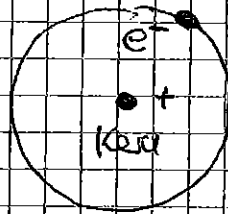


Wiederholung: Bohr'sches Atommodell

1 Aufgabe

Niels Bohr, 1913:

- verknüpft Beiträge von Planck, Einstein, Rutherford zur Erklärung des Wasserstoff-Atoms:



- e^- auf Bahnen um positive Kern, gebunden durch elektrostatische Anziehungskraft.
- ähnlich den Planetenbahnen um die Sonne
- wg. Eindeutigkeit wählte Bohr Kreisbahnen

→ Coulombpotential mit Zentralkraft aus, wenn Elektronen mit Geschwindigkeit v auf Bahnen um Kern mit Radius r zur halten:

$$\boxed{V_{\text{Coul}} = -k \cdot Z \cdot \frac{e^2}{r} \Rightarrow F = \frac{k Z e^2}{r^2} = \frac{m v^2}{r} \quad \left(k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)}$$

- ⇒ ergibt zwar mechanisch stabile Bahnen, nicht aber stabil:
Elektronen erfährt ständig Beschleunigung um Kreisbahnen. Eine beschleunigte Ladung strahlt aber ständig Licht mit Frequenz f (= Umlauffrequenz der Kreisbahnen) ab. Damit würde ständig Energie verloren, die Kreisbahnen würde immer enger, das Elektron würde innerhalb von 10^{-6} s auf dem Kern stehen.

⇒ widerspricht der experimentellen Erfahrung.

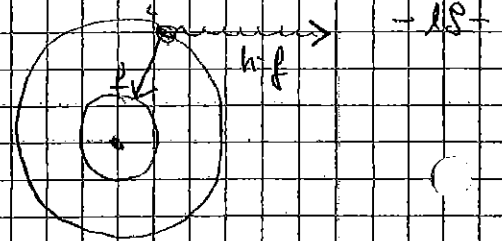
Lösung durch Bohr: 2 Postulate

1. Elektronen bewegen sich auf bestimmten stationären Bahnen um den Kern ohne zu strahlen.
2. Ein Atom strahlt, wenn ein Elektron von einem stationären Zustand in einen anderen übergeht.

Die Energie der abgestrahlten Photonen ist durch die Plancksche Beziehung $E = h \cdot f$ als Differenz der Energien zweier

Orbitale gegeben

$$h \cdot f = E_i - E_f$$



3. Postulat: Korrespondenzprinzip

→ im Grenzfall großer Bahnradien und hoher Energien müssen die quantenmechanischen Berechnungen in die klassische übergehen.

Quantisierung des Drehimpulses:

klassisch: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, $|\vec{L}| = r \cdot m \cdot v = r^2 \cdot m \cdot \omega$

quantisiert: $|\vec{L}| = n \cdot h / 2\pi = n \cdot \hbar$; $n = 1, 2, \dots$

Bahneigenschaften: (Kern: $+Ze$, Elektron: $-e$)

$$F_Z = F_{el} : \frac{kZe^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \Rightarrow v = \left(\frac{kZe^2}{m \cdot r} \right)^{1/2} \quad (k = 1/4\pi\epsilon_0)$$

mit Drehimpuls-Quantelung: $L = m \cdot v \cdot r = n \cdot \hbar$

$$\Rightarrow r = \frac{n \cdot \hbar}{m \cdot v} = \frac{n \cdot \hbar}{m} \cdot \left(\frac{m \cdot r}{kZe^2} \right)^{1/2} \quad | \text{quadrieren}$$

$$\Rightarrow r = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m \cdot kZe^2}$$

$$\Rightarrow r_n = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m \cdot kZe^2} = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

mit: $a_0 = \frac{\hbar^2}{m \cdot k \cdot e^2} = 0.529 \text{ \AA} = 0.0529 \text{ nm}$

a_0 : Bohrsches Radius: = Radius des 1. Bohrschen Bahns des H-Atoms ($n=1, Z=1$)

$r_n \sim \frac{1}{Z}$: Bohrsche Bahnradien für Ein-Elektronen-Atome mit $Z > 1$ verlaufen näher am Kern als beim H-Atom

Energiezustände:

Gesamtenergie des Elektronen: $E_{ges} = E_{kin} + E_{pot}$

$$\Rightarrow E_{ges} = \frac{1}{2} m v^2 + \left(- \frac{kZe^2}{r} \right)$$

aus $F_{el} = F_Z$: $\frac{kZe^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \Rightarrow \frac{1}{2} m v^2 = \frac{kZe^2}{2r}$

$$\Rightarrow E_{ges} = \frac{kZe^2}{2r} - \frac{kZe^2}{r} = - \frac{kZe^2}{2r}$$

ψ_u eingesetzt:

-20-

$$E_n = - \frac{kze^2}{2\pi a} = - \frac{kze^2}{2} \cdot \left(\frac{mkze^2}{n^2 \hbar^2} \right) = - \frac{mk^2 z^4}{2\hbar^2 n^2}$$

$$\Rightarrow E_n = -E_0 \cdot \frac{z^2}{n^2}$$

mit $n = 1, 2, 3, \dots$

$$E_0 = \frac{mk^2 z^4}{2\hbar^2}$$

und Energie ist
gequantelt !

\Rightarrow stationäre Zustände entsprechen bestimmten Werten der Gesamtenergie

$\Delta E_i, E_j$ aus 2. Postulat müssen aus einem Satz erlaubter Werte

E_n stammen:

$$h \cdot f = E_{n_i} - E_{n_j} = -E_0 \frac{z^2}{n_i^2} - \left(-E_0 \frac{z^2}{n_j^2} \right)$$

$$\Rightarrow f = \frac{E_0 z^2}{h} \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$c = \lambda \cdot f \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = z^2 R_H \cdot \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

mit: $R_H = \frac{E_0}{hc} = \frac{mk^2 z^4}{4\pi c \hbar^2}$: Rydberg-Konstante

$$R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Wasserstoff-Energien: $z=1$

für $z=1$ $\Delta E_n = - \frac{E_0}{n^2} = - \frac{mk^2 z^4}{2\hbar^2}$

$$E_1 = -2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -13.6 \text{ eV}$$

$\hat{=}$ Grundzustand des H-Atoms

Spektralserien:

Lyman: $n_j = 1$, $n_i = 2, 3, 4, \dots$: UV

Balmer: $n_j = 2$, $n_i = 3, 4, 5, \dots$: sichtbar

Brackett: $n_j = 4$, $n_i = 5, 6, 7, \dots$

Pfund: $n_j = 5$, $n_i = 6, 7, 8, \dots$

Paschen: $n_j = 3$, $n_i = 4, 5, 6, \dots$

} IR

Lösungsvorschlag: "Das Bohrsche Atommodell" (22) - 21 -

a) Herleitung: Radius r_n und Geschwindigkeit v_n von n -ter Bahn im Bohr-Modell des H-Atoms (mit quantisierter Drehimpuls)

→ Auf Bohrscher Kreisbahn eines Elektrons gilt Kräftegleichgewicht zwischen Coulomb- und Zentrifugalkraft: $F_c = F_z$

$$\Rightarrow (1): \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{m v_n^2}{r_n} = m \cdot r_n \cdot \omega_n^2 \quad (\text{da: } v_n = \omega_n \cdot r_n)$$

Drehimpuls-Quantelung: $L = |\vec{r}_n \times \vec{p}_n| = r_n \cdot m \cdot v_n = r_n \cdot m \cdot \omega_n r_n = m \cdot r_n^2 \cdot \omega_n = n \cdot \hbar$

$$\Rightarrow \omega_n = \frac{n \hbar}{m \cdot r_n^2} \quad \text{einsetzen in (1)}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n^2} = m \cdot r_n \cdot \left(\frac{n \hbar}{m r_n^2} \right)^2 = \frac{n^2 \hbar^2}{m \cdot r_n^3}$$

$$\Rightarrow (2): \left[r_n = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m e^2} \right]$$

Geschwindigkeit: (1) und v_n^2 auflösen:

$$v_n^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n} \cdot \frac{r_n}{m} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{m \cdot r_n}$$

r_n aus (2) einsetzen

$$v_n^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{m} \cdot \frac{m e^2}{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \left(\frac{e^2}{n \hbar} \right)^2$$

$$\Rightarrow \left[v_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{n \hbar} \right]$$

b) Herleitung: Bahnenergie E_n des Elektrons im H-Atom auf n -ter Bohrscher Bahn, Energiedifferenz ΔE zwischen n -ter und m -ter Bahn:

Gesamtenergie $E_n = E_{kin,n} + E_{pot,n}$

kinetische Energie: $E_{kin,n} = \frac{m}{2} v_n^2 = \frac{m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2}$

potentielle Energie: $E_{\text{pot},n} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{ue^4}{16\pi^2\epsilon_0^2 n^2 \hbar^2}$ -22-

$$\Rightarrow E_n = -\frac{ue^4}{32\pi^2\epsilon_0^2 n^2 \hbar^2}$$

Energiedifferenz: $\Delta E = E_n - E_m = \frac{ue^4}{32\pi^2\epsilon_0^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$

c) Zusammenhang zwischen Umfang der n -ten Bohrschen Bahn und der de-Broglie-Wellenlänge des ~~Atom~~ Elektrons im H-Atom:

i) Umfang: $U_n = 2\pi \cdot r_n = \frac{8\pi^2\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{ue^2}$

ii) de-Broglie-Wellenlänge: $\lambda_{\text{dB},n} = \frac{h}{p_n} = \frac{h}{m v_n} = \frac{h \cdot 4\pi\epsilon_0 n \hbar}{ue^2} = \frac{8\pi^2\epsilon_0 n \hbar^2}{e^2 \cdot u}$

oder Vergleich von i) und ii)

$$\lambda_{\text{dB},n} = \frac{U_n}{n}$$

Interpretation: Trisst man das Elektron als Materiewelle auf, dann sind stationäre Energiezustände erst möglich, wenn die Stellen der Materiewellen entsprechen, also der Umfang der n -ten Bohrschen Bahn ein ganzzahliges Vielfaches der Materiewellenlänge ist. Sonst würde die Welle auf sich selbst destruktiv interferieren.

d) Begründung mit Heisenberg - Unschärferelation, warum Bahnbegriff für kleine n fragwürdig ist. (falls Bahnbestimmung auf 10% genau sein sollte)

\Rightarrow Ortsschärfe für 1. Bohrsche Bahn:

$$r_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{ue^2} = a_0 = 0.0529 \text{ nm} = 5.29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

$$\Rightarrow \Delta r_0 = 0.1 \cdot r_0 = 5.29 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

Unschärferelation: $\Delta r_0 \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \Rightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{2 \Delta r_0}$

Damit folgt für die Unschärfe der kinetischen Energie:

$$\Delta W_{\text{kin}} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta r_0)^2} = \frac{(6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eVs})^2 \cdot (3 \cdot 10^8 \text{ m/s})^2}{8 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (5.28 \cdot 10^{-12} \text{ m})^2} = \underline{\underline{340.6 \text{ eV}}}$$

⇒ Diese Energieunschärfe ist jedoch sehr viel größer als die Bindungsenergie des 1s - Zustandes im Wasserstoff - Atom (-13.6 eV)