

Unterrichtsvorschlag: Eine Reise durch das Wasserstoffatom

Cornelius Marsch

Goethestraße 32, 27283 Verden

(Eingegangen: 22.08.2006; Angenommen: 08.12.2006)

Zusammenfassung

Ziel des vorgestellten Unterrichts ist es, ein quantenmechanisch korrektes Bild des Wasserstoffatoms auch für nichtradialsymmetrische Zustände zu gewinnen, ohne die Schüler zu sehr mit der Mathematik zu belasten. Hierzu wird die Schrödingergleichung mittels Computer gelöst, die Ergebnisse werden grafisch dargestellt und diskutiert.

1. Einführung

Aufgrund seiner Anschaulichkeit ist das Bohrsche Atommodell in der Öffentlichkeit sehr verbreitet, obwohl es seit knapp 80 Jahren überholt ist. Ziel eines neuen Quanten-/Atomphysikunterrichtes sollte deshalb sein, die Bahnvorstellung des Bohrschen Atommodells zugunsten einer quantenmechanischen Betrachtungsweise zu überwinden. Hierzu wird ein an das von der Gruppe um Hans Niedderer entwickelten Bremer Konzept ([1], [2], [3]) angelehnter Unterricht für die Oberstufe oder Studenten mit Nebenfach Physik vorgeschlagen.

Das Bremer Konzept schlägt eine numerische Lösung der Schrödingergleichung vor. Durch die Modellierung wird dem Schüler ein Gefühl für die Existenz von Eigenwerten vermittelt (was passiert mit der Lösung, wenn der eingegebene Energiewert vom Eigenwert abweicht?). Das numerische Verfahren ist hier auf eine unabhängige Variable (den Abstand vom Atomkern) beschränkt, damit lassen sich lediglich Vorstellungen für radialsymmetrische Zustände (Nebenquantenzahl $l = 0$) entwickeln.

Um zu einer dreidimensionalen Anschauung von Atomen auch in nicht radialsymmetrischen Zuständen zu gelangen, wurde ein Programm entwickelt, welches das Quadrat der numerischen Lösungen der Radialfunktion der Schrödingergleichung mit dem Quadrat der analytisch berechneten Kugelflächenfunktion für einen einstellbaren Polarwinkel multipliziert. Da dieses Programm noch auf zwei Dimensionen beschränkt ist, ist räumliches Vorstellungsvermögen gefragt.

2. Voraussetzungen

Um den Schülern das Neue der Quanten-Atomphysik nahe zu bringen, ist zunächst eine Wiederholung jener klassischen Begriffe erforderlich, mit deren Hilfe die Quanten-Atom-Physik beschrieben wird.

2.1 Teilchen

Die Begriffe Masse, Impuls (Bewegungsgröße) und Energie eines Teilchens werden wiederholt. Bezüglich der Masse eines Teilchens wird dabei besonderer Wert auf die Tatsache gelegt, dass ein System aus zwei Massen m in der klassischen Physik immer die doppelte Masse $2m$ aufweist, Massen also nie destruktiv interferieren.

Der Begriff der potentiellen Energie wird anhand einer Masse im Schwerfeld der Erde eingeführt, wobei insbesondere auf die Hubarbeit eingegangen wird. Das ist ein leicht eingängiges Beispiel, welches sich jeder Schüler/Student vorstellen kann (die Schwerkraft ist den Schülern von Geburt an bekannt). Der Bezug zwischen kinetischer Energie und Impuls (und damit sowohl der Masse als auch der Geschwindigkeit) wird hergestellt.

Schließlich wird auf die Energieeinheit Elektronenvolt eV für die Verwendung in der Quanten-Atom-Physik hingewiesen.

Teilchen können Träger elektrischer Ladung sein. Über die elektrostatische Anziehungskraft (Coulombkraft) zwischen zwei unterschiedlich geladenen Teilchen wird der Begriff des Coulombpotentials eingeführt und eine erste Reise durch ein Atom unternommen, indem der Potentialverlauf von $-\infty$ über Null (der Ort des Atomkerns) bis $+\infty$ betrachtet wird.

2.2 Welle

Was ist eine Welle? Was bewegt sich da überhaupt und in welche Richtung? Anhand der Ausbreitung einer Wasserwelle werden die Zusammenhänge diskutiert und die Begriffe Periodendauer, Frequenz, Wellenlänge und Phasengeschwindigkeit eingeführt. Die allgemeine Wellengleichung wird angegeben und daraus die Gleichung für stehende Wellen abgeleitet. In Abweichung vom Bremer Konzept wird hier nicht mit einer Seilwelle mit inhomogener Massenverteilung ([2]) gearbeitet, um mechanische Analogien zu vermeiden.

2.3 Empirische Grundlagen

Anhand des Doppelspaltexperimentes mit Wasser werden Interferenzen erläutert. Insbesondere die destruktive Interferenz ist ein rein wellenmechanisches Phänomen, das mit einer Teilcheneigenschaft nicht vereinbar ist. Die Erklärung des Interferenzmusters bei Verwendung von Licht bereitet Physikern keinerlei Schwierigkeiten, wenn Licht als elektromagnetische Welle aufgefasst wird. Hingegen wird es bei der Deutung des Interferenzmusters des Doppelspaltexperimentes mit einem Elektronenstrahl schon schwieriger. Die Schüler werden hier mit der empirischen Tatsache des Interferenzmusters konfrontiert, dass Elektronen ganz offensichtlich keine klassischen (geladenen) Tennisbälle oder Farbtropfen aus einer Sprühdose sind. Der statistische Charakter des Versuchsergebnisses wird hervorgehoben, indem die Intensität des Elektronenstrahls soweit heruntergeregelt wird, bis nur noch ein Elektron zur Zeit unterwegs ist. Der Weg des Elektrons durch die Spaltebene wird diskutiert. Den Schülern wird ein Internetlink zu einer Simulation zum Doppelspaltexperiment genannt (<http://www.cip.physik.uni.muenchen.de/~milq/download.html>, [4]).

Im Anschluss an das Doppelspaltexperiment, welches den Wellencharakter von Elektronen (und damit bisher gedachten klassischen Teilchen) offenbart, wird der Photoeffekt angesprochen. Eine geladene Zinkplatte wird erst dann entladen, wenn sie von Licht beschienen wird, dessen Frequenz größer als einer minimale Frequenz ist. Ist die Frequenz kleiner, so gelingt es trotz Intensitätssteigerung nicht, die Platte zu entladen. Aus diesem experimentellen Befund wird gefolgert, dass das Licht seine Energie nur quantenweise abgibt – Licht kann also nicht nur als Welle, sondern auch als Teilchen beschrieben werden.

3. Atommodelle

3.1 Schalenmodell

Zunächst wird das den meisten Schülern aus dem Chemieunterricht bekannte Schalenmodell als dreidimensionales Gebilde vorgestellt. Kovalente und Ionenbindung lassen sich mit dem Schalenmodell gut erklären. Die Elektronen bewegen sich dort in stationären Zuständen nicht. Lediglich die Energieaufnahme oder -abgabe eines Atoms ist mit einem Elektronenübergang von einer auf eine andere Schale verbunden, denn verschiedene Schalen weisen eine unterschiedliche Energie auf.

Die Frage nach der Stabilität der Atome wird nicht beantwortet – sie wird hier gar nicht gestellt. Es lassen sich weder absolute Atomgrößen noch Schalenenergien berechnen. Auch die Frage nach Teilcheninterferenzen bleibt unbeantwortet.

3.2 Bohrsches Atommodell

Es wird für sehr wichtig gehalten auf dieses Modell, das stellvertretend für alle Planetenbahnmodelle (Rutherford'sches Atommodell, Bohr'sches Atommodell mit Sommerfeldscher Erweiterung) steht, explizit einzugehen, da es den meisten Schülern/Studenten mehr oder weniger bekannt ist. Die Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen, wobei sich Bahnradius und Umfangsgeschwindigkeit aus der elektrostatischen Anziehungskraft (die als Zentripetalkraft der Kreisbewegung wirkt) ergeben. Das erste Bohrsche Postulat erzwingt die Existenz nur bestimmter Bohrscher Bahnen. Bei der Einführung der Bohr'schen Postulate ist der Hinweis wichtig, dass diese nicht begründbar sind (insbesondere das erste Postulat der strahlungslosen Bahnen).

Es ist an dieser Stelle sehr wichtig, die Schwachstellen des Bohr'schen Atommodells herauszuarbeiten: Lediglich die Spektren von Wasserstoff und wasserstoffähnlichen Ionen werden mit dem Bohrschen Atommodell korrekt berechnet. Ein weiteres Problem ist das erste Bohrsche Postulat: Da die gleichförmige Kreisbewegung eine beschleunigte Bewegung ist (der Geschwindigkeitsbetrag ist zwar konstant, nicht aber die Geschwindigkeitsrichtung), müsste ein Elektron nach den Gesetzen der Elektrodynamik als beschleunigtes geladenes Teilchen Energie abstrahlen, somit langsamer werden und in den Kern stürzen. Schließlich verbietet auch schon die Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation den Begriff der Bahn: Wird die Unbestimmtheit auf Bruchteile des Bahndurchmessers festgelegt (um überhaupt noch von einer Bahn sprechen zu können, ist das schon notwendig), so übersteigt die Unbestimmtheit der kinetischen Energie beim Wasserstoff die Ionisierungsenergie bei weitem.

3.3 Wahrscheinlichkeitsmodell

Werden Elektronen in stationären Zuständen von Atomen als stehende Wellen betrachtet, so liefert eine energetische Überlegung die eindimensionale Schrödingergleichung, die nur für ganz bestimmte Energieeigenwerte lösbar ist. Die Schwingungsamplitude ist eine Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude (Max Born 1927), d. h. ihr Betragsquadrat ist die Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen (Wahrscheinlichkeit je Länge oder je Volumen). Es schließt sich eine Betrachtung über den klassischen Wahrscheinlichkeitsbegriff als Grenzwert der relativen Häufigkeit sowie über den Dichtebegriff an. Schließlich wird ein erster Blick auf das zu erstellende Atommodell gegeben: eine Lokalisationswahrscheinlichkeitsverteilung. Die Lokalisation wird als ein Prozess begriffen, bei dem das Elektron von einem Zustand bestimmter Energie in einen Zustand bestimmten Ortes übergeht, es handelt sich also um einen Zustandswechsel.

Als weitere Interpretationsmöglichkeit bietet sich durch Multiplikation des Betragsquadrates der Wellenfunktion mit der Elementarladung das Bild des Elektroniums an, wie es im Karlsruher Physikurs diskutiert wird, vgl. [5]. Eine dreidimensionale Darstellung des Atoms findet sich in [6], eine Gegenüberstellung der drei im Unterricht behandelten Atommodelle in [3].

4. Gedankenexperiment: Der Potentialtopf

Zur Übung des Umganges mit der Schrödingergleichung ist in dem Programm ein Modul *Potentialtopf* vorgesehen. An diesem einfachen Modell können die Schüler und Studenten das Modellieren der Gleichung (Einsetzen verschiedener Energiewerte) bei verschiedenen Potentialtopftiefen und -weiten kennen lernen. Physikalisch vernünftige Lösungen sind nicht divergent (die Lokalisationswahrscheinlichkeit für ein Teilchen irgendwo im Raum ist 100 % und nicht unendlich) – und das Programm liefert solche Lösungen nur für ganz bestimmte Energiewerte.

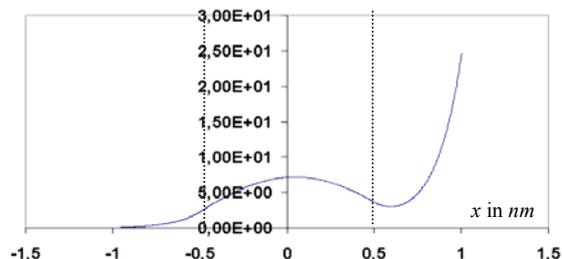


Abb. 1: Prinzip der Modellierung

In Abb.1 (die Ordinate ist hier noch in willkürlichen Einheiten skaliert) ist das Prinzip der Modellierung gezeigt: Bei einem eindimensionalen Potentialtopf, der $-2 eV$ tief und $1 nm$ breit ist, wird zunächst ein Energieeigenwert von $W_1 = -1,8 eV$ versucht. Der Funktionsverlauf der Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude entlang der Ortskoordinate x deutet sich schon an, die Funktion divergiert jedoch noch.

Um einigermaßen zufriedenstellende Funktionsverläufe zu erhalten, ist eine Genauigkeit von fünf Dezimalstellen für den Energiewert erforderlich. Abb.2 zeigt für den niedrigsten Energieeigenwert $W_1 = -1,77106 eV$ den Verlauf von Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude (dunkelblau), ihrem Quadrat (rot) und des Normierungsintegrals (hellblau) für einen Potentialtopf der Breite $1 nm$ und Tiefe -2

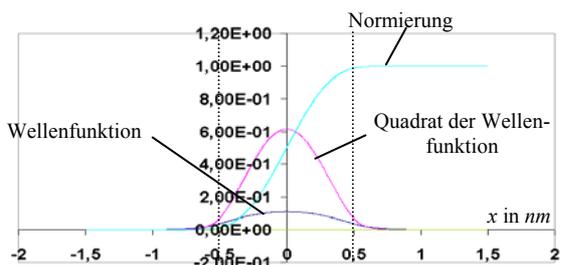


Abb. 2: Grundzustand beim Potentialtopf

eV . Die maximale Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude liegt in der Mitte (bei $0 nm$). Hier wie in allen weiteren Abbildungen ist die Ordinate in Einheiten des Normierungsintegrals skaliert, d. h. der rechtsseitige Grenzwert muss bei $1=100\%$ liegen (irgendwo muss das Elektron ja lokalisiert werden), ansonsten ist der Energieeigenwert zu schlecht getroffen.

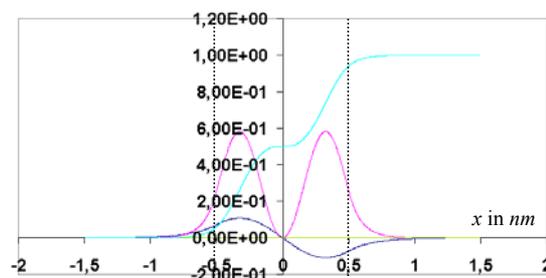


Abb. 3: Erster angeregter Zustand beim Potentialtopf

Der nächste Energieeigenwert liegt bei $W_2 = -1,11284 eV$. Wie in Abb.3 dargestellt, ergibt sich in der Mitte ein Nulldurchgang (Knoten) und damit dort die Lokalisationswahrscheinlichkeit Null. Die Wellenfunktion ist hier innerhalb des Potentialtopfes eine Sinuskurve, außerhalb fällt sie exponentiell ab.

Sehr schön kann hier beobachtet werden, wie die Wellenfunktion in klassisch verbotene Bereiche vordringt. Durch Variation der Potentialtopftiefe kann die Abhängigkeit der Weite dieses Eindringens als Funktion der Topftiefe ermittelt werden. Auch sind Untersuchungen möglich, wie sich beispielsweise die Potentialtopfweite auf die Energieeigenwerte auswirkt.

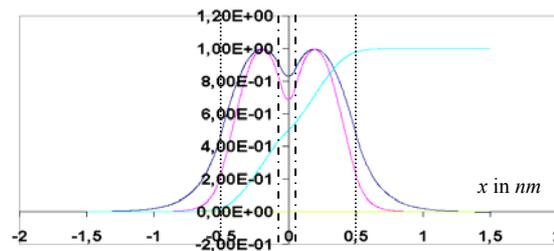


Abb. 4: Tunneleffekt

5. Der Tunneleffekt

Zur Demonstration des quantenmechanischen Tunneleffektes werden im Modul *Tunneleffekt* zwei Potentialtöpfe nebeneinander platziert. In Abb.4 ist dies erreicht, indem in einen $1 nm$ breiten und $-2 eV$ tiefen Potentialtopf eine $0,1 nm$ breite Potentialbarriere (Barrierehöhe $0 eV$, strichpunktiert gezeichnet) eingefügt ist. Die Wellenfunktion zeigt eine symmetrische Struktur. Es bietet sich eine Untersuchung des Funktionsverlaufes, aber auch des Energieeigenwertes in Abhängigkeit von der Barrierenweite an. Ferner kann das Verhalten bei

Absenken oder Anheben der Potentialbarriere untersucht werden.

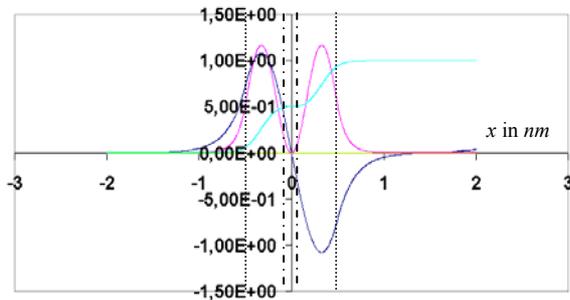


Abb. 5: erster angeregter Zustand

Auch hier gibt es natürlich höhere Energieeigenwerte (angeregte Zustände). In Abb.5 ist der sich ergebende Funktionsverlauf dargestellt. In der Mitte der Potentialbarriere hat die Wellenfunktion eine Nullstelle, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist entsprechend Null. Hier kann bereits ein Hinweis auf die Unmöglichkeit einer klassischen Bahnbewegung erfolgen: Wird das Elektron zu einem Zeitpunkt im linken Potentialtopf lokalisiert, kann es klassisch nicht in den rechten Topf wechseln, da es sich dazu ja über die Nullstelle bewegen müsste. Die Nullstelle bedeutet aber, dass das Elektron dort zu keinem Zeitpunkt angetroffen wird. Da die Lokalisationswahrscheinlichkeit auch im rechten Potentialtopf von Null verschieden ist, kann das Elektron dort lokalisiert werden. Aber es kann dort klassisch nicht hingelangen!

Schließlich sollte der Hinweis auf die praktische Bedeutung des Tunneleffektes nicht fehlen (Tunnel diode, Rastertunnelmikroskop).

6. Die Reise durch das Wasserstoffatom

Zunächst wird die Schrödingergleichung auf den dreidimensionalen Fall erweitert. Die Herleitung würde den Rahmen dieser Unterrichtseinheit sicher sprengen und liegt auch gar nicht in ihrer Intention. Als Ergebnisse werden mitgeteilt:

1. effektives Potential
Im Potential erscheint ein zusätzlicher Term, der außer vom Kernabstand von einer Nebenquantenzahl l abhängt. l kann ganzzahlige Werte von 0 bis $n-1$ annehmen (n Hauptquantenzahl). In der Literatur wird l oft Drehimpulsquantenzahl genannt.
2. Nebenquantenzahl m
Diese in der Literatur oft als magnetische Quantenzahl bezeichnete Quantenzahl kann ganzzahlige Werte von $-l$ bis $+l$ annehmen.
3. Einführung von Kugelkoordinaten
4. Quantisierungsachse
Begründung mit einem Hinweis auf eine Verallgemeinerung der Heisenbergschen Un-

bestimmtheitsrelation (quantenmechanische Kommutatoren)

5. quantenmechanische Wellenfunktion als Produkt eines nur vom Abstand abhängigen Radialanteil $R(r)$ und einer nur von den Winkeln abhängigen Kugelflächenfunktion $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

6. Unabhängigkeit vom Azimut
Senkrecht zur Quantisierungsachse gibt es keine messtechnische Unterscheidungsmöglichkeit, deshalb sind die Ergebnisse unabhängig vom Azimut. Nach Max Born ist die Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion gegeben, durch die Betragsquadratbildung verschwindet die Abhängigkeit vom Azimut: Atome sind rotationssymmetrisch um die Quantisierungsachse.

7. Radialanteil $R(r)$

Der Radialanteil der dreidimensionalen Schrödingergleichung ergibt sich aus den Lösungen $u(r)$ der eindimensionalen Schrödingergleichung durch

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

Die Reise durch das Wasserstoffatom erfolgt also durch eine Berechnung der Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte vom Ort des Atomkerns radial nach außen – und das für jeden beliebig einstellbaren Polarwinkel. Aufgrund der Unabhängigkeit vom Azimut ist das Ergebnis rotationssymmetrisch zur Quantisierungsachse.

Die Energieeigenwerte der einzelnen Zustände entsprechen den Schalenenergien im Schalenmodell sowie den Bahnenergien im Bohrschen Atommodell.

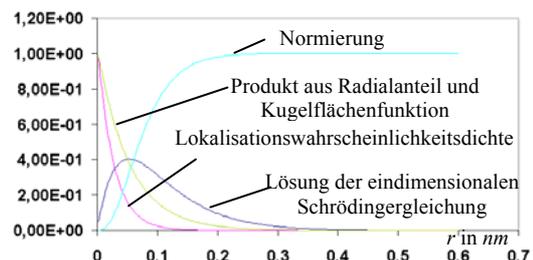


Abb. 6: Modellierung des Grundzustandes

6.1 Der Grundzustand

Mit Hilfe des Programms können die verschiedenen Zustände (allerdings ohne Berücksichtigung des Spins) für verschiedene Polarwinkel modelliert werden. So ergibt sich beispielsweise für den kugelsymmetrischen Grundzustand ($n = 1, l = 0, m = 0$) bei einem Energieeigenwert von

$W_1 = -13,59717 \text{ eV}$ unabhängig vom Polarwinkel die Abb.6.

Der Atomkern des Wasserstoffatoms befindet sich im Koordinatenursprung. Der Maßstab des Abstandes r vom Atomkern auf der Abszisse ist in nm angegeben. Die dunkelblaue Kurve zeigt den Verlauf der sich aus der eindimensionalen Schrödingergleichung

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u(r) = 0$$

ergebenden Lösung $u(r)$, multipliziert mit dem Betrag der Kugelflächenfunktion

$Y_l^m(\vartheta) = \sqrt{|Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2}$. Die grüne Kurve stellt den Radialanteil

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

multipliziert mit dem Betrag der Kugelflächenfunktion dar. Die rote Kurve schließlich hat unmittelbare physikalische Relevanz: Sie ist das Quadrat der grünen Kurve und damit die Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons, aufgetragen über den Abstand vom Atomkern.

Die hellblaue Kurve gibt den Wert der Fläche unter der roten Kurve und damit die Lokalisationswahrscheinlichkeit des Elektrons links von dem jeweils betrachteten Kernabstand an. Sie ist auf Eins normiert, d. h. bei optimaler Modellierung eines Zustandes (richtigen Energieeigenwert gefunden) muss sie beim maximalen Abstand vom Kern den Wert Eins erreichen. Weicht der rechtsseitige Grenzwert merklich größer als Eins, so ist die Modellierung zu schlecht (die Wellenfunktion divergiert). Die Ordinate ist in Einheiten des Normierungsintegrals, bezogen auf einen Polarwinkel und den Abstand vom Atomkern, angegeben.

Der Zusammenhang zum Normierungsintegral ist schnell hergestellt: Irgendwo im Raum wird das Elektron lokalisiert werden, das Integral der Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte über den ganzen Raum beträgt also $100\% = 1$. Der Wert des Normierungsintegrals in Abhängigkeit vom Kernabstand ergibt sich aus der hellblauen Kurve.

Als Ergebnis ergibt sich für das Wasserstoffatom im Grundzustand eine Kugel mit einem Maximum der Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte am Ort des Kerns sowie radial nach außen abnehmender Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte. Da die Ergebnisse unabhängig vom Polarwinkel sind, ist der Grundzustand nicht nur rotations-, sondern kugelsymmetrisch.

Die Zielpersonen sind durch die Verwendung des Programms an Stelle einer analytischen Herangehensweise an die Schrödingergleichung nicht nur

von der Mathematik befreit, sie entwickeln außerdem ein Gefühl für Energieeigenwerte (was passiert, wenn der Energieeigenwert nicht getroffen ist, vgl. Abb.1?).

6.2 Angeregte radialsymmetrische Zustände

Sämtliche angeregten Zustände mit der Nebenquantenzahl $l = 0$ sind radial-, d. h. kugelsymmetrisch. Ihre Kugelflächenfunktion zeigt keine Abhängigkeit vom Polarwinkel. Mit der Hauptquantenzahl n zeigen die Radialanteile (grüne Kurve) $n-1$ Nullstellen und die Atome damit eine Kugelschalenstruktur, wie dies in Abb.7 am Beispiel $n = 2$ dargestellt ist.

Am Ort des Atomkerns wird die maximale Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte angetroffen. Bei etwa $0,1 \text{ nm}$ zeigt sie eine Nullstelle. Das Normierungsintegral (hellblaue Kurve) weist an dieser Stelle ein Plateau auf. Bei $0,2 \text{ nm}$ ergibt sich für die Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte ein zweites lokales Maximum. Für größere Abstände vom Atomkern geht sie asymptotisch gegen Null.

Das Atom weist in diesem Zustand also eine Kugel der Lokalisationswahrscheinlichkeit mit einem Radius von $0,1 \text{ nm}$ um des Kern herum auf. Bei $0,1 \text{ nm}$ liegt eine Knotenschale. Darauf folgt eine Schale der Lokalisationswahrscheinlichkeit mit maximaler Dichte bei $0,2 \text{ nm}$.

Schon anhand dieses Zustandes lässt sich die Unmöglichkeit einer klassischen Bahn diskutieren: Das Wasserstoffatom enthält ein Elektron, welches immer als Ganzes nachgewiesen wird – zu einem Zeitpunkt in der inneren und zu einem anderen Zeitpunkt in der äußeren Schale. Würde sich das Elektron auf einer klassischen Bahn (Ort und Impuls zu jedem Zeitpunkt genau bestimmt) bewegen, so müsste diese Bahn durch die Knotenschale führen, das Elektron also irgendwann auch dort nachweisbar sein. Das kann es aber nicht, da die Lokalisationswahrscheinlichkeit dort Null ist.

Sämtliche radialsymmetrischen Zustände weisen eine ähnliche Struktur auf: Eine Lokalisationswahrscheinlichkeitskugel um den Atomkern herum und $n-1$ Lokalisationswahrscheinlichkeitskugelschalen, die sich konzentrisch um die innere Kugel herum anordnen.

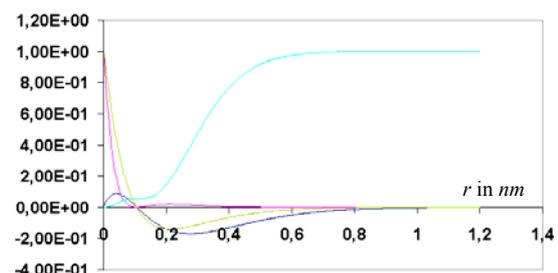


Abb. 7: erster angeregter Zustand, $l = 0$

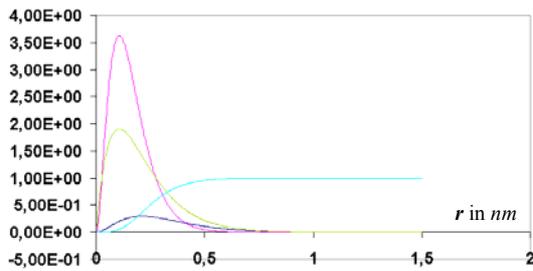


Abb. 8: Zustand $n = 2, l = 1, m = 0, \vartheta = 0^\circ$

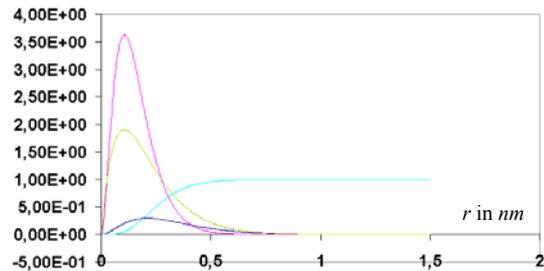


Abb. 9: Zustand $n = 2, l = 1, m = \pm 1, \vartheta = 90^\circ$

6.3 Angeregte nichtradialsymmetrische Zustände

Bei Zuständen mit $l \neq 0$ liegt aufgrund der (im Unterricht lediglich als Schaubild angegebenen, aber nicht näher begründeten) Kugelflächenfunktion keine Kugelsymmetrie, wohl aber wegen der Unabhängigkeit der Messergebnisse vom Azimut eine Rotationssymmetrie vor, wie in den folgenden Abbildungen anhand der ersten angeregten Zustände des Wasserstoffatoms mit $l = 1$ erläutert.

Zunächst wird der Zustand $m = 0$ betrachtet. Für $\vartheta = 0^\circ$ (Blick von oben auf das Atom) ergibt sich die Abb.8. Die maximale Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte liegt bei $0,1 \text{ nm}$. Werden andere Werte für den Polarwinkel verwendet, so zeigt sich das Maximum zwar beim gleichen Radius, es nimmt aber bis $\vartheta = 90^\circ$ (Blick von der Seite) kontinuierlich bis auf Null ab, um bei größeren Werten wieder anzusteigen. Bei $\vartheta = 180^\circ$ (Blick von unten) hat es wieder den Wert von $\vartheta = 0^\circ$ erreicht.

Zur Verdeutlichung wird das Atom mit einer Erdkugel mit dem Radius $0,1 \text{ nm}$ verglichen. An Nord- und Südpol ($\vartheta = 0^\circ$ bzw. 180°) ergibt sich auf der Erdoberfläche die maximale Lokalisationswahrscheinlichkeit, am Äquator verschwindet sie.

Oberhalb und unterhalb der Erdoberfläche nimmt ihr Wert ebenfalls ab.

Für die Zustände $m = \pm 1$ (Abb.9) liegen die Verhältnisse umgekehrt. Hier ergibt sich bei $\vartheta = 90^\circ$ (Blick von der Seite) eine maximale Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte, während sie bei $\vartheta = 0^\circ$ und $\vartheta = 180^\circ$ (Blick von oben und unten) verschwindet. Das Atom besteht also aus einem Ring maximaler Lokalisationswahrscheinlichkeit in der xy -Ebene.

Im Bild der Erdkugel besteht die größte Wahrscheinlichkeit, das Elektron anzutreffen, am Äquator. An den Polen wird das Elektron nie angetroffen.

Die nichtradialsymmetrischen Zustände der Hauptquantenzahl n sind durch $n - 1$ Kugelschalen der Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichte gekennzeichnet. Am Ort des Atomkerns verschwindet die Lokalisationswahrscheinlichkeit.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Die 20 Zustände bis $n = 4$ (Zustände mit $\pm m$ werden als ein Zustand gewertet) sind in der folgenden Tabelle 1 zusammengefasst:

Zustand	Nullstellen des Radialanteils in nm	Abstände maximaler Wahrscheinlichkeitsdichte vom Atomkern in nm	Knotenwinkel in °	Knotenlinie / Knotenfläche	Winkel maximaler Wahrscheinlichkeitsdichte in °
100	-	0	-	-	-
200	0,11	0; 0,21	-	-	-
210	0	0,11	90	xy -Ebene	0; 180
211	0	0,11	0; 180	z -Achse	90
300	0,10; 0,38	0,19; 0,61	-	-	-
310	0; 0,32	0,09; 0,54	90	xy -Ebene	0; 180
311	0; 0,32	0,09; 0,54	0; 180	z -Achse	90
320	0	0,32	$55^\circ; 125^\circ$	Knotenkegel	0; 90; 180
321	0	0,32	0; 90; 180	z -Achse xy -Ebene	45; 135
322	0	0,32	0; 180	z -Achse	90
400	0,10; 0,35; 0,82	0,18; 0,53; 1,20	-	-	-
410	0; 0,29; 0,77	0,09; 0,46; 1,14	90	xy -Ebene	0; 180
411	0; 0,29; 0,77	0,09; 0,46; 1,14	0; 180	z -Achse	90
420	0; 0,64	0,27; 1,00	$55^\circ; 125^\circ$	Knotenkegel	0; 90; 180
421	0; 0,64	0,27; 1,00	0; 90; 180	z -Achse xy -Ebene	45; 135
422	0; 0,64	0,27; 1,00	0; 180	z -Achse	90

Zustand	Nullstellen des Radialanteils in nm	Abstände maximaler Wahrscheinlichkeitsdichte vom Atomkern in nm	Knotenwinkel in $^\circ$	Knotenlinie / Knotenfläche	Winkel maximaler Wahrscheinlichkeitsdichte in $^\circ$
430	0	0,64	39; 90; 141	Knotenkegel	0; 63; 117; 180
431	0	0,64	0; 63; 117; 180	z -Achse Knotenkegel	31; 90; 149
432	0	0,64	0; 90; 180	z -Achse xy -Ebene	45; 135
433	0	0,64	0; 180	z -Achse	90

Tabelle 1: Aufbau von Radial- und Winkelanteil der Lokalisationswahrscheinlichkeitsdichten von Wasserstoff für die Hauptquantenzahlen $n \in \{1, 2, 3, 4\}$

Die Zustände zu den Hauptquantenzahlen $n = 1$ und $n = 2$ sollten zur Erfassung des Prinzips ausführlich berechnet und diskutiert werden. Weiterhin ist es ratsam, zumindest noch den 320-Zustand zu berechnen, da hier Knotenkegel auftreten.

Zum Abschluss dieser Unterrichtseinheit sollte ein Vergleich mit dreidimensionalen bildhaften Darstellungen verschiedener Zustände des Wasserstoffatoms erfolgen. Insbesondere sollte auf weit verbreitete fehlerhafte Darstellungen hingewiesen werden (s. z. B. in [9]), in denen die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Atoms nicht rotationssymmetrisch abgebildet ist, ferner auf den durch verbreitete Darstellungen hervorgerufenen Eindruck, das Atom habe einen festen Rand (das dem nicht so ist, zeigt die asymptotische Annäherung der Wellenfunktion stationärer Zustände an die Abstandsachse).

Über die Evaluation der vorgestellten Unterrichtseinheit wird in einem weiteren Artikel berichtet werden.

8. Literatur

- [1] J. Petri: Der Lernpfad eines Schülers in der Atomphysik, Verlag Mainz 1996
- [2] H. Niedderer, J. Petri: Mit der Schrödingergleichung vom H-Atom zum Festkörper, Universität Bremen 2000
- [3] M. Budde: Lernwirkungen in der Quantenatom-Physik, Logos 2004
- [4] R. Müller: Quantenphysik in der Schule, Habilitationsschrift 2003
- [5] F. Herrmann: Der Karlsruher Physikkurs Teil 3, Universitätsdruckerei Karlsruhe 1995
- [6] P. Bronner, H. Hauptmann, F. Herrmann: Wie sieht ein Atom aus?, PdN-PhiS 2/55 (2006) 18
- [7] D. Faires, R. Burden: Numerische Methoden, Springer 1994
- [8] T. Mayer-Kuckuk: Atomphysik, Teubner 1980
- [9] J. Grehn: Metzler Physik. Gesamtband, 2. Auflage, Metzlersche Verlagsbuchhandlung 1988