

LK Physik * K13 * Ausblick auf das quantenmechanische Atommodell

1. Grundlegendes

Bei konsequenter Anwendung der Quantenphysik gibt es weiterhin diskrete Energiestufen und die Frequenzbedingung $hf = \Delta E$ für die emittierten Photonen.

Der klassische Bahnbegriff für die Elektronen aber verliert im Mikrobereich seinen Sinn. An seine Stelle tritt eine nur statistische Beschreibung des „Bewegungsverhaltens“ durch Materiewellen. Die zugehörige Wellenfunktion ψ gibt für ein einzelnes Teilchen durch das Amplitudenquadrat $|\psi|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an.

So wie **freien Teilchen** eine **fortschreitende Materiewelle** zukommt, so kommt einem **gebunden Elektron** im Atom eine **stehende Welle** zu. Diese stehende Welle ist durch die Versuchsanordnung bestimmt.

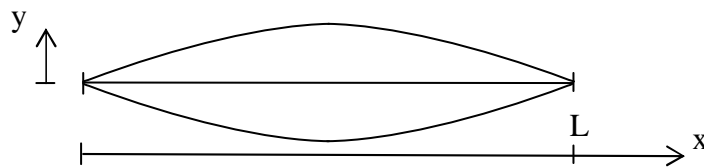
Da das Atom dreidimensional ist, sind auch die stehenden Materiewellen für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen dreidimensional.

Es zeigt sich, dass bei dieser Art der Beschreibung des Atoms die diskreten Energiestufen von selbst folgen. Die Frequenzbedingung $hf = \Delta E$ ist ohnehin schon eine Anwendung der Quantenphysik.

2. Betrachtungen im Eindimensionalen

A. Mechanisches Analogon

Auf einer beidseitig eingespannten Saite (Länge L) können stehende Querwellen angeregt werden.



$$y(x;t) = A(x) \cdot \sin(\omega t) = A_0 \sin(kx) \cdot \sin(\omega t)$$

Damit sich die stehende Welle ausbilden kann, muss die folgende Randbedingung erfüllt sein. $A(0) = A(L) = 0$ (Knoten an den Enden)

Geben Sie $A(x)$ für die Grundschwingung sowie für die Oberschwingungen an!

Wie lautet der Zusammenhang zwischen $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ und L ?

$A(x) =$	$L =$	bzw. $\lambda =$	(mit $n = 1, 2, 3, \dots$)
----------	-------	------------------	-----------------------------

B. Elektron im eindimensionalen Potentialkasten

Im eindimensionalen Potentialkasten mit „unendlich hohen Wänden“ ist ein Elektron „eingesperrt“.

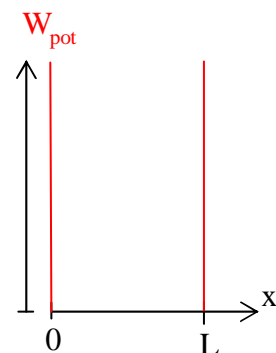
Beschreiben Sie das Elektron durch die Wellenfunktion $\psi(x)$.

Wie lauten die Randbedingungen?

Zeigen Sie, dass das Elektron nur diskrete Energiewerte E_n

haben kann! (Hinweis: $\lambda = \frac{h}{p}$ und $E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$)

Auch im tiefsten Energiezustand (Grundzustand) besitzt das Elektron eine Energie $E_1 > 0$. (Nullpunktsenergie E_1)



$\psi_n(x) =$	$E_n = E_{n, kin} =$	(mit $n = 1, 2, 3, \dots$)
---------------	----------------------	-----------------------------

3. Die Schrödinger-Gleichung

Im eindimensionalen Potentialkasten hat das Elektron im erlaubten Bereich $0 \leq x \leq L$ überall die potentielle Energie $E_{\text{pot}} = 0$ und zu jedem $\psi_n(x)$ gehört damit eine eindeutige Wellenlänge.

Ist aber die potentielle Energie eines Teilchens vom Ort x abhängig, so ist die Bestimmung von $\psi_n(x)$ schwieriger und die Wellenfunktion muss eine variable Wellenlänge besitzen.

Man ermittelt die Wellenfunktion $\psi(x)$, indem man eine Differentialgleichung löst. Diese Differentialgleichung heißt **Schrödinger-Gleichung**.

(Erwin Schrödinger, österr. Physiker, 1887-1961, Nobelpreis 1933 für seine wissenschaftliche Arbeit „Quantisierung als Eigenwertproblem“ aus dem Jahr 1926)

$$\psi''(x) = -\frac{8\pi m}{h^2} \cdot (E_{\text{ges}} - E_{\text{pot}}(x)) \cdot \psi(x)$$

eindimensionale zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung ist nicht tiefer begründbar, hat sich aber vielfach bewährt. Alle so genannten Herleitungen sind nichts weiter als Analogiebetrachtungen.

Mögliche „Herleitung“:

Leiten Sie die Wellenfunktion $\psi(x;t) = \psi_o(kx) \cdot \sin(\omega t)$ einer stehenden Welle zweimal nach x ab und nutzen Sie die folgenden Beziehungen

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} ; p = \frac{h}{\lambda} ; p^2 = 2mE_{\text{kin}} \quad \text{und} \quad E_{\text{ges}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}(x).$$

Hinweise

Lösen der Schrödinger-Gleichung bedeutet, dass man bei bekanntem $E_{\text{pot}}(x)$ eine geeignete Wellenfunktion $\psi(x)$ sucht, welche die Differentialgleichung erfüllt. Es zeigt sich hierbei, dass nur für ganz spezielle Werte von $E_{\text{ges},n}$ Lösungen $\psi_n(x)$ existieren, welche die Bedingung $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_n(x) = 0$ erfüllen!

(Warum ist diese Bedingung erforderlich?)

Die Quantisierung der Gesamtenergie ergibt sich also von selbst und muss nicht postuliert werden.

Die Schrödinger-Gleichung wird folgendermaßen auf den 3-dimensionalen Raum verallgemeinert:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x; y; z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x; y; z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x; y; z)}{\partial z^2} = -\frac{8\pi m}{h^2} \cdot (E_{\text{ges}} - E_{\text{pot}}(x; y; z)) \cdot \Psi(x; y; z)$$

Hierbei bedeutet $\frac{\partial^2 \Psi(x; y; z)}{\partial x^2}$ die zweite „partielle Ableitung“ von $\Psi(x; y; z)$ nach der Variablen x (y und z werden hierbei wie Konstante behandelt!).

Für zwei Elektronen erhält die Schrödinger-Gleichung 6 Ortskoordinaten. Die linke Seite der Gleichung enthält dann 6 partielle Ableitungen. usw.

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lässt sich auch auf die Abhängigkeit von der Zeit verallgemeinern.

Die (komplexe) Wellenfunktion ψ selbst hat keine reale physikalische Bedeutung, sondern nur das Amplitudenquadrat $|\psi|^2$.

Die praktische Lösung der Schrödinger-Gleichung beruht im Allgemeinen auf komplizierten Näherungsverfahren (Computer). Für das Wasserstoffatom sind allerdings alle möglichen Wellenfunktionen mathematisch exakt berechnet. (Internethinweise s.u.)

Die Schrödinger-Gleichung ist die Grundgleichung der nicht-relativistischen Wellenmechanik. Die nicht-relativistische klassische Mechanik (mit der Grundgleichung $\vec{F} = \vec{a} \cdot m$) ist ein Grenzfall der Wellenmechanik.

Mit der Schrödinger-Gleichung kann man nicht nur das Verhalten von Elektronen in elektrischen Feldern beliebiger Art beschreiben. Auch das Verhalten von Protonen oder Neutronen im Atomkern wird damit berechenbar (z.B. Tunneleffekt).

Internethinweise:

Das Lösen der Schrödinger-Gleichung für verschiedene Potentiale wird auf der folgenden Seite sehr anschaulich dargestellt:

<http://www.schulphysik.de/java/physlet/applets/quant2.html>

Mit dem Simulationsprogramm `slange.exe` („Schrödingers Schlange“) von Dr. J. Kühlbeck kann man sich die Energiespektren von Topf- und Coulomb-Potential sowie harmonischem Oszillator durch Anpassen der ψ -Funktion selbst erarbeiten.

Dieses Programm lässt sich von

<http://www.cip.physik.uni-muenchen.de/~milq/kap10/k103p01.html> herunterladen.

Visualisierungen der Lösungen zum H-Atom findet man u.a. auf folgenden Internetseiten:

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

<http://www.schulphysik.de/java/physlet/applets/quant1.html>

<http://www.ikg.rt.bw.schule.de/fh/physik.html>