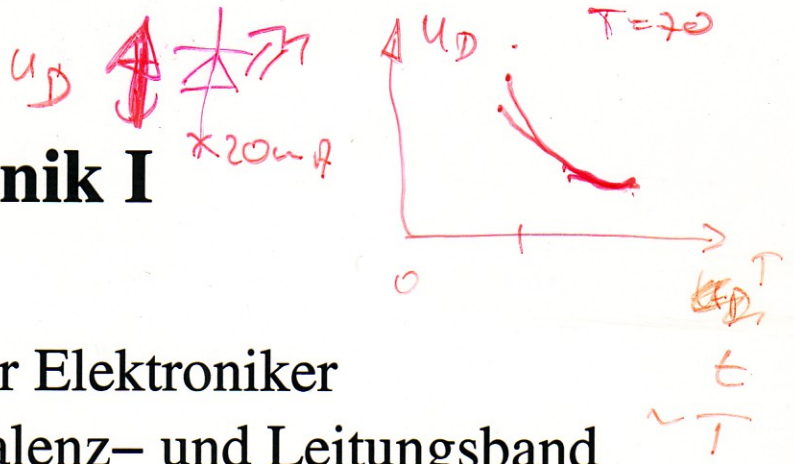


Elektronik I



Gliederung

1. Festkörperphysik für Elektroniker
2. Ladungsträger in Valenz- und Leitungsband
3. p-n Übergang, Diode
4. pnp, npn Übergänge, Bipolar-Transistor
5. MIS-Bauelemente, JFET, MOSFET
6. Kennlinien und Kleinsignalersatzschaltbilder

Literatur:

Ch. Kittel, Einführung in die Festkörperphysik

K. Kopitzki, Einführung in die Festkörperphysik

<http://www.uni-kiel.de/matwis/amat>

Möschwitzer/Lunze, Halbleiterelektronik

Skript/Übung:

Skript wird zur Zeit erstellt

online über eus-hp: www.eus.uni-saarland.de

Übungsaufgaben: aktuell in Vorlesung und hp

allgemein auch im Skript

Hinweise:

Ein Vorlesungstermin (letzte Woche) fehlt

Prüfung erfolgt mündlich (nur Verständnis)

Lehrstuhl Elektronik und Schaltungstechnik (EUS), Prof. Dr. M. Möller

Forschungs- und Vertiefungsgebiete

- Schwerpunkt:** Integrierte Hochgeschwindigkeitsschaltungen
- Anwendungen:** Glasfaser-Übertragungssysteme
Test- und Messtechnik
Mobiltelefonie
Vermittlungsnetze
Satellitenkommunikation
- Themengebiete:** Schaltungs- und Modellentwicklung
Simulationstechniken
Mess- und Aufbautechnik
- Weltrekord:** 100 Gbit/s Empfänger für ein 14 Terabit/s Übertragungssystem

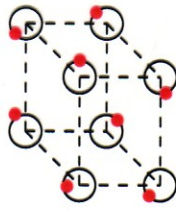
Grundlagenvorlesungen

Elektronik I

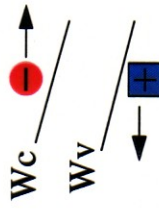
beginnt mit dem Wasserstoffatom,



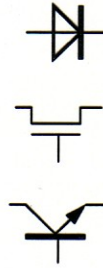
untersucht Atome in einem Halbleiter-Kristall Verbund



schaut sich die Ladungsträger in dem Halbleiter-Kristall an,

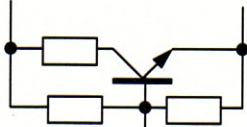


endet mit Modellen für Halbleiterbauelemente.

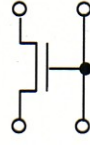


Elektronik II

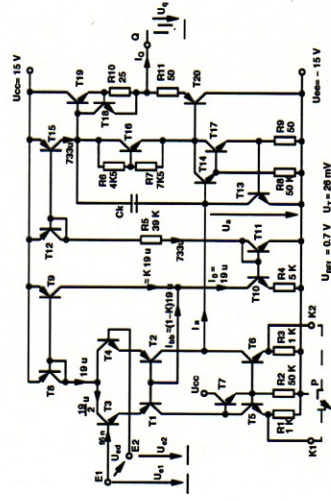
beginnt mit der Beschaltung von Halbleiterbauelementen,



zeigt Grundschaltungen mit Transistoren,



baut große Schaltungen aus Grundschaltungen zusammen,

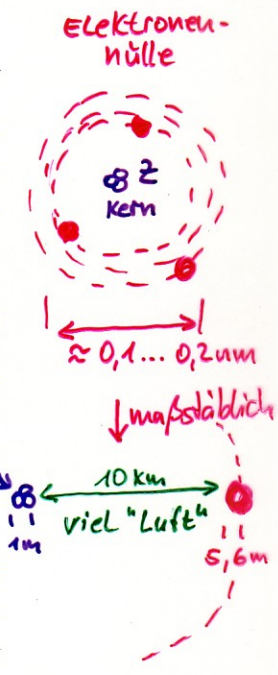


endet mit dem Verständnis für große Schaltungen und Zusammenhänge.

1 Festkörperphysik für Elektroniker

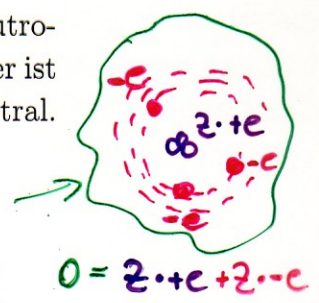
1.1 Grundlagen des Atomaufbaus

- Das Atom in der klassischen Teilchenvorstellung besteht aus einem Atomkern und einer um den Kern liegenden Elektronenhülle. Atome liegen in der Größenordnung von einem bis zwei Angström (\AA) = $0,1 \text{ nm} \dots 0,2 \text{ nm}$.
- Der Kern besteht aus einer Anzahl Z Protonen und in etwa genauso viel Neutronen. Die Anzahl Z heißt Ordnungszahl und ist charakteristisch für ein Element. Die verschiedenen Arten eines Elements mit unterschiedlicher Anzahl von Neutronen heißen Isotope. Der Kern besitzt nur ca. $\frac{1}{10.000}$ der Atomgröße und liegt in der Größenordnung 10^{-6} nm .
- Die Hülle eines nicht ionisierten, elektrisch neutralen Atoms besteht aus Elektronen, die den Kern auf bestimmten ausgezeichneten Bahnen (Orbitalen) umlaufen. Die Größe eines Elektrons liegt in der Größenordnung des Atomkerns $\approx 5,6 \cdot 10^{-6} \text{ nm}$. Daher wird die Größe eines Atoms in guter Näherung nur durch die Größe der Elektronenhülle bestimmt.
- Die Masse der Protonen und Neutronen im Atomkern ist sehr viel größer als die der Elektronen ($m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$). Daher bestimmt der Atomkern im wesentlichen die Masse des Atoms.
- Die Ladung jedes Protons im Kern beträgt $+e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$. Neutronen sind elektrisch neutral. Ein Elektron trägt die Ladung $-e$. Daher ist ein nicht ionisiertes Atom von außen gesehen (makroskopisch) neutral.



Atomgröße = Größe der Elektronenhülle

Elektron leicht Kern schwer



1.2 Atommodelle

1.2.1 Planetenmodell

Das klassische Rutherford'sche Atommodell, bei dem die Elektronen den Kern auf Kreis- oder Ellipsenbahnen umlaufen, wie die Planeten die Sonne, dient heute (nur) noch als Hilfe bei der Vorstellung des Atomaufbaus. Physikalisch ist dieses Modell nicht haltbar. Die Elektronen erfahren auf ihren Kreisbahnen eine Beschleunigung. Die Ladung der Elektronen, die diese Beschleunigung erfährt, müsste demnach eine elektromagnetische

Welle abstrahlen, deren Energie jedoch dem System verloren geht. Aufgrund der geringeren Energie müsste dann aber ein Elektron auf einer Kreisbahn mit niedrigem Radius fliegen, was letztendlich dazu führt, dass das Elektron in den Kern stürzt.

1.2.2 Bohrsches Modell

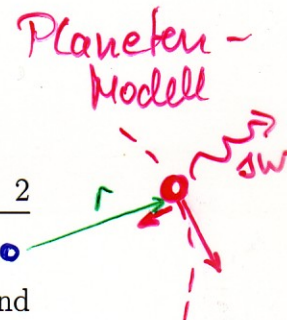
Abhilfe gegen diese planetarische Katastrophe liefert das von Niels Bohr 1913 postulierte Axiom, wonach es nur noch bestimmte stabile Bahnen der Elektronen um den Kern gibt, auf denen ein Elektron keine Energie verliert. Die Gesamtenergie eines solchen stabilen Zustandes ist konstant und besteht aus kinetischer und potentieller Energie. Der Unterschied zwischen den Energien der Bahnen ist aufgrund der einzelnen erlaubten Bahnen für die stabilen Zustände quantisiert. Die Energieaufnahme oder -abgabe erfolgt demnach in quantisierten Mengen, in sogenannten Quanten. Zum Wechsel von einem Energieniveau auf ein anderes muss Energie z. B. in Form von Licht (Photonen) aufgenommen oder abgegeben werden. Bohr postulierte stabile Bahnen auf Basis einer Quantelung des Drehimpulses $m \cdot v \cdot r$ eines Elektrons der Masse m , das sich mit der Geschwindigkeit v auf einer Kreisbahn mit dem Radius r um den Kern befindet. Danach darf der Drehimpuls nur ganzzahlige Vielfache von $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ($h = \text{Planksches Wirkungsquantum} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$) betragen:

$$m \cdot v \cdot r = n \cdot \hbar \quad (1.1)$$

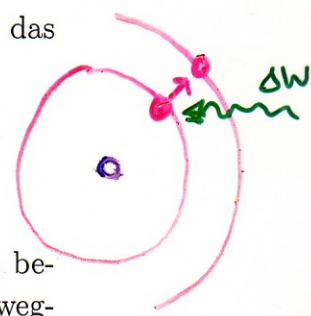
Mit dieser Quantelung des Drehimpulses lassen sich quantisierte Energiezustände berechnen, die bei Anwendung auf das Wasserstoffatom zu einer Übereinstimmung der Ergebnisse von Modell und Experiment für das Absorptions- und Emissionsspektrum (Balmer-Serie) führen. Bei Anwendung auf komplexere Atome mit mehr als einem Elektron liefert das Bohrsche Atommodell falsche Ergebnisse.

1.2.3 De Broglies-(Wellen-)Modell

Die Lösung, die zugleich unserer heutigen Modellvorstellung entspricht, beruht auf der 1924 von de Broglie eingeführten Welleneigenschaft von bewegten Teilchen.



Elektron wird auf Kreisbahn beschleunigt
 ↓
 beschleunigte Ladung
 ↓
 Abstrahlung
 ↓
 Energieverlust
 ↓
 planetarische Katastrophe
 ↓
 Abhilfe
 Bohr (1913)
 Postulat:
 es gibt nur bestimmte stabile Bahnen (Orbitale)
 Quantelung des Drehimpuls
 $m \cdot v \cdot r = n \cdot \hbar$



Bohr-Modell gut für H-Atom
 sonst falsche Ergebnisse

Wechsel zwischen den Bahnen nur durch quantisierte Zufuhr / Abgabe von Energie SW

Ein Photon (Lichtquant) mit der Frequenz f hat als bewegtes Teilchen den Impuls

$$p = \frac{h \cdot f}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad \text{mit } \lambda f = c \quad (1.2)$$

Die Wellenlänge des Photons ist demnach

$$\lambda: \text{welle} \rightarrow \boxed{\lambda = \frac{h}{p}} \leftarrow p: \text{Teilchen} \quad (1.3)$$

De Broglies Welleneigenschaft von bewegten Teilchen postuliert, dass diese Beziehung sowohl für Photonen als auch für alle anderen Teilchen gilt. D. h. jedes Teilchen kann auch als Welle mit einer Wellenlänge λ aufgefaßt werden. Der Impuls eines Teilchens der Masse m und Geschwindigkeit v ist $p = mv$. Die de Broglie-Wellenlänge dieses Teilchens beträgt dann

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{m \cdot v}} \quad (1.4) \quad p = m \cdot v$$

Die kinetische Energie eines Teilchens und der Ruhemasse m_0 beträgt

$$\boxed{W_{kin} = \frac{1}{2} m_0 v^2}$$

klassische Mechanik
(nicht relativistisch)

Die Geschwindigkeit des Teilchens v ist nicht identisch mit der Phasengeschwindigkeit $v_p = f \cdot \lambda$ der Welle ($y = A \cdot \cos 2\pi f(t - \frac{x}{v_p})$). Dies sieht man, wenn man die quantentheoretische Darstellung der Energie

$$\boxed{W = h \cdot f} \quad (1.5)$$

mit der relativistischen Gesamtenergie eines Teilchens

$$\boxed{W = m \cdot c^2 = m_0 c^2 + W_{kin}} \quad (1.6)$$

gleichgesetzt und nach der Frequenz umstellt

$$\boxed{f = \frac{mc^2}{h}} \quad (1.7)$$

Die Phasengeschwindigkeit der de Broglie-Welle ist daher mit Gl. (1.4)

$$\boxed{v_{ph} = f \cdot \lambda = \frac{mc^2}{h} \cdot \frac{h}{mv} = \frac{c^2}{v}} \quad (1.8)$$

$$\frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

Teilchen haben Welleneigenschaften

Wellen haben Energie und Impuls (p)

↑
Teilcheneigenschaft

$v \neq v_p$
↑
Teilchen ↑ Welle
(Phasengeschwindigkeit)

$v_{ph} > c$!
○

Da die Geschwindigkeit des Teilchens immer kleiner als die Lichtgeschwindigkeit ist, ist die Phasengeschwindigkeit der de Broglie Wellenlänge immer größer als die Lichtgeschwindigkeit. Dies klingt zunächst spektakulär, ist aber bei genauerer Betrachtung ein Resultat der gewählten mathematischen Beschreibung. Die physikalische, die Geschwindigkeit eines Teilchens im Raum beschreibende Größe der Gruppengeschwindigkeit, liegt immer unter der Lichtgeschwindigkeit und entspricht daher den Vorhersagen der Relativitätstheorie.

Je größer die Masse des Teilchens, umso kleiner ist die Wellenlänge seiner de Broglie-Welle. Zu beachten ist, dass m die relativistische Masse

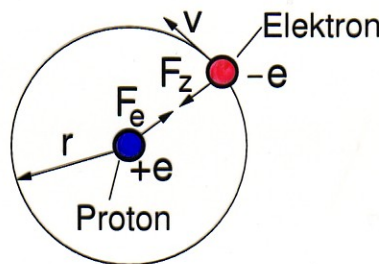
$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.9)$$

relativistische Masse

bezeichnet (m_0 ist die Ruhemasse).

1.2.4 Anwendung auf das Bohr-Modell des Wasserstoffatoms

Abb. 1.1 zeigt ein Bahnmodell des Wasserstoffatoms.



stabile Bahn:

Zentripetalkraft = Coulombkraft

F_Z



Abb. 1.1: Kräftegleichgewicht zwischen Zentripetalkraft F_Z und Anziehungskraft F_e aufgrund der Ladungen $\pm e$.

Auf einer stabilen Bahn gilt

$$F_Z = \frac{mv^2}{r} = F_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1.10)$$

Daraus bestimmt sich die Geschwindigkeit des Elektrons zu

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}} \quad (1.11)$$

Einsetzen in Gl. (1.4) ergibt die de Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m}} \quad (1.12)$$

v einsetzen

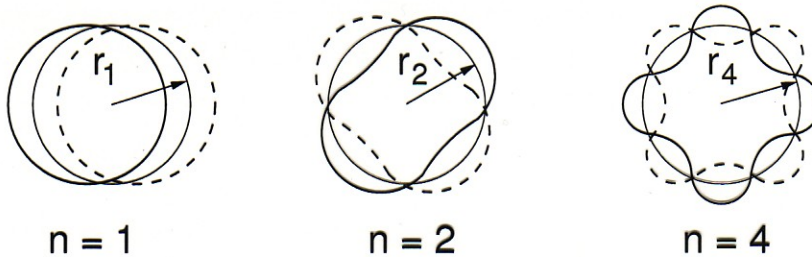
$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

De Broglies Postulat für einen stabilen Orbit des Elektrons beruht auf der Welleneigenschaft des Teilchens. Danach muss das Elektron auf sog. stabilen Kreisbahnen mit Radien r_n laufen, für deren Umfang gilt:

$$2\pi r_n = n\lambda \quad (1.13)$$

Stabiler Orbit = stehende Welle

Darin ist $n = 1, 2, 3, \dots$ die Hauptquantenzahl des Orbits. Die Einhaltung von Gl. (1.13) gewährleistet, dass die Wellenfunktion (Schwingung) des Elektrons für jeden Umlauf gleichphasig (konstruktiv) überlagern. Die ortsabhängige Amplitude der Wellenfunktion ist in diesem Fall zeitunabhängig und man spricht von einer stehenden Welle. In allen anderen Fällen kommt es zu einer Auslöschung der Wellenfunktion aufgrund der Überlagerung mit beliebigen Phasenlagen. Abb. 1.2 zeigt Beispiele für Wellenfunktionen auf stabilen Kreisbahnen mit $n = 1, 2$ und 3 .



*$2\pi r_n = n \cdot \lambda$
Achtung: nur Gedankenmodell*

Abb. 1.2: Gedankenmodell für die konstruktive Überlagerung der Wellenfunktion nach der Bedingung in Gl. (1.13). Beachten: Die Abbildungen für $n = 1, 2, 4$ sind in unterschiedlichen Maßstäben.

Mit den nach Gl. (1.13) erforderlichen Wellenlängen ergeben sich aus Gl. (1.12) die Radien des Bohrschen Atommodells¹

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.14)$$

*H-Atom
 $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-2} \text{ nm}$*

Der innerste Radius des Wasserstoffatoms (Bohrradius) lässt sich damit zu $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-2} \text{ nm}$ berechnen.

¹Die gleichen Radien könnten auch unter Verwendung des Bohrschen Postulats für den Bahndrehimpuls gewonnen werden.

Wichtig für
später

6
Energien
des Elektrons

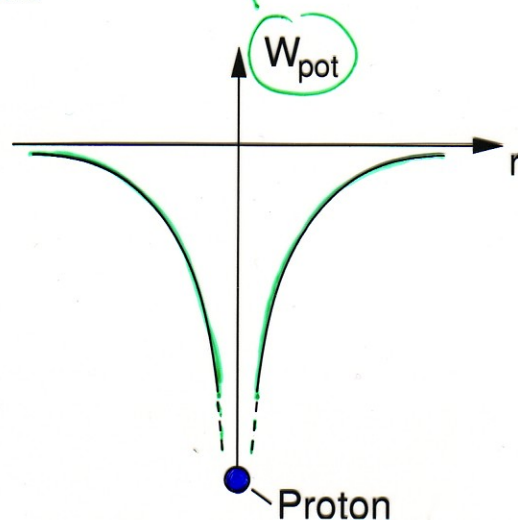
Die Energie W_n des Elektrons im Wasserstoffatom in Abhängigkeit des Bahnradius ergibt sich als Summe seiner kinetischen Energie

$$W_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 \quad (1.15) \quad \text{kinetisch}$$

und seiner potentiellen Energie im elektrostatischen Potential seines Atomkerns mit der Ladung eines Protons (vgl. Übung)

$$W_{pot} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.16) \quad \text{potentielle E. Berechnung in 2. Übung}$$

Abb. 1.3 zeigt den Verlauf der potentiellen Energie in Abhängigkeit vom Abstand r vom Kern.



Potentialtopf

Abb. 1.3: Potentielle Energie W_{pot} eines Elektrons auf einer Kugelfläche mit dem Abstand r vom Atomkern.

Die potentielle Energie bildet demnach einen Potentialtopf, in dem sich das Elektron befindet. Die Gesamtenergie des Elektrons ist

$$W = W_{kin} + W_{pot} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.17) \quad \text{Gesamtenergie}$$

Einsetzen der Geschwindigkeit aus Gl. (1.11) liefert allgemein

$$W = \frac{1}{2}m \left(\frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 mr}} \right)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (1.18)$$

Für Radien r_n nach Gl. (1.14), deren Umfang ein ganzzahliges Vielfaches der de Broglie-Wellenlänge entspricht, ergeben sich die quantisierten Energien

$$W_n = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{-me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{W_1}{n^2} \quad (1.19)$$

Energien des Elektrons im H-Atom

$n = 1, 2, 3, \dots$ wird als Quantenzahl bezeichnet. W_1 ist die Grundenergie im nicht angeregten Zustand. Abb. 1.4 zeigt die Energiezustände grafisch.

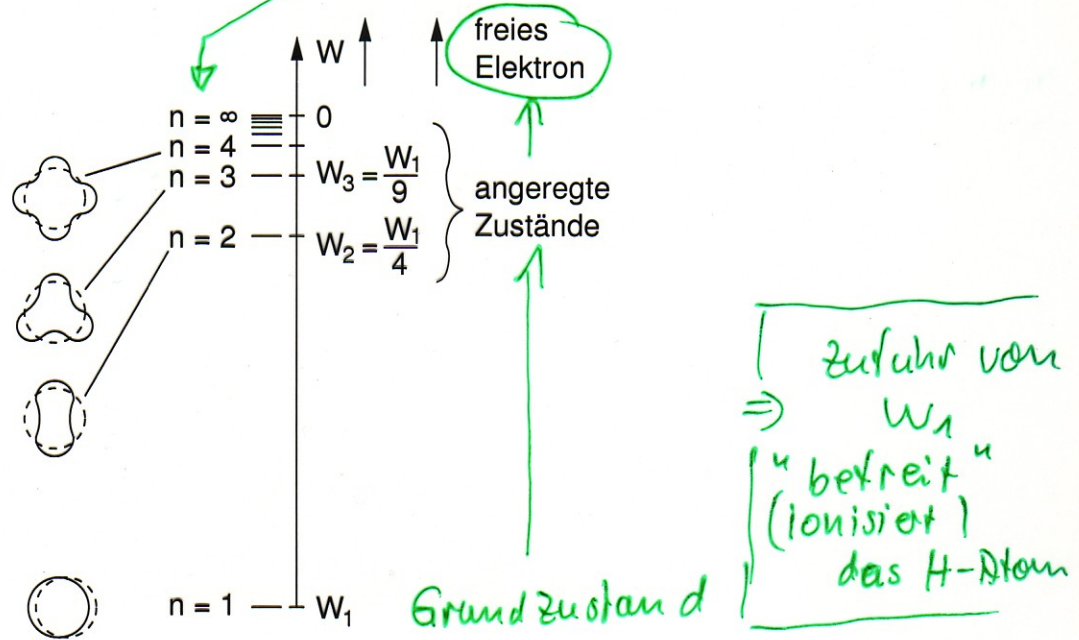


Abb. 1.4: Quantisierte Energien des Wasserstoff-Elektrons.

Für $n \rightarrow \infty$ gilt die Energie des Elektrons gegen Null und es ist nicht mehr an den Kern gebunden. Man spricht von einem freien Elektron. In diesem Fall ist das Wasserstoffatom ionisiert. Die Energie, die dem Wasserstoffatom zugeführt werden muss, um das Elektron aus dem Grundzustand in den freien Zustand zu bekommen, ist $-W_1$.

1.3 Wellenmodell des Atoms – Schrödingergleichung

Schwierigkeiten bei der Vorstellung der Materiewelle von de Broglie bereitet die Vorstellung, was (welcher Gegenstand / Objekt) genau die Wellenbewegung (oder Schwingung) ausführt. In der von begreifbaren Gegenständen

Wellenmodell des Atoms

⇒ Die Schrödinger-Gl.

geprägten menschlichen Vorstellung ist man geneigt, sich das Elektron als Teilchen auf einer gewellten Kreisbahn (vgl. Abb. 1.2) vorzustellen. Diese Vorstellung ist aber falsch. Vielmehr müssen wir in der Wellenvorstellung dem Elektron seinen Teilchencharakter nehmen und es in seiner Gesamtheit als Welle betrachten. (Stellen Sie sich z. B. Licht oder allgemein ein elektromagnetisches Feld Ihrer Handy-Antenne vor.) Wenn wir Elektronen in einem Orbit um den Kern betrachten, handelt es sich um stehende Wellen mit der de Broglie-Wellenlänge. Für freie Elektronen ergeben sich Wellen, die anderen Randbedingungen genügen.

Elektron ist kein Teilchen nur Welle

(vgl. Licht, E/M-Feld)

↓
Elektronen auf stabilem Orbit = stehende Welle mit der de Broglie Wellenlänge

Schrödinger formuliert 1926 eine (die!) bedeutende Wellengleichung, die allen Teilchen Welleneigenschaften zuschreibt und damit die moderne Quantenmechanik begründet. Er definiert hierzu eine komplexe Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$, die die Welleneigenschaft eines (oder mehrerer) Teilchen² beschreibt. $\psi(\vec{r})$ ist eine abstrakte mathematische Größe, beinhaltet jedoch alle physikalischen und damit anschaulichen und (be-)greifbaren Eigenschaften des beschriebenen Systems. Durch mathematische Operationen können diese aus ihr gewonnen werden.

Wellenfunkt. $\psi(\vec{r})$

komplex

Die Schrödingergleichung in ihrer allgemeinen zeitabhängigen Form ist eine der fundamentalsten Gleichungen der Physik. Sie enthält die Newtonschen Grundgleichungen und über die Dirac-Erweiterung auch die Maxwell'schen Gleichungen und die spezielle Relativitätstheorie. Sie kann nicht aus bisher bekannten physikalischen Prinzipien hergeleitet werden, sondern stellt selbst ein auf Experimente gestütztes physikalisches Axiom dar. Aufgrund ihrer Mächtigkeit sind Lösungen der Schrödingergleichung in der Regel sehr umfangreich.

Schrödingergl.:

- Newtonsche Gl.
- Maxwell'sche "
- spez. Rel.

↓
mächtig (kompliziert)

Wir begnügen uns im Rahmen dieser Vorlesung mit Lösungen zu sehr einfachen Modellen, die jedoch zum Verständnis von Ursachen und deren Wirkungen sowie von Methoden zu deren Beschreibung genügen. Wir betrachten stationäre Systeme, in denen sich also über der Zeit nichts ändert. In diesen Systemen existieren nur stehende Wellen und es gilt die vereinfachte

↓
vereinfachen !

²Hinsichtlich der Teilchengröße gibt es keine Einschränkung. Theoretisch könnten auch Murmeln oder Fußbälle als Welle beschrieben werden.

wir beobachten nur stationäre (zeitunabhängige) Vorgänge ⇒ stehende Wellen

Laplace Operator potentielle Energie
Gesamtenergie

zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + (W_{pot}(\vec{r}) - W) \psi(\vec{r}) = 0. \quad (1.20)$$

Teilchen-
masse

Darin ist m die Masse des betrachteten Teilchens, $W_{pot}(\vec{r})$ die potentielle Energie des betrachteten Systems am Ort \vec{r} und $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Die Gesamtenergie W des Systems (in der Regel kinetische plus potentielle Energie) ist wegen des Energieerhaltungssatzes eine feste Zahl und hängt nicht von einer Ortskoordinate ab. Der auf $\psi(\vec{r})$ angewendete Operator Δ ist der Laplace-Operator, der in kartesischen Koordinaten

$$\Delta \psi(\vec{r}) = \Delta \psi(x, y, z) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) \quad (1.21)$$

lautet. Für einfache eindimensionale Betrachtungen wird nur eine Abhängigkeit von $\psi(\vec{r})$ in eine Richtung angenommen. Für $\psi(\vec{r}) = \psi(x)$ vereinfacht sich Gl. (1.21) zu

$$\Delta \psi(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \quad (1.22)$$

und die eindimensionale Schrödingergleichung bekommt die Gestalt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (W_{pot}(x) - W) \psi(x) = 0. \quad (1.23)$$

Eine wichtige Eigenschaft der Schrödingergleichung ist ihre Linearität: wenn ψ_1 und ψ_2 Lösungen der Schrödingergleichung sind, dann ist auch $a\psi_1 + b\psi_2$ eine Lösung. Zu beachten ist dabei, dass a und b so gewählt sein müssen, dass die später diskutierte Normierungsbedingung nach Gl. (1.36) erfüllt sein muss.

1.4 Wellenfunktionen

Die Orts- und Zeitabhängigkeit einer in einer Dimension (hier in x -Richtung) fortschreitenden harmonischen Schwingung (z.B. einer Saite) lässt sich durch die Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = A \cos 2\pi f \left(t - \frac{x}{v_p} \right) \quad (1.24)$$

beschreiben. Darin ist A die Amplitude der Welle, f die Frequenz und v_p die Phasengeschwindigkeit. Wenn wir mit v_p die Geschwindigkeit der de Broglie-Welle mit der Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{mv}$ (vgl. Gl. (1.4)) bezeichnen, gilt

$$v_p = f \lambda, \quad (1.25)$$

eindimensional

eindimensional
 $\frac{\partial}{\partial y} = 0$ $\frac{\partial}{\partial z} = 0$

das bedeutet
NICHT
daß Objekte
mit 1-dim.
Ausdehnung
betrachtet
werden

1-dim.
Wellenfunktion

zeit: $2\pi f t$
Ort: $2\pi \frac{f}{v_p} x$
 $\frac{f}{v_p} = \frac{1}{\lambda}$

WELLENZAHL

$$\frac{2\pi}{\lambda} =: k$$

Räumliche Periodizität λ

d. h. die Welle hat eine Orts-Periode von $x = \lambda$.

Gl. (1.24) kann mit der Definition der Kreisfrequenz $\omega = 2\pi f$ geschrieben werden:

$$\lambda \cdot x = 2\pi \frac{x}{\lambda}$$

$$\psi(x, t) = A \cos(\omega t - kx) \quad (1.26)$$

Darin ist mit

$$k := \frac{\omega}{v_p} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.27)$$

k ist Wellenzahl

die Wellenzahl der in x -Richtung fortschreitenden Welle definiert worden.

In drei Dimensionen wird k zum Wellenvektor

$$\vec{k} = \vec{e}_x k = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z \quad (1.28)$$

und die Ortskoordinate x geht über in einen Raumvektor

3-dimensionale Erweiterung

$$\vec{r} = x \vec{e}_x + y \vec{e}_y + z \vec{e}_z \quad (1.29)$$

Aus der Wellengleichung (1.26) wird dann

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (1.30)$$

welle im 3-dim. Raum

Gl. (1.30) beschreibt eine in Richtung \vec{k} fortschreitende ebene Welle. D. h. auf Ebenen senkrecht zu \vec{k} ist die Amplitude für $t = \text{const.}$ konstant. Abb. 1.5 zeigt einen Ausschnitt dieser in Raum und Zeit fortschreitende Wellenfunktion.

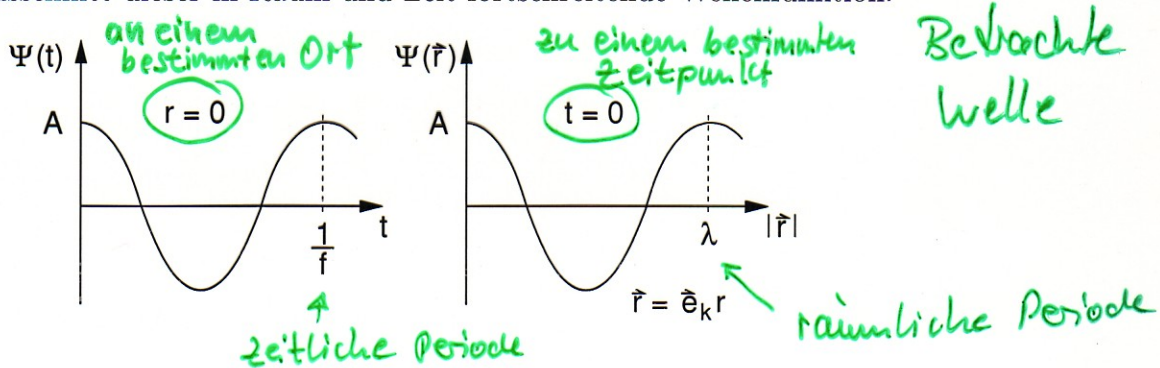


Abb. 1.5: Links: Wellenfunktion an einem festen Ort ($r = 0$) in Abhängigkeit von der Zeit. Rechts: Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt bei Bewegung in Richtung $\vec{r} = \vec{e}_k r$.

Übung: ebene Welle

In Gl. (1.30) wurde willkürlich eine cos-Schwingung verwendet. Um einen allgemeinen Ansatz der Wellenfunktion als Lösung der Schrödingergleichung zu erhalten, ist es sinnvoll, der cos-Schwingung noch eine sin-Schwingung zu

Räumliche Periodizität λ

d. h. die Welle hat eine Orts-Periode von $x = \lambda$.

Gl. (1.24) kann mit der Definition der Kreisfrequenz $\omega = 2\pi f$ geschrieben werden:

$$\psi(x, t) = A \cos(\omega t - kx) . \quad (1.26)$$

Darin ist mit

$$k := \frac{\omega}{v_p} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.27)$$

$$\lambda \cdot x = 2\pi \frac{x}{\lambda}$$

k ist Wellenzahl

die Wellenzahl der in x -Richtung fortschreitenden Welle definiert worden. In drei Dimensionen wird k zum Wellenvektor

$$\vec{k} = \vec{e}_k k = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z \quad (1.28)$$

und die Ortskoordinate x geht über in einen Raumvektor

$$\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z . \quad (1.29)$$

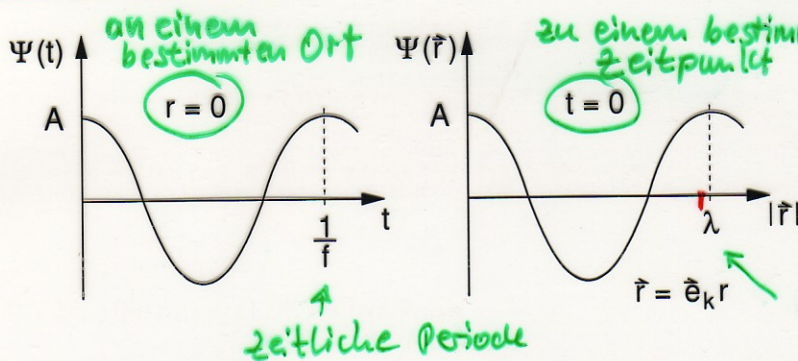
3-dimensionale Erweiterung

Aus der Wellengleichung (1.26) wird dann

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r}) . \quad (1.30)$$

Welle im 3-dim. Raum

Gl. (1.30) beschreibt eine in Richtung \vec{k} fortschreitende ebene Welle. D. h. auf Ebenen senkrecht zu \vec{k} ist die Amplitude für $t = \text{const.}$ konstant. Abb. 1.5 zeigt einen Ausschnitt dieser in Raum und Zeit fortschreitende Wellenfunktion.



Beobachte Welle

zeitliche Periode

räumliche Periode

Abb. 1.5: Links: Wellenfunktion an einem festen Ort ($r = 0$) in Abhängigkeit von der Zeit. Rechts: Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt bei Bewegung in Richtung $\vec{r} = \vec{e}_k r$.

Übung: ebene Welle

In Gl. (1.30) wurde willkürlich eine \cos -Schwingung verwendet. Um einen allgemeinen Ansatz der Wellenfunktion als Lösung der Schrödingergleichung zu erhalten, ist es sinnvoll, der \cos -Schwingung noch eine \sin -Schwingung zu

$$\begin{aligned} \cos(x) &= \cos(x + 2\pi) \\ &= \cos(x + 3\pi) \\ &= \cos(x + n\pi) \end{aligned}$$

überlagern. Man bedient sich bei der Überlagerung vorteilhaft der komplexen Zahlen und versieht (willkürlich) den sin-Term mit dem imaginären Vorfaktor j . Dadurch ergibt sich die Möglichkeit, beide Schwingungen elegant in der Euler-Schreibweise nach Gl. (1.32) zusammenzufassen:

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r}) + jA \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}), \quad (1.31)$$

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{j(\omega t - \vec{k}\vec{r})}. \quad (1.32)$$

verallgemeinert.
 => komplexe Wellenfkt.
 => sin + cos orthogonale Funktionen

Im zeitunabhängigen Fall $t = \text{const.} = 0$ geht Gl. (1.32) über in

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = Ae^{j\vec{k}\vec{r}}. \quad (1.33)$$

allgemeine Ebene Welle

Aus Linearkombinationen von Gl. (1.33) gehen wieder die zuvor verwandten sin- und cos-Schwingungen hervor.

Beispiel/Übung:
 Ermitteln Sie zur Übung die resultierende Funktion aus der Überlagerung von $\psi(\vec{k}, \vec{r}) + \psi(-\vec{k}, \vec{r})$ und $\psi(\vec{k}, \vec{r}) - \psi(-\vec{k}, \vec{r})$ entsprechend Gl. (1.33) unter Zuhilfenahme der Eulerschreibweise $a(\cos \varphi + j \sin \varphi) = ae^{j\varphi}$.

Wichtig: Für Elektrotechniker ist das Arbeiten mit Phasoren zur Vereinfachung von Berechnungen selbstverständlich geworden. Bei der Verwendung von Phasoren wie z.B.

$$\underline{U} = \underline{I}(R + j\omega C)$$

wird definitionsgemäß der Übergang zur reellen Zeitfunktion durch Realteilbildung vollzogen:

$$u(t) = \Re \{ |\underline{U}| e^{j\varphi_u} e^{j\omega t} \}$$

$$u(t) = \Re \left\{ |\underline{I}| |R + j\omega C| e^{j(\varphi_I + \arctan \frac{\omega C}{R})} e^{j\omega t} \right\}$$

Achtung:
 φ ist wirklich komplex
 (keine Hilfsfunktion wie bei der Elektrotechnik)

Diese Vorgehensweise ist für die komplexe Wellenfunktion nicht richtig! Sie ist tatsächlich eine komplexe Funktion. Die komplexe Schreibweise dient hier nicht zur Vereinfachung von Berechnungen.

1.5 Physikalische Interpretation der Wellenfunktion

Da die Wellenfunktion letztendlich Lösungen zu realen, von uns mess- und erfahrbaren Problemen enthält, ist eine physikalische Interpretation der Wellenfunktion notwendig. Wir erwarten von dieser Interpretation, dass sie für uns reellwertige und damit in Form von Messergebnissen (Experimenten) begreifbare Ergebnisse liefert.

Die Quantentheorie postuliert, dass das Betragsquadrat $|\psi(\vec{r})|^2$ der Wellenfunktion ein Maß für die Wahrscheinlichkeit ist, ein Teilchen an dem Ort \vec{r} anzutreffen. Die Wahrscheinlichkeit $f(\vec{r})$, dass das Teilchen in einem Volumenelement $dx dy dz$ an der Stelle $\vec{r} = (x, y, z)'$ angetroffen wird, ist

$$f(\vec{r}) = |\psi|^2 dx dy dz = |\psi|^2 dV. \quad (1.34)$$

Damit stellt das Betragsquadrat der Wellenfunktion

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = \frac{f(\vec{r})}{dV} \quad (1.35)$$

eine Wahrscheinlichkeitsdichte dar.

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo in einem beliebig großen Volumen zu finden, ist 100%. Daraus ergibt sich die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx dy dz = 1. \quad (1.36)$$

1.6 Die Schrödingergleichung und das Wasserstoffatom.

Das Wasserstoffatom ist das am einfachsten aufgebaute Atom. Hier bewegt sich nur ein Elektron im Potential des Atomkerns. Trotz seines einfachen Aufbaus ist die Lösung der Schrödingergleichung wegen der dreidimensionalen Struktur bereits aufwendig. Die einzige Größe, die zur Lösung bekannt sein muss, ist die potentielle Energie des Atomrumpfes, in der sich das Elektron bewegt. Wir haben sie bereits in Gl. (1.16) angegeben. Sie beträgt

$$W_{pot} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.16)$$

Strategie: Löse für H-Atom (einfach)
 → übertrage Lösung auf andere Atome

Quantentheorie
Wellenfunkt.

↓ Interpretation
physikalische
Ergebnisse
(Messungen)

Wahrscheinl.
daß Teilchen
in dV ist

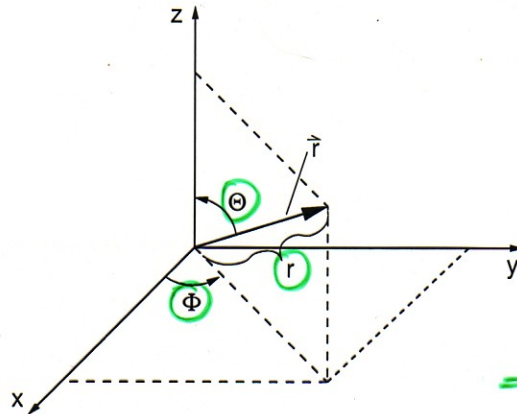
$|\psi|^2$ ist
Wahrscheinlichkeits-
dichte

irgendwo
muß das
Teilchen sein

Löse
Schröd. Gl.
für H-Atom

Brauche nur
Potentielle
Energie d.
Elektrons

Die Gesamtenergie des Atoms sowie die Wellenfunktionen ergeben sich als Lösung der Schrödingergleichung. Diese wird zur Lösung in Kugelkoordinaten nach Abb. 1.6 dargestellt, da aufgrund des kugelsymmetrischen Potentials ($W_{pot} = \text{const.}$ auf Kugelschalen um den Kern) ebenfalls Lösungen mit Kugelsymmetrie zu erwarten sind.



Kartesische Koord.
 x, y, z
 Kugelkoordinaten
 ϕ, θ, r

⇒ problem angepasst da
 Kugelsymm. Gebilde

Abb. 1.6: Zusammenhang zwischen Kugelkoordinaten (r, ϕ, θ) und kartesischen Koordinaten (x, y, z).

Die zu lösende Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten mit $\psi = \psi(r, \phi, \theta)$ lautet mit der potentiellen Energie nach Gl. (1.16)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + W \right) \psi = 0, \quad (1.37)$$

zu lösen

wobei der auf $\psi(\vec{r})$ angewendete Laplaceoperator in Kugelkoordinaten

$$\Delta\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \quad (1.38)$$

Schaut schwer aus

einzusetzen ist.

Die Lösung von Gl. (1.37) ist bekannt und erfolgt, ähnlich wie die Lösung der aus der Elektrostatik bekannten Laplacegleichung, über die Separation der Variablen mit Hilfe des Produktansatzes

$$\psi(r, \phi, \theta) = R(r) \varphi(\phi) \vartheta(\theta). \quad (1.39)$$

Lösung durch
 Separation der
 Variablen

Nach etwas Rechnung ergeben sich die drei entkoppelten Differentialgleichungen:

Schröd. Gl. zerfällt (noch etwas Rechnung) in 3 entkoppelte DGL:

Für $\varphi(\phi)$

$$\frac{d^2\varphi}{d\phi^2} + m_l^2 \varphi = 0. \quad (1.40)$$

Für $\vartheta(\theta)$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\vartheta}{d\theta} \right) + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \right) \vartheta = 0. \quad (1.41)$$

Für $R(r)$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + W \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0. \quad (1.42)$$

Die Lösungsfunktionen für die Differenzialgleichung in $\varphi(\phi)$ sind bekannt:

$\varphi(\phi)$ $\xrightarrow{\text{Lösungen}}$ $\varphi(\phi) = Ae^{jm_l\phi}. \quad (1.43)$

Aus der Bedingung der stehenden Welle geht hervor, dass $\varphi(\phi)$ nach jedem Umlauf $\phi + 2\pi$ den gleichen Wert haben muss. Es muss also gelten

$$Ae^{jm_l\phi} = Ae^{jm_l(\phi+2\pi)}. \quad (1.44)$$

Randbedingung: stehende Welle
 $\rightarrow 2\pi$ -Periode
 \downarrow
 m_l : magnet. Quantenzahl

Hieraus folgt, dass $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ sein muss. m_l wird magnetische Quantenzahl genannt.

Die Differenzialgleichung für $\vartheta(\theta)$ hat Lösungen, vorausgesetzt l ist eine ganze Zahl, die größer gleich $|m_l|$ ist (ohne Beweis). Daraus folgt $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$. Die Konstante l wird Nebenquantenzahl genannt. Häufig werden anstelle der Zahlen Buchstaben verwendet. Es gelten die Definitionen

$\vartheta(\theta)$ $\xrightarrow{m_l =}$ \rightarrow $0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$
 $\xrightarrow{\text{Lösungen}}$ allgem. Definition \rightarrow

- s für $l = 0$,
- p für $l = 1$,
- d für $l = 2$ und
- f für $l = 3$.

$\vartheta(\theta)$ hat Lösungen
 $\rightarrow l$ ist ganze Zahl
 $\Rightarrow l \geq |m_l|$
 $\Rightarrow m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$

Die Lösung von $R(r)$ für den radialen Anteil erfordert als Nebenbedingung, dass die Gesamtenergie positiv ist oder einen der negativen Werte W_n annimmt, die bereits anhand des Bohrschen Atommodells in Gl. (1.19) ermittelt wurden:

$R(r)$ $\xrightarrow{\text{Lösungen}}$ $W_n = \frac{-m e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.45)$

$\Rightarrow W_n$ muss Energien des Bohrschen Modells annehmen
 $\Rightarrow n \geq l + 1$

l : Neben-quantenzahl

Hierbei darf n nur gleich oder größer $l + 1$ sein. Die Konstante n wird als Hauptquantenzahl bezeichnet. Für die Quantenzahlen ergeben sich daher die bekannten Bedingungen:

n ist Hauptquantenzahl

Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$,
 Nebenquantenzahl $l = 0(s), 1(p), 2(d), \dots, (n - 1)$,
 Magnetische Quantenzahl $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$.

Bedingungen für Lösungen

In Analogie zur gebräuchlichen Schreibweise ist der Index l bei m_l weggelassen worden, da es hier nicht zur Konfusion mit der Elektronenmasse kommen kann.

Hinzu kommt noch die vierte bekannte Quantenzahl, die

Lösung erlaubt zusätzlichen Freiheitsgrad

Spinquantenzahl $s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$,

die unabhängig von allen anderen Quantenzahlen ist. Sie kann zwei verschiedene Werte $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ (spin-up, spin-down) annehmen. Sie ergibt sich nicht aus der Lösung der Schrödingergleichung, sondern muss über die erweiterte Form der Diracgleichung ermittelt werden.

Zu jedem Satz von Quantenzahlen ergeben sich Lösungen

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{n,l,m,s}(\vec{r}) \tag{1.46}$$

mit einer zugehörigen Energie

$$W = W_{n,l,m,s} \tag{1.47}$$

Beispiel: Für $n = 1, l = 0, m = 0$ ergeben sich (ohne Beweis) die Lösungen
 $\varphi(\phi) = 2\pi^{-\frac{1}{2}}, = \text{const.}$
 $\vartheta(\theta) = 2^{-\frac{1}{2}}, = \text{const.}$
 $R(r) = 2 a_0^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$ mit r_1 als kleinstem Radius des Bohrschen Atommodells nach Gl. (1.14).
 Einsetzen in Gl. (1.42) (zur Übung) liefert W_1 nach Gl. (1.45).

→ nur Radius-Abhängigkeit
 ↓
 Einsetzen in DGL für $R(r)$ liefert W_1

Die Energie zu einem bestimmten Satz Quantenzahlen kann, muss sich aber nicht von der Energie eines anderen Satzes Quantenzahlen unterscheiden. Sie wird nach Gl. (1.45) nur durch die Hauptquantenzahl n bestimmt. Sind

TABLE 6.1 Normalized Wave Functions of the Hydrogen Atom for $n = 1, 2,$ and 3^*

n	l	m_l	$\Phi(\phi)$	$\Theta(\theta)$	$R(r)$	$\psi(r, \theta, \phi) = \Phi(\phi) \cdot \Theta(\theta) \cdot R(r)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2} a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi} a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$
2	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{81\sqrt{3} a_0^{3/2}} \left(27 - 18 \frac{r}{a_0} + 2 \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi} a_0^{3/2}} \left(27 - 18 \frac{r}{a_0} + 2 \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \cos \theta$
3	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-r/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{10}}{4} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\frac{4}{81\sqrt{30} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	± 1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2} \sin \theta \cos \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	± 2	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm 2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2 \theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$





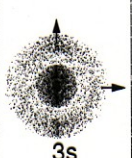

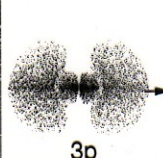



*The quantity $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/mc^2 = 5.292 \times 10^{-11}$ m is equal to the radius of the innermost Bohr orbit.

To exhibit the dependence of R , Θ , and Ψ upon the quantum numbers n, l, m , we may write for the electron wave functions of the hydrogen atom

die Gesamtenergien für verschiedene Sätze von Quantenzahlen gleich, so spricht man von einer Entartung. Für das Wasserstoffatom (und nur da) sind alle Zustände mit m, l und s für die gleiche Hauptquantenzahl n entartet.

Entartung: gleiche Energie für verschiedene Sätze der Quantenzahlen

Werden für die verschiedenen Quantenzahlen aus den Lösungen der Wellenfunktion $\psi_{n,l,m,s}(\vec{r})$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons nach Gl. (1.34) bestimmt, so ergeben sich die bekannten Orbitalformen, von denen einige Beispiele in Abb. 1.7 gezeigt sind. Insbesondere zeigen sich die kugelsymmetrischen s -Orbitale und die hantelförmigen p -Orbitale. Sie geben an, wie hoch die Wahrscheinlichkeit ist, das Elektron in einem bestimmten Raumsegment zu finden.

$\Theta=0$	$l=0$	$l=1$		$l=2$		
$\Phi=0$	$m=0$	$m=0$	$m=+1$ $m=-1$	$m=0$	$m=+1$ $m=-1$	$m=+2$ $m=-2$
$n=1$	 1s					
$n=2$	 2s	 2p	 2p			
$n=3$	 3s	 3p	 3p	 3d	 3d	 3d

*3-dim. Orbitale
z. Teil rota. Symm.*

Kugel- Hantel-Form

Abb. 1.7: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Elektrons im Wasserstoffatom bei Betrachtung im Winkel $\Theta = 0, \Phi = 0$. Bei rotationssymmetrischen Orbitalen kennzeichnet der Pfeil die Rotationsachse. Die beiden nicht rotationssymmetrischen $3d$ -Orbitale besitzen die gleiche Form, jedoch eine unterschiedliche Anordnung im Raum.

Orbital	n	l	m	s	Zustände für jedes l	Zustände für jedes n
1s	1	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	2
2s	2	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	8
2p		1	-1, 0, 1	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6	
3s	3	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	18
3p		1	-1, 0, 1	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6	
3d		2	-2, -1, 0, 1, 2	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	10	
4s	4	0	0	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	32
4p		1	-1, 0, 1	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6	
4d		2	-2, -1, 0, 1, 2	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	10	
4f		3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	14	

Ermittlung
 der
 möglichen
 Quanten-
 Zustände
 des Elektrons

Tabelle 1.1: Mögliche Quantenzustände des Elektrons des Wasserstoffatoms bis $n = 4$.

1.7 Quantenzustände des Elektrons

Für die später benötigte Herleitung der Bändertheorie ist die Kenntnis der möglichen Quantenzustände und deren Besetzung wichtig. Jeder Quantenzustand ergibt sich als Lösung $\psi_{n,l,m,s}$ über die Wahl der Quantenzahlen, wobei die im letzten Kapitel dargestellten Abhängigkeiten und Einschränkungen von n, l, m und s zu beachten sind. Tabelle 1.1 zeigt die möglichen Zustände des Elektrons für die ersten vier Hauptquantenzahlen. Die Gesamtzahl der möglichen Quantenzustände bis zum 4f-Orbital ist demnach $2+8+18+32 = 60$.

Kenntnis der
 Quantenzust.
 wichtig für
 Bändertheorie
 (entscheidet
 ob Elektr.
 in VB
 oder LB)

1.8 Lösung der Schrödingergleichung für allgemeinen Atomaufbau

Um die Schrödingergleichung für einen allgemeinen Atomaufbau mit einer bestimmten Anzahl Z Elektronen und Protonen zu lösen, ist formal die gleiche Vorgehensweise wie für das Wasserstoffatom gezeigt, möglich.

Die potentielle Energie der Elektronen ergibt sich aus der potentiellen Energie der Elektronen im Feld des Atomkerns sowie der Abstoßung der Z Elektronen untereinander. Die Wellenfunktion $\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z)$ hängt damit von den Ortsvektoren $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z$ ab, wobei jeder Ortsvektor durch

drei Variablen (x, y, z bzw. r, ϕ, θ) beschrieben wird. (vgl. Abb. 1.8).

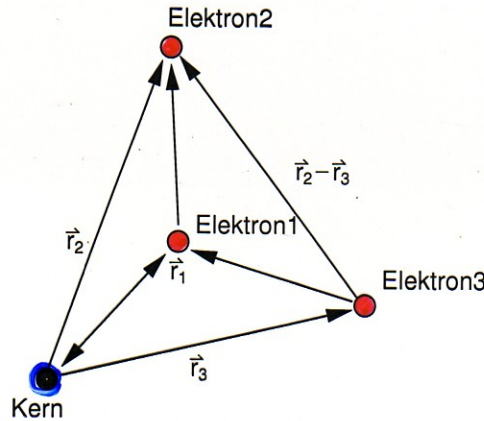


Abb. 1.8: Darstellung eines allgemeinen Atomaufbaus mit Ortsvektoren \vec{r}_n , zu den einzelnen Elektronen.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ gibt dann an, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, das Elektron 1 am Ort \vec{r}_1 und gleichzeitig die Elektronen 2, 3, ..., z am Ort $\vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_z$ zu finden.

Eine analytische Lösung der Schrödingergleichung selbst für das einfache Heliumatom mit $Z = 2$ ist nicht mehr möglich. Es bietet sich jedoch die Möglichkeit, numerische Verfahren und/oder Näherungsmethoden zur Lösung einzusetzen.

Eine sehr einfache und für den hier angestrebten Verständnis-Anspruch ausreichende Näherung beruht auf der Übertragung der Lösungen des Wasserstoffatoms auf alle Atome. Hierbei wird jeweils nur ein Elektron des Atoms betrachtet. Die restlichen $Z - 1$ Elektronen befinden sich entsprechend ihrer Wahrscheinlichkeit verteilt in ihren Orbitalen um den Atomkern. Die einfache Näherung besteht darin, anzunehmen, daß das betrachtete Elektron als effektive Ladung, die sein Potentialfeld erzeugt, eine positive, verschmierte (verteilte) Ladung e sieht, da die $Z - 1$ negativen verteilten Ladungen der restlichen Elektronen vom Kern kompensiert werden.

Das Elektron dieses allgemeinen Atoms befindet sich daher, ähnlich wie das Elektron im Wasserstoffatom, im Potential einer positiven Elementarladung. Jedoch ist diese Elementarladung nicht mehr punktförmig im Atomkern lokalisiert, sondern verteilt (verschmiert).

Mit dieser Näherung erhalten wir für das eine Elektron Lösungen der Schrödingergleichung, die analog zu den Lösungen des Wasserstoffatoms

allgemeiner Atomaufbau

$$\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_z)$$

$|\psi|^2$: Wahrscheinlichkeit
Elektron 1 bei \vec{r}_1
+ " 2 bei \vec{r}_2
+ : z bei \vec{r}_z
zu finden

Lösen der Schröd. Gl.

sehr kompliziert
(geht nicht mehr analytisch)

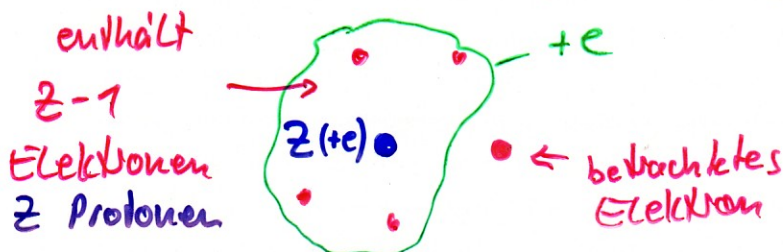
↓
Einfache Näherung:

Übertrage Ergebnis des H-Atoms

↓
Betrachte jeweils nur ein Elektron

restliche EL und Kern bilden

verschmierte Ladung $+e$



gewonnen werden. Aufgrund der Ähnlichkeit der betrachteten Struktur lassen sich die folgenden Aussagen machen:

Aussagen
wegen
Ähnlichkeit

- Es ergeben sich aufgrund der Näherung Abweichungen in der Orbitalform, jedoch bleibt die Kugelsymmetrie der s -Orbitale und die Hantelform der p -Orbitale erhalten.
- Jede Lösung der Schrödingergleichung $\psi_{n,l,m,s}$ wird wieder durch die vier Quantenzahlen n, l, m, s bestimmt.
- Die Lösungen $\psi_{n,l,m,s}$ werden ähnlich denen des Wasserstoffatoms sein.
- Zu jedem Satz von Quantenzahlen gehören wieder Energien $W_{n,l,m,s}$. Deren Werte unterscheiden sich jedoch von denen im Wasserstoffatom.
- Die Entartung der Energie bezüglich l, m, s wie beim Wasserstoffatom muss nicht mehr vorliegen. D.h. bei der selben Quantenzahl n können durch l, m, s bestimmte verschiedene Energien vorliegen.

ähnliche Orbitale

Quantenzahlen

ähnliche $\psi_{n,l,m,s}$

Energien
 $W_{n,l,m,s}$

aber mit
anderen Werten
und nicht

entartet

Basierend auf diesen einfachen Aussagen lässt sich der Aufbau der Elektronenhülle von beliebigen Atomen verstehen. Es existieren entsprechend den Quantenzuständen Orbitale, die mögliche Zustände für ein Elektron darstellen. Bei einem Atom mit Z Elektronen werden Z dieser Zustände besetzt.

1.9 Pauli-Prinzip

Die Besetzung der möglichen Zustände regelt das Paulische Ausschließungsprinzip. Es besagt:

Fermionen dürfen nie Zustände einnehmen, die in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

Pauli
Prinzip

Fermionen sind Teilchen mit einem halbzahligen Spin. Daher sind auch Elektronen Fermionen und folgen dem Paulische Ausschließungsprinzip. Damit ist jedem Satz Quantenzahlen genau ein Elektron in einem Zustand zugeordnet. Das Pauli-Prinzip gilt insbesondere in allen Atomverbänden (z.B. Molekül, Kristall) in denen sich die Wellenfunktionen der Lösungen der Schrödingergleichung der einzelnen Atome zu einer Gesamtlösung überlagern.

Elektron
ist
Fermion

Pauli Prinzip gilt auch für
Atomverbund
(ψ überlappen)