

QUANTENMECHANISCHES ATOMMODELL

UNTERRICHTSKONZEPT IM ZUGE DER GASTVORLESUNG

"RELATIVITÄTSTHEORIE UND QUANTENTHEORIE
VERMITTELN MIT HILFE ELEKTRONISCHER TOOLS"

VON

PROF. FRANZ EMBACHER

05.05.2011

ERSTELLT VON:

STEFAN ARZBACHER
CHRISTOPHER STADLER

UNIVERSITÄT INNSBRUCK
DIDAKTIK DER THEORETISCHEN PHYSIK

Quantenmechanisches Atommodell

Stefan Arzbacher, Christopher Stadler

05.05.2011

Inhaltsverzeichnis

I. Voraussetzungen und Vorüberlegungen	4
1. Klasse	4
2. Skizze des fachlichen Hintergrundes	4
3. Lernziele	5
II. Beschreibung des Szenarios	6
4. Ablaufbeschreibung	6
5. Einstieg ins Thema	7
6. Lösung zum Einstieg / Diskrete Energiespektren	7
6.1. Kurze Wiederholung: Optik	7
6.2. Das Absorptionsspektrum - Fraunhoferlinien	8
6.3. Erklärungsversuch mit Elektronen auf Planetenbahnen	8
7. Theorie	10
7.1. Die Energie	11
7.1.1. Die kinetische Energie	11
7.1.2. Die potentielle Energie im Schwerfeld	11
7.1.3. Die potentielle Energie im elektrischen Feld einer Punktladung . .	11
7.1.4. Die potentielle Energie einer gespannten Feder	12
7.2. Das Potential	12
7.2.1. Gravitations- und Coulombpotential	13
7.2.2. Harmonisches Potential	14

7.2.3.	Kastenpotential	14
7.2.4.	kompliziertere Potentiale	15
7.3.	Energieerhaltung	15
7.4.	Wellenfunktionen	16
7.4.1.	mathematische Beschreibung	16
7.4.2.	kompliziertere Wellenfunktionen	17
7.4.3.	Kopenhagener Interpretation	17
7.4.4.	spezielle Wahrscheinlichkeiten	18
7.5.	Die Schrödingergleichung	19
7.6.	Unbestimmtheitsrelation	20
8.	Diskrete Spektren	22
8.1.	Das Separieren der Zeit	22
8.2.	Das unendlich hohe Kastenpotential	23
8.3.	Die Randbedingungen	24
8.4.	Die stationäre Lösung	24
9.	Stabilität der Atome	26
10.	Das Wasserstoffatom	26
10.1.	Herausfinden der Parameter R und V_0 :	28
10.1.1.	Ermitteln der Potentialtopf- Breite R	28
10.1.2.	Ermitteln der Potentialtopf-Tiefe V_0	29
10.2.	Bestimmen der Energiewerte	30
10.3.	Ausblick zur exakten Lösung	33
11.	Allgemeine Atome	34
11.1.	Besetzung der Hüllen mit Elektronen	35
11.2.	Beispiel zur Besetzung der Schalen	36
12.	Praktischer Nutzen der Quantenmechanik	37
13.	Der Modellcharakter der Quantenmechanik	38
13.1.	Bemerkungen zur Modellbildung	39
14.	Fragestunde	39
15.	Beurteilung	39
III.	Nachbereitung	40
16.	Schülervorstellungen	40
17.	Kompetenzberücksichtigung	41

18. Entdeckendes Lernen	41
19. Fördern der Argumentation	41
20. Fördern der Artikulation	42
21. Erwartbarer Lernertrag	42
22. Plan B	43
23. Schlusswort	43
Literatur	45

Bemerkung zur Kurzschreibweise

Da in diesem Text sehr oft die Begriffe Schüler bzw. Schülerinnen, sowie Lehrer bzw. Lehrerinnen, vorkommen, werden diese im Nachfolgenden mit S und L abgekürzt. Selbiges gilt für den Begriff Quantenmechanik, welcher durch QM abgekürzt wird.

Teil I.

Voraussetzungen und Vorüberlegungen

1. Klasse

Das Thema fällt in den Bereich *Moderne Physik* und wird üblicherweise in der Maturaklasse - 12. bzw. 13. Schulstufe (8. bzw. 9. Klasse) - unterrichtet.

2. Skizze des fachlichen Hintergrundes

Die S lernten bis zur Maturaklasse nach Lehrplan folgendes, was wir voraussetzen:

- 5.Klasse: klassische Mechanik, Bewegungsgleichungen
- 6.Klasse: Wärmelehre, Optik
- 7.Klasse: Elektrostatik und Elektrodynamik

Ausserdem treffen wir noch zusätzliche Annahmen:

- Wir gehen nicht davon aus, dass die S das Prinzip eines Potentialtopfes verstehen.
- Wir gehen davon aus, dass die S das Lösen von einfachen 1-dim partielle Diff.Gl. nachvollziehen können. D.h. sie können die Gleichungen nicht selber lösen, begreifen aber, wenn man ihnen die Lösung gibt, durch einfaches Ableiten, dass diese korrekt ist.
- Wir gehen davon aus, dass in der klassischen Mechanik der Energie- und Impulsbegriff gelernt wurde.
- Wir gehen davon aus, dass der Welle-Teilchen Dualismus gerade erst behandelt wurde. DeBroglie Wellen sind bereits konzeptuell bekannt.
- Wir gehen davon aus, dass einführend in die QM der Photoeffekt gelernt wurde, und die S die Relation $E = h \cdot \nu$ kennen.
- Wir gehen davon aus, dass die S das Bohr'sche Atommodell kennen.

3. Lernziele

Vorab eine grundsätzliche Bemerkung zum übergreifenden Lernziel:

Wir stellen an dieses Konzept nicht die Forderung, dass der Stoff von jedem verstanden wird. Die QM ist ein schwieriges Thema, und kann in der knappen Unterrichtszeit nicht wirklich vermittelt werden. Dann muss man sich entscheiden, entweder spezifische Themen genau zu machen, oder einen Überblick zu verschaffen. Unsere Wahl fällt auf Letzteres. Ich erachte es in diesem Kontext für sinnvoller, ausnahmsweise das Verständnis nicht an erste Stelle zu setzen. Die Wenigen, die später einmal Physik studieren werden, lernen den Stoff auf der Universität ohnehin genau. Für die Anderen wünschen wir uns nur, dass sie die QM als Teil der Natur akzeptieren, und exemplarisch ein paar Phänomene kennen. Es ist uns vor allem wichtig, zu vermitteln, dass die QM nichts ausschliesslich theoretisches, abgehobenes, ist, sondern etwas uns alle betreffendes.

Etwas detailliertere Lernziele sind:

- S lernen, wie Astronomen rausfinden, aus was Sterne gebaut sind
- S lernen warum das Universum stabil ist (Atome strahlen normalerweise nicht obwohl sie klassisch müssten)
- S lernen, dass es in der QM eine Unschärfe- / Unbestimmtheitsrelation gibt, und können mithilfe dieser obigen Punkt erklären
- S lernen, dass in der Quantenwelt nur von Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, nicht jedoch von deterministischen Orten gesprochen wird
- S lernen Wellenfunktionen kennen und können diese mit Wahrscheinlichkeitsdichten identifizieren
- S lernen, dass die Schrödingergleichung nichts Mystisches ist - Gemeinsames Lösen der Gleichung an einem unendlich hohen Potentialtopf
- S lernen, dass es diskrete Energiespektren gibt - Wasserstoff Termschema
- Kennenlernen des einfachsten Atommodells: Wasserstoffatom mit Spektrum (qualitativ)
- S erfahren, dass die grundlegenden Konzepte auch für sie begreifbar sind, dass die exakte Lösung der allermeisten Probleme ohnehin nur durch numerische Methoden und viele Näherungen lösbar sind.
- S lernen in Diskussionen den Modellcharakter der QM und erkenntnistheoretische Grundlagen von physikalischen Theorien
- S lernen, dass die QM nicht nur etwas für durchgeknallte Wissenschaftler ist. Beispiele aus der Alltagswelt der S machen ihnen dies deutlich.

- Grundsätzlich soll die QM entzaubert werden, sowie den S die Berührungsangst vor dem Thema genommen werden

Teil II.

Beschreibung des Szenarios

4. Ablaufbeschreibung

Thema	Zeit	Arbeitsaufträge/Div.
Einstieg ins Thema	1 UE	0
Lösung zum Einstieg / Diskrete Energiespektren	1 UE	25min
Theorie	6 UE	25min +15min + 30min
Diskrete Spektren	0,5 UE	0
Stabilität der Atome	0,5 UE	0
Das Wasserstoffatom	2 UE	1 UE
Allgemeine Atome	2 UE	25min
Praktischer Nutzen der QM	0,5 UE	2 UE
Der Modellcharakter der QM	1 UE	0
Fragestunde	1 UE	0

5. Einstieg ins Thema

Die Sonne

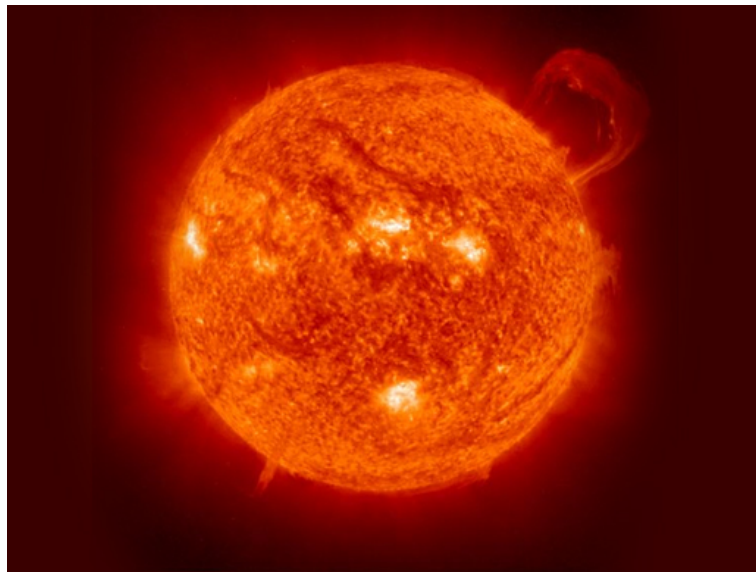


Abbildung 1: Die Sonne

Quelle: NASA [6]

Wie haben Wissenschaftler herausgefunden, aus was die Sonne aufgebaut ist? Warum kann man da nicht einfach hinfliegen, und eine Probe nehmen?

Diskussion mit den S über obige Fragestellung. Dabei sollte die Antwort noch nicht vorweg genommen werden. Wichtig ist hier, darauf aufmerksam zu machen, dass die Sonne sehr weit weg ist, und zu heiss um sich ihr zu nähern. Bei der Entfernung sollte noch erwähnt werden, dass dieselben Fragen auch für sehr viel weiter entfernte Sterne gestellt werden können. Dann kann man einfach nicht mehr hinfliegen!

Eventuell: Einbau eines kleinen Rechenbeispiels, welches die Entfernung verdeutlicht: Rakete bräuchte zum nächsten Stern (Alpha Centauri) 120.000 Jahre!

Trotzdem wissen wir sehr genau, aus was Alpha Centauri aufgebaut ist! Die Antwort auf diese Frage ist nur mit der QM erklärbar!

6. Lösung zum Einstieg / Diskrete Energiespektren

6.1. Kurze Wiederholung: Optik

Was ist Licht klassisch? - Elektromagnetische Wellen

Angenommen, man kann aus dem Licht, das Sterne austrahlen, herauslesen, wie sie aufgebaut sind. Wo kann diese Information stecken? - im Frequenzspektrum

Wir versetzen uns jetzt in die Rolle eines Astronomen vor knapp über hundert Jahren. Nach längerer Beobachtung der Sonne, haben wir ein Bild des Frequenzspektrums aufgenommen. Seltsamerweise gibt es nun da aber dunkle Streifen...

6.2. Das Absorptionsspektrum - Fraunhoferlinien

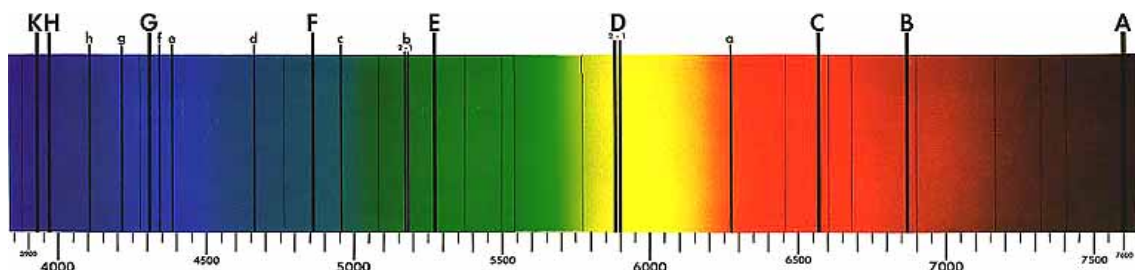


Abbildung 2: Absorptionsspektrum - Fraunhoferlinien

Quelle: Wikipedia [9]

Sehr schöne Atom-Emission-Spektren zu unterschiedlichsten Atomen findet man im Internet unter <http://www.harfesoft.de/aixphysik/atom/discharge/index1.html>

Woher kommen diese dunklen Streifen?

Wir wissen, dass Licht Energie transportiert. Wie wir beim Photoeffekt gesehen haben, kann Materie Energie vom Licht aufnehmen. Das zeigte sich dort dadurch, dass sich Elektronen aus dem Festkörperverbund gelöst haben. Dazu ist Energie nötig. Wir wissen auch, dass $E = h \cdot \nu$ ist, die Energie also abhängig von der Frequenz ist. Nun strahlt ein Stern in alle Richtungen weisses, also breitbandiges, Licht aus. Das entspräche einem kontinuierlichem Spektrum des sichtbaren Lichtes von blau nach rot. Offensichtlich sind aber schmale Frequenzbereiche ausgenommen. Das sind die dunklen Streifen in Abbildung 2, sie heissen Fraunhoferlinien. D.h. also entweder, dass der Stern Licht dieser Farbe bzw. Frequenz nicht aussendet, oder dass dieses noch vor dem Auftreffen auf der Erde absorbiert wird. Es hat sich gezeigt, dass die Atome der heissen Gase in der Sternatmosphäre Licht dieser Frequenzen absorbieren. Das mag nun nicht verwunderlich sein, was aber seltsam ist, ist, dass nur einzelne Frequenzen absorbiert. Wie kann man sich das erklären? Versuchen wir dies einmal mit dem grundlegenden Konzept (keine gequantelten Bahnen) des Bohr'schen Atommodells

6.3. Erklärungsversuch mit Elektronen auf Planetenbahnen

Bemerkung: auf eine semiklassische Darstellung von gequantelten Elektronenbahnradien wird bewusst verzichtet. Diese ist irreführend und fördert Fehlvorstellungen der S. [4]

Wir haben nun also im einfachsten Fall ein Elektron, welches um den Kern kreist.

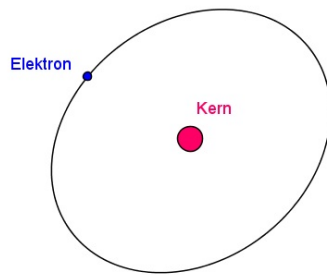


Abbildung 3: Planetenbahnen - Modell
Erstellt mit GeoGebra

Wird dem Elektron in diesem Modell Energie zugeführt, so wird es sich schneller bewegen. Aus der klassischen Mechanik wissen wir, dass sich dann der Radius der Bahn, hier eine Keplerbahn, vergrössern muss. Da es aber keine weitere Bedingung an den Radius der Bahn gibt, kann Energie in beliebiger Menge aufgenommen werden. Also: Wenig Energieaufnahme führt zu einer kleinen Vergrösserung des Radius; Viel Energieaufnahme führt zu einer starken Vergrösserung des Radius. Setzen wir die Atome im Gas der Sternatmosphäre nach diesem Modell an, so müssten die Frequenzen über das gesamte Band gleichmässig abgeschwächt sein. Mit diesem Modell lässt sich das Absorptionsspektrum also nicht erklären.

Bemerkung: Falls das Atommodell nach Bohr schon behandelt wurde, und die S gelernt haben, dass die Bahnumfänge Vielfache der DeBroglie Wellenlänge sein müssen, ist es ratsam, die S darauf aufmerksam zu machen, dass Bohr das einfach gefordert hat! Es gibt kein Gesetz aus dem sich das ableiten lassen würde!

Beim Modell mit den Elektronenbahnen kommt noch ein anderes grosses Problem zum Vorschein: Wie bereits in der Elektrodynamik gelernt, erzeugen beschleunigte Ladungen, also auch Elektronen auf Kreisbahnen, ein elektrisches Feld. Auch dieses transportiert, wie Licht, Energie. Das bedeutet aber, dass von den Elektronen erzeugte Feld transportiert mit jedem Umlauf ein kleines bisschen Energie von den Elektronen weg. Diese verlieren also nach und nach Energie, bis sie schliesslich in den Kern stürzen würden. Wenn man diesen Gedanken weiterverfolgt, kommt man zum Schluss, dass das Universum nicht stabil wäre! Sämtliche Elektronen würden irgendwann mit Protonen annihilieren, es gäbe kein einziges Element mehr. Zusammenfassend haben wir nun gelernt:

- Es gibt eine Eigenart von Atomen, nur ganz bestimmte Frequenzen zu absorbieren
- Das Planetenmodell der Elektronenbahnen ist kein geeignetes Modell

- Das Planetenmodell kann das Absorptionsspektrum nicht erklären
- Nach dem Planetenmodell müsste das Universum zusammenstürzen, das tut es aber offensichtlich nicht

Um ein anderes, passenderes Modell zu verstehen, kommen wir nicht umhin, ein bisschen Theorie zu lernen. Dies möchten wir im nächsten Abschnitt tun.

möglicher Arbeitsauftrag:

Arbeitszeit: 25min, **Hilfsmittel:** Tafel oder Arbeitsblatt

Um die Informationen bezüglich Lichtspektren und erwartbare Energien zu vertiefen, und ein Gefühl für die Grössenverhältnisse zu bekommen, wäre ein kleines Arbeitsblatt mit folgenden Inhalten möglich: Arbeitsblatt

- typischer Wellenlängenbereich/Frequenzbereich des sichtbaren Lichtes
- typischer Wellenlängenbereich/Frequenzbereich von UV-Licht
- typischer Wellenlängenbereich/Frequenzbereich von Infrarot-Licht (Mikrowelle)
- Beispiele von Energien von sichtbarem, UV- und Infrarotem Licht in den Einheiten Joule und eV
- Vergleich obiger Energien mit Energiegrössen aus dem Alltag; Obwohl so klein, kriegt man trotzdem einen Sonnenbrand
- Rechenbeispiel: Energie eines Lasers (um zu verdeutlichen, dass bei viel Licht durchaus ernstzunehmende Energien dahinter stecken)

7. Theorie

Bemerkung: Wir behandeln den Grossteil der mathematische Theorie eindimensional, obwohl wir wissen, dass das mitunter Fehlvorstellungen fördern kann. Da wir von den S aber keine Vektoranalysis verlangen können und wollen, muss die eindimensionale Darstellung ausreichen, was sie für das konzeptuelle Verständnis höchstwahrscheinlich auch tut.

Wir werden in diesem Abschnitt versuchen, eine vor allem mathematische Grundlage zu schaffen, um quantenmechanische Potentialprobleme zu lösen bzw. um Lösungen nachvollziehen zu können. Dafür benötigen wir den Begriff der Energie und den Begriff des Potentials.

7.1. Die Energie

Viele Probleme in der Physik werden über Energieerhaltung gelöst. In der klassischen Mechanik haben wir schon von den Begriffen kinetische Energie, und potentielle Energie gehört. Auch in der QM brauchen wir diese Begriffe wieder. Die kinetischen Energie ist, genau wie schon in der klassischen Mechanik, die Energie, die in der Bewegung des Objektes, steckt. Die potentielle Energie, ist die Energie, die ein Objekt in Relation zu einer äusseren Kraft erfährt.

Am allgemeinsten lässt sich der Begriff der Energie so erklären: Bewegt man einen Körper gegen eine Kraft $F(x)$ um ein infinitesimal kleines Wegstück dx , so hat man entweder die Energie dE gewonnen oder abgegeben, je nach Vorzeichen der Kraft. Das heisst also: wird ein Körper gegen die Kraft $F(x)$ von a nach b bewegt, so muss dafür die Energie

$$\begin{aligned} dE &= dF \cdot dx \\ E &= \int_a^b F(x) dx \end{aligned} \quad (1)$$

aufgewendet werden. Wir wollen nun das für einige bekannte Kräfte tun.

7.1.1. Die kinetische Energie

Bei der kinetischen Energie, ist die Kraft, die wir überwinden müssen, die Beschleunigungskraft. Wir müssen also einen Körper der Masse m von 0 auf v beschleunigen. Um nun die Energie zu berechnen, machen wir einen Umweg über den Impuls.

$$\begin{aligned} dF(v) &= \frac{dP}{dt} = m \cdot \frac{dv}{dt} \\ E_{kin} &= \int_0^{v_0} m \cdot \frac{dv}{dt} dx = \int_0^{v_0} m \cdot \frac{dx}{dt} dv = \int_0^{v_0} m \cdot v dv \\ E_{kin} &= \frac{1}{2} \cdot mv_0^2 = \frac{p^2}{2m} \end{aligned} \quad (2)$$

7.1.2. Die potentielle Energie im Schwerfeld

Die potentielle Energie im Schwerfeld, wurde bereits in der klassischen Mechanik behandelt. Die meisten werden noch die sehr einfache Formel $E = mgh$ im Gedächtnis haben. Dies ist aber nur eine Näherung im Schwerfeld der Erde. Richtigerweise muss man die potentielle Energie folgendermassen berechnen. Sie gibt an, wie viel Energie man braucht um einen Körper von r_0 auf r zu heben.

$$\begin{aligned} F(r) &= G \cdot \frac{Mm}{r^2} \\ E_{pot}(r) &= \int_{r_0}^r F(r') dr' = \int_{r_0}^r G \cdot \frac{Mm}{r'^2} dr' = GMm \cdot \left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{r} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

7.1.3. Die potentielle Energie im elektrischen Feld einer Punktladung

Diese entspricht, zumindest was ihre $1/r$ -Abhängigkeit anbelangt, der potentiellen Energie im Schwerfeld. Die Kraft, die nun statt der Gravitationskraft wirkt, ist die Cou-

lombkraft. Um eine Ladung q im E-Feld der Punktladung Q vom Punkt r_0 zum Punkt r zu transportieren benötigt man dann folgende Energie:

$$F(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{qQ}{r^2}$$

$$E_{pot}(r) = \int_{r_0}^r F(r') dr' = \int_{r_0}^r \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{qQ}{r'^2} dr' = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0} \cdot \left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{r} \right) \quad (4)$$

7.1.4. Die potentielle Energie einer gespannten Feder

Dies ist ein sehr wichtiges Beispiel, da sehr viele atomare Kräfte in erster Näherung als Federkräfte modelliert werden. Dies macht man deshalb, weil das die einfachste Näherung ist. Die Kraft verhält sich linear zum Abstand, eben wie bei einer Feder. Spannt man eine Feder mit Federkonstante k von der Ruhelage zu einer Länge x , so muss folgende Energie aufgewendet werden:

$$F(x) = k \cdot x$$

$$E_{pot}(x) = \int_0^x F(x') dx' = \int_0^x kx' \cdot dx' = \frac{1}{2} kx^2 \quad (5)$$

Diese potentielle Energie nennt man auch, die potentielle Energie eines harmonischen Oszillators.

7.2. Das Potential

In der Physik spricht man von Potentialen immer dann, wenn sich eine Kraft folgendermassen schreiben lässt:

$$F(x) = -q \frac{d}{dx} V(x) \quad F(x) = -m \frac{d}{dx} V(x) \quad (6)$$

Die potentiellen Energien lassen sich dann schreiben als:

$$E(x) = -q \cdot V(x) \quad E(x) = -m \cdot V(x) \quad (7)$$

Das Vorzeichen ist Konvention, und statt V wird oft auch der Buchstabe U verwendet. Dies hat aber keine andere Bedeutung, und soll nicht verwirren. Man sieht sofort, dass die Potentialfunktion nicht eindeutig ist. Fügt man zu $V(x)$ irgendeine beliebige Konstante hinzu, ändert das nichts an der Kraft, die durch Ableiten entsteht. Da schlussendlich nur die Kräfte interessant sind, können wir nach Belieben Konstanten addieren. üblicherweise wählt man diese so, dass sie das zu bearbeitende Problem möglichst vereinfachen.

Das Potential beschreibt die Fähigkeit eines Kraftfeldes, eine Arbeit zu verrichten. Es beschreibt die Wirkung eines konservativen Feldes auf Massen oder Ladungen unabhängig von deren Grösse und Vorzeichen. Das Potential ist eine Eigenschaft eines Kraftfeldes.

Betrachten wir noch einmal die potentiellen Energien aus dem vorigen Unterkapitel, und schauen, was durch Ableiten der Energiefunktionen $E_{pot}(x)$ bzw. $E_{pot}(r)$ nach x bzw. r passiert. Die Konstante r_0 fällt weg, und es steht wieder die bei den Herleitungen

verwendete Kraft da. Offensichtlich sind, bis auf das Vorzeichen, und den Faktor q bzw. m , die potentiellen Energien die Potentialfunktionen zu den Kräften.

Wir möchten hier noch einmal ein paar wichtige Potentiale zusammenfassen. Anbei sind auch Plots der Potentialfunktionen dargestellt. Hier ist wichtig zu wissen, dass die Kraft eben proportional zur ersten Ableitung dieser Potentialfunktionen ist. Beim Lesen der Plots, sollte man also auf die Steigungen der Tangenten achten, um etwas über die Kraft zu erfahren.

7.2.1. Gravitations- und Coulombpotential

Das Gravitationspotential, welches das Kraftfeld einer Masse M beschreibt lautet:

$$V_{Gravitation}(r) = -GM \cdot \frac{1}{r} \quad (8)$$

Das Coulombpotential, welches ein Kraftfeld einer Punktladung Q beschreibt lautet:

$$V_{Coulomb}(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (9)$$

Im nachfolgenden Plot, sieht man zwei $1/r$ -Potentiale. Dabei hat das gestrichelte positives, und das durchgezogene negatives Vorzeichen.

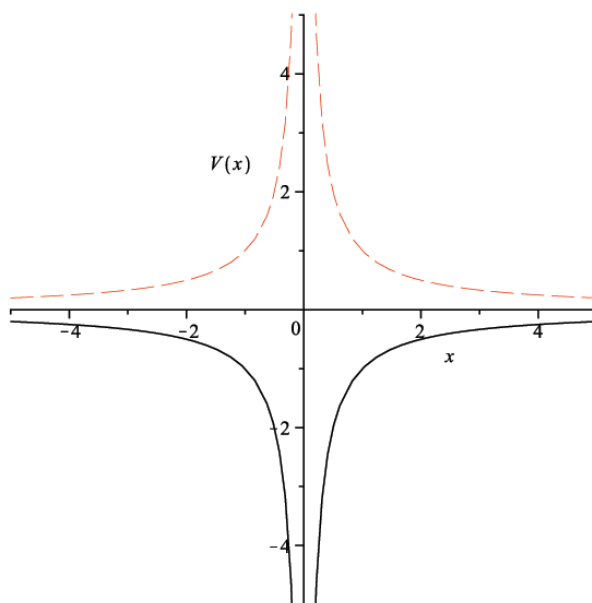


Abbildung 4: $1/r$ Potential
Erstellt mit: Maple

7.2.2. Harmonisches Potential

Das Harmonische Potential kann sowohl für eine an eine Ladung koppelnde Kraft, oder für eine an eine Masse koppelnde Kraft stehen. Es hat immer die Form

$$V_{\text{Harmonisch}}(x) = \frac{1}{2} \cdot kx^2 \quad (10)$$

Dabei kann nun k je nach Gegebenheit ein Ausdruck mit einer Masse, oder mit einer Ladung sein.

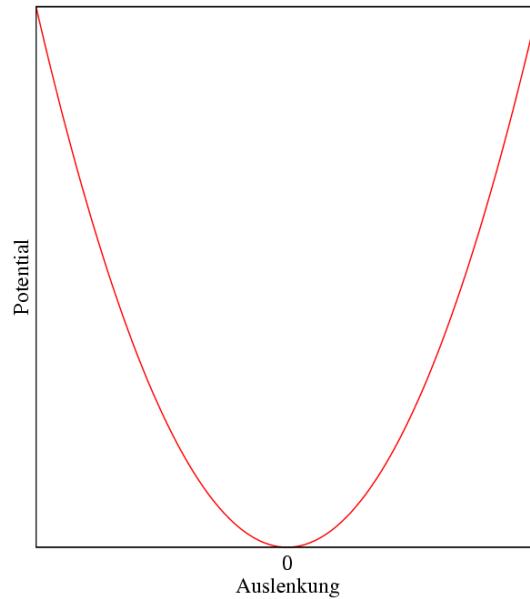


Abbildung 5: Harmonisches Potential

Quelle: Wikipedia [10]

7.2.3. Kastenpotential

Ein Kastenpotential ist eine Näherung an ein Potential, welches nur diskrete Werte hat. Normalerweise gibt es 3 Bereiche. Oft ist einer davon gleich Null, und die anderen beiden haben einen bestimmten Wert V_0 . An einem Plot ist dies am leichtesten verständlich.

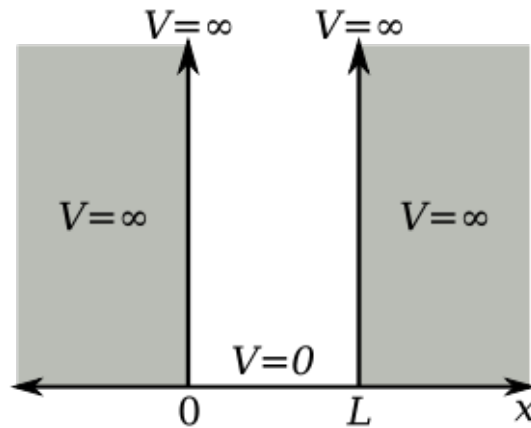


Abbildung 6: unendlich hohes Kastenpotential
Quelle: Wikipedia [13]

7.2.4. kompliziertere Potentiale

Vor allem in der Elektrodynamik und Elektrostatik, lassen sich beliebig komplizierte Potentiale basteln. Man kann sich vorstellen, beliebig viele Punktladungen im Raum zu verteilen, und dann alle Potentiale der einzelnen Punktladungen zu addieren (es gilt das Superpositionsprinzip). Das gibt dann schon sehr komplizierte Potentiale... Beispiele für bekannte einfache und komplizierte Potentiale findet man unter:

<http://www.falstad.com/vector/>

7.3. Energieerhaltung

Ziel dieses Unterkapitels ist, zu verstehen, wie sich ein Objekt mit Energie E in einem Potential bewegt. Dabei gilt immer die Energieerhaltung

$$E = E_{\text{pot}}(x) + E_{\text{kin}}(x) \quad (11)$$

Die kinetische und die potentielle Energie sind abhängig vom Ort, müssen in Summe aber immer konstant E sein. Das bedeutet: hat das Objekt für einen bestimmten Ort die potentielle Energie E , dann muss an diesem Ort die kinetische Energie Null sein. Oder anders herum: Hat das Objekt an einem bestimmten Ort die potentielle Energie Null, so steckt die gesamte Energie in der Bewegung des Objektes.

Diese Überlegungen lassen sich sehr schön an folgendem Applet demonstrieren:
<http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/index.php?topic=1497.0>

Ein anderes Applet, demonstriert die Bewegung eines Körpers in einem 2-dimensionalen $1/r$ Potential. Hier kann man sehr gut die Entstehung der Keplerbahnen nachvollziehen.
<http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/index.php?topic=1185.0>

möglicher Arbeitsauftrag:

Arbeitszeit: 25min, **Hilfsmittel:** Tafel

Um das Gelernte zu festigen, und Verständnis abzufragen, kann man, ohne viel Aufwand Potentiale an die Tafel zeichnen, wobei die Schüler selbstständig oder in kleinen Gruppen folgende Aufgaben lösen müssen :

- Skizzieren der 1. Ableitung der Potentialkurven (grafisch)
- Finden und interpretieren von Extremalstellen der Potentialkurve
- Einzeichnen der auf einen Körper wirkenden Kräfte, an vorgegebenen Punkten der Potentialkurve (Achtung: Vorzeichen)
- Beschreiben einer möglichen Bewegung (v-t-Diagramm) eines Körpers mit Energie E in vorgegebenen Potentialen
- Vergleich der ermittelten Bewegungen mit der Lösung aus dem Applet

Nachdem nun doch noch sehr klassischen Bereich kommen wir jetzt endlich zur QM.

7.4. Wellenfunktionen

Bemerkung: Wir behandeln hier nicht den Kollaps von Wellenfunktionen bei Messungen. Der Aspekt der Präparation von Zuständen muss in einem anderen Kontext behandelt werden, möglicherweise beim Stern-Gerlach-Experiment. Dafür gibt es gute Unterlagen auf der Homepage des Milq-Konzeptes [5]

Ziel dieses Abschnittes ist es, die Wellenfunktionen so einzuführen, dass wir damit einfache Schrödingergleichungen lösen können.

In der QM beschreibt man jeden Zustand, den ein Objekt haben kann, durch eine sogenannte Wellenfunktion. Wir wollen uns zuerst einmal die Wellenfunktion anschreiben, und diskutieren danach ihre Bedeutung.

7.4.1. mathematische Beschreibung

Eine Wellenfunktion ist eine komplexe Funktion. Sie ist abhängig von Ort und Zeit. Durch eine geeignete Transformation, die Fouriertransformation, kann man sie auch als Funktion von Impuls und Zeit schreiben. Sie beschreibt dann aber immer noch denselben Zustand. Man kann beliebig zwischen Ort und Impuls-Darstellung wechseln. Es empfiehlt sich die Darstellung zu wählen, die für das Problem am geeignetsten ist. Wir begnügen uns mit der Ortsdarstellung, wobei wir zunächst nur 1-dimensionale Orte annehmen. Die einfachste mögliche Wellenfunktion sieht so aus:

$$\begin{aligned}\psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R} &\rightarrow, \mathbb{C} & (x, t) &\mapsto A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \cdot (px - Et)} \\ \psi(x, t) &= A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \cdot (px - Et)}\end{aligned}\tag{12}$$

Verwenden wir nun die von DeBroglie-Wellen bekannten Beziehungen

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega\tag{13}$$

Dann wird aus der Wellenfunktion eine sogenannte Materiewelle mit Wellenzahl k und Kreisfrequenz ω .

$$\psi(x, t) = A_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}\tag{14}$$

Diese Gleichung ist nun die quantenmechanische Beschreibung eines freien Elektrons im eindimensionalen Raum.

Man findet in manchen Büchern für die Wellenfunktionen auch folgende oder ähnliche Schreibweise:

$$|\psi_t\rangle = A_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}\tag{15}$$

Wir verwenden aber ausschliesslich erstere.

7.4.2. kompliziertere Wellenfunktionen

In obigen Beispiel sieht die Wellenfunktion noch sehr harmlos aus, da es sich nur um eine ebene Welle handelt. Man kann durch Addition endlich vieler, oder durch Integration unendlich vieler einfacher Wellenfunktionen beliebig komplizierte Wellenfunktionen bauen. Dies ist in der Praxis auch unbedingt nötig, für uns führt das aber zu weit. Uns reichen die einfachsten Wellenfunktionen, um die Konzepte zu verstehen.

7.4.3. Kopenhagener Interpretation

Nach der Kopenhagener Deutung, gibt uns die Wellenfunktion Auskunft darüber, wie wahrscheinlich es ist das Objekt (z.B Elektron) an einem bestimmten Ort messen zu können. Mathematisch beschreibt man das dann so:

$$W(a, b)(t) = \int_a^b \psi(x, t)^* \cdot \psi(x, t) \cdot dx\tag{16}$$

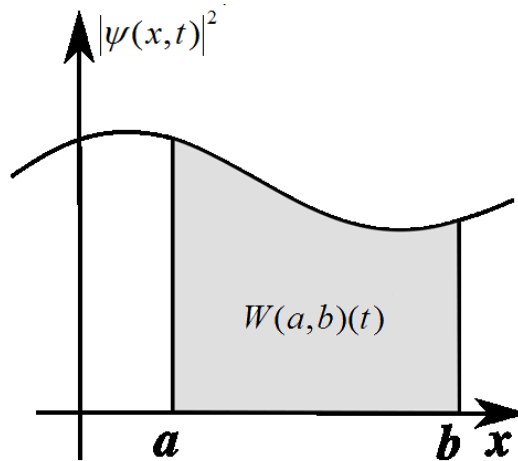


Abbildung 7: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
Nach einer Vorlage von Wikipedia [12]

Dies entspricht der zeitabhängigen Wahrscheinlichkeit, das Objekt irgendwo innerhalb des Intervalles $[a, b]$ zu finden. Aus der Mathematik kennen wir den Begriff der Wahrscheinlichkeits-Dichtefunktion.

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi(x, t)^* \cdot \psi(x, t) \quad (17)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons wird also durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x, t)|^2$ beschrieben.

Die Wellenfunktion selbst steht also in direktem Zusammenhang zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Das ist die Kopenhagener Deutung.

7.4.4. spezielle Wahrscheinlichkeiten

Wahrscheinlichkeit Objekt an einem diskreten Ort

Die Frage ist also, wie gross ist die Wahrscheinlichkeit, das Objekt am Ort $x = x_0$ zu finden:

$$W(x_0)(t) = \int_{x_0}^{x_0} \psi(x, t)^* \cdot \psi(x, t) \cdot dx = 0 \quad (18)$$

Da die obere und untere Grenze des Integrales gleich sind, ist die Wahrscheinlichkeit gleich Null. **Das bedeutet, dass ein Objekt in der QM nie an einem bestimmten Ort zu finden ist. Es ist quasi verschmiert über einen Ortsbereich!**

Normierungsbedingung

Die Frage hier ist: wie gross ist die Wahrscheinlichkeit, das Objekt irgendwo zu finden? Da das Objekt existiert, muss die Wahrscheinlichkeit, es irgendwo im Definitionsbereich

zu finden gleich Eins sein! Irgendwo muss es ja sein! Das führt zu folgender Bedingung, wobei Ω für den gesamten Definitionsbereich steht.

$$W(\Omega)(t) = \int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 \cdot dx = 1 \quad (19)$$

Es ist ratsam, noch das ein oder andere Wort über Definitionsbereiche zu verlieren. (z.B. Definitionsbereich im unendlich hohen Potentialtopf)

möglicher Arbeitsauftrag:

Arbeitszeit: 15min, **Hilfsmittel:** keine

S sollen in Gruppen überlegen, wie die Wellenfunktion einer harten makroskopischen Kugel aussehen muss. Die Gruppen müssen ihre Resultate vortragen und argumentieren. **ACHTUNG:** Es wird die Frage auftauchen, warum denn das kugelförmige Elektron nicht auch so beschrieben werden kann.

7.5. Die Schrödingergleichung

Bemerkung: Wir behandeln die SG nur sehr oberflächlich. Es wird darauf verzichtet, Operatoren und deren Eigenwerte einzuführen. Wer dies tun möchte, sei wieder auf das milq-Unterrichtskonzept verwiesen [5]. Wir halten dieses in dem Punkt aber für zu umfangreich für die zur Verfügung stehende Zeit. Wir versuchen lediglich, zu zeigen, dass auch die S einfache Beispiele mit der ihnen zur Verfügung stehenden Mathematik nachvollziehen können.

Ganz grundsätzlich kann man die Schrödingergleichung (abgekürzt SG) nicht ableiten. Schrödinger hat sie gefordert, wie einst Bohr seine Postulate. Sie ist DIE Gleichung der QM!

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) \quad (20)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \cdot \psi(x, t) \quad (21)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (22)$$

Die oberen 3 Gleichungen sind äquivalent. Der Einfachheit halber wollen wir uns an die 2. Gleichung halten. Wir werden keine Lösungen dieser Gleichung herleiten, aber durch einfaches differenzieren zeigen, dass Lösungen für bestimmte Potentiale existieren, und dass diese diskret sind. Zunächst aber noch folgendes:

Nehmen wir eine DeBroglie-Welle (Gleichung (12)) und setzen sie in die SG ein.

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} + V(x) \cdot A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\
\left(i\hbar \cdot -\frac{i}{\hbar} \cdot E\right) \cdot A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{i}{\hbar} \cdot p\right)^2\right) \cdot A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} + V(x) \cdot A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\
E \cdot A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} &= \left(\frac{p^2}{2m} + V\right) \cdot A_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\
E &= E_{kin} + V
\end{aligned} \tag{23}$$

Für ein freies Teilchen mit Energie E , das sich in einem Potential V bewegt, beschreibt die SG also so etwas wie die Energieerhaltung. Mit dieser Herleitung, kann man sich, sofern man die DeBroglie Materiewelle im Kopf hat, die SG ganz einfach wieder anschreiben. Ausserdem zeigt sie an einem einfachen Beispiel, wie die Differentialoperatoren anzuwenden sind.

7.6. Unbestimmtheitsrelation

Wie schon bei den Wellenfunktionen erwähnt, lässt sich jeder QM-Zustand sowohl im Orts- als auch im Impulsraum darstellen. Diese beiden Darstellungen sind über eine mathematische Transformation, die Fouriertransformation (abgekürzt FT), eindeutig verknüpft. Diese ist eigentlich nicht wirklich schwierig, wird hier aber aus Zeitgründen weggelassen.

$$\psi(x, t) \xleftrightarrow{FT} \psi(p, t)$$

In den nachfolgenden Plots ist dargestellt, wie dieselbe Wellenfunktion im Ort und im Impulsraum aussieht.

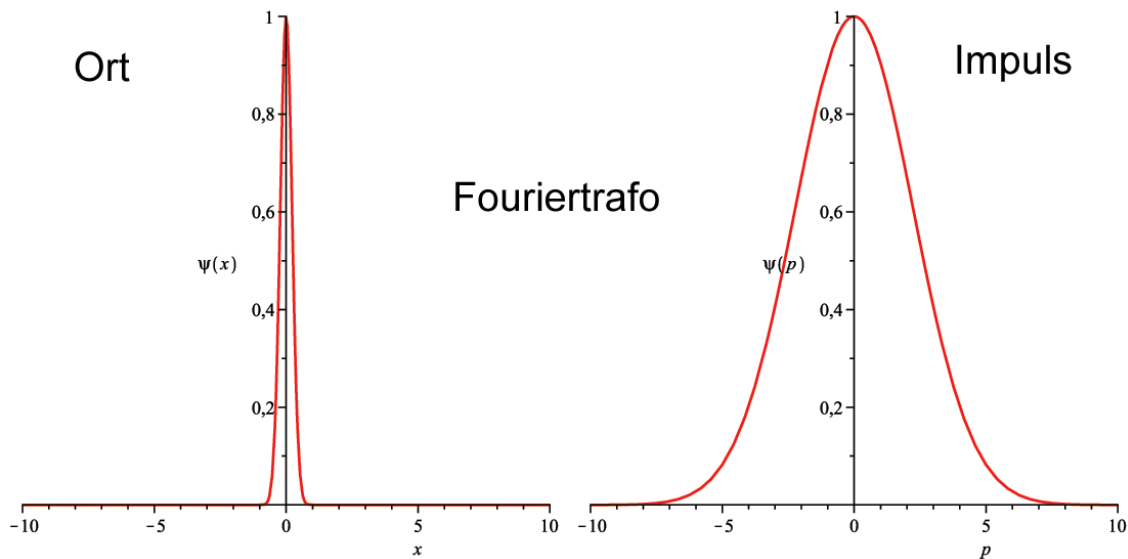


Abbildung 8: Orts- und Impulsraum
Erstellt mit Maple

Man beachte, dass die Wellenfunktion im Ortsraum sehr scharf ist, d.h. das Objekt ist nur über einen sehr kleinen Ort verschmiert. Seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist fast überall ungefähr Null, ausser in einem sehr kleinen Bereich. Es sieht fast so aus, als wäre das Objekt nur an einem Ort. Sieht man sich allerdings die Wellenfunktion im Impulsraum an, dann ist diese sehr breit. Der Impuls ist sehr verschmiert! Man tut sich sehr schwer eine Aussage über den Impuls zu treffen.

Dies ist nicht, wie man vielleicht meinen könnte, nur für diese Wellenfunktion der Fall, sondern für jede Wellenfunktion gültig. D.h. also auch für alle QM-Objekte! Die Ursache liegt eigentlich in der Mathematik (FT), die Wirkung zeigt sich aber im ganzen Universum. Man nennt diesen Effekt die **Unbestimmtheitsrelation** oder manchmal auch **Unschärferelation**.

Wir möchten hier zwei Varianten der Unbestimmtheitsrelation geben:

Orts-Impuls Unschärfe

Dies ist die bekanntere der beiden. Sie lautet:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h \quad (24)$$

Das bedeutet, die Unschärfe des Ortes (eigentlich die Standardabweichung der Ortsdichte) multipliziert mit der Unschärfe des Impulses (eigentlich die Standardabweichung der Impulsdichte) ist immer grösser als die Planck'sche Konstante. Qualitativ kann die Unschärfe als Mass für die Verschmiertheit verstanden werden.

Energie-Zeit Unschärfe

Diese rührt auch wieder von der Fouriertransformationen her. Man sieht das auf den ersten Blick vielleicht nicht. Bei genauerer Betrachtung fällt aber auf, dass die Energie ja $E = h \cdot \nu$ ist. Die Frequenz ν ist die zur Zeit t reziproke Grösse. Solche reziproke Grössen lassen sich über Fouriertransformationen verknüpfen. Die Energie-Zeit Unschärfe lautet dann:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h \quad (25)$$

Experiment: Wir wollen mit einem Experiment die Energie-Zeit- bzw. die Frequenz-Zeit- Unbestimmtheitsrelation deutlich machen. Dazu benötigen wir nur ein einfaches mathematisches Pendel. Im ersten Teil des Experiments, teilen wir die S in 3 Gruppen. Jede dieser Gruppen muss eine Messreihe an dem Pendel durchführen. Die erste Gruppe darf nur eine Periode des Pendels stoppen. Die zweite Gruppe stoppt 3 Perioden. Die dritte Gruppe darf ganze 10 Perioden stoppen. Jede Gruppe ermittelt die Periodendauer und errechnet die Frequenz des Pendels. Anschliessend berechnen wir gemeinsam mit der Klasse die Frequenz des mathematischen Pendels nach ganz normaler klassischer Kinematik. Wir vergleichen die Werte, und stellen fest (im Normalfall), dass die Gruppe, die am längsten messen durfte, am nächsten bei der tatsächlichen Frequenz ist. D.h., man muss lange hinschauen, um die Frequenz möglichst genau bestimmen zu können. D.h., Δt ist gross, und $\Delta \nu$ ist klein (Nicht mit Messfehlern verwechseln!). Dies ist eigentlich nicht wirklich ein Resultat der Unschärferelation, verknüpft aber reziproke Grössen und förderte das Verständnis.

Einen etwas umfassenderen Artikel zum Thema von Rainer Müller und Hartmut Wiesner findet man unter (Dieser ist aber eher etwas für Lehrpersonen):

<http://homepages.physik.uni-muenchen.de/~milq/kap7/images/quant5.pdf>

8. Diskrete Spektren

Wie in der Einleitung bereits festgestellt, sind die Energieniveaus in Atomen diskret. Wir wollen in diesem Abschnitt, an einem sehr einfachen Beispiel selber nachrechnen, warum dies so ist. Dazu reicht die Schulmathematik aus. Zumindest können die S die Schritte nachvollziehen.

8.1. Das Separieren der Zeit

Wir möchten hier zeigen, wie man bei zeitunabhängigen Potentialen die Wellenfunktion faktorisieren kann. Gegeben ist die 1-dimensionale SG:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) \quad (26)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad \text{mit} \quad \hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right)$$

Wir machen nun einen Produktansatz für die Wellenfunktion $\psi(x, t) := \psi(x) \cdot f(t)$, und setzen diesen in die SG ein.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) \cdot f(t) = \hat{H} \psi(x) \cdot f(t) \quad (27)$$

$$i\hbar \cdot \frac{f(t)'}{f(t)} = \frac{\hat{H} \psi(x)}{\psi(x)} \Rightarrow \begin{cases} i\hbar \cdot \frac{f(t)'}{f(t)} = E \\ \frac{\hat{H} \psi(x)}{\psi(x)} = E \end{cases}$$

Im letzten Schritt haben wir links nur die zeitabhängigen Funktionen, und rechts nur ortsabhängige. Die Gleichung kann für alle Zeiten und Orte nur dann erfüllt sein, wenn der rechte und linke Teil Konstant sind. Diese Konstante ist die Energie E . Dies führt uns zu nun zwei Gleichungen:

$$i\hbar \cdot f(t)' = E \cdot f(t) \quad (28)$$

$$\hat{H} \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (29)$$

Hat man die Konstante E gefunden lässt sich der Zeitanteil der Lösung einfach bestimmen zu:

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot E t} \quad (30)$$

Wir müssen nun also nur noch den Ortsteil der Gleichung (Gleichung (29)) lösen. Diese Lösung nennt sich die **stationäre Lösung**.

8.2. Das unendlich hohe Kastenpotential

Es ist folgende Situation gegeben: Ein zwischen 2 Wänden eingesperrtes Elektron kann sich frei bewegen. Die Wände sind allerdings unendlich hoch, d.h. es kann sich ausschliesslich zwischen den Wänden bewegen und nicht etwa teilweise in die Wand tunneln. Diese Situation lässt sich wieder durch das in Abbildung 6 gezeigte Potential beschreiben. Um leichter folgen zu können, ist dieses hier noch einmal dargestellt.

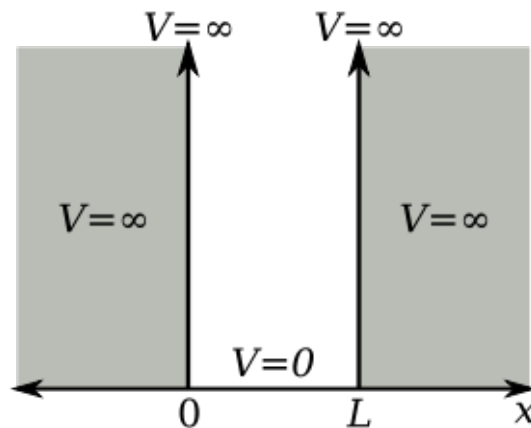


Abbildung 9: unendlich hohes Kastenpotential
Quelle: Wikipedia [13]

Das Potential ist also entweder Null, oder unendlich. Wie schon erwähnt kann sich das Elektron nicht in den Bereichen aufhalten, wo das Potential unendlich ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dort also Null. Das bedeutet, dass der Definitionsbereich für die Wellenfunktion das Intervall $[0, L]$ ist.

8.3. Die Randbedingungen

Die Randbedingungen sind eine zusätzliche Vorgabe, die mögliche Lösungen der SG einschränken. Ihre Herkunft ist mathematischer Natur. In Worten lauten sie:

- Die Wellenfunktion muss stetig sein
- Die 1. Ableitung der Wellenfunktion muss stetig sein, sofern das Potential nicht singulär ist.

Das heisst, dass der rechts- und linksseitige Grenzwert der Wellenfunktion, und der 1. Ableitung der Wellenfunktion, an jedem Punkt des Definitionsbereiches gleich ist. Wir können davon ausgehen, dass wir als Lösungsansätze nur stetige Funktionen verwenden, müssen uns also innerhalb des Definitionsbereiches keine Gedanken darüber machen. Anschauen muss man sich aber unbedingt die Ränder des Definitionsbereiches. In unserem konkreten Beispiel sind das die Orte $x = 0$ und $x = L$. Die 1. Ableitungen an diesen Rändern müssen ausnahmsweise nicht stetig sein, da das Potential an diesen Stellen singulär ist. Wir kriegen so also nur 2 Bedingungen für die stationäre Lösung der SG. Diese reichen aber aus:

$$\psi(x = 0) = \psi(x = L) = 0 \quad (31)$$

8.4. Die stationäre Lösung

Wir müssen nun also folgende Gleichung lösen, und dabei die Randbedingungen einhalten:

$$\frac{\partial^2}{\partial^2 x} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi(x) \quad (32)$$

Da wir uns im Inneren des Kastens befinden, ist $V(x) = 0$ und obige Gleichung vereinfacht sich zu:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial^2 x} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi(x) \quad (33)$$

Mit den $E = \frac{p^2}{2m}$ und $p = \hbar k$ wird die Gleichung noch einmal vereinfacht:

$$\frac{\partial^2}{\partial^2 x} \psi(x) = -k^2 \cdot \psi(x) \quad (34)$$

Diese Gleichung ist ein Differentialgleichung und kann gelöst werden. Eine Lösung ist

$$\psi(x) = A \cdot \sin(kx) \quad (35)$$

Dies kann man durch zweimaliges Differenzieren sehr leicht nachprüfen. Nun müssen wir aber noch die Randbedingungen nachprüfen. Man findet sehr leicht, dass nur für ganz bestimmte k die Randbedingungen erfüllt sind. Es gibt zwar unendlich viele Möglichkeiten, diese sind aber abzählbar!

$$k = \frac{\pi}{L} \cdot n, \quad n \in \{1, 2, 3, \dots\} \quad (36)$$

Schauen wir uns noch einmal an, wie denn k in die Gleichung kam, und mit der Energie E zusammenhängt:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2, \quad n \in \{1, 2, 3, \dots\} \quad (37)$$

Somit sind wir fertig! Wir fassen das Resultat noch einmal zusammen. Wichtig dabei ist, noch einmal festzuhalten, dass es zwar unendlich viele Lösungen gibt, diese aber abzählbar sind.

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2, \quad n \in \{1, 2, 3, \dots\} \\ \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L} \cdot n \cdot x\right), \quad n \in \{1, 2, 3, \dots\} \\ \psi_n(x, t) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L} \cdot n \cdot x\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot E_n t}, \quad n \in \{1, 2, 3, \dots\} \end{aligned} \quad (38)$$

Der Faktor $\sqrt{\frac{2}{L}}$ resultiert aus der Normierungsbedingung, und kann leicht nachgerechnet werden. **Man beachte zusätzlich, dass die Nullpunktsenergie E_1 ungleich Null ist.**

In folgendem Applet kann man sich eben gelöste Aufgabe für verschiedene Parameter plotten lassen.

<http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/13/vlu/spektroskopie/theorie/wechselwirkung.vlu/Page/vsc/de/ch/13/pc/spektroskopie/theorie/wechselwirkung/kastenpot.vscml.html>

Dies sind nette Applets für Lösungen der 1-dim SG einfacher allgemeiner Potentiale.

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

<http://web.physik.rwth-aachen.de/harm/aixphysik/quanten/Schroedinger/index.html>

Motivation: Abschliessend sollte nicht unerwähnt bleiben, dass es sich hierbei nicht um ein Kindergartenbeispiel handelt. Die sehr kurzreichweitigen Kernkräfte werden näherungsweise tatsächlich als Kastenpotentiale modelliert!

9. Stabilität der Atome

Wir haben uns in der Einleitung die Frage gestellt, warum das Universum bzw. die Atome stabil sind. Klassisch, wenn man das Planetenbahnenmodell hernimmt, und berücksichtigt, dass bewegte Ladungen Energie verstrahlen, müsste das Elektron in den Kern stürzen. Das tut es aber nicht. Dies wollen wir hier etwas näher bringen. Dazu schauen wir uns zuerst das Potential für das Elektron im Atom an:

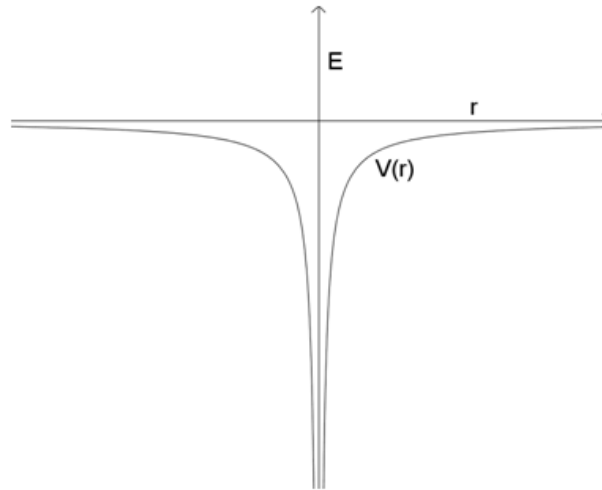


Abbildung 10: Coulomb Potential Elektron-Kern
Erstellt mit: GeoGebra

Klassisch muss das Elektron in diesem Potential hinunterrutschen und zum Kern gezogen werden, da die Kraft zum Kern wirkt. Jetzt kommt aber die Unbestimmtheitsrelation zum tragen. Wenn das Elektron näher zum Kern rückt, wird dessen Ort immer stärker eingeschränkt. D.h. Δx wird klein. Da aber $\Delta x \cdot \Delta p \geq h$ gilt, muss Δp grösser werden. Dadurch gewinnt das Elektron an kinetischer Energie. Da die Gesamtenergie erhalten bleiben muss, kann es nur kinetische Energie gewinnen, wenn es potentielle Energie verliert. Es muss also im Potential wieder nach oben wandern. So stellt sich ein Gleichgewicht ein, und das Elektron verweilt stabil auf einer Energie. Diese Energie kann man auch wieder mathematisch bestimmen, was wir näherungsweise im folgenden Abschnitt machen wollen.

10. Das Wasserstoffatom

Ziel dieses Abschnitts ist ein qualitatives Verständnis des Wasserstoffspektrums.

Es ist das einfachste aller Atome, da es nur ein Proton und ein Elektron enthält, welche sich auf Grund der Coulomb- Wechselwirkung anziehen. Das Proton ist fast zweitausendmal schwerer als das Elektron. Da sich das Elektron in einem sehr kleinen

Raumbereich konzentriert können wir also annehmen, dass es sich im Coulomb- Potenzial des Kerns aufhält.

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (39)$$

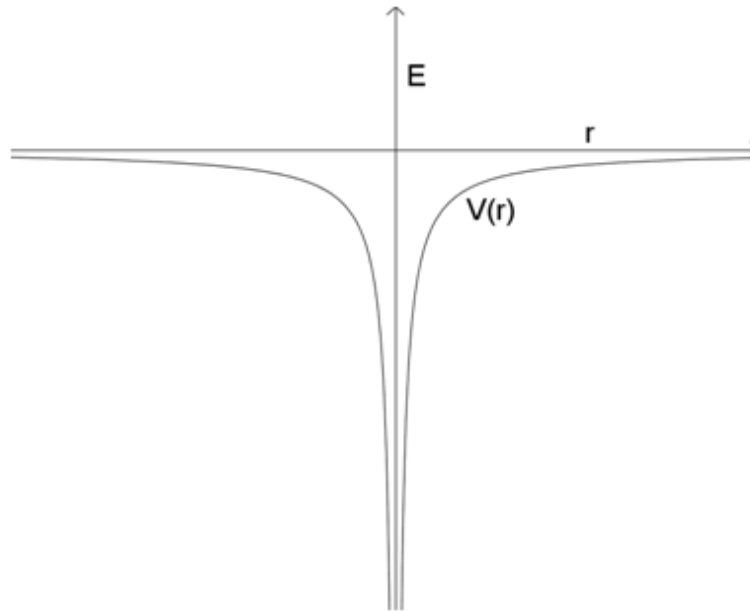


Abbildung 11: Coulomb Potential Elektron-Kern
Erstellt mit: GeoGebra

Die Energieniveaus des Elektrons lassen sich mit Hilfe der Schrödinger- Gleichung berechnen. Nun stellt sich heraus, dass die Lösung dieses Problems mit Mitteln der Schulmathematik nicht berechenbar ist. Eine mögliche Lösung wäre, ein einfacheres Potenzial zu verwenden. Wir müssen nun das Potential so annähern, dass wir die Schrödinger-Gleichung exakt lösen können. Ein mögliches Potential ist ein drei dimensionales Kastenpotential. Wir können die Breite $2R$ und die Energiedifferenz V_0 variieren. Die einzelnen Parameter werden so gewählt, dass dieser Potentialtopf möglichst gut auf das Problem des Coulomb- Potentials passt.

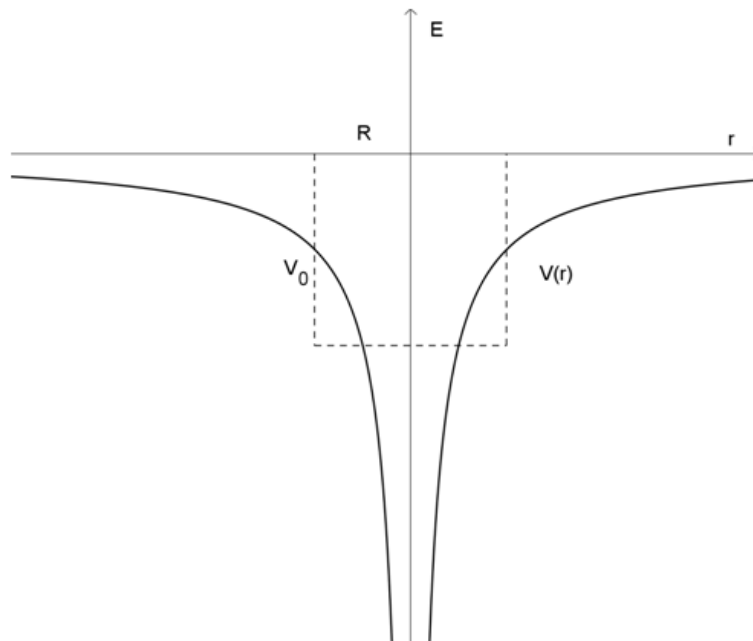


Abbildung 12: Coulomb Potential - Kastennäherung
Erstellt mit: GeoGebra

10.1. Herausfinden der Parameter R und V0:

Es wird keine Quantenmechanik benötigt um auf diese Parameter zu kommen.

10.1.1. Ermitteln der Potentialtopf- Breite R

In der klassischen Physik, kann sich eine gebundene Ladung im Coulomb- Potential nicht beliebig weit nach aussen bewegen (d.h. Energie $E_{ges} < 0$). Leicht ersichtlich ist dies im Gravitationsfeld der Erde. Bei einem senkrechten Wurf z.B. gibt es einen gewissen Abstand R am Umkehrpunkt, wo die kinetische Energie Null ist, also die gesamte Energie aus der potentiellen Energie besteht.

$$E_{ges} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (40)$$

Für den Radius würde dies bedeuten:

$$R = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E_{ges}} \quad (41)$$

Die Lage des Umkehrpunktes hängt also von der Gesamtenergie ab.

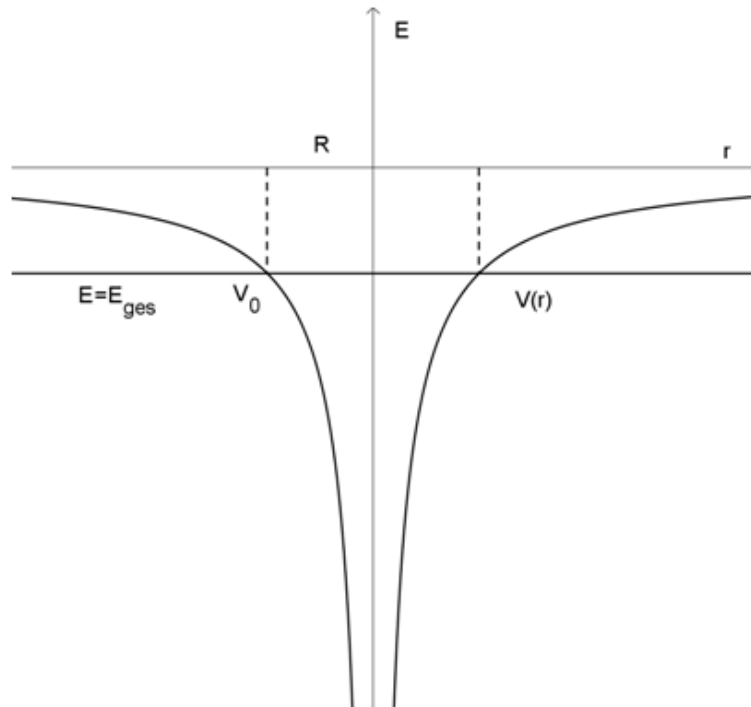


Abbildung 13: Coulomb Potential - Kastennäherung 2
Erstellt mit: GeoGebra

Damit haben wir einen Bereich gefunden, in welchen sich das Elektron aufhält. Der Potentialtopf hat die Breite $2R$. Innerhalb dieses Bereiches wird das Potential in allen drei Dimensionen als konstant angenommen. Der Aussenraum dieses Bereiches ist unzugänglich. Wir sprechen von unendlich hohen Potentialwänden.

10.1.2. Ermitteln der Potentialtopf-Tiefe V_0

Für die Tiefe des Potentialtopfes verwenden wir nun die mittlere Tiefe des Topfes. Bei der mittleren Tiefe gibt es ein Problem, und zwar dass das Potential im Nullpunkt divergiert. Diese Divergenz ist aber nicht echt, da durch die endliche Ausdehnung des Kerns das Potential irgendwann abgeschnitten wird und einen endlichen Wert annimmt. Man kann auch sehen, dass das Potential negativ und betragsmässig grösser ist als E_{ges} . Wir nehmen nun als Abschätzung an, dass V_0 den Wert des Coulomb-Potentials an der Stelle $R/2$ hat.

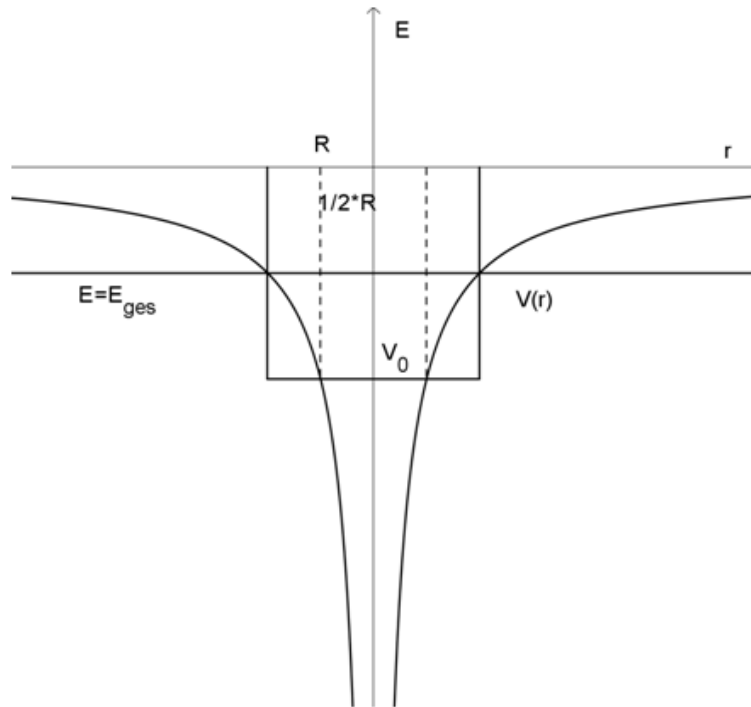


Abbildung 14: Coulomb Potential - Kastennäherung 3
Erstellt mit: GeoGebra

$$V_0 = V\left(r = \frac{R}{2}\right) \quad (42)$$

Unter Verwendung des Coulomb- Potentials, erhalten wir:

$$V_0 = \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0} \cdot 2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0 E_{ges}}{e^2} \quad (43)$$

Durch vereinfachen ergibt sich:

$$V_0 = 2 \cdot E_{ges} = -2 \cdot |E_{ges}| \quad (44)$$

Damit ist die Tiefe des Potentials gegenüber des Nullpunktes bestimmt. Als nächstes wollen wir quantenmechanisch die Energiewerte berechnen.

10.2. Bestimmen der Energiewerte

Zusammenfassung des bisher eingeführten:

Zur Modellierung des Coulomb. Potentials verwenden wir ein dreidimensionales kastenförmiges Potential mit unendlich hohen Wänden. Der Boden befindet sich bei $V_0 = 2 \cdot E_{ges}$ und

$$R = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |E_{ges}|} \quad (45)$$

für die Energieniveaus im dreidimensionalen Potentialtopf verwenden wir die Gleichung:

$$E_{ges} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2R)^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) + V_0 \quad (46)$$

Zur Vereinfachung beschränken wir uns auf Gleichungen, in denen $n_x = n_y = n_z = n$ ist. (d.h. es wird keine Richtung bevorzugt)

Für die Energieniveaus erhalten wir:

$$E_{ges} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2R)^2} \cdot 3n^2 + V_0 \quad (47)$$

Nach einsetzen von R und V_0 erhalten wir:

$$E_{ges} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \cdot 3n^2 \cdot \frac{(4\pi\epsilon_0)^2 E_{ges}^2}{4 \cdot e^2} + 2E_{ges} \quad (48)$$

Und schliesslich erhalten wir durch unser Modell die Gleichung:

$$E_{ges} = -\frac{16}{3\pi^2} \frac{me^2}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (49)$$

Dieses Modell sagt uns bereits die Quantisierung des Wasserstoffatoms voraus. Die Quantenzahlen n durchlaufen die Zahlen 1,2,3...

Zu jedem Wert n gehört eine Energie und damit ein Zustand, den das Elektron einnehmen kann.

Durch die Abhängigkeit:

$$E_{ges} \sim \frac{1}{n^2} \quad (50)$$

$E_{ges} < 0$ d.h. sie sind gebunden. Je höher n wird umso höher ist die Energie für grosse n rücken die Werte immer weiter zusammen und nähern sich dem Wert $E_{ges} = 0$ an.

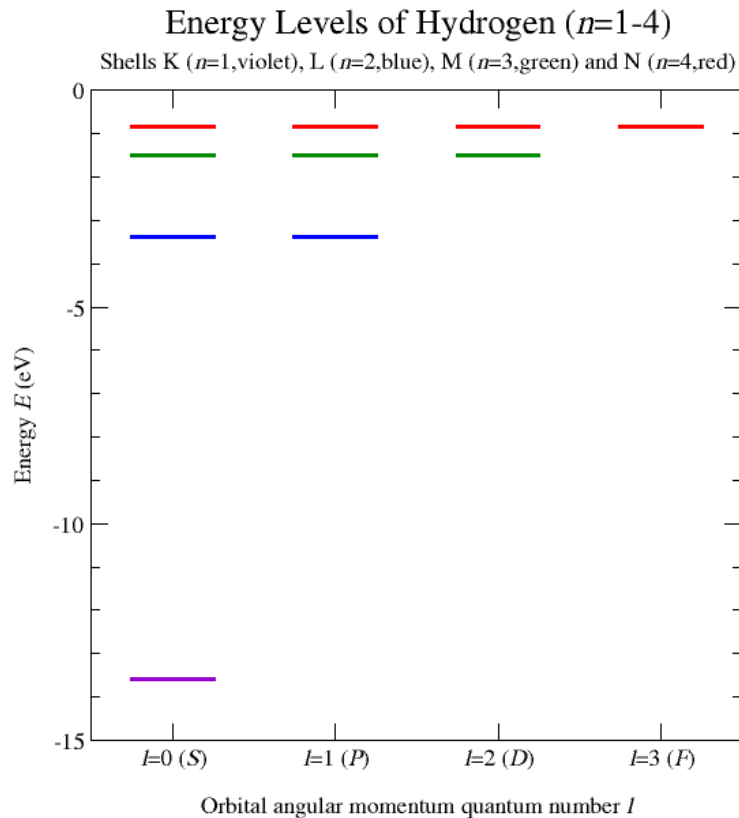


Abbildung 15: Energie-Niveaus des Wasserstoffatoms

Quelle: Wikipedia [11]

Diese Eigenschaften werden durch die exakte quantenmechanische Rechnung bestätigt. Für die Formel für die Gesamtenergie im Wasserstoffatom können wir nun folgende Formel annehmen:

$$E_{ges} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (51)$$

Für $n = 1$ ergibt sich der Zustand niedrigster Energie, dieser wird Grundzustand genannt und ist bei Wasserstoff $E_{ges} = -13,6\text{eV}$.

(Quelle der Herleitung: milq: Münchener Internetprojekt zur Lehrerfortbildung in Quantenmechanik [3])

möglicher Arbeitsauftrag: Berechnung einzelner Energiewerte des He+ Atoms

Arbeitszeit: 1 Unterrichtseinheit, **Hilfsmittel:** Herleitung zum Wasserstoffatom
 Leite die Gleichung für die Gesamtenergie eines He+ Atoms her und bestimme die Energiewerte für die Quantenzahlen n von eins bis vier. (Bemerkung: ein He+ Atom hat zwei Protonen und zwei Neutronen im Kern und ein Elektron in der Schale)
 Zeichne anschliessend deine Ergebnisse in ein Diagramm.

10.3. Ausblick zur exakten Lösung

Den Kern stellen wir uns als punktförmig und sehr schwer gegenüber der Elektronenmasse vor. Wir betrachten zunächst die Zustände eines geladenen Teilchens der Masse m_0 in einem ortsfesten Coulomb- Potential. Später muss der Koordinatenursprung in den Schwerpunkt des Systems Elektron- Kern angesetzt werden und als Masse muss die reduzierte Masse verwendet werden. Das Problem ist kugelsymmetrisch, deshalb verwenden wir in diesem Fall Kugelkoordinaten. Der Zusammenhang der Kugelkoordinaten r, θ, Φ mit den kartesischen Koordinaten ist:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \Phi \\y &= r \sin \theta \sin \Phi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}\tag{52}$$

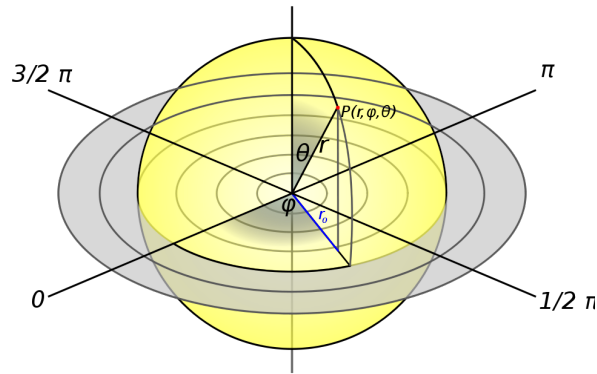


Abbildung 16: Kugelkoordinaten
Quelle: Wikipedia [14]

Wie schon bei der Separation der Zeit, spaltet man nun die Wellenfunktion in einen Radialen-, und einen Winkelanteil auf. Dies führt dann zu Differentialgleichungen, deren Lösung man kennt.

$$\psi(r, \theta, \Phi) = R(r) Y(\theta, \Phi)\tag{53}$$

Auf weiter Mathematik wird nun verzichtet. Nach längerer und komplizierter Rechnerei ergeben sich wieder diskrete Lösungen. Allerdings hängen diese nun von drei sogenannten Hauptquantenzahlen ab. Dies rührt im Wesentlichen von den 3 Raumdimensionen her. Sie heißen

- Die Hauptquantenzahl $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$
- Die Drehimpulsquantenzahl $l \in \{0, 1, 2, \dots, n - 1\}$
- Die magnetische Quantenzahl $m \in \{-l, -l + 1, \dots, l\}$

In den nachfolgenden Applets kann man sich für die niedrigsten Zustände die Wellenfunktionen plotten lassen. Beachte, dass wir nur Projektionen darstellen können, da die Wellenfunktionen Funktionen in drei Raumdimensionen sind.

<http://web.physik.rwth-aachen.de/harm/aixphysik/quanten/Mark/hydrogen.html>
<http://web.physik.rwth-aachen.de/harm/aixphysik/quanten/Mark/hydrogendensity.html>

11. Allgemeine Atome

Bei anderen Atomen, welche nicht mehr so einfach sind, wie das Wasserstoffatom lassen sich die Gleichungen nicht mehr analytisch lösen. Es müssen sehr viele Näherungen gemacht werden. Zur Charakterisierung der Form der räumlichen Verteilung der Elektronen verwenden wir den Begriff „Orbital“ (lat. orbis = Kreis). Elektronen kreisen also nicht auf bestimmten Bahnen, sondern erfüllen einen bestimmten Aufenthaltsbereich. Jedem Orbital entspricht eine „Orbitalenergie“. Zu ihrer Beschreibung verwendet man die ganzen Zahlen $n=1,2,3,\dots$. Für alle Atome, die mehr als ein Elektron besitzen, genügt die Hauptquantenzahl n allein nicht, um die Energiezustände zu beschreiben. Die Energiezustände dieser Atome müssen durch zusätzliche Angaben charakterisiert werden. s-, p-, d- und f- Orbitale: Als man Spektren mit immer genaueren Methoden untersuchte, liessen sich häufig einzelne Linien eines Spektrums in mehrere, dicht nebeneinander liegende Linien zerlegen. Es müssen daher innerhalb der Atomhülle mehrere dicht nebeneinander liegende Energiezustände existieren, die alle zu ein und derselben Hauptquantenzahl gehören. Zur Kennzeichnung der Energie- Unterniveaus bzw. Orbitale verwendet man die Kleinbuchstaben s, p, d und f (sharp, principal, diffuse, fundamental sind Bezeichnungen aus der Spektroskopie). Die einzelnen Orbitale haben unterschiedliche Formen. s- Orbitale sind kugelsymmetrisch, p- Orbitale sind hantelförmig. Sie liegen in den drei Raumachsen eines Koordinatensystems dessen Ursprung der Atomkern ist. Die drei p- Orbitale haben den gleichen Energiegehalt und unterscheiden sich nur durch ihre Lage im Raum. d-, und f- Orbitale haben kompliziertere Formen.

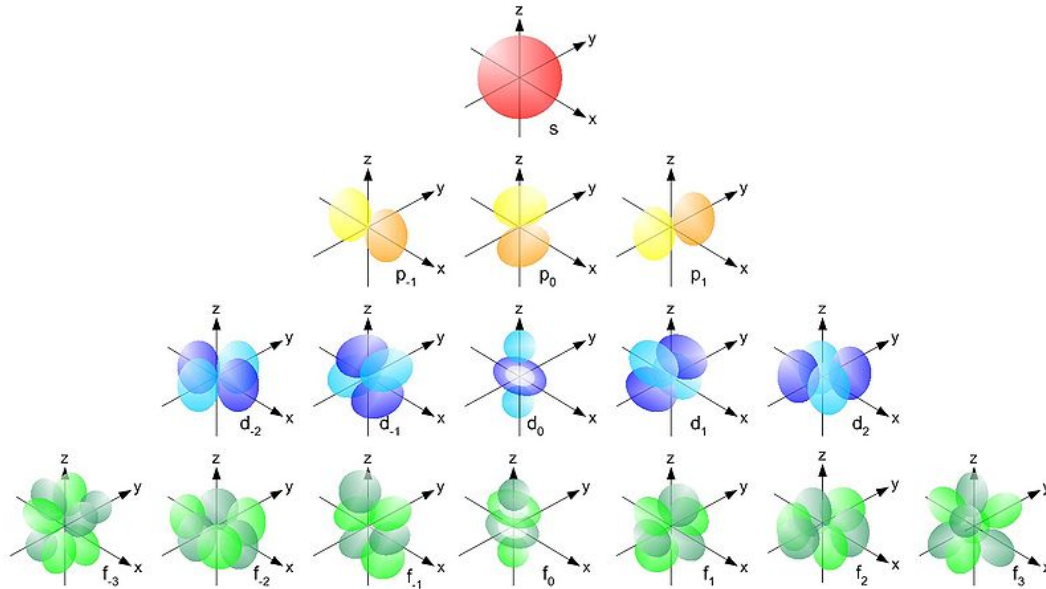


Abbildung 17: Elektronenorbitale
Quelle: Wikipedia [16]

In ein s- Orbital passen 2 Elektronen; in ein p-Orbital 6; in ein d-Orbital 10 usw... Die Zahl n , die Hauptquantenzahl gibt auch an, wie viele Orbitaltypen (Unterniveaus) ihr jeweils zugeordnet sind. Diese Zahl wird der entsprechenden Orbitalform (s,p,d,f) vorangestellt. z.B. bei $n=3$ gibt es drei Orbitaltypen wobei die Art der Orbitale 3s 3p 3d ist.

(Quelle: Chemie Aktuell [2])

11.1. Besetzung der Hüllen mit Elektronen

Jedes Elektron welches neu hinzugefügt wird versucht, in einen stabilen Zustand zu gelangen. Sowohl durch die Anzahl der Protonen und Neutronen im Kern, als auch durch die sich bereits in der Hülle befindlichen Elektronen, wird das Elektron in einem fest definierten Orbital seinen Platz finden. Elektronen füllen die Orbitale immer dort auf, wo der geringste Energiezustand erreicht werden kann. Erst dann werden höhere Energiezustände angenommen (z.B. 1s immer vor 2s). Wenn für ein Elektron mehrere Orbitale mit dem gleichen Energiezustand zur Auswahl stehen, wird immer noch das nicht voll besetzte Orbital gewählt (z.B. wird bei einem 2p Zustand zuerst jeder Raum einfach besetzt, bevor er doppelt besetzt wird).

Die Besetzung erfolgt nach dem Sogenannten **Madelung- Energieschema**:

Die Reihenfolge nach der die Elektronen die Orbitale besetzen wird durch die $n+l$ -Regel beschrieben (Erwin Madelung Regel). Diese Regel besagt, dass Orbitale mit einem kleineren $n+l$ - Wert vor Orbitalen mit einem grösseren Wert besetzt werden. Falls die

$n+l$ - Werte gleich gross sind, wird das Orbital mit kleinerem n - Wert zuerst gefüllt. Die Elektronen besetzen der Reihe nach folgende Orbitale:

1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f 5s 5p 5d 5f 6s 6p 6d 6f 7s 7p 7d 7f

Das Madelung- Energieschema kann nur auf neutralen Atome in ihrem Grundzustand angewendet werden. Ausnahmen:

Nicht immer halten sich die Elektronen an die mathematisch definierten Regeln. Beispiele für solche Atome wären: Kupfer, Chrom, Silber, Platin, Gold, Iridium, usw.

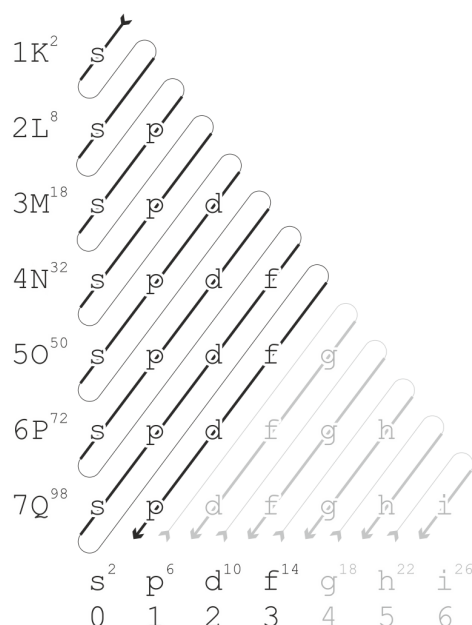


Abbildung 18: Madelung Regel

Quelle: Wikipedia [15]

Mittels dieser Regeln kann man versuchen das Periodensystem der Elemente zu verstehen. Die Besetzung des s- Orbitals einer neuen Schale entspricht dem Sprung in eine neue Periode. Innerhalb einer Periode (1. Und 2. Hauptgruppe, Ausnahme von Helium) werden zuerst die s- Orbitale und dann die p- Orbitale (6 Elektronen, 3. bis 8. Hauptgruppe) besetzt. Die Nebengruppen entsprechen dem Besetzen der d- Orbitale (10 Elektronen, 10 Nebengruppen). Die Lanthanoide und Actinoide entsprechen der Besetzung der f- Orbitale (14 Elektronen).

11.2. Beispiel zur Besetzung der Schalen

Notation:

Der Nummer der Schale folgt der Buchstabe für die Unterschale und hochgestellt die Anzahl der Elektronen in der Unterschale. Bei mehreren Unterschalen wird die gemeinsame Schale weggelassen. Aus $2s^22p^3$ wird $2s^2p^3$. Diese Schreibweise lässt sich noch weiter ab-

kürzen, indem man das Kürzel der vorangegangenen Edelgase in eckige Klammern setzt und dann die Unterschalen angibt, die noch zum gewünschten Element fehlen. Beispiel: Chlor: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ oder: $[Ne]3s^2 3p^5$ oder: $[Ne]3s^2 p^5$

(Quelle: Wikipedia [7])

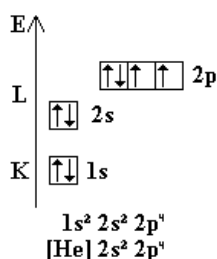


Abbildung 19: Elektronenkonfiguration von Sauerstoff

Quelle: Wikipedia [8]

möglicher Arbeitsauftrag: Besetzung der Hülle eines Kupfer Atoms

Arbeitszeit: ca. 25min, **Hilfsmittel:** Periodensystem der Elemente

Zeichne ein genaues Schema auf, wie die Hüllen in einem Kupfer Atom nach den behandelten Regeln mit Elektronen gefüllt werden. Beachte weiters dass alle Regeln in deiner Zeichnung enthalten sind. Schreibe anschliessend in Bezug auf dein Modell die Orbitalbesetzung auf und vereinfache diese so weit wie möglich.

Unter folgenden Links sind Applets zur Elektronenkonfiguration angegeben:

<http://lectureonline.cl.msu.edu/~mmp/period/electron.htm>

<http://www.chemcollective.org/applets/pertable.php>

<http://www.colorado.edu/physics/2000/applets/a2.html>

12. Praktischer Nutzen der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik gibt es viele Erfindungen, welche wir täglich verwenden. Ohne den Tunneleffekt, würde es keine moderne Elektronik geben und auch kein Rastertunnelmikroskop. Ohne stimulierte Emission von Photonen gäbe es keinen Laser im CD-Player oder auch kein ultragenaueres Massband in der Forschung. Ein noch relative neues Hilfsmittel der Physiker und Chemiker ist der Femtosekunden- Laser, dessen ultrakurze Lichtblitze es erlauben, chemische Reaktionen einzelner Atome und Moleküle in Zeitlupe zu verfolgen.

Die Bedeutung der Quanteneffekte wird aber in Zukunft noch wachsen. Ein Beispiel dafür sind die kommenden Anwendungen in der nichtlinearen Optik, oder in der

Computertechnik. In Quantencomputern zum Beispiel liessen sich viele Rechenoperationen gleichzeitig durchführen, wenn statt traditioneller „Bits“ quantenphysikalische „Qubits“ verwendet werden.

Ein weiteres Beispiel wäre die Quantenkryptographie, die zu einem sicheren Verschlüsselungssystem führen könnte.

Dies waren nur einige wenige Beispiele wo man aber schon erkennen kann, dass die Quantenmechanik in unserem täglichen Leben bereits eine wichtige Rolle spielt. In der Zukunft wird die Quantenmechanik immer wichtiger werden.

(Quelle: Welt der Physik [1])

möglicher Arbeitsauftrag:

Arbeitszeit: 1 Unterrichtseinheit, **Hilfsmittel:** Computer mit Internet

Finde heraus in wie weit die Quantenmechanik bereits in unserer Gesellschaft verwendet wird. Versuche möglichst viele technische Anwendungen zu finden, und auch zu klären wie diese funktionieren und in wie weit die Quantenmechanik dort verwendet wird.

Präsentation der Ergebnisse:

Arbeitszeit: 1 Unterrichtseinheit

In der nächsten Stunde kann in Form einer Gruppenarbeit ein Austausch des recherchierten erfolgen und mittels kleiner Vorträge vor der Klasse die Ergebnisse gesammelt werden. Die Lehrperson kann sich die Ergebnisse aufschreiben und eine Übersicht für die SchülerInnen zusammenstellen.

13. Der Modellcharakter der Quantenmechanik

Diskussion mit der Klasse: Wer findet die QM seltsam? Wer glaubt, dass das was wir eben gelernt haben stimmt? Wer glaubt, dass das nur Mathematik ist, und nichts mit der Wirklichkeit zu tun hat?

Die Quantenmechanik ist zurzeit alles andere als klar und vollständig erforscht. Man kann nur erkennen, dass die Konzepte, welche aufgestellt wurden ausserordentlich gut auf jeweilige Probleme Passen. Das heisst aber nicht, dass die Modelle alle so stimmen. Sie stimmen nur so lange, bis irgendwann jemand diese Modelle widerlegen kann. Man nennt dies „falsifizieren“. Generell kann man sagen, dass in der Physik nicht die Welt erklärt wird. Es werden Gesetze aufgrund von Versuchsreihen aufgestellt und so versucht die Natur möglichst gut zu Beschreiben.

13.1. Bemerkungen zur Modellbildung

- Als erstes müssen Phänomene ausgewählt werden, welche man verstehen will
- Danach wird dazu ein Modell erfunden
- Modell mit geeigneten mathematischen Objekten und Relationen verknüpfen
- Logisches schliessen: es sollen weitere Relationen zwischen den Objekten gefunden werden, welche im Ausgangsmodell bereits enthalten waren
- Interpretation: Man muss zwischen realer Welt und Modellwelt unterscheiden. Man muss überprüfen in wie weit das Modell auf die reale Welt zutrifft, ob das Modell überhaupt passt. Erst dann hat sich die Theorie bewährt. Wenn das Modell nicht zutrifft, muss man es so lange abändern, bis es passt.

Grundsätzlich kann man sagen dass ein Modell „so“ in der Natur nicht vorkommt, das Modell beschreibt nur einen möglichst grossen Satz an Phänomenen. (Quelle: Mag. Dr. Wolfgang Dür; Vorlesung: Didaktik der Theoretischen Physik; Modellbildung)

14. Fragestunde

Nach dieser Unterrichtsreihe, empfiehlt es sich, eine Fragestunde zu veranstalten. Dabei dürfen die S alles zum Thema fragen was sie möchten. Es gibt keine dummen Fragen! Auch die Lehrperson darf fragen, in dieser Stunde aber keine Antworten bewerten. Wichtig ist, die Fragen und Antworten in irgendeiner Weise schriftlich festzuhalten.

Vorschlag: Auf der linken Tafelhälfte darf jeder, der eine Frage hat, diese hinschreiben. Antworten werden entweder von den S oder vom L auf der rechten Tafelhälfte niedergeschrieben. Ist die Tafel voll, wird ein Foto gemacht.

Ziel ist es einerseits, ein Feedback für den eigenen Unterricht zu kriegen (wie kommt das Thema bei den S an), andererseits gibt es den S die Möglichkeit, noch einmal Unklarheiten zu beseitigen. Rege Teilnahme der S ist erwünscht! Die Sitzordnung darf/sollte aufgelöst werden.

15. Beurteilung

Wir finden es wäre unglücklich bei diesem Thema einen schriftlichen Test zu machen. Dies deshalb, weil wir keinen Wert darauf legen, ob die S die Mathematik hinter dem Modell behalten haben. Diejenigen die diese behalten könnten, hätten sie höchstwahrscheinlich 2 Wochen nach dem Test wieder vergessen, ganz einfach deshalb, weil die S diese in ihrem Leben nie brauchen werden. Wie bereits erwähnt, sind unsere Ziele andere. Unsere Meinung nach empfiehlt es sich, bei den von uns beabsichtigten Lernzielen, öfters

kleine Arbeitsnotizen zu machen. Wir empfehlen, die ersten 5-10 min einer Stunde für eine solche zu opfern. Diese sollte in etwa so ablaufen:

L fragt gezielt einzelne Schüler über Inhalte der letzten paar UE. Wichtig dabei ist, auf Verständnis zu fragen. Es sollten keine Formeln auswendig gelernt werden müssen! Man kann die Fragen in ein kleines Spiel verpacken: Wenn der/die gefragte SchülerInn die Antwort nicht weiss, darf er/sie die Frage an einen Kollegen weitergeben. Dieser muss dann antworten oder darf weitergeben. Dies geht solange, bis die Frage von einem S beantwortet wird. Es wird zudem ein Schlüssel vereinbart, der über die Note bestimmt. (z.B.: 5 richtige Antworten wären ein Sehr Gut, 4 richtige ein Gut, usw.) (Die Spielregeln sollten vorher mit den S abgesprochen werden). Dieses Spiel fördert die Aufmerksamkeit der restlichen Klasse, da jeder in jedem Moment an der Reihe sein könnte. Ausserdem wird negative Mitarbeit vermieden. Die Festlegung des Schlüssels richtet sich je nach Klassengrösse und Leistungsvermögen der S. Durch gezielte Fragen an S mit Verständnisproblemen, hat die Beurteilung so auch einen individuellen Charakter.

Teil III.

Nachbereitung

16. Schülervorstellungen

Welche Schülervorstellungen und besondere Probleme sind erwartbar?

Generell denken S oft, dass Wissenschaften wie Mathematik aber auch Physik längst abgeschlossen und vollständig erforscht sind. Sie könnten sich schwer tun zu glauben, dass die QM nötig ist, um die Natur zu beschreiben. Ihre Erfahrungswelt ist eine klassische, da gibt es keinen unmittelbaren Bedarf nach QM. Die S könnten mit der Abstraktheit der QM überfordert sein. Sie können bestimmt dem Formalismen folgen, können aber wahrscheinlich nichts mit Wellenfunktionen anfangen. Die Vorstellung, dass ein Elektron eine Wahrscheinlichkeitsdichtewolke ist, wird sehr schnell wieder durch ein starres Kugelmodell ersetzt werden. Dies wird unterstützt durch viele semiklassische Darstellungen in Schulbüchern und sonstiger Literatur. Es wird sehr schwer sein, dass die S vom klassischen Modell abweichende Alternativen akzeptieren lernen. Die klassische Physik hat sich bewährt und ist leichter verständlich. Es ist auch kaum möglich mit den S Experimente zu machen, welche die QM belegen, und die klassische Mechanik widerlegen. Wenn man es schafft, dass die S akzeptieren, dass diese beiden Modelle parallel zu einander gute Theorien sind, hat man schon viel erreicht. Dies sollte auch ein Hauptaugenmerk sein.

17. Kompetenzberücksichtigung

Inwieweit werden unterschiedliche Kompetenzen der S berücksichtigt?

In dieser Unterrichtsreihe werden alle S gleichermassen angesprochen. Es wird versucht das Thema so interessant als möglich zu gestalten um möglichst alle SchülerInnen mitzunehmen, wenngleich klar ist, dass dies nicht möglich sein wird. In den einzelnen Kapiteln wird immer wieder versucht, Inhalte mit den S zusammen zu erarbeiten. Dies ist bei diesem Thema natürlich nur begrenzt möglich. Viele Inhalte müssen einfach frontal vorgetragen werden. Durch einen bewussten fragenden Vortrag können sich S mit Vorwissen einbringen und so zum gemeinsamen Erforschen des Stoffes beitragen. An einfachen Fragen wie: „Wieso kann man nicht einfach zur Sonne fliegen und schauen aus was sie besteht?“, werden Schüler angeregt nachzudenken aber auch angeregt nach Lösungen zu suchen und diese festzuhalten. Diese Methoden sind kompetenzorientiert, denn wer mehr weiss, kann auch mehr zum Erfolg des Unterrichts beitragen. Grundsätzlich ist es aber leider so, dass diese Unterrichtsreihe, manche Kompetenzen stärker bedient, als wie andere. S die gut in abstraktem Denken und Mathematik sind, werden sich wesentlich leichter tun, als S die dies eben nicht sind. Es wurde aber versucht, den, unserer Ansicht nach nicht wegzulassenden, Mathematikteil durch möglichst viele Alternativen nicht allzu schwer zu gewichten.

18. Entdeckendes Lernen

Inwieweit erlaubt das Szenario entdeckendes Lernen?

Es ist aufgrund des Themas sehr schwer, entdeckendes Lernen in grossem Masse durchzuführen. Man kann nicht einfach hergehen, und die S selbst das Wasserstoffatom erforschen lassen. Einerseits können sie keine Experimente diesbezüglich anstellen, und andererseits können sie keine Literaturrecherche auf eigene Faust unternehmen, da die Herleitungen ohne führende Hand für die meisten zu schwierig sein werden. Dennoch sollte versucht werden, bereits gelerntes **wiederzuentdecken!** Dazu sind die Applets sehr gut geeignet. In Kapitel 12: Praktischer Nutzen der Quantenmechanik, sollen sich die SchülerInnen im Internet über den Nutzen informieren, herausfinden wo die Quantenmechanik bereits verwendet wird und diese Erfindungen aber auch verstehen und später, nach Möglichkeit, erklären können. Dies ist zum Beispiel etwas, wo die S ohne weiteres selber Suchen und Forschen können.

19. Fördern der Argumentation

Wie wird das Argumentieren gefördert?

Argumentation wird immer dann gefördert, wenn die S viel aktive Dialogphasen haben. Wie bereits erwähnt, ist im überwiegenden Teil dieser Unterrichtsreihe die Lehrper-

son der aktive Part. Trotzdem lassen sich manche Arbeitsaufträge als Aufforderung zur Argumentation sehen. Man kann zum Beispiel die einzelnen Arbeitsaufträge als Nachbereitung von den S der Klasse vorstellen lassen. Auch hier spielt wieder das Kapitel 12 eine zentrale Rolle, denn durch das Vorstellen der technischen Erfindungen müssen die SchülerInnen natürlich auch erklären wo die Quantenmechanik dort zum tragen kommt. Schon alleine, wenn die S einen Laser erklären wollen muss den Mitschülern plausibel gemacht werden, wie dieser funktioniert, oder wo da Quantenmechanik drinsteckt.

20. Fördern der Artikulation

Wie wird die Artikulation stimuliert und organisiert?

Bei jedem Vortrag oder immer wenn man vor Menschen spricht, wird die Artikulation gefördert. Da wir generell versuchen die SchülerInnen so stark wie möglich miteinzubeziehen und dazu anregen, sich bei Fragestellungen zu melden, wird in gewisser Weise auch die Artikulation gefördert. Es ist immer erwünscht, manchmal sogar gefordert dass sich SchülerInnen melden und so zum Erfolg des Unterrichts beitragen. Verbesserung der Argumentation und Artikulation sind Ziele in diesem Thema. Generell sollte bei jedem Thema möglichst früh damit begonnen werden, den SchülerInnen eine möglichst physikalische Sprechweise beizubringen und ihnen den Unterschied bei Begriffen (z.B. Geschwindigkeit, Beschleunigung) zwischen dem alltäglichem Gebrauch und der physikalischer Bedeutung beizubringen.

21. Erwartbarer Lernertrag

Welche Erwartungen bestehen an den Lernertrag?

Die S haben ein grundlegendes Verständnis des QM-Atommodells mitbekommen und die Scheu davor verloren. Sie verstehen, dass die Quantenmechanik ein Modell ist, welches aber sehr gut auf die Phänomene der Natur passt. Sie akzeptieren, dass die Quantenmechanik als Ergänzung zur klassischen Physik steht, und nicht damit konkurriert, also dass diese beiden Modelle gleichzeitig gelten können, sie aber etwas andere Phänomene beschreiben. Die S wissen über praktischer Anwendungsbeispiele, dass die QM etwas sehr nützliches ist. Generell gehen wir davon aus, dass das Interesse am Anfang gross ist, mit steigendem Mathematikanteil aber nachlässt. Es ist nicht anzunehmen, dass bei mehr als zehn Prozent der S, die Herleitung des Wasserstoffatoms auch nur überblicksmässig hängenbleibt. Das ist aber nicht so wichtig. Wir erwarten uns aber allerdings, dass konzeptuell verstanden wurde, wie man ein Objekt in einem Potentialtopf modelliert.

22. Plan B

Wie sieht ein möglicher Plan B aus?

Kurz: Es gibt keinen. Es wird auch keiner nötig sein. Wenn in einer Klasse kein Internet zur Verfügung steht muss auf Applets, zumindest während der Stunde, verzichtet werden. Es kann auch sein, dass kein Computerraum für Recherchen zur Verfügung steht, dann könnte man diese aber als Hausübung aufgeben. Ansonsten sehen wir keine grösseren Probleme, da das meiste ausschliesslich von der Vorbereitung der Lehrperson abhängt.

23. Schlusswort

Wir sind überzeugt, mit diesem Skript Lehrpersonen, die sich wagen das QM-Atommodell zu unterrichten, unterstützen zu können. Leider hatten wir bis jetzt noch nicht die Möglichkeit, die Tauglichkeit im Unterricht zu prüfen. Deshalb würden wir uns über Feedback bzgl. Unterrichtserfahrungen sehr freuen.

Arzbacher Stefan, stefan.arzbacher[at]student.uibk.ac.at
Stadler Christopher, Christopher.Stadler[at]student.uibk.ac.at

Abbildungsverzeichnis

1.	Die Sonne	7
2.	Absorptionsspektrum - Fraunhoferlinien	8
3.	Planetenbahnen - Modell	9
4.	$1/r$ Potential	13
5.	Harmonisches Potential	14
6.	unendlich hohes Kastenpotential	15
7.	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	18
8.	Orts- und Impulsraum	20
9.	unendlich hohes Kastenpotential	23
10.	Coulomb Potential Elektron-Kern	26
11.	Coulomb Potential Elektron-Kern	27
12.	Coulomb Potential - Kastennäherung	28
13.	Coulomb Potential - Kastennäherung 2	29
14.	Coulomb Potential - Kastennäherung 3	30
15.	Energie-Niveaus des Wasserstoffatoms	32
16.	Kugelkoordinaten	33
17.	Elektronenorbitale	35
18.	Madelung Regel	36
19.	Elektronenkonfiguration von Sauerstoff	37

Literatur

- [1] Welt der Physik. Quanten im Alltag. <http://www.weltderphysik.de/de/1481.php>, April 2011.
- [2] Markl Pribas Zadrazil Hagenauer, Jarisch. *Chemie Aktuell 1*. ISBN: 3-901138-00-5. Naturwissenschaftliche Verlagsgesellschaft m.b.H. Salzburg, 2004.
- [3] milq. H-atom. <http://homepages.physik.uni-muenchen.de/~milq/kap13/k130p01.html>, April 2011.
- [4] milq. Ist das Bohr'sche Modell noch zeitgemäß? <http://milq.tu-bs.de/index.php/hinweise/lehrgangs-materialien/108-aktualitaet-des-bohrschen-atommodells.html>, April 2011.
- [5] milq. Qm-Basiskurs. http://homepages.physik.uni-muenchen.de/~milq/milq_basiskursp01.html, April 2011.
- [6] NASA. Image of the day gallery. http://www.nasa.gov/multimedia/imagegallery/image_feature_21.html, April 2011.
- [7] Wikipedia. Elektronenkonfiguration. <http://de.wikipedia.org/wiki/Elektronenkonfiguration>, April 2011.
- [8] Wikipedia. Elektronenkonfiguration. <http://de.wikipedia.org/wiki/Elektronenkonfiguration>, April 2011.
- [9] Wikipedia. Fraunhoferlinien. http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fraunhofer_lines.jpg, April 2011.
- [10] Wikipedia. Harmonische Potentialkurve. http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/9/94/Harmonische_Potentialkurve.png, April 2011.
- [11] Wikipedia. Hydrogen energy levels. http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/6/64/Hydrogen_energy_levels.png, April 2011.
- [12] Wikipedia. Integral. http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/f/f2/Integral_as_region_under_curve.svg, April 2011.
- [13] Wikipedia. Kastenpotential. http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/2/27/Infinite_potential_well.svg, April 2011.
- [14] Wikipedia. Kugelkoordinaten. <http://de.wikipedia.org/wiki/Kugelkoordinaten>, April 2011.
- [15] Wikipedia. Madelung rule. http://en.wikipedia.org/wiki/File:Madelung_rule.svg, April 2011.

- [16] Wikipedia. Single electron orbitals. http://chemwiki.ucdavis.edu/Physical_Chemistry/Quantum_Mechanics/Atomic_Theory/Electrons_in_Atoms/Electronic_Orbitals, April 2011.

