

5 Anhang

5.1 Zeichen, Einheiten, Konstanten und Formeln

- **Amplitude einer mechanischen Welle:**

Zeichen: $s_{\max}$ Einheit: cm, m...

- **Amplitude einer Materiewelle:**

Zeichen: ψ Einheit: $\text{\AA}^{-\frac{3}{2}}$ bzw. $m^{-\frac{3}{2}}$

- **Antreffwahrscheinlichkeit eines Photons in einem Beugungsmuster:**

$$n \sim E^2$$

- **Elektronendichte:**

$$\psi^2 = \frac{dW}{dV}$$

- **Elektronenladung (Elementarladung):**

Zeichen: e Einheit: C $e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

- **Elektronenmasse:**

$$m_e = 9.110 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

- **Elementarladung (Elektronenladung):**

Zeichen: e Einheit: C $e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

- **Elongation (momentane Auslenkung eines Massenpunkts):**

Zeichen: s Einheit: cm, m ...

- **Energie:**

Zeichen: E Einheit: J, kJ $\left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2} \right] = 1 \text{ J(oule)}$

- **Energie, kinetische (Quantentheorie):**

Zeichen: T Einheit: J, kJ $\left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2} \right]$

- **Energie Oszillator:**

$$E = \frac{1}{2} \cdot m \cdot f^2 \cdot s_{\max}^2 \text{ [kJ]} \quad \left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2} \right]$$

- **Energie Photon:**

$$E = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda} \text{ [J]} \quad \left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2} \right]$$

- **Energie, potentielle (Quantentheorie):**

Zeichen: V Einheit: J, kJ

$$\left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2} \right]$$

- **Eulersche Zahl**

Zeichen: e $e = 2.718$

- **Fortpflanzungsgeschwindigkeit einer Welle:**

Zeichen: c Einheit: $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

- **Fotoelektron und maximale kinetische Energie:**

$$U_0 \cdot e = \frac{m_e \cdot v^2}{2} = h \cdot f - E = T_{\max} \quad [\text{J}]$$

- **Frequenz eines Oszillators:**

Zeichen: f Einheit: Hz (Hertz) oder s^{-1}

$$\text{Verknüpfung: } f = \frac{1}{T}; \quad f = \frac{c}{\lambda}$$

- **Länge eines schwingungsfähigen Systems:**

Zeichen: L Einheit: cm, m...

- **Lichtgeschwindigkeit:**

Zeichen: c $c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

- **Lichtintensität:**

Zeichen: I Einheit: $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$

$$I = \epsilon_0 \cdot E^2 \cdot c \quad [\text{Wellenmodell}]$$

$$I = (h \cdot f) \cdot n \quad [\text{Teilchenmodell}]$$

- **Massenpunktgeschwindigkeit (Oszillatorengewindigkeit):**

Zeichen: v Einheit: $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

- **Oszillatorenenergie:**

$$E = \frac{1}{2} \cdot m \cdot f^2 \cdot s_{\max}^2 \quad [\text{J}]$$

- **Photonenenergie:**

$$E = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad [\text{J}]$$

- **Planck'sches Wirkungsquantum:**

Zeichen: h Einheit: Js $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

$$\left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}} \right]$$

- Schwingungsdauer:Zeichen: T Einheit: s, min...

$$\text{Verknüpfung: } T = \frac{\lambda}{c}$$

- Schwingungszustand eines schwingungsfähigen Systems (Hauptquantenzahl):Zeichen: n $n = 1, 2, 3...$ **- Wellenlänge:**Zeichen: λ Einheit: nm, cm, m...

$$\text{Verknüpfung: } \lambda = c \cdot T; \quad \lambda = \frac{c}{f}$$

- Wellenlänge Materiewelle:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} \text{ [nm, m]}$$

- Wellenlängen sichtbares Licht:

$$\lambda = 400 \text{ bis } 800 \text{ nm}$$

5.2 Alles hat seine Wellenlänge

„Die Zeit“ Nr. 16; 10. April 1987

Am 19. März starb Louis de Broglie

Ihm verdanken wir die Einsicht: Jeder Körper hat auch eine Wellennatur

Eine Gruppe Schiffbrüchiger ist auf einer einsamen Insel gestrandet und wird von den dort lebenden Wesen völlig verwirrt: Von weitem zeigen sie fröhliche Gesichter, ihre Körper jedoch halten sie stets verborgen. Sobald die Schiffbrüchigen näherkommen, verschwinden die Eingeborenen und lassen nur Pferdehufspuren zurück. Erregte Diskussionen über die wahre Natur der Inselbewohner münden endlich in die Einsicht, es müssten wohl Zentauren sein, die sich so seltsam verhielten.

Diese Geschichte wird von Physikern gern erzählt, wenn sie das Denken der modernen Quantentheorie erklären wollen. Ähnlich den Schiffbrüchigen machten die Physiker zu Anfang dieses Jahrhunderts Entdeckungen, die zunächst unerklärbar schienen, dann jedoch zu einem grundlegend neuen Verständnis führten. Heute ist die Quantenmechanik längst zum Schlüssel für die atomare Welt geworden, die physikalische Revolution vor sechzig Jahren war quasi die Eintrittskarte in den Mikrokosmos, den seither Wissenschaftler aller Fachdisziplinen ausleuchten und für technische Entwicklungen nutzbar machen.

Im vergangenen Monat ist einer der letzten Väter jener Theorie gestorben: Louis Prince de Broglie. Von ihm stammt eine der verblüffendsten physikalischen Ideen unseres Jahrhunderts, die dem normalen Alltagsverständnis völlig zuwider zu laufen scheint und doch einen Grundbaustein der quantenmechanischen Weltsicht darstellt.

De Broglie hatte 1924 in seiner Promotionsarbeit frech behauptet, es bestünde kein prinzipieller Unterschied zwischen Wellen, die einen ganzen Raum ausfüllen und festen, greifbaren Teilchen. Ob wir unsere Nase von den Lichtwellen der Sonne bräunen lassen oder ob uns ein Fussball ins Gesicht knallt, ob die Schallwellen des neuesten Hits unser Ohr umspülen oder ein Wasserstrahl beim Duschen kitzelt – physikalisch sollten sich all diese Vorgänge gleich beschreiben lassen, meinte de Broglie. Er schlug vor, materielle Körper wie Wellen zu behandeln, ihnen eine Frequenz und eine Wellenlänge zuzuschreiben und sie fortan als „Materiewellen“ zu bezeichnen.

Das klingt verrückt. Doch zwei Jahrzehnte zuvor hatte Albert Einstein denselben Gedanken gedacht – nur umgekehrt. Aufbauend auf der „Quantenhypothese“ von Max Planck

hatte er die dahin gängige Modellvorstellung revidiert, Licht sei nichts anderes als eine elektromagnetische Welle. Einstein beschrieb Licht als einen Strahl kleiner Energiepakete, als Lichtquanten oder „Photonen“. Beide Anschauungen schienen experimentell gut belegt: Versuche von Young und Fresnel hatten gezeigt, dass sich Lichtstrahlen, wie andere Wellen auch, gegenseitig auslöschen können: dann nämlich, wenn sich zwei Wellen exakt so überlagern, dass gerade Wellenberge der einen auf Wellentäler der anderen treffen. Die dadurch entstehenden „Interferenzmuster“ gelten deshalb als untrügliches Zeichen für den Wellencharakter einer Strahlung. Andererseits liess sich der sogenannte Photoeffekt, bei dem durch Licht Elektronen aus einer Metalloberfläche wie Billardkugeln herausgeschlagen werden, von Einstein nur so erklären, dass die Lichtenergie eben in kleinen Partikelchen gespeichert ist und nicht kontinuierlich verteilt, wie bei einer Welle. „Es gibt nur einen Ausweg aus dieser Schwierigkeit“, schrieb de Broglie rückblickend, „die Wellenanschauung des Lichtes und seine Korpuskelanschauung werden als zwei komplementäre Anschauungen einer gleichen Wirklichkeit anerkannt.“ Das war dieselbe Erkenntnis, die auch die eingangs erwähnten Schiffbrüchigen fanden: Nicht *entweder* Mensch oder Pferd lautete die Entscheidung, sondern *sowohl als auch*. In der Physik bot sich allerdings kein so schönes Bild wie das des Zentauren an. Die Anerkennung der Teilchen-Welle-Doppelnatur war daher eigentlich eine Bankrotterklärung der menschlichen Vorstellungskraft. Keines der gängigen Bilder passte auf die Wirklichkeit.

Was die Theorie des Lichtes betrifft, wurde diese neue Sichtweise in der Fachwelt auch nach und nach akzeptiert. Doktorand de Broglie stellte mit seinem Konzept der Materiewellen die Anschauung jedoch noch radikaler in Frage. Das zweideutige Verhalten der Natur sollte nicht nur auf das Licht beschränkt sein, sondern für jeden Gegenstand gelten. In unserer normalen Umgebung bemerken wir den Wellencharakter aller Dinge nur deshalb nicht, weil die Massen, mit denen wir es zu tun haben, viel zu gross sind. Gemäss der berühmten De-Broglie-Beziehung aber sind die Wellenlängen grosser Massen so klein, dass ihre Wellennatur nie zum Vorschein kommt. Beispielsweise ergäbe sich für ein mit 100 Kilometer pro Stunde dahinbrausendes Auto lediglich eine Wellenlänge, die (in Metern gemessen) erst 38 Stellen nach dem Komma beginnt, und das ist immerhin um 23 Grössenordnungen kleiner als die Abmessungen der Atombausteine. Für die Teilchen der Mikrowelt dagegen liegen die Wellenlängen durchaus in einem der Messung zugänglichen Bereich. Die Physiker Davisson und Germer konnten deshalb an Elektronen das Teilchen/Welle-Doppelleben schon zwei Jahre nach de Broglies Hypothese nachweisen. Auch wenn sich anschaulich Welle und Korpuskel kaum unter einen Hut

bringen liessen, so wurde doch in der Quantentheorie eine unanschauliche, mathematische Brücke gefunden. Der Österreichische Physiker Erwin Schrödinger verallgemeinerte de Broglies Ansatz und stellte das richtungsweisende Konzept der „Wahrscheinlichkeitswellen“ auf: Atome werden dabei durch Wellengleichungen beschrieben. Die winzigen Grundbausteine existieren demnach nicht mehr an einem festen Ort zu einem bestimmten Zeitpunkt; ihre Präsenz ist vielmehr räumlich „verschmiert“ und es lässt sich nur noch die Wahrscheinlichkeit angeben, ein Teilchen an dieser oder jener Stelle zu finden. Bemerkenswert ist: Aus dem wellenmechanischen Konzept lässt sich die „klassische Mechanik“, die unserer üblichen Vorstellungswelt zugrunde liegt, herleiten, nicht jedoch umgekehrt. Man würde daher eigentlich „richtiger“ denken, wenn man, statt unseren gängigen Vorstellungen von Teilchen und festen Körpern nachzuhängen, in Wellenbildern dächte. Experimente mit „Antimaterie“, in Forschungszentren wie DESY (Hamburg) oder CERN (bei Genf) alltägliche Realität, belegen den Wellencharakter der Materie sehr anschaulich: Treffen Materie und Antimaterie aufeinander, verwandeln sie sich in Strahlung.

De Broglie, der 1929 den Nobelpreis für seine Doktorarbeit erhielt, gebührt das Verdienst, das Wellenbild als erster konsequent vorgedacht zu haben.

Ulrich Schnabel

5.3 Zitate zur Quantenchemie

...ich denke, ich kann davon ausgehen, dass niemand die Quantenmechanik versteht. Ein Philosoph hat einmal behauptet: "Naturwissenschaft setzt notwendig voraus, dass gleiche Umstände immer auch gleiche Auswirkungen haben." Nun, dem ist nicht so! Woher haben wir diese Gleichung? Es ist unmöglich, sie aus irgendetwas Bekanntem herzuleiten. Sie ist Schrödingers Kopf entsprungen.

Atome sind völlig unmöglich - vom klassischen Standpunkt aus betrachtet.

Richard Feynman (1918-1988)

Das Universum ist nicht nur seltsamer, als wir uns vorstellen, es ist auch seltsamer, als wir uns überhaupt vorstellen können.

J. B. S. Haldan (1892–1964)

Nichts ist von grösserer Bedeutung an der Quantenmechanik als dies: sie hat die Vorstellung von der Welt als etwas zerstört, das sich "da draussen" befindet. Das Universum wird niemals wieder dasselbe sein.

John A. Wheeler (1911-2004)

"Sein oder Nichtsein", das ist nicht die Frage; es ist die Antwort.

*Fred Alan Wolf (*1934)*

Das Atom ist also, mathematisch gesehen, gleich einem Schwingungssystem. Nun kann bekanntlich ein Schwingungssystem (eine schwingende Saite, eine Schallröhre, eine Radioantenne usw.) im Allgemeinen nur der Sitz bestimmter Schwingungen sein, derjenigen nämlich, welche seinen „Eigenfrequenzen“ entsprechen. Auch das Atom hat seine Eigenfrequenzen und kann nur der Sitz von Wellen sein, die gleiche Perioden haben. Aus diesem Grunde existiert für das Atom eine unstetige Folge von möglichen stabilen Zuständen, wie Schrödinger in seinen schönen Arbeiten im Einzelnen gezeigt hat.

Louis de Broglie (1892–1987)

Ohne Quantenmechanik ist ein Mensch nicht in der Lage, seine Umwelt und die Bedingungen seiner Existenz zu übersehen. (Er ist es wahrscheinlich auch mit der Quantenmechanik nicht vollständig!) Er mag antike Schriftsteller in der Originalsprache oder Heidegger in deutscher Sprache verstehen, er ist trotzdem ungebildet: Er hat die wichtigste geistige Revolution unseres Jahrhunderts und einen wesentlichen Inhalt seiner Kultur verpasst. Erstaunlicherweise wird dieses Bildungsgut unseren Jungen in den Mittelschulen immer noch vorenthalten.

*Ernst Schumacher (*1928)*

Der Chemieunterricht, so wie er an den höheren Schulen die Regel geworden ist, geht nicht mehr in erster Linie von Stoffen und Versuchen aus. An deren Stelle ist allzu häufig eine naturwissenschaftlich unhaltbare Präsentation von Atom- und Orbital-"Modellen" getreten, welche bestens geeignet ist, jungen Menschen die Freude an naturwissenschaftlicher Erkenntnis auf immer zu vergällen. Das ist ein Frevel an der Jugend!

*Hans Primas (*1928)*

Das wellenmechanische Atommodell kommt mir als etwas Interessantes vor; im Allgemeinen würde ich die Quantenchemie als eines der interessantesten, in der Schule behandelten Gebiete der Chemie und der Naturwissenschaften überhaupt bezeichnen.

Schülerin einer Prima des Literargymnasiums Neufeld (Bern, 1998)

Ich schätzte es, dass wir uns mit der Quantenchemie beschäftigten bzw. auseinandersetzten. Wir erhielten so einen Einblick in die moderne naturwissenschaftliche Denkweise. Dies ist nötig, um die Auswirkungen dieser Modellvorstellung auf unsere Zeit zu verstehen.

Schüler einer Prima des Literargymnasiums Neufeld (Bern, 1998)

Positiver Gesamteindruck bezüglich der Quantenchemie, hatte vielleicht mehrmals den Eindruck, mehr zu verstehen als ich verstanden habe ...

Schülerin einer Prima des Literargymnasiums Neufeld (Bern, 1998)

... Das Bewusstsein, dass häufig erst mehrere Blickwinkel eine befriedigende Erklärung liefern können, wurde in meinem gymnasialen Chemieunterricht gefördert. Ich erinnere mich sehr gut an die aufregende, mich richtiggehend aufwühlende Erkenntnis, dass es in der Quantenmechanik zwei unabhängige Erklärungsmodelle braucht, um die Wechselwirkung des Lichts mit Materie zu beschreiben. Das Wellenmodell und das Teilchenmodell ergänzen sich und können nur gepaart den Phänomenen auf die Spur kommen. Dieser gymnasiale Denksport wurde direkter Nährboden für meine kreative Entwicklung und in Kombination mit dem gleichzeitig wachsenden Interesse für philosophische Gedankengänge erlangte ich so anregende Perspektiven für mein Tun...

Meret Lüthi (künstlerische Leiterin Les Passions de l'Ames; Matur 1998, Gymnasium Bern-Neufeld)

herrenschw.
1. 10. 1993

lieber herr baers,
da habe ich doch tatsächlich schon
das gefühl gehabt, ich hätte das
gymnasium samt seiner fülle an
lehstoffen (die mich, zugegeben,
nicht immer interessiert haben)
schon weit hinter mir gelassen.
um mich geistig ein wenig auf
das studium der kunstgeschichte
vazubereiten, lese ich unter ander
em ein interessantes buch von
john berger, "glanz und elend
des malers pablo picasso". darin
bin ich auf die interessante passage
gestossen, in der er quantenphysik
mit kubismus in verbindung bringt
(sh. beilage). die vielen stunden
angstrengten chemie - büffeln
scheinen sich nun also doch noch
gelohnt zu haben, es wäre mir
sonst nicht möglich gewesen, diese
spannenden thesen nachzuvollziehen.
in dem sinne vielen dank & freundliche grüsse
irene schoch

5.4 Die Schrödinger-Gleichung

“Herleitung” der Schrödinger-Gleichung mit der zeitunabhängigen Wellengleichung eines Teilchensystems (vgl. Physiklehrbücher) und der Gleichung von de Broglie

Zeitunabhängige Wellengleichung eines Teilchensystems: $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \cdot \psi$

ψ : Amplitude der Teilchenschwingung

x, y, z : Raumkoordinaten

λ : Wellenlänge der Teilchenschwingung

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$: zweite (partielle) Ableitung (Steilheit, mit der sich eine mathematische Funktion krümmt; entspricht der kinetischen Energie eines Oszillators bzw. eines Elektrons in einem Elektronensystem) der gesuchten Funktion nach x ; Entsprechendes gilt für die beiden anderen Raumkoordinaten y und z .

de Broglie: $\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$

h : Planck'sches Wirkungsquantum $\left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2} \right]$

m : Masse [kg]

v : Teilchengeschwindigkeit $\left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$

$E_{\text{ges}} = E_k + E_p$ bzw. für die Quantenmechanik: $E_{\text{ges}} = T + V$

E_{ges} : Gesamtenergie des Systems

E_k : kinetische Energie; in der Quantenmechanik mit T abgekürzt

E_p : potentielle Energie; in der Quantenmechanik mit V abgekürzt

$$E_{\text{ges}} = \frac{m \cdot v^2}{2} + V = \frac{m^2 \cdot v^2}{2 \cdot m} + V$$

$$m^2 \cdot v^2 = 2 \cdot m \cdot (E_{\text{ges}} - V) \rightarrow m \cdot v = \sqrt{2 \cdot m \cdot (E_{\text{ges}} - V)}$$

→ eingesetzt in die Gleichung von de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot (E_{\text{ges}} - V)}} \quad \text{eingesetzt in die Wellengleichung eines Teilchensystems:}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = - \left(\frac{2\pi \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot (E_{\text{ges}} - V)}}{h} \right)^2 \cdot \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = - \frac{8\pi^2 \cdot m \cdot (E_{\text{ges}} - V)}{h^2} \cdot \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 \cdot m \cdot (E_{\text{ges}} - V)}{h^2} \cdot \psi = 0 \quad | \cdot \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 \cdot m} \right)$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - (E_{\text{ges}} - V) \cdot \psi = 0$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V \cdot \psi = E_{\text{ges}} \cdot \psi$$

$$-\frac{h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi = E_{\text{ges}}\psi$$

 T V E_{ges}

kinetische Energiepotentielle Energie

Gesamtenergie

Schrödinger-Gleichung zur Berechnung der kinetischen, potentiellen und Gesamtenergie einer Materiewelle (vgl. Modul „Quantenchemie und chemische Bindung“, Abschnitt 4.2)
