

Der Potentialtopf

Herleitung der Energien im Potentialtopf

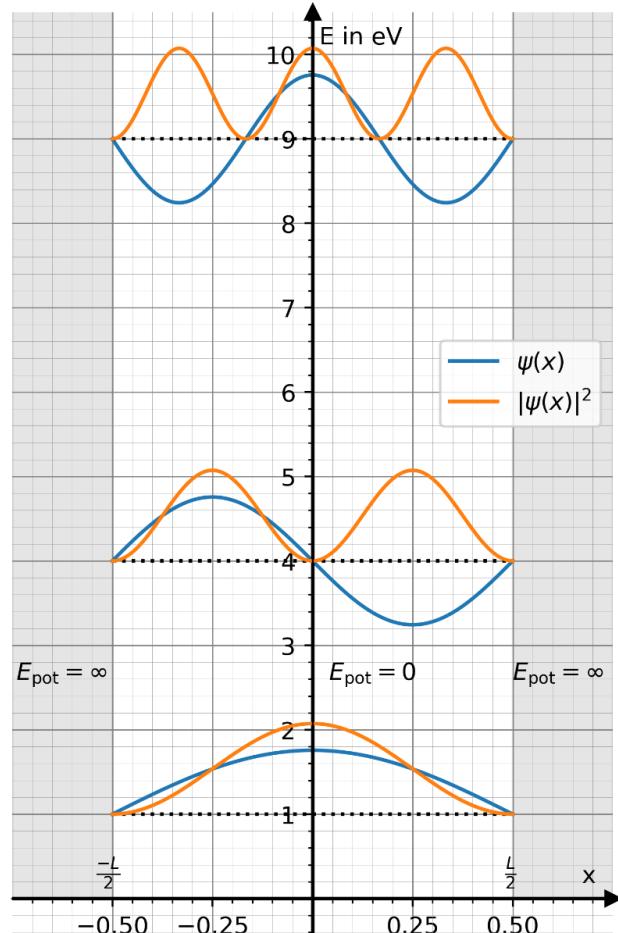
Objekte in der Quantenmechanik, also sogenannte Quantenobjekte (QO) weisen neben klassischen Eigenschaften von Teilchen auch Welleneigenschaften auf, beispielsweise die Fähigkeit zur Interferenz. Außerdem kann man ihnen nach DE BROGLIE eine Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

zuweisen, die über die PLANCK-Konstante h mit ihrem Impuls p verbunden ist.

Wir können einem QO aus der Wellenperspektive wegen der Unschärferelation keinen diskreten Ort, also einen Punkt im Raum, mehr zuweisen. Stattdessen beschreiben wir QO und ihr Verhalten über ihre jeweilige Wellenfunktion $\Psi(x)$, da deren Betragsquadrat, also $|\Psi(x)|^2$, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Objekts an einem bestimmten Punkt im Raum angibt.

Ein Beispiel für ein Quantenobjekt ist ein Teilchen im unendlich tiefen Potentialtopf. Dieses ist mit seiner Wellenfunktion in der Abbildung rechts dargestellt.



Das QO ist hier zwischen zwei Potentialwänden eingesperrt, in die es nicht eindringen kann. Stattdessen bildet die Wellenfunktion des QO im Potentialtopf eine stehende Welle aus, wie das auch bei anderen, z.B. mechanischen Wellen auf einer Gitarrensaite auftritt.

Für die Wellenlänge λ gilt dabei wie in mechanischen Fall auch

$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

Im Potentialtopf können sich nur ein oder mehrere „ganze“ Bäuche des Cosinus befinden ($n = 1, 2, 3, \dots$). Deshalb sind nicht alle Wellenlängen möglich, sondern nur ganz bestimmte, diskret verteilte Wellenlängen, die zur Breite L des Potentialtopfes passen. Die Energie des Quantenobjekts lässt sich ausschließlich durch seine kinetische Energie

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

berechnen, weil die potentielle Energie im Topf Null ist. Setzt man alle bisherigen Gleichungen ineinander ein, kann man über

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

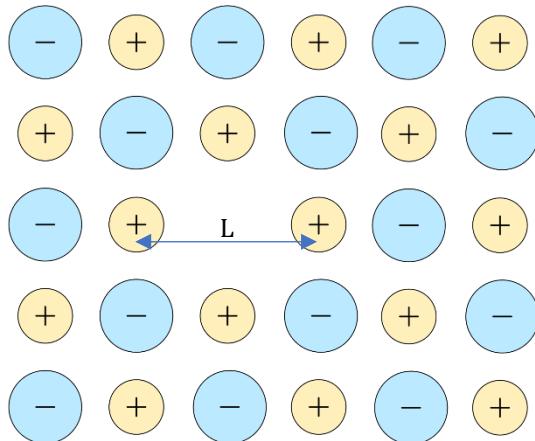
die möglichen Energien E_n des QO im unendlich tiefen Potentialtopf berechnen.

Potentialtopf im Experiment

Das Modell des Teilchens im Potentialtopf lässt sich verwenden, um Farberscheinungen in unperfekten Salzkristallen zu beschreiben. In der Abbildung sind mit Plus (+) und Minus (-) die Kationen und Anionen gekennzeichnet. Den freien Anionenplatz nennt man Punktdefekt, Fehlstelle oder F-Zentrum (F für Farbe). Statt des negativ geladenen Anions ist dort ein Elektron gebunden, das wir als QO im Potentialtopf beschreiben.

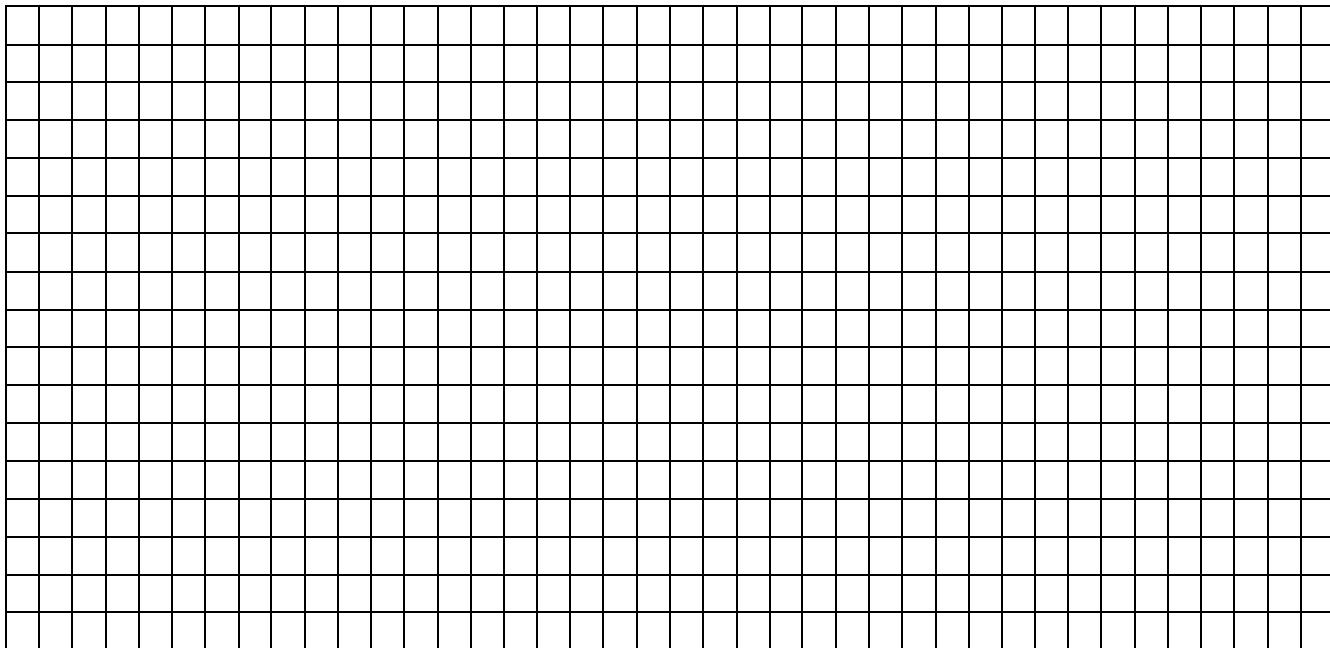
Dessen Energien können mit der Formel von oben berechnen. Dabei entspricht m der Elektronenmasse m_e . Die Ergebnisse für $\Delta E = E_2 - E_1$ liegen erfahrungsgemäß im Energiebereich von sichtbarem Licht (400-700 nm Farbkreisabbildung). Licht, das dieser Wellenlänge entspricht, kann vom F-Zentrum absorbiert werden und eine Farberscheinung hervorrufen.

Salz	Gitterparameter L in nm
KF	0,534
KCl	0,630
KBr	0,660
KI	0,706
NaCl	0,562
LiCl	0,512
NaF	0,462
LiF	0,400
RbCl	0,658

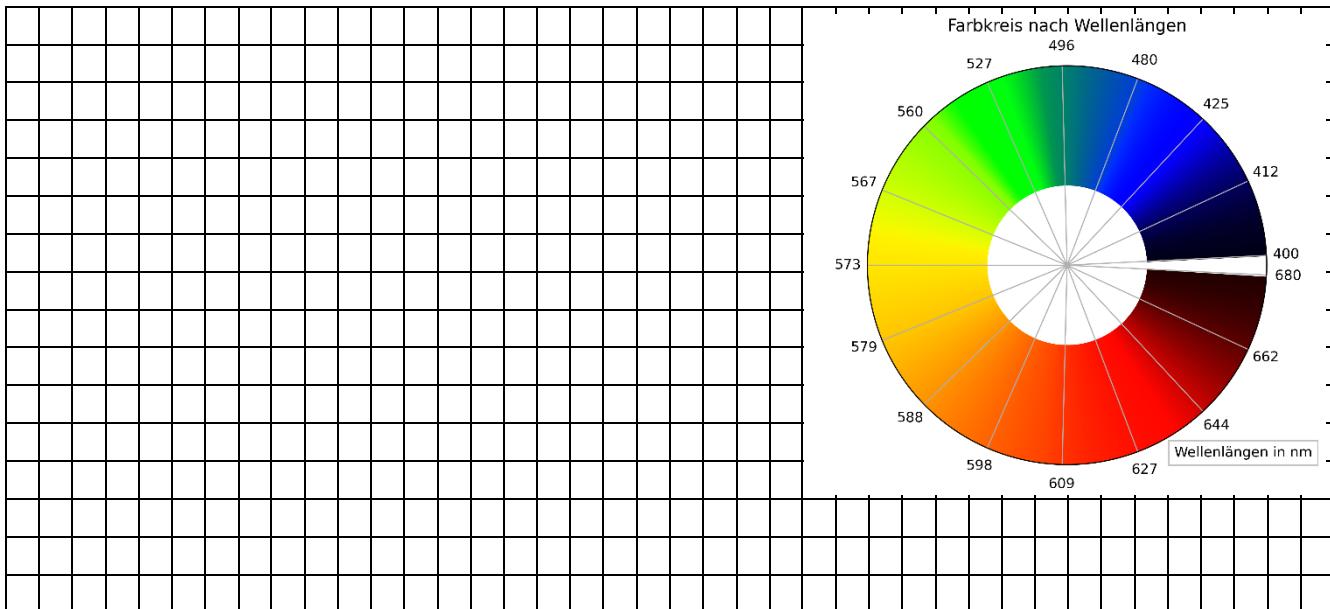


1a) Gib die Formel an, die für allgemeine elektromagnetischer Strahlung die Energien in Wellenlängen umrechnet.

1b) Leite eine Formel für $\Delta E = E_{n=2} - E_{n=1}$ her. Die Schreibweise deutet dabei an, dass $n = 1$ bzw. $n = 2$ eingesetzt werden soll. Vereinfache danach so weit wie möglich.



1c) Wenn F-Zentren in KCl einen violetten Farbton ergeben, welchen Farbton könnten die Farbzentrren in KBr hervorrufen? Stelle eine Vermutung an und begründe diese.



Wie du deiner Formel aus 1b) vermutlich entnehmen kannst, gilt $\Delta E \propto \frac{1}{L^2}$.

So lässt sich erklären, dass verschiedene Salze mit verschiedenen L verschiedene Farben annehmen. Mit den Formeln aus 1a) und 1b) beläuft sich der Wellenlängenunterschied $\Delta\lambda$ von KCl zu KBr durch weitergehende Umrechnung auf

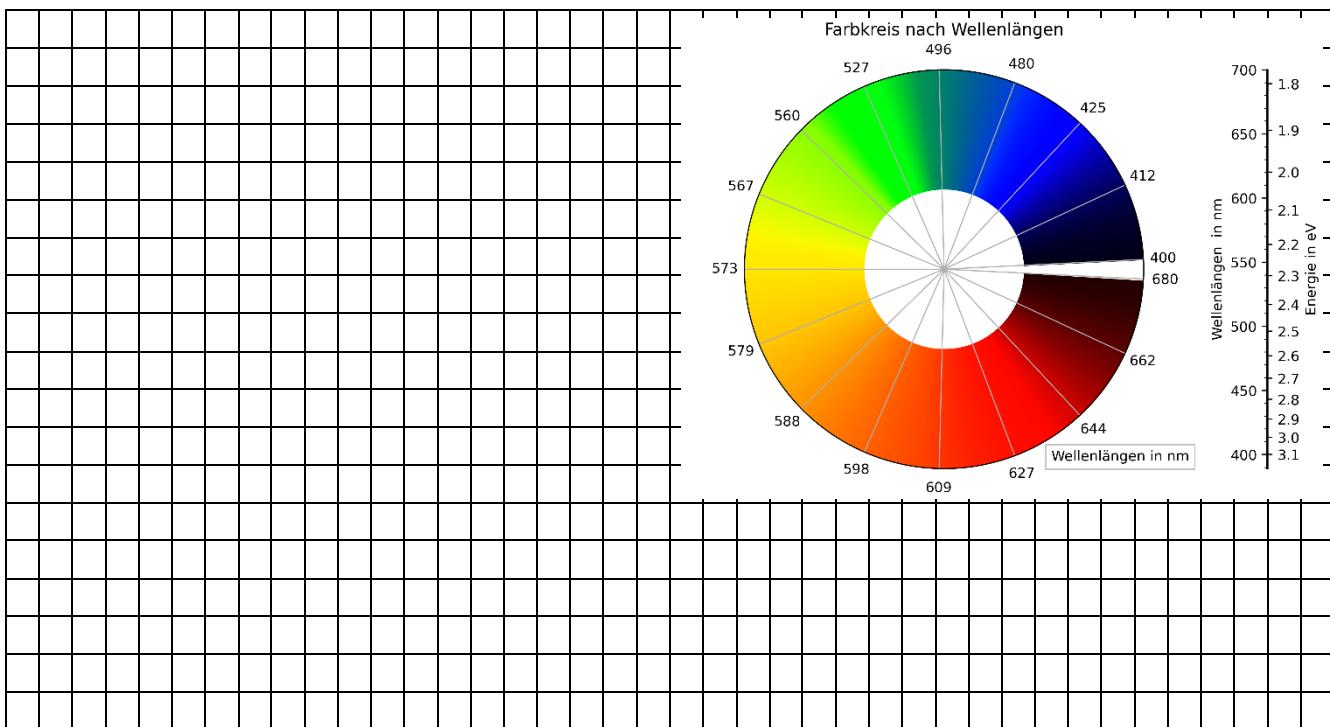
$$\Delta\lambda_{\text{KBr-KCl}} = \lambda_{\text{KBr}} - \lambda_{\text{KCl}} = hc \left(\frac{1}{\Delta E_{\text{KBr}}} - \frac{1}{\Delta E_{\text{KCl}}} \right) = \frac{8m_e c}{3h} (L_{\text{KBr}}^2 - L_{\text{KCl}}^2).$$

1d) Berechne den Wellenlängenunterschied $\Delta\lambda_{\text{KBr-KCl}}$ der Farberscheinung von KBr und KCl mithilfe der Tabelle für die Gitterparameter auf der zweiten Seite. Bei Verwendung der angegebenen Formel für $\Delta\lambda_{\text{KBr-KCl}}$ bedeuten positive Zahlen, dass KBr eine langwelligere Farberscheinung aufweist.

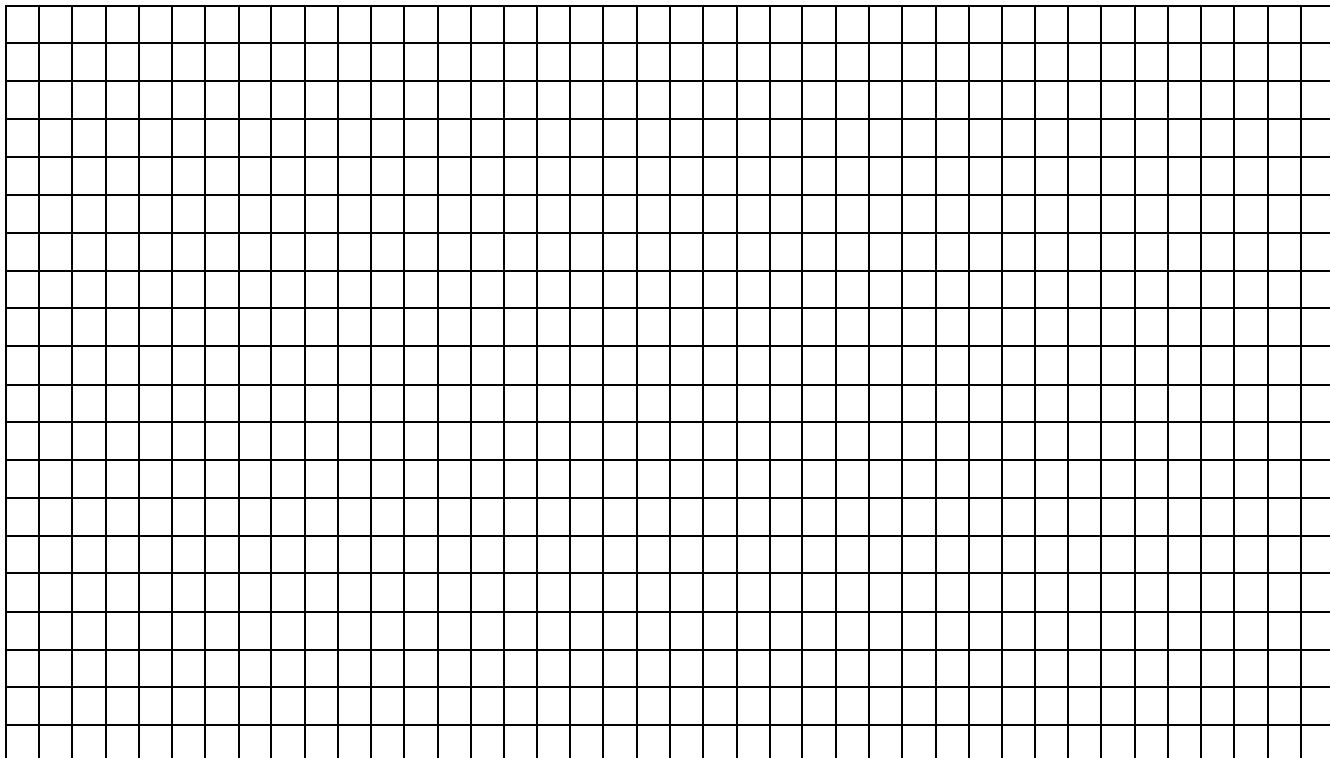
Konstanten: $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ und $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$

1e) Korrigiere oder verfeinere wenn nötig deine Hypothese aus der Aufgabe 1c). Erweitere außerdem deine Begründung der Hypothese um die Argumentation mithilfe der Formeln.

1f) Gib deinen experimentellen Wert für die Wellenlängenverschiebung an, indem du den Farbeindruck mithilfe des Farbkreises in Wellenlängen übersetzt. Vergleiche deine berechnete Wellenlängenverschiebung mit experimentellen Beobachtungen.



Platz zum Rechnen



Beispielrechnung zur Farberscheinung

Wellenlängenverschiebungen zwischen den Salzen KBr und KCl lassen sich zufriedenstellend vorhersagen. Im nächsten Schritt wird grundlegender versucht, die einzelne Farberscheinung von KCl aus dem Modell abzuleiten.

Tipp: Hilfreich bei der Rechnung ist $\frac{h^2}{8me} = 0.376 \text{ eVnm}^2$.

Wir berechnen nun für F-Zentren in KCl die Energien der ersten zwei Zustände $n = 1$ und $n = 2$:

$$\Delta E = \frac{3h^2}{8m_e L^2} = 3 \cdot 0.376 \text{ eV nm}^2 \frac{1}{0.630 \text{ nm}^2} = 2.84 \text{ eV}$$

Wenn das Elektron als QO vom ersten Zustand in den zweiten angeregt wird, dann nimmt es dabei also rechnerisch $\Delta E = 2.84 \text{ eV}$ an Energie auf. Diese Energie wird von einem Photon, also Licht, in das F-Zentrum eingebracht.

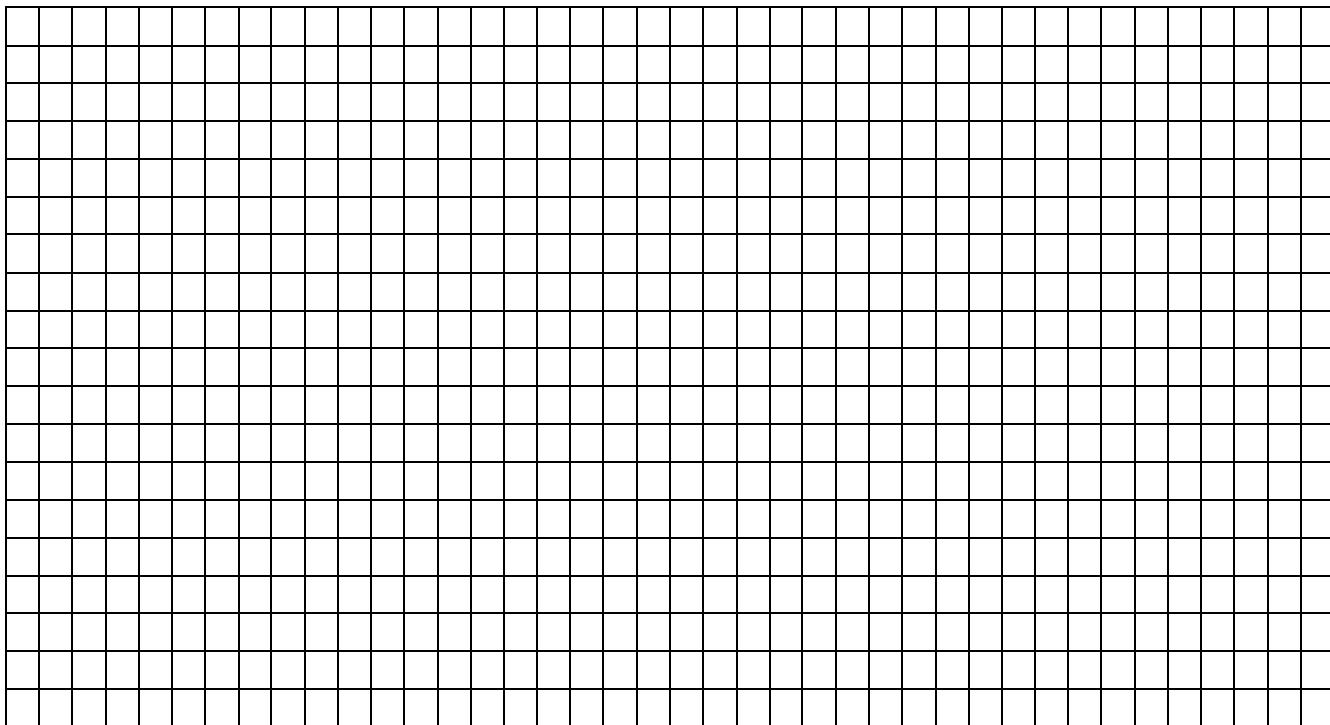
Das Salz ist (wie auch alle anderen Alkalihalogenide z. B. Kochsalz auch) bis auf vielfältige kleine Verunreinigungen weiß. Das bedeutet, es reflektiert alle Farben, also zunächst auch die Farbe, die zur Energie $\Delta E = 2.84 \text{ eV}$ gehört (blau wie aus dem Farbkreis abgelesen werden kann).

Sobald jedoch F-Zentren vorhanden sind, wird blaues Licht absorbiert. Vom weißen Licht bleibt noch die "Gegenteilfarbe", sprich die Komplementärfarbe übrig. Die theoretische Vorhersage mit dem Modell des Potentialtopfes ist also, dass F-Zentren in KCl das Salz orange einfärben. Tatsächlich erscheint es aber violett. Das Modell passt also zunächst kaum zum Experiment.

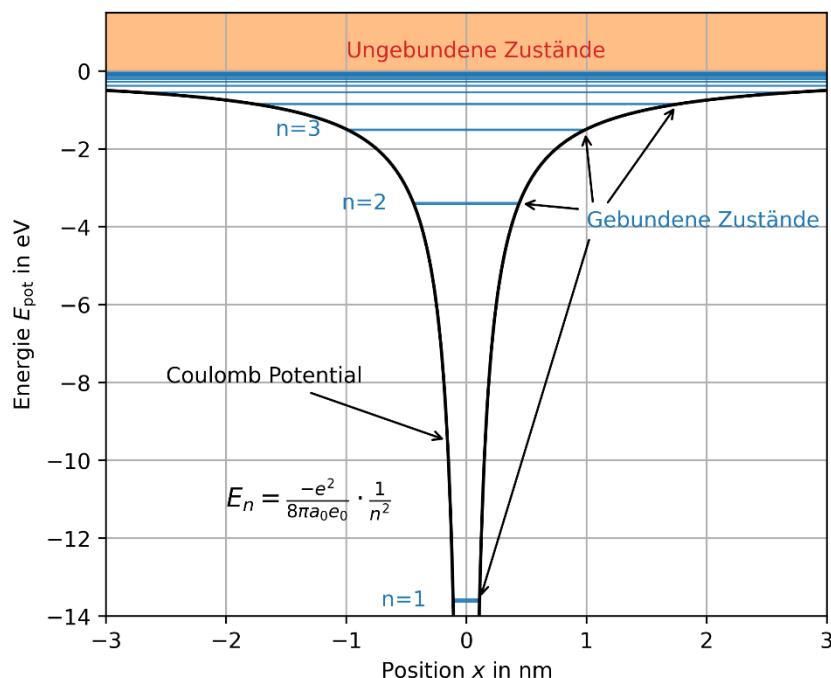
2a) Berechne den erwarteten Farbeindruck für KBr, wie es im Beispiel für KCl gemacht wurde. Vergleiche erneut die errechnete Farbe mit der beobachteten Farberscheinung.

2b) Für (mindestens) KCl passt die Berechnung mit der experimentellen Beobachtung kaum zusammen. Welche Näherungen haben wir getroffen, als wir das F-Zentrum als unendlich tiefen Potentialtopf modelliert haben?

Nenne drei oder mehr Punkte und gib jeweils Vermutungen ab, in welche Richtungen sich die Energiewerte dadurch verschieben.



Zusammengefasst kann das Modell des unendlich tiefen Potentialtopfes nicht jeden Aspekt des Experiments rund um die Farberscheinung von F-Zentren beschreiben. Das Modell hat Grenzen.



In der Abbildung sind analog zum unendlich tiefen Potentialtopf die rechnerisch möglichen Energien im Coulombpotential eingezeichnet. Außerdem ist die zu Grunde liegende Formel für E_n angegeben.

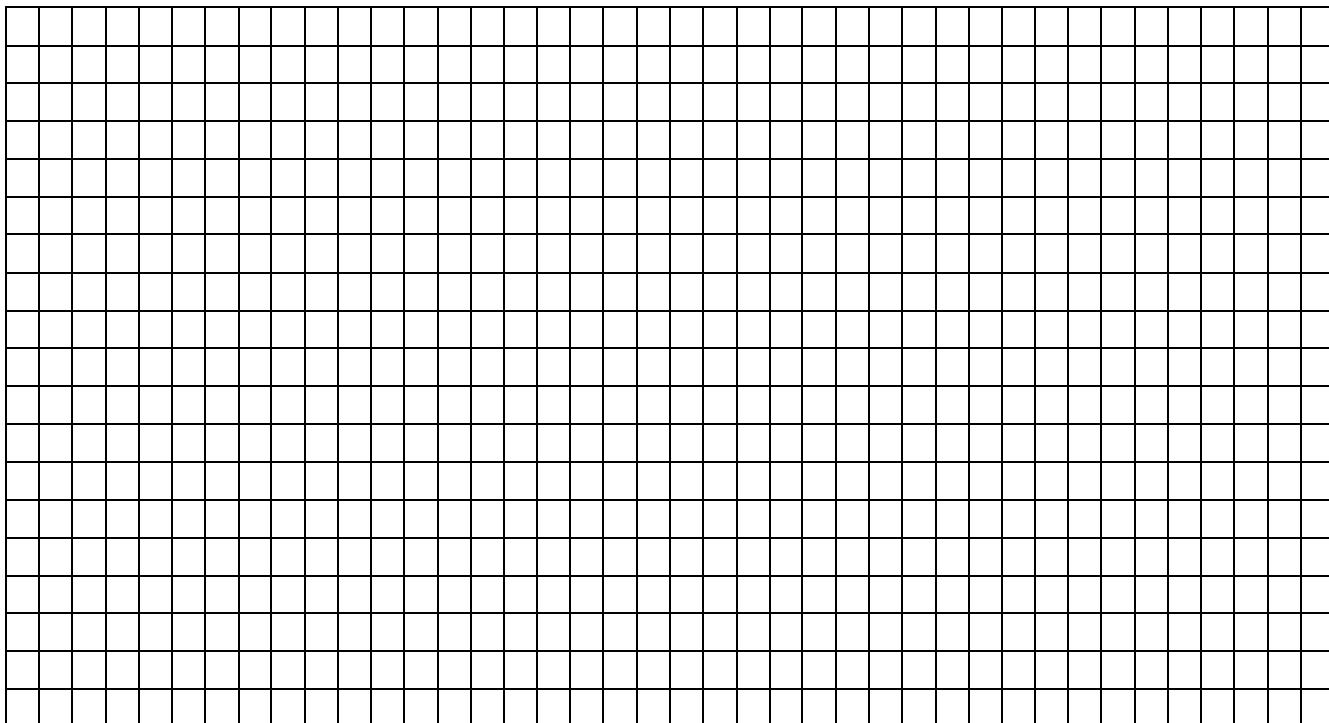
2c) Welche Gemeinsamkeiten und Unterschiede ergeben sich für das Modell um das Coulombpotential und das um den unendlich tiefen Potentialtopf?
Nenne jeweils mindestens zwei Punkte.

2d) Erinnere dich daran, welche Vorhersage das Modell des unendlichen Potentialtopfes für die Energiedifferenz ΔE von zwei Zuständen macht, wenn der Potentialtopf breiter wird. Nenne Sie und versuche, mit dieser Information zu erklären, wieso die Energiezustände höherer Energie im Coulombpotential nahe beieinander liegen.

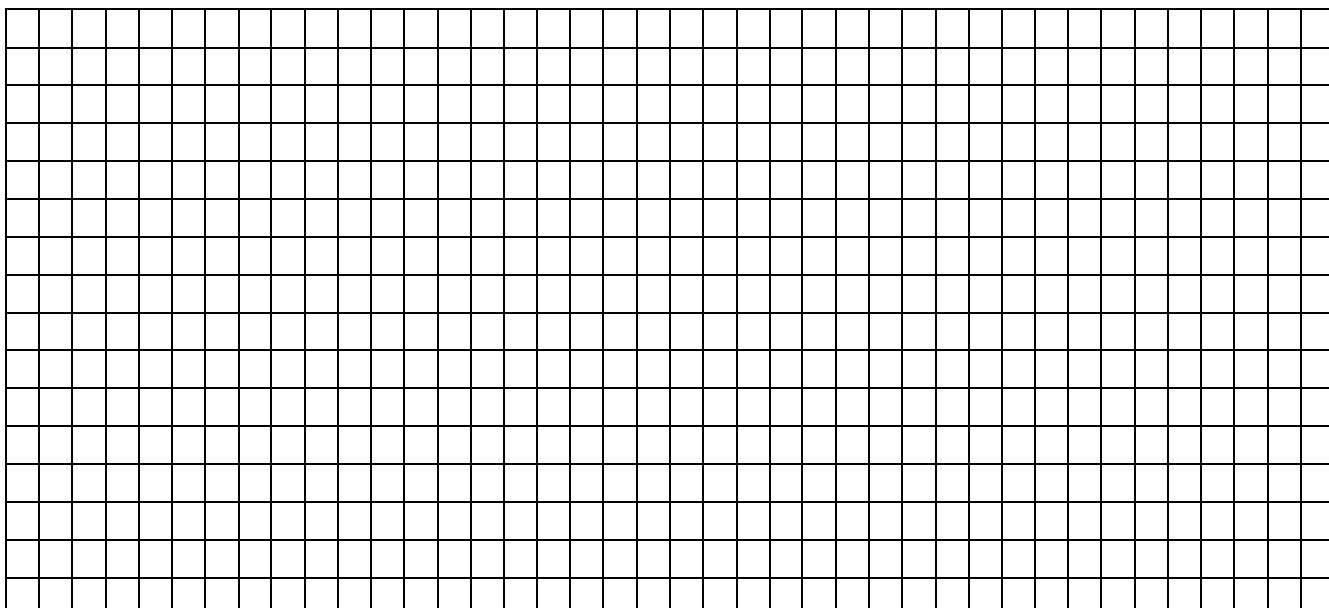
2e) Gib mittels einer klassischen Analogie eine Erklärung dafür, dass im Coulombpotential Zustände mit positiven Energien ungebunden genannt werden.

Wie müsste man den unendlich tiefen Potentialtopf abändern, damit er diese Zustände auch zulässt?

Fertige eine qualitative Zeichnung an.



2f) Gib eine Vermutung ab, ob der gezeichnete (und _____) Potentialtopf aus Aufgabe 2e besser geeignet wäre die Farbzentren zu beschreiben. Nenne einige Argumente in welchen Aspekten das der Fall ist und an welchen Phänomenen im Experiment das sichtbar ist.



Aufgaben zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit

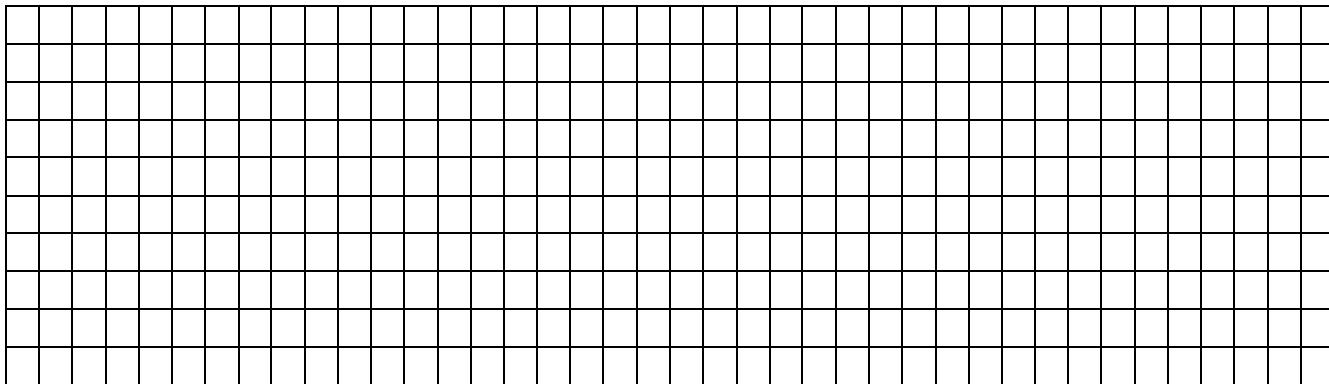
Teil 1

- a) Bestimme durch Argumentation die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Zustand $n = 3$ im linken Drittel des unendlich tiefen Potentialtopfes.

- b) Berechne die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Zustand $n = 2$ im linken Drittel des Potentialtopfes. Normiere dafür die Wellenfunktion und nutze, dass $\sin^2(x) = \frac{1-\cos(2x)}{2}$ gilt.

- c) Bestimme durch Argumentation die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Zustand $n = 2$ im rechten Drittel des unendlich tiefen Potentialtopfes.

- d) Bestimme durch Argumentation die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Zustand $n = 2$ im mittleren Drittel des unendlich tiefen Potentialtopfes.



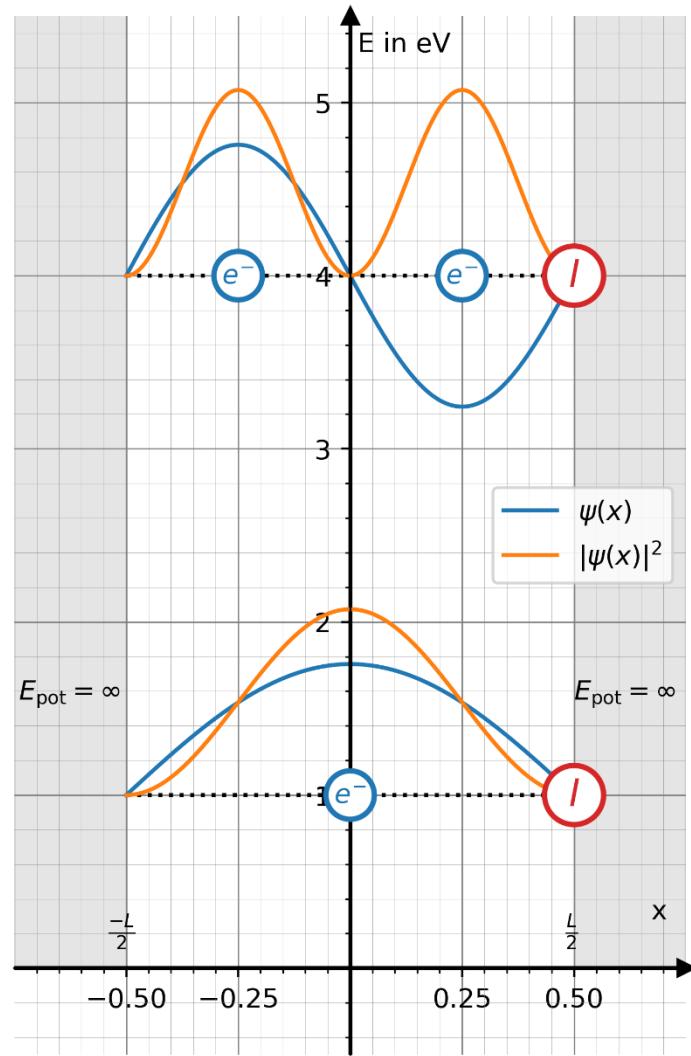
Teil 2

e) Im Potentialtopf können Elektronenzustände durch Anregung angehoben werden, allerdings können angeregte Elektronen auch wieder auf den Grundzustand zurückfallen. Dabei nimmt das F-Zentrum kein Licht mit der Übergangsenergie auf, sondern strahlt dieses wieder ab (emittiert).

Das Salz mit den F-Zentren ist nach der Anregung allerdings nicht mehr weiß, sondern hat die Komplementärfarbe des Lichts der Anregungsenergie. Das bedeutet, dass sich die Absorptions- und Emissionseffekte nicht gegenseitig aufheben können, da sonst die Farberscheinung verschwinden würde.

Warum das so ist, ergründen wir in dieser Aufgabe.

Die nebenstehende Abbildung zeigt zwei Zustände im Salzkristall. Die beteiligten Elektronen befinden sich dabei in den Zuständen $n = 1$ bzw. $n = 2$. Die beiden Zustände haben zwar verschiedene Ladungsverteilungen, vereinfachend gehen wir aber davon aus, dass sich der jeweilige Teil der Ladung nur in der Mitte des entsprechenden Wellenbauchs befindet.

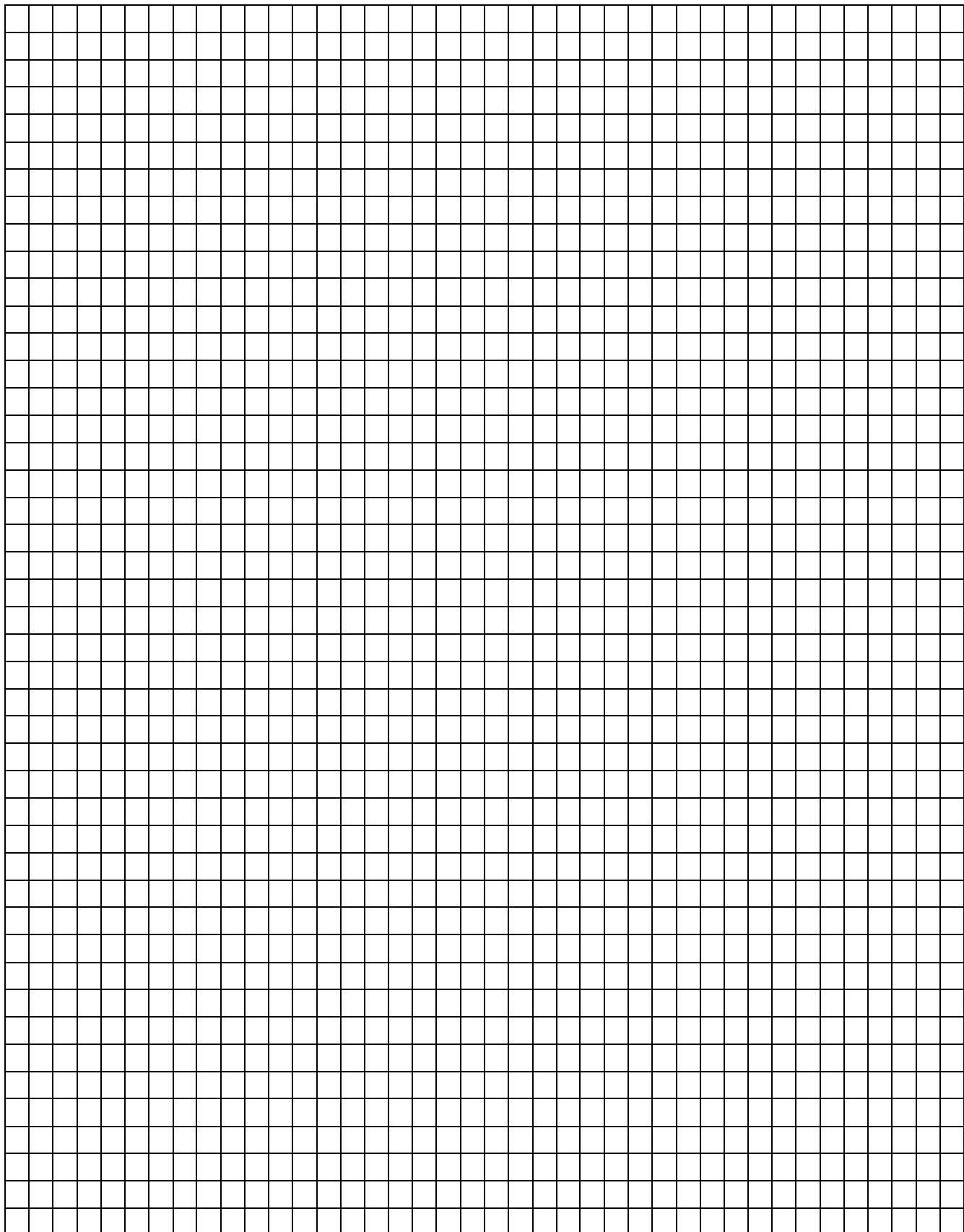


In welcher Situation aus der Abbildung wird das Ion (+) stärker angezogen? Begründe deine Entscheidung. Nutze zur Beantwortung die Information, dass die Kräfte zwischen Ladungen dem Coulombgesetz folgen. Es gibt die Proportionalität $F \propto 1/r^2$ der Kraft mit dem Abstand der Ladungen r an.

Das leichte Elektronen geht aus Sicht der schweren Ionen praktische instantan in den angeregten Zustand über. Bei der Anregung des Elektrons verändern sich die Kräfte auf die Ionen (Anionen wie auch Kationen).

f) Stelle Vermutungen an, was es für die Übergangsenergie der Emission im Vergleich der Anregung bedeutet. Hilfreich ist es über die Bewegung der Ionen nachzudenken und den Temperaturbegriff des Salzes wie auch die Energieerhaltung mit in die Argumentation einfließen zu lassen.

Platz zum Rechnen



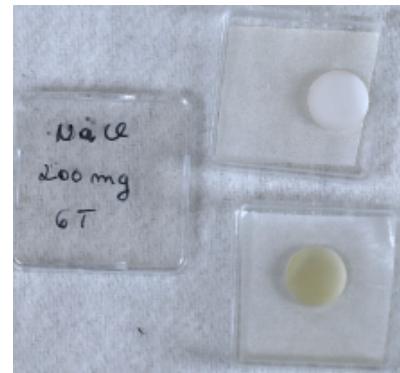
Zusatzaufgaben und Transferaufgaben

3a) (Zusatz) In der Liste gibt es Salze mit ähnlichem Gitterparameter L . Welche Vorhersage macht das Potentialtopfmodell für die Farberscheinung dieser Salze im Vergleich zu den bisher behandelten Salzen?

3b) (Schwer) Von KCl zu KBr verändert sich das Anion, Von KCl zu NaCl das Kation.

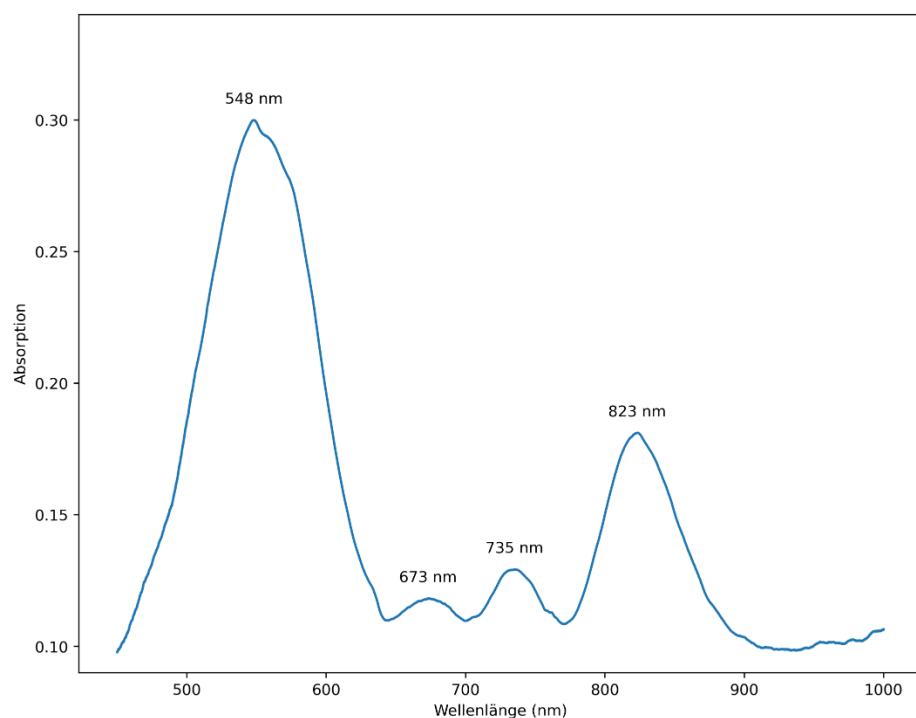
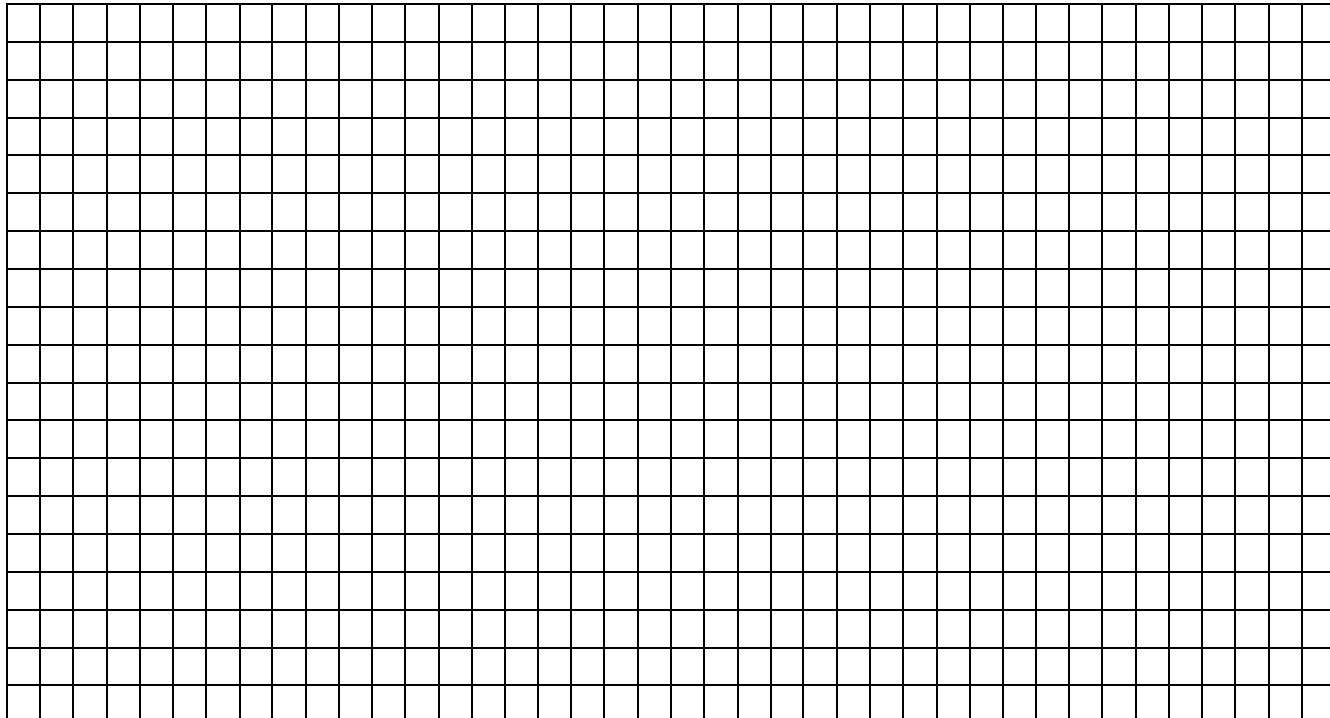
Was verändert sich dabei am F-Zentrum? Gib die Länge an, die deiner Meinung nach für den Potentialtopf bei NaCl vorliegt. Wiederhole die theoretische Vorhersage für $\Delta\lambda_{\text{NaCl-KCl}}$. Wieso sollte man hier die Nanometer im Zweifel am Farbkreis entlang und nicht am Zahlenstrahl der Wellenlängen abtragen? Vergleiche außerdem deine Vorhersage mit dem Experiment (siehe dazu nebenstehendes Bild).

Tipp: Negative Vorzeichen bedeuten, dass die entsprechende Nanometerzahl im Uhrzeigersinn auf dem Farbkreis entlang gegangen werden muss.



3c) (Schwer) Neben Punktdefekten gibt es bei Salzen (z.B. bei KCl) einen ganzen Zoo anderer Kristallstrukturfehler, die Farberscheinungen hervorrufen. Einer dieser Strukturfehler röhrt daher, dass zwei benachbarte Anionen fehlen.

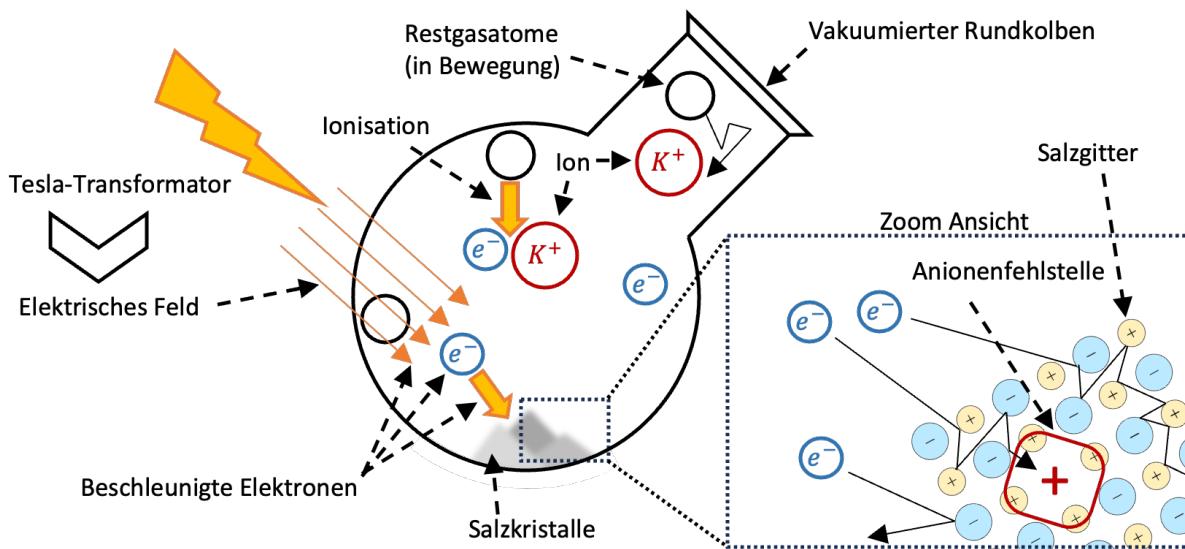
Markiere diese Art der Fehlstelle in einer eigenen Abbildung eines Salzkristalls und beschrifte sie als "M-Zentrum". Versuche dem M-Zentrum in KCl eine Länge L zuzuweisen und führe eine Vorhersage der absorbierten Wellenlänge durch. Versuche F-Zentrum und M-Zentrum den jeweiligen Absorptionspeak im Absorptionsspektrum unten zuzuweisen.



Erzeugung von farbigem Salz

Im Experiment wird weißes Salz unter Vakuum farbig. Durch das Vakuum besteht keine Möglichkeit für weitere Stoffe, den Salzkristall zu erreichen und an diesem etwas chemisch zu verändern. Der Salzkristall muss also nur durch sich selbst, durch interne Veränderungen farbig werden.

Diese können neben anderen Möglichkeiten darin bestehen, dass ein Anion in der Gitterstruktur fehlt. In der Abbildung (*im Zoomausschnitt*) ist diese zunächst leere Fehlstelle abgebildet. Im Bereich der Fehlstelle fehlt mit dem Anion auch eine negative Ladung, sodass die Fehlstelle positiv geladen ist und ein Elektron anziehen kann.



Das Vakuum in der Zelle ist nicht vollständig perfekt, sondern es sind noch einige Restgasatome vorhanden. Von diesen werden im Experiment Elektronen gelöst. Das geschieht durch das große elektrische Feld des Tesla-Transformators. So liegen im Vakuum neben den Restgasatomen auch freie Elektronen und Gasionen vor.

Elektronen können nicht nur aus ihren gebundenen Zuständen gelöst (ionisiert) werden, sondern auch wieder mit Ionen rekombinieren. Dabei wird ebenfalls Energie frei, was zu der beobachtbaren Leuchterscheinung (Gasentladung) führt.

Einige Elektronen rekombinieren allerdings nicht, sondern werden durch das Feld des Tesla-Transformators stark beschleunigt. Im Vakuum können sie einigermaßen ungestört fliegen, um dann auf das Salz zu treffen. Dort dringen die Elektronen mit hoher Geschwindigkeit ein und werden im Salz von positiv geladenen Fehlstellen angezogen und gebunden.

4a) In Abgrenzung zu den Farberscheinungen der F-Zentren in den Salzen, gibt es je nach Salz im Experiment auch charakteristische Farberscheinungen der Ionisation und Rekombination im Vakuumgefäß. Welche Elemente liegen im jeweiligen Restgas innerhalb des Vakuumsgefäßes vor? Welche Elemente liegen mehr vor, wenn das Gefäß einige Zeit lang mit dem Tesla-Transformer aufgeheizt wird? Gib begründete Vermutungen ab.

4b) In der Abbildung ist die Innenstadt von Tübingen aus dem Jahr 2018 gezeigt. Zu sehen ist, dass von innen nach außen die alten Straßenbeleuchtungen mit Natriumdampflampen gegen energieeffizientere mit LEDs ersetzt werden. Natriumdampflampen erzeugen Licht ebenfalls mit einer Gasentladung. Welche Farbbeiträge liegen beim Experiment mit NaCl im Vakuumgefäß mindestens vor? Gib eine begründete Vermutung ab.



<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Led-vs-na.jpg>

Bei der Rekombination bindet sich das freie Elektron an das Ion und fällt dann über verschiedene energetisch immer niedrigere Zustände ab. Dabei werden jeweils die Differenzenergien der diskreten Zustände als Licht abgestrahlt. Die Kombination an Differenzenergien und den zugeordneten Wellenlängen lassen sich in den sogenannten Atomspektren übersichtlich darstellen.

Gemessene wie berechnete Atomspektren lassen sich beispielsweise im Internet finden (z.B. <https://atomic-spectra.net/spectrum.php>). Diese müssten für die Gasmischung im Vakuumgefäß kombiniert werden, um sie dann mit Spektrallinien in einem zur Verfügung stehenden Spektrometer nachzumessen und zu vergleichen (z.B. <https://atomic-spectra.net/rcgnz14.htm>). Diese Aufgabestellung stellt höhere Mindestansprüche an das zur Verfügung stehende Spektrometer, und bleibt deshalb an dieser Stelle als Ausblick.