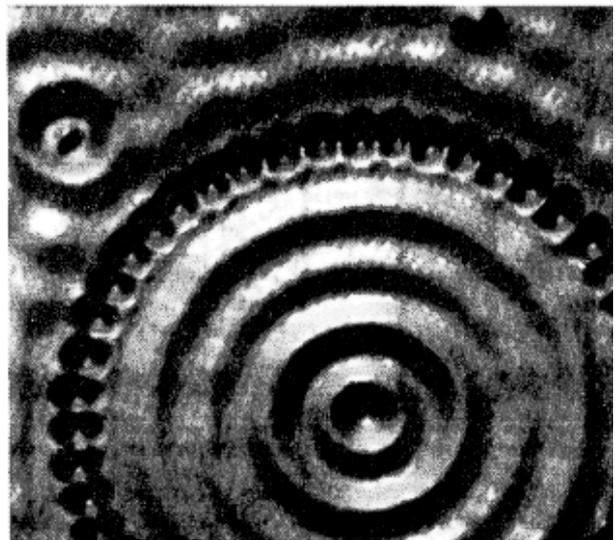
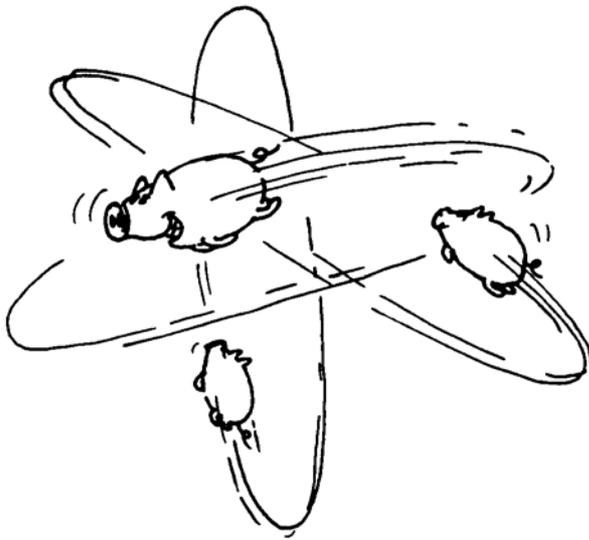


Atome unter der Lupe



Eine Einführung in die faszinierende Welt der Raster-Tunnel-Mikroskopie der Nanotechnologie und der Quantenmechanik für Schülerinnen und Schüler im Schwerpunktfach der Sekundarstufe II

Verfasst von

Dorothee Brovelli, Adrien Cornaz
Hans Peter Dreyer, Rudolf Dünki
Hans-Jörg Lohe

Herausgegeben durch Hans Peter Dreyer

ETH-Leitprogramm Physik:

„Atome unter der Lupe“

Eine Einführung in die faszinierende Welt der Raster-Tunnel-Mikroskopie und die Quantenmechanik für die Sekundarstufe II

Version 1

Juli 2002

Stufe, Schulbereich

Schwerpunktsfach Maturitätsschulen Klassen 11-13, Fachhochschulen

Fachliche Vorkenntnisse

Grundlagen der Quantenphysik, Energie-Orts-Diagramm, Austrittsarbeit bei Metallen, Drehimpuls, Infinitesimalrechnung bis zu Differentialgleichungen

Bearbeitungsdauer

Fundamentum: 9 Lektionen

Additum 1: 4 Lektionen

Additum 2: 6 Lektionen

Adresse für Anregungen und Kritik

Dipl. Phys. H. P. Dreyer

Fachdidaktik Physik, ETH-Hönggerberg HPZ F 9.1, CH-8093 Zürich

Telefon 01 / 633 26 31 - Telefax 01 / 633 11 15

dreyer@phys.ethz.ch - <http://educeth.ethz.ch/physik/leitprog>

Die *ETH-Leitprogramme* sind ein Gemeinschaftsprojekt von Karl Frey und Angela Frey-Eiling (Initiatoren), Walter Caprez (Chemie), Hans Peter Dreyer (Physik), Werner Hartmann (Informatik), Urs Kirchgraber (Mathematik), Hansmartin Ryser (Biologie), Jörg Roth (Geographie), zusammen mit den Autorinnen und Autoren.

Das Projekt *ETH-Leitprogramme* wurde durch die ETH Zürich finanziell unterstützt.

Dieses Material darf nur für den Gebrauch im Unterricht kopiert werden.

Vorwort

Auch dieses Leitprogramm ist durch den Einsatz vieler entstanden. Zusätzlich zu den im Vorwort von "Kann man Atome sehen?" erwähnten möchte ich nennen: D. Brovelli, Luzern und A. Cornaz, Wohlen. Sie haben verstanden die Grundlagen und wichtige Details der Tunnelmikroskopie in verständlicher Weise darzustellen. Dabei war die unkomplizierte Zusammenarbeit mit der Firma NanoSurf hilfreich. Die Einführung in die Quantentheorie geht im Wesentlichen auf R. Dünki zurück. Herr H.-J. Lohe hat das Ganze in die Endform gebracht und um den attraktiven Einblick in die Nanotechnologie ergänzt.

Allen Kolleginnen und Kollegen, die bei der Erprobung mitgeholfen haben, danke ich herzlich. Für die verbliebenen Fehler entschuldige ich mich.

ETH-Hönggerberg und Kantonsschule Wattwil, Juli 2002

H.P. Dreyer

Einführung

Ist das Raster-Tunnel-Mikroskop (RTM) eine Entdeckung oder eine Erfindung? Ist das RTM demnach ein Thema der Physik oder ein Thema der Technik? – Über diese Frage zu streiten ist fruchtlos. Denn auch die Entdeckung des Elektrons hat technologische Voraussetzungen und Konsequenzen und interessiert dementsprechend die Ingenieurinnen ebenso wie die Physiker.

Mit dem vorliegenden Leitprogramm erfahren Sie, in welchem Sinne man Atome sichtbar machen kann. Dabei schliessen Sie Bekanntschaft mit der Quantenmechanik, jener "neuen" Physik, die nötig ist, um Eigenschaften und Verhalten von Atomen und der Materie insgesamt zu verstehen. Im Zentrum steht die Schrödinger-Gleichung. Sie haben möglicherweise bereits im Chemieunterricht von ihr gehört. Natürlich lernen Sie auch das RTM und seine Verwandten genauer kennen und kommen dabei mit einem neuen Gebiet der Technik, der Nanotechnologie in Kontakt.

Im Additum 1 lernen Sie, wie man mit einem bestimmten RTM, dem easyScan, konkret arbeitet. Dabei geht es ebenso um praktische Dinge, wie die Herstellung der Spitze, als um die theoretisch richtige Interpretation der Computerbilder, wozu Sie Ihre Physikkenntnisse brauchen.

Im Additum 2 vertiefen Sie Ihr Verständnis der Quantenmechanik so weit, dass Sie die Elektronenpaar-Bindung verstehen.

Inhaltsverzeichnis

Titelblatt		I
Informationen, Copyright		II
Vorwort, Einführung		III
Inhaltsverzeichnis		IV
Kapitel 1	Das Raster-Tunnel-Mikroskop	1
	1.1 Die Funktionsweise des Raster-Tunnel-Mikroskops	3
	1.2 Der Aufbau des Raster-Tunnel-Mikroskops <i>easyScan</i>	9
	1.3 Die Probenoberflächen	12
	1.4 Ergänzungen: Verwandte des Raster-Tunnel-Mikroskops, Vertiefungen	15
	Lösungen zu den Aufgaben	18
Kapitel 2	Die Zustandsfunktion	24
	2.1 Präludium - Experimente mit Licht geben Rätsel auf	25
	2.2 Differentialgleichungen - ein intuitiver Zugang	28
	2.3 Die Schrödingergleichung bestimmt die Zustandsfunktion	31
	2.4 Quantisierung der Energie	37
	2.5 Die Rolle des Drehimpulses	42
	2.6 Elektronen im Festkörper	46
	Lösungen zu den Aufgaben	51
Kapitel 3	Nanotechnologie	55
	3.1 There's plenty of room at the bottom	56
	3.2 Internet Recherche	56
	Lösungen zu den Aufgaben	59
Additum 1	Atome sehen mit dem RTM	A1.1 - A1.19
	Anleitung zum Arbeiten mit dem <i>easyScan</i>	
Additum 2	Mehr Quantentheorie	A2.1 - A2.26
	Vom Atombau bis zum Sehvorgang	
Anhänge		
Anhang 1	Tests und Lösungen	Z1.1 - Z1.9
Anhang 2	Mediothek für die Schülerinnen und Schüler	Z 2.1
Anhang 3	Experimente	Z3.1 - Z3.4
Anhang 4	Von den Autoren benützte Quellen	Z4.1 - Z4.3
Anhang 5	Hinweise für die Lehrperson	Z5.1 - Z5.5

Das Raster-Tunnelmikroskop

Übersicht	1
Vorgehen	2
Lernziele von Kapitel 1	2
1.1 Die Funktionsweise des Raster-Tunnelmikroskops	3
1.2 Der Aufbau des Raster-Tunnelmikroskops <i>easyScan</i>	9
1.3 Probenoberflächen	12
1.4 Ergänzungen: Verwandte des Raster-Tunnelmikroskops, Vertiefungen	15
Lernkontrolle	17
Lösungen zu den Aufgaben	18

Übersicht

Sie haben in der Quantenphysik den Tunneleffekt kennengelernt. In diesem Kapitel lernen Sie ein Gerät kennen, das den Tunneleffekt benutzt. Das Raster-Tunnelmikroskop (RTM) ist eine völlig neue Art von Mikroskop. Es kann einzelne Atome abbilden.

Das RTM wurde Anfang der 80er Jahre am IBM-Forschungslabor in Rüschlikon erfunden. Im Unterschied zu den konventionellen Mikroskopietechniken wird hierbei nicht mehr Strahlung analysiert, die von der Probe reflektiert oder gestreut wurde. Man fährt vielmehr mit einer winzigen Sonde über die Oberfläche und nutzt den Tunneleffekt aus. Die räumliche Auflösung ist dann nicht mehr durch eine Wellenlänge begrenzt. Das Ergebnis: ein unerhörtes Auflösungsvermögen! Man kann mit dem Tunnelmikroskop Dimensionen vom Durchmesser eines Atoms “sehen”. In den Jahren nach der Erfindung gingen viele faszinierende Bilder atomarer Landschaften um die Welt. Bald folgten weitere, artverwandte Mikroskopiearten, wie zum Beispiel das Raster-Kraftmikroskop. Dessen Mikroskopspitze kann man auch als Werkzeug benutzen, um einzelne Atome auf der Oberfläche hin und her zu schieben. Heute sind alle diese Techniken und ihre Anwendungen ein aktiver Forschungsgegenstand (Stichwort: Nanotechnologie). Kein Wunder also, dass Binnig und Rohrer für ihre bahnbrechende Erfindung 1986 den Nobelpreis erhielten. Und für uns Grund genug, uns dieses Gerät ein bisschen genauer anzusehen...

Zu Beginn dieses Kapitels werden Sie das Prinzip dieses Gerätes kennenlernen. Interessant ist auch, wie man die physikalischen Grundgedanken technisch verwirklichen kann. Das erläutern wir am Beispiel eines RTM, das für Schulen geeignet ist: das *easyScan* von der Firma Nanosurf. In diesem Zusammenhang erfahren Sie auch etwas über Piezoelemente und

warum man sie braucht, um Atome abtasten zu können. Dann erhalten Sie einen kurzen Einblick in die Welt der Oberflächen, die Sie mit dem RTM untersuchen können. Im letzten Abschnitt erhalten Sie noch einige Anregungen, wie Sie Ihr neu erworbenes Wissen vertiefen können. Dabei lernen sie einige mit dem Tunnelmikroskop verwandten Mikroskope kennen.

Vorgehen

Am besten gehen Sie wie folgt vor: Zuerst studieren Sie die Lernziele. Dann arbeiten Sie den Stoff durch. Er ist mit Experimenten, Aufgaben und Gruppenarbeiten aufgelockert. Am Schluss des Kapitels finden Sie die Lösungen zu den Aufgaben.

Wenn Sie die Lernkontrollen mit eigener Anstrengung erledigt haben, gehen Sie zu Ihrem Lehrer, Ihrer Lehrerin oder der Tutorin, dem Tutor, um einen Kapiteltest zu absolvieren. Sollten Sie sich im Stoff aber noch unsicher fühlen, dann studieren Sie zuvor unbedingt nochmals die entsprechenden Abschnitte.

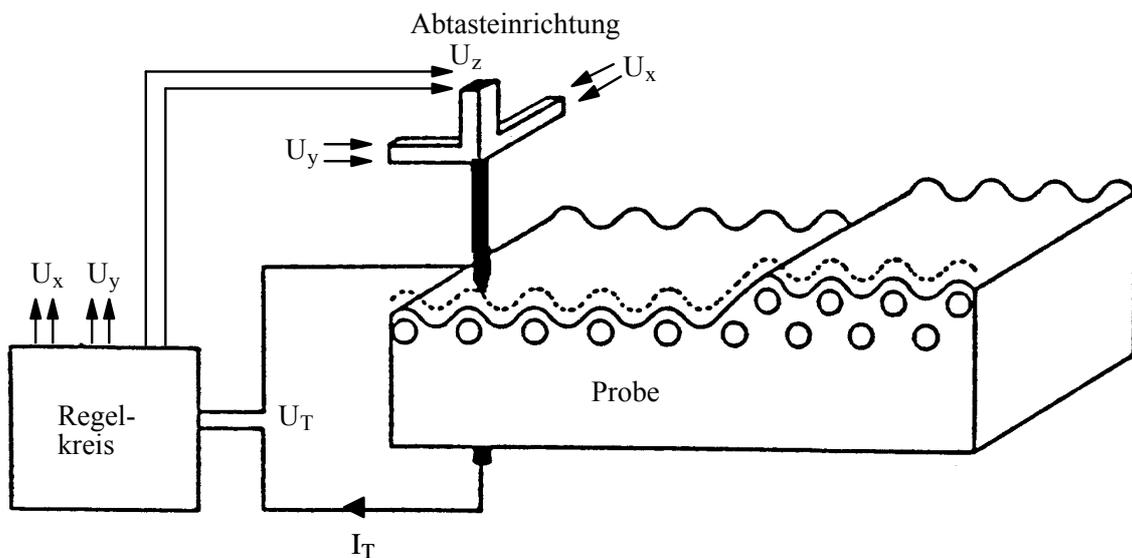
Genug jetzt mit den organisatorischen Dingen! Blättern Sie um und begeben Sie sich auf Entdeckungsfahrt in die Quantenphysik.

Lernziele von Kapitel 1

- Sie verstehen das Funktionsprinzip der Raster-Tunnelmikroskops und wissen, welche Rolle dabei der Tunneleffekt spielt.
- Sie können mindestens drei Probleme bei der technischen Umsetzung nennen und wissen, wie diese gelöst wurden.
- Sie sind in der Lage, einem Mitschüler zu erklären, wie die RTM-Aufnahme einer Graphitoberfläche zustande kommt.
- Sie können zwei mit dem Tunnelmikroskop verwandte Mikroskope und deren Anwendung beschreiben

1.1 Die Funktionsweise des Raster-Tunnelmikroskops

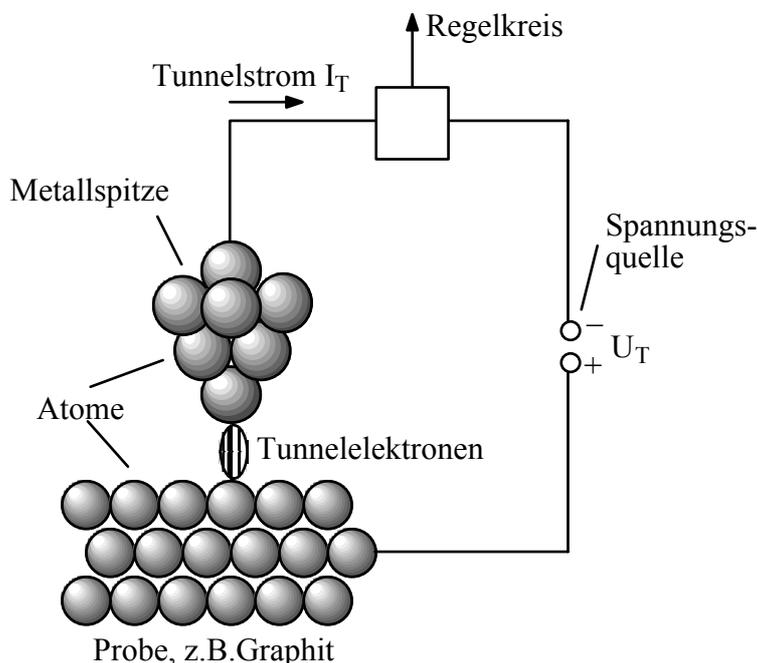
Beim Raster-Tunnelmikroskop wird eine feine Metallspitze sehr nahe an die Probenoberfläche herangeführt. Meistens beträgt der Abstand etwa $1 \cdot 10^{-9}$ m, also einige Atomlagen. Für die Elektronen in der Probe und in der Spitze ist der Aufenthalt in der Zone dazwischen eigentlich verboten. Diese Zone ist aber so dünn, dass die Elektronen einfach hindurchtunneln können. Legt man jetzt eine kleine Spannung U_T an, fließt ein Tunnelstrom I_T , den man messen kann (Figur 1.1). Dieser Strom hängt stark vom Abstand zwischen der Spitze und den Strukturen auf der Oberfläche ab. Jetzt fährt man mit der Spitze über die Oberfläche und hält dabei entweder die Höhe der Spitze oder den Tunnelstrom konstant. Man registriert dabei den Tunnelstrom bzw. die Regelparameter. Fährt man immer in parallelen Linien über die Oberfläche, tastet man sie also ab wie ein Buch in Blindenschrift, dann erhält man ein dreidimensionales Bild der Oberfläche.



Figur 1.1: Prinzip des Raster-Tunnelmikroskops

Was hier so einfach klingt, enthält in Wirklichkeit einiges an Physik und die Lösung einer Reihe technischer Probleme. Zuerst werden wir uns mit den physikalischen Prinzipien genauer auseinandersetzen. Die technische Umsetzung behandeln wir weiter unten am Beispiel des easyscan-Rastertunnelmikroskops.

Der Tunneleffekt beim Tunnelmikroskop



Figur 1.2 a: Vereinfachtes Schema zum Tunneln beim Tunnelmikroskop

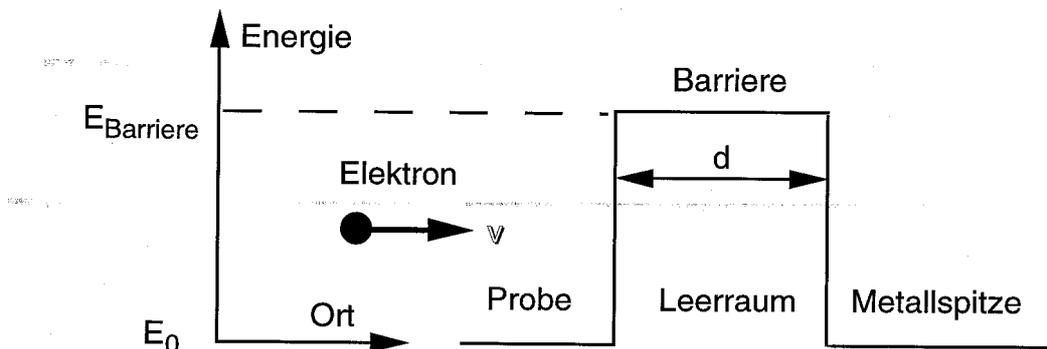
Figur 1.2 a) zeigt schematisch die Spitze, die Probenoberfläche und den Leerraum dazwischen. Im Stromkreis zwischen Probe und Spitze wird laufend die Stromstärke gemessen (Größenordnung Pikoampere 10^{-12} A). Mit dem RTM kann man also nur leitende Proben untersuchen. Aktiv an der Abbildung beteiligt ist eigentlich nur die Spitze der Metallspitze, also die vordersten Atome. Je kleiner aber die Strukturen sind, die man abbilden will, desto schärfer muss auch die verwendete Spitze sein. Zum Glück ist es recht einfach, scharfe Spitzen herzustellen. Für eine räumliche Auflösung, die besser als der Atomdurchmesser ist, muss jedoch ein einziges Atom auf der Spitze der Nadel sitzen. Häufig kommt so ein Atom von der Probenoberfläche selbst. Es wird durch die hohen elektrischen Felder aus der Oberfläche gelöst und bleibt an der Spitze hängen.

Die Leitungselektronen in einem Metall können sich im Inneren des Metalls praktisch frei bewegen. Sie können es jedoch nicht verlassen, weil sie von den positiven Atomrümpfen zurückgehalten werden. Wer sie trotzdem aus der Oberfläche herausholen will, muss Arbeit verrichten, nämlich die sogenannte Austrittsarbeit. Wir kürzen sie mit dem Buchstaben Φ ab. In einem glühenden Metall reicht dazu die kinetische Energie der Wärmebewegung aus, wie Edison als erster beobachtet hat. Bei Zimmertemperatur dürfte jedoch nach den Gesetzen der klassischen Physik nichts passieren. Der Aufenthalt im Gebiet zwischen Spitze und Probe ist für das Elektron verboten. Dort ist ein zu hoher Potentialberg.

Wie Ihnen aus der Einführung in die Quantenphysik bekannt ist, ist für Quantenobjekte das Tunneln durch Barrieren der Höhe E_{Barr} und der Breite d unter folgender Bedingung erlaubt:

$$\text{Tunnelbedingung: } d \cdot \sqrt{E_{\text{Barr}}} \leq h \cdot \sqrt{\frac{2}{m}}. \quad (*)$$

In einem Energie-Orts-Diagramm sieht das folgendermassen aus:



Figur 1.2b): Tunneln durch eine Potentialbarriere der Höhe E_{Barr} und der Breite d .
Hinweis: Der Potentialberg ist hier der Einfachheit halber als eckig angenommen worden.



Aufgabe 1.1

a) Zeichnen Sie ein Energie-Orts-Diagramm für Metall und Aussenraum beim Tunnelmikroskop analog zum Diagramm in Figur 1.2b). Zeichnen Sie darin die Austrittsarbeit Φ ein. Wie hängt Φ von den Grössen E_0 und E_{Barr} in Figur 1.2 b) ab?

b) Denken Sie nun bitte noch einmal klassisch. Argumentieren Sie anhand des Diagramms, warum ein Elektron bei Raumtemperatur im Metall bleibt und ein Elektron bei sehr hohen Temperaturen das Metall verlassen kann. Zeichnen Sie dazu die beiden Elektronen und ihre kinetischen Energien ins Diagramm ein.

Nun bedienen wir uns wieder der Quantenphysik. Den Fall von Probe und Metallspitze haben Sie im letzten Abschnitt schon kennengelernt: Figur 1.2 b) zeigt vereinfacht das Energiediagramm dafür. Das Elektron in der Probe wird von der Metallspitze durch eine Potentialbarriere getrennt. Obwohl es nach der klassischen Physik eingeschlossen bliebe wie ein zu langsamer Wagen bei der Berg- und Talfahrt, kann es nach der Quantenphysik die Energiebarriere durchtunneln.

Die Tunnelbedingung

Jetzt können wir nachrechnen, ob die aus der Unschärferelation hergeleitete Tunnelbedingung (*) beim Raster-Tunnelmikroskop erfüllt ist. Die Breite des Potentialberges entspricht gerade dem Abstand d von Probe zu Spitze, also etwa 10^{-9}m . Seine Höhe E_{Barr} wird durch die Austrittsarbeit bestimmt und beträgt einige eV, also etwa 10^{-18}J .

Es gilt also einerseits:

$$d \cdot \sqrt{E_{\text{Barr}}} \approx 10^{-9}\text{m} \cdot \sqrt{10^{-18}\text{J}} \approx 10^{-18}\text{J} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1/2}$$

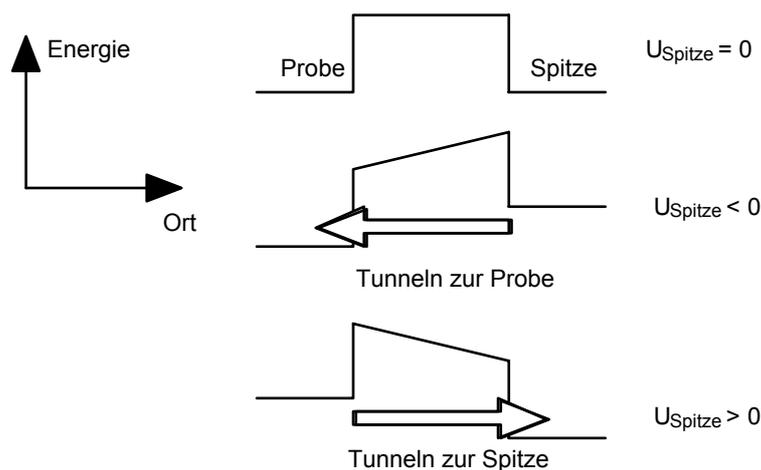
Andererseits ergibt sich ebenfalls:

$$h \cdot \sqrt{\frac{2}{m}} \approx 7 \cdot 10^{-34}\text{J} \cdot \text{s} \cdot \sqrt{2 \cdot 10^{30}\text{kg}^{-1}} \approx 10^{-18}\text{J} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1/2}$$

Diese Abschätzung der Grössenordnung zeigt, dass wir die komplizierten Prozesse beim Tunnelmikroskop mit der Unschärferelation verstehen können.

Der Tunnelstrom

Vielleicht werden Sie jetzt sagen, dass Elektronen nicht nur aus der Probe in die Spitze tunneln können, sondern auch umgekehrt. Zurecht! Auch die Elektronen in der Metallspitze können zur Probe tunneln. Man kann also in Figur 1.2b) auch ein Elektron auf der Seite der Metallspitze zeichnen, für das die gleichen Überlegungen gelten. Im Bild ist der Einfachheit halber angenommen worden, dass Probe und Spitze die gleiche Austrittsarbeit haben. Legen wir nun eine kleine Spannung U an, fliesst ein Tunnelstrom. In welche Richtung der Strom fliesst, hängt natürlich von der Polarität der angelegten Spannung ab. Er kann also entweder von der Spitze zur Probe oder umgekehrt fließen. Figur 1.3 verdeutlicht diesen Sachverhalt: Im Energieschema wirkt sich eine zusätzlich angelegte Spannung so aus, als ob den Elektronen auf einer Seite der Energiebarriere zusätzlich Energie zugeführt worden wäre. Diese Elektronen können dann als elektrischer Strom auf die andere Seite fließen, ähnlich wie der Grundwasserfluss zwischen zwei benachbarten Seen auf unterschiedlicher Höhe. Das Potentialgefälle wird durch eine schräge Potentialbarriere dargestellt.



Figur 1.3: Je nach angelegter Spannung tunneln Elektronen zur Probe oder zur Spitze

Die quantitativ ausgestaltete Quantenphysik erlaubt, abzuschätzen, wie gross dieser Tunnelstrom ist und wie er vom Abstand d zwischen Probe und Spitze abhängt. Wir müssen uns hier damit begnügen, einen Ausdruck für den Tunnelstrom anzugeben.

Es gilt:

$$I_T = c_1 \cdot U_T \cdot e^{-c_2 \sqrt{\Phi} \cdot d}$$

Der Tunnelstrom nimmt also exponentiell mit dem Abstand ab. Die Konstante c_1 hängt dabei von der Elektronendichte in Probe und Spitze ab. Der Exponent enthält eine weitere Konstante c_2 und die Austrittsarbeit der Metalle. Haben Spitze und Probe unterschiedliche Austrittsarbeiten, so muss hier der Mittelwert eingesetzt werden. Typische Arbeitsparameter sind folgende: $I_T = 10^{-9}$ A, $U_T = 100$ mV, $\Phi = 5$ eV und $d = 10^{-9}$ m. Mehr zu diesem komplexen Sachverhalt lernen Sie im Kapitel 3.

Wenn Sie sich die Gleichung für den Tunnelstrom noch einmal aufmerksam ansehen, werden Sie vielleicht folgendes bemerken: Das Tunnelmikroskop misst nicht einfach die Höhe von Strukturen auf der Probenoberfläche. Vielmehr hängt der Tunnelstrom neben dem Abstand d auch von der Elektronendichte (c_1) in der Probe an der untersuchten Stelle ab. Sie werden dieser Tatsache bei der Graphitprobe wieder begegnen. Sie können sich so auch die Ringe in der Figur auf dem Titelbild erklären. Hier sind 48 Eisenatome im Kreis auf einer Kupferoberfläche angeordnet. Sie sehen mit dem RTM aber nicht nur diese Atome, sondern auch ringförmige Maxima der Elektronendichte dazwischen. Eine stehende Welle der Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen!

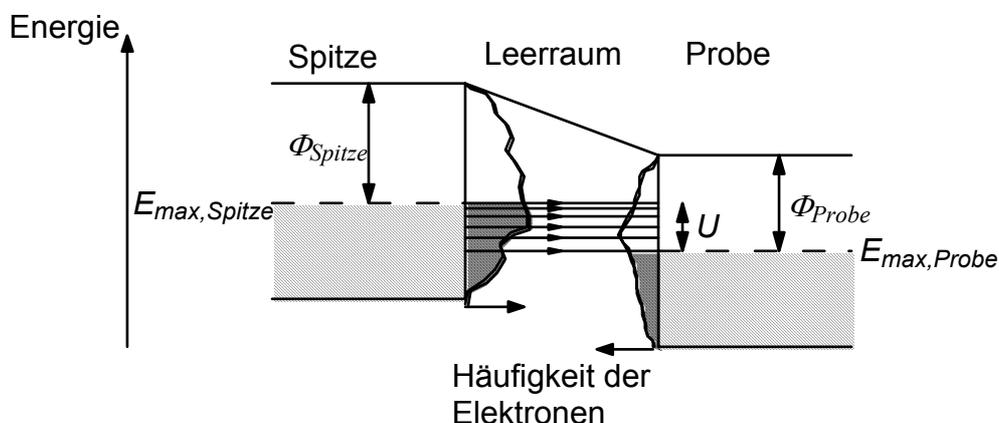


Aufgabe 4.2

Um welchen Faktor ändert sich der Tunnelstrom, wenn man über ein Atom auf der Oberfläche fährt? Setzen Sie $c_2 \approx \frac{10^{10}}{\sqrt{\text{eV} \cdot \text{m}}}$.

Wenn Sie es ganz genau wissen wollen (fakultativ):

Unsere Vorstellung von eingeschlossenen Elektronen mit einer bestimmten Energie ist natürlich eine Vereinfachung. In Wirklichkeit sind in Metallen Elektronen verschiedener Energien bis zu einer Maximalenergie vorhanden. Auch kommen manche Energien häufiger vor als andere. Eine mögliche solche Häufigkeitsverteilung in der Probe ist in Figur 1.4 dargestellt. Vorsicht! In der Zeichnung hat die x-Achse zweierlei Bedeutung. Zum einen bezeichnet sie den Ort der Elektronen (also Spitze, Zwischenraum und Probe). Zum anderen sind die kleinen Pfeile, die im Zwischenraum eingezeichnet sind, aber die y-Achsen der Häufigkeitsverteilung der Elektronen. Diese Häufigkeit ist darüber eingezeichnet. Sie sagt, wieviele Elektronen bei einer bestimmten Energie vorhanden sind. Im Metall sind nur Elektronen mit Energien bis zu einer Maximalenergie E_{max} vorhanden, also im Diagramm nur in den schraffierten Bereichen. Beim Tunneln ins andere Metall dürfen bei einer bestimmten Energie nur so viele Elektronen dazukommen, wie von der Häufigkeitsverteilung dieses Metalls erlaubt (unschraffierter Teil der Häufigkeitsverteilung). Das Tunneln der Elektronen bei einer bestimmten Energie ist in der Zeichnung durch Pfeile angedeutet.

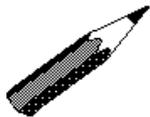


Figur 1.4: Der Tunnelstrom hängt von der Häufigkeitsverteilung der Elektronen im Metall ab

Wenn besonders viele Elektronen einer bestimmten Energie vorhanden sind und bei dieser Energie im anderen Metall besonders viele neue Elektronen erlaubt sind, ist auch der Tunnelstrom besonders gross. Die Konstante c_I in der Gleichung für den Tunnelstrom hängt demnach auch davon ab, wieviele Elektronen welche Energie besitzen dürfen. Wenn man die äussere Spannung verändert, kann man Informationen über diese Häufigkeitsverteilung der Elektronen in der Probe gewinnen. Es können Strukturen in der Elektronenhülle einzelner Atome sichtbar gemacht werden. Und daraus erfährt man wieder eine Menge über das untersuchte Material. Aus dieser Tatsache hat sich die Raster-Tunnelspektroskopie entwickelt.

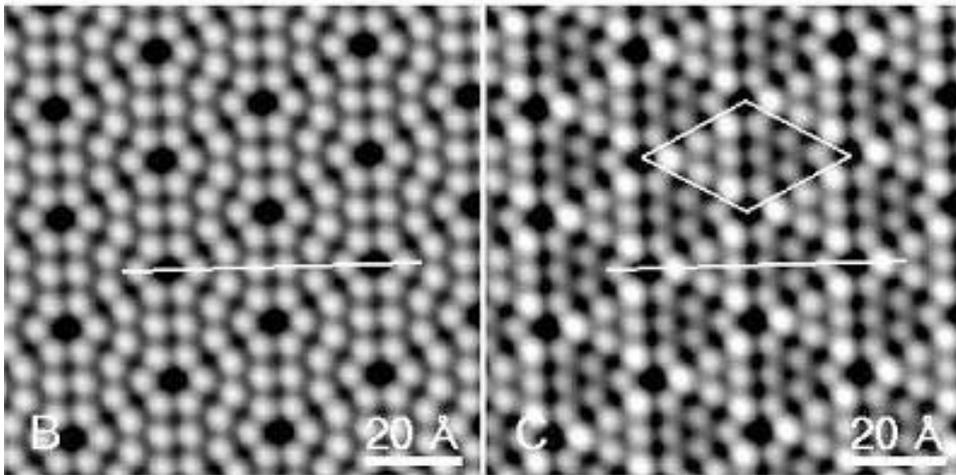
Was sieht man nun genau mit dem Tunnelmikroskop? (fakultativ)

Genau genommen sehen wir die Fläche konstanten Tunnelstroms. Der Tunnelstrom ist proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen im Festkörper und diese wiederum wird durch die Zustandsfunktion beschrieben. Was eine Zustandsfunktion ist und wie man diese mit Hilfe der Quantenmechanik berechnen kann, erfährst du in Kapitel 2. Der Tunnelstrom hängt nicht nur von der Probe ab, sondern auch von der Spitze. Wir „sehen“ nicht nur die Elektronen Verteilung auf der Probe sondern unser Bild wird auch von der elektronischen Zustandsverteilung der Spitze beeinflusst. Zur Erklärung moderner Experimente wird sogar die genaue Zustandsfunktion der Spitze berücksichtigt.



Aufgabe 1.3 (fakultativ)

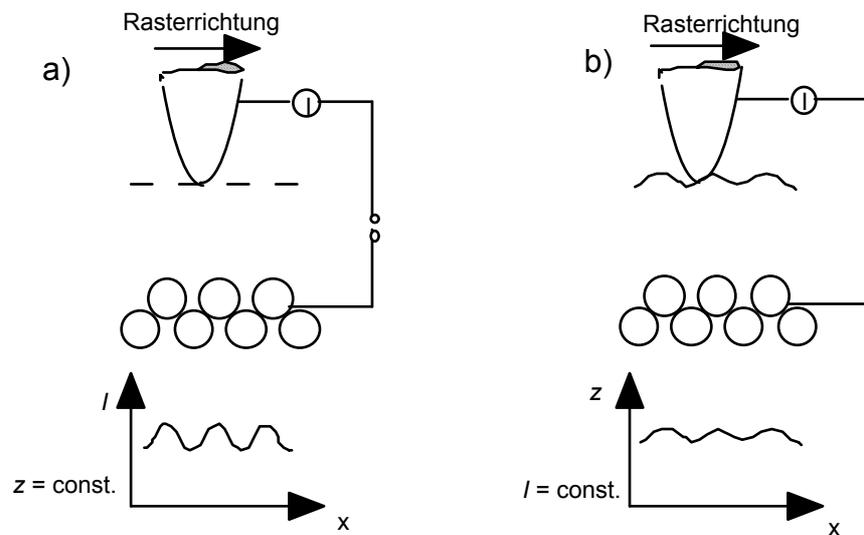
- Wenn man die gleiche Probe mit zwei verschiedenen Spitzen misst, unterscheiden sich die gewonnenen Tunnelaufnahmen. Wie erklären Sie sich das?
- Können Sie eine Bedingung für geeignetes Spitzenmaterial ableiten?
- Im Bild 1.5 sehen sie zwei Aufnahmen einer Silizium Oberfläche. Die linke ist bei einer Spitzen-Oberflächen Spannung von $-2V$, die rechte bei $+2.2V$ aufgenommen. Wie kann man die unterschiedlichen Aufnahmen interpretieren ? (welche Elektronen Zustände sieht man ?)



Figur 1.5: Tunnel Mikroskop Bilder einer Silizium-Oberfläche bei einer Spitzen-Proben Spannung von -2 V und $+2.2\text{ V}$.

Zwei Betriebszustände

Prinzipiell kann ein Raster-Tunnelmikroskop in zwei Betriebszuständen laufen:



Figur 1.5: Rastern bei a) konstanter Höhe und b) konstantem Strom

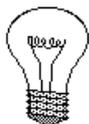
1. Rastern bei konstanter Höhe (Figur 1.5 a): Die Spitze wird auf einer geraden Linie über die Probe geführt. Dabei misst man den Tunnelstrom.
2. Rastern bei konstantem Strom (Figur 1.5 b): Die Spitze wird so der Oberfläche nachgeführt, dass der Tunnelstrom konstant bleibt. Dabei registriert man, wie stark man die Höhe der Spitze ändern muss.

Das *easyScan* rastert bei konstantem Strom. Es ist aber auch möglich, bei konstanter Höhe zu rastern. Dazu muss man den Regler langsamer einstellen. Er folgt dann nur noch langsamen Veränderungen, z. B. thermischen Ausdehnungen.



Aufgabe 1.4

Überlegen Sie sich für jeden Betriebszustand einen Vor- bzw. Nachteil und notieren Sie diese in je ein bis zwei Sätzen.

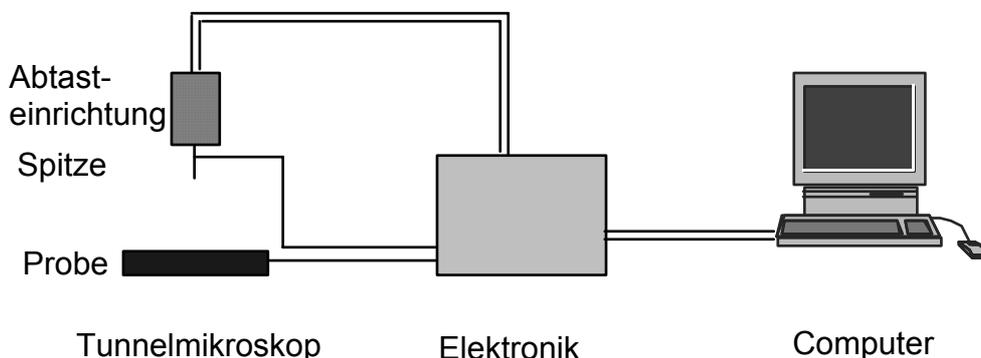


Wir fassen zusammen:

Mit dem Raster-Tunnelmikroskop kann man die Oberflächen leitender Proben im atomaren Bereich bildhaft darstellen. Man kann also Atome sichtbar machen! Der Tunnelstrom hängt dabei von der Elektronendichte und exponentiell vom Abstand zwischen Spitze und Probe ab. Je nach angelegter Spannung tunneln die Elektronen durch die Potentialbarriere zur Spitze oder zur Probe. Je nach Betriebsart hält man die Höhe über der Probe oder den Tunnelstrom konstant.

1.2 Der Aufbau des Raster-Tunnelmikroskops *easyScan*

Nachdem Sie jetzt die physikalischen Grundlagen des Raster-Tunnelmikroskops verstanden haben, sind Sie sicher gespannt, wie so ein Gerät in der Praxis funktioniert. Wir wollen das am Beispiel des RTM *easyScan* von Nanosurf erklären. Dabei werden wir experimentellen Schwierigkeiten begegnen und sehen, wie diese gelöst wurden.



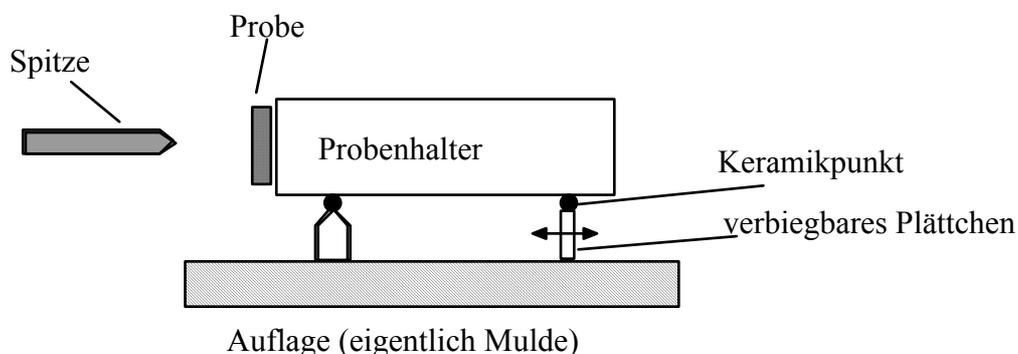
Figur 1.6: Schematischer Aufbau des *easyScan*

Das *easyScan* besteht aus drei Teilen: dem Tunnelmikroskop selbst, der elektronischen Ansteuerung und einem Computer (Figur 1.6). Das eigentliche RTM ist ein kleines Gerät, das man leicht in einer Hand halten kann und das etwa ein Kilogramm wiegt. Sein Herzstück

enthält die Spitze und die Probe auf einem kleinen Metallzylinder. Als Spitze verwendet man ein speziell abgeschnittenes Stück eines Platiniridiumdrahtes. Den Zylinder mit der Probe kann man zunächst von Hand in die Nähe der Spitze bringen. Wie aber kann man jetzt die Probe so kontrolliert an die Spitze annähern, dass sie im richtigen Abstand anhält, ohne dass die Spitze in die Probe gerammt wird?

Grobe Abstandseinstellung

Wir haben also das Problem, dass wir einen relativ grossen Weg in vielen sehr kleinen Wegstücken zurücklegen wollen. Beim *easyScan* wurde das Problem folgendermassen gelöst: Der Metallzylinder mit der Probe liegt in einer Mulde, in der er magnetisch festgehalten wird. Dabei liegt sein hinteres Ende auf zwei Keramikpunkten, die auf einem senkrecht stehenden Plättchen angebracht sind (siehe Figur 1.7, Die Grössenverhältnisse sind übertrieben!). Dieses Plättchen verbiegt sich, wenn man eine Spannung anlegt (ein Piezoelement, siehe nächster Abschnitt). Jetzt legt man eine Sägezahnspannung an. Die Spannung steigt also langsam linear an. Dabei verbiegt sich das Plättchen und der Probenzylinder darauf wird nach vorne geschoben. Wenn die Spannung ihren Maximalwert erreicht hat, fällt sie sehr schnell wieder auf ihren Anfangswert zurück. Dadurch klappt das Plättchen ruckartig wieder in seine Anfangsposition. Diese Bewegung ist aber zu schnell für den daraufliegenden Probenzylinder. Er wird nicht wieder mit zurückbewegt, sondern bleibt ein Stückchen näher an der Spitze liegen. Mit diesem "Reibungsmotor" kann der Probenzylinder also Mikrometer für Mikrometer an die Spitze herangeschoben werden. Sobald die Elektronik jedoch einen Tunnelstrom im Nanoamperebereich feststellt, wird dieser Annäherungsvorgang abgebrochen. Spitze und Probe haben jetzt den richtigen Abstand voneinander und die Messung kann beginnen.



Figur 1.7: Der Reibungsmotor schiebt den Probenhalter zur Spitze



Aufgabe 1.5

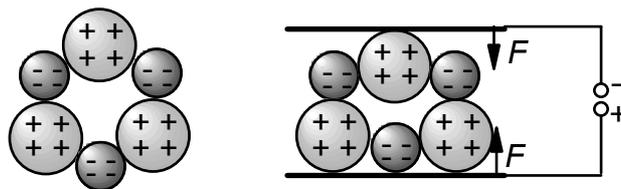
a) Erklären Sie, warum der Zylinder bei der langsamen, nicht aber bei der schnellen Bewegung mitgeschoben wird. Denken Sie daran, dass die beschleunigende Kraft von der Haftreibung aufgebracht werden muss.

b) Verdeutlichen Sie sich den Vorgang, indem Sie einen kleinen Gegenstand (z.B. Kugelschreiber) auf einem Blatt Papier entlang bewegen wie den Probenzylinder auf der Unterlage. Halten Sie Ihre Beobachtungen in drei bis vier Sätzen fest.

Piezoelemente ermöglichen atomare Auflösung

Die vielleicht schwierigste Frage bei der Entwicklung des Raster-Tunnelmikroskops war diese: Wie ist es möglich, mit einer Spitze so über eine Oberfläche zu fahren, dass man dabei eine Genauigkeit von weniger als 10^{-11} m erreicht? Mit anderen Worten: Wie bewegt man eine makroskopische Apparatur in Schrittweiten, die kleiner als ein Atomdurchmesser sind? Dazu kommt, dass man diese Genauigkeit in drei Dimensionen braucht! Das Werkzeug für so feine Bewegungen sind die sogenannten Piezoelemente. Ohne leistungsfähige Piezoelemente wäre das Raster-Tunnelmikroskop nicht möglich! Wie oft in der Physik hat eine Erfindung eine andere erst ermöglicht.

Wir wollen an dieser Stelle kurz den piezoelektrischen Effekt erläutern, weil er die Grundlage für die Piezoelemente ist. Wenn Sie damit schon vertraut sind, können sie diesen Absatz getrost überspringen. Der piezoelektrische Effekt wurde 1880 von Pierre Curie entdeckt. Bei einigen Kristallen, wie z.B. Quarz oder Bariumtitanat, kann man durch mechanische Kräfte auf gegenüberliegende Seiten des Kristalls eine elektrische Spannung erzeugen. Druck auf diese Flächen bewirkt nämlich eine Ladungsverschiebung im Kristall. Entgegengesetzte Ladungen sammeln sich so an den gegenüberliegenden Kristallflächen.



Figur 1.8: Piezokristalle (z.B. Quarz: Si positiv, O negativ) erzeugen beim Anlegen einer Spannung eine deformierende Kraft F .

Auch die Umkehrung dieses Effektes ist möglich (Figur 1.8). Ein elektrisches Feld kann einen Piezokristall verformen, also auseinanderziehen oder zusammendrücken. Die Längenänderung ist angenähert linear mit der angelegten Spannung. Piezoelemente verwenden diesen inversen piezoelektrischen Effekt. Um sie zu charakterisieren, benutzt man den Begriff der Konversion. Man bezeichnet damit das Verhältnis von angelegter Spannung zu erreichter Verlängerung des Kristalls. Typische Konversionen sind $\frac{\Delta U}{\Delta h} = \frac{100 \text{ V}}{1 \mu\text{m}}$. (Beim easyScan sind es $24 \text{ V}/\mu\text{m}$). Die sehr geringen Längenänderungen können zur genauen Positionierung im Raster-Tunnelmikroskop verwendet werden. Als Ergebnis ist die vertikale Auflösung nur durch mechanische und elektrische Störungen begrenzt. Es wurden bereits Werte von $5 \cdot 10^{-12}$ m erreicht. Die horizontale Auflösung liegt für eine einatomige Spitze bei $2 \cdot 10^{-11}$ m.



Aufgabe 1.6

- a) Ist es möglich, mit der obengenannten Konversion der Piezoelemente eine Verschiebungsgenauigkeit von einer Atomlage zu erreichen?

- b) Wie würden Sie die minimale und maximale Spannung der Steuerlektronik bemessen, wenn Sie eine quadratische Probe von 350 nm Seitenlänge untersuchen wollten?

Schwingungsdämpfung

Die Piezoelemente ermöglichen uns eine sehr genaue Positionierung von Probe und Spitze und erlauben damit das Abtasten der Probe. Um diese Genauigkeit aber auch einhalten zu können, muss man ein weiteres Problem in den Griff kriegen, nämlich die mechanischen Erschütterungen. Durch Schritte im Gebäude oder Schall in der Luft können Spitze und Probe viel stärker gegeneinander bewegt werden als durch die Piezoelemente. Das RTM muss deshalb einen Mechanismus zur Dämpfung solcher Schwingungen besitzen. Die ersten Tunnelmikroskope hatten dazu ausgeklügelte Dämpfungssysteme. Mittlerweile wurden einfachere und trotzdem leistungsfähige Methoden entwickelt. Das *easyScan* ist ein gutes Beispiel dafür. Es steht auf einer weichen Gummimatte, die auf einer zwei Kilogramm schweren Granitplatte mit Füßen aus Schaumstoff steht. Die Gummimatte dämpft hochfrequente Schwingungen, während die Füße aus Schaumstoff vor niederfrequenten Schwingungen schützen. Diese einfache Schwingungsdämpfung reicht zusammen mit der starren Konstruktion des Scanners aus, um atomare Auflösung zu erreichen.



Wir fassen zusammen:

Nachdem ein Motor unter Ausnutzung der Reibung Probe und Spitze angenähert hat, übernehmen Piezoelemente die Positionierung.

Piezoelemente können sich durch eine angelegte Spannung verformen. Die vertikale Auflösung ist durch mechanische und elektrische Störungen begrenzt, die horizontale Auflösung durch die Ausdehnung des Spitzenatoms.

Für eine gute Auflösung des RTM ist die Dämpfung von Schwingungen notwendig.

1.3 Probenoberflächen

“Das Volumen des Festkörpers schuf Gott, seine Oberfläche wurde vom Teufel gemacht.” sagte einmal Wolfgang Pauli. Was hat den berühmten Physiker zu so einer Aussage veranlasst? Im wesentlichen sind es drei Gründe, die die Oberfläche so schwierig machen: Teilchenzahl, Sauberkeit und Anordnung der Oberflächenatome.

1. Teilchenzahl

Die Menge der Atome, die an der Oberfläche sitzen, ist sehr viel kleiner als die im Volumen. Eine einfache Abschätzung zeigt das. Während in einem Kubikzentimeter Volumen etwa 10^{23} Atome ($\approx 10^{-1}$ mol) enthalten sind, sind in einem Quadratzentimeter Oberfläche nur etwa 10^{15} Atome ($\approx 10^{-9}$ mol). Daher erhält man mit vielen Analysemethoden praktisch nur Informationen über die Teilchen im Volumen.

2. Sauberkeit

Um Oberflächen zu studieren, müssen wir sie sauber und rein halten. Bei Atmosphärendruck treffen aber in jeder Sekunde 10^{23} Gasteilchen auf einen Zentimeter der Oberfläche. Jedes Atom wird also pro Sekunde etwa 10^8 mal getroffen. Auch wenn nur ein kleiner Bruchteil dieser Teilchen auf der Oberfläche haften bleibt, so ist doch die Zeitspanne, während der die frisch gereinigte Oberfläche sauber bleibt, sehr kurz.

3. Anordnung der Atome

Ein Atom im Volumen der Festkörpers ist ganz von anderen Atomen umgeben, ein Atom an der Oberfläche dagegen nur von anderen Oberflächenatomen und den Atomen gerade unter der Oberfläche. Die Oberflächenatome können sich deshalb zum Teil ganz anders anordnen als die Atome im Inneren. Die Eigenschaften der Oberfläche können sich deshalb sehr stark von denen des Volumens des Körpers unterscheiden.

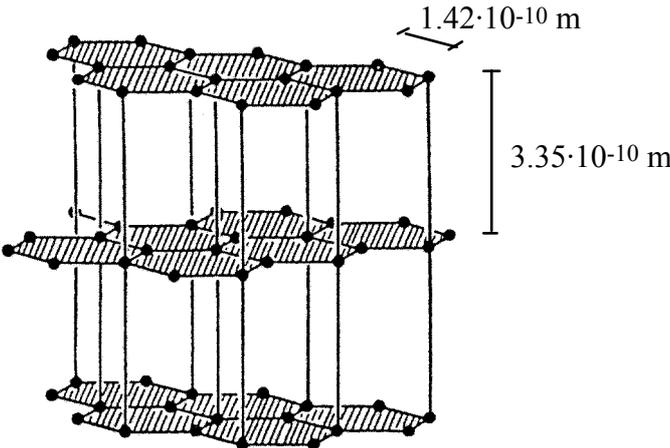
Diese Gründe sind dafür verantwortlich, dass wir viel weniger über die Oberfläche des Festkörpers wissen, als über sein Inneres. Und das, obwohl die Oberfläche von immenser Bedeutung ist: Die meisten chemischen Reaktionen laufen an Oberflächen ab (Denken Sie nur an Katalyse und Korrosion!), biologische Vorgänge spielen sich oft in Bereichen mit grosser Oberfläche ab (etwa in Gehirn, Magenschleimhaut oder Haut) und die Oberfläche ist bei vielen technischen Anwendungen wichtig (z.B. Reibung, Verkleben, Sensoren usw.). In den letzten Jahren wurde deshalb sehr viel auf diesem Gebiet geforscht. Wie Sie sich sicher vorstellen können, war es ein grosser Durchbruch, als man die Oberflächenatome mit dem Raster-Tunnelmikroskop endlich “sehen” konnte.

Proben, die man gut mit dem *easyScan* untersuchen kann

Bevor Sie die Proben mit dem *easyScan* untersuchen werden, wollen wir Sie mit ihrer Struktur vertraut machen und überlegen, was wohl mit dem Tunnelmikroskop abgebildet wird. Dabei beschränken wir uns auf zwei Proben, nämlich Graphit und Gold.

A) Graphit

Graphit ist – wie auch Diamant– eine der Erscheinungsformen des Kohlenstoffes. Wie Figur 1.9 zeigt, ist er aus ebenen Schichten aufgebaut, in denen regelmässige Sechsecke aus Kohlenstoffatomen in der Art einer Bienenwabe verknüpft sind.

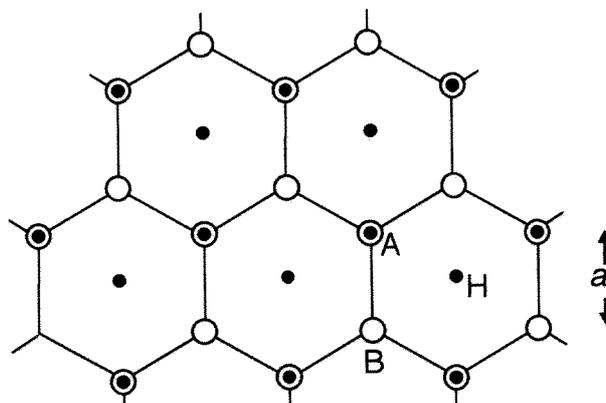


Figur 1.9: Schichtgitter beim Graphit

Die Netzebenen sind nur locker durch eine schwächere Bindung miteinander verknüpft, was zu einem sogenannten Schichtgitter führt. Der kürzeste Abstand zwischen Kohlenstoffatomen aus zwei benachbarten Schichten beträgt $3.35 \cdot 10^{-10}$ m, während miteinander verbundene Atome innerhalb einer Schicht nur $1.42 \cdot 10^{-10}$ m weit voneinander entfernt sind. Die Gitterkonstante des Graphits kann zum Beispiel durch Elektronenbeugung bestimmt werden (Kann man Atome sehen? p.37). Die lockere Bindung der Netzebenen untereinander hat einen grossen Vorteil für uns. Sie erlaubt uns nämlich direkt vor einer RTM-Aufnahme eine saubere, sehr ebene Oberfläche herzustellen. Dazu müssen Sie den Kristall nur zwischen zwei Netzebenen spalten! Sie können dafür einen Klebstreifen auf die Oberfläche kleben und zusammen mit den obersten Schichten wieder abziehen.

Schön, werden Sie sagen, dann sehen wir also mit dem Tunnelmikroskop die Kohlenstoffsechsecke in der obersten Netzebene. Leider ist es nicht ganz so einfach. Sie können nämlich nur jedes zweite Kohlenstoffatom abbilden. Aber wo sind die fehlenden Atome? Sehen Sie sich die Graphitoberfläche doch noch einmal genauer an, diesmal in der Draufsicht (Figur 1.10). Sie stellen fest, dass die Netzebenen leicht versetzt übereinander angeordnet sind. Deshalb hat nur die Hälfte aller Atome einen direkten Nachbarn in der zweiten Netzebene. Wir bezeichnen diese Atome mit A. Die andere Hälfte der Atome (B-Atome) hat gerade die Mitte eines Kohlenstoffsechsecks unter sich. Den Punkt im Zentrum des Sechsecks in der obersten Schicht nennen wir H.

Sie sehen also: Es sind nicht alle Atome gleich. Dadurch, dass sie sich in ihren Nachbarn unterscheiden, haben sie auch unterschiedliche Ladungsdichten. Jetzt wird wichtig, was wir weiter oben erwähnt haben: Der Tunnelstrom hängt von der Elektronendichte ab. Die Ladungsdichte ist über den H-Punkten am geringsten und über B-Atomen am grössten. Bei A-Atomen liegt sie aufgrund der Bindung zu den Atomen der zweiten Schicht dazwischen. Daher kann man diese Atome in der RTM-Aufnahme nicht sehen.



Figur 1.10: Graphit in der Draufsicht. Leere Kreise sind Atome der obersten Netzebene, ausgefüllte Punkte Atome der zweiten Netzebene. Der kürzeste Abstand a zwischen zwei Atomen beträgt $1.42 \cdot 10^{-10}$ m.

Wie erwähnt können sich Oberflächenatome manchmal anders anordnen als die Atome im Inneren des Festkörpers. Beim Graphit verschiebt sich manchmal die oberste Netzebene um einen halben Atomabstand, also in Figur 1.10 um $a/2$ nach oben. Das führt dann dazu, dass das RTM-Bild leicht verzogen aussieht mit seitlich abgeplatteten Atomen.

B) Gold

Die Variationen in der Ladungsdichte sind beim Graphit besonders gross. Daher ist es besonders einfach, Atome abzubilden. Gold hat eine viel gleichmässige Elektronenstruktur. Das hängt damit zusammen, dass die Leitungselektronen in einem Metall frei beweglich sind. Dazu kommt, dass Gold nicht so einfach zu reinigen ist wie Graphit und an Luft immer mindestens eine Atomlage Verunreinigungen auf der Oberfläche hat. Um Goldatome auflösen zu können, macht man deshalb Tunnelmikroskopaufnahmen im Vakuum. Dafür kann man aber am Gold verschiedene mögliche Anordnungen von Atomen an der Oberfläche studieren. Eine ideale glatte Oberfläche wie beim Graphit ist nämlich selten. Beim Gold kommen glatte Oberflächen nur in kleineren Bereichen vor. Diese Terrassen sind von breiten Stufen von manchmal nur einer Atomlage Höhe getrennt. Man findet auch Eckatome an solchen Stufen. Ausserdem treten kleinere "Fehler" an der Oberfläche auf: einzelne oder mehrere zusätzliche Atome auf einer Terrasse, fehlende Atome und kleine Verrückungen. Beachten Sie bitte, dass man die Goldoberfläche nicht mit einem Klebestreifen abziehen darf, da sonst die Goldprobe zerstört wird.

C) Andere Materialien

Natürlich lassen sich auch andere Materialien mit dem Tunnelmikroskop untersuchen. Die Firma Nanosurf bietet z.B. auch noch eine MoS₂ Probe an, aber auch leere Halter um eigene Proben zu untersuchen. Die wichtigste Einschränkung ist natürlich die Leitfähigkeit der Probe. Um isolierende Materialien untersuchen zu können, muss man diese mit einem elektrischleitenden Material bedampfen. Allerdings wird dadurch die Oberfläche verändert und die genaue Untersuchung der Oberfläche ist ja der Vorteil des Tunnelmikroskops.



Wir fassen zusammen:

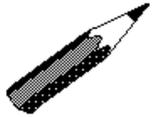
Beim Graphit sieht man nur diejenigen Atome mit dem RTM, die kein Atom in der zweiten Netzebene unter sich haben. Sie können die Goldatome an Luft nicht auflösen. Dafür sind grössere Strukturen sichtbar, vor allem Stufen. Proben, die man mit dem Tunnelmikroskop untersuchen will, müssen elektrisch leitend sein.

1.4 Ergänzungen: Verwandte des Raster-Tunnelmikroskops, Vertiefungen

Die vorhergehenden Abschnitte haben Sie darauf vorbereitet, selbst Tunnelaufnahmen zu machen. Wir hoffen, dass wir dabei Ihr Interesse für die bildhafte Darstellung der Welt der Atome wecken konnten. Falls dies so ist und Sie immer noch mehr über diese Thematik wissen möchten, finden Sie hier einige Vorschläge zur Vertiefung.

Dabei möchten wir Sie ganz besonders dazu einladen, das Raster-Kraftmikroskop (Aufgabe 1.7) kennenzulernen. Während das Tunnelmikroskop auf den Tunnelstrom und damit auf

leitende Proben angewiesen ist, kann das Kraftmikroskop auch Isolatoren untersuchen. Bei diesem Mikroskop drückt die feine Spitze direkt auf die Oberfläche. Man hält also nicht den Strom, sondern die Andruckkraft konstant. Die Auslenkungen der Spitze werden von einem Laserstrahl registriert, der auf der Rückseite der Spitze reflektiert wird. Mit der Spitze des Raster-Kraftmikroskops kann man sogar einzelne Moleküle auf der Oberfläche verschieben und so molekulare Landschaften bauen. In den vorgeschlagenen Artikeln werden auch noch andere Folgeentwicklungen des RTM erklärt.

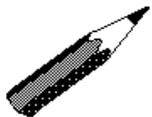


Aufgabe 1.7: Raster-Kraftmikroskop

Das Raster-Kraftmikroskop ist eine Weiterentwicklung des Raster-Tunnelmikroskops.

a) Lesen Sie die drei Artikel über das Raster-Kraftmikroskop (Atomic Force Microscope, Abstossungskraft-Mikroskop), die für Sie bereitstehen (Wickramasinghe 89 (nur S. 62 bis S.65), Neubert 88, Fricke 90). Beschreiben Sie die Funktionsweise des Raster-Kraftmikroskops auf ein bis zwei Seiten.

b) Nennen Sie je einen Vor- und Nachteil des Raster-Kraftmikroskops gegenüber dem Raster-Tunnelmikroskop.



Aufgabe 1.8: Nanosurf im Internet

Zusätzliche Informationen über das *easyScan*-RTM und einige Tunnelaufnahmen finden Sie auf der "Website" von Nanosurf (www.nanosurf.ch). Notieren Sie sich stichwortartig, was für Sie neu ist.

Möchten Sie am liebsten ein Tunnelmikroskop selber bauen? Dann finden Sie eine Bauanleitung unter: <http://sxm4.uni-muenster.de/introduction-de.html>

Lernkontrolle

Haben Sie alles verstanden? Hier können Sie es überprüfen.



Aufgabe 1.11

Hat das Rasterprinzip mit Quantenmechanik zu tun?



Aufgabe 1.12

Was hat der Tunneleffekt mit dem Raster-Tunnelmikroskop zu tun? Stellen Sie in etwa fünf Sätzen einen Zusammenhang her.



Aufgabe 1.13

Was bestimmt die Grenzen des Auflösungsvermögens beim Raster-Tunnelmikroskop?



Aufgabe 1.14

Nennen Sie drei Schwierigkeiten bei der technischen Verwirklichung des Tunnelmikroskops. Wie wurden sie gelöst? Stichworte genügen!



Aufgabe 1.15

Was ist ein Piezoelement und wozu braucht man es beim Raster-Tunnelmikroskop?



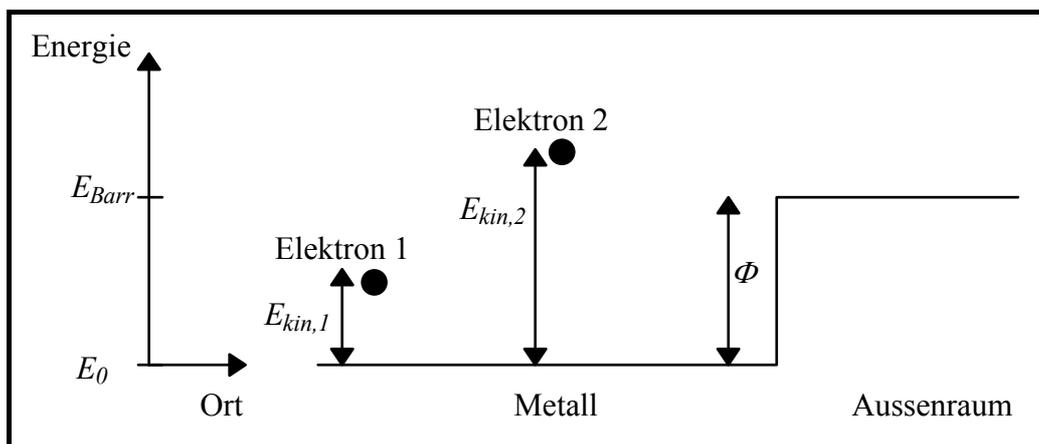
Aufgabe 1.16

- a) Begründen Sie in drei Sätzen, warum man bei der Tunnelaufnahme einer Graphitoberfläche nur die Hälfte der Atome sieht.
- b) Sieht die Tunnelaufnahme von Gold genauso aus? Begründung!

Lösungen zu den Aufgaben

Lösung 1.1

a) Im Diagramm ist die Austrittsarbeit Φ eingezeichnet. Sie entspricht der Differenz zwischen E_{Barr} und E_0 , also $\Phi = E_{\text{Barr}} - E_0$.



b) Das Elektron 1 in einem Metall bei Raumtemperatur besitzt eine kinetische Energie $E_{\text{kin},1} < \Phi$, das Elektron 2 in einem glühenden Metall dagegen hat $E_{\text{kin},2} > \Phi$. Elektron 1 hat also zu wenig Energie, um die Potentialbarriere zu überwinden, und bleibt deshalb nach den Regeln der klassischen Physik im Metall gefangen. Elektron 2 dagegen kann einen Teil seiner kinetischen Energie in die Austrittsarbeit umwandeln und das Metall verlassen. Nach Verlassen des Metall beträgt seine kinetische Energie nur noch $E_{\text{kin},2, \text{nachher}} = E_{\text{kin},2, \text{vorher}} - \Phi$.

Lösung 1.2

Der Radius eines Atoms ist etwa $1 \cdot 10^{-10}$ m. Damit ergibt sich für das Verhältnis des Tunnelstroms auf dem Atom ($I_{T,1}$) zum Strom vor dem Atom ($I_{T,2}$):

$$\frac{I_{T,1}}{I_{T,2}} = \frac{c_1 U_T e^{-c_2 \sqrt{\Phi} d_1}}{c_1 U_T e^{-c_2 \sqrt{\Phi} d_2}} = e^{-c_2 \sqrt{\Phi} [(d_2 - d_1)]} \approx e^{\frac{10^{10}}{\sqrt{\text{eV} \cdot \text{m}}} \cdot \sqrt{5 \text{eV}} \cdot 10^{-10} \text{m}} \approx e^{2.2} \approx 9$$

Der Tunnelstrom ändert sich also um fast eine Grössenordnung.

Lösung 1.3

a) Der Tunnelstrom hängt auch von der Häufigkeitsverteilung der Elektronenenergien im Spitzenmaterial ab. Unterschiedliche Spitzen können deshalb unterschiedliche Bilder erzeugen.

b) Das Material der Spitze sollte also eine möglichst konstante Verteilung besitzen, d.h. keine ausgeprägten Strukturen in der Atomhülle besitzen.

c) Bei einer Spannung von -2 V zwischen Spitze und Oberfläche tunneln die Elektronen von der Oberfläche zur Spitze. Im wesentlichen sieht man dann die Besetzten Zustände der Oberfläche. Bei einer Spannung von $+2.2\text{ V}$ tunneln die Elektronen von der Spitze in die Oberfläche. Der Tunnelstrom wird somit hauptsächlich durch die freien Zustände in der Oberfläche bestimmt.

Lösung 1.4

Rastern bei konstanter Höhe hat den Vorteil, dass man sehr schnell ein Bild bekommt (eine Sekunde oder schneller pro Bild). Um bei konstantem Strom zu rastern, muss die Spitze der Oberfläche nachgeführt werden, was viel länger dauert (typisch: einige Minuten pro Bild).

Man kann allerdings nur bei konstanter Höhe rastern, wenn die Probe sehr eben ist. Daher wird bei den meisten Anwendungen bei konstantem Strom gerastert, so auch beim *easyScan*.

Lösung 1.5

Beim langsamen Anstieg der Spannung wird die Unterlage langsam beschleunigt. Damit der Zylinder mitbeschleunigt wird, muss die beschleunigende Kraft auf ihn von der Haftreibungskraft aufgebracht werden ($F_{\text{beschl}} = m_{\text{Zylinder}} \cdot a = F_{\text{Haft}} \leq \mu_{\text{Haft}} \cdot F_{\text{N}}$).

Beim schnellen Abfall der Spannung (grosse Beschleunigung, d.h. grosse beschleunigende Kraft) reicht die Haftreibungskraft nicht zur Beschleunigung aus. Sie erreicht nämlich höchstens den Wert von Haftreibungskoeffizient mal Normalkraft. Die Unterlage gleitet unter dem Zylinder durch, wobei die Gleitreibungskraft wirkt. Diese ist allerdings viel kleiner als die Haftreibungskraft und kann den Zylinder nur wenig beschleunigen.

Lösung 1.6

Die Konversion beträgt $\frac{\Delta U}{\Delta h} = \frac{120\text{ V}}{1\ \mu\text{m}} = 1.2 \cdot 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}}$.

a) Eine Atomlage beträgt typischerweise $1 \cdot 10^{-10}\text{ m}$.

Nötige Spannung: $\Delta U = \Delta h \cdot 1.2 \cdot 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}} = 10^{-10} \cdot 1.2 \cdot 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}} = 12\text{ mV}$

Diese Spannung ist noch gut regulierbar. Die verlangte Genauigkeit kann erreicht werden.

b) $U = 350 \cdot 10^{-9}\text{ m} \cdot 1.2 \cdot 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}} = 42\text{ mV}$

Es wird also vom Zentrum ausgehend eine Spannung von $\pm 21\text{ mV}$ benötigt.

Lösung 1.11

Das Rasterprinzip hat natürlich nichts mit Quantenmechanik zu tun. Es wird zum Beispiel auch beim Fernsehen benützt.

Lösung 1.12

Der Leerraum zwischen Mikroskopspitze und Probe wäre klassisch verboten. Nach der Quantenmechanik können Elektronen dieses Gebiet aber durchtunneln. Bei Anlegen einer Spannung fliesst ein Tunnelstrom, der exponentiell vom Abstand zwischen Spitze und Probe abhängt. Sehr kleine Abstandsänderungen (in der Grössenordnung von Teilen des Atomdurchmessers) geben zu grossen Stromänderungen Anlass. Misst man diese Änderungen während man die Oberfläche abrastert, dann kann man Atome bildhaft darstellen. Das ist das Grundprinzip der RTM.

Lösung 1.13

Die vertikale Auflösung, also die Genauigkeit mit der man Höhenänderungen feststellen kann, ist nur begrenzt durch elektrische und mechanische Störungen, wie zum Beispiel Rauschen in der Elektronik oder Erschütterungen. Die horizontale Auflösung, also die maximale Breite einer Struktur, die man noch sehen kann, hängt von der Ausdehnung des Spitzeatoms, also von der Breite dieses Atoms ab.

Lösung 1.14

kontrollierte Annäherung der Spitze über relativ weite Wege in sehr kleinen Wegstückchen -> Lösung: Reibungsmotor

Abstandsänderungen, die kleiner als der Atomdurchmesser sind -> Lösung: Piezoelemente

Beeinträchtigung der Auflösung durch Schwingungen -> Lösung: Schwingungsdämpfung, z.B. durch Gummimatte und Füsse aus Schaumstoff am Gerät

Lösung 1.15

Ein Piezoelement ist ein Kristall, der sich durch Anlegen einer Spannung verformt, weil sich die Ladungen im Kristall gegeneinander verschieben. Die Längenänderung ist ungefähr proportional zur angelegten Spannung. Es sind winzige Längenänderungen (kleiner als der Atomdurchmesser) möglich. Man verwendet die Piezoelemente zur genauen Positionierung der Spitze des Raster-Tunnelmikroskops.

Lösung 1.16

a) Die Netzebenen des Graphit sind so gegeneinander verschoben, dass nur die Hälfte der Atome direkte Nachbarn in der nächsten Ebene hat. Diese Atome haben eine geringere Ladungsdichte. Da der Tunnelstrom von der Elektronendichte abhängt, sieht man nur die Atome ohne nächste Nachbarn.

b) Nein, Gold hat eine andere Struktur. An Luft sieht man mit dem RTM grössere Strukturen, vor allem Stufen.

Die Zustandsfunktion

Übersicht	24
Vorgehen	24
2.1 Präludium - Experimente mit Licht geben Rätsel auf	25
Lernziele von Kapitel 2	27
2.2 Differentialgleichungen - ein intuitiver Zugang	28
2.3 Die Schrödingergleichung bestimmt die Zustandsfunktion	31
2.4 Quantisierung der Energie	37
2.5 Die Rolle des Drehimpulses	42
2.6 Elektronen im Festkörper	46
Lösungen zu den Aufgaben	51

Übersicht

Hier werden die theoretischen Grundlagen des Tunnelmikroskops behandelt. Dieses Kapitel ist anspruchsvoll. Dies liegt daran, dass die bis anhin diffusen Begriffe von Quantenobjekt, Wellen und Wahrscheinlichkeiten in einen mathematisch-physikalischen Rahmen gesetzt und dadurch klarer werden sollen: Zentral ist die Schrödingergleichung. Sie wird in 2.3 eingeführt. Um sie zu verstehen, müssen Sie vorgängig in Abschnitt 2.2 noch ein bisschen Mathematik hinzulernen oder repetieren (Stichwort Differentialgleichungen). Damit verschaffen Sie sich Zugang zur eigentlichen *Quantenmechanik* (2.4 – 2.5) und knüpfen in 2.6 die Verbindung zu Festkörpern. Im Additum 2 wird dann näher auf Atomspektren eingegangen und die Verbindung zur Chemie hergestellt.

Vorgehen

Beginnen Sie mit den Phänomenen im experimentellen Teil. Studieren Sie dann die Lernziele. Falls Sie einfache Differentialgleichungen schon lösen können, überfliegen Sie das Kapitel 2.2 nur kurz. Für verschiedene Aufgaben benötigen Sie einen grafikfähigen Taschenrechner oder einen Computer, auf welchem Sie Mathematikprogramme laufen und die Resultate zeichnen lassen können. - Viel Vergnügen!

2.1 Präludium -

Experimente mit Licht geben Rätsel auf

Wenn wir mit Licht einer bestimmten Wellenlänge auf eine wässrige Lösung einstrahlen, so erwarten wir, dass das Licht mit derselben Wellenlänge wieder austritt. Es erscheint uns auf den ersten Blick unnatürlich, wenn wir z.B. mit blauem Licht hineinstrahlen und rotes Licht herauskommt. Trotzdem kennen Sie wahrscheinlich solche Beispiele: Vielleicht erinnern Sie sich an einen Disco-Besuch oder an eine Zirkusvorstellung, wo mit sogenanntem "Schwarzlicht" - das unsere Augen nicht wahrnehmen kann - phantastische Farbeffekte hervorgezaubert werden. Das gleiche Phänomen wird auch in Mineraliensammlungen benützt: Beleuchtet man einen Fluorit-Kristall mit UV-Licht, so leuchtet er. Das lieferte auch den Namen "Fluoreszenz".

Dies ist eine der vielen Überraschungen, die die Natur bereithält und die Quantenphysik erklärt. Ein kleines Experiment soll Ihnen dies zeigen. Lesen Sie zuerst, worum es geht, dann führen Sie das Experiment durch:



Experiment 2.1: Zur Fluoreszenz

Im Nebenzimmer finden Sie drei Lösungen in Reagenzgläsern. Löschen Sie das Licht. Wenn Sie nun die Gläser unter die UV-Lampe halten, beginnen diese Lösungen zu leuchten. - Welche Farben sehen Sie?

Bestrahlen Sie nun die Proben mit der weissen Lampe oder mit einer UV-Lampe einer anderer Wellenlänge und mit einer IR-Lampe. - Was stellen Sie jetzt fest ?

In allen Fällen - ausser mit der IR-Lampe - leuchteten die bestrahlten Lösungen unabhängig vom einfallenden Licht in der jeweils gleichen Farbe. Offenbar wird von jeder Flüssigkeit nur Licht mit bestimmten Wellenlängen ausgesandt. Diese *Wellenlängen* sind von Stoff zu Stoff verschieden. Mit der IR-Lampe nun werden die Lösungen mit langwelligem Licht bestrahlt. Dieses scheint nicht auszureichen, um den Stoff zum Fluoreszieren anzuregen. Doch warum leuchtet in diesem Fall die Lösung nicht einfach schwächer?

Sie wissen, dass einem Photon der Wellenlänge λ die Energie E zugeordnet wird: $E = hc/\lambda$. Ein Photon mit einer Wellenlänge im UV-Bereich ist kurzwellig und besitzt somit eine grosse Energie. Licht aus derartigen Photonen kann das Auge nicht wahrnehmen. Aber Sie sehen ja, wie die Lösung unter der UV-Lampe leuchtet! Also muss doch das kurzwellige UV-Photon in der Lösung so umgewandelt werden, dass ein Photon mit sichtbarer Wellenlänge die Lösung verlässt. Energetisch gesprochen: Die grosse *Energie E des einfallenden Photons* wird durch ein Atom oder Molekül der Lösung in einzelne Portionen umgewandelt $E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots$

Diese kleineren Energien werden als neue Photonen wieder ausgesandt, wobei mindestens eine Energieportion, z.B. E_1 , einem Photon mit sichtbarer Wellenlänge entspricht. Die anderen liegen im infraroten Bereich. Da die Farbe der fluoreszierenden Lösung unabhängig von der Energie des UV-Photons und jede Farbe einer bestimmten Energie zugehörig ist, muss also wenigstens die Portion E_1 für das sichtbare Photon in jeder Umwandlung vorhanden sein.

Mit diesen Überlegungen fällt es leicht zu erklären, weshalb einfallendes IR-Licht kein Leuchten erzeugt: Ein IR-Photon besitzt schlichtwegs zuwenig Energie, die in Portionen zerlegt werden könnte, von denen dann eine ein sichtbares Photon erzeugt. Doch das Rätsel

bleibt: Wie zerlegt ein Atom oder Molekül die Energie eines einfallenden Photons in immer dieselben Portionen und sendet diese als neue Photonen wieder aus? Kurz:

Weshalb tritt die Energie bei atomaren Prozessen in Portionen auf?

Zur Vertiefung des Verständnisses dieser Problematik untersuchen Sie im folgenden Gase mit einem Spektrometer. Sie wissen aus der Optik: ein Prisma zerlegt Licht in sein Farbspektrum. Jeder Farbe entsprechen Photonen einer bestimmten Wellenlänge. Nach dem Prisma oder Spektrometer sehen Sie also das Spektrum aller Photonen, die zusammen das einfallende Licht bilden.



Experiment 2.2: Zum Spektrum von Gasen

Sie untersuchen mit einem Spektrometer das Licht von Gasen, welche Sie durch Anlegen einer Hochspannung zum Leuchten bringen. Beobachten Sie:

- Neon und Argon (wie in Leuchtreklamen)
- Quecksilber und Natrium (von der Strassenbeleuchtung her vertraut)
- Wasserstoff, Stickstoff und Kohlendioxid

Die Edelgase sowie Quecksilber und Natrium weisen ein deutliches *Linienpektrum* auf. Diese Gase senden somit nur Photonen bestimmter Wellenlängen aus. Wiederum stellt sich die Frage, warum die Energie der ausgestrahlten Photonen nur *diskrete* Werte annehmen kann. ("Diskret" steht hier als Gegensatz zu "kontinuierlich". Diskret sind auch die natürlichen Zahlen im Gegensatz zu den kontinuierlichen, dicht liegenden, reellen Zahlen.)

Die Moleküle unter c) zeigen ein viel dichteres Spektrum. Anscheinend gibt es für die Moleküle wesentlich mehr Möglichkeiten, Photonen bestimmter Wellenlänge auszusenden. Beim Kohlendioxid z.B. liegen die Energien so dicht beieinander, dass die einzelnen Linien zu Streifen verschmelzen. (Ein Spektrometer höherer Auflösung würde dies offenbaren.) Ein solches Spektrum wird *Bandenspektrum* genannt. Wie diese entstehen, wird in Additum 2 besprochen werden.

Um diese Erscheinungen im Rahmen der Quantenphysik erklären zu können, sind Ihre Mathematikkenntnisse gefordert. Sie werden zuerst eingeführt in die Theorie der Differentialgleichungen - allerdings in einer sehr "eingängigen" und kurzgefassten Art. Der kleine mathematische Apparat stellt Ihnen Möglichkeiten zur Verfügung, in die Welt der Quantenobjekte einzutauchen und einige phantastische Resultate zu erreichen. So entwickelt sich Ihre Quantenphysik zu einer *Quantenmechanik*. Dazu streben wir folgende Lernziele an:

Lernziele von Kapitel 2

- Sie können dem Begriff "*Zustandsfunktion*" eine präzise Bedeutung geben.
- Sie kennen den Zusammenhang zwischen der Zustandsfunktion eines Quantenobjektes und der *Schrödingergleichung*. In einfachen Fällen können Sie die Schrödingergleichung *lösen*.
- Sie verstehen, weshalb die *Energie eines gebundenen Quantenobjekts quantisiert* ist. Die Rolle der Randbedingungen leuchtet Ihnen ein. Sie können damit das Auftreten von Spektrallinien begründen.
- Sie wissen, wie man Elektronen im Festkörper durch das Bändermodell beschreiben kann.
- Mit Hilfe des Bändermodells können sie den Unterschied zwischen Leitern, Halbleitern und Isolatoren erklären.

2.2 Diff.gleichungen - ein intuitiver Zugang

Zum Einstieg betrachten wir einen vertrauten Aufgabentypus: $3x^2 + 2 = 5x$, wobei x eine reelle Zahl aus dem Intervall $[0, 0.75]$ sein soll. Die Gleichung und die angegebene Grundmenge bestimmen, welche Bedingungen x zu erfüllen hat. Die Lösung ist nur $x = \frac{2}{3}$; die andere Variante $x = 1$ liegt nicht in der Grundmenge. Man kontrolliert durch Einsetzen.

Bei einer Differentialgleichung ist nun *die Unbekannte* nicht einfach eine Zahl x , sondern *eine Funktion* $f(x)$ aus einer Grundmenge von vielen Funktionen. Neben der gesuchten Funktion $f(x)$ tauchen in einer Differentialgleichung aber auch noch deren Ableitungen auf. In Worten lautet eine der einfachsten Differentialgleichungen so: "Welche Funktion ergibt einmal abgeleitet wieder dieselbe Funktion?" Dies können wir mathematisch formulieren: $f'(x) = f(x)$. Nun, die Lösungsfunktion ist hier $f(x) = e^x$; denn leiten wir e^x einmal nach x ab, so erhalten wir wiederum e^x .

Beispiel: "Welche Funktion aus der Menge aller ableitbaren Funktionen erfüllt die Differentialgleichung $f'(x) = -3f(x)$?" Versuchen wir es mit $f(x) = e^{-3x}$. Differenzieren wir einmal nach x , so ergibt sich wegen der inneren Ableitung $f'(x) = -3e^{-3x} = -3f(x)$. Also ist diese Wahl, im Mathematikerjargon: "dieser *Ansatz*" $f(x) = e^{-3x}$ richtig.

Vielleicht haben Sie oben bemängelt, dass die Lösungsfunktionen noch mit einer reellen Zahl A multipliziert werden können und immer noch Lösungsfunktionen bleiben. Da haben Sie recht:

$f'(x) = f(x)$ wird durch $f(x) = Ae^x$ und $f'(x) = -3f(x)$ durch $f(x) = Ae^{-3x}$ gelöst. Diese Zahl A wird als Amplitude bezeichnet.



Aufgabe 2.1: Lösungsansätze für Differentialgleichungen

Erraten Sie die Lösungen der folgenden Differentialgleichungen:

Nr. 1 $f'(x) = 2 \cdot f(x)$

Nr. 4 $x \cdot f'(x) = 3f(x)$

Nr. 2 $f'(x) = 2x \cdot f(x)$

Nr. 5 $f''(x) = 9f(x)$

Nr. 3 $f'(x) = -x \cdot f(x)$

Nr. 6 $f''(x) = -f(x)$

Bei den letzten beiden Aufgaben haben Sie festgestellt, dass es je zwei Lösungen gibt:

Nr. 5 $f(x) = Ae^{3x}$

und

$f(x) = Be^{-3x}$,

Nr. 6 $f(x) = A \sin(x)$

und

$f(x) = B \cos(x)$.

Die beiden Teillösungen können je zu einer Gesamtlösung addiert werden, wobei natürlich die beiden Amplituden A und B nicht gleich sein müssen:

Nr. 5' $f(x) = Ae^{3x} + Be^{-3x}$,

Nr. 6' $f(x) = A \sin(x) + B \cos(x)$. (Beachten Sie die Wirkung des Minuszeichens!)

Sie stellen fest, dass die Lösungsfunktion nicht vollständig bestimmt ist: wer legt die konstanten Vorfaktoren A und B und damit den genauen Funktionsverlauf fest? Eine *eindeutige Lösung* ist nur möglich, wenn zusätzlich zur Differentialgleichung noch andere Bedingungen für $f(x)$ gegeben sind: sogenannte Rand- oder Anfangsbedingungen (wenn x die Zeit bedeutet).

Beispiel: Wir gehen von Nr. 6 aus und verlangen zusätzlich: Die Schwingungsfunktion $f(x)$ soll bei $x = 0$ beginnen, dort am Rand a) Null sein, dh. $f(0) = 0$, und b) eine Steigung von 2 besitzen, dh. $f'(0) = 2$.

Die erste Bedingung führt auf $B = 0$. Wir verwenden folglich nur noch $f(x) = A\sin(x)$. Diese können wir in die zweite Bedingung einsetzen, wobei $f'(x) = A\cos(x)$ ist: $f'(0) = A\cos(0) = A$, dh. also $A = 2$. Die eindeutige Lösung der Differentialgleichung $f'(x) = -f(x)$ mit den beiden Bedingungen lautet somit: $f(x) = 2\sin(x)$.



Aufgabe 2.2: Berücksichtigen der Randbedingungen

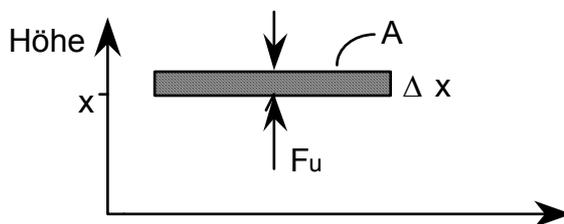
- a) Berechnen Sie die eindeutige Lösung der Differentialgleichung Nr. 5 $f'(x) = 9 \cdot f(x)$ für die beiden Randbedingungen:
 - 1) $f(0) = 10$ und 2) $f(0) = -24$. Hinweis: Der TR zeigt die Lösungsfunktion sehr schön für $x = [0; 1.2]$, $y = [0; 25]$.
- b) Weisen Sie nach, dass die Lösungsfunktion Nr.6 auch in der Form einer phasenverschobenen Cosinusfunktion geschrieben werden kann: $f(x) = C \cos(x + \delta)$. Formen Sie dazu $f(x)$ um; setzen Sie $B = C \cos\delta$ und $A = -C \sin\delta$. Wie gross sind C und δ ?

Ein physikalisches Beispiel:

Stellen Sie sich eine Atmosphärenphysikerin vor, die unbedingt wissen will, wieviel der *Luftdruck* $p(x)$ in nicht allzu grosser Höhe x über dem Erdboden beträgt. Sie stellt drei Überlegungen an:

- 1. Die Luft ist ein Gas. Deshalb gilt die Zustandsgleichung für ideale Gase $pV = NkT$. In der Höhe x ist also $p(x) = n(x)kT$, wobei $n(x)$ die Teilchendichte in der Höhe x darstellt. Die Temperatur wird dabei als konstant angenommen, was nicht realistisch ist.
- 2. Zwischen den einzelnen Luftschichten herrscht ein Kräftegleichgewicht. Sie betrachtet ein kleines Volumen $\Delta V = A\Delta x$ in der Höhe x . Auf die Fläche A wirkt von unten die "Trag"kraft $F_u = p(x)A$ - von oben wirkt einerseits das Gewicht $F_G = m_{Luft}gn(x)A\Delta x$ und andererseits die Druckkraft auf die Oberseite $F_o = p(x+\Delta x)A$ (Siehe Fig.1; m_{Luft} = Masse eines "Luftteilchens"). Es gilt also $F_u = F_G + F_o$. Diese Gleichung kann umgeformt werden zu:

$$\frac{p(x + \Delta x) - p(x)}{\Delta x} = -m_{Luft}g \cdot n(x)$$



Figur 2.1

- 3. Linkerhand entsteht für ein infinitesimal kleines Δx ein Differentialquotient. Zudem kann man $p(x)$ durch $n(x)kT$ ersetzen. Die Differentialgleichung lautet dann:

$$\frac{d}{dx}n(x) = -\frac{m_{Luft}g}{kT}n(x) = n'(x) \tag{2.1}$$

Die Lösung kennen Sie bereits: es ist eine Exponentialfunktion. Mit der Randbedingung, dass die Teilchendichte am Erdboden gleich der Zahl n_0 sei, dh für die Bedingung $n(0) = A = n_0$, ergibt sich:

$$p(x) = n(x) \cdot kT \Rightarrow p(x) = n_0 kT \cdot e^{-\frac{mg}{kT}x} \quad \text{Barometerformel}$$

Bei $T = 273.15 \text{ K}$ erhält man mit $m_{\text{Luft}} = 4.82 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ den Druck auf Meereshöhe:

$$p(0) = n_0 kT = 1016 \text{ hPa} = 1 \text{ atm (Normdruck)};$$

bei gleicher Temperatur in 1000 m Höhe wird: $p(1000) = 880 \text{ hPa}$ ($m_{\text{Luft}}g/kT = 1.25 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{-1}$).

Sie haben gesehen: Physikalische Überlegungen haben auf die Differentialgleichung (A1.1) geführt. Deren Lösung $n(x)$ ist ganz einfach. Die Amplitude A wird durch eine Bedingung am Rand bei $x = 0$ ebenfalls aufgrund einer physikalischen Betrachtung festgelegt. Das ist im folgenden unsere Methode!

2.3 Die Schrödingergleichung bestimmt die Zustandsfunktion

Im Unterricht haben Sie gelernt, dass mit den Quantenobjekten eine Funktion ψ auftritt. Ihr Quadrat ψ^2 gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte P dafür an, ein Teilchen in einem kleinen Volumenelement dV anzutreffen:

$$dP = \psi^2 dV \quad \Leftrightarrow \quad \psi^2 = \frac{dP}{dV}$$

Das ψ^2 kann in Experimenten gemessen werden: Beim Doppelspaltexperiment etwa ergibt sich die typische Intensitätsverteilung wie beim Experiment mit Lichtwellen. Doch wieso besitzt die Grösse ψ Welleneigenschaften? Was bedeutet dieses ψ ? Wodurch wird es bestimmt? Und wie kann dieses ψ berechnet werden? - Wir wollen zuerst die Terminologie erläutern und anschliessend diesen Fragen in fünf Schritten nachgehen.

In verschiedenen Büchern werden Sie verschiedene Bezeichnungen für das finden, was wir hier "*Zustandsfunktion*" nennen. Mancherorts spricht man von "Zustandsvektoren" und macht damit klar, dass diese mathematischen Objekte wie Vektoren zusammengefügt werden können. Oft liest man auch den Terminus "Wellenfunktion". Dies ist oft sinnvoll. Effektiv können Zustandsfunktionen wie Wasserwellen interferieren. Und zudem hat die Zustandsfunktion freier Quantenobjekte die mathematische Form einer Welle. Aber Elektronen etwa, die den "Leim" einer chemischen Bindung ausmachen, sind in einem Zustand, der mit der üblichen Vorstellung einer Welle wenig gemeinsam hat. Da ist die Benennung " ψ -Funktion" neutraler. Doch gibt sie möglicherweise zu psychedelischen ψ -Assoziationen Anlass ...

1. Schritt: An die Stelle der Ortsfunktion $s(t)$, aus der man $v(t)$ und andere Grössen klassischer Teilchen berechnen kann, tritt in der Quantenmechanik die Zustandsfunktion ψ . Sie wissen schon, dass in der Quantenphysik nur noch Wahrscheinlichkeitsangaben möglich sind. Mit der Grösse $\psi(x)$, deren Wert sich von Ort zu Ort ändert, können nun alle Grössen, die den Zustand eines Quantenobjekts charakterisieren, ausgerechnet werden:

- Die *Wahrscheinlichkeitsdichte*, ein Teilchen im infinitesimal kleinen Volumenelement dV an der Stelle x zu finden, ist also $dP(x) = \psi(x)^2 dV$. Die Orbitale, die Sie aus dem Chemieunterricht kennen, sind Bilder dieser Wahrscheinlichkeitsdichte.
- Die Zustandsfunktion $\psi(x)$ ermöglicht, die *Energie* eines Quantenobjekts zu berechnen. Wie das vor sich geht, lernen Sie im nächsten Abschnitt.
- Mit $\psi(x)$ kann man auch den Impuls und weitere Grössen ausrechnen. Doch die dafür nötigen Prozeduren werden Sie erst an der Hochschule kennenlernen. Das $\psi(x)$ ist so ausgelegt, dass die Unschärferelation immer erfüllt bleibt.

Wie man die Funktion $\psi(x)$ berechnet und wie sie aussieht, möchten Sie wohl gerne wissen.

2. Schritt: In 2.2. haben Sie gelernt, was Sie brauchen, um ganze Funktionen berechnen zu können: Differentialgleichungen. Sind die *Differentialgleichung* und die Randbedingungen *für die Zustandsfunktion* gegeben, ist alles berechenbar! Doch woher kommt die entsprechende Differentialgleichung? Am Beispiel der Barometerformel haben Sie gesehen, wie physikalische Überlegungen auf die Differentialgleichung des Atmosphärendrucks führten. Dies versuchen wir hier ebenso: Gesucht sind alle physikalischen Einflüsse auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens. Wir beginnen mit einem einfachen Spezialfall und analysieren ihn vorerst mit den Begriffen der klassischen Physik:

3. *Schritt*: Denken Sie an ein *Elektron*, das sich auf einer Bahn mit grossem Abstand x auf ein Proton zubewegt. Zwischen den beiden punktförmig angenommenen Teilchen wirkt die *Coulombkraft* $F = (1/4\pi\epsilon_0) \cdot qQ/x^2$. Die dazugehörige potentielle Energie E_{pot} ist $E_{pot} = -(1/4\pi\epsilon_0) \cdot qQ/x$. Die potentielle Energie V hängt nur vom Abstand x der beiden Teilchen ab: $E_{pot} + V(x)$. Nun besitzt das Elektron aber auch eine kinetische Energie $E_{kin} = mv^2/2 = p^2/2m$. Mit der totalen Energie $E = E_{kin} + E_{pot}$ berechnet sich E_{kin} demnach als $E_{kin} = p^2/2m = E - V(x)$. Umgeformt heisst es dann: $p^2 = 2m[E - V(x)]$.

Nun wechseln Sie von der klassischen zur Quantenphysik und ändern Ihre Betrachtungsweise! Fassen Sie mit de Broglie das Elektron als eine Welle mit Impuls $p = h/\lambda$ auf. Es gilt dann auch: $p/h = 1/\lambda$. Quadriert man und setzt dann den klassischen Impulswert von oben ein, ergibt sich die folgende "halbklassische" Beziehung:

$$p^2 = 2m[E - V(x)] = \frac{h^2}{\lambda^2} \Rightarrow \frac{1}{\lambda^2} = \frac{2m}{h^2} [E - V(x)] \quad (2.2)$$

Die "Bahn" des Elektrons, hier noch ausgedrückt durch die Grössen x und λ , wird wesentlich bestimmt durch die totale Energie E und durch das Potential $V(x)$, in dessen "Kraftfeld" es sich bewegt. Wir gehen davon aus, dass $V(x)$ sich im Verlaufe der Zeit nicht ändert.

4. *Schritt*: Im dritten Schritt wurde leider die klassische Voraussetzung gemacht, das Elektron befinde sich genau am Bahnort x mit dem exakten Impuls $p = h/\lambda$. Diese Annahme ist, wie Sie wissen, unhaltbar. Die Unbestimmtheit von Ort und Impuls eines Quantenobjektes wird durch die Heisenbergsche *Unschärferelation* quantitativ beschrieben. Um diesem Wesenszug der Natur gerecht zu werden, ist es notwendig, vom klassischen Ortsbegriff Abschied zu nehmen und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in die Gleichung (A1.2) einzubauen. Wir benötigen die Zustandsfunktion $\psi(x)$. Doch wie soll die Verknüpfung geschehen? Am besten wohl über die de Broglie-Wellenlänge λ ! Bei einem freien Teilchen muss sie in der Zustandsfunktion stecken, beispielsweise in der Form: $\psi(x) = \cos(2\pi x/\lambda)$. Eine verhältnismässig einfache Beziehung zwischen λ und $\psi(x)$ erhalten Sie, wenn Sie $\psi(x)$ zweimal nach x ableiten:

$$d^2/dx^2 \psi(x) = -(2\pi/\lambda)^2 \cos(2\pi x/\lambda) = -(2\pi/\lambda)^2 \psi(x)$$

Die Grösse λ^2 kann also umgerechnet werden in $\psi(x)$! Dies ist wichtig, wenn wir nun daran gehen, die Gleichung (2.2) nach dem Vorschlag von Erwin Schrödinger so zu verändern, dass die Zustandsfunktion $\psi(x)$ in ihr auftaucht.



Erwin Schrödinger: Er war 1926 Professor an der Universität Zürich

5. Schritt: Die quantenmechanische Version der Gleichung (2.2) hat Erwin Schrödinger 1926 *entwickelt*. Man würde ihm unrecht tun, schriebe man "erraten". Und doch war damals viel Intuition dabei. Schrödinger ergänzte die klassische Mechanik durch seine Differentialgleichung in einer Weise, die der Ergänzung der Strahlenoptik zur Wellenoptik entspricht. In vielen Fällen kommt die Strahlenoptik zu den gleichen Ergebnissen wie die Wellenoptik. Wenn aber das Licht durch sehr kleine Öffnungen und feine Strukturen strömt, dann kann nur die Wellenoptik die Beobachtungen korrekt beschreiben. Ebenso genügt die klassische Mechanik beispielsweise bei der Berechnung der Bewegung der Elektronen durch eine TV-Röhre. Wenn jedoch diese Elektronen mit den Atomen in der Fluoreszenzschicht wechselwirken, dann braucht es die Quantenmechanik.

Es gibt keinen Beweis für die Richtigkeit der Schrödingergleichung - ebensowenig wie für die klassische Bewegungsgleichung ($F = ma$)! In vielen Experimenten *bestätigt* sie die Natur. Schrödingers Gleichung ist die gesuchte Differentialgleichung für die Zustandsfunktion $\psi(x)$. Alle physikalischen Bedingungen, welche die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und andere Wesenszüge eines Teilchens beeinflussen, gehen in die Schrödingergleichung ein.

Die folgenden Rechnungen wollen den Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik andeuten. Schrödinger postuliert folgende *Ersetzungen* in der Gleichung (2.2):

$$\frac{1}{\lambda^2} \xrightarrow{QM} -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x)$$

und

$$[E - V(x)] \xrightarrow{QM} [E - V(x)]\psi(x)$$

Damit erhalten Sie die sogenannte *zeitunabhängige Schrödingergleichung* für ein Teilchen, das sich im Potential $V(x)$ befindet:

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [V(x) - E] \psi(x)} \quad (2.3)$$

Zu dieser fundamentalen Entdeckung des 20. Jahrhunderts einige Bemerkungen:

- Wir geben zu, dass wir *die Variable t* absichtlich aus der ganzen Problematik heraushalten. Natürlich hängt eine Welle von den Variablen x und t ab; sie ist allgemein eine Funktion $f(kx - \omega t)$. Stellen Sie sich hier einfach eine Momentaufnahme vor: Dann ist t fix und fällt weg! Wollten wir t auch in die Zustandsfunktion hineinbringen, dann wären komplexe Zahlen nötig. Diese zusätzliche Problematik ersparen wir uns. Damit verlieren wir allerdings die Möglichkeit, Prozesse zu betrachten, bei denen sich beispielsweise die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ändert. Wir müssen uns mit Anfangs- und Endsituation eines solchen Prozesses zufrieden geben.
- Wir beschränken uns einstweilen auf die Schrödingergleichung für ein *einzelnes* Quantenobjekt. Schon das einfachste Molekül, das H_2 , stellt uns dann vor neue Probleme.
- Auch die Schrödingergleichung ist nicht der Weisheit letzter Schluss. Die Natur ist vielfältiger. Unter anderem müssten auch die Wesenszüge der *Relativitätstheorie* hier einfließen. Dabei würde der Spin auftauchen.

Vielleicht möchten Sie sich ein genaueres Bild von der Entstehung der Quantenmechanik machen. Vorschlag: Kuhn W.: Physik Band II, Oberstufe, 2. Teil Klasse 12/13. Braunschweig 1990. (Westermann). Die Seiten 428 bis 432 sind der Wellenmechanik gewidmet, die vorwiegend auf de Broglie und Schrödinger zurückgeht. Aber eine ganze Reihe weiterer Physiker: Bohr, Born, Heisenberg, Pauli usw. haben in den "goldenen Zwanzigerjahren" andere, hier nicht erwähnte Beiträge zur neuen Grundlage der Physik geliefert.

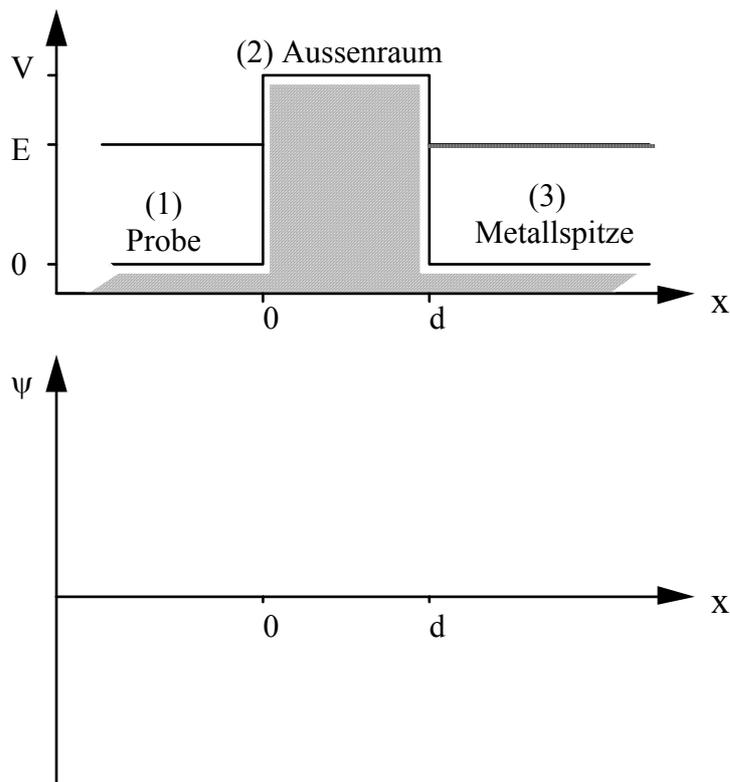


Aufgabe 2.3: Bild der Zustandsfunktion

- Machen Sie sich anhand einer kleinen Skizze vertraut mit der Schreibweise $\cos(kx) = \cos(2\pi x/\lambda)$ und der Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$!
- Lassen Sie sich die quantenmechanische Ersetzung nochmals durch den Kopf gehen und rechnen Sie die einzelnen Schritte nach, bis Sie die Schrödingergleichung erhalten!
- Berechnen Sie die Zustandsfunktion ψ eines freien Teilchens, dh. lösen Sie (2.3) für $V(x) = 0$!

Der Tunneleffekt

Wir illustrieren die Schrödingergleichung zuerst an einem Ihnen vertrauten Beispiel: am Tunneleffekt! Sie wissen, dass der Tunnelstrom mit zunehmendem Abstand zwischen der Probenoberfläche und der Wolframspitze exponentiell abnimmt. Die folgende Figur zeigt die Situation:



Figur 2.2: Potential und Zustandsfunktion bei einer Barriere

Die Energie E des Elektrons ist kleiner als die Barrierenhöhe V . Das Potential $V(x)$ selber sei im Aussenraum, dh. zwischen 0 und d , konstant $V(x) = V$.

Die Schrödingergleichung ist nun für die folgenden drei Bereiche zu lösen:

(1) in der Probe $x < 0$, (2) im Aussenraum $0 < x < d$, (3) im Bereich der Metallspitze $d < x$.

(1) Innerhalb der Probe wirken keine Kräfte: das Potential ist also Null. Die Lösung ist somit diejenige eines freien Teilchens: $\psi_i(x) = A_i \cos(kx + \delta)$ mit $k^2 = 2mE / (\hbar/2\pi)^2$.

(2) Die Schrödingergleichung im Aussenraum lautet:

$$\psi''(x) = 2m / (\hbar/2\pi)^2 \cdot [V - E] \psi(x)$$

Oder mit der Abkürzung $\kappa^2 = 2m / (\hbar/2\pi)^2 \cdot [V - E]$ einfach

$$\psi''(x) = \kappa^2 \psi(x).$$

Ihre Lösung kennen Sie aus Aufgabe A1.1 Nr.5:

$$\psi_a(x) = A_a e^{\kappa x} + B_a e^{-\kappa x}.$$



Aufgabe 2.4: Zur Eindeutigkeit der Lösung

Überlegen Sie sich, warum beim Tunneleffekt $A_a = 0$ und $B_a \neq 0$ sein muss! Stellen Sie sich vor, die Metallspitze sei noch weit entfernt.

(3) In der Metallspitze ist das Potential ebenfalls = 0. Die Lösung der Schrödingergleichung ist wiederum die des freien Teilchens. Es hat dieselbe Energie wie in der Probe, dh. die Wellenlänge λ und die Wellenzahl k der Zustandsfunktion bleiben gleich.

Insgesamt erhalten wir:

(1) Probe: $\psi_i(x) = A_i \cos(kx + \delta)$

(2) Aussenraum: $\psi_a(x) = B_a e^{-\kappa x}$

$$(3) \quad \text{Metallspitze: } \psi_M(x) = A_M \cos(kx + \delta_M)$$

Sicher finden Sie nun selbst heraus, wie die Zustandsfunktion aussieht (Aufgabe 2.5):



Aufgabe 2.5: Die Zustandsfunktion zeichnen

- Zeichnen Sie den Verlauf der Zustandsfunktion in der Figur A1.2 im vorgesehenen Diagramm ein.
Die Aufgaben b) und c) sind *fakultativ*.
- Berechnen Sie für $A_i = 3$ die Phasenverschiebung δ und die Amplitude B_a für die Zustandsfunktion im Aussenraum! Überlegen Sie sich dabei, dass $\psi_i(0) = \psi_a(0)$ und die ersten Ableitungen bei $x = 0$ ebenfalls identisch sind (kein Knick in der Zustandsfunktion). Die Lösung soll nur V und E enthalten. In einem zweiten Schritt bestimmen Sie die Zustandsfunktion in der Metallspitze: $\psi_M(x) = A_M \cos(kx + \delta_M)$. Dies gelingt Ihnen mit derselben Idee wie vorhin, indem Sie die Randbedingungen bei $x = d$ aufschreiben. Die Lösungen enthalten neben V und E noch k , κ und d .
- Schreiben Sie ein kleines Programm, welches für den Bereich $-5.5 \leq x \leq 7.0$ die gesamte Zustandsfunktion des tunnelnden Elektrons zeichnet. Sie sollen in das Programm V , E und d eingeben können (z.B. $V = 4$, $E = 3$, $d = 1.5$). Setzen Sie dabei $2m/(\hbar/2\pi)^2 = 1$; die Masseinheiten sind für den qualitativen Verlauf der Funktion nicht weiter interessant.



Wir fassen zusammen:

Wir verstehen den idealisierten Tunneleffekt quantitativ:

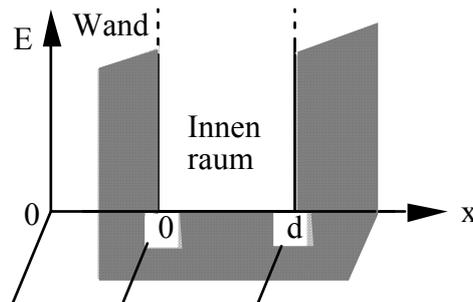
- In der Probe sind die Elektronen praktisch frei. Ihre Zustandsfunktion ist wellenförmig. Die Wellenlänge hängt von der Bewegungsenergie ab.
- Im Aussenraum nimmt die Amplitude von ψ exponentiell ab. Damit sinkt auch die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron zu finden.
- In der Metallspitze sind die Elektronen wieder praktisch frei. Die Zustandsfunktion ist ψ wieder wellenförmig. Die Amplitude ist kleiner und die Phasenlage ist anders, aber die Wellenlänge ist gleich wie in der Probe.

Soweit so gut. Wenn man aber vorhersagen will, wie gross der Tunnelstrom ist, wieviele Elektronen sich verschieben, dann muss man die Elektronendichte in der Probenoberfläche kennen. Die Elektronen dort sind jedoch nicht frei, sondern an ihre Atomkerne gebunden. Wir müssen demnach die Schrödingergleichung für gebundene Quantenobjekte untersuchen.

2.4 Die Quantisierung der Energie

Beim Spektrallinienexperiment haben Sie gesehen, dass die vom Gas abgestrahlten Photonen nur bestimmte Energien besitzen. Die sogenannte *Quantisierung* der Energie ist typisch für *gebundene* Quantenobjekte. In solchen Fällen treten zur Schrödingergleichung Randbedingungen hinzu, die die Menge der Lösungen drastisch reduzieren.

Am übersichtlichsten ist die Situation bei folgendem Extremfall: das Quantenobjekt ist in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden eingesperrt.



Figur 2.3: Unendlich hoher Potentialtopf

Wie ist es in den Potentialwänden? Sie sehen: Mit $V(x) = \infty$ erlaubt die Gleichung 2.3 für die Zustandsfunktion dort nur die Lösung $\psi(x) = 0$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Wand ist also null. Als Folge davon gelten für die Zustandsfunktion die folgenden Randbedingungen: $\psi(0) = \psi(d) = 0$. Mathematisch ist vieles ähnlich wie beim Tunneleffekt:



Aufgabe 2.6: Potentialtopf selber bearbeiten

- Stellen Sie die Schrödingergleichung für ein Quantenobjekt mit der Energie E im Innenraum des Potentialtopfs auf!
- Lösen Sie die Schrödingergleichung unter der Berücksichtigung der Bedingung $\psi(0) = 0$! (Die Amplitude A bleibt unbestimmt.)
- Die zweite Randbedingung lautet $\psi(d) = 0$. Was bedeutet das für k , respektive für die Wellenlänge? Geben Sie die Abhängigkeit von der Potentialtopfbreite d an!
- Was für eine Konsequenz haben die Randbedingungen somit für die Energie?

Was haben Sie in Aufgabe 2.6. gelernt? Die Lösungen der Schrödingergleichung im Innenraum des unendlich hohen Potentialtopfs sind Zustandsfunktionen mit ganz bestimmten Wellenlängen, weil die Randbedingungen das fordern. Solche Zustandsfunktionen werden oft als *Eigenfunktionen* bezeichnet. Die dazugehörigen Energien sind quantisiert und proportional zu n^2 ($n = \mathbb{N}$). Dieses n nennt man *Energie-Quantenzahl*.

$$E_n = \frac{h^2}{8md^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Ein mechanisches Analogon zum Potentialtopf ist die beidseitig eingespannte Saite. Die Schwingungen der Saite sind stehende Wellen. Zu jeder Wellenlänge λ gehört wegen $f = c/\lambda$ eine bestimmte Tonhöhe. So eine Saite kann nur in eigener Weise schwingen: $n = 1$ gibt den Grundton, $n = 2$ den ersten Oberton, die Oktave zum Grundton usw. Die Energie-Quantenzahlen n bedeuten anschaulich auch "Anzahl der Schwingungsknoten plus 1".

Angenommen, die Zustandsfunktion $\psi(x)$ beschreibe ein derart eingesperres Elektron. Dieses Elektron kann also nur bestimmte Energien besitzen. Es hat jedoch die Möglichkeit, von selbst von einem höheren Energieniveau n in ein tieferes zu springen und dabei Energie abzugeben. (Wie wahrscheinlich dieser Prozess ist, muss hier offen bleiben. Das ist ein Problem für die Hochschule.) Die beim Sprung frei werdende Energie wird als Photon abgestrahlt. Es besitzt bestimmte Energie, Frequenz und Wellenlänge:

$$E_{\text{photon}} = E_r - E_s = \frac{h^2}{8md^2}(r^2 - s^2) = hf_{rs} = hc / \lambda_{rs}$$

Die Absorption von Strahlung durch ein System mit gebundenen Zuständen verläuft in jeder Hinsicht umgekehrt.



Aufgabe 2.7: Energieniveaux-Schema

Zeichnen Sie die Energieniveaux des unendlichen Potentialtopfs für $n = 1$ bis $n = 6$ auf einer senkrechten Achse ein, und tragen Sie alle Elektronensprünge auf $n = 2$ ein!

Natürlich ist Ihr Einwand richtig, es handle sich hier um ein ausgefallenes Potential. In der Natur sei ja alles endlich. Die folgende Aufgabe zeigt Ihnen jedoch, dass Sie damit doch schon realistische Fragestellungen bearbeiten können:



Aufgabe 2.8: Farbzentren

Alkalihalogenidkristalle (NaCl, KBr, CsJ usw.) besitzen eine kubische Symmetrie. Sie enthalten verschiedenartige Störstellen, unter anderem fehlende Halogenid-Ionen. Durch Erwärmen kann man die Anzahl dieser würfelförmigen *Kastenpotentiale* erhöhen. Ein auf etwa 650 °C erhitzter KCl-Kristall kann dann dadurch violett verfärbt werden, dass man ihm von einer Stromquelle Elektronen zuführt. Diese füllen nämlich die Potentialtöpfe und absorbieren Licht einer bestimmten Wellenlänge: gelb beim KCl. Der Kristall erscheint in der Komplementärfarbe violett.

Farbzentren sind natürlich endliche, dreidimensionale Potentialtöpfe. Weil das Geschehen in den drei Dimensionen als unabhängig betrachtet werden darf, können Sie doch schon qualitativ richtige Vorhersagen liefern:

Überlegen Sie sich anhand des eindimensionalen Potentialtopfs, wie die Energieniveaux der Elektronen von der Kastengrösse abhängen könnten. Schliessen Sie sodann auf die Energie der Quanten, welche die Übergänge zwischen den Niveaux freisetzen. Und sagen Sie zum Schluss voraus, welche Farbe NaCl annehmen müsste, wenn bekannt ist, dass die Kästen im NaCl kleiner sind als im KCl.

Wir könnten jetzt den Potentialtopf mit endlichen Wänden studieren. Er ist grundsätzlich das Gegenstück zur Potentialstufe, die wir beim Tunneleffekt angetroffen haben. Ausser zusätzlicher Mathematik würden wir wenig Neues lernen.

Als zweites Beispiel untersuchen wir deshalb den harmonischen Oszillator, ein System, das man in ganz verschiedenen physikalischen Situationen antrifft. Indem wir das Problem in der Manier der Quantenmechaniker anpacken, erreichen wir den Gipfel der mathematischen Komplexität dieses Leitprogramms. Dieses Beispiel ist fakultativ; in den Kapiteln über Atombau und die chemische Bindung benützen wir jedoch die hier erarbeiteten Ergebnisse.

Der harmonische Oszillator (fakultativ)

Ein konkretes Beispiel für einen harmonischen Oszillator ist das Federpendel. Es ist das einfachste gebundene System der klassischen Mechanik. Bei jedem Oszillator zwingt eine rücktreibende Kraft F die schwingende Masse m immer wieder zur Gleichgewichtslage $x = 0$ zurück. Wenn eine Hooke'sche Feder oder eine andere Ursache dabei *das lineare Kraftgesetz* $F(x) = -kx$ erfüllt, dann haben wir einen *harmonischen* Oszillator. Die Bewegungsgleichung liefert für ihn die Differentialgleichung $mx'' = -kx$. Diese hat die Struktur der Nr. 6 von Aufgabe 2.1. Die Lösung, das Weg-Zeit-Gesetz, ist eine Sinus- respektive eine Cosinusfunktion. Für die Schwingungsdauer T und die entsprechende Kreisfrequenz ω gilt:

$$2\pi / T = \omega = \sqrt{k / m}$$

Verwechseln Sie in diesem Abschnitt die Richtgrösse (= Federkonstante) k nicht mit der Wellenzahl k , die bei freien Teilchen eine Rolle spielt!

Die im Federpendel steckende Gesamtenergie, wird laufend zwischen der Bewegungsenergie $mv^2/2$ und der Federenergie $kx^2/2$ hin- und hergeschoben. Die Federenergie, allgemein die potentielle Energie des Oszillators, liefert direkt das Potential $V(x) = kx^2/2$, das für jedes lineare Kraftgesetz gilt.

Zur quantenmechanischen Analyse des harmonischen Oszillators setzen wir die Potentialfunktion $V(x) = kx^2/2$ in die Schrödingergleichung A1.3 ein und erhalten:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} \left[\frac{1}{2} kx^2 - E \right] \psi(x)$$

Diesen Typus von Differentialgleichung finden Sie nicht unter den einfachen Fällen von A 1.1. Schwierigkeiten verursachen das x^2 und die additive Konstante $-E$. Doch leuchtet ein, dass die Zustandsfunktion für den Grundzustand so sein muss, dass die Masse m am wahrscheinlichsten bei $x = 0$ anzutreffen ist. Der Lösungsansatz geht also von einer Wahrscheinlichkeitsfunktion aus:

$$\psi(x) = Ae^{-ax^2}$$

Unsere, respektive Ihre Aufgabe besteht aus verschiedenen Teilen:

- Überprüfen, ob die Funktion die Differentialgleichung erfüllt. Wenn "ja" ...
- den Wert von a durch die Grössen m , k und $\hbar/2\pi$ ausdrücken,
- die Energie E des Grundzustands bestimmen und
- Überlegungen zum Wert von A anstellen.
- Ist dies alles erfolgreich bewältigt, dann müssen Sie sich auf die Suche nach weiteren Zustandsfunktionen machen.



Aufgabe 2.9: Quantenmechanischer Oszillator (fakultativ)

- a) Setzen Sie die vorgeschlagene Funktion in die Schrödingergleichung ein und zeigen Sie, dass es eine Lösungsfunktion ist.
- b) Suchen Sie nach Bedingungen, mit denen Sie a und E ausrechnen können.

Wenn Sie 2.9 a) durchrechnen, stossen Sie auf eine Gleichung, die Sie beidseits durch ψ teilen können. Damit ist a) erledigt. Sie erhalten dann folgende Gleichung:

$$-2a + 4a^2 x^2 = \frac{-2mE}{(\hbar/2\pi)^2} + \frac{m k}{(\hbar/2\pi)^2} x^2$$

Sie kann nur für alle x gelten, wenn die Glieder mit den Konstanten unter sich gleich sind *und* wenn die Glieder mit den x^2 gleich sind. Damit erhalten wir zwei Gleichungen für a und E :

$$-2a = \frac{-2mE}{(\hbar/2\pi)^2} \quad \text{und} \quad 4a^2 x^2 = \frac{m k}{(\hbar/2\pi)^2} x^2$$

Mit ein wenig Geduld und Konzentration und der Abkürzung $\omega = \sqrt{k/m}$ finden Sie:

$$a = \frac{m\omega}{2(\hbar/2\pi)} \quad \text{und} \quad E = \frac{1}{2}(\hbar/2\pi)\omega$$

Zur Amplitude A haben wir bisher keine Information erhalten. Weil der harmonische "Potentialtopf" keine bestimmte Ausdehnung hat, gibt es keine Randbedingungen. Die Grösse A muss in einem konkreten Fall so festgelegt werden, dass die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte über den ganzen Raum aufsummiert die vorhandene Anzahl Quantenobjekte - meist 1 - liefert.

Wir haben damit den Grundzustand des harmonischen Oszillators vollständig erfasst. *Dass* es sich um den *Grundzustand* handelt, davon können Sie sich selber überzeugen, wenn Sie das gleiche Prozedere mit den beiden Funktionen ψ_2 und ψ_3 durchführen:

$$\text{angeregte Zustände} \quad \psi_2(x) = Bxe^{-bx^2} \quad \text{und} \quad \psi_3(x) = C(1-k)x^2 e^{-cx^2}$$

Als Nebenprodukte erhalten Sie alle Energien:

$$E_1 = \frac{1}{2}(\hbar/2\pi)\omega \quad \text{und} \quad E_2 = \frac{3}{2}(\hbar/2\pi)\omega \quad \text{und} \quad E_3 = \frac{5}{2}(\hbar/2\pi)\omega \quad \dots \quad E_n = (n - \frac{1}{2})(\hbar/2\pi)\omega$$

Auch hier führt die Schrödingergleichung eines gebundenen Systems auf die Energiequantisierung und die Energiequantenzahl n . Interessanterweise haben hier alle *Energiestufen* den gleichen Wert $\Delta E = E_r - E_s = (\hbar/2\pi)\omega = hf \Rightarrow$ die Quanten von Einstein und Planck!

**Wir fassen zusammen:**

Sie haben anhand von zwei Beispielen gesehen, dass ein Quantenobjekt, welches in einem Potential (d.h. Kräftefeld) gebunden ist, nur ganz *bestimmte Energien* aufweisen kann. Die Quantisierung der Energie ergibt sich als Folge der Tatsache, dass nur eine begrenzte Anzahl von Funktionen, die Eigenfunktionen, sowohl die Schrödingergleichung als auch die Randbedingungen des Problems erfüllen.

Eine wichtige Charakterisierung der Zustandsfunktion eines Quantenobjekts in einem Potentialtopf ist die *Energie-Quantenzahl* n .

Sie haben auch eine Erklärung für das *Linienspektrum* gefunden: Weil die gebundenen Elektronen nur diskrete Energien besitzen, wird beim Quantensprung von einem höheren auf ein tieferes Niveau immer eine bestimmte Energie frei: die Energiedifferenz der beiden Niveaux. Diese Energiedifferenz trägt das Photon davon. Emittede und absorbierte Photonen besitzen also nur gewisse Wellenlängen $\lambda = hc/\Delta E$, was im Spektrometer sofort sichtbar ist.

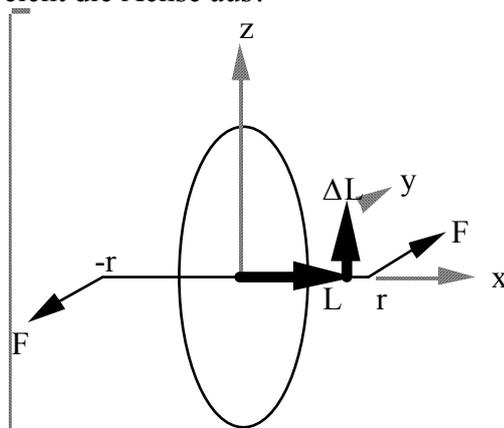
2.5 Die Rolle des Drehimpulses

Jetzt ist es an der Zeit, eine der ältesten Erfindungen der Menschheit - das Rad - quantenmechanisch in drei Dimensionen zu untersuchen.



Experiment 2.3: Zum Drehimpuls

Wiederholen Sie das folgende klassische Experiment: Halten Sie ein Velorad an den Achsenenden mit beiden Händen fest. Die Achse liegt dabei horizontal. Versetzen Sie das Rad in Rotation. Versuchen Sie nun, die Achse in horizontaler Richtung zu drehen, indem Sie mit der rechten Hand drücken, mit der linken ziehen. - In welche Richtung weicht die Achse aus?



Figur 2.5: Drehmoment und Drehimpuls

Sollten Sie keine Ahnung von den Begriffen "Drehmoment M " und "Drehimpuls L " (mehr) haben, können Sie beispielsweise im Metzler-Physik nachschlagen (Grehn J.: Physik. Stuttgart 1988 (Metzler). 66-75). Wie Sie (wieder) wissen, ändert bei diesem Experiment der Drehimpuls L zwar nicht seinen Betrag, doch seine Richtung gemäss dem wirkenden Drehmoment: $\Delta L_z = \Delta t M$. Das Drehmoment ist $M = r \times F$. Dabei wird die Achse mit der Kraft F um ein kleines Stückchen Δy gedreht. Die verrichtete Arbeit beträgt $F \Delta y = \Delta E$. Wenn wir voraussetzen, dass Δy kleiner als der Umfang ist, also $\Delta y \leq 2\pi r$, so können wir folgende Ungleichung aufstellen:

$$\Delta L_z = M \Delta t = r F \Delta t = \frac{r}{\Delta y} \Delta y F \Delta t = \frac{r}{\Delta y} \Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2\pi} \Delta E \Delta t$$

Das Rad soll jetzt schrumpfen! Es werde so klein, dass die Unschärferelation wichtig wird! Erinnern Sie sich an die Unschärferelation für die Energie $\Delta E \Delta t \geq h$? Mit ihr wird:

$$\Delta L_z \geq \frac{1}{2\pi} \Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2\pi}$$

Die kleinstmögliche Änderung des Drehimpulses in eine Raumrichtung (hier die z-Richtung) ist also $\Delta L_z = h/2\pi$. Der Drehimpuls L ändert sich also nur sprunghaft. Der Grund dafür liegt in der Tatsache, dass die Wechselwirkung $\Delta E \Delta t$ zwischen dem Quantenobjekt und der die Kraft ausübenden Umwelt nicht kleiner als das Wirkungsquantum h werden kann.

Ist es möglich, diese neue Form der Unschärferelation aus der Schrödingergleichung herzuleiten? - Im Prinzip ja, aber für uns wird der mathematische Aufwand zu zeitraubend.

Eine Drehbewegung benötigt zumindest zwei Dimensionen. Wir müssten also zuerst formal die Schrödingergleichung auf *zwei Dimensionen* ausbauen. Interessant würde es dann beim Aufstellen der Randbedingungen.

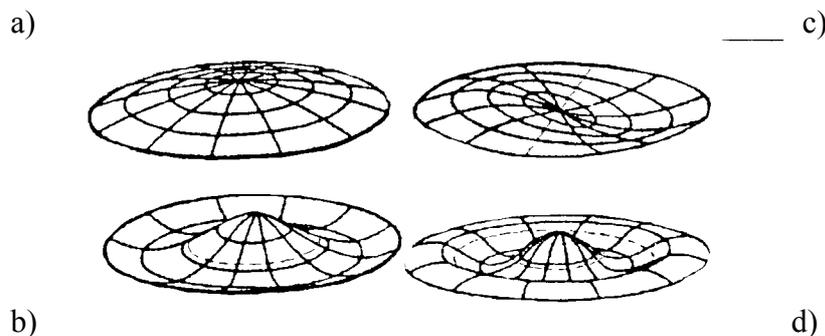
Wenn die physikalische Situation rotationssymmetrisch ist, müssen die Zustandsfunktionen nach einer Umdrehung wieder den Anfangswert erreichen. Der Astronom, Physiker und Mathematiker Friedrich Wilhelm Bessel hat solche Funktionen schon anfangs des letzten Jahrhunderts entdeckt. Wie sie aussehen können, zeigt das



Experiment 2.4: Zu 2-dimensionalen Schwingungen

Füllen Sie eine 2-Liter Mineralwasserflasche aus Plastik dreiviertel voll mit Wasser und regen Sie mit einem kleinen Schlag Oberflächenwellen an.

Gleichartige stehende Wellen können Sie auch auf einer Kesselpauke oder einem simplen Eisenblech beobachten, wenn Sie nach dem Vorschlag von Chladni feinen Sand darauf streuen. Aus der unendlich grossen Zahl von Zustandsfunktionen, welche die geforderten Randbedingungen erfüllen, sind in Figur 2.6 vier einfache Fälle ausgewählt:



Figur 2.6: 2-dimensionale Eigenschwingungen

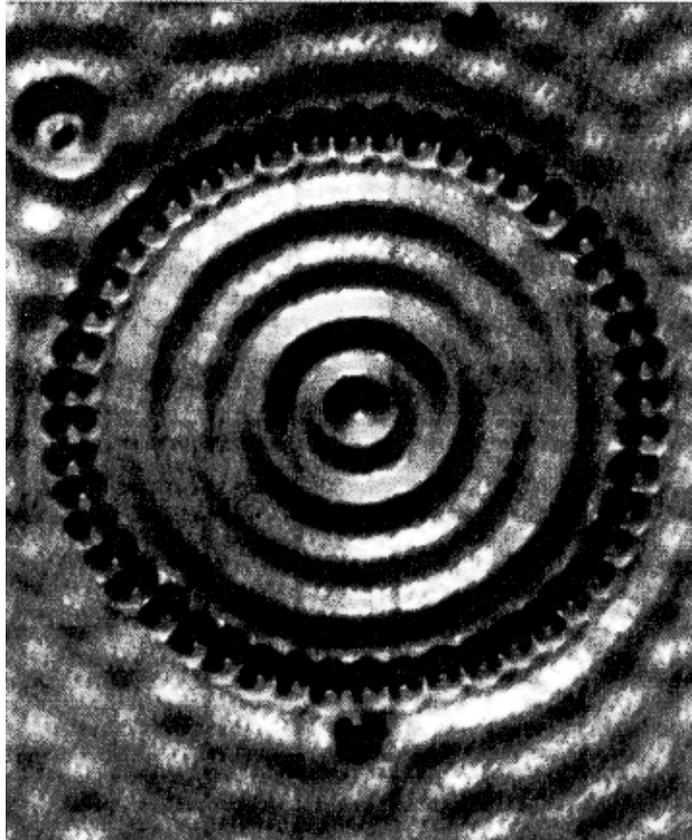
Sie sehen, dass die Figuren a), b) und d) vollständige Rotationssymmetrie besitzen. Das bedeutet, anschaulich offensichtlich, aber wir können es hier nicht beweisen: Der Drehimpuls ist null. Die drei Zustandsfunktionen unterscheiden sich jedoch in der Anzahl der kreisförmigen Knotenlinien! Haben Sie eine Idee, wie dies zu interpretieren ist?

Richtig! Sie haben beim eindimensionalen, endlichen Potentialtopf gelernt, dass die Energie mit zunehmender Knotenzahl wächst. Benennen wir folglich auch hier die Zahl der radialen, kreisförmigen Knoten einer Welle mit n_r und zählen dabei die Knotenlinie am Rand mit. Figur a) stellt offensichtlich den Grundzustand $n = n_r = 1$ dar; in den Figuren b) und d) sind die Zustände mit den Energieniveaus $n = 2$ und $n = 3$ gezeichnet.

Vergleichen wir nun die Figuren b) und c). Beide besitzen je eine innere Knotenlinie und eine am Rand. Deshalb dürfen wir annehmen, dass sie durch die gleiche Zahl $n = 2$ charakterisiert werden. Die Asymmetrie von c) kommt durch den zusätzlichen Drehimpuls L zustande. Er hat den minimalen Wert $L = h/2\pi$. Die Anzahl Drehimpulsportionen, die eine Zustandsfunktion mit sich bringt, wird durch eine zweite Quantenzahl l gekennzeichnet. Sie heisst *Drehimpuls-Quantenzahl* l . a) $n = 1$ und $l = 0$, b) $n = 2$ und $l = 0$, c) $n = 2$ und $l = 1$ usw.

Übrigens: Mit dem Drehimpuls wächst auch die Gesamtenergie eines Systems, denn es kommt noch die Rotationsenergie hinzu. Sie lautet klassisch: $E = L^2/(2mr^2)$. Man muss sie beim Formulieren der Schrödingergleichung auch berücksichtigen. Das gibt zusätzlichen Rechen-

aufwand. Doch die in Figur 2.6 sichtbare Symmetrie der Zustandsfunktion bleibt. Und am wichtigsten ist der Nachweis, dass es solche zweidimensionalen Zustandsfunktionen in der Natur wirklich gibt. Sie finden ihn in Figur 2.7:



Figur 2.7: RTM-Aufnahme eines "Quantenpferchs"

Mit Hilfe des RTM gelang es einer Forschergruppe 1993, auf einer extrem sauberen Kupferoberfläche 48 Eisenatome zu einem Ring anzuordnen. Dieser Ring stellt für die Oberflächen-Elektronen des Kupfers einen kreisförmigen Potentialtopf dar. Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen in Innern sieht offensichtlich so aus, wie wir vorhergesagt haben. Ihre Struktur stimmt mit derjenigen einer stehenden Welle auf einer Membran überein.

Der Drehimpuls der Elektronen im Quantenpferch ist null. Woher sollten sie auch den Kick bekommen? Sie wissen aber aus der Elektrodynamik, dass Elektronen, die senkrecht in ein Magnetfeld geschossen werden, zu kreisen anfangen, weil sie der Lorentzkraft unterworfen sind. Dieser Effekt wird nicht nur in der TV-Röhre und im CERN ausgenützt. Auch in den HALL-Sonden zur Magnetfeldmessung spielt er eine Rolle. Lesen Sie kurz im Metzler-Physik nach, wenn Ihnen dieses Stichwort nichts (mehr) sagt: (Greiner 92, 228-230). Zwingt man die Elektronen in eine eindimensionale Schicht (Metall-Oxid-Silizium-Struktur), dann sind wiederum die Voraussetzungen unserer Theorie erfüllt. Die kreisenden Elektronen dürfen dann aber nur die erwähnten Drehimpuls-Portionen besitzen. So entsteht der *Quanten-Hall-Effekt*, den Klaus von Klitzing 1980 entdeckt hat. Er erlaubt heute die direkte Verknüpfung der "antiken" Masseinheit "Ohm" mit den Naturkonstanten e und h !

**Wir fassen zusammen:**

Die Randbedingungen bei Rotationssymmetrie führen mit der Schrödingergleichung auf die Quantisierung des Drehimpulses. Jede Zustandsfunktion gebundener Quantenobjekte besitzt deshalb auch einen bestimmten Drehimpuls. Im Minimum ist er 0.

2.6 Elektronen im Festkörper

Im Chemieunterricht haben sie schon das Schalenmodell für den Aufbau der Atome kennengelernt. Die Elektronen besitzen verschiedene Energien, die einer sogenannten Schale zugeordnet werden. Wie diese Schalen zustandekommen, werden wir in Additum 2 besprechen. Das chemische Verhalten der Atome wird durch die Elektronen in der äussersten von Elektronen besetzten Schale bestimmt. Dadurch erhält man das Periodensystem mit in den Gruppen angeordneten Atomen mit ähnlichen Eigenschaften.

Ein Festkörper ist eine räumlich feste, periodische Anordnung von Atomen. Die elektrischen Eigenschaften des Festkörpers werden wiederum durch die Elektronen in der äussersten besetzten Schale der Atome bestimmt.

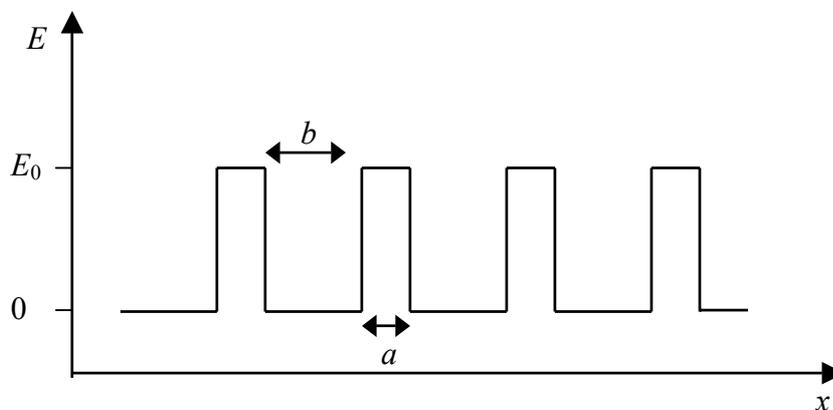


Aufgabe 2.10: Periodensystem und Leitfähigkeit

Kann man die Leitfähigkeit der Festkörper einer Gruppe bzw. mehreren Gruppen im Periodensystem zuordnen?

Im folgenden stellen wir ein Modell vor, mit dem sich die Unterschiede von elektrisch leitenden, halbleitenden und isolierenden Festkörpern, wie Kupfer, Silizium und Diamant erklären lassen. Dazu verwenden wir die Schrödingergleichung. Das Modell vereinfacht den dreidimensionalen Festkörper zu einer Dimension. Trotzdem erklärt es die wesentlichen Eigenschaften der Elektronen in einem Festkörper.

In Abschnitt 2.4 führte der Potentialtopf zu diskreten Energie Niveaus. Im Kronig-Penney Modell wird der Festkörper durch eine Aneinanderreihung von Potentialtöpfen beschrieben (Figur 2.8).



Figur 2.8: Das Potential im eindimensionalen Festkörper

Die Elektronen können sich in diesem Potential bewegen. Um dieses Modell zu berechnen, braucht man komplexe Zahlen. Damit wir hier keine Zeit mit Mathematik verlieren, wird der für die Quantenmechanik typische Lösungsweg nur skizziert.

Um die Schrödingergleichung zu lösen unterteilen wir die x-Achse in Gebiete mit $E = E_0$ und mit $E = 0$.

Die Lösung für den Fall $E = 0$ kennen wir schon vom Tunneleffekt:

$$\psi_i(x) = A \cos(kx + \delta)$$

mit

$$k^2 = 2mE/(\hbar/2\pi)^2$$

Die Energie der im Festkörper gebundenen Elektronen ist kleiner als E_0 .

Die ψ -Funktion für die Gebiete mit $E = E_0$ ist uns aber auch schon aus dem Tunnelproblem bekannt:

$$\psi_a(x) = B e^{\kappa x} + C e^{-\kappa x}$$

mit

$$\kappa^2 = 2m(E_0 - E)/(h/2\pi)^2$$

Nun müssen wir die Randbedingungen bei den Potentialsprüngen betrachten. Zusätzlich muss die ψ -Funktion periodisch in x sein. Um die Rechnung zu vereinfachen greifen wir zu einem mathematischen Trick. Wir lassen a gegen 0 gehen und E_0 gegen unendlich. Gleichzeitig bleibt das Produkt aus a und E_0 konstant. Dies bedeutet, dass wir unendlich hohe unendlich dünne Potentialwände betrachten.

Die Rechnungen sind länglich und kompliziert ohne zum Verständnis beizutragen. Man erhält ein Gleichungssystem für A , B , C und δ . Dies lässt sich lösen, wenn folgende Gleichung erfüllt ist:

$$\cos(\omega a) = \frac{P}{ka} \sin(ka) + \cos(ka) = S(ka)$$

mit

$$P = \frac{m(a+b)}{(h/2\pi)^2} a E_0$$

und

$$\omega > 0.$$

Die linke Seite der oberen Gleichung nimmt Werte zwischen -1 und 1 an. Wenn der Betrag der rechten Seite grösser als 1 ist, kann die Schrödingergleichung nicht gelöst werden.

Man muss aber gar nicht die ψ -Funktion berechnen. Die Gleichung für S erlaubt schon Aussagen über die erlaubten Elektronenenergien des Modell-Festkörpers. Dies ist ein typischer Fall im Bereich der Quantenmechanik. Ohne die genaue ψ -Funktion zu kennen kann man schon Aussagen über Eigenschaften des untersuchten Objektes machen.

In Figur 2.9 wird die rechte Seite der Gleichung als Funktion von ka und somit als Funktion der Energie für $P = 6$ dargestellt. P ist ein Parameter des Modells, den man an Messdaten anpassen muss.

Deutlich erkennt man die sogenannten Verbotenen Zonen in den Bereichen von $ka=4$ und $ka=7$. Im Festkörper kann es keine Elektronen geben, die die entsprechende Energie besitzen. Dazwischen sind die sogenannten Bänder erlaubter Energien. Es gibt nicht mehr nur diskrete Werte von Energien, die ein Elektron besitzen kann sondern ein kontinuierliches Band.

In der Realität ist natürlich alles ein wenig komplizierter. Wenn man die Bänder in drei Dimensionen mit realistischen Potentialen für die einzelnen Atome berechnen will, so muss man das Problem mit leistungsfähigen Computern numerisch berechnen. Als Beispiel zeigt Figur 2.10 die Bandstruktur des bekanntesten Halbleiters, Silizium. Im dreidimensionalen Raum entstehen nicht nur Kurven, sondern Energie-Ebenen. Die Figur zeigt zwei aneinandergelegte Schnitte durch solche Ebenen. Dargestellt ist die Energie erlaubter Zustände entlang zweier verschiedener Richtungen im Festkörper. Deshalb ist das Bild unsymmetrisch. Die Erklärung der speziellen Art der Darstellung von Impuls p gegen Energie müssen wir der Hochschule überlassen. Die durchgezogenen Linien entsprechen den Bändern. Hier kann man ablesen welche Energien im Silizium erlaubt sind. Man erkennt mehrere Bänder erlaubter Energien, die sich auch teilweise überschneiden. Deutlich sieht man eine Bandlücke, d.h. einen Energiebereich, wo kein Band an keinem Ort im Silizium hineinragt. Das unterste mit Elektronen voll besetzte Band nennt man Valenzband, das nächst höhere Band Leitungsband. Die elektrische Leitfähigkeit wird durch die Elektronen im Leitungsband hervorgerufen.

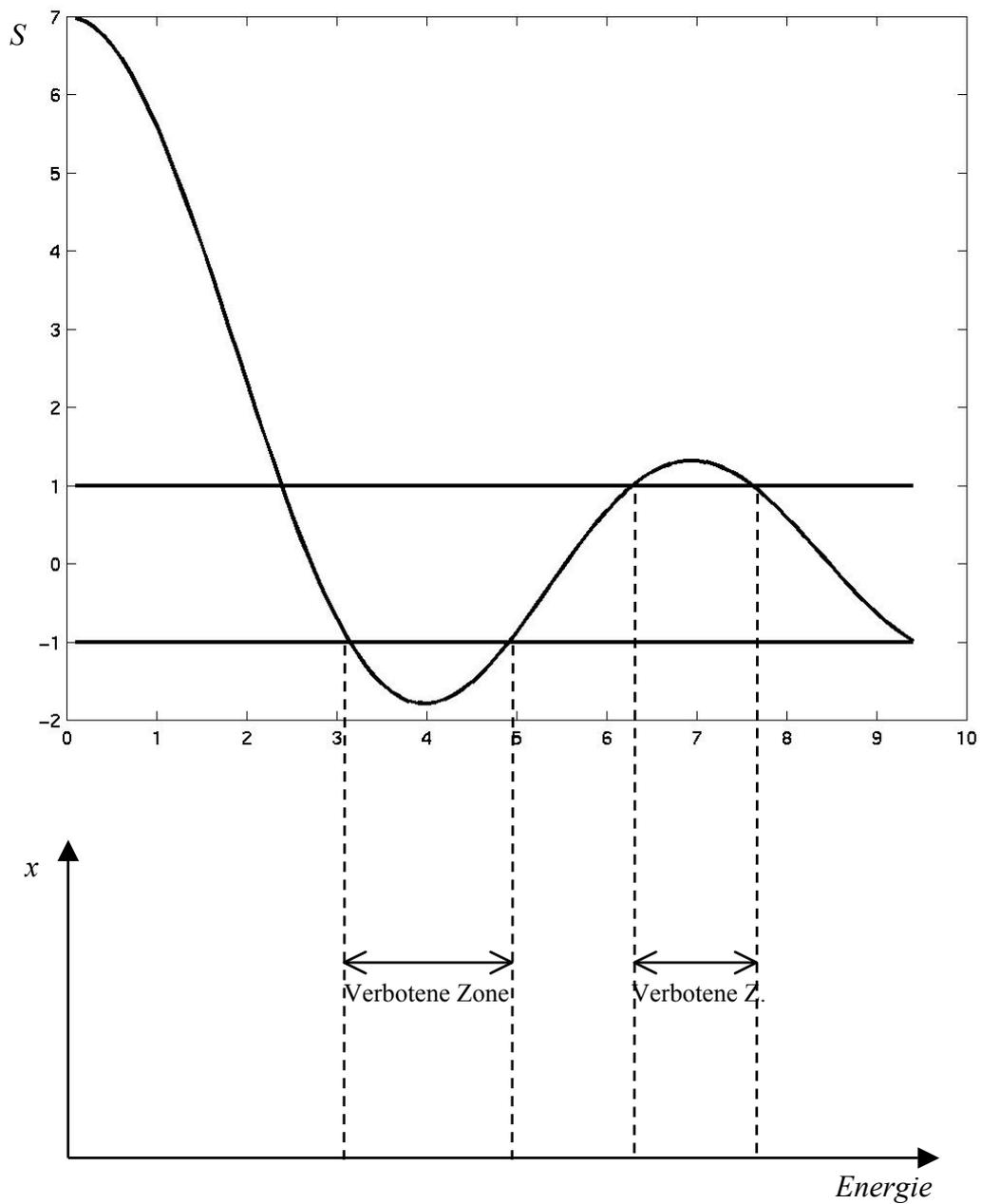


Fig 2.9: Die Lösung des Kronig-Penney Modell

Wir erkennen aber auch, wie gut das Kronig-Penney Modell schon trotz unrealistischer Vereinfachungen die wesentlichen Merkmale darstellt.

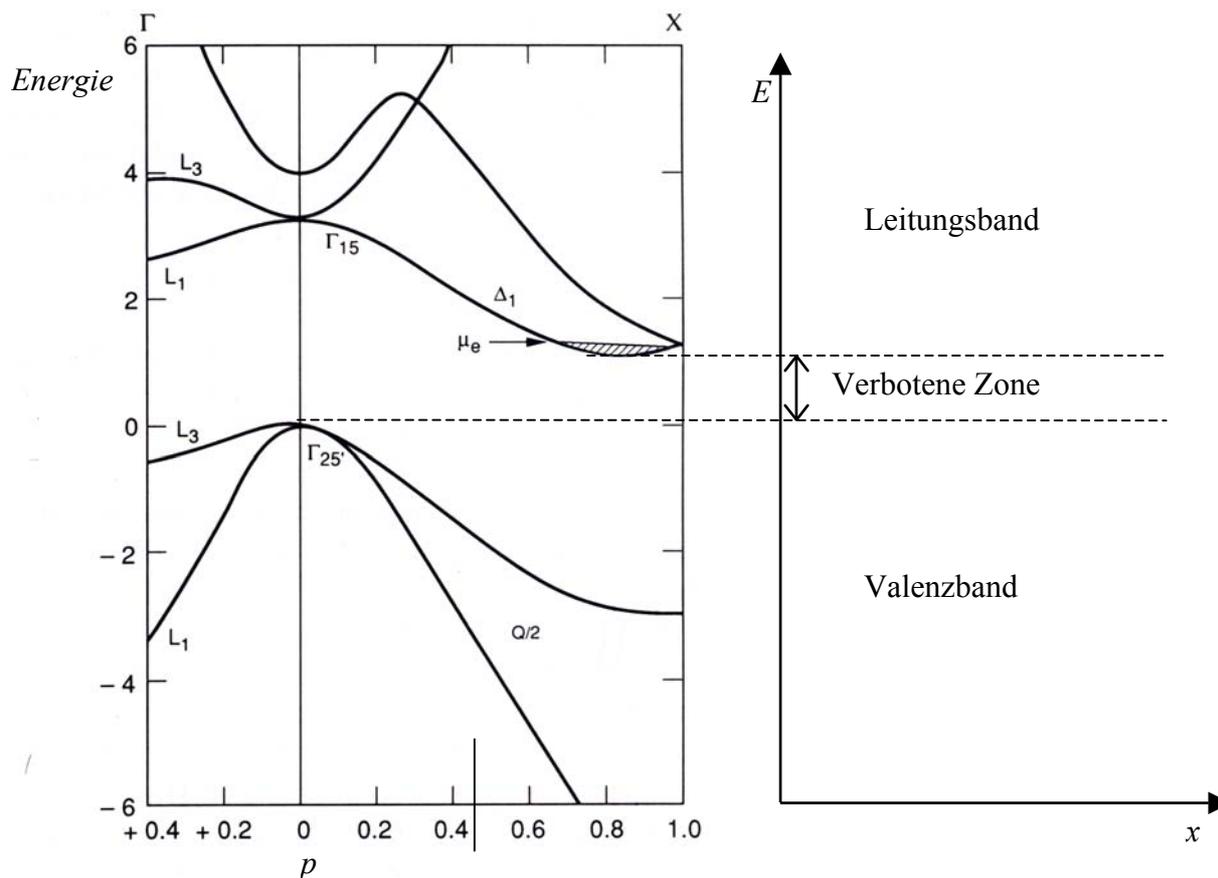


Fig.2.10 Die Bandstruktur von Silizium

(Quelle: Basic Properties of semiconductors Vol.1, ed.:T.S. Moss)



Aufgabe 2.11: Energiebänder aus Energieniveaus

Besuchen Sie im Internet die Homepage:
<http://phys.educ.ksu.edu/vqm/html/eband.html>
 Hier finden Sie einen Energiebandberechner.

- a) Benutzen Sie die Standardeinstellungen für die Tiefe, Breite und den Abstand der Potentialtöpfe. Berechnen Sie die Energien für 1, 2, 5 und 10 Töpfe. Was Beobachten Sie? Bestehen die Energiebänder wirklich aus Bändern?
- b) Welchen Einfluss hat die Tiefe der Potentialtöpfe? Wo entsteht das „Band“ bei tiefen Potentialtöpfen. Welche Bedeutung hat das im Festkörper?

Wie kann man nun mit diesem Modell den Unterschied zwischen Leiter, Halbleiter und Isolator erklären?

Dazu kommt es nicht nur auf die Bänder an, sondern auch auf die Verteilung der Elektronen in den Bändern. Wenn ein Band komplett mit Elektronen gefüllt ist, so können diese Elektronen sich in dem Band nicht bewegen, weil keine freien Plätze zur Verfügung stehen. Dies nennt man dann einen Isolator. Ist ein Band nur teilweise gefüllt so können sich die Elektronen in diesem Band bewegen und ein elektrischer Strom kann fließen. Es entsteht ein Leiter. Bei einem Halbleiter ist eigentlich auch ein Isolator. Das oberste Band ist vollständig mit Elektronen gefüllt. Allerdings ist das nächst höhere Band so dicht bei diesem gefüllten Band, dass die Wärmeenergie der Elektronen bei Zimmertemperatur ausreicht, um die

Elektronen in das höhere Band zu befördern. Aber auch Lichtenergie kann benutzt werden, um ein Elektron in das höhere Band zu befördern. Diesen Effekt nutzt man bei Solarzellen aus. Figur 2.10 fasst den unterschied der Bandstruktur zusammen.

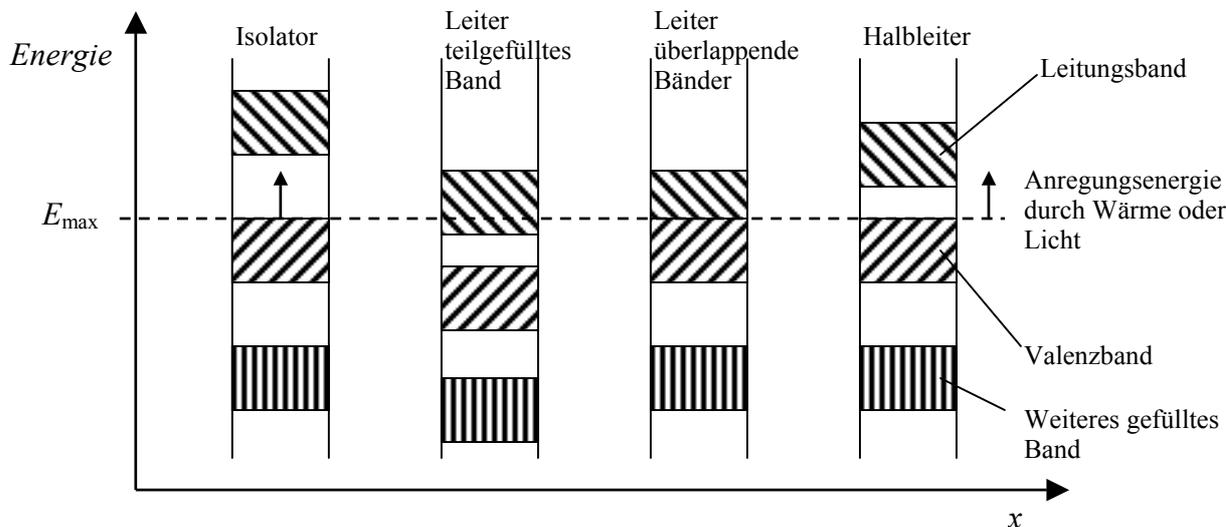
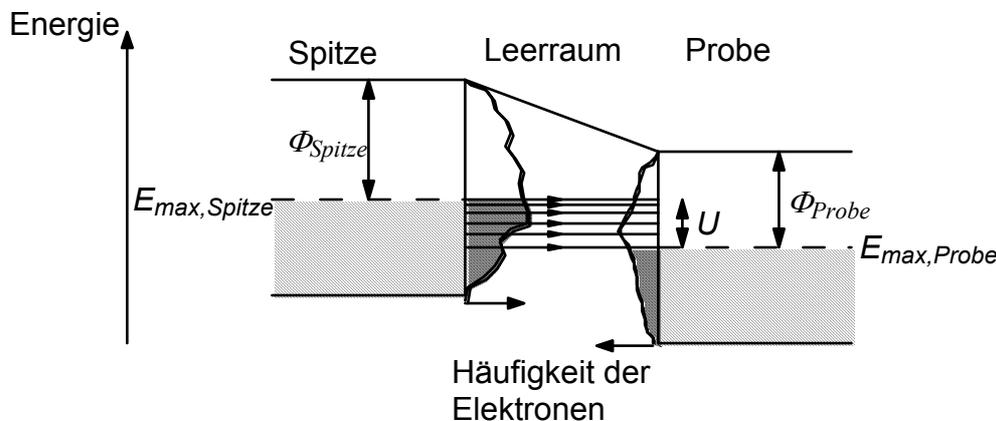
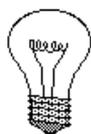


Fig 2.10 Bändermodell für Isolator Leiter und Halbleiter. E_{max} ist die Energie bis zu der Elektronen im Festkörper existieren.

Jetzt verstehen wir die Figur 1.4 aus Kapitel 1 besser. Dargestellt ist das Leitungsband der Spitze und Probe. E_{max} ist die Energie, bis zu der die Leitungsbander gefüllt sind. Die Elektronen tunneln nur in einen nicht besetzten Zustand des Leitungsbandes der Probe.



Figur 1.4: Der Tunnelstrom hängt von der Häufigkeitsverteilung der Elektronen im Metall ab



Wir fassen zusammen:

Die Schrödingergleichung bestimmt die Energieverteilung der Elektronen in einem Festkörper. Es gibt Energien die kein Elektron im Festkörper besitzen kann. Diese Energiebereiche nennt man verbotene Zone. Je nach Vorhandensein oder grösser der verbotenen Zone, ist der Festkörper ein Leiter, Halbleiter oder Isolator.

Lösungen zu den Aufgaben

Aufgabe 2.1: Lösungsansätze für Differentialgleichungen

Nr.1. $f(x) = Ae^{(2x)}$

Nr.4. $f(x) = Ax^3$

Nr.2. $f(x) = Ae^{(x^2)}$

Nr.5. $f(x) = Ae^{(3x)}$ und $f(x) = Be^{(-3x)}$

Nr.3. $f(x) = Ae^{(-x^2/2)}$

Nr.6. $f(x) = A\sin x$ und $f(x) = B\cos x$

Aufgabe 2.2: Berücksichtigen der Randbedingungen

a) $A = 1$ und $B = 9$; $f(x) = e^{3x} + 9e^{-3x}$

b) $C = \sqrt{A^2 + B^2}$; $\tan\delta = -A/B$

Aufgabe 2.3: Bild der Zustandsfunktion

a) Cosinus-Kurve mit x -Achse in der Abszisse und der Wellenzahl k .

b) Lesen Sie wenn nötig im Text nach. Beachten Sie, dass hier für das Potential gilt: $V(x) = 0$.

c) $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [-E]\psi(x)$ Vgl. Aufg. A 1.1 Nr. 6

$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x)$ Mit der Abkürzung $k = \sqrt{\frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [E]}$

$\Rightarrow \psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ A und B sind unbestimmt.

Aufgabe 2.4: Zur Eindeutigkeit der Lösung

Für grosse x überwiegt die erste Teillösung, d.h. $\psi(x) = Ae^{kx}$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ψ^2 wächst exponentiell an und würde in der Metallspitze riesig. Praktisch alle Elektronen müssten sich dort befinden.

Aufgabe 2.5: Zustandsfunktion zeichnen

a)

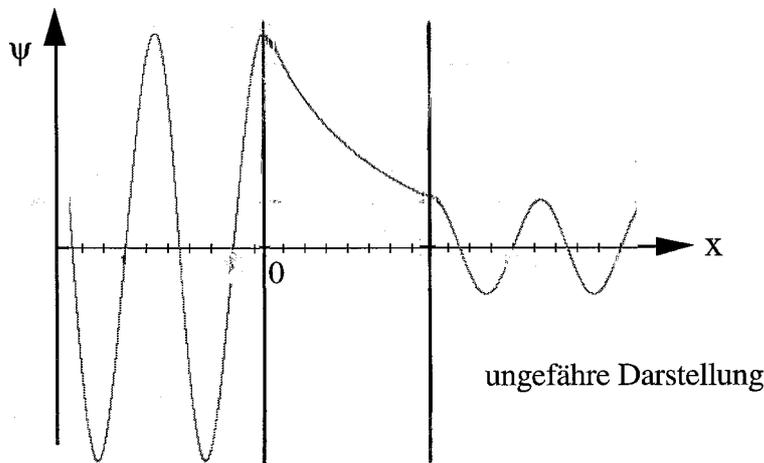


Fig 2.11: Zustandsfunktion für eine Potentialbarriere

b) Die drei Zustandsfunktionen im Innern der Probe, im Aussenraum und in der Metall-spitze:

$$\psi_i(x) = 3 \cos(kx + \delta) \quad \psi_a(x) = B_a e^{-\kappa x} \quad \psi_M(x) = A_M \cos(kx + \delta_M)$$

Beachten Sie, dass die beiden cos-Funktionen *nicht* in Phase sind.

Die physikalischen Randbedingungen führen nun zu folgenden mathematischen Forderungen:

- An der Stelle $x = 0$ ergibt sich ein Gleichungssystem für die Amplitude B_a und für δ :

$$\left. \begin{aligned} 3 \cos(\delta) &= B_a \\ -3k \sin(\delta) &= -\kappa B_a \end{aligned} \right\} \Rightarrow \delta = \arctan\left(\frac{\kappa}{k}\right) = \arctan\left(\sqrt{\frac{V-E}{E}}\right)$$

$$B_a = 3 \frac{k}{\sqrt{\kappa^2 + k^2}} = 3 \sqrt{\frac{E}{V}} < 3$$

- An der Stelle $x = d$ ergibt können Sie ebenso A_m und δ_m bestimmen:

$$\left. \begin{aligned} 3 \sqrt{\frac{E}{V}} e^{-\kappa d} &= A_M \cos(kd + \delta_M) \\ -3 \kappa \sqrt{\frac{E}{V}} e^{-\kappa d} &= -k A_M \sin(kd + \delta_M) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \delta_M = \arctan\left(\sqrt{\frac{V-E}{E}}\right) - kd$$

$$A_M = 3 e^{-\kappa d}$$

c) Das Programm besitzt die folgende Struktur:

1. Input V, E und d	2. FROM x_{\min} TO 0
(Parameterbesetzung)	$y = 3 \cos(kx + \delta)$
$k = \sqrt{E}$	Point (x,y)
$\kappa = \sqrt{V - E}$	FROM 0 TO d
$\delta = \arctan(\kappa/k)$	$y = B_a e^{-\kappa d}$
$\delta_M = \arctan(\kappa/k) - kd$	Point (x,y)
$A_M = 3 e^{-\kappa d}$	FROM d TO x_{\max}
$B_a = 3 \sqrt{E / V}$	$y = A_M \cos(kx + \delta_M)$
	Point (x,y)

Aufgabe 2.6: Potentialtopf selber bearbeiten

a) Vergleichen Sie mit A1.3 c). Die Schrödingergleichung lautet auch hier:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [-E] \psi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x) \quad k = \sqrt{\frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} [E]}$$

b) Die allgemeine Lösung lautet analog zu A1.1 Nr. 6

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{mit} \quad \psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$$

Somit: $\psi(x) = A \sin(kx)$. Für die Wellenzahl k gilt der Wert aus A1.6 a).

c) Die Bedingung am rechten Rand liefert $A \sin(kd) = 0$. Nicht mehr jedes k und jedes λ ist möglich. Das Produkt kd muss ein ganzzahliges Vielfaches von π sein:

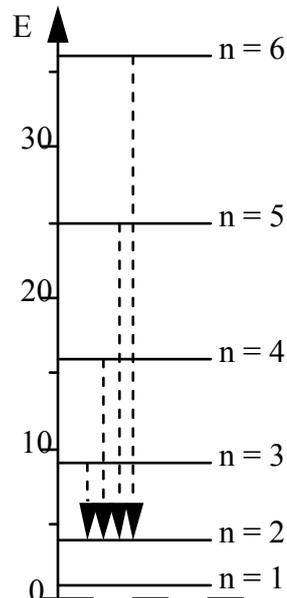
$$kd = n\pi \quad \Rightarrow \quad \frac{2\pi}{\lambda} d = n\pi \quad \Rightarrow \quad \lambda_n = \frac{2d}{n} \quad \text{bzw.} \quad d = \frac{\lambda_n}{2}$$

Zwischen 0 und d befindet sich ein ganzzahliges Vielfaches der halben Wellenlänge.

d) Aus obiger Gleichung folgt sofort eine Bedingung für die quantisierte Energie:

$$kd = n\pi \Rightarrow k^2 d^2 = n^2 \pi^2 \Rightarrow \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} Ed^2 = n^2 \pi^2 \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{8md^2} n^2$$

Aufgabe 2.7: Energieniveaux-Schema



Aufgabe 2.8: Farbzentren

Wenn im Kristall kein sichtbares Licht absorbiert wird, ist er durchsichtig. Absorbieren die Farbzentren vorwiegend im orange-gelben Bereich des Spektrums, dann erscheint der Kristall in der Komplementärfarbe violett. Das ist beim KCl der Fall.

Beim NaCl sind die Gitterabstände d kleiner als beim KCl, denn das Na-Atom hat weniger Elektronen und ist deshalb kleiner. Der Raum, der dem Elektron im Farbzentrum zur Verfügung steht, ist nun kleiner: ein engerer Potentialtopf. Nach unserer quantenmechanischen Rechnung steigt die Energie des eingeschlossenen Elektrons mit $1/d^2$. Die für die Absorption wesentlichen Energiedifferenzen steigen im gleichen Ausmass. Die Absorption beim NaCl wird also bei kürzeren Wellenlängen stattfinden, im blau-violetten Bereich. Die Komplementärfarbe entspricht dem beobachteten *Gelbton* des NaCl.

Aufgabe 2.9: Harmonischer Oszillator (quantenmechanisch)

a) $\psi(x) = Ae^{-ax^2} \Rightarrow \psi'(x) = -2axAe^{-ax^2} \Rightarrow \psi''(x) = -2aAe^{-ax^2} + 4a^2x^2Ae^{-ax^2}$

Alles eingesetzt liefert:

$$-2a\psi + 4a^2x^2\psi = \frac{-2mE}{(\hbar/2\pi)^2}\psi + \frac{mk}{(\hbar/2\pi)^2}x^2\psi$$

Sie können diese Gleichung durch die Funktion $\psi(x)$ teilen. $\psi(x)$ ist also eine Lösung, wenn die zusätzlichen Bedingungen für a und E erfüllt sind.

- b) Teilen Sie die letzte Gleichung durch die Funktion ψ ! Die weiteren Schritte sind im Text nach der Aufgabenstellung 2.9 angegeben.

Aufgabe 2.10: Energiebänder aus Energieniveaus

- a) Bei einem Topf gibt es 2 Niveaus. Bei 2 Atomen erkennt man noch 2 dicht beieinander liegende obere Niveaus und 2 sich fast überlappende unter Niveaus (Lupe). Bei 5/10 Töpfen gibt es 2 „dicke“ Niveaus. Mit Hilfe der Vergrößerung erkennt man, dass diese jeweils aus 5/10 Niveaus zusammengesetzt sind.
- b) Bei sehr tiefen Potentialtöpfen entsteht das Energieband nur in den höheren Energien. Im Festkörper heisst das, dass die Elektronen mit den tiefen Energien in den Potentialtöpfen gebunden sind und nicht zur elektrischen Leitfähigkeit beitragen können. Je tiefer die Energieniveaus in den Töpfen liegen, desto kleiner ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Elektronen in die benachbarten Töpfe tunneln können. Der Wert der ψ -Funktion fällt zwischen den Töpfen sehr schnell auf null. Eigentlich dürfte das Energieniveaus in den unteren Niveaus nicht durchgängig gezeichnet sein!

Nanotechnologie

Übersicht	55
Vorgehen	55
Lernziele von Kapitel 3	55
3.1 There's plenty of room at the bottom	56
3.2 Internet Recherche	56
Lösungen zu den Aufgaben	59

Übersicht

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit Anwendungen des Raster-Mikroskops. Die Rastermikroskopie war der erste Schritt in eine neue faszinierende Welt – die Nanotechnologie.

Sicherlich haben Sie das Wort „Nanotechnologie“ schon irgendwo gelesen oder gehört. Leider gibt es keine kurze Definition für Nanotechnologie. Je nachdem, wen Sie fragen, erhalten Sie unterschiedliche Antworten. Damit ist auch schon etwas wesentliches gesagt. Nanotechnologie ist vielseitig. Im folgenden Kapitel werden Sie einige Facetten dieser Vielseitigkeit kennen lernen und je nach eigenem Interesse vertiefen.

Dieses Kapitel ist kurz. Im ersten Teil lernen Sie eine visionäre Rede aus dem Jahre 1959 kennen und im zweiten Teil werden Sie aufgefordert selber nach Anwendungen der Nanotechnologie im Internet zu suchen.

Vorgehen

Zuerst machen Sie sich mit den Lernzielen vertraut. Danach bearbeiten Sie den ersten Abschnitt. Im Zweiten Abschnitt werden Sie aufgefordert eine Internet Recherche zu erstellen. Die „Lösungen“ zu den gestellten Aufgaben können natürlich nicht komplett sein.

Wir sind gespannt was Sie alles finden werden.

Lernziele von Kapitel 3

- Sie sind in der Lage, den Begriff „Nanotechnologie“ ihrem Musiklehrer zu erklären.
- Sie kennen mindestens zwei technische Anwendungen der Nanotechnologie.

3.1 There's plenty of room at the bottom

Mit diesem Titel "There's plenty of room at the bottom" hat einer der berühmtesten Physiker des letzten Jahrhunderts Richard Feynman im Jahre 1959 eine visionäre Rede gehalten. Den Originaltext findet man unter: <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>.

Wörtlich übersetzt heisst der Titel: Es gibt sehr viel Platz am unteren Ende.

Mit „unterem Ende“ meinte Feynman die Längenskala. Es geht um kleine Dinge, um wirklich kleine Dinge. Kann man die 24 Bände der Encyclopedia Britannica auf eine Stecknadelkopf schreiben? Dazu müsste man die Seiten der Encyclopedia Britannica um das 25000-fache verkleinern. Wenn wir einen Punkt dieser Textes um das 25000-fache verkleinern so erhalten wir einen Punkt der immer noch aus 1000 Atomen besteht.

Nach allem was Sie in den vorangegangenen Kapiteln gelernt haben, ist das in der heutigen Zeit kein Problem mehr.

Aber 1959? Feynman war überzeugt, dass dies möglich sein sollte, weil kein bis dahin bekanntes physikalisches Gesetz dagegen sprach. Er war sogar überzeugt davon, dass man in nicht allzu ferner Zukunft einzelne Atome gezielt positionieren kann.

„... But I am not afraid to consider the final question as to whether, ultimately—in the great future—we can arrange the atoms the way we want; the very *atoms*, all the way down! ...”

Wie wir heute wissen, hat er recht behalten.

Am Schluss der Rede stiftete Feynman zwei Preise. Jeweils 1000 US\$ für den, der es fertig bringt, eine Buchseite um das 25000-fache zu verkleinern und für den, der einen Motor baut, der nur 0.256 cm^3 gross ist.



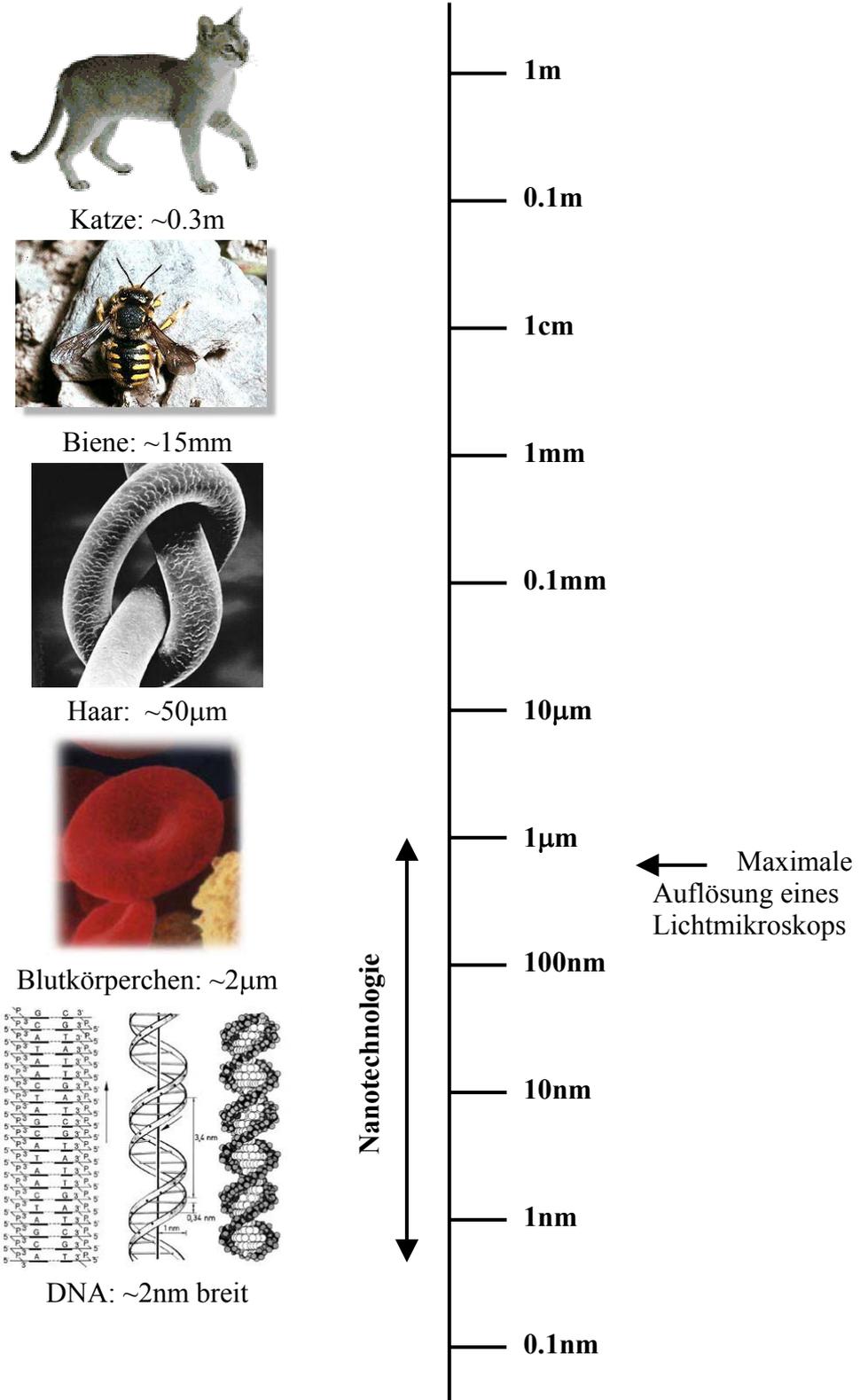
Aufgabe 3.1: Feynman Preise

- Suchen Sie im Internet, ob die beiden „Feynman-Preise“ schon vergeben wurden.
- Die neueste Datenspeicher-Entwicklung von IBM heisst „Millipede“. Sammeln Sie Informationen über diese Entwicklung im Internet. Wie gross wäre ein Millipede das die Informationen aller relevanten Bücher dieser Welt (nach Feynman 24 Millionen Bücher $\sim 10^{15}$ bits), speichert? Wäre damit der Anspruch auf den ersten Preis von Feynman erfüllt?

3.2 Internet Recherche

Was verbirgt sich nun alles hinter dem Begriff „Nanotechnologie“?

Nano ist griechisch und bedeutet Zwerg. Wir beschäftigen uns also mit Zwergen-Technologie. Allerdings sind das sehr kleine Zwerge. Nano wird auch als Vorsatz bei Einheiten verwendet und steht hier für 10^{-9} . Alles was sich mit der Herstellung und/oder Charakterisierung von Objekten beschäftigt, die hundert bis einige 10^{-9} m (Nanometer) gross (bzw. klein) sind, kann man so als Nanotechnologie bezeichnen. Einen guten Überblick was das bedeutet und wie diese Masseinheit einzuordnen ist, gibt Figur 3.1.



Figur 3.1: Längenskala mit Beispielen aus der Biologie

Wo aber wird die Nanotechnologie eingesetzt und wie klein sind die entwickelten Dinge wirklich?



Aufgabe 3.2: Internetrecherche Nanotechnologie

a) Suchen Sie drei Anwendungen der Nanotechnologie und beschreiben Sie sie in wenigen Sätzen. Als Ausgangspunkt können entweder die Suchmaschine <http://www.google.ch> dienen oder die Webseite <http://www.nanoscience.ch/> (Achtung Englisch!)

b) Was wird alles möglich sein? Welchen ethischen Fragen sind Sie bei ihrer Recherche begegnet?

Zum Abschluss kommen wir noch mal auf das Rastermikroskop zurück. Es war sozusagen der Wegbereiter in die Nanotechnologie.



Aufgabe 3.3: Anwendungen Rastermikroskop

a) Finden Sie zwei bis drei Bereiche, in denen das Raster-Tunnelmikroskop oder das Raster-Kraftmikroskop eingesetzt wird bzw. damit geforscht wird. Suchen Sie dafür auf dem Internet (evtl. auch auf Englisch: Scanning Tunneling Microscope, STM bzw. Atomic Force Microscope, AFM), in den “Physikalischen Blättern” oder im “Spektrum der Wissenschaft”. Beschreiben Sie jede Anwendung in wenigen Sätzen.

b) Welche zusätzlichen “Hilfsmittel” werden in diesen Anwendungen benötigt?

Lösungen zu den Aufgaben

Aufgabe 3.1:

- a) Unter <http://www.seas.upenn.edu/~triangle/mems.html> findet man einen Artikel, der den Preisträger des zweiten Preises erwähnt. Schon 1960 ist es William McLellan gelungen einen Motor dieser Grösse zu bauen. Den Preisträger des ersten Preises haben wir nicht gefunden. Vielleicht wissen Sie ja mehr. Allerdings gibt es einen jährliche Richard Feynman Preis des Foresight Instituts (<http://www.foresight.org/>) für Fortschritte in der Nanotechnologie.
- b) Auf der Homepage von IBM findet man eine realisierte Datendichte von 200 Gbit pro inch^2 . Teilt man die 10^{15} bit durch die $2 \cdot 10^{11}$ bit/ inch^2 , so erhalten wir eine Fläche von 5000 inch^2 . Umgerechnet sind das $32,258 \text{ m}^2$. Nehmen wir 100 Seiten pro Buch so haben wir 2,4 Milliarden Seiten. Bei einer Fläche von 310 cm^2 (DIN A5) pro Seite erhalten wir eine Fläche von $744 \cdot 10^5 \text{ m}^2$. Der Verkleinerungsfaktor ist also $744 \cdot 10^5 / 32,258 \sim 2.3$ Milliarden. Der Feynman Preis ist den Forschern von IBM sicher.

Aufgabe 3.2:

- a) Anwendungen
- Beschichtungen mit Lotus Effekt
Durch neuartige Beschichtungen mit Nanopartikeln werden Oberflächen selbstreinigend, wie die Blütenblätter der Lotus-Blume. Kommerziell angeboten werden schon Fenster, die man nicht mehr putzen muss, oder Farben an denen kein Graphit mehr hält.
 - Verbindung Computer-Nerven
Die Verbindung von Nervenzellen mit Halbleiterbausteinen hat verschieden Anwendungsmöglichkeiten. Auf der einen Seite lassen sich so die Rechenleistung künstlich gezüchteter Gehirne mit normalen Computern verbinden. Auf der anderen Seite können menschliche Sinne vielleicht ersetzt oder verbessert werden. Blinden kann man künstliche Augen aus Halbleitern direkt über Nervenzellen mit dem Gehirn verbinden. Aber man kann auch Soldaten mit einem dritten Nachsichtauge „ausstatten“.
 - Quantendot Laser
Durch die Anordnung von aus wenigen Atomen bestehenden sogenannten Quantenpunkten in einem Halbleiterlaser, kann man sehr effiziente Lichtquellen in allen möglichen Farben erzeugen. Diese könnten im Laser-TV für den Heim-Bereich als Lichtquelle eingesetzt werden.
- b) Ethische Fragen treten vor allem bei Biologischen Anwendungen auf wie Mensch-Maschine Verbindungen und bei Eingriffen in die Erbsubstanz. Wenn man wirklich Atome beliebig anordnen kann, so lassen sich auch künstliche DNA-Moleküle herstellen. Durch die hohe Selbstorganisation der biologischen Moleküle, kann man so vielleicht neue Tier- und Pflanzen-Arten erschaffen. Dann wird auch die eierlegende Wollmilchsau kein Problem mehr sein. Aber wird der Mensch diese Entwicklung wirklich beherrschen? Oder entwickeln die neuen Arten eine Eigendynamik, die die Menschheit ausrotten wird?

Aufgabe 3.3:

a) Anwendungen

- Das Rastertunnelmikroskop wird bei der Analyse von chemischen Bindungen verwendet. Durch einen gezielten Stromstoß durch die Spitze kann z.B. die Verbindung des Sauerstoffmoleküls aufgetrennt werden. Die Trennung tritt erst ab einer gewissen Stromstärke auf, die Rückschlüsse auf die Stärke der chemischen Bindung zulässt.
- Die Rasterkraftmikroskopie wird bei biologischen Proben verwendet, da man auch nichtleitende Substanzen untersuchen kann. Es können aber auch elektrische oder magnetische Felder in leitenden Substanzen, bzw. an deren Oberflächen, untersucht werden.

b) Hilfsmittel: Vakuumkammern, Laser und Photodioden, Tische mit Schwingungdämpfung

Atome sehen mit dem Raster-Tunnel Mikroskop

Anleitung zum Arbeiten mit dem *easyScan*

A1.1	Beschreibung der Apparatur	A1.3
A1.2	Das RTM betriebsklar machen	A1.9
A1.3	Messen mit dem RTM <i>easyScan</i>	A1.12
A1.4	Überlegungen zum Bild der Graphitoberfläche	A1.15
A1.5	Goldoberfläche mit dem RTM beobachten	

Beenden der Messung
Lösung der Aufgaben
Literatur

Lernziele von Additum1

- Nach dem Studium dieser Anleitung können Sie eine Aufnahme der atomaren Struktur von Graphit mit dem Raster-Tunnel-Mikroskop (RTM) *easyScan* selbständig durchführen
- Sie verstehen die Funktionsweise und den Aufbau des RTMs.
- Sie können die Aufnahme der Graphitoberfläche richtig interpretieren.

A1.1 Beschreibung der Apparatur

Bevor sie die Aufnahmen machen lernen Sie hier die Apparatur kennen. Die Funktionsweise der einzelnen Teile des RTMs werden erklärt.



Figur A1.1: Das RTM besteht aus dem Messkopf (1), der Elektronik (2) und dem Computer. Unter dem Messkopf ist die Gummimatte (schwarz) zu sehen. Die Steinplatte ist auf vier Gummifüsse (3) gestellt.

Das RTM kann grob in 3 Teile gegliedert werden (Figur 1):

1. Der Messkopf
2. Die Messelektronik
3. Der Computer (PC bzw. MAC)

Der Messkopf

Der Messkopf (Figur 2) ist das Herzstück des RTMs: hier wird die Oberfläche der Probe mit der Messspitze abgetastet. Zwischen der Spitze und der Probe fließt der Tunnelstrom. Dieser sehr kleine Strom wird im Messkopf mit einem höchst empfindlichen Vorverstärker (Operationsverstärker) in eine Spannung umgewandelt. Die Spannung wird der Messelektronik weitergegeben und stellt das Messsignal dar.



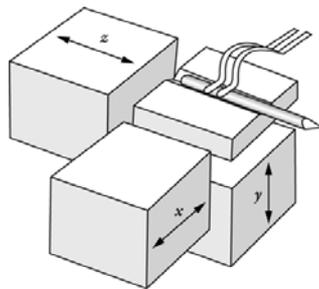
Figur A1.2 Der Messkopf: In der Mitte (bei der Spitze der Pinzette) befindet sich die Messspitze. Rechts davon sind die zwei Führungsschienen zu sehen. Im rechten Teil des Messkopfs befinden sich die zwei beweglichen weissen Keramikplättchen des Reibungsmotors.

Um Atome sichtbar zu machen, muss die Spitze genauer als ein Atomdurchmesser (rund 10^{-10} m) positioniert werden. Schwingungen des Untergrundes würden die Messung verunmöglichen, deshalb ist der Messkopf schwingungsfrei auf einer Steinplatte gelagert.

Schwingungsdämpfung:

Die Erdoberfläche ist bekanntlich nicht ruhig: neben den eher seltenen Erdbeben, gibt es kleinere durch die Natur (Wind, Meeresbrandung, Erdschwingungen (Mikroseismik), etc.) und durch die Menschen (Verkehr, gehen im Schulzimmer etc.) verursachte Schwingungen. Wäre der Messkopf direkt d.h. ohne Dämpfung mit dem Boden verbunden, könnte man keine Messung mit atomarer Auflösung machen. Die Messspitze würde die Oberfläche so unruhig und unpräzise abtasten, wie wenn ein Rodeo-Reiter versuchen würde, einen Brief auf dem Rücken einer wilden Kuh zu schreiben.

Die Steinplatte ist mit vier Füßen aus Weichgummi mit dem Tisch verbunden und hat eine grosse Masse (Figur 1 (4)). Die Gummifüsse wirken wie eine Feder mit kleiner Federkonstanten. Wegen der grossen Masse und der kleinen Federkonstanten findet die Eigenschwingung des Systems Steinplatte-Gummifüsse bei einer tiefen Frequenz statt. Die Gummifüsse haben weiter die Eigenschaft, dass eventuelle Schwingungen durch Reibung effizient gedämpft werden. Die durch die Lagerung sehr ruhige Steinplatte trägt den runden Messkopf, auch hier ist eine Gummimatte dazwischen geschoben. Die Übertragung der Schwingungen von der Steinplatte auf den Messkopf ist ebenfalls sehr klein. Diese zwei Dämpfungssysteme sind so aufeinander abgestimmt, dass Schwingungen des Tisches praktisch keine Störung auf die Messung verursachen.



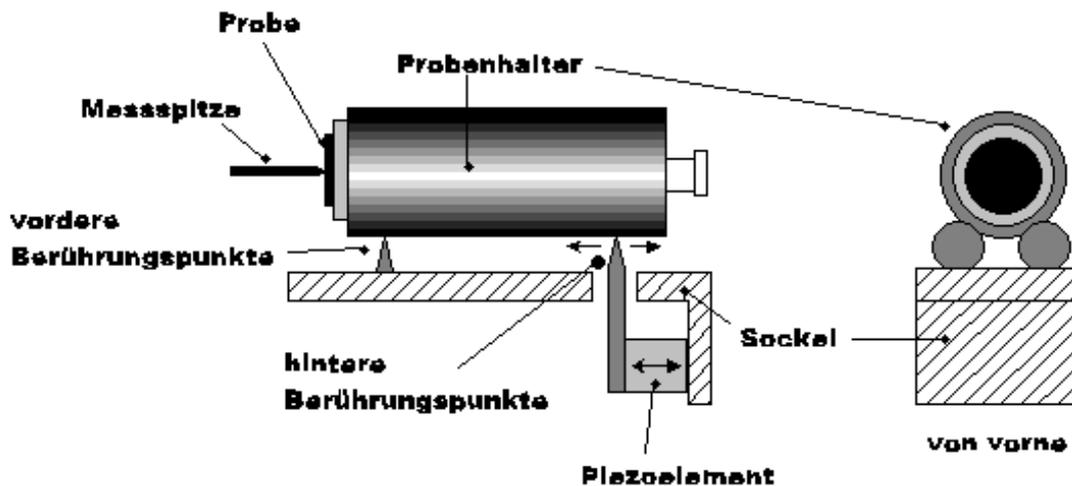
Figur A1.3 Die drei Piezoelemente sind so miteinander befestigt, dass die Spitze in x-, y- und z-Richtung bewegt werden kann. Die Blattfeder hält die Messspitze in der Kerbe einer Keramikplatte.

Messspitze:

Die Messspitze ist ein Stück eines Pt-Ir Drahtes, Länge 5 bis 10 mm, Durchmesser 0.1 mm. Die Spitze wird mit einer kleinen vergoldeten Blattfeder in die Kerbe einer Keramikplatte gedrückt (siehe Figur A1.3). Die Keramikplatte (Aluminum-Oxid) ist direkt auf einem der drei Piezoelementen für die 3-dimensionale Positionierung der Spitze geklebt. Die Blattfeder hat zwei Funktionen: sie hält die Spitze und macht mit ihr elektrischen Kontakt.

Probenhalter:

Der Probenhalter ist ein poliertes Stück Eisen mit Zylinderform. Eisen ist bekanntlich ferromagnetisch. Diese Eigenschaft ist für die Funktionsweise des Reibungsmotors entscheidend. Der Reibungsmotor verschiebt auf eine elegante Weise den Probenhalter mit höchster Präzision (nm Genauigkeit).



Figur A1.4. Schematische Sicht des Probenhalters und des Reibungsmotors. Der Probenhalter liegt vorne auf zwei Punkten auf den Führungsschienen. Hinten wird er von zwei in längsrichtung beweglichen Punkten gehalten. Diese können mit einem Piezoelement hin und her bewegt werden.

Der Probenhalter wird durch 4 Punkte in Position gehalten, (siehe Figur A1.4):

1. Der Zylinder berührt vorne zwei Führungsschienen. In Figur A1.4 sind sie schematisch als vordere Berührungspunkte bezeichnet.
2. Hinten wird der Zylinder an zwei Berührungspunkten (weisse, runde Keramikplättchen) gehalten. In Figur A1.4 sind sie als hintere Berührungspunkte bezeichnet. Die Keramikplättchen sind direkt mit dem Piezoelement verbunden, das die Bewegung des Probenhalters ermöglicht.

Die Gewichtskraft (Normalkraft), mit welcher der Probenhalter auf die 4 Berührungspunkte drückt, wird mit einem Magneten im Messkopf (in der Nähe der zwei hinteren Berührungspunkte) verstärkt. Durch die Platzierung des Magneten wird die Normalkraft dieser zwei Berührungspunkte mehr verstärkt als die der anderen zwei. Die vergrößerte Normalkraft verstärkt die Reibung: Der Reibungsmotor kann dadurch mit höherer Frequenz betrieben werden, was für die Positionierung eine grössere Geschwindigkeit (in nm/sec!) des Probenhalters zur Folge hat.



Aufgabe A1.1:

Der Probenhalter mit der Masse m wird symmetrisch vorne und hinten unterstützt. Die Normalkraft ist also vorne und hinten gleich. Nehmen Sie als Vereinfachung, dass die Haftreibungskoeffizienten vorne und hinten gleich sind.

Wie gross ist die Reibungskraft der vorderen Berührungspunkte? Mit welcher Kraft können die hinteren Berührungspunkte den Probenhalter verschieben? Was schliessen Sie daraus für die Beschleunigung und damit für die Bewegung des Probenhalters?

**Aufgabe A1.2:**

Die Berührungskraft (Normalkraft) wird hinten mit einem Magneten verstärkt. Die Normalkraft sei dadurch hinten doppelt so gross wie vorne. Wie gross ist die maximale Beschleunigung des Probenhalters in dieser Anordnung?

Im Probenhalter ist vorne ein zweiter kleiner Magnet montiert; dieser hat mit dem Reibungsmotor nichts zu tun. Er hält die Probe, welche auf einer Eisen-Platte geklebt ist, fest.

Proben:

Mit dem RTM können wegen des Tunnelstromes nur elektrisch leitende Proben untersucht werden. Die Proben müssen mit dem Probenhalter und dem Messkopf elektrisch leitend montiert sein. Da unser RTM an Luft und nicht in Vakuum betrieben wird, ist die Auswahl der möglichen Proben beschränkt. Für uns sind Graphit- und Goldproben geeignet.

Die Proben sind auf einer kleinen Eisen-Platte befestigt. Eisen ist elektrisch leitend (Tunnelstrom) und ferromagnetisch (Probenhalter). Die Proben sind mit Leitsilber (elektrisch leitender Klebstoff) auf der Eisenplatte fixiert.

Graphit: Das kristalline Graphit ist parallel zur Halterungsplatte geschichtet. Die Messspitze tastet die Oberfläche von Graphit entlang dieser Schicht ab.

Gold: Die Goldschicht ist nur wenige 100 nm dick, sie wurde unter Vakuum auf eine Glasplatte aufgedampft. Die Goldschicht ist polykristallin: die Goldatome sind in sehr kleinen Kristallen angeordnet, welche untereinander alle Ausrichtungen annehmen. Die elektrisch leitende Goldschicht ist, wie Graphit, mit Leitsilber mit der Eisenplatte verbunden.

Die Messelektronik

Die Elektronik regelt den Tunnelstrom und stellt die Spannung der einzelnen Piezoelemente für die Positionierung (x,y,z) der Messspitze ein. Die Regelung wird durch einen 8-bit Mikroprozessor digital überwacht. Das zuständige Programm ist auf dem Computer gespeichert und wird bei dem Einschalten der Messelektronik dem Mikroprozessor übermittelt.

Das Computer-Messprogramm *easyScan* versucht mit der Messelektronik via RS-232-Schnittstelle (serielle Schnittstelle) Kontakt aufzunehmen. Stellt *easyScan* fest, dass die Messelektronik nicht reagiert, schickt *easyScan* automatisch das Programm zum Mikroprozessor.

Der Computer

Der Computer überwacht mit Hilfe des Programms *easyScan* die Funktionen, welche vom Mikroprozessor ausgeführt werden. Der Computer dient auch als Schnittstelle zwischen Mensch und RTM. Weitere Details zu den einzelnen Funktionen des Programms entnehmen Sie der Programmanleitung zu *easyScan*.



Aufgabe A1.3:
Wie ist der RTM *easyScan* aufgebaut?



Aufgabe A1.4:
Wie schützt sich der RTM gegen Schwingungen?



Aufgabe A1.5:
Erklären Sie mit einer Skizze wie der Reibungsmotor funktioniert.

Sie kennen nun die einzelnen Teile der Apparatur und ihre Funktionsweise. Sie haben eine kleine Verschnaufpause verdient. Es geht im folgenden um das praktische Zusammenbauen des RTMs.

A1.2. Das RTM betriebsklar machen:

In diesem Arbeitsschritt geht es um das Aufstellen und Verkabeln des RTMs sowie um die Präparierung der Probe und der Messspitze. Die Justierung und die eigentliche Messung wird im nächsten Kapitel beschrieben.

Aufstellen des RTMs

Bevor Sie mit der Verkabelung beginnen, müssen Sie drei Faktoren für das Aufstellen der Apparatur berücksichtigen:

1. Der Tisch auf dem Sie das RTM aufstellen, muss stabil sein! Sie dürfen nicht gleichzeitig darauf arbeiten oder daran stossen.
2. Der RTM darf nicht in der Sonne oder in unmittelbarer Nähe eines Heizkörpers stehen (thermische Effekte).
3. Luftzug muss vermieden werden. Am besten schliessen Sie Türen und Fenster (thermische Effekte, ev. Schwingungen durch Turbulenzen).

Haben Sie diese Punkte berücksichtigt, können Sie das RTM übersichtlich aufstellen. Der Messkopf soll zuerst ohne Probenhalter sein. Falls der Probenhalter noch im Messkopf ist, entfernen Sie diesen sorgfältig. Achtung: Gehen Sie vorsichtig mit der Probe um!

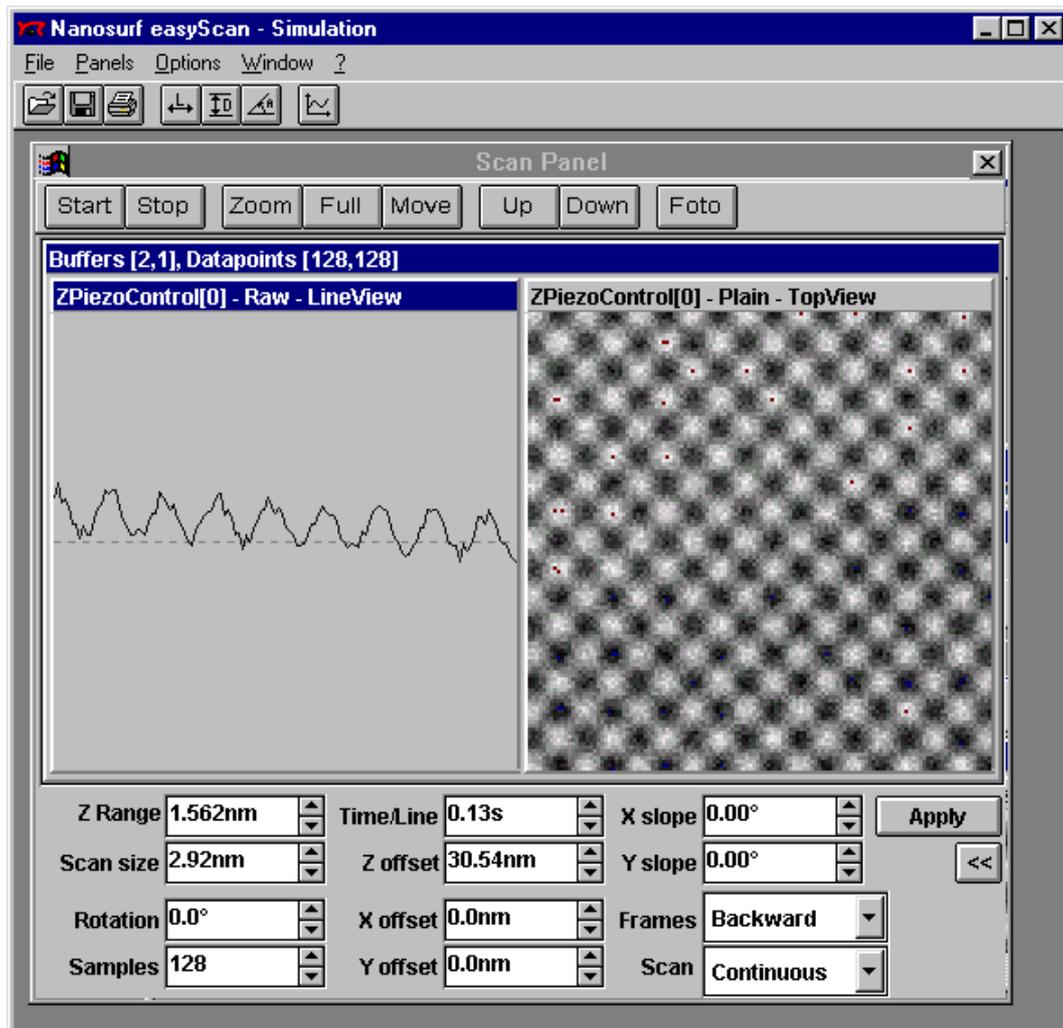
Stellen Sie zuerst den Computer auf. Testen Sie ihn, indem Sie ihn einschalten. Ist alles in Ordnung, können sie den Computer wieder abstellen. Die Verkabelung des RTMs sollte keine Schwierigkeiten bereiten, die Stecker sind alle eindeutig. Beachten Sie jedoch die Reihenfolge der Verbindungen, damit vermeiden Sie Schäden an der Elektronik:

1. Die Messelektronik wird mit dem Computer durch das serielle Kabel verbunden ev. Übergangsstück 9-25 Pins verwenden.
2. Die Messelektronik wird mit dem Messkopf verbunden.
3. Der Netzteil wird mit der Messelektronik verbunden.

Wenn alle Verbindungen hergestellt sind, können Sie Computer und Messelektronik einschalten.

Einschalten des Programms *easyScan*

Auf dem Computer starten Sie das Messprogramm *EasyScan*. Das Programm startet mit eingestellten Parametern im Simulationsmodus (Figur 5). Für eine detaillierte Beschreibung der Funktionsweise des Programms ist auf die Programmanleitung verwiesen.



Figur A1.5 Programm *easyScan* im Simulationsmodus. Links ist die Darstellung der aktuellen Linie, welche soeben gemessen worden ist. Rechts 2-dim. Bild der Oberfläche. Mit Hilfe der Parameter im unteren Teil kann die Messung optimiert werden.

Drücken Sie auf die Taste *Start*, eine simulierte Messung wird gestartet. Verändern Sie die Steigung *X slope* bis das Messsignal im linken Fenster horizontal ist. Drehen Sie die Messrichtung um 90^0 , indem Sie den Wert *Rotation* auf 90^0 stellen. Verändern sie die Steigung *Y slope* bis das Messsignal im linken Fenster horizontal ist.

Die Höhenempfindlichkeit wird mit *Z Range* verändert. Die Grösse des Bildes wird mit *Scan size* beeinflusst. Verändern Sie beide Grössen, um zu sehen, welchen Effekt sie auf die Messung haben.

Damit Sie eine echte und nicht nur simulierte Messung machen können, müssen Sie zuerst im Menü *Options* die Schaltfläche beim Menüpunkt *Simulate microscope* ausschalten. Der Computer sendet dann automatisch via serieller Schnittstelle das Programm zum Mikroprozessor der Messelektronik; dieser Vorgang wird in einem Fenster kurz angezeigt.

Vorbereitung der Graphit-Probe

Für eine Messung mit atomarer Auflösung muss die Graphitoberfläche absolut sauber sein. Graphit lässt sich wegen seiner kristallinen Struktur sehr leicht reinigen. Der Kristall wird entlang einer Ebene gespalten. Nach längerer Zeit (Wochen) lagern sich Fremdatome aus der

Luft auf der Graphitoberfläche ab. Um wieder eine saubere Oberfläche zu erhalten, brauchen Sie:

1. den Probenhalter,
2. die Probe,
3. ein Stück Klebstreifen sowie
4. eine kleine Pinzette.

Für die Reinigungsprozedur beachten Sie folgende Punkte:

1. Nehmen Sie die Graphit-Probe sorgfältig aus der Plastikdose mit der Pinzette und stellen Sie sie auf die Stirnfläche des Probenhalters. Achtung: nur den Probenhalter und nicht die Probe berühren!
2. Kleben Sie den Klebstreifen gleichmässig auf die Graphitoberfläche. Durch den Klebstreifen sehen Sie, an welchen Stellen die Oberfläche mit dem Klebstreifen Kontakt macht (dunkel). Mit der Pinzette können Sie den Klebstreifen homogen aufkleben (nicht zu viel Druck!).
3. Sie entfernen den Streifen sorgfältig und beobachten dabei, dass die oberste Schicht des Graphits auf dem Klebstreifen haften bleibt.

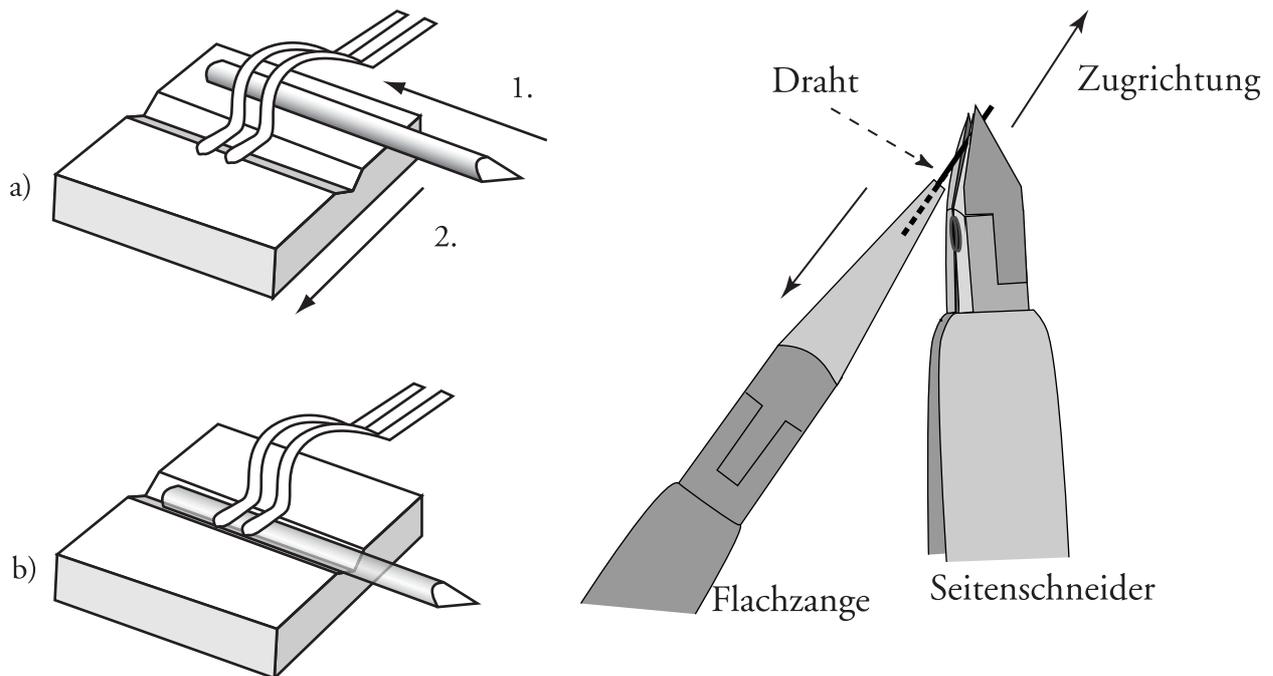
Die Graphitoberfläche ist nun atomar sauber. Achten Sie darauf, dass sie auch sauber bleibt!

Die Goldprobe kann nicht gereinigt werden. Sie können sie direkt messen.

Vorbereitung der Messspitze

Wie auf der Probe lagern sich auch auf der Messspitze Fremdatome an, welche die Messung stören. Die Messspitze kann mehrmals nachgespitzt werden. Sie ist erst dann zu kurz, wenn sie nicht mehr stabil in der Halterung des Messkopfes montiert werden kann (Länge < 5 mm). Für das Spitzen brauchen Sie:

1. Pt-Ir Draht oder eine alte Messspitze (aus dem Messkopf entnehmen),
2. einen kleinen scharfen, sauberen Seitenschneider,
3. zwei kleine Pinzetten, eine Flachzange
4. sauberen Aethylalkohol,
5. Wattestäbchen für die Reinigung.



Figur A1.6. Links: Abschneiden der Messspitze mit einem Seitenschneider.
Rechts: Vorgehen beim Montieren der Messspitze.

Bevor Sie anfangen, müssen alle Werkzeuge mit Aethylalkohol vom Fett gereinigt werden. Das Spitzen des Pt-Ir-Drahtes erfordert eine gute Beleuchtung und sehr ruhige Hände. Die Spitze wird folgendermassen hergestellt (Figur A1.6):

1. Halten Sie mit einer Pinzette oder Flachzange die alte Spitze oder das Ende des neuen Drahtes.
2. Mit dem Seitenschneider schneiden Sie die Spitze in einem stumpfen Winkel (20° - 45°). Gleichzeitig ziehen Sie mit einer kleinen Kraft den Seitenschneider und die Messspitze leicht voneinander.

Die auf das Drahtstück ausgeübte Kraft zieht beim Schneiden die Schnittstelle auseinander. Die scharfe Messsonde mit einem Atom an deren Spitze kann so einfacher entstehen. Als Vergleich können Sie sich Glas vorstellen: Eine Glasstange können Sie auseinander brechen, wobei die Schnittstelle stumpf wird. Wenn Sie aber das Glas durch Erhitzen weich machen und gleichzeitig die Schnittstelle auseinanderziehen, entsteht eine scharfe Spitze. Diese Methode ist unbedingt zu befolgen (siehe Punkt 2), sonst entsteht keine saubere Spitze, was eine Messung verunmöglicht.

Das Resultat eines Pt-Ir Drahtes geschnitten mit der oben beschriebenen Methode zeigt die Figur A1.7. Sie erkennen deutlich im unteren Bereich die Quetschspuren des Seitenschneiders als verschmierte Flächen. An der Spitze ist die Reissstelle zu sehen, welche entsteht, wenn Sie beim Schneiden noch gleichzeitig die Schnittstelle auseinanderziehen. Da der Tunnelstrom exponentiell mit dem Abstand abnimmt (siehe Theorieteil), fließt er nur über das vorderste Atom der Spitze.

Nach dem Schärfen der Messspitze wird diese sorgfältig zwischen Keramik und Blattfeder im Messkopf mit Hilfe der zwei Pinzetten eingespannt (Figur A1.6 rechts). Achten Sie darauf, dass die Messspitze richtig eingesetzt wird: neue Spitze gegen die Probe. Der kleine Draht ist nicht leicht in die Halterung einzuführen, eine kleine falsche Bewegung genügt, damit die Messspitze wegspickt und verloren geht!



Figur A1.7. Messspitze aus Pt-Ir ca. 200-fach vergrößert.



Aufgabe A1.6:

Haben Sie die Anleitung gut befolgt? Ihr Erfolg im nächsten Kapitel hängt direkt davon ab

Der Weg zu den Atomen ist lang und muss verdient werden! Jetzt haben Sie alles vorbereitet: die eigentliche Messung kann bald beginnen!

A1.3. Messen mit dem RTM *easyScan*

Die Messung mit dem RTM verlangt, dass die Messspitze und die Probe nur durch einen sehr kleinen Abstand voneinander getrennt sind (Abstand rund ein Atomdurchmesser!) Erst wenn dieser Abstand erreicht wird, kann die Messung beginnen.

Proben-Platzierung und Annäherung zur Messspitze

Zuerst müssen Sie den Probenhalter samt Probe im Messkopf platzieren. Mit Hilfe einer Lupe und einer guten Lampe verschieben Sie zuerst von Hand und dann mit dem Reibungsmotor die Probe gegen die Spitze (Figur A1.8).



Figur A1.8. Sorgfältige Platzierung und Verschiebung des Probenhalters.

Achten Sie darauf, dass die Probe die Messspitze nicht berührt. Eine Berührung könnte zur Folge haben, dass die Spitze neu zu formen wäre, und dass die Oberfläche beschädigt wäre. Für die Kontrolle der Bewegung schauen Sie am besten auf das Spiegelbild der Spitze auf der Graphitoberfläche. Von Hand schieben Sie bis auf rund einen Millimeter Abstand.

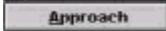
Um Luftturbulenzen bei der Messspitze zu vermeiden, stülpen Sie die zylindrische Glasschale über den Messkopf.

Mit dem Schnellgang des Reibungsmotors (Mit der linken Maustaste auf  im Fenster *Approach Panel* drücken), können Sie die Probe noch näher zur Spitze bewegen. Verfolgen Sie die Bewegung unbedingt mit der Lupe und einer guten Lichtquelle. Der LED auf dem Messkopf gibt folgende Informationen:

- orange: der Strom ist Null, d.h. kein Kontakt,
- grün: Tunnelstrom ist OK,
- rot: zu hoher Strom (=Kurzschluss) bzw. mechanischer Kontakt (=Zusammenstoß).

Die Probe darf die Spitze nicht berühren. Die grobe Annäherung haben sie erreicht, wenn der Abstand 0.2 bis 1 mm beträgt. Nach der Handjustierung stellen Sie das Licht aus, damit keine thermische Störeffekte entstehen.

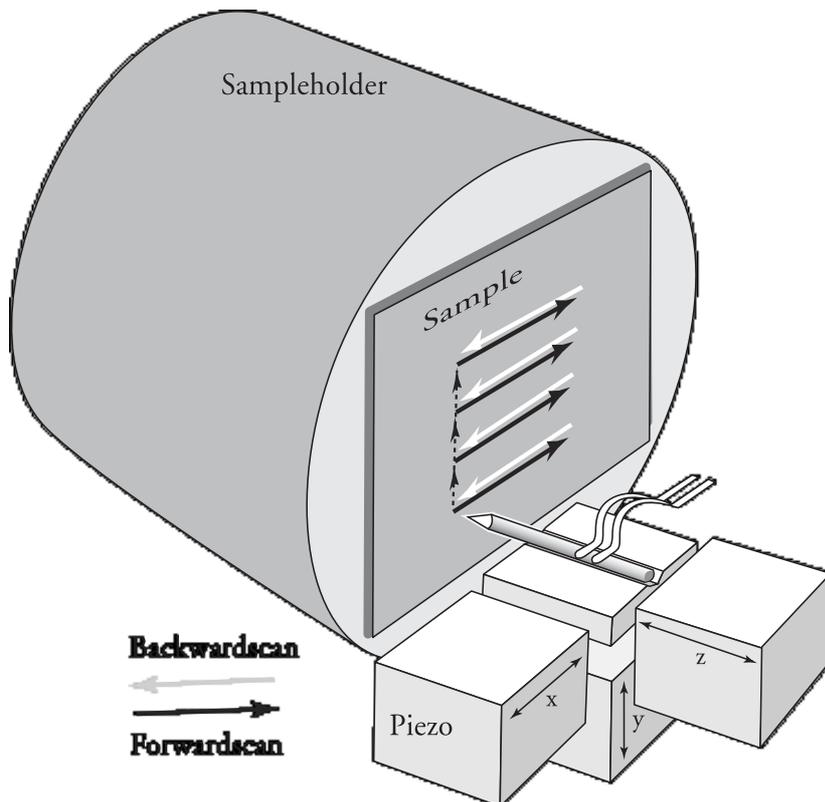
Die Messspitze ist jetzt in der Nähe der Oberfläche. Die Messspitze ist noch zu weit von der Probenoberfläche um einen Tunnelstrom entstehen zu lassen (LED=orange).

Die endgültige Annäherung (Tunnelstrom fließt) erfolgt mit Hilfe des Mikroprozessors: Drücken Sie auf die Taste  im Fenster *Approach Panel*. Der Reibungsmotor bewegt die Probe sehr langsam gegen die Spitze und misst ständig, ob ein Strom zwischen der

Messspitze und der Probe fließt. Sobald ein kleiner Strom (Tunnelstrom) beobachtet wird, stoppt der Mikroprozessor die Bewegung.

Justierung der Bewegung der Messspitze gegenüber der Proben-Oberfläche

Die Messung kann beginnen! Drücken Sie die Schaltfläche *Start* im Fenster *View Panel*. Die Proben-Oberfläche (x, y) und das Koordinatensystem der Messspitze (x, y, z) sind im Allgemeinen nicht parallel und müssen vorher justiert werden (Figur 9).



Figur A1.9. Die Probenoberfläche muss mit der Bewegungsrichtung (x, y) der Messspitze parallel sein.

Die Justierung soll die Bewegung der Messspitze in x - und y - bzw. z -Richtung parallel bzw. senkrecht zur reellen Oberfläche ausrichten. Die Justierung erfolgt nach folgendem Vorgehen, die Bedienungsfelder sind alle im Fenster *Scan Panel* (Figur A1.5):

1. Sichtfeld (x und y Dimensionen) einstellen: *Scan size* = 400 nm.
2. Höhenbereich (z -Messbereich) einstellen: *Z Range* = 200 nm.
3. Erscheint die Linie im linken Sichtfeld (*LineView*) nicht horizontal, verändern Sie den Winkel *X slope* so weit bis die Linie horizontal ist.
4. Stellen Sie die *Rotation* auf 90° ein, um auch die y -Richtung parallel zur Oberfläche auszurichten.
5. Erscheint die Linie im linken Sichtfeld (*LineView*) nicht horizontal, verändern Sie den Winkel *Y slope* so weit bis die Linie horizontal ist.
6. Die Linie im Sichtfeld *Line View* sollte immer in der Mitte sein. Wandert diese Linie nach oben oder nach unten (thermische Effekte), so ist diese mit Hilfe der Einstellung *Z offset* zu korrigieren.

Nach dieser Prozedur ist die Bewegung der Spitze parallel zur Oberfläche. Die x- und y-Richtung stellen die Koordinaten der Oberfläche dar, die z-Richtung ist die Höhe (Oberflächenstruktur).

Um Atome zu sehen, müssen Sie die Empfindlichkeit verbessern respektive die Vergrößerung erhöhen:

Verkleinern Sie das Sichtfeld (*Scan size*) und den z-Messbereich (*Z Range*) in kleinen Stufen, z.B. um je einen Faktor 2.

Sie beobachten eventuell Stufen auf der Oberfläche, diese sind Übergänge zwischen verschiedenen Schichten des Graphitkristalls. Falls Sie eine regelmässige Musterung entdecken, sehen Sie erstmals die atomare Struktur der Oberfläche. Vergrössern Sie die Empfindlichkeit bis Sie die hexagonale Struktur von Graphit eindeutig erkennen können.

Atomare Auflösung erreichen Sie erst bei einem Bildausschnitt von rund 5 nm x 5 nm und einer z-Höhe von rund 0.5 nm. Bei der Messung ist immer auf eine Anpassung des Wertes von *Z offset* zu achten. Verlieren Sie die Übersicht, so vergrössern Sie das Sichtfeld ('Scan size') und erhöhen den z-Messbereich ('Z Range'), danach gehen Sie zu Nummer 6. zurück und versuchen erneut Atome zu sehen.

Falls Sie jetzt die Oberflächenstruktur von Graphit erkennen können, haben Sie ausgezeichnet gearbeitet.

Falls sie noch nicht so weit sind, müssen Sie sich überlegen, welche Punkte dieser Anleitung Sie vielleicht nicht ganz richtig befolgt haben. Finden Sie keinen Fehler, so fragen Sie Ihren Physiklehrer oder ihre Physiklehrerin, was Sie eventuell verbessern könnten, um Atome zu sehen.

A1.4. Überlegung zum Bild der Graphitoberfläche

Sie sind in der Lage, Bilder der atomaren Struktur der Graphitoberfläche auf dem Computer darzustellen. Es geht darum, zu lernen, was Sie auf dem Bild sehen.

Das RTM misst ununterbrochen und stellt das Bild kontinuierlich auf dem Bildschirm dar. Wenn das Bild besonders ruhig ist, speichern Sie das aktuelle Bild der Graphitoberfläche ab, und drucken Sie es auf einem Printer aus.

Auf dem Bild sehen Sie weiss bzw. schwarz hohe bzw. kleine Werte von z (Höhe). Weiss bedeutet eine Erhöhung schwarz eine Vertiefung.

Interpretation des Bildes

Um das Bild richtig zu deuten, repetieren Sie die Erkenntnisse aus dem Kapitel 1. Dazu müssen Sie folgende Fragen richtig beantworten können:

**Aufgabe A1.7:**

Auf welche Grösse ist der Tunnelstrom empfindlich?

**Aufgabe A1.8:**

Welche kristalline Struktur hat Graphit?

**Aufgabe A1.9:**

Welche Struktur hat die Oberfläche von Graphit?

Kontrollieren Sie selber die Antworten auf die gestellten Fragen mit Hilfe des Kapitel 1. Erst wenn Sie sicher sind, die Theorie verstanden zu haben, beantworten Sie folgende Fragen zum RTM-Bild von Graphit:

**Aufgabe A1.10:**

Welche Struktur hat das RTM-Bild der Graphitoberfläche? Welcher Unterschied besteht zur kristallinen Oberfläche?

**Aufgabe A1.11:**

Erklären Sie den Unterschied, indem Sie den Tunneleffekt und die Kristallstruktur von Graphit berücksichtigen.

Die Antworten finden Sie im Kapitel 1. Wenn Sie die obigen Fragen beantwortet haben, können Sie das gemachte Bild vervollständigen:

**Aufgabe A1.12:**

Zeichnen Sie auf Ihrem RTM-Bild der Graphitoberfläche die kristalline Graphitstruktur ein.

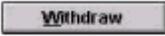
**Aufgabe A1.13:**

Geben Sie eine Längenangabe auf das Bild. Bestimmen Sie daraus die Vergrösserung.

A1.5. Messung der Goldprobe

Falls Sie die Graphit-Probe sauber aufgenommen haben und verstanden haben, was Sie mit dem RTM auf dem Bild sehen und noch Zeit haben, dann können Sie die Goldprobe mit dem RTM untersuchen.

Probenwechsel

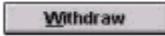
Mit der Taste  im *ApproachPanel* fahren Sie die Spitze zurück. Dabei beobachten Sie, dass die LED von grün auf orange wechselt: der Tunnelstrom wird unterbrochen. Mit der Taste  fahren Sie den Probenhalter noch weiter zurück in einen sicheren Abstand zur Messspitze. Sie wechseln die Probe aus, dabei achten Sie darauf, die Oberflächen nicht zu berühren! Sie dürfen die Goldprobe nicht reinigen, Sie würden die Goldschicht beschädigen. Die Positionierung der Probe geht gleich wie beim Graphit.

Messung der Goldprobe

Gold hat im Gegensatz zu Graphit eine homogenere Elektronenverteilung an der Oberfläche. Deshalb ist es mit unserer Apparatur nicht möglich, die Kristallstruktur von Gold zu erkennen. Sie messen Gold am besten über eine grössere Fläche als Graphit. Die Empfindlichkeit der Höhe *Z range* ist je nach Stelle unterschiedlich.

Sichtbar sind Stufen auf der Oberfläche. Sie kommen von Unregelmässigkeiten beim Aufdampfen der Goldschicht im Vakuum her. Eine Stufe kann bedeuten, dass dort die Goldschicht um eine oder mehrere Monolagen (= atomare Schicht) dicker ist. Falls das Bild flach erscheint, d.h. Sie sehen keine Stufen, ist der Wert von *Z range* zu gross oder Sie haben eventuell eine Stelle mit homogener Schichtdicke erwischt. Um Stufen zu finden, genügt es, die Spitze zurückzufahren, den Probenhalter wenig zu verdrehen und wieder heranzufahren.

A1.6. Beenden der Messung

Um eine Messung zu beenden, wird zuerst der Scan mittels der Schaltfläche *stop* im Fenster *View Panel* angehalten. Danach wird mit  und dann mit  im Fenster *Approach Panel* der Probenhalter zurückgefahren. Die Messspitze befindet sich jetzt in einem sicheren Abstand zur Probenoberfläche. Sie können die Probe vom Probenkopf abnehmen und wieder versorgen.

Sie beenden das Programm und stellen den Computer sowie die Messelektronik ab. Sie versorgen sorgfältig das RTM samt Proben, sowie das benötigte Werkzeug.

Lösungen der Aufgaben

Aufgabe A1.1

Reibungskraft vorne: $F_{RV} = \mu F_{NV}$, Reibungskraft hinten: $F_{RH} = \mu F_{NH} = F_{RV} \cdot F_{NV}$ bzw. F_{NH} ist die Normalkraft vorne bzw. hinten, μ ist der Haftreibungskoeffizient an den Berührungspunkten. Die Bewegung der hinteren Berührungspunkte kann höchstens eine Kraft auf den Probenhalter einkoppeln, welche die Reibung der vorderen zwei kompensiert. Der Probenhalter wird nicht beschleunigt, er bleibt in Ruhe.

Aufgabe A1.2

Bewegungsgleichung: $m \cdot a + F_{RV} = F_{RH}$.

Mit $F_{RV} = \mu F_{NV} = 0.5 \cdot \mu \cdot m \cdot g$ und $F_{RH} = \mu F_{NH} = \mu \cdot m \cdot g$ wird die Bewegungsgleichung $m \cdot a + 0.5 \cdot \mu \cdot m \cdot g = \mu \cdot m \cdot g$ oder wenn Sie nach a auflösen: $a = 0.5 \cdot \mu \cdot g$.

Aufgabe A1.3

Vergleichen Sie Ihre Antwort mit der Beschreibung der Apparatur in diesem Kapitel.

Aufgabe A1.4

Der Messkopf ist mit einer Gummimatte von der massiven Steinplatte getrennt. Die Steinplatte steht auf sehr weiche Gummifüsse. Diese Anordnung entspricht einer Kette: Tisch — weiche Feder (Gummifüsse) — grosse Masse (Steinplatte) — härtere Feder (Gummimatte) — kleine Masse (Messkopf). Dieses mechanische System überträgt sehr schlecht Schwingungen vom Tisch zum Messkopf.

Aufgabe A1.5

Vergleichen Sie Ihre Skizze mit der Figur 4.

Aufgabe A1.6

Die Antwort bekommen Sie im Kapitel 3. Falls die Messung nicht gelingen möchte, kann es daran liegen, dass eine Vorbereitung, welche in diesem Kapitel beschrieben wurde nicht ganz korrekt befolgt wurde.

Aufgabe A1.7

Der Tunnelstrom misst die Elektronendichte auf der Oberfläche der Probe.

Aufgabe A1.8

Hexagonal

Aufgabe A1.9

Sechseckstruktur ohne Zentrum.

Aufgabe A1.10

Sechseckstruktur mit Zentrum

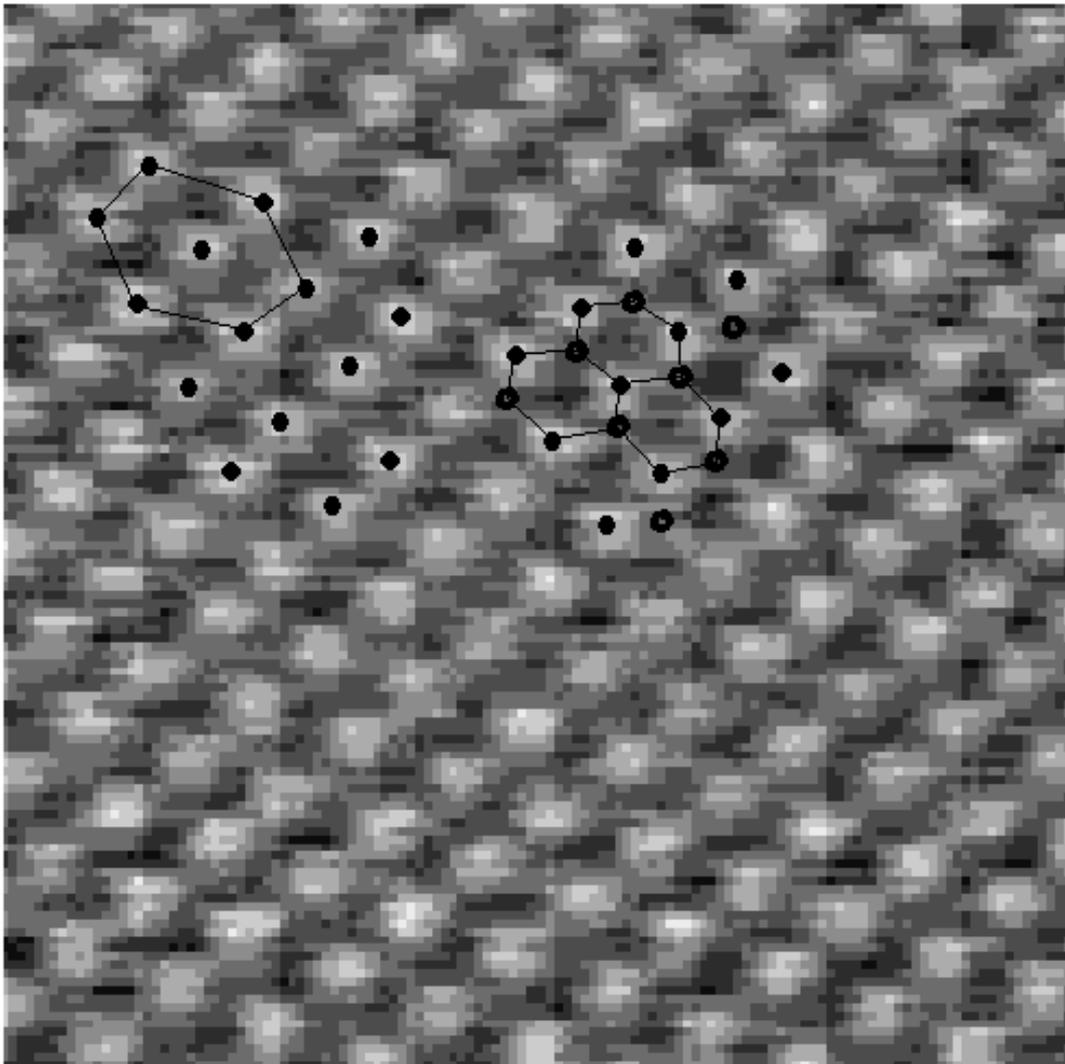
Aufgabe A1.11

Jeder zweite Kohlenstoffatom auf der Oberfläche von Graphit besitzt eine elektronische Bindung mit seinem nächsten Nachbarn auf der darunterliegenden Schicht. Die Elektronendichte an der Oberfläche ist an diesen Stellen bedeutend kleiner als bei einem Kohlenstoffatom ohne direkten Nachbarn in der darunterliegenden Schicht. Weitere Details entnehmen Sie dem Theorieteil.

Da der Tunnelstrom mit zunehmender Elektronendichte zunimmt, *sehen* Sie nur jeden zweiten Kohlenstoffatom der Graphitoberfläche.

Die Oberfläche von Graphit wird nicht als Sechseck ohne Zentrum, sondern als Sechseck mit Zentrum abgebildet.

Aufgabe A1.12



Figur A1.10 Graphitoberfläche aufgenommen mit dem RTM *easyScan*

Die Figur A1.10 zeigt eine Graphitoberfläche aufgenommen mit dem *easyScan*. Links oben sind die sichtbaren Kohlenstoffatome (volle Punkte) dargestellt. Die Struktur ist hexagonal mit Zentrum. Rechts sind neben den sichtbaren auch noch die Kohlenstoffatome mit verkleinerter Elektronendichte an der Oberfläche mit offenen Punkten dargestellt. Die Struktur ist hexagonal ohne Zentrum, wie auch die Oberfläche von Graphit. Falls Sie kein Bild selber machen konnten, können Sie im unteren Teil des obigen Bildes die Atome suchen!

Aufgabe A1.13

Die Gitterkonstante von Graphit ist 0.246 nm (Kantenlänge des Sechsecks auf der Oberfläche). Die Vergrößerung dieses Bildes ist rund 28-Mio-fach.

Die Sechsecke sind nicht ganz symmetrisch; der Grund kann eine kleine Temperaturveränderung während der Messung sein.

Literatur

Anleitung zum Programm *easyScan*, sowie Updates zum Messprogramm sind via Internet bei folgender URL erhältlich: www.nanosurf.ch

Mehr Quantentheorie

Vom Atombau bis zum Sehvorgang

Übersicht	A2.1
Vorgehen	A2.1
Lernziele von Additum 2	A2.2
A2.1 Atombau und Spektrallinien	A2.3
A2.2 Was die Welt im Kleinen zusammenhält	A2.10
A2.3 Quantenphysik in Lebewesen	A2.20
Lösungen zu den Aufgaben	A2.25

Übersicht

Hier führen wir Kapitel 2 weiter. In A2.1 werden die Elektronenorbitale die Sie schon im Chemieunterricht kennengelernt haben, mit der Quantenmechanik begründet. Danach lernen sie die Grundlagen der chemischen Bindung von Atomen kennen. Im letzten Abschnitt spannen wir den Bogen weiter zu Anwendungen der Quantenmechanik in der Biologie: der Sehprozess und die Photosynthese.

Vorgehen

Erinnern Sie sich bitte noch mal an die Versuchsergebnisse von Kapiteln 2. Dann studieren Sie die Lernziele. Nun können Sie mit dem Abschnitt A2.1 beginnen und in die Welt der Chemie und Biologie eintauchen.

Lernziele von Additum 2

- Sie können das Wasserstoffatom quantenmechanisch diskutieren und die Bedeutung der „Bohrschen Bahnen“ erläutern.
- Sie können einem Kollegen erläutern, wie die chemische Bindung mit der Quantenmechanik verstanden werden kann.

A2.1 Atombau und Spektrallinien

Ein vielversprechender Titel, werden Sie vielleicht denken. Er verspricht wohl etwas *zu* viel. Wir werden nämlich nur die Grundzüge des Atombaus diskutieren. "Atombau und Spektrallinien" hiess auch das Buch von Arnold Sommerfeld, das seit 1919 in vielen, immer wieder umgearbeiteten Auflagen erschienen ist. Umgearbeitet werden mussten nicht die spektroskopischen Grundlagen: Seit etwa 1850 wusste man mehr und mehr darüber, welche Elemente unter welchen Bedingungen welche Lichtwellenlängen emittierten. Die *theoretische Begründung* wechselte immer wieder. Sommerfeld, der übrigens die Drehimpuls-Quantenzahl eingeführt hat, musste von seinen anschaulichen Atommodellen mit elliptischen Elektronenbahnen 1926 Abschied nehmen. Auch Sie müssen jetzt das Bohr'sche Atommodell endgültig begraben.

Bisher haben Sie in diesem Leitprogramm sehr wenig über Atome gelernt. Im Kapitel 3 haben wir Sie damit beruhigen können, dass es Atome wirklich geben kann. Die Unschärferelation - "*Schrödingergleichung des armen Mannes*" - verhindert bekanntlich, dass das Elektron in den Kern stürzt. Dabei haben wir sowohl die Atomgrösse als auch die Energie des gebundenen Elektrons einigermassen richtig abschätzen können. Nun etwas mehr!

Vorerst erinnern wir Sie daran, dass Sie sich in der Aufgabe A 1.8 über die Farbzentren bereits mit dem Problem der Atomphysik auseinandergesetzt haben: Die Potentialtöpfe in Atomen sind *dreidimensional*! Die Schrödingergleichung für den einfachsten Fall, das Elektron im Wasserstoffatom, ist grundsätzlich nicht anders als in den bekannten Fällen. Das Elektron wird durch die Coulomb-Kraft an den Kern gebunden. Das zugehörige Potential $V(r)$ ist zentralsymmetrisch und hat den Wert:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad e = \text{Elementarladung}$$

Dementsprechend lautet die auf drei Dimensionen ausgebaute Schrödingergleichung:

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right\} \psi(x, y, z) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} \left[\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right] \psi(x, y, z)$$

Sie sehen, dass nun drei Ableitungen in die drei Raumrichtungen auftauchen. Doch die Atome sind leider nicht würfelförmig. Deshalb übersteigt die vollständige Bearbeitung erneut unsere Kapazitäten. Mit unserem Wissen über gebundene Zustände in einer und in zwei Dimensionen können wir ohne Rechnung bereits folgende Aussagen machen:

- Die Zustandsfunktionen des Elektrons im Coulomb-Potential des Kerns werden räumliche Symmetrie-Eigenschaften und bevorzugte Frequenzen haben, ähnlich wie die Schall-schwingungen in einem quaderförmigen Raum (Badezimmer...)
- Die räumlichen Zustandsfunktionen sind durch *drei Quantenzahlen* charakterisiert: eine Energiequantenzahl n und eine Drehimpulsquantenzahl l wie bisher. Zusätzlich taucht eine dritte Quantenzahl auf.
- Die dritte Quantenzahl hat damit zu tun, dass der Drehimpulsvektor im Raum verschiedene Richtungen annehmen kann.

Die vollständige Lösung der Schrödingergleichung auf Hochschulstufe benützt die sogenannten Kugelfunktionen $\psi(r, \theta, \phi)$, die der Kugelsymmetrie des Potentials besonders angepasst sind. $\psi(r, \theta, \phi)$ sind Funktionen des Abstandes r vom Kugelzentrum, der

"geographischen Breite θ " und der "geographischen Länge ϕ ". Länge und Breite sind auf eine z -Achse bezogen, die in Richtung "Nordpol" weist.

So wie der Kreis keinen Anfang hat, besitzt die Kugel von Natur aus *keine Pole*. Die erwähnte z -Achse zeigt also vorerst in eine *beliebige Richtung*. Erst wenn das kugelsymmetrische Atom in ein lineares Feld gebracht wird, gibt es eine ausgezeichnete Richtung. In Bezug auf eben diese Richtung muss die Lage des Drehimpulsvektors festgelegt werden. Der häufigste Fall ist ein äusseres Magnetfeld, wie beim Quanten-Hall-Effekt. Es kann aber auch ein elektrisches Feld sein oder ein benachbartes Atom, das experimentell die z -Achse erzeugt.

Ausgehend vom Beispiel des Quanten-Hall-Effekts werden Sie vermutlich akzeptieren, dass die neue Quantenzahl *magnetische Quantenzahl* m_l heisst. Sie gibt an, wie viele Drehimpulseinheiten vom Betrag $h/2\pi$ die z -Komponente des Drehimpulses eines bestimmten Zustands besitzt. Beweisen können wir das nicht.

Vermutlich haben Sie bereits aus dem Chemieunterricht eine gewisse Vorstellung, welche geometrischen Eigenschaften die verschiedenen Zustandsfunktionen des Elektrons im H-Atom besitzen. Anstatt "Wahrscheinlichkeitsverteilung" ist in der Chemie der Begriff "Orbital" in Gebrauch.



Aufgabe A2.1: Orbitale

Suchen Sie in Ihrem Chemiebuch nach dem Stichwort "Orbitale" oder "Elektronenwolken" beim Wasserstoff.

Versuchen Sie auf Grund der Symmetrie bei einigen Orbital-Bildern jeweils die Quantenzahlen n und l anzugeben.

Bei der Arbeit mit den Bildern haben Sie wohl festgestellt:

- Die Energie- oder Haupt-Quantenzahl n beschreibt wieder Anzahl der radialen, kugelförmigen Knotenflächen inklusive derjenigen im Unendlichen: $n = 1, 2, 3 \dots$. Die Chemiker sprechen von den verschiedenen Elektronen-"Schalen" und bezeichnen sie aus historischen Gründen mit den Buchstaben K, L, M usw.
- Die Drehimpuls-Quantenzahl durchläuft die Werte $l = 0, 1, 2 \dots (n-1)$. (Diese Limite ist nichttrivial.) Das l zeigt an, wieviele nicht-radiale Knotenflächen in der Zustandsfunktion auftreten. Wiederum aus historischen Gründen charakterisieren die Chemiker ihre Orbitale mit den Buchstaben s, p, d ... Genauer als bloss "s" ist die Bezeichnung 1s für den Grundzustand mit $n = 1$ und $l = 0$.
- Für die magnetische Quantenzahl gilt folgende, einleuchtende Bedingung: $m_l = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \pm l$. Denn für die Drehbewegung gibt es ja beide Umlaufsinne.

Ist Ihnen aufgefallen, dass im Grundzustand 1s der Drehimpuls = 0 ist? Das Elektron "kreist" also weder links- noch rechtsherum; eher schon: in beiden Richtungen zugleich. Es ist sowieso "überall und nirgends". Am wahrscheinlichsten aber ist es im Zentrum, denn es gibt keinen Grund, weiter aussen zu verweilen. Merken Sie sich unbedingt:

Das schöne, anschauliche Bild mit dem Elektron, das um den Kern kreist,
stimmt mit der Natur nicht überein.

Niels Bohr hat schon 1913 gesagt, sein Modell sei bloss *ein Ansatz*,
um auf die richtigen Werte der Spektrallinien zu kommen.

Sie sind nun soweit vorbereitet, dass Sie sich eingehender mit dem Wasserstoffatom beschäftigen können. Lesen Sie die folgenden Aufgabenstellungen zumindest sorgfältig durch:



Aufgabe A2.2: Dreimal Ionisationsarbeit

Historisch wichtig war, die Energie des Grundzustandes vorhersagen zu können. Diese Energie ist gleich der experimentell messbaren Ionisationsarbeit. Das ist die Arbeit, die nötig ist, um das Elektron aus seiner Bindung zu befreien. Zahlenmässig richtige Antworten kann man mit verschiedenen, historisch bedeutsamen, aber aus quantenmechanischer Sicht falschen Ansätzen bekommen:

- Man lässt ein Elektron klassisch kreisen und gibt ihm im Grundzustand eine Drehimpulseinheit.
- Man ordnet dem Elektron eine geschlossene, eindimensionale de Broglie-Welle zu.
- Das Elektron hat als Gesamtenergie die Summe von kinetischer und potentieller Energie: $E = p^2/2m - e^2/4\pi\epsilon r$. Mit den Unschärfen $\Delta p \approx p$ und $\Delta r \approx r$ sowie der Unschärferelation in der Form $\Delta r \Delta p \geq h/2\pi$ ergibt sich eine Untergrenze für die Energie E als Funktion der radialen Ortsunschärfe Δr . Durch Differenzieren erhalten Sie das Minimum dieser Funktion und die zugehörige minimale radiale Ortsunschärfe Δr_{min} .

- a) Kritisieren Sie die drei Ansätze aus der Sicht der Quantenmechanik.
- b) Berechnen Sie auf eine der drei Arten die Ionisationsarbeit.

Vermutlich möchten Sie nach dem langen Anmarschweg doch noch etwas Präziseres über die Energie des Grundzustands des Wasserstoffs erfahren. Und weil die Energiequantenzahl primär vom *radialen* Verhalten der Zustandsfunktion abhängt, können wir Ihnen für die Lösung des Problems folgenden Ansatz bieten:

$$\psi_1(x, y, z) \approx \psi_1(r, \theta, \phi) = \psi_1(r) \cdot F(\theta, \phi)$$

$$\text{wobei } \psi_1(r) = Ae^{-r/a} \quad \text{und} \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Kümmern Sie sich nun nicht weiter um die Funktion F . Nehmen Sie, wenn Sie Lust haben, die Funktion $\psi_1(r)$, leiten Sie mit der Kettenregel nach x , y und z ab, und setzen Sie Ihre Ergebnisse in die Schrödingergleichung ein. Sie werden feststellen, dass $\psi_1(r)$ tatsächlich eine Zustandsfunktion ist. Wie bei der Untersuchung des harmonischen Oszillators können wir nur andeuten, dass $\psi_1(r)$ den *Grundzustand* beschreibt. Wie wir weiter oben betont haben, ist das Elektron am wahrscheinlichsten im Zentrum zu finden. Dass sein Grundzustand den Dreh-

impuls 0 besitzt, würde erst die Funktion F zeigen, bleibt also ausserhalb unserer mathematischen Reichweite.

Der erfolgreiche Ansatz $\psi_I(r)$ liefert zumindest - nach einem Prozedere wie beim harmonischen Oszillator - die Bedingungen für a_I und für E_I :

$$a_1 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \quad \text{und} \quad E_1 = -\frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

E_I , die Energie des Grundzustandes, ist nichts anderes als die Ionisationsarbeit für atomaren Wasserstoff: $13.6 \text{ eV} = 1.3 \text{ MJ pro mol}$. Die Grösse $a_I = 53 \text{ pm} \approx 0.5 \text{ \AA}$ besitzt die Dimension einer Länge, wie schon aus ihrer Rolle im Ansatz klar wird. Dies ist der sogenannte "Bohr'sche Radius". Stellen Sie sich, wie schon erwähnt, nicht einen Bahnradius vor. Nehmen Sie a vielmehr als das fundamentale Längenmass in atomaren Dimensionen.

Atombau

Schon der Wasserstoff sprengt unsere mathematischen Möglichkeiten! Mit zwei und mehr Elektronen tauchen zwei grundsätzlich neue Schwierigkeiten auf:

- Weil mehrere Ladungen zusammenwirken, gibt es kein kugelsymmetrisches Potential.
- Wenn mehrere Elektronen vorhanden sind, haben wir ein quantenmechanisches Mehrteilchensystem vor uns. Wie muss man die Schrödingergleichung erweitern?

Im Fall der Alkaliatome können wir jedoch mit etwas Phantasie über die Zustandsfunktion des äussersten Elektrons spekulieren: Das äusserste Elektron verspürt im Grossen und Ganzen ein zentralsymmetrisches Coulomb-Potential mit der Gesamtladung $+e$, denn die inneren Elektronen kompensieren alle Protonen ausser einem.



Aufgabe A2.3: Alkali-Energieniveaux

Bei Atomen von höherer Ordnungszahl wird durch Elektronen aus den unteren Schalen die elektrostatische Anziehung des Atomkerns für ein äusseres Elektron abgeschirmt. - Was hat dies wohl für einen Einfluss auf die möglichen Energieniveaux des äussersten Elektrons?

Die Struktur des Periodensystems physikalisch zu begründen, vermag unsere Einteilchen-Schrödingergleichung nicht. Wie Sie möglicherweise im Chemieunterricht gelernt haben, spielt zusätzlich das sogenannte *Pauli-Prinzip* eine zentrale Rolle. Es bezieht sich auf den Spin von Quantenobjekten. Diese Grösse können Sie sich - bloss zur Veranschaulichung - als Drehimpuls um eine eigene Achse vorstellen. Durch den Spin werden alle Quantenobjekte in zwei Klassen eingeteilt: Elektronen, Protonen, Neutronen usw. besitzen Spin $\pm 1/2$ (nicht vorstellbar); die Photonen und andere Objekte besitzen den Spin ± 1 . Das Pauli-Prinzip bezieht sich nur auf die erste Klasse. Es sagt, dass in der Natur jedes Spin-1/2 - Objekt in einem separaten Quantenzustand sein muss.



Wolfgang Pauli: Er war ab 1933 Professor für theoretische Physik an der ETH

Im Helium-Atom erlaubt das Pauli-Prinzip ein zweites Elektron in einem Orbital des Grundzustandes, wenn dieses einen umgekehrten Spin aufweist. Komplizierter ist die Begründung der für die Chemie wichtigen *Oktett-Regel*: "Atome mit acht Elektronen im äussersten Orbital sind chemisch besonders stabil und reaktionsträge." Man spricht in dem Fall von einer "Edelgaskonfiguration".

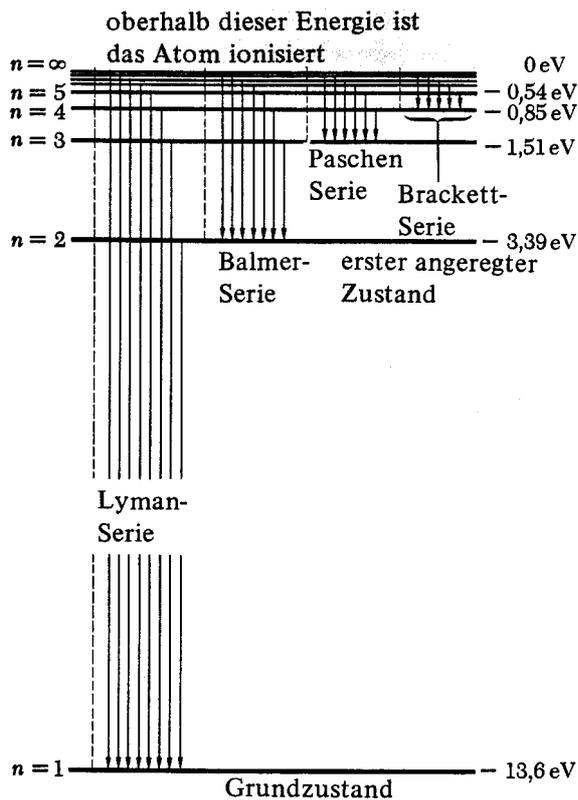
Das Periodensystem entsteht primär dadurch, dass jeweils das neunte Elektron in eine ganz andersartige Zustandsfunktion hinein muss, eine mit einer grösseren Energiequantenzahl. Die Folge ist eine geringere Tiefe im Potentialtopf und eine grössere Wahrscheinlichkeit dafür, das Elektron weiter vom Zentrum entfernt anzutreffen. Dies wird in Anlehnung an Bohr als "neue Schale" bezeichnet.

Spektrallinien

Die scharfen Linien in den Spektren sind schon ab etwa 1800 beobachtet worden. Mit zunehmender Verbesserung der Wellenlängenmessungen stellte sich die Frage nach quantitativen Gesetzmässigkeiten. *Johann Jakob Balmer*, Gymnasiallehrer für Kunstfächer in Basel und Zahlenmystiker, fand 1885 eine erste Regel für einige Wasserstofflinien:

$$\lambda_n = Cn^2/(n^2-4).$$

Zuvor hatte schon W. Hartley darauf aufmerksam gemacht, dass die Betrachtung des Kehrwertes $1/\lambda$ auf interessante Gesetzmässigkeiten führt. Die Balmer-Regel schreibt man deshalb besser als $1/\lambda_n = R/4 - R/n^2$. 1900 entdeckte Paschen und später Ritz ähnliche Gesetzmässigkeiten. Alle hatten vorerst bloss beschreibenden Wert. Verschiedene Physiker suchten nach Atommodellen zur Erklärung der Spektral-Regeln. Niels Bohr war 1913 als erster erfolgreich. Aber erst die Quantenmechanik lieferte die heute noch gültige Begründung.



Figur A2.1: Energieniveaux und Spektrallinien des Wasserstoffatoms. (aus Wichmann 1975)

Die senkrechten Pfeile symbolisieren mögliche Übergänge mit Abstrahlung von elektromagnetischer Energie. Diese Übergänge wurden in vier Serien geordnet und nach Pionieren auf dem Gebiet der Spektroskopie benannt. Die Lyman-Serie liegt im ultravioletten Bereich und wurde deshalb erst nach der Balmer-Serie entdeckt. Die Paschen- und die Brackett-Serie ergeben Infrarotstrahlung.

A 2.2 Was die Welt im Kleinen zusammenhält

Ihnen ist vertraut, dass Goethes Faust wissen möchte, was "die Welt im Innersten zusammenhält". In diesem Abschnitt können wir natürlich keine Antwort auf diese umfassende Frage anbieten. Bekanntlich dominiert im Grossen, in den Sternen und Galaxien die *Gravitation*. Und im Kleinen, in den Atomkernen und den Nukleonen, beherrschen die starke Wechselwirkung und die *Gluonen* das Feld. Hier geht es "nur" um die mittleren Dimensionen, um den Zusammenhalt von Molekülen und Kristallen, um die Bindungskräfte der Chemie. Doch bereits in diesem kleinen Ausschnitt aus der Welt ist die Vielfalt noch gross genug:

In der Physik spricht man von den anziehenden Kräften:

- *Adhäsion* - Adhäsionsantrieb bei der Eisenbahn, Zusammenkleben von Kunststofffolien, Flickern mit Klebstoff usw. Mit "Adhäsion" oder Haftreibung bezeichnet man allgemein die Kraft zwischen zwei verschiedenen Körpern.
- *Kohäsion* - Zusammenhaften der Wassermoleküle in einem Tropfen, Zugfestigkeit eines Metalls, Zusammenhaften der Bestandteile von Holz usw.

Solche Kräfte können als Überlagerung von sehr vielen Einzel-Kräften betrachtet werden, die von den elektrischen Ladungen an den Grenzflächen ausgehen. Weil *sehr viele Objekte* beteiligt sind, ist eine theoretische Analyse äusserst komplex. Die Grundprinzipien werden bereits beim Studium der Verhältnisse in den reinen Stoffen der Chemie sichtbar:

In der Chemie bevorzugt man etwas Globales, die Bindungen:

- *Ionenbindung* - Beispiele: Kochsalz NaCl, "Katzengold" = Pyrit FeS, Kupfervitriol CuSO₄. Allgemein: Bindung zwischen Atomen dadurch, dass einzelne Elektronen vollständig vom einen zum andern Atom wechseln.
- *Elektronenpaarbindung* - Beispiele: Wasserstoff H₂, Methan CH₄, und andere "Normal"-Moleküle; Diamant C und andere "Riesen"-Moleküle. Allgemein: Bindung zwischen zwei oder mehreren Atomen durch Elektronen, die beiden oder vielen Atomen gemeinsam angehören.
- *Metallische Bindung* - Beispiele: Silber Ag, Kalium K, usw. Allgemein: Bindung zwischen vielen Atomen, bei denen einzelne (Leitungs-)Elektronen praktisch frei durch den ganzen Kristall schwirren können.

Grundlegend ist, dass die Natur gebundene Zustände der äusseren Elektronen mit "*günstiger Geometrie*" erlaubt. Solche Elektronen "gehören dann zugleich zu mehreren Atomen". Sie "erzeugen anziehende Kräfte". Sie sorgen für einen Zustand mit einem Energieminimum. In *kovalenten* Bindungen sind die Orbitale vollkommen symmetrisch. In ionischen Bindungen sind sie extrem asymmetrisch, so dass man sich üblicherweise vorstellt, das Elektron sei vollständig zum anderen Atom hinübergewechselt. Und in der metallischen Bindung sind die Orbitale der Leitungselektronen über den ganzen Kristall ausgebreitet. Wer Bindungen berechnen will, muss in der Schrödingergleichung die Coulombkräfte sämtlicher Objekte berücksichtigen. Das Finden der Lösungen wird dadurch erschwert, dass zusätzliche, hier bisher nicht erwähnte Symmetriebedingungen erfüllt sein müssen.



Wir fassen zusammen:

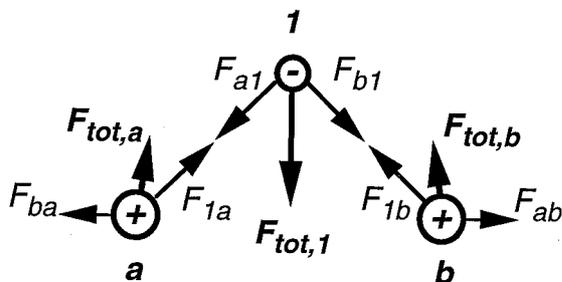
- Alle chemischen Bindungen beruhen letztlich auf den anziehenden Coulomb-Kräften zwischen den negativen Elektronen und den positiven Atomrümpfen. Die Bindungstypen werden durch unterschiedliche Geometrien der Orbitale verständlich.
- Die Quantenmechanik kann Orbitale und Energien vorhersagen. Neue Schwierigkeiten ergeben sich dadurch, dass die Wechselwirkungen mehrerer Teilchen berücksichtigt werden müssen.

Wieso ist das H_2^+ -Molekül möglich?

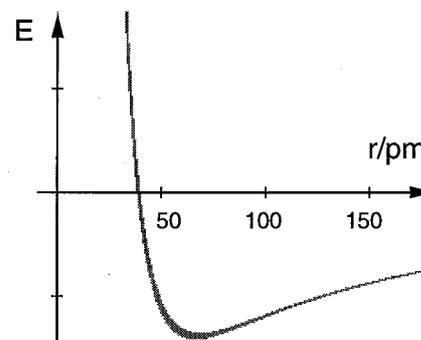
Wir beginnen unser Studium der chemischen Bindung selbstverständlich mit dem einfachsten Fall, dem H_2^+ -Molekül-Ion. Es besteht aus zwei Protonen und einem Elektron. Es ist offenbar stabiler, als ein neutrales H-Atom und ein einzelnes Proton. Das Experiment zeigt nämlich, dass bei der Bildung eines H_2^+ -Moleküls eine Energie von 2.8 eV frei wird: Dies ist überraschend viel! Wir wollen diese Erscheinung auf drei Ebenen verstehen:

1) *Es gibt Ladungsverteilungen, die netto zu anziehenden Kräften führen*

In der Figur 9 sind zwei verschiedene Ladungsanordnungen skizziert, die netto zu anziehenden Kräften zwischen den beiden Protonen führen. Skizzieren Sie doch selber eine dritte! (Selbstverständlich ist es nicht korrekt, die drei Quantenobjekte voll lokalisiert aufzuzeichnen. Besonders das leichte Elektron benötigt gemäss der Unschärferelation viel Raum.)



Figur A2.2: Anziehende Kräfte auf 3 Teilchen



Figur A2.3: Pot. Energie des H_2^+ -Moleküls

2) *Es gibt Ladungsverteilungen, welche die potentielle Energie minimalisieren:*

Wir untersuchen die potentielle Energie des Systems als Funktion des Abstandes r zwischen den beiden Protonen: (Figur A2.2) Zuerst denken wir uns als eine Extremsituation ein neutrales H-Atom und ein sehr weit davon entferntes Proton. Die Energie dieser Anordnung mit $r \rightarrow \infty$ wählen wir als Nullniveau. Sodann denken wir ein aus einem Beschleuniger stammendes Proton tief ins H-Atom hineingeschossen: dies führt zu einer sehr hohen potentiellen Energie für $r \rightarrow 0$.

Zwischen den beiden Extremen gibt es Abstände mit negativer Energie, wie Sie aus der klassischen Physik wissen: Ein neutraler Wasserstrahl wird von einem geladenen Stab angezogen unabhängig von dessen Ladungsvorzeichen. Allgemein gilt, dass polarisierbare Objekte in

einem inhomogenen elektrischen Feld zur Gegend maximaler Feldstärke hingezogen werden. Hier ist das *H-Atom polarisierbar*, und das Proton erzeugt ein inhomogenes Feld. (Allerdings muss erwähnt werden, dass diese klassische Anziehung nur in grossen Entfernungen dominiert und nicht die chemische Bindung bei kleinen Abständen zu erklären vermag. Die chemische Bindung kann letztlich *nicht* mit der klassischen Elektrizitätslehre erklärt werden!)

Zwischen den beiden Extremen muss ein Abstand r_0 mit minimaler Energie liegen. Das ist der Abstand der beiden Protonen im H_2^+ -Molekül-Ion. Experimente liefern $r_0 = 106$ pm. Selbstverständlich wird das Orbital des Elektrons in dieser Situation beide Protonen symmetrisch umfassen.

3) Breite, flache Potentiale minimieren die Lokalisierungsenergie:

Die Unschärferelation vermittelt auch im Fall des H_2^+ -Molekül-Ions ein tieferes Verständnis ohne mühsame Rechnung. Steht einem Elektron mehr Raum Δx zur Verfügung, kann seine Impulsunschärfe Δp und damit sein Impuls und seine kinetische Energie abnehmen. Die beiden Protonen liefern nun dem Elektron einen Potentialtopf der Grössenordnung r_0 . Wenn der zugehörige Raum ausreichend ist, liefert die aus der Vergrösserung des Orbitals gewonnene Energie die nötige Coulomb-Arbeit zur Annäherung der Protonen. Aus dem Atom-Orbital wird dabei ein Molekül-Orbital.

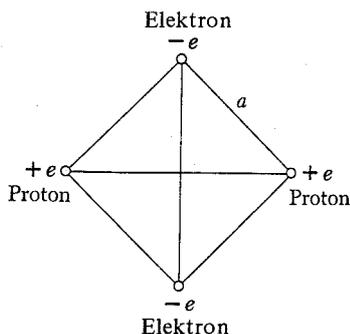
Die Elektronenpaarbindung im H_2 -Molekül.

Im vorangegangenen Abschnitt haben Sie Ihr Verständnis für das Auftreten von chemischen Bindungen ausgebaut. Jedoch: Die erwähnten Zustandsfunktionen haben wir bisher nicht rechnerisch erfassen können. Und das Wasserstoff-Molekülion ist speziell einfach. Zentral sind in der Chemie nämlich die Elektronenpaarbindungen: *Zwei Elektronen* müssen mitspielen, das Pauliprinzip ist zu berücksichtigen. Bevor wir diese Aufgabe jetzt in Angriff nehmen, müssen wir Ihnen gestehen, dass wir weiterhin vereinfachen. Wir vernachlässigen die magnetischen Momente von Protonen und Elektronen usw. Es ist so noch anstrengend genug.

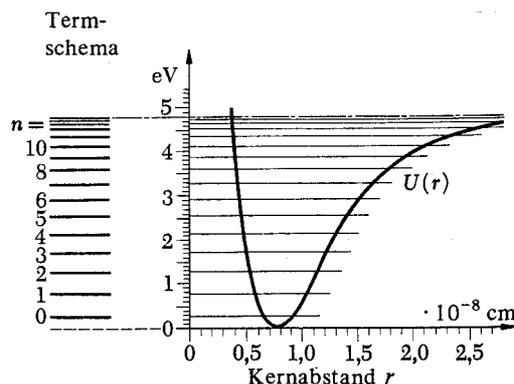
Wir werden die Elektronenpaarbindung auf zwei Arten quantenmechanisch bearbeiten. Zuerst werden wir voraussetzen, dass die Ladungsverteilung im gesuchten Molekül zu einem Potentialtopf führt. Diesen dürfen wir angenähert als harmonisch betrachten und deshalb die Kenntnisse aus dem Kapitel 2.4 anwenden. Dann aber beginnen wir an der Basis, bei der Schrödingergleichung.

1) Das H_2 -Molekül als System mit einem Potentialtopf:

Wir gehen davon aus, dass es auch mit *zwei* Elektronen Ladungsverteilungen gibt, die netto zu anziehenden Kräften führen. In Figur A2.3 ist ein Beispiel angegeben. Dass die vier Teilchen nicht etwa vollständig zusammenstürzen, verhindert selbstverständlich die Unschärferelation. Zu diesen Kräften gehört ein Potentialtopf. Er ist in Figur A2.4 eindimensional als Funktion des Abstandes r zwischen den beiden Protonen dargestellt. *Theoretische* Überlegungen zu Begründung der speziellen Form stellen wir später an. Hier gehen wir von den Ergebnissen der *Experimentatoren* aus: Es *gibt* einen Potentialtopf. Er weist eine Tiefe von -4.8 eV auf. Dann haben die beiden Protonen einen Abstand von 74 pm. (Beachten Sie, dass die Elektronenpaarbindung kürzer ist als die Einfachbindung beim H_2^+ -Molekül-Ion. Das ist eine Folge der grösseren Stabilität.)



Figur A2.4: Anziehende Gesamtkraft



Figur A2.5: H₂-Molekül-Potentialtopf

Der Potentialtopf ist ums Minimum herum parabelförmig, denn die Bindungskraft lässt sich näherungsweise durch ein lineares Kraftgesetz $F(r) = -k(r - r_0)$ erfassen. Das Wasserstoffmolekül kann demnach angenähert als harmonischen Oszillator betrachtet werden. (Sie dürfen sich zur Veranschaulichung vorstellen, dass die beiden Protonen durch eine Feder mit der Konstanten k im Abstand r_0 zusammengehalten werden. Die beiden Elektronenmassen spielen im Vergleich zu den zwei Protonenmassen, total $3.3 \cdot 10^{-27}$ kg, keine Rolle.)

Die Modellierung des H₂-Moleküls als harmonischen Oszillator erlaubt uns nicht, Aussagen über die Elektronenorbitale zu machen. Wir können aber mit unserem Wissen über den quantenmechanischen harmonischen Oszillator aus dem Kapitel 2.4 die Lage der niedrigsten *Energie-Niveaux* bestimmen und damit unser Modell testen. Wir wissen:

$$\text{Wenn } V(x) = 1/2 \cdot kx^2 \text{ ist, dann wird } E_n = (n - 1/2)(h/2\pi)\omega.$$

Wesentlich ist die Federkonstante k , die auch als Öffnungsmass der Potential-Parabel auftritt. Die Federkonstante k beschreibt nicht nur "Kraft pro Länge", sondern auch "Bindungsenergie pro Abstandsquadrat". Wir nehmen an, die unbekannt Grössen Bindungsenergie und Abstand des *Moleküls* seien von derselben Grössenordnung wie diejenigen beim bekannten Wasserstoffatom. Die Bindungsenergie sei etwa $E_1 = 13.6$ eV, und die Molekülgrösse sei etwa $a_1 = 53$ pm. Aus der Gegenüberstellung von

$$k/2 = E_1/a_1^2$$

resultiert eine Federkonstante von $k \approx 3000$ N/m. (In der Nähe der 500 N/m, die in der Chemie als typisch angenommen werden und mit den Daten von Figur A2.4 übereinstimmen. Wir haben die richtige Grössenordnung!) Der Energieunterschied zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand beim H₂-Molekül muss demnach folgenden Wert aufweisen:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = (2 - 1/2)(h/2\pi)\omega - (1 - 1/2)(h/2\pi)\omega = (h/2\pi)\omega.$$

Dabei steckt das Spezifische im Wert von ω , denn es gilt $\omega = \sqrt{k/m}$. Bei der Rechnung dürfen wir für m nur eine Protonenmasse nehmen, denn das Molekül schwingt symmetrisch um den Schwerpunkt, den Mittelpunkt. Setzen wir die Werte ein, erhalten wir

$$\omega = 1.3 \cdot 10^{15} \text{ Hz und } \Delta E = 0.87 \text{ eV.}$$

Die Wellenlänge von elektromagnetischer Strahlung mit den Energiequanten, die zum Übergang zwischen E_2 und E_1 gehören, liegen in der Grössenordnung von $1.5 \mu\text{m}$, also nicht mehr im sichtbaren Licht, sondern im Infrarotbereich. Im Experiment zeigt sich, dass ΔE einen Wert von 0.55 eV aufweist. Dadurch, dass es uns in den richtigen Wellenlängenbereich brachte, bestätigte sich unser Molekül-Oszillator-Modell glänzend.



Aufgabe A2.4: Rotierende Moleküle (fakultativ)

Testen Sie das Molekül-Modell noch auf andere Weise:

Unser Molekül kann um eine Achse senkrecht zur Längsachse rotieren. Es ist ein quantenmechanischer Rotator, dessen Drehimpuls L gemäss unseren Betrachtungen im Kapitel 1.5 nur ganzzahlige Vielfache von $h/2\pi$ annehmen kann. Dementsprechend ist auch seine Rotationsenergie quantisiert. Der Grundzustand besitzt eine Energie von rund $E_1 = L^2/(2J)$. Dabei ist J das Trägheitsmoment, hat also hier den Wert $ma^2/2$. m ist eine Protonenmasse und a sei 74 pm gemäss Figur A1.12.

- Bestimmen Sie die Energie des Rotations-Grundzustands des Wasserstoffmoleküls.
- Nehmen Sie an, die Energiedifferenz zum ersten angeregten Zustand sei E_1 . Bestimmen Sie die Wellenlänge des zugehörigen Photons. Vergleichen Sie mit dem experimentellen Wert: $\lambda = 165 \mu\text{m}$.

Exkurs: Quantenphysik am Himmel

Nicht nur das Wasserstoff- sondern auch die anderen Moleküle können Schwingungen ausführen, die einigermaßen harmonisch sind. Die Schwingungsfrequenzen hängen, wie Sie gesehen haben, von der Bindungsstärke und den Massen der Partner ab. Sie betragen beispielsweise für die Grundzustände von O_2 $4.4 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$ und von CO $6.5 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$. Die Quanten, welche von zugehörigen Übergängen stammen, sind nicht nur in der Chemie von Bedeutung. Sie geben auch den *Astronomen* und den *Atmosphärenphysikerinnen* Aufschluss über das Vorhandensein der betreffenden Moleküle. Dazu sind Fernrohre im Mikrowellenbereich nötig. Auch dreiatomige Moleküle wie H_2O und CO_2 und kompliziertere können schwingen, sogar in verschiedenen Schwingungsformen. Weil all diese Oszillatoren nicht streng harmonisch sind, liegen die zugehörigen Energieniveaux nicht in genau gleichen Abständen übereinander. Zugehörige Quanten haben dann leicht verschiedene Energien und die entsprechende Strahlungsarten leicht unterschiedliche Wellenlängen. Die Spektroskopiker sprechen deshalb von den "*Schwingungsbanden*" oder "*Oszillationsbanden*" der Moleküle.

Der *Treibhauseffekt* kommt bekanntlich dadurch zustande, dass die Atmosphäre durchsichtig ist für das Licht, das von der Sonne kommt, und teilweise undurchsichtig ist für die Strahlung, die die Erde abgibt. Die Spektren der dominierenden Stickstoff- und Sauerstoff-Moleküle, aber auch der Spurengase in unserer Atmosphäre sind so, dass sichtbares Licht zwischen $0.4 \mu\text{m}$ und $0.8 \mu\text{m}$ kaum absorbiert wird. Die Strahlung, welche die Erde abgibt, liegt hingegen zwischen $3 \mu\text{m}$ und $30 \mu\text{m}$. Sie regt die *Oszillationen der dreiatomigen Molekül H_2O und CO_2* stark an. Die Nutzung der fossilen Brennstoffvorräte beschert uns also via Quantenmechanik ein Problem, das nicht so leicht zu lösen ist!

Doch jetzt wissen wir immer noch nichts Genaues über die Orbitale im Wasserstoffmolekül. Deshalb packen wir sie nun an:

2) Die Schrödingergleichung für das H₂-Molekül:

Im Prinzip ist sie ganz einfach:

$$\psi''(1,2) = \frac{2m}{(\hbar/2\pi)^2} \left[\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{1a}} + \frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{2a}} + \frac{1}{r_{2b}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{ab}} \right) - E \right] \psi(1,2)$$

$\psi(1,2)$ ist jetzt eine Funktion, die den Zustand für die *zwei Elektronen*, die mit den Nummern 1 und 2 gekennzeichnet sind, beschreibt. Wir legen uns nicht mehr auf ein bestimmtes Koordinatensystem fest und schreiben deshalb bloss ψ'' für die zweiten Ableitungen. Wir benennen die zwei Protonen mit a und b . Die potentielle Energie des Systems umfasst jetzt sechs Anteile entsprechend den sechs Kräften von Figur A2.3. Die vier zwischen den Elektronen und Protonen sind anziehend, diejenigen zwischen den beiden Elektronen und den beiden Protonen sind abstossend. Die Grösse r_{1a} ist eine Abkürzung für die Entfernung des Elektrons 1 vom Proton a , Analoges bedeutet r_{1b} usw.

Obwohl "im Prinzip ganz einfach" stellt diese Schrödingergleichung auch noch für den Profi eine Knacknuss dar. Sie haben also ganz recht, wenn Sie im Geheimen dachten, die Gleichung sei furchtbar komplex. Die in diesem Teil aufgeschriebene Mathematik brauchen Sie demnach bloss der Spur nach zu verstehen.

1927 haben *Walter Heitler* - lange Jahre Ordinarius für theoretische Physik an der Universität Zürich - und *Fritz London* erstmals die befriedigende Näherungslösung für das Wasserstoffmolekül gegeben, die hier angedeutet wird. Mit ihnen stellen wir uns auf den Standpunkt, dass die korrekte Zustandsfunktion sich durch einem *Mix von Zustandsfunktionen* einzelner Wasserstoffatome beschreiben lässt. ψ_{1a} bedeutet einen derartigen Zustand mit dem Elektron 1 beim Proton a , ψ_{1b} meldet Elektron 1 beim Proton b usw. Zustandsfunktionen $\psi(1,2)$, die den Zustand *beider* Elektronen beschreiben, können als Produkte von Ein-Elektron-Zuständen dargestellt werden, beispielsweise:

$$\psi(1,2) = \psi_{1a} \cdot \psi_{2b} \quad \text{oder} \quad \psi(1,2) = \psi_{1b} \cdot \psi_{2a}$$

Nun kommt die Erweiterung des Pauli-Prinzips auf Mehrelektronensysteme: Elektronen sind eigentlich ununterscheidbar. Das ist ein Kennzeichen, durch das sich alle Quantenobjekte von klassischen Objekten, etwa den Molekülen in der kinetischen Gastheorie, unterscheiden.

Quantenobjekte sind ununterscheidbar.

Allerdings zerfallen die Quantenobjekte je nach Spin in zwei Sorten: Elektronen, Protonen und andere Objekte mit halbzahligen Spin müssen dem Pauliprinzip gehorchen. Photonen und andere Objekte mit ganzzahligen Spin unterliegen dem Pauliprinzip nicht. Sie können sich deshalb scharenweise im gleichen Zustand befinden, z.B. im Laser.

Aus der Ununterscheidbarkeit ergibt sich eine zusätzliche Bedingung an die Zustandsfunktionen: Für Systeme mit Objekten von halbzahligen Spin erlaubt die Natur nur *antisymmetrische Zustandsfunktionen*. Das heisst, dass sich beim Vertauschen des Elektrons 1 mit dem Elektron 2 soll das Vorzeichen der Zustandsfunktion - inklusive des Anteils vom Spin - sich umkehren. Die beiden oben angegebenen Beispiele für $\psi(1,2)$ erfüllen diese Bedingung jedoch noch

nicht. Das tun erst die folgenden Mischungen, in denen symbolisch die Spinfunktion hinzugefügt ist:

$$\psi_{+}(1,2) = (\psi_{1a} \psi_{2b} + \psi_{1b} \psi_{2a}) \cdot S_{\text{antiparallel}}$$

$$\psi_{-}(1,2) = (\psi_{1a} \psi_{2b} - \psi_{1b} \psi_{2a}) \cdot S_{\text{parallel}}$$

Würden wir diese Funktionen in die Schrödingergleichung einsetzen, erhielten wir selbstverständlich Energiequantenzahlen und die Reihe der möglichen Energien mit der tiefsten Energie des Grundzustandes. Heitler und London haben diese Rechnung durchgeführt und sind auf folgende zwei Ergebnisse für den Grundzustand des Wasserstoffmoleküls gestossen:

$$E_{+} = 2E_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ab}} + \frac{C+A}{1+S^2} \quad \text{und} \quad E_{-} = 2E_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ab}} + \frac{C-A}{1-S^2}$$

E_0 ist einfach der Wert des Grundzustands der beiden weit voneinander getrennten Wasserstoffatome. Der nächste Term stellt die Coulombabstossung zwischen den beiden Protonen dar. Die Konstante C ist die Abkürzung von Termen für Coulombkräfte. Die Grösse S, vom Spin bestimmt, ist sehr klein und für uns bedeutungslos.

Die beiden Energien unterscheiden sich durch das Vorzeichen des Beitrags A. Die Grösse A heisst "Austauschintegral". In ihr sind die drei Coulombenergien der Elektronen zusammengefasst und mit einem "Gewichtungsfaktor", dem Produkt der vier Ein-Elektron-Zustandsfunktionen, multipliziert. Zu integrieren ist über die Raumvariablen beider Elektronen:

$$A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iint \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{2a}} \right) \psi_{1a} \psi_{2b} \psi_{1b} \psi_{2a} dr_1 dr_2$$

Der Betrag von A hängt zentral davon ab, dass das Produkt der vier Ein-Elektron-Zustandsfunktionen *an einem bestimmten Ort* grösser als 0 ist. Das bedeutet, dass beide Elektronen, die sich an diesem Ort befinden, *zugleich* zu beiden Kernen gehören. Es braucht ein Elektronen*paar*, damit diese Konsequenz der Ununterscheidbarkeit zum Vorschein kommt.

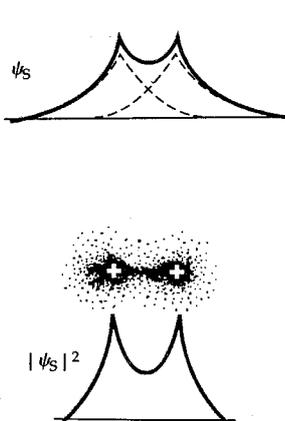
Das Austauschintegral beschreibt die nur quantenmechanisch erklärable Tatsache, dass die Bindungselektronen zugleich zu zwei Kernen gehören.

Der Begriff "Austauschintegral" ist übrigens problematisch, denn er suggeriert, dass ein "Austauschen der Elektronen" beobachtbar wäre. Die Elektronen sind aber ununterscheidbar.

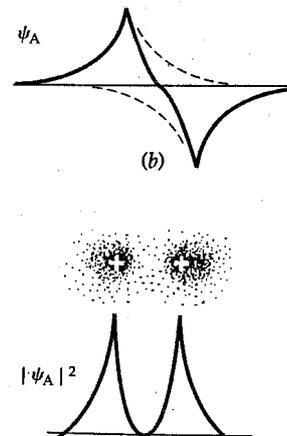
Der tiefste Zustand, der Grundzustand, wird von der Funktion $\psi_{+}(1,2)$ gut angenähert. Dieser bindende Zustand ist durch eine hohe Elektronendichte zwischen den beiden Protonen gekennzeichnet. E_{+} ist demnach näherungsweise die gesuchte Energie des quantenmechanisch exakten Grundzustandes. Die Rechnung führt auf $E_{+} = -3.1$ eV bei einem Abstand r_{ab} von 89 pm. Das Experiment liefert den Wert -4.7 eV und einen Abstand von 74 pm. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit, respektive die Ladungsverteilung des Grundzustands ist in Figur A1.13 dargestellt.

Die Funktion $\psi_{-}(1,2)$ beschreibt den "non-bonding state". Sie weist eine *minimale* Ladung *zwischen* den Protonen auf, wie aus Figur A2.5 ersichtlich ist. Anschauung und Rechnung zeigen, dass so keine Elektronenpaarbindung entstehen kann. Trotzdem spielt der antibonding state auch in der Chemie eine gewisse Rolle: Stehen in grösseren Molekülen mehr als zwei Elektronen für Bindungen zur Verfügung, dann dürfen nach dem Pauli-Prinzip nur die "ersten zwei" Elektronen im bonding state sein. Die "folgenden Elektronen" müssen sich in den (energetisch) unbequemen antibonding state fügen.

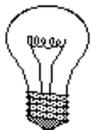
Der antibonding state ist bei Stossprozessen von Bedeutung: Schiesst man zwei Wasserstoffatome aufeinander, dann wird die Situation bei grösster Annäherung durch den antibonding state beschrieben. (Die Figuren A2.6 und A2.7 stammen aus Tipler 1994.)



Figur A2.6: Ladungsdichte $\psi_{+}(1,2)$
bonding-Zustand



Figur A2.7: Ladungsdichte $\psi_{-}(1,2)$
non-bonding-Zustand



Wir fassen zusammen:

- Die Heitler-London-Näherung liefert eine umfassende Beschreibung der Elektronenpaarbindung.
- Zentral ist die anziehende Kraft, die sich aus dem Austauschintegral ergibt. Die quantenmechanische Forderung nach Antisymmetrie der Zustandsfunktion führt zu "gemeinsam benutzten" Elektronenpaaren.
- Anschaulich kann man davon sprechen, dass die Quantenmechanik eine Anhäufung von Elektronenladung zwischen den Kernen fordert.

Hybrid-Orbitale und anderes aus der Artenvielfalt chemischer Bindungen

Sie wissen, dass der Klang einer Violine stark von der Art des Strichs abhängt. Physikalisch bedeutet dies, dass eine Musikerin mit dem Bogen bestimmen kann, in welchem Umfang die Grund- und die verschiedenen Oberschwingungen der Saite angeregt werden. Wenn die Grundschiwingung dominiert, ist der Klang weich. Viele Oberschwingungen führen zu einem markigen Klang. Alle schwingungsfähigen Systeme, nicht nur die Saite, können *zugleich Grund- und Oberschwingungen* ausführen. Hier gilt wieder das Überlagerungsprinzip. Es ist eine Folge der Linearität der Differentialgleichung. Weil bei der Schrödingergleichung

ebenfalls keine Quadrate der Zustandsfunktion auftreten, gilt auch hier das Überlagerungsprinzip:

Im Allgemeinen ist der *Zustand eines Systems eine Überlagerung* von mehreren Zuständen. Besonders bei Systemen mit vielen Elektronen ergeben sich daraus interessante Mischungen. Man bezeichnet sie als "Hybrid-Orbitale".



Aufgabe A2.5: Bilder von Hybrid-Orbitalen

Überfliegen Sie die Seiten 386 - 390 im Buch von H.R. Christen (Christen 78). Sie treffen dort die Hybridbildung beim Kohlenstoff (C).

Sie ist von grosser Bedeutung in der organischen Chemie und der Biochemie. Betrachten Sie die abgebildeten Hybrid-Orbitale.

Wie bereits erwähnt, ist die *ionische Bindung* leicht interpretierbar: Sie tritt bei zwei oder mehr stark ungleichen Atomen auf. Die Orbitale der Bindungselektronen sind dann extrem bei einem Partner konzentriert: Elektronen-Übertragung! Das "Spenderatom" wird zum positiven Ion, das "Empfängeratom" wird zum negativen Ion.

Kristalle umfassen etwa 10^{23} Atome. Alle diese Atome wirken nun wechselseitig aufeinander. Das hat zur Folge, dass ein einzelnes Energieniveau eines Atoms in rund 10^{23} Niveaux aufgespalten wird. Diese liegen aber so nahe beieinander, dass man von Energie-Bändern spricht, die mit den etwa 10^{23} Elektronen gefüllt sein können. Ob die Bänder ganz voll, halb voll oder ganz leer sind, hängt von der Anzahl zur Verfügung stehender Elektronen und von der *Temperatur* ab. Hohe Temperatur bedeutet nämlich mehr Energie.

- In *Atomkristallen* wie Diamant C oder Bergkristall SiO_2 ist das oberste Band, das sogenannte Valenzband, ganz gefüllt. Die Elektronen, die dort drin sind, bleiben an ihre Atome gebunden: Diamant isoliert.
- In *Metallen* ist ein Band nur wenig gefüllt. Die Elektronen in diesem sogenannten Leitungsband können sich durch den ganzen Kristall bewegen und den elektrischen oder thermischen Strom gut leiten.
- In *Halbleitern* sind zwei Bänder so nahe beieinander, dass bei zunehmender Temperatur mehr und mehr Elektronen aus dem Valenzband in das bei 0 K leere Leitungsband springen können. Deshalb leiten Halbleiter mit zunehmender Temperatur immer besser.



Wir fassen zusammen:

- Durch Hybridisierung kann man neue, bindungsfähige Zustände in einem Atom schaffen.
- In Kristallen werden aus den Energieniveaux Energiebänder mit unterschiedlichem Füllungsgrad.
- In Atomkristallen ist das oberste Band ganz voll.
- In Metallen liegen die relativ wenigen Leitungselektronen im obersten Band.
- In Halbleitern hat es benachbarte, teilweise gefüllte Bänder.

Exkurs: Quantenphysik in der Milchstrasse und im Kochtopf

Sie wissen nun sehr viel über die Bindungen und die Informationen aus den Spektren: Die Elektronen sind stabil an die Kerne gebunden (bis zu Hunderten von eV). Mehrere Atome sind durch Elektronenpaarbindungen verknüpft (etwa ein eV). Die Moleküle können schwingen und rotieren (etliche meV). Je nach dem Zustand, den man nachweisen oder anregen will, muss man demnach Röntgenstrahlen, UV, sichtbares Licht oder IR-Strahlung benutzen. Es gibt aber noch viele weitere Übergänge. Beispielsweise besteht die *interstellare Materie* in unserer Milchstrasse aus etwa einem H₂-Molekül pro cm³. Normalerweise sind die Spins der beiden Elektronen im Molekül antiparallel ausgerichtet. Mit der winzigen Energiezufuhr von 5 μ eV lassen sie sich aber parallel stellen (*Spin-flip*). Dies führt zur berühmten 21 cm-Linie, mit welcher die Astronomen der dunklen Materie auf den Sprung kommen wollen.

Wird ein Molekül angeregt, so beginnt es kombiniert zu schwingen, zu rotieren und seine Spins zu flippen. In Flüssigkeiten sind die Spektrallinien zudem dadurch verbreitert, dass etwa 10¹³ Zusammenstöße pro Sekunde passieren. Insgesamt resultieren Absorptions-Banden. Genau eine derartige Bande wird vom *Mikrowellenofen* anvisiert, wenn es mit einer Frequenz von 2.45 GHz, entsprechend einer Wellenlänge von 12 cm, ins Kochgut strahlt: Die Wassermoleküle schwingen, rotieren und flippen, die Milch wird heiss. Vorausgesetzt wird freilich, dass Ihr Kochgefäss nicht aus reflektierendem Metall besteht oder aus einem Kunststoff, der dort auch eine Absorptions-Bande aufweist ...

A 2.3 Quantenphysik in Lebewesen

Wenn Sie den letzten Abschnitt durchgearbeitet haben, wissen Sie es bereits: Die Quantenphysik findet zwar in mikroskopischen Bereichen statt, hat aber Konsequenzen auch für alltägliche Erscheinungen. Wir wenden uns zum Schluss zwei Prozessen zu, die z. B. für uns Menschen lebenswichtig sind. Beiden liegt die Absorption von Licht zugrunde. Die Energie, die dabei aufgenommen wird, wird aber nicht einfach wieder abgestrahlt. Sie wird verwendet, um bedeuten-de biochemische Zyklen in Gang zu setzen.

Wir können hier weder auf biochemische Zyklen noch auf Fragen, wie denn die beteiligten Moleküle in den Zellen organisiert sind, eingehen. Wir werden bloss den primären Prozess der Energieumwandlung beschreiben.

Chlorophyll und Photosynthese

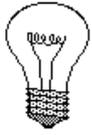
Sie alle wissen aus der Biologie, dass Pflanzen aus Kohlendioxid (CO_2) den Sauerstoff freisetzen und den Kohlenstoff für sich selbst brauchen. Deshalb werden Wälder in Stadtnähe ja auch als "Lunge der Stadt" bezeichnet.

Unter den vielen Molekülen, die an diesem Prozess beteiligt sind, nimmt das Chlorophyll eine besondere Stellung ein. Es ist in vielen Pflanzen verantwortlich für die Absorption des Lichts. Man unterscheidet zwei Hauptarten a und b beim Chlorophyll mit leicht unterschiedlichen Absorptionsmustern. Chlorophyll a z.B. weist bei 430 nm (blau) und 662 nm (rot) zwei deutliche Absorptionsmaxima auf (nicht bei grün!). Figur 15 zeigt Ihnen die Struktur von Chlorophyll a und b.

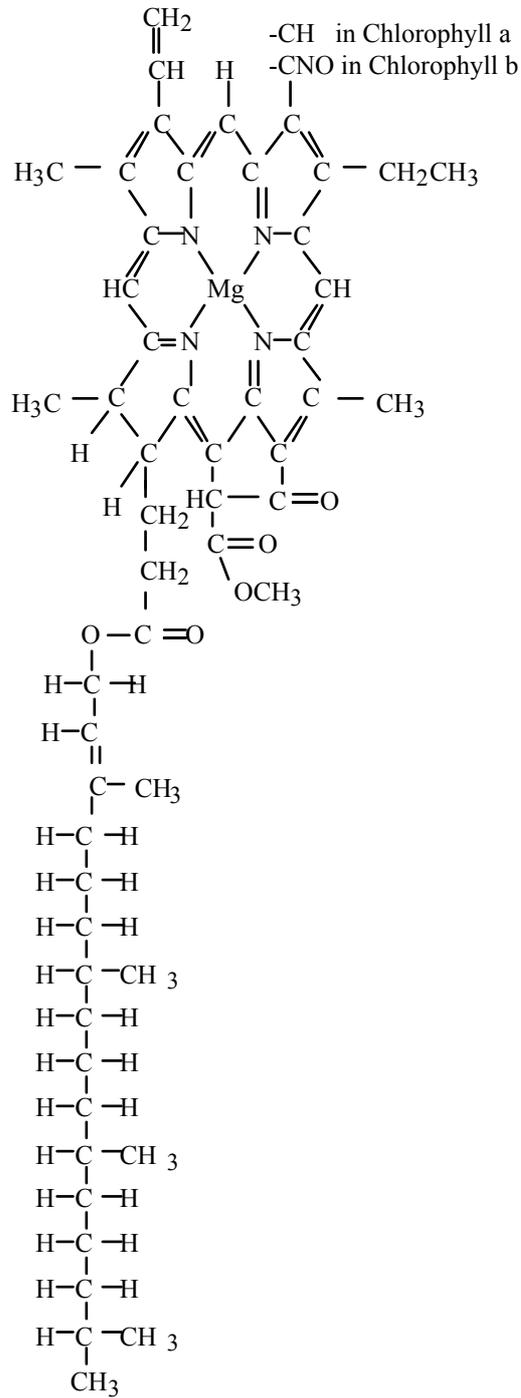
Isoliertes Chlorophyll strahlt die aufgenommene Energie wieder ab, es fluoresziert. Chlorophyll ist ein Quantensystem. Ein Elektron wird in einen angeregten Zustand versetzt. Es verlässt diesen wieder, wobei die überschüssige Energie abgestrahlt wird.

Im Verbund mit seinen Partnern *in der Zelle* hat das Chlorophyll aber eine sehr originelle Lösung für das Problem gefunden, diese Energie abzugeben. Das angeregte Elektron verlässt das Chlorophyll und geht an seinen Reaktionspartner über. Chlorophyll kehrt also als geladenes Molekül in den Grundzustand zurück. Am Schluss einer folgenden biochemischen Reaktionskette erhält es "sein" Elektron wieder auf tieferer Energie. In dieser Kette ist nochmals ein Prozess beteiligt, der Licht benötigt.

Solche Elektronenübergänge kennen Sie aus der Chemie. Es sind Redox-Reaktionen. Der Reaktionspartner des Chlorophylls wird dabei reduziert und setzt seinerseits weitere Reaktionen in Gang, wobei Energie frei wird.

**Wir fassen zusammen:**

- Photosynthese ist eine Form der Energieumwandlung, bei der die Quantennatur des Lichts und die Quantisierung der Energie gebundener Elektronen eine Rolle spielen.
- Die Energie des Photons löst eine Kette von Redoxreaktionen aus, in der aus Kohlenstoff Zucker hergestellt wird: biologische Energiespeicherung.
- Fast erscheint es etwas paradox, dass hier Sauerstoff ein Abfallprodukt ist, das von der Pflanze an die Umwelt "entsorgt" wird.



Figur A2.8

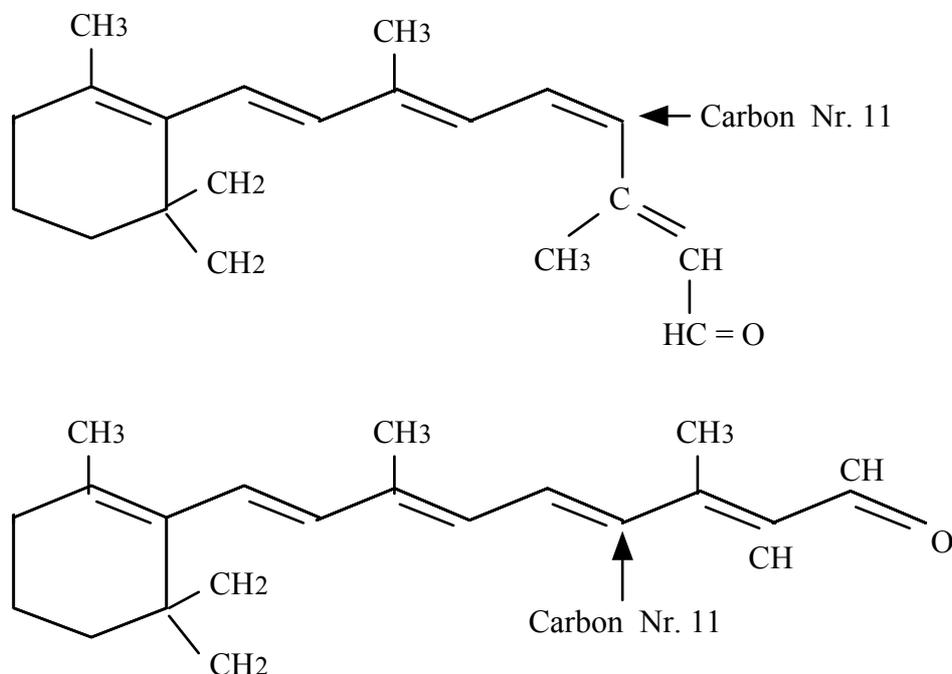
Chemische Struktur von Chlorophyll a und b

(Quelle: Baker 82, Seite 193)

Rhodopsin ermöglicht das Sehen

Sie wissen sicher aus dem Biologie-Unterricht, dass wir es den Zäpfchenzellen der Augen verdanken, dass wir bereits in der Dämmerung sehen. Am Anfang dieses Prozesses steht wieder die Absorption von Licht. Wie beim Chlorophyll gibt es auch hier ein Molekül, dessen Energieniveaux eine originelle Form der Energieabgabe ermöglichen: das Rhodopsin. Es ist ein grosses Molekül, das ein kleines - aber feines - Anhängsel hat: Das ist das sogenannte *Retinal*.

Sein Absorptionsmaximum liegt im grünen Bereich. Deshalb ist die Netzhaut purpurn. Das Retinal kann in zwei Formen vorkommen (Figur A2.9). Normalerweise ist es in der 11-cis Form im Rhodopsin gebunden. Wird nun Energie des Lichts aufgenommen, verlässt das Elektron seinen Zustand und gelangt in einen neuen Zustand. Dieser besitzt aber offensichtlich eine andere Struktur als der alte. Das Retinal ist in die all-trans Form übergegangen. Dabei hat eine Drehung um das Kohlenstoffatom Nr. 11 stattgefunden. Dieses ist in der Figur 11 speziell gekennzeichnet.



Figur A2.9

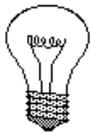
Die beiden Zustände des Retinals. 11-cis (oben) und all-trans (unten). Das Kohlenstoffatom Nr. 11 ist mit "Carbon Nr.11" markiert.

(Quelle: Baker 82, Seite 389)

In diesem Fall ist die räumliche Struktur der Zustandsfunktion im angeregten Zustand also deutlich anders als im Grundzustand. Die Zufuhr von Energie veränderte das Orbital merklich. Im gestreckten Zustand kann nun das angeregte Molekül die Bindung zum Rest des Rhodopsins lösen. Dieser Rest wird *Opsin* genannt. Das Opsin durchläuft nun seinerseits mehrere Stationen, bis es in einer Form vorliegt, welche die Zellmembran elektrisch erregen kann.

So liefert das angeregte Molekül ein elektrisches Signal, das schliesslich via Nerven ins Gehirn gelangt. Etwa vier Photonen sind ausreichend, um einen Impuls auszulösen. Dieser Prozess ist allerdings keine blosser Energieumwandlung. Im Gegenteil: Dem Sehprozess muss Energie zugefügt werden. Etwas salopp könnte man das Rhodopsin als Photodioden eines Photonen-Detektors bezeichnen.

Retinal und Opsin sind keine "Einwegpackungen", sie werden nicht verbraucht. Im Auge laufen endotherme Prozesse ab, welche die beiden wieder in der ursprünglichen Form zusammenführen.



Wir fassen zusammen:

- Photosynthese und Sehprozess sind zwei Beispiele, wo die Anregung eines Elektrons mit Licht bedeutende biochemische Prozesse in Gang setzen kann.
- Die aufgenommene Energie wird nicht einfach wieder abgestrahlt, sondern in chemisch nutzbare Formen umgewandelt.

Kann man Atome sehen?

Die Frage im Titel dieses Leitprogramms hat viele Aspekte: Gibt es überhaupt Atome? Wie gross sind sie? Was bedeutet "sehen können"? Was geschieht, wenn Strahlung und Materie miteinander in Wechselwirkung treten? Gibt es Geräte, mit denen man atomare Strukturen auflösen kann?

Immer wieder spielte das Wirkungsquantum bei der Beantwortung eine zentrale Rolle, zuletzt bei den bio-chemischen Prozessen, die in unseren Augen ablaufen. Wir sehen, dass es ohne Quanten kein Sehen gäbe...

Oder - äusserst frei nach Goethe:

"Und wär' die Natur nicht quantenhaft, nie könnten Licht wir erblicken."

Lösungen zu den Aufgaben

Aufgabe A2.1: Orbitale

Gehen Sie nötigenfalls in eine grössere Bibliothek, wenn Sie keine befriedigende Auswahl an Bildern von Orbitalen finden.

Aufgabe A2.2: Dreimal Ionisationsarbeit

a) Kritik an den dubiosen Wegen zum richtigen Resultat:

- Die Variante 1 geht von genau definierten Bahnen aus und verletzt damit die Unschärferelation. Zudem zeigt die Quantenmechanik, dass der Grundzustand in Wirklichkeit den Drehimpulswert 0 besitzt.
- Die Variante 2 benützt eine zweidimensionale Welle für eine dreidimensionale Situation. Zudem ist die Bedeutung der de Broglie-Welle unklar; sie ist heute überholt.
- Variante 3 stellt einen geschickten Mix zwischen klassischen und quantenmechanischen Gesetzen dar. Mit anderen Näherungswerten würde auch das Ergebnis vom richtigen Resultat abweichen.

b) Variante 1:

$$\text{Zentralkraft} = \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \text{Coulombkraft}$$

$$\text{Ferner ist: } L = mvr = \frac{h}{2\pi}.$$

Erweitern Sie den ersten Term mit mr^2 und setzen Sie L ein, dann erhalten Sie:

$$\frac{m^2 r^2 v^2}{mr^3} = \frac{L^2}{mr^3} = \frac{h^2}{4\pi^2 mr^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$\text{Das lösen Sie auf nach } r: \quad r = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi e^2 m}.$$

$$\text{Aus dem Kräftegleichgewicht entsteht: } \frac{mv^2}{r} = \frac{2E_{kin}}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{-E_{pot}}{r}$$

$$\text{Daraus wird (gilt übrigens für alle Zentralkräfte): } 2E_{kin} = -E_{pot}$$

$$\text{Demnach ist: } E_{total} = E_{kin} + E_{pot} = -\frac{1}{2} E_{pot} + E_{pot} = \frac{1}{2} E_{pot} = \frac{-1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Setzen Sie nun hier den Wert von r ein, erhalten Sie das Schlussresultat

$$E_{total} = \frac{-1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2 \pi e^2 m}{h^2 \epsilon_0} = \frac{-me^4}{8h^2 \epsilon_0^2}$$

b) Variante 2:

$$\text{de Broglie - Welle: } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = 2\pi r \quad \Rightarrow \quad mvr = \frac{h}{2\pi} = L$$

Das Übrige ist wie bei der Variante 1.

b) Variante 3:

$$\text{Gesamtenergie: } E_{tot}(r) = E_{kin} + E_{pot} = \frac{p(r)^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Die Funktion $p(r)$ ergibt sich aus der Unschärferelation:

$$p(r) = p \approx \Delta p \geq \frac{h}{2\pi\Delta r} \approx \frac{h}{2\pi r}$$

$$E_{tot}(r) = \frac{h^2}{8\pi^2 mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad \Rightarrow \quad E'(r) = \frac{-2h^2}{8\pi^2 mr^3} - \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$\text{Minimum für } E_{tot} \text{ bei } E'(r) = 0: \quad \Rightarrow \quad \frac{2h^2}{8\pi^2 mr^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad \Rightarrow \quad r \text{ wie bei Var. 1.}$$

Aufgabe A2.3: Wasserstoffähnliche Systeme

Wesentlich ist, dass anstelle von e^2 neu die Grösse $(Ze)^2$ in den Energieniveaux auftritt. Z ist die Anzahl positiver Elementarladungen im Potentialtopf, hier also die Anzahl der Protonen. Mit zunehmender Kernladungszahl wird die Energie grösser und das Orbital kleiner.

Zudem spielt eine Rolle, dass die Bewegung von Elektron *und* Kern um den gemeinsamen Schwerpunkt abläuft. Der geometrische Abstand der beiden Partner ist grösser als die physikalisch bedeutsame Entfernung vom Drehpunkt. Die Energie nimmt also nochmals zu mit der Kernmasse. Die Spektroskopiker können auf diese Weise den Unterschied zwischen dem normalen Wasserstoff und dem Deuterium mühelos nachweisen.

Interessant ist das Müonium, ein exotisches "Wasserstoffatom": Es besitzt anstelle des Protons das etwa zehnmals leichtere Mü-Meson als positives Ladungszentrum. Elektron und Müon "torkeln" merklich um den gemeinsamen Schwerpunkt. Die gute Übereinstimmung der Theorie mit den beobachteten Spektrallinien bildete einen wichtigen Test für die Quantenmechanik.

Aufgabe A2.4: Rotierende Moleküle (fakultativ)

$$\text{a) Niedrigster Drehimpuls: } L_1 = \frac{h}{2\pi} = 1.1 \cdot 10^{-34} \text{ Js.}$$

$$\text{Trägheitsmoment: } J = \frac{mr^2}{2} = 4.5 \cdot 10^{-48} \text{ kgm}^2.$$

$$\text{Niedrigste Energie: } E_1 = \frac{L^2}{2J} = 1.2 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 7.6 \text{ meV.}$$

b) Wellenlänge:
$$\lambda_{12} = \frac{hc}{\Delta E_{12}} \approx \frac{hc}{E_1} = 1.6 \cdot 10^{-4} \text{ m} = 160 \mu\text{m}.$$

Die Übereinstimmung mit dem Experiment ist sehr gut.

Aufgabe A2.5: Bilder von Hybrid-Orbitalen

Lesen und Bilder wirken lassen! Denken Sie daran, dass die gezeichneten Oberflächen keine absoluten Grenzen der Orbitale sind. Dort sinkt bloss die Aufenthaltswahrscheinlichkeit unter den Wert, den man dem Computer vorgegeben hat.

Test für Kapitel 1

Test-Aufgabe 1.1

2 Punkte

Welche Messgrösse registriert das RTM? Es gibt zwei Möglichkeiten!.

Test-Aufgabe 1.2

4 Punkte

Entscheiden Sie, für welche der folgenden Situationen die Tunnelmikroskopie eine geeignete Methode wäre:

- Sie interessieren sich für den Aufbau einer Kohlenstoffoberfläche.
- Sie wollen mehr über die Oberflächenstruktur eines Platinkristalls wissen.
- Sie stellen fest, dass die Vorder- und Rückseite einer Alufolie unterschiedlich aussehen und vermuten, dass die beiden Seiten unterschiedlich rau sind. Sie fragen sich, ob auch in atomaren Dimensionen ein Unterschied besteht.
- Sie möchten wissen, wie ein Elektron aussieht.

Begründen Sie jeweils ihre Antwort.

Test-Aufgabe 1.3

3 Punkte

- Wie hängt der Tunnelstrom vom Abstand zwischen Probe und Spitze ab?
- Wie kann man diese Tatsache nutzen, um Atome abzubilden?
- Nennen Sie mindestens eine weitere Grösse, von der der Tunnelstrom abhängt.

Test-Aufgabe 1.4

3 Punkte

Erklären Sie kurz die folgenden Begriffe:

- Austrittsarbeit
- Reibungsmotor
- Rastern

Test-Aufgabe 1.5

3 Punkte

Zeichnen Sie schematisch, welche Tunnelaufnahme Sie für die Graphitoberfläche erwarten. Dabei sollten Bereiche mit hohem Tunnelstrom hell und solche mit niedrigem Tunnelstrom dunkel gezeichnet werden.

Lösungen zum Test für Kapitel 1

Test-Aufgabe 1.1

3 Punkte

(K1) Das RTM registriert den Tunnelstrom (Rastern bei konstanter Höhe) oder es misst die Regelparameter der Piezoelemente, damit der Strom durch die Spitze konstant bleibt (Rastern mit konstantem Strom).

Test-Aufgabe 1.2

4 Punkte

(K3)

- a) Die Tunnelmikroskopie ist nicht für die Untersuchung von Kunststoff geeignet, da sie nur leitende Proben abbildet.
- b) Platin lässt sich gut mit dem RTM untersuchen. Allerdings hat man an Luft ähnliche Probleme wie beim Gold und kann nicht die einzelnen Atome auflösen, sondern nur grössere Strukturen.
- c) Auch die Rauigkeit lässt sich gut mit dem RTM untersuchen. Man kann die Höhenunterschiede über Änderungen im Tunnelstrom feststellen. Allerdings kann bei zu grossen Höhenunterschieden möglicherweise die Spitze nicht mehr nachgeführt werden und abbrechen.
- d) Elektronen können Sie leider nicht abbilden. Das RTM registriert tunnelnde Elektronen, um Atome abzubilden. Die Elektronen selbst sind zu klein. Man kann aber die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen abbilden (siehe Kapitel 2).

Test-Aufgabe 1.3

3 Punkte

(K2)

- a) Der Tunnelstrom hängt exponentiell vom Abstand zwischen Probe und Spitze ab.
- b) Kleine Abstände führen zu grossen Stromänderungen. Der Tunnelstrom ist also sehr empfindlich auf kleinste Abstandsänderungen, die sogar nur Bruchteile des Atomdurchmessers betragen können. Rastert man die Oberfläche ab und registriert dabei diese Änderung, kann man Atome abbilden.
- c) Der Tunnelstrom hängt noch von der Elektronendicht in Probe und Spitze ab. Auch die Austrittsarbeit der beiden Metalle und natürlich die angelegte Spannung bestimmen den Tunnelstrom.

Test-Aufgabe 1.4

3 Punkte

(K2)

- a) Die Austrittsarbeit ist die Arbeit, die man aufwenden muss, um ein Elektron aus einem Stoff herauszulösen.
- b) Der Reibungsmotor wird zum schrittweisen Annähern der Probe an die Spitze benutzt. Bei einer langsam veränderlichen Spannung bewegt sich der Probenzylinder mit der Unterlage nach vorne. Beim schnellen Spannungsabfall reicht die Reibungskraft

nicht aus, um ihn aus der Unterlage festzuhalten. Die Unterlage bewegt sich in die Ausgangsposition zurück, während der Zylinder vorne bleibt.

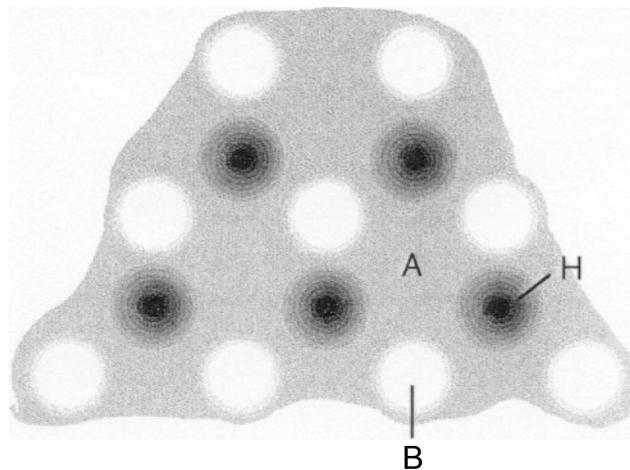
c) Als Rastern bezeichnet man das punktweise Abtasten einer Oberfläche.

Test-Aufgabe 1.5

4 Punkte

(K3)

Man erhält eine Vorstellung von der Tunnelaufnahme von Graphit, wenn man in Figur 1.10 die Bereiche um die H-Stellen dunkel zeichnet (geringe Elektronendichte, geringer Tunnelstrom) und die B-Atome hell lässt (hohe Elektronendichte, hoher Tunnelstrom). Dazwischen, also auch über den A-Atomen, misst man einen mittleren Strom, den man durch graue Flächen andeuten kann. Die Zeichnung sollte schematisch etwa so aussehen:



Test für Kapitel 2

Weil Sie alle Übungsaufgaben des Kapitels 2 selber durchgerechnet haben, ist es nicht nötig, dass Sie ihre mathematischen Fähigkeiten nochmals unter Beweis stellen.

Test-Aufgabe 2.1

3 Punkte

Schon vor über hundert Jahren konnte die Polizei eine Arsenvergiftung durch die Auswertung des Flammenspektrums nachweisen. - Erläutern Sie stichwortartig die physikalischen Grundlagen dieser Methode. Welche Rolle spielt hier die Quantenphysik?

Test-Aufgabe 2.2

3 Punkte

Was bedeutet der Begriff „Zustandsfunktion“? Stichworte genügen!

Test-Aufgabe 2.3

3 Punkte

Erläutern Sie stichwortartig, eventuell anhand eines Beispiels, was eine Differentialgleichung ist. Geben Sie anschliessend an, wie in diesem Zusammenhang Quantenzahlen auftreten.

Test-Aufgabe 2.4

4 Punkte

James Frank und Gustav Hertz führten 1913 erstmals einen Elektronenstossexperiment durch. Unter dem Namen Frank-Hertz-Versuch finden sie eine Beschreibung in Ihrem Physikbuch. Interpretieren Sie die Versuchsergebnisse mit Hilfe des Schalenmodells.

Test-Aufgabe 2.5

4 Punkte

Sie wissen, dass die elektrische Leitfähigkeit bei Metallen mit steigender Temperatur abnimmt. Passiert das gleiche auch bei Halbleitern? Es wird angenommen, dass die Temperatur unter dem Schmelzpunkt des Materials bleibt. Begründen Sie ihre Antwort!

Lösungen zum Test für Kapitel 2

Test-Aufgabe 2.1

3 Punkte

(K3)

Unbekannter Stoff wird erhitzt. Atome werden ionisiert. Elektronen geraten in angeregte Zustände. Energieabgabe durch aussenden von Photonen mit einer charakteristischen Energie. Diese Energie wird bestimmt durch den Energieabstand der Übergangsniveaus. Die Energieniveaus werden durch den Aufbau der Atome bestimmt. Somit hat jedes Atom ein charakteristisches Spektrum von Licht, das es aussenden kann.

Test-Aufgabe 2.2

3 Punkte

(K2)

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch eine sogenannte Zustandsfunktion beschrieben. Ihr Aufbau hängt von der Komplexität des Systems ab. Beim harmonischen Oszillator etwa besitzt Sie eine Orts- und Zeitvariable.

Test-Aufgabe 2.3

3 Punkte

(K2)

Differentialgleichungen sind Bedingungen für die unbekannt Funktionen. Sie enthalten neben den Funktionen auch Ableitungen der Funktion. Beispiel: $f'' = kf$
Quantenzahlen können auf zwei Arten in Erscheinung treten:

1. beim Lösen komplizierter Gleichungen: Gewisse Funktionen sind nur für ganze Zahlen definiert.
2. beim Berücksichtigen der Anfangs- und Randbedingungen. Sie erfassen zusätzliche Bedingungen, etwa Symmetriebedingungen, der Problemstellung.

Test-Aufgabe 2.4

4 Punkte

(K4)

Die kinetische Energie nimmt kontinuierlich mit der Beschleunigungsspannung der Elektronen zu. Die Atome des Gases stoßen mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit mit den Elektronen, wenn deren kinetische Energie mit der Energie eines Überganges des Atoms übereinstimmt. Ist die kinetische Energie ein ganzzahliges vielfaches der Übergangsenergie, so stoßen die Elektronen auf dem Weg zum Gitter mehrfach mit Atomen des Gases.

Test-Aufgabe 2.5

4 Punkte

(K3)

Bei steigender Temperatur werden im Halbleiter immer mehr Elektronen in das Leitungsband befördert. Die Leitfähigkeit nimmt zu. Wenn die thermische Energie kleiner wird als der Abstand zwischen Leitungs- und Valenzband, so wird aus dem Halbleiter ein Isolator.

Test für Kapitel 3

Test-Aufgabe 3.1

3 Punkte

Was hat Nanotechnologie mit Quantenmechanik zu tun? Wieso ist Nanotechnologie eine Anwendung der Quantenmechanik? Stichworte genügen!

Test-Aufgabe 3.2

3 Punkte

Der Internet-Boom ist wieder abgeflaut und an der Börse sind viele Aktien ins Bodenlose gefallen. Einige grössere Firmen sind Konkurs gegangen oder haben Tausende von Mitarbeitern entlassen. Kann man von der Nanotechnologie einen ähnlichen Boom erwarten? Was ist der wesentliche Unterschied zur Internettechnologie?

Lösungen zum Test für Kapitel 3

Test-Aufgabe 3.1

3 Punkte

(K3)

Die räumlichen Dimensionen werden in der Nanotechnologie so klein, dass quantenmechanische Effekte auftreten. Die Berechnungen für Nanomaschinen und Objekte müssen mit der Schrödingergleichung durchgeführt werden.

Test-Aufgabe 3.2

3 Punkte

(K3).

In der Internet-Branche brauchte man nur einen Computer und einen Internetanschluss und schon konnte man sich selbständig machen. Aber für die Nanotechnologie braucht man viele und teure technische Geräte und gut ausgebildetes Personal, um die nötige Entwicklung voranzutreiben. Dies können sich nur wenige Firmen leisten und auch die Investoren schrecken vor den hohen Investitionen eher zurück.

Atome unter der Lupe - Schlussprüfung

Name: Klasse:

Aufgabe 1:

8 Punkte

Erläutern Sie anhand einer Skizze den Aufbau eines Raster-Tunnel-Mikroskops. Geben Sie die Funktionsweise der wichtigsten Einzelteile an.

Aufgabe 2:

Wie gross darf der energetische Abstand des Leitungs- und Valenzbandes sein, wenn es noch Licht der Wellenlänge 550 nm absorbieren soll?

Aufgabe 3:

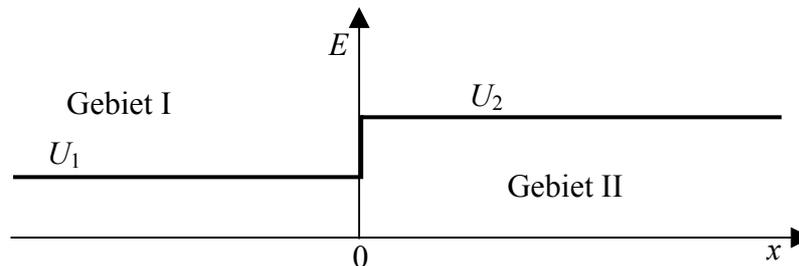
8 Punkte

Kann man mit dem RTM die Zustandsfunktion eines Elektrons sichtbar machen?

Aufgabe 4:

8 Punkte

Ein Elektron trifft auf einen Energiesprung wie in Figur Z1 dargestellt.



FigurZ1: Potentialsprung mit den Energien U_1 und U_2 .

Das Elektron besitze eine Energie e zwischen U_1 und U_2 .

Berechnen sie das Amplitudenverhältnis der Lösungen in den Gebieten von U_1 und U_2 .

Dazu lösen sie die Schrödingergleichung für die beiden Gebiete und benutzen dann die physikalischen Randbedingungen bei $x=0$.

Lösungen zur Schlussprüfung

Aufgabe 1:

8 Punkte

(K2)

Aus der/den sauberen Skizze/n müssen klar hervorgehen: Zeilenweise Abtastung der Probe, Tunneleffekt von Elektronen zwischen der Probe und der Spitze, Höhensteuerung der Spitze durch eine Elektronik, Bildentstehung durch die Registrierung der Position der Spitze. Wichtig sind die Darstellung des Tunneleffektes und der piezoelektrischen Verschiebung der Spitze, sowie die Begründung für das atomare Auflösungsvermögen.

Aufgabe 2:

4 Punkte

(K4)

Für die Photonenenergie gilt: $E = h\nu = hc/\lambda = 6.62606876 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 299792458 \text{ ms}^{-1} / 550 \text{ nm} = 3.61 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. Damit diese Licht absorbiert werden kann darf der Bandabstand nicht grösser als $3.61 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ sein, da sonst die Energie eines Photons nicht ausreicht ein Elektron in das Leitungsband anzuheben. Ein Elektron darf nie eine Energie besitzen die nicht durch Bänder erlaubt ist.

Aufgabe 3:

8 Punkte

(K3)

Mit dem RTM misst man den Tunnelstrom. Dieser ist proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen, die durch das Betragsquadrat der Zustandfunktion berechnet werden kann. Man kann also nur das Betragsquadrat der Zustandfunktion und nicht die Zustandfunktion selber messen. Durch das Quadrieren geht Information verloren.

Aufgabe 4:

8 Punkte

K(2)

Die Lösungen für die Gebiete I und II sind von Kapitel 2 her bekannt:

$$\text{I: } \psi_{\text{I}}(x) = A \cos(kx + \delta) \text{ mit } k^2 = 2m(e - U_1) / (\hbar/2\pi)^2$$

$$\text{II: } \psi_{\text{II}}(x) = B e^{-\kappa x} \text{ mit } \kappa^2 = 2m / (\hbar/2\pi)^2 \cdot [U_2 - e]$$

Für die Randbedingungen erhalten wir:

Bei $x=0$:

$$A \cos(\delta) = B$$

$$\Rightarrow B / A = \cos(\delta)$$

und

$$A k \sin(\delta) = B \kappa$$

$$\Rightarrow \sin(\delta) A / B = \kappa / k \Rightarrow \sin(\delta) / \cos(\delta) = \kappa / k \Rightarrow \delta = \arctan(\kappa / k)$$

$$\Rightarrow B / A = \cos(\arctan(\frac{\kappa}{k})) = \frac{k}{\sqrt{k^2 + \kappa^2}} = \sqrt{\frac{e - U_1}{U_2 - U_1}}$$

Je grösser die Energiebarriere, desto kleiner wird B im Verhältnis zu A, d.h. desto weniger Elektronen dringen in die Barriere ein.

Mediothek für die Schüler

Bücher/Publicationen

Mit den vorangestellten Kürzeln wird im Leitprogramm auf diese Bücher/Publicationen Bezug genommen.

- (Baumann 84) Baumann, K. und Sexl, U. R.: Die Deutungen der Quantentheorie. Braunschweig 1984 (Vieweg).
- (Binnig 85) Binnig, G. und Rohrer, H.: Das Raster-Tunnelmikroskop. In: Spektrum der Wissenschaften **10** (1985) 62 - 66.
- (Brennan 99) Brennan, K.F.: The physics of semiconductors, Cambridge 1999 (Cambridge University Press).
- (Christen 78) Christen, H. R.: Chemie. Frankfurt a.M./Aarau 1978 (Diesterweg-Salle-Sauerländer).
- (Grehn 92) Grehn, J.: Metzler Physik, Gesamtband, 2.Auflage. Stuttgart 1992 (J. B. Metzlersche Verlagsbuchhandlung).
- (Hey 90) Hey, T. und Walters, P.: Quantenuniversum. Heidelberg 1990 (Spektrum der Wissenschaften).
- (Kuhn 92) Kuhn, W.: Physik, Band 2, 12/13. Braunschweig 1992 (Westermann).
- (Schreiner 78b) Schreiner, J.: Physik 2. Frankfurt a.M./Aarau 1978 (Diesterweg-Salle-Sauerländer).
- (Sexl 91) Sexl, R. , Raab, I. und Streeruwitz, E.: Materie in Raum und Zeit, Eine Einführung in die Physik, Band 3. Frankfurt a.M./Aarau 1991 (Diesterweg-Salle-Sauerländer).
- (Sexl 92) Sexl, R. , Kühnelt H. et al: Physik 4. Wien 1992 (Hölder-Pichler-Tempsky).
- (Regis 95) Edward Regis, Nano: the emerging science of nanotechnology: remaking the world – molecule by molecule, Boston 1995 (Little Brown)

Videofilme-VHS

Atome sehen, Spektrum der Wissenschaften, Videothek, ISBN 3-89330-968-3.

Dauer: 31 Minuten. Die letzten 10 Minuten sind zum RTM.

Das Rastertunnelmikroskop, Fernsehen DRS, Sendung MTW vom 9. 5. 1990.

Dauer: 30 Minuten

Experiment 2.1: Zur Fluoreszenz

Material

- Stamm-Lösungen Fluorescein-Natriumsalz, Eosin und Rhodamin B
Konzentration jeweils zwischen 10^{-3} und 10^{-4} mol/l (Quelle: Tausch 88, Seite 16)
Lösungs-Material allenfalls vom Chemielehrer ausleihen.
Dunkel und kühl aufbewahrt, dürften die Stamm-Lösungen mehrere Jahre halten.
- 1 UV Leuchte
- 1 weisse Lampe mit grosser Lichtintensität wie z. B. eine Projektorlampe
- eventuell: IR-Lampe

Versuchsanleitung

1. Schalten Sie die UV-Lampe ein und löschen Sie das Licht. - Welche Farben sehen Sie?
2. Zünden Sie wieder die Zimmerbeleuchtung an und schalten Sie die UV-Lampe aus.
3. Beleuchten Sie die Substanzen mit weissem Licht oder mit IR. - Was sehen Sie jetzt?

Experiment 2.2: Zum Spektrum von Gasen

Material

- Gasentladungsröhren mit Neon und Argon, mit Hochspannungsgerät
- Gasentladungsröhren mit Quecksilber und Natrium, evtl. Hochdruckdampf lampen, mit Betriebsgerät
- Gasentladungsröhren mit Wasserstoff, Stickstoff und Kohlendioxid, Netzgerät
- (qualitatives) Spektroskop

!!!!!!!!!!!!!!! Warnung !!!!!!!!!!!!!!!!

Mit Hochspannungsgeräten lässt sich nicht spassen! Schalten Sie die Spannung nur an den Hauptschaltern ein und aus. Ändern Sie an den vom Lehrer eingestellten Spannungen nichts. Berühren Sie keinesfalls nicht-isolierte Metallteile. Isolationen, die für 230 Volt vollkommen sind, können bei Hochspannung durchschlagen.

Versuchsanleitung

1. Schalten Sie die Spannung für die Edelgasröhren ein. Sie werden an Leuchtreklamen erinnert. Betrachten Sie das Licht durch das Spektroskop: Erkennen Sie deutlich ausgeprägte Spektrallinien?
2. Schalten Sie die Spannung für die Metaldampf lampen ein. Das Licht wird Sie an gewisse Strassenbeleuchtungen erinnern. Betrachten Sie ihr Licht durch das Spektroskop. Welche Unterschiede stellen Sie fest?
3. Schalten Sie die Spannung für die Röhren ein, die mit Gas aus Molekülen gefüllt sind. Welche Veränderung im Wesen des Spektrums sehen Sie?
4. Schalten Sie alle Spannungen aus, bevor Sie wieder an die Arbeit mit dem Text gehen.

Experiment 2.3: Zum Drehimpuls

Material

- Velorad-Kreisel, einseitig aufgehängt

Versuchsanleitung

1. Bringen Sie den Kreisel mit horizontaler Achse auf eine möglichst hohe Tourenzahl.
2. Versuchen Sie, die Achse in einer horizontalen Ebene nach hinten zu drücken oder nach vorne zu ziehen: Wie Sie eventuell schon beim Velofahren oder sonstwo feststellen mussten: Der Kreisel weicht senkrecht zur Kraft nach oben oder unten aus, je nach Drehrichtung.

Experiment 2.4:

Zu 2-dimensionalen Schwingungen

Material

- grosse PET-flasche für Mineralwasser, ohne Kohlensäure, noch zu 3/4 voll.
- Chladni-Experiment mit einer runden Metallplatte. Anregung über einen Lautsprecher mit den Schwingungen eines Tongenerators angestrahlt wird.

Versuchsanleitung

1. Stellen Sie die Flasche auf den relativ stabilen Tisch und regen Sie durch einen Schlag auf die Tischplatte Oberflächenschwingungen an. Beobachten Sie die Symmetrie.
2. Schalten Sie den Tongenerator ein und beobachten Sie die Chladni-Figur, die es bei der eingestellten Anregungsfrequenz gibt. Verändern Sie bitte die Frequenz nicht. Putzen Sie lieber den Sand zusammen...

Von den Autoren benützte Quellen

- (Abramowitz 68) Abramowitz, M. und Segun, I. A.: Handbook of Mathematical Functions. New York 1968 (Dover Publications).
- (Audretsch 90) Audretsch, J. und Mainzer, K. (Eds.): Wieviele Leben hat Schrödingers Katze? Mannheim usw. 1990 (BI Wissenschaftsverlag).
- (Baker 82) Baker, J. J. W. und Allan, G. E.: The Study of Biology. Reading (MA) 1982 (Addison-Wesley).
- (Baumann 84) Baumann, K. und Sexl, U. R.: Die Deutungen der Quantentheorie. Braunschweig 1984 (Vieweg).
- (Binnig 85) Binnig, G. und Rohrer, H.: Das Raster-Tunnelmikroskop. In: Spektrum der Wissenschaften **10** (1985) 62 - 68.
- (Bittcher 91) Bittcher, M., Hänggi, G., Müller, P. und Schaffner, B.: Leitprogramm Quantenphysik. Zürich 1991 (ETH)
- (Brachner 71) Brachner, A. und Fichtner, R.: Quantenmechanik für Lehrer und Schüler. 1971.
- (Brachner 80) Brachner, A. und Fichtner, R. (Hsg.): Materialien für die Sekundarstufe II Physik, Quantenmechanik. Hannover 1980 (Schroedel Schulbuchverlag).
- (Capra 82) Capra, F.: Wendezeit. Bern usw. 1982 (Scherz).
- (Christen 78) Christen, H. R.: Chemie. Frankfurt a.M./Aarau 1978 (Diesterweg-Salle-Sauerländer).
- (Davies 88) Davies, P. C. W. und Brown, J. R.: Der Geist im Atom. Basel 1988 (Birkhäuser) ISBN 3-7643-1944-5.
- (Dorn 92) Dorn, F. und Bader, F.: Physik in einem Band, Neubearbeitung. Hannover 1992 (Schroedel Schulbuchverlag).
- (Elbaz 95) Edgar Elbaz, Quantique, 1995 (Ellipses)
- (Fischler 92) Fischler H. (ed): Quantenphysik in der Schule. Kiel 1992 (Institut für Pädagogik der Naturwissenschaften).
- (Gamow 79) Gamow, G.: Mr. Tompkins' seltsame Reise durch Kosmos und Mikrokosmos. Braunschweig 1979 (Vieweg).
- (Grehn 92) Grehn, J.: Metzler Physik, Gesamtband, 2. Auflage. Stuttgart 1992 (J. B. Metzlersche Verlagsbuchhandlung).
- (Greinacher 39) Greinacher, H.: Physik in Streifzügen. Berlin 1939 (Springer).

-
- (Grimsehl 68) Grimsehl: Physik II, Grundgesetze, Modelle und Theorien. Stuttgart 1968 (Ernst Klett Verlag).
- (Gross 87) Gross Berhag: Atome, Kerne, Quanten. Stuttgart 1987 (Klett).
- (ter Haar 69) ter Haar D.: Quantentheorie, Einführung und Originaltexte. Braunschweig 1969 (Vieweg).
- (Hey 90) Hey, T. und Walters, P.: Quantenuniversum. Heidelberg 1990 (Spektrum der Wissenschaften).
- (Känzig 78) Känzig, W. Physik III, Quantenphysik. Zürich 1978 (Verlag der Fachvereine an den Schweizerischen Hochschulen und Techniken).
- (Kneubühl 75) Kneubühl, F.: Repetitorium der Physik. Stuttgart 1975 (Teubner).
- (Kuhn 76) Kuhn, W.: Physik, Band III E, Quantenphysik. Braunschweig 1976 (Westermann).
- (Kuhn 92) Kuhn, W.: Physik, Band 2, 12/13. Braunschweig 1992 (Westermann).
- (NEVA) NEVA, Dr. K. Vatter GmbH, D-7340 Geislingen a. d. Steige o. Jz.
- (Obrist 88) Obrist, W.: Neues Bewusstsein und neue Religiosität. Olten 1988 (Walter).
- (Schreiner 78a) Schreiner, J.: Anschauliche Quantenmechanik. Frankfurt a.M./Aarau 1978 (Diesterweg-Salle-Sauerländer).
- (Schreiner 78b) Schreiner, J.: Physik 2. Frankfurt a.M./Aarau 1978 (Diesterweg-Salle-Sauerländer).
- (Schreiner 92) Schreiner, J.: Physik 4. Wien 1992 (Hölder-Pichler-Tempsky).
- (Schwaneberg 80) Schwaneberg, R.: Didaktik und Quantenphysik. Frankfurt am Main 1980 (Verlag Peter D. Lang).
- (Selleri 83) Selleri, F.: Die Debatte um die Quantentheorie. Braunschweig 1983 (Vieweg).
- (Sexl 91) Sexl, R. , Raab, I. und Streeruwitz, E.: Materie in Raum und Zeit, Eine Einführung in die Physik, Band 3. Frankfurt a.M./Aarau 1991 (Diesterweg-Salle-Sauerländer).
- (Sexl 92) Sexl, R. , Kühnelt H. et al: Physik 4. Wien 1992 (Hölder-Pichler-Tempsky).

- (Stiefel 73) Stiefel, E.: Methoden der mathematischen Physik. Zürich 1973 (Verlag der Fachvereine an den Schweizerischen Hochschulen und Techniken).
- (Tausch 88) Tausch, M. und Paterkiewicz, D.: Phosphoreszenz und Fluoreszenz. In: Praxis der Naturwissenschaften - Chemie **1/37**, (1988) 14 - 21.
- (Tipler 94) Tipler P. A.: Physik. Heidelberg usw. 1994 (Spektrum Akademischer Verlag).
- (Tolansky 69) Tolansky, S.: Linse, Licht und Laserstrahl. Frankfurt am Main 1969 (Umschau Verlag Breidenstein KG).
- (Whichman 73) Whichman E.H. et al: Berkeley Physik Kurs, 4 Quantenphysik. Braunschweig 1973 (Vieweg).

WWW

Introduction to Nanoscience, Rice University

<http://nanonet.rice.edu/intronanosci/>

Back to the roots Ursprung bei

<http://www.zurich.ibm.com/>

Schweizerische Forschung bei

<http://lmn.web.psi.ch/>

Forschungsförderung Deutschland

http://www.bmbf.de/618_900.html

Hersteller von *easyScan*

<http://www.nanosurf.com/>

Übersicht Schweiz

<http://www.nanoscience.ch/>

Einstieg Deutschland

<http://www.nanoscience.de/>

Alternatives RTM: Preiswert zum selber bauen:

Gute Tipps für die Spitzenpräparation!

<http://sxm4.uni-muenster.de/introduction-de.html>

Erklärungen RTM:

<http://www.chemie.uni-dortmund.de/groups/dc1/stmwww/stmiso/stm.htm>

Hinweise für die Lehrerinnen und Lehrer

Überblick

Stufe, Schulbereich: Sekundarstufe II, Schwerpunkts- und Ergänzungsfach der Maturitäts-schulen Klassen 11 - 13, Fachhochschulen

Fachliche Vorkenntnisse: Grundlagen der klassischen Physik, Grundlagen der Quanten-physik, Energie-Orts-Diagramm, Austrittsarbeit bei Metallen. Drehimpuls. Im Kapitel 2 und im Additum 2: Infinitesimalrechnung bis zu Differentialgleichungen.

Bearbeitungsdauer: Fundamentum 9 Lektionen, Additum 1 4 Lektionen, Additum 2 6 Lektionen

Inhalt:

Kapitel 1: Funktion des Raster-Tunnel-Mikroskops

Kapitel 2: Einblick in die Quantenmechanik

Kapitel 3: Internet-Recherche zur Nanotechnologie

Additum 1: Arbeiten mit RTM *easyScan*

Additum 2: Vertiefung der Kenntnisse in Quantenmechanik

Das Besondere am Leitprogramm "Atome unter der Lupe"

Wie der Titel andeutet, haben naturwissenschaftliche (Atome) und technische (Lupe) Gesichtspunkte hier gleiches Gewicht. Wir gehen von der Funktionsweise des modernen Raster-Tunnel-Mikroskops aus und benötigen zu dessen genauerem Verständnis grundlegende Kenntnisse der Quantenmechanik.

Allerdings sind hier die mathematischen Anforderungen höher als in den Leitprogrammen fürs Grundlagenfach: Nach einer kleinen Einführung werden auch Differentialgleichungen mit einer Variablen benutzt. So kann die Schrödingergleichung eingeführt und in einfachen Fällen auch gelöst werden. Anschliessend werfen wir via Internet einen Blick auf das sich rasch entwickelnde Gebiet der Nanotechnologie.

Vom Additum 1 profitiert am meisten, wem ein RTM-Gerät *easyScan* der Firma Nanosurf zur Verfügung steht: Schrittweise lernt man damit umzugehen. Andere RTM der gleichen Preisklasse funktionieren ähnlich.

Im Additum 2 taucht man tiefer in die Quantenmechanik ein: Es wird eine Reihe von praktisch wichtigen Beispielen bis hin zu den Prozessen beim Sehvorgang im menschlichen Auge, - obwohl teilweise bloss über Analogien - erschlossen.

Experimente im Fundamentum

2.1: Zur Fluoreszenz

2.2: Zum Spektrum von Gasen

2.3: Zum Drehimpuls

2.4: Zu 2-dimensionalen Schwingungen

Zum Additum 1

4 Lektionen; wenn möglich ein RTM *easyScan*

Vom Additum 1 profitiert am meisten, wem ein RTM-Gerät *easyScan* der Firma Nanosurf zur Verfügung steht: Schrittweise lernt man damit umzugehen. Andere RTM der gleichen Preisklasse funktionieren ähnlich.

Zum Additum 2

6 Lektionen; keine Experimente

Im Additum 2 taucht man tiefer in die Quantenmechanik ein: Es wird eine Reihe von praktisch wichtigen Beispielen bis hin zu den Prozessen beim Sehvorgang im menschlichen Auge, - obwohl teilweise bloss über Analogien - erschlossen.

Allgemeines zum Unterrichten mit ETH-Leitprogrammen

Leitprogramme sind ...

- ... schriftliches Selbststudienmaterial für die einzelnen SchülerInnen,
- ... eingerichtet für Zeitspannen von etwa 3 bis 12 Lektionen,
- ... unterteilt in ein Fundamentum (= Grundstock für alle) und mehrere, unabhängige Addita mit unterschiedlicher Thematik und anregendem Zusatzstoff für Schnelle, Interessierte,
- ... abwechslungsreich dadurch, dass Experimente, Videosequenzen, Lektüren in der Handbibliothek usw. eingebaut sind,
- ... mit der Möglichkeit zu ständiger Selbstkontrolle durch Zusammenfassungen, Fragen, Übungs- und Kontrollaufgaben bestückt,
- ... mit Kontrollmöglichkeiten für die Lehrkraft durch Kapiteltests, die einzeln mündlich oder in Gruppen schriftlich durchgeführt werden, versehen.

Leitprogramme sind nicht ...

- ... vorgesehen für Projektunterricht, wo die Ziele vorerst noch offen sind.
- ... Fallstudien. Die Fragestellungen sind in den Leitprogrammen meist abgeschlossen.

Absichten der ETH-Leitprogramme

- Sie bringen Abwechslung in den Unterrichtsstil.
- Sie reduzieren den Anteil an lehrerzentriertem Unterricht.
- Sie fördern die Eigenverantwortung der Lernenden für ihren Lernfortschritt.
- Sie bereiten auf die Universität vor (selbständiges Studium neben den Vorlesungen).
- Sie realisieren das "mastery learning": erst weiterfahren, wenn die Voraussetzungen sitzen.
- Sie liefern sorgfältige Formulierungen in kritischen Gebieten, z.B. in der Quantenphysik.
- Sie erlauben individuelles Lerntempo und individuellen Arbeitsort.
- Sie vermitteln den besonders Leistungsfähigen Anregungen durch den Stoff der Addita.

Leitprogramme aus der Sicht von Lehrerinnen und Lehrern ...

Eine erfreuliche Überraschung bei der Erprobung der ETH-Leitprogramme waren Berichte über neue, persönliche Kontakte: Bei den mündlich durchgeführten Kapiteltests, im Zusammenhang mit den Experimenten, nach der Lektüre in der Handbibliothek oder "einfach so". Viele Jugendliche wagten in diesen Situationen eher Fragen zu stellen. Nun hatten sie nicht mehr das Gefühl, bei ihnen falle der Groschen viel langsamer als bei allen andern der Klasse.

... und aus der Sicht von Schülerinnen und Schülern:

Vorteil von Leitprogrammen: Man muss nur soviel arbeiten, wie man will. - Nachteil von Leitprogrammen: Man sollte mehr arbeiten, als man will. (Rückmeldung eines Schülers)

Maturandinnen und Maturanden merken also die Absicht, dass sie mit den LPR als mündig betrachtet werden. Sie entdecken offensichtlich auch eigene Schwächen.

Generell sind die Urteile günstig: Beinahe alle wünschen sich ein bis zwei Leitprogramme pro Fach und Schuljahr. Negativ vermerkt wird vor allem die fehlende Kontaktperson für Fragen.

Was macht der Lehrer, die Lehrerin, beim Arbeiten mit Leitprogrammen?

1) Vor dem Start

... gibt es eine Reihe von Vorbereitungsarbeiten:

- Vorkenntnisse abklären und nötigenfalls bereitstellen
- Experimentiermöglichkeiten abklären und ergänzen, Versuchsanleitungen anpassen
- Bücher für die Handbibliothek beschaffen
- Zeitlimiten und Notengebung bestimmen
- Arbeitsorte festlegen, allenfalls unter Mitwirkung des Rektorats (Versicherungsfrage)
- Leitprogramme, Arbeitsanweisungen usw. für SchülerInnen vervielfältigen
- Tests und Schlussprüfung vorbereiten, Räume und Zeitpunkte festlegen, eventuell einen Tutor oder eine Tutorin informieren und einarbeiten

2) Während der Leitprogrammphase...

... stehen Sie zwar nicht im Rampenlicht, sind aber trotzdem ausgelastet mit:

- Tests durchführen, korrigieren und rückmelden
- Einstellungen und Reparaturen bei Video und Experimenten
- Fragen von einzelnen Schülerinnen und Schülern beantworten

3) Nach Abschluss

- Fehler und Verbesserungsmöglichkeiten im Text vermerken
- Tabellen, Bücher, Experimente und andere Medien aufdatieren
- Neue Kapiteltests und Klausuren vorbereiten, weil eine gewisse Diffusion unvermeidlich ist.

Lehrkräfte werden also nicht überflüssig...

Vorschläge zur Notengebung

Im Gegensatz zu Projekten und Fallstudien bildet die Benotung keinerlei Schwierigkeiten. Sie führen am Schluss der Unterrichtsphase, allenfalls nach einer Repetitionslektion, die gewohnte Klausur durch.

Das LPR kann schwache Charaktere zum Schlendrian verführen. Sie glauben, den ganzen Brocken erst für die Klausur sorgfältig lernen zu müssen. Dem kann man mit dem Verfahren entgegenwirken, auch die Kapiteltests zu bewerten. Realistisch wäre: Alle Tests zusammen zählen wie eine halbe Klausur.

Primär sind die Addita durch ihren Inhalt attraktiv. Ein Notenbonus für all diejenigen, die ein Additum vollständig durcharbeiten, stimuliert trotzdem. Es scheint legitim zu sein, diese Zusatzleistung dadurch zu honorieren, dass die Klausurnote um eine halbe Stufe angehoben wird.

Wieviel Leitprogramm-Unterricht?

Die Fachdidaktiker schlagen keine Revolution vor. Es gibt auch Hinweise auf Ermüdungserscheinungen. Aufgrund der Rückmeldungen scheinen ein bis zwei LPR pro Schuljahr ideal.

Wichtig ist ein schrittweiser Einstieg. Mit längeren Lernaufgaben lernen die Schülerinnen und Schüler das sorgfältige Lesen naturwissenschaftlicher Texte und das Arbeiten nach schriftlichen Anweisungen. Mit kürzeren Leitprogrammen gewöhnen sie sich an die neue Freiheit und die damit verbundene Verantwortung bei dieser Unterrichtsform.