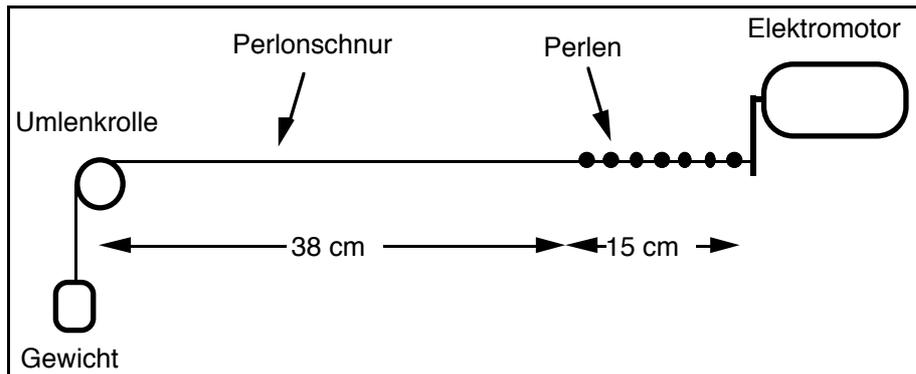


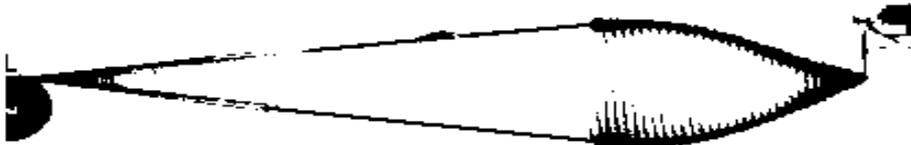
Anhang

A.1 Tabellen und Abbildungen

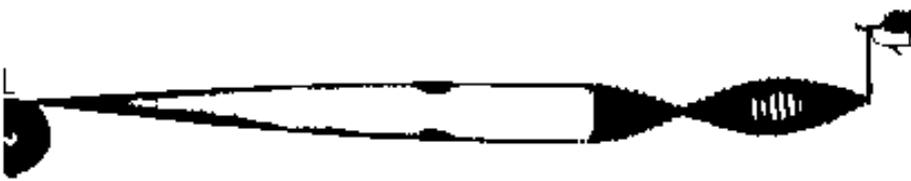
- **Mechanische stehende Wellen**
- Versuchsaufbau und Amplitudenfunktionen stehender Seilwellen



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



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



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



Eigenfrequenzen und Knotenlinien eines Tamburins

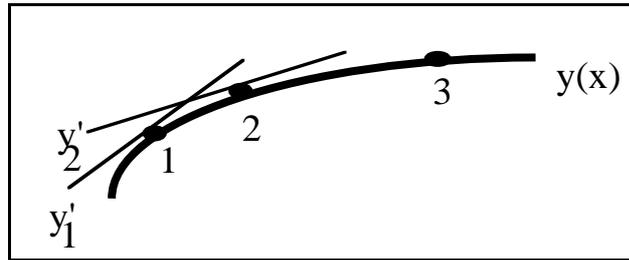
$n_r \backslash n_\phi$	0	1	2	3
1	 139 Hz	 211 Hz	 288 Hz	 366 Hz
2	 304 Hz	 435 Hz	 517 Hz	 581 Hz
3	 455 Hz	Eigenfrequenzen und Knotenlinien eines Tamburins		

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

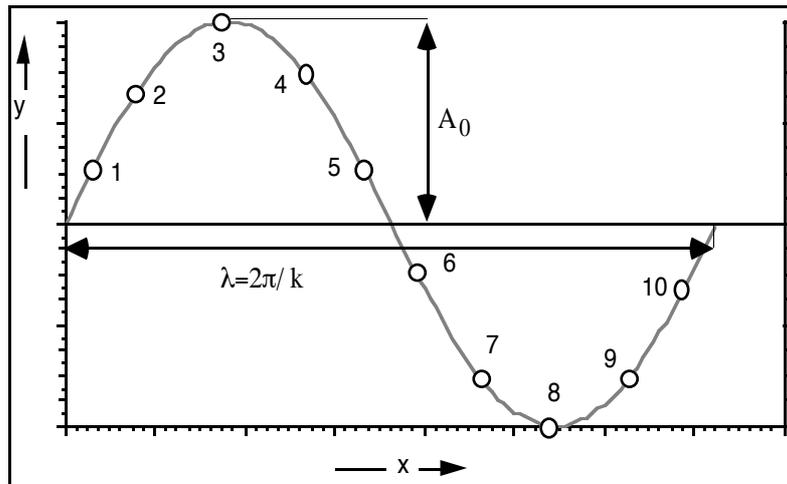
Stehende Wellen	Eindimensional	Zweidimensional	Dreidimensional
Beispiel	Seilwellen	Tamburin	Schall in Glaskugel
Knotenart	Punkte	Linien	Flächen
Knotensysteme	Ein System	Zwei Systeme, z.B. Kreise und Geraden	Drei Systeme, z.B. Kugelflächen, Ebenen, Doppelkegel
Zustandszahlen	eine, z.B. n	zwei, z.B. n,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

• **Krümmung**

Die Kurve $y(x)$ zeigt in Punkt 1 eine größere Steigung y'_1 als y'_2 in Punkt 2. Die Steigung nimmt ab, die Krümmung ist negativ. In Punkt 3 ist die Krümmung kleiner, die Steigung ändert sich weniger stark.



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



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

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

- **Zustandsbegriff, ψ -Funktion, Schrödinger-Gleichung**
- Klassischer und quantenmechanischer Zustand eines Elektrons

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

- Zur Entwicklung der SGL benutzte Beziehungen und Deutungen

• klassische Mechanik:	$E_{kin} = 1/2 m \cdot v^2$; $p = m v$; $E = E_{kin} + E_{pot}$
• stehende Wellen:	$y''(x) = -k^2 \cdot y(x)$ bzw. $y''(r) = -4\pi^2 \frac{1}{\lambda^2} \cdot y(r)$
• elektrisches Feld:	$F_c(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r^2}$; $V(r) = \int F_c(r) dr$
• Quantenphysik:	$\lambda = h / p$
• Quantenphysikalische Gleichungen wie $\lambda = h / p$ oder die SGL erkennt man an der Planckschen Konstante h. Die Konstante h verknüpft Größen des klassischen Teilchenbilds mit klassischen Wellengrößen. Gleichungen wie die SGL oder die de Broglie-Beziehung können als Übersetzungsgleichungen vom Teilchen- ins Wellenbild gedeutet werden.	
• Das Potential V(r) wird als "Kraftfeld" um den Atomkern, das auf das Elektron wirkt, gedeutet. Es wird anstelle von E_{pot} im Energiesatz verwendet.	

- Die Schrödinger-Gleichung

Die eindimensionale, stationäre SGL als Grundgleichung der Atomphysik

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

bzw.

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

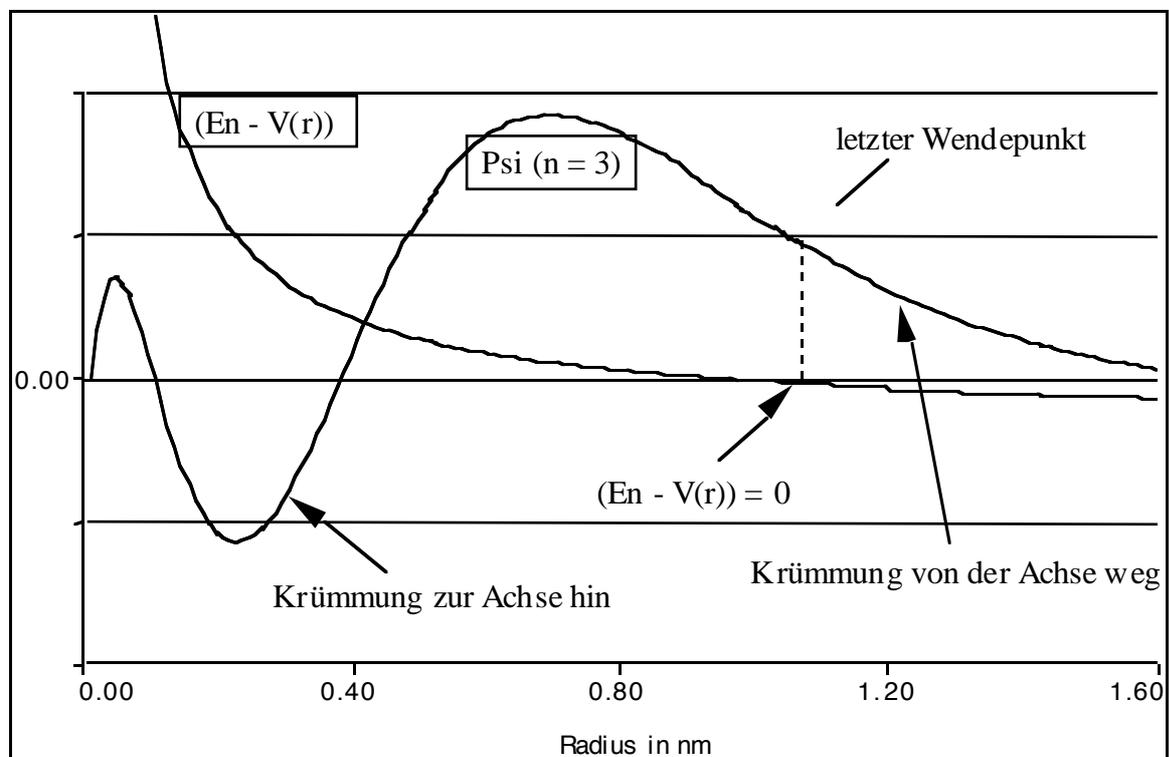
$V(r)$ errechnet sich für das H-Atom aus der Coulomb-Kraft F_c zu:

$$V(r) = - \int_{\infty}^r F_c(r') \cdot dr' = - \int_{\infty}^r \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(-e) \cdot e}{r'^2} \cdot dr' = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

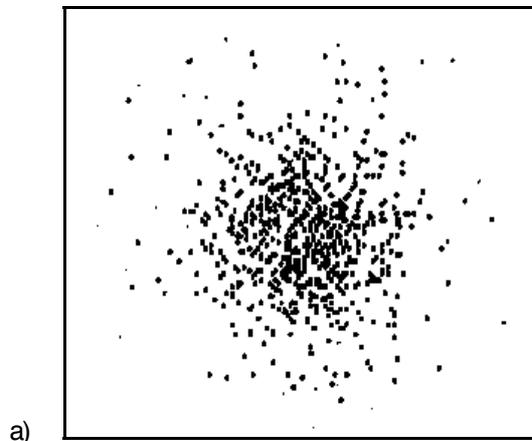
Die eindimensionale, stationäre SGL des H-Atoms lautet:

$$\psi''_n(r) = -8\pi^2 \cdot \frac{m}{h^2} \cdot \left(E_n + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \cdot \psi_n(r)$$

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

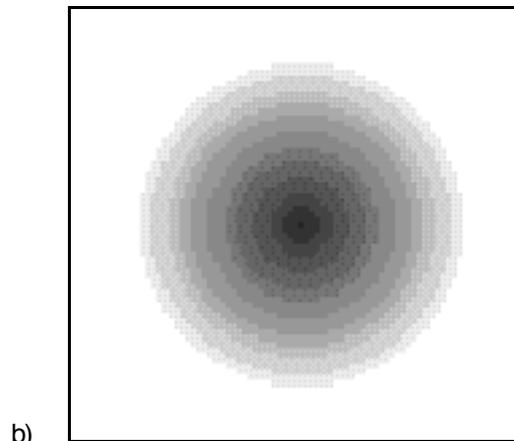


- Veranschaulichung von a) Lokalisationswahrscheinlichkeits- und b) Ladungsdichteverteilung des Elektrons im Grundzustand des H-Atoms



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

Die Punktdichte nimmt nach außen exponentiell ab.



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

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

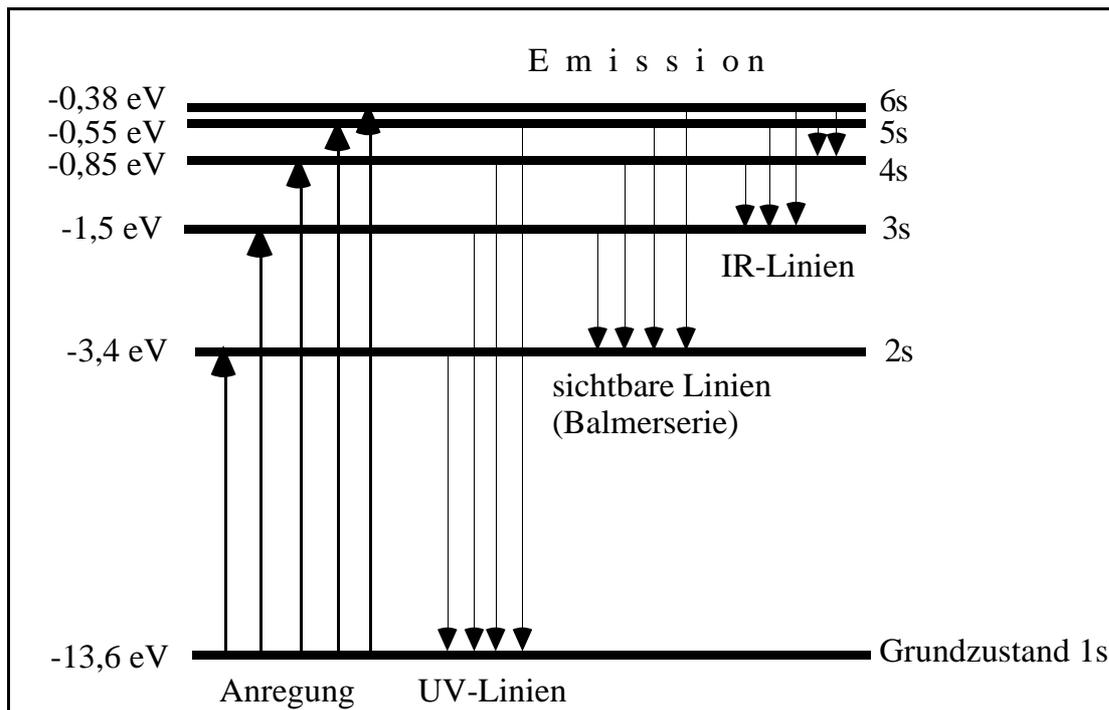
- **Das H-Atom**
- Übergänge und Spektrallinien des H-Atoms

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

- Sichtbares Spektrum des H-Atoms

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

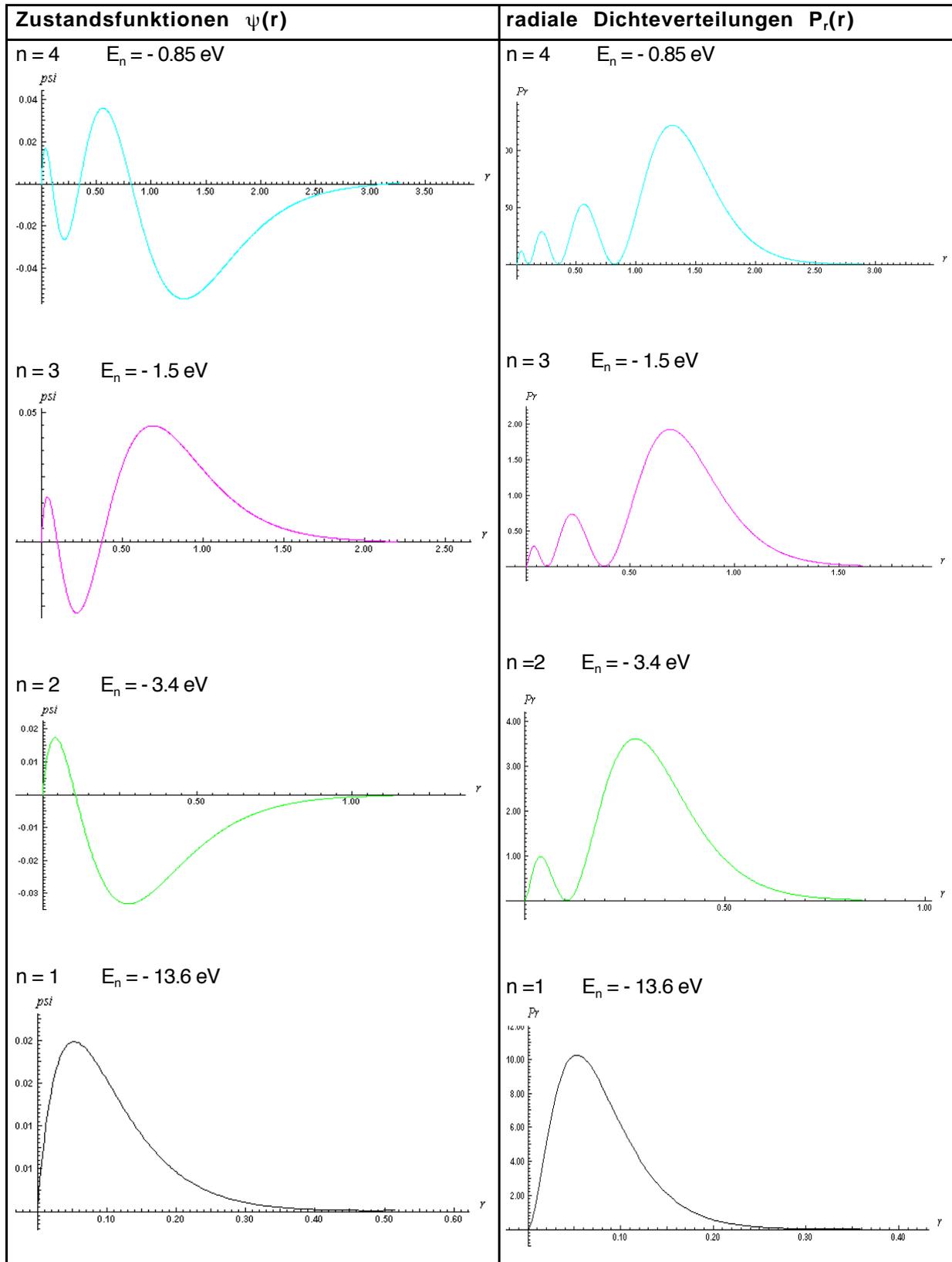
- Anregung und Emission



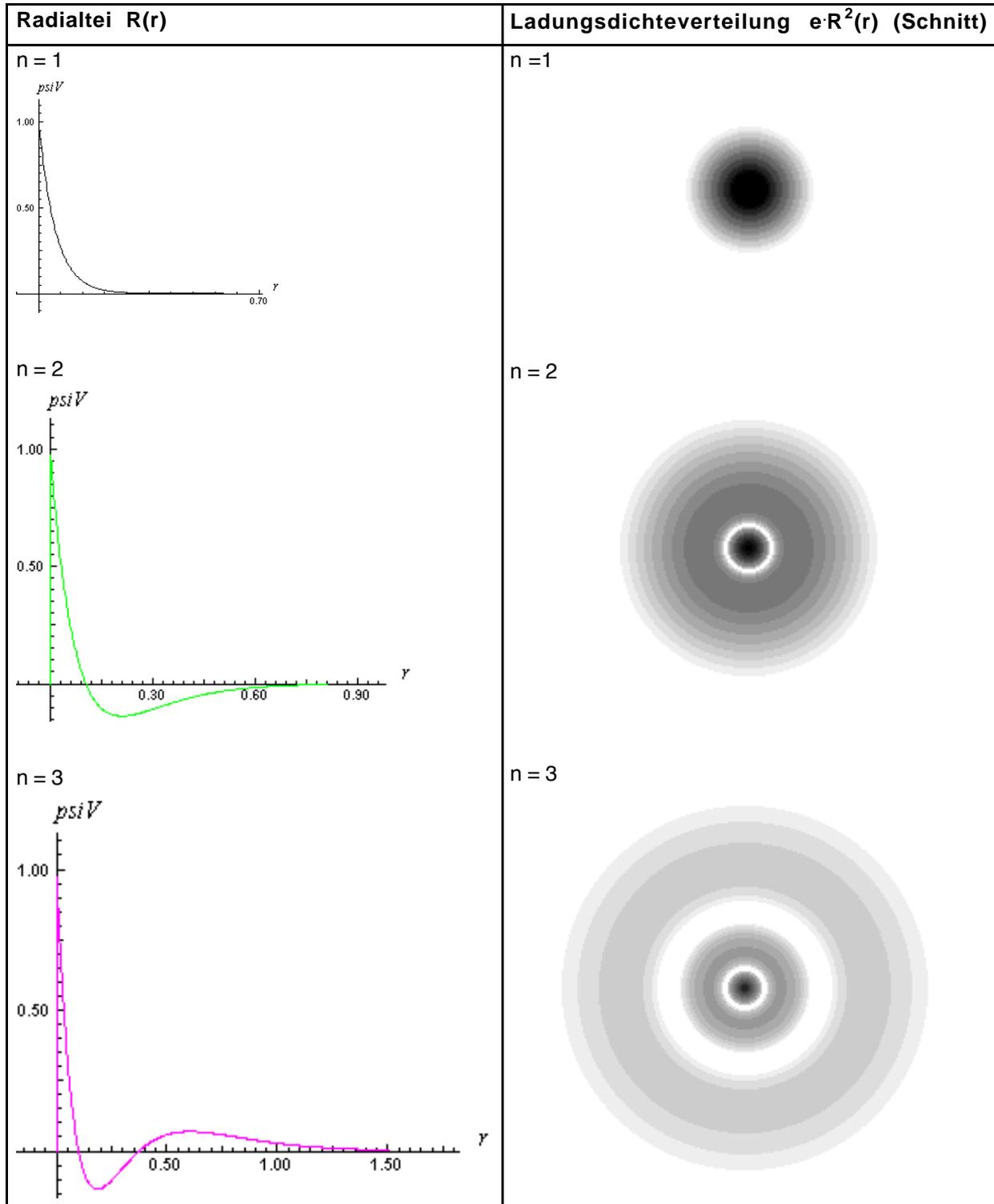
• Einige Zustandsfunktionen des H-Atoms

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

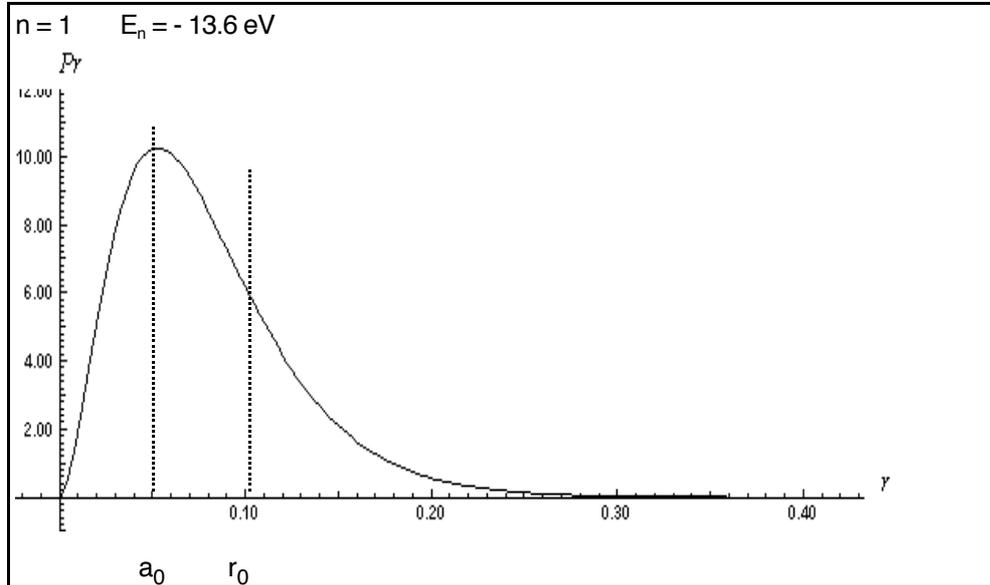
- Die s-Zustände $n = 1$ bis $n = 4$ des H-Atoms (eindimensionale SGL)



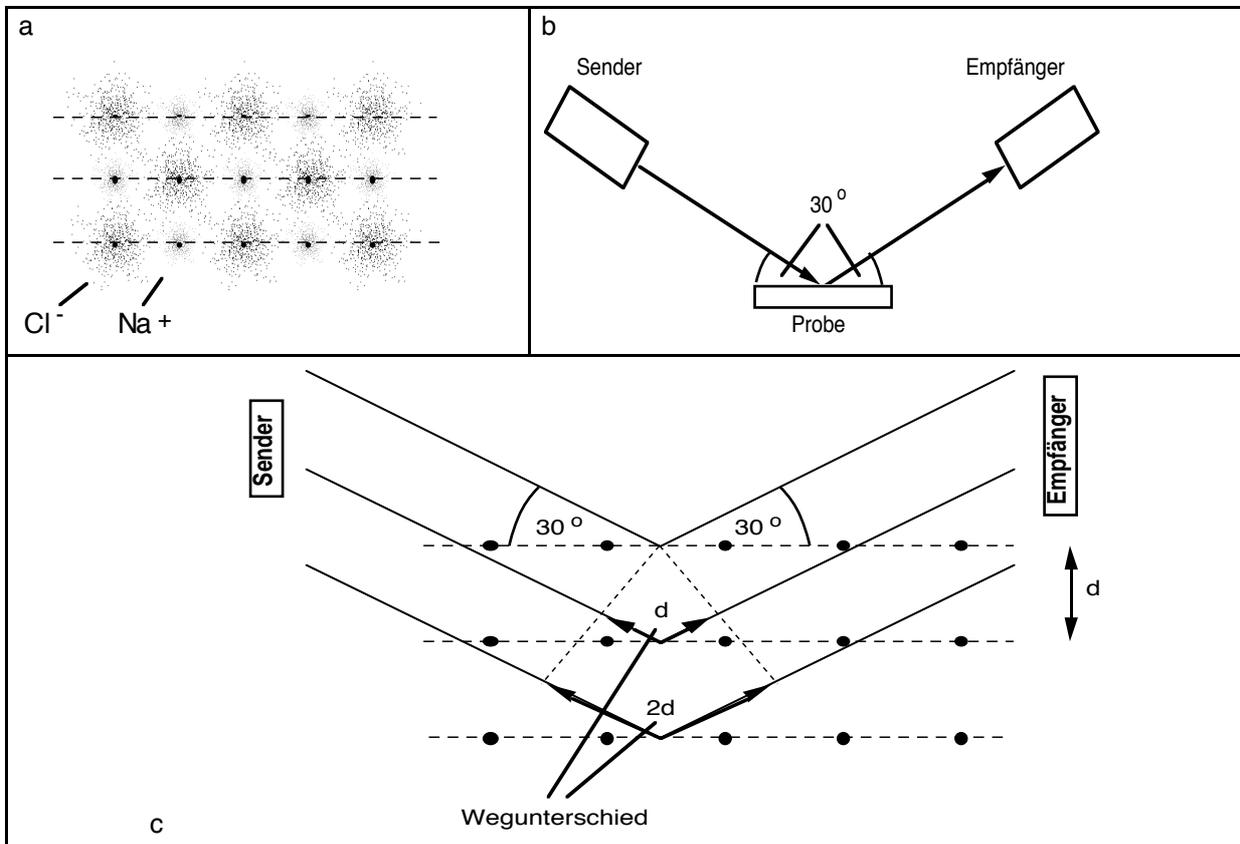
- Der Radialteil $R(r)$ der Lösungen einer dreidimensionalen SGL des H-Atoms und Veranschaulichungen der zugehörigen Ladungsdichteverteilungen (s-Zustände)



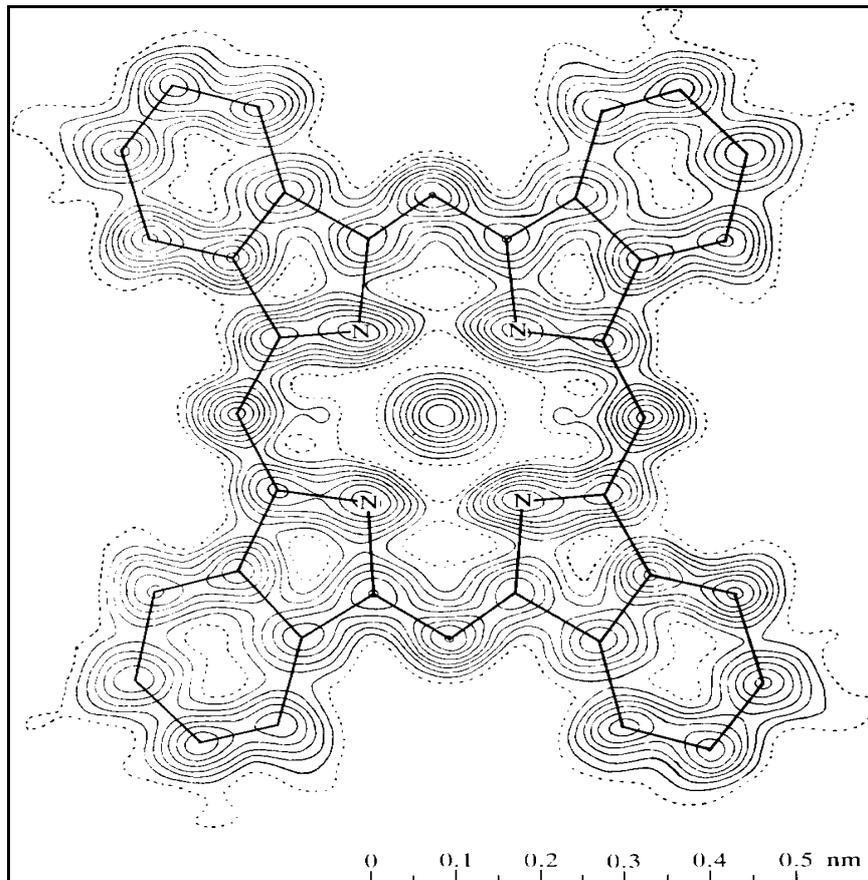
- **Atomradien und Ionisierungsenergien**
- Radiale Dichteverteilung, Bohrscher Radius a_0 und Wendepunkt r_0



- Zur Bestimmung des Ionenradius in Kristallgittern



- Die Ladungsdichteverteilung von Nickel-Phthalocyanin

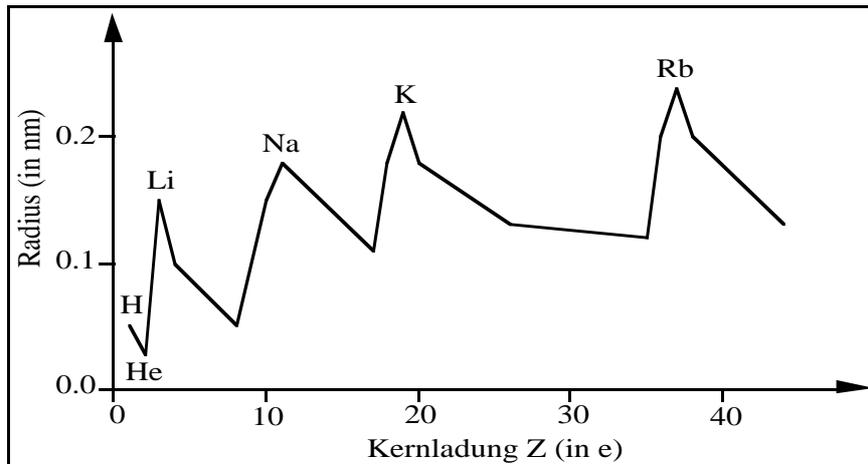


- Atom- und Ionenradien: Experimentelle (oben) und modellierte Werte (unten)

Element	Kovalenter Bindungsradius	aus gaskinetischer Theorie	in Kristallgitter	aus Wirkungsquerschnitt
H	0.032 nm	0.126 nm		
He		0.110 nm		0.224 nm
Li	0.152 nm		0.151 nm	
Li ⁺			0.068 nm	

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

- Atomradien und Ordnungszahl (schematisch)



- Ionisierungsenergien einiger Atome und Ionen in eV

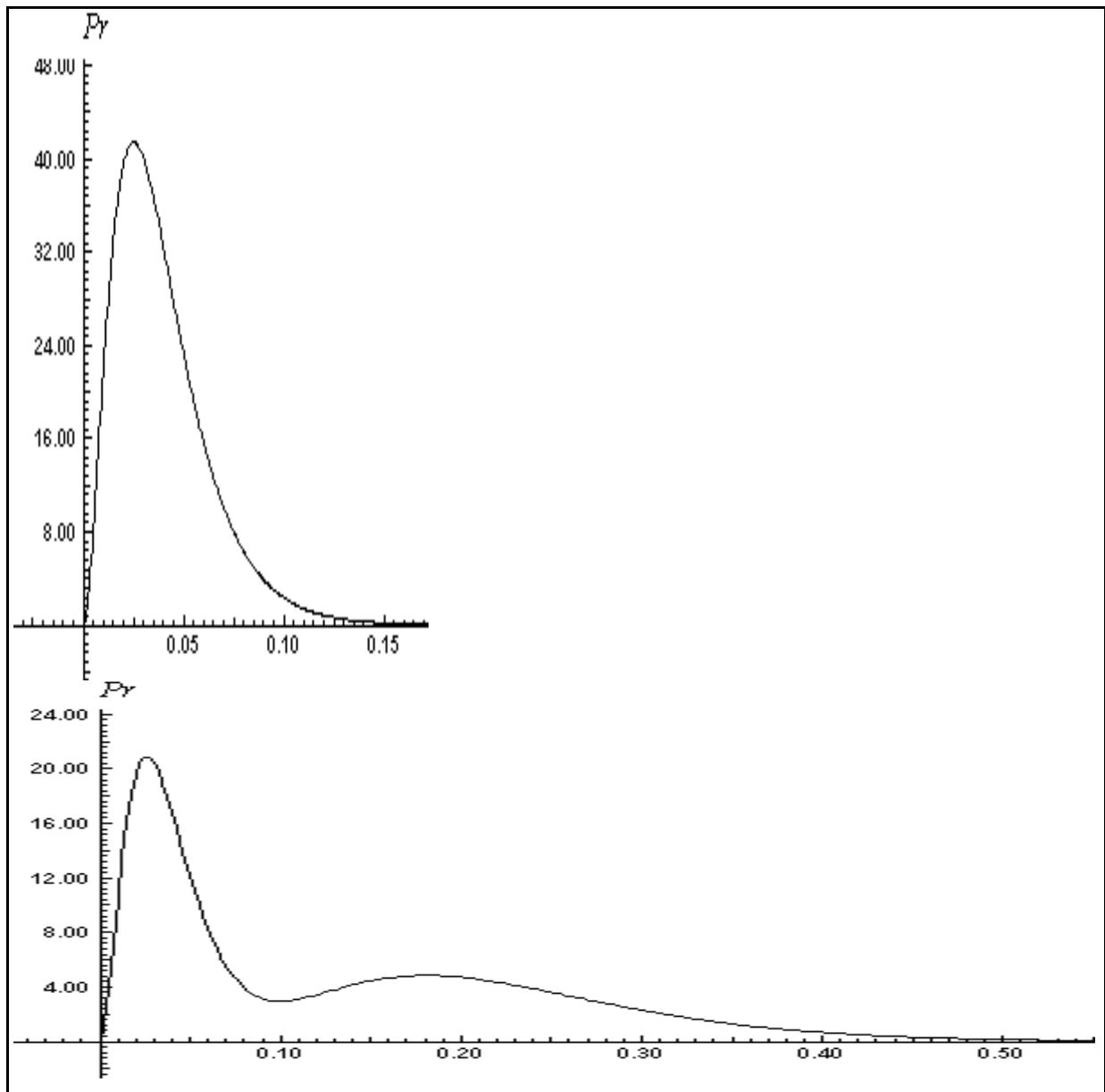
Z	Ladungszustand							
	1+	2+	3+	4+	5+	6+	7+	8+
1 H	13.6							
2 He	24.6	54.4						
3 Li	5.4	75.6	122.5					
4 Be	9.3	18.2	153.9	217.7				
5 B	8.3	25.2	37.9	259.4	340.2			
6 C	11.3	24.4	47.9	64.5	392.1	490.0		
7 N	14.5	29.6	47.5	77.5	97.9	552.1	667.0	
8 O	13.6	35.1	54.9	77.4	113.9	138.1	739.3	871.4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

- **Höhere Atome**

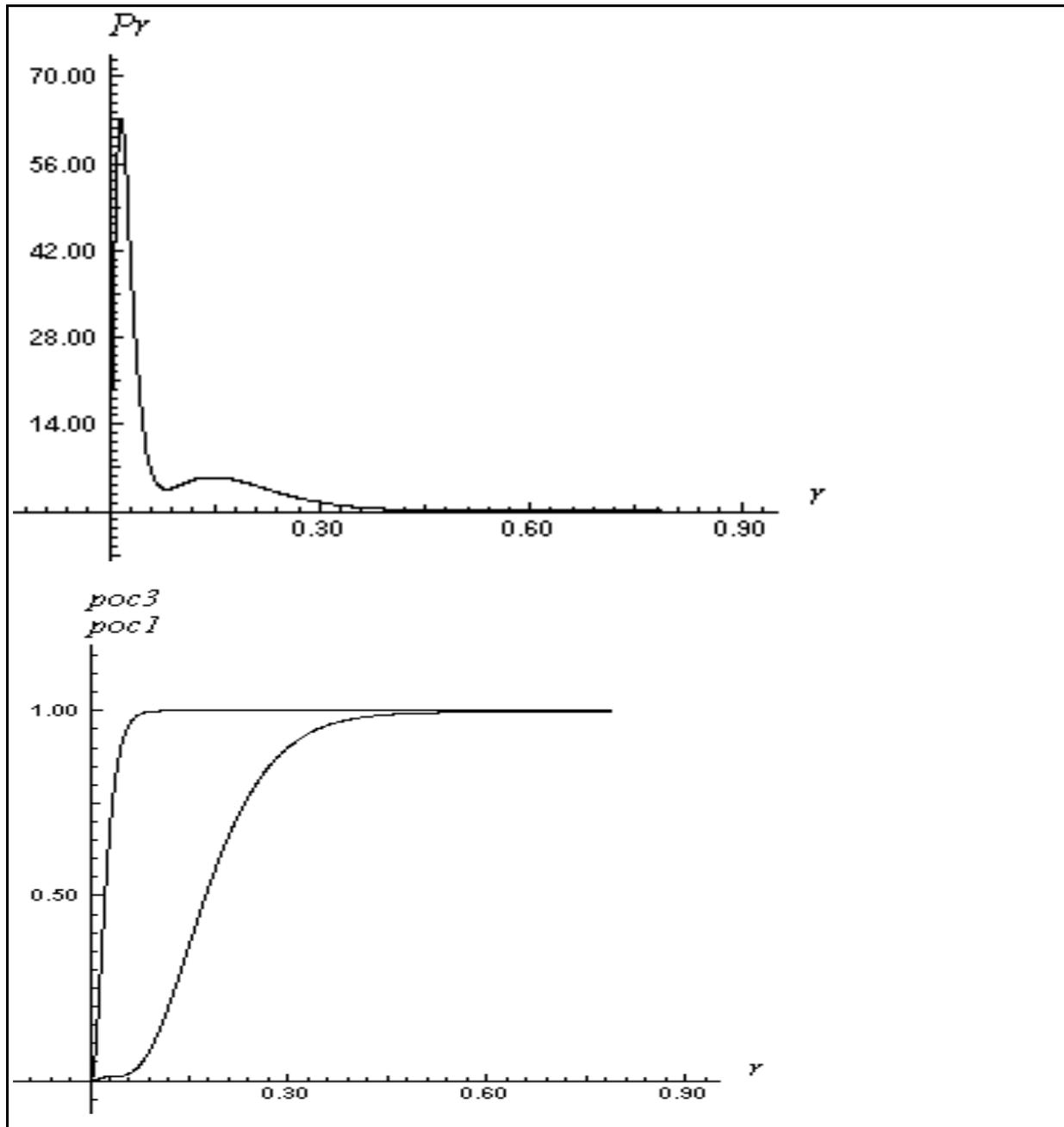
- Zustandsenergien von Helium: Modellerte Werte und Literaturwerte

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

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



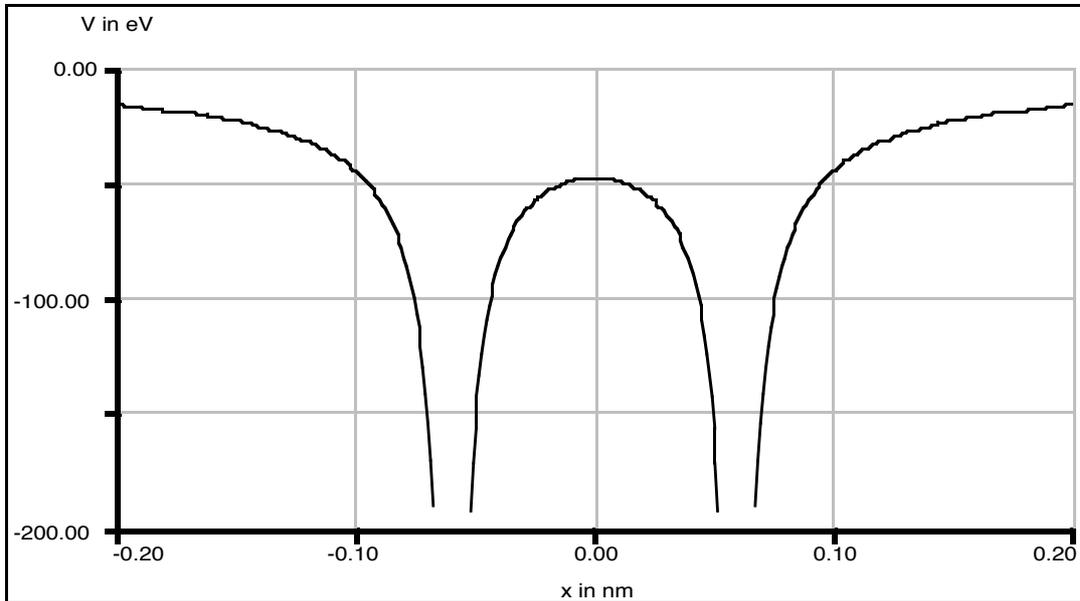
- Radiale Dichteverteilung P_r und Abschirmungsfaktor p_{oc} bei Lithium



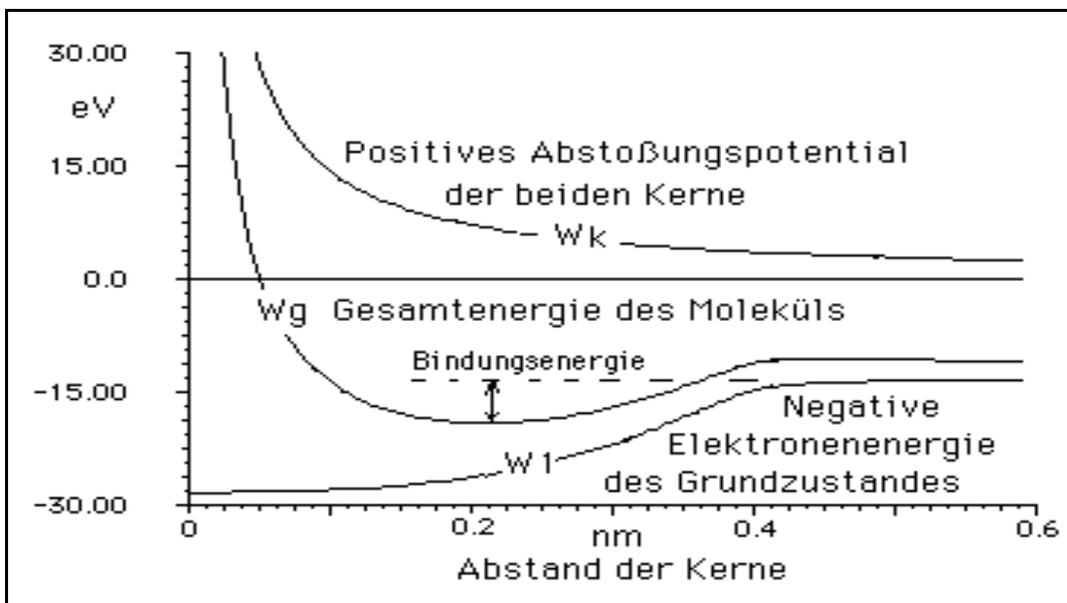
- Li-Atom im Grundzustand:

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

- **Das H_2^+ -Molekülion**
- Das Potential des H_2^+ -Molekülions, eindimensional

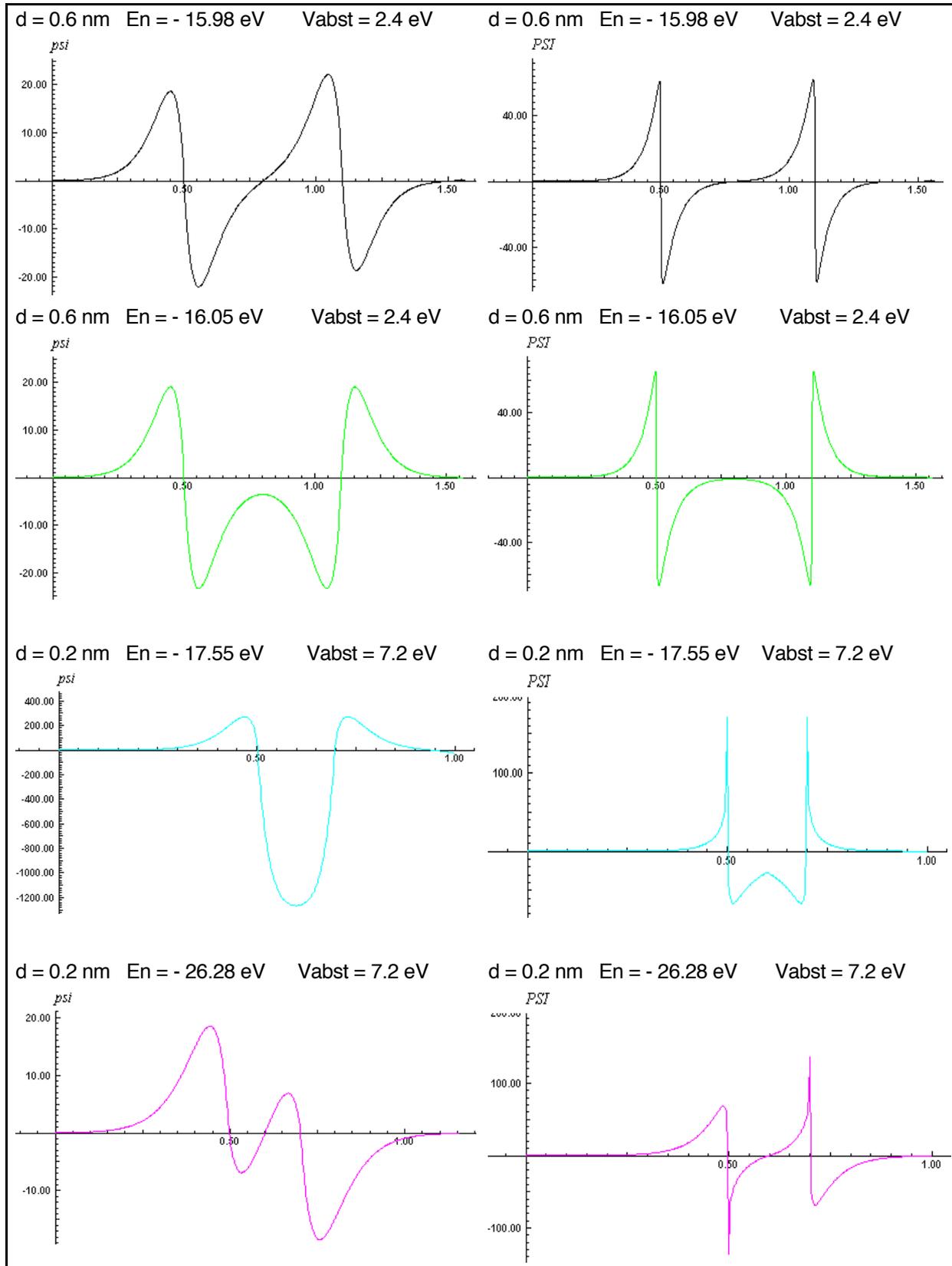


- Bindungsenergie des Molekülions und Kernabstand

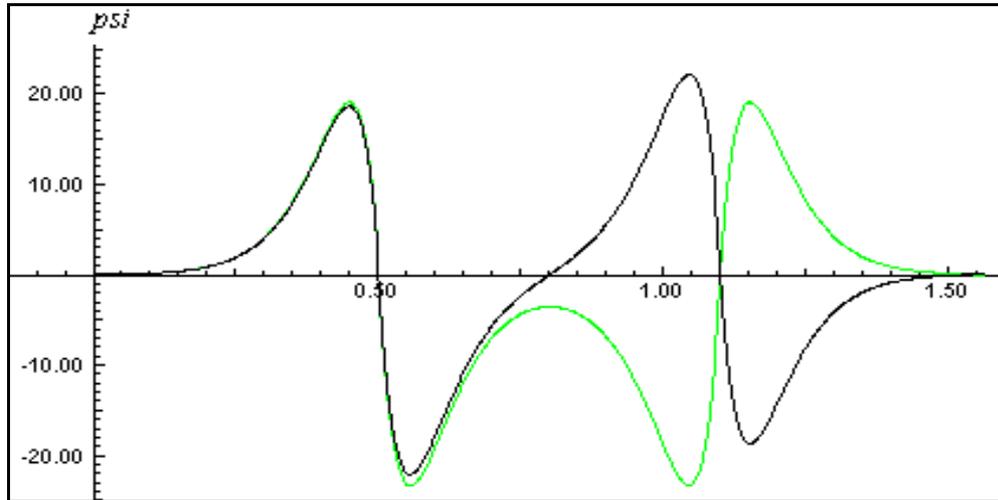


Die Energie wird hier mit W bezeichnet

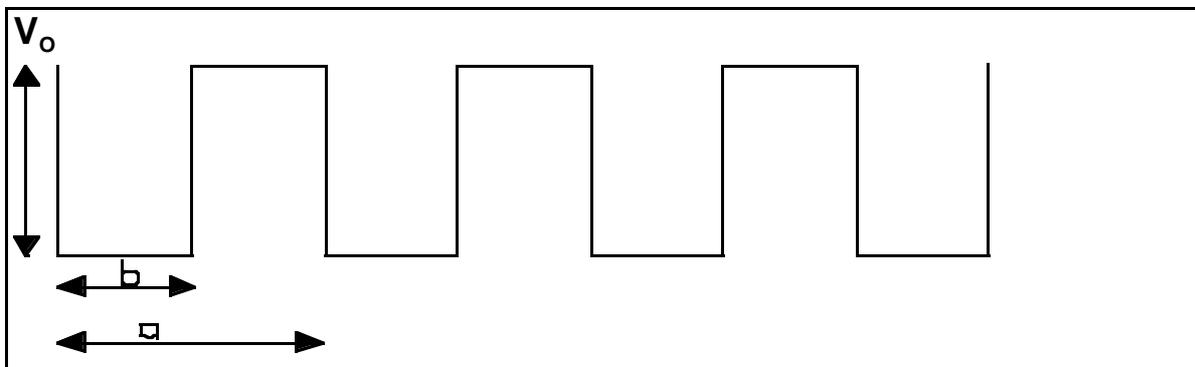
- ψ -Funktionen des H_2^+ -Moleküliions eindimensionale SGL
- ψ -Funktionen des H_2^+ -Moleküliions dreidimensionale SGL



- Bindender und antibindender Zustand bei $d = 0.6 \text{ nm}$



- **Festkörper**
- Kronig-Penney-Potential: V_0 : Potentialschwelle a : Abstand zweier Gitterionen; b : Ionenradius

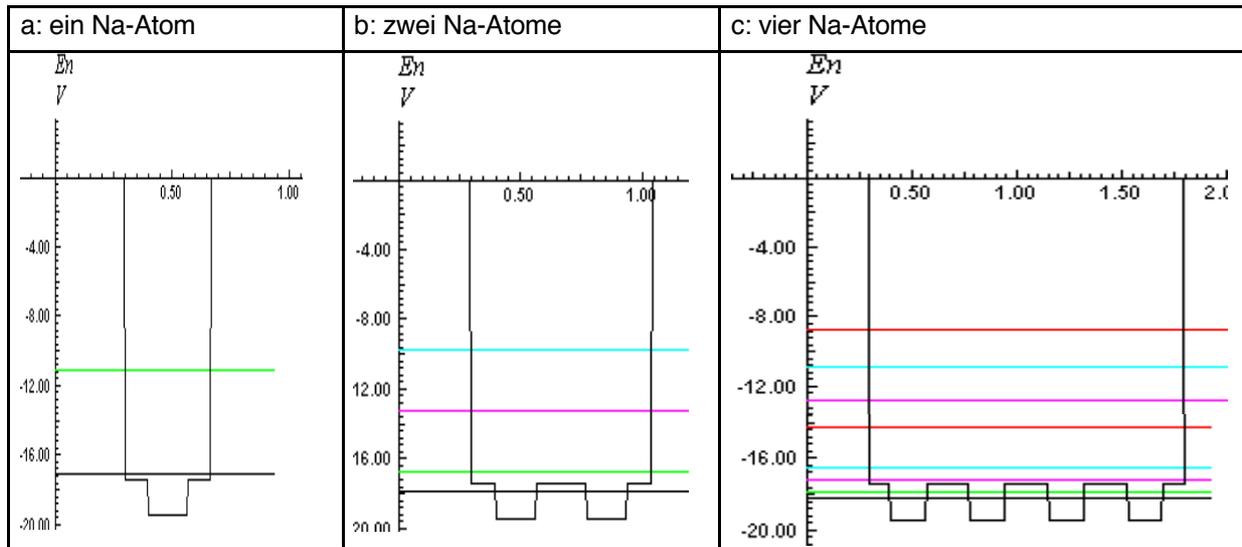


- Parameter für Potentialtopfmodelle einiger Hauptgruppenmetalle

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

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

• Potentialtöpfe und Energieniveaus für Natrium

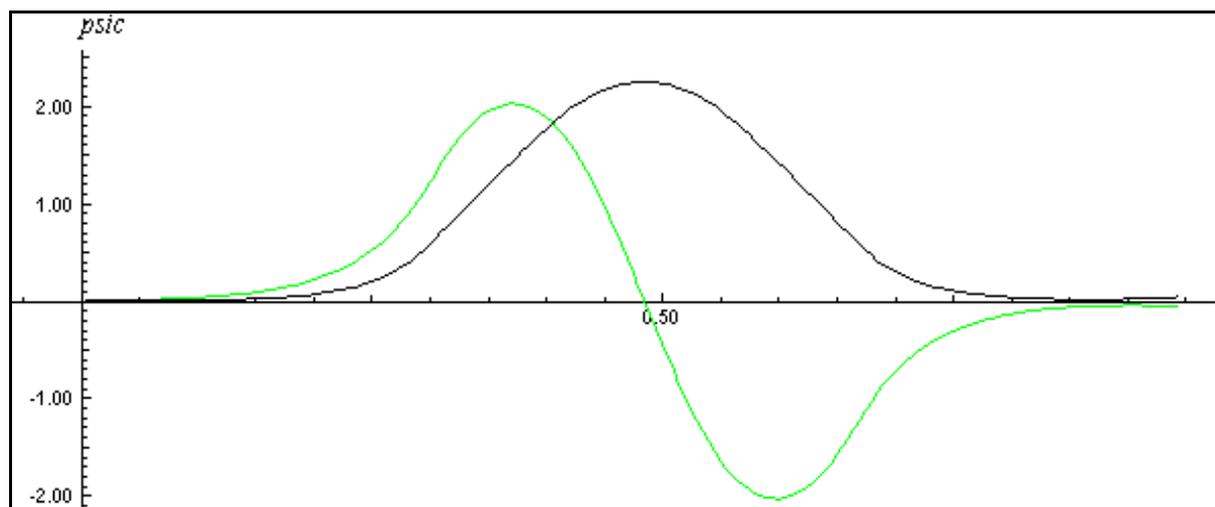


• Ermittelte Eigenwerte für Natrium (in eV) bei einer Schrittweite von 0.005 nm

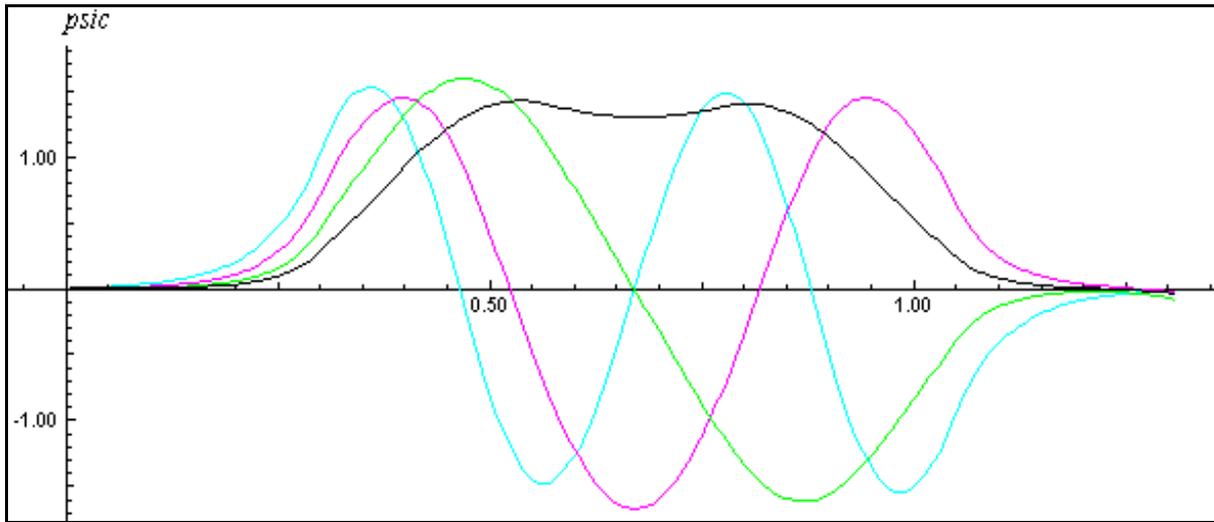
Ein Atom	Zwei Atome		Vier Atome:			
- 17.070	- 17.944	- 16.732	- 18.291	- 17.871	- 17.210	- 16.616
- 11.166	- 13.266	- 9.735	- 14.306	- 12.802	- 10.926	- 8.734

• Die Zustandsfunktionen ψ zu den für Natrium berechneten Energieniveaus

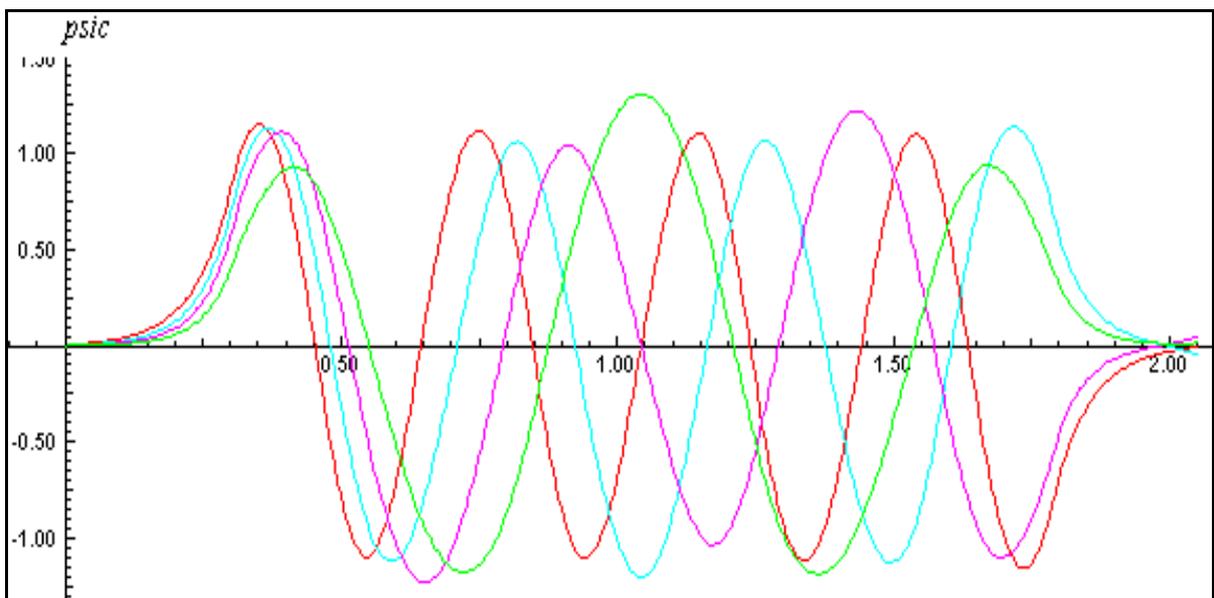
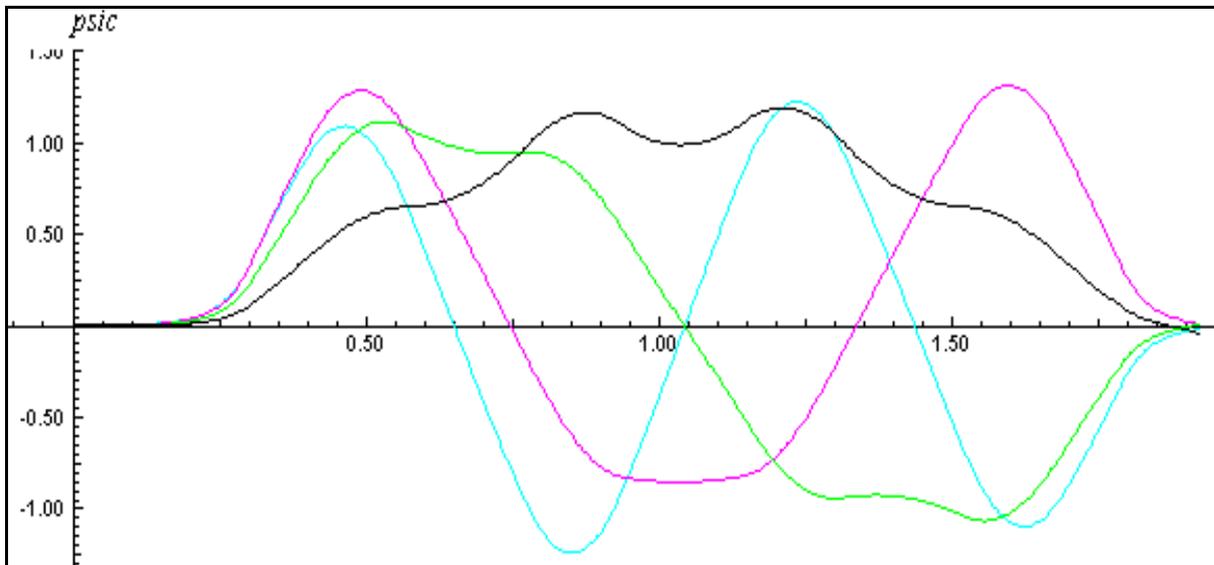
a: ein Na-Atom, Kern bei $r = 0.48$ nm



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

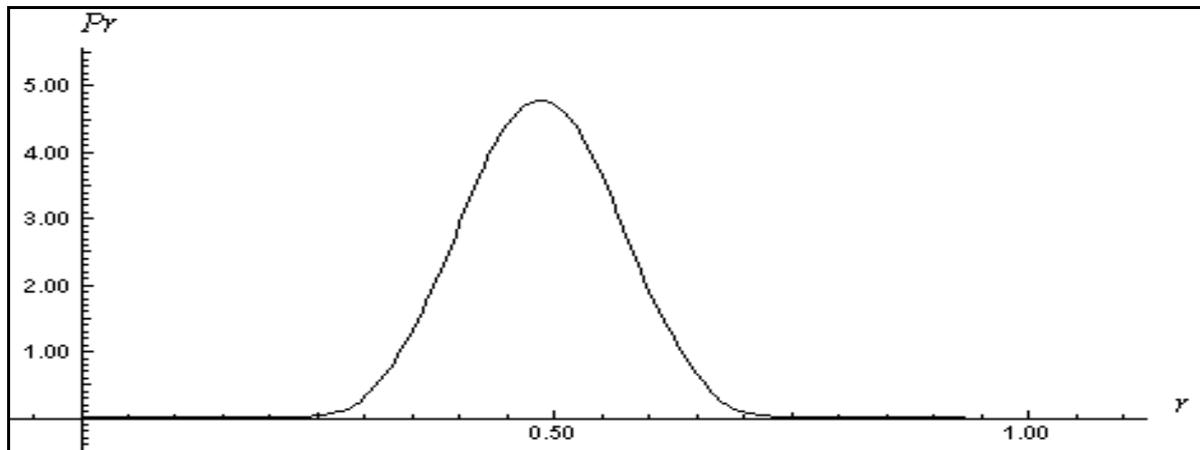


c: vier Na-Atome (Niveau 1 - 4 oben, 5 - 8 unten), Kerne bei $r = 0.48 ; 0.85 ; 1.22$ und 1.59 nm

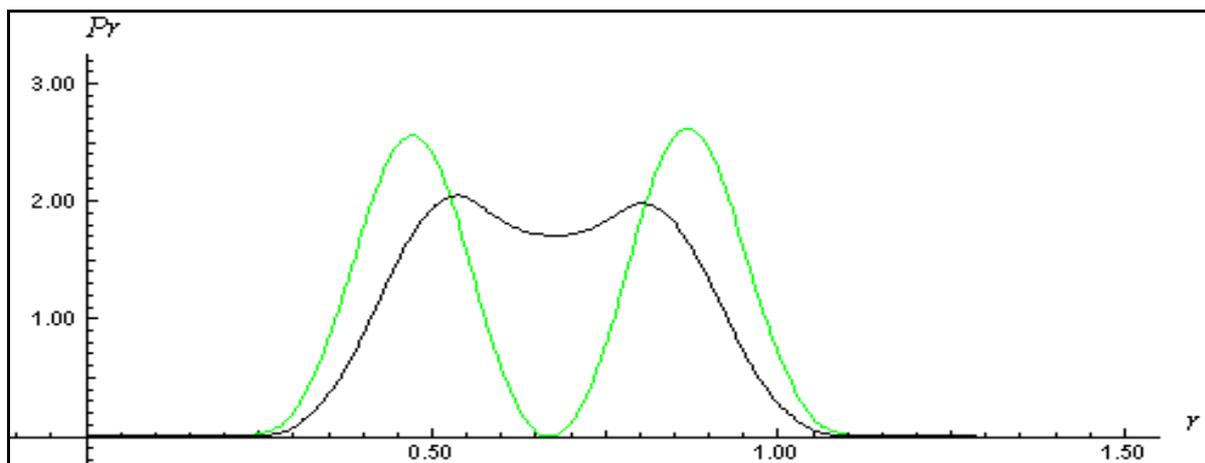


- Die Dichteverteilungen ψ^2 zu den für Natrium berechneten Energieniveaus

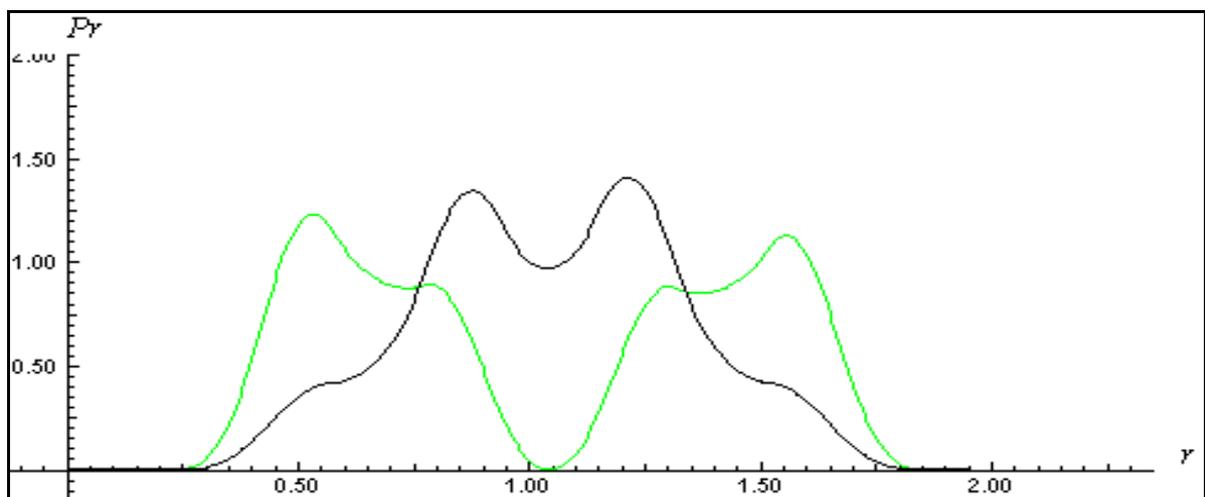
a: ein Na-Atom, Kern bei $r = 0.48$ nm

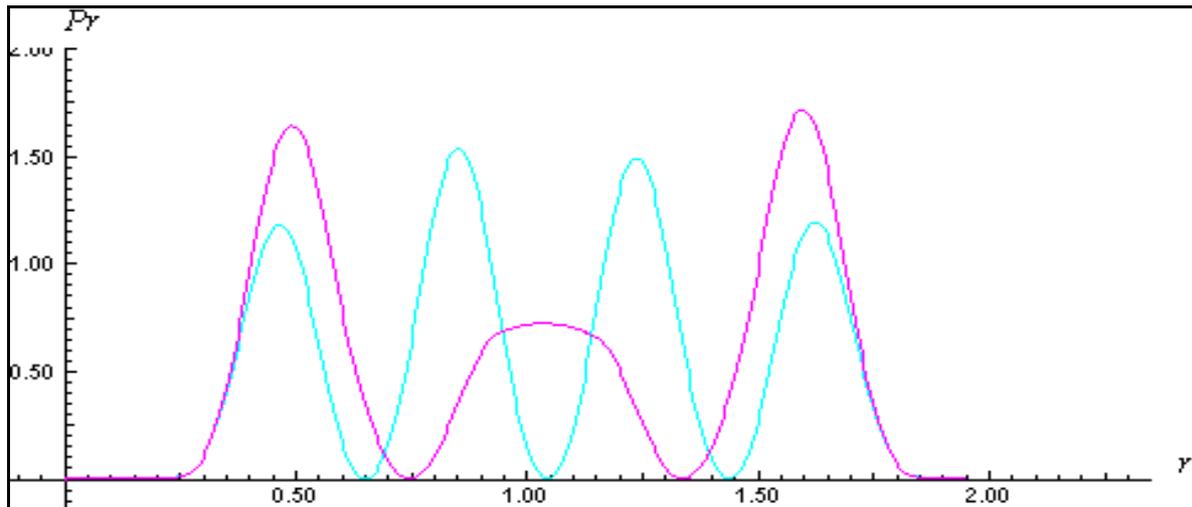


b: zwei Na-Atome, Kerne bei $r = 0.48$ und 0.85 nm



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





A.2 Beispiele für Aufgabenstellungen

• Schülervorstellungen vom Atom vor Beginn des Unterrichts

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

Mein Atommodell

Zeichnung z.B.

Kern

Bahn Schale

Atomkern aus Protonen und Neutronen
Atomhülle aus Elektronen auf Bahnen,
auch mehrere Elektronen auf einer

Die Elektronen und Protonen haben
entgegen- gesetzte Ladung. Deshalb
werden sie voneinander angezogen.
Die Bewegung auf der Kreisbahn
bewirkt eine Kraft, die der
Anziehungskraft entgegenwirkt.

Kommentiere diese Vorstellung:

- Inwiefern entspricht diese Vorstellung Deiner eigenen Vorstellung und Deinen eigenen bisherigen Kenntnissen?
- Womit bist Du einverstanden, womit nicht?
- Wo würdest Du Ergänzungen vornehmen?
- Kennst Du andere Atommodell? Wenn ja, beschreibe sie!

• **Spektren**

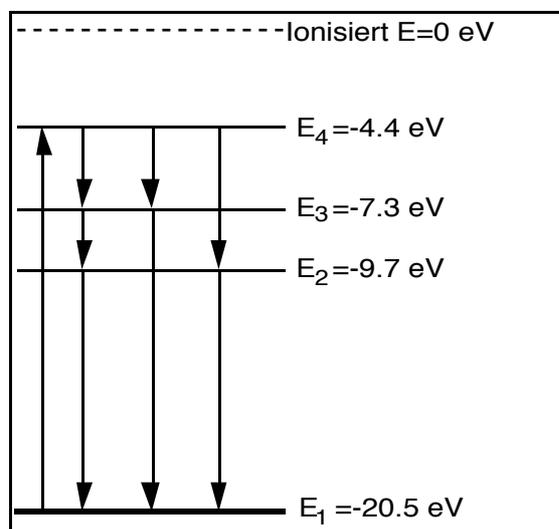
2) Das Energieniveauschema eines Atoms ist unten abgebildet. Die Atome liegen gasförmig in einer Glasröhre vor und werden mit Elektronen beschossen, die die Atome bevorzugt in den Zustand mit der Energie $E_4 = -4.4 \text{ eV}$ anregen (nach oben gerichteter Pfeil). Beim Zerfall der Atome gibt es drei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

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

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

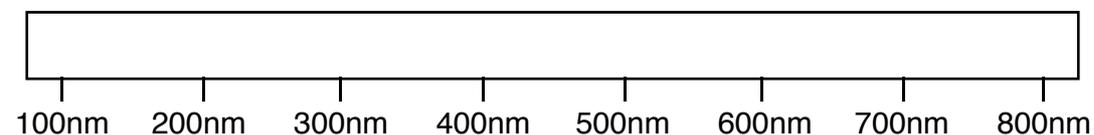
c: Das Atom zerfällt über den Zustand 2 in den Grundzustand.

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



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

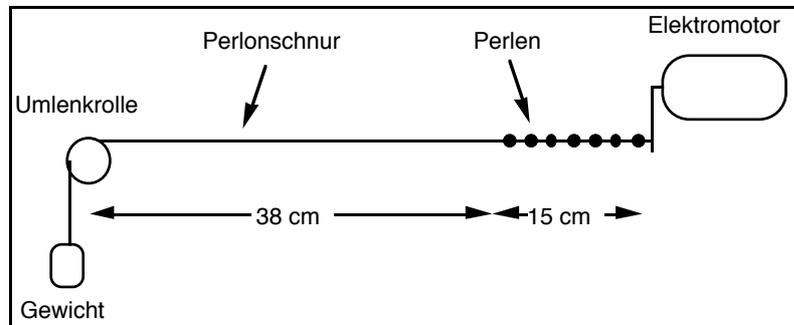
- Zeichne es in die Abbildung unter Berücksichtigung der Wellenlänge ein!



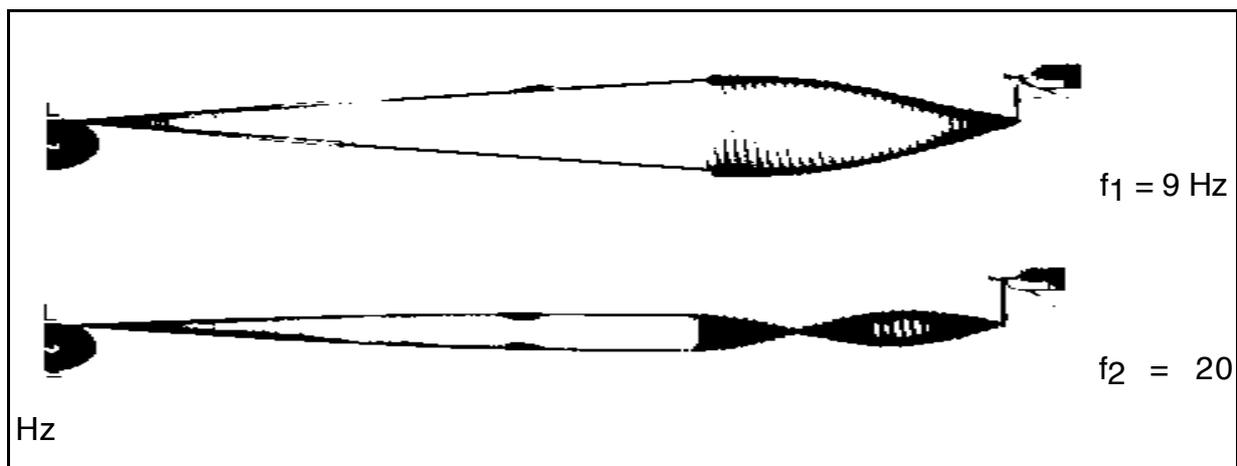
- Welche dieser Linien liegen im für den Menschen sichtbaren Bereich?

• **Stehende Seilwellen**

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



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



- Worin unterscheiden sich die beiden Fotos (Zustände)?
- Welche Form erwartest Du für den nächst höheren Schwingungszustand? Fertige eine Zeichnung an und beschrifte sie kurz.
- Was erwartest Du von dem schwingenden Seil, wenn man eine Frequenz zwischen $f = 9 \text{ Hz}$ und $f = 20 \text{ Hz}$ einstellt?
- Welche Aussagen lassen sich zur Krümmung des Seil im Zustand 1 machen?
- Worin unterscheidet sich die Krümmung des Seil in Zustand 1 und in Zustand 2?

- **Zustand**

4) Was bedeutet für Dich der Begriff Zustand?

Formuliere zwei Sätze, in denen das Wort Zustand vorkommt.

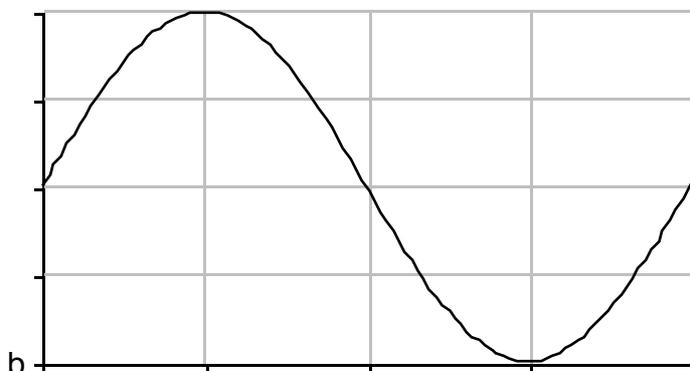
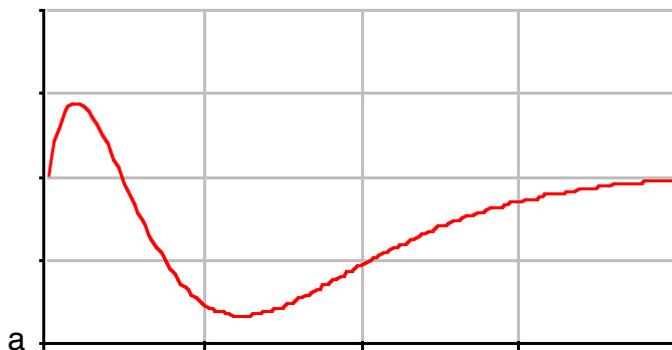
Was bedeutet es für Dich, wenn man sagt, dass sich ein Auto in einem bestimmten Zustand befindet? Was bedeutet es für Dich, wenn man sagt, dass sich ein Atom in einem bestimmten Zustand befindet?

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

Was bedeutet ein Eigenzustand a) klassisch b) quantenmechanisch?

- **Krümmung**

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



- **Paarbeziehungen**

7) Welche der genannten Begriffe gehören jeweils paarweise zusammen?

Grundzustand, Abschirmung, Lichtaussendung, Zustand niedrigster Energie, Photon, Übergang zwischen zwei Zuständen, Licht, Atome mit mehreren Elektronen
Erkläre kurz Deine Auswahl!

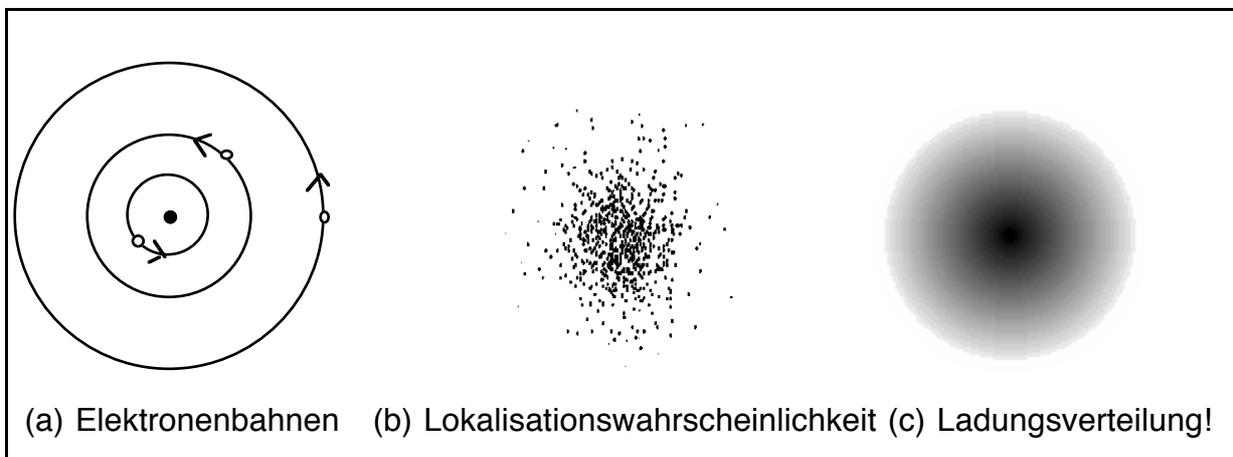
- **Modellierung des H-Atoms**

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

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

- **Atommodelle**

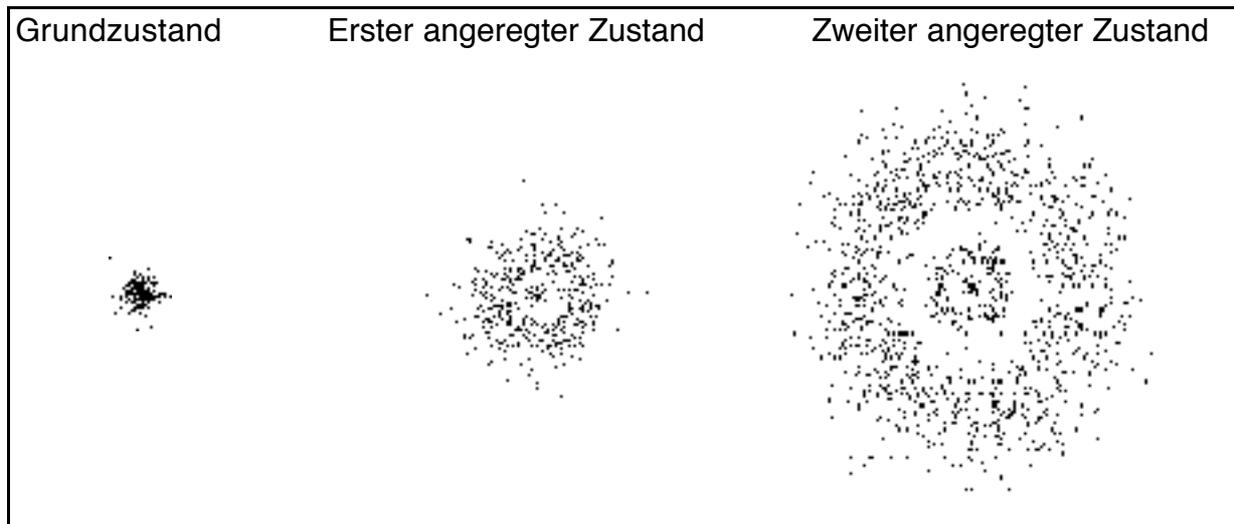
9) Beschreibe die Gemeinsamkeiten und Unterschiede der drei Atommodelle:



Vergleiche die drei Atommodelle mit einem Querschnitt durch

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

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



- Skizziere und diskutiere den Zusammenhang mit den $\psi^2(r)$ -Kurven!
- Welche Interpretation der ψ -Funktion liegt zugrunde? (Erkläre den Begriff)
- Wie könnten diese Abbildungen entstanden sein?
- Wie könnte man diese Abbildungen missverstehen?

• **Orbitale / Schale**

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

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

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

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

- Welche Gestalt und Lage haben die Knotenflächen?
- Skizziere die zugehörigen Orbitale!
- Welche Quantenzahlen kennzeichnen die beiden Zustände?
- Was bedeuten die Quantenzahlen n, m und l?

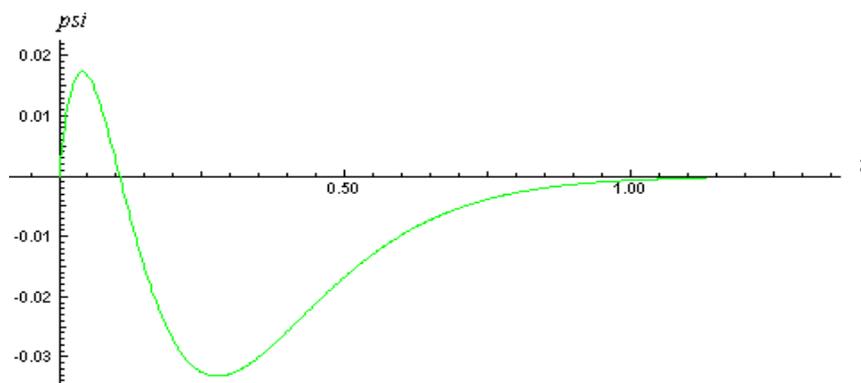
• **Schrödinger-Gleichung**

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

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

- Berechne für die mit dem Computer ermittelten Energieeigenwerte die Radien an denen gilt: $E_n = V(r)$!
- Markiert diese Radien an den Funktionsgraphen!
- Wie ändert sich an diesem Punkt die ψ -Kurve?
- Was spricht dafür, den Radius des Atoms über diesen Wert zu definieren?
- Welche theoretischen Alternativen zur Definition des Atomradius gibt es?
- Beschreibe ein experimentelles Verfahren zur Bestimmung des Atomradius!
- Was kannst Du über das Verhältnis von theoretischen und experimentellen Werten aussagen?

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

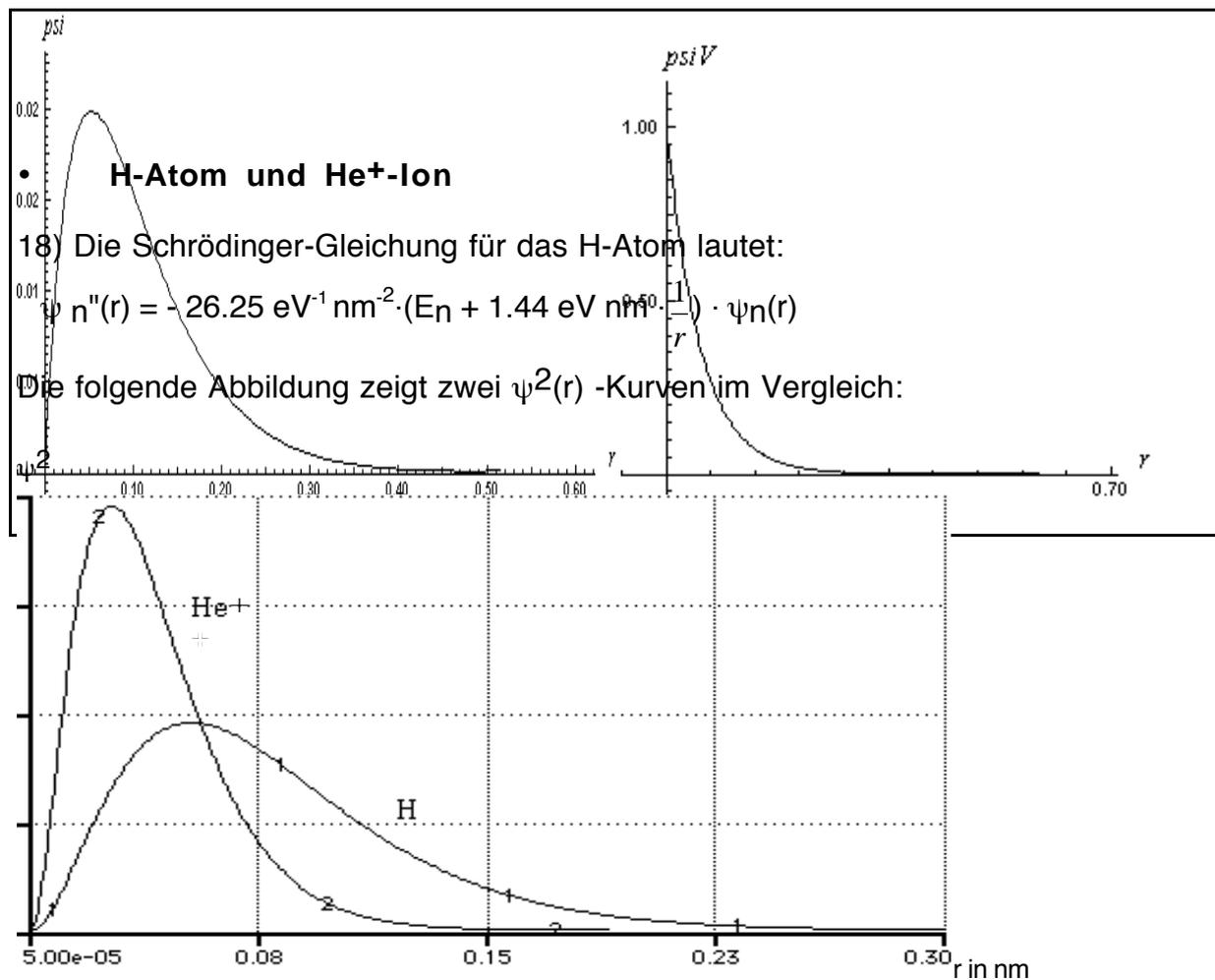


15) Erkläre mit Hilfe des Krümmungsbegriffs: Warum gibt es beim H-Atom keinen stabilen Zustand mit $E_n < -13,6 \text{ eV}$ und entsprechend kleinerem Atomradius ?

16) Erkläre die Stabilität des Atoms aus der SGL!

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

- Worin besteht der Zusammenhang der beiden Kurven (mit Formel)?
- Inwieweit ist der Unterschied physikalisch wichtig?



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

Der Energieeigenwert dieses Zustands des He⁺-Ions ist: $E = -54,4 \text{ eV}$.

- Um welchen Zustand handelt es sich in beiden Kurven? Begründung!
- Wie hoch ist der Energieeigenwert dieses Zustands im H-Atom?

- Welche beiden für H-Atom und He^+ -Ion experimentell bestimmbaren Meßgrößen lassen sich direkt aus diesen theoretischen Daten (Kurven und Energiewerte) vorhersagen? Welche Meßergebnisse erwartest Du jeweils ?
- Wie lautet die Formel für das Potential $V(r)$ des He^+ -Ions?
- Gib die Schrödinger-Gleichung (SGL) für das He^+ -Ion an!
- Wie läßt sich der unterschiedliche Energieeigenwert erklären?
- Erkläre die Abweichungen der ψ^2 -Kurve des He^+ -Ions von der ψ^2 -Kurve des H-Atoms, indem Du das Krümmungsverhalten der entsprechenden ψ -Kurven aus der jeweiligen SGL analysieren!
- Zeichne ein Diagramm für die ψ^2 -Kurve des zweiten Zustand des He^+ -Ions (mit Maßstab an der r-Achse) ! Wie groß schätzt Du den Energieeigenwert dieses Zustandes (Begründung)?

- Lithium**

19) Die Modellgleichungen für ein Li-Atom in MODELLUS lauten.

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

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

$$\frac{d\psi_3}{dr} = s\psi_3$$

$$\frac{ds\psi_1}{dr} = -26.25 \times \left(E_{n1} + 1.44 \times (3 - p_{oc2} - p_{oc3}) \times \frac{1}{r} \right) \times \psi_1$$

$$\frac{ds\psi_2}{dr} = -26.25 \times \left(E_{n2} + 1.44 \times (3 - p_{oc1} - p_{oc3}) \times \frac{1}{r} \right) \times \psi_2$$

$$\frac{ds\psi_3}{dr} = -26.25 \times \left(E_{n3} + 1.44 \times (3 - p_{oc1} - p_{oc2}) \times \frac{1}{r} \right) \times \psi_3$$

$$\frac{dp_{oc1}}{dr} = z1$$

$$\text{if}(r \leq 0.17) \text{ then } \left\{ z1 = \frac{\psi_1^2}{c1} \right\}$$

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

$$\frac{dp_{oc2}}{dr} = z2$$

$$\text{if}(r \leq 0.17) \text{ then } \left\{ z2 = \frac{\psi_2^2}{c2} \right\}$$

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

$$\frac{dp_{oc3}}{dr} = \frac{\psi_3^2}{c3}$$

$$Pr = z1 + z2 + \frac{\psi_3^2}{c3}$$

- Wie drückt sich die Anzahl der Elektronen von Lithium in Modell aus?
- Erkläre möglichst ausführlich: Wie wird die gegenseitige Wechselwirkung der Elektronen im Modell berücksichtigt?
- Wieswegen sind die if-Bedingungen notwendig?
- Wie wird bei der Modellierung (nicht in den Modellgleichungen) das Pauli-Prinzip berücksichtigt?
- Skizziere den zu erwartenden Verlauf der Kurven ρ_{c1} , ρ_{c2} und ρ_{c3} !
- Was bedeutet P_r ? Welcher Funktionsverlauf ist für P_r zu erwarten?
- Was bedeuten die Faktoren c_1 , c_2 und c_3 ?

20) Ein Lithium-Atom hat einen dreifach positiv geladenen Kern und drei Elektronen.

- Was besagt das Pauli-Prinzip?
- Welche Konsequenzen ergeben sich aus dem Pauli-Prinzip für Lithium!
- Wie wirken sich diese Konsequenzen bei der Modellierung des Li-Atoms im Grundzustand aus? (Vergleich mit Helium)

21) Die drei Elektronen des Lithium-Atoms im Grundzustand $(1s)(1s)(2s)$ besitzen folgende Bindungsenergien. $E_1 = -96.3\text{eV}$ $E_2 = -96.3\text{eV}$ $E_3 = -5.8\text{eV}$

- Skizziere die zugehörigen ψ -Funktionen und die radiale Dichteverteilung!
- Welche Energie besitzt das Lithium-Atom in diesem Zustand?

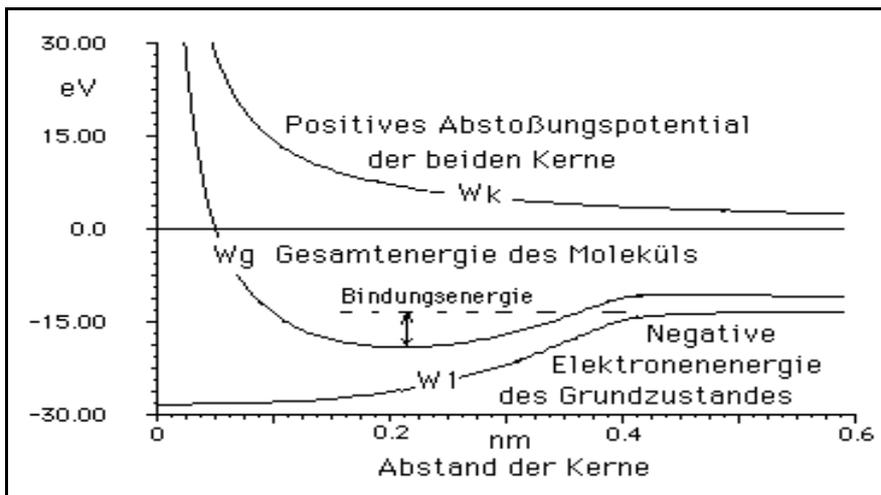
Das Lithium-Atom wird nun in den $(1s)(1s)(3s)$ -Zustand angeregt.

- Was bedeutet das für die ψ -Funktionen und Energien der einzelnen Elektronen 1, 2 und 3 (es sind keine Zahlenangabe der Energien erforderlich; es reicht die Aussage, ob die einzelnen Energien kleiner, gleich oder größer sein werden)?
- Begründe Deine Voraussage über die ψ -Funktionen und Energien der einzelnen Elektronen.

• **Das H₂⁺-Molekülion**

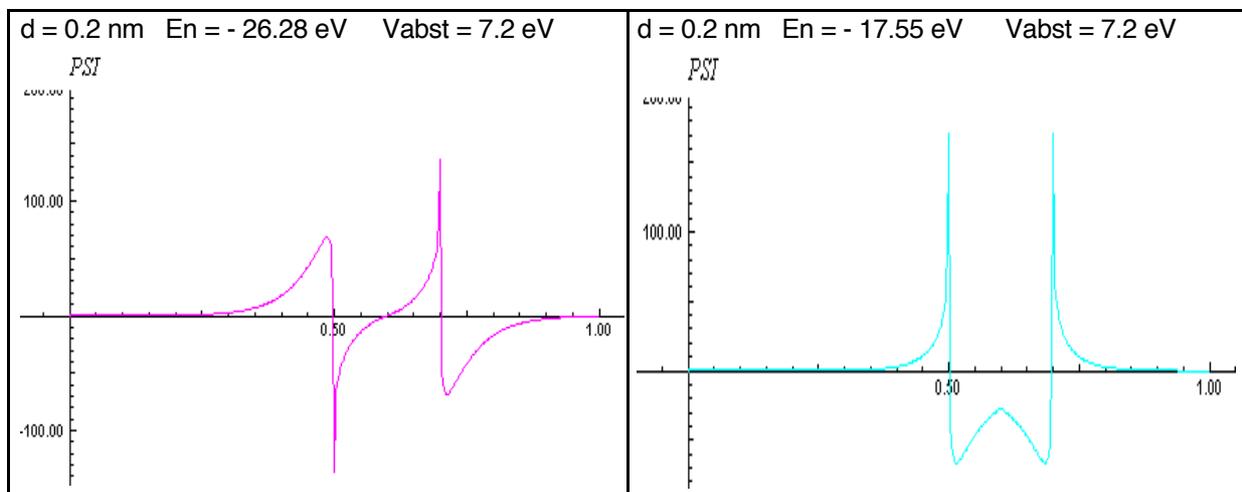
22) Wie kann man sich die Molekülbindung mit der Ladungsdichteinterpretation der ψ -Funktion plausibel erklären? Erläutere den Sachverhalt an einer Beispielskizze!

23) Erläutere anhand der Abbildung, unter welchen Bedingungen beim H₂⁺-Molekülion eine stabile Bindung entsteht!



24) Für das H₂⁺-Molekülion wurden bei $d = 0.2$ nm folgende Eigenwerte und Zustandsfunktionen (niedrigste Zustände) ermittelt.

Erläutere, interpretiere und diskutiere die Daten! Betrachte dabei auch den Grundzustand des H-Atoms von -13.59 eV.



• **Festkörper**

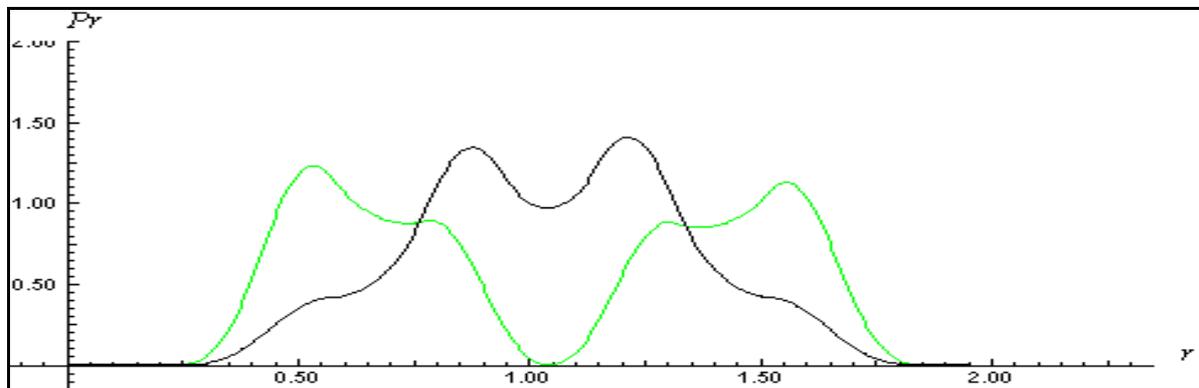
25) Mit einem Potentialtopfmodell für Na wurden folgende Energien (in eV) ermittelt:

Ein Atom	Zwei Atome		Vier Atome:			
- 17.37	- 17.94	- 16.73	- 18.29	- 17.87	- 17.11	- 16.61
- 11.16	- 13.26	- 9.73	- 14.30	- 12.80	- 10.92	- 8.73

Erläutere anhand dieser Daten allgemein die Herausbildung einer (Energie)Bänderstruktur von Festkörpern!

26) Wie kann man aus der Bänderstruktur die optischen Eigenschaften eines Festkörpers im Prinzip verstehen?

27) Mit einem Potentialtopfmodell für vier Na-Atome an den ungefähren Positionen $r = 0.48 ; 0.85; 1.22$ und 1.59 nm wurden folgende Verteilungsfunktionen bestimmt:



- Um welche Zustände handelt es sich ? (Begründung!)
- Markiere die Position der Atomkerne. Was läßt sich daraus in Verbindung mit den Verteilungsfunktionen über die Qualität der Bindung der vier Na-Atome ableiten?
- Wie werden nach Deiner Einschätzung die beiden nächst höheren Verteilungen ungefähr aussehen? Fertige eine Skizze an! Erläutere und begründe sie!