

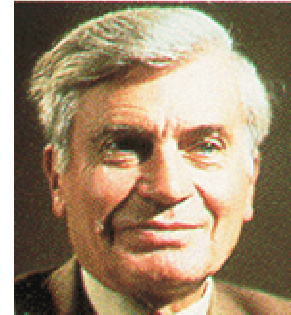
Einführung in die Quantenmechanik

Gliederung

1. Einleitung - Womit beschäftigt sich die Quantenmechanik
2. Pauliprinzip
3. Wahrscheinlichkeitswellen
 - 3.1. Schrödingers Katze
 - 3.2. Allgemein und am Beispiel eines Elementarteilchens
 - 3.3. Heisenbergsche Unschärferelation
4. Quantenmechanisches Atommodell - Modell der Orbitale
5. Schlusswort
6. Quellen

1. Womit beschäftigt sich die Quantenmechanik

Die Quantenmechanik ist eines der fundamentalen Bestandteile des physikalischen Weltbildes. Sie beschäftigt sich mit der Mikrowelt, also Moleküle, Atome und Elementarteilchen und beschreibt deren Wechselwirkungen. Dieser Grundpfeiler der Physik lässt sich aber auch für die makroskopische Welt anwenden, da diese aus Atomen besteht, die diese Theorie erfolgreich beschreibt. So lässt sich zum Beispiel die Stabilität der Materie erklären. An dieser Stelle möchte ich Zitat von Bernard d'Espagnat (Quantenphysiker) wiedergeben, das die Bedeutsamkeit der Quantenmechanik umreißt:



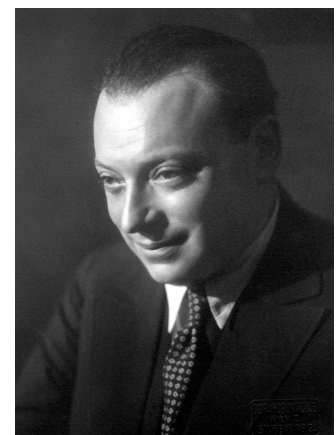
„Jeder, der sich eine Vorstellung von der Welt zu machen sucht – und von der Stellung des Menschen in der Welt -, muss die Errungenschaften und die Problematik der Quantentheorie einbeziehen. Mehr noch, er muss sie in den Mittelpunkt seines Fragens stellen“

So hat die Quantenmechanik auch große Bedeutung in der Alltagswelt, da zum Beispiel die Entwicklung des Lasers, Transistoren für Computer, Medizin (Kernspintomographie) sowie CD's auf die Erkenntnisse der Theorie beruhen. Erstaunlicherweise sollen sogar 25% des Bruttosozialprodukt auf die Entwicklungen durch die Quantenmechanik zurückzuführen.

2. Pauliprinzip

Das von dem Österreicher Wolfgang Pauli 1925 entdeckte Pauliprinzip, auch Pauli'sches Ausschließungsprinzip oder Pauliverbot genannt, stellt für die Physik, aber auch für die Chemie ein fundamentales Prinzip dar. 1945 erhielt Pauli den Nobelpreis für Physik.

Demnach können sich Fermionen (große Gruppe der Elementarteilchen) eines Systems, welches ein Atom oder ein Molekül darstellen kann, nicht gleichzeitig im gleichen Quantenzustand befinden. Ein Quantenzustand ist also maximal von nur einem Teilchen, zum Beispiel einem Elektron, besetzbar. Der schon erwähnte Quantenzustand ist nun



ausströmenden Giftgas stirbt die Katze. All dies geschieht mit 50%iger Wahrscheinlichkeit, aber nach einer Minute ist es ebenso wahrscheinlich, dass das radioaktive Atom nicht zerfallen ist und der Mechanismus nicht ausgelöst würde, sodass die Katze noch lebt. Wie realisiert dieses Gedankenexperiment nun die Übertragung quantenmechanischer Aspekte auf die makroskopische Welt?

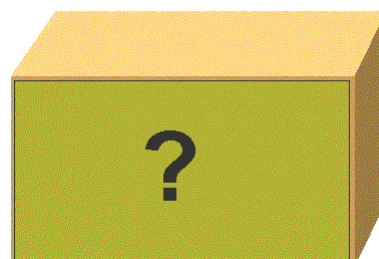
Nach der Quantenmechanik ist jedes System durch eine so genannte Wahrscheinlichkeitswelle beschreibbar.

So auch das System der Kiste. Die Kiste ist sozusagen von der Wahrscheinlichkeitswelle ausgefüllt. Dabei können sich zwei verschiedene Wahrscheinlichkeitswellen zu einer überlagern. Im Fall des Systems „Kiste mit Katze“ beschreibt die eine Wahrscheinlichkeitswelle die Kiste mit der lebendigen Katze und die andere das System der toten Katze. Diese beiden



Wahrscheinlichkeitswellen überlagern sich nun zu einer neuen Wahrscheinlichkeitswelle, die beide Zustände gleichzeitig beschreibt. Die Katze ist demnach gleichzeitig lebendig und tot. Dies zeigt noch ein wichtiges anderes Wesen der Quantenphysik: Das Superpositionsprinzip, nachdem sich verschiedene Zustände (in unserem Fall die lebende und tote Katze) eines Systems zu einem einzigen Zustand überlagern können. Noch mal: Die Katze in der undurchsichtigen Kiste ist also zugleich lebendig, als auch tot. Nun stellt sich natürlich die Frage, warum man nicht einfach in die Kiste schaut, um herauszufinden, ob die Katze noch lebt oder nicht beziehungsweise den überlagerten Zustand zu erblicken. Dies würde aber die Wahrscheinlichkeitswelle, die die beiden überlagerten Zustände beschreibt, veranlassen in einen einzigen der beiden Zustände überzugehen. Man spricht von dem Kollaps der Wahrscheinlichkeitswelle. Es ist also von der Messung, vom Beobachtungsprozess beziehungsweise vom Beobachter abhängig, wie sich die Wahrscheinlichkeitswelle verhält. Erst durch die Messung eines Superpositionszustandes fällt dieser zu einem Zustand zusammen und die Katze ist zu 100% entweder tot oder lebendig. Es ist also einem Beobachter unmöglich einen überlagerten Zustand, wie eine zu 50% lebendige und zu 50% tote Katze in der Kiste vorzufinden. Nur eines von beiden ist für den Beobachter möglich. Außerdem sei erwähnt, dass nicht nur eine direkte Messung zum Kollaps eines überlagerten Systems führen kann, da ein solches auf Einwirkungen der Umwelt sehr empfindlich reagiert. So könnte schon ein thermischer Prozess oder nur eine Wechselwirkung mit der Luft zum Kollaps der Superposition führen.

Es ist an dieser Stelle noch sinnvoll zu erwähnen, dass die Wahrscheinlichkeitswellen mathematisch durch eine Wellenfunktion $\Psi(\Psi)$ ausgedrückt werden. Überlagern sich nun zwei oder mehrere Zustände kommt es zur Superposition und es gilt $\psi = \psi_1 + \psi_2$. Hier nochmals eine kleine Illustration.



3.2. Allgemein und am Beispiel eines Elementarteilchens

Fassen wir also kurz zusammen.

Allgemein kann man sagen, dass eine Wellenfunktion Ψ die mathematische Beschreibung eines physikalischen Systems im Ortsraum darstellt.

Die Wellenfunktionen beschreiben also einen Zustand (oft überlagert) eines Systems, nach $\psi = \psi_1 + \psi_2$.

Diese Wellenfunktionen sind die Lösungen der so genannten Schrödingergleichung, welche von Erwin Schrödinger entwickelt wurde. Sie gilt aber nur für ein Elementarteilchen, wie zum Beispiel ein Elektron. Die Schrödingergleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)$$

Die Gleichung beinhaltet also Informationen eines beliebigen Quantensystems. So lassen sich auch, die vor der Beobachtung oder Messung, mehreren überlagerten Zustände (Superposition) beschreiben.

Im Moment der Messung nimmt das System schließlich eines seiner Eigenzustände an, indem die Wahrscheinlichkeitswelle in eine dieser Zustände kollabiert.

Machen wir dies nun am Beispiel eines Elektrons deutlich.

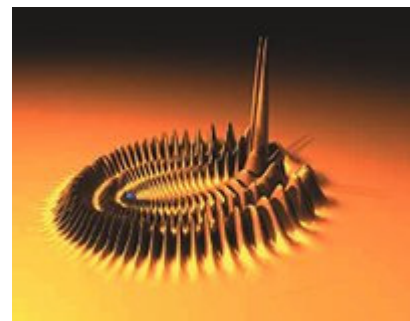
Die Wellenfunktion gibt Wahrscheinlichkeiten der Zustände (Ort, Geschwindigkeit,...) des gegebenen Elektrons an. Es existiert also ein überlagerter Zustand des Elektrons (Superposition).

Das Teilchen hat also weder eine genaue Position noch eine genaue Geschwindigkeit. Übertrieben dargestellt könnte man sagen, dass das Elektron sich zu 80% hier in deiner Umgebung und zu 20% irgendwo anders im Universum befindet. In Wirklichkeit sind diese hohen prozentualen Anteile der Wahrscheinlichkeiten aber auf einen viel engeren Raum begrenzt. Dabei nimmt die Wahrscheinlichkeit aber mit Abstand zu einem bestimmten Raumbereich mit höchster Wahrscheinlichkeit immer mehr ab. Es existiert aber wahrlich noch eine kleine aber nicht gleich Null große Wahrscheinlichkeit, das Elektron am Ende des Universums anzutreffen. Misst man nun aber das Elektron nimmt es einen einzigen Zustand an, wobei derjenige am wahrscheinlichsten ist, der auch prozentual am stärksten in der Wahrscheinlichkeitswelle ausgedrückt wird.

Um noch mal auf unserer übertriebenen Darstellung zurückzukommen, befindet sich das Teilchen nun genau einem Zustand (z.B. hier in deiner Nähe und nicht am Ende des Universums).

Ein weiteres Beispiel soll ein ungewöhnlich großes Molekül aus zwei Rubidium-Atomen darstellen. Ich erwähne es aufgrund einer Besonderheit seiner Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die eher in den Bereich Spekulation und, sagen wir mal, Suche nach einer Art universellen Grundidee der Natur. Denn die Wahrscheinlichkeitswellen dieses Moleküls hat die Form eines Trilobiten (Urzeittier im Meer). Die Wissenschaftler vermuten nun einen Zusammenhang

zwischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit und Tier. Sie spekulieren sozusagen auf ein grundlegendes Schema der Natur. Nachdem sie, so gesehen, sowohl das Äußere eines Tieres als auch einer Wahrscheinlichkeitswelle aufbaut. Ich halte dies allerdings für bloßen Zufall. Auf dem Bild (rechts) wurde die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für eine zweidimensionale Fläche berechnet. Wobei die Ergebnisse in der dritten Dimension (nach oben) aufgetragen wurden.



Die jeweilige Höhe der Wellen gibt Wahrscheinlichkeit an, das Elektron am betreffenden Punkt der Ebene anzutreffen.

Bei den ganzen vorangegangenen Erläuterungen spielt das Phänomen der Heisenbergschen Unschärferelation eine große Rolle, die so gesehen ein nicht unwichtiger Grund für die Superposition darstellt. Deshalb beschäftigt sich der nachfolgende Abschnitt mit diesem unverzichtbaren Grundprinzip der Quantenmechanik.

3.3 Heisenbergsche Unschärferelation



Die Heisenbergsche Unschärferelation oder auch Unbestimmtheitsrelation genannt, wurde 1927 von Werner Heisenberg (1901-1976) aufgestellt, wofür er 1932 den Nobelpreis für Physik erhielt.

Demnach ist der Ort x und der Impuls p eines Teilchens nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmbar.

Es gilt mathematisch: Ortsunschärfe Δx ; Impulsunschärfe ;
 $h = 6,6261 \cdot 10^{-34}$ Js

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

Das Produkt aus Ortsunschärfe Δx und Impulsunschärfe Δp darf also nie den Wert von $\frac{h}{4\pi}$ unterschreiten.

Je genauer man beispielsweise den Ort misst (je kleiner also Δx), umso ungenauer werden die Information über dem Impuls (umso größer Δp) eines Teilchens.

Oft wird eine falsche Erklärung der Unschärferelation angeführt, die zuerst sogar von Heisenberg selbst als Grund angegeben. Sie lautet wie folgt (Es soll aber nochmals unterstrichen werden, dass diese Erklärung falsch war und ist.).

Den Ort eines Teilchens misst man mit Licht mit hoher Frequenz, um die Messung möglichst genau zu halten. Wir halten also fest, dass mit Licht hoher Frequenz der Ort gut bestimmbar ist. Aber durch das Licht bekommt das Teilchen einen unbekanntes Impuls. Dabei muss man wissen, dass das Licht einen umso höheren Impuls besitzt, je höher seine Frequenz ist. Misst man also ein Teilchen mit hochfrequentem Licht, um eine möglichst genau Ortbestimmung durchzuführen, stößt man das Teilchen mit einem großen Impuls an, sodass der Impuls des Teilchens selbst sehr ungenau wird. Gleiches gilt umgekehrt. Um das Teilchen in deinem Impuls möglichst genau zu messen, also den Impuls des Lichtes gering zu halten, kann man den Ort nicht genau genug messen. Denn dazu bräuchte man ja höher frequentes Licht benötigt.

Dieses eben skizzierte Bild kann man sich als Gedankenstütze im Gedächtnis behalten, aber bitte stets mit dem Wissen seiner Unrichtigkeit.

Wie schon mehrfach erwähnt ist diese Vorstellung nicht korrekt. Die Unschärfe liegt schon in der Natur begründet. Teilchen besitzen einfach keinen genauen Ort oder genauen Impuls.

Das Ganze ist kein Problem des Messens oder der Messapparatur.

Ein Beweis für die in der Natur selbst begründete Unschärfe stellt die, wenn auch sehr komplexe, mathematische Herleitung der Unschärferelation dar.

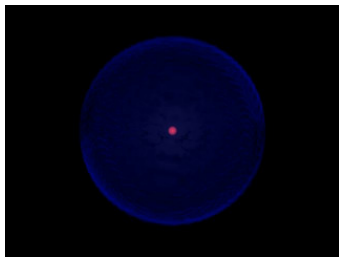
Das Prinzip lässt sich also beweisen, ohne nur einmal gemessen zu haben.

Man kann also die Schlussfolgerung ziehen, dass Teilchen weder einen bestimmten Ort, noch einen bestimmten Impuls besitzen. Diese Eigenschaften lassen sich stets nur durch Wahrscheinlichkeit eingrenzen.

Die Heisenbergsche Unschärferelation ist also ein Beweis für die Wellennatur von Teilchen.

Es gibt im Übrigen auch Unschärfen zwischen anderen physikalischen Größen. So zum Beispiel zwischen Energie und Zeit. Diese äußern sich zum Beispiel in Erscheinungen wie dem Tunneleffekt oder Vakuumfluktuationen.

4. Quantenmechanisches Atommodell - Modell der Orbitale

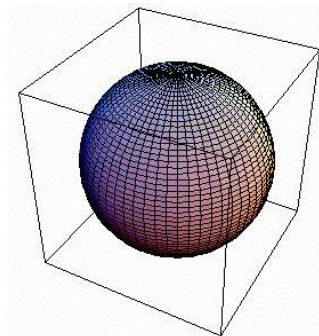


Das quantenmechanische Atommodell ist durch Orbitale charakteristisch gekennzeichnet. Die Orbitale eines Atoms entsprechen den Aufenthaltsräumen der dazugehörigen Elektronen. Dabei ist das Quadrat der Wellenfunktion eines bestimmten Elektrons gleich die räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

So charakterisiert das Quadrat der Wellenfunktion eines Elektrons die Wahrscheinlichkeit mit der dieses an einem bestimmten Ort anzutreffen sein könnte. In diesem Modell des Atoms existieren also keine Kreisbahnen noch andere definierte Bahnen. Es steht also im Gegensatz zum Atommodell von Bohr. Nach solchen bestimmten Aufenthaltsorten zu fragen ist nämlich sinnlos in der Quantenmechanik, denn nach der Heisenbergschen Unschärferelation gibt es keine genauen Aufenthaltsorte der Elektronen. Es ist lediglich eine stochastische Beschreibung möglich. Nimmt man die Sache ganz genau, so ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons theoretisch sogar unendlich weit. Das ergibt natürlich ein Problem, wenn man ein Atom durch mit solchen Kalkül beschreiben möchte, da das Modell nur mit einem begrenzten Raum Sinn macht und anwendbar ist. Aus diesem Grund werden die Aufenthaltsräume auf eine Wahrscheinlichkeit von ca. 98% begrenzt. Mit dieser Festlegung ergeben sich Räume, die der Größe eines Atoms entsprechen.

Betrachten wir nun aber die Orbitale etwas genauer. Jedes Orbital beinhaltet maximal zwei Elektronen, die sich im entgegengesetzten Spin befinden.

Des Weiteren werden die Orbitale von vier Quantenzahlen klassifiziert und eindeutig bestimmbar (n , l , m , s):

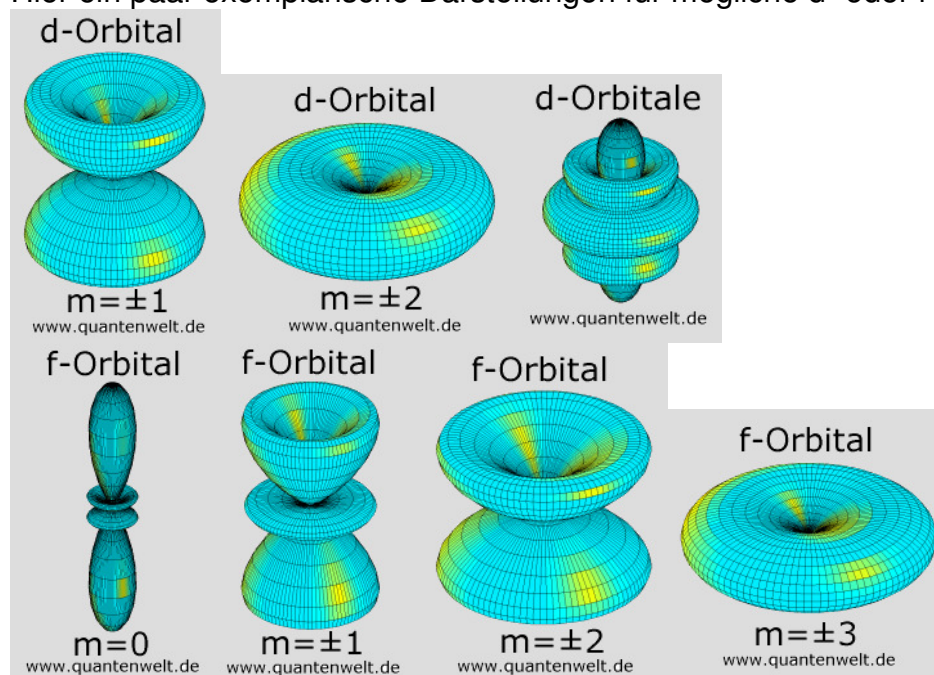


- n (*Hauptquantenzahl*, Wertebereich: 1, 2, 3, ..) beschreibt das Hauptenergieniveau, welches ein Elektron besitzt. Es entspricht gewissermaßen der Bahnzahl n des Bohr'schen Atommodells.
- l (*Bahndrehimpulsquantenzahl*, Wertebereich: 0, 1, .. $n-1$) beschreibt kurz gesagt den Bahndrehimpuls des Elektrons. Bei gleichem n -Wert haben Orbitale höherer l -Werte höhere Energie.
- m (*magnetische Quantenzahl*, Wertebereich: $-l$.. $+l$) beschreibt die räumliche Ausrichtung, die das Orbital bezüglich eines äußeren Magnetfeldes einnimmt.
- s ist die Spinnmagnetquantenzahl, kurz Spin. Ihre Existenz deutet man als Eigenrotation der Elektronen. Sie legt den Drehimpuls dieser Rotation fest und kann für Elektronen den Wert $+1/2$ oder $-1/2$ annehmen.

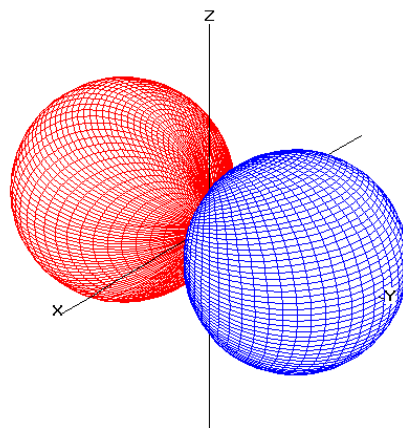
So haben Orbitale zu verschiedenen l-Zahlen charakteristische grobe Formen. Es wird jedem l-Wert ein bestimmter, historisch bedingter, Buchstabe zugeordnet, wobei die entstandenen Bezeichnungen s-Orbital, p-Orbital, d-Orbital und f-Orbital aus der Spektroskopie stammen. Hier sind diese spezifischen Formen aufgelistet:

- » s-Orbital (sharp) ($l=0$) = radialsymmetrische Form (siehe oben rechts)
- » p-Orbital (principal) ($l=1$) = hantelförmig in drei Raumachsen
- » d-Orbital (diffuse) ($l=2$) = gekreuzte Doppelhandel
- » f-Orbital (fundamental) ($l=3$) = rosettenförmig

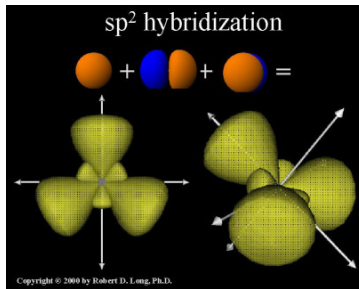
Hier ein paar exemplarische Darstellungen für mögliche d- oder f-Orbitale Orbitale:



Oder hier speziell ein Beispiel für ein p-Orbital mit der typischen Hantelform:



Dabei ergeben sich die zu den Orbitalen zugehörigen Wellenfunktionen aus der Schrödingergleichung. Streng genommen charakterisieren Orbitale nur Ein-Elektronen-Systeme, wie zum Beispiel das Wasserstoffatom, da die Betrachtungen von der Schrödingergleichung ausgehen, und diese auch nur für ein Elektron Gültigkeit aufweist. Denn bei mehr als einem Teilchen (hier Elektron) beeinflussen sich diese gegenseitig, was natürlich in den Rechnungen der Gleichung von Schrödinger nicht berücksichtigt wird. Selbst für Ein-Elektronen-Systemen stellt sie nur eine gute approximative Lösung dar. Dennoch sind die groben Formen aber auch in Mehr-Elektronen-Systemen gültig.



Ich möchte an dieser Stelle als kleine Zusatzinformation erwähnen, dass einige Symmetrien von chemischen Bindungen so nicht erklärbar sind. Dies wird erst durch so genannte Hybrid-Orbitalen und der Hybridisierung möglich. Diese Bindungen werden durch rechnerische Überlagerung der Wellenfunktionen erklär- und beschreibbar. So überlappen bei Molekülen die Atomorbitale (AO) und vereinigen sich zu einem

Molekülorbital (MO). Hier kommt es zur zusätzlich Beeinflussen der Elektronen durch das Vorhandensein verschiedener Atomkerne, was die Beschreibung natürlich noch ungenauer werden lässt.

5. Schlusswort

Die hier erklärten quantenmechanischen Phänomene habe ich durch die so genannte Kopenhagener Deutung erläutert und erklärt. Es existieren aber noch andere Interpretationen der Quantenmechanik, die vielleicht sogar schlüssig erscheinen. Aber die Kopenhagener Deutung war die erste abgeschlossene Interpretation, weshalb ich mich für diese entschieden habe.

Der Grund für die vielen Theorien ist, dass die Quantenmechanik Effekt und Erscheinungen aufweist, die man deuten muss! Welche nun aber die richtige ist muss jeder für sich selber entscheiden.

6. Quellen (inhaltlich, als auch Graphiken)

- Microsoft Encarta Enzyklopädie 2002
- TV-Sendung (Alpha-Centauri)
- "Quantentheorie" von Claus Kiefer
- <http://www.cip.physik.uni-muenchen.de/~milq/kap6/k65p01.html>
- www.wikipedia.de
- <http://www.emsf.rai.it/biografie/anagrafico.asp?d=240>
- http://hepweb.rl.ac.uk/ppUKpics/POW/pr_021204.htm
- <http://www.weltderphysik.de/themen/bausteine/atome/uebersicht/>
- <http://home.germany.net/101-92989/atom/arbeiten/gruppe3/arbeit32.htm>
- <http://www.darvill.clara.net/nucrad/types.htm>
- <http://www.th.physik.uni-frankfurt.de/~jr/physlist.html>
- <http://www.cip.physik.uni-muenchen.de/~milq/kap6/k65p01.html>
- http://www.zenger.informatik.tu-muenchen.de/lehre/seminare/math_nszeit/SS03/vortraege/kriegd/
- <http://www.weltderphysik.de/themen/quanten/uebersicht/philosophie/>
- www.quantenwelt.de