere relatives Maximum bei ca.:	0.15 nm (He 0.025 nm)
Modellierte Energieeigenwerte:	-96.83 eV, -96.83 eV und - 5.84 eV
Modellierte Gesamtenergie:	- 199.5 eV
Gemessene Ionisationsenergien:	5.39 eV, 75.64 eV und 122.45 eV
Gemessene Gesamtenergie:	-203.5 eV

- **Das H_2^+-Molekülion**

- Das Potential des H_2^+-Molekülions, eindimensional



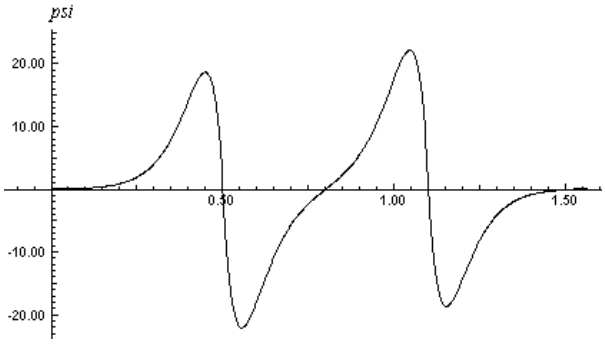
- Bindungsenergie des Molekülions und Kernabstand



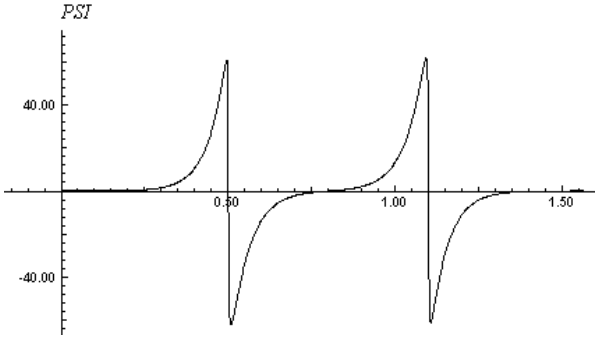
Die Energie wird hier mit W bezeichnet

- ψ-Funktionen des H_2^+-Molekülions eindimensionale SGL
- ψ-Funktionen des H_2^+-Molekülions dreidimensionale SGL

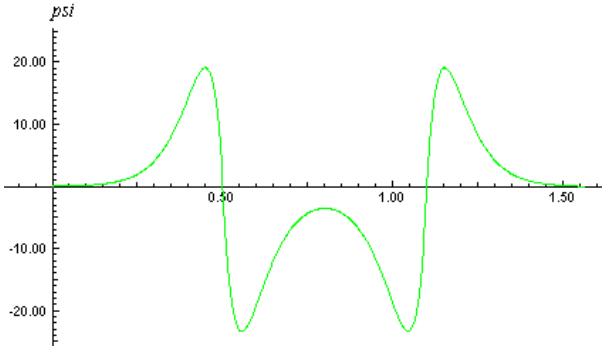
d = 0.6 nm En = - 15.98 eV Vabst = 2.4 eV



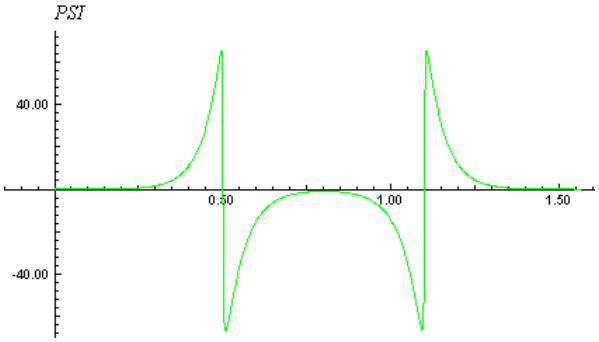
d = 0.6 nm En = - 15.98 eV Vabst = 2.4 eV



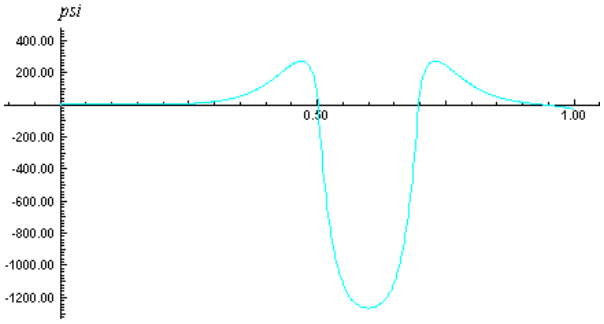
d = 0.6 nm En = - 16.05 eV Vabst = 2.4 eV



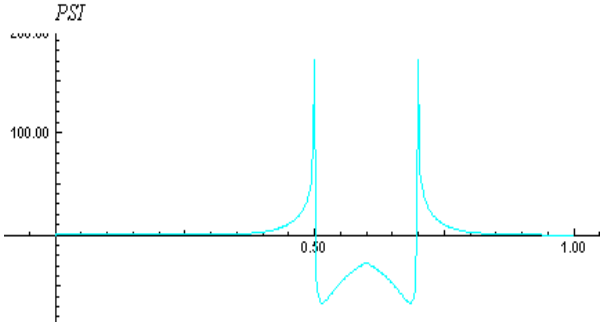
d = 0.6 nm En = - 16.05 eV Vabst = 2.4 eV



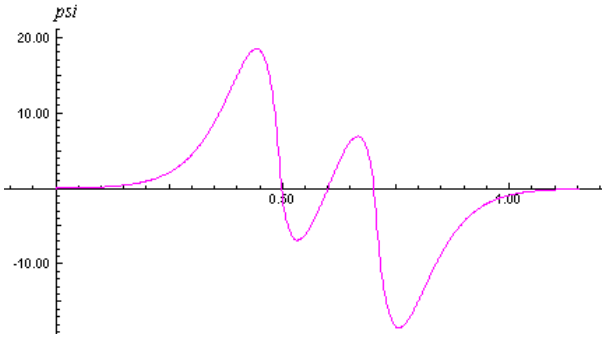
d = 0.2 nm En = - 17.55 eV Vabst = 7.2 eV



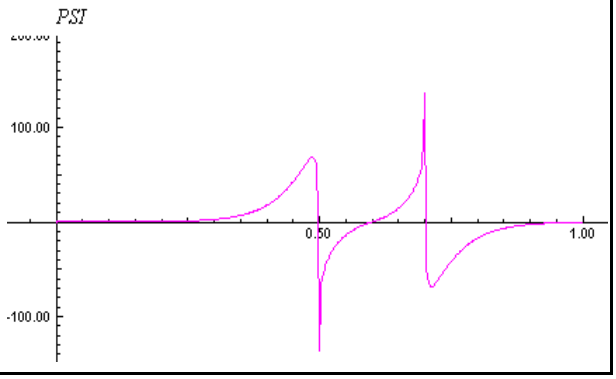
d = 0.2 nm En = - 17.55 eV Vabst = 7.2 eV



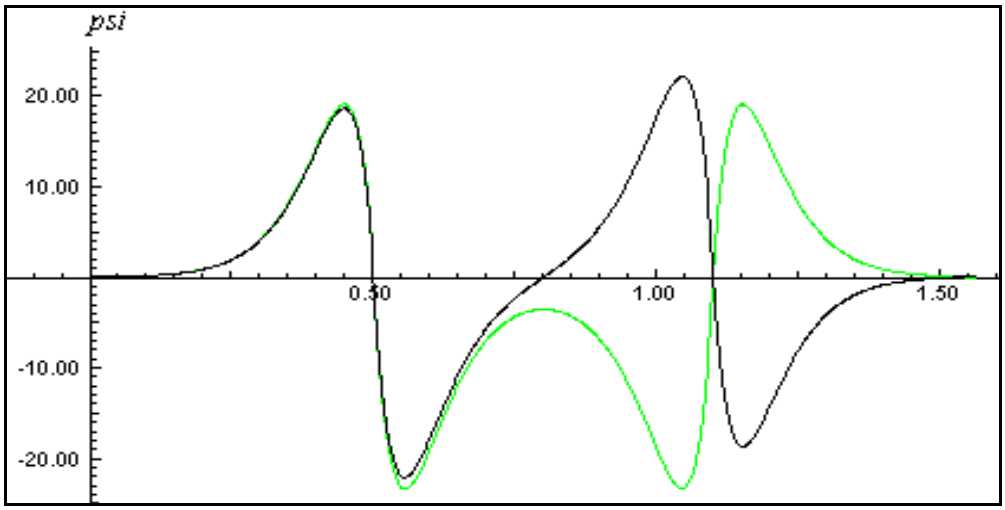
d = 0.2 nm En = - 26.28 eV Vabst = 7.2 eV



d = 0.2 nm En = - 26.28 eV Vabst = 7.2 eV

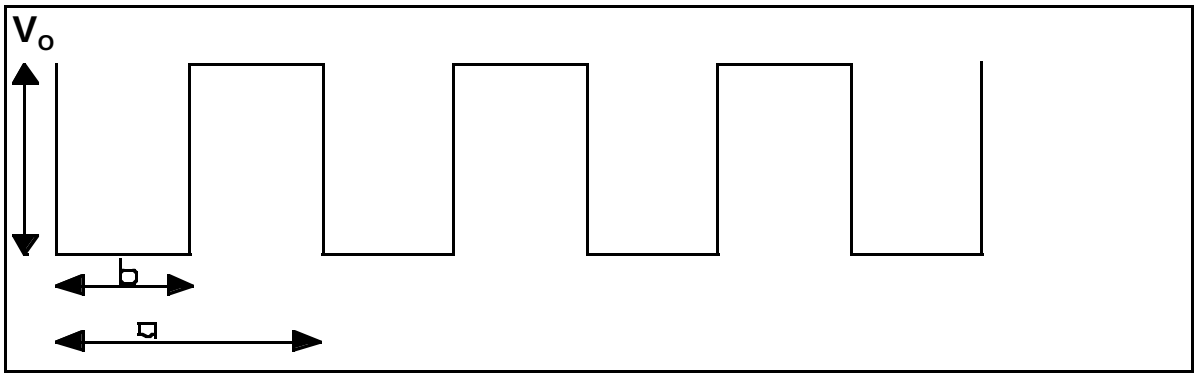


- Bindender und antibindender Zustand bei d = 0.6 nm



- **Festkörper**

- Kroning-Penney-Potential: Vo: Potentialschwelle a: Abstand zweier Gitterionen; b: Ionenradius

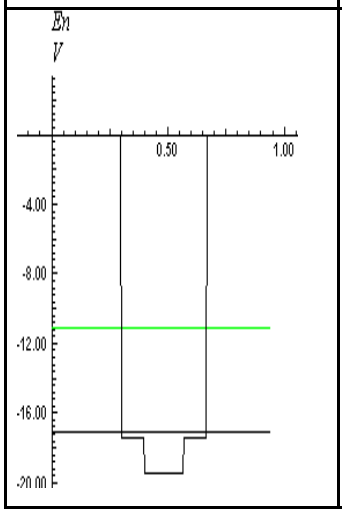
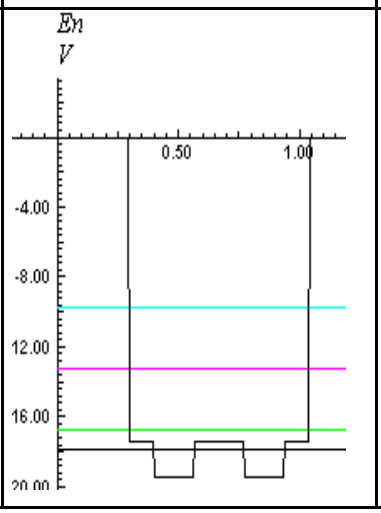
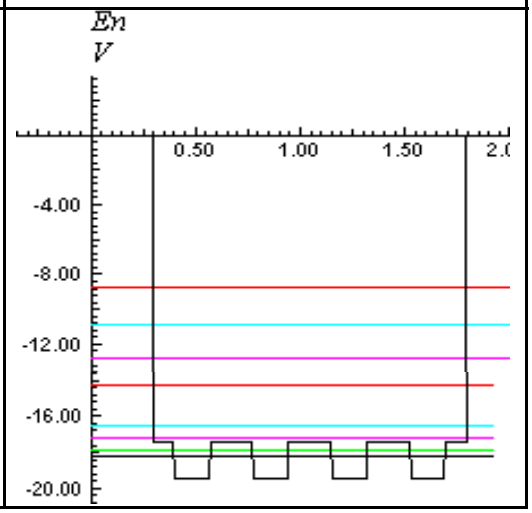


- Parameter für Potentialtopfmodelle einiger Hauptgruppenmetalle

Metall	r_a in nm	r_i in nm	a in nm	b in nm	a-b in nm	V_a in eV	V_i in eV	V_0 in eV
Lithium	0.152	0.076	0.304	0.152	0.152	18.95	25.26	3.16
Natrium	0.186	0.102	0.372	0.204	0.168	15.48	19.45	1.98
Cäsium	0.266	0.167	0.532	0.334	0.198	10.83	12.30	0.74
Magnesium	0.160	0.072	0.320	0.144	0.176	18.00	25.81	3.90

$2r_i = b$, $2r_a = a$, $V_0 = 1/2\,(V_a - V_i)$

- Potentialtöpfe und Energieniveaus für Natrium

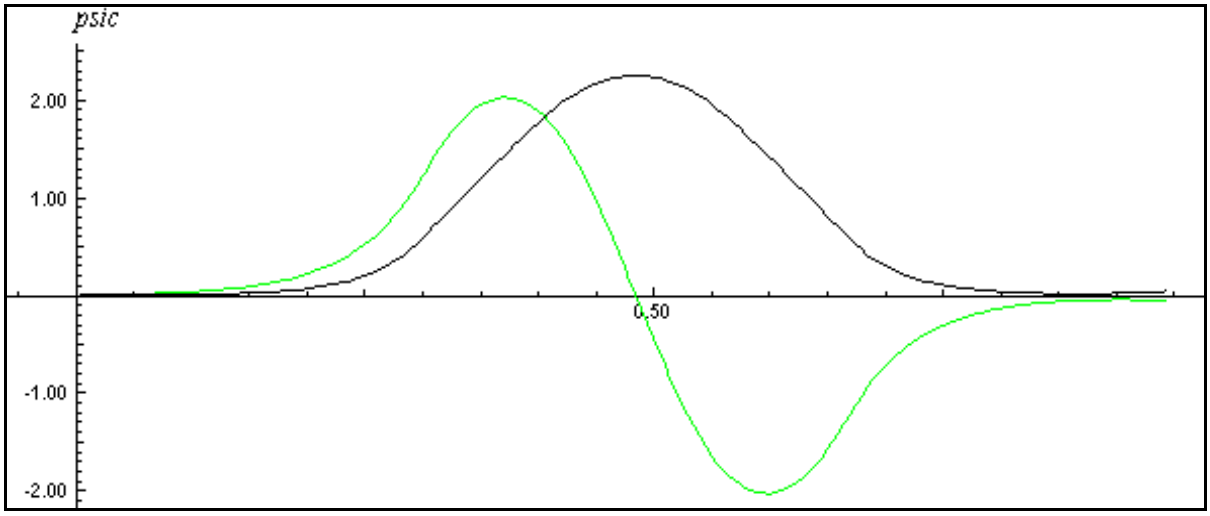
a: ein Na-Atom	b: zwei Na-Atome	c: vier Na-Atome
		

- Ermittelte Eigenwerte für Natrium (in eV) bei einer Schrittweite von 0.005 nm

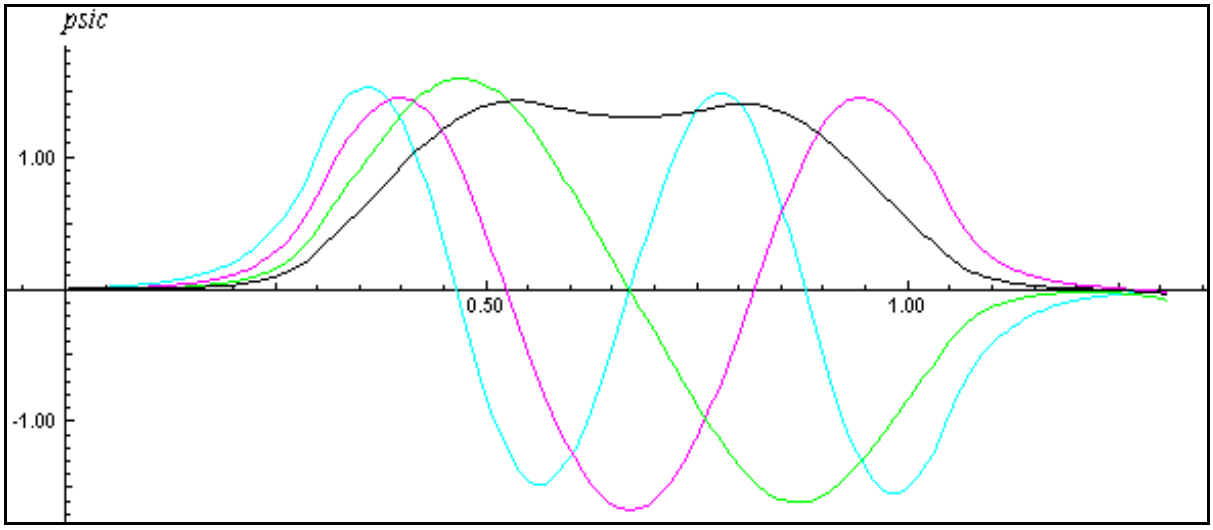
Ein Atom	Zwei Atome		Vier Atome:			
- 17.070	- 17.944	- 16.732	- 18.291	- 17.871	- 17.210	- 16.616
- 11.166	- 13.266	- 9. 735	- 14.306	- 12.802	- 10.926	- 8.734

- Die Zustandsfunktionen ψ zu den für Natrium berechneten Energieniveaus

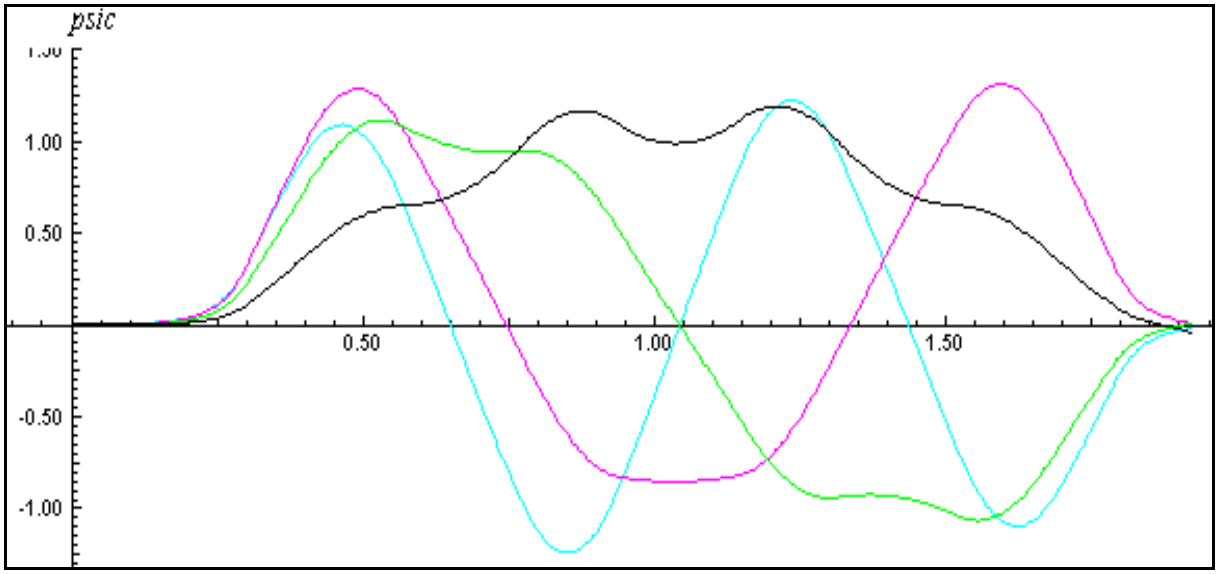
a: ein Na-Atom, Kern bei r = 0.48 nm

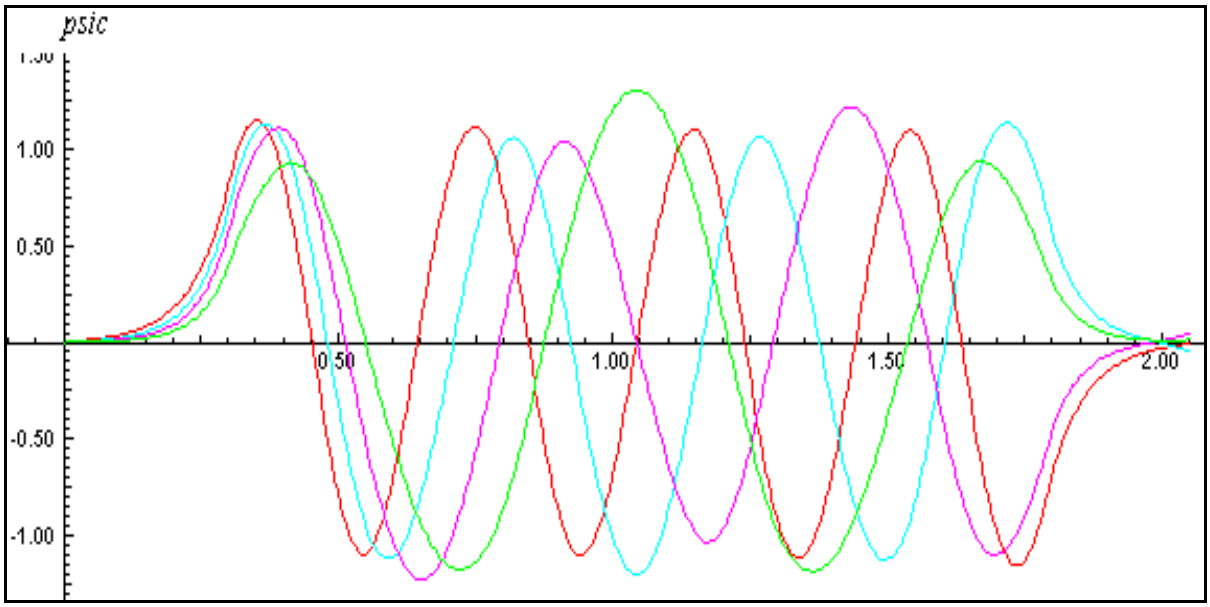


b: zwei Na-Atome, Kerne bei r = 0.48 und 0.85 nm



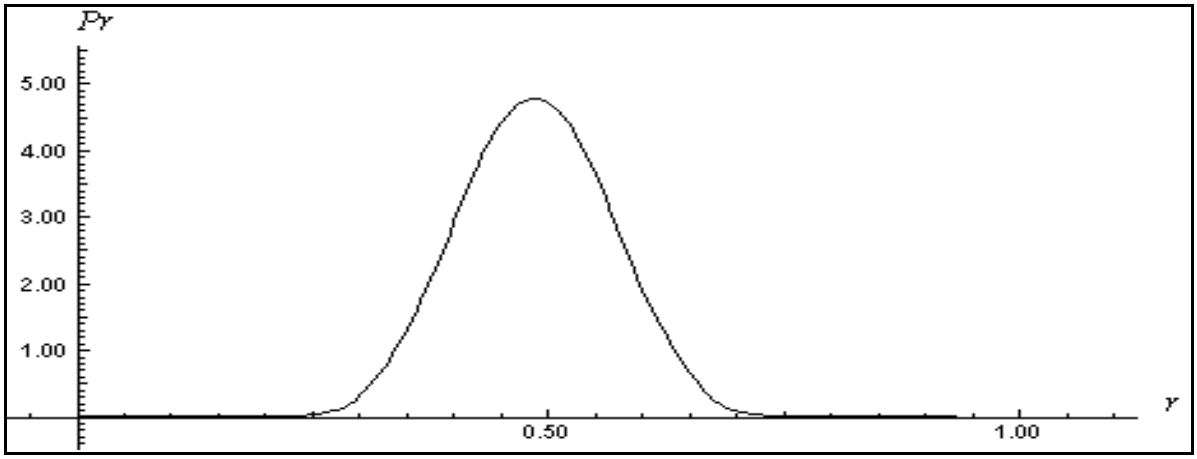
c: vier Na-Atome (Niveau 1 - 4 oben, 5 - 8 unten), Kerne bei r = 0.48 ; 0.85 ; 1.22 und 1.59 nm



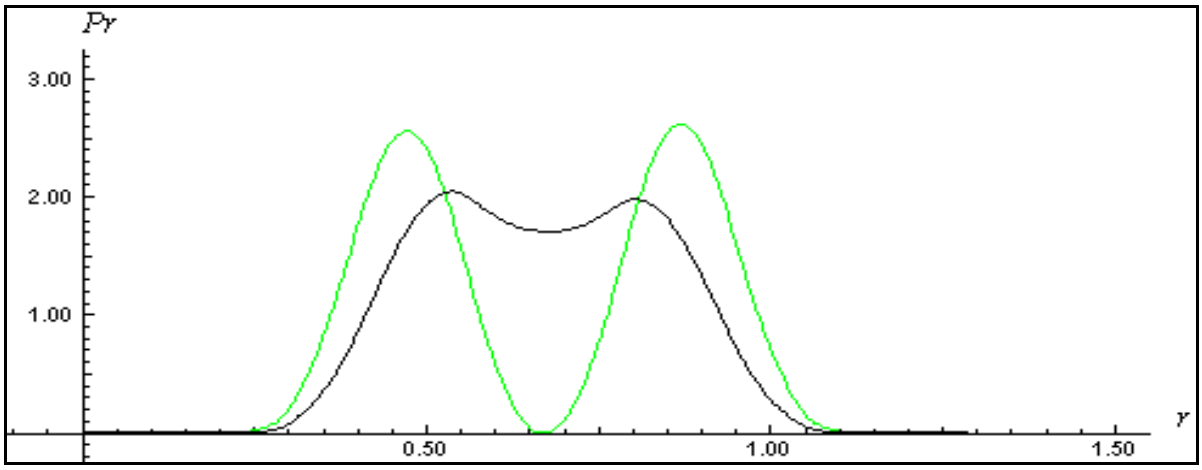


- Die Dichteverteilungen ψ^2 zu den für Natrium berechneten Energieniveaus

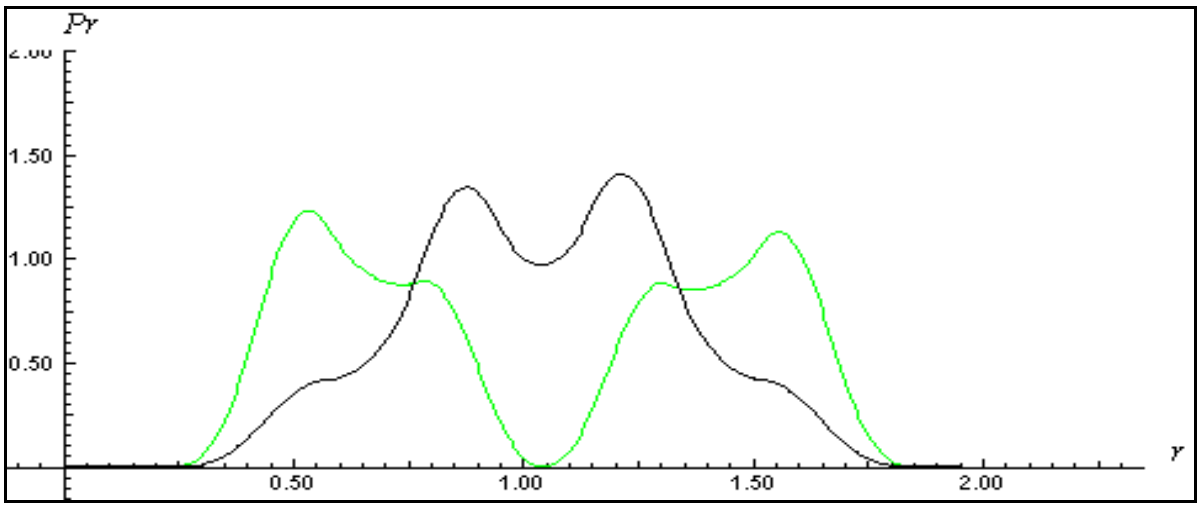
a: ein Na-Atom, Kern bei r = 0.48 nm

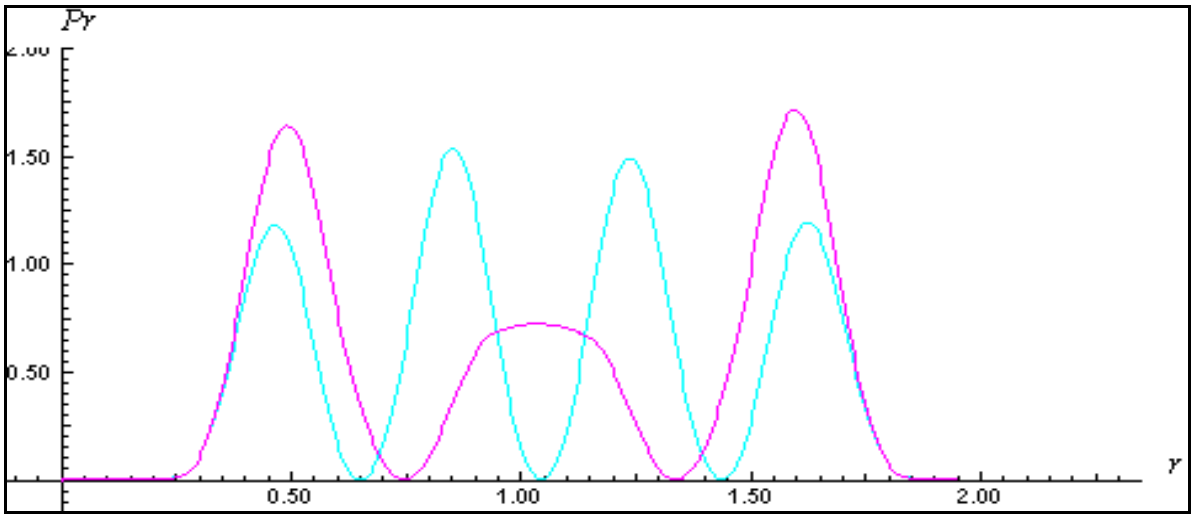


b: zwei Na-Atome, Kerne bei r = 0.48 und 0.85 nm



c: vier Na-Atome (Niveau 1 und 2 oben, 3 und 4 unten) Kerne bei r = 0.48 ; 0.85 ; 1.22 und 1.59 nm

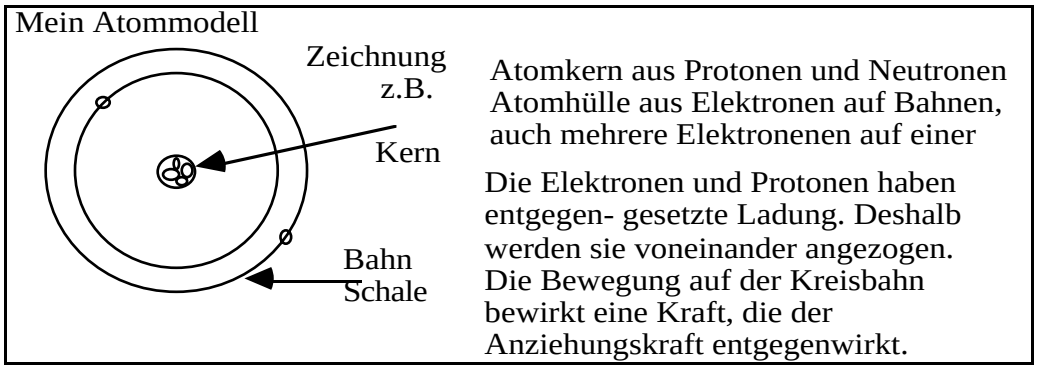




A.2 Beispiele für Aufgabenstellungen

- **Schülervorstellungen vom Atom vor Beginn des Unterrichts**

1) Ein Schüler hat seine Vorstellung über den Aufbau eines Atoms folgendermaßen beschrieben (Rekonstruktion eines Originals):



Kommentiere diese Vorstellung:

- Inwiefern entspricht diese Vorstellung Deiner eigenen Vorstellung und Deinen eigenen bisherigen Kenntnissen?

- Womit bist Du einverstanden, womit nicht?

- Wo würdest Du Ergänzungen vornehmen?

- Kennst Du andere Atommodell? Wenn ja, beschreibe sie!

- **Spektren**

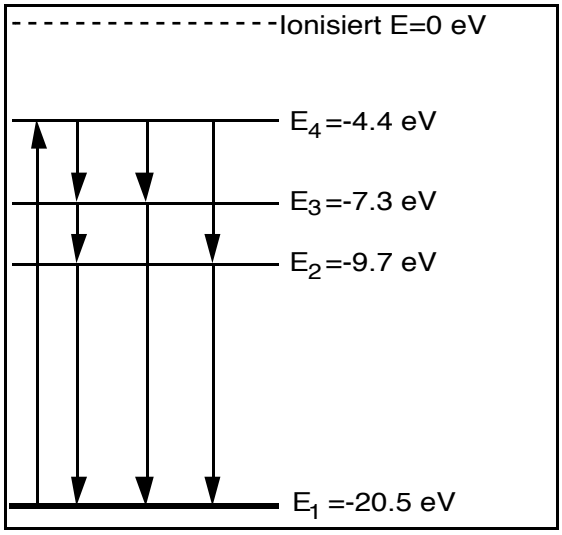
2) Das Energieniveauschema eines Atoms ist unten abgebildet. Die Atome liegen gasförmig in einer Glasröhre vor und werden mit Elektronen beschossen, die die Atome bevorzugt in den Zustand mit der Energie E_4 = -4.4 eV anregen (nach oben gerichteter Pfeil). Beim Zerfall der Atome gibt des drei mögliche "Zerfallskanäle".

a: Das Atom zerfällt über Zustand 3 und Zustand 2 in den Grundzustand (1).

b: Das Atom zerfällt über den Zustand 3 in den Grundzustand.

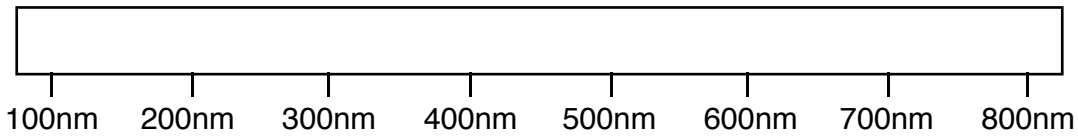
c: Das Atom zerfällt über den Zustand 2 in den Grundzustand.

Diese drei Fälle sind mit den nach unten gerichteten Pfeilen angedeutet.



- Wie sieht das Spektrum des Lichts dieses Gases aus, wenn man es mit einem Gitter nach den Wellenlängen "zerlegt"? ($h = 4.1*10^{-15}$ eV*s , $c = 3.0*10^{8}$m/s)

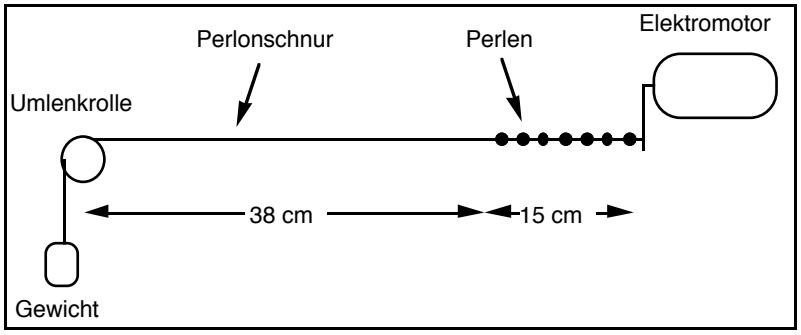
- Zeichne es in die Abbildung unter Berücksichtigung der Wellenlänge ein!



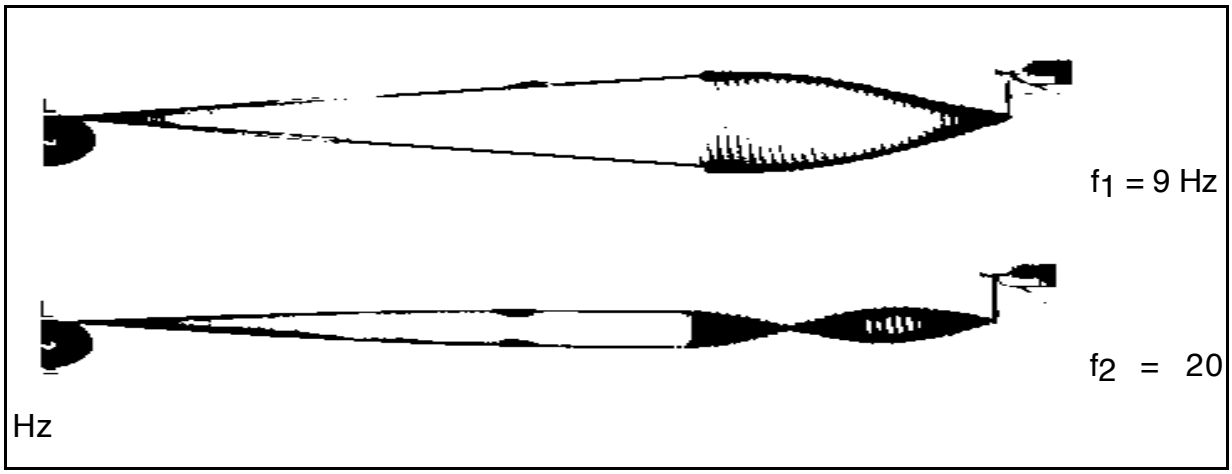
- Welche dieser Linien liegen im für den Menschen sichtbaren Bereich?

- **Stehende Seilwellen**

3) Die Skizze zeigt einen Versuch, mit dem durch einen Elektromotor ein Seil in Schwingungen versetzt. Die rechte Seite des Seils ist durch Perlen beschwert.



Die Fotos zeigen zwei Eigenzustände des Seils mit zugehörigen Motorfrequenzen. Auf der rechten Seite ist der Motor und auf der linken Seite die Umlenkrolle zu erkennen. Die Fotos sind Langzeitaufnahmen, die über mehrere Schwingungsdurchgänge aufgenommen worden sind.



- Worin unterscheiden sich die beiden Fotos (Zustände)?

- Welche Form erwartest Du für den nächst höheren Schwingungszustand? Fertige eine Zeichnung an und beschrifte sie kurz.

- Was erwartest Du von dem schwingenden Seil, wenn man eine Frequenz zwischen f = 9 Hz und f = 20 Hz einstellt?

- Welche Aussagen lassen sich zur Krümmung des Seil im Zustand 1 machen?

- Worin unterscheidet sich die Krümmung des Seil in Zustand 1 und in Zustand 2?

- **Zustand**

4) Was bedeutet für Dich der Begriff Zustand?

Formuliere zwei Sätze, in denen das Wort Zustand vorkommt.

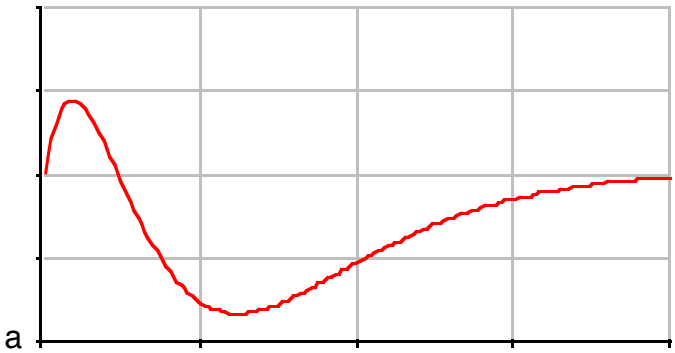
Was bedeutet es für Dich, wenn man sagt, dass sich ein Auto in einem bestimmten Zustand befindet? Was bedeutet es für Dich, wenn man sagt, dass sich ein Atom in einem bestimmten Zustand befindet?

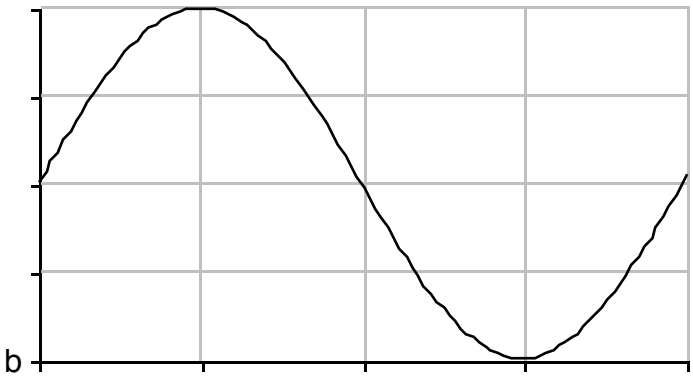
5) Wie unterscheiden sich grundsätzlich der Zustand eines klassischen Teilchens und der eines Quantensystems?

Was bedeutet ein Eigenzustand a) klassisch b) quantenmechanisch?

- **Krümmung**

6) Markiere bei den unten gezeichneten Funktionen (a. und b.) die Orte der Funktion mit größter Krümmung mit einem Kreuz und die Orte der Funktion mit Krümmung Null mit einem Kreis.





- **Paarbeziehungen**

7) Welche der genannten Begriffe gehören jeweils paarweise zusammen?

Grundzustand, Abschirmung, Lichtaussendung, Zustand niedrigster Energie, Photon, Übergang zwischen zwei Zuständen, Licht, Atome mit mehreren Elektronen

Erkläre kurz Deine Auswahl!

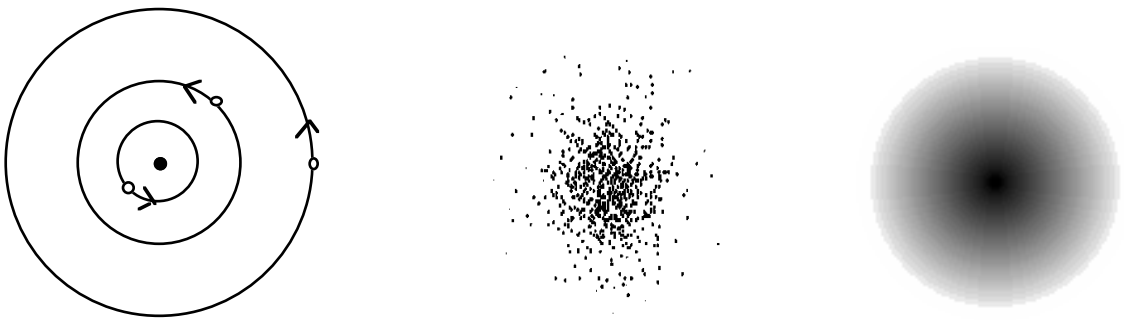
- **Modellierung des H-Atoms**

8) Wie muss man vorgehen, um die Zustände und Energiewerte des Wasserstoff-Atoms mit dem Computer zu bestimmen?

Beginne Deine Beschreibung mit dem Start der Software MODELLUS auf dem Computer.

- **Atommodelle**

9) Beschreibe die Gemeinsamkeiten und Unterschiede der drei Atommodelle:

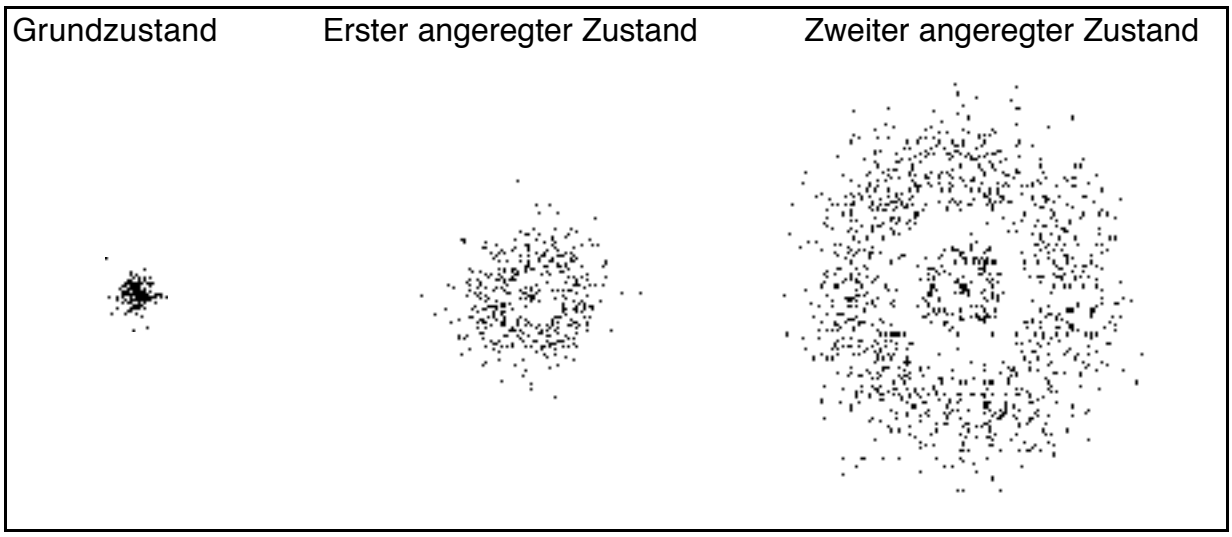


(a) Elektronenbahnen (b) Lokalisationswahrscheinlichkeit (c) Ladungsverteilung!

Vergleiche die drei Atommodelle mit einem Querschnitt durch

a) eine Kirsche b) eine Zwiebel c) einen Rosinenkuchen d) die Erde mit Lufthülle

10) Erkläre die Bedeutung folgender Darstellungen von Zuständen des H-Atoms:



- Skizziere und diskutiert den Zusammenhang mit den $\psi^2(r)$ -Kurven!

- Welche Interpretation der ψ-Funktion liegt zugrunde? (Erkläre den Begriff)

- Wie könnten diese Abbildungen entstanden sein?

- Wie könnte man diese Abbildungen missverstehen?

- **Orbitale / Schale**

11) Welche Beziehungen bestehen zwischen den Begriffen Atom, Schale, Orbital und Elektron?

Wodurch ist es begründet von einer Schalenstruktur der Atomhülle zu sprechen?

12) Welche Zustände des H-Atoms beschreiben die folgenden Funktionen?

a) $\psi = c \cdot \left(27 - 18\frac{r}{a} + 2\frac{r^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$, b) $\psi = c \cdot \left(\frac{x \cdot z}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$

- Welche Gestalt und Lage haben die Knotenflächen?

- Skizziere die zugehörigen Orbitale!

- Welche Quantenzahlen kennzeichnen die beiden Zustände?

- Was bedeuten die Quantenzahlen n, m und l?

- **Schrödinger-Gleichung**

13) Die Schrödinger-Gleichung für das H-Atom lautet:

$$\psi_n''(r) = -\,26.25\ \mathrm{eV}^{-1}\,\mathrm{nm}^{-2}\cdot\left(E_n + 1.44\ \mathrm{eV\ nm}\cdot\frac{1}{r}\right)\cdot\psi_n(r)$$

- Berechne für die mit dem Computer ermittelten Energieeigenwerte die Radien an denen gilt: En = V(r) !

- Markiert diese Radien an den Funktionsgraphen!

- Wie ändert sich an diesem Punkt die ψ–Kurve?

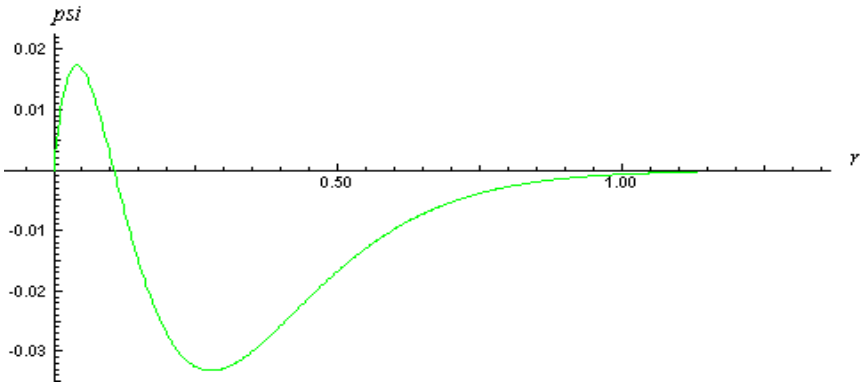
- Was spricht dafür, den Radius des Atoms über diesen Wert zu definieren?

- Welche theoretischen Alternativen zur Definition des Atomradius gibt es?

- Beschreibe ein experimentelles Verfahren zur Bestimmung des Atomradius!

- Was kannst Du über das Verhältnis von theoretischen und experimentellen Werten aussagen?

14) Wie läßt sich die Gestalt der abgebildeten Zustandsfunktion aus der SGL erklären? ("Sinusartigkeit", asymptotisches Verhalten, Form und unterschiedliche Größe der Bäuche)



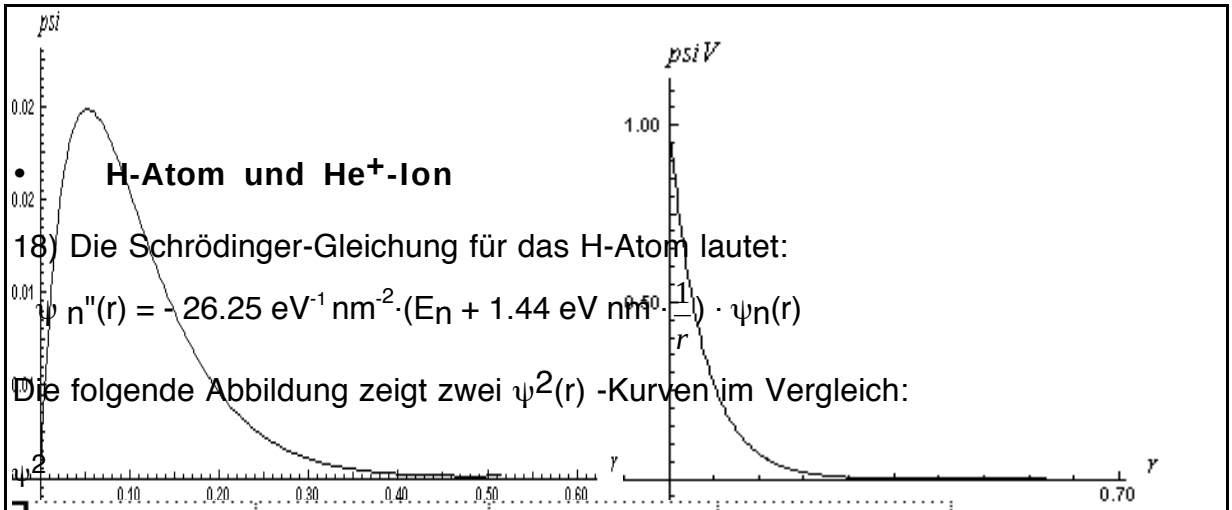
15) Erkläre mit Hilfe des Krümmungsbegriffs: Warum gibt es beim H-Atom keinen stabilen Zustand mit $E_n < -13{,}6$ eV und entsprechend kleinerem Atomradius ?

16) Erkläre die Stabilität des Atoms aus der SGL!

17) Die beiden unten abgebildeten Verteilungsfunktionen beziehen sich auf den 1s-Zustand des H-Atoms.

- Worin besteht der Zusammenhang der beiden Kurven (mit Formel)?

- Inwieweit ist der Unterschied physikalisch wichtig?

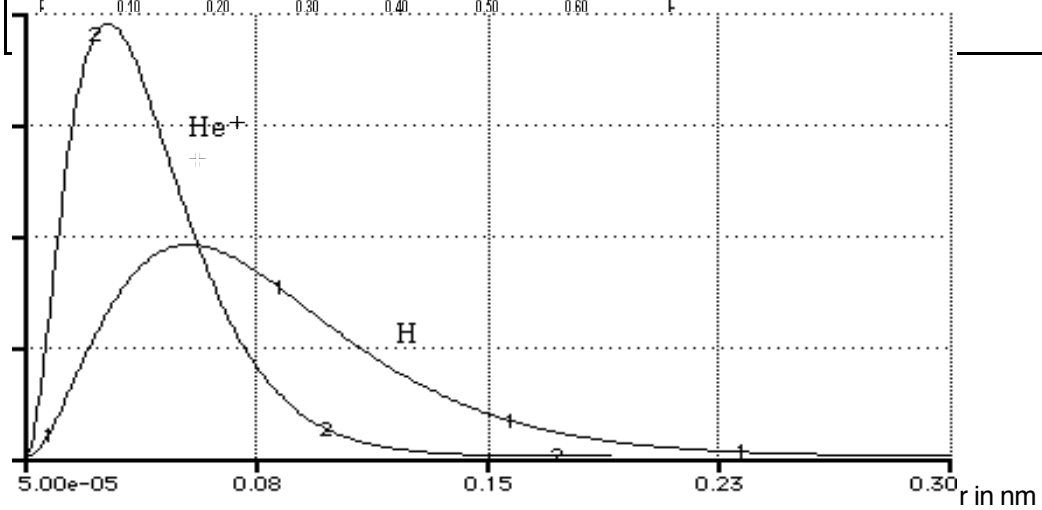


- **H-Atom und He$^+$-Ion**

18) Die Schrödinger-Gleichung für das H-Atom lautet:

$$\psi_n''(r) = -26.25\ \text{eV}^{-1}\,\text{nm}^{-2}\cdot\left(E_n + 1.44\ \text{eV nm}\cdot\frac{1}{r}\right)\cdot\psi_n(r)$$

Die folgende Abbildung zeigt zwei $\psi^2(r)$ -Kurven im Vergleich:



Kurve 1 zeigt die ψ^2-Kurve eines Zustands des H-Atoms. Kurve 2 zeigt eine ψ^2-Kurve eines Zustands des He$^+$-Ions, das aus 2 Protonen, 2 Neutronen und einem Elektron besteht. Beide Kurven sind auf 1 normiert.

Der Energieeigenwert dieses Zustands des He$^+$-Ions ist: E = - 54,4 eV.

- Um welchen Zustand handelt es sich in beiden Kurven? Begründung!

- Wie hoch ist der Energieeigenwert dieses Zustands im H-Atom?

- Welche beiden für H-Atom und He^+-Ion experimentell bestimmbaren Meßgrößen lassen sich direkt aus diesen theoretischen Daten (Kurven und Energiewerte) vorhersagen? Welche Meßergebnisse erwartest Du jeweils ?

- Wie lautet die Formel für das Potential V(r) des He^+-Ions?

- Gib die Schrödinger-Gleichung (SGL) für das He^+-Ion an!

- Wie läßt sich der unterschiedliche Energieeigenwert erklären?

- Erkläre die Abweichungen der ψ^2-Kurve des He^+-Ions von der ψ^2-Kurve des H-Atoms, indem Du das Krümmungsverhalten der entsprechenden ψ-Kurven aus der jeweiligen SGL analysieren!

- Zeichne ein Diagram für die ψ^2-Kurve des zweiten Zustand des He^+-Ions (mit Maßstab an der r-Achse) ! Wie groß schätzt Du den Energieeigenwert dieses Zustandes (Begründung)?

- **Lithium**

19) Die Modellgleichungen für ein Li-Atom in MODELLUS lauten.

$$\frac{dpsi1}{dr} = spsi1$$

$$\frac{dpsi2}{dr} = spsi2$$

$$\frac{dpsi3}{dr} = spsi3$$

$$\frac{dspsi1}{dr} = -26.25 \times \left(En1 + 1.44 \times (3 - poc2 - poc3) \times \frac{1}{r} \right) \times psi1$$

$$\frac{dspsi2}{dr} = -26.25 \times \left(En2 + 1.44 \times (3 - poc1 - poc3) \times \frac{1}{r} \right) \times psi2$$

$$\frac{dspsi3}{dr} = -26.25 \times \left(En3 + 1.44 \times (3 - poc1 - poc2) \times \frac{1}{r} \right) \times psi3$$

$$\frac{dpoc1}{dr} = z1$$

$$\mathbf{if}(r <= 0.17)\ \mathbf{then} \left(z1 = \frac{psi1^2}{c1} \right)$$

$$\mathbf{if}(r > 0.17)\ \mathbf{then}\ (z1 = 0)$$

$$\frac{dpoc2}{dr} = z2$$

$$\mathbf{if}(r <= 0.17)\ \mathbf{then} \left(z2 = \frac{psi2^2}{c2} \right)$$

$$\mathbf{if}(r > 0.17)\ \mathbf{then}\ (z2 = 0)$$

$$\frac{dpoc3}{dr} = \frac{psi3^2}{c3}$$

$$Pr = z1 + z2 + \frac{psi3^2}{c3}$$

- Wie drückt sich die Anzahl der Elektronen von Lithium in Modell aus?

- Erkläre möglichst ausführlich: Wie wird die gegenseitige Wechselwirkung der Elektronen im Modell berücksichtigt?

- Weswegen sind die if-Bedingungen notwendig?

- Wie wird bei der Modellierung (nicht in den Modellgleichungen) das Pauli-Prinzip berücksichtigt?

- Skizziere den zu erwartenden Verlauf der Kurven poc1, poc 2 und poc 3!

- Was bedeutet Pr? Welcher Funktionsverlauf ist für Pr zu erwarten?

- Was bedeuten die Faktoren c1, c2 und c3?

20) Ein Lithium-Atom hat einen dreifach positiv geladenen Kern und drei Elektronen.

- Was besagt das Pauli-Prinzip?

- Welche Konsequenzen ergeben sich aus dem Pauli-Prinzip für Lithium!

- Wie wirken sich diese Konsequenzen bei der Modellierung des Li-Atoms im Grundzustand aus? (Vergleich mit Helium)

21) Die drei Elektronen des Lithium-Atoms im Grundzustand (1s)(1s)(2s) besitzen folgende Bindungsenergien. E_1 = -96.3eV E_2 = -96.3eV E_3 = -5.8eV

- Skizziere die zugehörigen ψ-Funktionen und die radiale Dichteverteilung!

- Welche Energie besitzt das Lithium-Atom in diesem Zustand?

Das Lithium-Atom wird nun in den (1s)(1s)(3s)-Zustand angeregt.

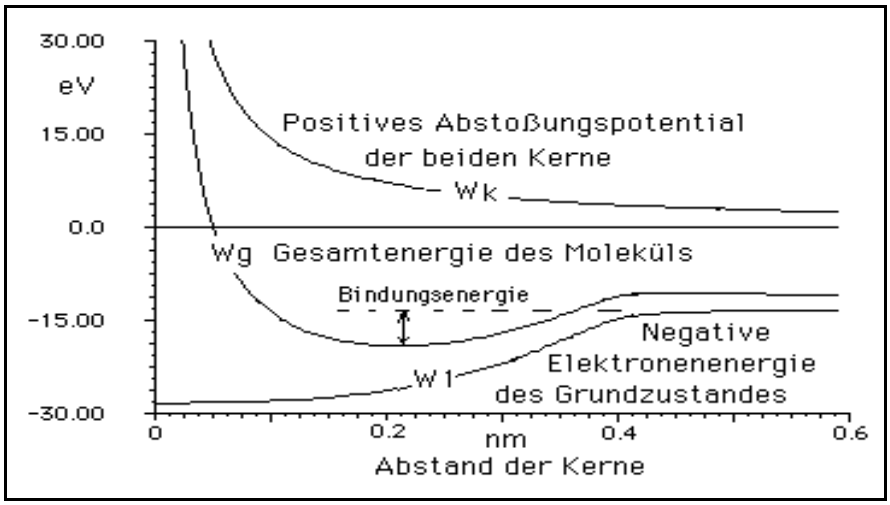
- Was bedeutet das für die ψ-Funktionen und Energien der einzelnen Elektronen 1, 2 und 3 (es sind keine Zahlenangabe der Energien erforderlich; es reicht die Aussage, ob die einzelnen Energien kleiner, gleich oder größer sein werden)?

- Begründe Deine Voraussage über die ψ-Funktionen und Energien der einzelnen Elektronen.

- **Das H_2^+-Molekülion**

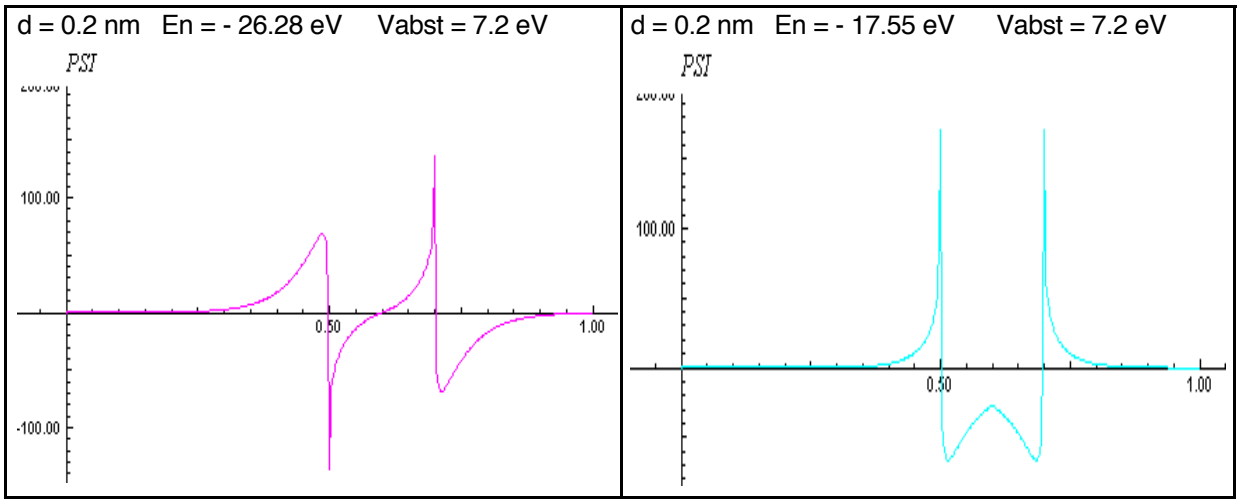
22) Wie kann man sich die Molekülbindung mit der Ladungsdichteinterpretation der ψ-Funktion plausibel erklären? Erläutere den Sachverhalt an einer Beispielskizze!

23) Erläutere anhand der Abbildung, unter welchen Bedingungen beim H_2^+-Molekülion eine stabile Bindung entsteht!



24) Für das H_2^+-Molekülion wurden bei d = 0.2 nm folgende Eigenwerte und Zustandsfunktionen (niedrigste Zustände) ermittelt.

Erläutere, interpretiere und diskutiere die Daten! Betrachte dabei auch den Grundzustand des H-Atoms von - 13.59 eV.



- **Festkörper**

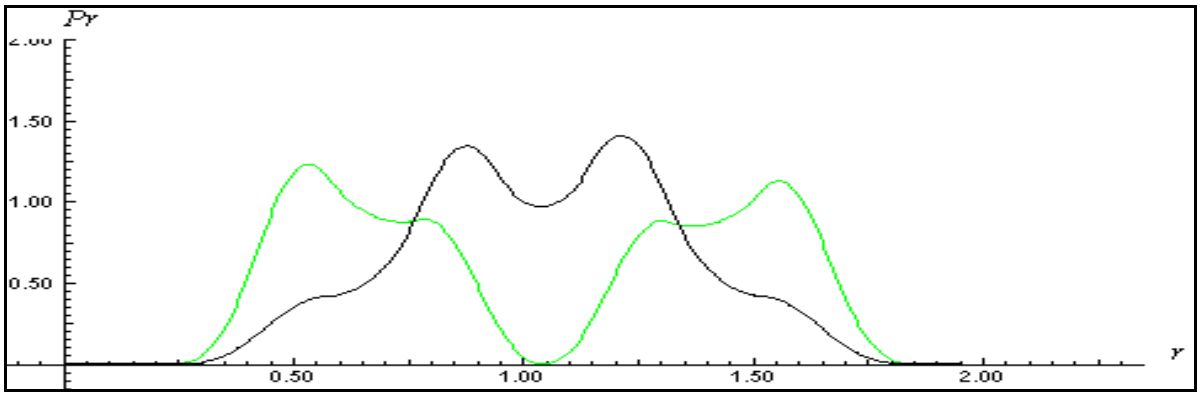
25) Mit einem Potentialtopfmodell für Na wurden folgende Energien (in eV) ermittelt:

Ein Atom	Zwei Atome		Vier Atome:			
- 17.37	- 17.94	- 16.73	- 18.29	- 17.87	- 17.11	- 16.61
- 11.16	- 13.26	- 9.73	- 14.30	- 12.80	- 10.92	- 8.73

Erläutere anhand dieser Daten allgemein die Herausbildung einer (Energie)Bänderstruktur von Festkörpern!

26) Wie kann man aus der Bänderstruktur die optischen Eigenschaften eines Festkörpers im Prinzip verstehen?

27) Mit einem Potentialtopfmodell für vier Na-Atome an den ungefähren Positionen r = 0.48 ; 0.85; 1.22 und 1.59 nm wurden folgende Verteilungsfunktionen bestimmt:



- Um welche Zustände handelt es sich ? (Begründung!)

- Markiere die Position der Atomkerne. Was läßt sich daraus in Verbindung mit den Verteilungsfunktionen über die Qualität der Bindung der vier Na-Atome ableiten?

- Wie werden nach Deiner Einschätzung die beiden nächst höheren Verteilungen ungefähr aussehen? Fertige eine Skizze an! Erläutere und begründe sie!