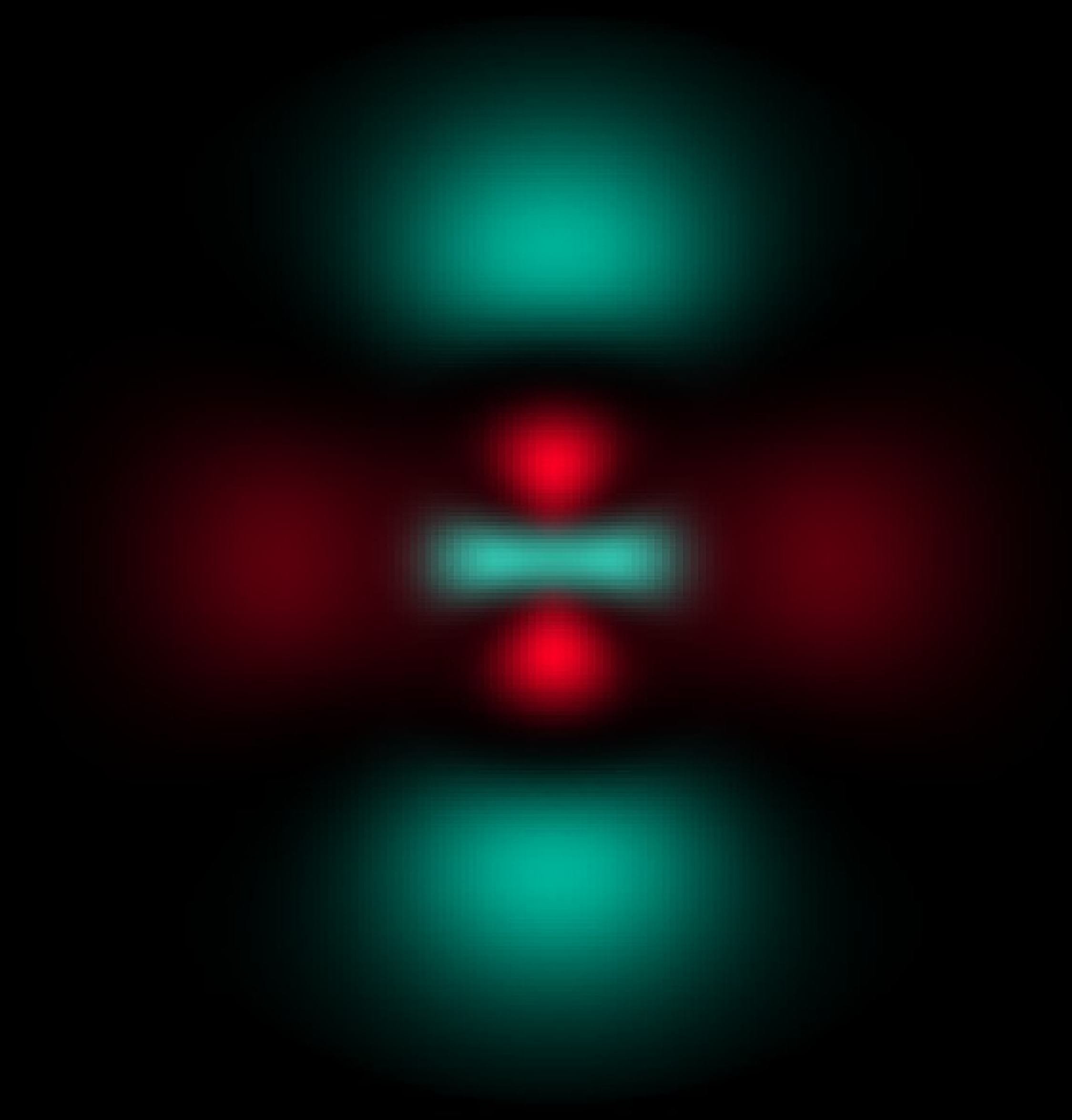
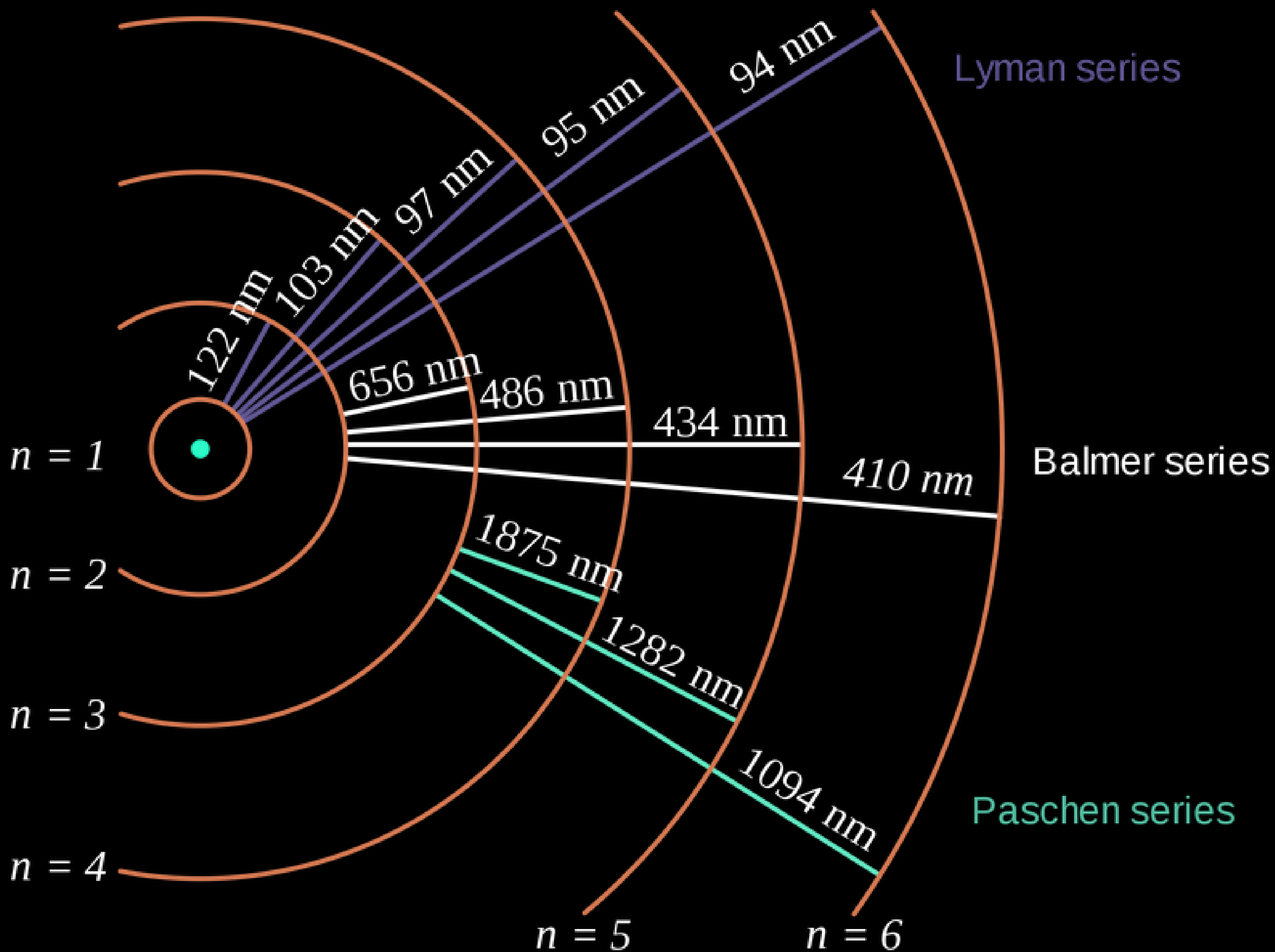
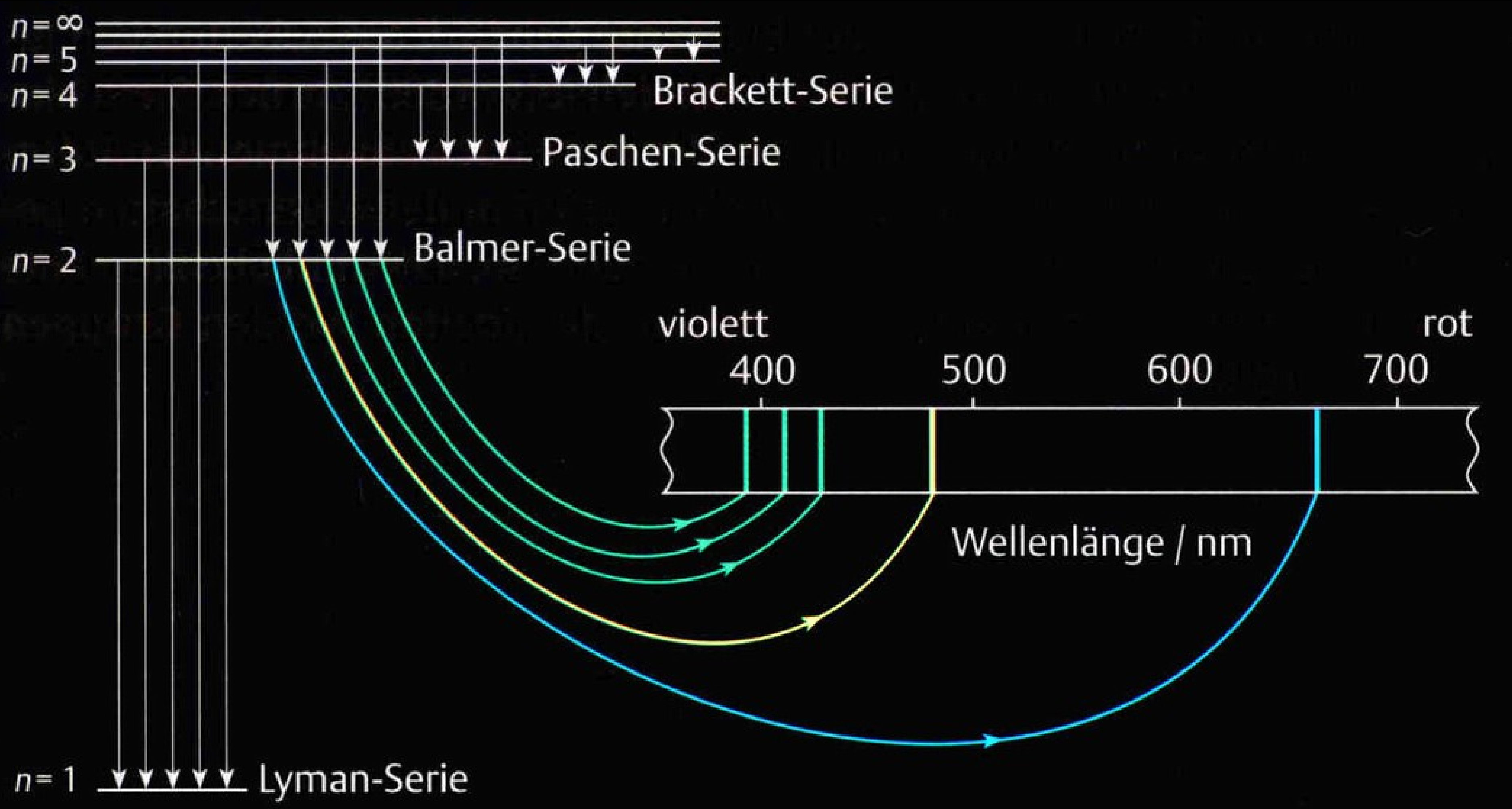
Die Schrödingergleichung II - Das Wasserstoffatom



Das Wasserstoffatom im Bohr-Sommerfeld-Atommodell



Entstehung des Emissionslinienspektrums von Wasserstoff



Das Bohr-Sommerfeld'sche Atommodell erlaubt für einfache Atome (insbesondere Wasserstoff sowie für die Alkali-Metalle) die Berechnung ihrer Spektren.

→ „Bahngleichung“ für strahlungsfreie Bahnen:

$$r_n = \frac{h^2}{4\pi^2 e^2 Z\, m_e}\, n^2 \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

→ „Energie“ der n-ten Bahn

$$E_n = -\frac{1}{2}\,\frac{Ze^2}{r_n} \qquad\qquad E_{n+1} - E_n = \frac{2\pi^2 m_e Z^2 e^4}{rh^2}\left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n+1}\right) = h\nu$$

Problem: Die Feinstruktur von Spektrallinien läßt sich mit diesem einfachen Modell nicht erklären

- weitere Quantenzahlen außer n (der Hauptquantenzahl) sind notwendig!

Um die „Feinstruktur" der Spektrallinien zu erklären, wie sie im Zeeman- und im Stark-Effekt zutage treten, mußte das Bohrsche Atommodell weiter „verkompliziert" werden:

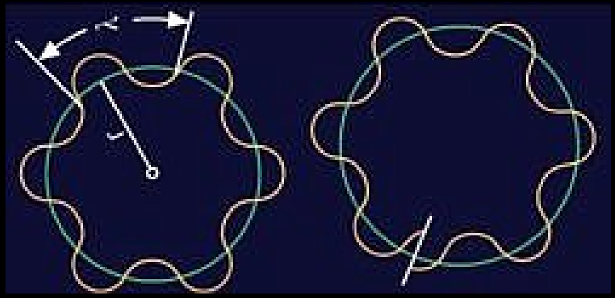
Verwendung von Methoden aus der „Himmelsmechanik"

- Einführung von „elliptischen" Elektronenbahnen (Nebenquantenzahl l)
- „Apsidendrehung" + relativistisch veränderliche Elektronenmasse (Störungsrechnung)
- Berücksichtigung des Systemschwerpunktes über die „reduzierte Masse"
- „Räumliche" Quantelung, um den Einfluß von Magnetfeldern beschreiben zu können
- Eigendrehimpuls des Elektrons (Spin) / Präzession

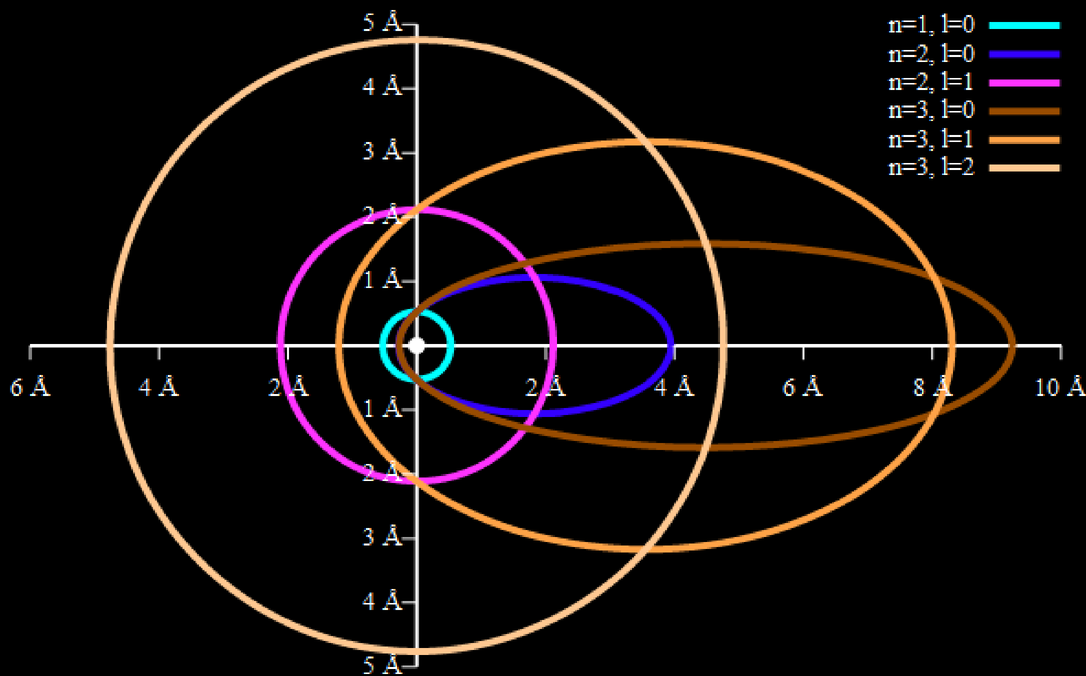
Alles ganz wunderbar – Theorie scheitert aber grandios bei Mehrelektronensystemen...

Außerdem läßt sich mit diesem Modell die chemische Bindung ohne Postulierungen (Pauli-Prinzip) und ad hoc-Annahmen nicht ordentlich erklären.

Das Bild der „Atomschalen“ funktioniert nur bei Wasserstoff (ein Elektron) gut und bei Alkalimetallen (ein „Leuchtelektron“) einigermaßen gut. Es versagt völlig bei Mehrelektronensystemen.



Die Berücksichtigung des (gequantelten) Bahndrehimpulses der Elektronen führt zu einer neuen Quantenzahl, der **Nebenquantenzahl l**. Im Bohr-Sommerfeldschen Atommodell beschreibt sie „diskrete Ellipsenbahnen“.



l=0	->	s
l=1	->	p
l=2	->	d
l=3	->	f

Die Nebenquantenzahl l läuft für jedes Hauptniveau n von l={0 ... n-1}

Heisenberg: Es gibt keine Bahnen in Atomen ! *Also was soll das alles?*

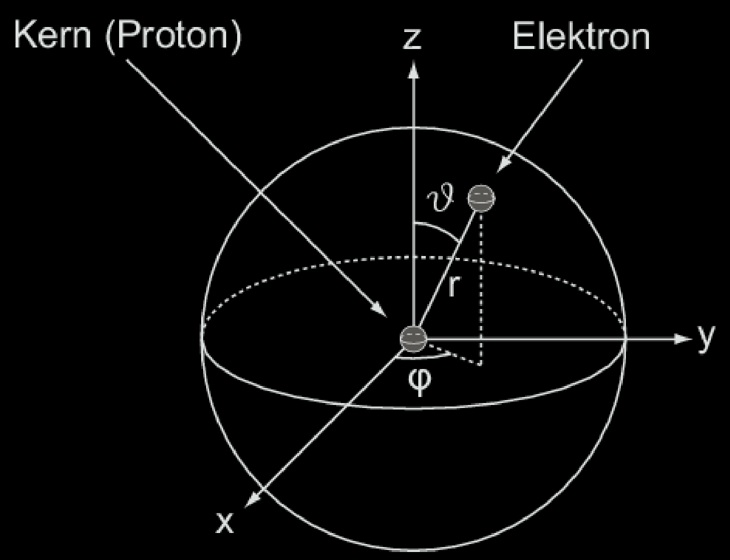
Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom

$$\mathrm{E}\Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\Psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\Psi(\vec{r})$$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ für das Coulomb-Potential

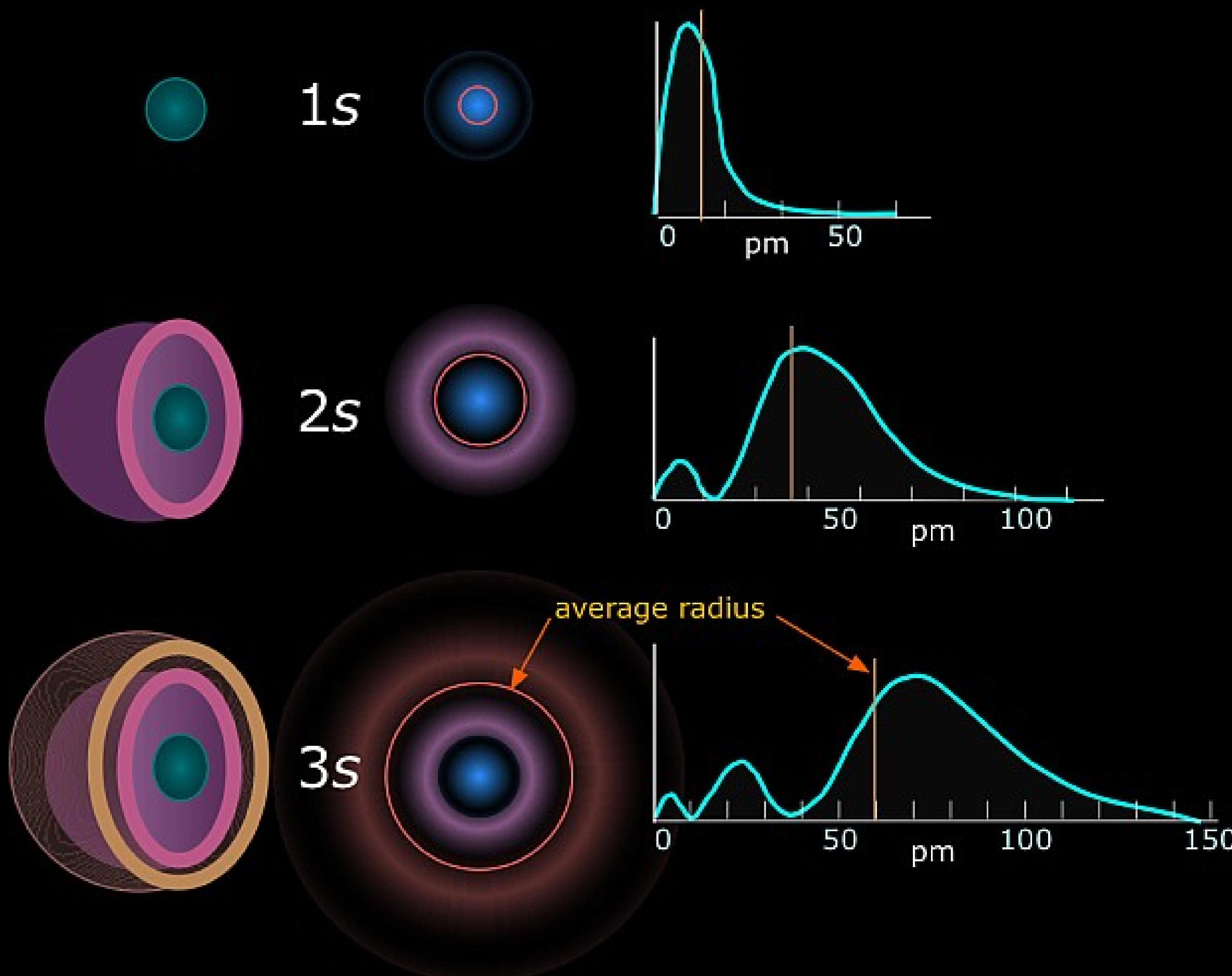
Lösungsansatz unter Verwendung von Kugelkoordinaten:

$$\Psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)\; Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

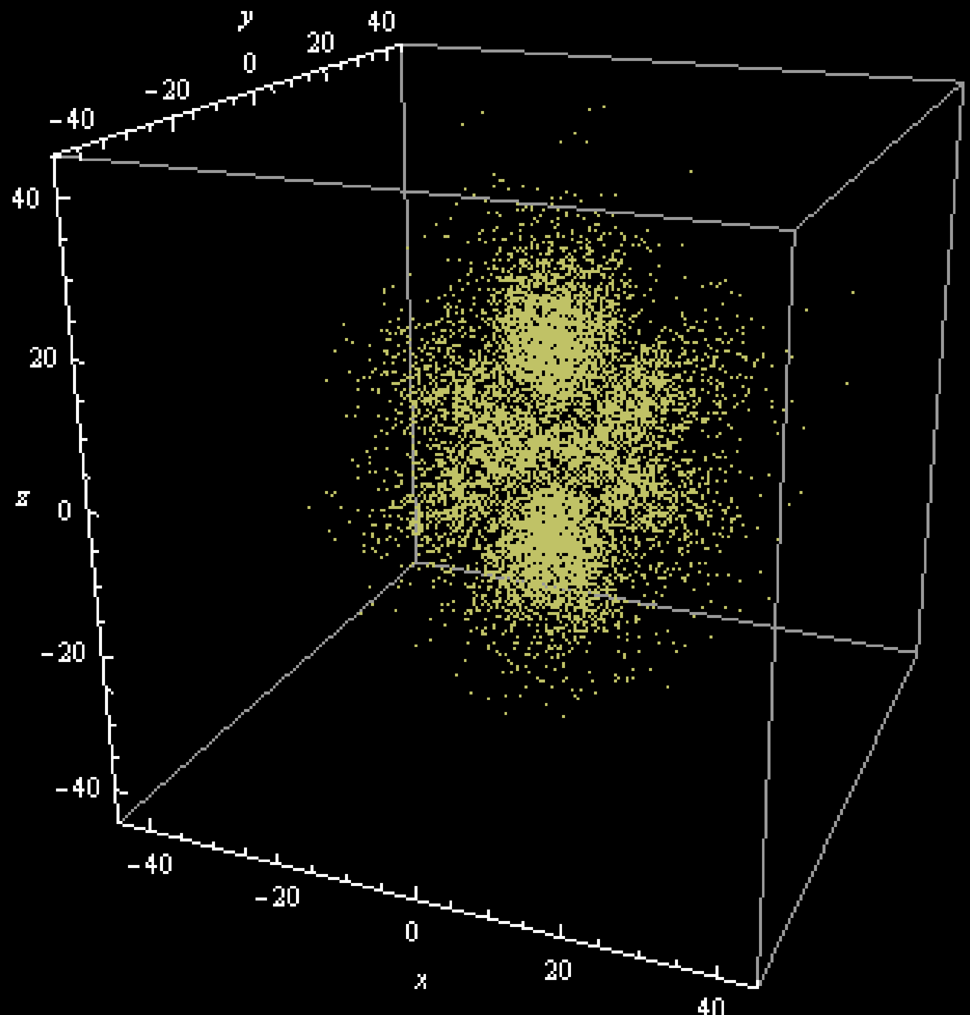



```
n = Hauptquantenzahl = 1,2,3 ...
l = Nebenquantenzahl (Bahndrehimpuls) = 0, ... , n-1
m = magnetische Quantenzahl = -l ... + l
```

Gestalt der Wellenfunktion (l = 0 = s-Orbitale, m=0)



Lösung der Schrödingergleichung mit Mathematica ...



Zusammenfassung

Im Orbitalmodell eines Atoms existieren keine Elektronenbahnen. Das widerspiegelt die Erkenntnis (Heisenbergsche Unschärferelation), daß der Aufenthaltsort eines Quantenobjekts nicht exakt bestimmbar ist.

→ Man kann nur für jeden Punkt des Raumes eine **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** angeben – Wahrscheinlichkeitsdichte (= Amplitudenquadrat der Wellenfunktion, wie sie sich als Lösung der Schrödingergleichung ergibt)

→ Ein Orbital überdeckt den gesamten Raumbereich, innerhalb dessen die Aufenthalts-wahrscheinlichkeit für das Elektron 90% beträgt

→ Die Abstände der Gebiete mit der größten Aufenthaltswahrscheinlichkeit decken sich mit den Bahnen im Bohr-Sommerfeldschen Atommodell

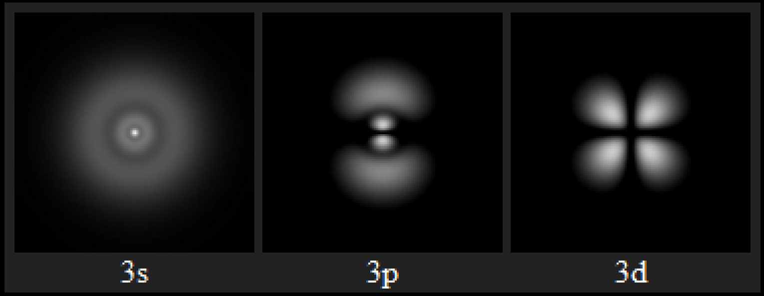
→ Jedes Orbital kann durch einen Satz von Quantenzahlen n, l, m charakterisiert werden

→ Jedes Orbital kann maximal 2 Elektronen aufnehmen, die sich jedoch in ihren Spin s unterscheiden müssen

→ Die Hauptquantenzahl n bestimmt die Energie eines Orbitals

→ Die Nebenquantenzahl l beschreibt den Bahndrehimpuls eines Elektrons. Sie bestimmt die Form des Orbitals

l=0 (s-Orbital) → radialsymmetrisch
l=1 (p-Orbital) → hantelförmig
l=2 (d-Orbital) → gekreuzte Doppelhantel
i=3 (f-Orbital) → rosettenförmig



→ Die magnetische Quantenzahl m bestimmt die Ausrichtung des Orbitals unter dem Einfluß eines äußeren Magnetfeldes

Im Schalenmodell werden Orbitale gleicher Energie (Hauptquantenzahl n, Energieeigen-werte der zeitunabhängigen Schrödingergleichung) als Hauptschalen bezeichnet. Sie werden gewöhnlich mit den Großbuchstaben K, L, M, ... belegt.

Eine Hauptschale kann in Unterschalen mit einem jeweils anderen Wert der Neben-quantenzahl l unterteilt werden. Jeder l-Wert hat einen anderen Namen (s, p, d, f)

Die äußerste mit Elektronen besetzte Hauptschale wird als Valenzschale bezeichnet.
Sie ist äußerst wichtig für die Ausbildung chemischer (genauer kovalenter) Bindungen.