

4.4.6 Die experimentelle Bestimmung von Atomradien

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

- In einem Molekül (z.B. H_2) haben die Atome einen bestimmten Abstand voneinander. Der halbe Abstand wird **kovalenter Bindungsradius** des Atoms genannt.
- In Kristallen ordnen sich die Ionen regelmäßig in einer Gitterstruktur an. Der Abstand zweier Ionen ist in einfachsten Strukturen die Summe aus dem Radius der beiden Ionen. Man spricht hierbei von **Ionenradien**. Im allgemeinen lassen sich die Abstände aller Atome, die in einem Kristall angeordnet sind, aus Interferenzerscheinungen bestimmen.
- Liegt ein Element als atomares Gas vor, so gibt es wegen der Abstoßung zwischen zwei Atomen einen minimalen Abstand, auf den sich zwei Atome nähern können. Aus makroskopischen Messungen (z.B. dem Verhalten von Druck und Volumen eines Gases bei konstanter Temperatur) lässt sich das sogenannte **Kovolumen (oder Eigenvolumen)** der Atome und damit deren Radius bestimmen.
- Streut man z.B. Elektronen an Atomen, erhält man den sogenannten **Wirkungsquerschnitt**. Die Elektronen werden vom Atom wie von einem kugelsymmetrischen Gebilde abgelenkt. Aus dem Wirkungsquerschnitt lässt sich ein Atomradius bestimmen.

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

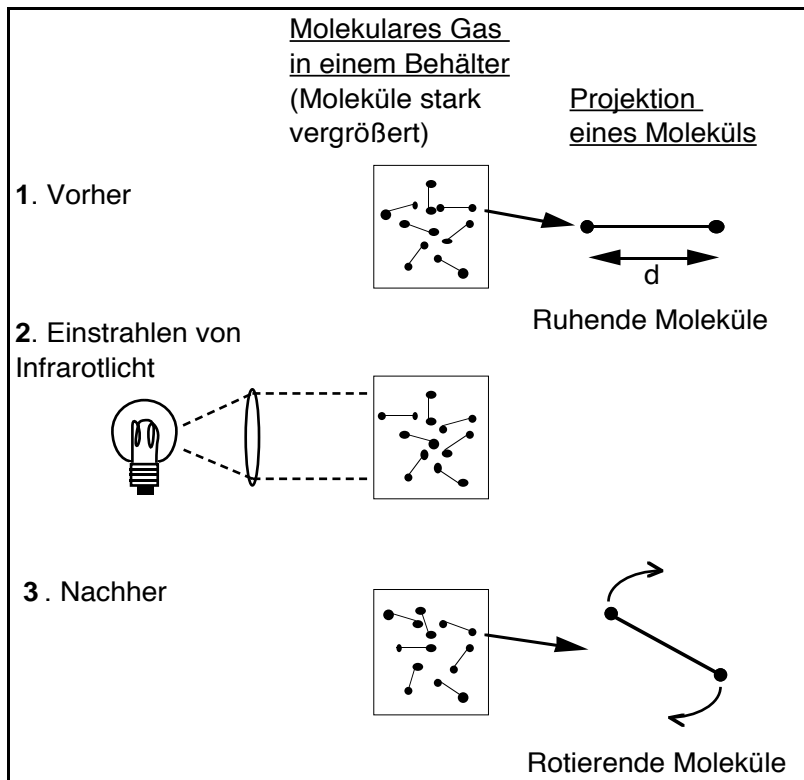
Verschiedene Elemente liegen bei Raumtemperatur in unterschiedlicher Form vor (atomar, molekular, metallisch, als Ionengitter), so dass ein direkter Vergleich der Radien oft nur unter hohem experimentellem Aufwand möglich wird.

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

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

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

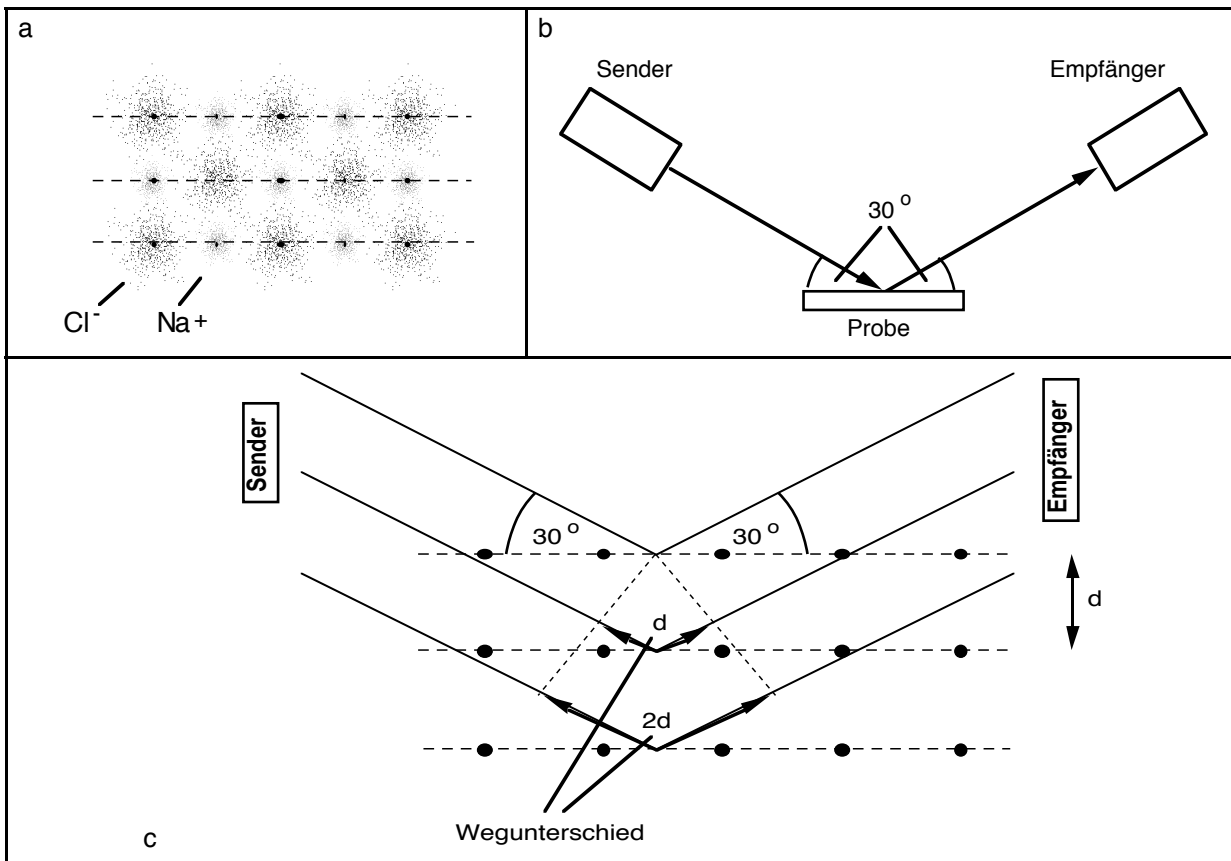
Abb. 4.4.10: Zur Bestimmung des kovalenten Bindungsradius



• **Die Bestimmung des Ionenradius in Kristallgittern**

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

Abb. 4.4.11: Zur Bestimmung des Ionenradius in Kristallgittern



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

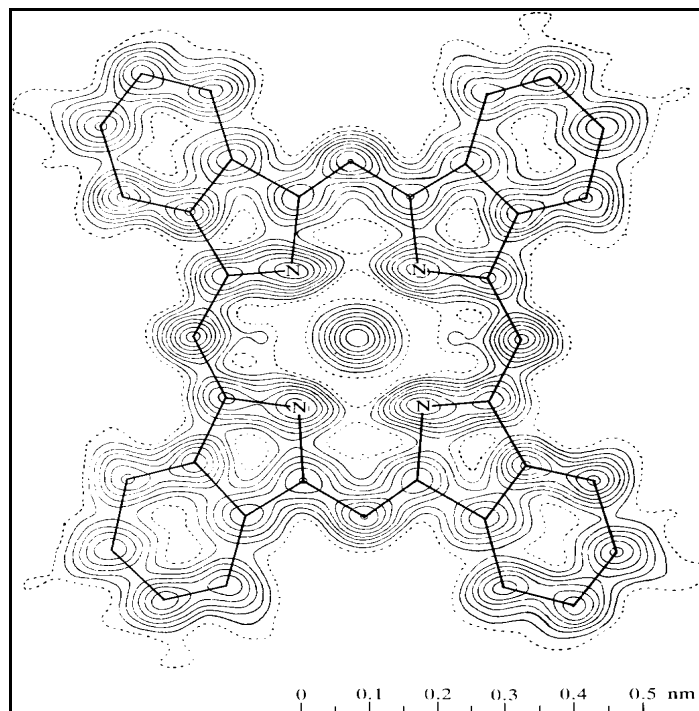
Bedingung für konstruktive Interferenz erfüllt und es entsteht aufgrund der periodischen Struktur der Probe unter einem Austrittswinkel von genau 30° eine Reflexion des Röntgenstrahls. Den Abstand zweier Ionen im Gitter erhält man, indem man die Wellenlänge des Röntgenstrahls solange variiert, bis man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

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

Abb. 4.4.12:

Die Ladungsdichteverteilung von Nickel-Phthalocyanin

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



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

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

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

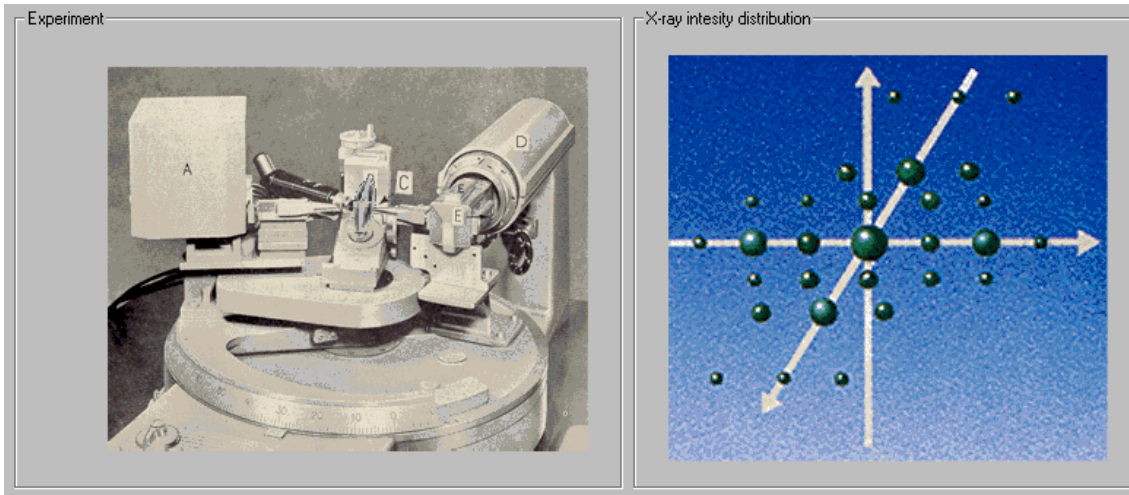
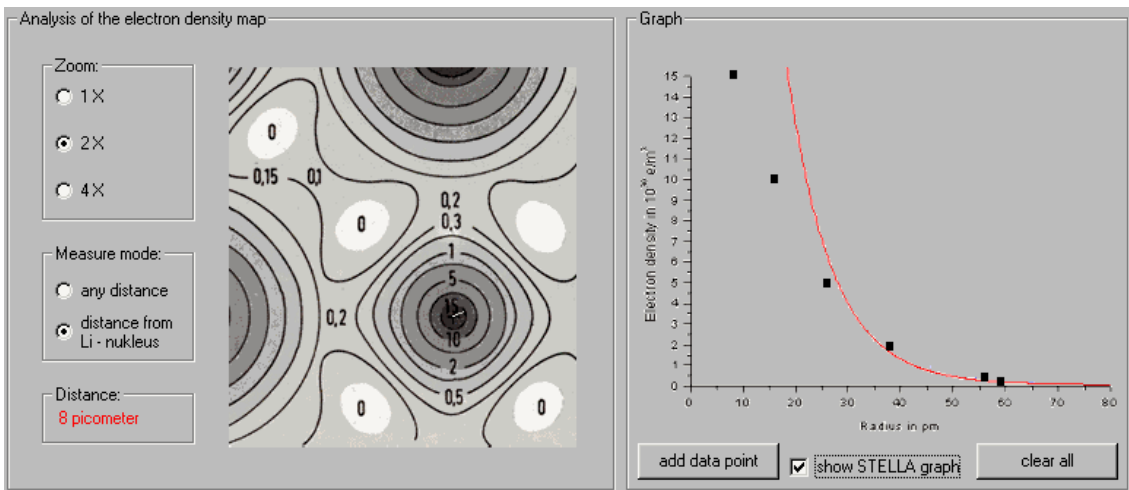


Abb. 4.4.14: Aus dem Simulationsprogramm vLab zur Röntgen-Beugung an Kristallen



• **Die Bestimmung des Atomradius in Gasen**

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

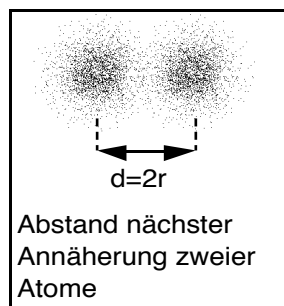
$$(p + a \cdot V^{-2}) \cdot (V-b) = R \cdot T \quad (4.4.11)$$

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

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

Abb. 4.4.15:

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



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

• **Die Bestimmung des Streuradius bei Elektronenstreuung**

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

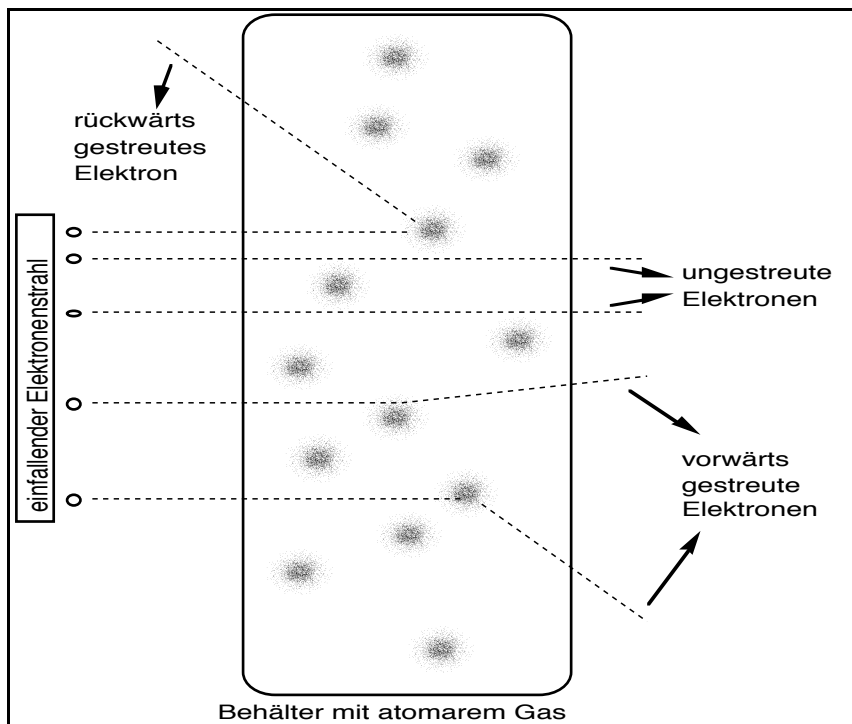
$$\sigma = \frac{\text{Elektronen(gestreut)}}{\text{Elektronen(gesamt)}} \cdot \frac{A_{\text{gesamt}}}{N_{\text{Gasatome}}} \tag{4.4.12}$$

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

$$A_{\text{Gasatom}} = \sigma = 2\pi \cdot r^2 \tag{4.4.13}$$

berechnen. σ ist die Fläche des Kreisscheibchens eines Atoms.

Abb. 4.4.16: Zur Bestimmung des Streuradius bei Elektronenstreuung



4.4.7 Nicht radialsymmetrische Zustände

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

- **Haupt- und Nebenquantenzahlen**

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

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

und $l \leq m \leq l \quad (4.4.14)$

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

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

$l = 0$: s -Zustände

$l = 1$: p-Zustände

$l = 2$: d-Zustände

$l = 3$: f-Zustände

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

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

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

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

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

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

- **Pauli-Prinzip**

Das Pauli-Prinzip von 1925 besagt:

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

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

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

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

- **Schalenstruktur**

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

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

- **Orbitale**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Tab. 4.4.4: Einige Zustandsfunktionen des H-Atoms

Zust.	(n, m, l)	Funktion	Zust.	(n,m,l)	Funktion
1s	1, 0, 0	$\psi = c \cdot e^{-\frac{r}{a}}$	3p _z	3, 1, +1	$\psi = c \cdot \left(\frac{z}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
2s	2, 0, 0	$\psi = c \cdot \left(2 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	3p _x	3, 1, -1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
2p _x	2, 1, +1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	3p _y	3, 1, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{y}{a}\right) \cdot \left(6 - \frac{r}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
2p _y	2, 1, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{y}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	3d _{xy}	3, 2, +2	$\psi = c \cdot \left(\frac{x \cdot y}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
2p _z	2, 1, -1	$\psi = c \cdot \left(\frac{z}{a}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a}}$	3d _{yz}	3, 2, +1	$\psi = c \cdot \left(\frac{y \cdot z}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
3s	3, 0, 0	$\psi = c \cdot \left(27 - 18\frac{r}{a} + 2\frac{r^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$	3d _{xz}	3, 2, 0	$\psi = c \cdot \left(\frac{x \cdot z}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
$a = \frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot e^2 \cdot m} = 0,053 \text{ nm} : \text{Radius des Maximums des Grundzustands} = \text{Bohrscher Radius}$ c = jeweilige Normierungskonstante			3d _{x²-y²}	3, 2, -1	$\psi = c \cdot \left(\frac{x^2 - y^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$
			3d _{z²}	3, 2, -2	$\psi = c \cdot \left(\frac{3z^2 - r^2}{a^2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3a}}$

4.5 Abschnitt 5: Mehrelektronensysteme I

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

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

4.5.1 Höhere Atome und Abschirmung der Kernladung

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

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

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

4.5.2 Die Modellierung des He-Atoms mit MODELLUS

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

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

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

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

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

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

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

a

$$\frac{d\psi_1}{dr} = s\psi_1$$

$$\frac{ds\psi_1}{dr} = -26.25 \times \left[E_{n1} + 1.44 \times (2 - p_{oc2}) \times \frac{1}{r} \right] \times \psi_1$$

$$\frac{d\psi_2}{dr} = s\psi_2$$

$$\frac{ds\psi_2}{dr} = -26.25 \times \left[E_{n2} + 1.44 \times (2 - p_{oc1}) \times \frac{1}{r} \right] \times \psi_2$$

$$\frac{d p_{oc1}}{dr} = \frac{\psi_1^2}{c1}$$

$$\frac{d p_{oc2}}{dr} = \frac{\psi_2^2}{c2}$$

$$Pr = \frac{\psi_1^2}{c1} + \frac{\psi_2^2}{c2}$$

b

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

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

Independent variable:	r
Step:	0.0005
Limits	
Min:	1e-06
Max:	0.4

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

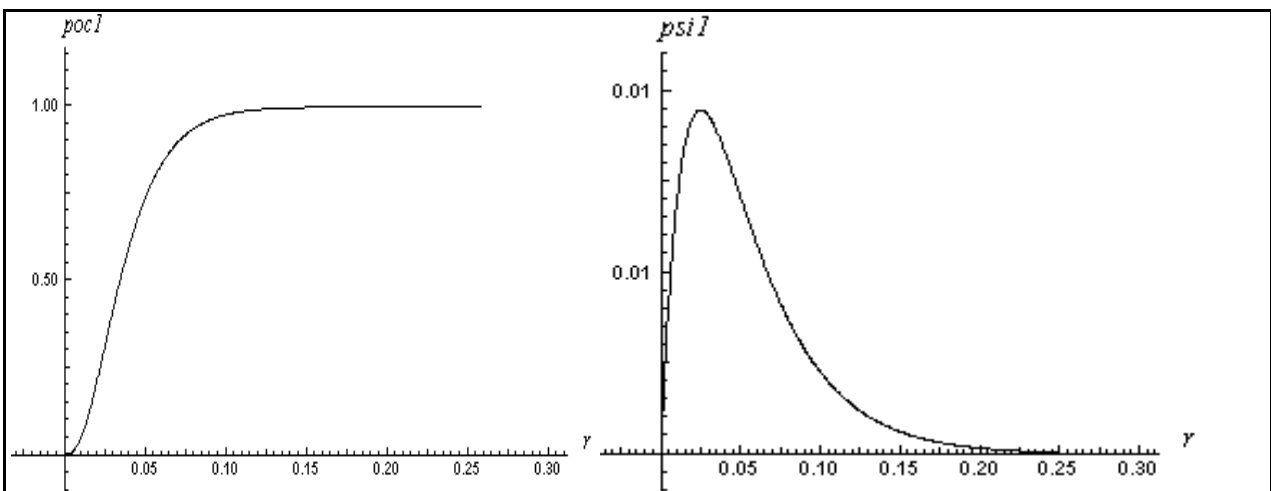
Auf die Berechnung und Darstellung von Funktionen $R(r)$ und $R^2(r)$ wurde verzichtet. Für die hier betrachteten physikalischen Aspekte sind radiale Darstellungen ausreichend bzw. ausschlaggebend.

4.5.3 Auswertung: Radius und Spektrum des He-Atoms

- **Der Radius des He-Atoms**

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

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



• **Energien und Spektrallinien**

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

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

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

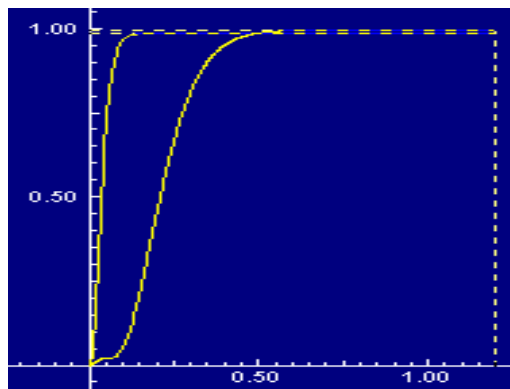
$$\frac{d^2poc1}{dr^2} = Z$$

if($r \leq 0.3$) then $Z = \frac{psi1^2}{c1}$

if($r > 0.3$) then ($Z = 0$)

$$\frac{d^2poc2}{dr^2} = \frac{psi2^2}{c2}$$

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



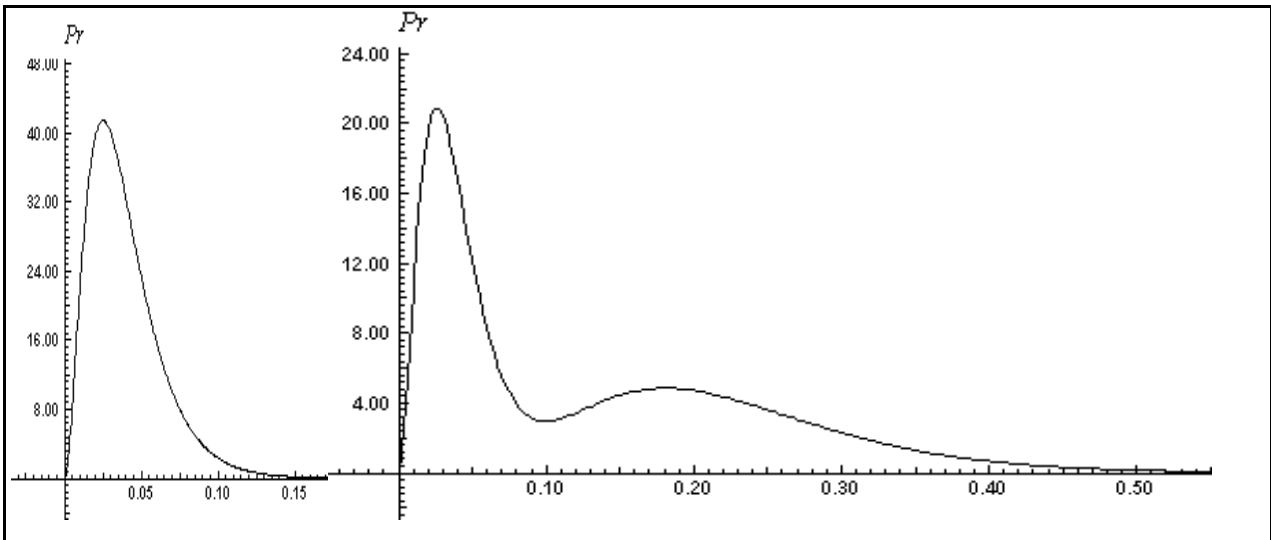
Parameters	
	case 1
E_{n1}	-53.804
E_{n2}	-4.9933
$c1$	5e-06
$c2$	9.8e-05

Step: 0.0005, Min.: 1e-06

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.5.4 Lithium und weitere höhere Atome

- **Zur Modellierung weiterer höherer Atome**

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

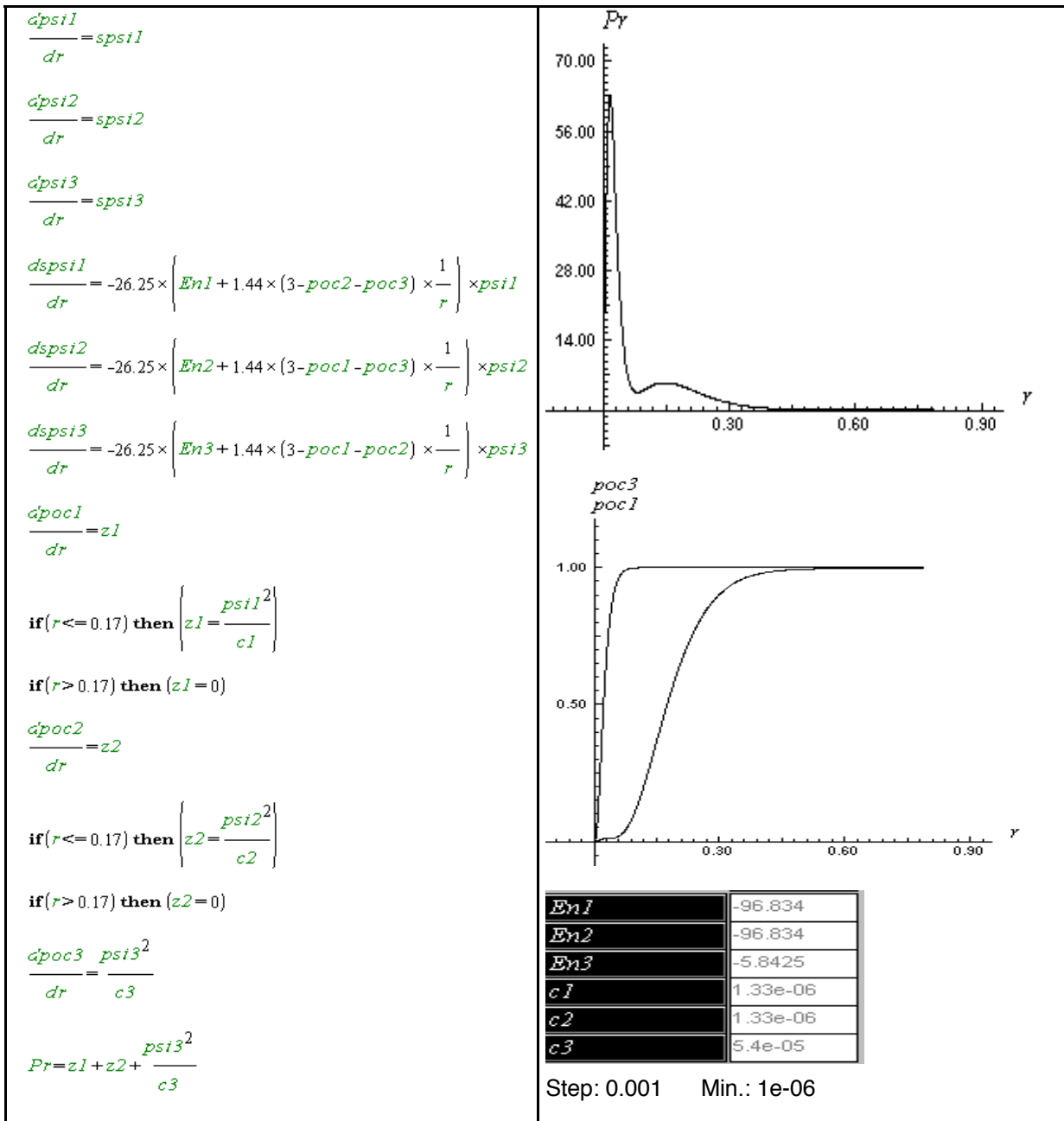
Quantitativ treten in den Modellen für Li und Be zwar zusätzliche SGLen und Abschirmungsfaktoren auf, qualitativ ergeben sich bei den Grundzuständen gegenüber dem He⁺-Ion aber keine neuen Aspekte. Sobald man angeregte Zustände von Li und Be, die auch 3s-Zustände beinhalten, modelliert, wird die Modellkomplexität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

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

• **Lithium**

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

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



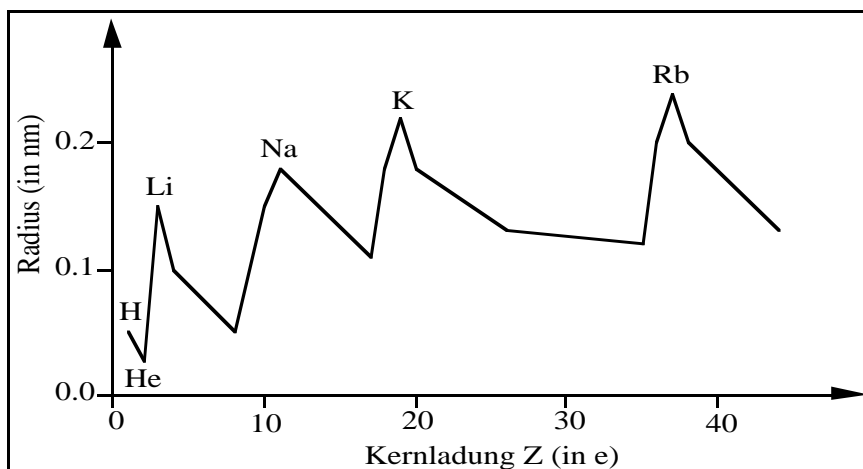
Wegen des dritten Elektrons im 2s-Niveau ist es klar, dass das Li-Atom im Grundzustand wesentlich größer als das He-Atom ist. Das äußere relative Maximum liegt bei ca. 0.15 nm, beim He waren es 0.025 nm.

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

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

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

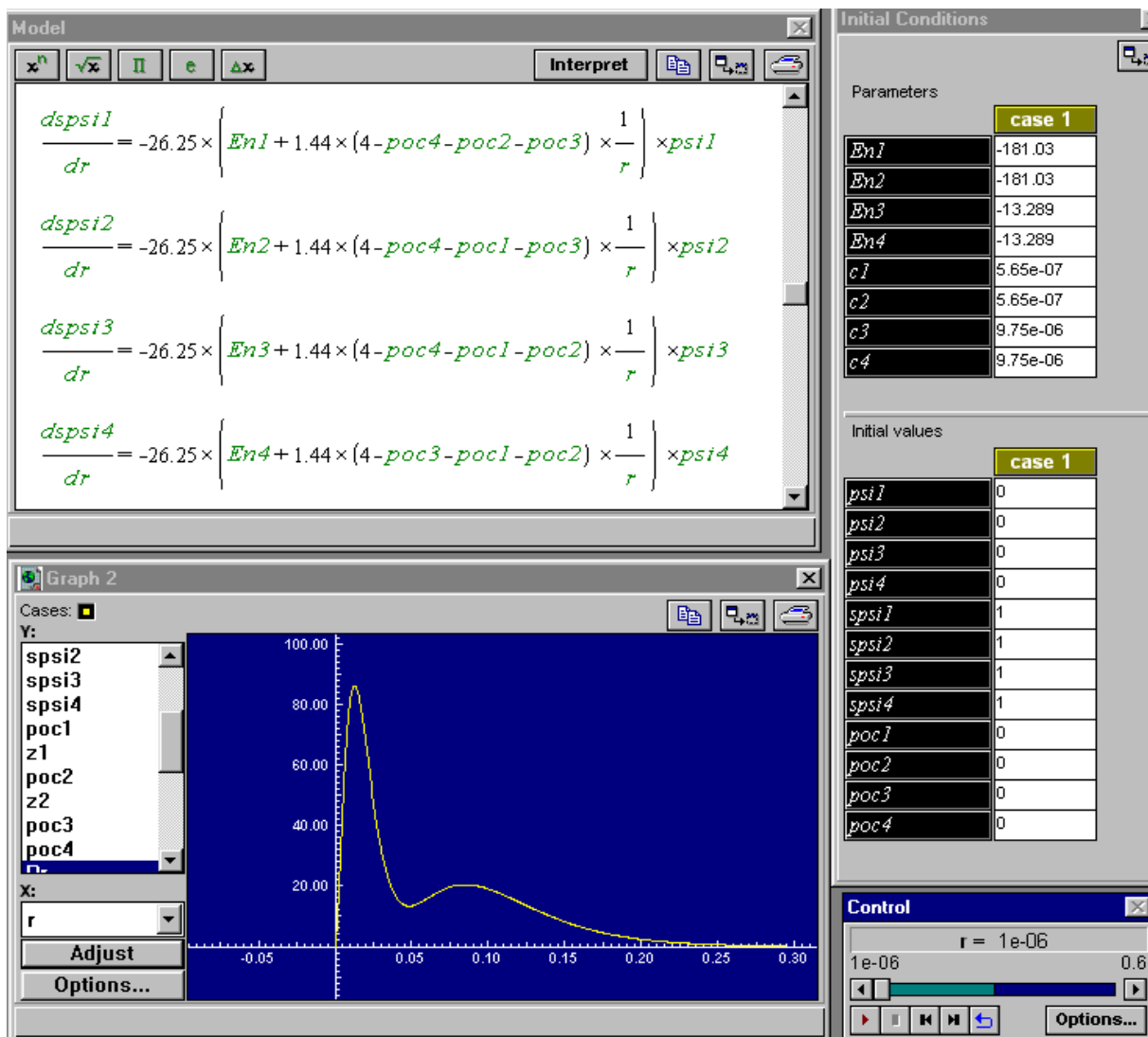
Abb. 4.5.6: Atomradien und Ordnungszahl (schematisch)



• **Beryllium**

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

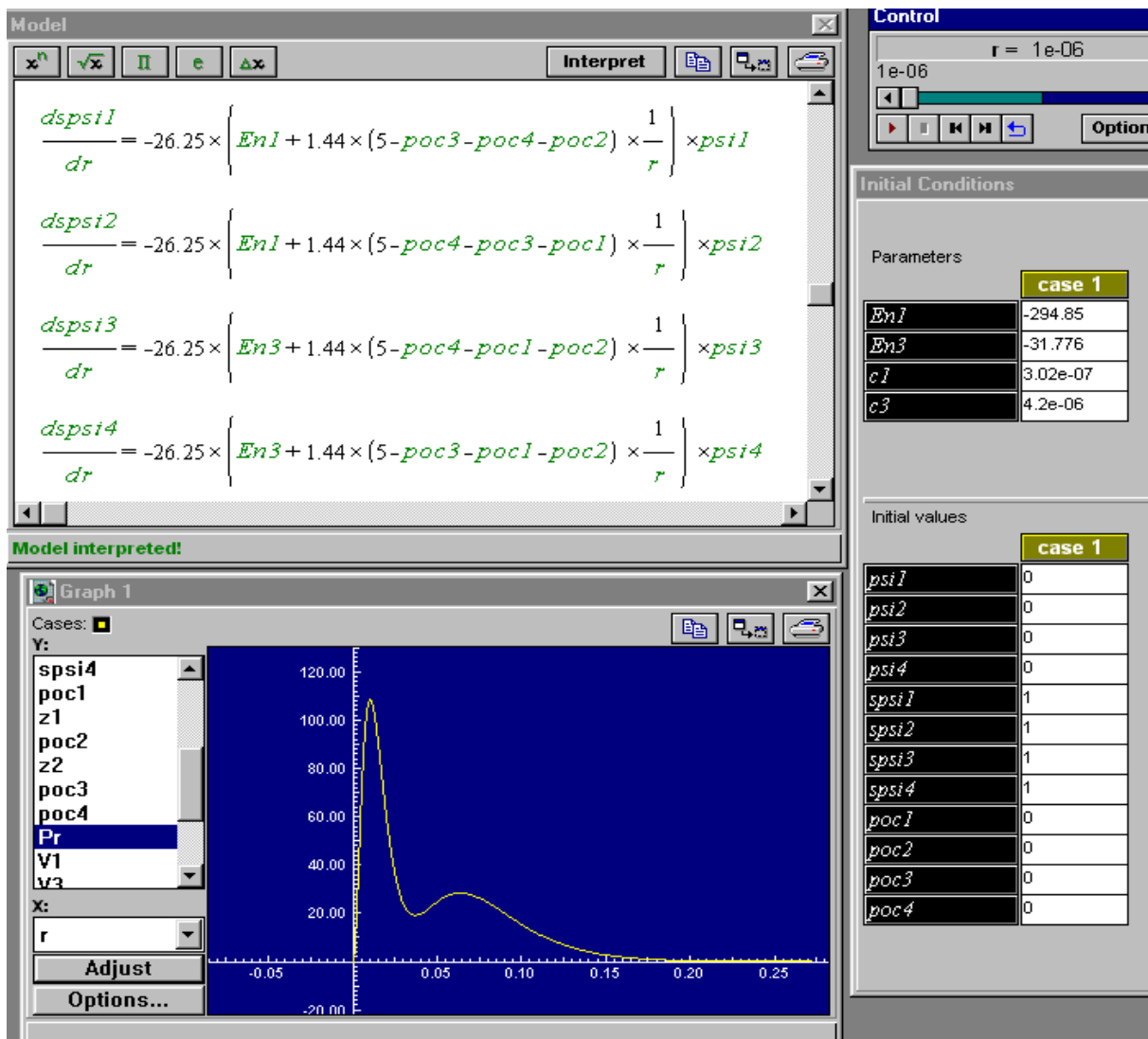
Abb. 4.5.7: Ausschnitte des Modells von Beryllium (Step: 0.0005)



• Bor

Beim einfachen Bor-Ion (Abb. 4.5.8) sinkt der Radius erwartungsgemäß noch etwas weiter. Die Gesamtenergie liegt bei -326.62 eV (Literaturwert -362.67 eV)

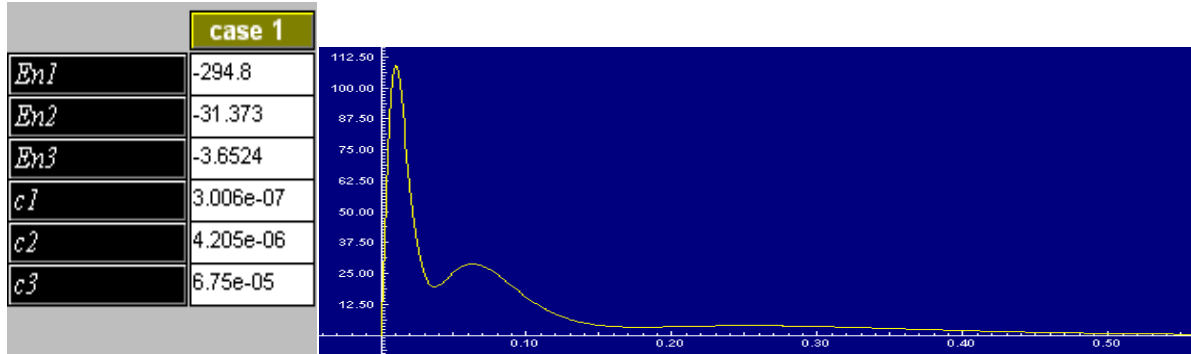
Abb. 4.5.8: Ausschnitte des Modells von Bor¹⁺ (Step: 0.001, En1 = En2, En3 = En4)



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

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

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



- **energetische und geometrische Schalenstruktur**

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

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

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

4.6 Abschnitt 6: Einelektronensysteme II

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

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

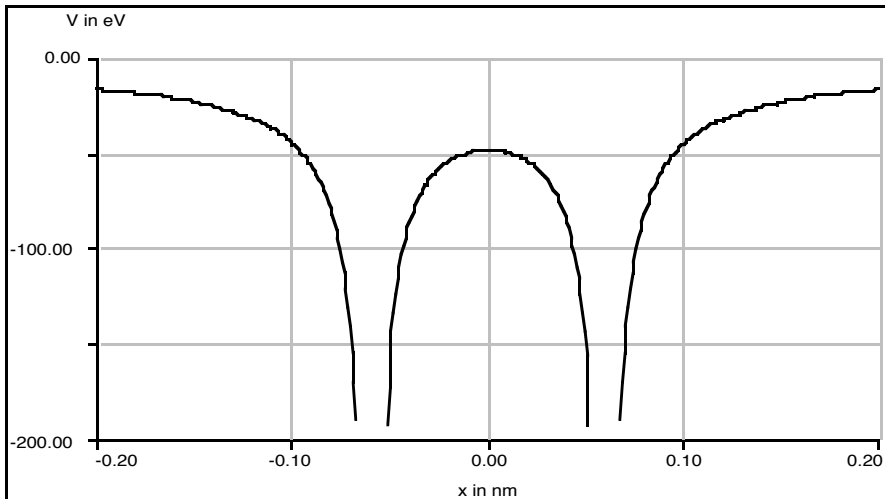
4.6.1 Das H_2^+ - Molekülion: Potential und Molekülbindung

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

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

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

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

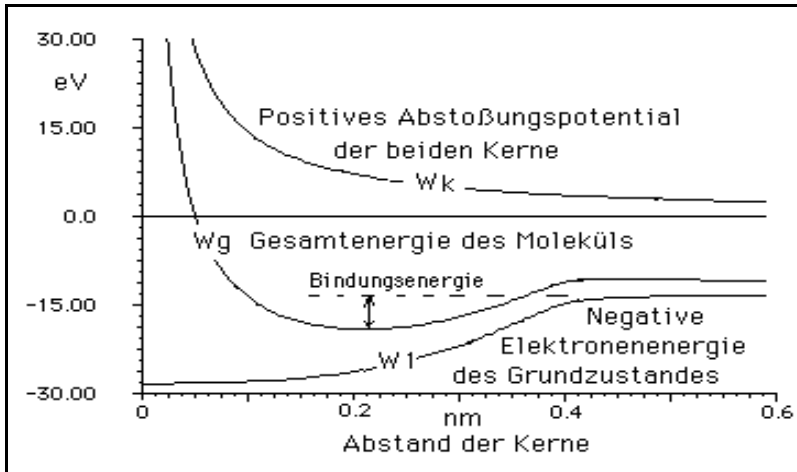


Bei großem Abstand d der Kerne ($d > 0.6$ nm) ist die gemeinsame ψ -Funktion des Elektrons etwa gleich der halben (!) Summe der ψ -Funktionen von zwei H-Atomen (es gibt ja nur ein Elektron). Man hat quasi zwei bzgl. des Atomkerns jeweils symmetrische Ladungsdichteverteilungen nebeneinander angeordnet.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

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

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

Abb. 4.6.2: Bindungsenergie des Molekülions und Kernabstand



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

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

4.6.2 Die Modellierung des H_2^+ -Molekülions mit MODELLUS

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

Die Atomkerne befinden sich an den Abständen $r = a$ und $r = b$ vom Nullpunkt der positiven r -Achse, d.h. links vom gesamten Ion (hier $a > b$). Die Teilpotentiale sind bzgl. a und b symmetrisch. Dies erreicht man durch den Absolutbetrag abs von $r-a$ bzw. $r - b$. Um an den Stellen $r = a$ und $r = b$ eine Division durch Null zu vermeiden, muss jeweils eine kleine Konstante r_0 , die sich nur an den Stellen a und b deutlich bemerkbar macht, zum Potential addiert werden. Der Wert von r_0 darf aber auch nicht zu klein gewählt werden, da an den Stellen a und b ansonsten sehr hohe Steigungsänderungen in ψ auftreten, die zu Problemen bei der schrittweisen numerischen Berechnung führen können. Für r_0 empfehlen sich Werte zwischen 0.001 nm und 0.0001 nm.

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

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

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

$\frac{d\psi}{dr} = s\psi$	$\frac{dc_{\text{norm}}}{dr} = \psi^2$
$\frac{ds\psi}{dr} = -26.25 \times (E_n - V) \times \psi$	$PSI = \frac{\psi}{\sqrt{c}} \times \frac{1}{rab}$
$V = -1.44 \times \left(\frac{1}{r_0 + \text{abs}(b-r)} + \frac{1}{r_0 + \text{abs}(r-a)} \right)$	$\text{if } \left(r \leq \frac{a}{2} + \frac{b}{2} \right) \text{ then } (rab = 10 \times r_0 + \text{abs}(b-r))$
$V_{\text{abst}} = \frac{1.44}{\text{abs}(b-a)}$	$\text{if } \left(r > \frac{a}{2} + \frac{b}{2} \right) \text{ then } (rab = 10 \times r_0 + \text{abs}(a-r))$
$E_{\text{ges}} = V_{\text{abst}} + E_n$	

Um zu Funktionen Ψ zu gelangen, die den Lösungen einer dreidimensionalen SGL in etwa entsprechen, wird wiederum für jedes Atom eine Division durch r vorgenommen. Dazu wird in einer Näherung eine Variable r_{ab} definiert, die sich bis zum Mittelpunkt des Moleküliions auf das Atom bei b und dann auf das Atom bei a bezieht. Der Faktor r_0 von 0.0001 nm wurde verzehnfacht, um Ψ an den Stellen a und b nicht zu groß werden zu lassen, so dass sich noch sinnvolle graphische Darstellungen ergeben.

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

Tab. 4.6.1: Parameter und einige Ergebnisse der modellierten Beispiele

Parameters				
	case 1	case 2	case 3	case 4
a	1.1	1.1	0.7	0.7
b	0.5	0.5	0.5	0.5
E_n	-15.981	-16.049	-17.545	-26.281
r_0	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
c	167.53	158.63	71.23	2.17e+05

Step: 0.005 nm

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

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

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

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

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

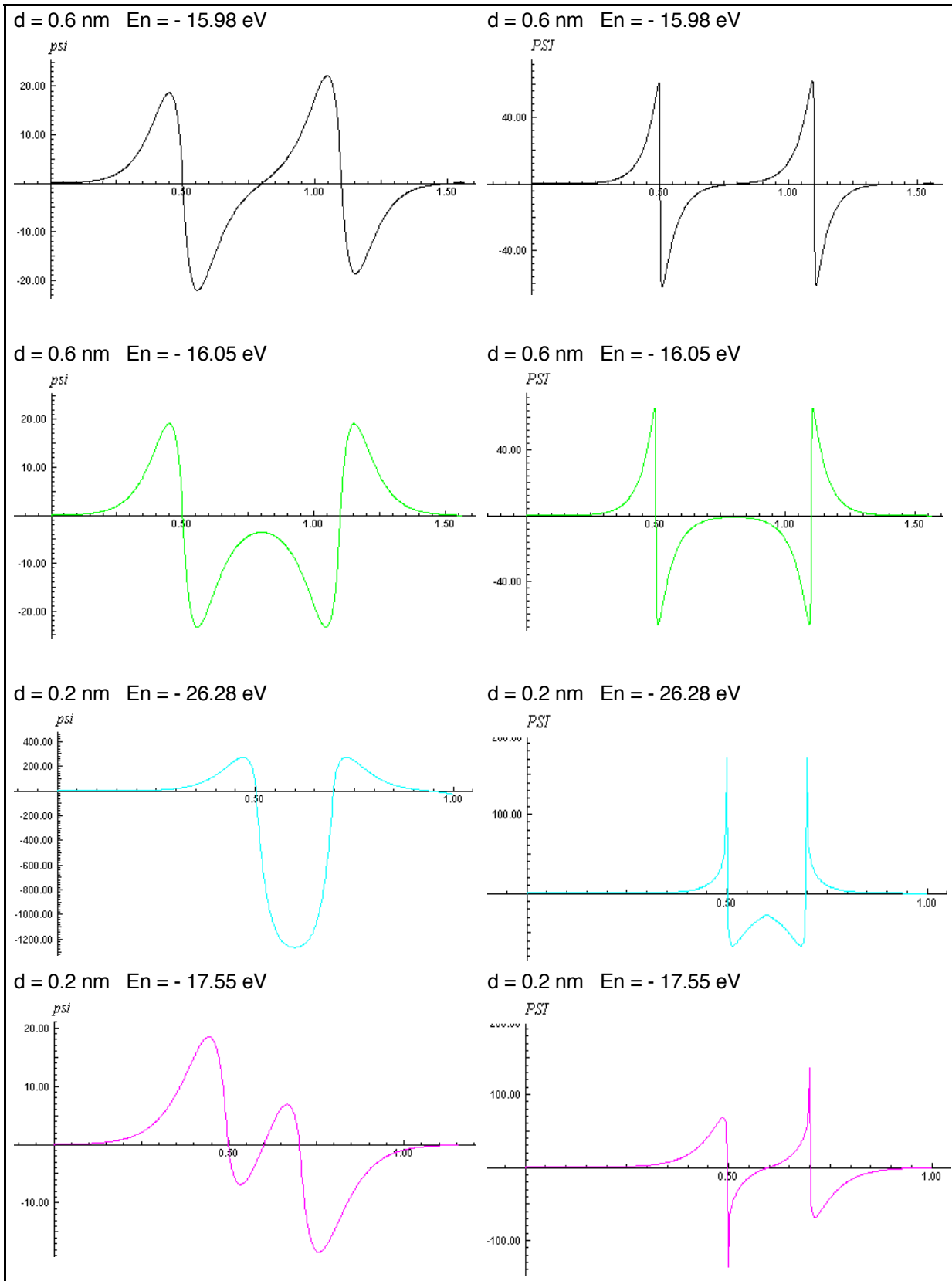
Man erkennt in beiden Fällen einen bzgl. der Achse durch den Mittelpunkt des Molekülions symmetrischen und einen antisymmetrischen Zustand. Der symmetrische Zustand liegt energetisch tiefer und hat - wie man besonders deutlich im Fall $d = 0.2$ nm sieht - einen größeren Anteil der Ladungsdichteverteilung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

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

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

Abb. 4.6.4: ψ -Funktionen eindimensional

ψ -Funktionen quasi dreidimensional



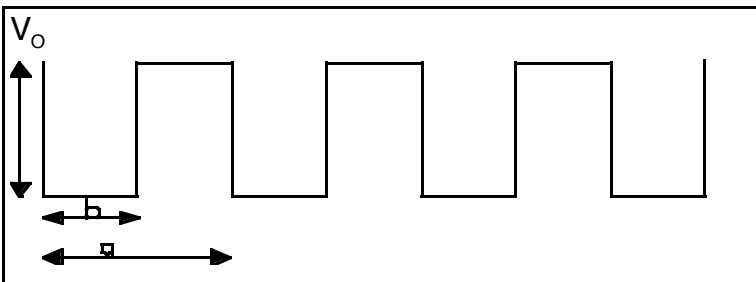
4.7 Abschnitt 7: Mehrelektronensysteme II

4.7.1 Grundlagen der Modellierung von Festkörpern

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

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

Abb. 4.7.1: Kroning-Penney-Potential: V_0 : Potentialschwelle
 a: Abstand zweier Gitterionen; b: Ionenradius



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

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

Die Höhe der Potentialstufen V_0 ist im wesentlichen von der Ladung des Ions (gleichbedeutend mit der Zahl der Valenzelektronen pro Atom) und daneben von der relativen Größe des Atoms abhängig. Da diese beiden Parameter unmittelbar die Valenzelektronendichte und damit auch die Fermi-Energie bestimmen, könnte man die Höhe der Potentialsschwellen über $2/3$ der Fermi-Energie (= Energie des höchsten Energieniveaus, das bei der Temperatur von 0 Kelvin noch besetzt ist) abschätzen. Wegen der einfacheren Durchschaubarkeit wird die Höhe der Potentialsschwelle hier durch eine Berechnung auf der Basis der Coulomb-Potentiale von einzelnen Atomrümpfen gewonnen, obwohl die Ergebnisse evtl. etwas schlechter sind als bei der Annahme einer Potentialsschwelle in der Höhe von $2/3$ der Fermi-Energie.

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

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

$$V_1(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r}$$

$$V_2(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{2r_a - r}$$

$$V(r) = V_1 + V_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Q}{r} + \frac{Q}{2r_a - r} \right) \tag{4.7.1}$$

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

$$V_0 = 1/2 (V_a - V_i) \tag{4.7.2}$$

angenähert wird.

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

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

Tab. 4.7.1: Parameter für Potentialtopfmodelle einiger Hauptgruppenmetalle

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

4.7.2 Ein Potentialtopfmodell für Festkörper mit MODELLUS

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

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

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

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

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

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

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

a

$$\frac{d\psi}{dr} = s\psi$$

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

```

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

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

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

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

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

dcnorm
dr = psi^2

Pr = psi^2 / c
        
```

b

```

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

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

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

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

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

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

if(r >= 1.042) then (V = 0)
        
```

c

```

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

if(r >= 1.786) then (V = 0)
        
```

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

Ein Atom	Zwei Atome		Vier Atome			
- 17.070	- 17.944	- 16.732	- 18.291	- 17.871	- 17.210	- 16.616
- 11.166	- 13.266	- 9.735	- 14.306	- 12.802	- 10.926	- 8.734

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

des zweiten Bandes von ca. 5.6 eV relativ schmale Lücke von ca. 2.3 eV. Dies liegt daran, dass die innere Potentialtopfschwelle V_0 relativ niedrig im Vergleich zum Topfboden ist. Die höheren Zustände unterscheiden sich nur noch unwesentlich von Zuständen in einem einfachen Rechteck-Potentialtopf mit endlich hohen Wänden, in dem keine Bänderstruktur auftritt. Die Energieniveaus liegen dort nach oben hin lediglich zunehmend dichter. Man erkennt ebenfalls den bei der Aufspaltung der Niveaus auftretenden Effekt der Absenkung bzw. Anhebung von jeweils der Hälfte der Niveaus bzw. des Ausgangsniveaus. (In Abb. 4.7.3.c wurden die Graphiken aus zwei getrennten Modellen zusammenkopiert.)

Abb. 4.7.3: Potentialtöpfe und Energieniveaus für Natrium

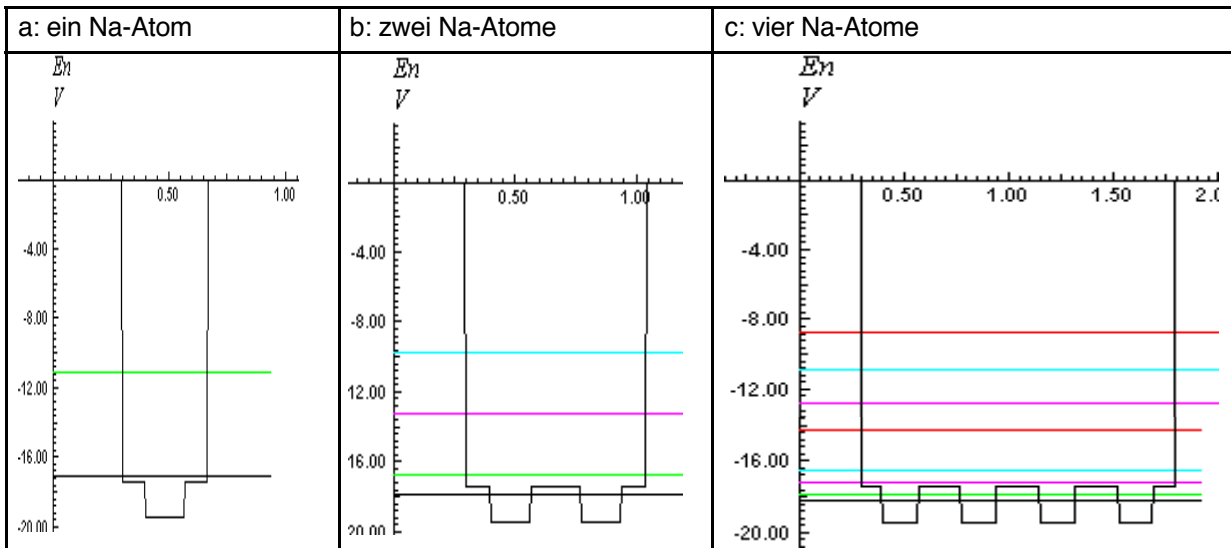
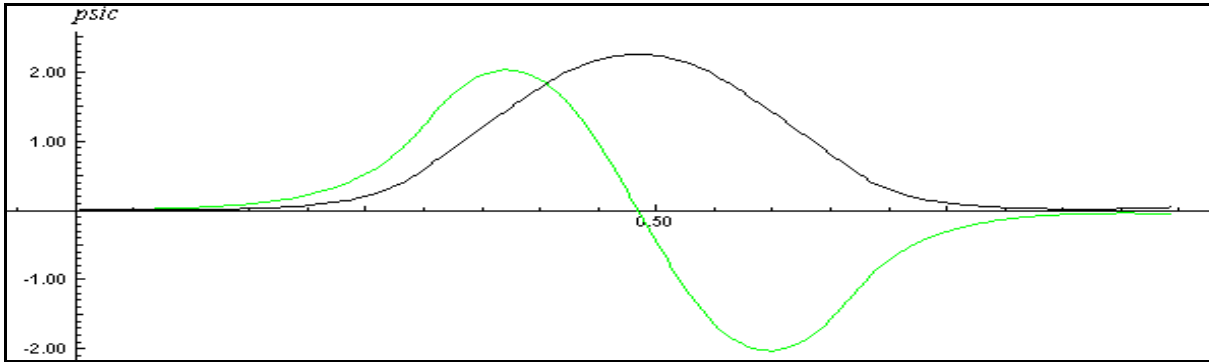


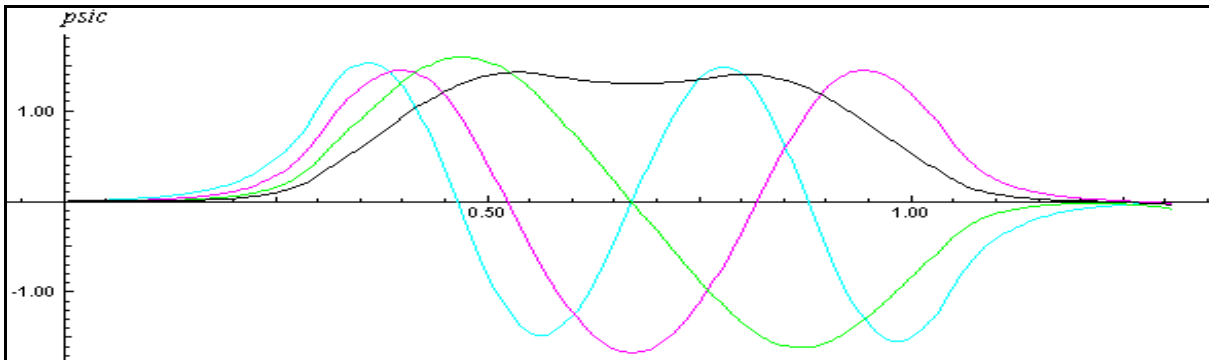
Abb. 4.7.4 zeigt die entsprechenden Zustandsfunktionen ψ , Abb. 4.7.5 die Dichteverteilungen ψ^2 (nur für die tieferen Zustände). Von Zustand zu Zustand wächst die Zahl der Knoten um einen. Daran sieht man auch, dass man bei der Modellierung keine Zustände übersprungen hat. Bei den niedrigsten Zuständen,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

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

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



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



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

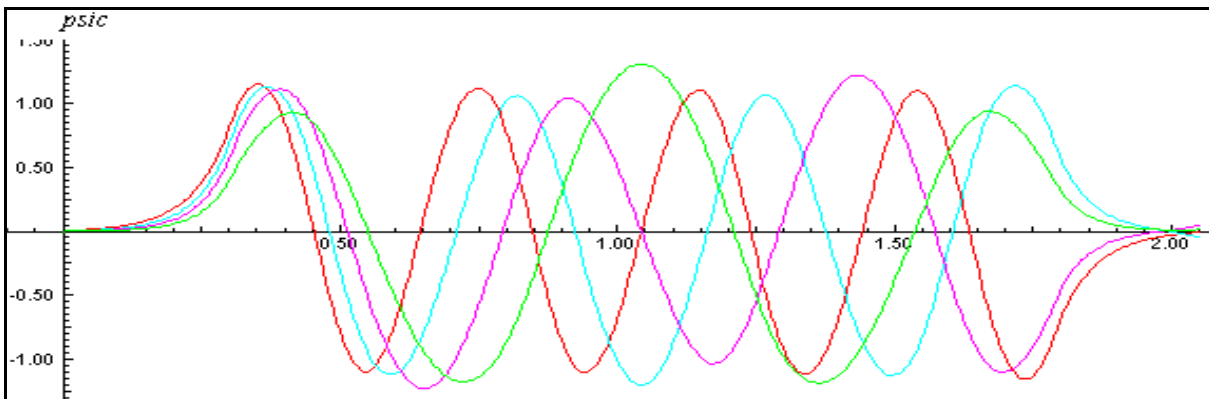
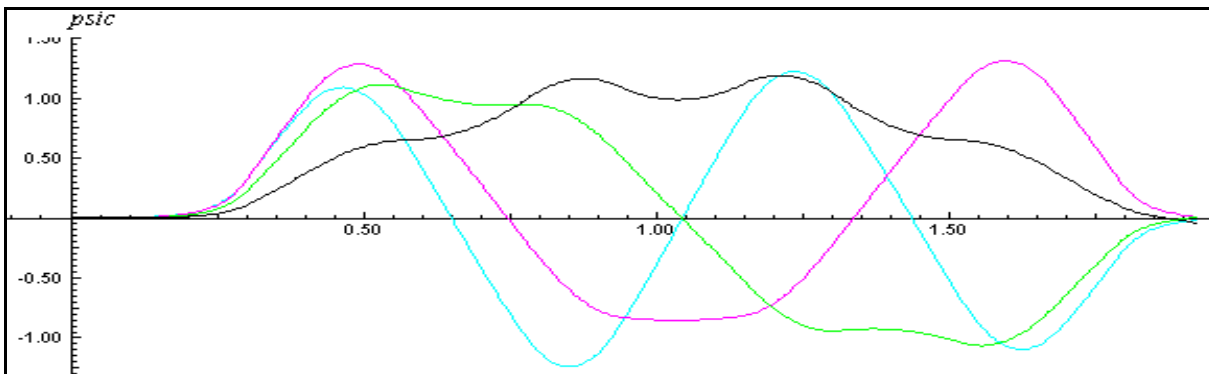
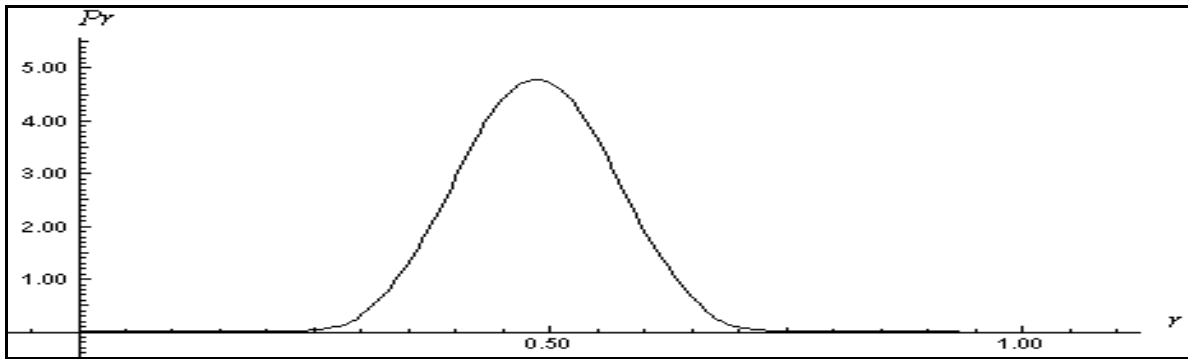
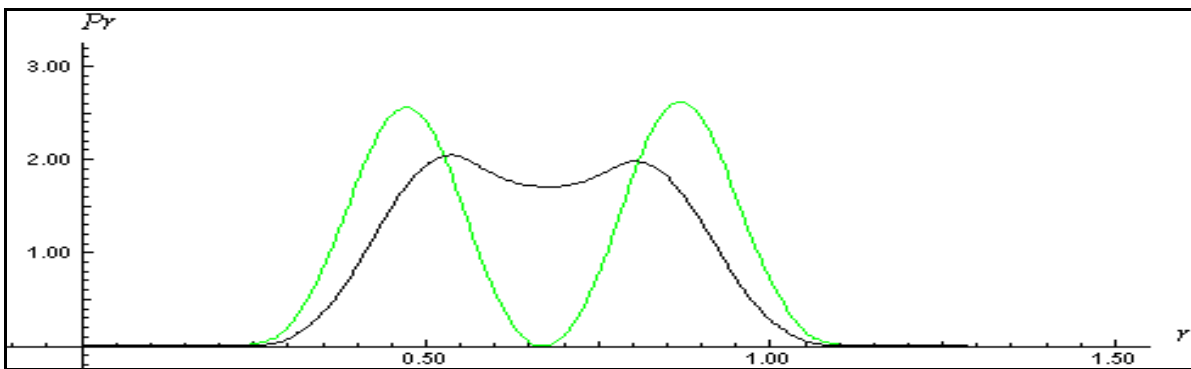


Abb. 4.7.5: Die Dichteverteilungen ψ^2 zu den für Natrium berechneten Energieniveaus

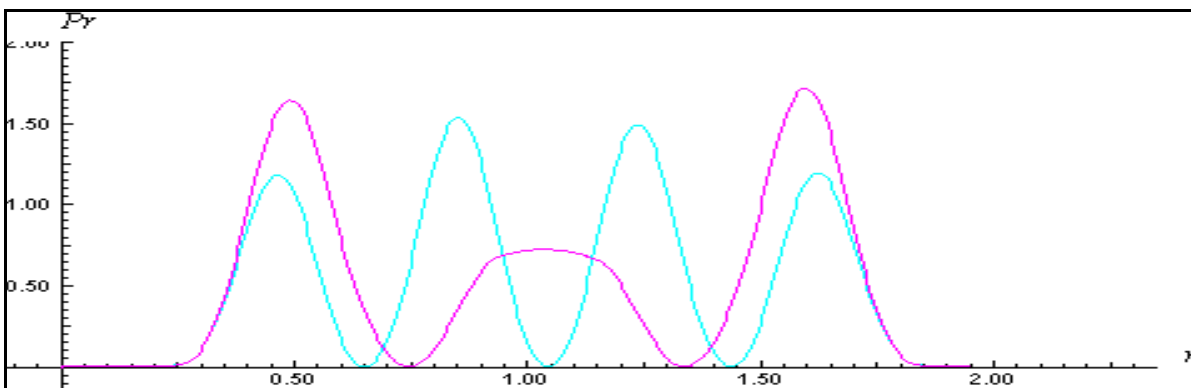
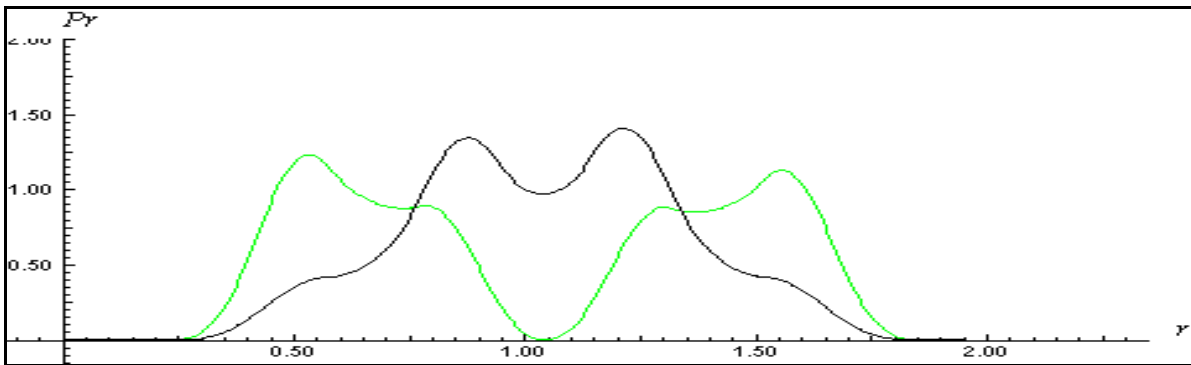
a: ein Na- Atom, Kern bei $r = 0.48$ nm



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



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



4.7.3 Modellierung und physikalische Eigenschaften

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

- **chemische Bindung**

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

- **mechanische Eigenschaften**

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

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

- **optische Eigenschaften**

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

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

- **elektrische Eigenschaften**

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

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

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

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

• **Vergleich verschiedener Festkörper**

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

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

In Verbindung mit dem stoffklassenspezifischen Verhalten der Feststoffe bedeutet dies:

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

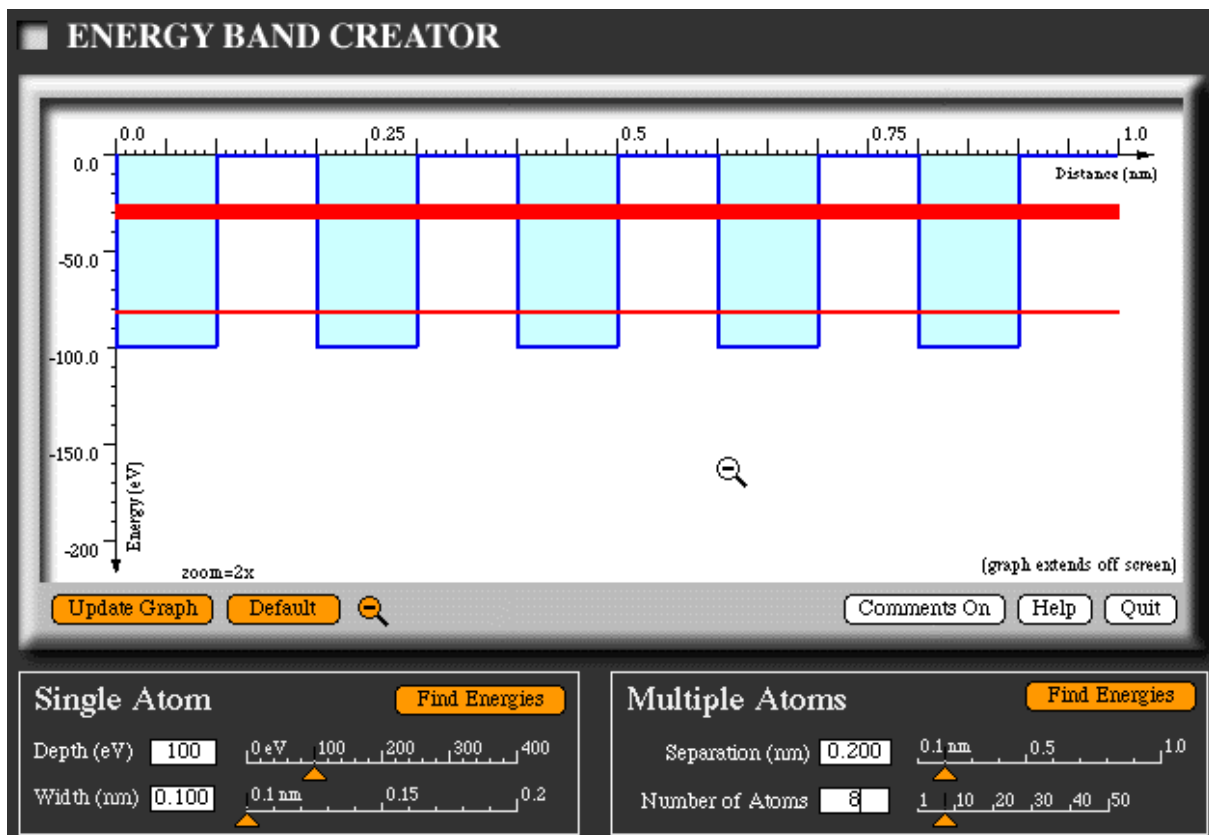
4.7.4 Die Simulationssoftware ENERGY BAND CREATOR

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

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

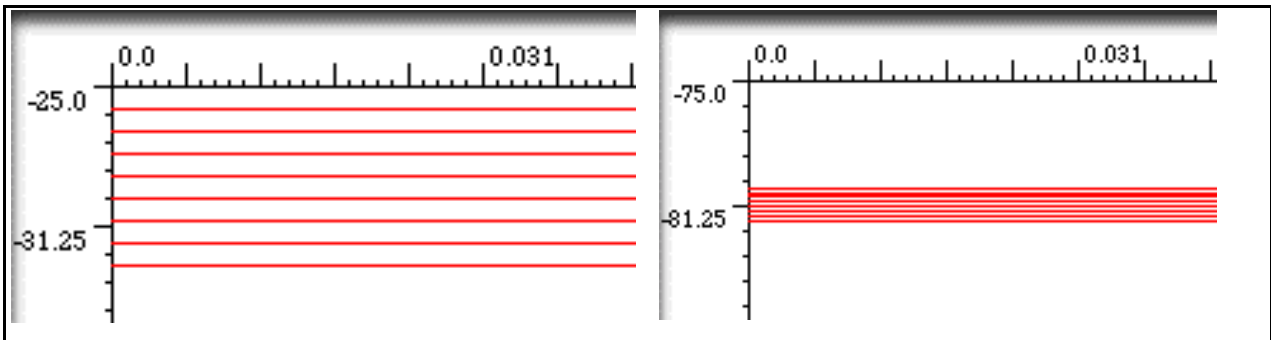
Im abgebildeten Beispiel wurden acht einzelne Töpfe mit einer Potentialtiefe von - 100 eV aneinandergereiht. Wegen der eingestellten zweifachen Vergrößerung sind nur noch fünf Töpfe dargestellt.

Abb. 4.7.6: Die Simulationssoftware ENERGY BAND CREATOR



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

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



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

Die Zustandsfunktionen können mit diese Software nicht dargestellt werden.

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

5 Schülervorstellungen und Unterrichtsverlauf

5.1 Schülervorstellungen in der Atom- und Quantenphysik

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

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

- **Modell und Wirklichkeit**

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

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

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

(M2) Modelle dienen der Veranschaulichung

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

- **Experiment und Messung**

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

- **Energie**

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

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

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

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

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

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

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

- **Elektron, Bahn und Bewegung**

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

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

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

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

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

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

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

- Die Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Bahn wird angegeben.
- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf einem bestimmten Abschnitt einer Bahn wird angegeben.
- Die Bahnen sind "verschmiert".

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

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

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

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

- **Wahrscheinlichkeit**

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

(W1) Wahrscheinlichkeit als Interpretations- oder Übersetzungskalkül

(W2) Wahrscheinlichkeit als akausale Beschreibung

(W3) Wahrscheinlichkeit als Ungenauigkeit

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

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

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

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

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

- **Atom**

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

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

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

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

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

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

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

Inhaltsebene

- Planetenmodell
- Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell
Das Atom besteht aus dem Kern und den Elektronen. Die Elektronen befinden sich in durch die ψ -Funktion definierten Aufenthaltsräumen. Die Elektronen bewegen sich nicht.
- Ladungswolkenmodell
Das Atom besteht aus dem Atomkern und der Elektronenladungswolke. Diese Wolke ist statisch. Die Elektronen sind in ein "verschmierten Etwas" aufgelöst.

Verwaltungsebene

- Beziehung
Das Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell geht aus dem Planetenmodell in deutlicher Abgrenzung hervor. Die Bewegung des Elektrons wird "gestoppt". Die Aufenthaltsbereiche des Elektrons sind wesentlich größer (Orbital statt Orbit). Das Ladungswolkenmodell entsteht in weiterer Abgrenzung von beiden Modellen. Das Elektron als Teilchen wird in eine statische Ladungswolke aufgelöst.
- Stärke
Ladungswolkenmodell < Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell < Planetenmodell
Das Planetenmodell wird spontan assoziiert. Die anderen Modelle werden bewusst davon abgegrenzt. Diese Abgrenzung ist beim Ladungswolkenmodell wesentlich konsequenter, deutlicher und expliziter.
- Status
Ladungswolkenmodell > Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell > Planetenmodell
Das Ladungswolkenmodell ist als quantenphysikalisches Modell moderner und hat sich in vielen Bereichen als erfolgreich und dem Planetenmodell überlegen erwiesen. Es ist plastisch-anschaulicher und in vielen Fällen auch fruchtbarer als das Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell. Das Aufenthaltswahrscheinlichkeitsmodell selbst hat als quantenphysikalisches Modell einen höheren Status als das Planetenmodell.

5.2 Konsequenzen für die Bremer Konzeption zur Atomphysik

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

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

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

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

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

- **hoher Interaktionsanteil, Bewusstwerdung von Vorstellungen**

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

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

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

- **Anwendungsorientierung**

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

- **Anschaulichkeit**

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

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

- **Zustandsbegriff**

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

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

- **Ladungsdichteverteilung und ψ -Funktion**

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

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

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

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

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

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

- **Potentialbegriff**

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

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

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

5.3 Unterrichtsverlauf: Überblick über mögliche Alternativen

- **Zum Thema Zeitbedarf**

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

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

- **Zum Thema Grundkurse**

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

- **Vorschläge für den Unterrichtsverlauf**

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

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

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

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

• **Rückmeldung erbeten**

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

Tab. 5.3.1: Alternativen zum Unterrichtsverlauf

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

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

6 Literatur- und Softwareverzeichnis

- Bayer, H. (1986): Schülervorstellungen beim Übergang vom Bohrschen zum wellenmechanischen Atommodell. In W. Kuhn (Hrsg.), Vorträge Physikertagung Gießen, Fachausschuss Didaktik der Physik, Gießen: DPG, S. 249-256.
- Bayer, R. et.al. (1997): Impulse Physik 2, Klasse 12 - 13. Stuttgart: Klett.
- Bäuerle, W. et.al. (1988): Umwelt: Chemie. Stuttgart: Klett.
- Berg, A., Fischler, H., Lichtfeldt, M., et. al. (1989): Einführung in die Quantenphysik. Ein Unterrichtsvorschlag für Grund- und Leistungskurse. Berlin: Pädagogisches Zentrum.
- Bethge, T. (1988): Aspekte des Schülervorverständnisses zu grundlegenden Begriffen der Atomphysik. Dissertation, Universität Bremen.
- Bethge, T. (1992): Schülervorstellungen zu grundlegenden Begriffen der Atomphysik. In: Fischler, H. (Hrsg.): Quantenphysik in der Schule, Kiel: IPN, 215-233.
- Bormann, M. (1987): Das Schülervorverständnis zum Themenbereich "Modellvorstellungen zu Licht und Elektronen". In W. Kuhn (Hrsg.), Vorträge Physikertagung Berlin, Fachausschuss Didaktik der Physik, Gießen: DPG, 475-481.
- Cassens, H. (1992): Anwendungen quantenphysikalischer Erkenntnisse im Unterricht. In: Fischler, H. (Hrsg.): Quantenphysik in der Schule, Kiel: IPN, 114-133.
- Christen, H. R. (1986): Chemie. Vom Experiment zur Theorie, Teil 2. Frankfurt a.M.: Diesterweg.
- Deylitz, S. (1999): Lernergebnisse in der Quanten-Atomphysik. Evaluation des Bremer Unterrichtskonzepts. Berlin: Logos.
- Eckhardt, H. (1982): Aufbau und Struktur der Atomhülle - Periodensystem und Bindung. Stuttgart: Klett.
- Fick, E. (1979): Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie. 4. Aufl., Akademische Verlagsgesellschaft: Wiesbaden.
- Gerthsen, C., et.al. (1989): Physik. 16. Aufl., Berlin et.al.: Springer.
- Grehn, J. (1982): Metzler Physik. Gesamtband, 1. Aufl., Stuttgart: Metzlersche Verlagsbuchhandlung.
- Grehn, J. (1988): Metzler Physik. Gesamtband, 2. Aufl., Stuttgart: Metzlersche Verlagsbuchhandlung.
- Haken, H., Wolf, H.C. (1993): Atom- und Quantenphysik. Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen. 5. Aufl., Berlin et. al.: Springer .
- Herrmann, F., Laukemann, M. (1994): Atomphysik in der Sekundarstufe I. Karlsruher Physikkurs. In: Physik in der Schule 32, 262 - 265.
- Koppelman, G. , et.al. (1981): Von Bohrschen Bahnen zu den Orbitalen (Eine Einführung mit Modellversuchen und Anschauungshilfen). In: Scharmann, A., Hofstaetter, A., Kuhn, W.(Hrsg.): DPG Vorträge der Frühjahrstagung 1981, Universität Gießen, 637-643.
- Kuhn, W. (Hrsg.) (1990): Physik. Band II, 2. Teil: Klasse 12/13. Braunschweig: Westermann.
- Lichtfeldt, M. (1992): Schülervorstellungen in der Quantenphysik und ihre möglichen Veränderungen durch Unterricht. Essen: Westarp
- Meyer-Kuckuk, T. (1980): Atomphysik. 2. Aufl., Stuttgart: Teubner.
- Niedderer, H. (1983): Mechanische Analogieexperimente für Wellenfunktionen in verschiedenen Potentialtöpfen. In: Scharmann, A., Hofstaetter, A., Kuhn, W. (Hrsg.): Vorträge auf der Physikertagung 1983, Universität Gießen, 516-524.
- Niedderer, H. (1984): Stehende Seilwellen mit variabler Massendichte zur eindimensionalen Simulation der Psi-Funktion im H-Atom. Der Physikunterricht 15, Heft 1, 64-68
- Niedderer, H. (1987): Die chemische Bindung im H_2^+ -Molekül - veranschaulicht und berechnet mit zwei einfachen Potentialtopfmodellen. In W. Kuhn (Hrsg.), Vorträge Physikertagung 1987 Berlin. 564-578. DPG, Fachausschuss Didaktik der Physik, Gießen.
- Niedderer, H., Bethge, T., Schernau, M. (1987): Simulationsprogramme zum wellenmechanischen Atommodell. Universität Bremen.
- Niedderer, H., Bethge, T., Cassens, H. (1990): A Simplified Quantum Model - a Teaching Approach and Evaluation of Understanding. In: P.L. Lijnse et. al. Eds.), Relating Macroscopic

- Phenomena to Microscopic Particles - A Central Problem in Secondary Science Education (67-80). Utrecht: CD-β Press.
- Niedderer, H. (1991): Eine Unterrichtsfallstudie zur Atomphysik. In H. Wiesner (Hrsg.), Aufsätze zur Didaktik der Physik II. Bad Salzdetfurth: Franzbecker .
- Niedderer, H. (1992): Atomphysik mit anschaulichem Quantenmodell, in: Fischler, H. (Hrsg.): Quantenphysik in der Schule, Kiel: IPN, 88-113
- Niedderer, H. , Schecker, H. (1982): Ziele und Methodik eines wissenschaftstheoretisch orientierten Physikunterrichts. In: Der Physikunterricht, 16 (1/1982), 58-71.
- Niedderer, H., Cassens, H., Petri, J. (1994): Anwendungsorientierte Atomphysik in der S II - Zustände und Orbitale von Atomen, Molekülen, Festkörpern. In: Physik in der Schule 32, 266 - 270.
- Petri, J. (1996): Der Lernpfad eines Schülers in der Atomphysik - Eine Fallstudie in der Sekundarstufe II. Aachen: Verlag Mainz.
- Petri, J., Niedderer, H. (1998a): A learning pathway in high-school level quantum atomic physics. Int. J. Sci. Educ., Vol. 20, No. 9, 1075-1088.
- Petri, J., Niedderer, H. (1998b): Die Rolle des Weltbildes beim Lernen von Atomphysik - Eine Fallstudie zum Lernpfad eines Schülers. Zeitschrift für Didaktik der Naturwissenschaften ZfDN 4 (1998), Heft 3, 3 - 18.
- Schreiner, J. (1978): Anschauliche Quantenmechanik. Frankfurt: Diesterweg.
- MODELLUS (1997): Vitor Duarte Teodoro (für PC)
<http://phoenix.sce.fct.unl.pt/modellus>
- STELLA (1996): High Performance Sytems. Hanover, NH. (PC und Mac)
<http://www.hps-inc.com/>
- VISUAL QUANTUM MECHANICS (VQM) (1996): D. Zollman et.al. (PC und Mac)
<http://www.phys.ksu.edu/perg/vqm>
- vLab (1998): Thorsten Klein (für PC)
- e-Wolke (1997): Hermann Lüdicke (für Mac)
- cT-Quantum Well (1987): B. Sherwood (für Mac)