Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Warum und wie Bohr'sches Atommodell und Quantenmechanik zusammen gehören – auch im Physikunterricht

Workshop „Quantenphysik in der Schule“
Heisenberg-Gesellschaft, Schloss Lautrach, 1. Juli 2017

Ingolf Hertel* und Burkhardt Priemer

ProMINT-Kolleg der Humboldt-Universität zu Berlin,
Institut für Physik und *Max-Born-Institut für
Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie

3. Juli 2017

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Einführung I

- Das einst bahnbrechende Bohr'sche Atommodel (1913), das weltweit das Bild vom „Atom“ geprägt hat, gehört heute in Deutschland zu den „gefährdeten Spezies“ im Schulunterricht.
- Es wird – als Ausgangspunkt für ein modernes Verständnis der Struktur von Atomen – seit den späten 1970er Jahren auf eine Weise verunglimpft, die an religiösen Fanatismus erinnert: *Du sollst Dir kein Bildnis noch irgend ein Gleichnis machen* .. .
- Aber sollte man nicht „Schüler dort abholen, wo sie stehen ..“? – bzw. .. wie sie Bewegung beobachten?
- Und: Wissenschaftlicher Fortschritt beginnt fast immer damit, dass man sich unerklärten Phänomenen mit anschaulichen Modellen und einleuchtenden Bildern nähert – das gilt selbst für die abstraktesten Konzepte –
- man könnte sagen: seit Platon's Höhlengleichnis.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Einführung II

- Das gilt ganz besonders in der Physik und beim Einstieg in so abstrakte Konzepte wie die Quantenmechanik.
- .. und ich weiß mich damit in guter Gesellschaft: Carl Wieman (Nobelpreis f. Physik 2001) hat mit seiner AG empirisch sehr überzeugend belegt (McKagan et al, 2008), dass "teaching the Bohr model is *not* an obstacle to learning the Schrödinger model" – sofern die Gemeinsamkeiten und Grenzen der Modelle hinreichend deutlich aufgezeigt werden.
- Modelle sind nie *per se* „falsch oder richtig" (Passmore et al, 2014, p. 1176). Es gibt kaum ein besseres Beispiel in der Physik, wo man „NOS", didaktisch so hoch geschätzt, für Schüler so deutlich machen kann.
- Und, wie McKagan et al (2008) betonen: "when solving simple problems, practicing scientists often use the Bohr model. Therefore, avoiding the Bohr model deprives students of a tool that scientists find useful."

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Ein Beispiel

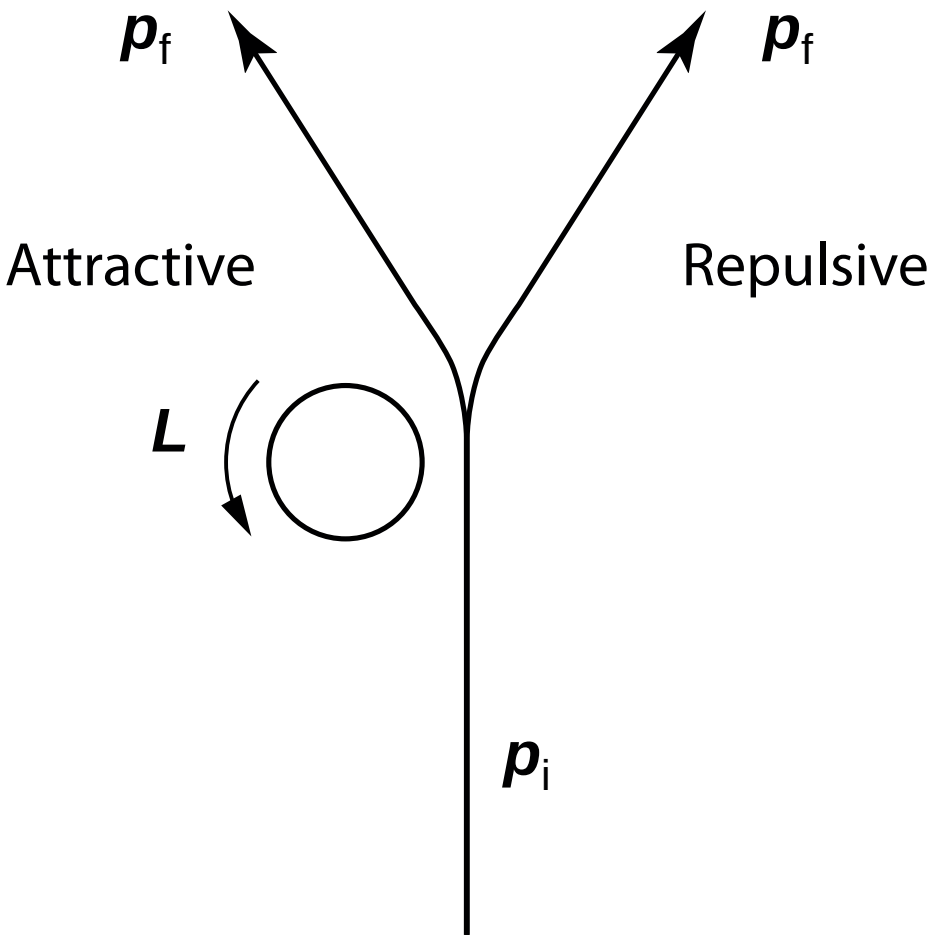
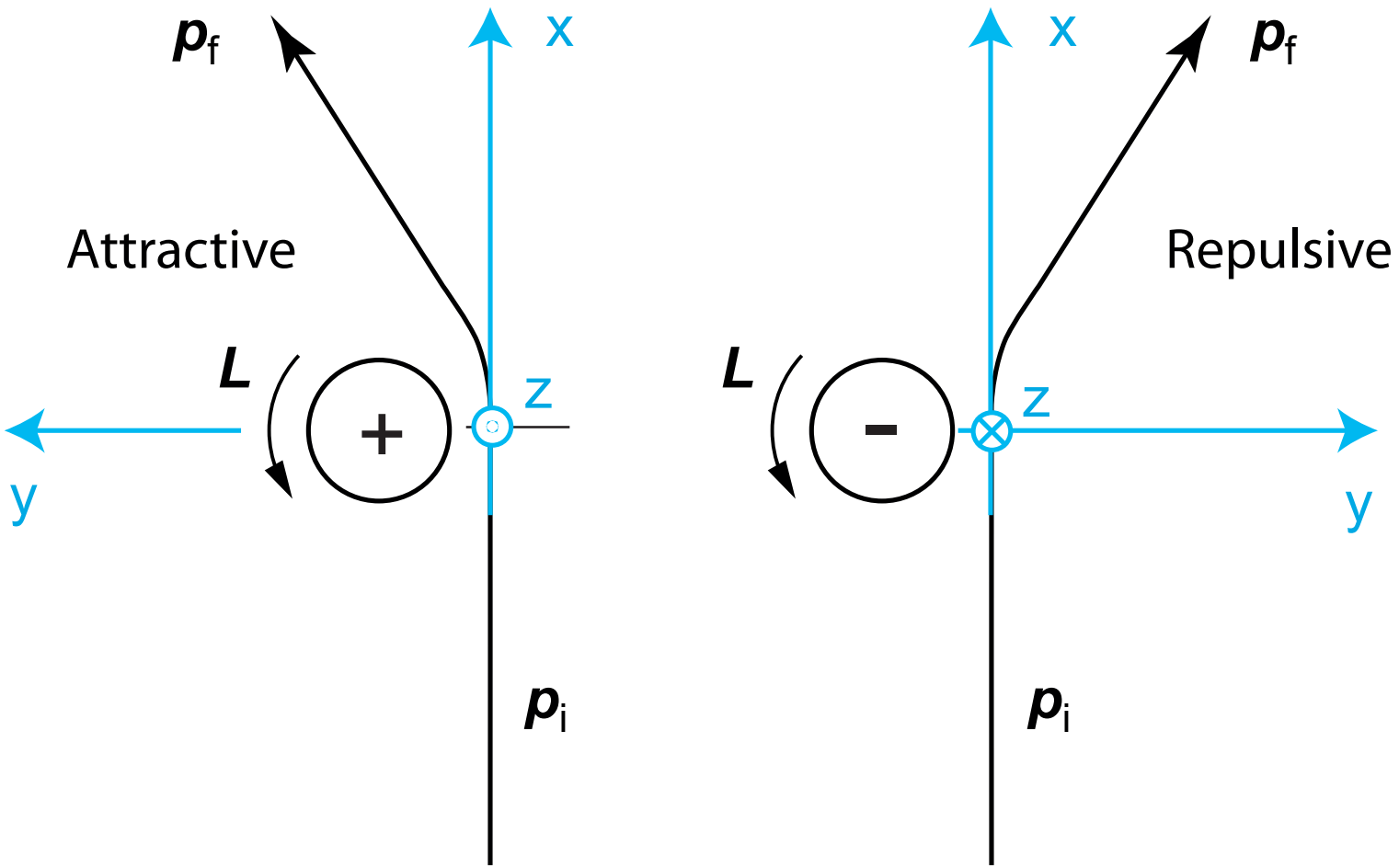


Abbildung: Intuitives Modell für die Übertragung von Drehimpuls $\vec{L}$ auf ein Atome im Stoßprozess nach Kohmoto and Fano (1981): "Das Diagramm zeigt, wie anziehende bzw. abstoßende Kräfte bei Stoßprozessen zu umgekehrtem Vorzeichen von $\vec{p}_i \times \vec{p}_f \cdot \vec{L}$ führen."

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Ein Beispiel



Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Übersicht

Einführung

Misskonzeptionen mit Schrödinger und Bohr

Intention unseres Ansatzes: Harmonisierung

Das Bohr'sche Atommodell

Quantenmechanisches Atommodell H-Atom

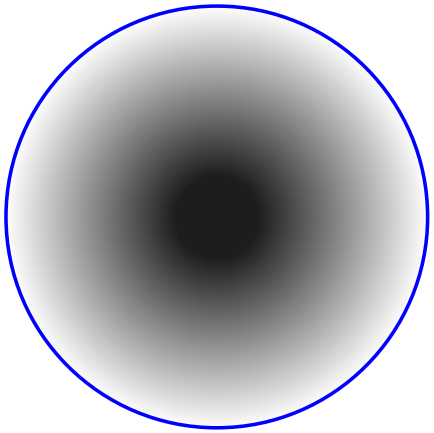
Zirkulare Rydbergzustände $n \gg 1$ mit $m = \ell = n - 1$

Elektronendynamik und Attosekundenphysik

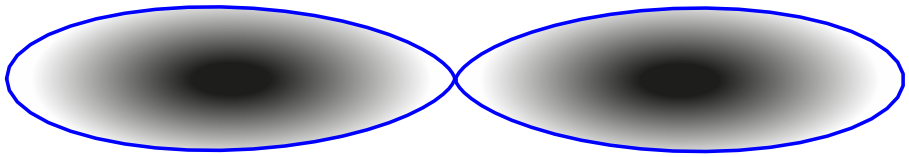
Schlussfolgerungen

Quellenverzeichnis

Misskonzeptionen auch mit Schrödinger möglich



s orbital



p orbital

Abbildung: Typische Schulbuch Orbitale (auch im WWW zu finden) für s- und p-Zustände. Nach einem kurzen Hinweis auf das Bohr'sche Model liest man: "*Die Quantenphysik macht dagegen keine Aussage darüber, was die Elekronen im Atom machen, sie macht nur Aussagen über mögliche Messergebnisse. So kann die Wahrscheinlichkeit vorausgesagt werden, ein Elektron bei einer Ortsmessung an einer bestimmten Stelle im Atom nachzuweisen. Stellt man diese Lokalisationswahrscheinlichkeiten durch unterschiedliche Grautöne dar, so erhält man die bekannten Orbitalbilder.*" *Solche Bilder und die einschlägigen Texte sind höchst irreführend, wie wir später diskutieren werden.*

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Das Problem der QM in der Schule

- Die Schrödinger-Gleichung ist eine (komplexe) partielle Differenzialgleichung 2. Ordnung in vier Dimensionen mit komplexen Lösungen.
- Details und Lösungen können allenfalls in 1D *plausibel* gemacht werden.
- So führt z.B. auch der Versuch, 3D mit kubischen Randbedingungen zu lösen, völlig in die Irre, auch wenn die Bilder der Orbitale schön aussehen.
- In jedem Falle fehlt der **Bahndrehimpuls** – eine Observable, ohne die man Atome nicht verstehen kann!
- Bahndrehimpuls ist aber die zentrale Größe bei Bohr.
- Dagegen wird gesagt, das Bohr'sche Atommodell sei falsch, weil es die klassischen Trajektorien in der QM nicht gäbe – eine Aussage, die (modulo Unschärferelation) genauer zu spezifizieren wäre.
- Bohr hat aber auch nie behauptet, dass sein Modell solche klassischen Trajektorien im stationären Atom beschreibe!

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Zusammenführung von Bohr und Schrödinger

- Wir wollen also versuchen, beide Modelle – Bohr und Schrödinger – zusammenzuführen, zu vergleichen und genau nachzusehen, wo die **jeweiligen** Grenzen liegen.
- Zentral ist dabei die Heisenberg'sche Unschärferelation:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Wenn wir *Bahn* oder *Orbit* sagen, immer *mitdenken*.
- Natürlich können wir hier noch kein im Detail ausformuliertes Unterrichtskonzept vorgestellen, auch kein detailliertes Curriculum.
- Wir präsentieren aber einige Grundgedanken, wie man auf einer physikalisch sauberen Basis die beiden Betrachtungsweisen aufeinander aufbauen und harmonisieren kann.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Das Bohr'sche Atommodell 1.

- Erinnerung an die Grundannahmen und Ergebnisse des Bohr'schen Modells (1913). Leider in den Lehrbüchern meist falsch dargestellt.
- Bohrs Antwort auf die Unvereinbarkeit der klassischen Elektrodynamik mit der beobachteten, von Atomen emittierten Strahlung waren seine zwei "*principle assumptions*" (Postulate):

1. *That the dynamical equilibrium of the systems in the stationary states can be discussed by help of the ordinary mechanics, while the passing of the systems between different stationary states cannot be treated on that basis.*

- Aber: "*.. it is known that the ordinary mechanics cannot have an absolute validity, but will only hold in calculations of* **certain mean values** *of the motion of the electrons*"

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Das Bohr'sche Atommodell 2.

2. *That the latter process is followed by the emission of a homogeneous radiation, for which the relation between the frequency and the amount of energy emitted is the one given by Planck's theory.*

- Das 2. Postulat impliziert also:

$$hf = W_{\mathrm{o}} - W_{\mathrm{u}}$$

- Das waren gewissermaßen zwei Hiebe auf den Gordischen Knoten.
- Der Vergleich mit dem Experiment ergab damit beim H-Atom hervorragende Übereinstimmung, wenn für den Bahndrehimpuls des Elektrons gilt:

$$L = n\hbar \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3 \ldots$$

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Drehimpulsquantisierung – Das Schlüsselergebnis

Diese Beziehung wird oft (fälschlicherweise) Erstes Bohr'sches Postulat genannt. Es ist aber das – sehr beeindruckende – Resultat seines Vergleichs von beobachteten Spektren mit der Berechnung von klassischen Bahnen der einfachsten Art:

- *Die Entdeckung der* **Drehimpulsquantisierung**.

Und zwar wohlgemerkt: für den **Bahndrehimpuls**!

Das quantenmechanische Resultat weicht im Prinzip davon nur in einem Punkt ab:

- Es gibt **auch** stationäre Zustände mit L=0. Quantisierung gilt ganz generell –
  nicht nur für das H-Atom.

Und noch einmal: Die sogenannten Bohr'schen Orbits (Bahnen) charakterisieren nach Bohrs eigenem Verständnis (s.o.) nur „gewisse Mittelwerte“, sind also symbolisch zu verstehen.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Bohr'sches H-Atom, Gesamtenergie

Für stationäre Zustände gilt:

Gesamtenergie = kinet. Energ. + pot. Energ.
= Radialenerg.+ Rotationsenerg. + Coulomb-Energ.

In mathematisch kompakter, 'dimensionsloser' Form:

$$W = \frac{p^2}{2} + V(r) = \frac{p_r^2}{2} + \frac{L^2}{2r^2} - \frac{1}{r}$$

$$W = \frac{p_r^2}{2} + V_{\text{eff}}(r) \quad \text{mit} \quad V_{\text{eff}}(r) = \frac{L^2}{2r^2} - \frac{1}{r}$$

Längen, Energien und Drehimpuls werden in **atomaren Einheiten (a.u.)** gemessen:
$a_0 \simeq 5.292 \times 10^{-11}\,\text{m}$ (Länge), $E_\text{h} = 27.2\,\text{eV}$ (Energie),
$\hbar = h/2\pi = 1.05 \times 10^{-34}\,\text{J s}$ (Drehimpuls),
$m_\text{e} = 9.109 \times 10^{-31}\,\text{kg}$ (Masse), $e = 1.602 \times 10^{-19}\,\text{C}$ (Ladung), $t_0 = 2\pi \frac{m_\text{e} a_0^2}{h} = 24.2\,\text{as}$ (Zeit)

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls
Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Bohr'sches H-Atom, Gesamtenergie

Bohr'sche Rechnung: Kreisbahnen: dann wird die

Gesamtenergie = kinet. Energ. + pot. Energ.
= ~~Radialenerg.~~ + Rotationsenerg. + Coulomb-Energ.

In mathematisch kompakter, 'dimensionsloser' Form:

$$W = \frac{p^2}{2} + V(r) = 0 + \frac{L^2}{2r^2} - \frac{1}{r}$$

$$W = V_{\text{eff}}(r) \quad \text{mit} \quad V_{\text{eff}}(r) = \frac{L^2}{2r^2} - \frac{1}{r}$$

bis hierher in **atomaren Einheiten (a.u.)**

$L = n\hbar$ (Quantisierung) und $V_{\text{eff}}(r_n) =$ Minimum

$$\Rightarrow r_n = \left(\frac{L}{\hbar}\right)^2 a_0 \quad \text{und} \quad W_n = -\frac{E_{\text{h}}}{2n^2}$$

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Bohr'sches H-Atom, Potenzialbild

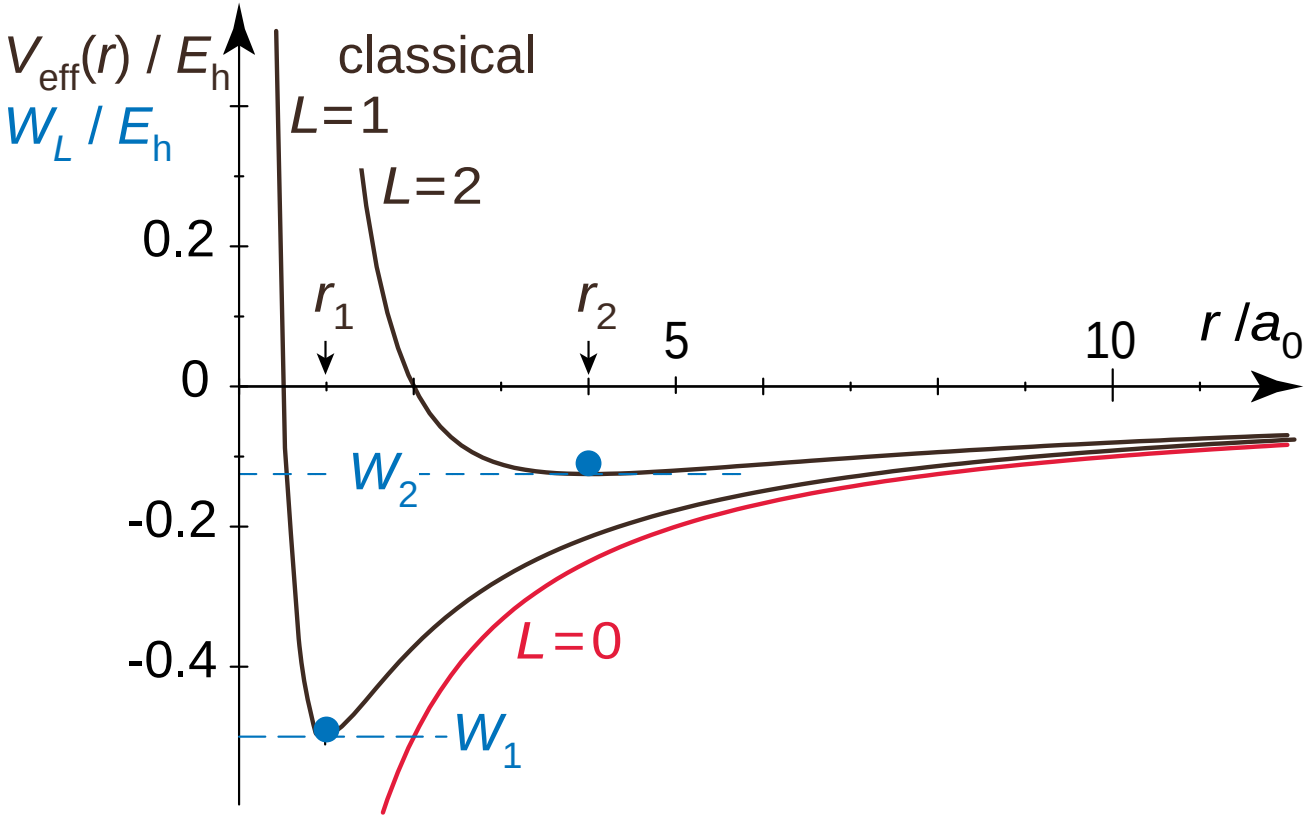


Abbildung: Effektives Potenzial $V_{\text{eff}}(r) = L^2/2r^2 - 1/r$ für klassische e-Bahnen im Coulomb-Potenzial als Funktion des Abstands r vom Kern. Der Bahndrehimpuls L in $\hbar$ ist eine ganze Zahl (hier $n = 0, 1, 2$). Horizontale gestrichelte Linien: Gesamtenergie $W_n = -1/(2n^2)$ in $E_{\text{h}} = 27.2\,\text{eV}$.

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Quantenmechanisches Atommodell H-Atom

Gesamtenergie = **Radialenergie** + **Rotationsenergie** + **Coulomb-Energie**

genau wie klassisch, aber: **Observable** $\Rightarrow$ **Operatoren**.
Energie $W \Rightarrow \widehat{H}$, Impuls (radialer) $p_r \Rightarrow \widehat{p}_r$,
Bahndrehimpuls $\vec{L} \Rightarrow \widehat{\vec{L}}$ und Ortsvektor $\vec{r} \Rightarrow \vec{r}$. In **a.u.**

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_r^2}{2} + \frac{\widehat{\vec{L}}^2}{2r^2} - \frac{1}{r}.$$

In der Schule **plausibel kommunizieren** sollte man:

die Schrödinger Gleichung: $\widehat{H}\,\Psi(\vec{r}) = W\Psi(\vec{r})$

Quantisierung des Bahndrehimpulses (statt $L = n\hbar$):

$$L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2 \quad \text{mit} \quad \ell = 0, 1, 2, 3 \ldots$$

$$L_z = m\hbar \quad \text{mit} \quad m = -\ell, -\ell+1, \ldots + \ell$$

Vielleicht die Vertauschungs Regeln $[r_i, p_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Vektormodell für einen p Zustand

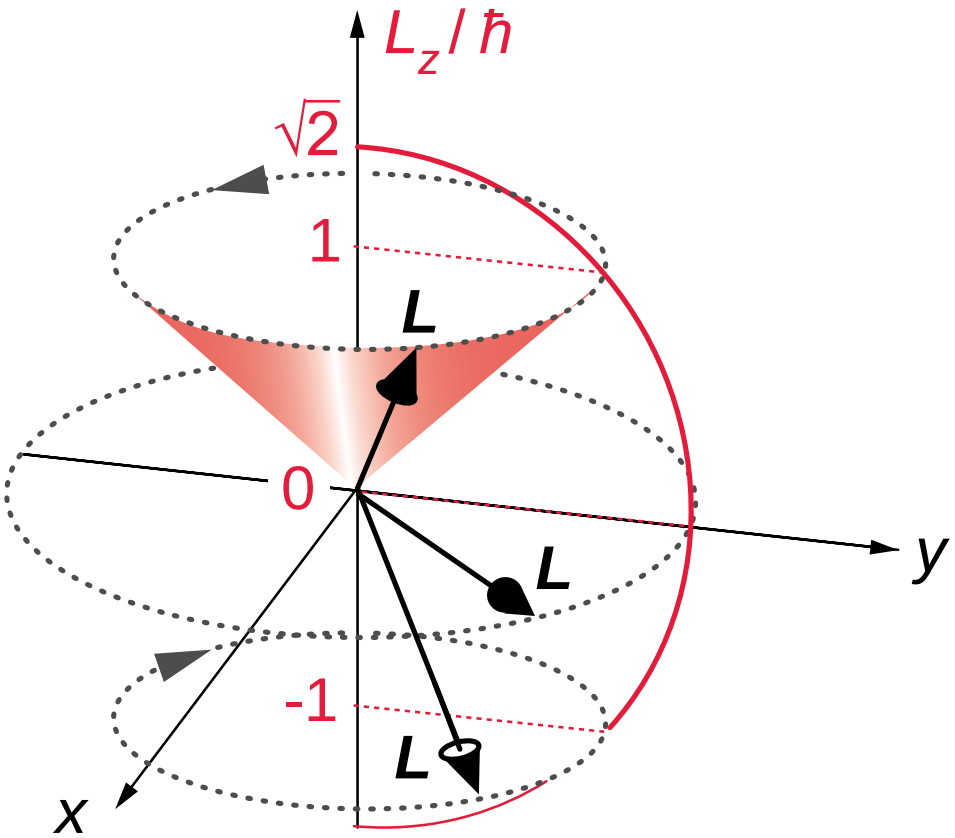


Abbildung: Vector diagram for a p state, i.e. for orbitals with $\ell = 1$, the magnitude of the orbital angular momentum being $L = \sqrt{1(1+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar$. The vector $\vec{L}$ (arrows) can be oriented in space on the dotted circles, here with well defined projection onto the z axis: $L_z = +1\hbar$ or 0 or $-1\hbar$.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Radiale Schrödinger Gleichung

Nach Separation der Winkelanteile (Bahndrehimpuls):

$$\left[\frac{\widehat{p}_r^2}{2} + V_{\text{eff}}(r)\right] R_{n\ell} = W_{n\ell} R_{n\ell}$$

mit dem effektiven Potenzial

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{1}{r}$$

für QM-Elektron im Coulomb-Potenzial; r Abstand vom Kern in a.u.

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Quantenmechanisches H-Atom, Potenzialbild

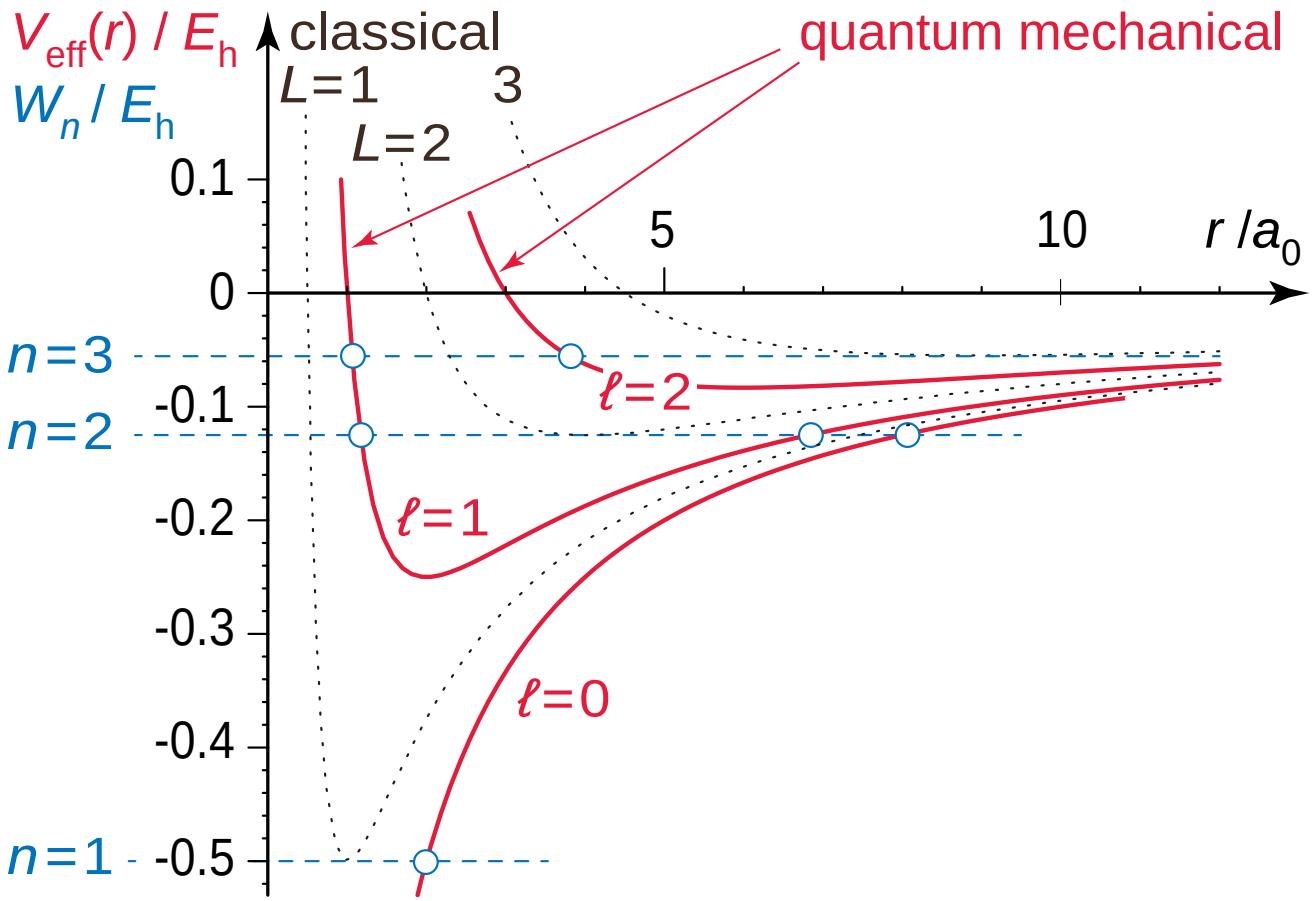


Abbildung: Effektives Potenzial $V_{\text{eff}}(r) = \ell(\ell+1)/2r^2 - 1/r$ für QM-Elektron im Coulomb-Potenzial; r Abstand vom Kern in a.u. Horizontale, gestrichelte Linien: Eigenenergien für $n = 1, 2, 3$ in $E_{\text{h}} = 27.2\,\text{eV}$. Kleine Kreise: klassische Umkehrpunkte. Gepunktet das klassische effektive Potenzial für $\ell = 1, 2, 3$.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Was „beweist“ die Quantenmech. eigentlich?

- Bei Bohr: Drehimpulsquantisierung ist ein Axiom, experimentell gerechtfertigt.
- QM hebt die Axiomatik auf eine „höhere“ mathematische Stufe, experimentell gerechtfertigt: Große Allgemeingültigkeit, hohe Präzision.
- Speziell Schrödinger: Wellenfunktionen sollen vernünftigen Randbedingungen genügen.
- Für Winkelabhängigkeit (und damit für Bahndrehimpuls) $\Rightarrow$ Wellenfunktionen periodisch in ϕ und θ (also nicht mehrdeutig).
- In der Operatorendarstellung (Heisenberg): Quantisierungsbedingungen für $\widehat{\vec{L}}^2$ und $\widehat{L}_z$ folgen aus Vertauschungsrelationen (Heisenberg'sche Unschärferelation).
- Also reine Algebra – vielleicht sogar schultauglich?
- **Und:** Schrödinger erklärt nicht Bohr-Postulat 2 (Strahlungsproblem) – das tut erst die QED

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit H-Elektron

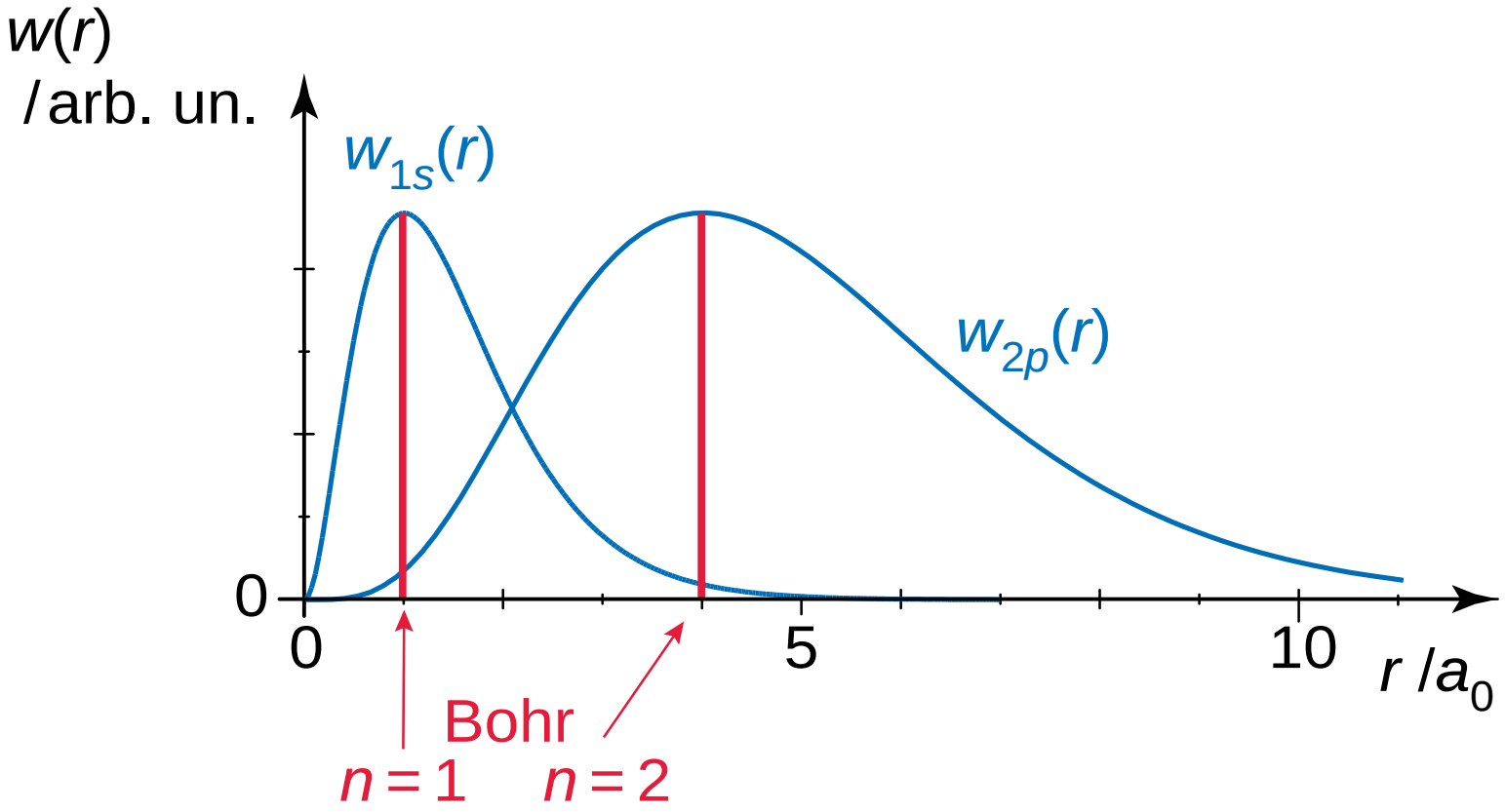


Abbildung: Probability distribution $w(r) = r^2|R_{n\ell}(r)|^2$ for an electron in the H atom to be found at a distance r from the atomic nucleus for the states $1s$ and $2p$ – in arbitrary units, normalized to equal maxima. In Bohr's model these probabilities correspond to a delta function at the radii $r_1 = 1a_0$ and $r_2 = 4a_0$, respectively, as indicated by bold vertical lines.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

QM Winkelabhängigkeit der Wahrscheinlichkeit

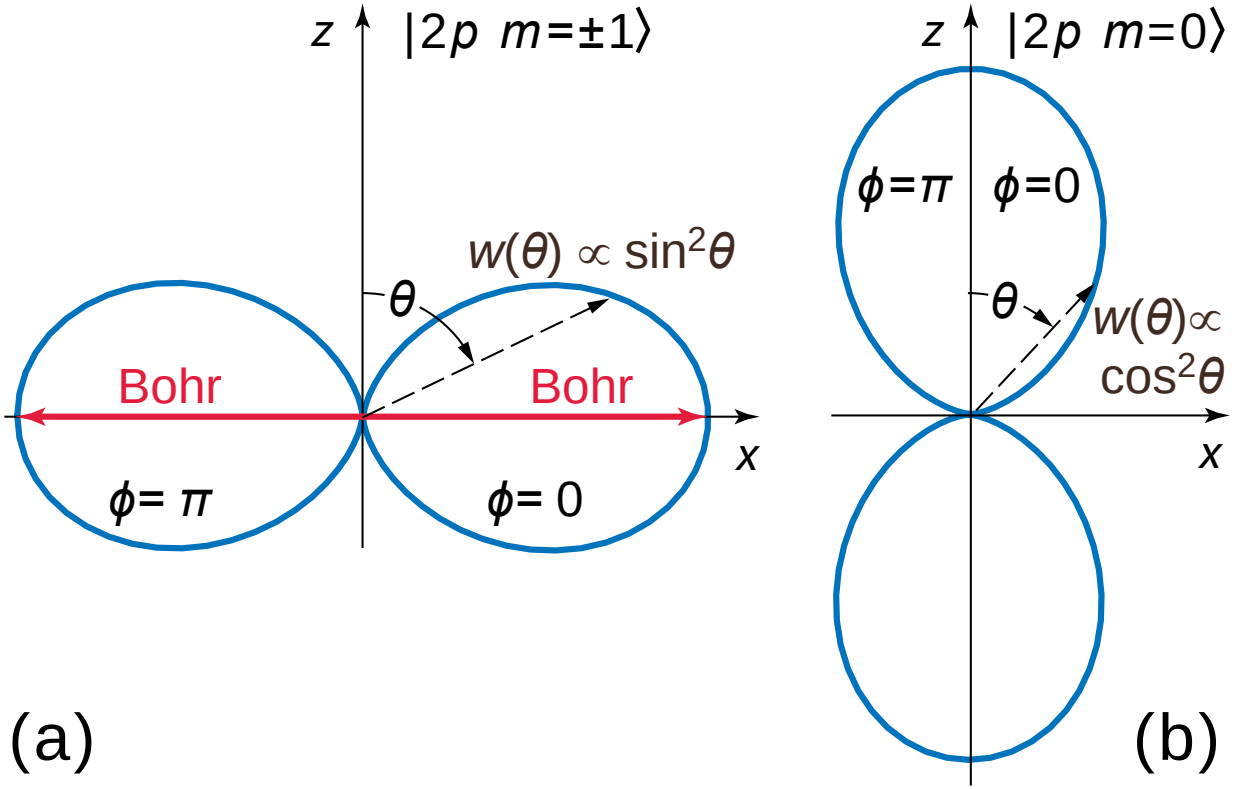


Abbildung: Quantum mechanical probability distribution $w(\theta)$ as a function of the polar angle θ in the xz plane (i.e. at two fixed azimuthal angles $\phi = 0$ and π) for the **(a)** $2p_{\pm 1}$ and **(b)** $2p_0$ orbitals; $w(\theta)$ is given by the length of the dashed arrows between origin and boundary of the orbital (blue). A Bohr orbital would be represented in this view by the bold arrows. – **cf. Misskonzept.**

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Konturbilder von $1s_0$ und $2p_{\pm 1}$ Orbitalen

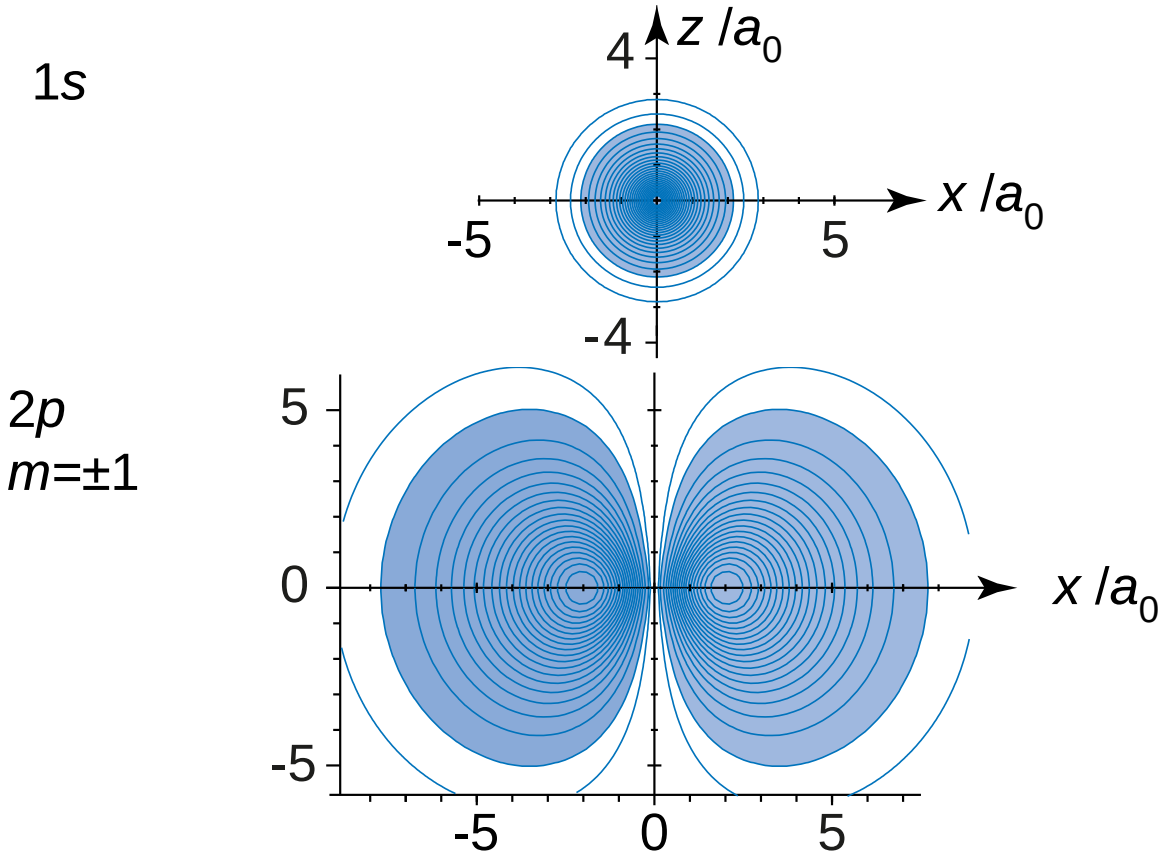


Abbildung: Contour plots of the probability density for two hydrogen $|n\ell m\rangle$ orbitals: $1s_0$ and $2p_{\pm 1}$. The lines connect points in the xz plane of equal $|\Psi(x,0,z)|^2$; both orbitals have cylindrical symmetry around the z axis. Shaded areas indicate volumes within which the electron is found with a probability $\simeq 80\%$. Man beachte: Maximum bei $2a_0$ für $2p_1$ – vgl. **radWahrsch**.

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

3D Winkelverteilung für $2p_1$ und $2p_0$ Zustände

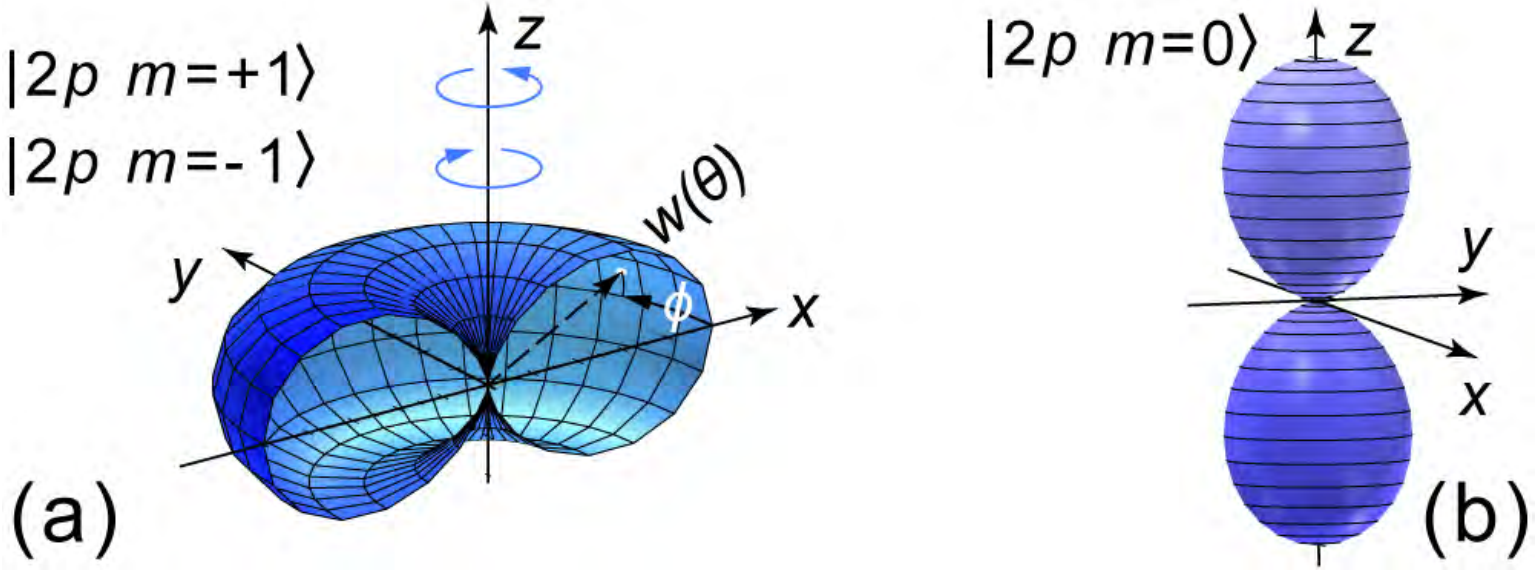


Abbildung: Three dimensional view of the angular distributions of $2p$ orbitals. Left: $2p_1$ (or $2p_{-1}$) orbital with $m = +1$ ($m = -1$); right: $2p_0$ orbital with $m = 0$.
The $2p_{\pm 1}$ orbital is shown only for $y > 0$ to allow a comparison with the cut through the xz plane in Fig. 7.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

3D Winkelverteilung für (reelle) $2p_{xyz}$ Zustände

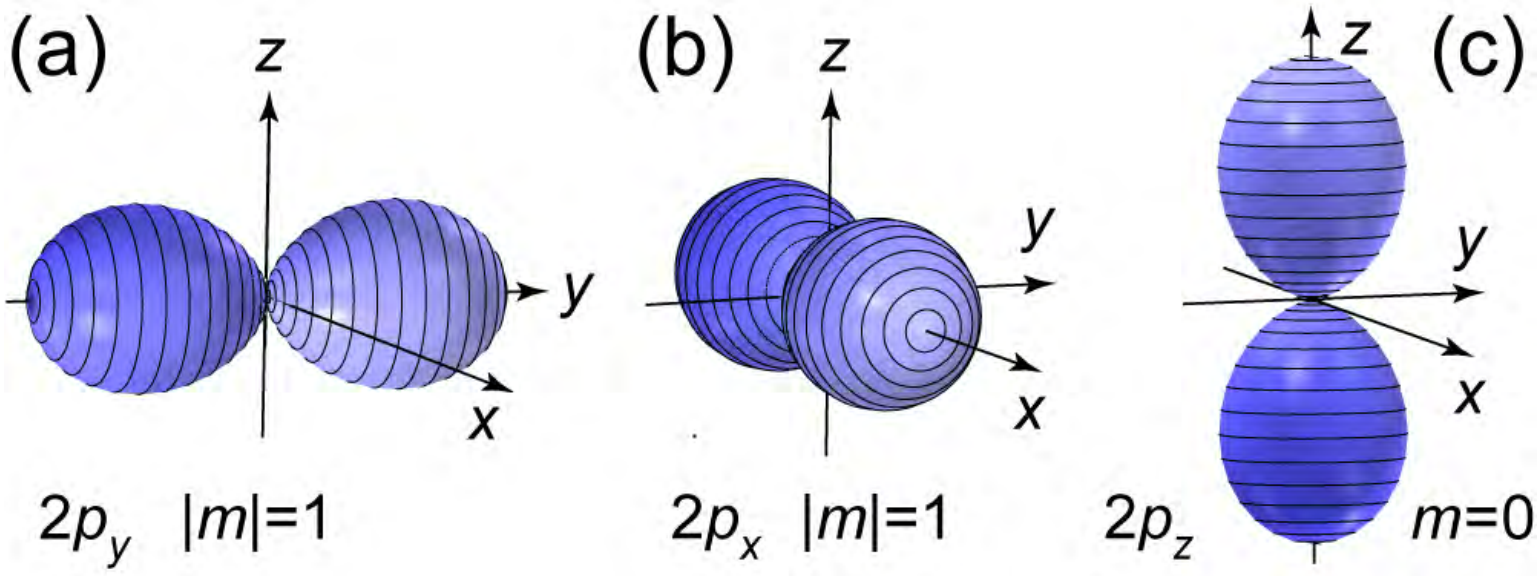


Abbildung: Three dimensional view of the angular distributions for the $2p_x, 2p_y$ and for the $2p_z$ orbitals with $|m| = 1$ and $|m| = 0$, respectively (only the absolute value of the angular momentum component in z direction is defined, as opposed to the $2p_{\pm 1}$ orbital (siehe **3DWinkelvert**).

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

3D-xy Verteilung für $2p_{\pm 1}$ Zustände

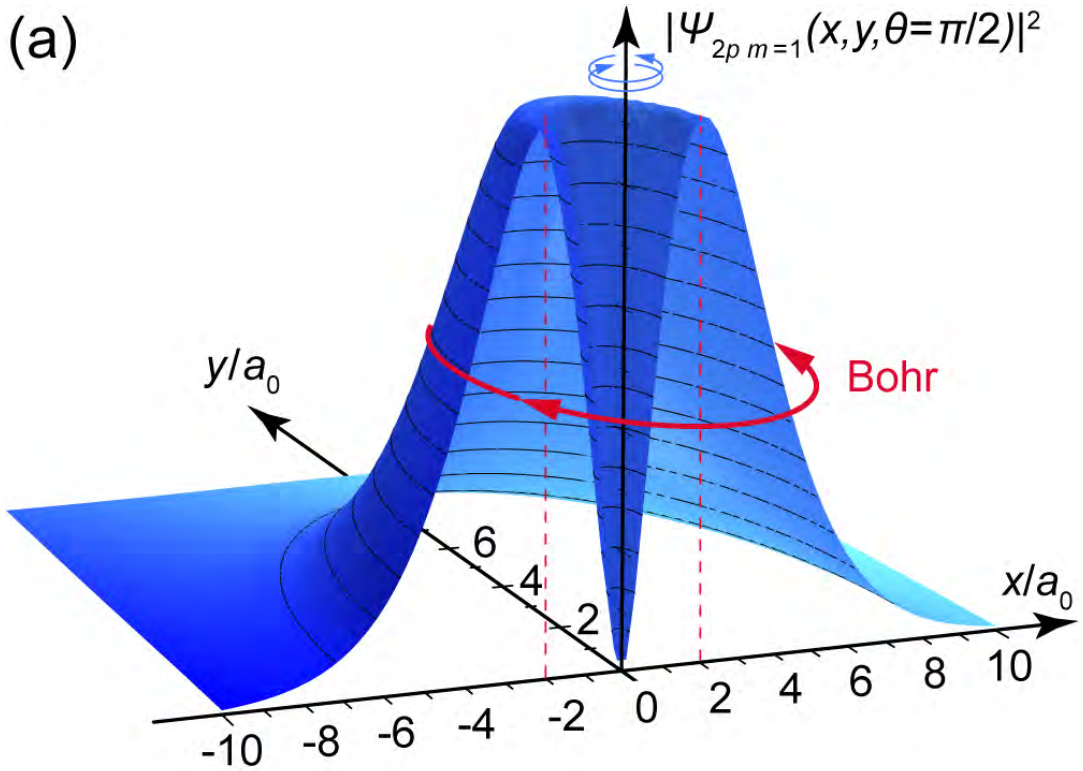


Abbildung: Quantum mechanical probability distribution $|\Psi(x,y)|^2$ (in arbitrary units) for the $2p_{\pm 1}$ states in the xy plane (i.e. $\theta = 0$) in 3D-view; for transparency we show only $y \geq 0$. Note that the maximum is now at $r = \sqrt{x^2 + y^2} = 2$ (dashed vertical lines) in contrast to Fig. 6, where $w(r)$ is the probability integrated over all azimuthal angles. For comparison, a Bohr orbit with $r_2 = 4a_0$ is indicated schematically.

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung

Misskonzeptionen

Harmonisierung

Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild

QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen

ZirkulareR

Elektronendynamik

Conclusions

Quellenverzeichnis

Literatur

Zirkulare Rydbergzustände

$n \gg 1$ mit $m = \ell = n - 1$

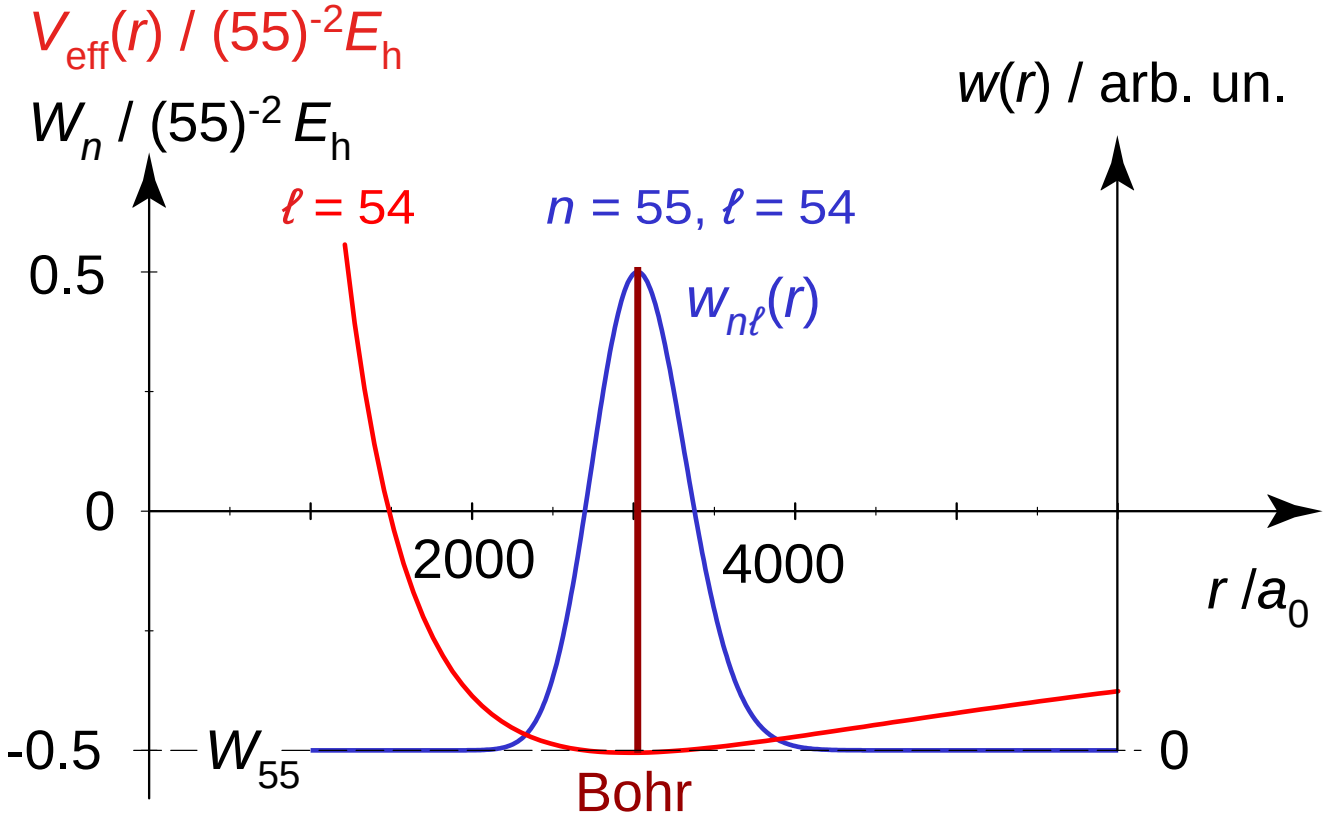


Abbildung: Centrifugal potential (red) $V_{\text{eff}}(r) = \ell(\ell+1)/2r^2 - 1/r$ and $w(r)$ (blue) for $|n = 55, \ell = 54, m\rangle$ states. Otherwise as in Fig. 5 and Fig. 6, respectively. Note, however, the very different scales.

Orbits, Orbitale und Bahndrehimpuls

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

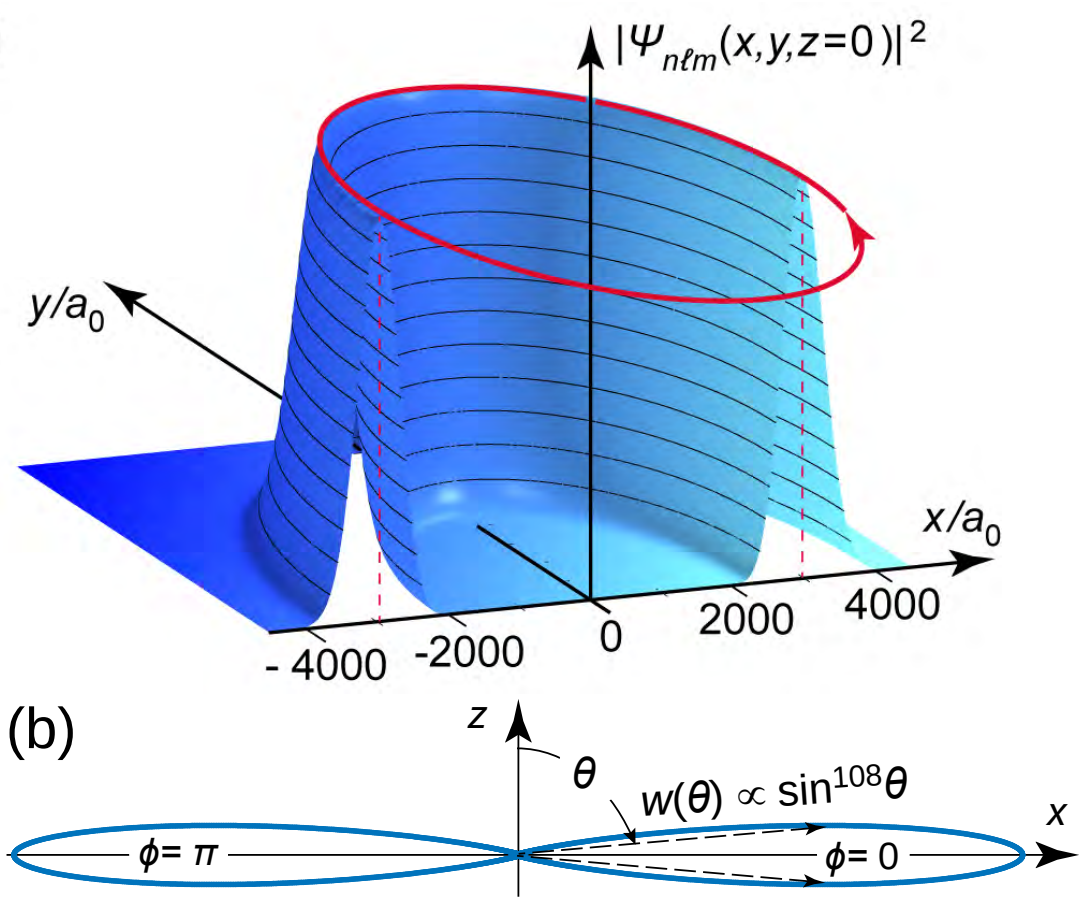


Abbildung: $|n = 55, \ell = 54, m = 54\rangle$ circular Rydberg state: Quantum mechanical probability distribution of this 'Bohr like' orbital. **(a)** $|\Psi(x,y)|^2$ in the xy plane as in Fig. 11 with its maximum at $r = \sqrt{x^2 + y^2} = 2097a_0$ (Bohr radius $r_{55} = 3025a_0$); the red circle indicates the corresponding classical orbit with radius $r_n = 3025a_0$. **(b)** Angular distribution as in Fig. 7.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Elektronendynamik und Attosekundenphysik

- Zhelyazkova and Hogan (2016) haben den Zustand $|n = 55, \ell = 54, m = +54\rangle$ in He präpariert.
- Spezielle Superpositionen solcher zirkularer Rydberg Zustände (Wellenpakete) erlauben *Beobachtung* der Dynamik der Elektronen.
- Klassische Umlaufzeit solcher Elektronen:

$$T_L = 2\pi r_L / v_L = 2\pi t_0 \left(L/\hbar\right)^3 = 152\,\mathrm{as}\left(L/\hbar\right)^3 ,$$

  für $n = 300$ ist $T \simeq 100\,\mathrm{ns}$: bequem zugängliches Zeitfenster. Experiment und Modellrechnungen (auch klassisch) von Dunning et al (2009, 2010).
- Stand der Femto- ($1\,\mathrm{fs} = 10^{-15}\,\mathrm{s}$) und Attosekunden ($1\,\mathrm{as} = 10^{-18}\,\mathrm{s}$) Forschung (Calegari et al, 2016): **Kürzeste Laserimpulse** $67\,\mathrm{as}$; Maxima von fs Pulsen kontrollierbar auf ca. $t = 12\,\mathrm{as}$ (Koke et al, 2010).
- Vergleich (hypothetische) Umlaufperiode eines $2p$ Elektrons auf Bohr Orbit: $T = 2\pi t_0 = 152\,\mathrm{as}$.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Schlussfolgerungen I

- Das Bohr'sche Atommodell hat, wie alle Modelle, seine Grenzen, passende und unpassende Repräsentationen und spezifischen Vorzüge
- Bohrs großes Verdienst war die dramatische Überwindung klassischer Konzeptionen durch die Einführung von stationären Zuständen und die Entdeckung der Quantisierung des Bahndrehimpulses.
- Die Quantenmechanik hat dafür eine Axiomatik entwickelt, die gerechtfertigt wird durch eine breite Übereinstimmung von darauf basierenden quantitativen Berechnungen mit einer Fülle von Experimenten.
- Leider ist der Zugang zur QM in der Schule begrenzt und blendet in aller Regel den quantisierten Drehimpules aus, der für ein Verständnis von Atomen unverzichtbar ist

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

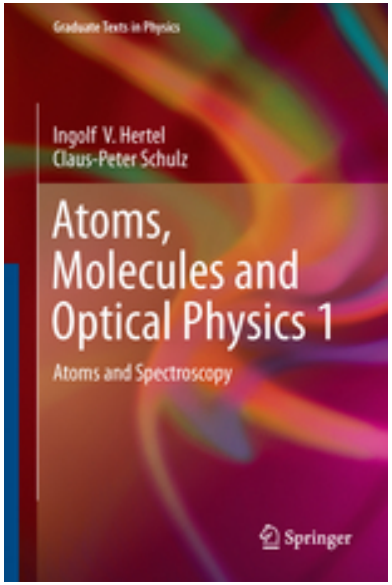
Schlussfolgerungen II

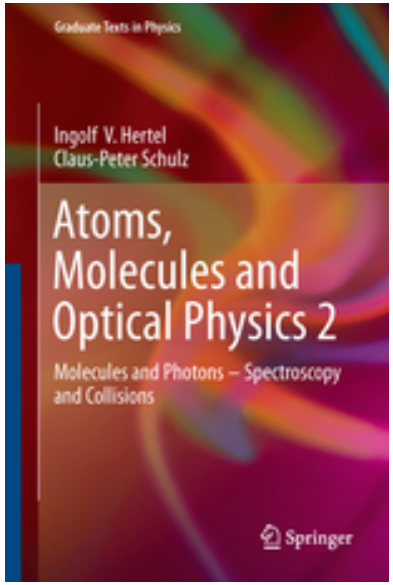
- Das Bohr'sche Modell ist dagegen sehr einfach und anschaulich und erlaubt einen direkten Zugang zum Bahndrehimpuls als zentraler Observablen, auch wenn deren Repräsentation durch Kreisbahnen lediglich symbolisch verstanden werden darf.
- Es kann und sollte Ausgangspunkt jeder Einführung in die Physik von Atomen und Molekülen in der Schule sein – zusammen mit einer sorgfältigen Diskussion seiner Grenzen,
- und verbunden mit einigen Elementen der Quantenmechanik, die aufzeigen, wie sich diese Grenzen überwinden lassen.

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Dank und Ende

- dem**Max-Born-Institut** *für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie* in Berlin Adlershof für einen gut ausgestatteten Arbeitsplatz als Direktor emeritus.
- den Kollegiaten und Kollegen des ProMINT-Kollegs der Humboldt Universität zu Berlin für viele stimulierende Diskussionen





- Ihnen danke ich für Ihre Aufmerksamkeit!

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Quellenverzeichnis I

Bohr N (1913) On the constitution of atoms and molecules. Philosophical Magazine and Journal of Science, Sixth Series 26:1–25

Brachner A, Fichtner R (1977) Quantenmechanik für Lehrer und Studenten. Schroedel, Hannover

Brachner A, Fichtner R (1980) Quantenmechanik. Schroedel, Hannover

Calegari F, Sansone G, Stagira S, Vozzi C, Nisoli M (2016) Advances in attosecond science. J Phys B: At Mol Opt 49:062,001

DUDEN (2016) Das quantenmechanische Atommodell. Schülerlexikon: Das Multimedia Lexikon URL https://www.lernhelfer.de/schuelerlexikon/chemie-abitur/artikel/das-quantenmechanische-atommodell

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Quellenverzeichnis II

Dunning FB, Mestayer JJ, Reinhold CO, Yoshida S, Burgdorfer J (2009) Engineering atomic rydberg states with pulsed electric fields. J Phys B-At Mol Opt Phys 42(2):022,001

Dunning FB, Reinhold CO, Yoshida S, Burgdörfer J (2010) Steering quantum states toward classical bohr-like orbits. American Journal of Physics 78(8):796–803

Fischler H, Lichtfeldt M (1992) Modern physics and students conceptions. Int J Sci Educ 14(2):181–190

Hertel IV, Priemer B (2017 submitted) Orbits and orbitals. – how to connect bohr's model of the atom and quantum mechanics in school physics

Kohmoto M, Fano U (1981) Orientation by collision. J Phys B-At Mol Opt Phys 14(13):L447–L451

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Quellenverzeichnis III

Koke S, Grebing C, Frei H, Anderson A, Assion A, Steinmeyer Gu (2010) Direct frequency comb synthesis with arbitrary offset and shot-noise-limited phase noise. Nature Photonics 4:462 – 465

McKagan SB, Perkins KK, Wieman CE (2008) Why we should teach the Bohr model and how to teach it effectively. Phys Rev ST Phys Educ Res 4:010,103, URL https://arxiv.org/abs/0707.1541

Meyer L, Schmidt GD (eds) (2015) Physik – Lehrbuch für die Qualifikationsphase. DUDEN PAETEC Schulbuchverlag, Berlin, Frankfut a. M.

Passmore C, Gouvea JS, Giere R (2014) Models in Science and in Learning Science: Focusing Scientific Practice on Sense-making. In: Matthews MR (ed) International Handbook of Research in History, Philosophy and Science Teaching, Springer, pp 1171–1202

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur

Quellenverzeichnis IV

Zhelyazkova V, Hogan SD (2016) Preparation of circular rydberg states in helium using the crossed-fields method. Phys Rev A 94(2):023,415

Einführung
Misskonzeptionen
Harmonisierung
Bohrs Atommodell
Gesamtenergie
Zentrifugalpotenzial
Potenzialbild
QM-Modell
Vektormodell
QMPotenzial
radWahrsch
QM-Winkel-2p
Konturbilder
3DVerteilungen
ZirkulareR
Elektronendynamik
Conclusions
Quellenverzeichnis
Literatur