

Physikaufgabe 116

[Home](#) | [Startseite](#) | [Impressum](#) | [Kontakt](#) | [Gästebuch](#)

Aufgabe: Beweisen Sie anhand des Bohrschen Atommodells, daß die Heisenbergsche Unschärferelation für das Wasserstoffatom nicht gilt.

Beweis: Nach den Gesetzen der klassischen Mechanik halten sich Coulombkraft und Zentrifugalkraft auf einer Kreisbahn des Elektrons um das Proton die Waage:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m\omega^2 r = \frac{mv^2}{r},$$

wobei r der Radius, m die Masse und v die Geschwindigkeit des Elektrons sind. Die Elementarladung e und die Dielektrizitätskonstante ϵ_0 sind konstante Größen. Multiplizieren wir die obige Gleichung mit r , folgt der Virialsatz

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = mv^2 = \frac{L^2}{mr^2}.$$

Der Drehimpuls L des Elektrons hängt nach dem Bohrschen Postulat von der Lokalität der Schale ab, auf der es um den Atomkern kreist, und ist damit proportional zur Quantenzahl n :

$$L_n = mR_n v_n = R_n p_n = n\hbar.$$

Aus dem Virialsatz erhalten wir sofort den Bahnradius der n ten Schale:

$$R_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}.$$

Für $n = 1$ ergibt sich der Bohrsche Atomradius des Wasserstoffatoms zu

$$R_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}.$$

Aus dem Energieerhaltungssatz wiederum folgen die Energieniveaus der einzelnen Schalen

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{2m} \frac{1}{R_n^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R_n} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R_n} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R_n} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R_n}.$$

Setzen wir den Radius ein, erhalten wir die diskreten Niveaus

$$E_n = -\frac{m}{2} \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{E_R}{n^2}$$

mit der Rydberg-Energie

$$E_R \equiv \frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2.$$

Physikaufgabe 116

Die Energiedifferenz beim Übergang des Elektrons von einer Bahn n zu einer höheren Bahn $n+i$ entspricht damit folgender Energiedifferenz:

$$\Delta E_{n+i} = E_{n+i} - E_n = E_R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+i)^2} \right).$$

Unter Verwendung des Drehimpulserhaltungssatzes errechnet sich die Geschwindigkeit des Elektrons auf der n ten Schale gemäß

$$v_n = \frac{L_n}{mR_n} = \frac{1}{n} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \quad \text{bzw.} \quad p_n = \frac{1}{n} \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}.$$

Da der Radius R_n quadratisch mit der Quantenzahl zu-, die Geschwindigkeit aber umgekehrt proportional dazu abnimmt, folgt mit jeder Anhebung des Niveaus ein Beitrag

$$\Delta p_{n+i} = p_{n+i} - p_n = \left(\frac{1}{n+i} - \frac{1}{n} \right) \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} = -\frac{i}{n+i} p_n.$$

Analog gilt

$$\Delta R_{n+i} = R_{n+i} - R_n = \left((n+i)^2 - n^2 \right) \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{(2n+i)i}{n^2} R_n.$$

Multiplizieren wir Orts- und Impulsunschärfe,

$$\Delta R_{n+i} \Delta p_{n+i} = -\frac{(2n+i)i^2}{n^2(n+i)} R_n p_n = -\frac{(2n+i)i}{n(n+i)} i\hbar,$$

können wir die Unschärfe des Drehimpulses durch die gewöhnliche Unschärferelation ausdrücken,

$$\Delta L_{n+i} = R_n \Delta p_{n+i} + p_n \Delta R_{n+i} = \left[-\frac{n}{n+i} + \frac{2n+i}{n} \right] \frac{i p_n R_n}{n} = i\hbar - \Delta R_{n+i} \Delta p_{n+i}.$$

Schließlich folgt durch Vergleich mit $\Delta L_{n+i} = (n+i)\hbar - n\hbar = i\hbar$, daß im Wasserstoffatom Bahnradius und Impuls aufeinander senkrecht stehen müssen, d.h. es muß gelten:

$$\Delta R_{n+i} \Delta p_{n+i} = 0,$$

weil der Drehimpuls während eines Übergangs nach dem Bohrschen Postulat nur in Vielfachen von \hbar übertragen werden kann. Der minimale Übergang von $n \rightarrow n+1$ entsprechend $i=1$ hätte demnach eine Unschärfe von

$$|\Delta R_{n+1} \Delta p_{n+1}| = \frac{2n+1}{n(n+1)} \hbar,$$

Physikaufgabe 116

wenn Ort und Impuls sich statistisch unabhängig zueinander verhalten würden, was im Bohrschen Atommodell aber nicht der Fall ist, weil sie dort aufeinander senkrecht stehen. Im Grenzfalle großer Quantenzahlen gilt ohnedies

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\Delta R_{n+1} \Delta p_{n+1}| = \hbar \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \rightarrow 0.$$

Nur der Form halber berechnen wir die Unschärferelationen in normierter Darstellung anhand der relativen Größe

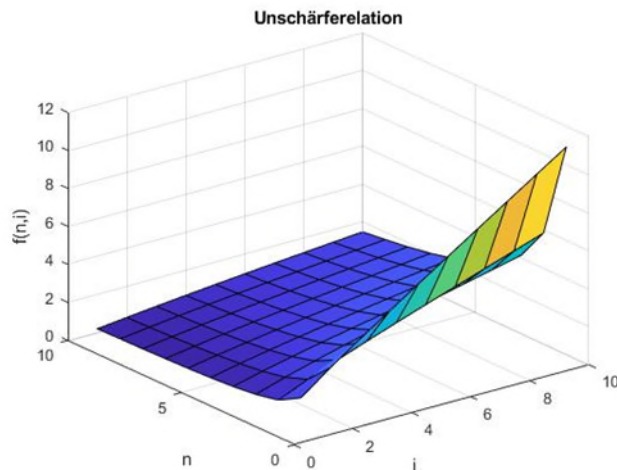
$$f(n, i) \equiv \frac{|\Delta R_{n+i} \Delta p_{n+i}|}{\hbar} = \frac{(2n+i)i}{n(n+i)},$$

wobei wir gemäß Tab. 1 feststellen können, daß ein Wert von $3/2$ auf dem untersten Energieniveau nicht unterschritten werden kann. Für höhere Orbitale verliert sich die Quantennatur sukzessive und die Differenz der Energieniveaus geht in ein Kontinuum über. So verbraucht etwa ein Quantensprung vom 11. zurück auf das 1. Energieniveau ca. 12 Wirkungsquanten, $f(n=1, i=10) = 120/11 \approx 12$. Diese Abhängigkeit ist graphisch in Abb. 1 dargestellt.

$f(n, i)$	$i=1$	$i=2$	$i=3$
$n=1$	$\frac{3}{2}$	$\frac{8}{3}$	$\frac{15}{4}$
$n=2$	$\frac{5}{6}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{21}{10}$
$n=3$	$\frac{7}{12}$	$\frac{16}{15}$	$\frac{3}{2}$

Tabelle 1. Werte der Heisenbergschen Unschärferelation für die ersten sechs Orbitale

Für festes n ist die Funktion $g_n(i) = f(n = \text{const}, i)$ in Abb. 2 aufgetragen. Diese Unschärfen gelten aber wohlgermerkt nur, wenn Radius- und Impulsvektor parallel zueinander sind, nicht wenn sie senkrecht aufeinander stehen, wie das bei einer Kreisbewegung der Fall ist.



Physikaufgabe 116

Abbildung 1. Orts-Impuls-Unschärfen in Einheiten des Plackschen Wirkungsquantums

Im Bohrschen Atommodell gibt es also noch keine Wellenfunktion und keine quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten. Die Elektronen haben nach dieser Theorie eine reale Bahngeschwindigkeit und einen festen Abstand zum Kern. Ort und Impuls sind gleichzeitig scharf meßbar, weil sie linear unabhängig voneinander sind. Daher probieren wir nachfolgend noch den Übergang zur statistischen Interpretation der Quantenmechanik aus, und wir werden überrascht sein, wie gut sie das klassische Ergebnis reproduziert.

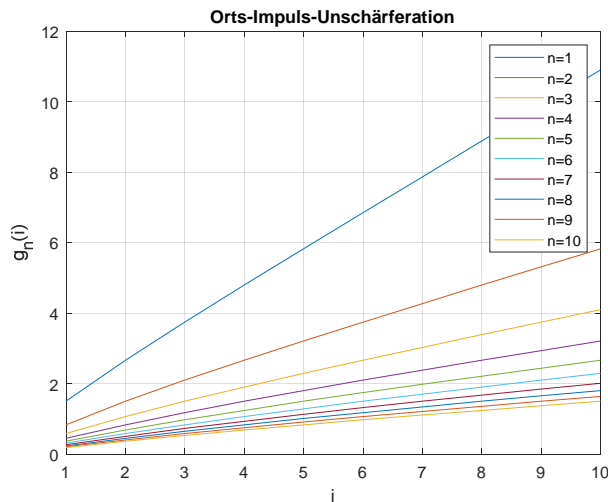


Abbildung 2. Orts-Impuls-Unschärfen bei festgehaltener Hauptquantenzahl n

Die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Gaußverteilung lautet

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

ihr Integral ist auf eins normiert,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = 1.$$

Alle asymmetrischen Momente verschwinden aus Symmetriegründen, z.B.

$$\int_{-\infty}^{\infty} xf(x) dx = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = 0,$$

während die symmetrischen endliche Werte annehmen, etwa

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = \sigma^2.$$

Eine um den Mittelwert R_n zentrierte Verteilung hat die Form

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_n)^2 e^{-\frac{(x-R_n)^2}{2\sigma^2}} dx = \sigma^2,$$

wobei

$$\sigma^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{(x-R_n)^2}{2\sigma^2}} dx - 2R_n \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-R_n)^2}{2\sigma^2}} dx + \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} R_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-R_n)^2}{2\sigma^2}} dx.$$

Mit den Substitutionen

$$\xi = x - R_n \quad \text{und} \quad d\xi = dx$$

können wir schreiben:

$$\sigma^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{(x-R_n)^2}{2\sigma^2}} dx - 2R_n \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi + R_n) e^{-\frac{\xi^2}{2\sigma^2}} d\xi + \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} R_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2\sigma^2}} d\xi.$$

Die nichtverschwindenden Terme lauten

$$\sigma^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{(x-R_n)^2}{2\sigma^2}} dx - R_n^2,$$

so daß sich mit der Definition

$$R_{n+i}^2 \equiv R_n^2 + \sigma^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{(x-R_n)^2}{2\sigma^2}} dx$$

die Varianz $\sigma = \sqrt{R_{n+i}^2 - R_n^2}$ abschätzen läßt. Wir können nun für die Ortsvarianz schreiben:

$$\sigma_R = \sqrt{R_{n+i}^2 - R_n^2} = \sqrt{(n+i)^2 - n^2} \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \sqrt{(2n+i)i} \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2},$$

und die Impulsvarianz lautet entsprechend

$$\sigma_p = \sqrt{p_{n+i}^2 - p_n^2} = \hat{i} \sqrt{\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+i)^2}} \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} = \hat{i} \frac{\sqrt{(2n+i)i}}{n(n+i)} \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}.$$

Hierbei ist \hat{i} die imaginäre Einheit zur Unterscheidung vom Laufindex i . Multiplizieren wir die beiden Größen, ergibt sich

$$\sigma_R \sigma_p = \hat{i} \frac{(2n+i)i}{n(n+i)} \hbar \quad \text{und} \quad \overline{\sigma_R \sigma_p} = -\hat{i} \frac{(2n+i)i}{n(n+i)} \hbar,$$

d.h. das Betragsquadrat der Unschärfe erhalten wir aus der Relation

Physikaufgabe 116

$$|\Delta R_{n+i} \Delta p_{n+i}|^2 = \sigma_R \sigma_p \cdot \overline{\sigma_R \sigma_p} = -\hat{i}^2 \frac{(2n+i)^2 i^2}{n^2 (n+i)^2} \hbar^2,$$

womit sich der altbekannte Wert

$$|\Delta R_{n+i} \Delta p_{n+i}| = \frac{(2n+i)i}{n(n+i)} \hbar$$

wie im klassischen Fall ergibt, nur haben wir es diesmal mit einer komplexen Zahl zu tun,

qed