

Bildungsplanüberarbeitung: Linienspektren und Atomphysik

Daniela Bednarski und Sven Lübeck

Inhalt

- Vorgaben des Bildungsplans
- Linienspektren
- Unendlicher Potentialtopf
- Wasserstoffähnliche Atome
- Ausblick auf Mehrelektronensysteme etc.
- Röntgenspektren

Vorgaben des Bildungsplans (LF)

Die Schülerinnen und Schüler verbinden die Beobachtung von Linienspektren mit der Struktur der Atomhülle. Sie verwenden den Photonenbegriff zur Erklärung von Emissions- und Absorptionsspektren von Atomen.

Die Schülerinnen und Schüler können...

- (10) Linienspektren von *Atomen* als Übergänge zwischen diskreten Energieniveaus beschreiben und in einem Energieniveauschema veranschaulichen (*Absorption, Emission, Bohr'sche Frequenzbedingung*
 $f = \frac{\Delta E}{h}$, Energiewerte des Wasserstoffatoms $E_n = -R_\infty \cdot c \cdot h \cdot \frac{1}{n^2}$,
Energiewerte wasserstoffähnlicher *Atome*)
- (11) können die Entstehung des Röntgenspektrums erklären (*charakteristische Röntgenstrahlung, Bremsstrahlung, kurzwellige Grenze des Röntgenspektrums*)

Vorgaben des Bildungsplans (LF)

- (12) können die Energiewerte eines *Elektrons* im eindimensionalen *Potentialtopf* mit unendlich hohen Wänden berechnen sowie die Grenzen dieses Modells zur Beschreibung von Energieniveaus in *Atomen* beziehungsweise Molekülen erläutern
- (13) können unterschiedliche atomare Modellvorstellungen (Rutherford'sches Atommodell, Orbitale des Wasserstoffatoms) und Mehrelektronensysteme (Pauli-Prinzip) im Überblick beschreiben

Formelsammlung:

$$f = c \cdot R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad E_n = - \frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad E_{K\alpha} = 13,6 \text{ eV} \cdot \frac{3}{4} \cdot (Z - 1)^2 \quad E_n = \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot L^2} \cdot n^2$$

Vorgaben des Bildungsplans (BF)

Die Schülerinnen und Schüler verbinden die Beobachtung von Linienspektren mit der Struktur der Atomhülle. Sie verwenden den Photonenbegriff zur Erklärung von Emissions- und Absorptionsspektren von Atomen.

Die Schülerinnen und Schüler können . . .

- (9) Linienspektren von *Atomen* als Übergänge zwischen diskreten Energieniveaus beschreiben und in einem Energieniveauschema veranschaulichen (Absorption, Emission, Bohr'sche Frequenzbedingung $f = \frac{\Delta E}{h}$, Energiewerte des Wasserstoffatoms)
- (10) können unterschiedliche atomare Modellvorstellungen (Rutherford'sches Atommodell, Orbitale des Wasserstoffatoms) beschreiben

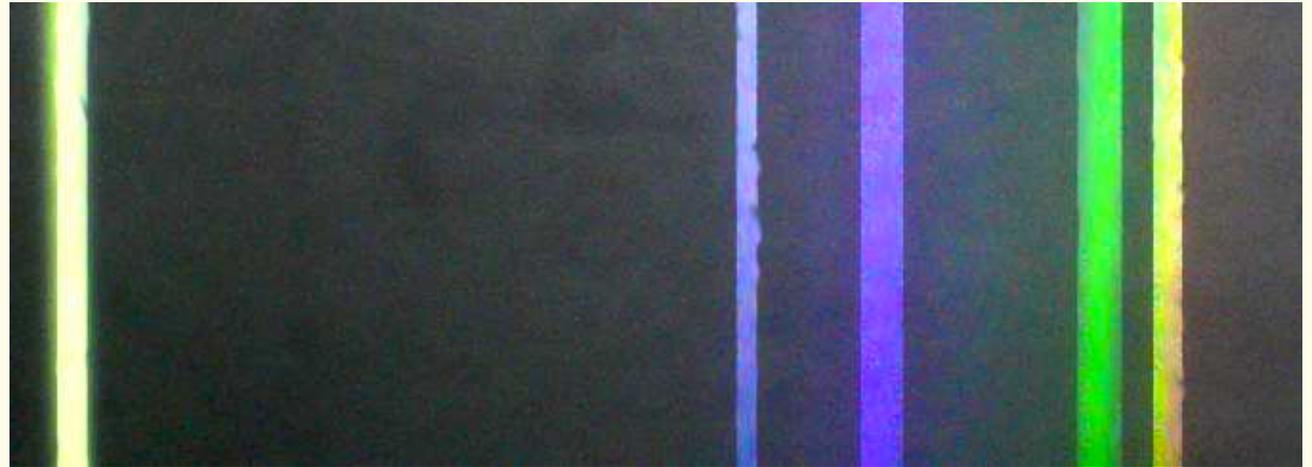
Formelsammlung:

$$f = c \cdot R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$$E_n = - \frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

Emissionsspektren von Metalldampfampfen (LF/BF)

- Experiment Quecksilber-Höchstdrucklampe

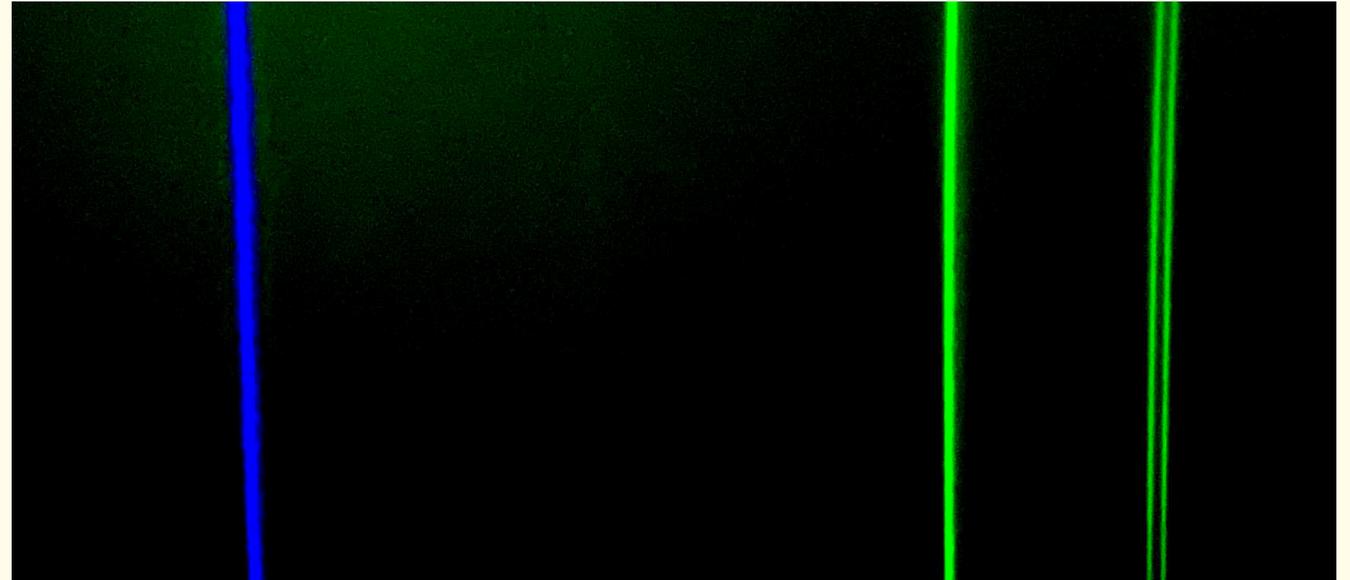
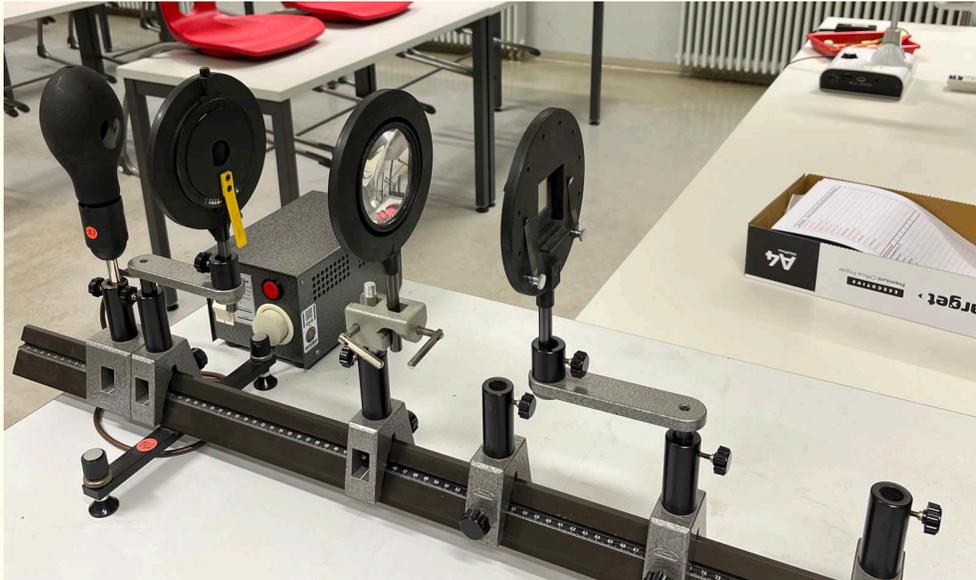


Gitter (600Linien/mm) oder
Geradsichtprisma sind geeignet.
Hier: 150 mm Linse und Spalt

Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Emissionsspektren von Metalldampf lampen (LF/BF)

- Quecksilber-Hochdrucklampe (Auflösung der Doppellinie)

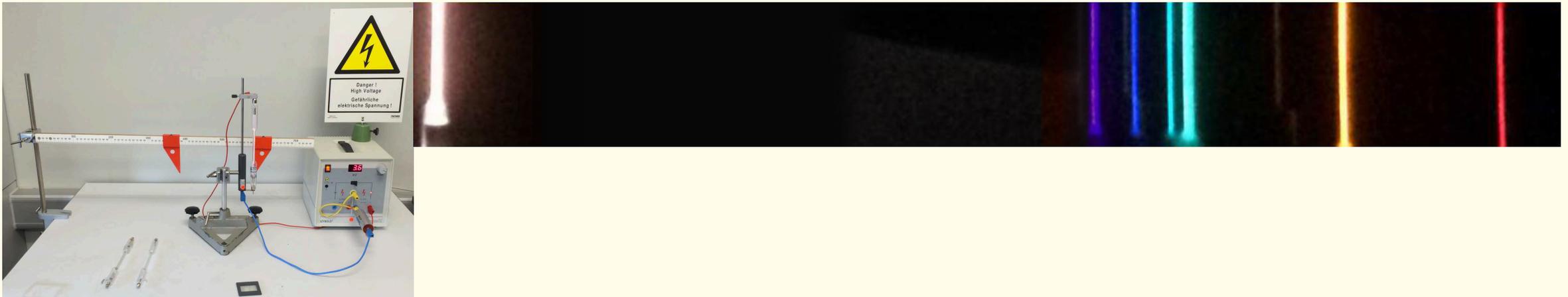


Gitter (600 Linien/mm) oder Geradsichtprisma sind geeignet.
Mit einer Hochdrucklampe kann die Doppellinie aufgelöst werden.

Emissionsspektren von Gasentladungslampen (LF/BF)

Falls möglich, zuerst Edelgas-Entladungslampen untersuchen (reines Linienspektrum). Bei Wasserstoffgas ist das Linienspektrum von kontinuierlichen Bandenspektren überlagert.

- Helium-Gasentladungslampe (subjektive Betrachtung)
- Verwendung eines „hochspannungsfesten“ Messwiderstands mit $100\text{ k}\Omega$



Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](#)

Experimente zu Absorptionsspektren (LF/BF)

Flammprobe von NaCl und LiCl mit Natriumdampf Lampe

Das Emissionsspektrum und Absorptionsspektrum eines Gases sind gleich:



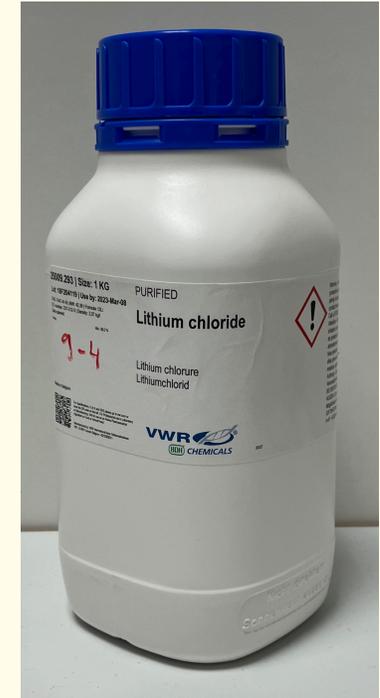
Na-Dampf Lampe mit Brenner-Flamme



Na-Dampf Lampe mit NaCl in Brenner-Flamme



Na-Dampf Lampe mit LiCl in Brenner-Flamme



Achtung:
GBU für LiCl
notwendig!

Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Erlasstagung Physik 2023 Dr. Sven Lübeck / Daniela Bednarski [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

5001_linienpektren_und_atomphysik



GBU für Flammprobe von LiF mit Na-Dampfampe

Beim Erstellen einer GBU zum Experiment „Flammprobe von LiF mit der Natrium-Dampfampe“ sollten folgende Punkte berücksichtigt werden:

- H: 302-315-319
- P: 302+352-305+351+338

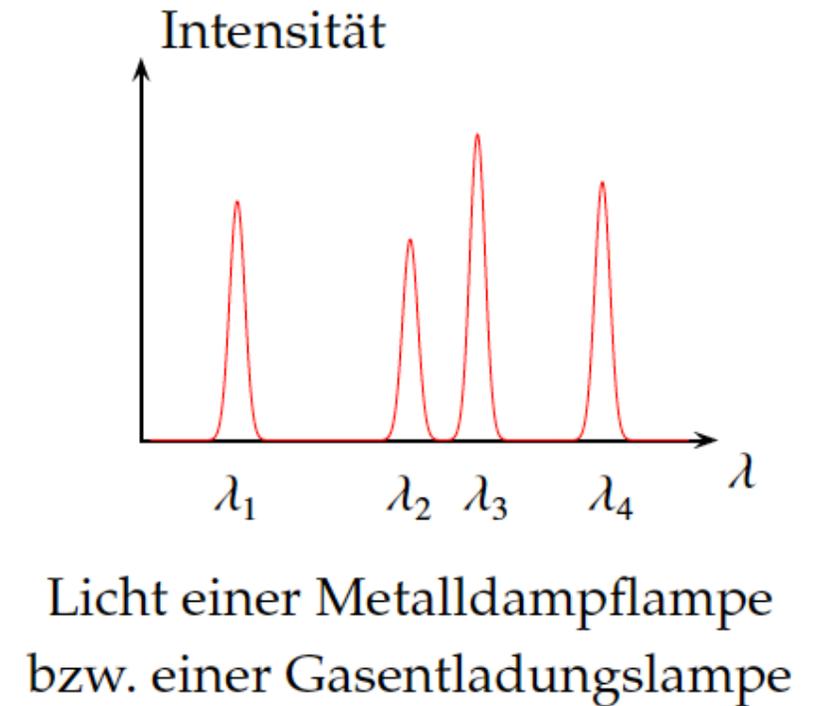
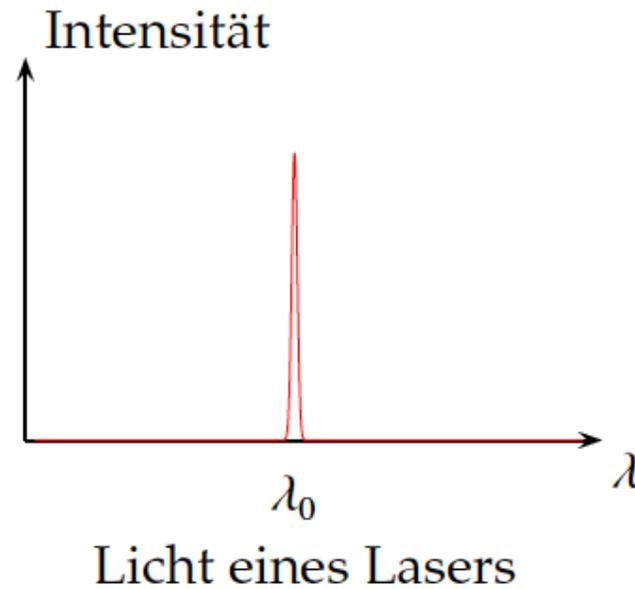
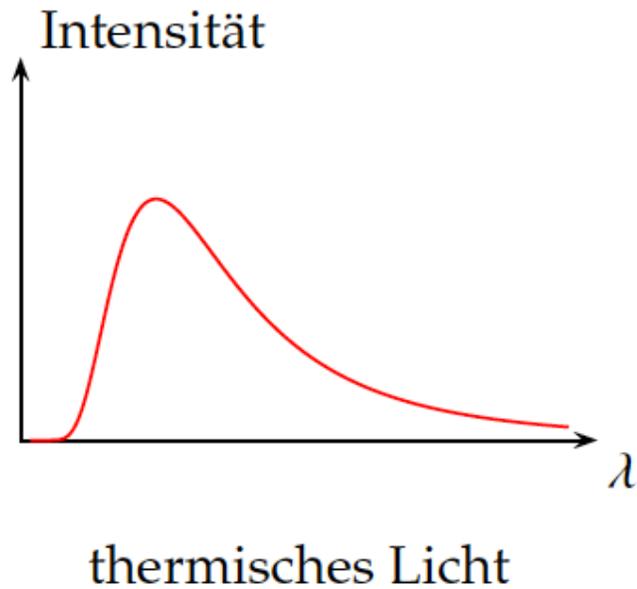
- Augenschutz sowie beim Umfüllen Handschutz verwenden.
- Haut- und Augenkontakt vermeiden, nicht verschlucken.
- Bei Hautkontakt ausgiebig mit Wasser waschen. Bei Augenkontakt sorgfältig mit Wasser spülen, falls vorhanden Kontaktlinsen entfernen.
- Bei Verschlucken den Mund ausspülen und Erbrechen einleiten.

- Entsorgung der Kleinmengen: Sammelbehälter für anorganische feste Stoffe in der Chemiesammlung.

- Mit befeuchtetem Magnesiastab Lithiumchlorid aufnehmen und in die Flamme des Kartuschenbrenners halten.

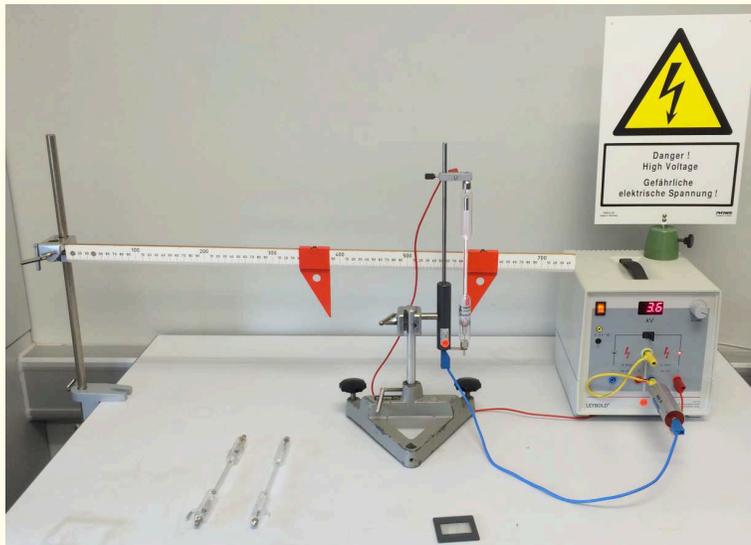
Spektren unterschiedlicher Lichtquellen (LF/BF)

Zusammenfassend bzw. vergleichend betrachtet man die Spektren unterschiedlicher Lichtquellen:



Linienpektrum des Wasserstoffatoms (LF/BF)

Gasentladungslampen mit Wasserstoff (H_2 -Moleküle, überlagertes Linienpektrum aufgrund der Moleküle), Gitter mit 600 Linien/mm



	Experiment	Ångström (1868)
H_α	656 nm	656,208 nm
H_β	486 nm	486,08 nm
H_γ	434 nm	434,01 nm
H_δ	410 nm	410,12 nm



Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](#)

Balmer-Artikel (LF)

*V. Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs;
von J. J. Balmer.*

(Aus den Verhandl. d. Naturforsch. Ges. zu Basel, Bd. 7, p. 548, mitgetheilt vom Hrn. Verfasser.)

Ausgehend von den Messungen von H. W. Vogel und Huggins über die ultravioletten Linien des Wasserstoff spectrums habe ich versucht, eine Gleichung aufzusuchen, welche die Wellenlängen der verschiedenen Linien in befriedigender Weise ausdrückt, ich wurde dazu durch die Aufmunterung von Hrn. Prof. E. Hagenbach ermuthigt. Die sehr genauen Messungen Angström's der vier Wasserstofflinien ermöglichten es, für deren Wellenlängen einen gemeinschaftlichen Factor aufzusuchen, der zu den Wellenlängen in möglichst einfachen Zahlenverhältnissen stand. So gelangte ich denn allmählich zu einer Formel, welche wenigstens für diese vier Linien als Ausdruck eines Gesetzes gelten kann, durch welches deren Wellenlängen mit einer überraschenden Genauigkeit dargestellt werden. Der gemeinschaftliche Factor für diese Formel ist, wie er sich aus den Angström'schen Bestimmungen ableitet:

$$\left(h = 3645,6 \frac{\text{mm}}{10^7} \right).$$

Man könnte diese Zahl die Grundzahl des Wasserstoffs nennen; und wenn es gelingen sollte, auch für andere

1) Hittorf, Pogg. Ann. 136. p. 215. 1869. Die von Hittorf beobachteten Spiralen des negativen Glimmlichtes unter Einwirkung eines Magnetpols scheinen mit unseren kürzesten Linien auf Rotationskegeln gut übereinzustimmen.

Bildquelle:
J. J. Balmer,
„Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs“,
Ann. d. Phys. und Chem. 25, Seite 80 (1885)

Linienpektrum des Wasserstoffatoms (LF)

Aus Analyse des Artikels von Balmer folgt:

Balmer (1885) erkennt: „Die Wellenlängen der vier ersten Wasserstofflinien ergeben sich nun dadurch, dass die Grundzahl $A = 364,56$ nm der Reihe nach mit den Coeffizienten $\frac{9}{5}$, $\frac{4}{3}$, $\frac{25}{21}$ und $\frac{9}{8}$ multiplicirt wird.“

$$656 \text{ nm} \approx A \cdot \frac{9}{5} \quad 486 \text{ nm} \approx A \cdot \frac{4}{3} = A \cdot \frac{16}{12} \quad 434 \text{ nm} \approx A \cdot \frac{25}{21} \quad 410 \text{ nm} \approx A \cdot \frac{9}{8} = A \cdot \frac{36}{32}$$

Damit ergibt sich nach Balmer

$$\lambda = A \cdot \frac{m^2}{m^2 - 4} \quad \text{mit } m \in \{3, 4, 5, 6\}$$

Bemerkung zur Genauigkeit: Der aktuelle Wert $A = 364,51$ nm spiegelt die „...grosse Gewissenhaftigkeit und Sorgfalt“ wider, „mit welcher Ångström bei seinen Operationen zu Werke gegangen sein muss“.

Typische **Schülerfrage**: Wie kam Balmer darauf?

Mögliche Vertiefung (LF)

Weder aus der Veröffentlichung noch aus dem Nachlass von Balmer kann auf die Herleitung geschlossen werden. Vermutlich betrachtete Balmer die Quotienten und ahnte die Bedeutung der Quadratzahlen:

$$\frac{656}{486} \approx 1,350 = \frac{27}{20}$$

$$= \frac{1}{5} \cdot \frac{27}{4}$$

$$= \frac{1}{5} \cdot \frac{9 \cdot 3}{4}$$

$$= \frac{9}{5} \cdot \frac{3}{4}$$

$$= \frac{9}{5} \cdot \frac{12}{16}$$

$$= \frac{3^2}{3^2 - 4} \cdot \frac{4^2 - 4}{4^2}$$

$$\frac{656}{434} \approx 1,512 = \frac{189}{125}$$

$$= \frac{1}{5} \cdot \frac{189}{25}$$

$$= \frac{1}{5} \cdot \frac{9 \cdot 21}{25}$$

$$= \frac{9}{5} \cdot \frac{21}{25}$$

$$= \frac{9}{5} \cdot \frac{21}{25}$$

$$= \frac{3^2}{3^2 - 4} \cdot \frac{5^2 - 4}{5^2}$$

$$\frac{656}{410} \approx 1,6 = \frac{8}{5}$$

$$= \frac{9}{5} \cdot \frac{8}{9}$$

$$= \frac{9}{5} \cdot \frac{32}{36}$$

$$= \frac{3^2}{3^2 - 4} \cdot \frac{6^2 - 4}{6^2}$$

Naheliegender Ansatz:

$$656 \text{ nm} = A \cdot \frac{3^2}{3^2 - 4}$$

$$486 \text{ nm} = A \cdot \frac{4^2}{4^2 - 4} \text{ usw.}$$

→ Mittelwert der Grundzahl A kann bestimmt werden.

Linienpektrum des Wasserstoffatoms (LF)

Basierend auf $\lambda = A \cdot \frac{m^2}{m^2 - 4}$ mit $m \in \{3, 4, 5, 6\}$

stellt Balmer zwei Hypothesen auf:

1. Es gibt weitere Linien für $m > 6$.

Nachtrag des Artikels: „...durch gütige Vermittlung“ erhält Balmer die Kenntnis, dass Linien bis $m = 16$ bereits experimentell bestimmt wurden (v. Huggins 1880), die seine Vermutung bestätigen.

2. Balmer vermutet eine weitere Quadratzahl im Nenner ($4 = 2^2$): „...und so komme ich dazu, die Formel für die Coefficienten allgemeiner so darzustellen:“

$$\lambda = A \cdot \frac{m^2}{m^2 - n^2} \quad \text{mit } n \in \{1, 2, 3, 4, \dots\} \text{ und } m \in \{n + 1, n + 2, n + 3, \dots\}$$

Diese Vermutung ist falsch, entsprechende Linien gibt es nicht. Ursache ist ein weiterer versteckter Faktor $4 = 2^2$.

Linienpektrum des Wasserstoffatoms (LF)

Rydberg erkannte die korrekte Form:

$$\lambda = \frac{A}{4} \cdot \frac{n^2 \cdot m^2}{m^2 - n^2} \quad \text{mit } n \in \{1, 2, 3, 4, \dots\} \quad \text{und} \quad m \in \{n + 1, n + 2, n + 3, \dots\}$$

Für die Frequenzen des vom Wasserstoffatom emittierten bzw. absorbierten Lichts gilt entsprechend

$$f = \frac{c}{\lambda} = \frac{4 \cdot c}{A} \cdot \frac{m^2 - n^2}{n^2 \cdot m^2} = c \cdot R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad \text{mit } n \in \{1, 2, 3, \dots\}, m \in \{n + 1, n + 2, n + 3, \dots\}$$

und $c \cdot R_H \approx 3,2898 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$ bzw. $R_H = 1,0968 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}$.

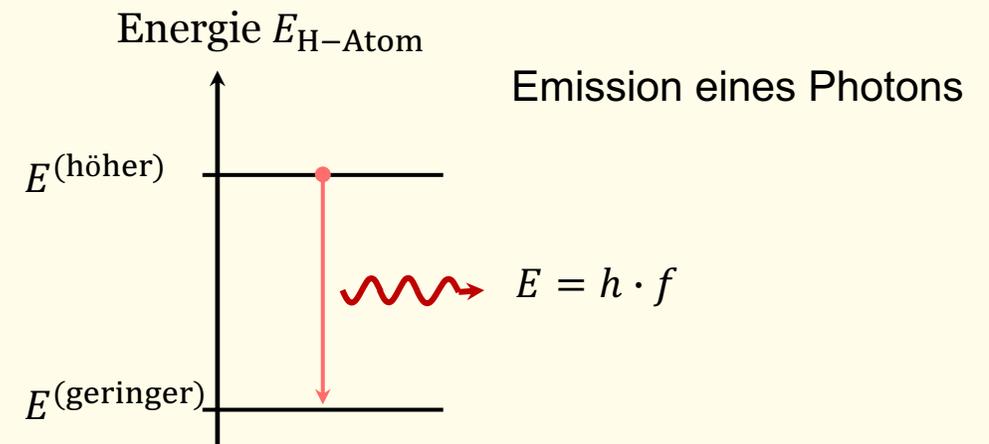
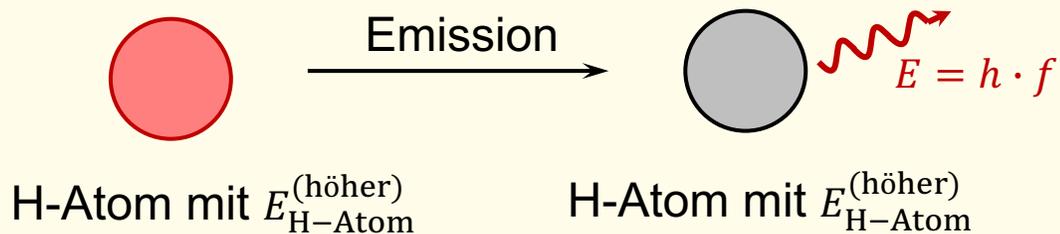
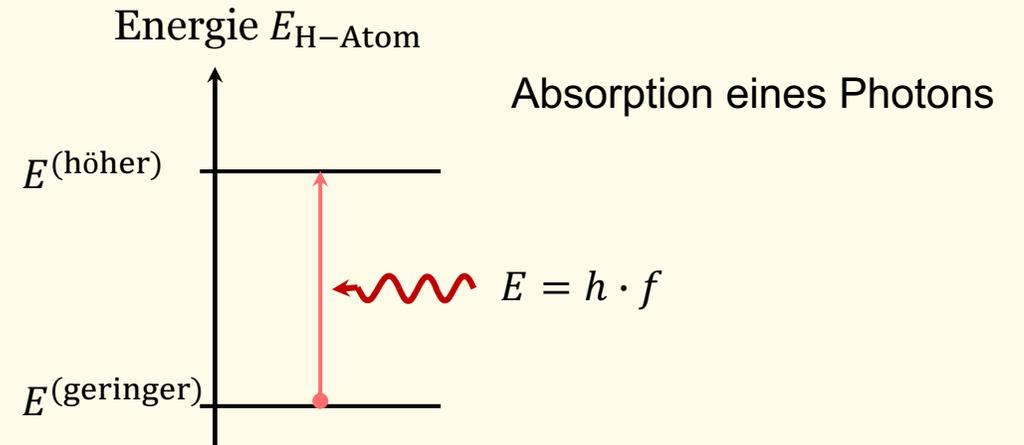
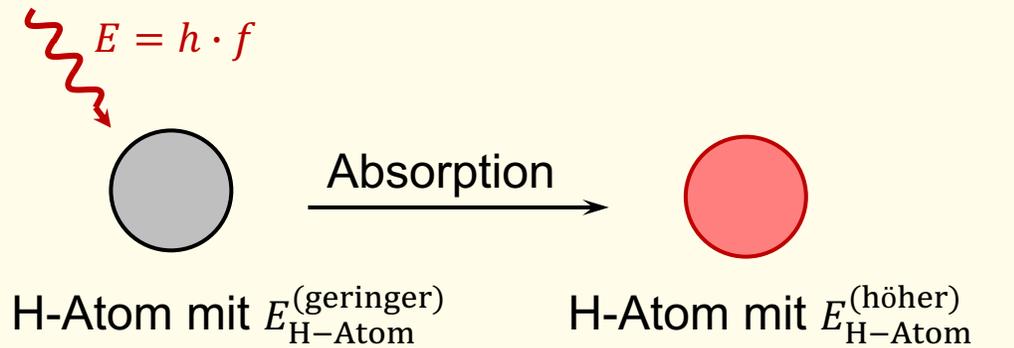
Beachte: Formelsammlung unterscheidet zwischen $R_\infty = 1,0974 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}$ und $R_H = 1,0968 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}$

Hintergrund: Endliche Masse des Atomkerns: $R_H = \left(1 + \frac{m_e}{m_p} \right)^{-1} \cdot R_\infty$

Physikalische Interpretation der obigen Formel im Unterricht?

Interpretation der Experimente (LF/BF)

Interpretation der Formel $f = c \cdot R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ mittels Photonenbegriff und EES:



Interpretation der Experimente (LF/BF)

Aus dem EES folgt:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Absorption: } E_{H\text{-Atom}}^{(\text{niedriger})} + h \cdot f = E_{H\text{-Atom}}^{(\text{höher})} \\ \text{Emission: } E_{H\text{-Atom}}^{(\text{höher})} = E_{H\text{-Atom}}^{(\text{niedriger})} + h \cdot f \end{array} \right\} \rightarrow E_{H\text{-Atom}}^{(\text{höher})} - E_{H\text{-Atom}}^{(\text{niedriger})} = h \cdot f$$

Mit Formel aus Experiment:

$$E_{H\text{-Atom}}^{(\text{höher})} - E_{H\text{-Atom}}^{(\text{niedriger})} = h \cdot f = h \cdot c \cdot R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Interpretation der Experimente (LF/BF)

Fazit aus Experiment und Interpretation ($m > n$):

$$E_{H-Atom}^{(höher)} - E_{H-Atom}^{(niedriger)} = h \cdot c \cdot R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{n^2} - h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{m^2}$$

Hypothese A (**Schüler-Hypothese**):

$$E_{H-Atom}^{(höher)} = h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{und} \quad E_{H-Atom}^{(niedriger)} = h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{m^2}$$

Hypothese B:

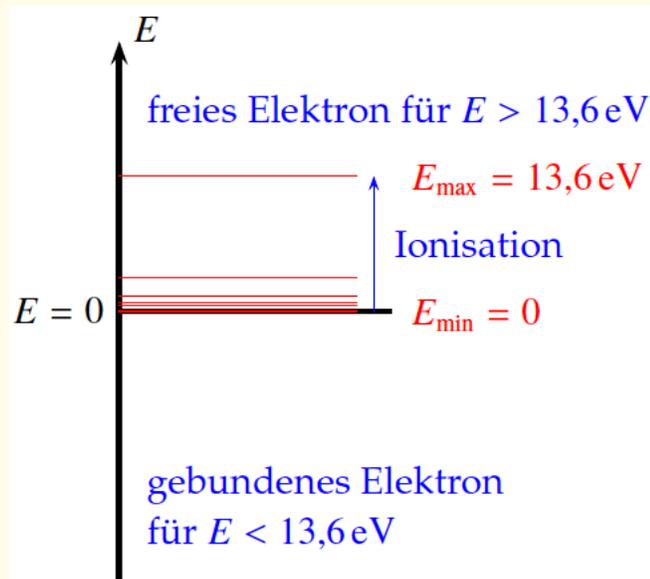
$$E_{H-Atom}^{(höher)} = -h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{und} \quad E_{H-Atom}^{(niedriger)} = -h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{m^2}$$

Welche Hypothese kann man verwerfen?

Welche Hypothese passt zum Experiment? (LF/BF)

Hypothese A (Schüler)

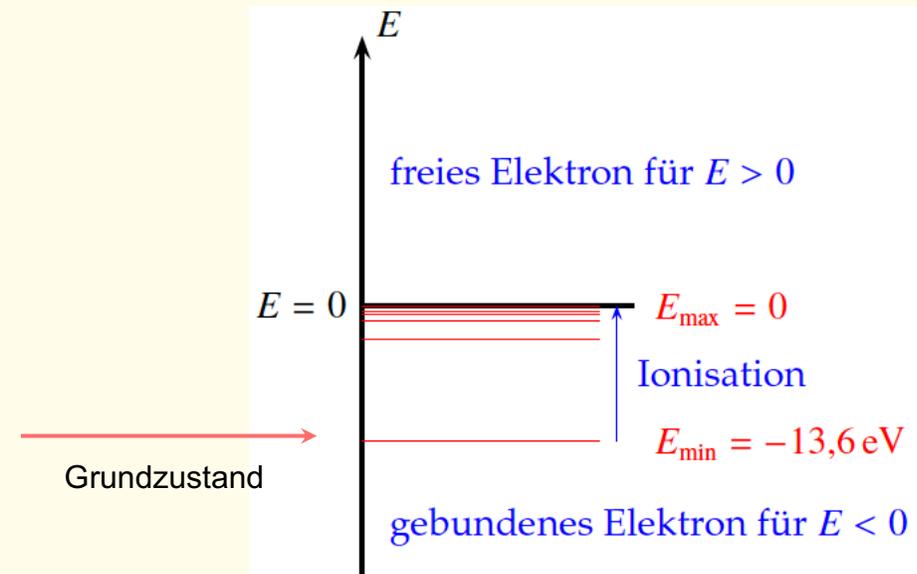
$$E_{H-Atom} = h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{n^2}$$



Kleinste Energieübertragungen können das Elektron aus Grundzustand (E_{min}) anregen
Widerspricht Experiment
Hypothese ist falsch

Hypothese B

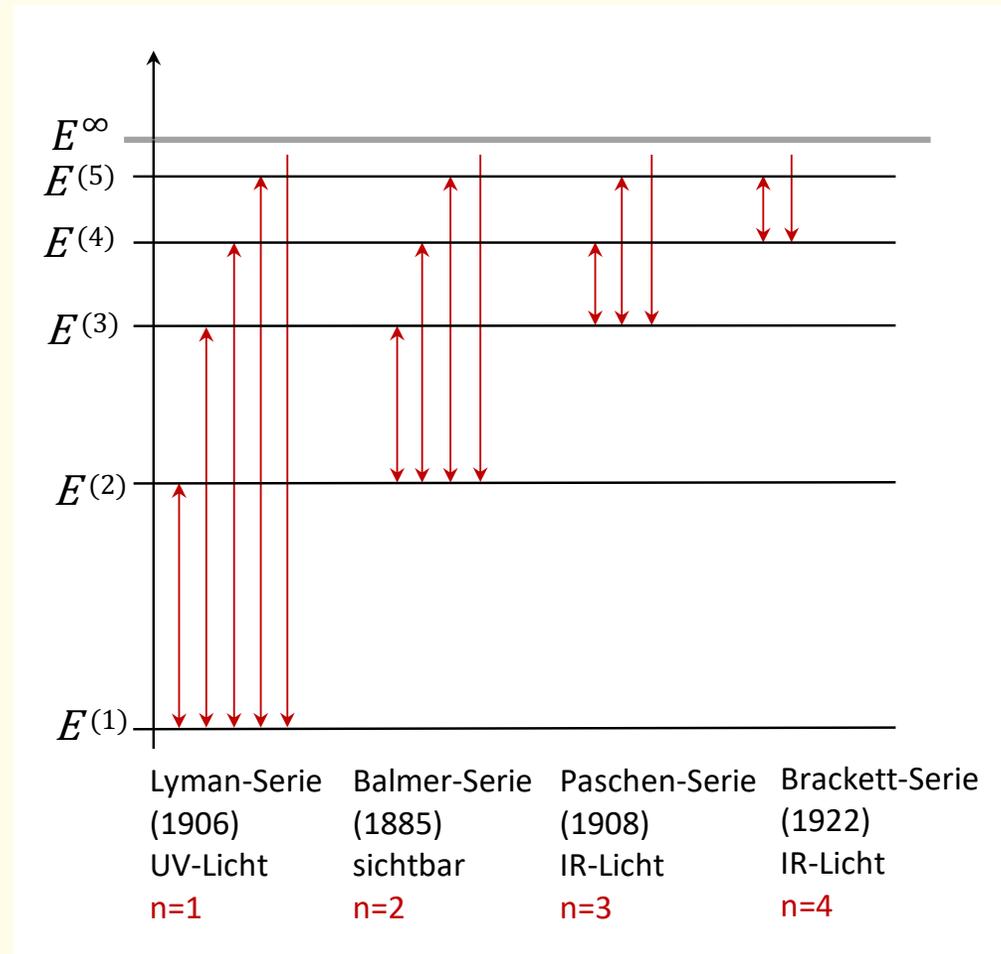
$$E_{H-Atom} = -h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{n^2}$$



Nur Energieübertragungen mit $\Delta E \geq E^{(2)} - E^{(1)}$ können das Elektron aus Grundzustand (E_{min}) anregen
Stimmt mit Experiment überein
Hypothese könnte stimmen

Energieniveauschema Wasserstoffatom (LF/BF)

Aus den Energiewerten des Wasserstoffatoms ergibt sich das Energieniveauschema:



Bildquellen:
Daniela Bednarski, [CC BY 4.0](#)

Linienpektrum des Wasserstoffatoms (LF/BF)

Folgerung der Analyse der experimentellen Daten:

Die Energieniveaus des im Wasserstoffatom gebundenen Elektrons sind vermutlich gegeben durch

$$E_{H-Atom}^{(n)} = -h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{1}{n^2}$$

Weitere Folgerungen:

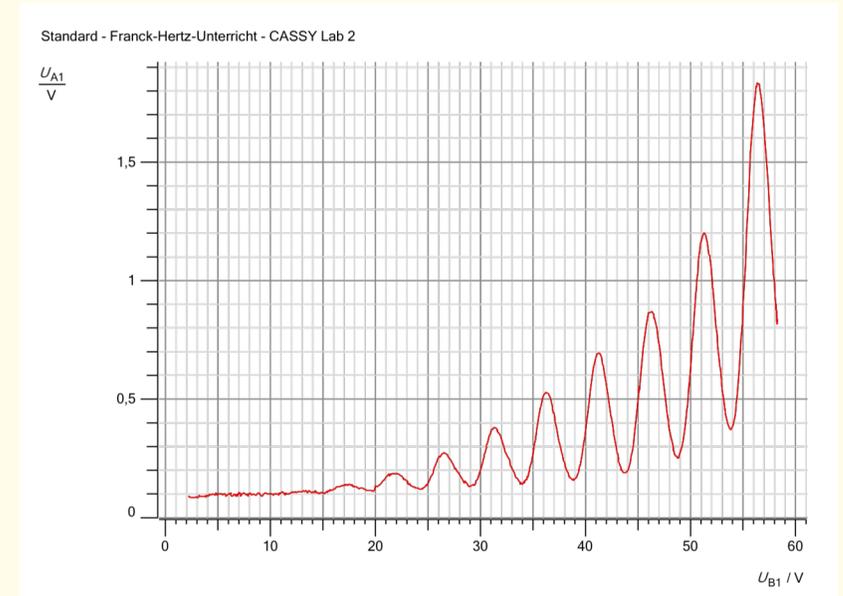
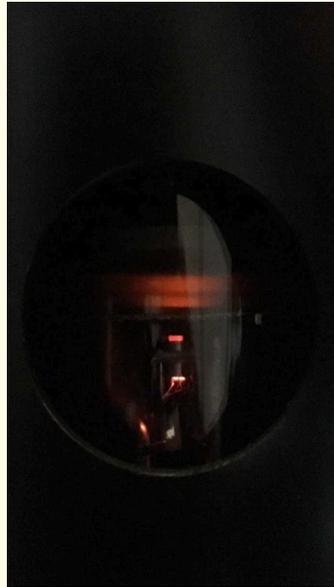
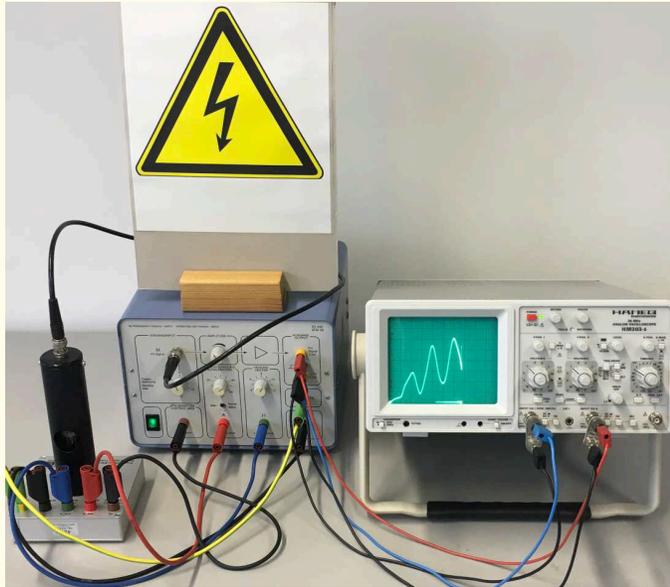
1. Atome haben charakteristische Energieniveaus, es ist unmöglich die Energie eines Atoms beliebig zu verändern.
2. Nur Licht bestimmter Frequenzen kann emittiert bzw. absorbiert werden, es gilt die Bohr'sche Frequenzbedingung $f = \frac{\Delta E}{h}$.

Allgemein: gebundene Zustände mit diskreten Energien ↔ Linienpektrum

Bemerkung: Jegliche atomare Modellbildung des Wasserstoffatoms muss die obige Formel und den Wert der Konstanten R_H erklären können.

Mögliche Vertiefung Franck-Hertz-Versuch (evtl. LF)

Inelastische Stoßprozesse in einer Triode mit Gasfüllung (z. B. Neon, Quecksilber) bestätigen diskontinuierliche Energieänderungen der Elektronen in Atomen.



- Neon-Füllung (links): Alle ca. 18 V tritt eine weitere Stoßanregung auf, das sichtbare orange Licht entspricht aber Übergängen zwischen 3p und 3s Niveaus. Vorteil: Die Anregungszonen können beobachtet werden.
- Quecksilber-Füllung (rechts): 4,89 V entsprechen der Wellenlänge 254 nm. Eine Heizung und entsprechende Vorwärmzeit sind notwendig.
- siehe z.B. auch: [Lehrerfortbildung BW: BP 2016 Basisfach Physik mit Schwerpunkt Astrophysik](#)

Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, Daniela Bednarski, [CC BY 4.0](#)

Rutherford'sches Atommodell (LF/BF)

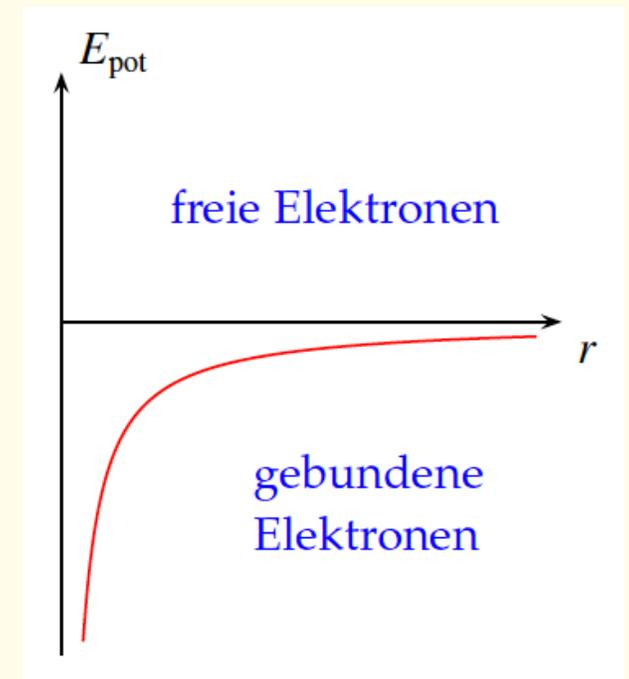
Die Experimente von Geiger und Marsden bestätigen das Rutherford'sche Atommodell, wonach die Elektronen in der Atomhülle mit den positiven Ladungen (Protonen) im Atomkern allein durch die Coulomb-Kraft wechselwirken:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_{\text{Kernladung}} \cdot q_{\text{Elektron}}}{r^2}$$

Für das Wasserstoffatom gilt daher:

$$F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \quad \text{und} \quad E_{\text{pot}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Über die genaue Struktur der Atomhülle, d.h. über die Zustände des gebundenen Elektrons im Atom macht das Rutherford'sche Atommodell keine Aussagen. Hierzu sind weitere Modellannahmen nötig.



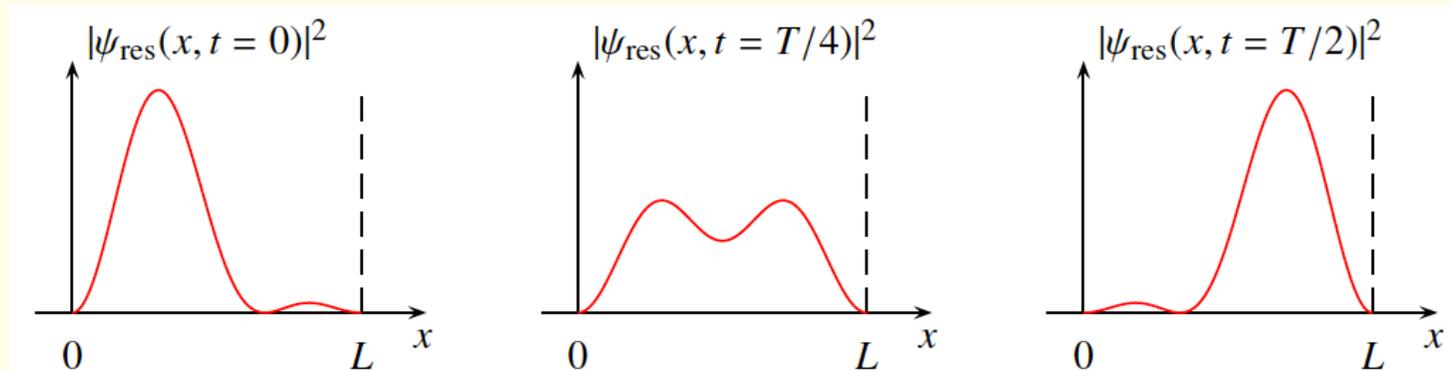
Fachliches und fachdidaktisches zum unendlichen Potentialtopf

- Lösungen der Schrödinger-Gleichung in **Ortsraum-Darstellung**

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin(k_n \cdot x) \cdot e^{-i \cdot \frac{E_n}{\hbar} \cdot t} \quad \text{mit} \quad k_n = \frac{\pi}{L} \cdot n$$

- Jede Superposition der $\psi_n(x, t)$ ist ebenfalls eine Lösung.
- Typisch für Superpositionen sind „oszillierende“ Wellenfunktionen, z.B.

$$\psi_{res}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n=1}(x, t) + \psi_{n=2}(x, t)]$$



entsprechend ist der Ortserwartungswert: $\langle x \rangle = \frac{L}{2} + L \cdot \frac{16}{9\pi^2} \cdot \cos\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} \cdot t\right)$

- Korrespondenzprinzip: Im Limes ($\hbar \rightarrow 0$ bzw. $n \rightarrow \infty$) ergibt sich klassische Lösung

Fachliches und fachdidaktisches zum unendlichen Potentialtopf

- In der fachdidaktischen Literatur und in Schulbüchern wird häufig statt der Schrödinger-Gleichung nur die zeitunabhängige Gleichung betrachtet:

$$\hat{H}\varphi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \cdot \varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \text{ mit } \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin(k_n x)$$

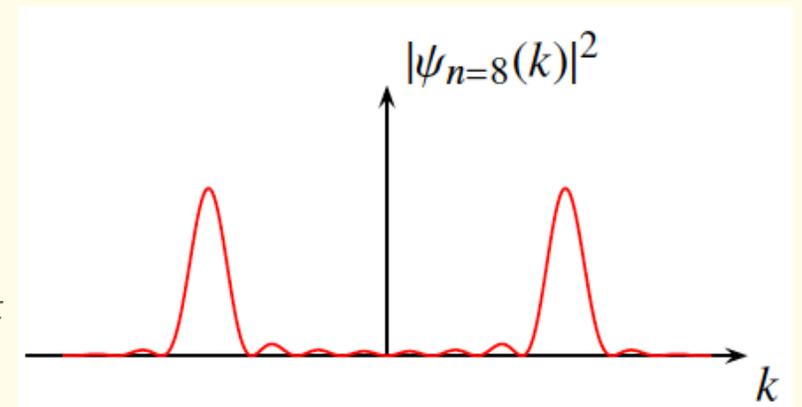
- Beachte: Für $\varphi_n(x)$ und $\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$ gilt das Superpositionsprinzip nicht. (Siehe auch alternative Umsetzung im Materialordner.)
- Weitere Lernschwierigkeit: Mit $\varphi_n(x)$ ist Wellenlänge verknüpft.

Typische Schülerfrage: Mit λ muss es

Impuls $p = \frac{h}{\lambda}$ geben, wo ist der Impuls?

- Lösung: ψ in Impulsraum-Darstellung ($p = \hbar \cdot k$)

$$\psi_n(k, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi L \hbar}} \cdot \frac{k_n}{k_n^2 - k^2} \cdot [1 - (-1)^n \cdot e^{-ikL}] \cdot e^{-i\frac{E_n}{\hbar} \cdot t}$$



Unendlicher Potentialtopf (LF)

Einfachstes Modell eines gebundenen Quantenobjekts: „Teilchen im Kasten“ bzw. **Quantenobjekt im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden**

Grundlegend ist die potentielle Energie

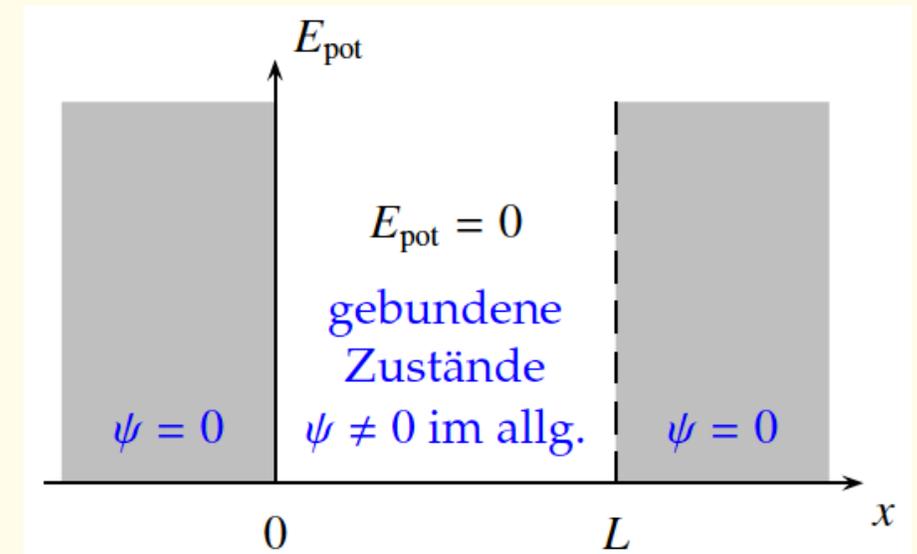
$$E_{pot} = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\text{EES: } E_{ges} = E_{kin} + E_{pot} = E_{kin}$$

Quantenobjekte haben Welleneigenschaften:

$$\psi_{res} = \psi_{\text{nach links laufende Welle}} + \psi_{\text{nach rechts laufende Welle}}$$

Superposition ergibt stehende Materiewelle mit $E_{ges} = \frac{p^2}{2m}$ und $p^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2$



Unendlicher Potentialtopf (LF)

Bedingung für stehende Welle: $L = \frac{\lambda}{2} \cdot n$ mit $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$

Energie der stehenden Materiewelle im Potentialtopf:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{h^2}{8mL^2} \cdot n^2$$

Die gebundenen Zustände des Quantenobjekts spiegeln sich in diskreten Energieniveaus wieder.

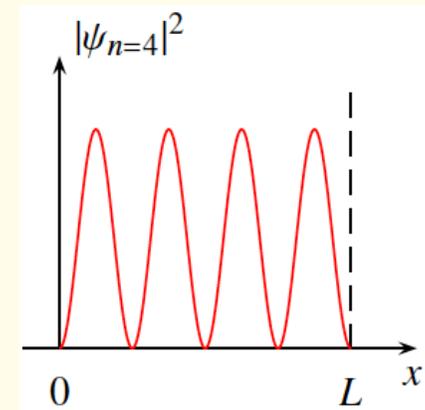
Frequenz der Übergänge: $f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_m - E_n}{h} = \frac{h}{8mL^2} \cdot (m^2 - n^2)$

Die Wellenfunktion des Quantenobjekts $\psi_n(x)$ hängt von der Quantenzahl n und vom Ort x ab

$\psi_n(x) \sim \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right)$ (sogenanntes Orbital)

Genauso wie die Detektionswahrscheinlichkeitsdichte

$|\psi_n(x)|^2 \sim \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} x\right)$



Fachliche Definition Orbitale

- Zur Definition des Begriffs „Atomorbital“ siehe z.B. das [Lexikon der Physik](#).
→ Definition als quantenmechanischer Zustand des Hamilton Operators
- Abgrenzung zum Begriff „Atomorbital“ oder „Orbital“ in der Chemie nötig!

Unendlicher Potentialtopf (LF)

Grenzen der Modellbildung des unendlichen Potentialtopfs zur Beschreibung der Energieniveaus in Atomen: [IQB-Aufgabe "Der Potentialtopf und das Bohr'sche Atommodell"](#)

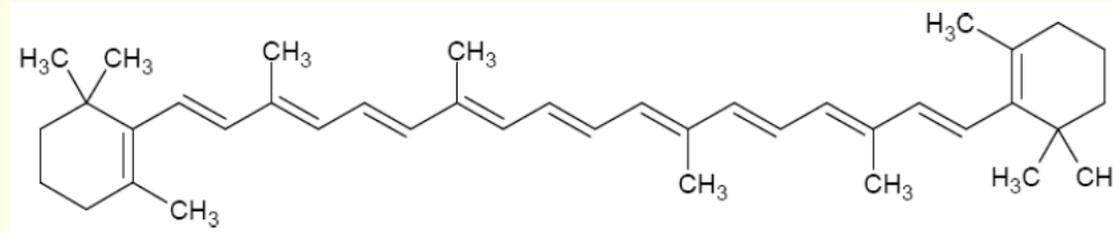
- Die Energiewerte stimmen weder quantitativ noch qualitativ ($E_n \sim n^2$ statt $E_n \sim \frac{1}{n^2}$) überein.
- Die entscheidende elektrostatische Wechselwirkung (Coulomb-Kraft) spielt keine Rolle.
- Die Lage des Kerns ist nicht definiert.
- Eine Ionisation bzw. ein Fotoeffekt ist unmöglich.
- Ungebundene/gebundene Zustände treten nicht auf.
- Unendliche Energiewerte sind unphysikalisch.
- Im Gegensatz zur Atomen ist die räumliche Ausdehnung immer gleich (L).
- Die aus der Chemie bekannten Schalen existieren nicht.
- Es gibt keine Doppellinien.

Fazit: Das Modell des Potentialtopfes mit unendlich hohen Wänden ist zur Beschreibung der Energieniveaus von Atomen ungeeignet.



Fachliches zum β -Carotin (LF)

Häufig wird der unendlich hohe Potentialtopf in Zusammenhang mit Farbstoffmolekülen diskutiert, insb. mit β -Carotin $C_{40}H_{56}$.



Siehe z.B. auch
Abituraufgabe aus
Bayern, 2018:
"Tomatenrot"

Chemisch: konjugiertes Molekül mit abwechselnden π - und σ -Bindungen, 22 delokalisierte Elektronen in π -Bindungen

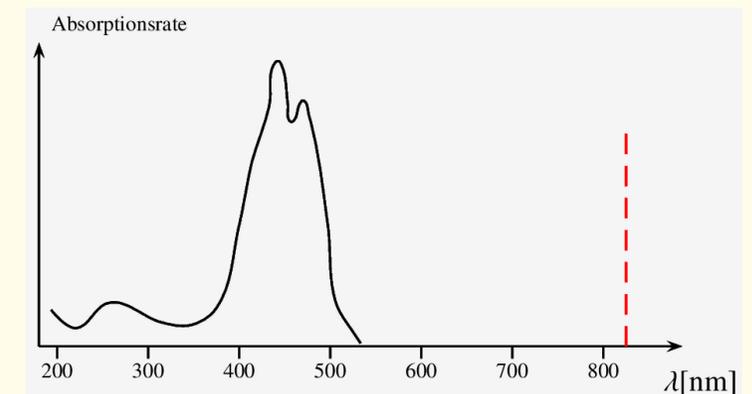
Näherung: 22 Elektronen sind 2,4 nm frei beweglich \rightarrow Unendlicher Potentialtopf

Pauli-Prinzip: Grundzustand $n = 11$, erster angeregter Zustand $n = 12$

$$\text{Frequenz des Übergangs: } f = \frac{h}{8mL^2} \cdot (12^2 - 11^2)$$

$$\rightarrow \lambda \approx 825 \text{ nm}$$

Fazit: Das Modell des Potentialtopfes mit unendlich hohen Wänden ist zur Beschreibung der Energieniveaus von Molekülen ungeeignet.



Alternativer Zugang

In den Materialien findet sich ein alternativer Zugang zu den Themen „Energiewerte des Wasserstoffatoms“ und „Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden“.

Überblick über die Materialien:

- 5110_up_kombinationsprinzip_nach_ritz: Unterrichtspräsentation, in der das Prinzip der Energieniveaus anhand von Höhenunterschieden erarbeitet und auf Energieunterschiede übertragen wird.
- 5111_up_schroedingergleichung_topf: Unterrichtspräsentation, in der die stationäre Schrödingergleichung für den ebenen Potentialtopf plausibel gemacht und schrittweise gelöst wird.
- 5112_up_bilder_psiquadrat_wasserstoff: Bilder von Patrick Bronner, welche $|\psi|^2$ von H-Atomen für verschiedene Orbitale in 2D und in 3D zeigen.

Ausblick Atommodelle (LF)

Wasserstoffähnliche Modelle: Die Energieniveaus von Atomen mit Kernladungszahl Z und nur einem Elektron ($(Z - 1)$ -fach ionisiertes Atom) sind gegeben durch

$$E_{H\text{-ähnlich}}^{(n)} = -h \cdot c \cdot R_H \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

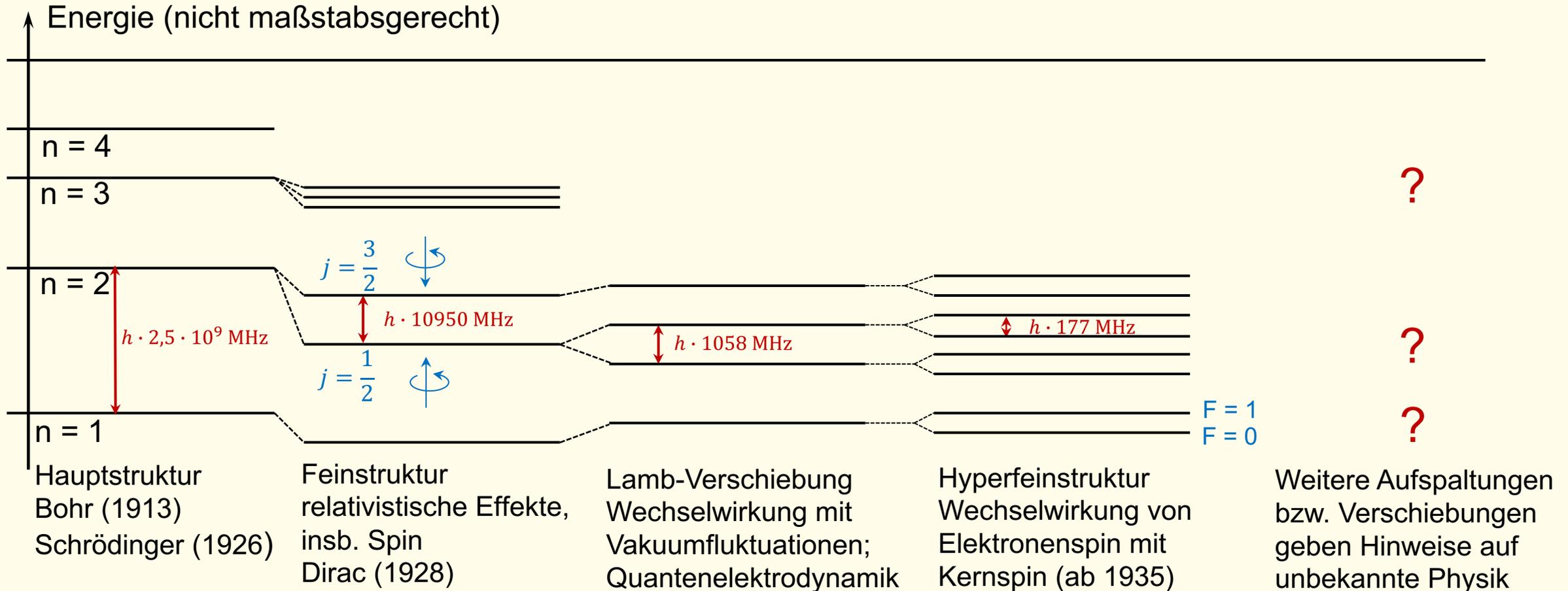
Nur wenige Modellbildungen können die Energieniveaus des Wasserstoffatoms und der Wasserstoff-ähnlichen Atome reproduzieren und insbesondere den Wert der Rydberg'schen Konstante erklären:

$$R_H = \left(1 + \frac{m_e}{m_p}\right)^{-1} \cdot R_\infty \quad \text{mit} \quad R_\infty = \frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot c}$$

Weitere Analysen belegen Korrekturen zu den Energiewerten des Wasserstoffatoms, die durch weitere Quantenzahlen (z.B. Drehimpulsquantenzahl und Spin-Quantenzahl) gekennzeichnet sind und bisher nicht berücksichtigte physikalische Effekte widerspiegeln. Mit den Energiewerten ändern sich Energieniveauschema und Linienspektrum.

Ausblick Atommodelle (LF/BF)

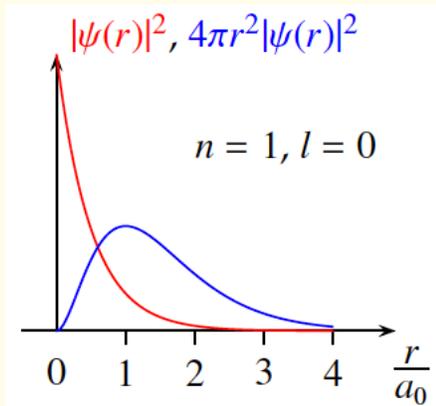
Die Energiewerte des Wasserstoffatoms jenseits von Bohr und Schrödinger:



Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, Daniela Bednarski, [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

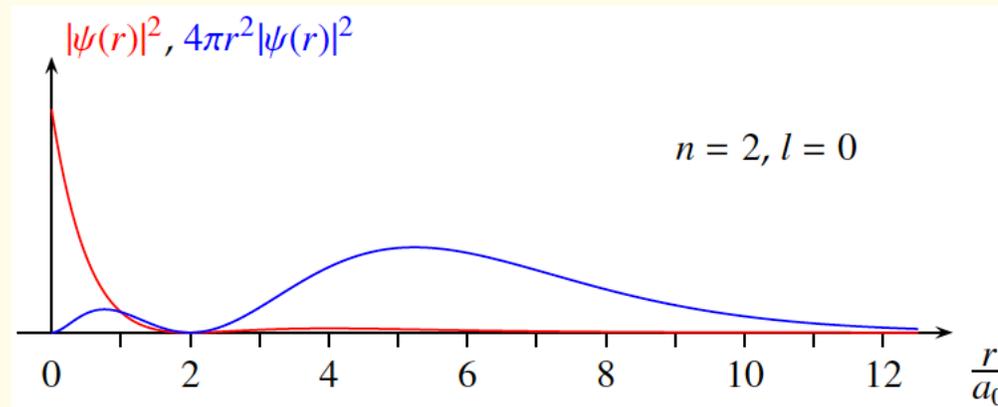
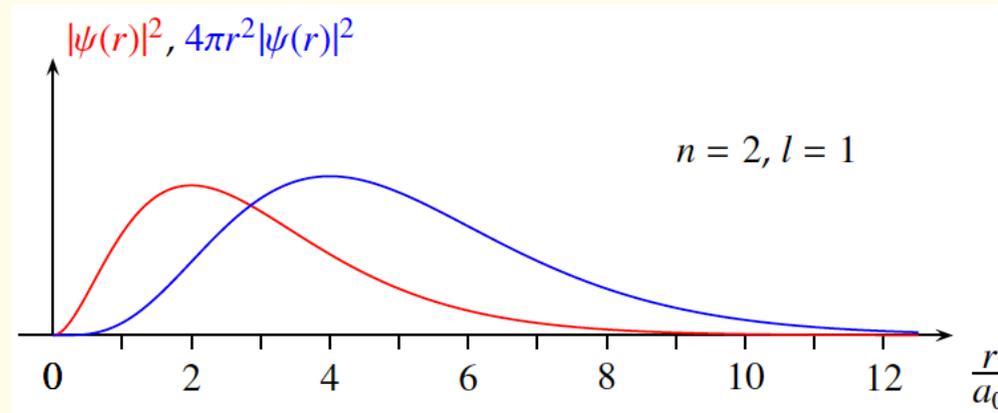
Ausblick Orbitale (LF)

Die Wellenfunktion ψ (Orbitale) des Wasserstoffatoms sind durch Quantenzahlen charakterisiert und hängen vom Ort ab, z.B.



Radialer Anteil der Detektionswahrscheinlichkeitsdichte: $|\psi(r)|^2$

Radiale Detektionswahrscheinlichkeitsdichte: $4\pi r^2 |\psi(r)|^2$



[Aufgabe zu \$|\psi\(r\)|^2\$: IQB](#)
["Der Potentialtopf und das Bohr'sche Atommodell"](#)

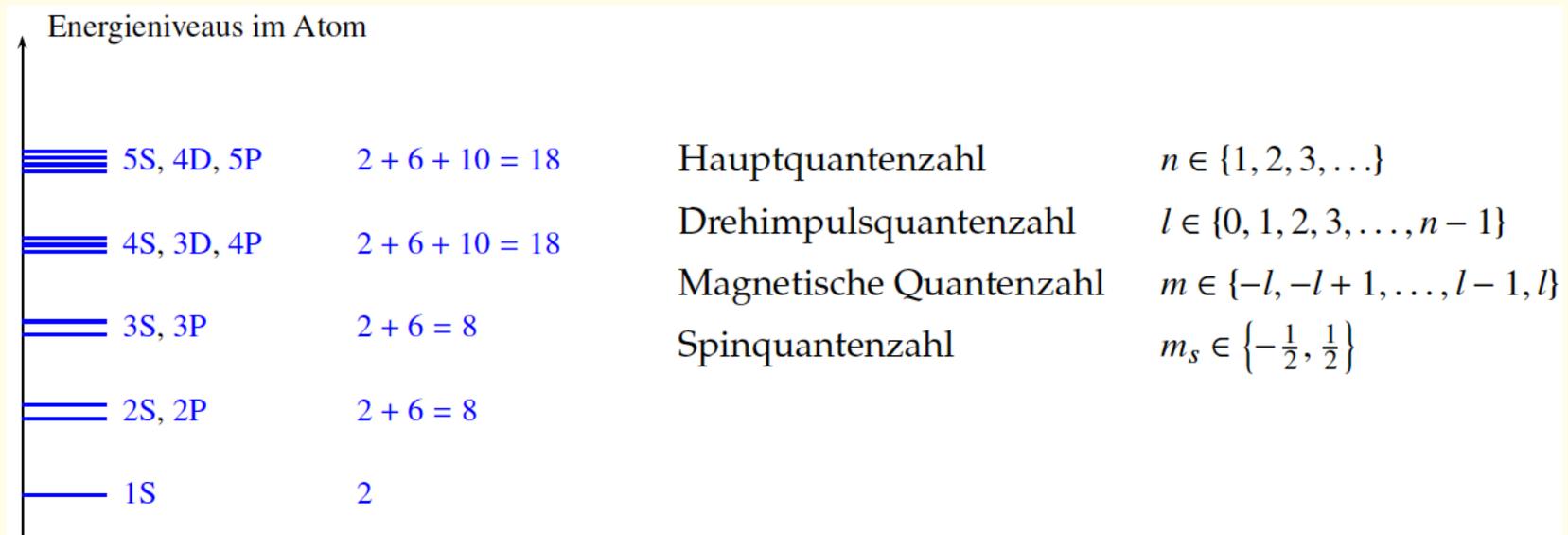
[Aufgabe zu \$\psi\(r\)\$: Abitur Bayern 2015](#)
["Potentialtopf und quantenphysikalisches Modell zum Wasserstoffatom"](#)

Ausblick Mehrelektronensysteme (LF)

Bei Atomen mit mehr als einem Elektron sind die Wellenfunktionen komplexer als beim Wasserstoffatom.

Näherungsweise nimmt man an, dass sich die Elektronen auf wasserstoffähnliche Wellenfunktionen (Orbitale) gemäß dem Pauli-Prinzip verteilen, d.h. je zwei Elektronen können nicht in allen vier Quantenzahlen (n, l, m, m_s) übereinstimmen.

Die Elektronen-Zustände werden reihenweise nach aufsteigender Energie aufgefüllt. Daraus ergibt sich die aus der Chemie bekannte Schalenstruktur (K, L, M, ... bzw. s, p, d, f, ...) der Atomhülle mit den abgeschlossenen Schalen bei Edelgasen ($Z = 2, Z = 10, Z = 18, \dots$):



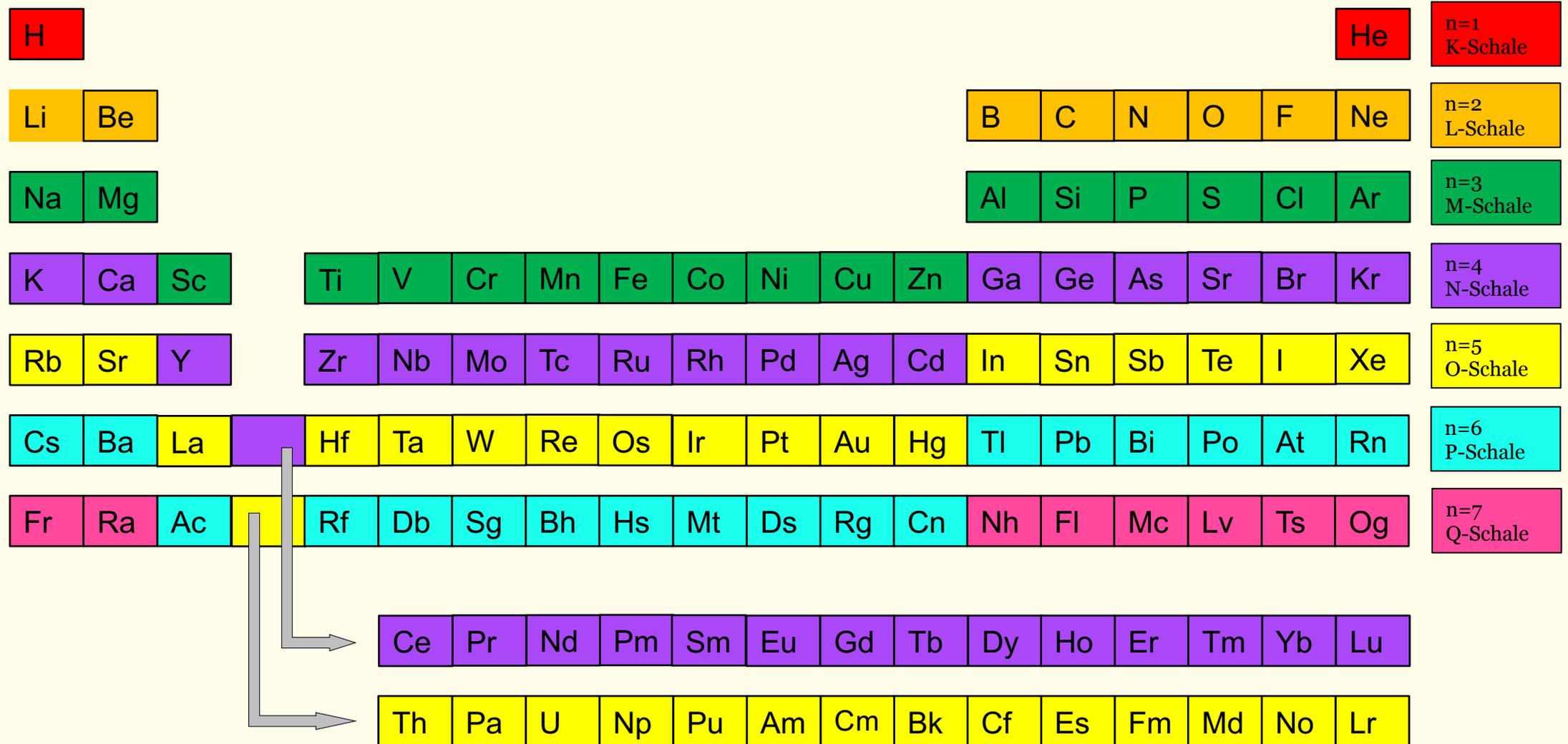
Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](#)

Mögliche Vertiefung (LF)

Aus den Quantenzahlen ergibt sich die Struktur des Periodensystems.
Gewinnbringende Verknüpfung zum Chemie-Unterricht.

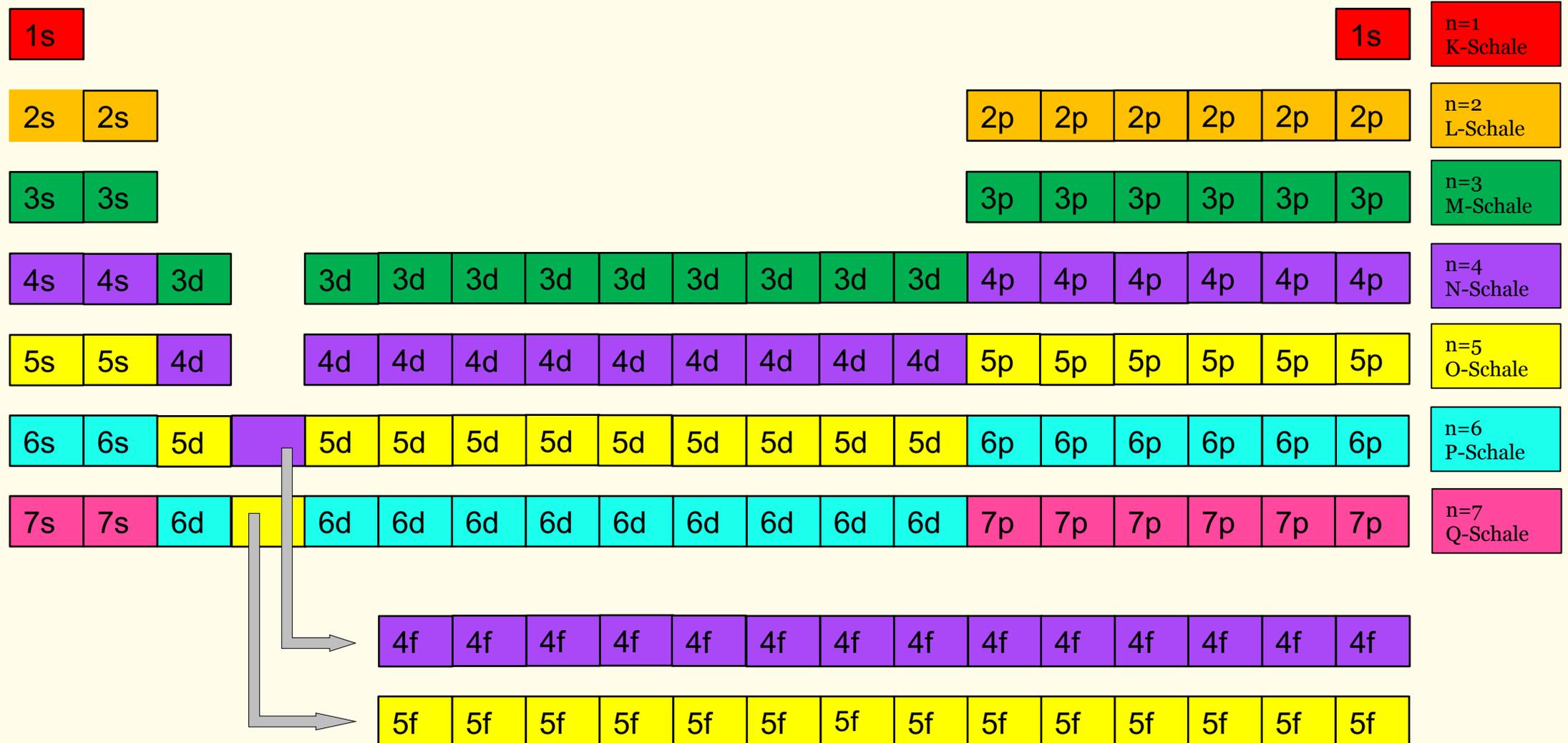
n	l	m	m_s	Chem. Bezeichnung	Anzahl
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	1s	2
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2s	2
	1	-1, 0, +1	$\pm \frac{1}{2}$	2p	6
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	3s	2
	1	-1, 0, +1	$\pm \frac{1}{2}$	3p	6
	2	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm \frac{1}{2}$	3d	10
4	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	4s	2
	1	-1, 0, +1	$\pm \frac{1}{2}$	4p	6
	2	-2, -1, 0, +1, +2	$\pm \frac{1}{2}$	4d	10
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$\pm \frac{1}{2}$	4f	14

Mögliche Vertiefung (LF)



Bildquellen:
Daniela Bednarski, [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

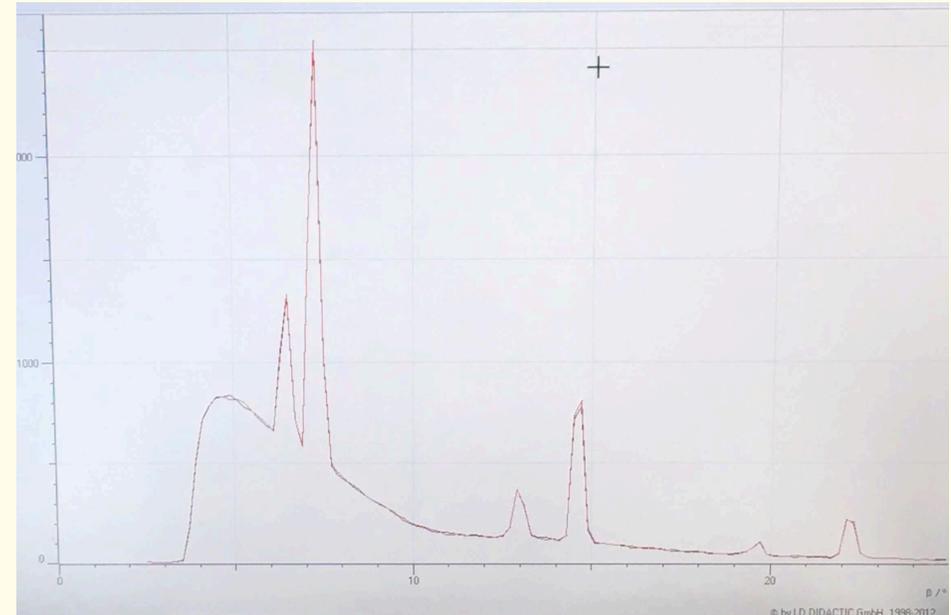
Mögliche Vertiefung (LF)



Bildquellen:
Daniela Bednarski, [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Röntgenspektren (LF)

Experimentelle Bestimmung des kontinuierlichen Bremsspektrums und des diskreten charakteristischen Spektrums ist mit Schulröntgengeräten möglich.



Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Erlasstagung Physik 2023 Dr. Sven Lübeck / Daniela Bednarski [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

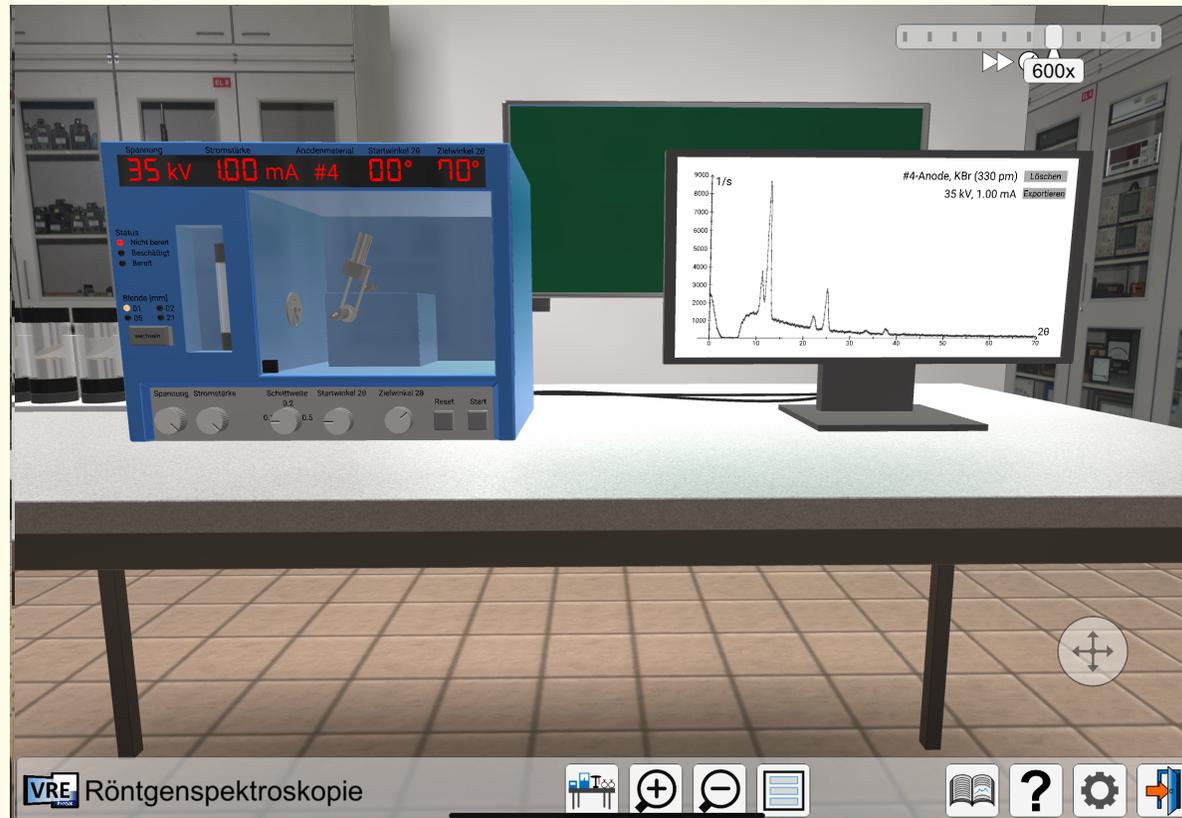
5001_linienpektren_und_atomphysik



Röntgenspektren (LF)

Alternativ:

[Virtual-Reality-Experimente der Uni Mainz](#) zu Röntgenbeugung, Röntgen-Spektroskopie und zum Rutherford-Experiment



Bildquellen:
Screenshots (<https://www.vre.uni-mainz.de>), [CC BY 4.0](#)

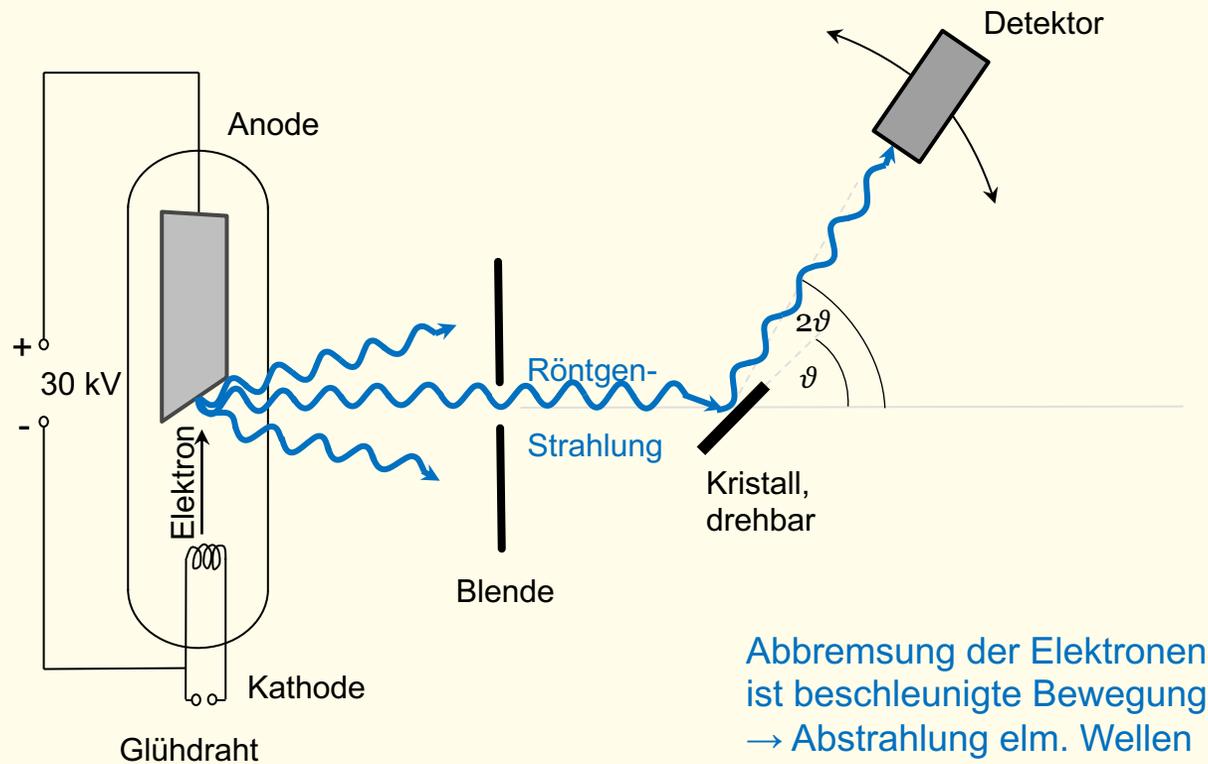
Erlasstagung Physik 2023 Dr. Sven Lübeck / Daniela Bednarski [CC BY 4.0](#)

5001_linienpektren_und_atomphysik

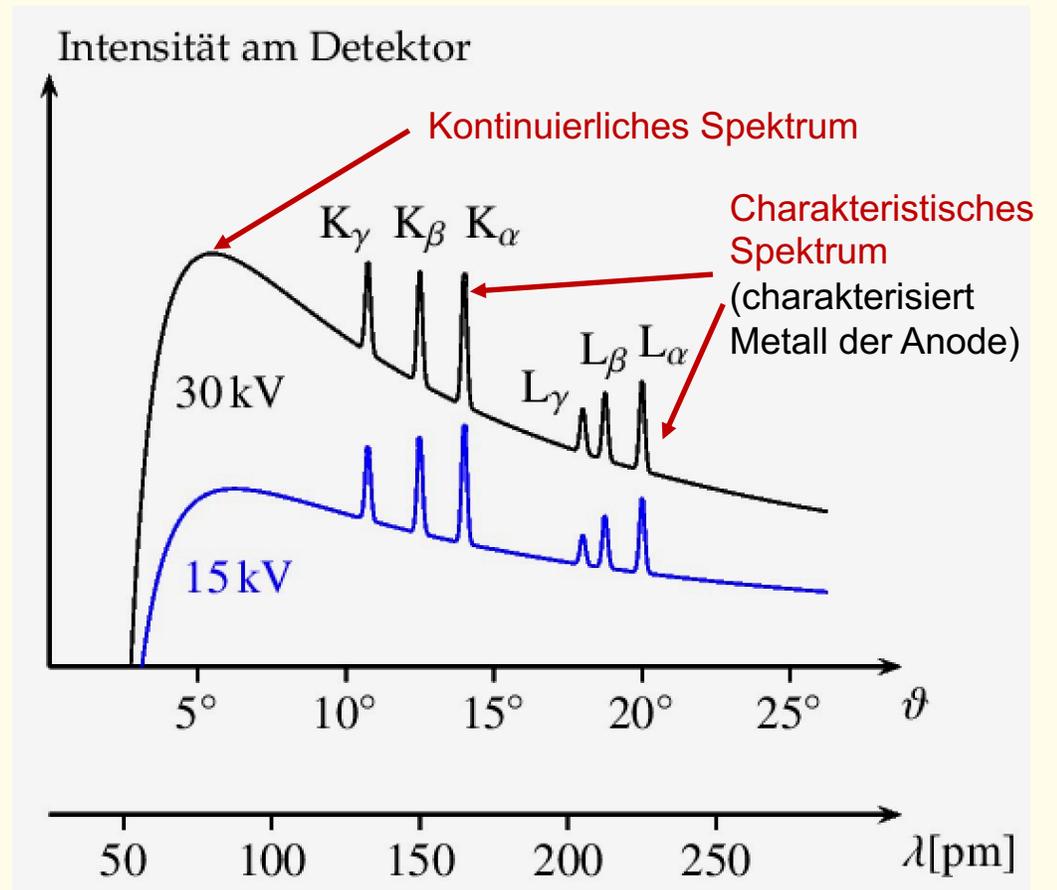


Aufbau Röntgen-Röhre (LF)

Röntgen-Röhre

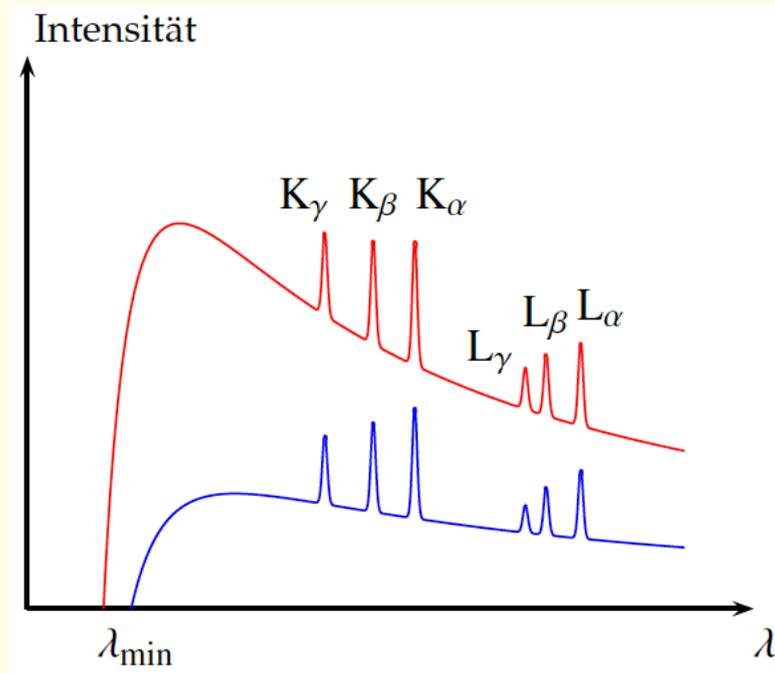


Typische Messung

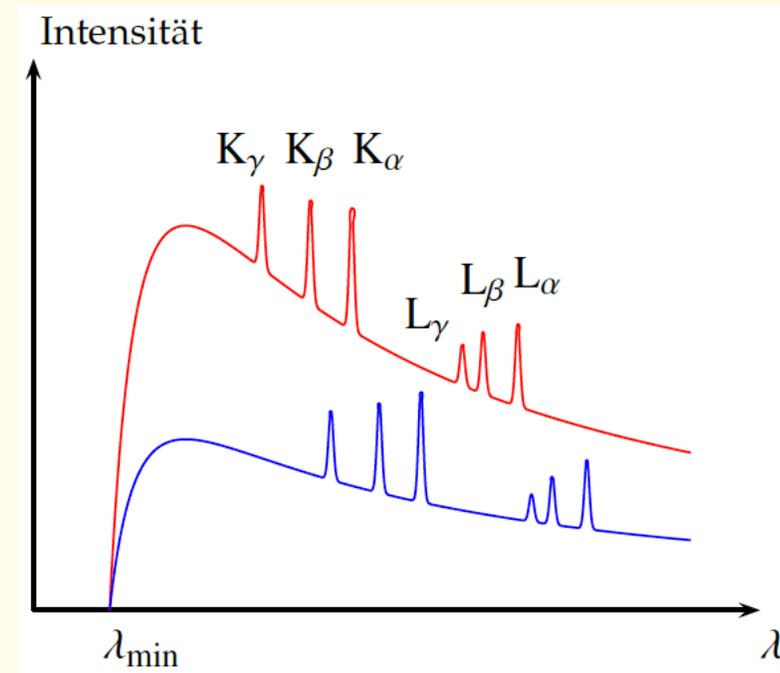


Röntgenspektren (LF)

Bremsspektrum ($U_1 > U_2$) mit charakteristischer Strahlung (K_α, K_β, \dots)



Bremsspektrum ($Z_1 > Z_2$) mit charakteristischer Strahlung (K_α, K_β, \dots)



Fachl. Hinweis: Duane-Hunt: $\lambda_{\min} = \frac{h \cdot c}{e \cdot U}$

und Kramers: $I(\lambda) = I_0 \cdot Z \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_{\min}} - 1 \right) \cdot \frac{1}{\lambda^2}$

Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](#)

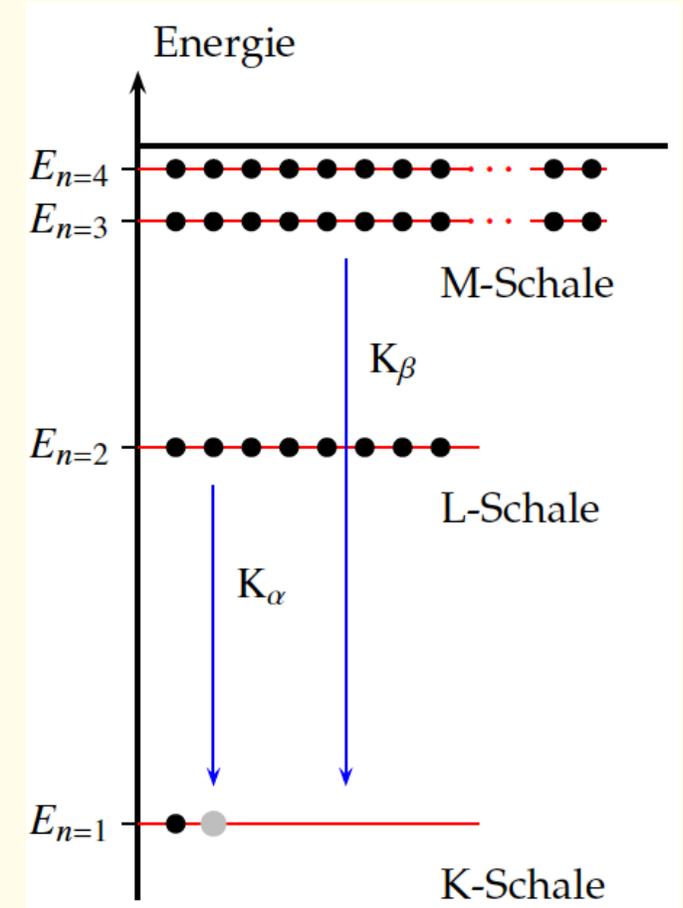
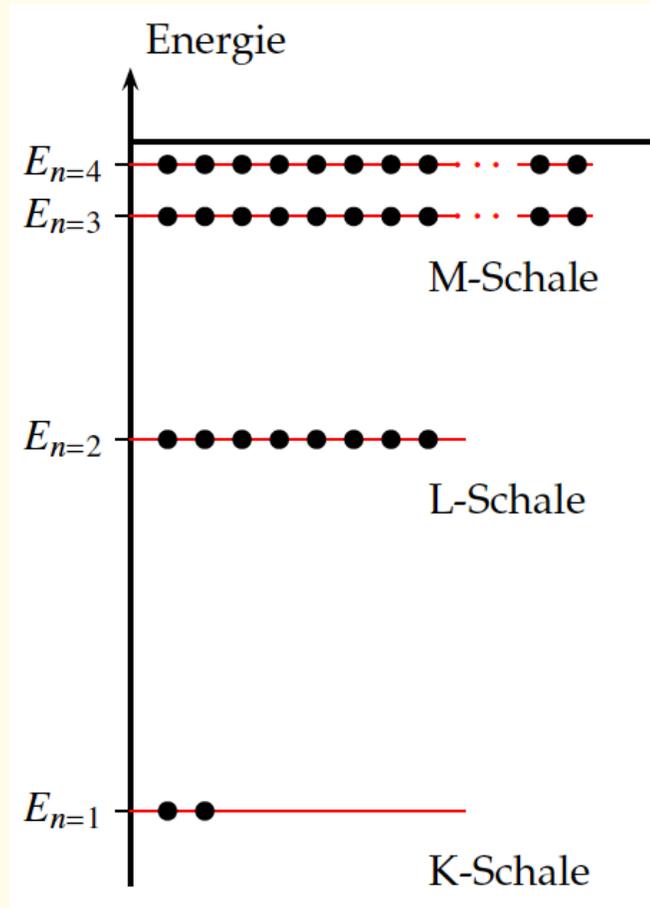
Erlasstagung Physik 2023 Dr. Sven Lübeck / Daniela Bednarski [CC BY 4.0](#)

Röntgenspektren (LF)

Hinweis: In der Formelsammlung ist das Moseley'sche Gesetz für den Spezialfall der K_{α} -Linien angegeben:

$$E_{K_{\alpha}} = 13,6 \text{ eV} \cdot \frac{3}{4} \cdot (Z - 1)^2$$

Aufgabe:
Abitur Bayern 2016:
Röntgenfluoreszenzanalyse
(RFA)



Bildquellen:
Dr. Sven Lübeck, [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Erlasstagung Physik 2023 Dr. Sven Lübeck / Daniela Bednarski [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

5001_linienpektren_und_atomphysik



Röntgenspektren: Abi-Aufgabe NRW 2020

Die NRW-Leistungskurs-Aufgabe **Beschleunigung von Elektronen** behandelt im ersten Teil eine Elektronenröhre, im zweiten Teil ein Synchrotron, im dritten Teil einen Speicherring mit Strahlungsverlusten.

Der dritte Teil enthält die Aufgabe, in der die Entstehung der Bremsstrahlung in einer Röntgenröhre beschrieben werden soll.

Folgende Aspekte sollten in der Lösung angesprochen werden:

- Die angelegte Spannung beschleunigt die aus der Kathode austretenden Elektronen.
- In der Anode treffen die hochenergetischen Elektronen auf Metall.
- Dort werden sie aufgrund der Ablenkung an den positiv geladenen Atomrümpfen beschleunigt.
- Die Beschleunigung verursacht die Aussendung elektromagnetischer Strahlung, deren Frequenz im Bereichs der Röntgenstrahlung liegt.
- Die Abstrahlung verursacht eine Abnahme der kinetischen Energie der Elektronen; sie werden abgebremst.
- Beim Bremsvorgang kann Strahlung in beliebigen Energiemengen bis zur gesamten kinetischen Energie der Elektronen freigesetzt werden. Dies ist der kontinuierliche Anteil des Spektrums.

Röntgenspektren: Abi-Aufgabe NRW 2019

NRW-Leistungskurs-Aufgabe **Röntgenstrahlung** behandelt im ersten Teil eine Röntgenröhre, im zweiten Teil das Röntgenspektrum, im dritten Teil Röntgenstrahlung in der Medizin.

Unter anderem werden folgende Aspekte abgefragt:

1. Teilaufgabe:
Beschriftung und Polung der Röntgenröhre, relativistische Berechnung der Geschwindigkeit
2. Teilaufgabe:
Drehkristallverfahren, Herleitung der Bragg-Gleichung, Beschreibung der Ursache des Bremsspektrums und des charakteristischen Spektrums, Angabe von K_α - und K_β -Linie im Spektrum, Bestimmung und Diskussion von λ_{min} , Veränderung des Spektrums bei geringerer Beschleunigungsspannung
3. Teilaufgabe:
Absorptionskoeffizient, Halbwertsdicke etc.