

Das Ionisierungsproblem in der Quantenmechanik

Mein Lehre@LMU-Projekt beschäftigt sich mit dem maximalen Überschuss an Elektronen, die Atomkerne zusätzlich zur Kernladung binden können.

Einer der größten Erfolge der Quantenmechanik ist die Erklärung der Ordnung der chemischen Elemente im Periodensystem. In der Chemie lernen wir, wie aus der Quantenmechanik das Schalenmodell der Atome hervorgeht, das uns die Periodizität im Verhalten der Atome erklärt. Allerdings gibt es universelle Phänomene, die nicht durch das einfache Schalenmodell beschrieben werden können, sondern auf allgemeineren Gesetzen der Materie beruhen. Ein solches Phänomen ist zum Beispiel die Tatsache, dass die maximale negative Ionisierung, d.h. die Anzahl zusätzlicher Elektronen, die ein Atomkern binden kann, bei allen Elementen klein bleibt. Während die Elektronenaffinität (die Energie, die bei der Formung eines negativen Ions frei wird) zwischen den Elementen stark schwankt, ist selbst die Existenz stabiler, zweifach negativ geladener Ionen unsicher.

In der Mathematischen Physik untersucht man daraufhin die Schrödingergleichung, das Herzstück der Quantenmechanik, ob und wie diese Eigenschaften aus ihr hervorgehen. Dabei besteht die größte Schwierigkeit in der enormen Komplexität der Gleichung. Durch die große Zahl an Variablen ist für große Atome eine explizite Lösung schlicht unmöglich. Dennoch ist es möglich durch geeignete Approximationen Informationen aus ihr zu extrahieren. So gelang es Elliott Lieb 1984 [1] zu beweisen, dass die Schrödingergleichung keine Ionen zulässt, deren Überschussladung höher als die Kernladungszahl ist. Damit ist das Problem zumindest für Wasserstoff gelöst, denn einfach ionisierter Wasserstoff ist stabil.

Darüber hinaus kann man typischerweise asymptotische Schranken zeigen. Im Grenzwert großer Kernladungszahl geht die Schrödingertheorie in eine statistische Theorie der Elektronen über, in der die Anzahl der Variablen erheblich niedriger ist. Zurückgehend auf eine Arbeit von Lieb, Simon, Sigal und Thirring [2] ist in diesem Zusammenhang bekannt, dass in führender Ordnung in der Kernladung ein Atomkern kein echtes Vielfaches der Kernladung binden kann, asymptotisch herrscht also Neutralität. Es stellt sich heraus, dass das Pauliprinzip, das besagt, dass zwei Elektronen nicht in ihrem Quantenzustand übereinstimmen können, essentiell dafür verantwortlich ist, dass sich die meisten Elektronen fern des attraktiven Kerns aufhalten. Dadurch entsteht effektiv eine Abschirmung weiterer Elektronen. Diese wurde bereits 1931 von Paul Ehrenfest beobachtet, der damals schon bemerkte, dass das Pauliprinzip entscheidend für die Stabilität der Materie ist.

Die volle Vermutung, dass für alle Kernladungszahlen der Überschuss an Elektronen diese nur um eine universelle Konstante, mutmaßlich 1, betragen kann, beschäftigt Mathematiker und Physiker seit Jahrzehnten und ist immernoch ein aktuelles Thema der Forschung. So findet man es zum Beispiel als Problem 9 auf Barry Simons Liste von offenen Problemen über Schrödingeroperatoren aus dem Jahr 2000 [3].

In meinem durch die Lehre@LMU geförderten und von Prof. Siedentop betreuten Projekt beschäftige ich mich damit, die bereits bekannten Resultate in der nicht-relativistischen Schrödingertheorie für pseudo-relativistische Systeme zu verallgemeinern. Dabei be-

trachte ich Operatoren, die direkt aus der physikalisch akkurateren, aber wesentlich schwieriger zu behandelnden Quantenelektrodynamik abgeleitet wurden und somit relativistische Korrekturen einführen. Schwerpunkt der Arbeit ist damit herauszufinden, wie die in diesem Zusammenhang auftauchenden Pseudodifferential- und No-Pair-Dirac-Operatoren zu behandeln sind. Im Zuge des Projektes wurde mir unter anderem ein Arbeitsplatz in der Universität zur Verfügung gestellt, um eine engere Betreuung zu ermöglichen. Außerdem wurde mir der Besuch einer Konferenz über "Mathematics of Many-Particle Systems" ermöglicht, bei der auch neue Ergebnisse zur Ionisierung vorgestellt wurden.

Michael Handrek, 18.09.12

References

- [1] LIEB, E. H. Bound on the maximum negative ionization of atoms and molecules. *Phys. Rev. A* 29, 6 (1984), 3018–3028.
- [2] LIEB, E. H., SIGAL, I. M., SIMON, B., AND THIRRING, W. Asymptotic Neutrality of Large- z Ions. *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984), 994–996.
- [3] SIMON, B. Schrödinger operators in the twenty-first century. In *Mathematical physics 2000*. Imp. Coll. Press, London, 2000, pp. 283–288.