Andreas Helzel
Karsten Rincke
Universität Regensburg

Bohrs Alternativen: Anstoß zu einer Diskussion

Einleitung

Im Zuge der Diskussion über den Zweck des Bohrschen Atommodells (z.B. Fischler & Lichtfeldt 1994) in der Schule wurden Unterrichtskonzepte (UK) zur Quantenmechanik (QM) entwickelt, die verschiedene Alternativen mit unterschiedlich guten Ergebnissen dazu anbieten (Müller & Wiesner, 2000), (Berg, Fischler, Lichtfeld, Nietzsche, Richter & Walther, 1989), (Niedderer & Deylitz, 1997). Für die universitäre Ausbildung in Physik gab es keine (so ausführliche) Diskussion dazu, weshalb neben theoretischen Berechnungen in der Quantenmechanik nur das Bohrsche Atommodell als einfaches Modell zur Betrachtung des Wasserstoffatoms behandelt wird.

Um eine Basis für eine Diskussion des Bohrschen Atommodells an Universitäten zu liefern, werden hier die Näherungen zum Wasserstoffatom von drei bekannten UK fachphysikalisch verglichen und deren Abweichungen vom genauen Ergebnis diskutiert. Davon ausgehend wird eine weiterführende Näherung vorgestellt, die das genaue Ergebnis liefert, und die anschlussfähig ist, sowohl für eine Theorievorlesung als auch für moderne UK zur QM an Schulen.

Vergleich bisheriger Näherungen

Im Folgenden werden Näherungen für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms aus dem Münchener UK (Müller & Wiesner, 2000), dem Berliner UK (Berg, Fischler, Lichtfeld, Nietzsche, Richter & Walther, 1989) und dem Bremer UK (Niedderer & Deylitz, 1997) herangezogen. Diese werden hier fachlich verglichen und dazu aus ihren jeweiligen Darstellungen herausgelöst.

Die Grundidee in diesen Näherungen ist es das Coulombpotential mit einem Kastenpotential für jedes Energieniveau anzunähern. In einem eindimensionalen Kastenpotential der Breite L und der Tiefe V_0 ergeben sich aus der QM die Energieniveaus mit den Werten $E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} + V_0$. Für ein dreidimensionales Kastenpotential, entweder als Würfel oder Sphäre, werden die Größen r_n als Radius[1] des Potentials, V_n als Potentialtiefe und $\bar{r}_n$ für den (mittleren) Radius verwendet, bei dem $V_{Coulomb}(\bar{r}_n) = V_n$ gilt. Das Verhältnis der Radien ist $r_n/\bar{r}_n = x$. Also müssen nach der Wahl einer Geometrie die beiden Größen r_n und entweder V_n, $\bar{r}_n$ oder x sinnvoll abgeschätzt werden, um die Energieniveaus zu berechnen.

Abbildung 1 illustriert die wesentlichen Unterschiede hinsichtlich der Wahl der Geometrie und der Ausdehnung des Kastenpotentials zwischen den UK. Für alle Näherungen ergibt sich $E_n = 2V_n$, weshalb das Verhältnis von durchgezogener und gepunkteten Linie in allen UK gleich ist. Die Unterschiede in der Geometrie und Ausdehnung des Kastenpotentials (gestrichelte Linien) führen zu Ergebnissen, die unterschiedlich nah am Termschema $E_n = R_y \frac{1}{n^2}$ (mit $R_y = 13{,}6$ eV) liegen. Das Münchener UK erreicht mit dem Würfel, der mit den Ecken und Kanten den „klassisch erlaubten Bereich“ überragt, ca. 54% davon, das Berliner UK mit einem sehr kleinen Würfel 14% und das Bremer UK mit der Sphäre 41%. Alle Näherungen stimmen also hinsichtlich der Naturkonstanten und der Abhängigkeit zu n

[1] Je nach Geometrie handelt es sich dabei entweder wirklich um einen Radius, oder, falls ein Würfel anstatt einer Sphäre verwendet wird, um die halbe Kantenlänge.

mit dem Termschemen überein. Die rein numerischen Unterschiede werden auf die unterschiedliche Ausdehnung zurückgeführt.

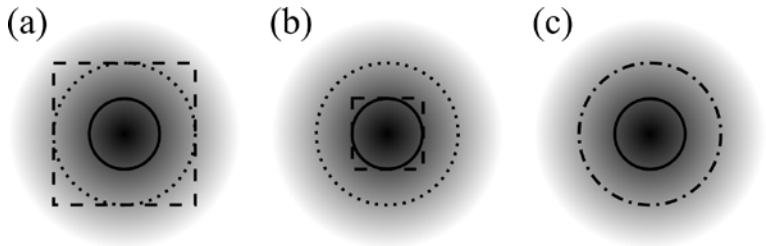

Abbildung 1: Zweidimensionaler Querschnitt durch das Coulombpotential (graue Schattierung). Der mittlere Radius $\bar{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{n}}$ ist die durchgezogene Linie, die Grenzen des Kastenpotentials gestrichelt und die Grenze die ein klassisches Teilchen der Energie erreichen könnte (also $\boldsymbol{E_n} = \boldsymbol{V_{Coulomb}}$) gepunktet. (a) Münchener, (b) Berliner und (c) Bremer UK.

Weiterführende Näherung

Die weiterführende Näherung, die Gegenstand dieses Textes ist, hat dieselbe Basis wie die oben besprochenen Näherungen, entscheidet sich aber für andere und erweiterte Bedingungen.

Als Geometrie wird wie im Bremer UK eine Sphäre gewählt. Das entspricht der Symmetrie des Problems und führt zu radialsymmetrischen Wellenfunktionen ($\psi \propto \frac{\sin r}{r}$). Die Größen sollen hier sinnvoll abgeschätzt werden und nicht nur plausibel festgesetzt. Das erweiterte Vorgehen besteht darin, die Ausdehnung des Potentials r_n mit einer Abschätzung durch die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation (HU) vorzunehmen. Bei einer derartigen Abschätzung wird die Ausbreitungsenergie[2] des Grundzustandes mit der Standardabweichung des Impulses durch die klassische Energie-Impuls-Beziehung in Verbindung gebracht. Die Standardabweichung des Impulses wird anschließend mit der HU genähert, indem für die Standardabweichung der mittlere Radius $\bar{r}_1$ verwendet wird. Damit ergibt sich $r_n = \pi\bar{r}_n = \frac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{me^2}$.

Zusammengefasste Ergebnisse

Zentrales Ergebnis der weiterführenden Näherung ist das Termschema für die Energieniveaus, wie es auch mit der Berechnung mit dem Coulombpotential gefunden wird: $E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2}$. Die oben gemachten Abschätzungen sind also offensichtlich sehr gut. Was ergibt sich noch aus ihnen?

Da die Symmetrie radialsymmetrisch gewählt wird, können die Zustandsfunktionen des Kastenpotentials auch hinsichtlich den winkelbezogenen Quantenzahlen l und m ausgewertet werden und damit der quantenmechanische Drehimpuls besprochen werden. Weiterhin ähnelt der Radialteil der Näherung qualitativ der der Berechnung mit Coulombpotential; es zeigt sich ein ausgeprägtes Maximum im Zentrum, also am Atomkern, und eine der Anregung entsprechende Zahl an Knoten und Bäuchen. Diese sind in Abbildung 2(a) in das Energie Termschema zusammen mit dem Coulombpotential und den Kastenpotentialen für die ersten drei Energieniveaus eingezeichnet.

[2] Klassisch handelt es sich hierbei um die kinetische Energie. Da aber auf klassisch-mechanistische Ausdrücke, die eine Kinetik implizieren, die nicht vorhanden ist, verzichtet werden sollte, wurde für diese Arbeit der Ausdruck „Ausbreitungsenergie“ gewählt.

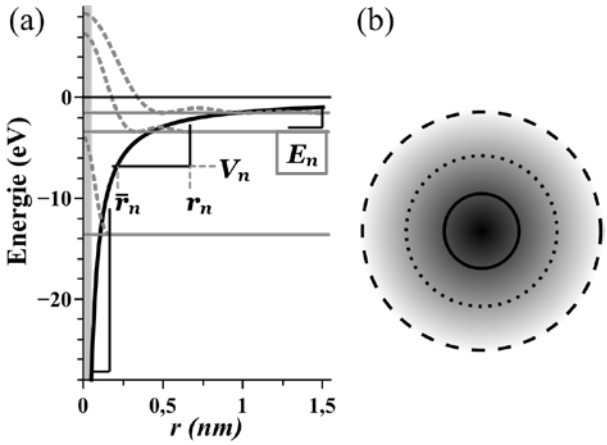

Abbildung 2: (a) Termschema im Coulombpotential und Wellenfunktionen. (b) Querschnitt durch das Potential.

Hier kann man erkennen, dass die Wellenfunktion im Kastenpotential in einen Bereich ragt, der klassisch energetisch nicht möglich wäre. Durch die Größe des Potentials wird also der quantenmechanischen Eigenschaft des Tunnelns Rechnung getragen. Auch Abb. 2(b) zeigt in einem 2D Querschnitt durch das Potential, dass die Ausdehnung des Kastenpotentials über die klassische energetische Grenze des Coulombpotentials hinausgeht.
Der Bohrsche Atomradius bezeichnet nicht nur die Elektronenbahn im Bohrschen Modell, er wird auch in der Quantenmechanik mit dem (wahrscheinlichsten) Ort (bzw. Radius) in Verbindung gebracht. In der weiterführenden Näherung ist der Radius $\bar{r}_1$ gleich dem Bohrschen Atomradius. Dieser Radius lässt sich also hier mit dem Ort des mittleren Potentials, das ein Elektron im Grundzustand wahrnimmt, deuten und nicht nur mit dem Ort des Elektrons selbst. Das liefert eine weitere Möglichkeit eine Ausdrucksweise zu wählen, die nicht zu klassischen Größen wie „Ort eines Teilchens“ führt.

Es kann mit dieser weiterführenden Näherung also eine Möglichkeit gegeben werden, die anschlussfähig an eine Vorlesung der Theoretischen/Fachphysik ist und gleichzeitig an moderne UK zur Quantenmechanik, ohne bei den Studierenden bestehende Fehlvorstellungen weiter zu verfestigen. Sie besitzt den Vorteil des Bohrschen Atommodells auf einfache Weise das Termschema des Wasserstoffatoms zu liefern, und versucht dessen Nachteile, zu suggestiv und klassisch-mechanistisch zu sein, zu überwinden.
Diese Näherung dient als ein Vorschlag für eine Alternative zum Bohrschen Atommodell in der Hochschullehre.

Literatur

Fischler, H.; Lichtfeldt, M. (1994). Ein Unterrichtskonzept zur Einführung in die Quantenmechanik. Physik in der Schule 32, S. 276

Müller, R.; Wiesner, H. (2000). Das Münchener Unterrichtskonzept zur Quantenmechanik. Physik in der Schule 38, S. 126

Berg, A.; Fischler, H.; Lichtfeldt, M.; Nitzsche, M.; Richter, B.; Walther, F. (1989). Einführung in die Quantenphysik. Pädagogisches Zentrum Berlin

Niedderer, H.; Deylitz, S. (1997). Atome, Moleküle und Festkörper - Verständnis ihrer Eigenschaften auf der Basis der Schrödinger-Gleichung unter Zuhilfenahme des Computers. Basistext für Schüler, Universität Bremen. Institut für Didaktik der Physik