

A) Quantentheorie

- 1) Planck entdeckte die Quantisierung der Bewegungsmöglichkeiten atomarer Oszillatoren.
Die Energieverteilung der elektromagnetischen Strahlung eines Körpers der Temperatur T , als Funktion der Strahlungsfrequenz bzw. der Farbe, ist nur erklärbar, wenn das Schwingungsverhalten seiner Atome *quantisiert* ist:

Es sind nur diejenigen Schwingungsamplituden erlaubt, bei denen die zugehörigen Schwingungsenergien Vielfache von $h \cdot f_{Osz}$ sind. Für einen einfachen Oszillator gilt

$$f_{Osz} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{D}{m}} .$$

Die *baubedingte* Eigenfrequenz des Oszillators ist also überraschenderweise für die erlaubten Amplituden (Anfangsauslenkungen) verantwortlich. Wegen der eingeschränkten Bewegungsmöglichkeiten ist auch die EM-Wellen-Abstrahlung der Oszillatoren eingeschränkt. Das reicht, um das Ausbleiben der UV-Katastrophe zu erklären.

Aufgabe: Erkläre, inwiefern Planck das Tor zur Quantentheorie aufstieß.

- 2) Einstein entdeckte die Quantisierung der elektromagnetischen Strahlung (des Lichtes).
Beim Photoeffekt werden Elektronen durch Lichteinstrahlung aus einem Metall ausgelöst. Unterhalb einer materialabhängigen Grenzfrequenz bleibt die Photoemission aus. Oberhalb von f_G steigt die kinetische Energie der emittierten Elektronen linear an. Dieses Verhalten ist nur erklärbar, wenn die Amplitude und die damit verbundene Wellenenergie W_{Licht} der EM-Welle (des Lichtes) *quantisiert* ist: Die Energie des Lichtes kann nur Vielfache des Wertes $h \cdot f_{Licht}$ annehmen. Da die geringst mögliche Energie einer Lichtwelle der Frequenz f_{Licht} den Wert $1 \cdot h \cdot f_{Licht}$ besitzt, nennt man dieses Energiequantum „Photon“ und schreibt $W_{Ph} = h \cdot f_{Ph}$ mit $f_{Ph} = f_{Licht}$. Gemäß Superpositionsprinzip können zwei Lichtwellen sich nicht gegenseitig beeinflussen, sie überlagern sich lediglich. Deshalb können auch zwei Photonen weder miteinander wechselwirken, noch gemeinsam agieren. Mittels dieses zusätzlichen „1zu1“-Prinzips, nach welchem jeweils nur *ein* Photon mit *einem* Elektron in Wechselwirkung treten kann, wird der Photoeffekt erklärbar.
Aufgabe: Skizziere die geschlossene und offene Schaltung einer Photozelle und erläutere jeweils das physikalische Geschehen. Erkläre, wie sich das Plancksche Wirkungsquantum h experimentell aus den Daten des Photoeffektes ermitteln lässt.

- 3) Compton entdeckt durch Stoßversuche, dass das Photon ein „echtes“ Teilchen ist.
Durch Gleichsetzen von $W = m \cdot c^2$ und $W = h f = h \cdot c / \lambda$ erhält man für das Photon die Masse $m = h / \lambda \cdot c$, wodurch auch klar wird, dass das Photon ein echtes Teilchen ist.
Aufgabe: Erläutere den Versuchsaufbau zum Comptoneffekt und erkläre, wie sich die Energieabgabe des Photons beim elastischen Stoß mit dem Elektron experimentell äußert.

- 4) Dualismus der Lichtes.

Licht ist eine elektromagnetische Welle, bei welcher die elektrische Feldstärke E und die magnetische Flussdichte B Schwingungen mit der Lichtfrequenz f_{Licht} ausführen.

Die EM-Welle breitet sich mit der Lichtgeschwindigkeit $c = 300\,000\,km/s$ im Raum aus. Überlagern sich zwei Wellenzüge, so addieren sich die Auslenkungen des elektrischen und magnetischen Feldes. Sind die beiden Wellen gleichfrequent und in Phase, so führt die Überlagerung zu Stellen, an welchen *dauerhaft* Auslöschung bzw. Verstärkung herrscht (Interferenz). Dies ist z.B. am Doppelspalt oder Beugungsgitter nachweisbar.

Licht besteht aus Photonen, welche (als stoßende Teilchen) eine Masse besitzen. Das wird beim Photoeffekt und beim Comptoneffekt offenbar. Ein weiterer Beleg für den Teilchencharakter ergibt sich bei Beleuchtung einer Photoplatte mit sehr geringer Intensität:

Der Film schwärzt sich *nicht* gleichmäßig, im Gegenteil, von Zeit zu Zeit registriert man *einzelne* Schwärzungspunkte. Nach wochenlanger Beleuchtung „verschmieren“ die Schwärzungspunkte zu genau derjenigen Schwärzung, welche sich im Wellenbild durch die Interferenz sofort ergeben würde.

Der Dualismus sagt, dass Licht eine *Doppelnatur* besitzt. Individuell besteht es aus Teilchen. Doch jedes *einzelne* Teilchen trägt, gemäß der Gleichung $W_{ph} = h \cdot f_{Licht}$, die *kollektive* Eigenschaft *aller* Teilchen, nämlich die Frequenz der Welle aller Teilchen, in sich. Die statistische Gesamtheit *aller* Photonen ist also durch die EM-Welle gegeben.

Aufgabe: Erläutere den Dualismus der elektromagnetischen Welle. Erkläre am Beispiel der Schwärzung der Photoplatte, inwiefern das individuelle Verhalten Teilchencharakter und das kollektive Verhalten Wellencharakter besitzt.

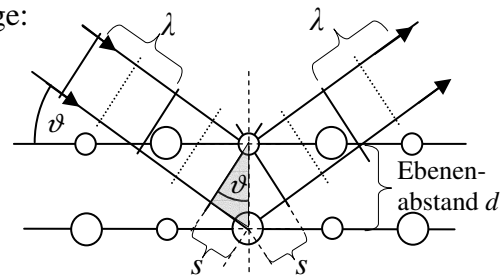
5) De Broglie überträgt den Dualismus auf Materieteilchen.

Aus rein geistigen Gründen fordert De Broglie eine „Symmetrie“ in der Natur: Wenn Licht Welle *und* Teilchen ist, dann müssen die *Materieteilchen* auch *Wellencharakter* haben.

De Broglie löste die Gleichung $m = h / \lambda \cdot c$ für die Masse der Photonen nach λ auf, ersetzt die Lichtgeschwindigkeit c durch die Teilchengeschwindigkeit v und erhielt so die Wellenlänge $\lambda = h / m \cdot v$ der *Materiewelle*.

Dieses Konzept lieferte sogleich etliche große Erfolge:

- a) Bragg-Reflexion: Die Materiewelle von Elektronen, Neutronen oder anderen Elementarteilchen zeigt am kristallinen Beugungsgitter Interferenz. Bei gegebenem λ wird unter denjenigen Winkeln ϑ reflektiert, für die der Gangunterschied $2 \cdot s = n \cdot \lambda$ beträgt. Mit $s = d \cdot \sin \vartheta$ ergeben sich die *Glanzwinkel* aus $2 \cdot d \cdot \sin \vartheta_n = n \cdot \lambda$



- b) v-Filter für Neutronen: Strahlt man z.B. Neutronen (m_N) verschiedener Geschwindigkeit schräg auf den Kristall mit dem Netzebenenabstand d , so filtert man unter dem Winkel ϑ Neutronen der Geschwindigkeit $v = h / (2d m_N \sin \vartheta)$ aus.
- c) Elektronenmikroskop: λ ist bei großem v sehr klein. Weil die Wellenlänge für das Auflösungsvermögen des Mikroskops verantwortlich ist, konnte das Elektronenmikroskop mit sehr hoher Auflösung zunächst erdacht und dann gebaut werden.
- d) Phononen: Der Gedanke von De Broglie lässt sich auch umkehren: Durchläuft eine akustische Welle mit Wellenlänge λ , Intensität $I = \Delta W / \Delta A \cdot \Delta t$ und Schallgeschwindigkeit v ein Kristallgitter, so lässt sich diese als Strom von Schallteilchen = Phononen der Masse $m = h / \lambda \cdot v$ ansehen. Analog heißen die Teilchen der Spinwelle Magnonen.
- e) Das bis dahin unbegründete Bohrsche Atommodell des H-Atoms wurde nachträglich verständlich: Nur solche Bahnen sind zulässig, auf welche ganzzahlige Vielfache der, zu der Umlaufgeschwindigkeit gehörigen, Wellenlänge passen.

Aufgabe: a) Berechne die Geschw. von Neutronen ($m_N = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$), die unter $\vartheta = 1^\circ$ am Netzebenenabstand $d = 0,3 \text{ nm}$ reflektiert werden. b) Zeige, dass die Wellenlänge der Materiewelle eines mit U_A beschleunigten Elektrons $\lambda = h / \sqrt{2emU_A}$ beträgt. Berechne λ für ein E-mikroskop mit $U_A = 5 \text{ kV}$. Vergleiche Auflösungsverm m d Lichtmikroskop.

6) Aus dem Dualismus ergibt sich die Heisenberg'sche Unschärfe-Relation.

Um den Ort eines Teilchens möglichst genau zu ermitteln, muss man die zugehörige Welle auf einen sehr kleinen Raumbereich einschnüren. Dann wird λ aber sehr klein. Das hat nach $\lambda = h / m \cdot v$ zur Folge, dass v unkontrollierbar groß wird und das Teilchen von seinen Bestimmungsort „entfleucht“. Der minimale Kompromiss zwischen der Ortsgenauig-

keit Δx und der Geschwindigkeits- bzw. Impulsungenauigkeit Δp_x (in dieser Richtung) ist durch die Heisenberg'sche Unschärfe-Relation $\Delta x \cdot \Delta p_x > h$ gegeben.

Aufgabe: Wenn ein Neutron aus einem Proton und einem Elektron zusammengesetzt wäre, so wäre $\Delta x \approx d_{\text{Neutron}} \approx 1,7 \cdot 10^{-15} \text{ m}$. Welcher Wert folgt daraus für $v_x \approx \Delta p_x / m_e$?

Wie groß wäre dann die kinetische Energie $W_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2$ des Elektrons.

7) Das Messproblem als Folge der Heisenberg'schen Unschärferelation.

Ist z.B. der Ort eines Elektrons durch Messung *exakt* ermittelt, so ist nach der HUR die Geschwindigkeit *vollkommen unbestimmt*. Nach einer Ortsmessung „hat“ das Elektron also einen Ort, denn eine erneute Ortsmessung *reproduziert* diesen, aber einen Geschwindigkeitswert „hat“ das Elektron *nicht* mehr, die Geschwindigkeit ist sozusagen „weg“.

8) Schrödinger verallgemeinerte das Wellenkonzept von De Broglie.

Die Materiewelle erfüllt den dreidimensionalen Raum. Daher brauchte man eine Bestimmungsgleichung für die möglichen Auslenkungen Ψ dieser Welle. Diese fand Schrödinger. Mit seiner Gleichung lassen sich die Atomorbitale und vieles mehr berechnen. Die Superposition zweier Materiewellen erklärt das Interferenzverhalten. Die Auslenkung Ψ ist jedoch aus mathematischen Gründen komplexwertig ($\sqrt{-1} = i$). Hier geht also *gemeinschaftliches* wissenschaftl Denken über das Vorstellungsvermögen des Einzelnen hinaus.

Aufgabe: Benenne, was mit der Schrödingergleichung berechnet wird und gib an, warum die berechnete Größe sich der unmittelbaren Anschaulichkeit entzieht.

9) Zeitunabhängige Schrödingergleichung = Messgleichung der Energie.

Isolierte Atome sind *abgeschlossene* Systeme. Hier bleiben die Bedingungen zeitlich konstant. In diesem Fall braucht man von der Ψ -Funktion nur die *räumliche* Komponente zu betrachten. Diese wird mit kleinen griechischen Buchstaben ($\psi, \varphi, \chi, \dots$) bezeichnet.

Eine Messung \mathcal{M} transformiert einen Zustand φ in einen Zustand χ . Mathematisch wird dies durch einen „Operator“ \hat{M} beschrieben: $\hat{M}\varphi = \chi$. Der Operator der Energiemessung heißt $\hat{H} = \text{Hamiltonoperator}$. Das Elektron „hat“ somit *nur dann* einen Energiewert, wenn sein Zustand ψ durch die Energiemessung *unverändert* bleibt. Das ist *nur* der Fall, wenn $\hat{H}\psi$ proportional zu ψ ist, wenn also $\hat{H}\psi \sim \psi$ bzw. $\hat{H}\psi = E \cdot \psi$ gilt. Da ψ ohne Maßeinheit ist, ist der Proportionalitätsfaktor gleich dem Energiewert des Elektrons. Diese zeitunabhängige Schrödingergleichung ist somit eine Bestimmungsgleichung sowohl für die möglichen Energien E als auch für die zugehörigen Schwingungszustände ψ_E .

Aufgabe: 1) Warum verwendet man in der QuTh. für die Beobachtungsgrößen Operatoren und nicht „normale“ Größen? 2) Was ist die Bedeutung des „Produktes“ $\hat{H}\psi$? 3) Warum muss ein stationärer Quantenzustand die Gleichung $\hat{H}\psi \sim \psi$ erfüllen? 4) Welche physikalische Bedeutung hat der Proportionalitätsfaktor E ?

10) Kopenhagener Deutung der Materiewelle nach Max Born.

Die Auslenkung Ψ der Materiewelle lässt sich wegen ihrer Komplexwertigkeit nicht veranschaulichen. Weil die Welle jedoch das kollektive Verhalten der individuellen Teilchen repräsentiert, ergab sich folgende Wahrscheinlichkeitsinterpretation:

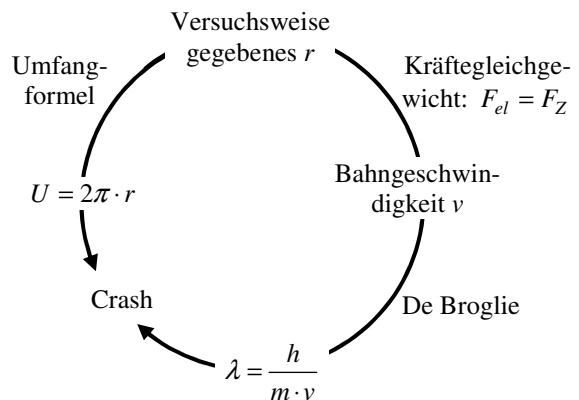
Das Betragsquadrat $|\Psi|^2$ multipliziert mit der Größe des Volumens ΔV liefert die *Wahrscheinlichkeit* dafür, das *Teilchen* bei einer Messung im Volumen ΔV zu finden.

Aufgabe: Erkläre und begründe die Born'sche Wahrscheinlichkeitsinterpretation.

B) Atome

1) Das Bohrsche Atommodell des Elektrons im Wasserstoffatom

Seit Rutherford wusste man, dass das Atom aus einem winzigen Kern und umlaufenden Elektronen besteht. Beim H-Atom umkreist ein Elektron den Kern mit der Kernladungszahl $Z = 1$. Die erlaubten Bahnen erhält man nach De Broglie am einfachsten durch den „logischen Kreis“. Nach dem Planetenmodell ist eine Kreisbahn mit Radius r nur dann stabil, wenn ein Kräftegleichgewicht zwischen der elektrischen Anziehungskraft F_{el} und der Zentrifugalkraft F_Z



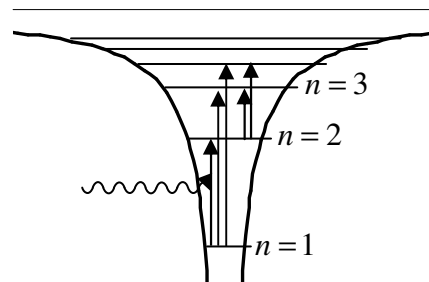
herrscht. Dadurch erzwingt ein gegebener Radius r eine gewisse Geschwindigkeit v . Nach De Broglie ergibt sich daraus eine Wellenlänge λ . Andererseits folgt aus r über $U = 2\pi \cdot r$ ein gewisser Kreisumfang U . Ein Radius ist nur dann zulässig, wenn $U = n \cdot \lambda$ gilt. Das trifft nur für ausgewählte Bahnen zu. Nach dem Oszillator findet man für das Elektron im H-Atom zum zweiten mal ein *quantisiertes* Bewegungsverhalten von Materie. Die Anzahl n der Wellenlänge λ auf dem Umfang nennt man HQZ (Hauptquantenzahl).

Ergebnis: $v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m} \cdot \frac{1}{r}}$. Erlaubten Radien $r_n = \frac{h^2 \cdot \epsilon_0}{\pi \cdot m \cdot e^2} \cdot n^2, n \in \mathbb{N}$

Für die potentielle *Energie* eines Planeten im Abstand r vom Kreismittelpunkt gilt $W_{pot} = -\frac{C}{r}$,

wobei C sich aus Naturkonstanten zusammensetzt. Weil v auf der stabilen Kreisbahn von r abhängt, ergibt sich eine Beziehung zwischen W_{kin} und

W_{pot} . Sie lautet $W_{kin} = +\frac{1}{2} \cdot \frac{C}{r}$. (Virialsatz)



Damit folgt $W_{ges} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{C}{r}$. Dieser Sachverhalt überträgt sich auf die quantisierten

Bahnen des Elektrons im H-Atom, sodass sich die quantisierten Energiewerte

$W_n = -R \cdot h / n^2$ mit $R = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3} = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ (Rydberg-Frequenz) ergeben.

Die *Energiedifferenzen* liefern das optische Absorptions- bzw. Emissionsspektrum:

Lyman: $f_{1 \rightarrow n} = \frac{1}{h} \cdot (W_n - W_1) = R \cdot \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{n^2} \right)$; $n > 1$; n ist die „Ziel-HQZ“

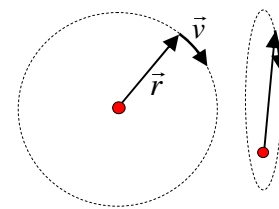
Balmer: $f_{2 \rightarrow n} = \frac{1}{h} \cdot (W_n - W_2) = R \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$; $n > 2$; n ist die „Ziel-HQZ“

Bem.: Einsetzen von r_n in v ergibt die „Wirkung“ $r_n \cdot m v = \hbar \cdot n$ mit $\hbar = h / 2\pi$.

Aufgabe: Skizziere den „Logischen Kreis“, der zur Quantisierung der Elektronenbahnen im H-Atom führt. Wie hängen die erlaubten Radien von n ab? Skizziere das Energiediagramm des Elektrons im H-Atom. Erkläre, inwiefern das H-Atom Licht absorbieren kann. Gib die Frequenzen der Lyman-Serie an. Berechne den Durchmesser des H-Atoms, beachte die Maßeinheiten: $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$; $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$; $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$; $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$.

2) Erweiterung des Bohrschen Atommodells durch Sommerfeld für das H-Atom

Für die Planeten gibt es neben den Kreisbahnen auch ellipsenförmige Bahnen. Die Sonne steht in einem der Brennpunkte. Diesen Sachverhalt hat Sommerfeld auf die Elektronenbahnen übertragen. Die Elliptizität einer Bahn entspricht dem mittleren Drehimpuls des Elektrons auf der Bahn. Der Drehimpuls lautet



$L = r \cdot mv \cdot \sin \alpha$. Je mehr der Sinus des Winkels zwischen dem Ortsvektor \vec{r} und dem Geschwindigkeitsvektor \vec{v} bei null liegt, desto kleiner ist der mittlere L -Wert und desto mehr gleicht die schlanke Ellipsenbahn einer Schwingungs- und keiner Drehbewegung. Eine exakte Schwingungsbewegung ist aber nach Heisenberg verboten, daher müssen die Ellipsen eine Minimalbreite haben. Wie Sommerfeld zeigen konnte ist auch die Elliptizität bzw. der Drehimpuls eine *quantisierte* Größe. Die zugehörige Quantenzahl heißt NQZ l . Die Laufwerte der NQZ l ist durch die HQZ n beschränkt. Es gilt $0 \leq l < n$.

$n \backslash l$	l				Anz. pro n
	s	p	d	f	
1	1				1
2	1	3			4
3	1	3	5		9
4	1	3	5	7	16

Mögl. Orientierungen im Raum

Aus historischen Gründen werden die $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ -Bahnen mit s -, p -, d -, f -... bezeichnet. Für $l > 0$ gibt es mehrere *Orientierungen* der Ellipsenbahnen im Raum. Wie alle Bewegungsformen, so ist auch die Raumorientierung eine quantisierte Größe. Die zugehörige Quantenzahl heißt „magnetische QZ“ m . Es gilt $-l \leq m \leq +l$, sodass m jeweils die $2l+1$ Werte $-l, \dots, +l$ durchläuft. Die Tabelle zeigt, dass die Anzahl der *insgesamt* möglichen Kreis- und Ellipsenbahnen mit dem *Quadrat* der HQZ n anwächst.

Bedeutung der Quantenzahlen von Atomorbitalen nach Bohr-Sommerfeld:

$n = \text{HQZ}$ gibt im wesentlichen die Energie des Orbitals an (beim H-Atom exakt)

$l = \text{NQZ}$ gibt den Drehimpuls bzw. die Elliptizität der Bahn an. Maximales $l \Rightarrow$ Kreis.

$m = \text{magnetische QZ}$ zählt die Orientierungsmöglichkeiten der Kreise bzw. Ellipse.

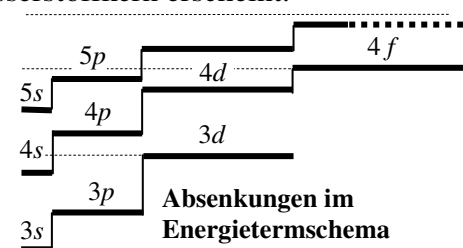
$s = \text{SpinQZ}$. Sie gibt die Eigendrehung des Elektrons an und kann nur $s = \pm 1/2$ sein.

Aufgabe: Erkläre die Modifikation, die Sommerfeld am Bohrschen Atommodell vornahm und tabelliere die möglichen Bahnen samt ihrer Bezeichnungen. Inwiefern tritt beim H-Atom eine Energiegleichheit auf?

3) Anwendung des Bohr-Sommerfeldschen Atommodells auf andere Atome.

Besonders gut erklären die Sommerfeld'schen Ellipsen die Energieniveaus des äußersten Elektrons (Leuchtelektron) von Alkalimetallen, bei denen ein Atomkern mit der Kernladungszahl Z von $Z-1$ Rumpfelektronen abgeschirmt wird, sodass der Atomrumpf dem äußersten Elektron wie ein mit $Z=1$ geladener Wasserstoffkern erscheint.

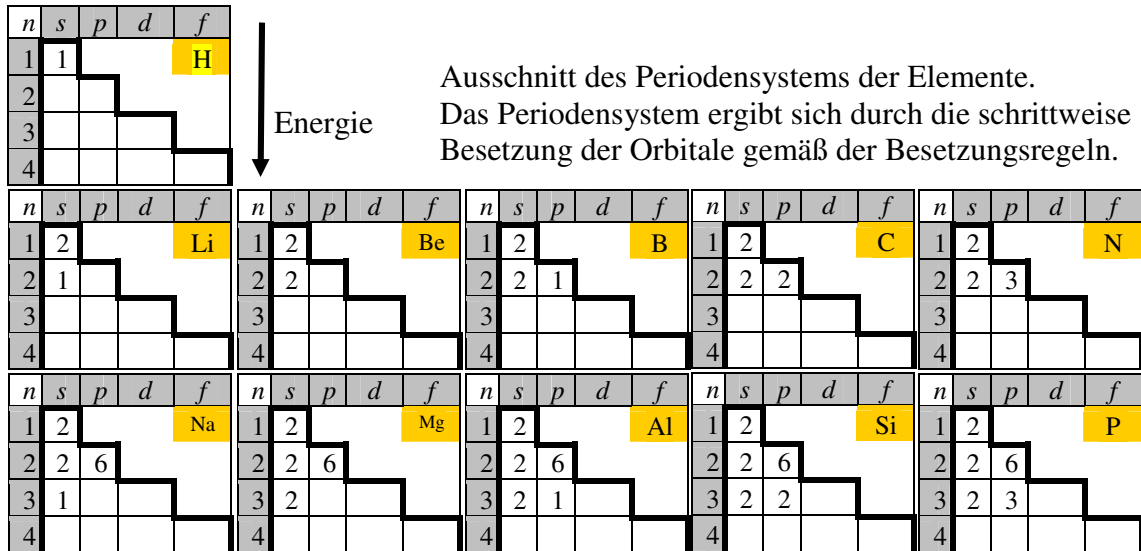
Dies gilt aber nur für die Kreisbahnen mit maximalem Drehimpuls, also maximalem l -Wert. Je größer die Elliptizität, bzw. je kleiner die NQZ l , desto mehr *unterläuft* die Ellipsenbahn die Abschirmung. Durch die starke Kernannäherung sinkt die Bahnenergie dann ab. Deshalb gilt die Energiegleichheit der unterschiedlichen l -Werte zu gleichen n jetzt nicht mehr. Für höhere HQZ kommt es sogar zu Überschneidungen Z.B. gilt $W_{4s} < W_{3d}$



und $W_{5s} < W_{5p} < W_{4f}$. Auf Grund dessen kommen die Nebengruppenelemente und die seltenen Erden als verzögert aufgefüllte Elemente im Periodensystem zustande.

Das versteht man durch die *Besetzungsregeln*:

- *Pauli-Prinzip*: Elektronen sind Fermionen und dürfen deshalb niemals in allen Quantenzahlen übereinstimmen.
- *Hund'sche Regel*: Die $2l + 1$ räumlich unterschiedlich orientierten Orbitale zu gleichem n und l werden zunächst einfach mit gleich orientiertem Spin besetzt.
- Gemäß dieser Regeln erfolgt die Besetzung von niedrigen zu hoher Energiewerten.



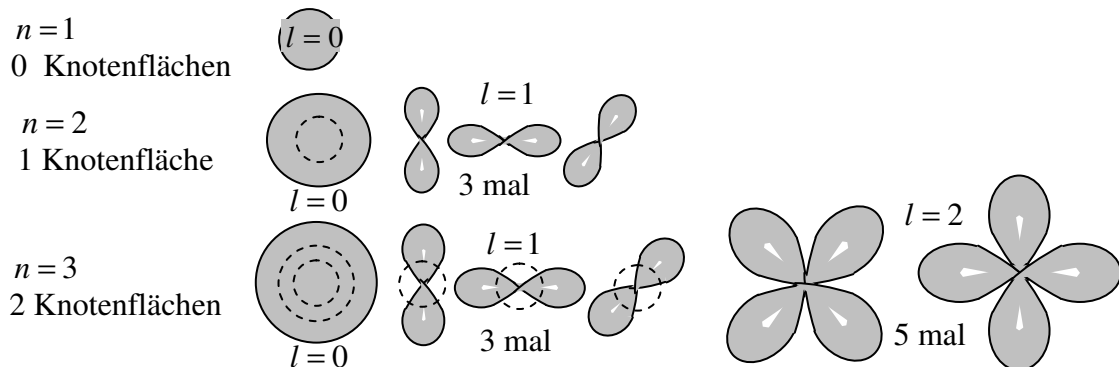
Aufgabe: 1) Erläutere, wie es zur Aufhebung der Energiegleichheit kommt und welche Folgen dies gemäß der Besetzungsregeln für den Aufbau des Periodensystems hat.
2) Betrachte das Periodensystem und gib an, welches Nebengruppenatom in der 4. Periode über das größte magnetische Moment verfügt? Wieviele ungepaarte, spinmäßig gleich orientierte Elektronen kann ein Seltenes-Erd-Atom der 6. Periode maximal besitzen?

4) Orbitalformen nach Schrödinger

Von Anfang an war klar, dass das Bohr-Sommerfeld'sche Bahnen-Bild unzulänglich ist und dass die Welle den gesamten Raum um den Kern herum erfassen muss. Das H-Atom ist nicht scheibenförmig, wie ein Planetensystem, sondern gemäß der kinetischen Gastheorie kugelförmig. Erst die Schrödingergleichung lieferte die Orbitale als räumliche Ladungswolken. Dabei blieb aber das Konzept von HQZ, NQZ und magn. QZ erhalten. Eine gute Veranschaulichung liefern die möglichen Schwingungen (Chladni'sche Klangfiguren) einer runden Glasscheibe. Dort bilden sich Knotengeraden und Knotenkreise aus.



Die dreidimensionalen Schwingungen der Materiewelle (ψ -Funktion) haben vergleichbare Eigenschaften.



Einen Überblick liefert die Betrachtung der *Knotenflächen* der Orbitale.

Wie die Knoten der eindimensionalen stehenden Welle, so sind auch die Knotenlinien der zweidimensionalen Chladni-Figuren und die Knotenflächen der dreidimensionalen Orbitale Stellen, an denen die Auslenkung stets *null* ist. In diesen Bereichen wird das Elektron also niemals angetroffen. Dennoch gelangt es *innerhalb ein und desselben* Orbitals durch die Verbotszone hindurch, ohne dass man seine Bahn dabei verfolgen könnte. Die Atomorbitale besitzen *Knotenebenen* KE und *Knotenkugeln* KK. Die Summe der beiden Sorten beträgt für alle Orbitale mit derselben Hauptquantenzahl n stets $n-1$.

Knotenebenen KE, Knotenkugeln KK

s -Orbitale ($l=0$) besitzen *keine* Knotenebenen

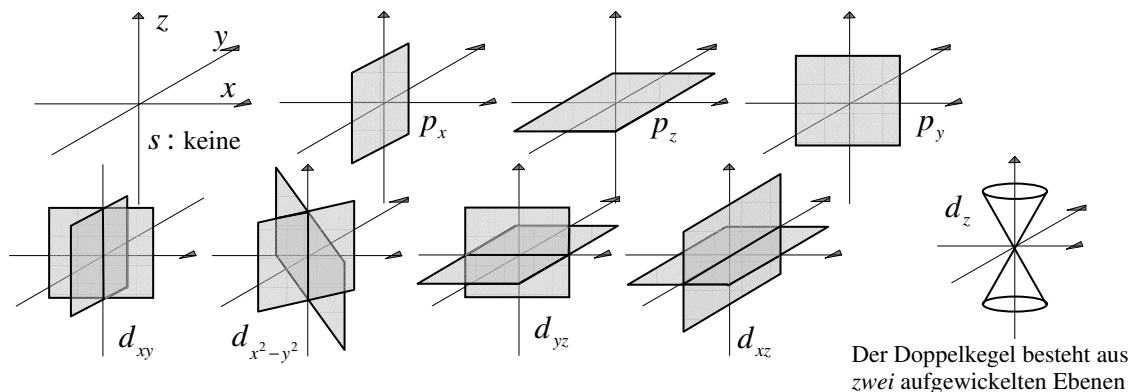
p -Orbitale ($l=1$) besitzen *eine* Knotenebene

d -Orbitale ($l=2$) besitzen *zwei* Knotenebenen

Allgemein: Orbitale mit der Nebenquantenzahl l besitzen l Knotenebenen. Die restlichen $n-1-l$ Knotenflächen sind Knotenkugeln.

n	s		p		d		f	
	KK	KE	KK	KE	KK	KE	KK	KE
1	0	0						
2	1	0	0	1				
3	2	0	1	1	0	2		
4	3	0	2	1	1	2	0	3

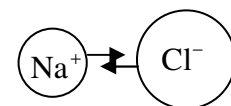
Übersicht: Knotenebenen.



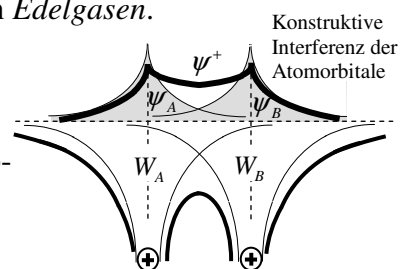
Aufgabe: Warum sind das $1s$ - und $2p$ -Orbital „orthogonal“ zueinander (Siehe B4) ?

C) Chemische Bindung

Die Ionenbindung, z.B. beim NaCl versteht man mit Hilfe der Elektrostatik, also der klassischen Physik. Die kovalente Bindung z.B. im H_2 ist jedoch *nur* quantentheoretisch verständlich, denn bei Annäherung der Atome begegnen sich zunächst die Elektronenhüllen, sodass wegen deren Abstoßung keinerlei Bindung möglich sein dürfte. Dieser Mechanismus greift auch tatsächlich bei den *Edelgasen*.

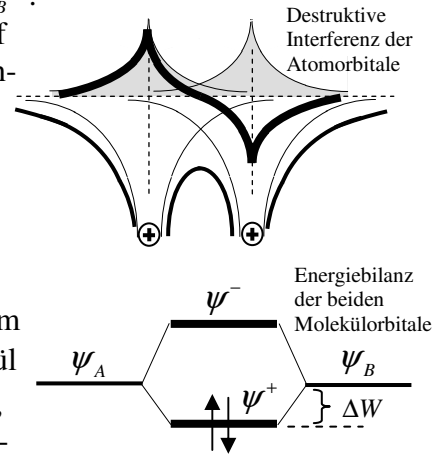


Qualitativ versteht man die *quantentheoretische* Ursache der chemischen Bindung bereits mit Hilfe der Heisenberg'schen Unschärfe-Relation (HUR) und der Interferenz: Im Atom sind die Elektronenwellen ψ_A und ψ_B durch die engen Potentialtöpfe $W_{pot A}$ bzw. $W_{pot B}$ auf die Atomdurchmesser $\Delta x = d$ eingeschnürt, sodass $p_v \approx \Delta p_v \approx h / \Delta x = h / d$ beträgt. Sobald die



Kerne sich einander annähern, gewinnen die Elektronen mehr Raum z.B. $\Delta x = 1,6 \cdot d$. Überlagern sich die Atomwellen (-orbitale) in diesem Bereich *konstruktiv*, also gemäß $\psi^+ = \psi_A + \psi_B$, so beträgt das Verhältnis der Impulse $p_{Molek} / p_{Atom} \approx 1/1,6$ und weil $W_{kin} \sim p^2$ gilt, folgt $W_{Molek} / W_{Atom} \approx 1/1,6^2 \approx 0,4$, was eine erhebliche Energieabsenkung im Molekül bedeutet. Desweiteren befinden sich die Elektronen im Zustand ψ^+ größtenteils in dem Bereich *zwischen* den Kernen, sodass auch die potentiellen Energie abgesenkt wird.

Destruktive Interferenz von ψ_A und ψ_B gemäß $\psi^- = \psi_A - \psi_B$:
 Hierbei wird das Elektron (wie beim p -Orbital des Atoms) auf zwei Teilbereiche eingeschnürt und außerdem aus dem Mittenbereich, mit tiefem W_{pot} , heraus gedrängt. Die Energie von



ψ^- liegt deshalb deutlich höher, als die von ψ_A bzw. ψ_B .

Insgesamt ergibt sich somit nebenstehende Energiebilanz:

Durch drei spezifisch quantentheoretische Sachverhalte, nämlich HUR, konstruktive Interferenz und Pauli-Prinzip, ist es möglich, dass die *beiden* Elektronen der isolierten H-Atome im H_2 -Molekül eine *Energieabsenkung* erfahren und das Molekül somit stabiler ist, als die einzelnen Atome. Sitzen, wie bei He, je zwei Elektronen entgegen gesetzten Spins in den Atomorbitalen, so müsste im He_2 -Molekül außer ψ^+ auch ψ^- doppelt besetzt werden. Das ergibt aber insgesamt eine negative Energiebilanz, weswegen Edelgase keine Bindung eingehen.

Bindungsregel: Die konstruktive Interferenz zweier Atomorbitale ψ_A und ψ_B ergibt nur dann ein wesentliches ΔW , wenn

- (1) ihre Energiewerte ähnlich sind
- (2) eine hinreichend räumliche Überlappung vorliegt
- (3) bzgl. der Bindungsachse gleiche Symmetrie vorliegt.

Allgemein sehen wir: Ohne Quantentheorie wären alle Atome „Edelgase“.

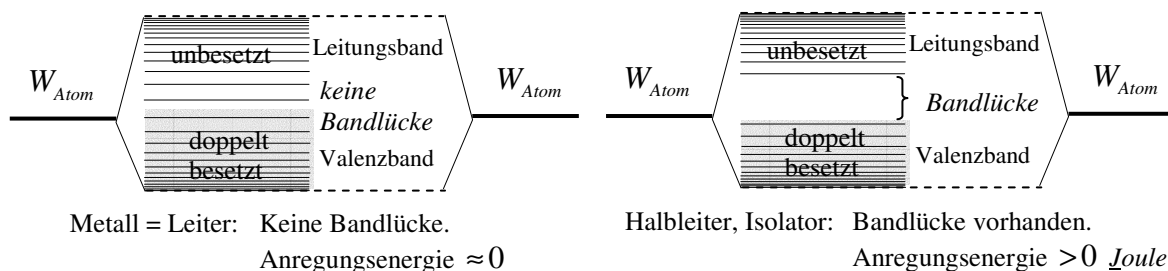
Chemische Bindung, anorganische und organische Moleküle usw. würden nicht existieren.

Aufgabe: Erkläre die Bindungsregeln der kovalenten chemischen Bindung.

D) Festkörper

Im Kristall werden sehr viele (n) Atome zusammengebracht. Entsprechend der Molekülbindung spalten die n zunächst gleichgroßen Energien der isolierten Atomorbitale dann in ein „Valenzband“ von $n/2$ bindenden und ein „Leitungsband“ von $n/2$ „antibindenden“ Kristallzuständen auf. Analog zum Molekül sind die bindenden Zustände doppelt besetzt und die antibindenden Zustände bleiben leer. Das bringt gegenüber den isolierten Atomen eine Energieabsenkung, so dass der Kristall stabil ist. Nun ist zwischen metallischen, halbleitenden und isolatorischen Kristallen zu unterscheiden.

Ist die sog. Bandlücke, also der energetische Abstand zwischen dem Valenz- und Leitungsband, $\Delta W = 0$, so ermöglicht die kleinste thermische Anregung den Übergang einzelner Elektronen vom höchsten Niveaus des Valenzbandes ins niedrigste Niveau des Leitungsbandes. Einzelne Elektronen sind aber beweglich, so dass der Kristall ein elektrischer Leiter und damit ein Metall wird. Lässt sich die Bandlücke durch eine optische Anregung überwinden, so bezeichnet man den Kristall als Halbleiter. Das ist z.B. für Germanium, Indium oder Silizium der Fall. Eine noch größere Bandlücke besitzt z.B. Diamant. Hier ist Röntgenanregung erforderlich. Stoffe mit solch großer Bandlücke sind daher Isolatoren.



Aufgabe: Erkläre, warum ein Kristall nicht auseinander fällt. Erläutere den Unterschied zwischen Metall, Halbleiter und Isolator anhand des Bändermodells.