Bohrsches Atommodel

Leistungsfähigkeit …

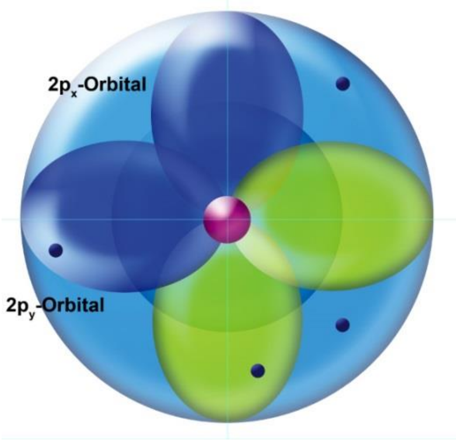
- richtige Berechnung des Durchmessers vom Wasserstoffatom.
- grundsätzliche Erklärung aller Emissions- und Absorptionsquanten als Energieänderung des betreffenden Elektrons.
- sehr genaue theoretische Herleitung des Wasserstoffspektrums sowie der Spektren wasserstoffähnlicher Ionen
- Serienformel auf 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 Heisenbergschen Unschärferelation (Genauigkeit von Bahnradius und Geschwindigkeit)

→ unvollkommenes Atommodell

Das quantenmechanische Atommodell



„Orbitalmodell“

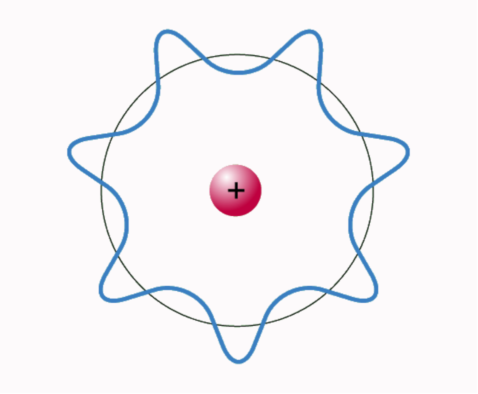
… Bohrsche Postulate als (scheinbar) willkürliche Annahmen

$\rightarrow$ Einbeziehung der Erkenntnisse von E. Schrödinger

- mathematische Modellbeschreibung
  (schwere bildhafte Vorstellung)
- Grundidee: Elektronen als Welle $\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$
- Länge einer Elektronenbahn als ganzzahliges Vielfaches der De-Broglie-Wellenlänge

(Bohrsche Quantenbedingung)

- räumliches Gebilde einer stehenden Welle



- Schrödinger-Gleichung (Psi): $\Delta\psi = \frac{1}{u^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$

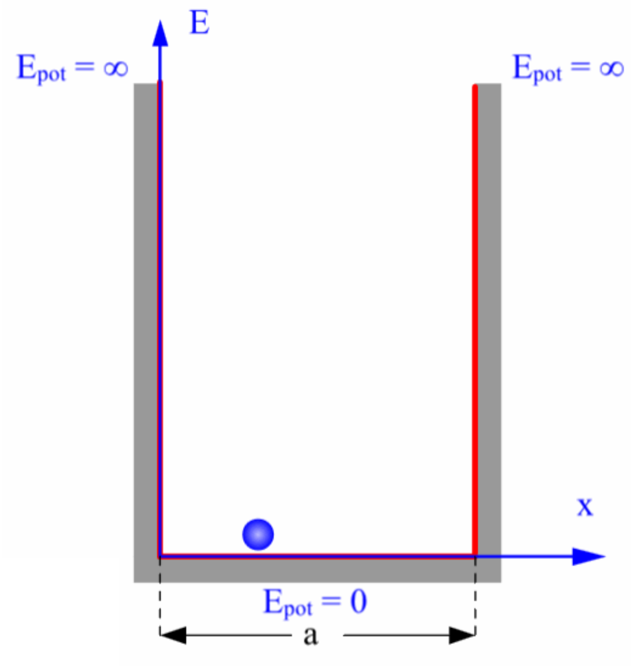
ψ *… Amplitude des schwingenden Systems*

u … Geschwindigkeit der sich überlagernden Wellen

► *Grundgleichung der Quantenphysik*

Das Absolutquadrat dieser Wellenfunktion ist als Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auffinden eines Teilchens zur Zeit t an einem bestimmten Ort r zu deuten.

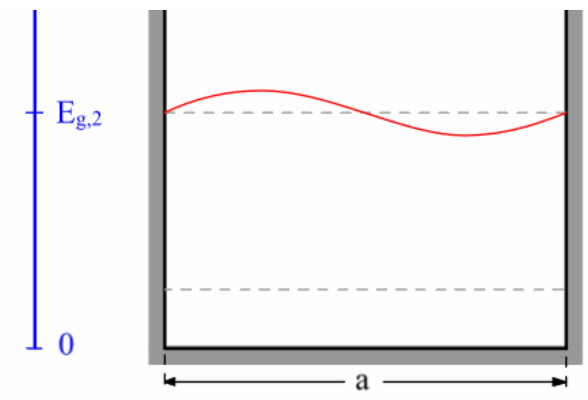
Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung P$|\psi|^2$ nennt man **Orbitale** abgeleitete Modelldarstellung: **Linearer Potenzialtopf**



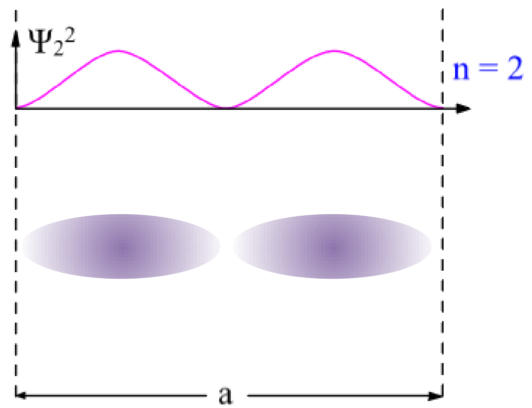
„Energietopf“ mit unendlich hohen Wänden und dem Durchmesser a

Die potenzielle Energie im Topf ist E_{pot}=0, außerhalb unendlich groß

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

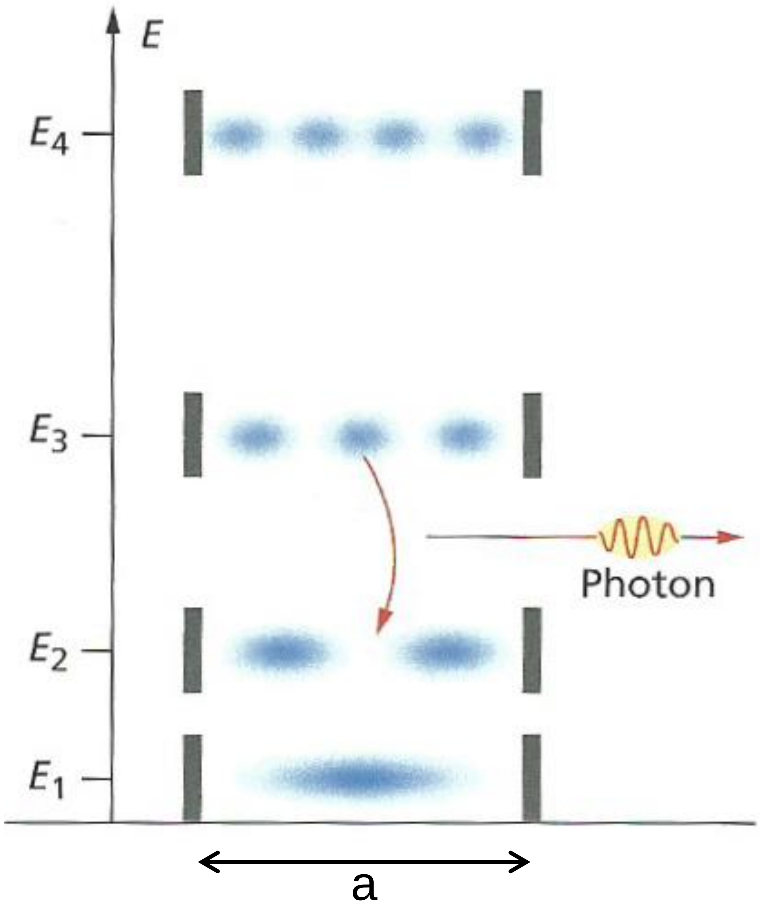


Aufenthaltswahrscheinlichkeit:



als Orbitale

Energieniveauschema
(Potenzialtopf)



→ andere Energieverteilung wie im Bohrschen Energiestufenmodell

Für die Breite a des Potenzialtopfes als <u>stehende Welle</u> gilt:

$$a = n \cdot \frac{\lambda_n}{2} \qquad \lambda_n = \frac{2 \cdot a}{n}$$

Für den Impuls:

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

Für die Geschwindigkeit:

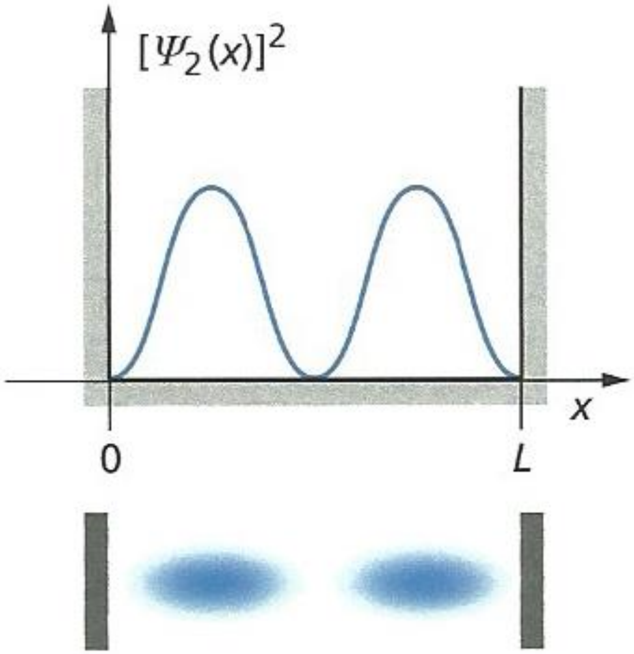
$$v_n = \frac{p_n}{m_e} = \frac{n \cdot h}{2 \cdot a \cdot m_e}$$

Und damit für die Energie:

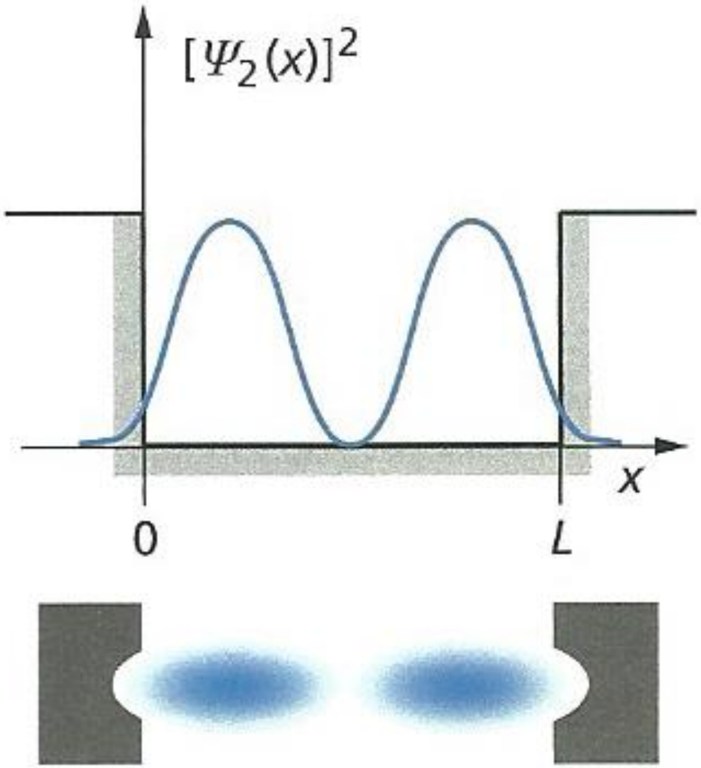
$$\boxed{E_n = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot {v_n}^2 = \frac{n^2 \cdot h^2}{8 \cdot a^2 \cdot m_e}}$$

Topf mit <u>unendlicher</u> Höhe:

Topf mit <u>endlicher</u> Höhe:



Die Topfbarriere (Wände) können nicht durchdrungen werden



Es sind verbotene energetische Bereiche möglich

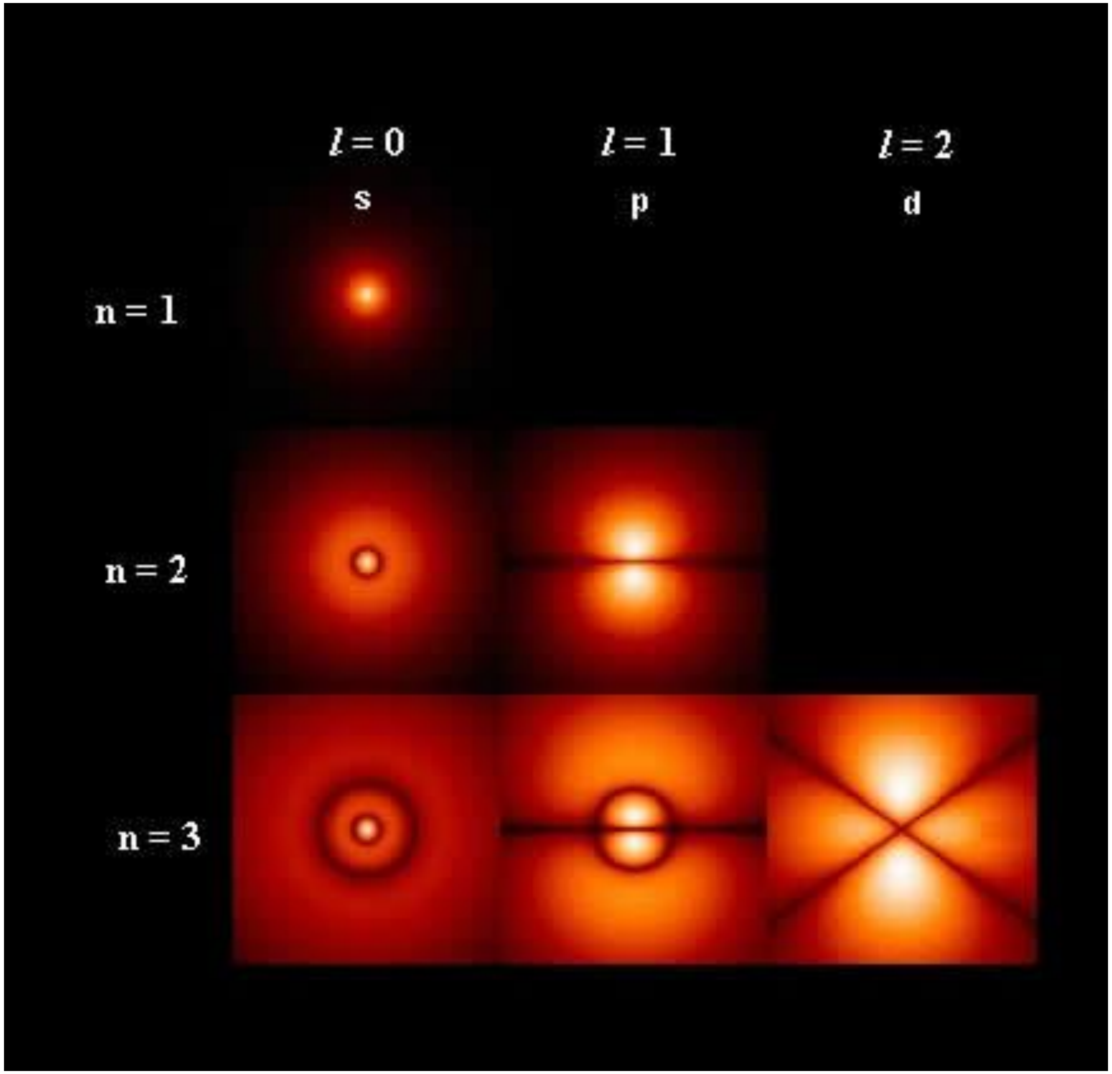
Die Wahrscheinlichkeit einen Potenzialwall auch mit geringerer Energie zu durchdringen nennt man **Tunneleffekt**.

Nach der Schrödingergleichung gibt es verschiedene stationäre Zustände des Atoms, die sich durch vier verschiedene Quantenzahlen ausdrücken lassen:

	Bezeichnung	**Bedingung**	**Bemerkung**
n	Hauptquantenzahl	$n \in \mathbb{N}$	Die Hauptquantenzahl *n* bestimmt im wesentlichen die Energie E_n des beschriebenen Zustands
l	Nebenquantenzahl	*l* = 0; 1; 2; . . . (n-1)	Die Nebenquantenzahl beschreibt den Betrag des Bahndrehimpulses. Oft werden für die Nebenquantenzahl auch Buchstaben verwendet: *l* = 0: s ; *l* = 1: p ; *l* = 2: d und *l* = 3: f.
m	Magnetische Quantenzahl	-*l* ≤ m ≤ +*l*	Quantenzahl für die z-Komponente des Drehimpulses
s	Spin-Quantenzahl	*s* = +½; *s* = -½	Quantenzahl für den Eigendrehimpuls eines Elektrons

Jeder Quantenzahlkombination lässt sich demnach eine Aufenthalts-wahrscheinlichkeit zuordnen. Solche Aufenthaltswahrscheinlichkeiten kann man auf verschiedene Weise darstellen:

… als flächig dargestellte Wahrscheinlichkeitsverteilung



… als räumliche Darstellung