Einführung in das Elektroniummodell

Michael Pohlig
WHG-Durmersheim – Didaktik an der Uni KA
michael@pohlig.de

Literatur:

Bronner, Hauptmann, Herrmann: Wie sieht ein Atom aus? (PdN-PhiS 2/55 Jg 2006)

CD Das Wasserstoffatom im Bild (Aulis Verlag Deubner)

Ex. 20.4 (3. Gebot)

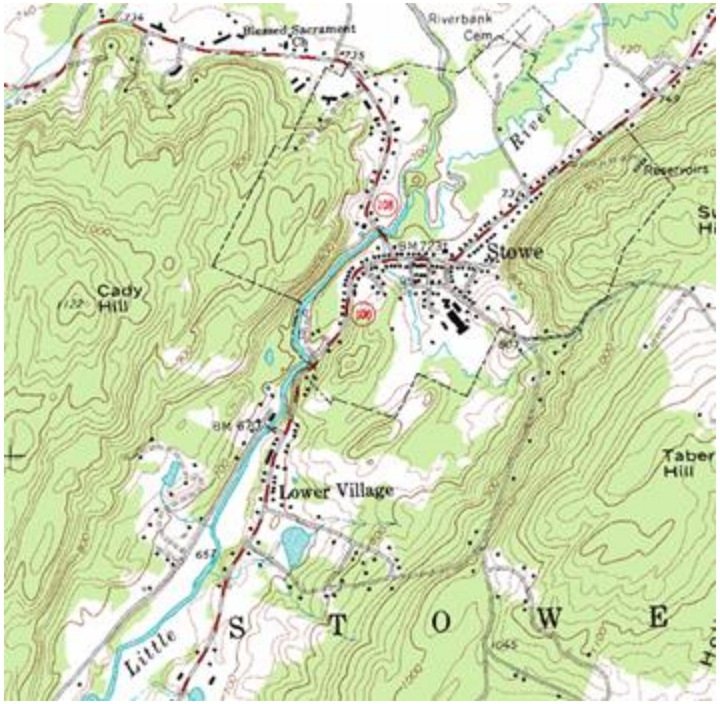
Du sollst Dir keine Bilder machen von Dingen, die im Himmel, auf der Erde, im Wasser oder unter der Erde sind.

Ein Bild sagt mehr als tausend Worte.

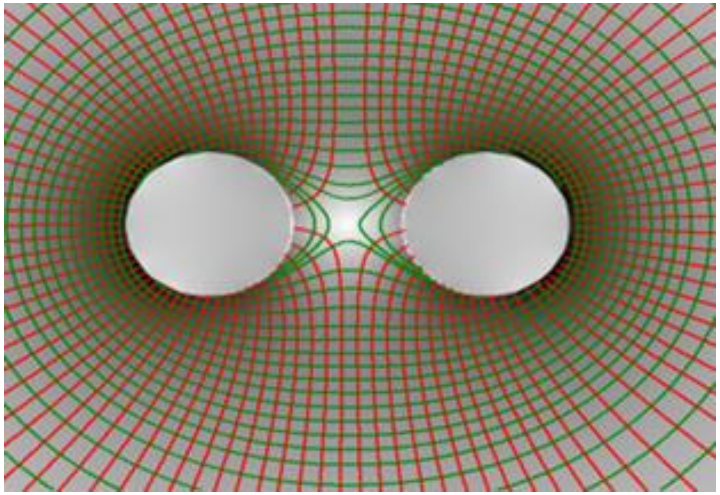
1. Bilder

- Größe
- Gestalt
- Farbe
- Transparenz
- Oberflächen-
  beschaffenheit
- …

- Topografische Karte mit Höhenlinien

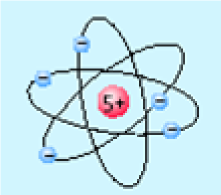


- Felddichtebild mit Zuglinien (Feldlinien) und Schnitt durch Druckflächen

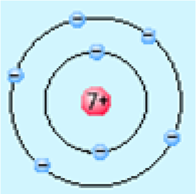


Michael Pohlig

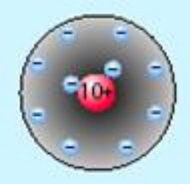
1. Bilder



Rutherford



Bohr



Quantenmechanisch?

1. Bilder

Zwei Fassungen der QPh:

Matrizen	Differenzialoperatoren
Heisenbergsche Matrizen-Mechanik	Schrödingersche Wellen-Mechanik

Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik und zu der meinen.

Schrödinger Ann. d. Phys. (4) 79,734 (1926)

1. Bilder

Bilder beruhen auf den Lösungen der Schrödingergleichung

Bilder sollen folgende Eigenschaften veranschaulichen:

- Platzbedarf
- Drehimpuls
- Magnetismus

Man soll sehen können,

- warum ein Atom in bestimmten Zuständen nicht strahlt,
- warum es in anderen Zuständen strahlt,
- ob die Strahlung stark oder schwach ist,
- ob die Strahlung linear oder zirkularpolarisiert ist.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r},t) = \hat{H} \psi(\vec{r},t)$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r},t)}$$

Laplace-Operator $\Delta = \nabla^2$

Nabla-Operator $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$

Q_e, m_e, Feld des Protons

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t)$$

komplexwertig

messen

$$\Psi(x, y, z, t)$$

$$\boxed{\Psi^{*}\Psi}$$

$$\boxed{\frac{\hbar}{2mi}(\Psi^{*}\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^{*})}$$

reelwertige Funktionen

Kontinuitätsgleichung

$$\left.\begin{array}{c} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t) \\ \rho = \Psi^*\Psi \\ \vec{j} = \dfrac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) \end{array}\right\} \quad \frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0$$

Elektronium

$$\left.\begin{aligned}\rho_{Q_e} &= Q_e \cdot \rho \\ \vec{j}_{Q_e} &= Q_e \cdot \vec{j}\end{aligned}\right\} \frac{\partial \rho_{Q_e}}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_{Q_e} = 0$$

Kontinuitätsgleichung der Ladung

$$\left.\begin{aligned}\rho_{m_e} &= m_e \cdot \rho \\ \vec{j}_{m_e} &= m_e \cdot \vec{j}\end{aligned}\right\} \frac{\partial \rho_{m_e}}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_{m_e} = 0$$

Kontinuitätsgleichung der Masse

Nimmt die elektrische Ladung (Masse) in einem Raumbereich ab bzw. zu, so muss ein entsprechender Strom heraus bzw. hineinfließen.

Interpretation bedeutet, dass man sich vorstellen darf:
Die Hülle eines Atoms besteht aus einem kontinuierlichen, in der Nähe des Kerns verteilten Stoff, der im Allgemeinen auch strömt. Wir nennen diesen Stoff **Elektronium.**

Intermezzo Anfang

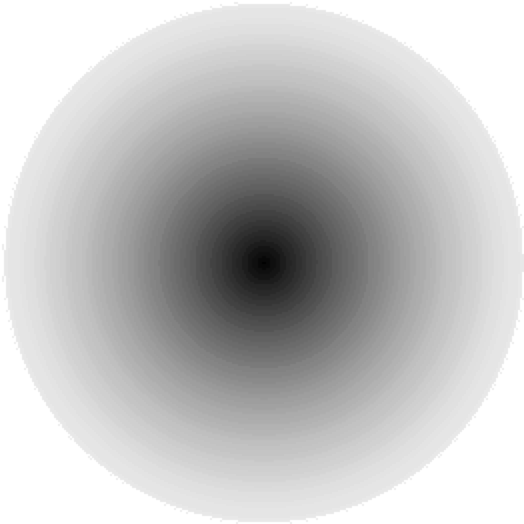
übliche Deutung

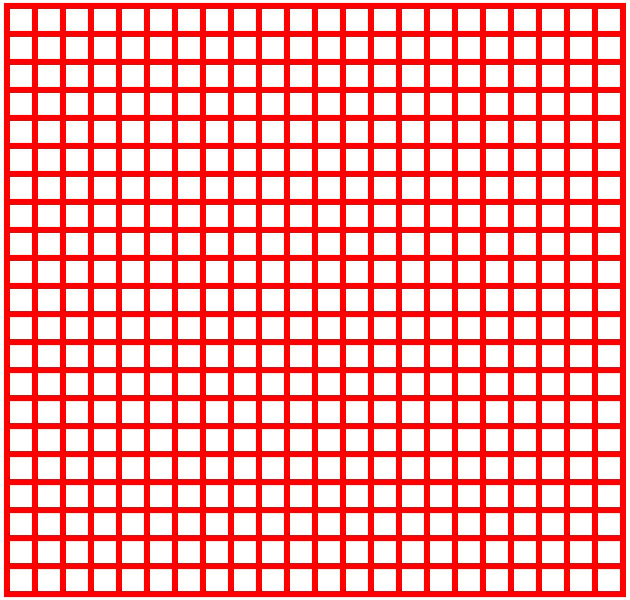
$$\rho = \Psi^* \Psi$$ Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$ Wahrscheinlichkeitsdichteströmung

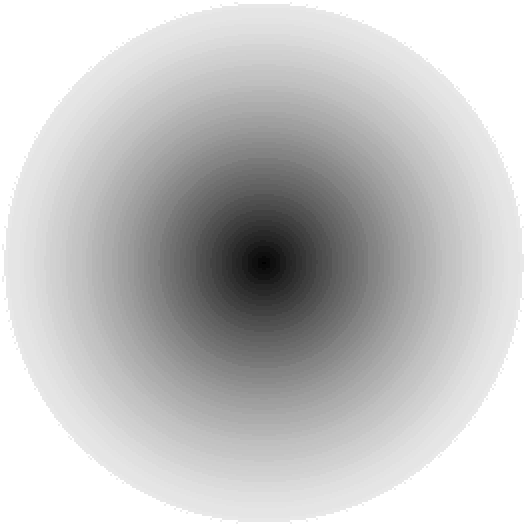
Zusammenhang mit dem Elektroniummodell?

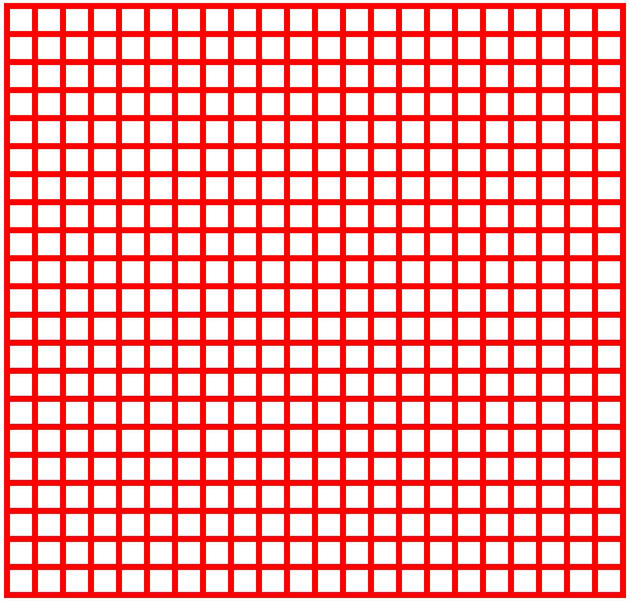
Intermezzo



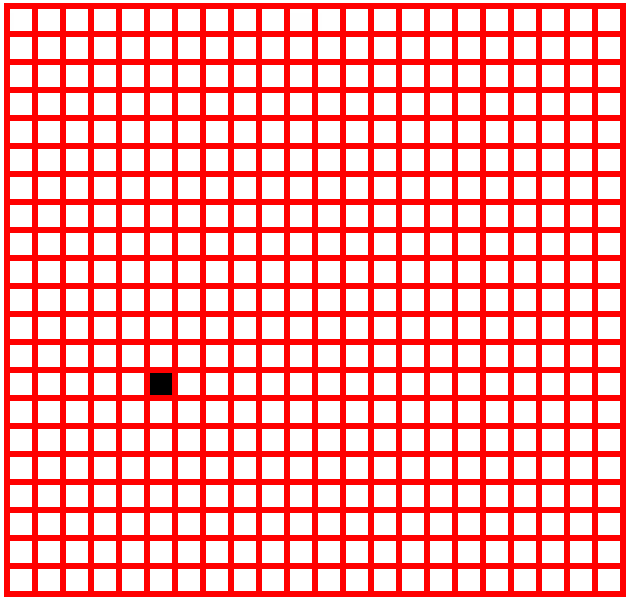


Intermezzo





Intermezzo Ende



War das Elektron unmittelbar vor der Messung schon an diesem Ort?

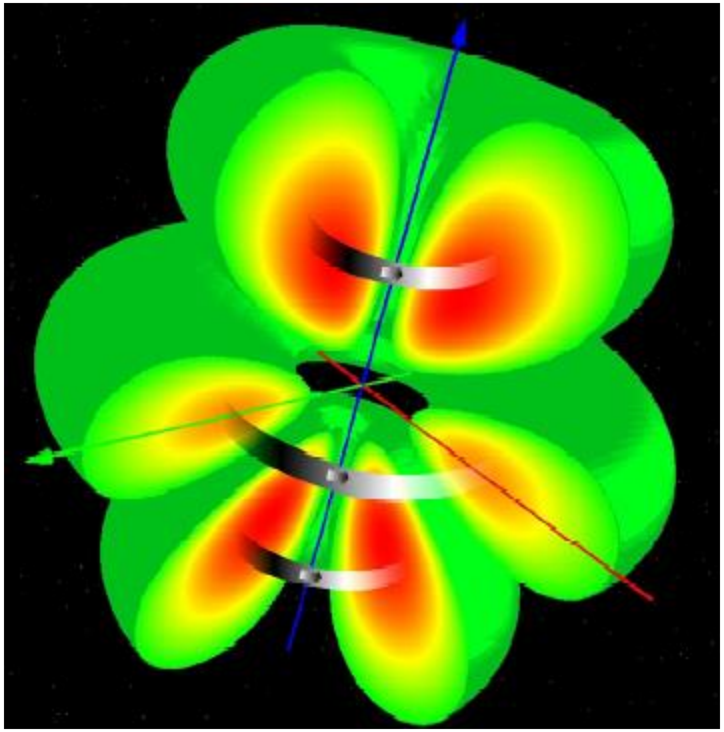
Die Elementarportionen des Elektroniums: Elektronen

Verteilung des
Elektroniums

$$\rho = \Psi^* \Psi$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

Strömen des
Elektroniums



4. Lösungen der Schrödingergleichnug

Spezielle Lösungen:

$$\Psi(\vec{r},t) = u_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$$

Alle speziellen Lösungen
bilden eine Basis des Vektorraums aller Lösungen

Vollständiges Funktionensystem

Allgemeine Lösungen:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_k a_k u_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$$

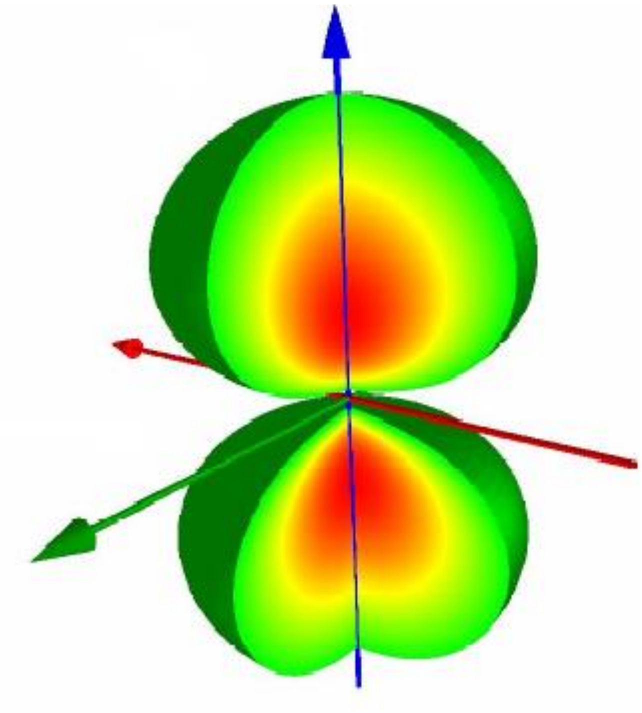
4.1 Bedeutung der speziellen Lösungen der Schrödingergleichung

$$\rho = \Psi(\vec{r},t)^* \cdot \Psi(\vec{r},t)$$

$$= u_k^*(\vec{r}) e^{+\frac{i}{\hbar}E_k t} \cdot u_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$$

$$= u_k^*(\vec{r}) \cdot u_k(\vec{r})$$

- Die Dichte des Elektroniums ist zeitunabhängig.
- Dichte also zeitlich konstant
- Eigenzustand – Eigenwert der Energie



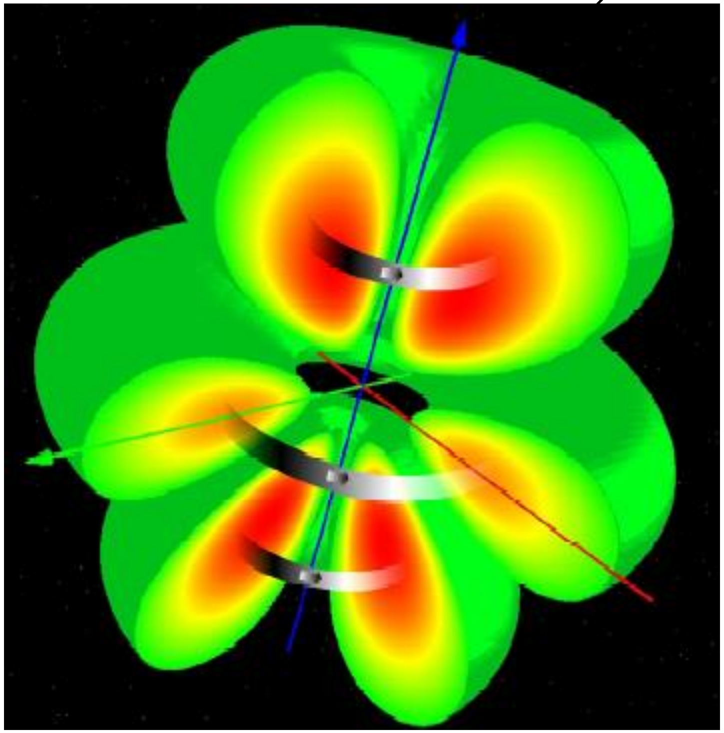
Stationärer Zustand

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left(u_k^*(\vec{r})e^{+\frac{i}{\hbar}E_k t}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\nabla u_k(\vec{r}) - u_k(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\cdot e^{+\frac{i}{\hbar}E_k t}\nabla u_k^*(\vec{r})\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left(u_k^*(\vec{r})\nabla u_k(\vec{r}) - u_k(\vec{r})\nabla u_k^*(\vec{r})\right)$$

- Die Strömung des Elektroniums ist zeitunabhängig.
- Strömung ist stationär → stationäres Magnetfeld
- Eigenzustand – Neben Eigenwert der Energie auch Eigenwert des Drehimpulses



Stationärer Zustand

2008 Bad Wildbad "Physics meets Chemistry"

Michael Pohlig

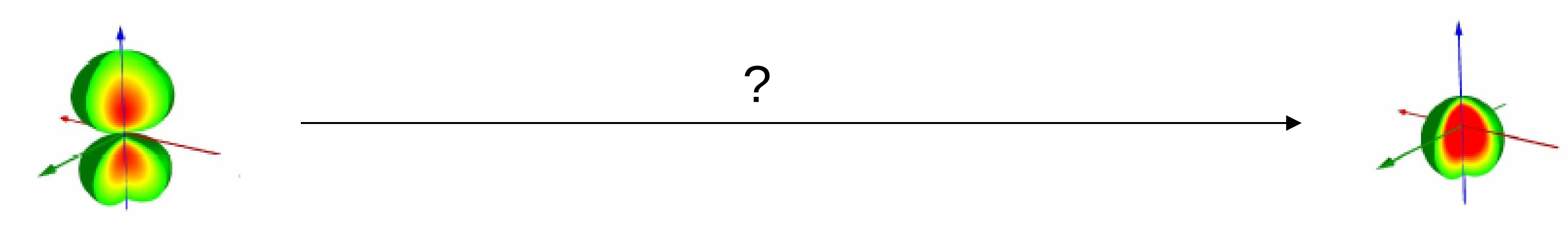
Zusammenfassung des bisher besprochenen:

- Spezielle Lösungen der Schrödinger Gleichung beschreibt:
  - stationären Zustand d.h.
    und sind zeitunabhängig
- Elektroniummodell: stationäre Zustände
  - die Verteilung des Elektroniums ist zeitunabhängig.
    → statisches elektrisches Feld
  - Wenn in einem stationären Zustand Stromdichte nicht verschwindet:
    → stationäres magnetisches Feld
  - Elektrodynamik sagt: Die Hülle strahlt in stationären Zuständen nicht!
- aber *Bohr*sches Modell
  - Sieht man in der Hülle kleine sich bewegende Körperchen' führt dies zu einem Widerspruch zur Elektrodynamik.
  - Flaches Wasserstoffatom.

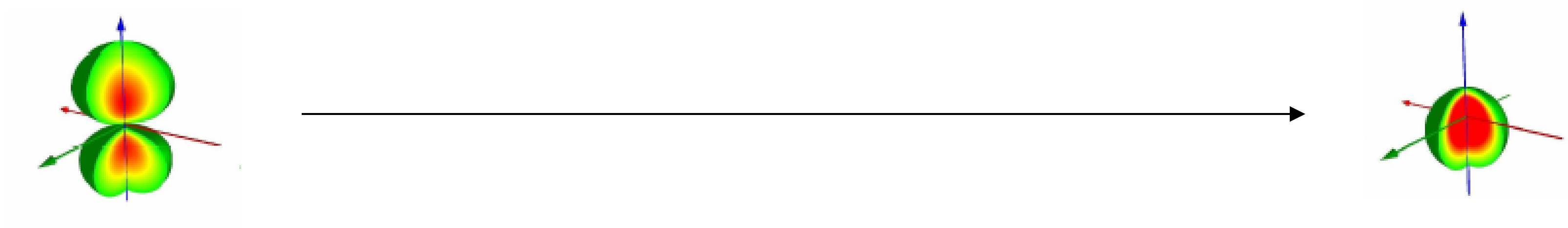
4.2 Bedeutung der allgemeine Lösung der Schrödinger Gleichung

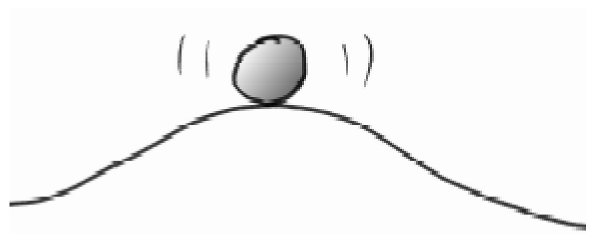
$$\psi(\vec{r},t) = c_A \psi_A(\vec{r},t) + c_B \psi_B(\vec{r},t)$$

- Dichte ist zeitabhängig
- Ortsabhängig, zeitunabhängiger Term
- Rest schwingt harmonisch
- Beschreibt den Übergang von einem stationären Zustand A in einem anderen stationären Zustand B



4.2 Bedeutung der allgemeine Lösung der Schrödinger Gleichung

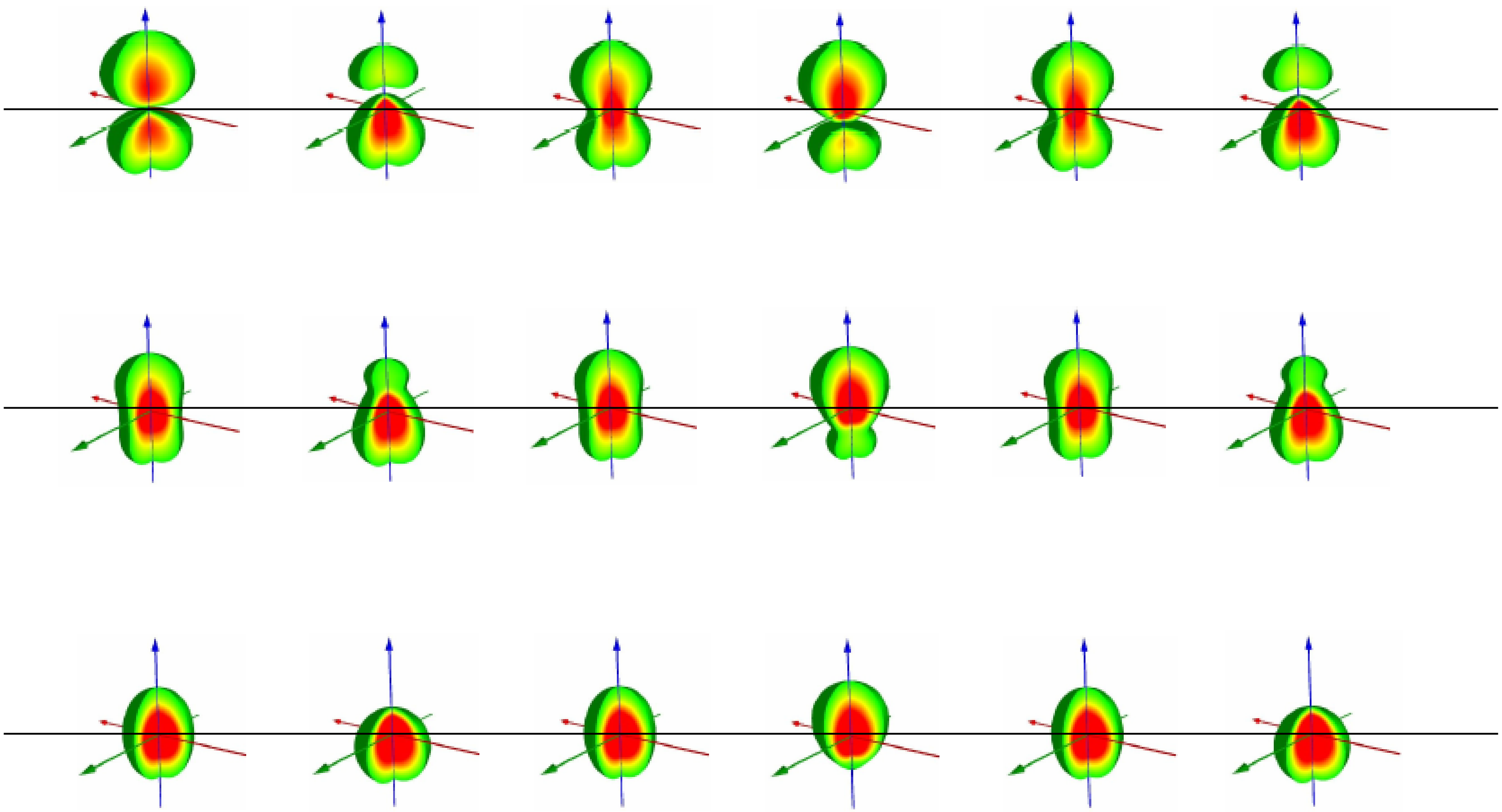




Wer stört das Gleichgewicht?

- Stöße mit anderen Atomen
- Fluktuationen des EM-Feldes im Grundzustand.

4.2 Bedeutung der allgemeine Lösung der Schrödinger Gleichung



Michael Pohlig

Was fehlt noch?

Bilder sollen folgende Eigenschaften veranschaulichen:

- ✓ Platzbedarf
- ✓ Drehimpuls
- ✓ Magnetismus

Man soll sehen können,

- ✓ warum ein Atom in bestimmten Zuständen nicht strahlt,
- ✓ warum es in anderen Zuständen strahlt,
- o ob die Strahlung stark oder schwach ist,
- o ob die Strahlung linear oder zirkular polarisiert ist.