

## 2.3 Essenz der Quantentheorie

### 2.3.1 Bindungszustände für Elektronen und Folgerungen

#### Das klassische Bild eines Atoms

- ▶ Klassisch gesehen besteht ein Atom mit der **Ordnungszahl**  $z$  aus einem sehr kleinen Atomkern mit  $z$  positiven Elementarladungen, der von  $z$  einfach negativ geladenen Elektronen im Abstand von rund und roh  $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$  "umkreist" wird.
  - Im großen und ganzen ist das ein **Planetenmodell**. Die Kraftgesetze von Gravitation und Coulombwechselwirkung haben identische  $(1/r^2)$ -Abhängigkeiten – beide haben ein  $(-1/r)$ -*Potential*.
  - Leider funktioniert das nicht. Rechnungen zum Planetenmodell der Atome ergeben komplett falsche Ergebnisse gemessen am Experiment – und nur das zählt!
  - Auch sonst versagt die klassische Physik an allen Ecken und Enden, sobald man sich der Welt der Atome und Elementarteilchen nähert; im [Link](#) gibt es Beispiele.
- ▶ Nicht so schlimm – der **ET&IT**-Ingenieur beschäftigt sich schließlich nicht mit dem Kleinzeugs, könnte man denken.
  - **Falsch!** Würde man die Quantentheorie "abschalten" und nur die klassische Physik gelten lassen, würde nicht nur das Universum in sich zusammenfallen, es gäbe schlicht keine *Elektronik* mit Halbleitern (und damit keine **IT**) mehr. Noch nicht mal die gute alte *Elektronik* mit *Elektronen*röhren würde noch funktionieren – von Lasern, Magnetspeichern, **GMR**-Leseköpfen (beruhend auf dem "Gigantomagnetowiderstandseffekt"), **LEDs** usw. ganz zu schweigen.
- ▶ Wir nehmen mal zur Kenntnis: Für **ET&IT**-Ingenieure gibt es nur **3** "Teilchen", aus denen die Welt besteht (MaWi's und Physiker kennen und benützen noch ein paar Exoten, wie z. B. [Positronen](#) ).

1. **Atomkerne ("unteilbar", aus Protonen und Neutronen zusammengesetzt).**
2. **Elektronen.**
3. **Photonen = "Lichtteilchen".**

**Das war's!**

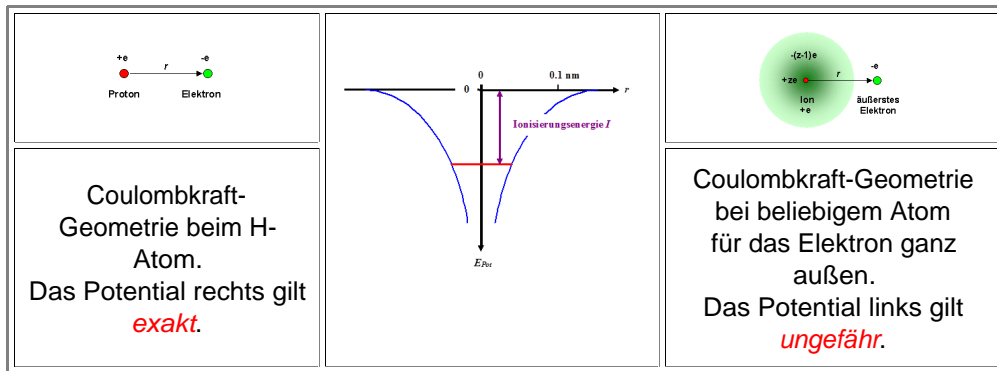
- Mehr ist nicht. Die **Quantentheorie** ist die mathematische Behandlung der Eigenschaften und Interaktionen dieser Teilchen.
- ▶ Man braucht aber mindestens zwei Semester, um die Quantentheorie halbwegs gründlich zu lernen, vom Verstehen ganz zu schweigen. In den maximal **2** Stunden, die hier zur Verfügung stehen, können wir allenfalls ein paar wenige Schlüsselbegriffe formulieren.
  - Wer ein bißchen mehr tun will, macht sich über die "[Ergänzende Quantentheorie](#)" im Rückgrat **2** her. (**Hinweis:** "No, you're not going to be able to understand it. You see, my physics students don't understand it either. That is because I don't understand it. Nobody does." So der Physiker und Nobelpreisträger [Richard Feynman](#) zur Quantentheorie; seinen Nobelpreis hat Feynman übrigens für die [Quantenelektrodynamik](#) erhalten, den experimentell am besten bestätigten Bereich der Quantenphysik, und die von ihm eingeführten und daher nach ihm benannten [Feynman-Diagramme](#) sind inzwischen ein Standard-Hilfsmittel zur Veranschaulichung quantenmechanischer Wechselwirkungen.)
- ▶ Hier gehen wir pragmatisch vor und schauen uns mal das **Potential eines Elektrons** im Atom an, ganz analog zum Bindungspotential zwischen Atomen oder Ionen.

#### Potential eines Elektrons im Atom

- ▶ Ein Atom mit der Ordnungszahl  $z$  hat durch die Coulombwechselwirkung "irgendwie"  $z$  Elektronen gebunden. Ein Atom ist rund und roh einige wenige Angström ( $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$ ) "groß". Wir nehmen mal an, dass die  $z$  Elektronen sich in einer entsprechend großen Kugel halbwegs gleichmäßig verteilt aufhalten.
  - Das würden sie schon deshalb tun, weil sie sich abstoßen und sich deswegen ihre gegenseitige Abstände maximieren.
  - Den Atomkern plus  $z-1$  Elektronen können wir deshalb als eine mit *einer* effektiven positiven Elementarladung versehene Kugel etwas unklarer Größe auffassen, die das  $z$ -te Elektron ganz außen noch mit einem  $(-1/r)$ -Potential bindet.

- Wer das zu abstrakt findet, betrachtet halt erst mal nur das Wasserstoffatom – da stimmt das Coulombpotential zu **100 %**.

Unser Elektron sitzt damit in einem Potentialtopf wie unten gezeigt.



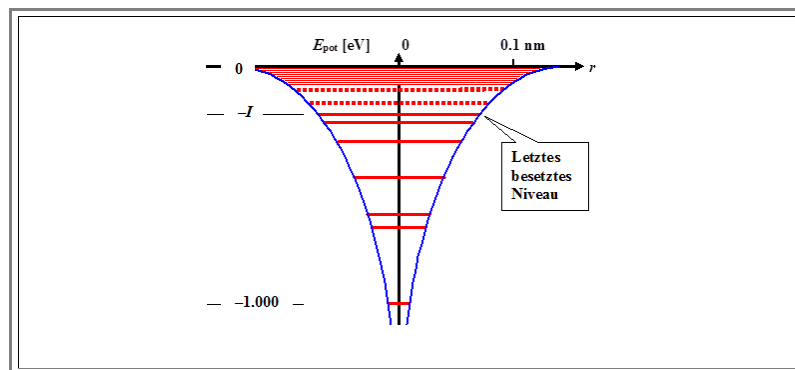
- Das  $z$ -te Elektron ganz außen ist am wenigsten stark gebunden und deshalb am leichtesten abzutrennen. Die dazu notwendige Arbeit ist das Integral vom jeweiligen Abstand  $r$  bis  $\infty$ ; es kann fast jeden beliebigen Wert annehmen; je nach Ausgangspunkt  $r$ .

Merkwürdigerweise ist die **Ionisierungsenergie**, der Zahlenwert des obigen Integrals für jedes Atom der betreffenden Sorte, **immer exakt gleich**. Das bedeutet, dass unser "letztes" Elektron auf einem **eindeutig definierten Energieniveau** (rote Linie) "sitzt" – es kann sich nur in einem **Zustand** befinden, zu dem eine eindeutige Energie gehört (und ein eindeutiges  $r$  im Potentialbild; da seine Energie konstant ist, können wir ein konstantes **Energieniveau** für **alle** Abstände einzeichnen).

- Zustände dieses Elektrons mit irgendwelchen anderen Energien sind "verboten". Hier haben wir schon einen klaren Bruch mit der klassischen Physik.
- Wir haben zum erstenmal den Schlüsselbegriff **Zustand** (des Systems) verwendet; im Zustand ist die gesamte relevante Information enthalten.

Die experimentelle Erfahrung sagt nun: Was für **ein** Elektron gilt, gilt auch für **alle** anderen (denn alle Elektronen sind gleich!): Sie sitzen **alle** auf energetisch eindeutig definierten Niveaus, die zu erlaubten **Zuständen** des Systems "Atom" gehören.

- Das können wir mal schematisch aufzeichnen:



Im Bild sind einige wichtige Punkte angedeutet; andere lassen sich nicht so leicht graphisch darstellen. Hier ist eine Liste:

1. Es gibt  $\infty$  viele, aber immer **diskrete** Energieniveaus, die für zunehmende  $r$  immer dichter aufeinander folgen. Da wir aber nur  $z$  Elektronen haben, können nicht alle vorhandenen Energieniveaus von Elektronen "besetzt" sein. Das ist durch die Strichelung weiter oben angedeutet.
2. Vom letzten (von unten aus gesehen) besetzten Niveau braucht man immer exakt die Ionisierungsenergie  $I$ , um das am schwächsten gebundene Elektron (= auf dem höchsten besetzten Niveau) ins Unendliche zu bringen, d. h. komplett abzutrennen.
3. Man kann – mit entsprechend mehr Energie – natürlich auch stärker gebundene Elektronen ins Unendliche bringen (es gilt der **1. Hauptsatz!**).
4. Man kann aber **nicht** ein Elektron auf ein Energieniveau bringen, das keinem erlaubten Zustand entspricht, es also zwischen den roten Strichen ansiedeln.
5. Während das letzte besetzte Niveau sich im Bereich einiger **eV** bis einiger **zig eV** befindet (wir kennen die **Ionisierungsenergien** aller Atome!), geht die Skala nach unten leicht bis zu einigen **1.000 eV**. Irgendwo ist aber das **tiefstmögliche** Niveau; darunter kommt nichts mehr.
6. Auf einem gegebenen Energieniveau können immer mindestens **2** Elektronen "sitzen", und zwar immer eine exakt definierte und nicht zu große Anzahl.

- 7. Trotzdem hat jedes Elektron einen definierten **Zustand**, der sich vom Zustand jedes anderen Elektrons eindeutig unterscheidet. Damit folgt notwendigerweise:
  - Zustände sind nicht **nur** durch die Energie definiert.
  - Verschiedene Zustände (wie auch immer unterschieden) können dieselbe Energie haben. Man nennt diese Zustände dann bezüglich der Energie **entartet**.
- 8. Jetzt kommt das größte Mysterium der Quantentheorie, das **Pauli-Prinzip**:

**Elektronen in einem System können nie exakt denselben Zustand einnehmen.**

- Während man alle anderen Prinzipien oder Axiome der Quantentheorie in Bezug zu Prinzipien der klassischen Physik setzen und damit "anschaulich" machen kann, geht das nicht für das (hier vereinfacht dargestellte) **Pauli-Prinzip**. Mehr dazu im Rückgrat **2** und in diesem [Link](#)

Unklarheiten dazu werden später beseitigt; jetzt machen wir erst mal den Schritt zum Kristall.

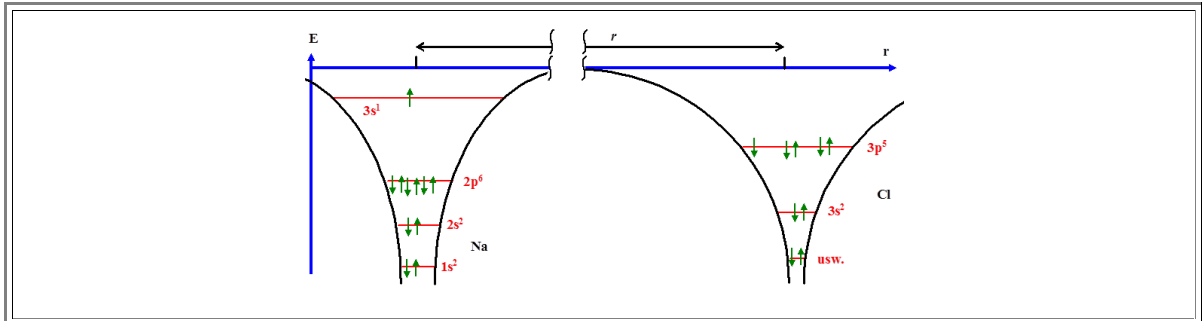
- Dazu brauchen wir Bindungen, und Bindung bedeutet jetzt:

1. Die Elektronen der beteiligten Atome müssen sich "spüren".
2. Die bindenden Elektronen gehören **nach** erfolgter Bindung zum "**System** Molekül oder Kristall" und nicht mehr zum "System Ursprungsatom".
3. Durch Eingehen einer Bindung wird Energie frei (= "gewonnen"), d. h. die Gesamtenergie wird abgesenkt.

### Bindung im Elektronenpotentialbild

Wir schauen uns erst mal die Bildung eines **NaCl**-Moleküls aus der Sicht der Elektronen an und vertiefen gleichzeitig die obigen Punkte noch etwas.

- Halbwegs maßstabsgetreue Potentialtöpfe der Elektronen in weit voneinander entfernten, isolierten **Na**- und **Cl**-Atomen sehen etwa so aus:

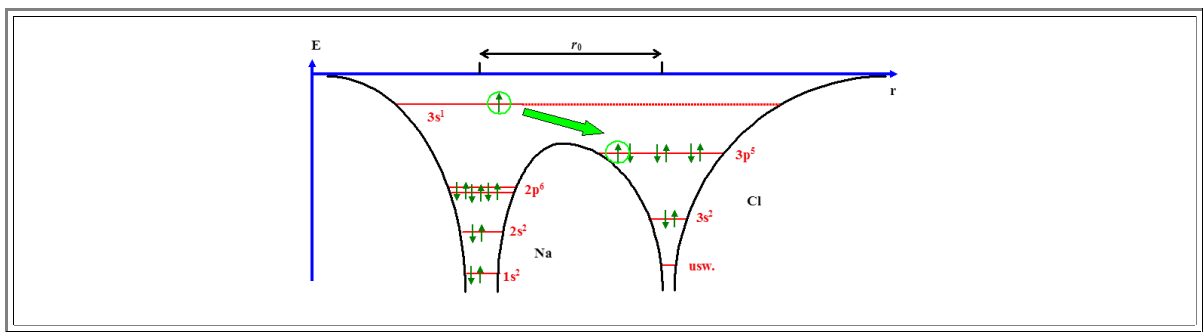


- Alles wie gehabt; allerdings haben wir noch ein paar neue graphische "Zeichen" eingeführt:

1. Die Zustände mit gleicher Energie sind nach irgendeiner Systematik der Form "**nx<sup>k</sup>**" (mit vermutlich **n = 1, 2, 3, ...**; **x = s, p, d, ...(?)...**, **k = 1, 2, 3, ...**) nummeriert und können dadurch unterschieden werden.
2. Mit grünen Pfeilchen ist angedeutet, wieviele Elektronen ein Energieniveau besetzen.
3. Zwei Sorten Pfeilchen ("rauf" und "runter") sind eingeführt worden, um damit Elektronen mit verschiedenem "**Spin**" (was immer das ist) zu unterscheiden.
4. Die Zahl der tatsächlich vorhandenen Elektronen ist in der **nx<sup>k</sup>**-Systematik durch der Zahl "**k**" ausgedrückt.
5. Indirekt ist angedeutet, dass Zustände mit **x = s** oder **x = p** Platz für maximal **2** bzw. **6** Elektronen haben.

Wie zuvor bei den Atom"feder"potentialen, verringern wir jetzt den Abstand zwischen den Atomen. Wiederum dürfen wir die individuellen Potentiale addieren (wobei wir die negative Skala beachten:  $-3 \text{ eV} + (-5 \text{ eV}) = -8 \text{ eV}$ !  $-8$  ist eine **kleinere** Zahl als  $-3$ !).

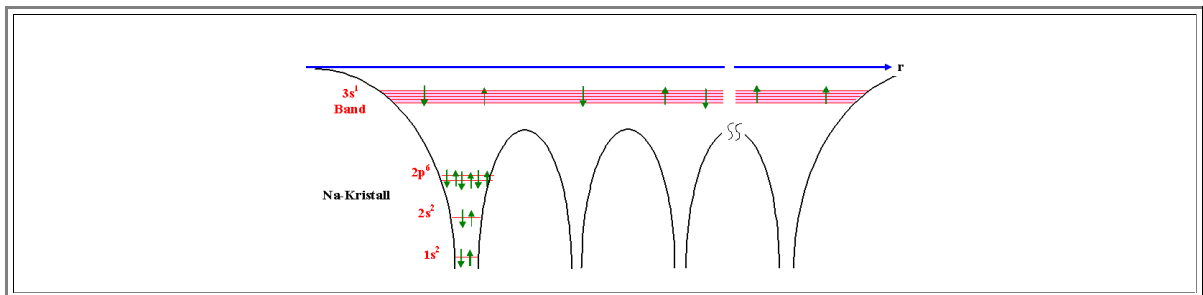
- Beim Bindungsabstand  $r_0$  (der sich hier aber nicht "von selbst" über ein Potentialminimum ergibt), sieht das so aus:



- Das mit einem Elektron besetzte  $3s^1$ -Energieniveau des **Na**-Atoms (das im Zahlenwert jetzt möglicherweise leicht modifiziert ist) liegt **über** dem maximalen Potentialwert zwischen den Atomen. Das dort sitzende Elektron kann sich also hinüber zum **Cl**-Atom begeben (damit haben wir zwei Ionen produziert) **und** sich noch zusätzlich energetisch **nach unten** auf den einen freien Platz des **3p**-Niveaus des Chlors setzen.
- Die Gesamtenergie ist durch die Bindung geringer geworden; sie kann aber nur bei einem bestimmten Abstand – dem Bindungsabstand  $r_0$  – ein Minimum haben, da sie bei zu kleinen oder zu großen Abständen wieder ansteigt (das hatten wir schon).
- Das System "**NaCl**-Molekül" hat gegenüber dem System "**Na**-Atom plus **Cl**-Atom" **Energie freigesetzt** – die Bindungsenergie.
- Deswegen kommt diese Bindung auch tatsächlich zustande. **Energieminimierung** ist eine **treibende Kraft** für Veränderungen!
- Alle Elektronen sind nach wie vor fest einem Atom zugeordnet und damit ortsfest – wir haben einen **Isolator** vor uns.

Das war die klassische **Ionenbindung** aus der Sicht der Elektronen. Wie sieht das Ganze bei der **Metallbindung** aus? Machen wir gedanklich mal ein **Na-Metall**.

- Einfach. Gleiches Rezept: Potentiale überlagern. Allerdings jetzt in drei Raumrichtungen und wiederholt ins (fast) Unendliche. Geht graphisch nicht, also vereinfachen wir in eine Dimension (aus technischen Gründen ist die Energieachse weggefallen, es gilt die gleiche wie zuvor):

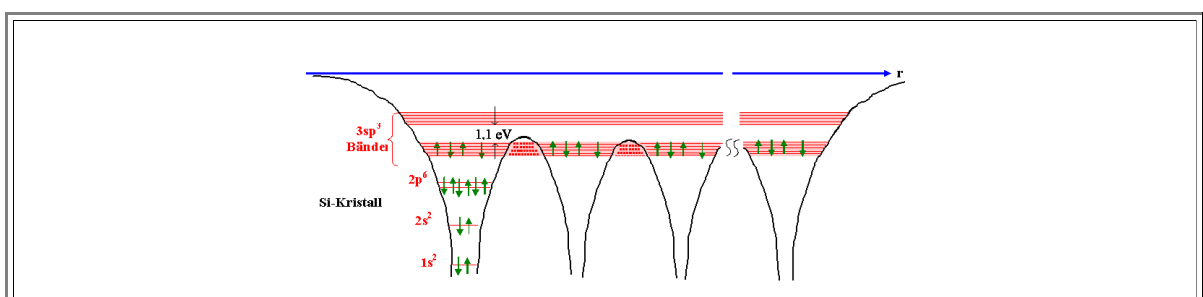


- Alles klar? Das **3s**-Niveau läge wieder oberhalb der Potentialmaxima und gehört dadurch jetzt **allen** **Na**-Atomen im Kristall. Von jedem einzelnen **Na**-Atom kommt ein Elektron, das auf diesem Niveau sitzen müsste, da es "weiter unten" keine freien Plätze gibt.
- Das ist aber durch das Pauli-Prinzip ausgeschlossen! Maximal **2** Elektronen können ein solches Niveau besetzen!

Der **einzig**e Ausweg ist die Aufspaltung des im einzelnen Atom ganz scharfen Energieniveaus auf ein "**Energieband**" von vielen (ca. soviel wie Atome im Kristall) dicht benachbarten Energieniveaus, die formal zu **verschiedenen** Zuständen des Kristalls gehören! So ist es in der Schemazeichnung dargestellt.

- Bei dieser Aufspaltung kann es zur **Absenkung** der Energie kommen – wir haben dann einen Grund zur Bindung!
- Neu ist: Die Elektronen in diesem **Band** können im ganzen Kristall "herumlaufen" und deshalb auch den elektrischen Strom leiten. Wir haben einen **Leiter** erhalten.

Es fehlt noch die **kovalente Bindung**. Die ist aber wie gehabt. Hier das Beispiel für Silizium (**Si**; es gilt wieder die gleiche Energieachse wie zuvor):



- Der einzige Unterschied zum obigen Bild (für **Na**) besteht darin, daß die notwendige Aufspaltung der über den Potentialminima sitzenden Niveaus (es können ja auch mal mehr als nur eines sein) *zwei* Energiebänder produziert hat, und zwar mit einer **Energielücke** der Weite **1,1 eV** (eine Zahl, die wir uns merken müssen!).
- Falls die Elektronen im unteren Band sitzen, werden sie nicht so recht beweglich sein. Im oberen Band schon, aber da werden nur die sich aufhalten, die unten keinen Platz mehr haben. Weder Isolator noch Leiter – diesmal haben wir es mit einem **Halbleiter** zu tun.
- Mit dem Konzept der *Energielücke* haben wir schon fast die Halbleiter definiert und verstanden! Allerdings müssen wir (später) schon noch etwas genauer hinschauen.

So weit, so gut. Die Frage, die sich jetzt aufdrängt ist: Wie *rechnet* man das alles?

- Die Antwort ist: *Man* (und *frau*) rechnet mit der **Schrödingergleichung** als neuer Grundgleichung der Physik. *Wir* hingegen tun das aber eher nicht, zumindest nicht in voller Schönheit, denn dazu fehlt uns nicht nur die Zeit, sondern auch die notwendige Mathematik.
- Aber die ist gar nicht so schlimm, daher wagen wir mal einen Blick, frei nach dem Motto "ein bißchen was geht immer" – aber erst im nächsten Modul.