

## 1.) Historisches zur Atomphysik

### „Die alten Griechen“

- **Vorsokratiker** (ca. 500 v. C.) dachten über den Aufbau der Welt nach. Empedokles formulierte, dass alles aus den 4 Elementen Feuer, Erde, Wasser, und Luft zusammengesetzt sei.
- Für **Demokrit** (ca. 400 v. C.) ist die Materie aus unteilbaren Bauteilen aufgebaut, den Atomen (atomós = unteilbar). Sie sind unzerstörbar, undurchdringlich und alle von gleicher Art, aber unterschiedlicher Form und Größe und können sich unterschiedlich anordnen, und erzeugen so die Verschiedenheit in der Welt.
- **Aristoteles** (ca. 350 v. C.) widersprach Demokrit und behauptete, dass Atome immer weiter teilbar seien.

### „Naturforscher der Neuzeit“

- **John Dalton** (um 1800, England) ist der Begründer der modernen Atomvorstellung. Atome sind für ihn kleine, neutrale und elastische Kugeln. Er formulierte zwei Gesetze: Atome eines Elementes haben dasselbe Atomgewicht, Atome verschiedener Elemente haben verschiedenes Atomgewicht. Sein Atommodell konnte viele chemische Gesetze erklären, z. B. dass das Gesamtgewicht bei chemischen Reaktionen konstant bleibt. Noch heute ist Daltons Modell geeignet zur Erklärung der kinetischen Gastheorie.
- **Henri Becquerel, Marie Curie** (beide Frankreich, kurz vor 1900) entdeckten Alpha-, Beta- und Gammastrahlen. Bei Alphastrahlung wandeln sich die Atome eines Elements, z. B. Po 210 in ein anderes Element, z. B. Pb 206 um und „schleudern“ Heliumkerne aus dem Atom. Unzerstörbarkeit und Unteilbarkeit waren wohl keine atomaren Eigenschaften. Damit begann die Suche nach der inneren Struktur der Atome.
- **J. J. Thomson** (um 1900, England) untersuchte subatomare Strukturen und entwickelte das „Rosinenkuchenmodell“: Das Atom besteht aus einer Wolke kontinuierlich verteilter positiver Ladung - gespickt mit Elektronen
- **Ernst Rutherford** (1911, England) beschießt Atome mit  $\alpha$ -Strahlen und entdeckt dabei, dass Atome (ca. 100 pm Durchmesser) fast leer sind, einen winzigen Kern (ca. 0,01 pm, 10.000 mal weniger) mit positiver Ladung besitzen und von einer negativen Elektronenwolke (Elektronen bewegen sich um den Kern) umgeben sind. Das Rutherford'sche Atommodell hat einen großen Nachteil: Es ist nach den Regeln der (klassischen) Physik unmöglich stabil, da die Elektronen bei ihrer Bewegung wie ein Hertz'scher Dipol Energie abstrahlen müssen und somit innerhalb eines Sekundenbruchteils in den Kern fallen.

### „Vorläufer des Quantenmodells“

- **Balmer** (Gymnasiallehrer in Basel, 1884) untersuchte die Spektrallinien des Wasserstoffs im sichtbaren Bereich und fand durch probieren, dass sie folgendem Gesetz gehorchen:  $f_B = f_R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ .

Mit  $f_R = 3,3 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ , der **Rydberg**-Frequenz (Schweden), entsprechen sie der Energieformel:

$$W_B = hf_B = 13,6 \text{ eV} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Analog entdeckten **Lyman** im UV-Bereich Spektrallinien, die dem Gesetz  $W_L = hf_L = 13,6 \text{ eV} \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$  gehorchen und **Paschen** im IR-Bereich Spektrallinien mit  $W_P = hf_P = 13,6 \text{ eV} \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$

- **Niels Bohr** (1913, Dänemark) entwickelte auf der Basis der Rutherford'schen Erkenntnisse ein neuartiges Atommodell, das „Planetenmodell“, bei dem die Elektronen den Kern umkreisen wie die Planeten die Sonne, wobei die Coulombkraft die Gravitationskraft ersetzt. Er ergänzte sein Modell durch folgende Postulate („Polizeigesetze“) - (s. a. Das Bohrsche Modell (Applet Fendt):

○ Es sind nur bestimmte (=diskrete) Bahnen erlaubt, durch die Hauptquantenzahl  $n = 1, 2, 3 \dots$  bezeichnet:

○ Es muss gelten: Bahnumfang =  $n \cdot$  Wellenlänge Elektron:  $2\pi r = n\lambda \Leftrightarrow 2\pi r = n \frac{h}{mv}$  (\*)  
(nur dann sind die Wellenzüge geschlossen und interferieren nicht weg)

○ Über  $F_z = F_L \Leftrightarrow m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$  folgt mit (\*)  $2\pi r = n \frac{h}{mv} \Leftrightarrow v = n \frac{h}{2\pi m r}$

$$m \frac{1}{r} \left( n \frac{h}{2\pi m r} \right)^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \Leftrightarrow m \frac{1}{r} n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 r^2 m^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \Leftrightarrow \frac{1}{r} = \frac{\pi Ze^2 m}{\epsilon_0 h^2} \frac{1}{n^2} \Leftrightarrow r = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi Ze^2 m} n^2$$

## Physik Oberstufe - Atomphysik

Für  $Z = 1$  (Wasserstoff) ergibt sich der Bohrsche Radius  $r_1 = 53 \text{ pm}$  und  $r_n = n^2 \cdot r_1$

- Jeder Bahn mit Quantenzahl  $n$  entspricht ein Energieniveau:  $W(n) = W_{\text{kin}} + W_{\text{pot}}$   
Beim Wasserstoffatom:  $W(n) = (-) 13,6 \text{ eV} / n^2$

$$W_{\text{pot}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\pi e^2 m}{\epsilon_0 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{4} \frac{e^4 m}{\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \frac{h^2}{4\pi^2 m^2} \frac{1}{r^2} = \frac{1}{2} \frac{h^2}{4\pi^2 m} \frac{\pi^2 e^4 m^2}{\epsilon_0^2 h^4} \frac{1}{n^2} = \frac{1}{8} \frac{e^4 m}{\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

$$W_{\text{ges}} = W_{\text{pot}} + W_{\text{kin}} = -\frac{1}{4} \frac{e^4 m}{\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} + \frac{1}{8} \frac{e^4 m}{\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{8} \frac{e^4 m}{\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -13,6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$$

- Auf diesen Bahnen strahlen die Elektronen keine Energie ab.
- Es sind Übergänge zwischen diesen diskreten Bahnen möglich
  - Der Übergang „nach außen“ (z. B. von  $n = 1$  nach  $n = 3$ ) erfordert Energiezufuhr:  $\Delta W = W(n) - W(m)$ . Die Energie kann durch die Einstrahlung von Licht erfolgen (dabei kann man beim Licht Absorptionsspektren beobachten, gewisse Wellenlängen fehlen im Spektrum)
  - Der Übergang „nach innen“ (z. B. von  $n = 3$  nach  $n = 1$ ) erfolgt unter Abgabe von Energie, die in Form von Licht freigesetzt wird:  $\Delta W = 13,6 \text{ eV} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = hf$

Dabei können wir Emissionsspektren beobachten (einzelne Wellenlängen).

Bohr konnte mit seinem Modell die Absorptions- und Emissionsspektren des Wasserstoffs erklären.

Die Lyman-, Balmer- und Paschen-Formeln sind Sonderfälle für Übergänge nach  $n=1$ ,  $n=2$  bzw.  $n=3$ .

Bei anderen Atomen stimmen die berechneten Werte nicht mit den Spektren überein.

- **James Franck und Gustav Hertz** (1914) wiesen in Stoßversuchen, bei denen Elektronen auf Quecksilber-Atome prallen und dabei die Elektronen im Quecksilber durch Energieportionen von exakt  $4,9 \text{ eV}$  anregen, experimentell die quantisierte Energieaufnahme und -abgabe im Atom nach:
  - Die Elektronen im Atom besitzen scharfe und diskrete Energieniveaus,
  - die sie unter Abgabe bzw. Aufnahme von Energie in Quantensprüngen wechseln können.
- **Arnold Sommerfeld** (Deutschland, ca. 1920) erweiterte das Bohrsche Modell. Er hatte die Vorstellung, dass sich die Elektronen nicht nur auf Kreisbahnen sondern auch auf elliptischen Bahnen bewegen. Dazu führte er zusätzliche Quantenzahlen ein, die weitere experimentelle Beobachtungen - wie z. B. die Aufspaltung der Spektrallinien - erklären konnten:
  - Die **Hauptquantenzahl  $n$**  mögliche Werte: 1, 2, 3, 4, ...  
aus dem Bohrschen Modell für die Energieniveaus.  
(in der Chemie / Physik heißen diese auch K-Schale ( $n=1$ ) / L-Schale ( $n=2$ ) / M-Schale ( $n=3$ ) ...)
  - Die **Nebenquantenzahl  $l$**  mögliche Werte: 0, 1, ...,  $n-1$   
beschreibt den Bahndrehimpuls und ist ein Maß für die Abweichung von der Kreisbahn. Damit lässt sich z. B. unterschiedliches chemisches Bindungsverhalten erklären.  
(in der Chemie/ Physik gibt es auch die Bezeichnung:  $l = 0$ : s-Orbital /  $l = 1$ : p-Orbital /  $l = 2$ : d-Orbital, in der Quantenphysik sind s-Orbitale kugelsymmetrisch, p-Orbitale haben eine andere Form ...)
  - Die **magnetische Quantenzahl  $m$**  mögliche Werte:  $-l, \dots, 0, \dots, +l$   
erklärt, warum sich bei einem äußeren Magnetfeld die Energieniveaus z. B. für  $l = 1$  in drei Zustände aufspalten:  $-1 / 0 / 1$ .
  - Die **Spinquantenzahl  $s$**  mögliche Werte:  $-\frac{1}{2}$  und  $+\frac{1}{2}$  („Spin up und down“)  
leitet sich von der Vorstellung ab, dass Elektronen als um sich selbst kreisende Kugeln einen magnetischen Dipol darstellen, der sich gegenüber einem äußeren Magnetfeld ausrichten kann.
- **Wolfgang Pauli** (Deutschland, 1925) gelang es, das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell zur Erklärung des Periodensystems heranzuziehen. Er postulierte das sog.
  - **Pauli-Prinzip:** In einem Atom muss jedes Elektron einen anderen Satz von Quantenzahlen besitzen.
  - Damit lässt sich erklären, warum im Atom nicht alle Elektronen den energetisch günstigsten Grundzustand besetzen.
  - Für die K-Schale, den Grundzustand  $n=1$ , gibt es 2 Möglichkeiten:  $n=1 / l=0 / m=0 / s = -\frac{1}{2}$  bzw.  $s = \frac{1}{2}$   
Wasserstoff mit 1 Elektron; Helium mit 2 Elektronen - K-Schale „voll besetzt“ – ein Edelgas
  - Für die L-Schale gibt es acht Möglichkeiten:  $n = 2$  und  $l = 0$  oder  $1$   
Bei  $l = 0$  (s-Orbital):  $m = 0$  und  $s = -\frac{1}{2}$  bzw.  $s = \frac{1}{2}$ : 2 Möglichkeiten

## Physik Oberstufe - Atomphysik

Bei  $l = 1$  (p-Orbital):  $m = -1 / 0 / 1$  und jeweils  $s = -1/2$  bzw.  $s = 1/2$ : 6 Möglichkeiten

Bei Lithium mit 3 Elektronen ist die K-Schale mit 2 Elektronen besetzt, das dritte befindet sich auf der L-Schale.

Bei 10 Elektronen (2 auf der K-Schale, 8 auf der L-Schale) erhalten wir wieder ein Edelgas: Neon.

- Allgemein: Jede Schale kann nur  $2n^2$  Elektronen aufnehmen.
- Damit lassen sich auch chemische Bindungen wie NaCl gut erklären:  
Na mit 11 Elektronen hat ein Elektron auf der M-Schale (2 auf K, 8 auf L), Cl mit 17 Elektronen (2 auf K, 8 auf L) hat 7 Elektronen auf der M-Schale, 2 mit  $l=0$  (s-Orbital), 5 mit  $l=1$  (p-Orbital).  
Das einzelne Na-Elektron auf der M-Schale füllt bei Cl das p-Orbital der M-Schale auf.  
Das positive Na-Ion bindet sich dann ans negative Cl-Ion: NaCl, Kochsalz, entsteht.'

### 1.) Das Atommodell der Quantenphysik

Allen Vorläufermodellen zusammen gelingt es nicht zu erklären, warum die Elektronen auf ihren Bahnen nicht strahlen dürfen, warum nur diskrete Bahnen möglich sind. Dies gelingt erst der Quantenphysik – allerdings um den Preis der Anschaulichkeit. Bis heute stimmen alle Berechnungen der Quantenphysik mit den Experimenten der Atomphysiker überein.

In der Quantenphysik (ab 1900) wird unsere Vorstellung von der Wirklichkeit komplett verändert, was sich natürlich auf das Atommodell auswirkt.

#### Die Unbestimmtheitsrelation

- **Werner Heisenberg** (Deutschland, 1927) entwickelte die sogenannte **Unbestimmtheitsrelation (UBR)**,  $\Delta x \Delta p \approx h$  bzw.  $\Delta E \Delta t \approx h$ , wodurch der „Bahn­begriff geschlachtet“ wird (Ort und Impuls sind nicht gleichzeitig exakt definiert), so dass die Vorstellung von Elektronen, die sich auf Kreisbahnen um's Atom bewegen, ad absurdum geführt wird.
- Eine andere Konsequenz aus der UBR ist die **Lokalisationsenergie**:
  - Im Atom mit Durchmesser  $L$  sind die Elektronen lokalisiert:  $\Delta x \approx L$
  - Die Elektronen-Impulse in können - eindimensional betrachtet - Werte zwischen  $-p$  und  $+p$  annehmen:  $\Delta p = 2p$
  - Mit der UBR folgt:  $\Delta x \Delta p \approx h \rightarrow 2p = \Delta p \approx h/L \rightarrow p \approx 1/2 h/L$
  - Damit gilt für die kinetische Energie:  $W_{kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} = \frac{1}{2} \frac{h^2}{4L^2 m} = \frac{h^2}{8mL^2} = W_{Lok}$
  - Diese Energie hat ein Elektron, das in einem „Käfig“ der Größe  $L$  eingesperrt ist, aufgrund der UBR: Je kleiner  $L$ , desto größer ist die Lokalisationsenergie  $W_{Lok}$ .
  - Für Elektronen im H-Atom mit  $L \approx 3 \cdot 10^{-10}$  m:  $W_{Lok} \approx 4eV$ .  
In dieser energetischen Größenordnungen laufen Prozesse der Atomhülle (=Chemie) ab.
  - Kernreaktionen finden bei viel höheren Energiemengen statt, z. B. für Protonen im Kern der Größe  $L = 10^{-14}$  m:  $W_{Lok} = 2MeV$
  - Falls Elektronen mit ihrer kleinen Masse im Atomkern eingesperrt wären, würde die Lokalisationsenergie einige 1000 MeV betragen, so dass sie den Kern sofort wieder verlassen könnten.

#### Die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$

- An die Stelle von definierten Bahnen treten **Wellenfunktionen  $\Psi(x,t)$** , die wir durch rotierende  $\Psi$ -Zeiger mit darstellen können, wobei die Wellenlänge über die **De Broglie-Formel** (1924)  $\lambda_B = \frac{h}{mv}$  gegeben ist.  
Die mathematische Beschreibung entspricht der von mechanischen oder elektromagnetischen Wellen, nur dass die Wellenfunktionen  $\Psi(x,t)$  keine anschauliche Bedeutung hat – es gibt nichts, was „wellt“ – sondern ein Modell darstellt, mit dessen Hilfe die Phänomene erklärt werden können.
- **Max Born** (Deutschland) interpretierte  $|\Psi(x,t)|^2$  als **Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektronen** am Ort  $x$  zur Zeit  $t$  – eine Größe, die die unanschauliche Größe  $\Psi(x,t)$  mit einer anschaulichen Bedeutung verknüpft.
- **Erwin Schrödinger** (Deutschland, 1925) fand eine Berechnungsvorschrift für die Wellenfunktionen. So wie sich die Bewegungen der Körper in der klassischen Mechanik mit den Newtonschen Gesetzen berechnen lassen,

## Physik Oberstufe - Atomphysik

so kann man in der Quantenmechanik über die **Schrödinger-Gleichung**, einer Differentialgleichung, die Wellenfunktion  $\Psi(x,t)$  und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten  $|\Psi(x,t)|^2$  berechnen.

- Die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung:  $\Psi''(x) = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} (W - W_{pot}(x))\Psi(x)$
- Um aus der Schrödingergleichung die Wellenfunktion  $\Psi(x)$  zu bestimmen,
  - müssen wie die physikalische Situation analysieren: Welche Kräfte wirken? Wie groß ist die potentielle Energie  $W_{pot}(x)$ ?  $W_{pot}(x)$  wird in die Schrödingergleichung eingesetzt.
  - Für verschiedene Werte der Gesamtenergie  $W$  löst man nun die Differentialgleichung (exakt oder über Näherungsverfahren).
  - Dabei sind jeweils spezielle Randbedingungen (z. B. beim linearen Potentialtopf  $\Psi(x=L) = 0; \Psi(x=0) = 0$ ) zu berücksichtigen.
- Für Atome können wir uns – analog zu den mechanischen Wellen - vorstellen, dass sich bei den Wellenfunktionen der im Coulomb-Potential eingesperrten Elektronen eine  $\Psi(x,t)$ -Welle nach „rechts“ mit einer anderen  $\Psi(x,t)$  nach „links“ überlagert.

### Orbitale: Stationäre Zustände, diskrete, scharfe Energieniveaus

- Für Atome ergeben sich aus dieser Interferenz verschiedene **stationäre Zustände** - analog zu den stehenden Wellen der mechanischen Wellen -, bei denen der Zeiger der resultierenden  $\Psi$ -Welle zwar weiter rotieren, aber ihre Länge, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi(x)|^2$ , nicht mehr von der Zeit abhängt: wir bezeichnen sie als **Orbitale** oder Wahrscheinlichkeitswolken.  
Diese stationären Zustände sind auch der Grund, warum die Elektronen keine Energie abstrahlen: Sie schwingen ja nicht hin und her wie in einem Hertzschen Dipol.
- Die stationären Zustände im Atom treten unter den Randbedingungen, dass  $\Psi(x)$  am Rand des Atoms gegen Null geht, nur für **diskrete Werte** auf – so wie bei einer eingespannten Saite der Länge  $L$  die stehenden Wellen nur unter der Bedingung  $L = n \frac{\lambda}{2}$  eintreten.
- Stationäre (=zeitunabhängige) Zustände der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi(x)|^2$  haben **scharfe Energieniveaus**, da mit der UBR:  $\Delta W \Delta t \approx h$  aus „stationär“, also  $\Delta t \rightarrow \infty$ , folgt, dass  $\Delta W \rightarrow 0$ , die Energieunschärfe also 0 ist.
- Verschiedene **Quantenzahlen** charakterisieren die unterschiedlichen Orbitale
  - Zu jedem Orbital gehört entsprechend der Hauptquantenzahl ein Energieniveau.  
Beim Wasserstoffatom entspricht dies (zufälligerweise?) gerade Bohrs Formel:  $W(n) = (-) 13,6 \text{ eV} / n^2$
  - Die Nebenquantenzahl charakterisiert die Form des Orbitals :  
 $l = 0$ , s-Orbitale, sind kugelsymmetrisch,  $l = 1$ , p-Orbitale, sind keulenförmig, ...

### Übergänge zwischen den Orbitalen: Absorption und Emission

Der Übergang zwischen verschiedenen Orbitalen erfolgt durch **Quantensprünge** – analog zum Bohrschen Modell - wobei der Wechsel zwischen den Energieniveaus unter Absorption und Emission von Photonen mit  $\Delta W = W(n) - W(m) = h f$  erfolgt.

- Der Übergang in höheres Energieniveaus (**Absorption von Energie**) wird durch thermische Anregung, Photonenbeschuss (innerer Fotoeffekt) oder Elektronenbeschuss (Franck-Hertz) erreicht.
- Der Übergang in ein niedrigeres Energieniveaus (**Emission von Energie**) kann durch
  - **spontane Emission** erfolgen. Die - zuvor angeregten - Elektronen fallen wieder zurück – eventuell über Zwischenstufen (bei Fluoreszenz) – und geben ihre Energie als Photon ab.  
Analog zum Zerfall von radioaktiven Kernen gibt es Wahrscheinlichkeiten und Halbwertszeiten (Größenordnung:  $10^{-8}$ s) für den Übergang. Bei Phosphoreszenz sind diese Zeiten viel länger (bis Minuten).
  - **stimulierte Emission** („Alle im Gleichschritt zurück“):  
Indem man die angeregten Atome mit Licht der entsprechenden Wellenlänge bestrahlt, lässt sich die Emission steuern. LASER: Light amplification by the stimulated emission of radiation

### Verschiedene Lösungen der Schrödingergleichung

**Beispiel 1: Der lineare, unendlich tiefe, eindimensionale Potentialtopf:**

$W_{pot}(x) = 0$  für  $0 \leq x \leq L$ ; sonst :  $W_{pot}(x) = \infty$  - eingesperrte Elektronen haben keine Fluchtchance.

## Physik Oberstufe - Atomphysik

- Eine  $\Psi$ -Welle nach rechts wird am Rand reflektiert und wird zu einer  $\Psi$ -Welle nach links usw. Diese  $\Psi$ -Wellen interferieren.
- Unter der Randbedingung, dass  $|\Psi(x)|^2 = 0$  außerhalb des Potentialtopfes bzw. sich dort Knoten von  $\Psi(x)$  befinden, ergeben sich – analog zur eingespannten Saite – für  $L = n \frac{\lambda}{2}$  stehende  $\Psi$ -Wellen, stationäre Zustände  $\Psi_n$ .
- Dazu gehören scharfe, diskrete Energieniveaus – abhängig von der Quantenzahl  $n$ :  
$$W(n) = W_{pot} + W_{kin} = 0 + \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} = \frac{1}{2} \frac{h^2}{m\lambda^2} = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$
  
Der Grundzustand,  $n = 1$ , entspricht der Lokalisationsenergie der UBR in einem Käfig der Größe  $L$ .
- *Anwendungen z. B. bei Farbmolekülen: Bei einem Potentialtopf der Größe  $L = 1,2 \text{ nm}$  führt ein Sprung von  $n = 5$  nach  $n = 4$  zur Aussendung eines Photons mit  $\Delta W = \frac{h^2}{8mL^2} (5^2 - 4^2)$ , was Licht der Wellenlänge  $\lambda = 523 \text{ nm}$ , Farbe grün, entspricht.*

### Beispiel 2: Der lineare, endlich tiefe, eindimensionale Potentialtopf:

$W_{pot}(x) = 0$  für  $0 \leq x \leq L$ ; am Rand ein dünner Potentialwall der Breite  $b$  mit  $W_{pot}(x) = 5 \text{ eV}$ .

- Mit einem Simulationsprogramm können wir für verschiedene Werte der Gesamtenergie  $W$  die Lösungen  $\Psi(x)$  der Schrödinger-Gleichung bestimmen (z. B. von J. Küblbeck: Schrödingers Schlange).
- Unter der Randbedingung, dass  $|\Psi(x)|^2$  möglichst klein außerhalb des Potentialtopfes, ergeben sich wieder scharfe, diskrete Energieniveaus.  
Die Antreffwahrscheinlichkeit  $|\Psi(x)|^2$  außerhalb des Potentialtopfes ist auch für Energien unter  $5 \text{ eV}$  nicht Null.
- Eine  $\Psi$ -Welle nach rechts wird auch bei Energien kleiner als  $5 \text{ eV}$  am Rand nur teilweise reflektiert, ein anderer Teil geht durch: Die  $\Psi$ -Welle tunnelt durch den Potentialwall, nach dem Wall läuft sie als fortschreitende Welle weiter (Tunneleffekt).
- *Anwendung 1: Das Rastertunnelmikroskop macht sich den Tunneleffekt zunutze. Ein sehr dünne Nadelspitze – ein Atom an der Spitze – tastet die zu untersuchende Oberfläche ab und misst den Tunnelstrom, die Anzahl der tunnelnden Elektronen, was ein Maß für den Abstand zur Oberfläche ist. So lässt sich die atomare Struktur der Oberfläche sichtbar machen.*
- *Anwendung 2: Beim Alpha-Zerfall tunneln Heliumkerne aus dem Kern der Alpha-Strahler.*

### Beispiel 3: Das harmonische, eindimensionale Potentialtopf:

Zu einer Rückstellkraft  $F = Dx$  gehört das „harmonische“ Potential  $W_{pot}(x) = \frac{1}{2} Dx^2$ .

- Mit einem Simulationsprogramm können wir für verschiedene Werte der Gesamtenergie  $W$  die Lösungen  $\Psi(x)$  der Schrödinger-Gleichung bestimmen.
- Nur für diskrete Werte  $W(n) = k(n + \frac{1}{2})$  ( $k$  hängt von  $D$  ab,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) geht  $|\Psi(x)|^2$  für größere  $x$  gegen Null. Die Energiestufen haben alle denselben Abstand.
- *Anwendung: Bei schwingenden Atomen in Molekülen und Festkörpern.*

### Beispiel 4: Das Coulombpotential

Zur Coulombkraft  $F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$  gehört das Coulomb-Potential  $W_{pot}(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$ .

- Mit einem Simulationsprogramm können wir bei  $Z=1$ , dem Wasserstoffatom, für verschiedene Werte der Gesamtenergie  $W$  die Lösungen der Schrödinger-Gleichung bestimmen.
- Nur für diskrete Werte  $W(n) = -13,6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$  geht  $|\Psi(x)|^2$  für größere  $x$  gegen Null.
- Bei  $n = 1$  ist das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit gerade beim Bohrschen Radius.
- *Anwendung 1: Damit sind die Ergebnisse von Balmer, Lyman, Paschen und Bohr quantenphysikalisch erklärt.*
- *Anwendung 2: Elektronen, die sich außerhalb dieses Potentials befinden, haben nichtquantisierte Energie, sie sind frei, alle Energiemenge  $W > 0$  sind möglich. Quantensprünge in ein gebundenes Energieniveau erzeugen das kontinuierliche Spektrum, wie es z. B. beim Sonnenlicht vorliegt.*
- *Anwendung 3: Für schwere Atome,  $Z \gg 1$ , sind die Energiestufen deutlich größer. Wenn man bei ihnen durch Elektronenbeschuss Elektronen aus der K-Schale herausschießt, so fallen Elektronen aus der L- oder M-Schale zurück in die K-Schale. Dabei senden sie Photonen im Röntgenbereich aus: die zwei Linien im charakteristischen Röntgenspektrum, z. B. bei Kupfer  $\lambda_1 = 139 \text{ pm}$ ;  $\lambda_2 = 154 \text{ pm}$*