

## Atommodell der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik wird jedem Teilchen auch eine Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r}, t)$  zugeordnet. Erwin Schrödinger hat mit seiner bekannten Schrödingergleichung  $\Psi''(\vec{r}, t) + k^2\Psi(\vec{r}, t) = 0$  eine Differenzialgleichung aufgestellt, die durch die Wellenfunktionen der Teilchen gelöst werden muss. Dabei ist  $k$  die sogenannte Wellenzahl mit  $k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\frac{p}{h}$ .

Über die Wellenlänge  $\lambda$  in der Wellenzahl  $k$ , besteht ein Bezug zur Energie, die ein Teilchen besitzt. Diese Energie ist durch äußere Faktoren beeinflusst. Aus dem Bohrschen Atommodell ist bekannt, dass die Energie eines Elektrons von seiner Bahn abhängig ist. Diese ist durch die Coulombkraft zwischen Elektron und Kern bedingt. Sie lässt sich auch für andere Systeme als das Wasserstoff berechnen. Dabei spielen aber noch weitere Faktoren eine Rolle, außer dem bekannten  $n$  aus dem Bohrschen Atommodell. Insgesamt gibt es die vier Faktoren  $n, l, m$  und  $s$ , die als Quantenzahlen bezeichnet werden.

Es ergeben sich also verschiedene mögliche Wellenfunktionen  $\Psi_{n,l,m,s}(\vec{r}, t)$ , die Lösungen der Schrödingergleichung unter entsprechenden Bedingungen sind. Dabei hat  $\Psi(\vec{r}, t)$  aber keine direkte physikalische Bedeutung, da dieser Wert an den verschiedenen Orten nicht gemessen werden kann. Stattdessen wird mit dem Betragsquadrat  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  gearbeitet. Dieses gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Teilchen an einer Stelle an, die vom Ursprung aus mit dem Vektor  $\vec{r}$  zu erreichen ist.

Berechnet man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Elektron eines Wasserstoffatoms, so hat diese ihren höchsten Wert in dem Abstand vom Atomkern, der auch mit den Bahnradien aus dem Bohrschen Atommodell mit identischem  $n$  übereinstimmt. Somit liefert die Quantenmechanik eine Erklärung für das Bohrsche Atommodell und gleichzeitig eine Lösung für den Verstoß des Bohrschen Atommodells gegen die Heisenbergsche Unschärferelation, nach der nicht gleichzeitig Bahnradius und Bahngeschwindigkeit beliebig genau gemessen werden können. Dieses wäre aber nach Bohrs Rechnungen möglich.

Der Bereich in dem die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Elektron am höchsten ist, wird als Orbital bezeichnet. Die Lage des Orbitals wird durch die Quantenzahlen bestimmt. Durch die Lage wird aber auch die Energie der Elektronen festgelegt. Die Quantenzahlen sind dabei voneinander abhängig und sorgen gegenseitig für Bedingungen, welche Werte die anderen Quantenzahlen annehmen können. Die Hauptquantenzahl  $n$  mit den Werten  $n = 1, 2, 3, \dots$  gibt hauptsächlich das Energieniveau an sowie den Abstand zum Kern. Sie bestimmt auch die sogenannte Schale. Die Nebenquantenzahl  $l$  gibt Auskunft über die Winkelabhängigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Sie kann Werte von  $l = 0, \dots, (n - 1)$  annehmen. Die Magnetquantenzahl  $m$  gibt die Orientierung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Raum an. Ihr Wertebereich ist  $m = -l, \dots, l$ . Durch diese Abhängigkeiten lässt sich auch die Anzahl der Möglichkeiten für ein Elektron innerhalb einer Schale bestimmen.

Wolfgang Pauli hat postuliert, dass innerhalb eines Atoms eine Kombination von Quantenzahlen nur einmal vorkommen darf. Dieses ist auch als das Pauli-Prinzip bekannt. Zählt man nun die Möglichkeiten für  $n = 1$  auf, so stellt man fest, dass es nur eine mögliche gibt. Für  $n = 2$  kommt man auf vier Möglichkeiten. Aus dem Aufbau des Periodensystems ist aber bekannt, dass sich die erste Schale mit zwei und die zweite Schale mit bis zu acht Elektronen besetzen lässt. Eine Erklärung dafür liefert die spektrale Zerlegung des Lichts einer Na-Dampflampe. Bei

genauerer Betrachtung ist zu erkennen, dass die gelbe D-Linie aus zwei sehr nah beieinander liegenden Linien besteht. Dafür müssen zwei verschiedene Energiezustände vorliegen, die sehr nahe beieinander liegen. Diese werden durch die Spinquantenzahl  $s$  hervorgerufen, die die Werte  $s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  annehmen kann. Sie wird auch als Eigendrehimpuls des Elektrons bezeichnet und sorgt für eine Verdopplung der möglichen Kombinationen.

Die verschiedenen Schalen hat man mit den Buchstaben K,L und M bezeichnet. Dabei ist die Schale mit  $n = 1$  die K-Schale. Auch die Quantenzahl  $l$  wird mit Buchstaben bezeichnet. Hier ist es s, p, d und f. Daraus abgeleitet werden Namen für die Elektronen. So bezeichnet man ein Elektron in der ersten, bzw. K-Schale mit  $l = 0$  als 1s-Elektron. Ein Elektron mit  $n = 3$  und  $l = 2$  ist ein 3d-Elektron.

## Aufgaben

1. Es wird angegeben, dass  $k$  in Bezug zur Energie steht. Legen Sie diesen Bezug dar.
2. Gegeben ist eine eindimensionale, zeitunabhängige Lösung für  $\Psi(x)$ :

$$\Psi(x) = 2 \cdot e^{-\frac{4}{5} \cdot x^2} \cdot \sin(x) + i \cdot \frac{1}{2} \cdot e^{-\frac{4}{25} \cdot x^2}$$

Zeichnen Sie für diese Lösung die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem Graphen auf.

3. Begründen Sie, weshalb dieses Atommodell nicht gegen die Unschärferelation verstößt.
4. Bestimmen Sie jeweils die maximale Anzahl der Elektronen der K, L, M und N Schale.
5. Beim Kalium ist die N Schale bereits mit einem Elektron besetzt, obwohl die M Schale noch nicht vollständig besetzt ist. Erklären Sie mit Hilfe der Abbildung 1 diesen Sachverhalt.

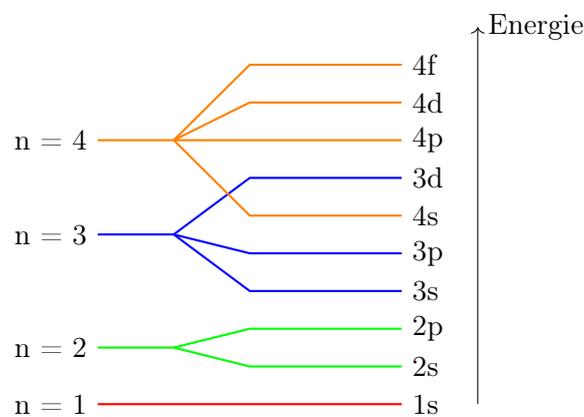


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Einflusses der Nebenquantenzahl  $l$  auf die Energie

## Hinweise

1. Eine komplexe Zahl  $x$  lässt sich schreiben als  $x = a + i \cdot b$  mit  $i^2 = -1$ .
2. Das Betragsquadrat einer komplexen Zahl berechnet sich aus der Zahl multipliziert mit ihrer komplex Konjugierten:  $|x|^2 = x \cdot x^* = (a + i \cdot b) \cdot (a - i \cdot b)$ .