

# **Atome**

# **Moleküle und Festkörper**

**Verständnis ihrer Eigenschaften  
auf der Basis der  
Schrödingergleichung  
unter Zuhilfenahme des Computers**

**Basistext für Schüler**

von

**Hans Niedderer und Stefan Deylitz**

Institut für Didaktik der Physik  
Universität Bremen  
1997



# Inhaltsverzeichnis

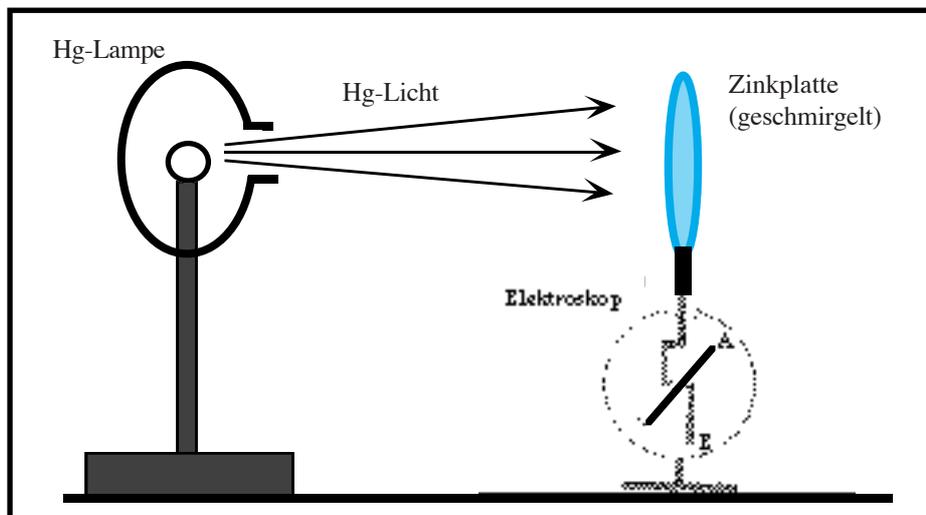
1. Licht und Elektron als Quant.....	2
1.1 Lichtelektrischer Effekt und Energiequantelung	2
1.2 Elektronenbeugung	8
1.3 Zusammenfassung: Freie Quanten	12
2. Klassische stehende Wellen.....	13
2.1 Beschreibung stehender Wellen - Tamburinversuch	13
2.2 Stehende Schallwellen in einer Glaskugel	14
2.3 Stehende Seilwellen	16
2.4 Zusammengefaßte Ergebnisse über stehende Wellen	17
2.5 Stehende Wellen in inhomogenen Medien	19
2.6 Theoretische Beschreibung stehender Seilwellen	21
2.7 Modellierung stehender Wellen mit STELLA	23
2.8 Die Zustandsbeschreibung gebundener Elektronen	26
3. Das H-Atom .....	29
3.1 Modelle vom Aufbau der Atome	29
3.2 Zustände eines gebundenen Elektrons	33
3.3 Analogie zu stehenden Wellen	35
3.4 Schrödingergleichung und Potential	35
3.5 Das H-Atom	40
3.6 Erstes STELLA-Modell der Schrödingergleichung	43
3.7 Diskrete Zustände und Stabilität des Wasserstoffatoms	51
3.8 Experimente zum Wasserstoffatom	53
3.9 Nicht-Radialsymmetrische Zustände	70
3.10 Röntgenspektren	73
4. Höhere Atome .....	76
4.1 Vom H-Atom zu höheren Atomen	76
4.2 Das Helium-Atom	78
4.3 Experimentell meßbare Größen des He-Atoms	88
4.4 Das Lithium-Atom	93
4.5 Experimentell meßbare Größen des Li-Atoms	98
4.6 Höhere Atome	102
Anhang I: Sachstruktur-Überblicke über die einzelnen Kapitel .....	I
2. Stehende Wellen	III
3. Das H-Atom	IV
4. Höhere Atome	V
Anhang II: Tabellen .....	VII
Atom- und Ionenspektren von Wasserstoff, Helium und Lithium	VII
Ionisierungsenergien von Atomen und Ionen	IX
Atom- und Ionenradien	X
Anhang III .....	XI
Erklärung von Interferenzeffekten am Kristallgitter	XI

# 1. Licht und Elektron als Quant

## 1.1 Lichtelektrischer Effekt und Energiequantelung

Mit dem lichtelektrischen Effekt, der die Quanteneigenschaften von Licht demonstrieren soll, wird über ein Experiment in das Thema Quantenphysik eingestiegen.

Der einfachste Versuch zur Darstellung des lichtelektrischen Effekts bedarf lediglich einer Zinkplatte, eines Elektroskops und einer Quecksilberdampf-lampe.



Die Zinkplatte wird negativ aufgeladen, woraufhin das Elektroskop ausschlägt. Beim Beleuchten der Zinkplatte mit dem Licht einer Hg-Dampf-lampe wird die Platte entladen, was der zurückgehende Zeigerausschlag des Elektroskops anzeigt. Lädt man die Zinkplatte positiv auf, so läßt sich beim Beleuchten mit Hg-Licht keine Entladung über das Elektroskop beobachten.

Ein qualitatives Ergebnis dieses Versuchs läßt sich bereits formulieren:

*Bestrahlt man ein negativ geladenes Metall mit Licht, dann können Ladungen herausgelöst werden. Bei einem positiv geladenen Metall ist dies nicht der Fall.*

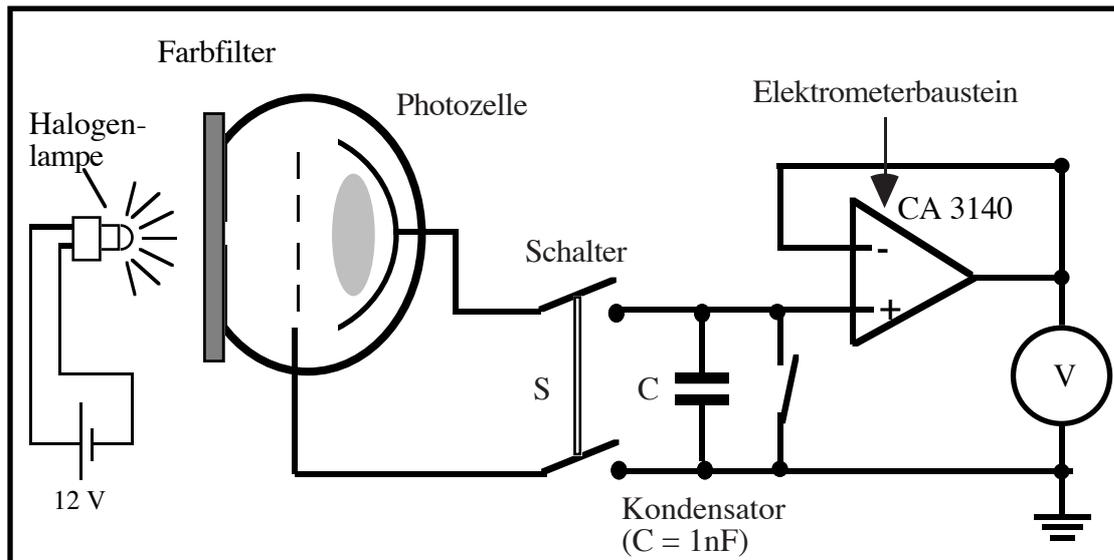
Der Versuch läßt sich um eine Glasplatte erweitern, die in den Strahlengang zwischen Lampe und Zinkplatte gestellt wird. Die Glasplatte dient dabei als Absorber für ultraviolettes Licht (Glas ist für UV-Licht undurchlässig). Mit der Glasplatte beobachtet man auch bei einer negativ geladenen Zinkplatte keine Entladung mehr. Der Ausschlag des Elektroskops bleibt erhalten. Da außer der UV-Strahlung noch sämtliches Licht durch die Glasplatte gelassen wird, läßt sich folgende Aussage formulieren:

*Der UV-Anteil des Lichts der Hg-Lampe verursacht das Entladen der negativ geladenen Zinkplatte. Das sichtbare Licht entlädt die Zinkplatte nicht.*

Aufgrund dieser Beobachtungen lassen sich folgende Fragen formulieren:

1. Wie (bzw. in welcher Form) werden die negativen Ladungen aus der Platte "entfernt"?
2. Was unterscheidet UV-Licht von sichtbarem Licht?
3. Wie läßt sich eine Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Licht und Materie (in diesem Fall die Elektronen in der Zinkplatte) formulieren?

Einen erweiterten Versuch zum lichtelektrischen Effekt stellt die Untersuchung des **Photoeffekts** mit Hilfe einer Photozelle dar.



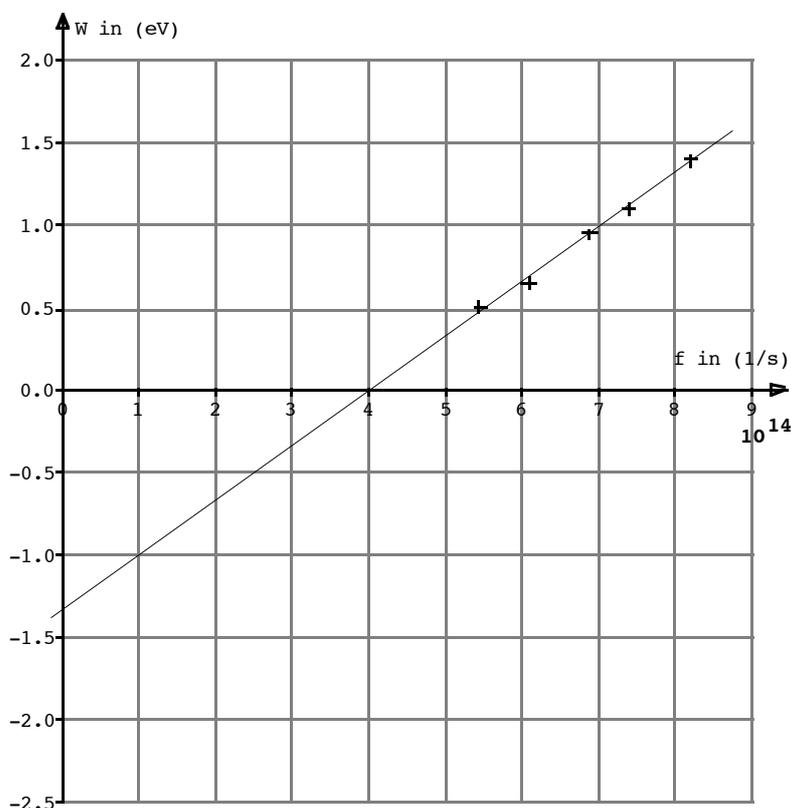
In dieser Versuchsanordnung können mit einem Gitter, das sich innerhalb der Photozelle befindet, die aus der Metallplatte herausgelösten Ladungen (sprich die Elektronen) aufgefangen werden. Das Kathodenmaterial ist Cäsium. Das Voltmeter mißt über den Meßverstärker die Spannung am Kondensator. Der Operationsverstärker (Kröncke Elektrometerbaustein oder CA 3140) bildet mit dem Voltmeter zusammen ein hochohmiges Voltmeter (Größenordnung  $10^{10}\Omega$ ), das die Kondensatorspannung anzeigt, ohne diesen merklich zu entladen (Kapazität des Kondensators  $C = 1 \text{ nF}$ ). Wird der Schalter S geschlossen, so baut sich über die am Gitter aufgefangenen Elektronen eine Gegenspannung auf, die sich aus der Gleichung  $U = Q/C$  über die gesammelte Ladung ergibt. Ab einer bestimmten Gegenspannung kommen keine weiteren Elektronen mehr am Gitter an, da sie zuerst die Potentialdifferenz zwischen Cäsiumkathode und Gitter durchlaufen müssen. Ihre Energie reicht ab einer bestimmten Gegenspannung nicht mehr aus, um das Feld zu überwinden; die Kondensatorspannung steigt nicht weiter an. Daraus läßt sich bereits eine erste quantitative Aussage formulieren:

*Die aus der Cäsiumkathode herausgelösten einzelnen Elektronen besitzen eine bestimmte Maximalenergie. Diese läßt sich über die Gegenspannung am Kondensator zu  $W_{kin} = e \cdot U$  berechnen ( $e$ : Elementarladung,  $W_{kin}$ : kinetische Energie eines Elektrons).*

Nun lassen sich wie bei dem vorherigen Versuch Filter zwischen Lichtquelle (die Lichtquelle kann auch die schon zuvor verwendete Hg-Lampe sein) und Photozelle bringen. Die Filter sind nur für einen sehr kleinen Frequenzbereich des Lichts durchlässig. Nach Schließen des Schalters S wartet man, bis sich eine konstante Gegenspannung eingestellt hat. Für verschiedene Filter trägt man die Frequenzangabe der Filter gegen die Maximalspannung am Voltmeter auf. Die folgende Tabelle zeigt die im Experiment gefundenen Werte. Die Wellenlänge  $\lambda$  wird über  $f = c/\lambda$  in die Frequenz umgerechnet. Die Angabe der kinetischen Energie der Elektronen ist in Elektronenvolt. Ein Elektron, das die Potentialdifferenz von einem Volt gerade noch überwinden kann, besitzt eine Energie von 1 eV. Sowohl Elektronenvolt als auch Joule sind die Einheiten einer Energie. Ihre Umrechnung ist:  $1.0 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ . Das eV ist eine sehr kleine Energieeinheit, die sich besonders für die Mikrophysik eignet.

Lichtfarbe	$\lambda$ (in nm)	f (in 1/s)	U (in V)	$W_{kin}$ (in eV)
gelb-grün	546	$549 \cdot 10^{12}$	0.50	0.50
blau-grün	492	$609 \cdot 10^{12}$	0.65	0.65
indigo	436	$688 \cdot 10^{12}$	0.95	0.95
violett	405	$740 \cdot 10^{12}$	1.1	1.1
UV	366	$819 \cdot 10^{12}$	1.4	1.4

Trägt man die kinetische Energie der Elektronen gegen die Frequenz auf, erhält man den folgenden Graphen (Datenpunkte mit Ausgleichsgerade):



Die Ausgleichsgerade besitzt die Steigung

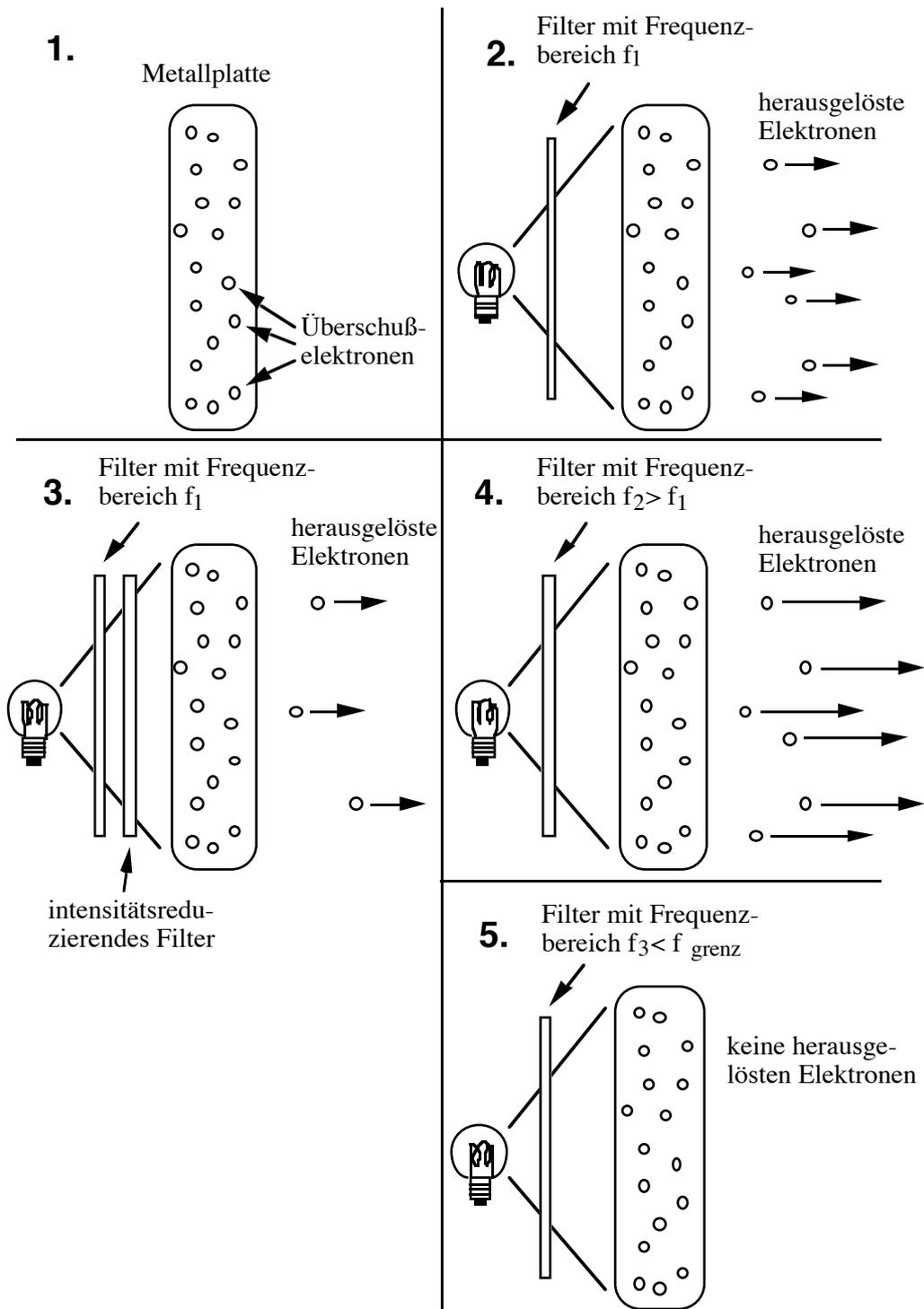
$$\frac{\Delta W_{kin}}{\Delta f} = 3.3 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$$

und schneidet die y-Achse bei

$$W_{kin}(f = 0) = -1.35 \text{ eV}$$

Bei  $f_{\text{grenz}} = 4.1 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$  schneidet die Gerade die x-Achse. Diese Frequenz wird Grenzfrequenz genannt.

Die Beobachtungen mit den verschiedenen Filtern lassen sich dadurch erklären, daß Licht seine Energie portionsweise an die im Metall befindlichen Ladungsträger (Elektronen) abgibt. Die Energieportionierung ist dabei nicht von der Intensität des Lichts (dies läßt sich in einem Versuch mit intensitätsreduzierenden Filtern zeigen), sondern nur von dessen Frequenz abhängig. Eine höhere Intensität führt nur dazu, daß der Maximalausschlag des Voltmeters schneller erreicht wird, was darauf zurückzuführen ist, daß bei höherer Intensität in einem bestimmten Zeitraum mehr Elektronen aus dem Metall gelöst werden.



Das Bild auf der vorherigen Seite faßt die wichtigsten Ergebnisse zusammen. Abbildung 1 ist die modellhafte Darstellung der geladenen Metallplatte. Beleuchtet man die Metallplatte mit Licht der Frequenz  $f_1$  (siehe Abbildung 2), so lassen sich aus der Metallplatte herausgelöste Elektronen feststellen, die alle die gleiche kinetische Energie besitzen (mit gleichlangen Pfeilen angedeutet). Bringt man wie in Abbildung 3 noch ein intensitätsreduzierendes Filter in den Strahlengang (beläßt die Frequenz aber bei  $f_1$ ), verändert sich die Menge der Elektronen, die in einem bestimmten Zeitintervall herausgelöst werden, jedoch besitzen die herausgelösten Elektronen die gleiche kinetische Energie, wie bei dem Versuch in Abbildung 2. Die Intensität verändert die Menge der herausgelösten Elektronen, aber nicht ihre kinetische Energie, was sich im Versuch durch das langsamere Aufladen des Kondensators zeigt. In Abbildung 4 ist ein Filter eingesetzt, das nur Licht einer Frequenz  $f_2 > f_1$  durchläßt. Man beobachtet, daß die austretenden Elektronen eine größere kinetische Energie besitzen, als es in dem Versuch in Abbildung 3 der Fall ist (mit längeren Pfeilen angedeutet). Licht größerer Frequenz gibt größere Energieportionen an die Elektronen ab. Man spricht daher auch von energiereicherem Licht.

Der Versuch (Abbildung 5) mit Licht der Frequenz  $f_3$  (die kleiner als die Grenzfrequenz ist) löst überhaupt keine Elektronen mehr aus dem Metall. Die Elektronen sind im Metall mit einer bestimmten Energie gebunden. Ist die Frequenz des Lichts so groß, daß die auf die Elektronen übertragene Energieportion kleiner als die Energie ist, die benötigt wird, um die Elektronen aus dem Metall zu lösen, beobachtet man keine freien Elektronen.

Die Ergebnisse lassen sich zusammengefaßt so formulieren:

- 1. Ein mit Elektronen geladenes Metall bindet diese mit einer bestimmten Energie. Um ein Elektron aus dem Metall herauszulösen benötigt man eine bestimmte Austrittsarbeit.*
- 2. Licht gibt seine Energie portioniert an die in einem Metall gebundenen Elektronen ab. Die Energieportionen sind von der Frequenz des Lichts abhängig. Licht großer Frequenz überträgt größere Energieportionen als Licht kleiner Frequenz.*
- 3. Diese zwei Tatsachen haben bei der Wechselwirkung zwischen Licht und Elektronen zur Folge, daß Licht mit einer Frequenz kleiner der Grenzfrequenz zu kleine Energieportionen auf die Elektronen überträgt, so daß diese nicht aus dem Metall gelöst werden können.*

Diese drei Aussagen beantworten der Reihe nach die drei anfangs gestellten Fragen. Mit Hilfe des zweiten Experiments lassen sich die bisherigen Ergebnisse quantitativ formulieren. Licht mit einer Frequenz, die, in den Graphen des zweiten Versuchs eingesetzt, zu einer negativen kinetischen Energie führt, kann keine Elektronen aus dem Metall lösen. Die Austrittsarbeit  $W_a$  ist der Schnittpunkt der Geraden mit der y-Achse. Die Mindestenergie, um ein Elektron aus dem Metall zu lösen, ist damit  $W_a = 1.35 \text{ eV}$ . Dieses Ergebnis ist die quantitative Aussage von Punkt 1. Die Steigung der Geraden, die wir ab jetzt  $h$  nennen, ist das Verhältnis zwischen Frequenz des eingestrahlt Lichts und der an die Elektronen übertragenen Gesamtenergie. Aussage 2 läßt sich damit qualitativ so formulieren:

$$W = h \cdot f$$

Die an ein Elektron übertragenen Gesamtenergie ergibt sich aus der Austrittsarbeit plus der kinetischen Energie des Elektrons.  $h$  ist eine Naturkonstante. In sehr genauen Experimenten wurde sie bestimmt zu

$$h = 4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Von der Größenordnung stimmt dieser Wert mit der in unserem Versuch gefundenen Steigung von  $3.3 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$  überein. Die zweite Angabe in Joule mal Sekunde beinhaltet die gleiche Einheit, jedoch wurde eV in J umgerechnet.  $h$  ist die fundamentale Größe der Mikrophysik (Quantenphysik, Atomphysik). Sie wird zu Ehren von Max Planck das **Plancksche Wirkungsquantum** genannt. Der Begriff **Quant** deutet die Portionierung (oder Quantelung) von Energie an, die sich, wie in diesen Versuchen zu beobachten war, bei der Wechselwirkung zwischen Licht und Materie zeigt.

Die eben besprochenen Interpretation des Photoeffekts wurde erstmals 1905 von Einstein gegeben. Sie führt den Begriff des **Photons** ein, das den teilchenhaften Charakter des Lichts hervorheben soll. Nach Einstein lassen sich die Ergebnisse folgendermaßen deuten:

- Licht besteht aus Lichtquanten (genannt "Photonen"), die neben den Welleneigenschaften ( $\lambda$ ,  $f$ ) auch Teilcheneigenschaften, wie z.B. eine bestimmte Energieportion besitzen.
- Ein Photon im Licht der Frequenz  $f$  besitzt die Energie  $W_{\text{Photon}} = h \cdot f$
- Das auf das Metall auftreffende Licht kann man sich als einen Strom sehr vieler Photonen vorstellen. Je größer die Intensität des Lichts, desto mehr Photonen.
- Trifft ein Photon auf ein Elektron, so kann es dem Elektron die Energie  $W = h \cdot f$  übertragen.
- Diese Energie benutzt das Elektron, um sich aus dem Metall zu befreien (Austrittsarbeit  $W_a$ ). Der Rest bleibt am Elektron als kinetische Energie  $h \cdot f = W_a + W_{\text{kin}} = W_a + e \cdot U$  ( $U$  ist die Gegenspannung, gegen die die herausgelösten Elektronen gerade noch anlaufen können; über  $U$  wird damit die kinetische Energie der Elektronen gemessen)

Neben dem Photoeffekt zeigen viele andere Experimente den quantenhaften Charakter von Licht. Da die Portionierung von Größen üblicherweise eine Eigenschaft von Teilchen ist (ein Elektron besitzt eine bestimmte Masse bzw. Massenportion und eine bestimmte Ladung bzw. Ladungsportion), wird mit dieser Entdeckung dem Licht eine völlig neue Eigenschaft zugeschrieben, die sich allerdings nur in der Mikrophysik bemerkbar macht.

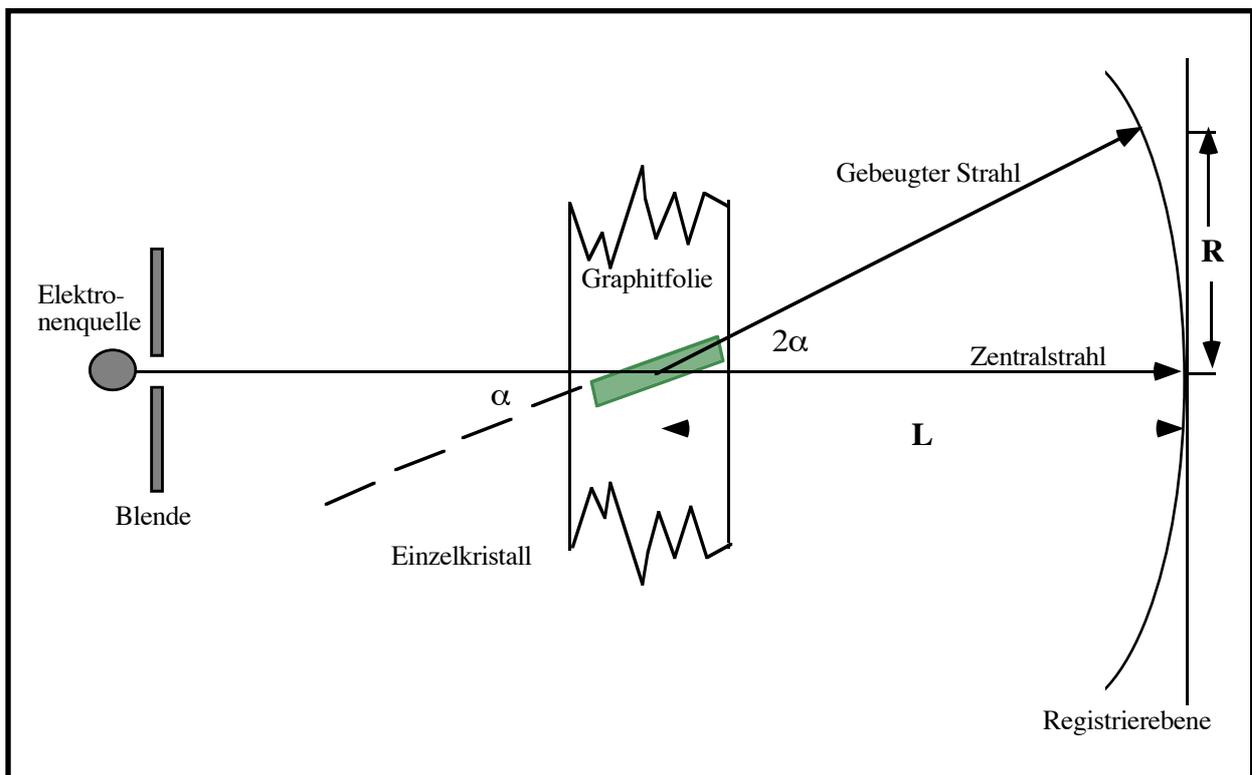
## 1.2 Elektronenbeugung

1923 stellte Louis de Broglie eine Hypothese für den Wellencharakter von Elektronen auf. Wenn sich bei Licht über  $W = h \cdot f$  ein Zusammenhang zwischen Eigenschaften, die üblicherweise nur Teilchen besitzen, und Eigenschaften, die eine Welle beschreiben, verknüpfen lassen, könnte über die "Übersetzungsgröße"  $h$  auch eine Verbindung zwischen Teilchen- und Welleneigenschaften bei Elektronen bestehen. Er formulierte diesen Zusammenhang als Hypothese in der Formel:

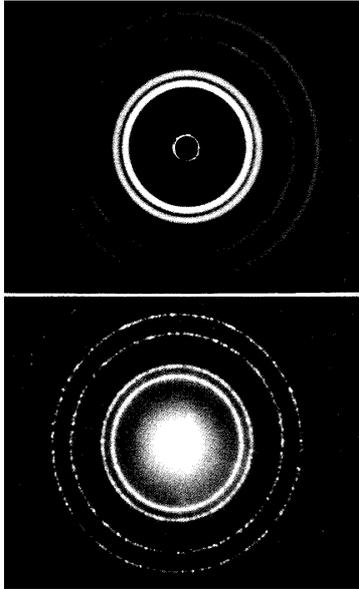
$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Wie beim Photoeffekt, wo den Photonen über ihre Frequenz die Teilcheneigenschaft der Energieportionierung über  $W = h \cdot f$  zugeschrieben werden konnte, wird nun den Elektronen über ihren Impuls eine Wellenlänge  $\lambda$  gegeben, die den wellenhaften Charakter ausdrückt.

Der Aufbau einer Apparatur zum Nachweis des Wellencharakters von Elektronen ist die Elektronenbeugungsröhre:



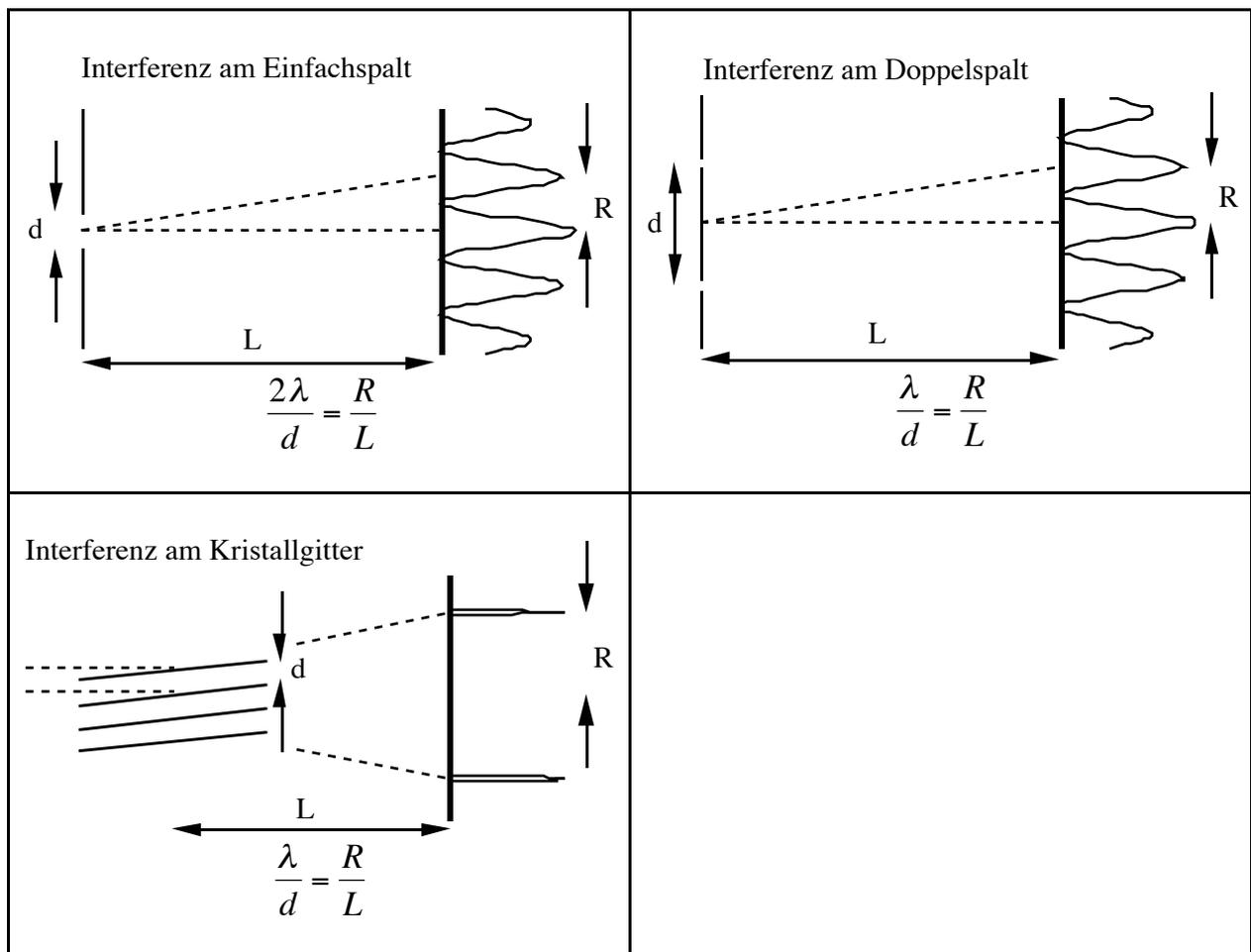
Die Elektronenquelle liefert Elektronen mit einer bestimmten Energie. Diese werden auf den Kristall geleitet (genaugenommen befinden sich in der Graphitfolie sehr viele Kristalle, die in alle möglichen Richtungen ausgerichtet sind).



Die von vorne aufgenommene Registrierebene des realen Experiments ist nebenstehend abgebildet. Das obere Bild zeigt zur Erinnerung das Experiment mit Röntgenstrahlung. Es lassen sich Interferenzringe beobachten.

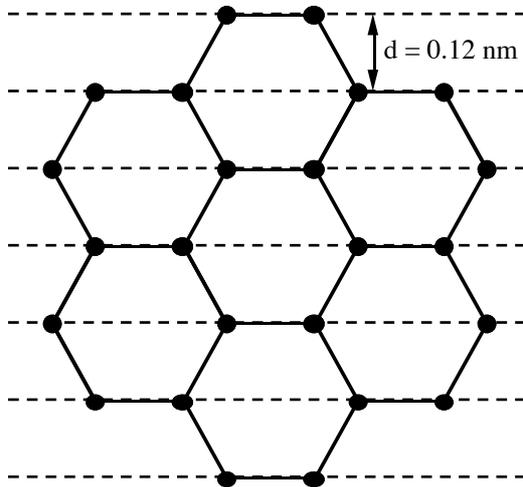
Darunter befindet sich eine Aufnahme der Registrierebene bei Durchführung des Experiments mit Elektronen. Der helle Fleck in der Mitte entsteht durch Elektronen, die an der Graphitfolie nicht gebeugt werden. Um den Mittelpunkt liegen Kreise, die darauf schließen lassen, daß auch Elektronen interferieren und damit einen wellenhaften Charakter besitzen. Wird die Elektronenenergie vergrößert (die Wellenlänge damit verkleinert), so verkleinert sich auch der Radius der Interferenzringe.

Ähnlich wie bei Interferenzexperimenten mit elektromagnetischer Strahlung können wir versuchen, einen Zusammenhang zwischen Radius der Ringe, Abstand der Schirmebene, Wellenlänge der Elektronen und dem Abstand zweier Ebenen des beugenden Mediums zu machen.



Die drei Abbildungen zeigen Interferenzeffekte elektromagnetischer Strahlung am Einfachspalt, Doppelspalt und Kristallgitter. Es gibt jeweils einen

Zusammenhang zwischen den mikroskopischen Größen  $\lambda$  (Wellenlänge) und  $d$  (Einfachspalt: Spaltbreite, Doppelspalt: Spaltabstand, Kristallgitter: Abstand der Gitterebenen) und den makroskopischen Größen  $R$  (Abstand zweier Maxima bzw. Radius des Interferenzrings) und  $L$  (Abstand zwischen beugendem Medium und Schirm).



Ebenso versuchen wir den Radius  $R$  der Interferenzringe, die wir beim Versuch mit der Elektronenbeugungsröhre beobachtet haben, in einen Zusammenhang mit  $\lambda$ ,  $d$  und  $L$  zu bringen. Der Abstand zweier gedachter Gitterebenen in einem Kristall ist in dem Bild links mit  $d$  gekennzeichnet. Die Ebenen sind gestrichelt eingezeichnet; der Abstand  $d = 0.12 \text{ nm}$  in der hexagonalen Anordnung der Atome findet man im Graphit. Für Elektronenbeugung am Kristallgitter bedienen wir uns derselben Formel, die wir schon für die Interferenz am Doppelspalt (bzw. die Beugung elektromagnetischer Strahlung am Kristallgitter) kennen.

In einem Demonstrationsexperiment sind folgende Werte gemessen worden:

$$R = 2.3 \text{ cm}, L = 13.5 \text{ cm}, U = 3500 \text{ V (Beschleunigungsspannung)}$$

Die experimentell bestimmte Elektronenwellenlänge ergibt mit diesen Werten:

$$\lambda = \frac{d \cdot R}{L} = \frac{0.12 \text{ nm} \cdot 2.3 \text{ cm}}{13 \text{ cm}} = 0.021 \text{ nm}$$

Da wir in die vorgeschlagene Formel von de Broglie den Elektronenimpuls einsetzen müssen, muß zuvor die uns bekannte Elektronenenergie in den Impuls umgerechnet werden:

$$W = U \cdot e = \frac{p^2}{2m_e} \rightarrow p^2 = 2m_e \cdot U \cdot e \rightarrow p = \sqrt{2m_e \cdot U \cdot e}$$

Die aus der Hypothese von de Broglie berechnete Elektronenwellenlänge ist damit

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e \cdot U \cdot e}} = \frac{6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{\sqrt{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 3500 \text{ V}}} = 0.021 \text{ nm}$$

Der erste Versuch zeigt, daß die von de Broglie vorgeschlagene Hypothese die im Experiment gemessene Wellenlänge von  $\lambda = 0.021 \text{ nm}$  korrekt vorhersagt.

In einem zweiten Versuch läßt sich die Allgemeingültigkeit der Hypothese von de Broglie überprüfen, indem man den Radius des Interferenzrings gegen die Beschleunigungsspannung der Elektronen mißt. Da eine Proportionalität

zwischen  $\lambda$  und  $1/p$  vorhergesagt wird  $\left( \lambda = h \cdot \frac{1}{p} \right)$ , erwartet man beim

Auftragen von  $\lambda$  gegen  $1/p$  eine Gerade mit der Steigung  $h$ . Die gemessene

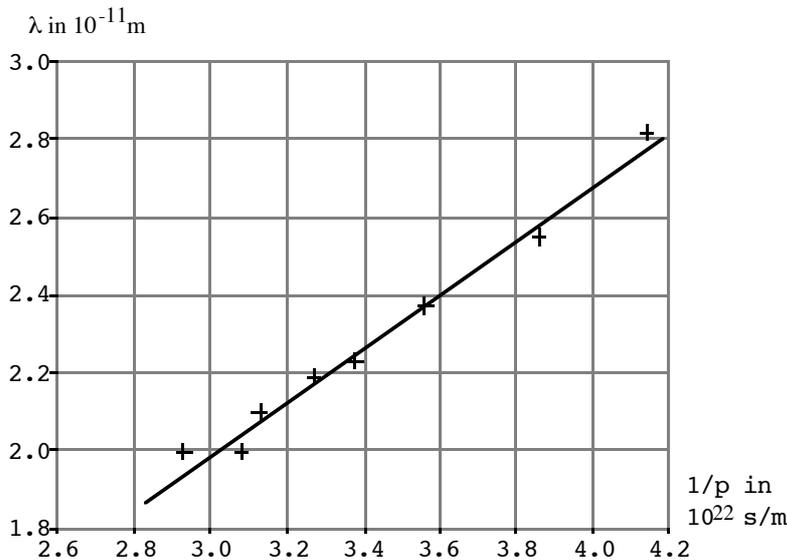
Beschleunigungsspannung  $U$  muß dazu in  $1/p$  und der Kreisradius  $R$  in  $\lambda$  umgerechnet werden.

Dazu benutzen wir die schon zuvor genannten Formeln:

$$\frac{1}{p} = \frac{1}{\sqrt{2m_e \cdot U \cdot e}} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{d \cdot R}{L}$$

In einem Demonstrationsversuch wurden die folgenden, tabellierten Werte gefunden ( $d=0.123 \text{ nm}$ ,  $L=0.135 \text{ m}$ ):

U (in V)	R (in m)	1/p (in s/m)	$\lambda$ (in m)
2000	0.031	$4.14 \cdot 10^{22}$	$2.82 \cdot 10^{-11}$
2300	0.028	$3.86 \cdot 10^{22}$	$2.55 \cdot 10^{-11}$
2700	0.026	$3.56 \cdot 10^{22}$	$2.37 \cdot 10^{-11}$
3000	0.0245	$3.38 \cdot 10^{22}$	$2.23 \cdot 10^{-11}$
3200	0.024	$3.27 \cdot 10^{22}$	$2.19 \cdot 10^{-11}$
3500	0.023	$3.13 \cdot 10^{22}$	$2.10 \cdot 10^{-11}$
3600	0.022	$3.08 \cdot 10^{22}$	$2.00 \cdot 10^{-11}$
4000	0.022	$2.93 \cdot 10^{22}$	$2.00 \cdot 10^{-11}$



Nebenstehend sind die Tabellenwerte in  $\lambda$  gegen  $1/p$  aufgetragen. Die Steigung der Ausgleichsgeraden ist

$$\frac{\Delta\lambda}{\Delta(1/p)} = 6.77 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Aus der Vorhersage von de Broglie erwarten wir den Wert

$$h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

(Um den mathematischen Aufwand zu reduzieren, kann man in dem Graphen auch den Radius  $R$  gegen  $1/\sqrt{U}$  auftragen, um die Proportionalität zu zeigen. Damit entfällt die Umrechnung von  $U$  in  $1/p$  und  $R$  in  $\lambda$ .)

Der Vergleich der beiden Werte zeigt eine sehr gut Übereinstimmung zwischen der hypothetischen Vorhersage und dem experimentellen Ergebnis. Damit läßt sich die Beobachtung mit der Elektronenbeugungsröhre folgendermaßen interpretieren:

Die um den Mittelpunkt liegenden Kreise im Versuch mit der Elektronenbeugungsröhre sind Interferenzerscheinungen, wie sie auch beim Experiment mit Röntgenstrahlung entstehen. Dies ist ein Beleg für den Wellencharakter der

Elektronen. Wären Elektronen klassische Teilchen, die an einem Hindernis gestreut werden, würde man in der Registrierebene eine über die ganze Fläche verteilte Leuchterscheinung erwarten. Die Interferenzringe können nur durch einen, den Elektronen zugeschriebenen Wellencharakter erklärt werden. Der Wellencharakter drückt sich quantitativ in der dem Elektron zugeteilten Wellenlänge  $\lambda$  aus, die über den Zusammenhang

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

mit dem Impuls des Elektrons verbunden ist.

### 1.3 Zusammenfassung: Freie Quanten

Die beiden Abschnitte dieses Kapitels basieren auf den ersten Experimenten, die zur Formulierung und Überprüfung der Quantenphysik geführt haben. Licht und Elektronen (und noch viel allgemeiner: Elementarteilchen wie auch z.B. Neutronen, Protonen, ...) zeigen ganz ähnliche Eigenschaften. Sie verknüpfen ihre Größen Impuls, Energie, Wellenlänge und Frequenz über die zwei Gleichungen:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{und} \quad W = h \cdot f$$

$h$  ist dabei eine "Übersetzungsgröße", die eine fundamentale Rolle in der Quantenphysik spielt. Man bezeichnet sowohl Licht, als auch Elektronen als **Quanten**. Diese besitzen teilchenhaften wie auch wellenhaften Charakter und sind damit etwas völlig Neues, das in der Beschreibung der klassischen Physik nicht existiert.

Die zwei gezeigten Experimente behandeln freie Quanten. Die Atomphysik, die in den anschließenden Kapiteln besprochen wird, beschäftigt sich mit gebundenen Quanten (ganz konkret mit Elektronen, die an einen Atomkern gebunden sind) und mit der Wechselwirkung zwischen gebundenen Elektronen und Licht. Die zwei "Übersetzungsgleichungen" sind in der Atomphysik weiterhin gültig. Sie werden sich an weiteren Experimenten bestätigen lassen.

## 2. Klassische stehende Wellen

### 2.1 Beschreibung stehender Wellen - Tamburinversuch

Jedes System, das sich zum Schwingen anregen läßt (z.B. ein Tamburin, eine Stimmgabel oder eine Gitarrensaite), besitzt ganz bestimmte Frequenzen (sogenannte **Eigenfrequenzen**), unter denen sie schwingen. Eine Stimmgabel zum Beispiel gibt, wenn man sie anschlägt, einen Ton ihrer Eigenfrequenz ab. Ein Tamburin kann man mit Hilfe eines Frequenzgenerators und Lautsprechers zum Schwingen anregen. Hat man Sand auf die Membran gestreut, dann werden bei der Anregung des Tamburin die Sandkörner nach oben geschleudert und tanzen durcheinander. Bei bestimmten Frequenzen beobachtet man jedoch Figuren, die der Sand auf das Tamburin zeichnet. An den Stellen, an denen der Sand liegenbleibt, bewegt sich das Tamburin nicht. Diese Stellen haben häufig die Form von Linien oder geschlossenen Kreisen. Im Bild unten sind die sogenannten **Knotenlinien** zu einigen Frequenzen aufgezeichnet.

$n_r \backslash n_\phi$	0	1	2	3
1	 139 Hz	 211 Hz	 288 Hz	 366 Hz
2	 304 Hz	 435 Hz	 517 Hz	 581 Hz
3	 455 Hz	Eigenfrequenzen und Knotenlinien eines Tamburin		

Zwischen den beiden Eigenfrequenzen von 139 Hz und 211 Hz gibt es keine weiteren Frequenzen, bei denen Knotenlinien entstehen. Der Sand tanzt herum, ohne ein Muster zu bilden. Die physikalischen Eigenschaften des Systems (Tamburin) legen fest, bei welchen Frequenzen Knotenlinien entstehen und wie diese aussehen. Im obigen Bild sind alle **Knotenlinienbilder** zwischen 0 Hz und 581 Hz abgebildet. Knotenlinien entstehen dort, wo die Membran des Tamburin trotz der Schwingung nicht vibriert.

Sind die Bedingungen erfüllt, unter denen Knotenlinien auftreten, spricht man von einem **Zustand** des Systems. Die Zustände lassen sich durchnummerieren. Man verwendet üblicherweise die Variable **n**, die sogenannte **Zustandszahl**. Die in der Abbildung dargestellten Zustände des Tamburins sind mit  $n_r$  und  $n_\varphi$  bezeichnet.  $n_r = 1$  und  $n_\varphi = 0$  bezeichnet z.B. den Zustand bei der Frequenz  $f_{10}=139\text{Hz}$  (diese Eigenfrequenz besitzt dann im Index die Zustandszahlen),  $n_r = 2$  und  $n_\varphi = 2$  den Zustand bei  $f_{22}=517\text{Hz}$ .

Diese Aufteilung nach zwei Zustandszahlen wird gemacht, weil alle Zustände mit gleicher Zahl  $n_\varphi$  ein ähnliches Knotenlinienbild zeigen. Z.B. besitzen alle Zustände mit  $n_\varphi = 0$  **radialsymmetrische** Knotenlinien; alle Linien sind kreisförmig um den Mittelpunkt angeordnet. Alle Bilder mit  $n_r = 1$  besitzen einen Kreis (ganz außen), alle mit  $n_r = 2$  zwei Kreise, alle mit  $n_r = 3$  drei Kreise, usw.

## **2.2 Stehende Schallwellen in einer Glaskugel**

Das zuvor beschriebene Tamburin ist ein zweidimensionales System; es entstehen Knotenlinien. In einem dreidimensionalen System wie z.B. einer Glaskugel, in der die Luft durch einen Lautsprecher, der an einen Frequenzgenerator angeschlossen ist, zum Schwingen angeregt wird, gibt es bei stehenden Wellen **Knotenflächen**.

Um diese zu untersuchen, wird ein Draht durch den Mittelpunkt der Glaskugel geführt. An den Knotenflächen ist die Luft in Ruhe. Wird der Draht von Strom durchflossen, wird er an den Stellen, wo er eine Knotenfläche schneidet, zu glühen anfangen, da die Luft an diesen Stellen in Ruhe ist und den Draht weniger kühlt. Die Stellen, an denen aufgrund der Schwingung die Luft in Bewegung ist, wird der Draht stärker gekühlt; er glüht nicht.

Auch hier bilden sich nur bei bestimmten Frequenzen (den Eigenfrequenzen) Knotenflächen. In den Abbildungen auf der nächsten Seite sind die Bilder des Glühdrahtes in der Glaskugel bei den zwei Zuständen  $n=1$  und  $n=3$  aufgezeichnet. Da es sich nur um radialsymmetrische Zustände handelt, reicht die eine Zustandszahl  $n$  aus, um den Zustand festzulegen (Zur Beschreibung nicht-radialsymmetrischer Zustände bräuchte man insgesamt drei Zustandszahlen). Die Kugelflächen sind radialsymmetrisch um den Kugelmittelpunkt im Abstand der Knotenpunkte angeordnet.

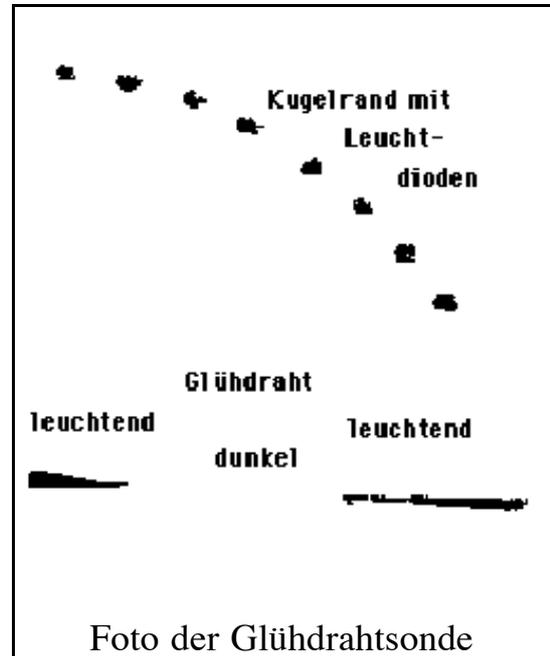
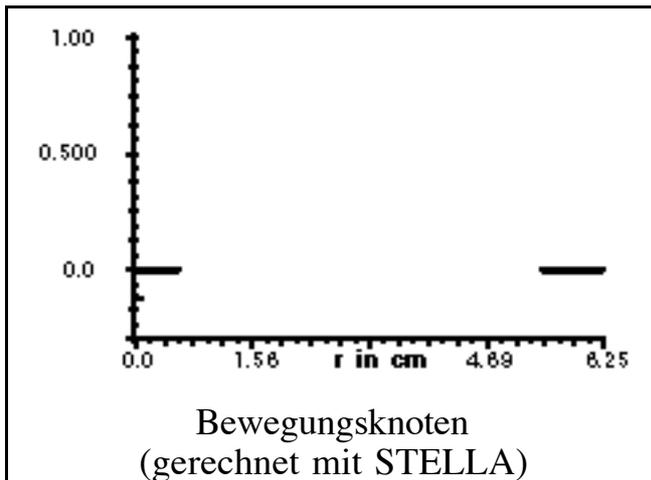
## Beispiele für kugelsymmetrische Zustände in der Glaskugel

### Zustand $n=1$

-  $f_0 = 3.1$  kHz

- Keine Knotenflächen

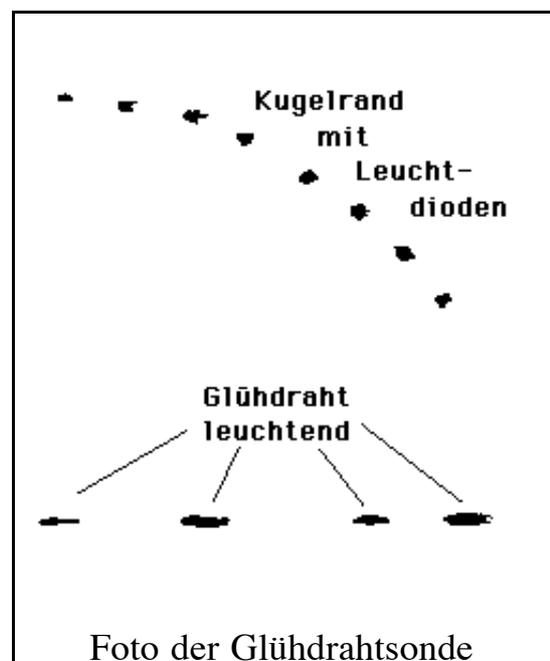
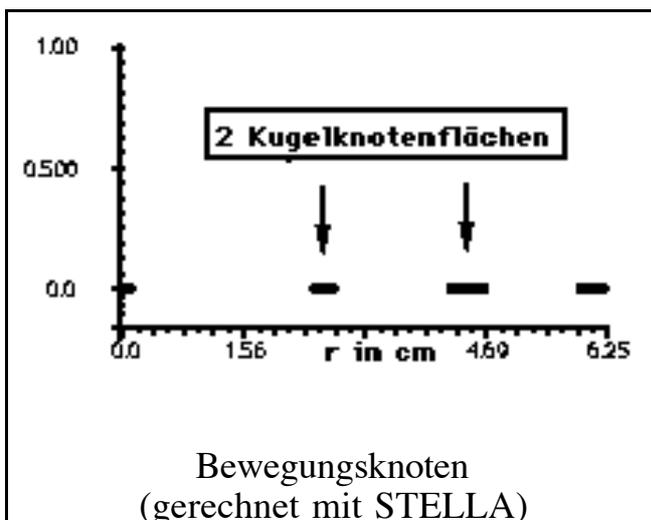
(außer Rand und Mittelpunkt)



### Zustand $n=3$

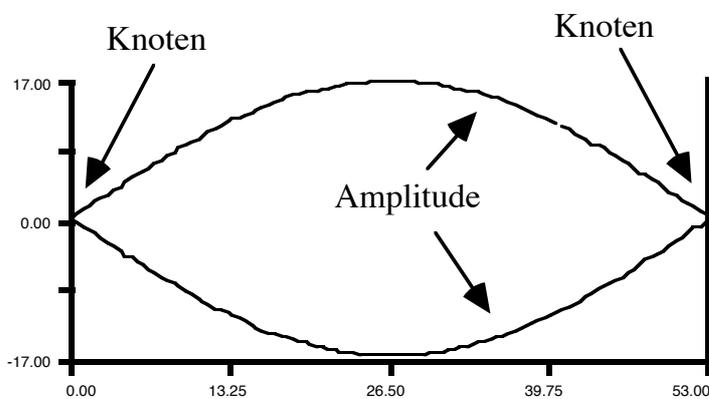
-  $f_2 = 9.9$  kHz

- 2 Kugelknotenflächen

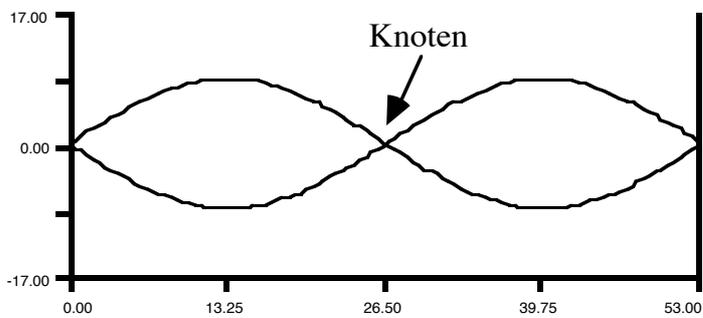


## 2.3 Stehende Seilwellen

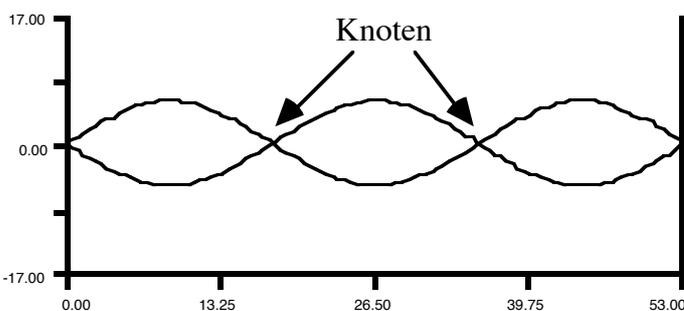
Ein besonders einfacher und anschaulicher Fall ergibt sich bei eindimensionalen stehenden Wellen, wie z.B. einem Seil, das durch einen Motor in Schwingung versetzt wird. Stehende Wellen entstehen ganz allgemein in einem durch Ränder begrenzten Medium, wie z.B. der Membran des Tamburin oder der eingeschlossenen Luft in der Glaskugel. An den Rändern befinden sich immer **Knoten** (Punkte, Linien, Flächen), da das Medium dort keine Bewegungsfreiheit besitzt. Stehende Wellen entstehen in einem Seil, das auf beiden Seiten eingespannt ist, so daß auch hier der Rand des schwingenden Mediums (das Seil) keine Bewegung ausführen kann. Die Ränder sind gleichzeitig **Knotenpunkte**. Die Abbildung zeigt die drei niedrigsten Zustände stehender Wellen eines Seils, das eine konstante Massenbelegung besitzt (völlig gleichmäßiges Seil).



Grundschiwingung  $n=1$ ;  $f_1=15$  Hz



Erste Oberschiwingung  
(angeregte Schwiwingung)  $n=2$ ;  $f_2=30$  Hz



Zweite Oberschiwingung  
(angeregte Schwiwingung)  $n=3$ ;  $f_3=45$  Hz

den Punkt des maximalen Ausschlags. Da sie symmetrisch zur x-Achse ist,

Das Seil ist 53 cm lang und auf beiden Seiten eingespannt. Auf einer Seite befindet sich ein Motor, der das Seil in Schwingung versetzt. Man beobachtet bei Frequenzen unterhalb 15 Hertz eine ungeordnete Bewegung des Seils, ohne darin eine Struktur erkennen zu können.

Bei 15 Hertz schwingt das Seil völlig gleichmäßig. Die Funktion des maximalen Ausschlags des Seils an einer bestimmten Stelle nennt man **Amplitudenfunktion**. Sie ist die Einhüllende der Seilbewegung.

Bei einer vollständigen Schwiwingung einer stehenden Welle wird jeder Punkt auf dem Seil von der Nullstellung aus bis zur maximalen positiven Amplitude schwingen, dann umkehren, die maximale negative Amplitude erreichen und dann zur Nullstellung zurückkehren. Die Amplitude beschreibt nur

genügt die Angabe einer Funktion (z.B. nur der positiven). Diese Funktion besitzt im Gegensatz zum schwingenden Seil keine Bewegung. Sie ist zeitlich konstant.

Die stehende Welle bei 15 Hertz wird als Grundschiwingung bezeichnet. Unterhalb dieser Frequenz gibt es keine weiteren stehenden Wellen. Die Grundschiwingung ist dadurch gekennzeichnet, daß sie zwischen den beiden Punkten, die das Seil einspannen, keine Knoten besitzt. Die Bezeichnung dieses Zustands ist eher willkürlich. Man könnte sagen, daß er durch das Fehlen von Knoten charakterisiert ist (und meint damit, daß es zwischen den beiden einspannenden Punkten keine weiteren Knoten gibt). Man könnte ihn aber auch durch die Angabe, daß er zwei Knoten besitzt, beschreiben (diese wären die Knoten am Anfang und Ende des Seils). Ebenso willkürlich ist die Angabe der Zustandszahl. Hier wurde der Grundzustand mit  $n=1$  bezeichnet, der nächsthöhere muß daher  $n=2$  heißen. Man muß mit seinen Bezeichnungen nur bei anderen Zuständen konsistent bleiben (zuvor hatten wir beim Tamburin und der Glaskugel den Grundzustand mit  $n=1$  gekennzeichnet, der nächsthöhere muß also die Zustandszahl  $n=2$  besitzen). Die Frequenz besitzt als Index die Zustandszahl (z.B.  $f_1=15$  Hz).

Erhöht man die Frequenz des Motors von 15 Hertz kontinuierlich, dann beobachtet man wieder ungeordnete Seilbewegungen. Erst bei 30 Hertz bildet sich ein geordnetes Muster. Zwischen 15 Hertz und 30 Hertz gibt es keine Frequenz, bei der die Bedingungen für eine stehende Welle gegeben sind. Der nächsthöhere Zustand (mit  $n=2$  bezeichnet oder auch erster angeregter Zustand genannt) ist durch eine Amplitudenfunktion gekennzeichnet, die einen Knoten zwischen den beiden, das Seil einspannenden Punkten besitzt. Ihre Eigenfrequenz ist  $f_2=30$  Hz.

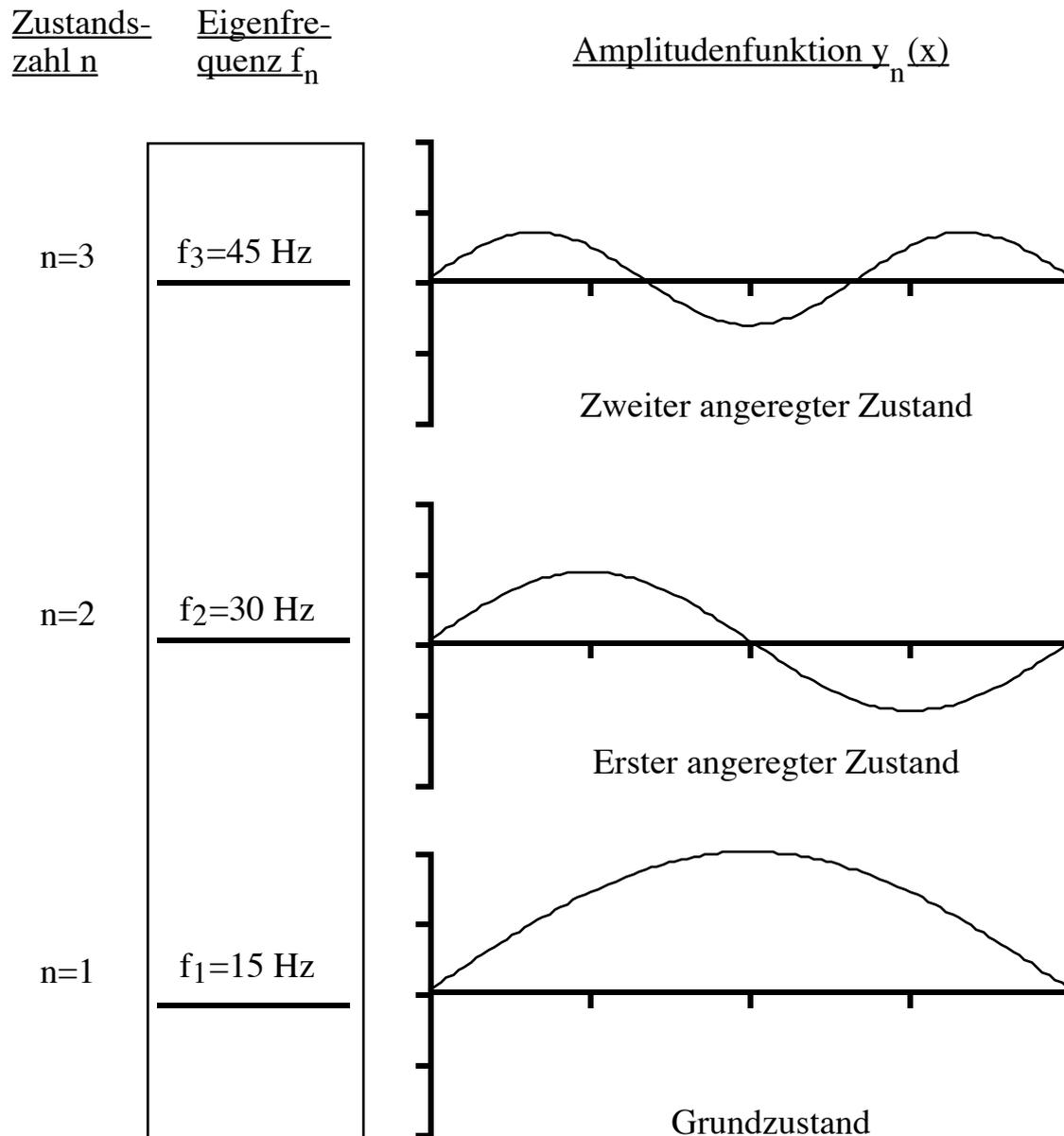
## **2.4 Zusammengefaßte Ergebnisse über stehende Wellen**

Zusammenfassend lassen sich die bisherigen Ergebnisse über stehende Wellen folgendermaßen darstellen:

- Jedes schwingende Medium (Seil, Tamburin, Luft in Glaskugel) besitzt bestimmte Eigenfrequenzen  $f_n$ , bei denen sich stehende Wellen ausbilden.
- Ist die Bedingung einer stehenden Welle erfüllt, spricht man von einem Zustand des Systems (eingespannte Seite, Luft in Glaskugel, ...) und weist jedem Zustand eine Zustandszahl  $n$  zu.
- Jeder Zustand ist durch seine Knotenbilder charakterisiert.
- Noch allgemeiner besitzt jeder Zustand eine Amplitudenfunktion  $y_n(x)$ , aus der sich die Knoten ermitteln lassen. Die Amplitudenfunktion ist die Einhüllende der Wellenbewegung; sie ist zeitlich konstant (keine Bewegung!).

Zwei Dinge müssen an dieser Stelle noch hervorgehoben werden. Jede stehende Welle, ob 1-dimensional (Seil), 2-dimensional (Tamburin) oder 3-dimensional (Glaskugel), besitzt eine Amplitudenfunktion. Die Angabe von Knoten reicht zur Charakterisierung des Zustands aus, beinhaltet aber nicht die gesamte Information, die die Amplitudenfunktion besitzt. Der Begriff Zustand ist in

diesem Zusammenhang eine physikalische Definition. Wir sprechen von einem Zustand, wenn die Bedingungen einer stehenden Welle erfüllt sind. Die vollständige Beschreibung eines Systems läßt sich graphisch durch Angabe von Zustandszahlen, Eigenfrequenzen und Amplitudenfunktionen darstellen, wie in der folgenden Abbildung am Beispiel eines Seils dargestellt.



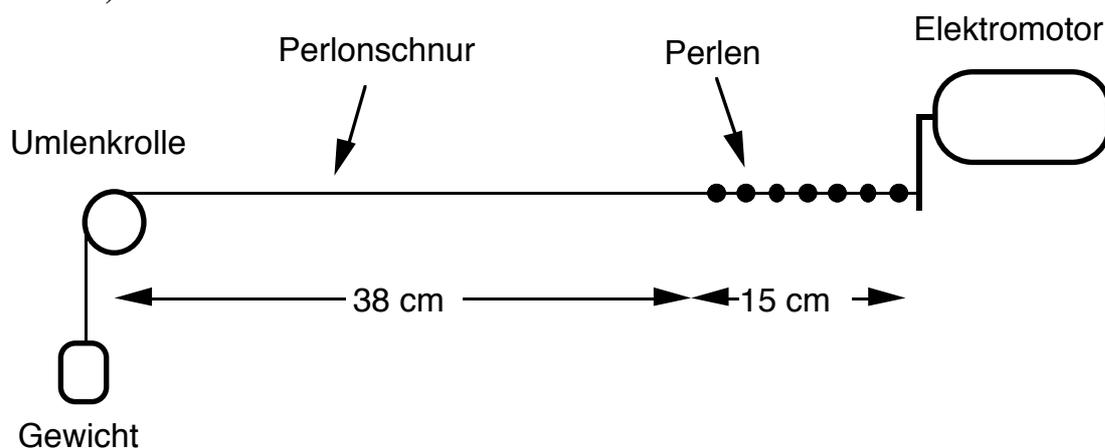
Für den eindimensionalen Fall ist diese Darstellung noch sehr übersichtlich. Mehrere Dimensionen erschweren eine anschauliche Vorstellung. Die folgende Tabelle listet die Eigenschaften 1-dimensionaler, 2-dimensionaler und 3-dimensionaler stehender Wellen auf.

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

## 2.5 Stehende Wellen in inhomogenen Medien

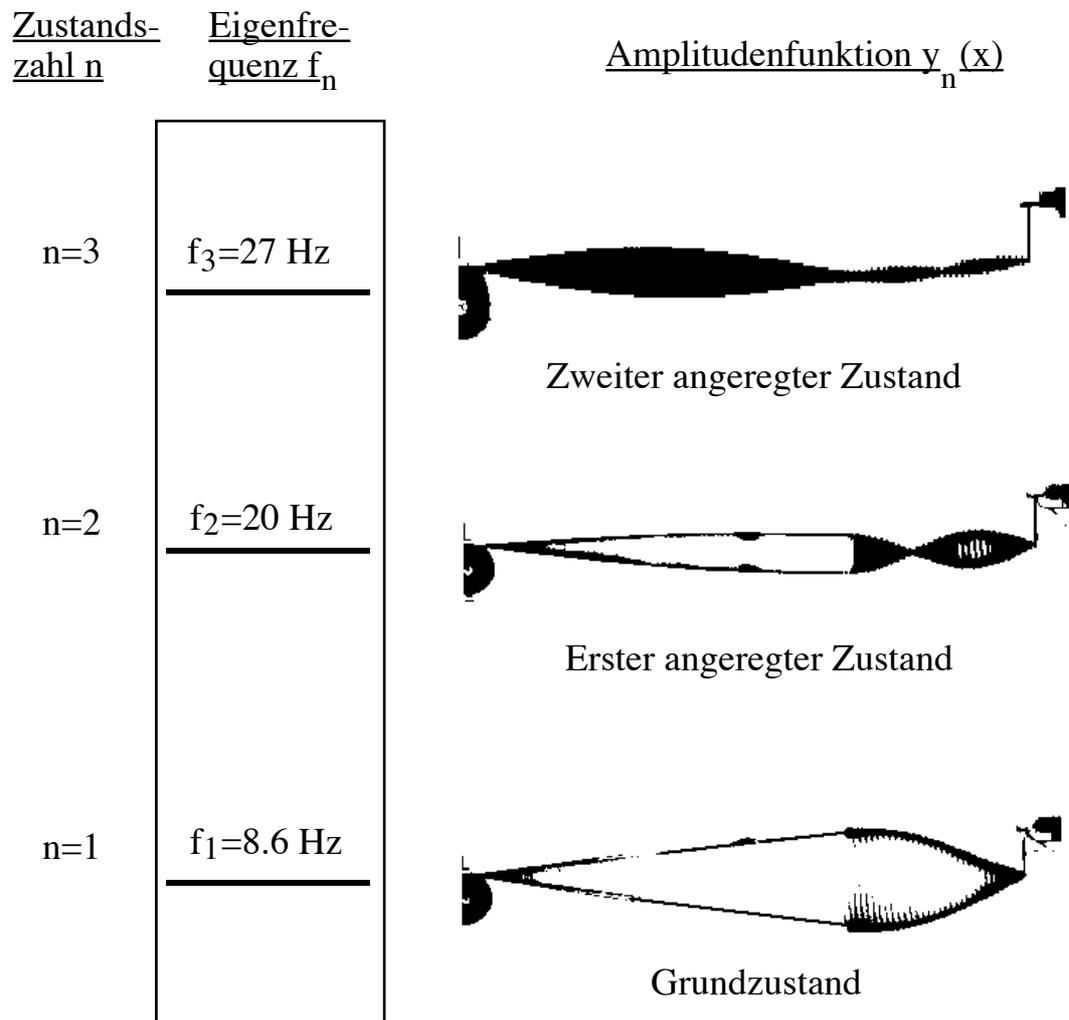
Ein inhomogenes Medium ist durch eine ungleichmäßige Massenverteilung charakterisiert. Für ein Seil bedeutet dies, daß seine Massendichte nicht überall konstant ist. Es ist - einfach gesagt - an einigen Stellen schwerer als an anderen. Das bedeutet, daß das System "inhomogenes Seil" anderen Bedingungen unterworfen ist, als ein homogenes Seil. Es ist anzunehmen, daß sich andere Eigenfrequenzen und andere Amplitudenfunktionen ergeben.

Als Beispiel benutzen wir ein 53cm langes Seil, das die ersten 38cm eine Massendichte von 7.8mg/cm (nur Perlonschnur) besitzt und die restlichen 15cm eine Massendichte von 80mg/cm (Perlonschnur mit aufgefädelten Perlen).



Die konstante Spannung im Seil wird durch ein Gewicht erreicht, das über eine Umlenkrolle an einem Seilende befestigt ist. Auf der anderen Seite ist das Seil mit einem Motor verbunden, dessen Anregungsfrequenz gesteuert werden kann.

Die ersten drei Zustände dieses Systems sind in der folgenden Abbildung gezeigt.

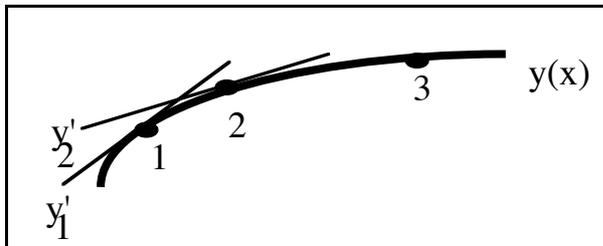


Die abgebildeten Amplitudenfunktionen sind Fotos des realen Versuchsaufbaus, die Frequenzen entsprechen den gemessenen Eigenfrequenzen der Zustände. Auf der linken Seite läßt sich die Umlenkrolle erkennen, auf der rechten Seite der Elektromotor.

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, also jeweils ein Abstand von 15 Hz). Bei den angeregten Zuständen befinden sich die Knoten im Bereich der höheren Massendichte. Die **Krümmung** des Seils ist im Bereich der hohen Massendichte größer, als im Bereich der kleinen Massendichte. Die Krümmung des Seils läßt einen Rückschluß auf die Massendichte zu. Sie spielt bei der späteren theoretischen Beschreibung stehender Seilwellen eine wichtige Rolle.

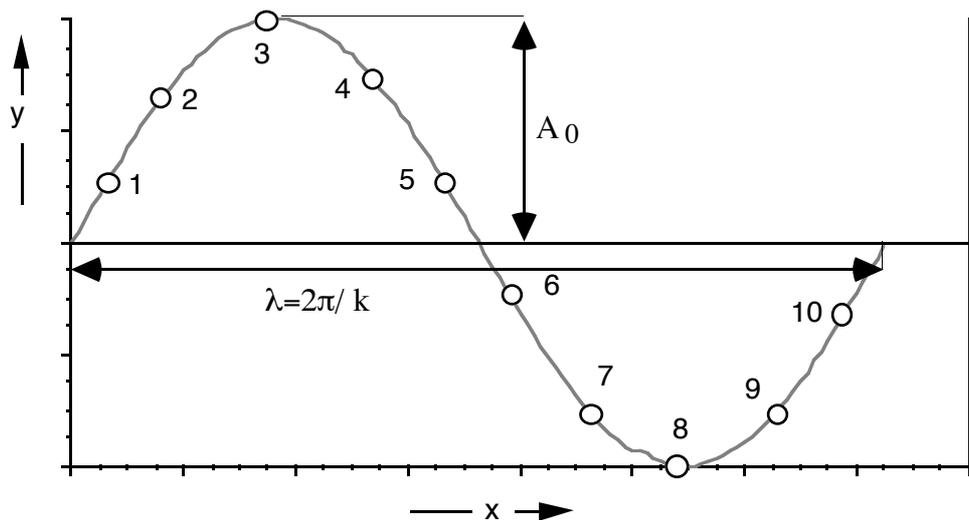
## 2.6 Theoretische Beschreibung stehender Seilwellen

Für ein genaueres Verständnis und eine Berechnung der stehenden Wellen sind sogenannte Differentialgleichungen nötig. In ihnen tritt insbesondere die zweite Ableitung der Amplitudenfunktion  $y''(x)$  auf. Wir wollen uns daher zuvor eine anschauliche Bedeutung dieser Grösse als **Steigungsänderung** oder **Krümmung** erarbeiten.



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

Die folgende Abbildung zeigt eine Sinuskurve (wie es auch die Amplitudenfunktion des ersten angeregten Zustands des homogenen Seils ist):



In Punkt 1 ist die Krümmung betragsmäßig gering, die Funktion gleicht in der Umgebung von Punkt 1 einer Geraden. Zwischen Punkt 2 und 3 nimmt die Krümmung zu, der Graph neigt sich immer stärker. In Punkt 3 ist die Krümmung betragsmäßig maximal (ihr Vorzeichen ist negativ, weil sich die Kurve mit dem Uhrzeigersinn dreht). Zwischen Punkt 5 und 6 ist der Graph einer Geraden wieder sehr ähnlich, die Krümmung ist fast Null. In Punkt 8 ist die maximale Krümmung in entgegengesetzter Richtung erreicht (ihr Vorzeichen ist positiv, weil sich die Kurve gegen den Uhrzeigersinn dreht).

Für eine **sinusförmige stehende Welle** (homogene Massenverteilung im Seil) hat die Amplitudenfunktion  $y(x)$  folgende Form:

$$y(x) = A_0 * \sin(k*x) \dots \dots \dots (1)$$

$A_0$  (die Amplitude) und  $k$  (die Wellenzahl) sind zwei, die Amplitudenfunktion beschreibende Konstanten (siehe Abbildung). Leitet man diese Funktion zweimal nach  $x$  ab, erhält man im ersten Schritt  $y'(x)$  und im zweiten Schritt  $y''(x)$ .

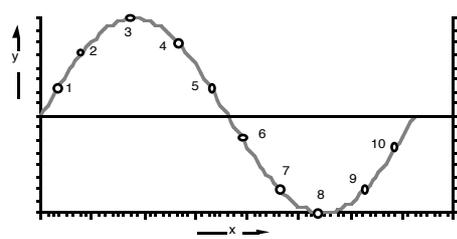
Das Ergebnis sieht so aus:

$$y''(x) = - A_0 * k^2 * \sin(k*x). \dots\dots\dots (2)$$

Setzt man aus Gleichung (1)  $A_0 * \sin(k*x)=y(x)$  in (2), läßt sich dies auch so schreiben:

$$y''(x) = - k^2 * y(x). \dots\dots\dots (3)$$

Dies ist eine sogenannte **Differentialgleichung** für die Amplitudenfunktion  $y(x)$ . In einer Differentialgleichung kommen die gesuchte Funktion - hier  $y(x)$  - und ihre zweite Ableitung - hier  $y''(x)$  - vor. Sie gilt für alle  $x$  und genügt deshalb zur Bestimmung der gesuchten Funktion. Diese Gleichung drückt die oben gefundene Beziehung zwischen Krümmung und Amplitudenwert mathematisch exakt aus:



- Amplitude und Krümmung haben entgegengesetztes Vorzeichen
  - Je größer die Amplitude desto größer die Krümmung.
- Aus diesen beiden Aussagen ergibt sich die typische Gestalt einer Sinuskurve.

Mit  $k=2\pi/\lambda$  (der Zusammenhang zwischen Wellenzahl  $k$  und Wellenlänge  $\lambda$ ) und  $\lambda=c/f$  (der Zusammenhang zwischen Wellenlänge  $\lambda$ , Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c$  und Frequenz  $f$ ) läßt sich Gleichung (3) wie folgt umschreiben:

$$y''(x) = - \frac{4\pi^2 f^2}{c^2} * y(x) \dots\dots\dots (4)$$

Für **nichtsinusförmige stehende Wellen** (inhomogene Massenverteilung im Seil) ergibt sich eine etwas kompliziertere Differentialgleichung. Entscheidend sind dabei der Einfluß der Masse des Seils und der Einfluß der Spannkraft  $F_s$ . Letztere ist durch das angehängte Gewicht bestimmt und bei dieser Anordnung auf dem ganzen Seil konstant. Die Masse dagegen ist entlang des Seils durch die darauf angebrachten Perlen ortsabhängig. Wir definieren: **(Massendichte an der Stelle  $x$ ) =  $m_s(x) = m'(x) = \Delta m / \Delta s = \text{Masse/Länge}$**

Die Differentialgleichung nichtsinusförmiger stehender Wellen lautet:

$$y''(x) = - 4\pi^2 * f^2 * m'(x) / F_s * y(x)$$

Auch hier findet sich die Beziehung zwischen Krümmung der Amplitudenfunktion  $y''(x)$  und der Amplitudenfunktion selbst  $y(x)$  wieder. Da  $y(x)$  auf der rechten Seite mit  $m'(x)$  multipliziert wird, ist die Krümmung  $y''(x)$  in dem Bereich größer, der eine große Massendichte besitzt. Zu diesem Ergebnis sind wir auch schon bei der Betrachtung des Experiments gekommen.

Wie lassen sich aus dieser Gleichung die Amplitudenfunktionen und Eigenfrequenzen zu Zuständen stehender Wellen finden? Wir wissen aus dem Experiment, daß die gesuchten Amplitudenfunktionen am linken und am rechten Ende Null sein müssen, da das Seil an diesen Stellen eingespannt ist und sich nicht bewegen kann. Eine notwendige **Randbedingung** ist daher bei dem 53 cm langen Seil:

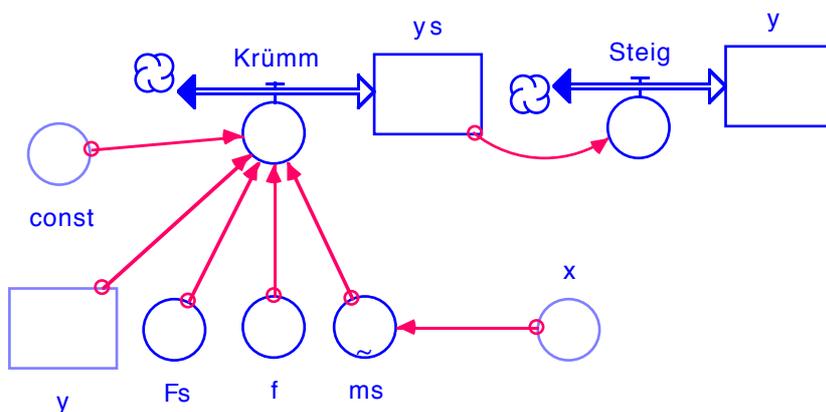
$$y(0 \text{ cm}) = 0 \quad \text{und} \quad y(53 \text{ cm}) = 0$$

Nur wenn diese Bedingungen erfüllt sind, handelt es sich um eine physikalisch sinnvolle Situation. In der Differentialgleichung sind die Massendichte  $m'(x)$  und die Spannkraft  $F_s$  bekannt. Man muß die Frequenz so lange variieren, bis die Bedingungen erfüllt sind. Die gefundenen Funktionen  $y_n(x)$  sind dann die gesuchten Amplitudenfunktionen stehender Wellen. Jede wird mit einem Index  $n$  (der Zustandszahl) durchnummeriert.

## 2.7 Modellierung stehender Wellen mit STELLA

STELLA ist ein Computerprogramm, mit dessen Hilfe sich unter anderem Differentialgleichungen lösen lassen. Die Programmierung erfolgt auf einer graphischen Oberfläche. Jede Variable und Konstante erhält ihr eigenes Symbol. Diese Symbole werden mit Pfeilen verbunden, die anzeigen, wie die einzelnen Größen voneinander abhängen.

Wir werden STELLA benutzen, um die mathematisch aufwendig zu bestimmenden Amplitudenfunktionen stehender Seilwellen mit inhomogener Massenverteilung graphisch darzustellen. Als weiteres Produkt des Lösungsverfahrens mit STELLA erhalten wir die Eigenfrequenzen der Zustände. Die Grundlage unseres STELLA-Modells ist immernoch eine Differentialgleichung. Sie bildet den theoretischen Inhalt.



In dem nebenstehenden Modell finden sich alle bereits genannten Größen wieder.  $x$  ist der Ort auf der  $x$ -Achse,  $m_s$  die Massendichte,  $F_s$  die Spannkraft des Gewichts,  $f$  die Frequenz,  $y$  die Amplitudenfunktion und "Steig" bzw.  $y_s$

deren erste Ableitung. STELLA beginnt mit  $x=0$  und berechnet aus den Angaben und den eingegebenen Gleichungen die Krümmung, daraus die erste Ableitung und letztendlich die Funktion  $y(x)$  selbst. Dann wird  $x$  um ein kleines Intervall  $\Delta x$  vergrößert und der Rechenprozeß von vorne begonnen. Auf diese Weise wird die Amplitudenfunktion von  $x=0$  cm bis  $x=0.53$  m konstruiert. Die hinter den Symbolen stehenden Gleichungen finden sich in den unten aufgelisteten Modellgleichungen:

$y(t) = y(t - dt) + (\text{Steig}) * dt$ INIT $y = 0$ INFLOWS: $\text{Steig} = y_s$	$y_s(t) = y_s(t - dt) + (\text{Krümm}) * dt$ INIT $y_s = 1$ INFLOWS: $\text{Krümm} = -\text{const} * f^2 * (\text{ms}/F_s) * y$
$x = \text{time} \{m\}$ $\text{ms} \{g/m\} = \text{GRAPH}(x \{m\})$ (0.00, 0.78), (0.053, 0.78), (0.106, 0.78), (0.159, 0.78), (0.212, 0.78), (0.265, 0.78), (0.318, 0.78), (0.371, 8.00), (0.424, 8.00), (0.477, 8.00), (0.53, 8.00)	$\text{const} = 4 * \pi^2 * 1e-3$ $f = 7.5 \{Hz\}$ $F_s = .2 \{N\}$

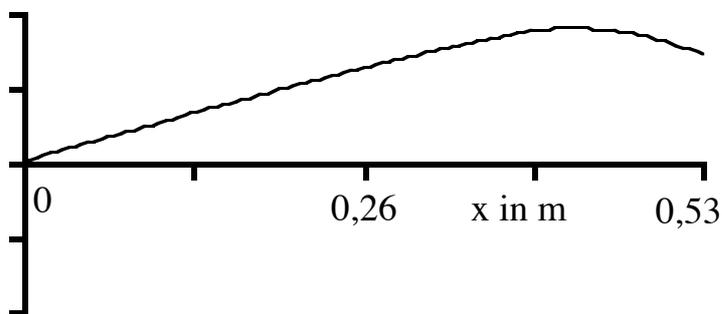
□

Die Differentialgleichung liegt in der Form

$$\text{Krümmung} = -4 * \pi^2 * 10^{-3} * f^2 * (\text{ms}/F_s) * y$$

vor. Die Konstante  $\text{const}$  enthält den Faktor  $1e-3=10^{-3}$ , da die Massendichte in der Einheit  $g/m$  (und nicht  $kg/m$ ) angegeben wird. STELLA rechnet einheitenlos, weswegen die Einheiten auf der linken und rechten Seite gleich sein müssen, so daß sie sich rauskürzen.

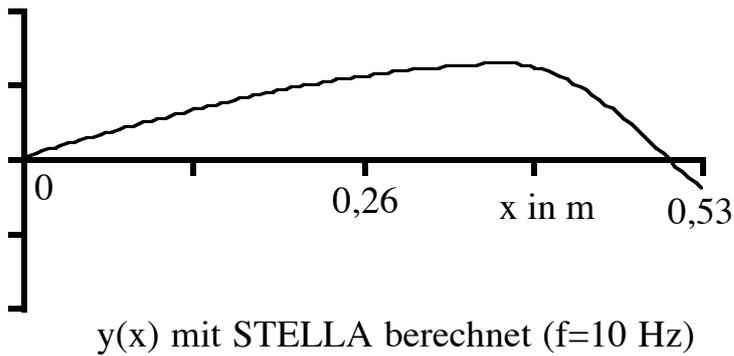
Zum Auffinden der Eigenfrequenzen und der Amplitudenfunktionen stehender Wellen müssen wir so vorgehen, wie es im Theorieteil geschildert wird. Die gefundenen Funktionen müssen die Bedingungen  $y(0)=0$  und  $y(53)=0$  erfüllen.



$y(x)$  mit STELLA berechnet ( $f=5$  Hz)

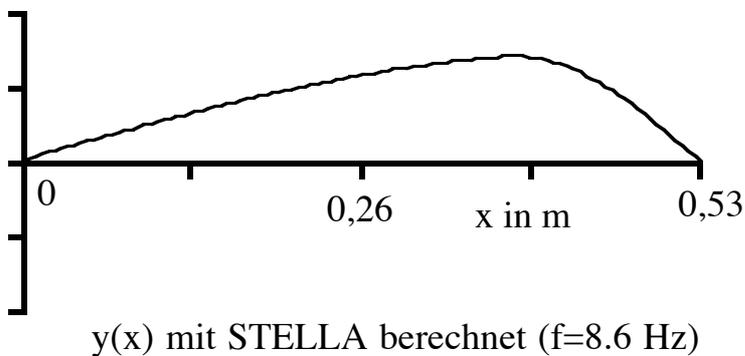
Die erste Nebenbedingung  $y(0)=0$  kann durch Eingabe des Startwerts, der einfach Null gesetzt wird, erfüllt werden. Nun versuchen wir mit der Eingabe einer beliebigen Frequenz (z.B.  $f=5$  Hz), die erste Eigenfrequenz zu finden. Die Funktion

startet wie vorgegeben bei Null, endet aber weit über Null. Dies kann keine physikalisch sinnvolle Lösung sein, wenn das Seil auf der rechten Seite eingespannt ist.

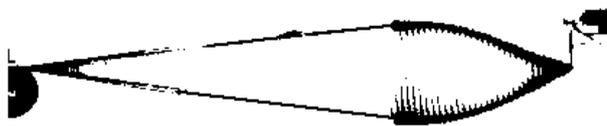


Ein zweiter Versuch mit der Frequenz  $f = 10$  Hz ergibt das nebenstehende Bild. Diesmal landet die Funktion zu weit unten. Auch dies ist keine sinnvolle Lösung. Allerdings läßt sich aus den beiden Bildern ablesen, daß die gesuchte

Frequenz zwischen 5 Hz und 10 Hz liegen muß, da die Funktion mit  $f = 5$  Hz bei  $x=53$  cm zu weit oben und die andere Funktion mit  $f = 10$  Hz zu weit unten liegt.



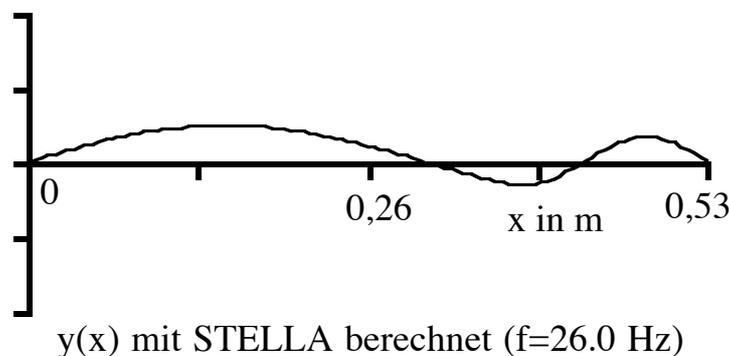
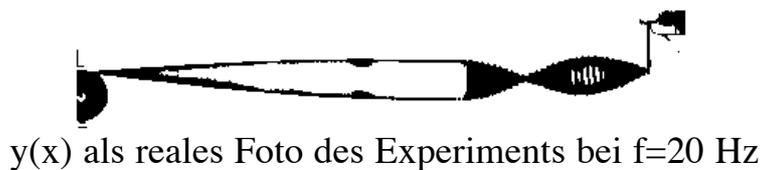
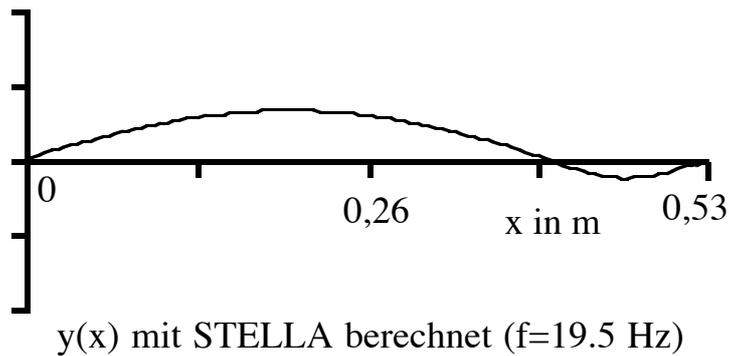
Eine sinnvolle physikalische Lösung erhält man bei  $f=8.6$  Hz (siehe Abbildung). Hier ist die Bedingung  $y(53)=0$  erfüllt. Das Ergebnis stimmt mit der experimentellen Beobachtung (siehe Foto) gut überein. Die exakte Übereinstimmung der Frequenz aus Theorie und Experiment ist eher zufällig. Bei höheren Zuständen weichen die Werte etwas voneinander ab, was auf



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

Ungenauigkeiten in der Angabe der einzelnen Werte zurückzuführen ist. Im Folgenden sind die experimentellen Beobachtungen und die theoretischen Ergebnisse zu den ersten beiden angeregten Zuständen graphisch dargestellt. Die gefundenen Eigenfrequenzen sind:

Zustand $n=1$	8.6 Hz (Experiment)	8.6 Hz (STELLA)
Zustand $n=2$	20 Hz (Experiment)	19.5 Hz (STELLA)
Zustand $n=3$	27 Hz (Experiment)	26.0 Hz (STELLA)



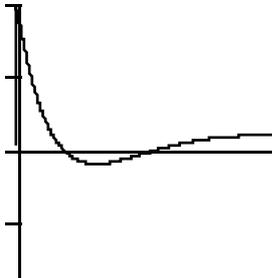
## **2.8 Die Zustandsbeschreibung gebundener Elektronen**

Bis jetzt haben wir den Zustandsbegriff an einem klassischen System (schwingendes Seil) erläutert. Wir haben die Bedingungen für die Entstehung stehender Wellen aus experimentellen Beobachtungen abgeleitet und dabei die physikalischen Begriffe Zustand, Zustandszahl, Eigenfrequenz, Amplitudenfunktion und Knoten definiert. Die theoretische Beschreibung wurde in einem Computerprogramm umgesetzt, um den mathematischen Aufwand zu reduzieren. Ein Vergleich zwischen theoretischen Ergebnissen und experimentellen Werten bestätigte unsere Theorie. Das Modell löst die vorgegebene Differentialgleichung unter Angabe der physikalischen Bedingungen (Knotenpunkte an den Rändern). Wir fragen nun, was dieses Verfahren mit gebundenen Elektronen zu tun hat und wie wir es zur Berechnung von Atomen verwenden können.

Untersucht man experimentell in Atomen gebundene Elektronen macht man folgende Beobachtungen:

- Elektronen sind im Atom in Zuständen gebunden; diese lassen sich wie die Zustände stehender Wellen mit Zustandszahlen durchnummerieren (in der Atomphysik nennt man diese Zahlen **Quantenzahlen**).
- Jeder dieser Zustände ist durch einen **Eigenwert** charakterisiert. Bei stehenden Wellen war dies die Frequenz, bei gebundenen Elektronen ist es die Bindungsenergie (man spricht auch von **Eigenenergie**).
- Die fundamentale Gleichung zur Beschreibung von gebundenen Elektronen ist eine Differentialgleichung (**Schrödingergleichung** genannt), die die gleiche Struktur besitzt, wie die Differentialgleichung stehender Wellen. Auf der linken Seite befindet sich die zweite Ableitung einer Amplitudenfunktion (in der Atomphysik wollen wir diese **Verteilungsfunktion** nennen), auf der rechten Seite die Verteilungsfunktion selbst.
- Die Verteilungsfunktion beschreibt einen Zustand eines gebundenen Elektrons und ist wie die Amplitudenfunktion zeitlich konstant. Sie darf allerdings nicht mehr als Hüllkurve einer Bewegung interpretiert werden. Sie beschreibt stattdessen die **Ladungsverteilung** des Elektrons um den Atomkern.

Da Atome dreidimensionale Gebilde sind, stellt eine eindimensionale Berechnung eine Vereinfachung dar. Diese Vereinfachung macht uns eine zu stehenden Seilwellen analoge Berechnung der Verteilungsfunktionen möglich und damit diese Funktionen anschaulich. Ähnlich dem Schema einer stehenden Seilwellen, das Zustandszahl, Eigenfrequenz und Amplitudenfunktion nebeneinanderstellt, lassen sich zu einem gebundenen Elektron Quantenzahl, Eigenenergie und Verteilungsfunktion zur vollständigen Beschreibung des Systems Atom graphisch darstellen. Die Verteilungsfunktionen unterliegen allerdings etwas anderen Bedingungen. Bei  $x=0$  starten diese mit einem vorgegebenen Wert ungleich Null. Die zweite Bedingung fordert, daß die Funktionen mit zunehmenden  $x$  gegen Null streben. Es gibt im Atom keine "Wand", an der die Verteilungsfunktion festgemacht wird. Eine Begrenzung kann man sich im Unendlichen denken. Die ersten drei Zustände des Wasserstoffatoms sind in der folgenden Abbildung dargestellt.

Quantenzahl $n$	Eigenwert der Energie $E_n$	Verteilungsfunktion $\psi_n(r)$
n=3	<u><math>E_3 = -1.5 \text{ eV}</math></u>	 <p>The plot shows the radial wavefunction for the n=3 state. It starts with a positive peak at r=0, crosses the zero axis once, reaches a negative peak, and then decays towards zero from the negative side. The energy level is indicated by a horizontal line.</p>
n=2	<u><math>E_2 = -3.4 \text{ eV}</math></u>	 <p>The plot shows the radial wavefunction for the n=2 state. It starts with a positive peak at r=0, crosses the zero axis once, and then decays towards zero from the negative side. The energy level is indicated by a horizontal line.</p>
n=1	<u><math>E_1 = -13.6 \text{ eV}</math></u>	 <p>The plot shows the radial wavefunction for the n=1 state. It is a single positive peak at r=0 that decays exponentially towards zero. The energy level is indicated by a horizontal line.</p>

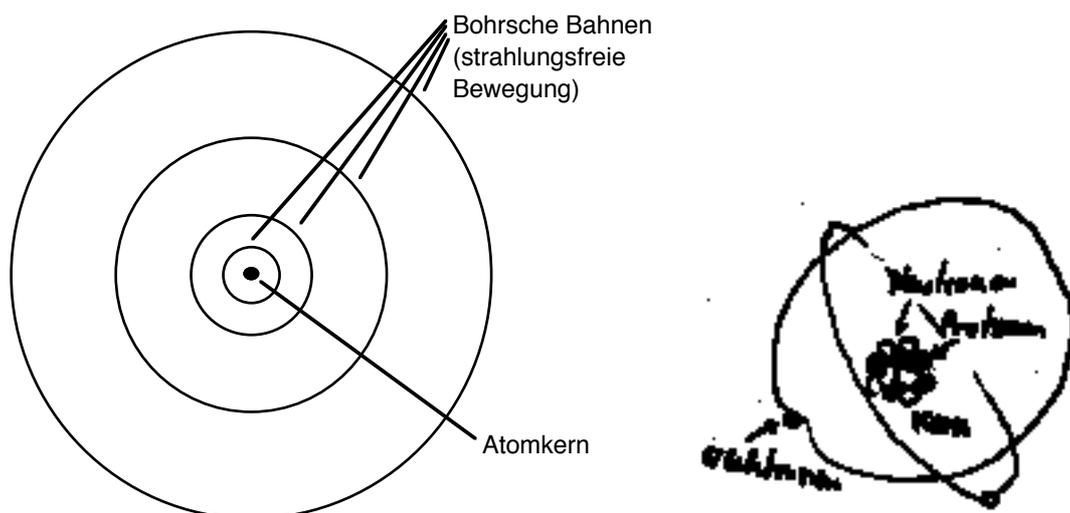
## 3. Das H-Atom

### 3.1 Modelle vom Aufbau der Atome

Streuexperimente von Rutherford (ab 1904) an Atomen zeigten, daß sich die positive Ladung von Atomen und fast ihre gesamte Masse auf einem sehr kleinem Raum im Zentrum aufhält. Dieses Zentrum nennt man den Atomkern, der aus Protonen (den Trägern der positiven Ladung) und Neutronen (ungeladene Teilchen) besteht. Darüber, wie sich die Elektronen, die die negative Ladung tragen, um diesen Kern anordnen (man spricht von der Atomhülle), haben sich im Laufe der letzten 100 Jahre verschiedene Modelle entwickelt. Die **Atomphysik** beschäftigt sich hauptsächlich mit Fragen zum Aufbau der Atomhülle, die das Verhalten **gebundener Elektronen** beschreibt. Es werden hier einige Modelle vom Aufbau der Atome angeboten.

#### A) Das Bohrsche Atommodell

Bohr formulierte 1913 einen entscheidenden Ansatz für ein Atommodell, das die experimentellen Beobachtungen erklärte und einen bedeutenden Schritt zur Formulierung der Quantenphysik enthielt. Die Experimente waren vor allem die Rutherfordschen Streuversuche und die Beobachtung von Linienspektren, wenn man ein atomares Gas zum Leuchten anregt. In diesem Modell sind die Elektronen Teilchen, die sich auf Kreisbahnen um den Atomkern bewegen, ähnlich wie die Planeten um die Sonne kreisen. Durch die Coulomb-Anziehung der entgegengesetzten Ladungen entstehen stabile Bahnen (Kreisbewegung). Die folgenden Zeichnungen (2-dimensionales Bild und Schülerzeichnung) veranschaulichen dies.



Das eben beschriebene Gleichgewicht gilt für beliebige Bahnen, erlaubt also beliebige (oder auch kontinuierliche) Abstände zwischen Elektron und Kern. Gibt das Elektron Energie in Form von Licht ab, verringert sich sein Bahnradius. Die Menge der abgegebenen Energie bestimmt die Frequenz und damit die Farbe des Lichtes. Da die Spektren der Atome

aber nur Linien bei ganz bestimmten Frequenzen zeigen (man nennt dies diskrete Frequenzen), deutet das darauf hin, daß die Elektronen nur ganz bestimmte Energieportionen aufnehmen können. Im Bohrschen Bild führt dies zu ausgewählten Bahnen (Bohrsche Bahnen, siehe Bild), auf denen sich die Elektronen um den Kern bewegen. Alle anderen Bahnen sind verboten. Da sich diese Beobachtung aber in den klassischen Gesetzen der Mechanik nicht wiederfinden läßt, stellte Bohr ein Postulat auf, das die Auswahl bestimmter Elektronenbahnen abweichend von der klassischen Physik beschreibt.

Ein zweites Postulat entstand aus der Überlegung, daß Elektronen, die sich auf Kreisbahnen bewegen, also ständig eine Beschleunigung erfahren, Energie abstrahlen. Für die um den Atomkern kreisenden Elektronen hätte das zur Folge, daß sie ihren Bahnradius wegen der Energieabgabe ständig verringern und letztendlich in den Kern stürzen. Da das nicht beobachtet wird (Atome sind stabile Gebilde), muß eine strahlungslose Bewegung auf den ausgewählten Bahnen postuliert werden.

Daß diese erste Vorstellung vom Atom nicht zufriedenstellend war, liegt an der Formulierung von Postulaten. Die klassische Physik ist im Bohrschen Atombild nur soweit um Forderungen erweitert, wie sie aus experimentellen Beobachtungen notwendig sind. Diese Forderungen gelten nur in der mikroskopischen Welt der Atome, jedoch nicht in unserer makroskopischen, erfahrbaren Welt. Dennoch sind sie ein wichtiger Schritt zur Entwicklung einer einheitlichen Theorie der Atome.

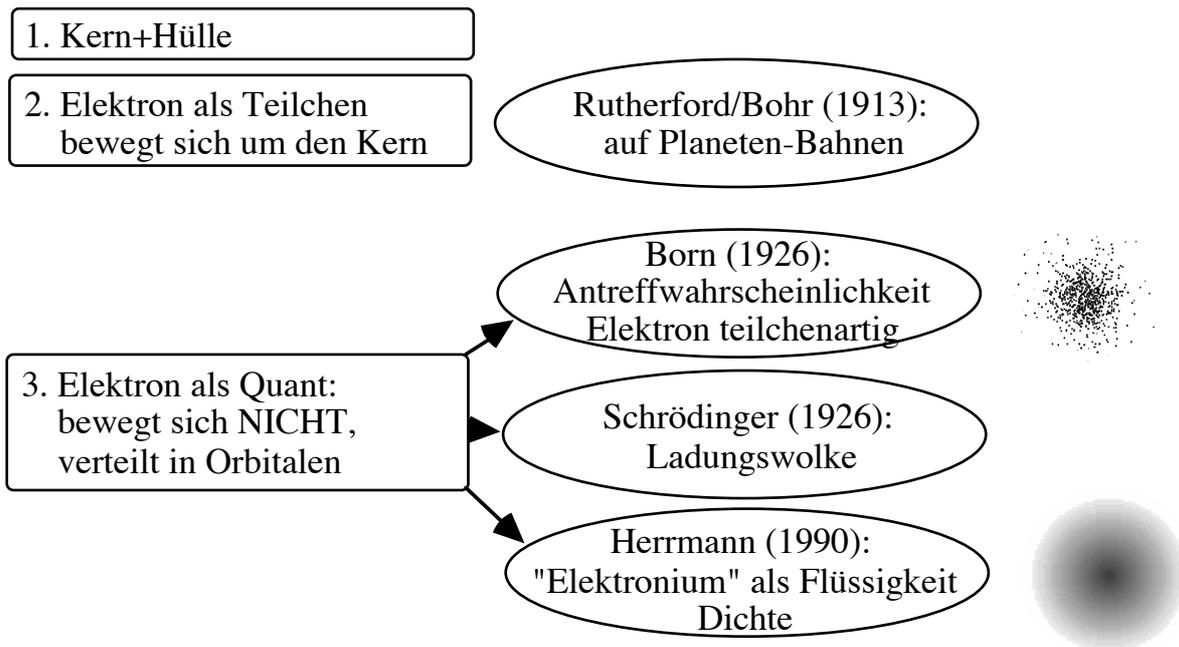
## B) Das gebundene Elektron als Quant

Betrachtet man im Atom gebundene Elektronen nicht mehr als klassische Teilchen, sondern behandelt sie als Quantenobjekte, wie wir es auch bei freien Elektronen getan haben, erhält man die folgenden Beschreibungen: Dem Elektron wird eine Amplitudenfunktion zugeschrieben, die Psi-Funktion (griechisch  $\psi$ ) genannt wird. Diese Funktion besitzt für jeden Ort um den Atomkern einen bestimmten Wert. Die Psi-Funktion selbst läßt sich mit der Schrödingergleichung berechnen. Sie ist die fundamentale Gleichung der Atomphysik und wird später noch ausführlich besprochen. Die Schrödingergleichung liefert aber noch mehr Ergebnisse. Aus ihr ergeben sich rechnerisch die bei Bohr nur postulierten erlaubten Energien und damit eine schlüssige Erklärung der beobachteten Linienspektren, wenn ein Elektron Energie abgibt. Da man im Zusammenhang mit gebundenen Elektronen auch nicht mehr von Bahn und Bewegung sprechen kann, sondern nur noch von Zuständen (diese werden später noch genau behandelt), entfällt auch die Postulierung einer strahlungslosen Bewegung, wie sie sich bei Bohr findet. Der Vorteil im Gegensatz zum Bohrschen Atommodell ist, daß diese Beschreibung keiner Postulate bedarf.

Leider beinhaltet die Theorie der Schrödingergleichung und der Psi-Funktion aber auch einen großen Nachteil, der bis heute zu Diskussionen unter Physikern führt. Die das Elektron beschreibende, um den Atomkern befindliche Psi-Funktion erlaubt keine einfache Vorstellung mit

Elektronen als klassischen Teilchen, wie es bei Bohr möglich ist. Es gibt daher verschiedene Interpretationen der Psi-Funktion, die sich in verschiedenen Texten zu diesem Thema finden lassen, wie z.B. in den folgenden Auszügen von Max Born und Friedrich Herrmann. Beiden gemeinsam ist, daß  $\psi$  bzw  $\psi^2$  die Verteilung des Elektrons um den Kern beschreibt.

### Vorstellungen vom H-Atom



### Interpretation I (Antreffwahrscheinlichkeit)

Max Born (1926):

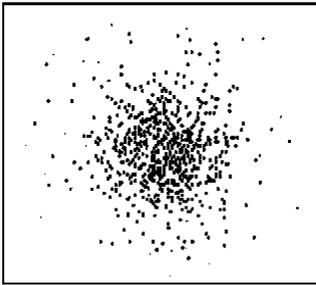
Ich möchte versuchen, hier eine (...) Interpretation zu geben (...). Dabei knüpfe ich an eine Bemerkung Einsteins über das Verhältnis von Wellenfeld und Lichtquanten an; er sagte etwa, daß die Wellen nur dazu da seien, um den korpuskularen Lichtquanten den Weg zu weisen, und er sprach in diesem Sinne von einem "Gespensterfeld". Dieses bestimmt die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Lichtquant, der Träger von Energie und Impuls, einen bestimmten Weg einschlägt; dem Felde selbst aber gehört keine Energie und kein Impuls zu. (...)

Bei der vollständigen Analogie zwischen Lichtquant und Elektron (...) wird man daran denken, die Gesetze der Elektronenbewegung in ähnlicher Weise zu formulieren. Und hier liegt es nahe, die de Broglie-Schrödingerschen Wellen als das "Gespensterfeld" oder besser "Führungsfeld" anzusehen.

(...) Die Bahnen dieser Korpuskeln sind nur so weit bestimmt, als Energie- und Impulssatz sie einschränken; im übrigen wird aber für das Einschlagen einer bestimmten Bahn nur eine Wahrscheinlichkeit durch die Werteverteilung der Funktion  $y$  (= mathematische Funktion, die das "Führungsfeld" beschreibt, J.P.) bestimmt. (...)

Die im Text von **Born** favorisierte Interpretation hat mit dem Prozeß der Lokalisation zu tun. Wenn man den Ort des Elektrons messen möchte (man sagt das man das Elektron dann lokalisiert), gibt  $\psi^2 \cdot \Delta V$  die **Wahrscheinlichkeit** an, das Elektron im Volumen  $\Delta V$  zu finden. Das Elektron besitzt weiterhin teilchenartigen Charakter, ist aber je nach dem Wert

von  $\psi^2(r)$  mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit im Abstand  $r$  vom Kern "anzutreffen" oder zu "lokalisieren".



- $\psi^2 \cdot \Delta V$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Elektron bei einer Lokalisation im Volumen  $\Delta V$  anzutreffen.  
( $\psi^2$  als Wahrscheinlichkeitsdichte)
- Jeder Bildpunkt stellt eine Lokalisation des Elektrons dar. Nach vielen Messungen erhält man ein Bild, das die Wahrscheinlichkeit, das Elektron an einem Ort anzutreffen, verdeutlicht
- Man nennt  $\psi$  dann ein "wellenartiges Möglichkeitsfeld"

## Interpretation II (Elektronenwolke)

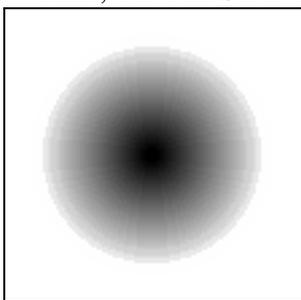
Friedrich Herrmann (Der Karlsruher Physikkurs, 1990)

Das Elektron ist ein ausgedehntes Gebilde. Seine Form wird durch seine Zustandsfunktion beschrieben. Die Form ist demzufolge vom Zustand abhängig. In einem Zustand scharfen Ortes ist das Elektron sehr klein, in einem Zustand scharfen Impulses ist es sehr groß. Um ein solches Elektron zu beschreiben, braucht man einen Namen für etwas, das es im traditionellen Modell nicht gibt: einen Namen für diesen Stoff, aus dem das Elektron besteht. Wir haben diesen Stoff *Elektronium* genannt.

Die Einführung dieses Namens erleichtert die Beschreibung des Atomaufbaus: Das Atom besteht aus einem kleinen schweren Kern und einer großen, leichten Hülle. Die Hülle besteht aus Elektronium. Das Elektronium hat im Zentrum eine hohe Dichte. Nach außen hin nimmt seine Dichte kontinuierlich ab. Es hat keinen scharfen Rand. Wenn man versucht, etwas von dem Elektronium aus dem Atom herauszunehmen, so beobachtet man, daß man immer bestimmte Portionen erhält: eine bestimmte Menge Elektronium (als Mengenmaß nimmt man die Masse) oder ganzzahlige Vielfache dieser Menge. Wir nennen diese Elementarmenge ein Elektron.

In Zuständen des Atoms, die die Quantenmechanik Eigenzustände der Energie nennt, ist die Verteilung, und damit die Form des Elektroniums zeitlich konstant: das Elektronium bewegt sich nicht.

Wir glauben, daß diese Art des Umgangs mit den Elektronen im Grunde gar nichts Neues darstellt. Atomphysiker, Chemiker und Kristallographen arbeiten ständig mit diesem Modell. Statt von Elektronium sprechen sie allerdings von Orbitalen oder Elektronendichteverteilungen. Man erkennt an ihrer Art zu sprechen, daß hier eigentlich nur ein Wort fehlt, das den Stoff bezeichnet, über den gesprochen wird.



- $e \cdot \psi^2 \cdot \Delta V$  gibt die Teil-Ladung des Elektrons im Volumen  $\Delta V$  an ( $e \cdot \psi^2$  als "Ladungsdichte").
- Eine solche Vorstellung des Elektrons bezeichnet man als Ladungswolke. Das Elektron ist ein diffuses Gebilde um den Atomkern. Diese Vorstellung hat sich insbesondere in der Chemie beim Aufbau von Molekülen bewährt.
- Das nebenstehende Bild veranschaulicht als Beispiel die Ladungswolke eines einzelnen Elektrons im Wassersoffatom. Die Ladungswolke befindet sich um den

Atomkern.

Die von **Herrmann** formulierte Vorstellung kommt der Interpretation von Schrödinger sehr nahe, der zusammen mit Heisenberg in den 20er Jahren die Quantenphysik begründete. Schrödinger interpretierte die Psi-Funktion als eine Ladungswolke, die sich um den Atomkern befindet. Begriff wie **Ladungswolke**, **Elektronium** oder **verschmierte Ladung** weisen alle auf ein ähnliches Bild hin, das eine **Dichteverteilung** des Elektrons veranschaulicht, die durch  $\psi^2$  gegeben ist. Das Elektron verliert in gebundenen

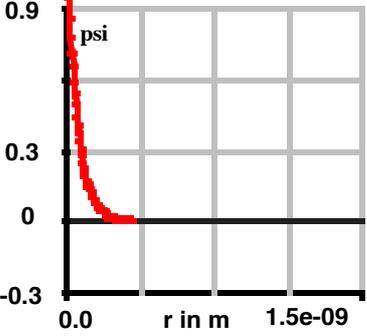
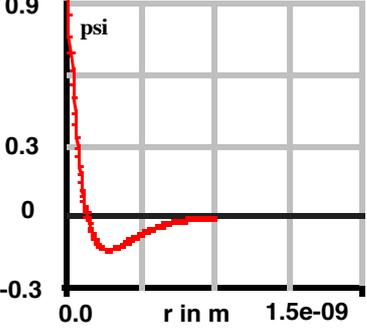
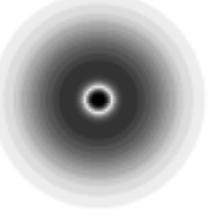
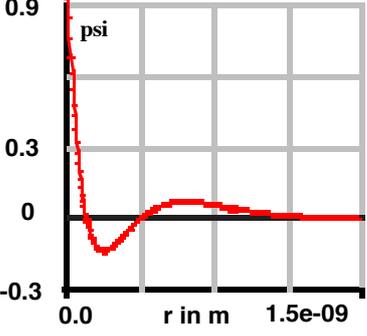
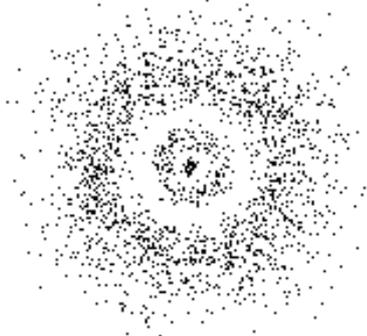
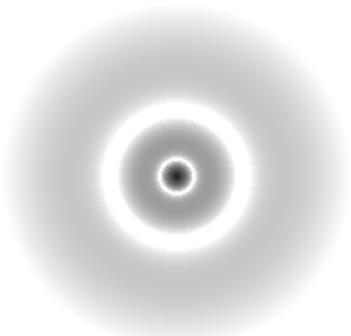
Zuständen seinen teilchenartigen Charakter (damit verbunden läßt sich auch keine Aussage über eine Bewegung mehr machen)

### 3.2 Zustände eines gebundenen Elektrons

Unser erstes Ziel ist es, die Grundgleichung gebundener Elektronen zu finden, um aus ihr die Energie und Verteilungsfunktion  $\psi$  gebundener Zustände zu berechnen. Die Gleichung wird **Schrödingergleichung** genannt und liefert als Ergebnisse Funktionen (diese werden Funktionen gebundener Zustände genannt; die Funktion beschreibt das gebundene Elektron). In der **klassischen Physik** verbindet man die Beschreibung eines Teilchens mit einer **Bahn**, wie z.B. der Kreisbahn eines Planeten um die Sonne. Kennt man die Bahn, so läßt sich der Aufenthaltsort des Planeten zu jedem beliebigen Zeitpunkt vorherbestimmen. In der **Atomphysik** erhält man zur Beschreibung eines Quantenobjekts einen **Zustand** (der durch eine Funktion und eine Energie charakterisiert ist). Zwei Interpretationsmöglichkeiten dieser Zustände haben wir zuvor schon angesprochen. Allerdings machen die Begriffe "Bahn" und "Bewegung" im Zusammenhang mit Zuständen keinen Sinn mehr. Sie werden ersetzt durch die Vorstellung einer Verteilung des Elektrons um den Kern gemäß den Werten der  $\psi$ -Funktion ("Verteilungsfunktion"). Wo  $\psi$  einen hohen Wert hat, ist das Elektron "oft" anzutreffen bzw. die Dichte der Elektronenwolke groß. Es sind auf der folgenden Seite die ersten drei Zustände des Wasserstoffatoms in drei verschiedenen Darstellungen abgebildet. Auf der linken Seite sind die  $\psi$ -Funktionen der ersten drei Zustände, in der Mitte die Bilder zur Antreffwahrscheinlichkeit und auf der rechten Seite die jeweiligen Zeichnungen der Ladungswolke des Elektrons. Je mehr Punkte in einem Bereich eines Bildes zur Antreffwahrscheinlichkeit liegen, desto wahrscheinlicher ist es das Elektron in diesem Gebiet zu lokalisieren; je dunkler das Gebiet der Ladungswolke ist, desto größer ist die Ladungsdichte in diesem Bereich. Zu jedem Zustand gehört eine Energie, die die Stärke angibt, mit der die Elektronenwolke an den Kern gebunden ist. Der oben abgebildete 1s-Zustand besitzt die größte Bindungsenergie und wird als Grundzustand bezeichnet. Wasserstoffatome favorisieren diesen Zustand wegen seiner niedrigsten Energie (eine hohe Bindungsenergie bedeutet in diesem Zusammenhang, daß sich das Atom in einem energetisch besonders günstigen, also energetisch niedrigen Zustand befindet). Um den 2s-Zustand zu erreichen, muß dem Atom Energie zugeführt werden, um den 3s-Zustand zu erreichen, muß die zugeführte Energie noch größer sein. Zwischen dem 1s- und dem 2s-Zustand des Wasserstoffatoms gibt es keinen anderen Zustand mehr, in dem das Atom existieren kann. Ebenso ist es zwischen dem 2s- und dem 3s-Zustand. Werden die  $\psi$ -Funktionen quadriert und zweidimensional abgebildet, dann erhält man die Bilder der Ladungswolken auf der rechten Seite. Diese besitzen **keine Zeitabhängigkeit**. Das Quadrat einer Psi-Funktion verändert sich also nicht mit der Zeit. Daher macht es auch keinen Sinn, von einer Bahn oder einer Bewegung zu sprechen. Die Ladungswolke ist eher als ein im Raum statisch stehendes Gebilde zu sehen. Fügt man dem Atom Energie zu, dann verändert die Ladungswolke seine Form. Es können keine Aussagen über den

Prozeß zwischen zwei Zuständen gemacht werden, sondern nur in welchem Zustand das Atom vorher war und in welchem Zustand es sich danach befindet.

### Die ersten drei Zustände des H-Atoms

<b><math>\psi</math>-Funktion (Verteilungsfunktion)</b>	<b>Antreff- wahrscheinlichkeit</b>	<b>Dichteverteilung</b>
 <p>1s-Zustand</p>	 <p>1s-Zustand</p>	 <p>1s-Zustand</p>
 <p>2s-Zustand</p>	 <p>2s-Zustand</p>	 <p>2s-Zustand</p>
 <p>3s-Zustand</p>	 <p>3s-Zustand</p>	 <p>3s-Zustand</p>

### 3.3 Analogie zu stehenden Wellen

Im vorherigen Kapitel haben wir unter anderem dreidimensionale stehende Wellen in einer Glaskugel kennengelernt. Eine stehende Welle, die sich bei einer bestimmten Frequenz in der Glaskugel ausbildet, ist ebenso durch eine Amplitudenfunktion gekennzeichnet, wie eine Ladungswolke durch eine  $\psi$ -Funktion charakterisiert ist. Nur bei ganz bestimmten Frequenzen bilden sich in der Glaskugel stehende Wellen aus. Bei Ladungswolken ist die Bindungsenergie mit der Frequenz der stehenden Wellen zu vergleichen. Auch die Ladungswolke existiert nur bei ganz bestimmten Energien. Zur Charakterisierung beider Funktionen, sowohl der Amplitudenfunktion einer stehenden Welle als auch der  $\psi$ -Funktion eines Elektrons, sind Knotenflächen sehr hilfreich. Die analogen Zustandseigenschaften zwischen Glaskugel und Atom sind unten zusammengefaßt.

<u>Glaskugel</u>	<u>Atom</u>
<b>Eigenwert</b> Frequenz $f_n$	<b>Eigenwert</b> Energie $W_n$
<b>Zustand n</b>	
<b>Form</b> Amplitudenfunktion $y_n(x, y, z)$	<b>Form</b> Verteilungsfunktion $\psi_n(x, y, z)$
<b>Knotenflächen</b> - Kugelnknotenflächen - Ebenen (durch den Mittelpunkt) - Doppelkegel	<b>Knotenflächen</b> - Kugelnknotenflächen - Ebenen (durch den Mittelpunkt) - Doppelkegel

In einem wichtigen Punkt, nämlich der Interpretation der beiden Funktionen, besteht keine vollständige Analogie. Während die Amplitudenfunktion stehender Wellen ein Maß für die Schwingung der Luft in der Glaskugel ist, ist das Quadrat der  $\psi$ -Funktion des Elektrons ein Maß für die Ladungsdichte (Ladungswolke) oder die Antreffwahrscheinlichkeit bei einer Lokalisation (wellenartiges Möglichkeitsfeld). Die Amplitudenfunktionen besitzen in den zwei Sachverhalten einen sehr unterschiedlichen physikalischen Hintergrund, aber eine sehr ähnliche mathematische Beschreibung durch Differentialgleichungen.

### 3.4 Schrödingergleichung und Potential

Als erstes wollen wir die Grundgleichung zur Berechnung der  $\psi$ -Funktion (die sogenannte Schrödingergleichung (SGL)) aufstellen und plausibel machen.<sup>1</sup>

Wir gehen hierbei von sinusförmigen Seilwellen aus. Die Wellengleichung beim Seil war:

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

Aufgrund der oben dargestellten Analogie (Eigenwerte, Knoten, ...) gehen wir davon aus, daß wir zur Berechnung der  $\psi$ -Funktionen eine ähnliche

<sup>1</sup> Eher eine stark vereinfachte Plausibilität als eine strenge Herleitung

Differentialgleichung erhalten, wie bei den stehenden Seilwellen. Die Seilwellen sind allerdings eindimensional, während die Ladungswolke dreidimensional um den Atomkern angeordnet ist. Beschränkt man seine Berechnungen der  $\psi$ -Funktion auf radialsymmetrische Zustände (diese sind kugelsymmetrisch um den Kern angeordnet), die nur noch vom Radius  $r$  abhängen, erhält man wie bei den stehenden Seilwellen eine Differentialgleichung, die nur noch  $r$  als Differential beinhaltet. Die Lösungen dieser Gleichung sind die **radialen Amplitudenfunktionen**, die mit  $u(r)$  bezeichnet werden. Die  $\psi$ -Funktion erhält man, wenn man  $u(r)$  durch  $r$  teilt.

$$\psi(r) = u(r)/r$$

Wir werden eine Gleichung aus der Differentialgleichung stehender Wellen aufstellen, mit der sich  $u(r)$  berechnen läßt. Die  $\psi$ -Funktion erhält man dann aus der oben angegebenen Gleichung.

Wir ersetzen deshalb das  $y$  durch  $u$  und ändern das  $x$  in ein  $r$ , also  $y(x)$  in ein  $u(r)$ . Die Funktion sieht dann folgendermaßen aus.

$$(1) \quad u''(r) = -4\pi^2 \cdot \frac{1}{\lambda^2} \cdot u(r)$$

Da wir bis jetzt von dem Seil ausgegangen sind, somit immer mit Teilchen gearbeitet haben, müssen wir uns überlegen wie wir vom Teilchen zum Quant kommen. Dafür gibt es sogenannte Übersetzungsgleichungen. Sie verbinden Eigenschaften des Korpuskels, wie z.B.  $W$  und  $p$ , mit Eigenschaften der Welle, wie z.B.  $\lambda$  und  $f$ . Wir kennen sie schon aus dem einführenden Kapitel zur Quantenphysik. Z.B. weißt das Feld Welleneigenschaften auf, wie Beugung und Interferenz. Somit besteht ein Zusammenhang zur DE BROGLIE Wellenlänge. Für das Elektron als Quant gilt aber auch die EINSTEINSche Gleichung.

<b>Teilchengrößen:</b> $W, p$	$W = h \cdot f$ $p = h / \lambda$	<b>Wellengrößen:</b> $f, \lambda$
----------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------

Wir können jetzt in unsere Gleichung (1)  $\frac{1}{\lambda^2} = \frac{p^2}{h^2}$  einsetzen.

Wir erhalten dann:

$$(2) \quad u''(r) = -4\pi^2 \cdot \frac{p^2}{h^2} \cdot u(r)$$

Bei einer Seilwelle werden die Zustände durch die Frequenz beschrieben. Da für ein Quant die EINSTEINSche Gleichung  $W = h \cdot f$  gilt und sich im Atom Energie befindet, können wir davon ausgehen, daß der Zustand im Atom durch die Energie beschrieben wird.

$$W_{\text{kin}} = 1/2 m \cdot v^2$$

mit:  $v = p/m$

ergibt:  $W_{\text{kin}} = p^2 / (2m)$

Diese Energie ist allerdings nicht die gesamte Energie des Atoms. Wir müssen beachten das wir nicht mehr von freien Elektronen ausgehen dürfen, sondern daß das Elektron an den Atomkern gebunden ist. Das Elektron wird durch eine Kraft um den Kern gehalten. Diese Kraft wirkt überall zu jeder Zeit. Für diese Kraft ist die COULOMB-Anziehung verantwortlich. Wir sprechen von einem Potential  $V(r)$ , das auf das Elektron wirkt. Das Potential entspricht der Arbeit, die nötig ist, um eine Ladung  $-e$  aus dem "Unendlichen" auf den Radius  $r$  an die Ladung  $+e$  heranzuführen. Daraus ergibt sich:

$$V(r) = W_{\text{pot}}$$

$V(r)$  beschreibt das "Potential" des elektrischen Feldes.

Mit  $V(r)$  bezeichnet man in der Quantenphysik ein ortsabhängiges (Energie)-Potential. Es beschreibt, wie die Anziehungskraft des Kerns auf das gemäß  $\psi(r)$  um den Kern verteilte Elektron wirkt. das das Elektron beeinflusst.  $W_{\text{pot}}$  ist demgegenüber die potentielle Energie eines klassischen Teilchens an der Stelle  $r$ .

$$W_{\text{pot}}(r) = \int_{\text{Bezugspunkt}}^r \vec{F} \cdot d\vec{s}$$

Coulombkraft:

$$F = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \quad (\epsilon_0: \text{elektr. Feldkonstante, } e^2=Q_1 \cdot Q_2)$$

$$W_{\text{pot}}(r) = + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot e^2 \cdot \int_{\infty}^r \frac{1}{r^2} dr = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot e^2 \cdot \int_r^{\infty} \frac{1}{r^2} dr \quad ^2)$$

Wegen des  $1/r$ - Verlaufs von  $V$  ist es hier sinnvoll, den "Bezugspunkt" ins Unend-liche bzgl. des Atomkerns zu verlegen.

$$W_{\text{pot}}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot e^2 \cdot \left. \frac{1}{r} \right|_r^{\infty} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot e^2 \left( \frac{1}{\infty} - \frac{1}{r} \right)$$

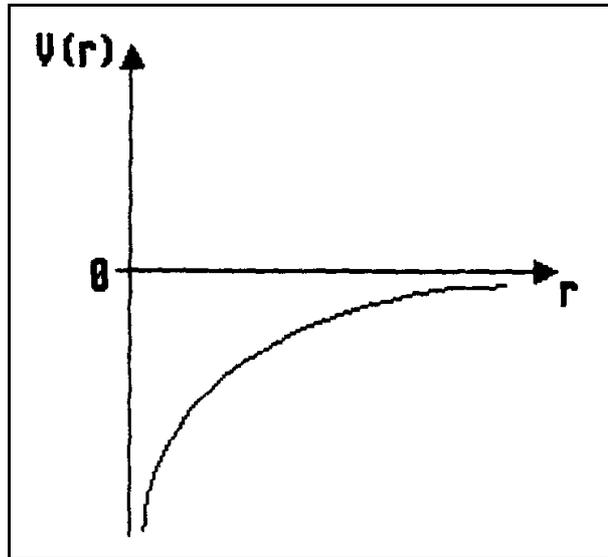
Da  $\frac{1}{\infty}=0$  ist, ergibt sich schließlich für das Coulombpotential eines Elektrons im H-Atom:

---

<sup>2)</sup> weil  $\infty > r$  ist, das heißt umgekehrter Integrationsweg

$$V(r) = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Wir können anhand der Formel sehen, daß wir in Kernnähe (kleines  $r$ ) ein sehr tiefes Potential haben, weiter draußen (großes  $r$ ) strebt das Potential gegen Null. Dies wird am Diagramm deutlich:



Wir können jetzt für die Gesamtenergie  $W$  eines gebundenen Elektronenzustandes schreiben:

$$W = p^2/(2m) + V(r)$$

Dies setzen wir, nach  $p^2$  umgestellt, in unsere Gleichung (2) ein und erhalten:

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

Diese Differentialgleichung ist die **Schrödinger-Gleichung (SGL)** für ein gebundenes Elektron in einem kugelsymmetrischen Potential  $V(r)$ . Sie ist die wichtigste Grundgleichung der ganzen Atomphysik.

Ist  $W$  hierbei der Eigenwert  $W_n$  eines bestimmten Eigenzustandes  $n$ , so beschreibt die Schrödingergleichung die Funktion  $u_n$  dieses Zustandes  $n$ . Für diesen Fall erhalten wir also speziell die Gleichung:

$$u''_n(r) = - 8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot (W_n - V(r)) \cdot u_n(r)$$

$u''_n(r)$ ,  $u_n(r)$  und  $W_n$  sind für verschiedene Zustände verschieden,  $V(r)$  ist unabhängig vom speziellen Zustand.

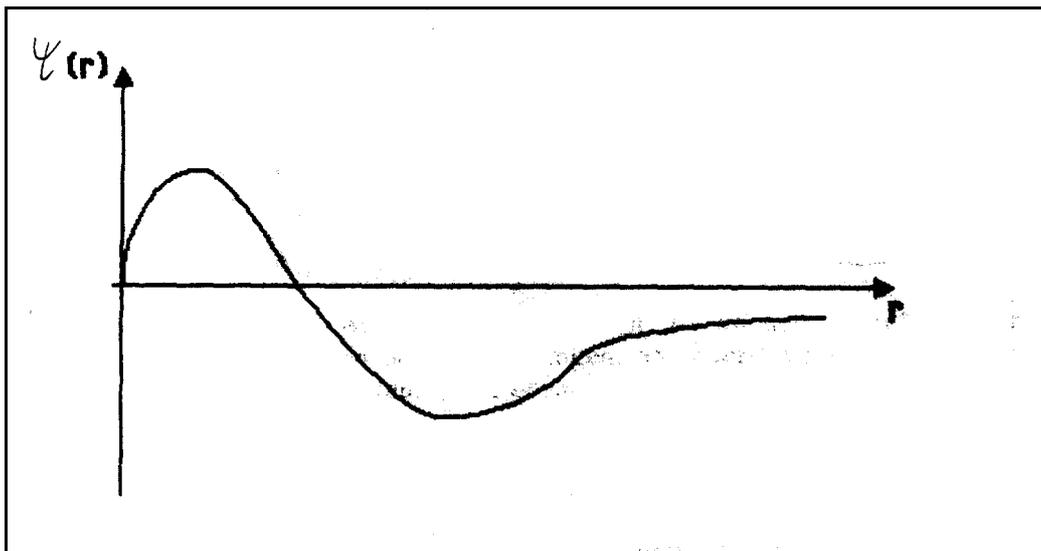
Für ein anschauliches Verständnis dieser Gleichung interpretieren wir wieder (wie bei stehenden Wellen)  $u''$  als Krümmung. Dann besagt die SGL folgendes:

- bei größerem Energieeigenwert (höheren Zuständen) ist die Krümmung größer; wir erhalten mehr Knoten und kleinere Knotenabstände
- Bei größerem Potential (größere Entfernung vom Kern) ist die Krümmung kleiner und damit sind die Knotenabstände größer.
- Bei  $u=0$  ist die Krümmung 0 (also in Nähe der Knoten)
- In den Maxima von  $u$  erhalten wir die größte Krümmung (weil dort  $u$  am größten ist)

Speziell für das H-Atom ergibt sich:

$$u_n''(r) = - 8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot (W_n + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}) \cdot u_n(r)$$

Wie wir wissen, ist das Potential bei kleinem  $r$  klein und bei großem  $r$  groß. Daraus können wir schließen, daß je größer das Potential wird, desto kleiner wird die Krümmung. Das heißt also, daß die Krümmung in der Nähe des Kerns am größten ist. Das dazugehörige  $u_2(r)$  - Diagramm ( $\psi_2(r)=u_2(r)/r$ ) sieht folgendermaßen aus:



Bei dem Potential können wir wieder Parallelen zu unserem Seil ziehen. Da das Potential von  $r$  abhängig ist, können wir es mit der Abhängigkeit der Masse des inhomogenen Seiles von  $x$  vergleichen.  $e^2$  entspricht dabei  $F_s$ . Beide, das Potential  $V(r)$  und die Massendichte  $m_s(x)$  beeinflussen entscheidend die Krümmung der jeweiligen Amplitudenfunktionen  $u(r)$  (radiale) bzw.  $y(x)$  und damit die Form dieser Kurven!

Nun stellte sich uns die Frage, was uns die Schrödinger Gleichung (SGL) sagt:

- Sie beschreibt die Krümmung der  $u$ -Funktion: Je größer die Gesamtenergie  $W$  oder je tiefer das Potential  $V(r)$  oder je größer der Funktionswert von  $u(r)$ , desto größer die Krümmung.
- Sie erlaubt die Berechnung von  $\psi(r)$  auf verschiedenen Wegen, z.B. durch schrittweises Bestimmung des Kurvenverlaufs von  $u(r)$  aus der Steigungsänderung (= Krümmung), insbesondere mit Hilfe des Computers (STELLA-Modell), oder durch Lösen der Differentialgleichung mit einem Ansatz für die Funktion  $u(r)$ .
- Sie erlaubt damit auch die Bestimmung von Knotenpunkten (Nullstellen) und Bäuchen (Maxima) der  $\psi$ - Funktion, insbesondere mit Hilfe des Computers.
- Bei Angabe von Randbedingungen (z.B.: die  $\psi$ - Funktion soll für große  $r$ -Werte gegen null gehen) erlaubt die SGL auch die Bestimmung von Eigenwerten  $W_n$  der Gesamtenergie, welche zu einer  $\psi$ -Funktion führen, die eben diese physikalisch begründete Randbedingung erfüllt.

Aus diesen Aussagen resultiert, daß wir mit der Schrödingergleichung die Zustände und die Eigenwerte berechnen können. Dazu führen wir einige Versuche durch.

### **3.5 Das H-Atom**

#### Zustände des Atoms (= Zustände des Elektrons im Atom)

Zustand  $n$  beschrieben durch

- Eigenwert: bestimmte Gesamt-Energie  $W_n$   
und
- Form: Die genaueste Beschreibung der Form ist die Amplitudenfunktion  $\psi_n$ . Oft reicht schon die Angabe der Anzahl der Knotenflächen (Nullstellen von  $\psi_n$ ), oder die Angabe der Lage und Abstände der Knotenflächen oder eine grobe zeichnerische Darstellung der Form der Amplitudenfunktion  $\psi_n$ .

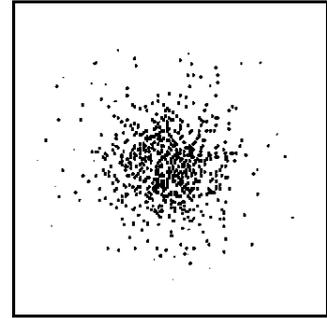
#### Vorstellung vom H-Atom

Es stellte sich das Problem, wie wir uns das Wasserstoffatom näher vorstellen können und was wir machen könnten, um mehr über das Atom zu erfahren.

Wir müssen unsere bisherige Vorstellung der Atomhülle ändern, wenn wir uns das Elektron als Quant vorstellen. Die Hülle ist dann als eine Verteilung des Elektrons zu sehen. Das Elektron hat keine bestimmte Bahn, sondern einen Aufenthaltsraum ("Orbital"), in dem es sich befindet und der räumlich ausgedehnt (dreidimensional) ist. In der Mitte des H-Atoms befindet sich ein Proton (Kern), darumherum die Hülle aus einem Elektron. Die Verteilung dieses Elektrons in der Hülle wird durch die  $\psi$ -Funktion angegeben.

## Interpretation I:

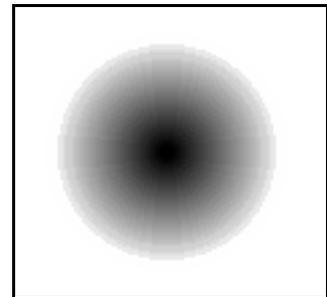
- $\psi^2 \cdot \Delta V$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Elektron bei einer Lokalisation im Volumen  $\Delta V$  anzutreffen.
- ( $\psi^2$  als Wahrscheinlichkeitsdichte)  
Vergleiche das nebenstehende Bild als Darstellung vieler nacheinander durchgeführter Lokalisationen an verschiedenen H-Atomen, die sich alle im Grundzustand befanden.



Die Lokalisation bedeutet die Zerstörung eines Zustandes. Für das ungestörte Atom ist es daher vorteilhafter, sich die Hülle als kontinuierlich und breiartig vorzustellen. Dazu kann die "Ladungsdichte" herangezogen werden:

## Interpretation II:

- $e \cdot \psi^2 \cdot \Delta V$  gibt die Teil-Ladung des Elektrons im Volumen  $\Delta V$  an  
( $e \cdot \psi^2$  als "Ladungsdichte")
- Eine solche Vorstellung des Elektrons bezeichnet man als Ladungswolke. Diese Vorstellung hat sich insbesondere in der Chemie beim Aufbau von Molekülen bewährt.



## Zusatzbemerkung:

Es entsteht an dieser Stelle die Frage, ob das Elektron in der Atomhülle Schwingungen vollführt. Dies kann mit Bestimmtheit ausgeschlossen werden, da der Zeitanteil der  $\Psi$ -Funktion solcher Atomzustände immer komplex ist, sodaß bei der Berechnung von  $\Psi \cdot \Psi$  dieser Zeitanteil herausfällt: Es gibt keine zeitliche Schwingung oder Schwankung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in solchen Atomzuständen.<sup>3</sup>

Es gibt kugelförmige und nicht-kugelförmige  $\psi$ -Funktionen. Wir werden uns fast ausschließlich mit den kugelförmigen  $\psi$ -Funktionen beschäftigen. In ihnen ist auch die Form der Knotenflächen eine Kugel ("Kugelnodenfläche"). Man nennt eine  $\psi$ -Funktion dann "kugelsymmetrisch", wenn  $\psi$  für einen Abstand  $r$  vom Mittelpunkt in jede Richtung denselben Wert besitzt. Immer wenn die  $\psi$ -Funktion nur von  $r$  abhängig ist, können wir sagen, daß wir kugelsymmetrische Zustände eines Atoms vor uns haben.

---

<sup>3</sup> Das  $\psi$ -Feld der stabilen gebundenen Zustände des Elektrons ist die Amplitudenfunktion einer zeitabhängigen Zustandsfunktion  $\Psi(r,t)$ . Die Zeitabhängigkeit ist jedoch komplex ( $e^{-i\omega t}$ ). Die Frage, ob das  $\psi$ -Feld schwingt, ist daher schwierig. Bei der Berechnung von  $|\Psi(r,t)|^2$  ergibt sich:  $e^{-i\omega t} \cdot e^{+i\omega t} = 1$ , d.h.  $|\Psi(r,t)|^2 = |\psi(r)|^2$ . Die Frage spielt also für die Interpretation von  $\psi$  als Möglichkeitsfeld für den Ausgang von Messungen keine Rolle. Das ERgebnis bedeutet, daß ein solcher Zustand keine Bewegung hat und deshalb keine Strahlung (Licht) aussendet.

Die Knotenflächen sind als Nullstellen der  $\psi$ -Funktion eindeutig bestimmt. Auf diesen Flächen ist die Lokalisationswahrscheinlichkeit und die Ladungsdichte null. Die Angabe der Knotenflächen kennzeichnet einen Zustand eindeutig. Eine räumliche Vorstellung von solchen Knotenflächen ist die beste Hilfe für eine räumliche Vorstellung vom Atom selbst. Man nennt diese durch eine  $\psi$ -Funktion beschriebene Form des Elektrons und der Hülle auch ein **Orbital**.

### Größe und Rand des H-Atoms

Einige dieser Fragen können wir schon beantworten. Wir wissen z.B., daß es keinen festen Rand in der Atomhülle gibt. Dies ergibt sich aus der Tatsache, daß sich die  $\psi$ -Funktion von atomaren Zuständen der  $r$ -Achse zwar asymptotisch nähert, aber nie null wird. Praktisch gesehen wird die Ladungsdichte aber nach außen so gering, daß wir doch von der Begrenztheit des Atoms ausgehen müssen. Man kann z.B. Radien angeben, innerhalb derer sich 95% oder 99% der Ladungswolke befinden. Wir können also von einem Rand ausgehen, der sich dort befindet wo die  $\psi$  - Funktion "praktisch" null ist.

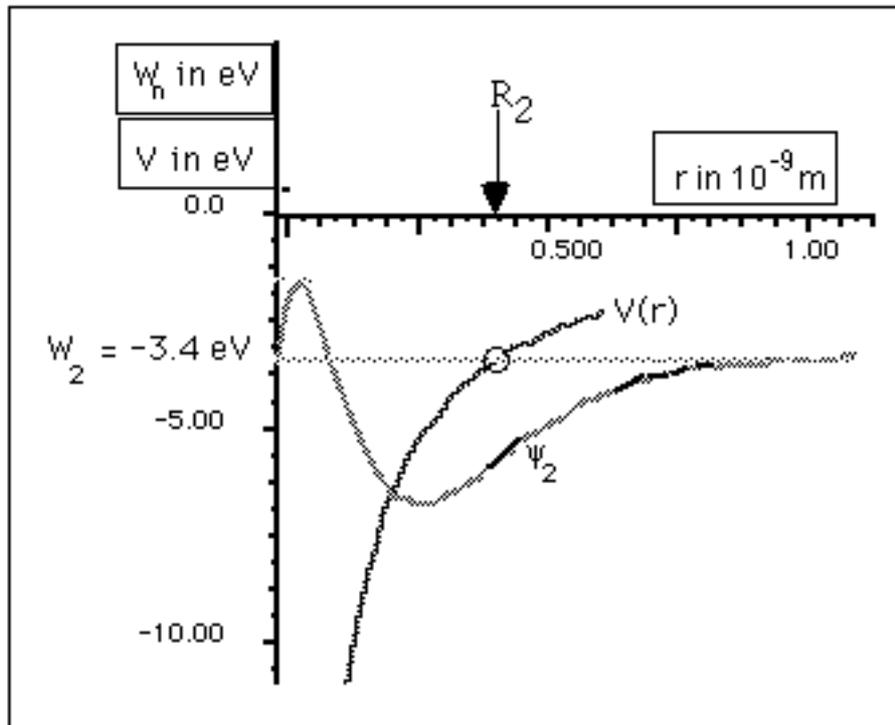
Eine andere Überlegung zum Rand des Atoms geht von der Schrödinger-Gleichung aus:

$$u_n''(r) = -C * [W_n - V(r)] * u_n(r)$$

Die Werte von  $W_2$  und  $V(r)$  sowie die Funktion  $u_2(r)$  sind in der folgenden Abbildung dargestellt.

Aus dieser Abbildung erkennt man folgendes:

- Für  $r = R_2$  ist  $[W_2 - V(r)] = 0$ ; das bedeutet einen Wendepunkt und Krümmung null, also geradlinigen Verlauf.
- Für  $r < R_2$  ist  $[W_2 - V(r)] > 0$ , also positiv; das bedeutet Krümmung der  $u$ -Kurve zur  $r$ -Achse hin.
- Für  $r > R_2$  ist  $[W_2 - V(r)] < 0$ , also negativ; das bedeutet Krümmung der  $u$ -Kurve von der  $r$ -Achse weg



Der Wert  $r=R_2$  markiert also eine Änderung im Verhalten der  $u$ -Kurve, das Ende der Entstehung von Bäuchen und Knoten. Außerhalb dieses Bereichs muß sich die  $u$ -Kurve bei einem Eigenwert der  $r$ -Achse anschmiegen, für  $r>R_2$  beginnt der Randbereich der Elektronenhülle und damit des Atoms.  $R_2$  ist damit auch ein geeignetes Maß für die Größe des Atoms im Zustand  $n=2$ . Eine mögliche Definition des Radius wäre also der Punkt, ab dem die  $u$ -Funktion keine Wendepunkte mehr besitzt und gegen Null strebt. Entsprechende Rand-Werte  $R_n$  gibt es für alle anderen Zustände  $n$ .

### **3.6 Erstes STELLA-Modell der Schrödingergleichung**

Ziel ist es die mit STELLA modellierte Differentialgleichung stehender Wellen durch Austauschen der physikalischen Größen so zu verändern, daß wir die Schrödingergleichung erhalten. Da beides Wellengleichungen ähnlicher Struktur sind, können wir die bisherigen mathematischen Erkenntnisse, die wir über die Differentialgleichung stehender Wellen erhalten haben, auf die Schrödingergleichung übertragen. Die bisherige Differentialgleichung lautet:

$$y_n''(x) = - 4\pi^2 f_n^2 * m'(x) * y_n(x)$$

Sie soll umgeformt werden in:

$$u_n''(r) = - (8\pi^2 m/h^2) * [W_n - V(r)] * u_n(r)$$

Analogien zwischen **stehenden Wellen** und **Atomen** in bezug auf den gemeinsamen Begriff **Zustand** sind:

<u>Seil</u>	<b>Zustand n</b>	<u>Atom</u>
Frequenz $f_n$		Energie $W_n$
Amplitude $y_n(x)$		Amplitude $u_n(r)$
Knotenpunkte		Knotenflächen
Randbedingung: Knoten/Bauch		Randbedingung: $u \Rightarrow 0$
Inhomogenes Seil		Veränderliches Potential
$m' = f(x)$ (veränderl. Massendichte)		$V = V(r)$ ("Potentialtopf")
$y_n''(x) \sim -f_n^2 * m'(x) * y_n(x)$		$u_n''(r) \sim -[W_n - V(r)] * u_n(r)$

Im STELLA-Modell müssen also folgende Größen ausgetauscht werden:

x durch r  
 $y_n(x)$  durch  $u_n(r)$   
 $y_n''(x)$  durch  $u_n''(r)$   
 $f_n$  durch  $W_n$   
 $m'(x)$  durch  $V(r)$

Man erhält für die Krümmung  $u''$  der gesuchten Amplitudenfunktion  $u$  die folgende Gleichung als erste Form der stationären Schrödingergleichung (SGL):

$$u''(r) = -2m \cdot \frac{(2\pi)^2}{h^2} \cdot (W_n - V(r)) \cdot u(r) = -c\_SGL \cdot (W_n - V(r)) \cdot u(r)$$

In der Atomphysik werden aus praktischen Gründen Energien in Elektronenvolt angegeben, weil die vorkommenden Energien viel kleiner sind als 1 Joule; sie liegen in der Größenordnung von 1 eV ("ein Elektronenvolt"). Die Umrechnung dieser beiden Energieeinheiten ergibt sich aus der folgenden Gleichung:

$$1\text{J} = 1\text{Cb} \cdot V = \frac{1\text{Cb}}{e} \cdot e \cdot V = \frac{1\text{Cb}}{1.602 \cdot 10^{-19} \text{Cb}} \cdot eV = \frac{1}{1.602 \cdot 10^{-19}} \cdot eV = 6.242 \cdot 10^{18} eV$$

Umgekehrt ergibt sich

$$1eV = 1e \cdot 1V = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ CV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Joule.}$$

Wenn man also die Anzahl an Joule (J) durch die Maßzahl von e (in Cb) dividiert, erhält man die Energie in eV.

Damit ergibt sich für die Konstante in der Schrödingergleichung:

$$c\_SGL = 2m \cdot \frac{(2\pi)^2}{h^2} = 4 \cdot \pi^2 \cdot 2 \cdot m / h^2 \{1/\text{Jm}^2\} = e \cdot 4 \cdot \pi^2 \cdot 2 \cdot m / h^2 \{1/eV\text{m}^2\},$$

wobei wir hier mit e multiplizieren, weil die Energie im Nenner steht. Wir lassen diese Konstante in STELLA mit dieser Gleichung vom Computer berechnen.

Längen werden wir manchmal in Nanometer (ein Nanometer=1 nm=10<sup>-9</sup> m) angeben, in der Schrödingergleichung und den auf ihr beruhenden STELLA-Modellen werden wir jedoch Meter benutzen, um die Orginalkonstanten für e, h, ε<sub>0</sub> und m benutzen zu können und weitere Einheitenumrechnungen zu vermeiden.

Für die Berechnung des Potentials V(r) lassen wir ebenfalls vom Computer eine Konstante c\_Cb berechnen. Es gilt

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \{J\} = \frac{-c\_Cb}{r} \{eV\}$$

mit

$$c\_Cb = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = e^2/(4*\pi*\epsilon_0) \{J*m\} = e/(4*\pi*\epsilon_0) \{eV*m\}$$

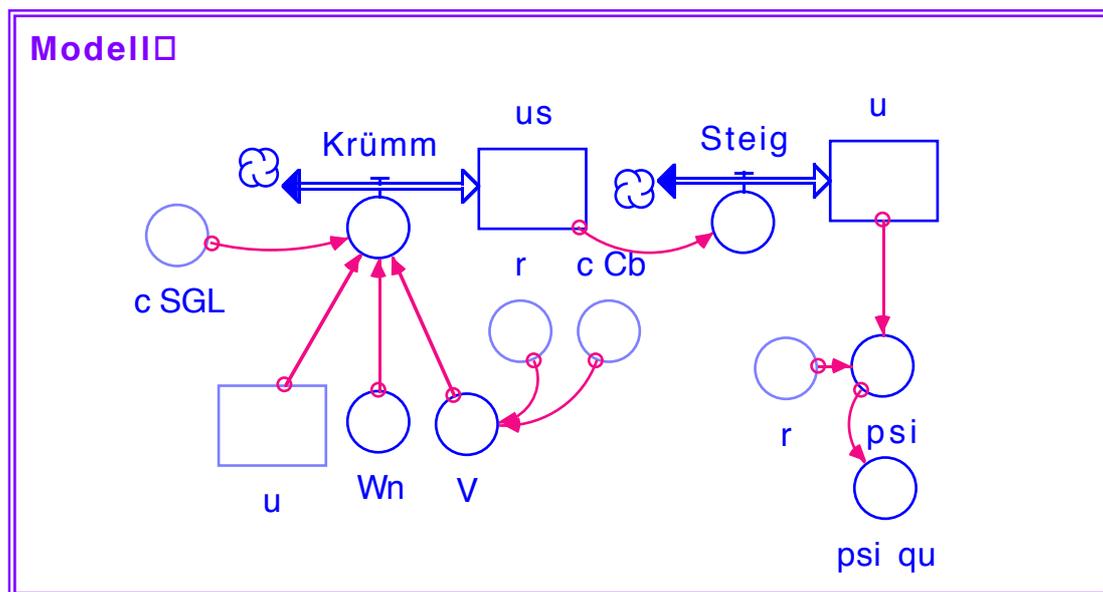
Hier wird bei der Umrechnung von Joule in eV durch die Maßzahl von e (in Coulomb) dividiert, wie es oben erklärt wurde.

W<sub>n</sub> und V(r) werden in eV angegeben, r in Meter, u<sub>n</sub>''(r) besitzt die Benennung (1/m<sup>2</sup>) und u<sub>n</sub>(r) ist benennungslos.

### 1-dim (radiale) und 3-dim (räumliche) Verteilungsfunktion - u<sub>n</sub>(r) und ψ<sub>n</sub>(r)

Stehende Seilwellen sind auf eine Dimension, nämlich x, beschränkt. y<sub>n</sub>(x) gibt die Amplitude, also den maximalen Ausschlag des Seils, im Punkt x an. Ein Atom hingegen ist ein dreidimensionales Gebilde. Nicht die Funktion u<sub>n</sub>(r) (die sogenannte radiale Verteilungsfunktion), sondern ψ<sub>n</sub>(r) = u<sub>n</sub>(r)/r und besonders ψ<sub>n</sub>(r)<sup>2</sup> sind in der Atomphysik interpretierbare Größen.

Aus diesem Grund sollten zwei weitere Größen im STELLA-Modell definiert werden, die durch die Gleichungen psi=u<sub>n</sub>(r)/r und psi\_quad=psi\*psi gegeben sind. Das vollständige Modell sieht so aus:



Die dazugehörigen Modellgleichungen lauten:

$u(t) = u(t - dt) + (\text{Steig}) * dt$ INIT $u = 0$ INFLOWS: Steig = $u_s$	$r = \text{time} \{m\}$
$u_s(t) = u_s(t - dt) + (\text{Krümm}) * dt$ INIT $u_s = 1$ INFLOWS: Krümm = $-c\_SGL * (W_n - V) * u$	$V = -c\_Cb/r$ $c\_Cb = e / (4 * \pi * \epsilon) \{eVm\}$ $c\_SGL = e * 4 * \pi^2 * 2 * m / h^2 \{1/eVm^2\}$ $W_n = -13.605 \{eV\}$
$e = 1.602e-19 \{C\}$ $\epsilon = 8.854e-12 \{C/Vm\}$ $h = 6.626e-34 \{Js\}$ $m = 9.109e-31 \{kg\}$	$\psi = u/r$ $\psi\_qu = \psi^2$

### Eigenwertsuche mit dem STELLA-Modell

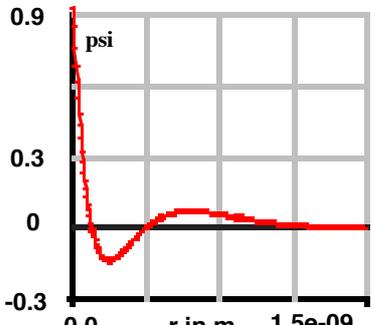
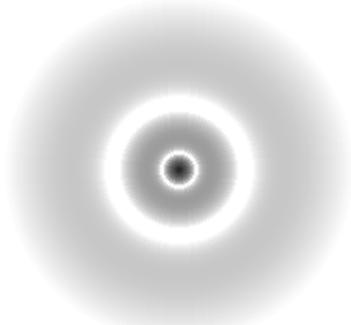
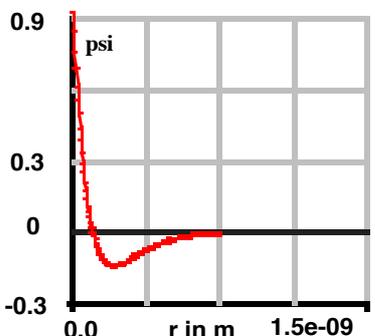
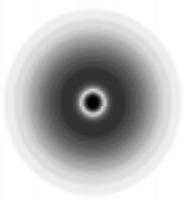
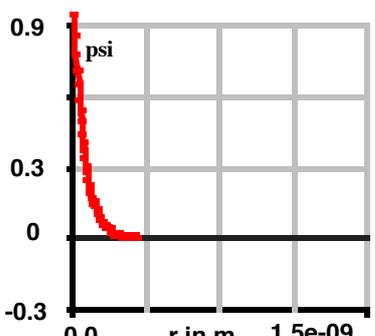
Die Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms besitzt nur für bestimmte Eigenenergien  $W_n$  ( $n=1,2,3,\dots$ ) eine Lösung, die die Bedingung erfüllt, daß die dazugehörige  $\psi$ -Funktion mit zunehmenden  $r$  gegen Null läuft. Um diese Lösungen zu finden, müssen wir verschiedene Werte für  $W_n$  einsetzen und die dazu gebildeten  $\psi$ -Funktionen beobachten. Die gesuchten Lösungen laufen mit großen  $r$  asymptotisch gegen die  $r$ -Achse. Der Grundzustand ist durch keinen Knoten zwischen Null und Unendlich gekennzeichnet, der erste angeregte Zustand durch einen Knoten, usw. Zwischen diesen Zuständen gibt es keine weiteren Lösungen.

Empfehlenswerte Einstellungen zum Auffinden der ersten drei Zustände sind:

- $\Delta t \quad 1 \cdot 10^{-11} \{m\} = 1e-11 \{m\}$
- von  $1 \cdot 10^{-13} \{m\} = 1e-13 \{m\}$
- bis  $0.5 \cdot 10^{-9} \{m\} = 0.5e-9 \{m\}$  (1s);
- $0.9 \cdot 10^{-9} \{m\} = 0.9e-9 \{m\}$  (2s);
- $1.5 \cdot 10^{-9} \{m\} = 1.5e-9 \{m\}$  (3s)

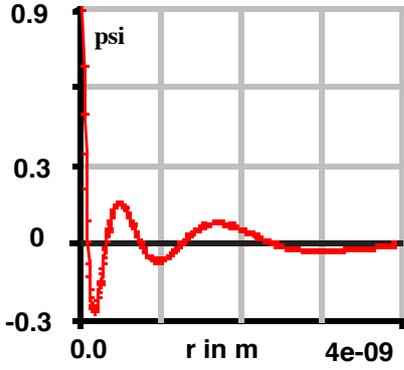
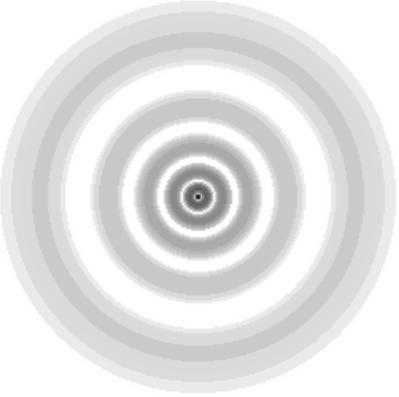
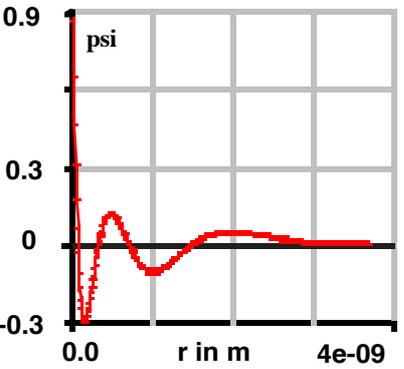
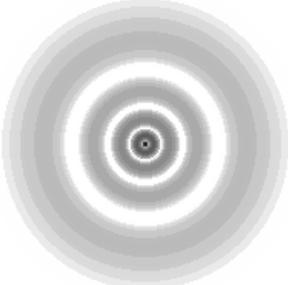
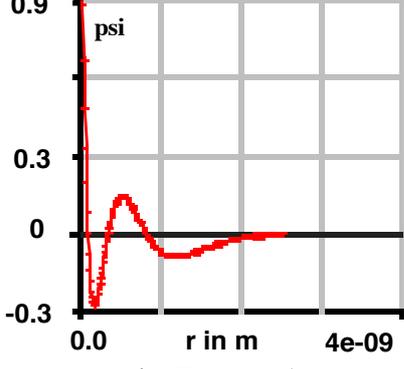
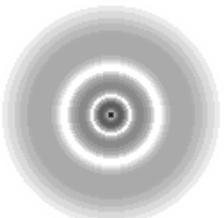
STELLA benutzt als laufende Variable  $t$  (time), die durch die Gleichung  $r = \text{time} \{m\}$  vom Zahlenwert aber genau  $r$  (in  $m$ ) entspricht. Der Startwert von  $r$  muß auf  $1 \cdot 10^{-11} \{m\} = 1e-11 \{m\}$  gesetzt werden, da sonst anfangs eine Division durch Null einen Fehler erzeugt.

**Ergebnisse der ersten drei Zustände des H-Atoms**  
**(Rechnung mit STELLA-Modell)**

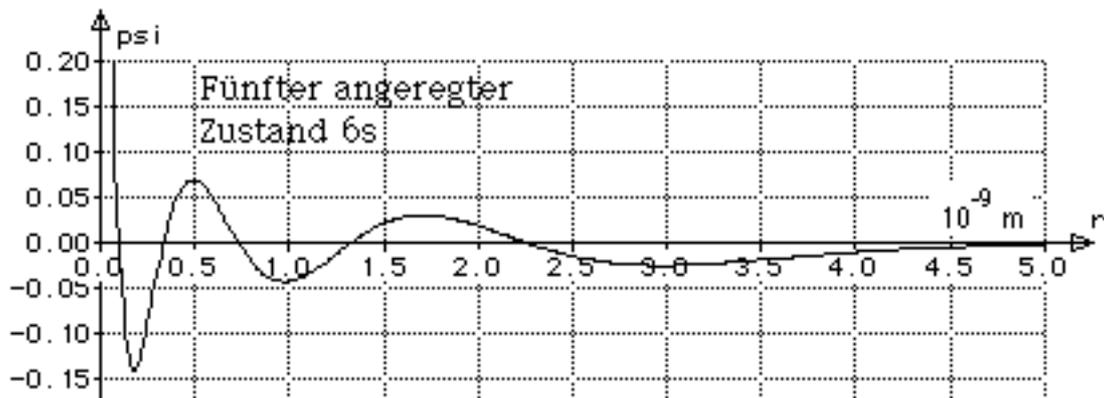
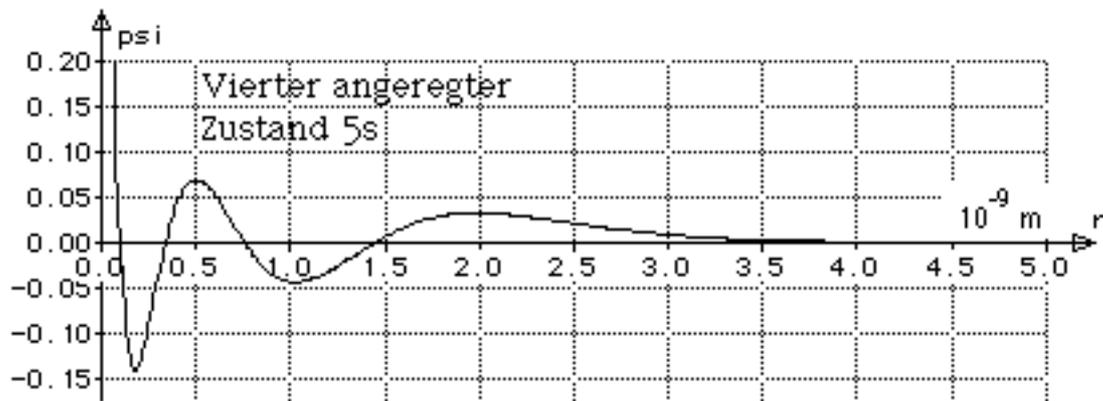
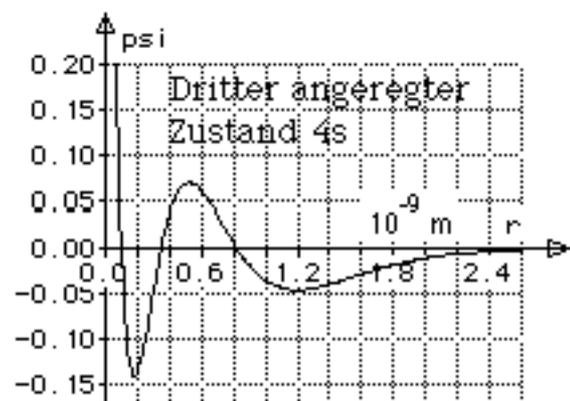
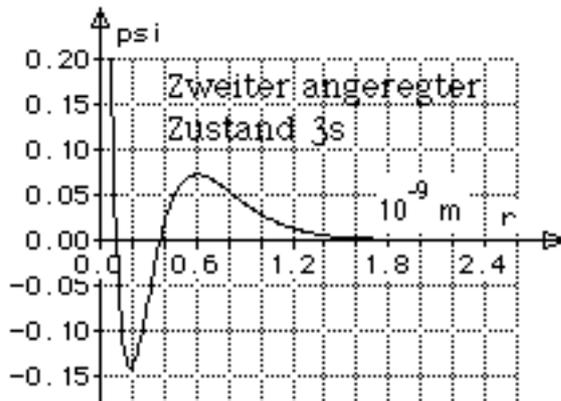
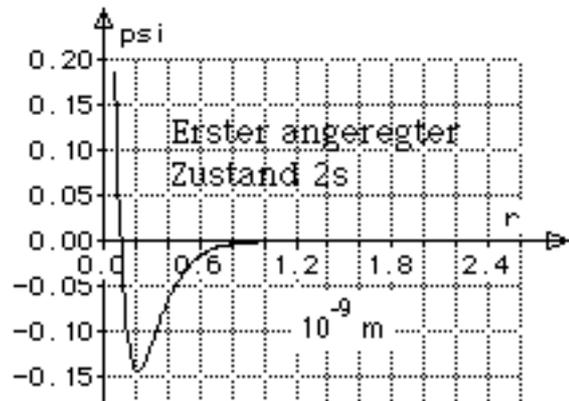
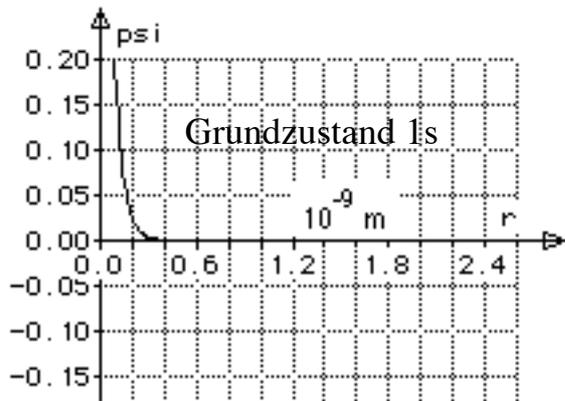
Energieniveaus $W_n$	Verteilungsfunktion $\psi_n$	Dichteverteilung $\psi_n^2$ (2-dimensional)
<p align="center">0 eV</p> <hr/> <p>3s      - 1.5 eV</p> <hr/>	 <p align="center">3s-Zustand</p>	 <p align="center">3s-Zustand</p>
<p>2s      - 3.4 eV</p> <hr/>	 <p align="center">2s-Zustand</p>	 <p align="center">2s-Zustand</p>
<p>1s      - 13.6 eV</p> <hr/>	 <p align="center">1s-Zustand</p>	 <p align="center">1s-Zustand</p>

**Ergebnisse für die Zustände 4s bis 6s des H-Atoms**

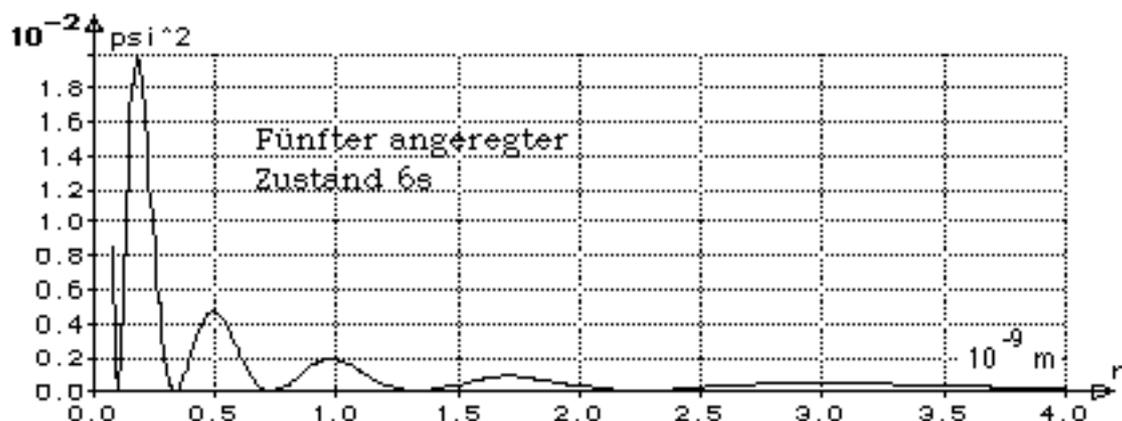
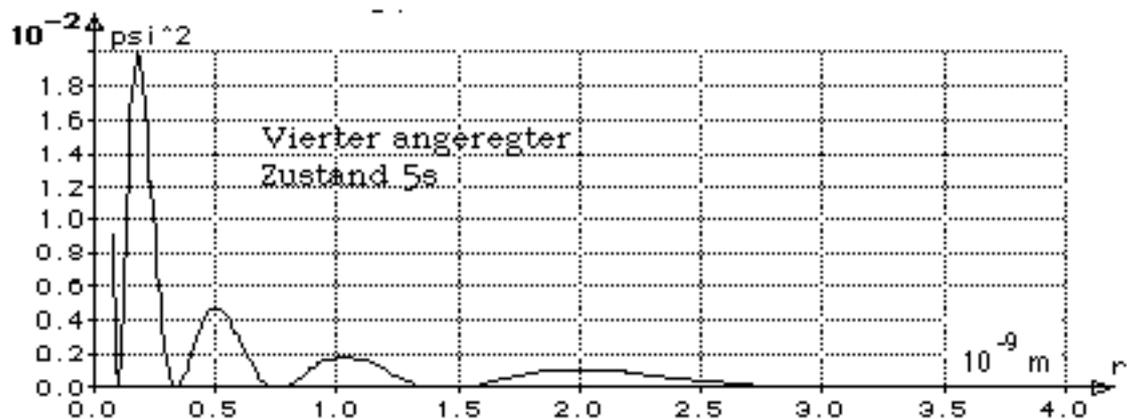
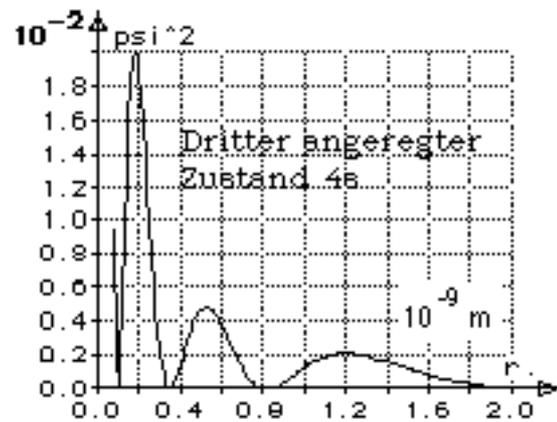
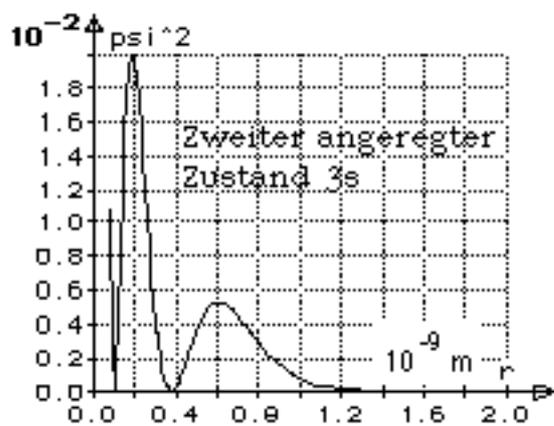
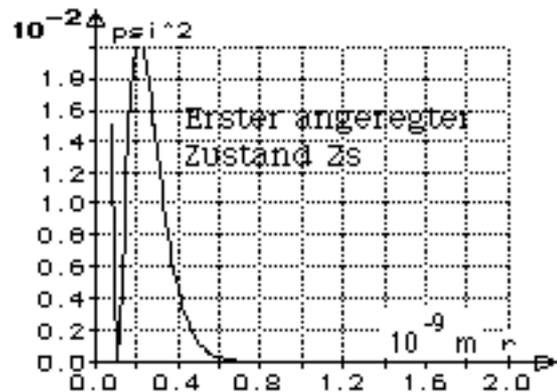
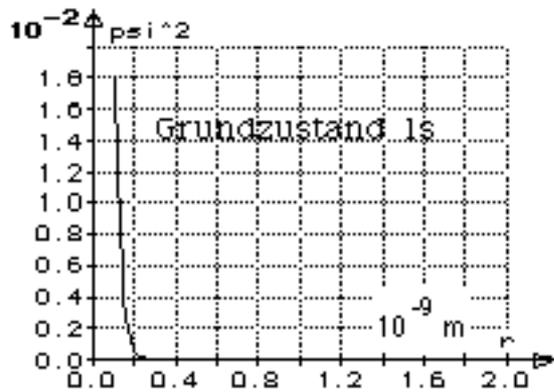
(Rechnung mit STELLA-Modell)

Energieniveaus $W_n$	Verteilungsfunktion $\psi_n$	Dichteverteilung $\psi_n^2$ (2-dimensional)
<p>0 eV</p> <hr/>	 <p>6s-Zustand</p>	 <p>6s-Zustand</p>
<p>6s - 0.38 eV</p> <hr/> <p>5s - 0.55 eV</p> <hr/>	 <p>s-Zustand</p>	 <p>5s-Zustand</p>
<p>4s - 0.85 eV</p> <hr/>	 <p>4s-Zustand</p>	 <p>4s-Zustand</p>
<p>3s - 1.5 eV</p> <hr/>		

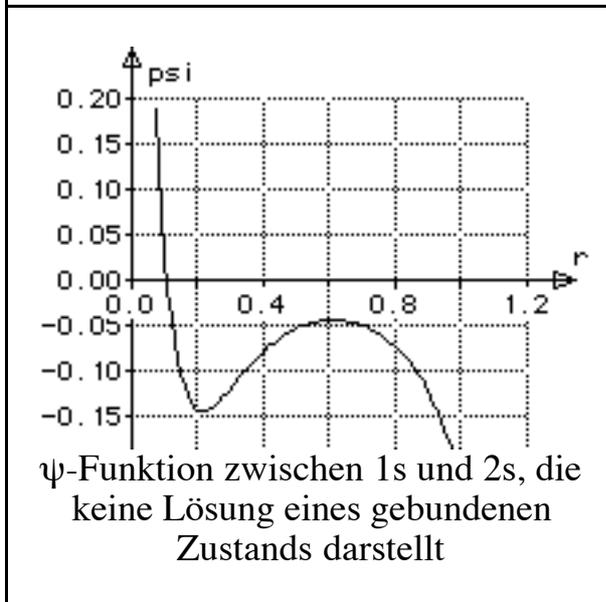
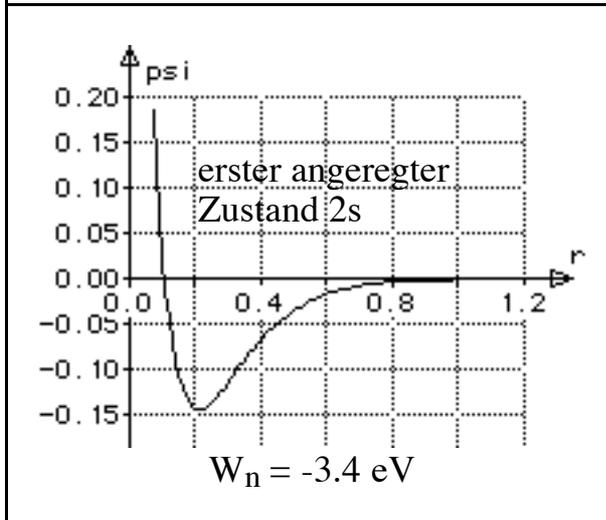
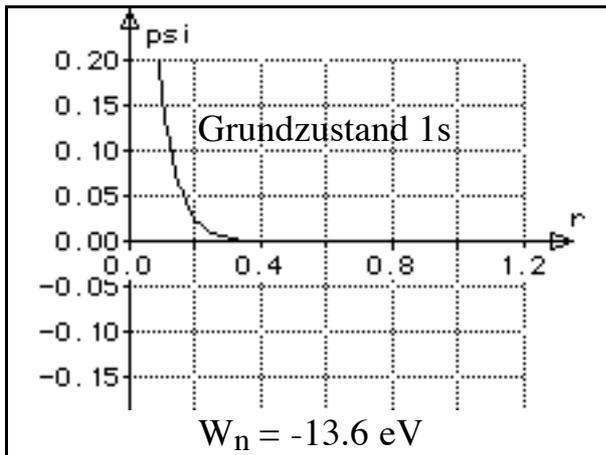
## Psi-Funktionen (Verteilungsfunktionen) der ersten sechs Zustände



## Psi<sup>2</sup>-Funktionen (Wahrscheinlichkeitsdichte) der ersten sechs Zustände



### 3.7 Diskrete Zustände und Stabilität des Wasserstoffatoms



Bis jetzt sind verschiedene Modelle zur Beschreibung des Wasserstoffatoms und ihre Interpretationen vorgestellt worden. Das Bohrsche Atommodell gab mit seinen Postulaten die Bedingungen für eine Theorie gebundener Elektronen vor. Die Grundgleichung dieser Theorie ist die Schrödingergleichung, die Energieniveaus und Verteilungsfunktionen zu den Zuständen liefert.

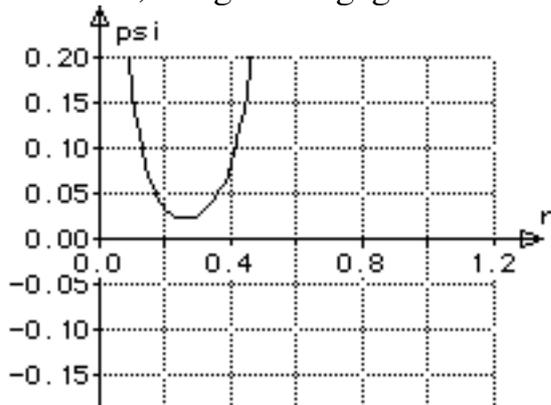
Die Frage, warum die Beschreibung von Atomen nach Schrödinger vollständiger als die Bohrsche Beschreibung ist, kann zum Teil mit der Frage nach dem Ursprung diskreter Zustände und der Stabilität der Atome beantwortet werden. Im Bohrschen Atommodell gibt es keine einfache Begründung, warum die im Atom gebundenen Elektronen diskrete Bindungsenergien zeigen und nicht mit beliebigen Energien gebunden sein können.

Aus experimentellen Beobachtungen konnte dies nur als eine Bedingung für gebundene Elektronen postuliert werden.

Die Gleichung von Schrödinger beinhaltet diese Bedingung bereits. Bei der Eigenwertsuche mit dem STELLA-Modell zeigte sich dies dadurch, daß es zwischen zwei nebeneinanderliegenden Zuständen (wie den links gezeigten 1s und 2s) keinen weiteren gibt, der die Bedingung einer gegen Null strebenden Verteilungsfunktion erfüllt.

Alle Funktionen, die zwischen 1s und 2s liegen, laufen mit zunehmendem Abstand  $r$  gegen Unendlich. Diese können aber keine Lösung der Schrödingergleichung darstellen, da das Elektron nach Interpretation der Verteilungsfunktion am wahrscheinlichsten sehr weit vom Kern entfernt wäre. Wie bei den stehenden Seilwellen sind durch **Nebenbedingungen** nur ganz bestimmte Lösungen möglich. Bei den Seilwellen waren dies die zwei Knoten an den

Wänden, an denen das Seil eingespannt ist; beim Atom ist es die nach Null strebende Verteilungsfunktion für große  $r$ . Die Seilwelle kann keinen, einen oder mehrere Knoten zwischen den beiden begrenzenden Wänden besitzen, die Verteilungsfunktion eines Atoms besitzt ebenso keinen Knoten (Grundzustand), einen Knoten (erster angeregter Zustand) oder mehrere Knoten (höhere Zustände) zwischen Null und Unendlich. Zwischen zwei Zuständen mit  $\psi$ -Funktionen, die sich in ihrer Knotenanzahl nur um einen Knoten unterscheiden, gibt es keine weiteren gebundenen Zustände. Auf der Suche nach den "richtigen" Energiewerten stellen wir also die Bedingung an die  $\psi$ -Funktion, für große  $r$  gegen Null zu laufen.



$\psi$ -Funktion mit einem Energiewert unterhalb  $-13.6$  eV, die keine Lösung eines gebundenen Zustands darstellt

Diese Betrachtung erklärt auch das Vorhandensein eines niedrigsten Zustands, dem Grundzustand. Alle  $\psi$ -Funktionen mit einer Energie unterhalb  $-13.6$  eV streben, bevor sie noch die  $r$ -Achse erreichen, von ihr weg gegen Unendlich (siehe links) und sind daher keine Lösung eines gebundenen Elektrons. Es gibt immer einen Zustand niedrigster Energie. Dieser ist durch keinen Knoten zwischen  $r=0$  und Unendlich gekennzeichnet. Wie bei den stehenden Seilwellen ist dies der Grundzustand.

Aus der Sicht der Ladungswolke kann man sich diesen Sachverhalt anschaulich machen. Die Ladungswolke existiert nur in bestimmten räumlichen Verteilungen, die durch die  $\psi$ -Funktionen vorgegeben sind. Dazwischen kann sie keine stabile Form annehmen. Der Grundzustand stellt die Ladungswolke niedrigster Energie dar und damit den Zustand, den ein Atom favorisieren wird. Ein Atom in einem höheren Zustand wird durch sein Bestreben einer möglichst niedrigen Bindungsenergie in den Grundzustand "fallen" und dabei die "überschüssige" Energie abstrahlen. Da unterhalb des Grundzustands kein Zustand mit einer niedrigeren Energie existiert, wird es in diesem Zustand verweilen.

Diese Überlegung zeigt, daß sich die Stabilität der Atome durch ihre Bindungsenergie erklären läßt. Die anziehende Wirkung des Potentials auf die Ladungswolke ließe vermuten, daß sich diese immer weiter zusammenziehen würde, um ein möglichst niedriges Energieniveau zu erreichen. Es gibt aber scheinbar eine Begrenzung, die diesem Bestreben entgegenwirkt. In der Schrödingergleichung ist dies der Term, der die zweite Ableitung der Verteilungsfunktion enthält. Man nennt ihn auch **Lokalisationsenergie**. Je schneller die Verteilungsfunktion gegen Null strebt, desto kleiner ist der Raum innerhalb dessen sich das Elektron mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit lokalisieren läßt und desto schneller strebt die Lokalisierungsenergie gegen große Werte. Es gibt also in der Tat ein Bestreben der Ladungswolke nicht auf einen möglichst kleinen Raum zusammengedrückt zu werden. Der Grund für dieses Verhalten findet sich in der sogenannten **Heisenbergschen**

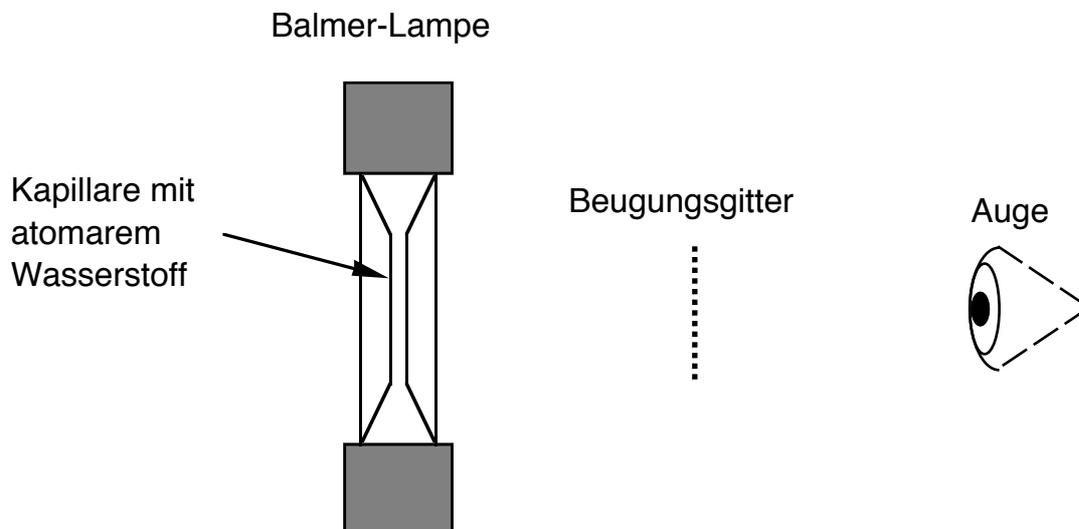
**Unschärferelation.** Sie beschreibt eine der fundamentalen Eigenschaften eines Quantenobjekts (wie dem Elektron). Seine Verteilungsfunktion kann nach der Heisenbergschen Unschärferelation in einem Zustand bestimmter Energie nicht auf beliebig engem Raum zusammengezogen sein.

### 3.8 Experimente zum Wasserstoffatom

#### **3.8.1 Das Wasserstoff-Spektrum: Balmerröhre**

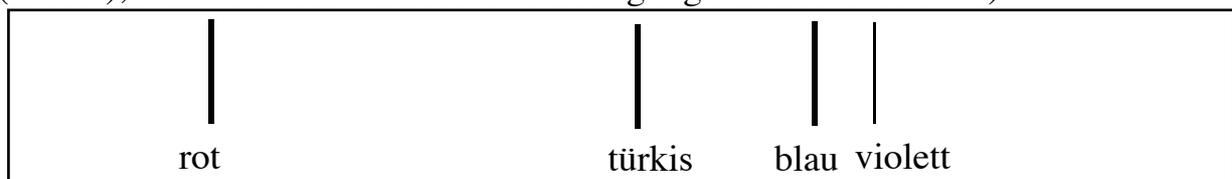
##### Wie wird ein Wasserstoffspektrum erzeugt

In der Balmer-Lampe wird auf elektro-chemischem Weg ein Gas aus Wasserstoffatomen erzeugt (bei Raumtemperatur liegt Wasserstoff in Form von  $H_2$ -Molekülen vor). Die H-Atome werden durch Stöße mit Elektronen, die aus einer Kathode heraus beschleunigt werden, angeregt. Fallen die H-Atome in energetisch günstigere Zustände zurück, entsteht elektromagnetische Strahlung, die Anteile im sichtbaren Bereich enthält (Lichtaussendung).



##### Das sichtbare Spektrum

Mit Hilfe eines Spektrometers oder Beugungsgitters lassen sich die Komponenten dieses Emissions-Spektrums (Emission = Aussendung), also die einzelnen Spektrallinien, nach ihrer Wellenlänge trennen. Im Gegensatz zum Sonnenlicht ("kontinuierliches Spektrum") findet man hier ein "Linienspektrum", welches zeigt, daß nur Licht von ganz bestimmten Wellenlängen bzw. Frequenzen ausgestrahlt wird! Im sichtbaren Bereich findet man 4 Linien (3 starke (rot, türkis und blau) und eine mit geringer Intensität (violett), die sich nur unter idealen Bedingungen beobachten läßt).



Farbe	Wellenlänge $\lambda$	Frequenz $f$	Photonenenergie $h \cdot f$
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

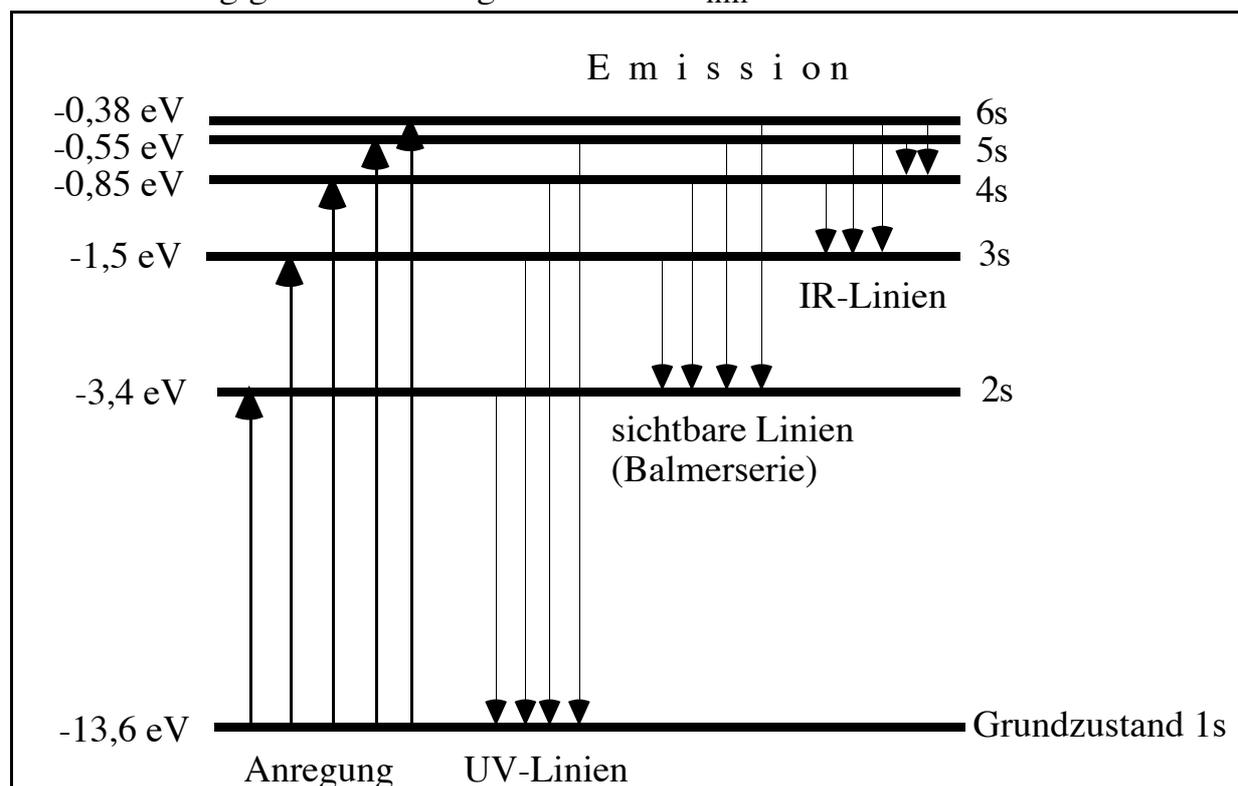
### Erklärung des Linienspektrums

Wie schon mit den STELLA-Modellen und der Schrödingergleichung berechnet, kann sich das im Wasserstoffatom gebundene Elektron nur in ganz bestimmten Zuständen befinden. In jedem Zustand hat das Wasserstoffatom eine bestimmte Energie. Die Energieniveaus des Wasserstoffs (Eigenwerte der stabilen Zustände)  $W_n$  haben folgende Werte:

$$\begin{aligned}
 W_1 &= -13,6 \text{ eV} & W_2 &= -3,4 \text{ eV} & W_3 &= -1,5 \text{ eV} \\
 W_4 &= -0,85 \text{ eV} & W_5 &= -0,55 \text{ eV} & W_6 &= -0,38 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

Darüber gibt es weitere, relativ dicht zusammenliegende Niveaus.

Durch die Elektronenstöße wird das H-Atom "angeregt", seine Gesamtenergie wird erhöht, es geht vom Grundzustand mit der kleinen Energie  $W_1$  in einen Zustand mit größerer Gesamtenergie  $W_n$  über. Dieser Vorgang wird in der Abbildung mit Anregung bezeichnet und ist mit nach oben zeigenden Pfeilen angedeutet. Beim Übergang von einem "angeregten" Zustand mit höherer Energie  $W_n$  zu einem Zustand mit niedrigerer Energie  $W_m$  - das muß nicht der Grundzustand sein - wird ein Photon der Energie  $h \cdot f_{nm} = W_n - W_m = W_{nm}$  ausgestrahlt. Die Frequenz bzw. die Wellenlänge des abgestrahlten Lichts ist also abhängig von der Energiedifferenz  $W_{nm}$  der beiden Zustände.



$f_{nm}$  ist also die Frequenz des Lichts, das man beim Übergang eines Wasserstoffatoms vom Zustand  $n$  in den Zustand  $m$  beobachtet. Diese Übergänge sind in der Abbildung mit Emission bezeichnet und mit nach unten zeigenden Pfeilen angedeutet. Liegt die Wellenlänge des ausgesendeten Lichts zwischen 400 nm und 800 nm (das entspricht einer Energiedifferenz zwischen zwei Zuständen von 3,1 eV bis 1,5 eV), so liegt es im sichtbaren Bereich; es läßt sich mit dem Auge beobachten. Übergänge von höheren Zuständen auf den 2s Zustand erfüllen diese Bedingung. Sie sind im Diagramm als sichtbare Linien gekennzeichnet.

So wird z.B. die rote Linie im H-Spektrum beim Übergang von 3s nach 2s erzeugt. Die Energiedifferenz ist  $W_{32}=1,89$  eV, was einer Wellenlänge von  $\lambda=656$ nm entspricht.

$$h \cdot f_{nm} = W_n - W_m = W_{nm}$$

$$n > m$$

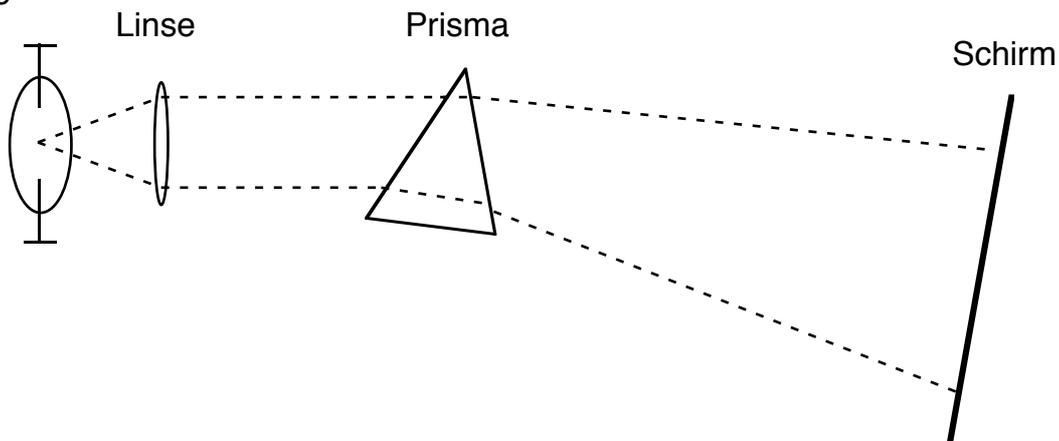
### Das nicht sichtbare Spektrum

Die größere Zahl der Übergänge erzeugt Licht (elektromagnetische Strahlung) im nicht sichtbaren Bereich. Die in der Abbildung mit UV-Linien gekennzeichneten Übergänge sind energiereicher als die sichtbaren Übergänge. Sie lassen sich nur mit Detektoren oder einer in diesem Bereich photoempfindlichen Schicht messen. Weitere Übergänge auf den 3s und den 4s Zustand sind als IR-Linien (Infrarot) bezeichnet. Auch sie können nur mit entsprechenden Meßinstrumenten registriert werden.

Der einfachste Aufbau eines Spektrometers ist unten abgebildet. Das Licht der Wasserstofflampe wird durch eine Linse auf ein Prisma geleitet. Dieses trennt das Licht nach der Wellenlänge und projiziert das Spektrum auf den Schirm. Um die ultravioletten Linien sichtbar zu machen, kann man z.B. eine fluoreszierende Schicht (dies ist ein Material, das UV-Licht in sichtbares Licht wandelt) auf den Schirm aufbringen. Um die Position von infraroten Linien festzustellen, kann auf dem Schirm eine Photodiode bewegt werden. Diese ist empfindlich auf Strahlung mit einer Wellenlänge größer 800 nm. Sie wandelt die Strahlung in Strom um, der auf einem Meßgerät registriert werden kann.

Spektrometer sind üblicherweise mit Licht bekannter Wellenlänge kalibriert, so daß man an der Position einer Linie auf dem Schirm sofort ihre Wellenlänge ablesen kann.

Wasserstoff-  
lampe



Tabellierte Wellenlängen aus Experimenten am Wasserstoffatom

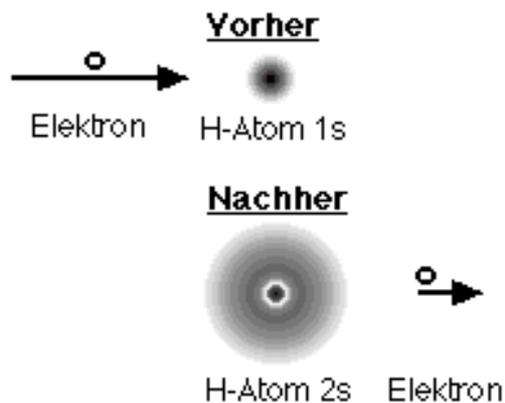
Dies ist eine Auflistung aller gemessenen Spektrallinien zu Übergängen zwischen den Zuständen 1s bis 6s (aus Kayser/Ritschl: Tabelle der Hauptlinien der Linienspektren aller Elemente). Die Werte sind der Literatur entnommen. In Klammern befindet sich der Übergang, dahinter die Wellenlänge in nm.

<b>Infrarot</b>	<b>Sichtbar</b>	<b>Ultraviolett</b>
(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		

Auf der folgenden Seite befindet sich noch ein Graph, der die Messung der Intensität gegen die Wellenlängen einer Wasserstofflampe im Bereich von 300nm bis 700nm wiedergibt.

### 3.8.2 Elektron-Atom-Stöße; Franck-Hertz-Versuch

Im Versuch mit der Balmerlampe zur Beobachtung des sichtbaren Spektrums des Wasserstoffs wurden die H-Atome in einen angeregten Zustand gebracht und daraufhin die Emission von Licht beim Übergang von einem höheren in einen niedrigeren Zustand beobachtet.

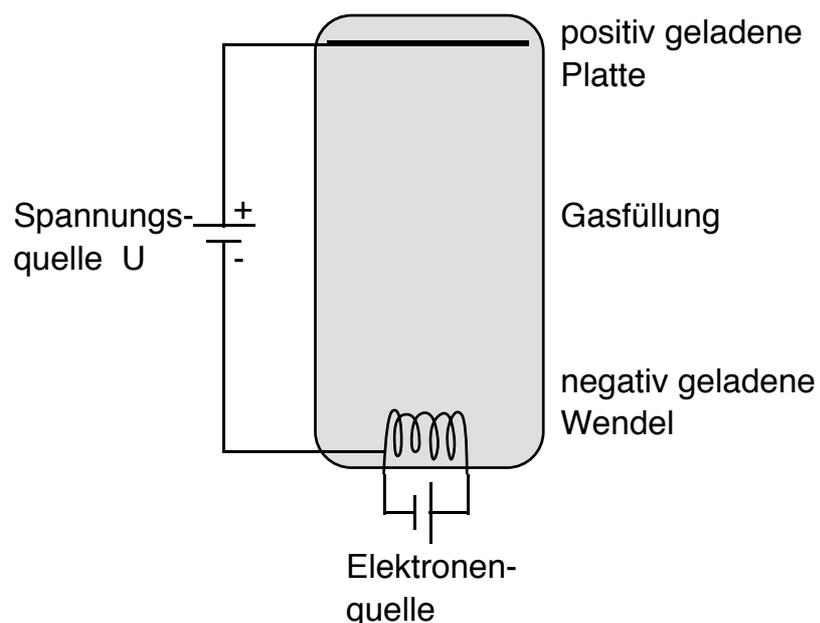


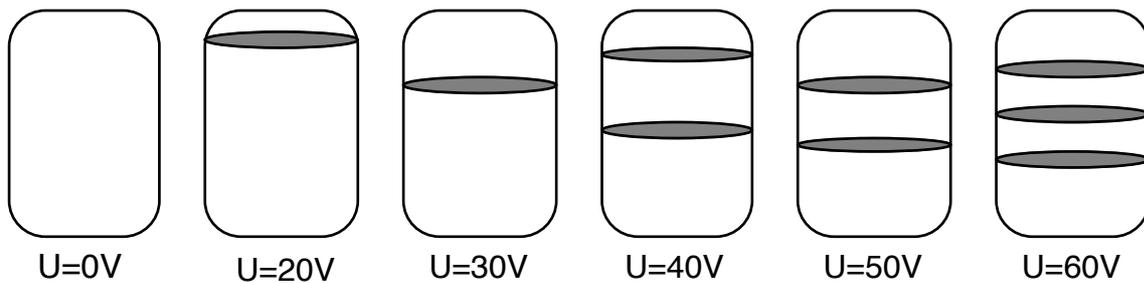
Die **Anregung von Atomen** kann z.B. mit Elektronen geschehen, die einen Teil ihrer Energie auf Atome übertragen. Im nebenstehenden Bild ist dies am Beispiel eines Wasserstoffatoms, das durch einen Elektronenstoß in den ersten angeregten Zustand versetzt wird, illustriert. Das Elektron überträgt dabei eine Teil seiner kinetischen Energie auf das Atom, das vom 1s-Zustand in den 2s-Zustand übergeht.

In einem leicht abgeänderten **Franck-Hertz-Versuch** werden mit Hilfe einer Glühwendel (Elektronenquelle) freie Elektronen in ein elektrisches Feld gebracht. Die Spannung zwischen der Platte und der Wendel ist variabel. Zwischen den Platten befindet sich ein Gas (dies kann z.B. Wasserstoff sein; im gezeigten Film wurde eine Neon-Füllung verwendet, da diese sichtbare Leuchterscheinungen erzeugt). Die freien Elektronen werden nun von der negativ geladenen Wendel weg zur positiv geladenen Platte hin beschleunigt. Dabei nehmen sie kontinuierlich Energie auf. Auf ihrem Weg durch das Gas werden sie aber auch mit dessen Atomen zusammenstoßen. Wäre kein Gas zwischen den Platten, dann hätte ein Elektron beim Erreichen der positiven Platte als Zahlenwert die Energie in Elektronenvolt, die der Spannung  $U$  in Volt entspricht (z.B. bei 30V Platten-spannung hätte ein Elektron nach vollständigem Durchlaufen des Feldes die Energie  $30\text{eV}$ , bei 40V entsprechend  $40\text{eV}$ ).

Führt man den Versuch durch, indem man kontinuierlich die Spannung  $U$  vergrößert,

so beobachtet man in zeitlicher Reihenfolge die folgenden Bilder.





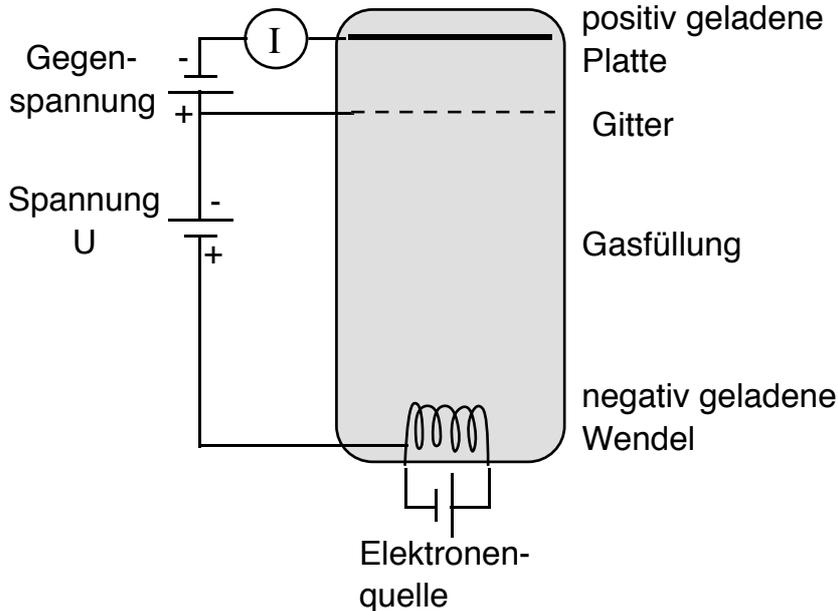
Ab etwa  $U=20\text{ V}$  wandert, während die Spannung  $U$  erhöht wird, eine Leuchterscheinung gleichmäßig nach unten. Ist die erste etwa in der Mitte der Röhre angelangt (bei etwa  $U=40\text{ V}$ ), erscheint im oberen Teil der Röhre eine zweite. Diese wandert ebenfalls nach unten, verringert allerdings währenddessen ihren Abstand zur ersten Leuchterscheinung. Letztendlich (bei ca.  $U=60\text{ V}$ ) erscheint noch eine dritte.

#### Die Beobachtungen lassen sich so erklären:

1. Die Elektronen werden beim Durchlaufen des elektrischen Feldes ständig beschleunigt, so daß ihre Energie kontinuierlich zunimmt. Man kann also den Elektronen in jedem Punkt in der Röhre eine Energie zuordnen.
2. Die Gasatome in der Röhre können nur ganz bestimmte Energieportionen aufnehmen, die durch die Energiedifferenz zwischen zwei Zuständen gegeben ist. Da die Gasatome im Grundzustand vorliegen, handelt es sich um die Energiedifferenz zwischen einem angeregten Zustand und dem Grundzustand.
3. Die Elektronen stoßen beim Durchlaufen des Gases ständig mit den Gasatomen zusammen, können aber nur dann Energie auf ein Atom übertragen, wenn ihre kinetische Energie größer ist als die Energie, die benötigt wird, um ein Atom anzuregen. Ist dies nicht der Fall, wird beim Zusammenstoß keine Energie übertragen, das Elektron also auch nicht abgebremst.
4. An bestimmten Punkten in der Röhre reicht die kinetische Energie der Elektronen aus, um Gasatome anzuregen. An dieser Stelle läßt sich eine Leuchterscheinung beobachten, da das Atom sofort wieder in den Grundzustand zurückfällt und dabei Licht aussendet. Die Elektronen haben nun soviel Energie verloren, daß sie keine weiteren Atome mehr anregen können. Sie werden weiter zur positiven Platte hin beschleunigt, bis die kinetische Energie wiederum ausreicht, um ein Gasatome anzuregen. An diesem Punkt kann man eine weitere Leuchterscheinung beobachten.

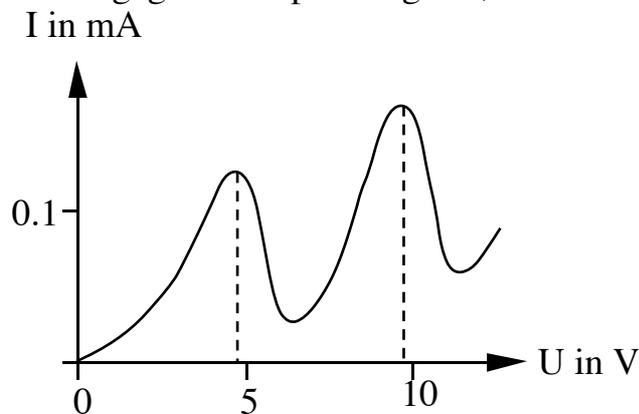
Führt man diesen Versuch als Gedankenexperiment mit einer mit atomarem Wasserstoffgas gefüllten Röhre durch, würde man die erste Leuchterscheinung bei  $U=10.2\text{ V}$  beobachten. Dies ist die Energie, die benötigt wird, um ein H-Atom vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand zu versetzen. Wegen der Energiedifferenz von  $10.2\text{ eV}$  zwischen den zwei Zuständen wird beim Zurückfallen der Atome in den Grundzustand Licht im ultravioletten Bereich ausgesendet. Die Lichterscheinung müßte daher z.B. mit einem fluoreszierenden Schirm sichtbar gemacht werden.

Der **Franck-Hertz-Versuch**, wie er erstmals 1913 von J. Franck und G. Hertz durchgeführt wurde, sieht etwas anders aus, als der oben geschilderte Versuch.



Zwischen der Anode und der Elektronenquelle ist ein weiteres Gitter angebracht. Zwischen diesem Gitter und der Anode liegt eine Gegenspannung an, gegen die die Elektronen, die das Gitter passiert haben, anlaufen müssen. An der Anode kommen nur die Elektronen

an, die noch ausreichend Energie besitzen, um dieses Potential zu überwinden. Die Zahl der Elektronen, die die Anode erreichen, ist proportional zum gemessenen Strom. Erhöht man kontinuierlich die Spannung, und trägt den Strom gegen die Spannung auf, erhält man folgendes Diagramm.



Der Strom steigt kontinuierlich mit der Spannung an. Bei einer bestimmten Spannung fällt der gemessene Strom aber fast bis auf Null zurück, um dann abermals anzusteigen. Der Abstand der Maxima ist eine Konstante. Beim Originalversuch, der mit Quecksilberdampf in der Röhre durchgeführt wird, beträgt dieser Abstand 4.9 V.

Bei Quecksilber beträgt die Energiedifferenz zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand 4.9 eV. Liegt die Beschleunigungsspannung unterhalb 4.9 V, können die Elektronen, die den Quecksilberdampf durchlaufen, keine Energie an die Hg-Atome übertragen. Wenn sie das Gitter erreichen, besitzen sie genügend Energie, um die Gegenspannung zu überwinden und an der Anode anzukommen. Wird die Schwelle von 4.9 V überschritten, können die Elektronen Energie an Quecksilberatome übertragen. Kommen sie nun am Gitter an, besitzen sie nicht mehr genug Energie, um die Gegenspannung zu überwinden und die Anode zu erreichen. Erst wenn die Beschleunigungsspannung so groß ist, daß ein Elektron auch nach einem Stoß mit einem Hg-Atom noch ausreichend Energie besitzt, um die Gegenspannung zu überwinden, steigt der Strom wieder an. Bei 9.8V

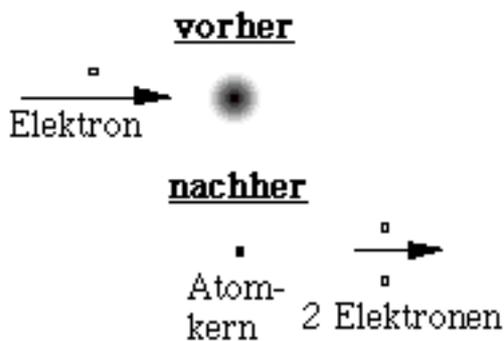
Beschleunigungsspannung reicht die Energie der Elektronen aus, um zweimal Energie auf Hg-Atome zu übertragen und der Vorgang wiederholt sich.

Führt man diesen Versuch als Gedankenexperiment mit einer mit atomarem Wasserstoffgas gefüllten Röhre durch, würde man die Peaks in einem Abstand von 10.2 V beobachten. Dies ist die Energie, die benötigt wird, um ein H-Atom vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand zu versetzen. Wegen der Energiedifferenz von 10.2 eV zwischen den zwei Zuständen wird beim Zurückfallen der Atome in den Grundzustand Licht im ultravioletten Bereich ausgesendet. Die Lichterscheinung müßte daher z.B. mit einem fluoreszierenden Schirm sichtbar gemacht werden.

### 3.8.3 Ionisation

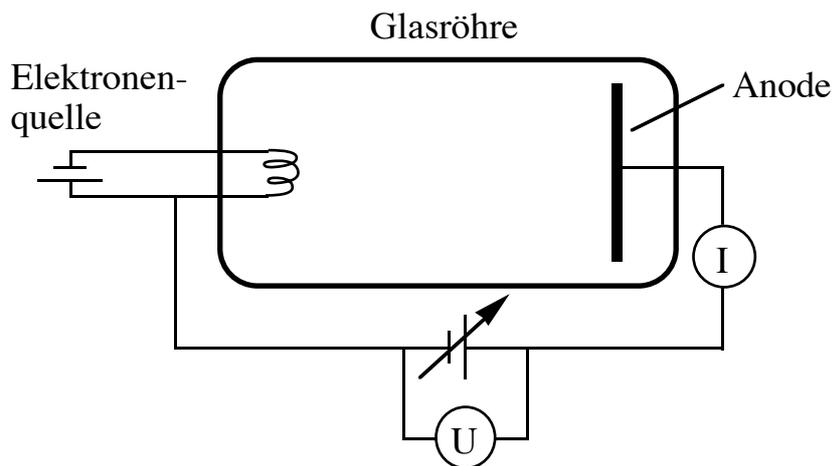
Unter Ionisation versteht man einen Vorgang, bei dem einem Atom soviel Energie zugeführt wird, daß sich ein Elektron vom Atom lösen kann. Das Elektron des Wasserstoffatoms ist mit einer bestimmten Energie an den Kern gebunden. Die Arbeit oder Energie, die benötigt wird, um das Elektron dem Kern zu "entreißen", nennt man **Ionisierungsarbeit** oder **Ionisierungsenergie**. Bei diesem Vorgang sagt man, daß man das Atom ionisiert.

Eine Methode, Energie auf ein Atom zu übertragen, ist ein Elektron-Atom-Stoß. Dabei werden freie Elektronen beschleunigt und z.B. durch ein Gas geleitet, das aus den zu ionisierenden Atomen besteht. Trifft ein Elektron mit ausreichend kinetischer Energie auf ein Atom des Gases (ausreichend heißt hier, daß seine kinetische Energie größer als die Ionisierungsenergie des Atoms ist), so kann es durch Übertragen seiner Energie auf das Atom dieses ionisieren. Das links dargestellte Bild veranschaulicht diesen Vorgang. Das auf ein Wasserstoffatom im Grundzustand treffende Elektron überträgt soviel Energie, daß dem Atom das gebundene Elektron "entrissen" wird. Übrig bleibt der positiv geladene Atomkern.



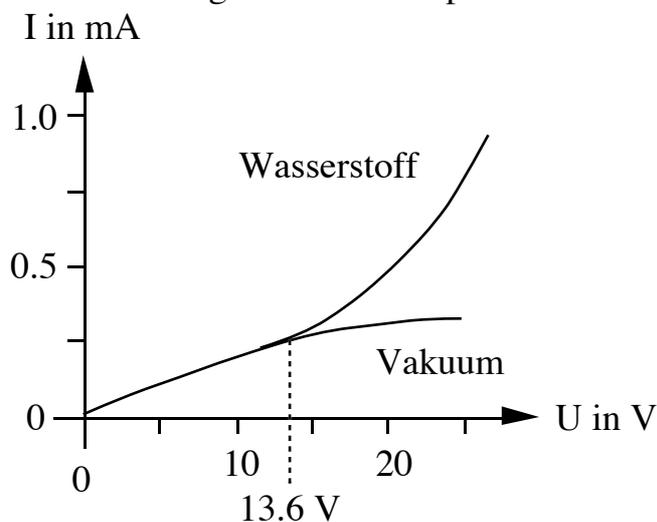
Eine recht einfache Meßmethode, um Ionisierungsenergien experimentell zu bestimmen, ist im folgenden Bild gezeigt. In einer Glasröhre befindet sich eine Glühwendel, die Elektronen freisetzt, sobald ein bestimmter Strom sie durchfließt (diese Anordnung ist als Elektronenquelle bezeichnet). Zwischen der Glühwendel und der mit Anode bezeichneten Platte, ist eine regelbare

Spannungsquelle. Die Elektronen werden also von der Wendel "abgesaugt" und zur Anode hin beschleunigt.



Das Verhältnis von Strom  $I$  zu Spannung  $U$  läßt sich an den Meßgeräten ablesen. Dieses Verhältnis trägt man für eine Vakuumröhre und eine mit Wasserstoff gefüllte Röhre auf.

Man kann folgende zwei Graphen beobachten:



Macht man den Versuch mit einer Vakuumröhre, beobachtet man beim Heraufregeln der Spannung  $U$  auch einen steigenden Strom  $I$ . Der Versuch mit der mit atomarem Wasserstoff gefüllten Röhre verläuft anfangs genauso. Ab einer bestimmten Spannung erhöht sich allerdings der Strom im Verhältnis zur Spannung viel stärker als bei der Vakuumröhre.

Die Erklärung gibt das oben gezeigt Bild des Elektron-Atom-Stoßes. Der zwischen Anode und Spannungsquelle gemessene Strom entspricht der Menge der Elektronen, die in einem bestimmten Zeitintervall an der Anode ankommen. Ist die Energie der zur Anode hin beschleunigten Elektronen groß genug, um ein Wasserstoffatom zu ionisieren, so kann durch einen Zusammenstoß zwischen Elektron und Atom ein weiteres Elektron freigesetzt werden. dieses wird dann ebenfalls zur Anode "gesaugt" und erhöht den gemessenen Strom. Da in der Vakuumröhre (ohne Gas) keine zu ionisierenden Atome sind, findet dieser Effekt und damit die starke Stromzunahme nur in der Wasserstoffröhre statt.

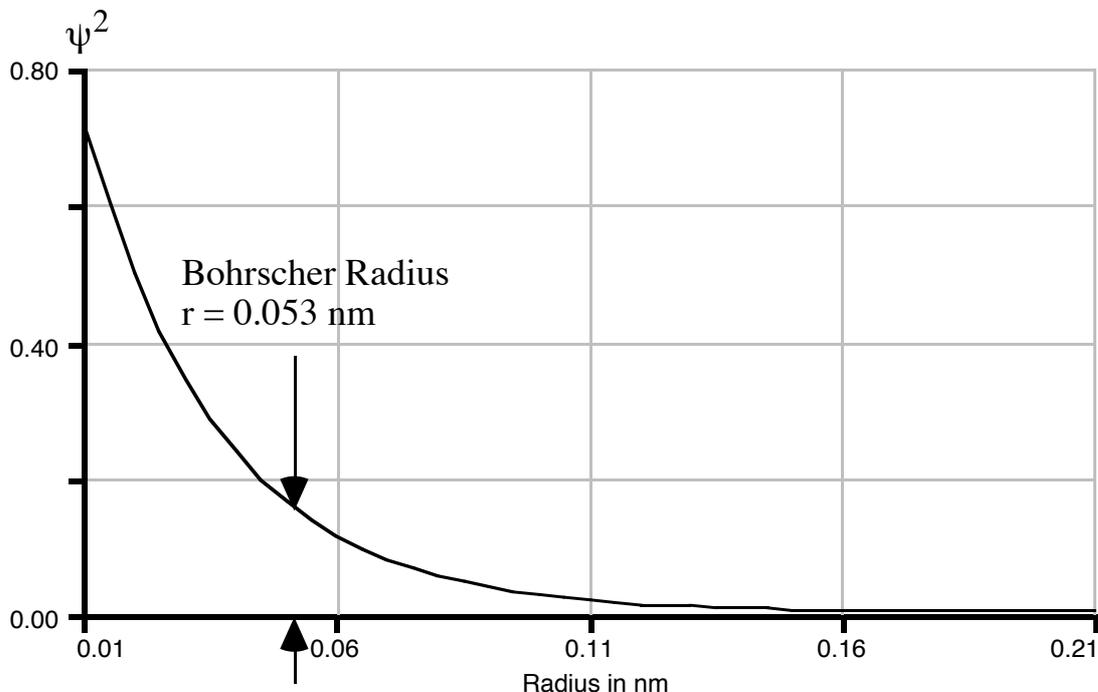
Mit dieser Apparatur läßt sich die Ionisierungsenergie des eingeschlossenen Gases messen. Die Spannung, an der die beiden Graphen auseinandergehen, muß der minimalen Spannung entsprechen, die benötigt wird, um freie Elektronen so sehr zu beschleunigen, daß ihre Energie ausreicht, um H-Atome zu ionisieren. Die Ionisierungsenergie berechnet sich aus Spannung\* Ladung. Die Ladung eines Elektrons ist  $e$ . Experimentelle Messungen geben einen Wert von 13.6 Volt, bei dem die beiden Graphen auseinanderlaufen. Die Ionisierungsenergie ist damit

$$W_{\text{ion}} = q * U = e * 13.6 \text{ V} = 13.6 \text{ eV}$$

Da Wasserstoff bei Raumtemperatur als  $H_2$  existiert - also molekular - ist der oben geschilderte Versuch nur dann durchführbar, wenn man das Gas so stark aufheizt, daß es atomar vorliegt. Daher ist der Versuch eher als Gedankenexperiment zu sehen. Helium dagegen liegt auch bei Raumtemperatur atomar vor, weshalb seine Ionisierungsenergie mit diesem Versuch ohne größeren Aufwand bestimmt werden kann.

### 3.8.4 Experimentelle Bestimmung der Atomradien

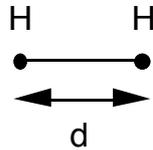
Wie wir schon an unseren berechneten  $\psi$ -Funktionen gesehen haben, läßt sich ein eindeutiger Radius eines Atoms, also eine Grenze, ab der das Atom zu Ende ist, nicht konkret angeben. Z.B. nimmt die  $\psi$ -Funktion des Wasserstoffatoms im Grundzustand mit größeren Radien sehr schnell ab, wird aber nicht Null. Das bedeutet, daß die Ladungswolke nach außen hin sehr "dünn" wird, jedoch nicht vollständig verschwindet.



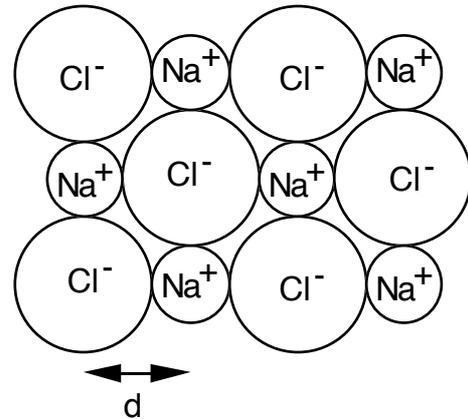
Im Graphen der  $\psi^2(r)$ -Funktion des Wasserstoffatoms im Grundzustand ist der Bohrsche Atomradius eingezeichnet. Man erkennt, daß sich ein erheblicher Teil der Ladungswolke innerhalb dieses Radius befindet und ein deutlich geringerer Teil außerhalb. Dennoch ist die Bezeichnung "Radius" in bezug auf die Ladungswolke, die keine scharfe Begrenzung besitzt, nicht ganz passend. Der Bohrsche Radius stammt noch vom Bohrschen Atommodell in dem das Elektron als Teilchen den Kern umkreist. Der Radius der Kreisbahn des Elektrons wäre im Grundzustand genau der Bohrsche Radius, der auch heute noch als atomare Längeneinheit gelegentlich verwendet wird.

Der Radius eines Atoms wird definiert als eine Distanz zum Atomkern, innerhalb derer man eine bestimmte Prozentzahl der Gesamtladung findet. Der gemessene "Atomradius", der einer Definition bedarf, wird daher auch von

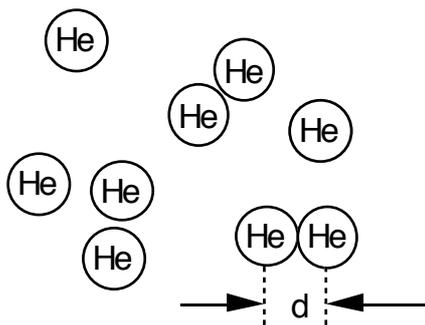
der jeweiligen Meßmethode abhängen. Ein paar der gängigsten Definitionen für den Atomradius sind im Folgenden aufgelistet:



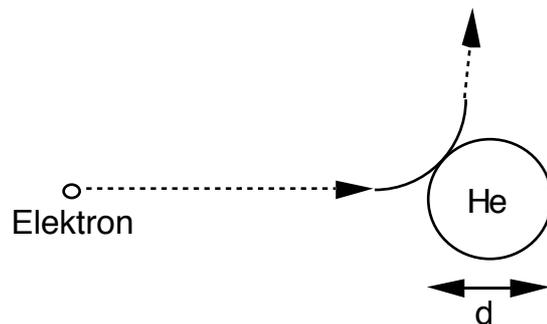
Kovalenter Bindungsradius  $r=d/2$   
 Abstand zweier Atome im Molekül  
 (wie hier z.B. H<sub>2</sub>; die Ladungswolken sind weggelassen, so daß man den Abstand der zwei Atomkerne sieht)



Ionenradius  $d=r_{Na} + r_{Cl}$   
 Abstand zweier Ionen  
 in einem Kristallgitter



Radius aus Eigenvolumen  $r=d/2$   
 Minimaler Abstand mit dem  
 sich zwei Atome in einem Gas  
 nähern können



Radius aus Elektronenstreuung  $r=d/2$   
 Abstand der nächsten Näherung  
 zwischen Elektron und Atom

- In einem Molekül (z.B. H<sub>2</sub>) haben die beiden Wasserstoffatome einen bestimmten Abstand voneinander. Der halbe Abstand wird kovalenter Bindungsradius des Atoms genannt.
- In Kristallen ordnen sich die Ionen (z.B. Na<sup>+</sup> und Cl<sup>-</sup> im NaCl) 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, 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

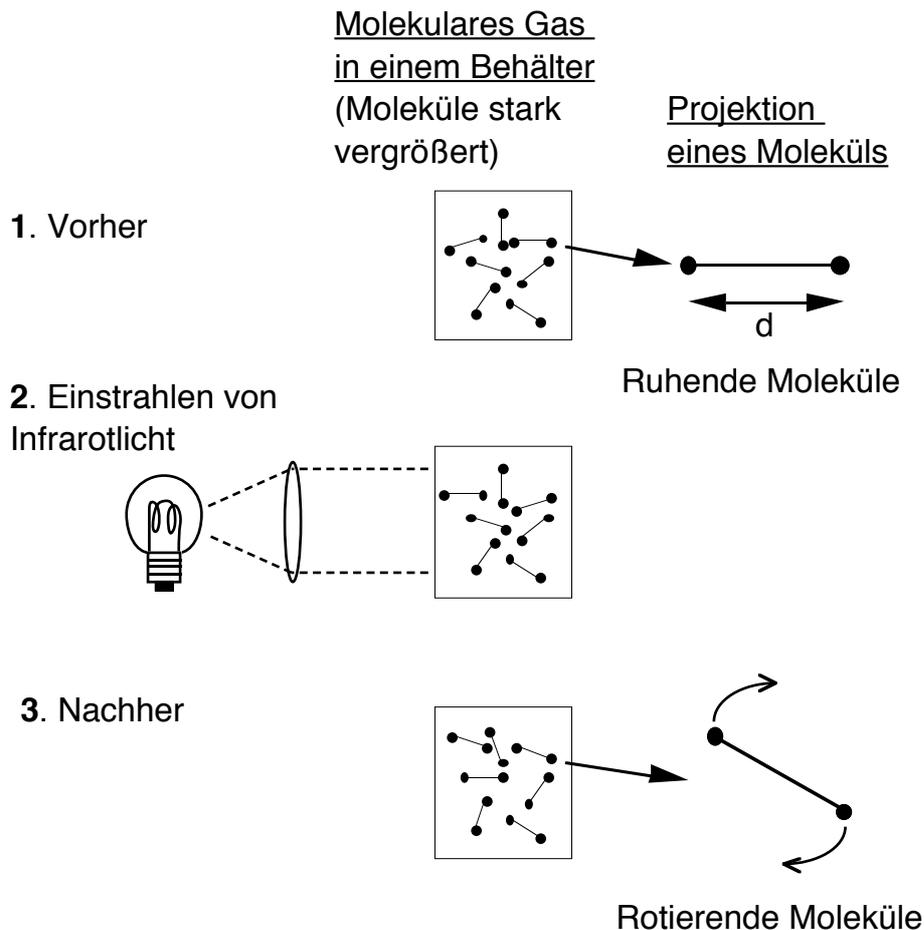
zwischen Druck und Volumen eines Gases unter konstanter Temperatur) läßt sich das sogenannte Kovolumen (oder Eigenvolumen) der Atom und damit der Radius bestimmen.

- 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.

Ganz allgemein läßt sich zusammenfassen, daß man Atome ihrer Größe nach untereinander vergleichen kann, wenn man zuvor mit einer Meßmethode einen Radius definiert hat. Radien aus verschiedenen Meßmethoden können deutlich voneinander abweichen.

Verschiedene Elemente liegen bei Raumtemperatur in verschiedener Form vor (atomar, molekular, metallisch, als Ionengitter), so daß ein direkter Vergleich der Größe zweier Atome oft nur unter hohem experimentellem Aufwand möglich wird.

## Meßmethode zur Bestimmung des Bindungsradius in Molekülen

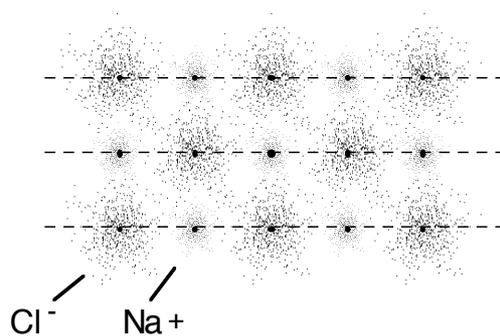


In einem zweiatomigen Molekül (z.B.  $H_2 \rightarrow H-H$ ) sind die Atomkerne in einem bestimmten Abstand  $d$  voneinander getrennt. Da die Masse der Elektronen nur etwa den zweitausentsten Teil der Gesamtmasse des Moleküls ausmachen, können die Elektronen bei der Massenverteilung vernachlässigt werden. Es bleiben nur noch die beiden Atomkerne (praktisch als Punktmassen), deren Massen bekannt sind. Der Abstand  $d$  der beiden Kerne zueinander soll experimentell bestimmt werden (auch in der Zeichnung sind die Ladungswolken aus Gründen der Übersichtlichkeit weggelassen).

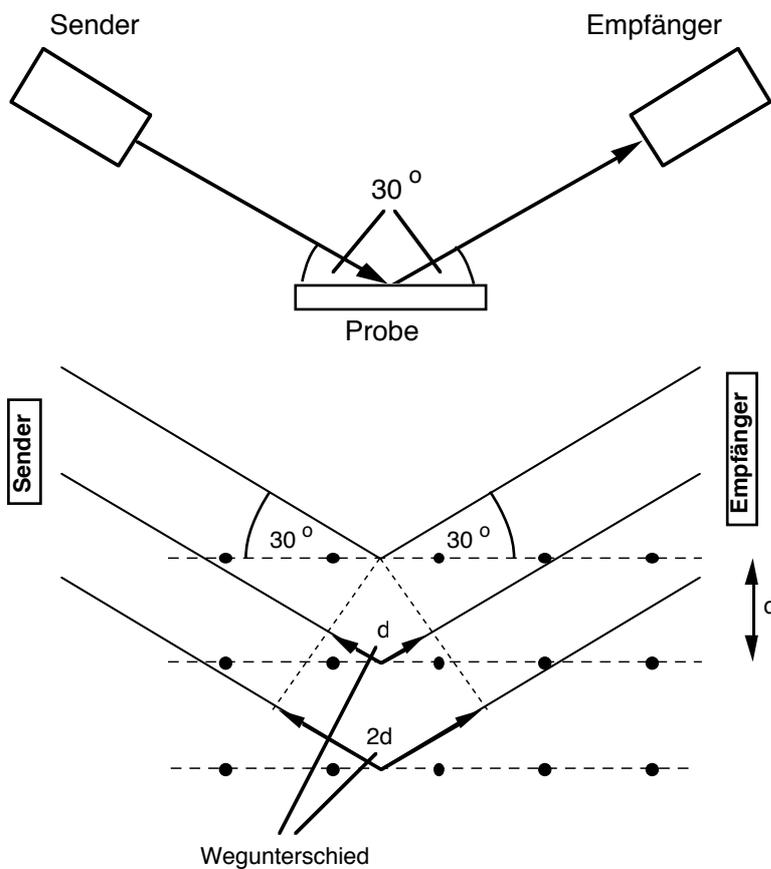
Versetzt man das Molekül, wie eine sehr leichte Stange mit zwei schweren Kugeln an jedem Ende, in Rotation, so muß man dazu Energie auf das Molekül übertragen. Die Energie, die übertragen werden muß, um eine bestimmte Rotation (oder besser Drehimpuls) zu erreichen, hängt vom Abstand der beiden Atomkerne ab.

Molekülrotation läßt sich z.B. durch Einstrahlen von Infrarotlicht anregen (die Energie des Lichtes wird dabei auf die Moleküle übertragen). Trägt man in einem Graphen die eingestrahelte Energie gegen die Rotation auf, läßt sich daraus der Abstand der beiden Atome ermitteln.

## Meßmethode zur Bestimmung des Ionenradius in Kristallgittern



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

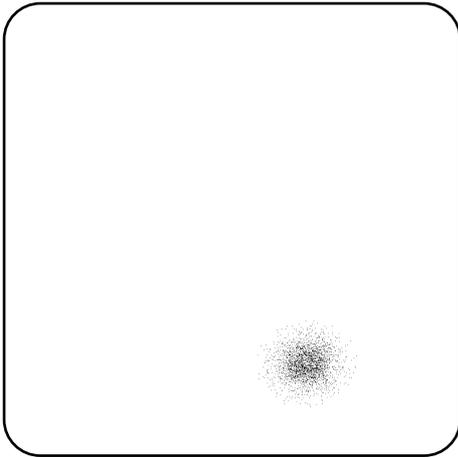


Der Abstand  $d$ , innerhalb dessen sich die Gitterstruktur wiederholt, läßt sich mit einem Röntgenstrahl ausmessen. Dieser wird, um besonders einfache Verhältnisse zu schaffen, unter einem Winkel von  $30^\circ$  auf den Kristall (Probe) geschickt. Sind die Wellenlänge  $\lambda$  und der Abstand  $d$  (oder ein Vielfaches von  $d$ ) gleich, entsteht unter einem Austrittswinkel von genau  $30^\circ$  eine Reflexion des Röntgenstrahls aufgrund der periodischen Struktur der Probe (siehe nebenstehende

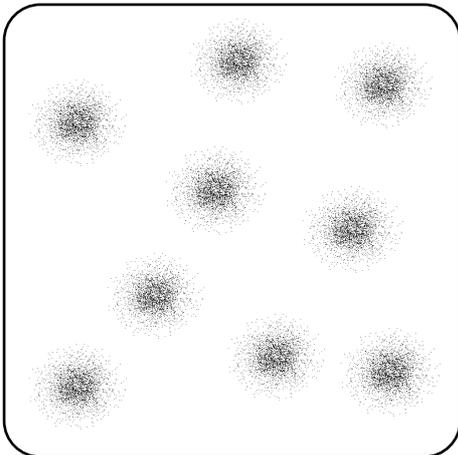
Zeichnung; die Ladungswolken wurden aus Gründen der Übersichtlichkeit weggelassen). Den Abstand zweier Ionen im Gitter erhält man also, indem man die Wellenlänge des Röntgenstrahls (Sender) variiert, bis man im Empfänger eine Reflexion registriert. Es ist dann  $d = \lambda$ . Da die Gitterabstände im Bereich von zehntel Nanometern sind, muß auch die Wellenlänge der Strahlung in diesem Bereich liegen. Diese Bedingung erfüllt Röntgenstrahlung.

Der Winkel von  $30^\circ$  wird in diesem Beispiel gewählt, weil unter diesem Einfall- bzw. Ausfallwinkel sich die Bedingung für Reflexion auf  $d = \lambda$  vereinfacht.

## Meßmethode zur Bestimmung des Atomradius in Gasen



Einem einzelnen Atom steht das gesamte Volumen V zur Verfügung



In einem Gas nehmen die Gasatome selbst ein Volumen b ein. Jedes einzelne Atom hat nur noch das Volumen (V-b) zur Verfügung

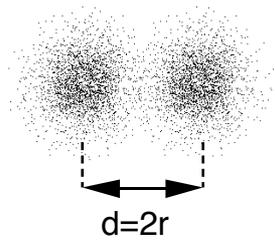
Während man mit den vorhergehenden Methoden den Abstand von gebundenen Atomen bestimmen kann, läßt sich über die reale Gasgleichung das Eigenvolumen von Atomen (die als Gas vorliegen) ermitteln. Das Eigenvolumen ist der Raum, den die Atome in einem vorgegebenen Volumen selbst einnehmen. Wäre ein einzelnes Atom in einem Behälter mit einem Volumen V eingeschlossen, dann stünde ihm das gesamte Volumen frei zur Verfügung; es könnte sich überall befinden (siehe links; Atom stark vergrößert). Ist jedoch ein Gas in diesem Volumen eingeschlossen, dann steht jedem einzelnen Gasatom nicht mehr das gesamte Volumen zur Verfügung, da ein Teil des Volumens von all den anderen Gasatomen besetzt ist (siehe links; Atome stark vergrößert). Man kann hierzu eine reale Gasgleichung aufstellen (die van der Waals Gleichung):

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right) \cdot (V - b) = R \cdot T$$

Sie beschreibt das Verhalten zwischen Druck **p**, Volumen **V**, und Temperatur **T**. **a** und **b** sind zwei Konstanten, die von dem jeweiligen Gas abhängen.

Man kann nun ein Experiment unternehmen, bei dem unter einer konstanten Temperatur T das Volumen V geändert wird. Den Graphen, den man in diesem p-V-Diagramm erhält, versucht man durch die Gleichung zu beschreiben, indem man a und b

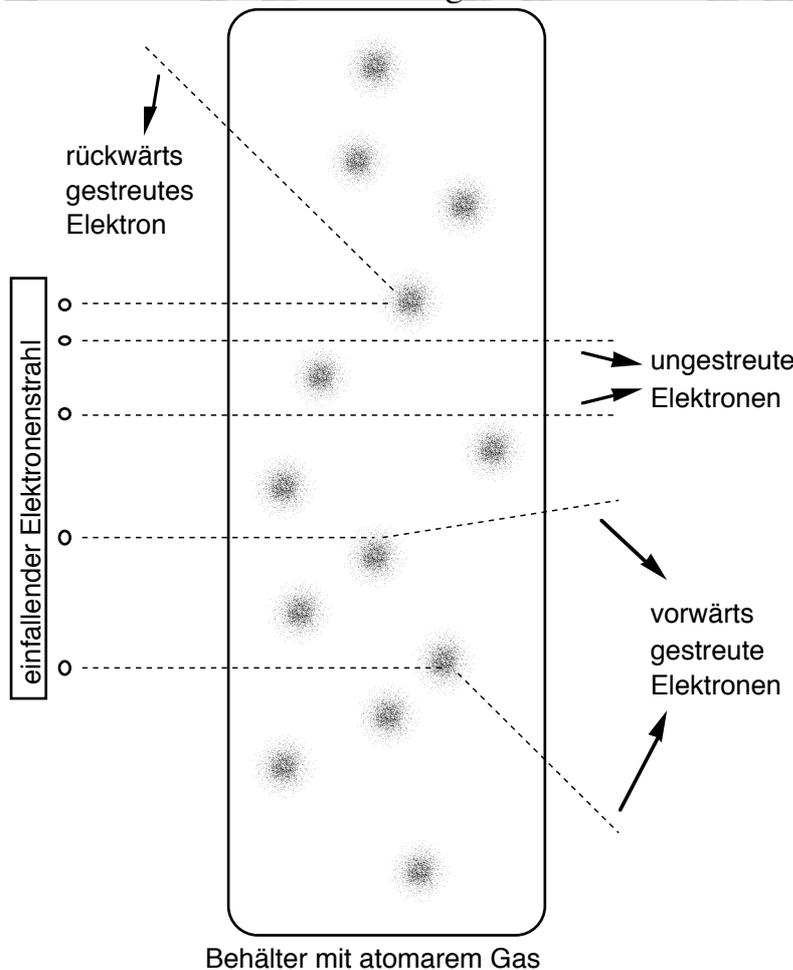
entsprechend anpaßt. a und b werden also so variiert, daß sie für ein bestimmtes Gas die experimentell gemessene p-V-Kurve möglichst gut wiedergeben. Der Parameter b ist dabei ein direktes Maß für das Eigenvolumen der Atome (daher wird b auch von V abgezogen; er vermindert das Volumen V des Gefäßes um das Eigenvolumen b der Atome). Der Parameter a soll uns hier nicht weiter interessieren (er beinhaltet die atomaren bzw. molekularen Kräfte der Gasteilchen untereinander).



Abstand nächster  
Annäherung zweier  
Atome

Aus dem Eigenvolumen  $b$  läßt sich der Atomradius  $r$  bestimmen. Er läßt sich mit dem Abstand  $d=2 \cdot r$  nächster Annäherung zwischen zwei Atomen identifizieren. Ab dem Abstand  $d$  haben sich die Ladungswolken so stark durchdrungen, daß sich die Atome abstoßen.

### Meßmethode zur Bestimmung des Streuradius bei Elektronenstreuung



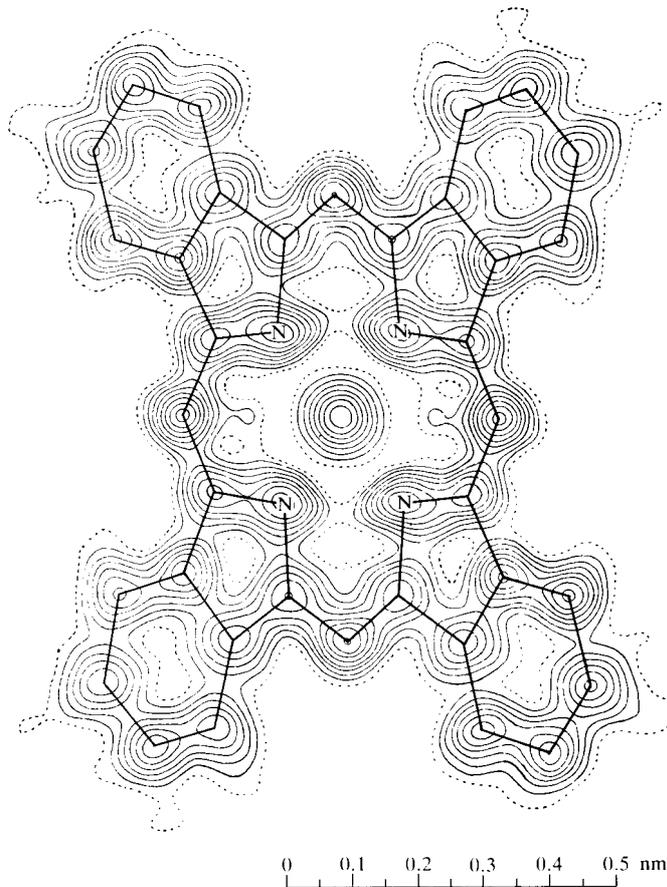
Durchläuft ein Elektronenstrahl ein atomares Gas, werden eine bestimmte Zahl an Elektronen mit Gasatomen kollidieren und abgelenkt. Ist die Wegstrecke der Elektronen durch das Gas so kurz, daß die Wahrscheinlichkeit mit einem Elektron zwei Gasatome zu treffen vernachlässigbar klein ist, ist das Verhältnis von gestreuten Elektronen zur Gesamtzahl der eingeschossenen Elektronen proportional zum sogenannten Wirkungsquerschnitt  $\sigma$ , der die Größe eines zwei-

dimensionalen "Atomscheibchens" angibt:

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

$A_{\text{gesamt}}/N_{\text{Gasatome}}$  ist die Gesamtfläche des bestrahlten Gases (Blickrichtung von vorne, also links in der Zeichnung) geteilt durch die Anzahl von Atomen in dieser Fläche. Aus dem Wirkungsquerschnitt (dessen Einheit eine Fläche ist) kann man über  $A_{\text{Gasatom}} = \sigma = 2\pi \cdot r^2$  den Radius berechnen. Der Wirkungsquerschnitt ist die Fläche des Kreisscheibchens eines Atoms.

## Kann man Ladungswolken messen?



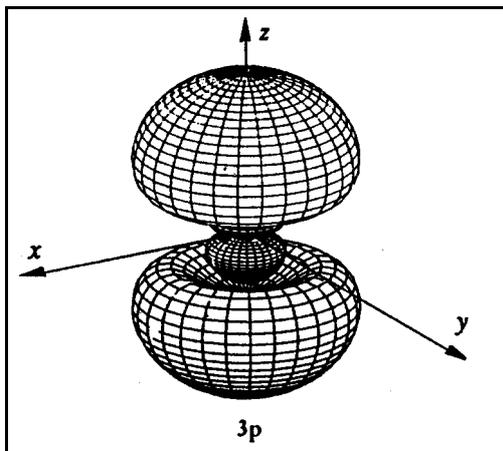
Ladungswolkenbild von Nickel-Phthalocyanin. Die Linien geben Bereiche gleicher Elektronendichte an. In jedem Mittelpunkt, um den sich eine Schar von Kreisen befindet, sitzt ein Atomkern. Die Elektronendichte nimmt von innen nach außen ab.

Mit der zuvor genannten Methode der Bestimmung des Bindungsabstandes in Kristallgittern mit Hilfe von Röntgenstrahlung (man nennt diesen Prozeß auch Röntgenbeugung) lassen sich ganze "Ladungswolkenbilder" von einfachen Strukturen bis zu komplexen Molekülen aufzeichnen. Bedingung ist, daß das zu untersuchende Molekül in Form eines regelmäßig angeordneten Kristalls vorliegt. Mit dem Röntgenstrahl werden die Intensitäten der Reflexionen unter allen möglichen Einfallrichtungen aufgezeichnet (und nicht wie zuvor nur unter einem Winkel). Aus den gemessenen Intensitäten läßt sich durch ein mathematisches Verfahren das Bild der Ladungsverteilung im Molekül rekonstruieren.

Das Bild zeigt das

### 3.9 Nicht-Radialsymmetrische Zustände

Alle Zustände, die bis jetzt berechnet und besprochen wurden, sind radialsymmetrisch (sie werden mit einem  $s$  bezeichnet;  $1s$ ,  $2s$ ,  $3s$ , ...). Die Psi-Funktionen dieser Zustände sind nur vom Kernabstand abhängig, nicht aber von der Raumrichtung. Sie besitzen alle eine kugelsymmetrische Form. Diese Zustände können mit einer Quantenzahl, die wir  $n$  genannt haben, charakterisiert werden. Es gibt aber auch Orbitale, die keine Kugelsymmetrie besitzen und durch weitere Quantenzahlen, den Nebenquantenzahlen (oder auch durch weitere Buchstaben wie  $p$ ,  $d$ , ...) angegeben werden.

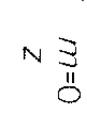
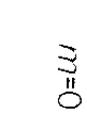
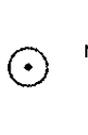
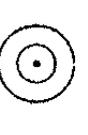
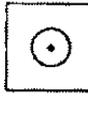
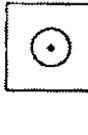
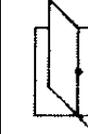
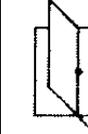
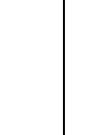
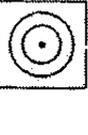
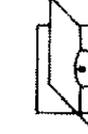
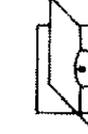
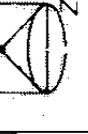
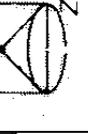


Das nebenstehende Bild zeigt ein  $3p$  Orbital. Das Orbital ist der "Aufenthaltsraum" in dem das Elektron hauptsächlich lokalisiert wird. Interpretiert man es als Ladungswolke, so bedeutet der Rand die Grenze, ab der die Ladungsdichte unter einen bestimmten Wert fällt. Es bedeutet nicht, daß die Ladungswolke am Gitterrand zu Ende ist, oder außerhalb des Netzgebildes kein Elektron mehr lokalisiert werden kann. Die Wahrscheinlichkeit einer Lokalisation wird nur nach außen hin sehr klein.

Obwohl das Gebilde mehrere, durch Knotenflächen abgetrennte Bereiche besitzt, ist es die Ladungswolke eines Elektrons. Auch in den  $s$ -Orbitalen haben wir schon mehrere abgetrennte Bereiche kennengelernt, die ebenfalls die Ladungswolke eines Elektrons veranschaulichen. Diese sind kugelsymmetrisch um den Kern angeordnet und auch ihre Knotenflächen besitzen Kugelsymmetrie.

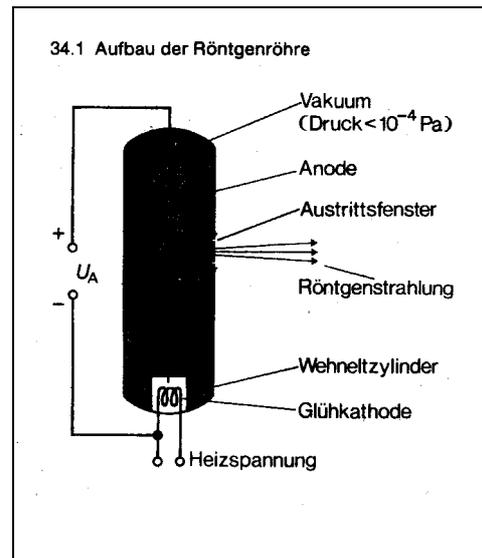
Da das Wasserstoffatom nur ein Elektron besitzt, entspricht die Form seiner Ladungswolke dem Bild des oben gezeigten Orbitals, wenn sich das Elektron im  $3p$ -Zustand befindet.

n	l = 0 (s-Elektron)			l = 1 (p-Elektron)			l = 2 (d-Elektron)			l = 3 (f-Elektron)							
	m = 0	m = 0	m = 0	m = 1	m = -1	m = 0	m = 1	m = -1	m = 2	m = -2	m = 0	m = 1	m = -1	m = 2	m = -2	m = 3	m = -3
1																	
2																	
3																	
4																	

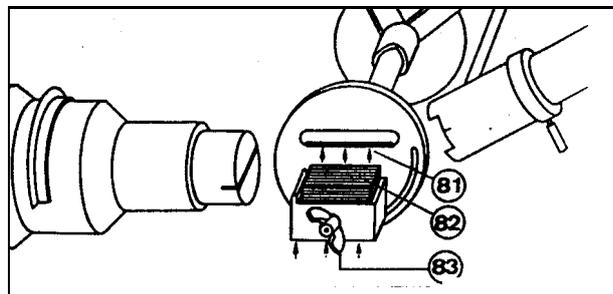
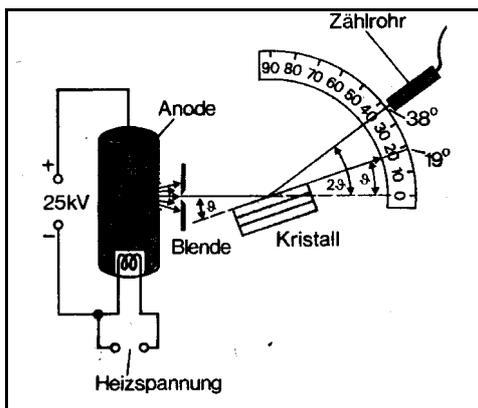
$n$	$l=0$ (s-Elektron)		$l=1$ (p-Elektron)		$l=2$ (d-Elektron)		$l=3$ (f-Elektron)		$n$						
	$m=0$	$m=0$	$m=1$	$m=-1$	$m=0$	$m=1$ $m=-1$	$m=2$ $m=-2$	$m=0$		$m=1$ $m=-1$	$m=2$ $m=-2$	$m=3$ $m=-3$			
1												1			
2												2			
															
3															3
															4
4															4

### 3.10 Röntgenspektren

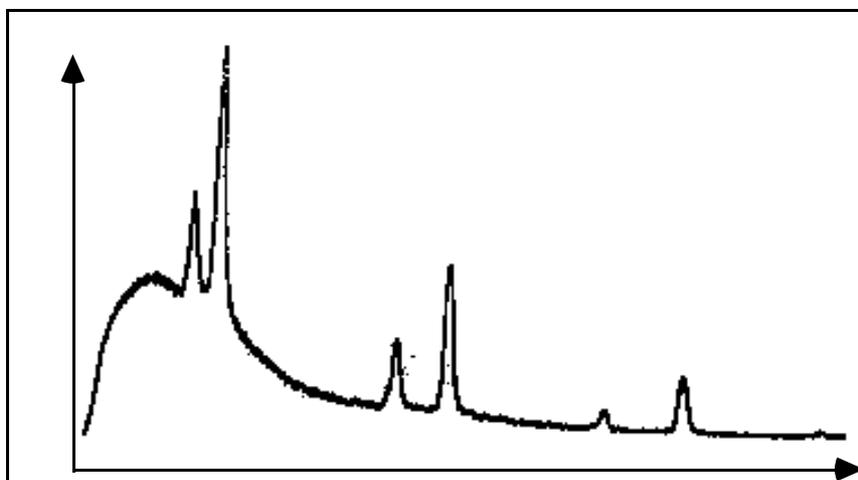
Da die Röntgenstrahlung eine hochenergetische elektromagnetische Strahlung ist, kann sie Materialien mehr oder minder gut durchdringen, wobei sie von einigen Metallen recht gut aufgehalten wird, wie z.B. Blei. Zur Erzeugung der Röntgenstrahlung setzen wir eine Röntgenröhre ein, wie sie rechts abgebildet ist.



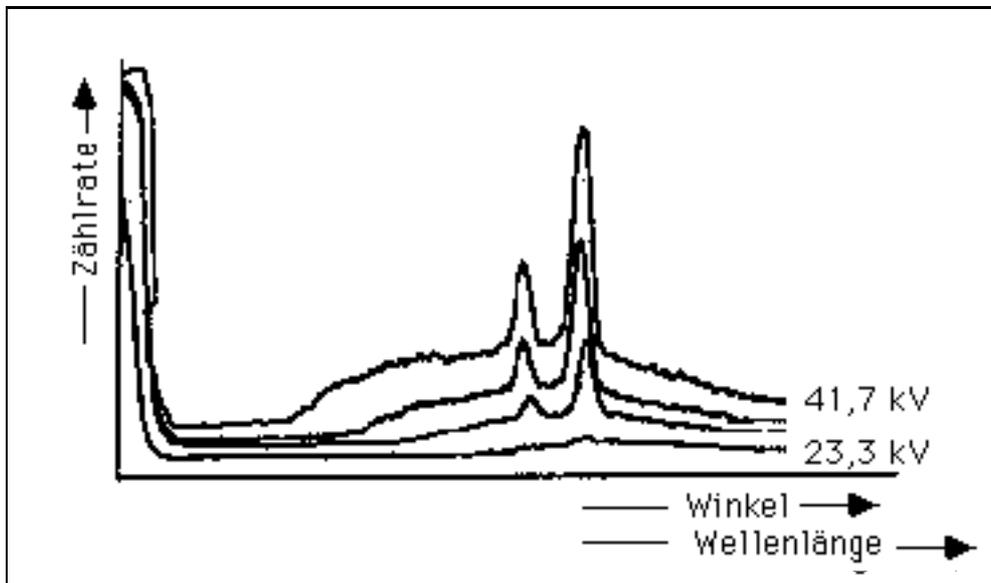
Nun wollten wir das Röntgenspektrum untersuchen, wozu wir Röntgenstrahlen auf einen Kristall fallen ließen. Aufgrund der Beziehungen der Braggschen Reflexion bildeten sich bestimmte Maxima und Minima, welche wir anhand eines GMZ.-Rohres erfaßten. Versuchsaufbau:



Heraus kam in etwa folgender Graph:



Wir wunderten uns über die Zacken im Graph, und versuchten diese durch Variieren der Spannung zum Verschwinden zu bringen, was allerdings mißlang. Danach sah das Ergebnis folgendermaßen aus:



Daraus schlossen wir, daß sich der Graph aus zwei Teilen zusammensetzt.

- 1.) Einer spannungsabhängigen Strahlungsart, welche ein **kontinuierliches Röntgenpektrum** aufweist. Sie entsteht wenn die beschleunigten Elektronen auf der Anode aufschlagen und auf einer sehr kurzen Strecke gestoppt werden, was eine große negative Beschleunigung ergibt. Da grundsätzlich alle beschleunigten Ladungen strahlen, entsteht die sogenannte "Röntgen-Bremsstrahlung".
- 2.) Einer materialcharakteristischen Strahlungsart, welche die Zacken im Graph verursacht. Sie entsteht, wenn nach Heraus schlagen eines Elektrons aus der K-Schale durch die auftreffenden Elektronen ein anderes Elektron aus einem höheren Energieniveau (L-, M- oder N-Schale) in die freigewordene Lücke in der K-Schale nachrückt. Man nennt diesen Vorgang Quantensprung und im optischen Bereich entspricht dies der Entstehung von Spektrallinien. Diese Strahlung ergibt das sogenannte **charakteristische Röntgenspektrum**.

### Theorie der Röntgenstrahlung

Beim H-Atom gibt es folgende Formel für die Frequenz, bei der die Quantensprünge passieren (das H-Atom geht vom Zustand n in den Zustand m über):

$$f = \Delta W / h = -\frac{13,6eV}{h} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Beim H-Atom hat der Kern eine positive Ladung (+e), das Elektron eine negative Ladung (-e). Im Vorfaktor (-13,6eV/h) sind diese als Quadrat enthalten.

$$Q \cdot q = e^2 \quad (q = 1e \text{ vom Elektron, } Q = 1e \text{ vom Kern})$$

Bei höheren Atomen (Kernladung= $Z \cdot e$ ) wäre das Produkt der Ladungen:

$$Q \cdot q = z \cdot e^2 \quad (q = 1e \text{ vom Elektron, } Q = z \cdot e \text{ vom Kern})$$

Höhere Atome mit der Kernladung  $Z$  hätten daher den Vorfaktor ( $-13.6eV \cdot Z^2/h$ )

Das hieße also, daß Atome der Ordnungszahl  $Z$  Spektrallinien der  $Z^2$ -fach entsprechenden Wasserstoff-Frequenzen aufweisen müßten, was sie allerdings bei der Berechnung erst dann tun, wenn man von  $Z$  noch  $a=1$  abzieht. Das kommt daher, daß, wenn ein Elektron aus einer höheren Schale in die K-Schale wechselt; es die um eins verminderte Coulombkraft zu spüren bekommt. Das verbliebene eine Elektron in der K-Schale schirmt die Kernkraft nämlich um eine Elementarladung ab. Daher wird  $a$  auch die Abschirmzahl genannt. Deshalb muß die Formel auch angepasst werden:

$$f = \Delta W / h = -(Z - 1)^2 \cdot \frac{13.6eV}{h} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Hierbei handelt es sich nur eine Näherungsformel. Man kann sagen, daß bei einem Sprung von einer höheren Schale (mit der Hauptquantenzahl  $n$ ) in eine Schale mit der Hauptquantenzahl  $m$  die Frequenz der Quantensprünge mit der obengenannten Formel berechnet wird.

Eine praktische Anwendung liegt in der Material- und Werkstoffprüfung, wenn der zu untersuchende Gegenstand nicht beschädigt werden darf.

Ein weiteres Produkt ist die sogenannte Moseley-Gerade, welche der Chemie half das Periodensystem der Elemente neu zu ordnen. Wenn jetzt ein Elektron nach dem Herausschlagen direkt aus der L-Schale ersetzt wird ist  $n=2$  und  $m=1$ :

$$f_K = -(z-1)^2 \cdot (13.6eV/h) \cdot (1/4^2 - 1/1)$$

Wenn wir jetzt  $\sqrt{f_K}$  gegen  $Z$  auftragen kommt dabei eine Gerade heraus, auf der alle 92 chemischen Elemente ihren Platz haben. Sie bildet heute die Grundlage des Periodensystems der Elemente. Daß die Einordnung nach Massenzahl manchmal Probleme bringt, liegt an den Isotopen, welche sich nicht immer in einer Reihenfolge einordnen lassen.

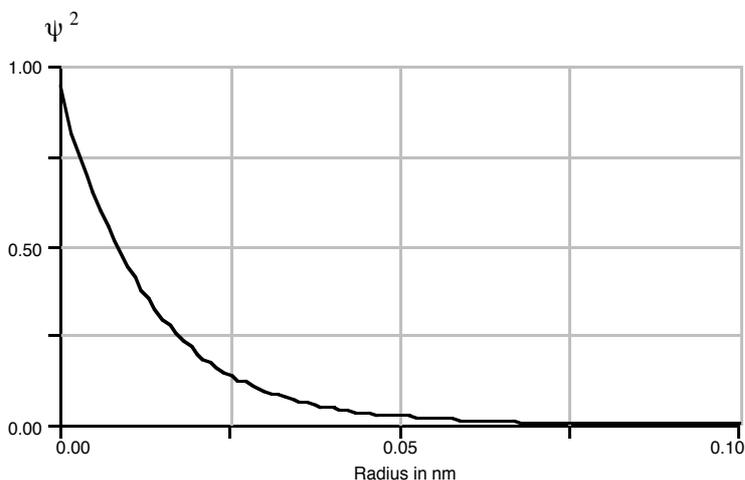
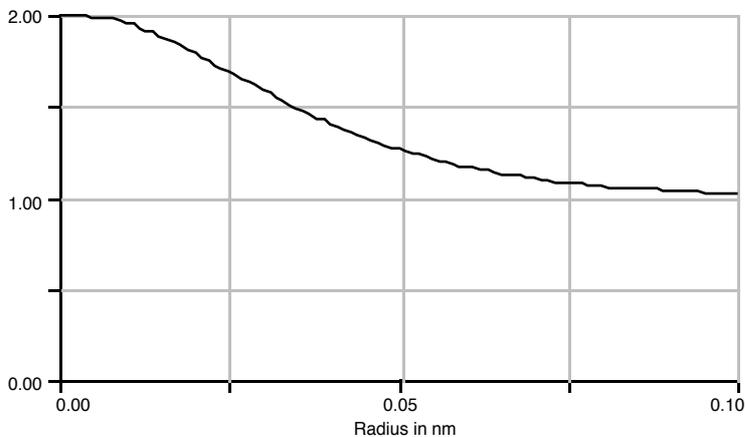
## 4. Höhere Atome

### 4.1 Vom H-Atom zu höheren Atomen

Bis jetzt haben wir ausführlich das Wasserstoffatom kennengelernt. Sein Atomkern besteht nur aus einem Proton; er besitzt eine positive Elementarladung. Daher kann er auch nur ein Elektron an sich binden. Dieses bildet die Ladungswolke um den Kern. Der Zustand des H-Atoms ist durch den Zustand, in dem sich das Elektron befindet, gegeben. Man braucht beim H-Atom also nicht zwischen dem **Zustand des Atoms** und dem **Zustand des Elektrons** zu unterscheiden. Auf die Ladungswolke des Elektrons "wirkt" überall die gesamte Kernladung, das Potential ist nur vom Kernabstand abhängig.

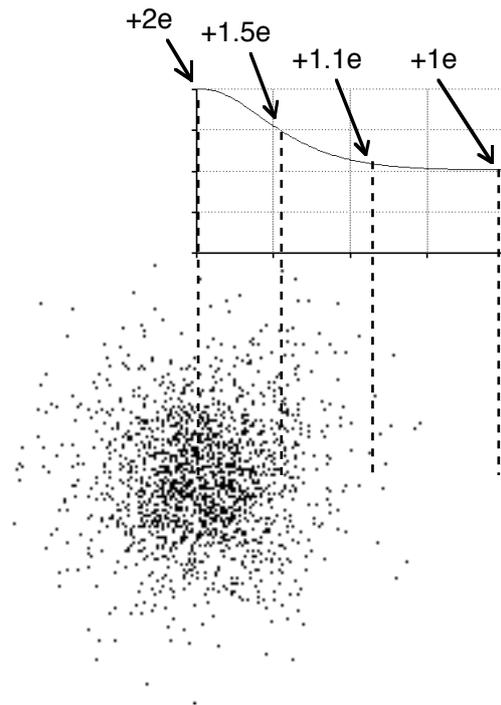
Wie ist aber ein Zustand eines Atoms mit mehreren Elektronen charakterisiert? Um den Zustand des He-Atoms (Kernladung  $+2e$ ) zu beschreiben, müssen wir die Zustände beider Elektronen angeben, da der Kern zwei Elektronen an sich bindet. Zusätzlich beeinflussen sich die beiden gebundenen Elektronen aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung gegenseitig. Auf jedes einzelne Elektron "wirkt" jetzt nicht nur die Kernladung, sondern auch die Ladung des anderen Elektrons. Dadurch wird sich seine Bindungsenergie und seine Verteilungsfunktion verglichen zum Wasserstoffatom ändern. Die Ladungswolke des He-Atoms besteht aus zwei Elektronen. Sie ergibt sich aus Überlagerung der zwei  $\psi^2$ -Funktionen.

"wirksame" Kernladung



Die gegenseitige Beeinflussung der beiden Elektronen und ihrer Verteilungsfunktionen wird mit Hilfe folgender Überlegung klarer: Ein freies Elektron nähert sich aus weiter Entfernung einem He-Kern, der nur ein Elektron (das sich im Grundzustand befindet) an sich gebunden hat (man spricht hierbei von einem einfach ionisierten He-Atom, da dem Atom ein Elektron entrissen wurde). Die Gesamtladung (wirksame Kernladung; siehe links), die auf das freie, sich nähernde Elektron "wirkt", ist die Kernladung plus der abschirmenden Ladung der Ladungswolke ( $\psi^2$ ; siehe links). Weit vom ionisierten

Atom entfernt entspricht die wirksame Ladung  $+1e$ , da eine positive Ladung vom gebundenen Elektron abgeschirmt wird (man spricht in diesem Zusammenhang von **Abschirmung**). Nähert sich das freie Elektron nun weiter dem Kern, "wirkt" auf es immer mehr von der Kernladung  $+2e$ , da es einen immer größeren Teil der Ladungswolke durchdringt und daher die Abschirmung des gebundenen Elektrons mit zunehmender Annäherung an den Atomkern abnimmt. Beim Abstand  $r$  vom Atomkern trägt der außerhalb des Radius  $r$  liegende Teil der Ladungswolke nicht zur Abschirmung bei, sondern nur noch der innerhalb der Kugel mit dem Radius  $r$  liegende Anteil der Ladungswolke.



Das nebenstehende Bild illustriert diesen Sachverhalt nochmals am Beispiel von vier ausgewählten Punkten. Das dargestellte  $\text{He}^+$ -Ion besitzt zwei positive Elementarladungen im Kern ( $+2e$ ) und eine negative in der Ladungswolke ( $-1e$ ). Weit vom Kern entfernt "wirkt" eine Ladung, die mit einer Punktladung  $+1e$  identisch ist. Nähert man sich dem Kern und dringt damit in die Ladungswolke ein, dann "wirkt" eine stetig wachsende Punktladung (im Bild  $+1.1e$  und  $+1.5e$ ). In sehr geringem Abstand vom Kern wird die Punktladung der Kernladung  $+2e$  entsprechen; die Ladungswolke bewirkt bei sehr kleinen Kernabständen praktisch keine Abschirmung mehr.

Der Begriff "wirkt" ist nicht wörtlich zu nehmen. Vielmehr sollte er darauf

hinweisen, daß sich das vom Ion erzeugte Potential so verhält, als ob es von einer Punktladung erzeugt wird, deren Ladung mit Annäherung größer wird.

Die Abschirmung wirkt jedoch nicht nur auf ein freies Elektron, das sich in einem bestimmten Abstand vom Atomkern befindet, sondern auch auf eine Ladungswolke eines gebundenen Elektrons um einen Atomkern. Das Gesamtpotential, mit dem die Ladungswolke eines Elektrons wechselwirkt, setzt sich bei höheren Atomen aus dem Kernpotential plus den Potentialen der anderen Ladungswolken zusammen. Wir werden für jede Ladungswolke eine eigene Schrödingergleichung aufstellen müssen, die auch die anderen Ladungswolken berücksichtigt. Für das He-Atom erhalten wir wegen den zwei Elektronen zwei Schrödingergleichungen:

$$\text{Elektron 1: } u''_{\text{Elektron1}}(r) = - 8\pi^2 \cdot 2m/h^2 \cdot (W_{\text{Elektron1}} - V_{\text{eff}}(r)) \cdot u_{\text{Elektron1}}(r)$$

$$\text{Elektron 2: } u''_{\text{Elektron2}}(r) = - 8\pi^2 \cdot 2m/h^2 \cdot (W_{\text{Elektron2}} - V_{\text{eff}}(r)) \cdot u_{\text{Elektron2}}(r)$$

Die beiden Gleichungen entsprechen soweit der Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms. Das wirklich Neue steckt im Potential  $V(r)$ ; in ihm ist nicht nur das Potential des Atomkerns, sondern auch das der anderen Ladungswolke enthalten:

**Elektron 1:**  $V(r) = V_{\text{Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung2}}(r)$

**Elektron 2:**  $V(r) = V_{\text{Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung1}}(r)$

$W_{\text{Elektron1}}$  und  $W_{\text{Elektron2}}$  sind die Eigenenergien von Elektron 1 bzw. Elektron 2,  $u_{\text{Elektron1}}(r)$  und  $u_{\text{Elektron2}}(r)$  sind ihre radialen Verteilungsfunktionen, wie schon zuvor beim Wasserstoffatom erläutert.

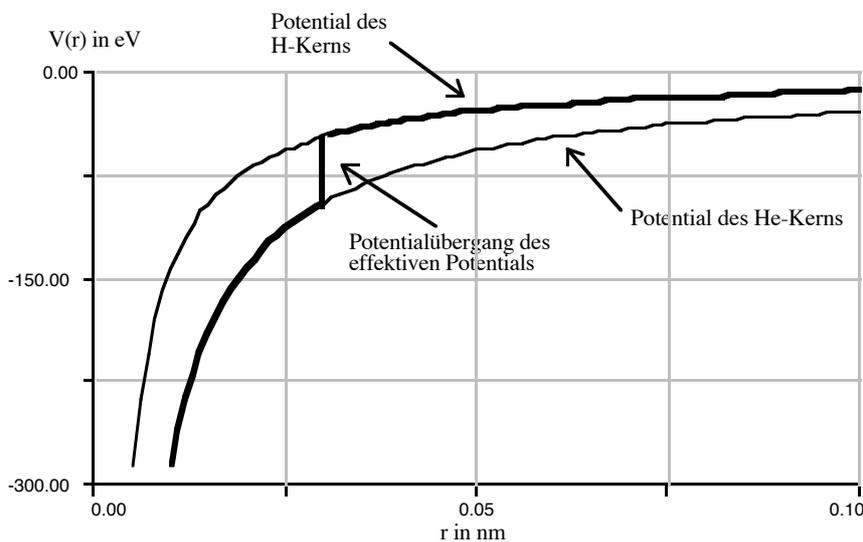
## 4.2 Das Helium-Atom

### Potentialübergänge

Da die Schrödingergleichungen für die beiden Elektronen sich nur im Potential von der Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms unterscheiden, können wir alle grundlegenden Überlegungen aus dem vorherigen Kapitel auf das He-Atom übertragen. Die Schrödingergleichung ist die Grundgleichung der Atomphysik, aus der sich der Aufbau aller höheren Atome berechnen lässt. Wir müssen nur durch geeignete Ansätze das Gesamtpotential, mit dem jedes einzelne Elektron wechselwirkt, möglichst genau angeben können.

Beim He-Atom kennen wir bereits drei Eigenschaften des Potentials eines Elektrons im Grundzustand:

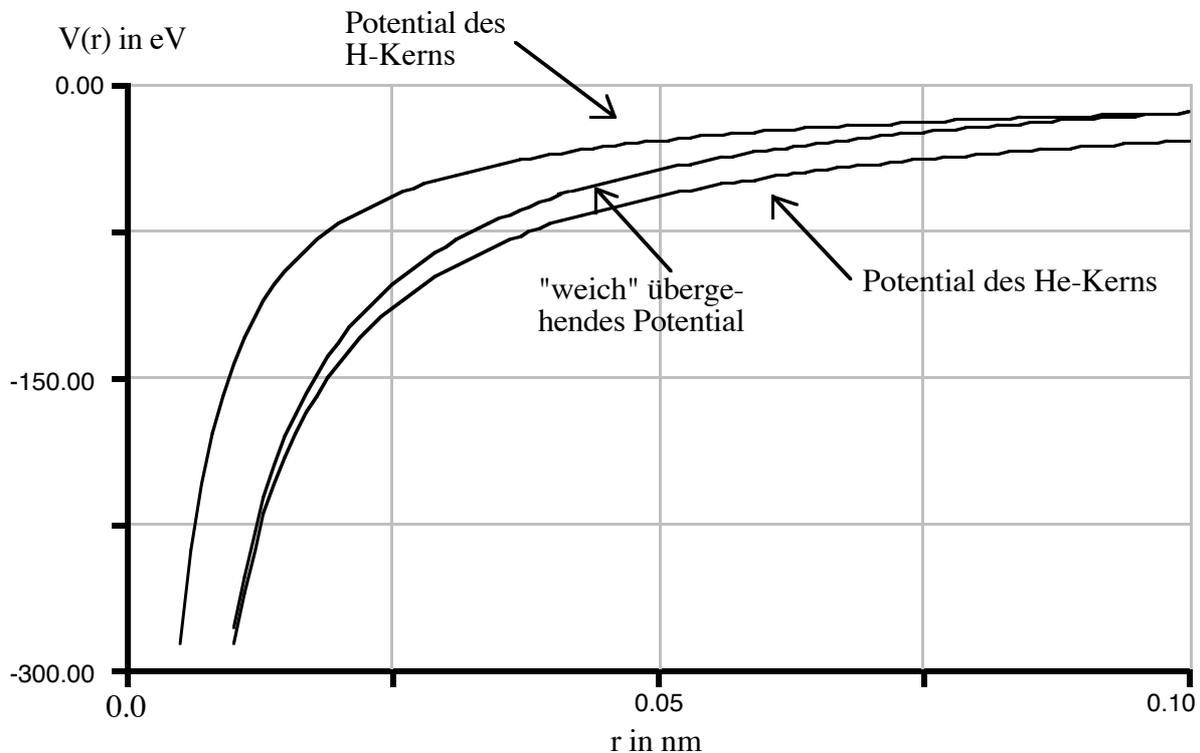
1. Weit entfernt vom Kern wirkt ein Potential, das dem Potential einer Punktladung  $+1e$  entspricht
2. Sehr nahe am Kern wirkt ein Potential, das dem Potential einer Punktladung  $+2e$  entspricht
3. Dazwischen verändert sich das Potential kontinuierlich



Die Abbildung zeigt zwei Potentiale; das eines einfach geladenen Kerns (=Potential des H-Kerns) und das eines zweifach geladenen Kerns (=Potential des He-Kerns). Die einfachste Näherung wäre ein Potential, das für große Abstände dem Potential eines

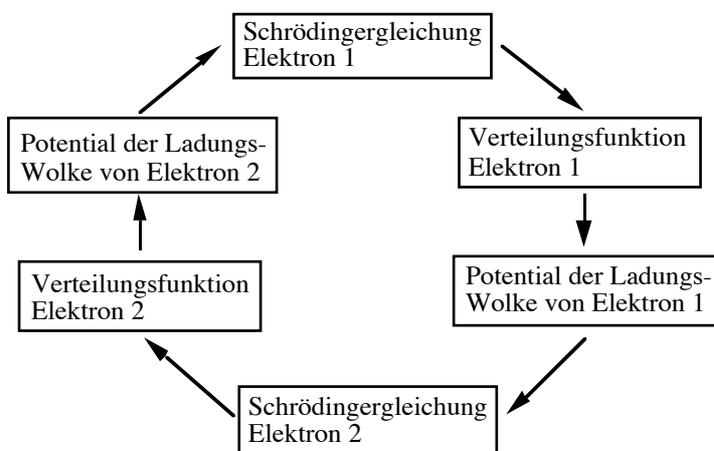
einfach geladenen Kerns und für kleine Abstände dem Potential eines zweifach geladenen Kerns entspricht. Dazwischen gibt es bei einem bestimmten Radius einen schlagartigen Übergang von dem einen Potential zum anderen. Das daraus resultierende Potential ist die dickere Linie in der Zeichnung. Dies ist sicherlich keine ideale Näherung, jedoch erfüllt sie zwei unserer drei Potentialeigenschaften und lässt sich für Rechnungen mit STELLA sehr einfach anwenden. Es bleibt allerdings die Frage, bei welchem Radius man den **Potentialübergang** wählt.

Eine andere Potentialnäherung, die dem wirklichen Potential in einem He-Atom näher kommt, als der "harte" Potentialübergang, ist ein "weicher" Übergang zwischen den zwei Kurven, wie unten abgebildet.



Wie zuvor sind die zwei Potentiale, das eines einfach geladenen Kerns (=Potential des H-Kerns) und das eines zweifach geladenen Kerns (=Potential des He-Kerns), abgebildet. Das dritte Potential ("weich" übergehendes Potential) geht fließend von dem einen Graphen in den anderen über. Es erfüllt damit auch die dritte Potentialeigenschaft. Auch hier muß man sich überlegen, wo der Übergang beginnt, wo er endet und welche Form er besitzt.

### e-Teil und Abschirmung

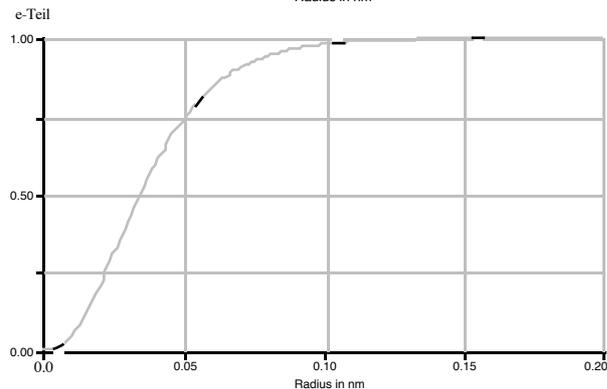
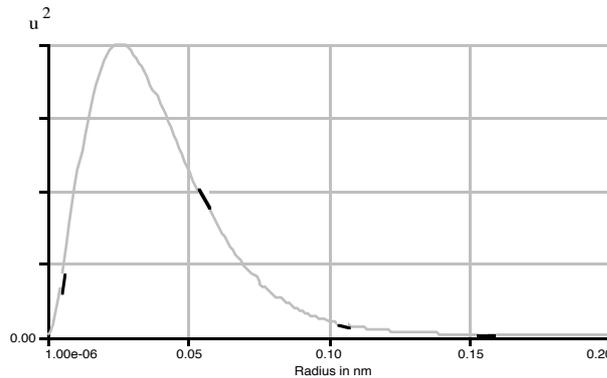
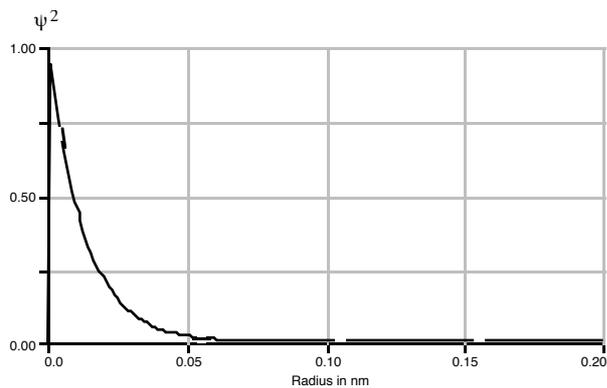


Daß wir überhaupt eine Näherung für das Gesamtpotential benötigen, liegt daran, daß sich das Potential in der Schrödingergleichung des Elektron 1 aus den Potentialen von Kern und Elektron 2 zusammensetzt. Entsprechend setzt sich das Potential in der Schrödingergleichung des Elektron 2 aus den Potentialen von Kern und

Elektron 1 zusammen. Die beiden Schrödingergleichungen sind miteinander verknüpft. Das Schaubild verdeutlicht dies. Um die Schrödingergleichung für das Elektron 1 aufstellen zu können, benötigen wir das Potential, das die

Ladungswolke des Elektron 2 erzeugt. Diese erhalten wir aus der Verteilungsfunktion  $\psi$  von Elektron 2, die wiederum aus der Schrödingergleichung für das Elektron 2 gewonnen wird, usw. Möchte man diese aufwendige Prozedur umgehen, versucht man das Potential der Ladungswolken zu nähern, wie wir das zuvor getan haben.

Wie läßt sich aber das Potential einer Ladungswolke näherungsweise berechnen? Dazu führen wir den sogenannten **e-Teil** ein, den Anteil der Ladung einer Ladungswolke, der bei einem Abstand  $r$  "wirkt". Diesen haben wir schon zuvor im Zusammenhang mit der Abschirmung und dem Begriff "wirksame" Ladung kennengelernt. Der abschirmende Anteil einer Ladungswolke beim Radius  $r$  ist das Integral der  $\psi^2$ -Funktion zwischen 0 und  $r$ .



Abschirmender Anteil einer Kugel mit Radius  $r$  und Dichteverteilung  $\psi^2(r)$ :

$$C \cdot \int_0^r \psi^2(r) \cdot r^2 \cdot dr = C \cdot \int_0^r u^2(r) \cdot dr$$

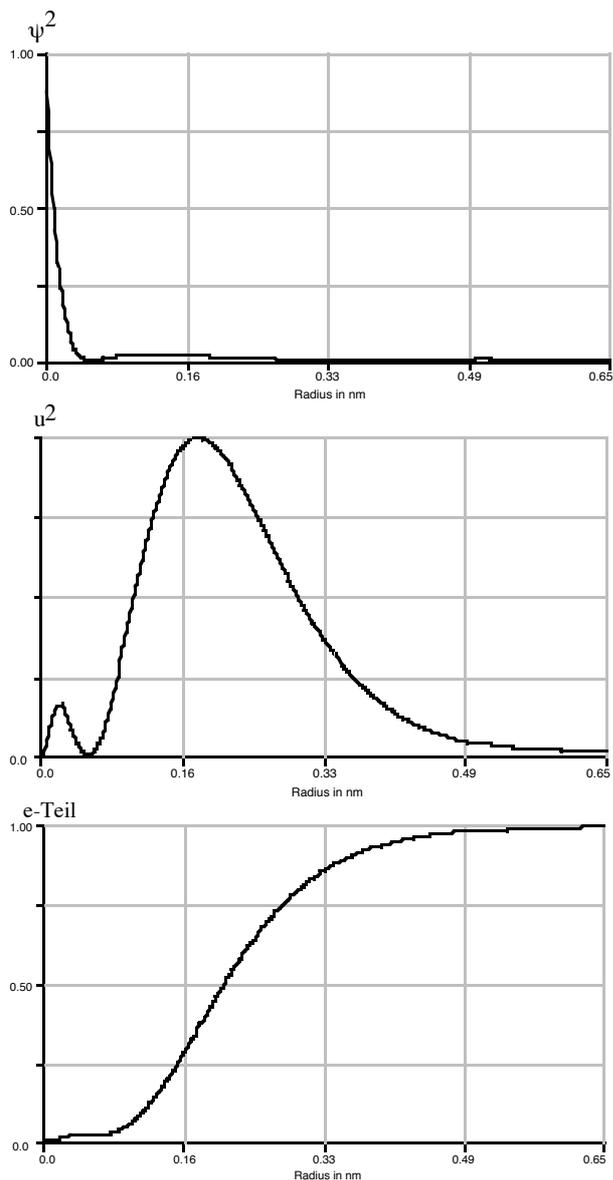
Wir summieren damit  $\psi^2(r)$  von 0 bis  $r$  auf. Die Konstante  $C$  muß eingeführt werden, um  $\psi^2$  auf eins zu **normieren**. Integriert man die Ladungswolke von Null bis Unendlich, erhält man die gesamte Ladung des Elektrons, nämlich  $-1e$ :

$$C \cdot \int_0^{\infty} \psi^2(r) \cdot r^2 \cdot dr = 1$$

Die Konstante  $C$  wird also auf die  $\psi$ -Funktion so angepaßt, daß das Integral 1 wird, da die Gesamtladung der Ladungswolke  $-1e$  ist.

Die drei nebenstehenden Graphen zeigen dies am Beispiel einer Ladungswolke im 1s-Zustand im He-Atom. Die  $\psi^2$ - und die  $u^2$ -Funktion sind noch nicht normiert. Ihre Werte sind willkürlich; eine Normierung war bis jetzt nicht notwendig. Der Graph des e-Teil zeigt den Anteil der Ladungswolke, den eine Kugel mit Radius  $r$  umschließt. Sein Maximum

bei  $r \rightarrow \infty$  ist über die Konstante  $C$  auf eins normiert. Der e-Teil entspricht der Fläche unter der  $u^2$ -Funktion bis zum Radius  $r$ . Wenn sich im He-Atom beide Elektronen im 1s-Zustand befinden, besitzen die beiden Elektronen identische Ladungswolken und e-Teile.



Die drei Graphen auf der linken Seite zeigen wie zuvor die  $\psi^2$ -Funktion, die  $u^2$ -Funktion und den e-Teil; diese jedoch von einem Elektron im 2s-Zustand. Der e-Teil an der Stelle  $r$  ist wie zuvor das Integral der  $u^2$ -Funktion von 0 bis  $r$ . Ein He-Atom kann sich z.B. in einem Zustand befinden, in dem ein Elektron im 1s-Zustand ist, das andere im 2s-Zustand. Wie schon in der Einführung erläutert, müssen wir bei höheren Atomen zwischen dem Zustand eines Elektrons und dem Zustand eines Atoms unterscheiden. Betrachtet man die beiden e-Teile der Elektronen (1s und 2s; auf die unterschiedlichen Skalen der Graphen zu den Zuständen 1s und 2s ist zu achten), läßt sich feststellen, daß in dem (1s)(2s)-Zustand des He-Atoms die Ladungswolke des 1s-Elektrons sich fast vollständig innerhalb eines Radius von  $r=0.1$  nm befindet, während die Ladungswolke des 2s-Elektrons sich fast vollständig außerhalb des Radius von  $r=0.1$  nm befindet. Dies bedeutet, daß die

Ladungswolke des 2s-Elektrons wegen der Abschirmung der 1s-Ladungswolke im He-Atom fast überall nur eine Elementarladung "sieht" und daher der Ladungswolke eines 2s-Elektrons im H-Atom sehr ähnlich ist, das aufgrund der Kernladung des H-Atoms überall ein Potential einer Ladung  $+1e$  erfährt. Das 1s-Elektron in diesem Zustand des He-Atoms wird dagegen vernachlässigbar gering von der 2s-Ladungswolke abgeschirmt und "sieht" fast überall die Kernladung  $+2e$ .

Das Potential des H-Atoms haben wir in Kapitel 3 mit

$$V_{Kern}(r) = -\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

angegeben.  $Z$  ist die Kernladung (beim H-Atom ist  $Z=1$ ),  $e$  und  $\epsilon_0$  sind physikalische Konstanten ( $e$ =Elementarladung= $1.6 \cdot 10^{-19}$ C,  $\epsilon_0=8.9 \cdot 10^{-12}$ As/Vm). Das Potential eines He-Kerns unterscheidet sich nur in der Kernladung vom H-Kern. Für sie ist  $Z=2$  einzusetzen.

Das Potential einer abschirmenden Ladungswolke besitzt ein positives Vorzeichen (wegen der gleichen Ladungen der beiden Elektronen; im

Kernpotential führen die entgegengesetzten Ladungen von Kern und Elektron zum negativen Vorzeichen) und ist vom e-Teil abhängig.

$$V_{\text{Abschirmung}}(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot e_{\text{Teil}}$$

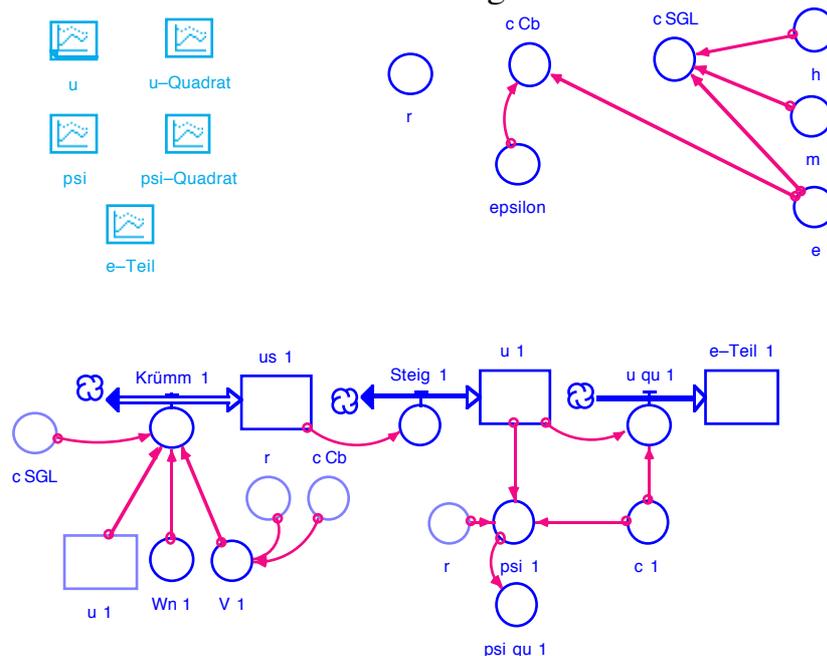
Das Gesamtpotential setzt sich aus diesen beiden Zusammen:

$$V(r) = V_{\text{Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot (2 - e_{\text{Teil}})$$

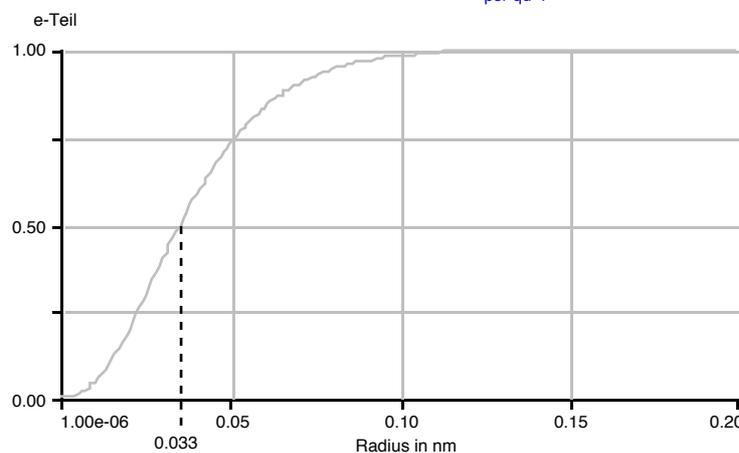
Der e-Teil ist von r und vom Zustand, in dem sich die abschirmende Ladungswolke befindet, abhängig. Er "korrigiert" das Potential der Kernladung um die abschirmende Wirkung der Ladungswolke.

### STELLA-Modelle zum He-Atom

Anfangs wollen wir das STELLA-Modell des H-Atoms so modifizieren, daß wir mit der zuvor besprochenen Näherung des Potentialsprungs eine Abschätzung der Eigenenergien und Verteilungsfunktionen erhalten. Wir reduzieren das Modell damit auf eine Schrödingergleichung (wie beim H-Atom) und geben das Potential vor. Hier stellte sich schon zuvor die Frage, wie man einen für die Näherung sinnvollen Ort des Potentialsprungs erhält.

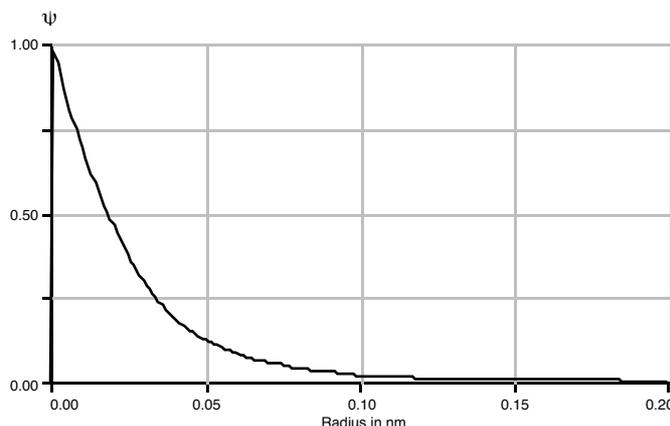


Das Modell ist nur um den e-Teil erweitert worden. Zuerst betrachten wir das He<sup>+</sup>-Ion, in dem nur ein Elektron an den He-Kern mit einem Eigenwert von **W<sub>1</sub> = -54.4 eV** gebunden ist. Dieses Elektron erfährt keine Abschirmung. Sein e-Teil ist links abgebildet. Die Hälfte der Ladung ist beim Radius r=0.033 nm erreicht. Dies kann ein sinnvoller Wert für den Potentialübergang sein.



- $e\text{-Teil}_1(t) = e\text{-Teil}_1(t - dt) + (u\_qu\_1) * dt$   
INIT  $e\text{-Teil}_1 = 0$   
INFLOWS:  
 $u\_qu\_1 = u\_1^2/c\_1$
- $us\_1(t) = us\_1(t - dt) + (Krümm\_1) * dt$   
INIT  $us\_1 = 1$   
INFLOWS:  
 $Krümm\_1 = -c\_SGL*(Wn\_1-V\_1)*u\_1$
- $u\_1(t) = u\_1(t - dt) + (Steig\_1) * dt$   
INIT  $u\_1 = 0$   
INFLOWS:  
 $Steig\_1 = us\_1$
- $c\_1 = 4.0e-32$
- $c\_Cb = e/(4*pi*epsilon)$
- $c\_SGL = e*4*pi^2*2*m/h^2 \{1/Jm^2\}$
- $e = 1.602e-19$
- $epsilon = 8.854e-12$
- $h = 6.626e-34 \{Js\}$
- $m = 9.109e-31 \{kg\}$
- $psi\_1 = u\_1/r/SQRT(c\_1)$
- $psi\_qu\_1 = psi\_1^2$
- $r = time \{m\}$
- $V\_1 = IF r>3.3e-11 THEN -c\_Cb/r ELSE -2*c\_Cb/r$
- $Wn\_1 = -39.6$

Potential

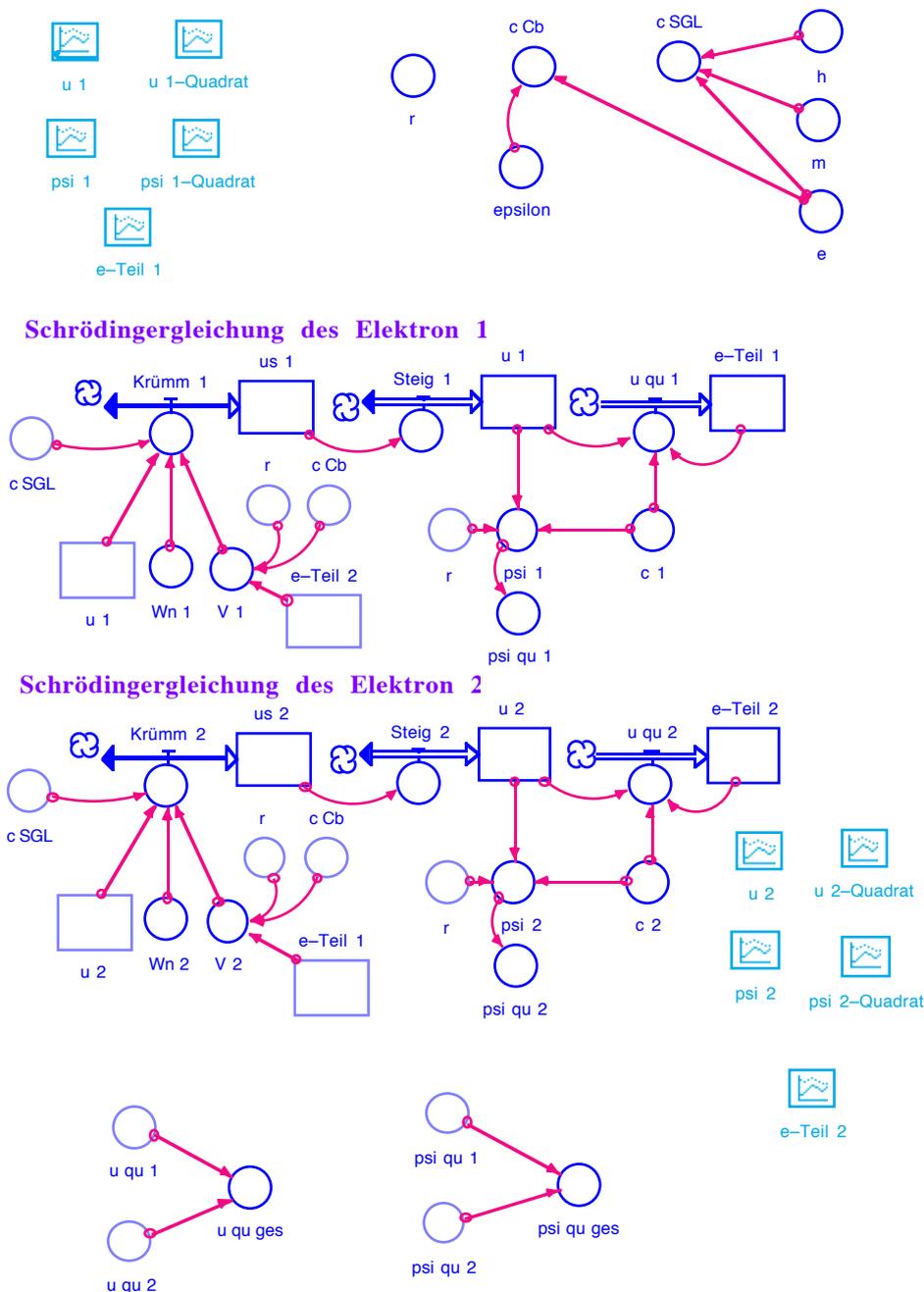


Grundzustand 1s im He-Atom  $W_1 = -39.6 \text{ eV}$

Dies sind die Gleichungen zu dem oben abgebildeten Modell. Sie unterscheiden sich, verglichen zum Modell des H-Atoms, nur im Potential. Dieses wurde mit einer IF-THEN-Bedingung in zwei Teile getrennt. Bei Radien kleiner  $3.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$  ist das Kernpotential nicht abgeschirmt, bei größeren Radien wirkt die volle Abschirmung. Die Verteilungsfunktion, die die Randbedingungen erfüllt (siehe links), besitzt einen Eigenwert von  $W_1 = -39.6 \text{ eV}$ . Beide Elektronen besitzen die gleiche Verteilungsfunktion und den gleichen Eigenwert. Sie sind beide im 1s-Zustand gebunden, weshalb sie beide durch die selbe Schrödingergleichung beschrieben werden können.

Nachdem wir über eine grobe Näherung eine Abschätzung der Bindungsenergie erhalten haben, wollen wir ein sogenanntes **selbstkonsistentes Modell** aufstellen. In diesem werden schrittweise die e-Teile aus den Verteilungsfunktionen berechnet und in die Schrödingergleichungen eingesetzt. Wir erhalten zwei Schrödingergleichungen, die über die e-Teile miteinander verbunden sind.

## Selbstkonsistentes STELLA-Modell des He-Atoms



Der e-Teil der beiden Ladungswolken wird durch Probieren so normiert, daß er für große Radien gegen 1 läuft. Der e-Teil des Elektron 1 wird schrittweise aus der u-Funktion berechnet (in SGL des Elektron 1), in das Potential der SGL des Elektron 2 eingesetzt und umgekehrt. Dies bedeutet, daß während der Berechnung der Verteilungsfunktionen der abschirmende Effekt eines Elektrons in das Potential der jeweils anderen Schrödingergleichung eingeht, wodurch die beiden Gleichungen nicht mehr unabhängig voneinander sind. Dies passiert mit einem sogenannten "Ghost" (die schraffierten Kästen im linken unteren Bereich der beiden Modelle der Schrödingergleichungen), der die Verbindung der zwei Gleichungen deutlich macht. Die durch diese Kästen repräsentierten Variablen sind die selben e-Teile, die durch Aufintegrieren der

u-Funktionen berechnet werden. Die Verbindung über einen "Ghost" ist nur aus Gründen der Übersichtlichkeit verwendet worden.

Die Gesamtladungswolke (und auch die Gesamt- u- und  $\psi$ - Funktion) erhält man aus Addition der Einzelfunktionen 1 und 2. Dies geschieht im unteren Teil des Modells.

- $e\text{-Teil}_1(t) = e\text{-Teil}_1(t - dt) + (u_{qu_1}) * dt$   
INIT  $e\text{-Teil}_1 = 0$   
INFLOWS:  
  $u_{qu_1} = \text{IF}(e\text{-Teil}_1 < 1) \text{ THEN}(u_1^2/c_1) \text{ ELSE}(0)$
- $e\text{-Teil}_2(t) = e\text{-Teil}_2(t - dt) + (u_{qu_2}) * dt$   
INIT  $e\text{-Teil}_2 = 0$   
INFLOWS:  
  $u_{qu_2} = \text{IF}(e\text{-Teil}_2 < 1) \text{ THEN}(u_2^2/c_2) \text{ ELSE}(0)$
- $us_1(t) = us_1(t - dt) + (\text{Krümm}_1) * dt$   
INIT  $us_1 = 1$   
INFLOWS:  
  $\text{Krümm}_1 = -c_{SGL} * (Wn_1 - V_1) * u_1$
- $us_2(t) = us_2(t - dt) + (\text{Krümm}_2) * dt$   
INIT  $us_2 = 0$   
INFLOWS:  
  $\text{Krümm}_2 = -c_{SGL} * (Wn_2 - V_2) * u_2$
- $u_1(t) = u_1(t - dt) + (\text{Steig}_1) * dt$   
INIT  $u_1 = 0$   
INFLOWS:  
  $\text{Steig}_1 = us_1$
- $u_2(t) = u_2(t - dt) + (\text{Steig}_2) * dt$   
INIT  $u_2 = 0$   
INFLOWS:  
  $\text{Steig}_2 = us_2$
- $c_1 = 4.74e-33$
- $c_2 = 4.4e-31$
- $c_{Cb} = e / (4 * \pi * \epsilonpsilon)$
- $c_{SGL} = e * 4 * \pi^2 * 2 * m / h^2$
- $e = 1.6022e-19$
- $\epsilonpsilon = 8.8542e-12$
- $h = 6.6262e-34$
- $m = 9.1095e-31$
- $\psi_1 = u_1 / r / \text{SQRT}(c_1)$
- $\psi_2 = u_2 / r / \text{SQRT}(c_2)$
- $\psi_{qu_1} = \psi_1^2$
- $\psi_{qu_2} = \psi_2^2$
- $\psi_{qu\_ges} = \psi_{qu_1} + \psi_{qu_2}$
- $r = \text{time}$
- $u_{qu\_ges} = u_{qu_1} + u_{qu_2}$
- $V_1 = -c_{Cb} * (2 - e\text{-Teil}_2) / r$
- $V_2 = -c_{Cb} * (2 - e\text{-Teil}_1) / r$
- $Wn_1 = -54.4$
- $Wn_2 = -1.89$

Das eben gesagte läßt sich auch in den nebenstehenden Modellgleichungen wiederfinden. Diese unterteilen sich in Berechnung der e-Teile, der u-Funktionen und der ersten und zweiten Ableitung der u-Funktionen. Darunter befinden sich die Definitionen und Angaben für  $\psi$ ,  $\psi^2$ , die Potentiale und die Energieeigenwerte.

Das Aufintegrieren der e-Teile wurde mit Zuwachs bzw. Zuwachs\_2 bezeichnet.

### Das Zustandsschema des He-Atoms

Um einen Zustand eines He-Atoms vollständig zu beschreiben, müssen die Verteilungsfunktionen beider Elektronen angegeben werden. Die Eigenenergie ist die Summe der Bindungsenergien beider Elektronen. Auf der nächsten Seite ist das Zustandsschema von Helium abgebildet. Zwischen dem Zustand (1s)(3s) (dies bedeutet, daß sich ein Elektron im 1s-Zustand befindet und eines im 3s-Zustand) und dem zweifach ionisierten He-Atom ( $\text{He}^{2+}$ ) befinden sich noch weitere Zustände, die nicht angegeben sind. Die Energie  $W = 0 \text{ eV}$  ist auf das zweifach ionisierte Atom festgelegt. Die

Zustandsenergien zeigen, daß die Energie des Elektrons im 1s-Zustand vom Zustand des anderen Elektrons abhängt. Es ist daher nicht mehr möglich eine einzige Energie eines Elektrons im 1s-Zustand anzugeben. Sie ist abhängig vom Zustand des anderen Elektrons.



Die Energiewerte und  $\psi$ -Funktionen sind mit STELLA berechnet und weichen wegen der angesetzten Näherung etwas von den experimentellen Werten ab. Die verwendete Näherungsmethode war hier das selbstkonsistente Modell. Das Energieniveauschema zeigt die Gesamtenergie des Systems in seinem jeweiligen Zustand; die  $\psi$ -Funktionen beziehen sich auf ein einzelnes Elektron. "ionisiert" bedeutet, daß das Elektron nicht mehr an den Kern gebunden ist. Die Energieskala auf der linken Seite hat nur bis zum einfach ionisierten He-Atom eine maßstabgetreue Skala, darüber ist sie zusammengedrückt.

**Grundzustand (1s)<sup>2</sup>:** Unter Normalbedingungen (z.B. das Helium in der Luft) befinden sich He-Atome in diesem Zustand niedrigster Energie. Beide Elektronen sind im 1s-Zustand. Die Energie beträgt  $W_{(1s)^2} = -73.8 \text{ eV}$ .

**Angeregter Zustand (1s)(2s):** Ein Elektron wurde (z.B. durch einen Elektronenstoß) in den 2s-Zustand angehoben. Die Energiedifferenz zum Grundzustand beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)(2s)} - W_{(1s)^2} = -58.6 \text{ eV} + 73.8 \text{ eV} = 15.2 \text{ eV}$ .

**Angeregter Zustand (1s)(3s):** Ein Elektron wurde in den 3s-Zustand angehoben. Die Energiedifferenz beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)(3s)} - W_{(1s)^2} = -56.1 \text{ eV} + 73.8 \text{ eV} = 17.7 \text{ eV}$ . Zwischen diesem Zustand und dem einfach ionisierten He-Atom gibt es noch weitere Zustände, die nicht aufgeführt sind (wie z.B. (1s)(4s), (1s)(5s), ...).

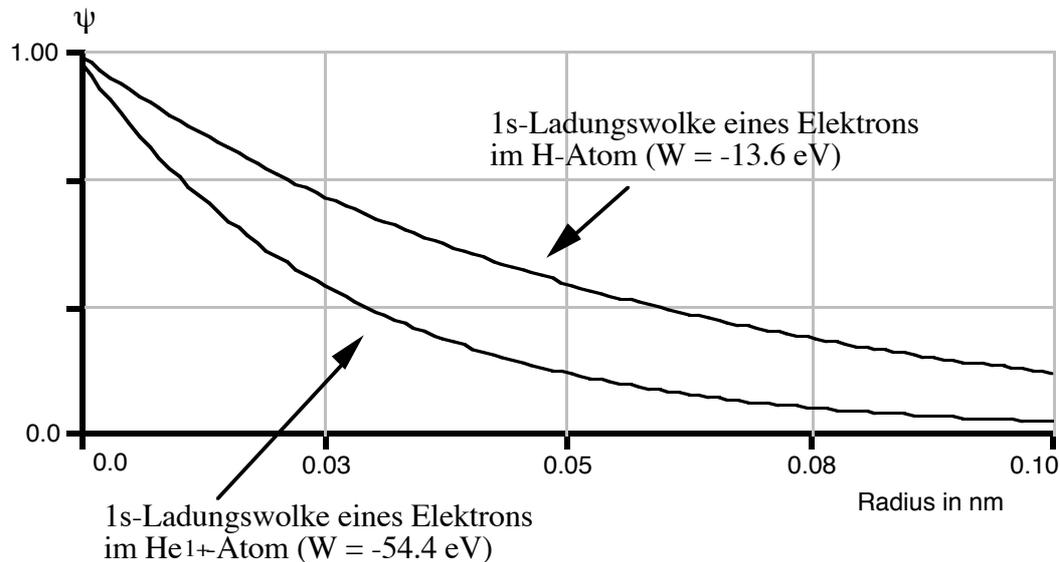
**Einfach ionisierter Zustand (1s):** Ein Elektron wurde dem He-Atom entrissen (z.B. durch einen Stoß mit einem Elektron). Die Energiedifferenz beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)} - W_{(1s)^2} = -54.4 \text{ eV} + 73.8 \text{ eV} = 19.4 \text{ eV}$ . Das einzelne Elektron kann ebenfalls in höhere Zustände versetzt werden. Diese sind nicht im Zustandsschema verzeichnet (wie z.B. (2s), (3s), ...).

**Zweifach ionisierter Zustand:** Beide Elektronen wurden dem He-Atom entrissen. Ein zweifach ionisiertes He-Atom besteht nur noch aus dem Atomkern. Diesem Zustand wird die Nullpunktsenergie  $W = 0 \text{ eV}$  zugewiesen.

Wie läßt sich die unterschiedliche 1s-Zustandsenergie des Elektron 1 bei verschiedenen Zuständen des Elektron 2 erklären? Dazu läßt sich das Bild der Ladungswolke verwenden. Befindet sich das Elektron 2 im 1s-Zustand, so konzentriert sich seine Ladungswolke sehr dicht um den Kern herum. Das Elektron 1 (ebenfalls im 1s-Zustand) wird vom Kern deutlich abgeschirmt. Seine Energie beträgt  $W_{(1s)} = -36.9 \text{ eV}$ . Wird das Elektron 2 in den 2s-Zustand angehoben, ist seine Ladungswolke deutlich ausgedehnter. Das Elektron 1 wird kaum noch abgeschirmt, wodurch sich seine Ladungswolke "zusammenzieht" und seine Energie damit auf  $W_{(1s)} = -53.8 \text{ eV}$  abgesenkt wird (generell gilt: Je größer die effektive anziehende Ladung, desto kleiner die Ladungswolke und tiefer die Zustandsenergie).

Das folgende Bild macht diesen Sachverhalt klarer. Es vergleicht die beiden Ladungswolken eines gebundenen Elektrons im H-Atom und im He<sup>1+</sup>-Atom (Ion). Beide Atome besitzen nur ein Elektron. Wegen der stärkeren Wechselwirkung zwischen Kern und Ladungswolke im He-Ion (man kann auch

sagen: wegen des tieferen Kernpotentials des He-Ions) ist die Ladungswolke dichter um den Kern konzentriert, als es beim H-Atom der Fall ist. Die dichtere Bindung führt gleichzeitig zu einer stärkeren Bindungsenergie (-54.4 eV beim He-Ion und -13.6 eV beim H-Atom). Die Ladungswolke des He-Ions ist damit kleiner als die des H-Atoms. Vereinfacht läßt sich sagen, daß das He-Ion kleiner als das H-Atom ist. (Dies gilt für beide Atome im Grundzustand; die Elektronen befinden sich im 1s-Zustand).



### 4.3 Experimentell meßbare Größen des He-Atoms

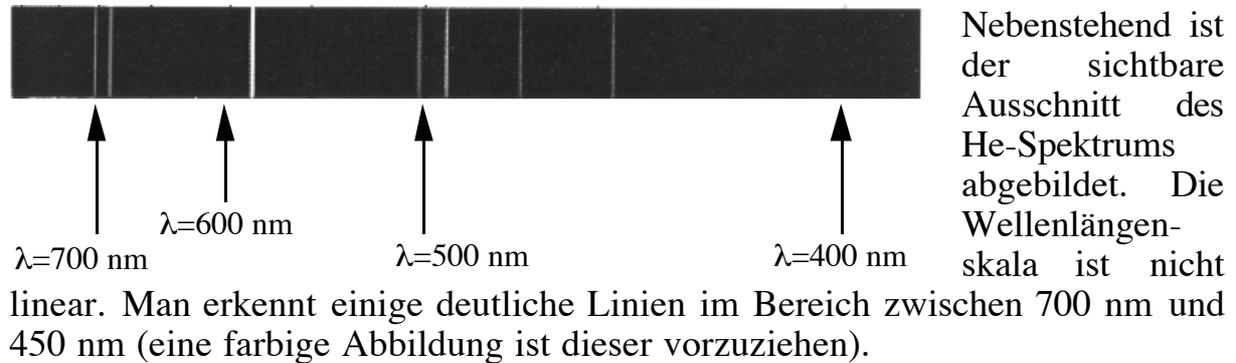
Helium kommt unter natürlichen Umweltbedingungen (Raumtemperatur, Atmosphärendruck) als monoatomares Gas vor. Die einzelnen He-Atome gehen keine Verbindungen mit anderen Atomen ein, weshalb man Helium zu den Edelgasen zählt. Wasserstoff dagegen liegt bei Raumtemperatur als H<sub>2</sub> vor; zwei Wasserstoffatome sind aneinander gebunden. Warum Helium so "ungern" Verbindungen mit anderen Elementen eingeht, wird erst klar, wenn wir mehr Informationen über das Verhalten von gebundenen Elektronen in höheren Atomen (wie Lithium) und Atombindungen (Kapitel 5) gesammelt haben.

Der monoatomare, gasförmige Zustand macht Helium für uns zu einem leicht handhabbaren Studienobjekt. Das in einer Glasröhre eingeschlossene He-Gas kann durch Elektronenstöße direkt angeregt werden (beim gleichen Versuch mit Wasserstoff mußten wir zuerst die H<sub>2</sub>-Moleküle in H-Atome aufspalten, bevor wir die Atomspektren beobachten konnten; siehe Kapitel 3.8.1 (Das Wasserstoffspektrum)). Ebenso läßt sich die Ionisationsenergie bereits bei Raumtemperatur bestimmen.

Da Helium keine Verbindungen eingeht, ist auch kein kovalenter Bindungsradius in den Tabellen zu finden (da dieser nur an einem Molekül bestimmt werden kann; siehe Kapitel 3.8.4 (Experimentelle Bestimmung der Atomradien)). Es ist jedoch ein Größenvergleich zwischen Helium und Wasserstoff über den Radius aus der gaskinetischen Theorie möglich.

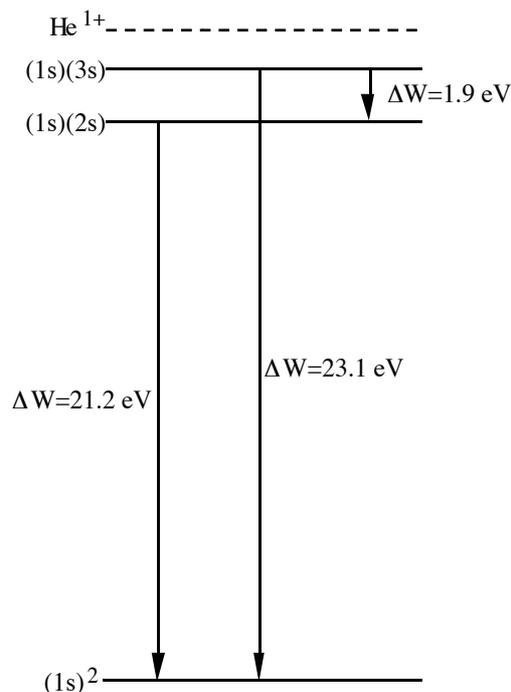
## Das He-Spektrum

Wie auch beim Wasserstoffatom zeigt das sichtbare Spektrum (zwischen 400nm und 800 nm) des Helium nur einen kleinen Ausschnitt der Spektrallinien. Ein weitaus größerer Teil der Linien ist für das menschliche Auge nicht sichtbar, da es im ultravioletten oder infraroten Bereich liegt.



Betrachten wir dazu die mit Stella berechneten Energien der Zustände des He-Atoms. Eine Spektrallinie entsteht beim Übergang von einem angeregten in einen niedrigeren Zustand. Wir haben zuvor schon die Energiedifferenzen einiger Übergänge berechnet. Diese werden in der folgenden Tabelle den experimentell bestimmten Werten gegenübergestellt (siehe Tabellenwerke).

Übergang	Mit STELLA berechnete Energiedifferenz	Mit STELLA berechnete Wellenlänge	Experimentell bestimmte Wellenlänge	Experimentell bestimmte Energiedifferenz	Farbe
$(1s)(2s) \rightarrow (1s)^2$	15.2 eV	81.6 nm	58.4 nm	21.2 eV	UV
$(1s)(3s) \rightarrow (1s)^2$	17.7 eV	70.0 nm	53.7 nm	23.1 eV	UV
$(1s)(3s) \rightarrow (1s)(2s)$	2.5 eV	496 nm	668 nm	1.9 eV	rot

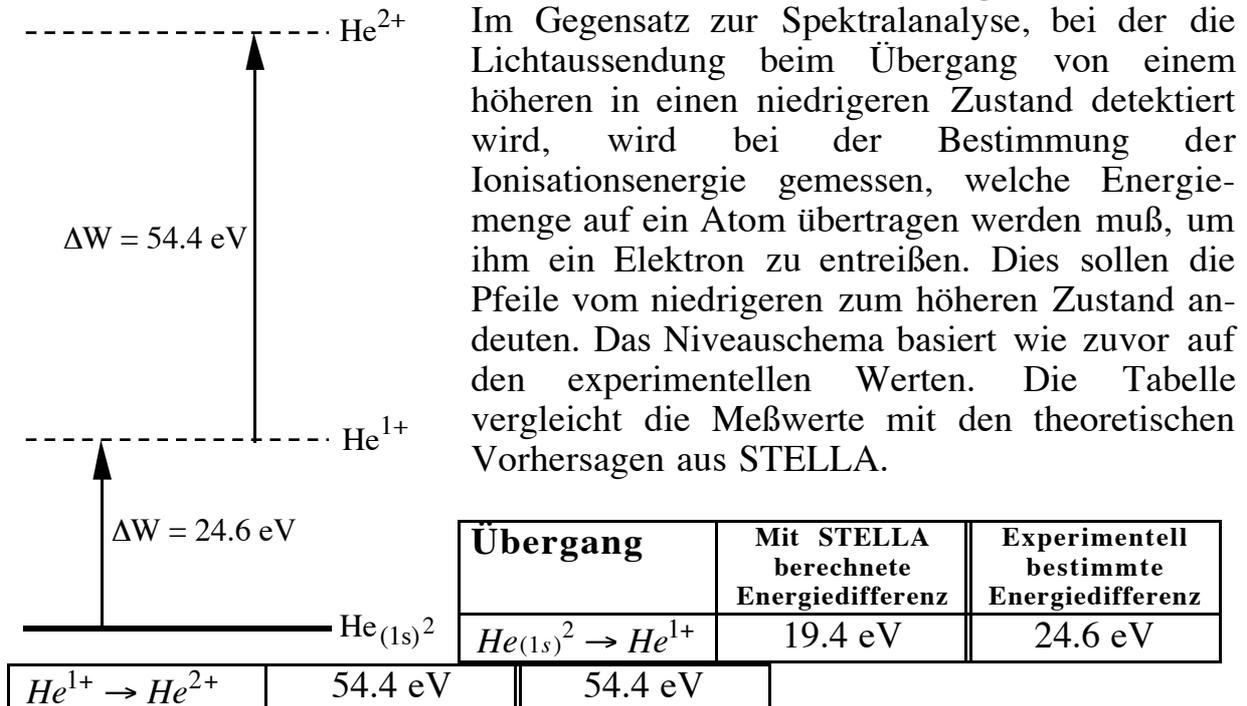


Das nebenstehende Energieniveauschema basiert auf experimentellen Werten. Beim Übergang von  $(1s)(3s)$  nach  $(1s)(2s)$  gibt das He-Atom sichtbares Licht der Energie  $\Delta W = 1.9 \text{ eV}$  ab, was einer Wellenlänge  $\lambda = 668 \text{ nm}$  entspricht. Diese rote Linie läßt sich deutlich im oben abgebildeten He-Spektrum erkennen. Das Niveauschema zeigt weiterhin zwei Übergänge, die Licht im ultravioletten Bereich aussenden, nämlich die Übergänge  $(1s)(2s) \rightarrow (1s)^2$  und  $(1s)(3s) \rightarrow (1s)^2$ . Die dazugehörigen UV-Linien befinden sich weit rechts außerhalb des oben gezeigten Spektrums. Sie lassen sich mit einem UV-sensiblen Film oder Detektor nachweisen. Die anderen sichtbaren Linien gehören zu Übergängen zwischen höheren Zuständen, die wir nicht mit STELLA berechnet haben.

Die mit STELLA berechneten Werte weichen teilweise bis zu 30% von den experimentell gemessenen Daten ab. Dies zeigt uns, daß die verwendete Näherung der Abschirmung keine idealen Ergebnisse liefert, jedoch von der Größenordnung her korrekte Angaben macht. Da die  $\psi$ -Funktionen gegenüber Variationen der Energie sehr unempfindlich sind, ist bei ihnen die Abweichung zu den exakt berechneten  $\psi$ -Funktionen sehr gering.

### Ionisation

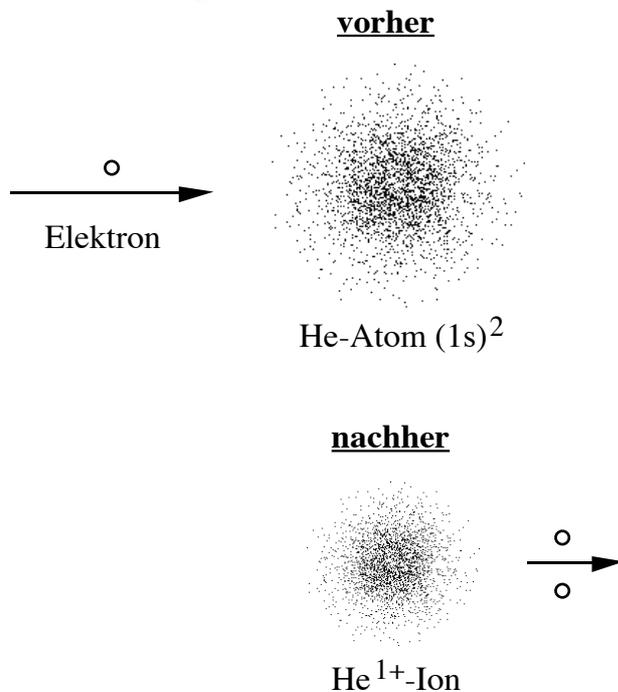
Die Ionisationsenergie des Helium läßt sich analog zu dem in Kapitel 3.8.3 (Ionisation) beschriebenen Verfahren bestimmen. Allerdings besitzt das Helium zwei Ionisationszustände, nämlich das einfach ionisierte und das zweifach ionisierte Atom, wie im Niveauschema zur Ionisation unten abgebildet.



Der vorhergesagte Wert aus dem STELLA-Modell für den Übergang vom neutralen zum einfach ionisierten Atom weicht um etwa 25% von dem Meßwert ab. Diese Beobachtung hatten wir schon zuvor bei den Übergängen zwischen den Zuständen festgestellt. Der Übergang vom einfach zum zweifach ionisierten Atom wird dagegen korrekt vorhergesagt. Die Abweichung ist ebenso gering, wie die theoretischen Vorhersagen der Zustände des Wasserstoffatoms in Kapitel 3. Die Erklärung dafür ist im STELLA-Modell zu finden. Der Übergang von  $He_{(1s)^2}$  nach  $He^{1+}$  benötigt noch die Näherungsrechnung der Abschirmung für den Grundzustand  $He_{(1s)^2}$ . Der Übergang von  $He^{1+}$  nach  $He^{2+}$  beinhaltet nur noch die Beschreibung eines Elektrons. Die Näherung der Abschirmung wird nicht benötigt, da das Elektron überall die volle Kernladung von +2e "sieht". Die Beschreibung des He-Atoms reduziert sich damit auf eine Schrödungsgleichung, die (ebenso wie beim Wasserstoffatom) die experimentellen Werte korrekt vorhersagt.

Weshalb man zum Abtrennen des ersten Elektrons vom Atom deutlich weniger Energie ( $\Delta W = 24.6 \text{ eV}$ ) benötigt, als zum Abtrennen des zweiten Elektrons

( $\Delta W = 54.4 \text{ eV}$ ), läßt sich nochmals mit der Ladungswolkendarstellung erklären. Wenn man das erste Elektron vom Kern trennt, wird dieses mit zunehmender Entfernung nur noch die effektive Kernladung  $+1e$  "sehen", da die zweite Kernladung vom gebundenen Elektron abgeschirmt wird. Man wird daher weniger Energie aufwenden müssen, das erste Elektron vom Kern zu entfernen, als man für das zweite Elektron benötigt, das wegen der fehlenden Abschirmung überall die volle Kernladung  $+2e$  "erfährt".



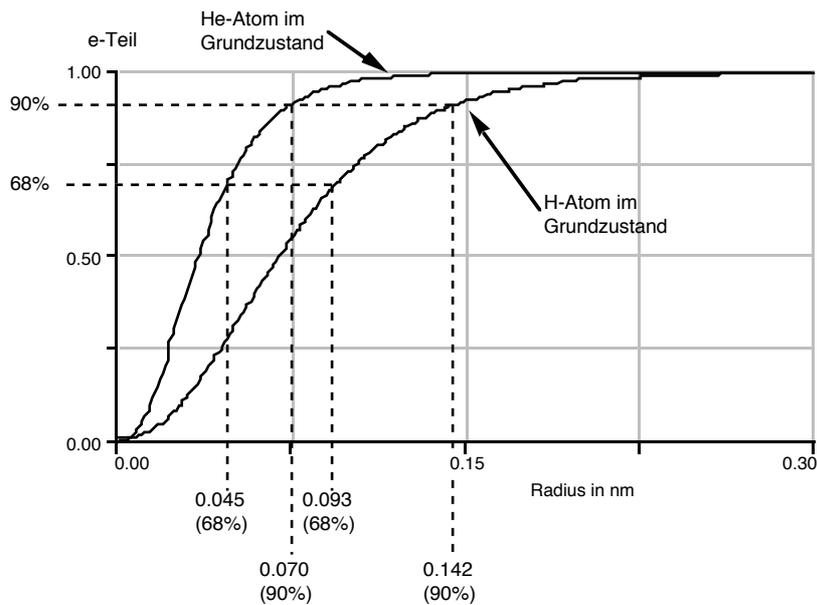
Ein zweiter Effekt vermindert die Ionisationsenergie des ersten Elektrons um einen weiteren Betrag. Während das erste Elektron dem Kern entrissen wird, wird die Ladungswolke des zweiten Elektrons zusammengezogen, da die Abschirmung des ersten Elektrons entfernt wird. Dieser "Energiegewinn" vermindert die Ionisationsenergie des Elektron 1. Nebenstehend ist dieser Vorgang schematisch abgebildet. Ein freies Elektron trifft auf ein He-Atom im Grundzustand und überträgt Energie auf das Atom. Der Energieübertrag reicht aus, um dem He-Atom ein Elektron zu entreißen. Die fehlende

Abschirmung hat zur Folge, daß sich die Ladungswolke zusammenzieht. Die Gesamtenergie von freiem Elektron und He-Atom müssen vorher und nachher gleich sein (Energieerhaltung). Die Wechselwirkung des freien Elektrons erfolgt mit dem gesamten Atom. Aus der Sichtweise der Zustandsbeschreibung kann man nur Aussagen über das System vorher und nachher machen, nicht aber über den Prozeß selbst.

### Atomradius

Wie schon ausführlich im Kapitel 3.8.4 (Experimentelle Bestimmung der Atomradien) besprochen wurde, ist der Radius eines Atoms sowohl aus experimenteller Sicht, als auch aus der Sicht der Theorie ( $\psi$ -Funktionen), eine definierte Größe. Um die Größe zweier Atome vergleichen zu können, muß von experimenteller Seite für beide Atome das gleiche Meßverfahren verwendet werden (falls dies überhaupt möglich ist).

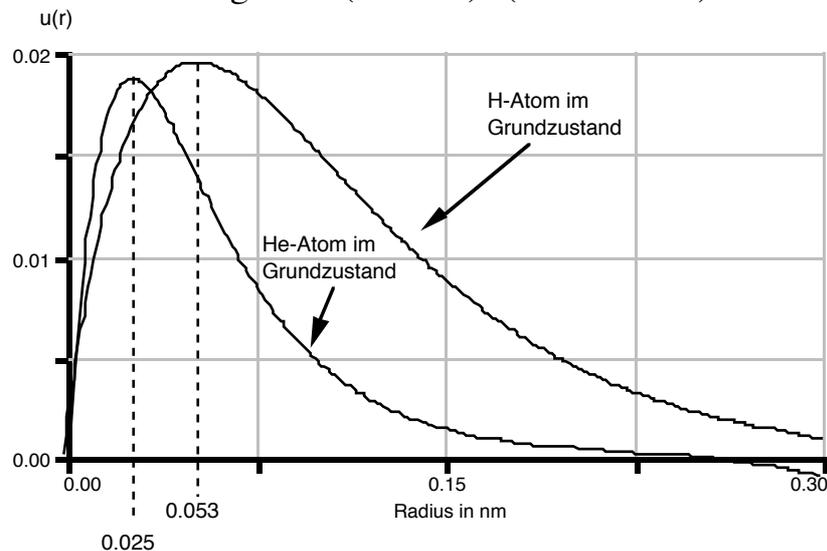
In der Theorie muß man eine einheitliche Definition des Radius vorgeben. Der Radius kann zum Beispiel der Abstand vom Atomkern sein, innerhalb dessen sich eine bestimmte Prozentzahl der Gesamtladung befindet. Wir hatten beim Wasserstoffatom zwei Angaben, nämlich 68% und 90% gemacht. Man könnte ebenso den letzten Wendepunkt der  $u(r)$ -Funktion angeben.



Die folgenden Graphen vergleichen die aus dem STELLA-Modell gewonnenen Werte der Radien von Wasserstoff und Helium. Definiert man den Radius bei 68% des e-Teils, erhält man für Wasserstoff  $r=0.093\text{nm}$  und für Helium  $r=0.045\text{nm}$ . Daraus kann man ablesen, daß das He-Atom im Grundzustand deutlich

größer als das H-Atoms im Grundzustand ist. Dazu ist noch zu erwähnen, daß das Heliumatom zwei Elektronen an sich bindet und der e-Teil zu großen Werten hin gegen zwei laufen sollte. Zum Vergleich wurde jedoch der e-Teil des He-Atoms auf den des H-Atoms angeglichen.

Definiert man den Atomradius bei 90% des e-Teils, zeigen die Radien für Wasserstoff ( $r = 0.142 \text{ nm}$ ) und Helium ( $r = 0.070 \text{ nm}$ ) einen ähnlichen Zusammenhang von  $r(\text{Helium})/r(\text{Wasserstoff}) = 1/2$ .



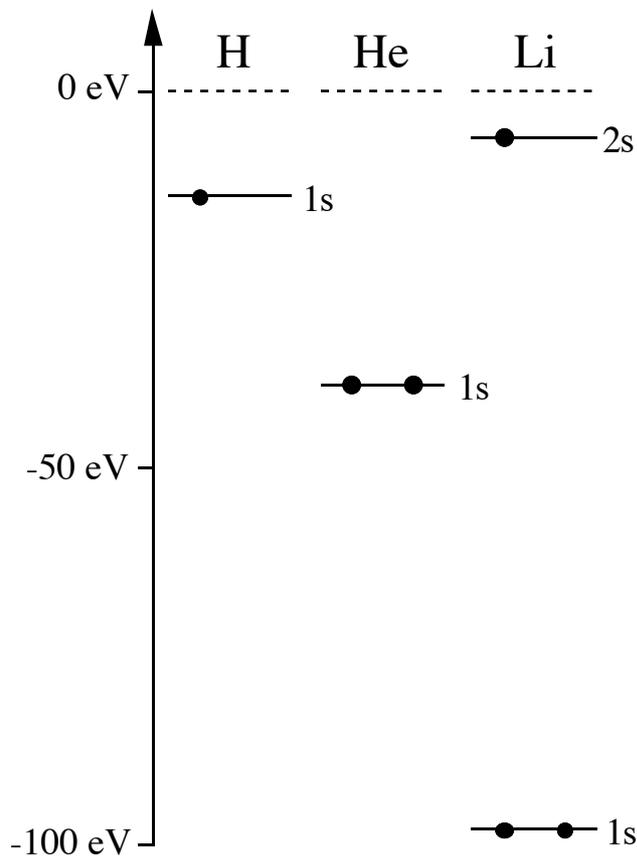
Auch bei der dritten Definition des Atomradius läßt sich ein ähnliches Verhältnis feststellen. Die  $u(r)$ -Funktion des H-Atoms besitzt das Maximum bei  $r=0.053\text{nm}$ , während die Funktion des He-Atoms ihr Maximum bei  $r=0.025\text{nm}$  hat.

Experimentell lassen sich die Größen der beiden Atome über die gaskinetische Theorie vergleichen. Die Messungen bestätigen, daß das Heliumatom im Grundzustand ( $r=0.110\text{nm}$ ) kleiner als das Wasserstoffatom im Grundzustand ( $r=0.126\text{nm}$ ) ist. Die experimentellen Radien ergeben sich aus dem Eigenvolumen der Atome. Obwohl sich experimentell nicht der starke Größenunterschied feststellen läßt, den man aus der Theorie ablesen kann, ist zumindest qualitativ eine korrekte Aussage aus der Theorie zu ziehen. Die kompaktere Ladungswolke des Heliumatoms hat zur Folge, daß das Eigenvolumen der Atome kleiner ist als das der Wasserstoffatome.

## 4.4 Das Lithium-Atom

Als nächsten Schritt wollen wir das Lithium-Atom untersuchen, dessen Kern drei positive Elementarladungen ( $+3e$ ) trägt. Um ein insgesamt neutrales Li-Atom zu erreichen, muß der Kern daher drei Elektronen an sich binden. Im Wasserstoffatom befindet sich im Grundzustand des Atoms das Elektron im  $1s$ -Zustand. Der Zustand des Atoms ist damit durch den Zustand des Elektrons beschrieben. Im Helium-Atom haben wir zwei Elektronen, die sich im Grundzustand des Atoms beide im  $1s$ -Zustand befinden. Durch Angabe der beiden Zustände der Elektronen läßt sich der Zustand des Atoms festlegen. Wir hatten gesehen, daß der Zustand eines Elektrons und der Zustand eines Atoms im allgemeinen nicht das gleiche ist.

Der Zustand eines Lithium-Atoms wird durch die Angabe der Zustände der drei Elektronen festgelegt. Ein grundlegendes Prinzip der Quantenmechanik fordert, daß sich höchstens zwei Elektronen des Li-Atoms im  $1s$ -Zustand "aufhalten" dürfen. Im Grundzustand des Li-Atoms sind zwei Elektronen im  $1s$ -Zustand; das dritte Elektron wird einen möglichst niedrigen Zustand wählen, nämlich den  $2s$ .



Das nebenstehende Bild faßt die bisherigen Ergebnisse nochmals zusammen. Im H-Atom ist ein Elektron gebunden. Im Grundzustand des Atoms befindet sich dieses im  $1s$ -Zustand (mit einem Punkt in der Abbildung angedeutet) mit einer Energie von  $W_{(1s)} = -13.6\text{eV}$ . Das He-Atom im Grundzustand bindet zwei Elektronen jeweils im  $1s$ -Zustand (mit zwei Punkten in der Abbildung angedeutet) mit einer Energie von  $W_{(1s)} = -39\text{eV}$ . Die Energie des Grundzustands des Atoms ist damit  $W_{(1s)2} = 2 \cdot (-39\text{eV}) = -78\text{eV}$ . Im Lithiumatom im Grundzustand sind drei Elektronen gebunden; zwei im  $1s$ -Zustand (mit zwei Punkten in der Abbildung angedeutet) mit einer Energie von  $W_{(1s)} = -98\text{eV}$  und eines im  $2s$ -Zustand (mit einem

Punkt in der Abbildung angedeutet) mit  $W_{(2s)} = -6\text{eV}$ . Die Gesamtenergie des Atoms ist damit  $W_{(1s)2(2s)} = 2 \cdot (-98\text{eV}) + (-6\text{eV}) = -202\text{eV}$ . Daß sich das dritte Elektron im Lithium nicht auch noch im  $1s$ -Zustand befinden darf, folgt aus den Eigenschaften von Elektronen (bzw. deren Ladungswolken), die später genauer besprochen werden.

### STELLA-Modell des Li-Atoms

Mit unserem bisherigen Wissen über das He-Atom können wir nun ein selbst-konsistentes STELLA-Modell des Lithium-Atoms aufstellen. Dieses besteht aus drei Schrödingergleichungen; jeweils eine pro Elektron:

$$\text{Elektron 1: } u_{\text{Elektron1}}(r) = - 8\pi^2 \cdot 2m/h^2 \cdot (W_{\text{Elektron1}} - V_1(r)) \cdot u_{\text{Elektron1}}(r)$$

$$\text{Elektron 2: } u_{\text{Elektron2}}(r) = - 8\pi^2 \cdot 2m/h^2 \cdot (W_{\text{Elektron2}} - V_2(r)) \cdot u_{\text{Elektron2}}(r)$$

$$\text{Elektron 3: } u_{\text{Elektron3}}(r) = - 8\pi^2 \cdot 2m/h^2 \cdot (W_{\text{Elektron3}} - V_3(r)) \cdot u_{\text{Elektron3}}(r)$$

Das Potential in der jeweiligen Schrödingergleichung eines Elektrons setzt sich aus dem Kernpotential plus den Potentialen der Ladungswolken der beiden anderen Elektronen zusammen.

$$\text{Elektron 1: } V_1(r) = V_{\text{Li-Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung2}}(r) + V_{\text{Abschirmung3}}(r)$$

$$\text{Elektron 2: } V_2(r) = V_{\text{Li-Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung1}}(r) + V_{\text{Abschirmung3}}(r)$$

$$\text{Elektron 3: } V_3(r) = V_{\text{Li-Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung1}}(r) + V_{\text{Abschirmung2}}(r)$$

Das Potential des Lithium-Kerns wird von dessen drei positiven Elementarladungen erzeugt:

$$V_{\text{Li-Kern}}(r) = - \frac{3 \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

Der Faktor 3 kommt von der Kernladung.

Das Potential der jeweiligen Ladungswolke ist wie schon beim He-Atom:

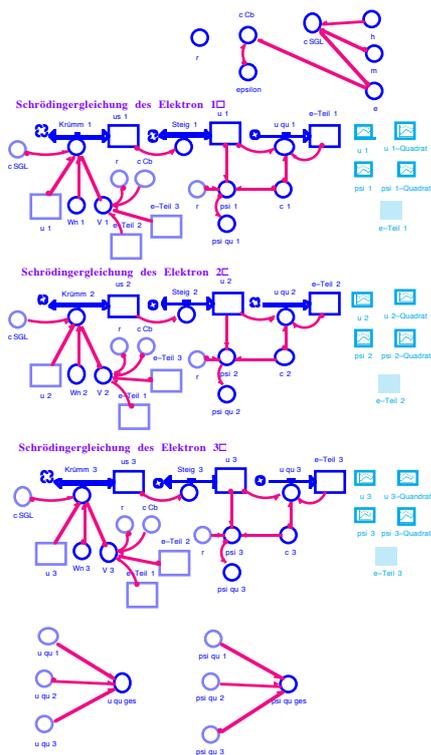
$$V_{\text{Abschirmung}}(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot e_{\text{-Teil}}$$

Für das Potential der Schrödingergleichung des Elektron 1 bedeutet dies z.B.:

$$\begin{aligned} V(r) &= V_{\text{Li-Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung2}}(r) + V_{\text{Abschirmung3}}(r) = \\ &= - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot (3 - e_{\text{-Teil2}} - e_{\text{-Teil3}}) \end{aligned}$$

Die Kernladung wird für das Elektron 1 durch die beiden Ladungswolken der Elektronen 2 und 3 abgeschirmt (entsprechend wird Elektron 2 von 1 und 3 abgeschirmt und Elektron 3 von 1 und 2).

## Selbstkonsistentes STELLA-Modell des Li-Atoms



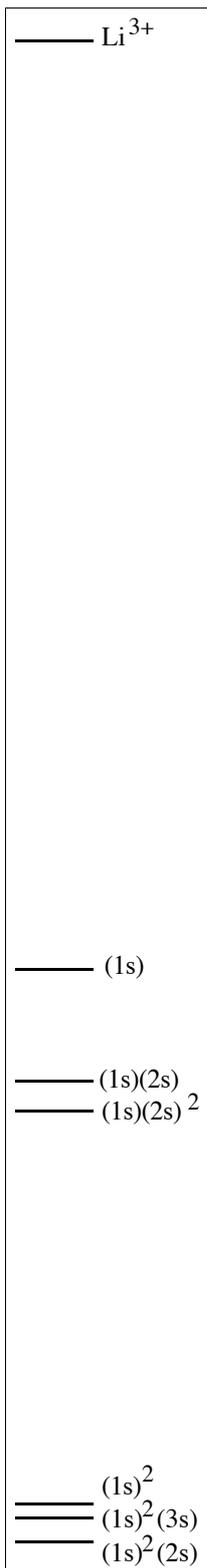
Die drei Gleichungen sind völlig gleich aufgebaut. Der Radius ist in allen drei Gleichungen die selbe Größe. Um eine Größe im STELLA-Modell mehrfach erscheinen zu lassen, erzeugt man von dem ursprünglichen Symbol einen "Ghost" (wurde auch schon im Zusammenhang mit dem STELLA-Modell des Helium besprochen). Die Gleichungen 2 und 3 nehmen über ihre e-Teile Einfluß auf das

Potential von Elektron 1 (entsprechend verhält es sich mit den Gleichungen 2 und 3).

Die Bedingung für einen Zustand des Atoms ist, daß alle drei  $\psi$ -Funktionen für große  $r$  gegen Null streben und ihre e-Teile auf eins normiert sind. Beim Li-Atom kann die Prozdur zum Auffinden dieser Werte sehr zeitaufwendig werden, da sechs Größen angepaßt werden müssen (die drei Energiewerte und die drei Normierungskonstanten der e-Teile). Die zugehörigen Modellgleichungen lassen sich aus dem STELLA-Modell zum Li-Atom entnehmen.

## Zustandsschema des Li-Atoms (Auswahl)

$W_{\text{Li}^{3+}} = -0.0 \text{ eV}$ <hr style="border-top: 1px dashed black;"/> <div style="text-align: center;"> </div> $W_{(1s)} = -122.5 \text{ eV}$ <hr style="border: 1px solid black;"/> <div style="text-align: center;"> </div> $W_{(1s)(2s)} = -138.1 \text{ eV}$ <hr style="border: 1px solid black;"/> <div style="text-align: center;"> </div> $W_{(1s)(2s)^2} = -142.0 \text{ eV}$ <hr style="border: 1px solid black;"/> <div style="text-align: center;"> </div> $W_{(1s)^2} = -193.6 \text{ eV}$ <hr style="border: 1px solid black;"/> <div style="text-align: center;"> </div> $W_{(1s)^2(3s)} = -195.5 \text{ eV}$ <hr style="border: 1px solid black;"/> <div style="text-align: center;"> </div> $W_{(1s)^2(2s)} = -198.4 \text{ eV}$ <hr style="border: 1px solid black;"/>	<b>Elektron 1</b>  ionisiert   $W_{(1s)} = -122.5 \text{ eV}$	<b>Elektron 2</b>  ionisiert  ionisiert  ionisiert   $W_{(1s)} = -121.13 \text{ eV}$	<b>Elektron 3</b>  ionisiert  ionisiert   $W_{(2s)} = -16.92 \text{ eV}$
	 $W_{(1s)} = -119.1 \text{ eV}$	 $W_{(2s)} = -11.46 \text{ eV}$	 $W_{(2s)} = -11.46 \text{ eV}$
	 $W_{(1s)} = -96.78 \text{ eV}$	 $W_{(1s)} = -96.78 \text{ eV}$	ionisiert
	 $W_{(1s)} = -96.7 \text{ eV}$	 $W_{(1s)} = -96.7 \text{ eV}$	 $W_{(3s)} = -2.11 \text{ eV}$
	 $W_{(1s)} = -96.3 \text{ eV}$	 $W_{(1s)} = -96.3 \text{ eV}$	 $W_{(2s)} = -5.83 \text{ eV}$



Die vorhergehende Seite zeigt das Zustandsschema der wichtigsten Zustände. Die gestrichelten Linien zwischen zwei Energiewerten sollen andeuten, daß die Skala an den entsprechenden Stellen gestaucht wurde. Eine lineare Skala zu diesen Zuständen ist links abgebildet.

Wie schon zuvor wird der Zustand des Elektrons durch die Zustände aller Elektronen angegeben (bei Lithium 3). Die  $\psi$ -Funktionen der Elektronen sind rechts neben dem Energieniveauschema abgebildet. Die Energie eines atomaren Zustands ergibt sich aus den einzelnen Energien der Elektronen.

**Grundzustand  $(1s)^2(2s)$ :** Unter Normalbedingungen liegt atomares Lithium in diesem Zustand niedrigster Energie vor.

**Angeregter Zustand  $(1s)^2(3s)$ :** Das Elektron im 2s-Zustand wurde (z.B. durch einen Elektronenstoß) in den 3s-Zustand angehoben. Die Energiedifferenz zum Grundzustand beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)^2(3s)} - W_{(1s)^2(2s)} = -195.5 \text{ eV} + 198.4 \text{ eV} = 2.9 \text{ eV}$ .

**Einfach ionisierter Zustand  $(1s)^2$ :** Das Elektron im 2s-Zustand wurde (z.B. durch einen Elektronenstoß) dem Li-Atom entrissen. Die Energiedifferenz beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)^2} - W_{(1s)^2(2s)} = -193.6 \text{ eV} + 198.4 \text{ eV} = 4.8 \text{ eV}$ .

**Angeregter Zustand  $(1s)(2s)^2$ :** Ein Elektron im 1s-Zustand wurde in den 2s-Zustand angehoben. Die Energiedifferenz beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)(2s)^2} - W_{(1s)^2(2s)} = -142.0 \text{ eV} + 198.4 \text{ eV} = 56.4 \text{ eV}$ .

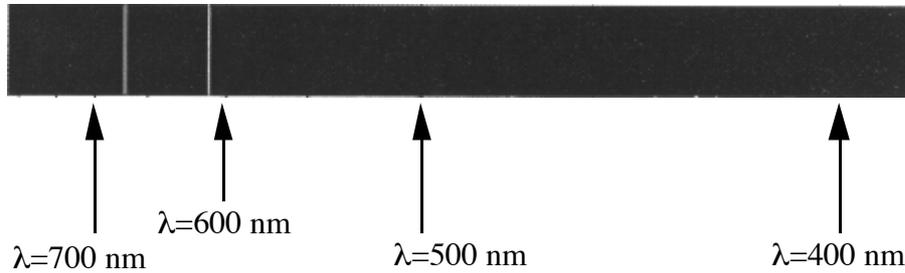
**Weiterer einfach ionisierter Zustand  $(1s)(2s)$ :** Ein Elektron im 1s-Zustand wurde dem Li-Atom entrissen. Die Energiedifferenz beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)(2s)} - W_{(1s)^2(2s)} = -138.1 \text{ eV} + 198.4 \text{ eV} = 60.3 \text{ eV}$ .

**Zweifach ionisierter Zustand  $(1s)$ :** Zu diesem Zustand kommt man, wenn z.B. dem einfach ionisierte Li-Atom im  $(1s)^2$ -Zustand nochmals ein Elektron entrissen wird. Die Energiedifferenz zum Grundzustand beträgt nach der STELLA-Rechnung  $\Delta W = W_{(1s)} - W_{(1s)^2(2s)} = -122.5 \text{ eV} + 198.4 \text{ eV} = 75.9 \text{ eV}$ .

**Dreifach ionisierter Zustand  $Li^{3+}$ :** Alle drei Elektronen sind dem Kern entrissen worden. Diesem Zustand wird die Nullpunktsenergie  $W = 0 \text{ eV}$  zugewiesen.

## 4.5 Experimentell meßbare Größen des Li-Atoms

### Das Lithium-Spektrum



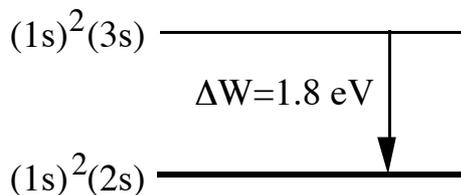
Im sichtbaren Lithium-Spektrum sind nur zwei Linien deutlich zu erkennen. Wie schon beim Helium befinden

sich viele der Übergänge im infraroten und ultravioletten Bereich. Zudem wird die Intensität bei Übergängen zwischen höheren Zuständen deutlich schwächer, so daß auch das hier abgebildete sichtbare Spektrum nur intensitätsstarke Übergänge zeigt.

Unter den mit STELLA berechneten Übergängen befindet sich nur einer, der auch im sichtbaren Spektrum zu beobachten ist.

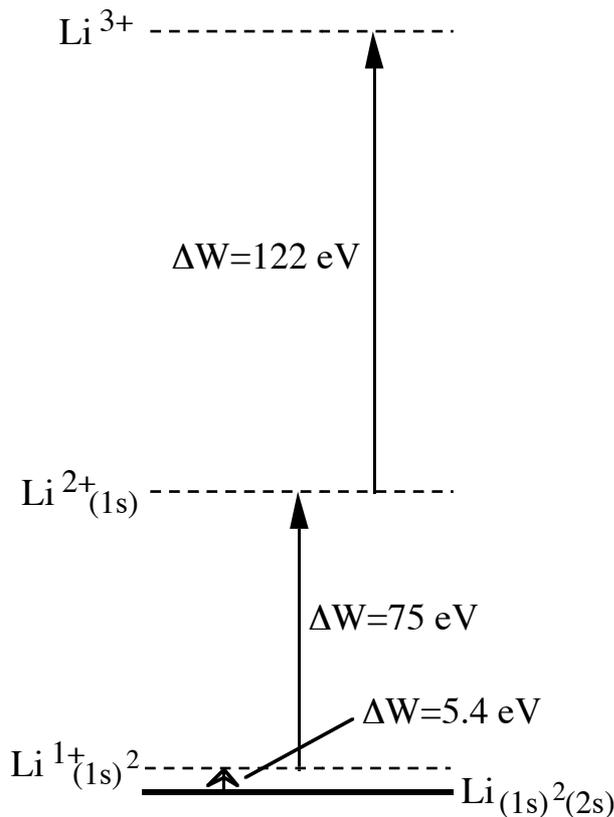
Übergang	Mit STELLA berechnete Energiedifferenz	Mit STELLA berechnete Wellenlänge	Experimentell bestimmte Energiedifferenz	Experimentell bestimmte Wellenlänge	Farbe
$(1s)^2(3s) \rightarrow (1s)^2(2s)$	2.9 eV	428 nm	1.8 eV	671 nm	rot

$\text{Li}^{1+}$  ----- Der mit dem STELLA-Modell theoretisch vorhergesagte Wert weicht wie schon beim Helium deutlich vom experimentellen Ergebnis ab, macht aber von der Größenordnung her eine korrekte Angabe. Der Grund liegt in den über die Abschirmung näherungsweise berechneten Potentiale.



Links ist der untere Ausschnitt des experimentell bestimmten Energieniveauschemas von Lithium abgebildet. Das einfach ionisierte Li-Atom (gestrichelte Linie) befindet sich im  $(1s)^2$ -Zustand.

## Ionisation

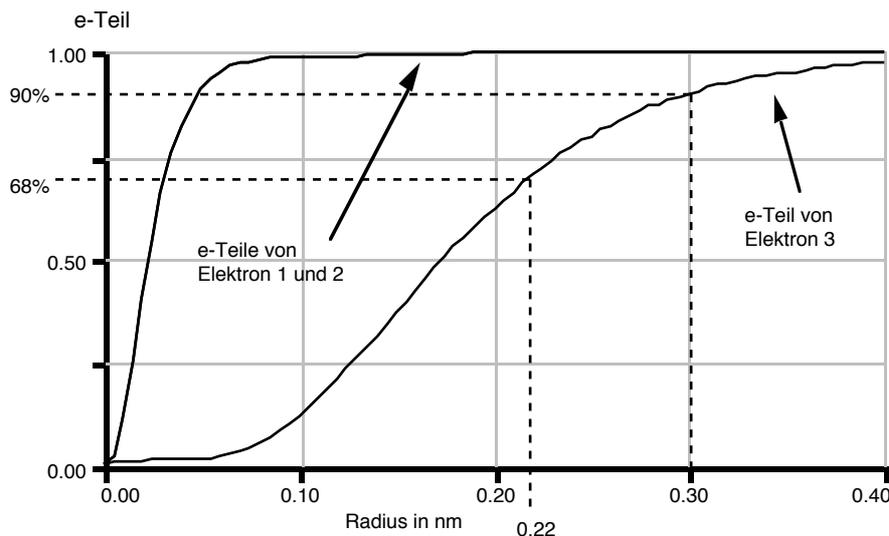


Lithium besitzt drei Ionisationszustände, nämlich das einfach, das zweifach und das dreifach ionisierte Atom, deren Zustände mit den experimentell ermittelten Werten in dem links abgebildeten Niveauschema eingezeichnet sind. Die mit STELLA vorhergesagten Werte sind mit den experimentellen Daten in der folgenden Tabelle aufgelistet:

Übergang	Mit STELLA berechnete Energiedifferenz	Experimentell bestimmte Energiedifferenz
$\text{Li}(1s)^2(2s) \rightarrow \text{Li}^{1+}$	4.8 eV	5.4 eV
$\text{Li}^{1+} \rightarrow \text{Li}^{2+}$	71.1 eV	75 eV
$\text{Li}^{2+} \rightarrow \text{Li}^{3+}$	122.5 eV	122 eV

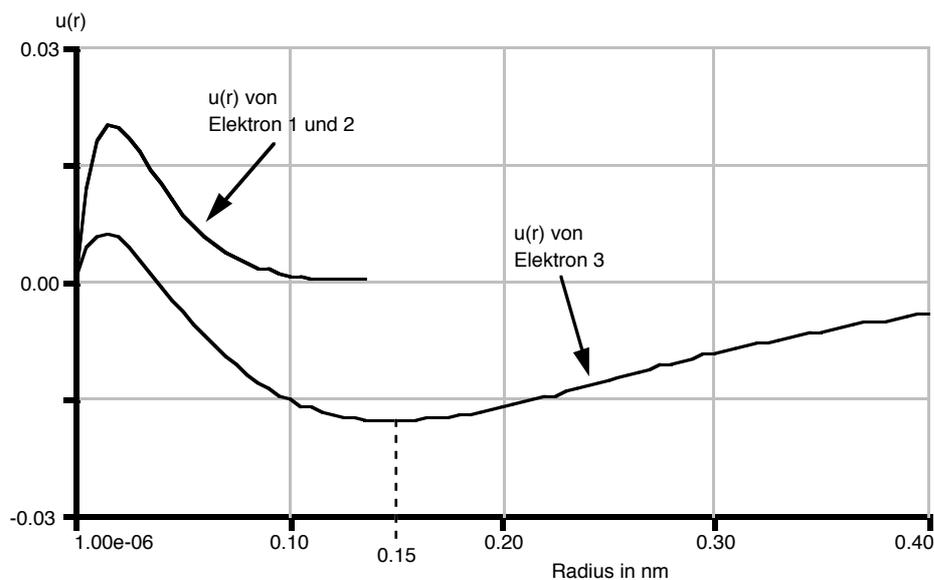
Wie schon beim Helium wird die Energie für die letzte Ionisation ( $\text{Li}^{2+} \rightarrow \text{Li}^{3+}$ ) korrekt vorhergesagt, da für diesen Übergang die Näherung der Abschirmung nicht benötigt wird. Die beiden anderen Werte weichen um einen Prozent von den experimentellen Ergebnissen ab.

## Atomradius



Die Ladungswolke des Li-Atoms im Grundzustand setzt sich aus den drei Ladungswolken der Elektronen zusammen. Nebenstehend sind die e-Teile der drei Elektronen eingezeichnet. Für den Größenvergleich mit anderen

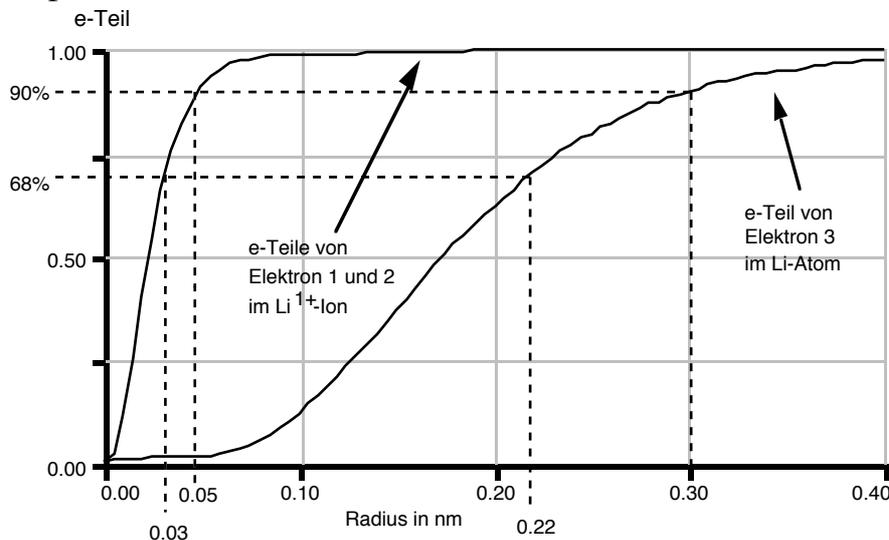
Atomen vergleichen wir den definierten Radius des äußersten Elektrons (bei Lithium das Elektron im 2s-Zustand). Sein e-Teil erreicht bei  $r=0.22\text{nm}$  68% der Gesamtladung, bei  $r=0.30\text{nm}$  90% der Gesamtladung. Verglichen zum H-Atom (68% bei  $r=0.093\text{nm}$  und 90% bei  $r=0.14\text{nm}$ ) ist Lithium damit deutlich größer.



Auch das letzte Maximum der  $u(r)$ -Funktion von Elektron 3 bei  $r=0.15\text{nm}$  deutet an, daß das Li-Atom im Vergleich zum H-Atom ( $r=0.053\text{nm}$ ) deutlich größer ist.

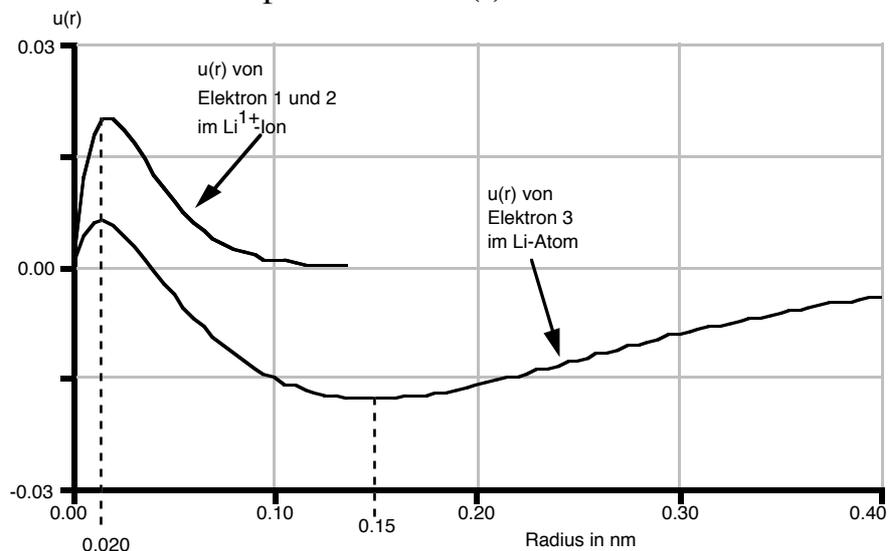
Einen experimentellen Vergleich der beiden Atomgrößen erhalten wir über die Bestimmung des kovalenten Bindungsradius. Das damit gemessene Größenverhältnis zwischen Wasserstoff ( $r=0.053\text{nm}$ ) und Lithium ( $r=0.15\text{nm}$ ) beträgt nahezu 1 zu 5. Qualitativ stimmt diese Aussage mit der theoretischen Vorhersage aus dem STELLA-Modell überein (das Lithiumatom ist deutlich ausgedehnter als das Wasserstoffatom). Vom Zahlenwert ist die Vorhersage zu klein. Der Grund hierfür liegt nicht daran, daß unsere berechneten  $\psi$ -Funktionen große Fehler aufweisen, sondern daß bei der Bindung zweier Atome die Ladungswolken deformiert werden und damit nicht mehr die ursprüngliche atomare Form besitzen. Ein Größenvergleich in der von uns

vorgeschlagenen Form kann daher keine quantitativ korrekten Aussagen machen, sondern gilt eher als eine qualitative Kontrolle der berechneten  $\psi$ -Funktionen. Eine genauere Untersuchung von gebundenen Atomen folgt in Kapitel 5.



Es lässt sich aus den mit STELLA berechneten  $\psi$ -Funktionen auch ein Größenvergleich zwischen dem neutralen Li-Atom im Grundzustand und dem einfach ionisierten Lithium ( $(1s)^2$ ) anstellen. In Kristallgittern gebunden, ist der Radius des

neutralen Lithiumatoms nach experimentellen Untersuchungen ( $r=0.151\text{nm}$ ) etwa doppelt so groß, wie der Radius des  $\text{Li}^{1+}$ -Ions ( $r=0.068\text{nm}$ ). Die theoretischen Vorhersagen mit STELLA bestätigen qualitative diese Aussage, geben jedoch einen zu deutlichen Größenunterschied vor. Die e-Teile der Elektronen im  $1s$ -Zustand im  $\text{Li}^{1+}$ -Ion erreichen eine bestimmte Prozentangabe bei einem sechs bis sieben mal kleineren Radius als der e-Teil des Elektrons im  $2s$ -Zustand im neutralen Lithium. Ähnlich ist es bei den Maxima der entsprechenden  $u(r)$ -Funktionen.



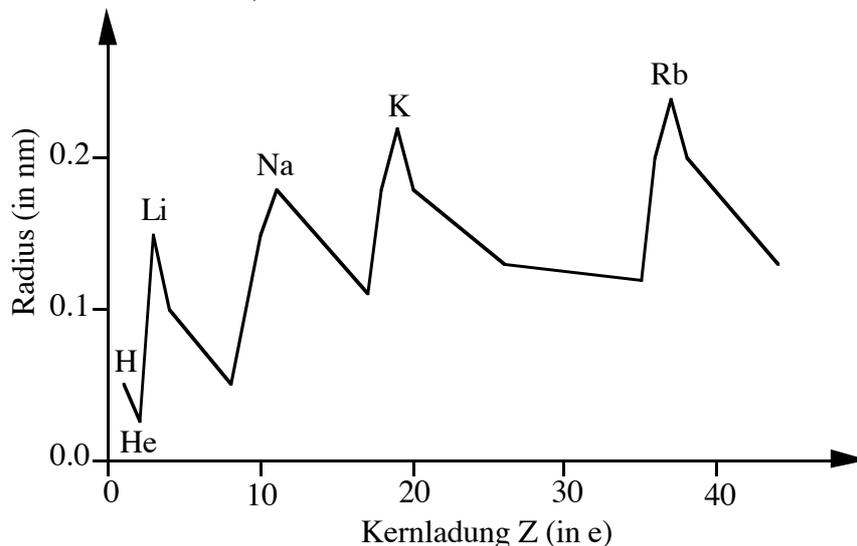
Die deutlich größere Ausdehnung des neutralen Li-Atoms gegenüber dem H-Atom, He-Atom und  $\text{Li}^{1+}$ -Ion ist auf den besetzten  $2s$ -Zustand zurückzuführen. Die  $\psi$ -Funktion des Elektrons in diesem Zustand besitzt einen Knoten und

ist damit (wie wir schon bei den angeregten Zuständen des Wasserstoffatoms gesehen haben) deutlich ausgedehnter.

## 4.6 Höhere Atome

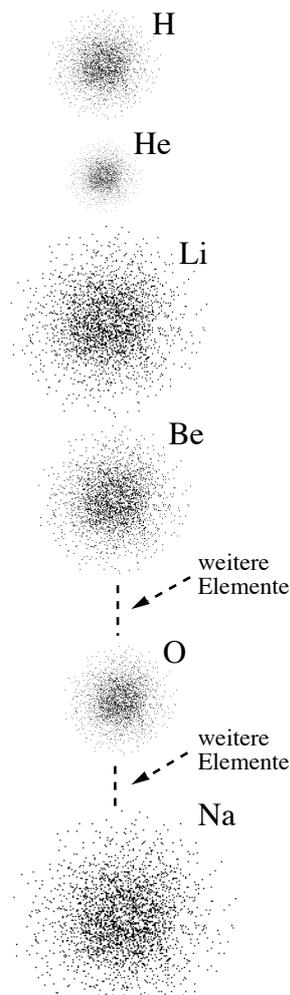
Bis jetzt haben wir die drei leichtesten Elemente Wasserstoff (Kernladung =  $+1e$ ), Helium (Kernladung =  $+2e$ ) und Lithium (Kernladung =  $+3e$ ) kennengelernt. Diese binden entsprechend ein, zwei und drei Elektronen im Grundzustand an sich, um elektrisch neutral zu sein und damit den energetisch niedrigsten Zustand zu erreichen (aus den Rechnungen mit STELLA und den Experimenten konnte man erkennen, daß alle ionisierten Atome energetisch höher liegen). Die Kenntnisse, die wir bis jetzt erworben haben, reichen aus, um den Aufbau aller Elemente und damit das Periodensystem zu verstehen.

Die höheren Elemente nach Lithium unterscheiden sich in ihrer Kernladung und damit auch in der Menge der Elektronen, die sie an sich binden (z.B. Beryllium 4, Bor 5, Kohlenstoff 6, usw.). Wir haben gesehen, daß sich das dritte Elektron im Lithium-Grundzustand im  $2s$ -Zustand befindet. Dies liegt an den elementaren Eigenschaften von Elektronen (Quanten). Aus ihnen folgt, daß im Zustand 1 nur zwei Elektronen sein können, im Zustand 2 acht Elektronen usw. Die Grundlage für die Besetzung von Elektronenzuständen im Atom ist das **Pauliprinzip** (ein elementares Prinzip der Quantenphysik). Es besagt, daß jeder Zustand in einem Atom nur von einem Elektron besetzt werden kann. Der  $1s$ -Zustand besteht also eigentlich aus zwei Zuständen, die wir bis jetzt jedoch nicht unterschiedlich bezeichnet haben. Ebenso ist es mit den acht Zuständen der Quantenzahl 2.  $2s$  benennt nur zwei dieser acht Zustände; weitere sechs haben die Bezeichnung  $2p$ . Sind nun nach zehn Elektronen auch alle Zustände mit der Quantenzahl 2 besetzt, muß sich das elfte Elektron (wie z.B. im Natrium) in den  $3s$ -Zustand setzen.



Nebenstehend ist ein schematischer Verlauf des experimentell bestimmten Atomradius der ersten 45 Elemente in einem Graphen gezeigt. Die Ergebnisse der Meßmethoden wurden so angepaßt, daß ein Größenvergleich der Atome

möglich ist. Bei Lithium, Natrium, Kalium und Rubidium steigt die Atomgröße, verglichen zu den vorherigen Elementen sprunghaft an. Danach sinkt sie wieder kontinuierlich ab.



Die Elemente mit sehr kleinen Radien wie z.B. Helium füllen die Zustände einer Quantenzahl voll auf. Das darauffolgende Element (in unserem Beispiel Lithium) kann das eine zusätzliche Elektron nur in einem Zustand mit höherer Quantenzahl unterbringen. Die höhere Quantenzahl hat zur Folge, daß der Radius im Vergleich zum vorhergehenden Element deutlich größer ist. Mit zunehmender Kernladung  $Z$  (in unserem Beispiel die Elemente schwerer als Lithium) wird der Zustand mit dieser Quantenzahl mit Elektronen "aufgefüllt". Durch die höhere Kernladung werden die Ladungswolken enger an den Kern gebunden und der Radius nimmt ab. Beim Übergang zu der nächsten Quantenzahl (in unserem Beispiel Natrium) steigt der Radius wieder sprunghaft, weil der Zustand 3 besetzt wird, dessen Ladungswolke deutlich ausgedehnter ist als eine Ladungswolke in Zustand 2. Die folgende Tabelle faßt das "Auffüllen" der Zustände zusammen:

Element	Elektronen im Zustand 1	Elektronen im Zustand 2	Elektronen im Zustand 3
H	1	-	-
He	2	-	-
Li	2	1	-
Be	2	2	-
O	2	6	-
Na	2	8	1

Die gleichen Sprünge im Vergleich der Radien zweier nebeneinanderliegender Elemente erkennt man auch bei Kalium und Rubidium. Diese Elemente müssen ein Elektron in einen höheren Zustand setzen und sind damit deutlich ausgedehnter als ihre leichteren Nachbarelemente. Bei den Edelgasen (Helium, Neon, Argon, ...) sind die Zustände mit gleicher Quantenzahl voll besetzt (bei Helium ist der Zustand 1 voll besetzt, bei Neon die Zustände 1 und 2). Die Ladungswolken dieser Elemente sind sehr dicht an den Kern gebunden, was zu einer energetisch besonders günstigen Konfiguration führt. Aus diesem Grund sind die Ionisationsenergien für das erste Elektron bei Edelgasen sehr groß. Dies ist auch der Grund, weshalb Edelgase atomar vorliegen und keine molekularen Bindungen miteinander oder mit anderen Atomen eingehen.

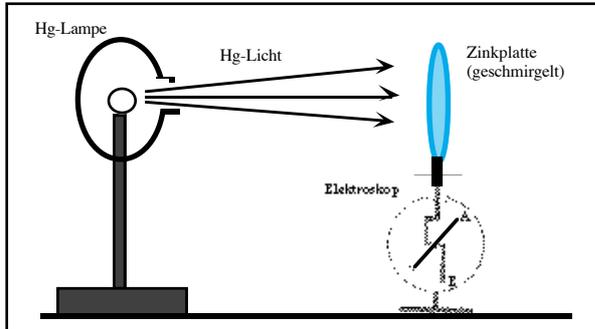
In diesem Zusammenhang spricht man bei Atomen von **Schalen**. Die Schalen (Zustände gleicher Quantenzahl) werden mit Elektronen "aufgefüllt". Der Begriff ist aus diesem Grund energetisch zu sehen. Schale ist im wesentlichen nur ein anderer Begriff für Zustand. Sind alle Zustände einer Quantenzahl besetzt, spricht man von einer abgeschlossenen Schale, wie es bei den Edelgasen der Fall ist. Bei den Elementen, die auf die Edelgase folgen, befindet sich das letzte Elektron in einer höheren Schale als die restlichen Elektronen. Die Ionisierungsenergie dieses Elektrons ist besonders niedrig, weshalb die Elemente Lithium, Natrium, Kalium, ... besonders "gerne" Bindungen mit anderen Atomen eingehen.

# **Anhang I: Sachstruktur-Überblicke über die einzelnen Kapitel**

# 1. Freie Quanten

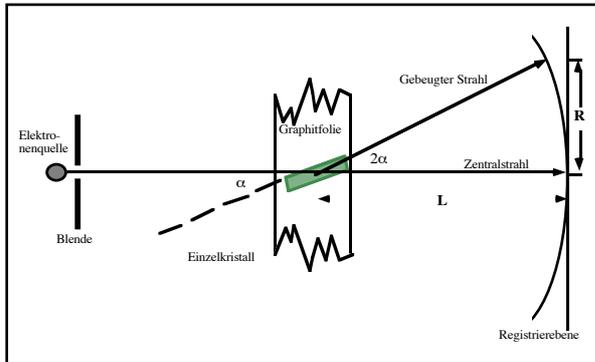
## Experimentelle Fakten

### 1. Photoeffekt



Herauslösen von Elektronen aus einer Metallplatte durch Beleuchten mit einer Quecksilbersampflampe. Die Menge der herausgelösten Elektronen in einem bestimmten Zeitintervall ist von der Intensität des Lichts abhängig, während die kinetische Energie der einzelnen Elektronen von der Frequenz des Lichts abhängt.

### 2. Elektronenbeugung am Kristallgitter



Ein Elektronenstrahl, der auf ein Kristallgitter gelenkt wird, zeigt in der Registrierebene Interferenzringe. Diese können auch bei Röntgenstrahlung, die an einem Gitter gebeugt wird, beobachtet werden. Der Radius der Interferenzringe ist von der Beschleunigungsspannung und damit vom Elektronenimpuls abhängig.

## Theoretische Beschreibung

1. Licht und Elektronen (noch allgemeiner Elementarteilchen) besitzen gemeinsame Eigenschaften, die in Wellencharakter und Teilchencharakter aufgeteilt werden können. Man faßt Licht und Elektronen daher unter dem Oberbegriff Quanten zusammen. Siese besitzen sowohl Wellen-, als auch Teilcheneigenschaften. Man bezeichnet die Lichtquanten auch als Photonen.

2. Während in der klassischen Physik zwischen Wellen (beschrieben durch Wellenlänge  $\lambda$  und Frequenz  $f$ ) und Teilchen (beschrieben durch Energie  $W$  und Impuls  $p$ ) unterschieden wird, sind in der Quantenphysik diese Größen miteinander verknüpft. In Gleichungen ausgedrückt verbinden Quanten die Größen  $\lambda$ ,  $f$ ,  $W$  und  $p$  über

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{und} \quad W = h \cdot f$$

## 2. Stehende Wellen

Experimentell meßbare Größen:

	Eigenwerte, Zustandszahlen	Knotenbilder, Amplitudenfunktionen
1-dimensionale stehende Wellen:	Schwingungsfrequenz des Seils, Zustandszahl $n$	
2-dimensionale stehende Wellen:	Schwingungsfrequenz des Tamburins, Zustandszahlen $n_r$ und $n_\varphi$	
3-dimensionale stehende Wellen:	Schwingungsfrequenz der Luft in der Glaskugel, drei Zustandszahlen, z.B. $n, m$ und $l$	

### Theoretische Beschreibung:

**STELLA-Rechnung**

$f_3=26$  Hz

$f_2=19.5$  Hz

$f_1=8.6$  Hz

- Zusammenhang zwischen Massendichte  $m'(x)$ , der Amplitudenfunktion  $y(x)$  und deren Krümmung  $y''(x)$ 
  - Starke Krümmung und enger Knotenabstand bei hoher Massendichte
  - Beträgsmäßig starke Krümmung bei betragsmäßig großer Amplitudenfunktion

#### 2. Differentialgleichung stehender Wellen

$$y''(x) = -4\pi^2 * f^2 * m'(x)/F_s * y(x)$$

$m'(x)$ : Massendichte des Seils

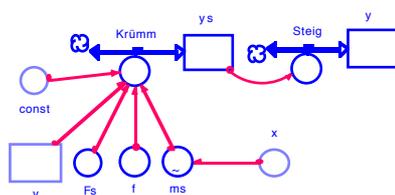
$F_s$ : Spannkraft des Seils

$y(x)$ : Amplitudenfunktion

$f$ : Schwingungsfrequenz

Physikalisch sinnvolle Lösung der Gleichung mit Randbedingung  $y(\text{Seilanzfang})=y(\text{Seilende})=0$

#### 3. STELLA-Modell stehender Seilwellen

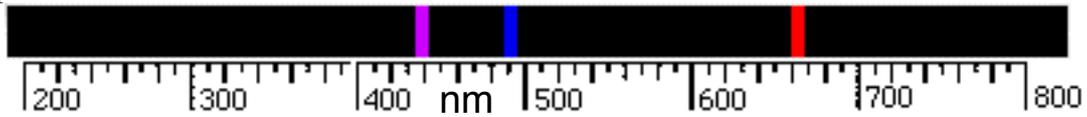


$y'(t) = y'(t - dt) + (\text{Steig}) * dt$ INIT $y = 0$ INFLOWS: Steig = $y'$	$y''(t) = y''(t - dt) + (\text{Krümm}) * dt$ INIT $y'' = 1$ INFLOWS: Krümm = $-const * f^2 * (ms/Fs) * y$
$x = \text{time [m]}$ $ms [g/m] = \text{GRAPH}(x [m])$ (0.00, 0.78), (0.853, 0.78), (0.106, 0.78), (0.159, 0.78), (0.212, 0.78), (0.265, 0.78), (0.318, 0.78), (0.371, 0.00), (0.424, 0.00), (0.477, 0.00), (0.53, 0.00)	$const = 9 * m^2 * 10^{-3}$ $f = 7.5$ [Hz] $F_s = 2$ [N]

### 3. Das H-Atom

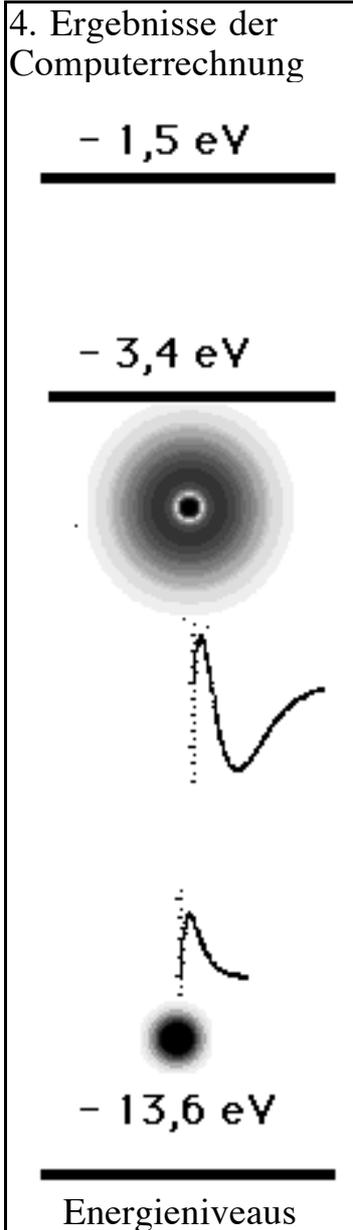
#### Experimentelle Fakten:

1. Spektrallinien der Balmer-Serie:



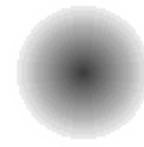
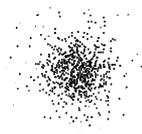
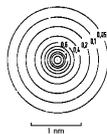
2. Größe des H-Atoms in den verschiedenen Zuständen

Versuche zur Balmerlampe, Ionisation, Streuung, ... und dazugehörige tabellierte Meßwerte



#### Theoretische Grundlagen:

1. Amplitude  $\psi$



Die  $\psi$ -Funktion liefert Zahlenwerte für  $|\psi|^2$ .  
 Interpretation 1: Lokalisationswahrscheinlichkeit  
 Interpretation 2: Ladungsdichte, -wolke, "Elektronium"

2. Zustand  $n$  und Schrödingergleichung

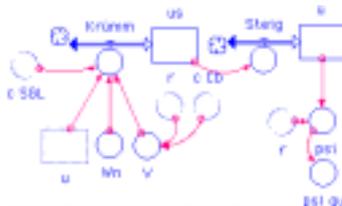
Zustand  $n$ , Energie  $W_n$ , Amplitude  $\psi_n(r)$ , Knotenflächen

Randbedingung:  $\psi \Rightarrow 0$

Veränderliches Potential  $V=V(r)$  ("Potentialtopf")

$$\text{SGL: } u_n'' \propto - [W_n - V(r)] * u_n(r)$$

3. STELLA-Modell H-Atom



$u(t) = u(1 - \theta) + (\text{Steg}) * \theta$ INIT u = 0 INFLOWS Steg = 0	$r = \text{time (m)}$
$u_n(t) = u_n(1 - \theta) + (\text{Knoten}) * \theta$ INIT u_n = 1 INFLOWS Knoten = -c_SGL * (W_n - V) * u	$V = -c_C / r$ $c_Cb = e^2 / (4 * \pi * \epsilon_0 * m)$ (eV/m) $c_SGL = e^2 / (4 * \pi * \epsilon_0 * \hbar^2 * m^2)$ (1/mV/m^2) $W_n = -13.605$ (eV)
$e = 1.602e-19$ [C] $\epsilon_0 / \text{vac} = 8.854e-12$ (C/Vm) $\hbar = 6.626e-34$ [Js] $m = 9.109e-31$ [kg]	$pi = \text{usr}$ $pi\_qu = pi^2$

5. Eine allgemeine Formel für die Energieniveaus

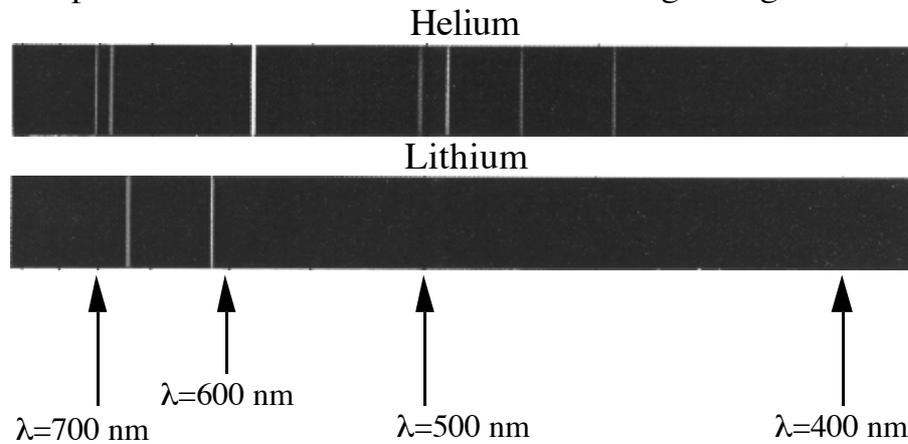
$$W_n = W_1 * \frac{1}{n^2}$$

6. Vergleich zwischen Theorie und Messungen.

## 4. Höhere Atome

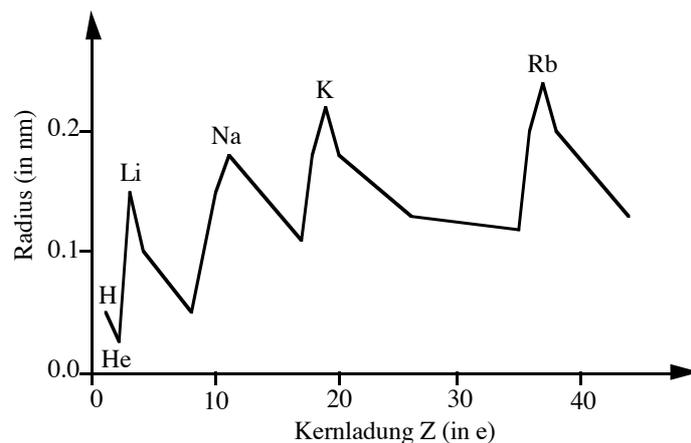
### Experimentelle Fakten

#### 1. Spektren höherer Atome und Ionisierungsenergien



Aufnahmen der sichtbaren Spektren von Helium und Lithium (zum Vergleich mit dem Wasserstoffspektrum). Messung der Ionisierungsenergien.

#### 2. Atom- und Ionenradien



Vergleich der Radien höherer Atome unter Verwendung der gleichen Meßmethode bzw. Angleichen der Meßdaten aus verschiedenen Methoden (Bindungsradius, Eigenvolumen, ...). Kleine Radien und große Ionisierungsenergien bei Edelgasen; große Radien und kleine Ionisierungsenergien bei Lithium, Natrium, ... Vergleich von Radien zwischen neutralem Atom und ionisiertem

Atom.

### Theoretische Grundlagen

#### 1. Zustand des Atoms und Schrödingergleichungen der Elektronen

$$u''_{\text{Elektron1}}(r) \propto -(W_{\text{Elektron1}} - V(r)) \cdot u_{\text{Elektron1}}(r)$$

$$u''_{\text{Elektron2}}(r) \propto -(W_{\text{Elektron2}} - V(r)) \cdot u_{\text{Elektron2}}(r)$$

(entsprechend für Elektron 3, 4, ...)

$$\text{Elektron 1: } V(r) = V_{\text{Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung2}}(r) + \dots$$

$$\text{Elektron 2: } V(r) = V_{\text{Kern}}(r) + V_{\text{Abschirmung1}}(r) + \dots$$

Die Zustände aller Elektronen, die im Atom gebunden sind, beschreiben den Zustand des Atoms.

Das Potential in der

Schrödingergleichung des Elektron 1 setzt sich aus dem Kernpotentialanteil plus den Potentialen aller anderen Elektronen zusammen (Entsprechendes gilt für das Potential in der SGL der Elektronen 2, 3, ...). Die Schrödingergleichungen aller Elektronen sind über die Potentiale miteinander verknüpft.



# Anhang II: Tabellen

## Atom- und Ionenspektren von Wasserstoff, Helium und Lithium

HYDROGEN (H) Z = 1			HELIUM (He) Z = 2		
H I Ref. 214 — W.C.M.			He I and II Ref. 16, 94, 173, 183, 317 W.C.M.		
Intensity	Wavelength		Intensity	Wavelength	
Vacuum			Vacuum		
15	926.226	I	15	231.454	II
20	930.748	I	20	232.584	II
30	937.803	I	30	234.347	II
50	949.743	I	50	237.331	II
100	972.537	I	100	243.027	II
300	1025.722	I	300	256.317	II
1000	1215.668	I	1000	303.780	II
500	1215.674	I	500	303.786	II
Air			Air		
5	3835.384	I	10	320.293	I
6	3889.049	I	2	505.500	I
8	3970.072	I	3	505.684	I
15	4101.74	I	4	505.912	I
30	4340.47	I	5	506.200	I
80	4861.33	I	7	506.570	I
120	6562.72	I	10	507.058	I
180	6562.852	I	15	507.718	I
5	9545.97	I	20	508.643	I
7	10049.4	I	25	509.998	I
12	10938.1	I	35	512.098	I
20	12818.1	I	50	515.616	I
40	18751.0	I	100	522.213	I
5	21655.3	I	400	537.030	I
8	26251.5	I	1000	584.334	I
15	40511.6	I	50	591.412	I
4	46525.1	I	5	958.70	II
6	74578	I	6	972.11	II
3	123685	I	8	992.36	II
			15	1025.27	II
			30	1084.94	II
			35	1215.09	II
			50	1215.17	II
			120	1640.34	II
			180	1640.47	II
			Air		
			7	2385.40	II
			9	2511.20	II
			50	2577.6	I
			1	2723.19	I
			12	2733.30	II
			2	2763.80	I
			10	2818.2	I
			4	2829.08	I
			10	2945.11	I
			40	3013.7	I
			20	3187.74	I
			3	3202.96	II
			15	3203.10	II
			1	3354.55	I
			2	3447.59	I
			1	3587.27	I
			3	3613.64	I
			2	3634.23	I
			3	3705.00	I
			1	3732.86	I
			10	3819.607	I
			1	3819.76	I
			500	3888.65	I
			20	3964.729	I
			1	4009.27	I
			50	4026.191	I
			5	4026.36	I
			12	4120.82	I
			2	4120.99	I
			3	4143.76	I
			10	4387.929	I
			3	4437.55	I
			200	4471.479	I
			25	4471.68	I
			6	4685.4	II
			30	4685.7	II
			30	4713.146	I
			4	4713.38	I
			20	4921.931	I
			100	5015.678	I
			10	5047.74	I
			5	5411.52	II
			500	5875.62	I
			100	5875.97	I
			8	6560.10	II
			100	6678.15	I
			3	6867.48	I
			200	7065.19	I
			30	7065.71	I
			50	7281.35	I
			1	7816.15	I

		3306.28	II
		3393.	
		3488.	I
		3579.8	I
		3618.	I
		3662.	I
		3684.32	II
1		3714.00	II
5		3714.16	II
6	d	3714.27	II
8		3714.29	II
7	d	3714.40	II
10		3714.41	II
1		3714.51	II
0		3714.58	II
3		3718.7	I
6		3794.72	I
20		3915.30	I
20		3915.35	I
10		3985.48	I
10		3985.54	I
40		4132.56	I
40		4132.62	I
		4196.	I
20		4273.07	I
20		4273.13	I
5		4325.42	II
5		4325.47	II
1		4325.54	II
		4516.45	II
		4590.	
13		4602.83	I
13		4602.89	I
		4607.34	II
0		4671.51	II
6		4671.65	II
2		4671.70	II
3		4678.06	II
1		4678.29	II
		4760.	I
		4763.	II
		4788.36	II
		4843.0	II
4		4881.32	II
4		4881.39	II
1		4881.49	II
8		4971.66	I
8		4971.75	I
		5037.92	II
		5095.	
		5114.	
		5190.	
		5271.	I
		5315.	I
		5395.	I
		5440.	I
600	c	5483.55	II
600	c	5485.65	II
320		6103.54	I
320		6103.65	I
3600		6707.76	I
3600		6707.91	I
48		8126.23	I
48		8126.45	I
		8517.37	II
		9581.42	II
		10120.	II
		12232.	I
		12782.	I
		13566.	I
		17552.	I
		18697.	I
		19290.	I
		24467.	I
		40475.	I

Li III  
Ref. 335 — J.O.S.

Intensity	Wavelength	
	Vacuum	
	102.9	III
	103.4	III
	104.1	III
	105.5	III
	108.0	III
	113.9	III
	135.0	III
	540.0	III
	729.1	III

		8361.69	I		1424.	II
		9063.27	I	3	1492.93	II
		9210.34	I	5	1492.97	II
		9463.61	I	1	1493.04	II
		9516.60	I		1555.	II
		9526.17	I	3	1653.08	II
		9529.27	I	5	1653.13	II
		9603.42	I	1	1653.21	II
		9702.60	I		1681.66	II
		10027.73	I		1755.33	II
		10031.16	I			
		10123.6	II		Air	
		10138.50	I			
		10311.23	I		2009.	II
		10311.54	I		2039.	I
		10667.65	I		2068.	II
		10829.09	I		2131.	II
		10830.25	I		2164.	II
		10830.34	I		2173.4	I
		10913.05	I		2183.	II
		10917.10	I		2214.	II
		11626.4	II		2222.	II
		11969.12	I		2237.	II
		12527.52	I	H	2249.21	II
		12784.99	I		2286.82	II
		12790.57	I		2302.57	II
		12845.96	I		2303.33	II
		12968.45	I		2304.59	I
		12984.89	I		2304.92	I
		15083.64	I		2305.36	I
		17002.47	I		2305.83	I
		18552.55	I		2306.29	I
		18636.8	II		2306.82	I
		18685.34	I		2307.44	I
		18697.23	I		2308.97	I
		19089.38	I		2309.88	I
		19543.08	I		2310.94	I
		20581.30	I		2312.11	I
		21120.07	I		2313.49	I
		21121.43	I		2315.08	I
		21132.03	I		2316.95	I
		30908.5	II		2319.18	I
		40478.90	I		2321.88	I
					2325.11	I
					2329.02	I
					2329.84	II
					2333.94	I
				3	2336.88	II
				5	2336.91	II
				2	2337.00	II
					2340.15	I
					2348.22	I
					2358.93	I
					2373.54	I
					2381.54	II
					2383.20	II
				1	2394.39	I
					2402.33	II
					2410.84	II
				3	2425.43	I
					2429.81	II
					2460.2	I
				10	2475.06	I
					2506.94	II
					2508.78	II
					2518.	I
					2539.49	II
				24	2551.7	II
					2559	II
				15	2562.31	I
					2605.08	II
					2640.	
				2	2657.29	II
				3	2657.30	II
					2674.46	II
				0	2728.24	II
				5	2728.29	II
				2	2728.32	II
				3	2730.47	II
				1	2730.55	II
				5	2741.20	I
					2766.99	II
					2790.31	II
					2801.	I
					2846.	I
					2868.	I
					2895.	I
				2	2934.02	II
				2	2934.07	II
				5	2934.12	II
				1	2934.25	II
					2968.	I
				3	3029.12	II
				3	3029.14	II
					3144.	I
				3	3155.31	II
				4	3155.33	II
				1	3196.26	II
				9	3196.33	II
				4	3196.36	II
				5	3199.33	II
				2	3199.43	II
				17	3232.66	I
					3249.87	II

LITHIUM (Li)  
Z = 3  
Li I and II  
Ref. 3, 15, 17, 18, 37, 44, 112, 284,  
321, 335 — J.D.S.

Intensity	Wavelength		
	Vacuum		
	125.5	II	1
	136.5	II	
	140.5	II	
	167.21	II	3
	168.74	II	
	171.58	II	
	178.02	II	10
	199.28	II	
	207.5	II	
	456.	II	
	483.	II	
	540.	II	24
	729.	II	
	800.	II	15
	820.	II	
	861.	II	
	905.5	II	2
	917.5	II	3
	936.	II	
	945.	II	0
	965.	II	5
	972.	II	2
	988.	II	3
	1018.	II	1
	1032.	II	5
	1036.	II	
	1093.	II	
	1103.	II	
	1109.	II	
	1116.	II	
	1132.1	II	
	1141.	II	2
	1166.4	II	2
	1198.09	II	5
	1215.	II	1
	1238.	II	
	1253.8	II	3
	1420.89	II	3
			3
			4
			1
			9
			4
			5
			2
			17

## Ionisierungsenergien von Atomen und Ionen

		number of external s-electrons			
		1		2	
$n = 1$	H	$^2S_{1/2}$	13.595	He	$^1S_0$ 24.581
	He <sup>+</sup>	$^2S_{1/2}$	54.403	Li <sup>+</sup>	$^1S_0$ 75.619
$n = 2$	Li	$^2S_{1/2}$	5.390	Be	$^1S_0$ 9.320
	Be <sup>+</sup>	$^2S_{1/2}$	18.206	B <sup>+</sup>	$^1S_0$ 25.149
	B <sup>++</sup>	$^2S_{1/2}$	37.920	C <sup>++</sup>	$^1S_0$ 47.871
$n = 3$	Na	$^2S_{1/2}$	5.138	Mg	$^1S_0$ 7.644
	Mg <sup>+</sup>	$^2S_{1/2}$	15.031	Al <sup>+</sup>	$^1S_0$ 18.823
	Al <sup>++</sup>	$^2S_{1/2}$	28.44	Si <sup>++</sup>	$^1S_0$ 33.46
$n = 4$	K	$^2S_{1/2}$	4.339	Ca	$^1S_0$ 6.111
	Ca <sup>+</sup>	$^2S_{1/2}$	11.868	Sc <sup>+</sup>	$^3D_1$ 12.80
	Sc <sup>++</sup>	$^2D_{3/2}$	24.75	Ti <sup>++</sup>	$^3F_2$ 27.47
$n = 5$	Rb	$^2S_{1/2}$	4.176	Sr	$^1S_0$ 5.692
	Sr <sup>+</sup>	$^2S_{1/2}$	11.027	Y <sup>+</sup>	$^1S_0$ 12.23
	Y <sup>++</sup>	$^2D_{3/2}$	20.5	Zr <sup>++</sup>	$^3F_2$ 22.98
$n = 6$	Cs	$^2S_{1/2}$	3.893	Ba	$^1S_0$ 5.210
	Ba <sup>+</sup>	$^2S_{1/2}$	10.001	La <sup>+</sup>	$^3F_2$ 11.43
	La <sup>++</sup>	$^2D_{3/2}$	19.17	Ce <sup>++</sup>	
$n = 7$	Fr	$^2S_{1/2}$	—	Ra	$^1S_0$ 5.277
	Ra <sup>+</sup>	$^2S_{1/2}$	10.144	Ac <sup>+</sup>	$^1S_0$ 12.1

## Atom- und Ionenradien

### Experimentell bestimmte Werte

Element	Kovalenter Bindungsradius	Radius aus gaskinetischer Theorie	Radius in Kristallgitter	Radius aus Wirkungsquerschnitt
H	32 pm	126 pm	-	-
He	-	110 pm	-	224 pm
Li	152 pm	-	151 pm	-
Li <sup>+</sup>	-	-	68 pm	-
Be	111 pm	-	112 pm	-
Be <sup>2+</sup>	-	-	35 pm	-

### Berechnete Werte aus Theorie

Element	Bohrscher Radius	Maximum der u(r)-Funktion	Letzter Wendepunkt der u(r)-Funktion	68% der Gesamtladung	90% der Gesamtladung
H	53 pm	53 pm	106 pm	93 pm	142 pm
He	-	25 pm	-	45 pm	70 pm
Li	-	150 pm	-	220 pm	300 pm
Li <sup>+</sup>	-	20 pm	-	30 pm	50 pm
Be					
Be <sup>2+</sup>					

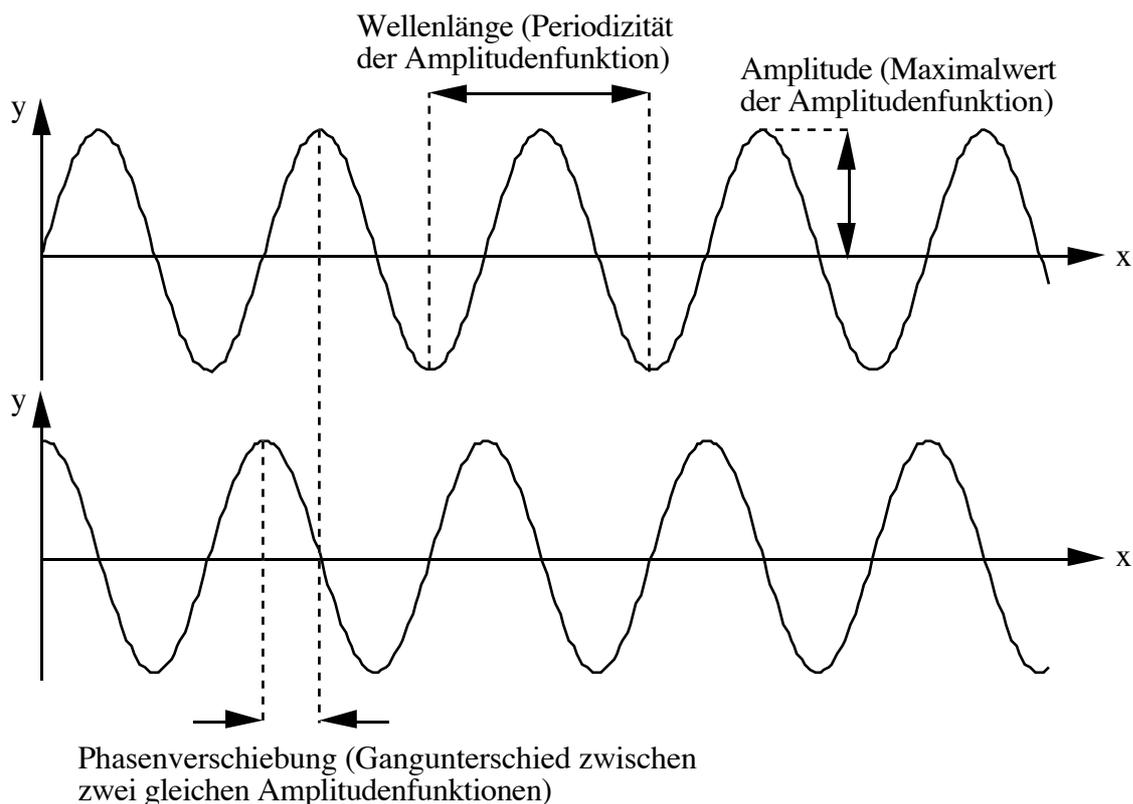
## Anhang III

### Erklärung von Interferenzeffekten am Kristallgitter

Dieser Abschnitt beschreibt die charakteristischen Merkmale von Wellen, um eine Versuchsanordnung zu entwickeln, die die Welleneigenschaften von Elektronen nachweisen kann. Dazu stellen wir folgende drei Fragen:

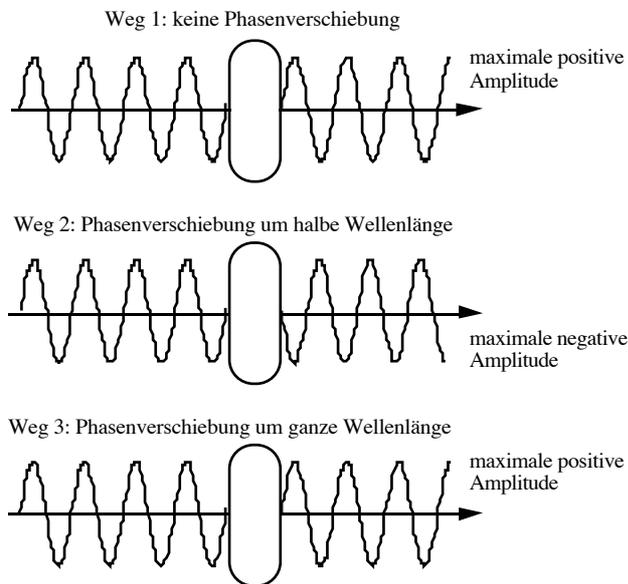
1. Welche Eigenschaften charakterisieren Wellen?
2. Welche Phänomene zeigen sich aufgrund dieser Eigenschaften?
3. Mit welcher experimentellen Anordnung läßt sich die Existenz dieser Phänomene bei Elektronen überprüfen?

Die ersten beiden Fragen kann man sich aus der Schwingungslehre klarmachen. Eine Welle wird über die Amplitude und die Wellenlänge beschrieben. Die Wellenlänge gibt an, innerhalb welcher Strecke sich die Amplitudenfunktion wiederholt; ist also ein Maß für ihre Periodizität. Zwei Wellen gleicher Amplitude und Wellenlänge können sich in ihrer Phase unterscheiden. Die folgende Zeichnung erläutert den Phasenbegriff.



Die beiden übereinandergezeichneten Wellen besitzen die gleiche Amplitude und Wellenlänge. Die beiden Funktionen sind die Amplitudenfunktionen  $y$  zu einem bestimmten Zeitpunkt (sozusagen zeitlich eingefroren). Räumlich liegt die obere Funktion  $y$  nach rechts verschoben. Diese Verschiebung wird über die Phase angegeben.

Wellen besitzen Interferenzeigenschaften, da sich bei der Überlagerung von zwei Wellen die Amplitudenfunktionen addieren. Da diese positive wie auch negative Werte annehmen können, kommt es zu konstruktiver und destruktiver Interferenz (die Wellen können sich verstärken oder auslöschen, was bei Interferenzexperimenten in der Optik zu den Interferenzstreifen führt).



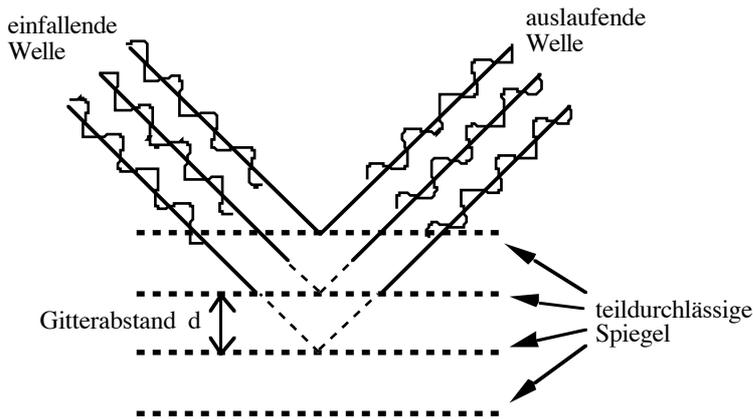
Stellen wir uns zur Veranschaulichung des Interferenzbegriffs eine Welle vor, die in zwei gleiche Wellen aufgeteilt wird. Die eine Welle durchläuft einen Weg, auf dem sie keine Phasenverschiebung erfährt. Dies entspricht in nebenstehender Zeichnung dem Weg 1 (keine Phasenverschiebung). Das Oval in der Mitte soll einen Mechanismus andeuten, der je nach Bedarf die Phase verschiebt. Auf dem Weg 1 beginnt die Welle nach dem Mechanismus so, wie sie vorher geendet hat; die Phase ist

nicht verändert. Durchläuft nun der andere Teil der Welle auch den Weg 1 (ohne Phasenverschiebung) und treffen die Wellen letztendlich wieder aufeinander, dann interferieren sie konstruktiv, da beide am Ort des Zusammentreffens die maximale positive Amplitude haben und sich diese einfach addieren.

Durchläuft der erste Teil der Welle keine Phasenverschiebung (Weg 1), der andere Teil aber eine Phasenverschiebung um die halbe Wellenlänge (Weg 2 in der Zeichnung; die aus dem Mechanismus herauskommende Welle ist, verglichen zur einfallenden Welle, um eine halbe Wellenlänge verschoben), dann besitzt die erste Welle am Ort des Zusammentreffens die maximale positive Amplitude und die zweite Welle die maximale negative Amplitude. Diese addieren sich zu Null, was man destruktive Interferenz (oder Auslöschung) nennt.

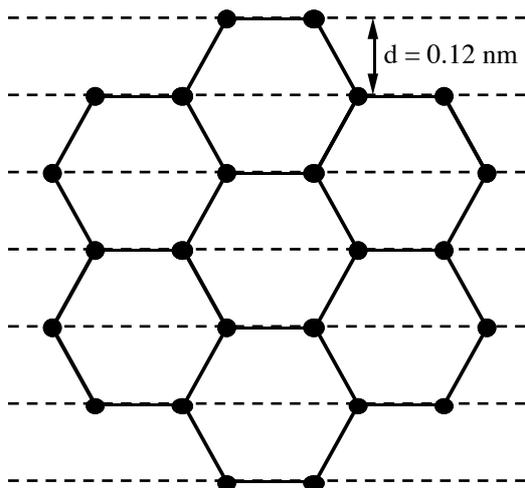
Wird die Phase der ersten Welle (Weg 1) nicht verschoben, die der zweiten Welle aber um eine ganze Wellenlänge (Weg 3), dann beobachtet man wieder konstruktive Interferenz, da beide Wellen am Ort des Zusammentreffens die maximale positive Amplitude aufweisen. Dieser Fall entspricht daher dem ersten Beispiel, in dem beide Wellen in ihrer Phase nicht verschoben wurden.

Nun muß man sich noch überlegen, wie ein Mechanismus hergestellt werden kann, der die beschriebene Phasenverschiebung erzeugt. Stellen wir uns dazu mehrere parallel zueinander liegende Ebenen vor, die für Wellen jeglicher Art wie teildurchlässige Spiegel wirken. Die folgende Abbildung soll dies veranschaulichen.



Die dicken gestrichelten Linien sind teildurchlässige Spiegel mit Abstand  $d$ . Es sind drei parallele "Strahlen" mit ihren Amplituden eingezeichnet. Idealisiert entstehen sie im selben Ort (Sender) und überlagern sich im selben Ort (Empfänger) (das soll

bedeuten, daß die drei Wellen eigentlich übereinander liegen, aber aus Gründen der Übersichtlichkeit getrennt gezeichnet wurden). Die drei eingezeichneten einfallenden Strahlen gehören zu einer Welle, die an den teildurchlässigen Spiegeln teils reflektiert und teils transmittiert wird. Am nächsten Spiegel passiert das gleiche nochmals. Ein Teil der Welle wird reflektiert, der Rest transmittiert. Die Zeichnung zeigt anhand der gestrichelten Strahlen, daß die einzelnen Wege unterschiedlich lang sind, je nachdem wie häufig ein Strahl transmittiert wurde. Die gestrichelten Linien sind die Wegunterschiede zum Strahl, der an der ersten Ebene reflektiert wird. Ein Wegunterschied bedeutet gleichzeitig eine Phasenverschiebung. Ist durch den Einfalls- und Ausfallswinkel der Wegunterschied so gewählt, daß er genau einem vielfachen der Wellenlänge entspricht (was zur Folge hat, daß die Phasenverschiebung ebenfalls einem vielfachen der Wellenlänge entspricht), dann kommt es zu konstruktiver Interferenz (dies entspricht im vorherigen Beispiel Weg 1 und Weg 3). Man kann sich klarmachen, daß durch die vielen Reflexionsebenen nur noch ein Winkel für konstruktive Interferenz übrigbleibt. In allen anderen Richtungen interferiert die Welle destruktiv.



Diese parallelen, teildurchlässigen Spiegel werden schon von der Natur bereitgestellt. Es sind sehr gleichmäßig angeordnete Kristallgitter, wie sie in Graphit (Kohlenstoff; siehe Abbildung) oder Silizium vorkommen. Durch Schmelzprozesse erhält man perfekte Kristalle mit Millionen und mehr parallelen Ebenen (gestrichelte Linien deuten Atomschichten an). Der Abstand dieser Ebenen beträgt üblicherweise einige zehntel Nanometer. Da die Phasenverschiebung zweier Wellen, die an zwei aufeinanderfolgenden Ebenen

reflektiert werden, in etwa der Wellenlänge  $\lambda$  entsprechen muß, läßt sich daraus folgern, daß Kristallgitter für Wellen mit  $\lambda \approx 0.1\text{nm}$  gut geeignet sind, um konstruktive Interferenz zu erreichen. Bei elektromagnetischer Strahlung spricht man bei Wellenlängen um  $\lambda \approx 0.1\text{nm}$  von Röntgenstrahlung.