2.8 Das Bohrsche Atommodell

Niels Bohr
(1885 - 1962)

Zentripetalkraft = Coulombkraft

$$\frac{\mu\cdot v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\cdot\varepsilon_0}\cdot\frac{Z\cdot e^2}{r^2} \qquad \mu = \frac{m_e\cdot m_{\text{Kern}}}{m_e + m_{\text{Kern}}} \approx m_e$$

$$r = \frac{Z\cdot e^2}{4\pi\cdot\varepsilon_0\cdot\mu\cdot v^2} \qquad p = \mu\cdot v = \hbar\cdot k = \frac{h}{\lambda}$$

zusätzliche Bedingung: Umfang der Bahn = ganzzahliges Vielfaches der de-Broglie-Wellenlänge λ

$$2\pi\cdot r = n\cdot\lambda = n\cdot\frac{h}{\mu\cdot v} \quad\rightarrow\quad v = \frac{n\cdot h}{2\pi\cdot r\cdot\mu}$$

diskrete Werte von *v* und *r*

$$r = \frac{Z\cdot e^2}{4\pi\cdot\varepsilon_0\cdot\mu}\cdot\frac{4\pi^2\cdot r^2\cdot\mu^2}{n^2\cdot h^2} \quad\rightarrow\quad r = \frac{n^2\cdot h^2\cdot\varepsilon_0}{\pi\cdot Z\cdot e^2\cdot\mu} = \frac{n^2}{Z}\cdot a_0 \quad\rightarrow\quad v = \frac{h\cdot Z}{2\pi\cdot\mu\cdot a_0\cdot n}$$

$$a_0 = \frac{h^2\cdot\varepsilon_0}{\pi\cdot e^2\cdot\mu} = 5{,}292\cdot 10^{-11}\,\text{m} \approx 0{,}53\,\text{Angstrom}$$

Bohrscher Radius **(Wasserstoffatom im Grundzustand)**

diskrete Werte der kinetischen Energie

$$E_{kin} = \frac{1}{2}\mu\cdot v^2 = \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\cdot\varepsilon_0}\frac{Z\cdot e^2}{r} = -\frac{1}{2}E_{pot} \qquad E = E_{kin} + E_{pot} = -E_{kin}$$

$$E = -\frac{1}{2}\mu\cdot v^2 = -\frac{h^2}{8\pi^2\cdot\mu\cdot a_0^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2} = \frac{h^2}{8\pi^2\cdot\mu}\cdot\frac{\pi^2\cdot e^4\cdot\mu^2}{h^4\cdot\varepsilon_0^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2}$$

$$\boxed{E = -\frac{e^4\cdot\mu}{8\varepsilon_0^2\cdot h^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2} \quad\leftrightarrow\quad E = -R\cdot\frac{Z^2}{n^2}} \qquad \left(R_\infty \text{ für } \mu\rightarrow m_e\right)$$

Rydberg-Konstante

Bahndrehimpuls

$$\left|\vec{L}\right| = \mu \cdot r \cdot v = \mu \cdot \frac{n^2}{Z} a_0 \cdot \frac{h \cdot Z}{2\pi \cdot \mu \cdot a_0 \cdot n} = \frac{n \cdot h}{2\pi} \qquad \boxed{\left|\vec{L}\right| = n \cdot \hbar}$$

Statt Umfang = ganzzahliges Vielfaches von λ könnte man auch fordern:
Bahndrehimpuls = ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$

Der Drehimpuls ist quantisiert und *n* ist eine Quantenzahl, die einen Quantenzustand definiert.

Licht wird absorbiert, wenn ein Elektron von einem energetisch tieferen in einen höheren Zustand übergeht.
Licht wird emittiert, wenn ein Elektron von einem energetisch höheren in einen tieferen Zustand übergeht.

$$E(n_i) - E(n_j) = h \cdot \upsilon$$

Die potenzielle Energie des tiefsten Zustands des Wasserstoffatoms ist -*R* = -13,6 eV.
Diese Energie wird benötigt, um das Wasserstoffatom zu ionisieren.

Die Radien der Bahnen nehmen quadratisch mit *n* zu und umgekehrt proportional zu *Z* ab.
Die Energien der Zustände folgen $-Z^2/n^2$.

2.9 Die Schrödinger-Gleichung

Erwin Schrödinger
(1887 - 1961)

Die Wellenfunktionen müssen einer geeigneten Wellengleichung und Randbedingungen (z.B. freier Raum oder Potenziale verschiedener Form) genügen.

elektromagn. Welle $\omega = c \cdot k$ $\qquad \frac{\partial^2}{\partial t^2} f = c^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} f$ **Wellengleichung**

Materiewelle $\omega = \frac{\hbar}{2m} \cdot k^2$ $\qquad$?

einsetzen des *E*- und *p*-Operators

$$\hbar \cdot \omega = \frac{(\hbar \cdot k)^2}{2m} \qquad E = \frac{p^2}{2m} \qquad \rightarrow \qquad \boxed{i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi}$$

allgemeiner: mit einem Potenzial *V*, d.h. unter dem Einfluss konservativer Kräfte

$$\boxed{i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V(x,t) \cdot \psi}$$

zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

dreidimensional

$$\boxed{i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \qquad \text{mit} \qquad \hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x,t)}$$

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Hamilton-Operator **vgl. Hamilton-Funktion in der Mechanik = kin. Energie + pot. Energie**

(Potenzial bislang noch zeitabhängig)

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$V = V(x) \quad \rightarrow \quad \boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\cdot\varphi(t)}$$ **Produkt einer orts- und zeitabhängigen Funktion**

in die eindimensionale Schrödinger-Gleichung eingesetzt

$$i\cdot\hbar\cdot\psi(x)\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = -\varphi(t)\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\cdot\psi(x)\cdot\varphi(t) \qquad :\{\psi(x)\cdot\varphi(t)\}$$

$$i\cdot\hbar\cdot\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = \frac{1}{\psi(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\cdot\psi(x)\right)$$

da die linke Seite nur *t*-abhängig und die rechte nur *x*-abhängig ist, müssen beide Seiten gleich einer Konstanten sein

$$\boxed{\begin{aligned} & i\cdot\hbar\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = E\cdot\varphi(t) \\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\cdot\psi(x) = E\cdot\psi(x) \end{aligned}}$$

Es ergeben sich zwei getrennte Differenzialgleichungen, die Konstante wird *E* genannt (weil die erste Gleichung eine Eigenwertgleichung für den Energieoperator ist)

Lösung der ersten Gleichung:

$$\frac{1}{\varphi}\partial\varphi = \frac{E}{i\hbar}\cdot\partial t \qquad \int_0^t \frac{1}{\varphi}\partial\varphi = -\frac{i\cdot E}{\hbar}\int_0^t \partial t \qquad \ln\varphi(t) - \ln\varphi(0) = \ln\frac{\varphi(t)}{\varphi(0)} = -\frac{i\cdot E}{\hbar}t$$

$$\varphi(t) = \varphi(0)\cdot e^{-\frac{i\cdot E}{\hbar}t} \qquad \boxed{\varphi(t) = e^{-i\cdot\omega\cdot t}} \qquad \text{mit} \qquad E = \hbar\cdot\omega \qquad \text{und} \qquad \varphi(0) = 1$$

Zweite Gleichung:

Eigenwertgleichung, die von V(x) abhängt und als Eigenwerte diskrete Energien für Quantenzustände ergibt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\cdot\psi(x)=\boxed{\hat{H}\psi(x)=E\cdot\psi(x)}$$

Gesamtwellenfunktion

$$\Psi_n(x,t)=\psi_n(x)\cdot e^{-i\cdot\omega_n\cdot t}$$

Anwendungsbeispiele

a) Unendlich hoher Potenzialtopf

$$V(x)=0 \quad \text{für} \quad 0\le x\le a$$

$$V(x)\to\infty \quad \text{für} \quad x<0,\ x>a$$

in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}=E\cdot\psi(x) \qquad \psi(0)=\psi(a)=0$$

Allgemeiner Lösungsansatz (hier nur sin-Funktionen, da die Wellenfunktion bei *x* = 0 verschwindet)

$$\psi(x)=A\cdot\sin(k\cdot x)+B\cdot\cos(k\cdot x)$$

$$\psi(x)=A\cdot\sin(k\cdot x) \quad \text{mit} \quad \lambda_n=\frac{2a}{n} \qquad k_n=n\frac{\pi}{a} \qquad n=1,2,3\ldots$$

Gesamtwellenfunktion (Betragsquadrat muss = 1 sein)

$$\Psi_n(x,t)=A_n\cdot\sin(k_n\cdot x)\cdot e^{-i\cdot\omega\cdot t} \quad \text{mit} \quad A_n=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

Energiewerte

$$\boxed{E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\cdot n^2}$$