### **Bohrsches Atommodel**

### Leistungsfähigkeit ...

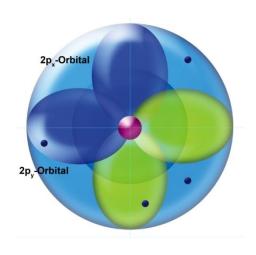
- richtige Berechnung des Durchmessers vom Wasserstoffatom.
- grundsätzliche Erklärung aller Emissions- und Absorptionsquanten als Energieänderung des betreffenden Elektrons.
- sehr genaue theoretische Herleitung des Wasserstoffspektrums sowie der Spektren wasserstoffähnlicher Ionen
- Serienformel auf der Grundlage von Naturkonstanten
- korrekte Berechnung der Ionisierungsenergie

### ... und Grenzen

- keine Erklärung der Strahlungsfreiheit bei der Kreisbewegung um den Kern
- spektrale Berechnungen auf Mehrelektronensysteme nicht anwendbar
- keine Erklärung der Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Energieniveaus (Intensität der Linien)
- Keine räumliche Beschreibung des Atoms (Scheibenmodell)
- Widerspruch zur Heisenberg'schen Unschärferelation (Genauigkeit von Bahnradius und Geschwindigkeit)

### → unvollkommenes Atommodell

# Das quantenmechanische Atommodell



"Orbitalmodell"

# **Grundlagen:**

- → Einbeziehung der Erkenntnisse von E. Schrödinger
  - Schrödinger-Gleichung (Psi):  $\Delta \psi = \frac{1}{u^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$

 $\psi_{\cdots}$  Ampitude des schwingenden Systems

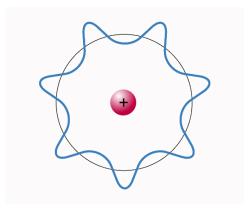
u ... Geschwindigkeit der sich überlagernden Wellen

- ► Grundgleichung der Quantenphysik
- Grundidee: Elektronen als Quant  $\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$
- Elektronenbahn als stehende De Brogli Wellen

Max Born interpretierte das Absolutquadrat dieser Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auffinden eines Teilchens zur Zeit tan einem bestimmten Ort r.



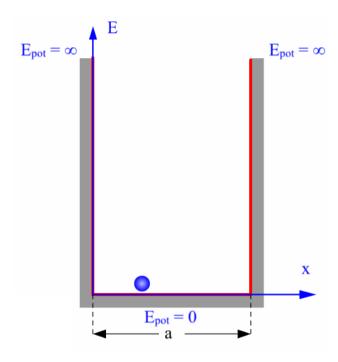
(Bohrsche Quantenbedingung)



Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung P $|\psi|^2$  nennt man Orbitale.

Dieses quantenmechanische Obitalmodell ist ein rein mathematisches Modell und entzieht sich einer grafischen Veranschaulichung.

# abgeleitete Modelldarstellung: (eindimensionale Betrachtung)

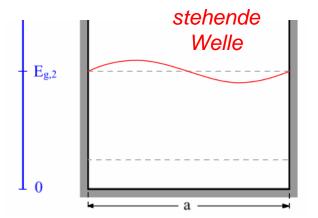


"Energietopf" mit unendlich hohen Wänden und dem Durchmesser a

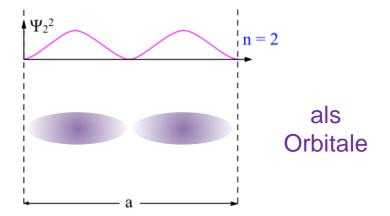
Die potenzielle Energie am "Boden" des Topf ist E<sub>pot</sub>=0, außerhalb unendlich groß

# **Linearer Potenzialtopf**

De-Broglie-Wellen der Elektronen im Potenzialtopf (n=2)

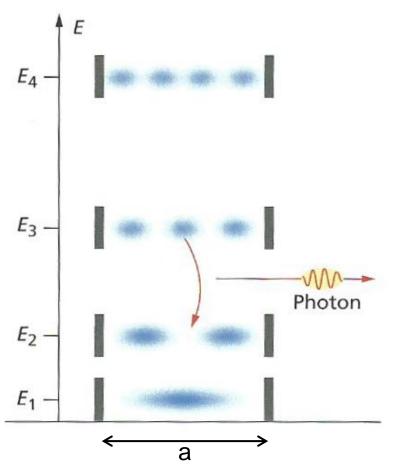


Aufenthaltswahrscheinlichkeit:



### **Energieniveauschema**

(Potenzialtopf)



→ andere Energieverteilung wie im Bohrschen Energiestufenmodell Für die Breite a des Potenzialtopfes als <u>stehende Welle</u> gilt:

$$a = n \cdot \frac{\lambda_{\mathsf{n}}}{2} \qquad \qquad \lambda_{\mathsf{n}} = \frac{2 \cdot a}{n}$$

Für den Impuls:

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{n \cdot h}{2 \cdot a}$$

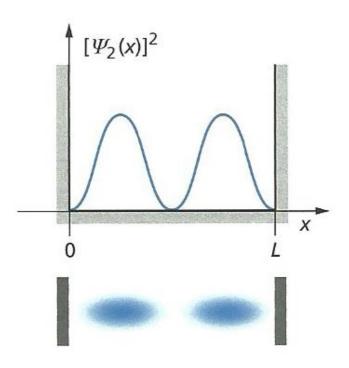
Für die Geschwindigkeit:

$$v_n = \frac{p_n}{m_e} = \frac{n \cdot h}{2 \cdot a \cdot m_e}$$

Und damit für die Energie:

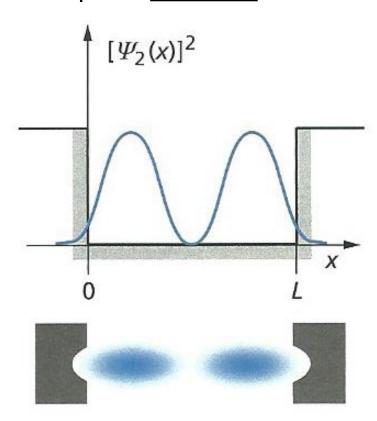
$$E_n = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_n^2 = \frac{n^2 \cdot h^2}{8 \cdot a^2 \cdot m_e}$$

# Topf mit <u>unendlicher</u> Höhe:



Die Topfbarriere (Wände) können nicht durchdrungen werden

# Topf mit endlicher Höhe:



Es sind verbotene energetische Bereiche möglich

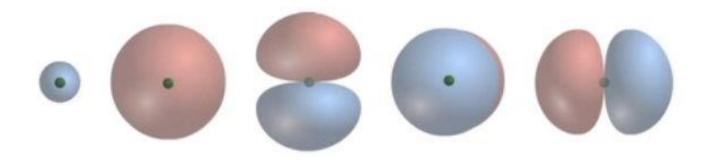
Die Wahrscheinlichkeit einen Potenzialwall auch mit geringerer Energie zu durchdringen nennt man Tunneleffekt.

### **3-dimentionale Beschreibung der Orbitale:**

Die Lösungen der Wahrscheinlichkeitsfunktion ergeben unterschiedliche Orbitale.

→ Wahrscheinlichkeitsraum

entspricht einer "Wolke", in der sich die Teilchen bewegen



→ verschiedene 3-dimensionale Formen

Unterschiedliche Orbitale entsprechen verschiedenen Energieniveaus.

Das Energieniveau ist nicht nur vom Orbitale (Hauptquantenzahl) abhängig.

Zur vollständige Energiebeschreibung werden weiteren Quantenzahlen eingeführt.

Chemieunterricht

### Quantenzahlen

	Bezeichnung	Bedingung	Bemerkung
n	Hauptquantenzahl	$n\in\mathbb{N}$	Die Hauptquantenzahl $n$ bestimmt im wesentlichen die Energie $E_n$ des beschriebenen Zustands
I	Nebenquantenzahl	/= 0; 1; 2; . (n-1)	Die Nebenquantenzahl beschreibt den Betrag des Bahndrehimpulses. Oft werden für die Nebenquantenzahl auch Buchstaben verwendet: <i>I</i> = 0: s; <i>I</i> = 1: p; <i>I</i> = 2: d und <i>I</i> = 3: f.
m	Magnetische Quantenzahl	-/ ≤ m ≤ +/	Quantenzahl für die z-Komponente des Drehimpulses
s	Spin-Quantenzahl	$s = +\frac{1}{2}$ ; $s = -\frac{1}{2}$	Quantenzahl für den Eigendrehimpuls eines Elektrons

Jeder "Quantenzahlkombination" ergibt eine andere Orbitalform.

