

10.7 Moderne Atommodelle

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts entwickelte Niels Bohr sein berühmtes Bohrsches Atommodell. Mit diesem Modell konnten die Atomhüllen von einfachen Atomen wie dem Wasserstoffatom und die darin stattfindenden Vorgänge sehr genau physikalisch beschrieben werden. So lassen sich beispielsweise die experimentell bestimmten Spektralserien des Wasserstoffs mit dem Bohrschen Atommodell sehr genau vorhersagen. Die Bohrschen Postulate, nach denen sich die Elektronen in der Atomhülle auf diskreten strahlungsfreien Bahnen mit festgelegten Energieniveaus bewegen, konnten durch eine Vielzahl von Experimenten bestätigt werden. Auch die Emission und die Absorption von Licht durch Quantensprünge zwischen den unterschiedlichen Elektronenbahnen konnte durch das Bohrsche Atommodell erklärt werden.



[53] Niels Bohr

Trotz dieser großen Fortschritte im Vergleich zu früheren Atommodellen weist auch das Bohrsche Atommodell Schwächen auf. Dies bedeutet jedoch keinesfalls, dass die Annahmen von Bohr falsch waren, sondern nur dass sie für die Beschreibung von komplexeren Atomhüllen nicht ausreichend sind. Diesen Gedankengang kann man sich sehr einfach an einem Beispiel aus dem Alltag verdeutlichen: So ist ein Modellauto im Maßstab 1:10 ein gutes Modell zur Beschreibung eines Autos, wenn man sich lediglich die äußeren Eigenschaften des Autos, wie Form, Farbe, Aufbau oder Konstruktion deutlich machen will. Möchte man hingegen die Funktionsweise des Motors im Auto verstehen, so ist dieses Modell ungeeignet. Mit jedem Modell können somit nur eingeschränkte Teilbereiche eines sehr umfangreichen Sachverhalts beschrieben werden. Gleiches gilt auch für physikalische Modelle und insbesondere für das Bohrsche Atommodell. Ziel der nachfolgenden Überlegungen ist es nun die Grenzen des Bohrschen Atommodells aufzuzeigen und gleichzeitig einen Ausblick auf moderne quantenmechanische Atommodelle zu geben. Aufgrund der Komplexität dieses Themas wird jedoch nur auf die grundlegenden Ansätze der Quantenmechanik eingegangen.

10.7.1 Grenzen des Bohrschen Atommodells

- Das Bohrsche Atommodell basiert im Wesentlichen auf zwei Annahmen, den Bohrschen Postulaten. Diese Annahmen sind im Rahmen der klassischen Physik völlig unverständlich und

erscheinen willkürlich. Es ist zum Beispiel nicht klar, warum sich die Elektronen in der Atomhülle nur auf den Bohrschen Bahnen mit fest vorgegebenen Radien bewegen und sämtliche anderen Bahnradien „gemieden“ werden.

- Zusätzlich bleibt unklar, warum die Elektronen keine elektromagnetische Strahlung emittieren, obwohl sie bei ihrem Umlauf kontinuierlich einer Radialbeschleunigung unterliegen.
- Mit dem Bohrschen Atommodell können die Spektralserien des Wasserstoffs mit großer Genauigkeit berechnet werden. Bei Atomen mit mehreren Elektronen werden die Berechnungen jedoch ungenau und es muss mit Näherungen gerechnet werden (siehe Röntgenstrahlung).
- Im Bohrschen Atommodell bewegen sich die Elektronen auf Bahnen mit bekanntem Bahnradius und mit bekannter Geschwindigkeit. Dies widerspricht jedoch der Heisenbergschen Unschärferelation wonach Ort und Impuls (Geschwindigkeit) eines Teilchens nicht gleichzeitig scharf bestimmt werden können ($\Delta p \cdot \Delta x \geq h/4\pi$).
- Die Spektrallinien des Wasserstoffs bestehen nach dem Bohrschen Atommodell aus diskreten scharfen Linien mit genau berechenbaren Wellenlängen. Die Spektrallinien besitzen jedoch aufgrund der Unschärferelation eine natürliche Linienbreite, die nicht von Bohr erklärt werden kann.
- Die einzelnen Spektrallinien des Wasserstoffs und anderer Elemente besitzen alle eine unterschiedliche Intensität. Die verschiedenen Quantensprünge zwischen dem Bohrschen Bahnen besitzen somit unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten. Einer großen Wahrscheinlichkeit entspricht dabei eine helle Spektrallinie und umgekehrt. Die unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten können mit dem Bohrschen Atommodell nicht erklärt werden.

10.7.2 Übergang vom Bohrschen zum quantenmechanischen Atommodell

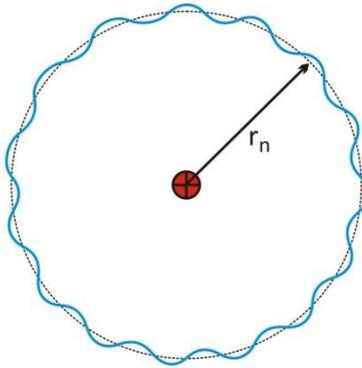
Aufgrund der zahlreichen Mängel des Bohrschen Atommodells entwickelten die Physiker Erwin Schrödinger und Werner Heisenberg im Jahr 1925 ein völlig neues Atommodell, das bis heute gültige „Quantenmechanische Atommodell“. Hierzu verwarfen sie zunächst die Vorstellung, dass sich Elektronen genauso um den Atomkern bewegen wie die Planeten um die Sonne. Stattdessen benutzte Schrödinger die Vorstellung, dass sich die Elektronen in der Atomhülle nicht mehr wie Teilchen, sondern wie Wellen verhalten. Diese Forderung wurde durch die Elektronenbeugungsexperimente von de Broglie unterstützt, wonach auch für Elektronen der Korpuskel-Welle Dualismus gilt.

Im Bohrschen Atommodell bewegen sich die Elektronen auf einer Kreisbahn mit dem Radius r_n . Der Umfang der Elektronenbahnen beträgt:

$$U = 2 \cdot \pi \cdot r_n$$

Betrachtet man die Elektronen nun nicht mehr als Teilchen, sondern als Wellen, so können sich diese stark vereinfacht dargestellt auf der Kreisbahn um den Atomkern ausbreiten.

stehende
Elektronen-
wellen



Die Elektronenwellen können hier nur stabil sein, wenn der Umfang der Kreisbahn ein ganzzahliges Vielfaches von $\lambda/2$ ist, die Elektronen also die Eigenschaften von stehenden Wellen annehmen:

$$U = n \cdot \frac{\lambda}{2}$$

$$2 \cdot \pi \cdot r_n = n \cdot \frac{\lambda}{2}$$

Mit Hilfe der de-Broglie Beziehung für Elektronenwellen kann nun die Wellenlänge λ durch den Impuls p ersetzt werden:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Es ergibt sich somit die Gleichung:

$$2 \cdot \pi \cdot r_n = n \cdot \frac{\left(\frac{h}{p}\right)}{2}$$

$$r_n = n \cdot \frac{h}{4 \cdot \pi \cdot p}$$

$$p \cdot r_n = n \cdot \frac{h}{4 \cdot \pi}$$

$$m \cdot v \cdot r_n = n \cdot \frac{h}{4 \cdot \pi} \text{ (Drehimpulsquantelung)}$$

Erstaunlicherweise ergibt sich aus der obigen Rechnung in guter Näherung das 1. Bohrsche Postulat, nach dem der Drehimpuls der Elektronen $m \cdot v \cdot r_n$ quantisiert ist. Diese von Bohr zunächst recht willkürlich angenommene Forderung kann also direkt aus den Grundlagen des quantenmechanischen Atommodells hergeleitet werden. Das quantenmechanische Atommodell kann somit einen entscheidenden Mangel des Bohrschen Atommodells beheben. An dieser Stelle ist jedoch anzumerken, dass sich die obige Formel für die Drehimpulsquantelung um den Faktor zwei von der Drehimpulsquantelung aus dem ersten Bohrschen Postulat unterscheidet:

$$m \cdot v \cdot r_n = n \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi} \text{ (1. Bohrsches Postulat)}$$

Dieser Unterschied ist dadurch zu erklären, dass die obige Zeichnung einer stehenden Elektronenwelle, die sich auf einer Kreisbahn mit dem Radius r_n ausbildet, nicht ganz korrekt ist und nur der ersten Veranschaulichung dient. Der Übergang vom Bohrschen Atommodell zum quantenmechanischen Atommodell des linearen Potentialtopfs soll hierdurch erleichtert werden. Im folgenden Kapitel werden die Elektronenwellen nicht mehr als kreisförmige Wellen betrachtet, sondern als stehende Wellen, die sich im gesamten Atom in Form von den sog. Orbitalen ausbilden. Die richtige physikalische Darstellung liefert dann schließlich auch den korrekten Faktor für die Drehimpulsquantisierung.

10.7.3 Das Quantenmechanische Atommodell

Neben der Herleitung des ersten Bohrschen Postulats (Drehimpulsquantisierung) im vorangegangenen Kapitel, kann mit Hilfe des quantenmechanischen Atommodells auch das zweite Bohrsche Postulat erklärt bzw. ausgeräumt werden. So entfällt die Annahme von strahlungsfreien Elektronenbahnen durch die Einführung von stehenden Elektronenwellen völlig, da im quantenmechanischen Atommodell die Elektronen nicht mehr um den Kern kreisen, somit auch keine Radialbeschleunigung mehr erfahren und letztendlich deshalb auch keine Energie in Form von Synchrotronstrahlung abgeben müssen.

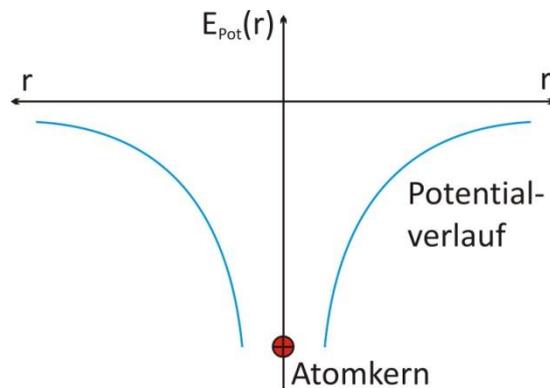
Ziel der nachfolgenden Überlegung ist es nun, ein möglichst genaues Modell zur Beschreibung der stehenden Elektronenwellen in Atomen zu entwickeln, das genau wie das Bohrsche Atommodell, die Quantisierung der Energieniveaus und damit die Emission und Absorption von Licht erklären kann:

Die Ausbreitung der Elektronenwellen wird durch die Anziehung des positiv geladenen Atomkerns räumlich beschränkt. Im Raum um den Atomkern nimmt die elektrische Feldstärke je weiter man sich vom Atomkern entfernt ab. Gleichzeitig steigt jedoch die potentielle Energie, kurz das Potential der Elektronen mit zunehmendem Abstand. Durch Integration, über die zwischen Kern und Elektronen wirkende Coulombkraft kann das Potential der Elektronen berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 E_{Pot}(r) &= \int_r^{\infty} F_C \cdot dr \\
 &= \int_r^{\infty} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{-q_1 \cdot q_2}{r^2} \cdot dr \\
 &= \left[-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r} \right]_r^{\infty} \\
 &= \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r} \right]_r^{\infty} \\
 &= \lim_{r \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r} \\
 &= 0 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r} \\
 &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r}
 \end{aligned}$$

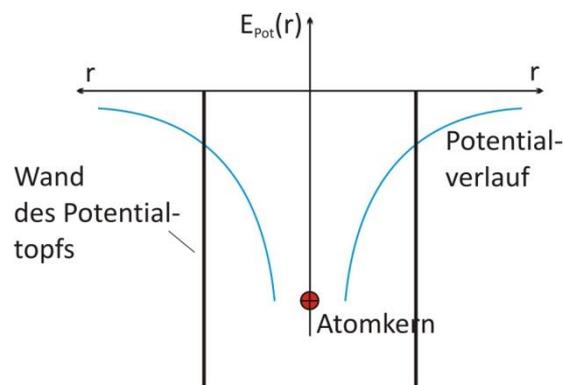
In der obigen Rechnung ist darauf zu achten, dass die Vorzeichen der Ladungen von Atomkern und Elektronen unterschiedlich sind. In der zweiten Zeile wurde aus diesem Grund ein negatives Vorzeichen

eingefügt. Trägt man das Potential nun in Abhängigkeit vom Abstand zum Atomkern auf, so ergibt sich ein nach außen hin ansteigender Verlauf in Form einer gespiegelten Hyperbel.

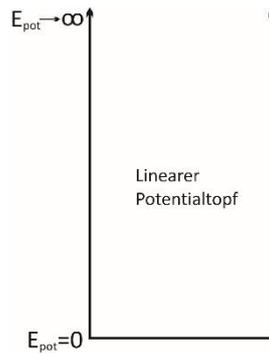


Befindet sich nun ein Elektron in der Nähe des Atomkerns, so ist es dort wie in einem „Trichter“ gefangen. Möchte es die Atomhülle verlassen, so muss es die Energie aufbringen, um sein Potential auf den Wert Null zu erhöhen. Anschaulich muss das Elektron also wie ein Bergsteiger einen Berg überwinden, um sich aus der Atomhülle zu lösen.

Zur Vereinfachung des Sachverhalts ersetzen Schrödinger und Heisenberg nun den hyperbelförmigen Potentialverlauf zunächst näherungsweise durch einen rechteckigen Verlauf. Ein derartiger Potentialverlauf wird mit Potentialtopf bezeichnet. Im Quantenmechanischen Atommodell sind die Elektronen zwischen den Wänden des Potentialtopfs eingeschlossen. Die Elektronen können den Potentialtopf nur verlassen, wenn ihnen von außen, zum Beispiel durch ein Photon (Photoeffekt) Energie zugeführt wird.



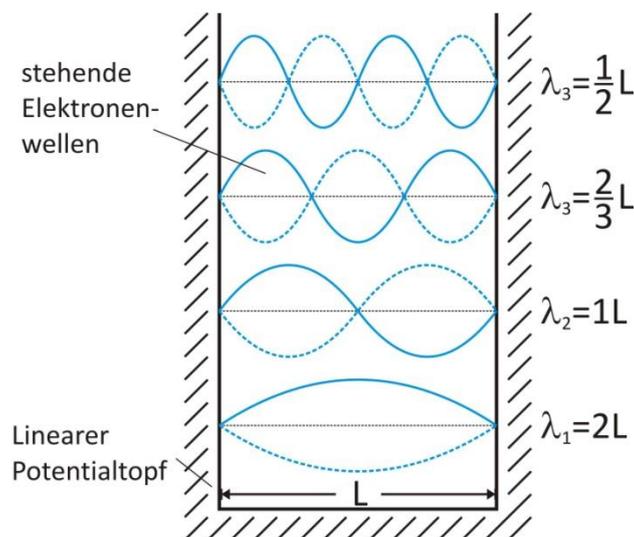
Im Gegensatz zur obigen Darstellung, bei der sich das Nullniveau der potentiellen Energie im Unendlichen ($r \rightarrow \infty$) befindet und die potentielle Energie der Elektronen negative Werte annimmt, legten Schröder und Heisenberg zur Vereinfachung das Nullniveau auf den „Grund“ des Potentialtopfes, sodass die Energie der Elektronen in y-Richtung positive Werte annimmt. An den Rändern des Potentialtopfes steigt die potentielle Energie sprunghaft ins Unendliche.



Diese Vereinfachung ermöglicht es, die Energiequantisierung der Elektronen relativ leicht herzuleiten, wie die nachfolgenden Überlegungen zeigen:

Betrachtet man nun die Elektronen nicht mehr als Teilchen, sondern als Welle, so würden diese an den Wänden des Topfes reflektiert werden und sich schließlich durch Interferenz gegenseitig auslöschen. Diesen Sachverhalt kann man sich am Beispiel von Schallwellen in einem Klassenraum verdeutlichen. Ertönt am Ende der Stunde der Pausengong, so breiten sich die Schallwellen im Klassenzimmer aus. Schon nach kurzer Zeit löschen sich die Schallwellen gegenseitig aus, so dass kein Ton mehr zu hören ist. Ähnliches passiert mit den Elektronenwellen, die in einem Potentialtopf eingeschlossen sind. Auch diese löschen sich direkt gegenseitig aus. Demnach dürfte es in der Atomhülle keine stabilen Elektronen mehr geben.

Um dieses Problem zu lösen gingen Schrödinger und Heisenberg davon aus, dass die Elektronen in der Atomhülle nur existieren können, wenn sie in Form von stehenden Wellen vorliegen. Stehende Wellen haben die Eigenschaft, dass sie nicht durch Interferenz ausgelöscht werden, sondern auf Dauer stabil bleiben. Die Wellenlängen der stehenden Wellen unterliegen jedoch einigen Einschränkungen. So können sich in einem Potentialtopf mit einer konstanten Ausdehnung L nur stehende Wellen bestimmter Wellenlängen ausbilden. Die Wellenlänge muss gerade so groß sein, dass an den Wänden des Potentialtopfs Wellenknoten vorliegen.



Für die stehenden Elektronenwellen gilt somit die Beziehung:

$$L = n \cdot \frac{\lambda}{2} \quad \text{bzw.} \quad \lambda_n = \frac{2 \cdot L}{n} \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}$$

Die Wellenlängen der Elektronen im Atomkern sind somit quantisiert. Mit Hilfe der De-Broglie Beziehung kann den Elektronen nun ein ebenfalls quantisierter Impuls zugeordnet werden:

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{h}{\left(\frac{2 \cdot L}{n}\right)} = \frac{h \cdot n}{2 \cdot L}$$

Für die Geschwindigkeiten der Elektronen ergibt sich hieraus:

$$\begin{aligned} p_n &= m \cdot v_n \\ \Leftrightarrow v_n &= \frac{p_n}{m} \\ \Leftrightarrow v_n &= \frac{h \cdot n}{2 \cdot L \cdot m} \end{aligned}$$

Schließlich kann die Energie der Elektronen berechnet werden. Wie im Bohrschen Atommodell setzt sich die Energie der Elektronen aus potentieller und kinetischer Energie zusammen. Da die potentielle Energie der Elektronen im Inneren des Potentialtopfes Null ist ergibt sich für die Gesamtenergie:

$$\begin{aligned} E_{Ges} &= E_{pot} + E_{kin} \\ &= 0 + E_{kin} \\ &= \frac{1}{2} \cdot m \cdot v_n^2 \\ &= \frac{1}{2} \cdot m \cdot \left(\frac{h \cdot n}{2 \cdot L \cdot m}\right)^2 \\ E_{Ges} &= \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m \cdot L^2} \cdot n^2 \end{aligned}$$

Wie man sieht, ist die Energie der Elektronen quantisiert. Auf diese Weise können also auch mit dem quantenmechanischen Atommodell die diskreten Energieniveaus der Elektronen berechnet und die daraus resultierenden Linienspektren erklärt werden.

Anmerkung: In der obigen Überlegung wurde die Energie der Elektronen in einem „eindimensionalen“ Potentialtopf berechnet. Da die Atomhülle jedoch dreidimensional ist, muss man bei einer genaueren Betrachtung anstelle eines Potentialtopfes von einem Potentialwürfel ausgehen. Für jede Raumrichtung gelten hier jedoch die gleichen Bedingungen:

$$\lambda_x = \frac{2 \cdot L}{n_x}; \quad \lambda_y = \frac{2 \cdot L}{n_y}; \quad \lambda_z = \frac{2 \cdot L}{n_z}$$

n_x , n_y und n_z sind dabei voneinander unabhängige natürliche Zahlen. Für die gesamte kinetische Energie der Elektronen ergibt sich somit:

$$E_{Ges, n_x, n_y, n_z} = \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m \cdot L^2} \cdot n_x^2 + \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m \cdot L^2} \cdot n_y^2 + \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m \cdot L^2} \cdot n_z^2$$

$$= \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m \cdot L^2} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

10.7.4 Orbitale

In einem linearen Potentialtopf verhalten sich die Elektronen wie stehende Wellen. Die stehenden Elektronenwellen können mit Hilfe einer Wellenfunktion mathematisch beschrieben werden:

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= A \cdot \sin(\omega \cdot t) \\ &= A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{T} \cdot t\right)\end{aligned}$$

Der Aufenthaltort der Elektronen bleibt bei dieser Darstellung völlig unbestimmt, ähnlich wie der Aufenthaltort eines Photons beim Doppelspaltexperiment, das sich im Zustand der Superposition befindet (siehe Kapitel Quantenphysik).

Mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wellen $v = \frac{\lambda}{T} \Leftrightarrow T = \frac{\lambda}{v}$ ergibt sich:

$$\Psi(t) = A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot v \cdot t\right)$$

Hieraus folgt eine nur vom Ort x im Potentialtopf abhängige Wellenfunktion:

$$\Psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right)$$

Für den linken Rand des Potentialtopfs ($x = 0$) erhält man:

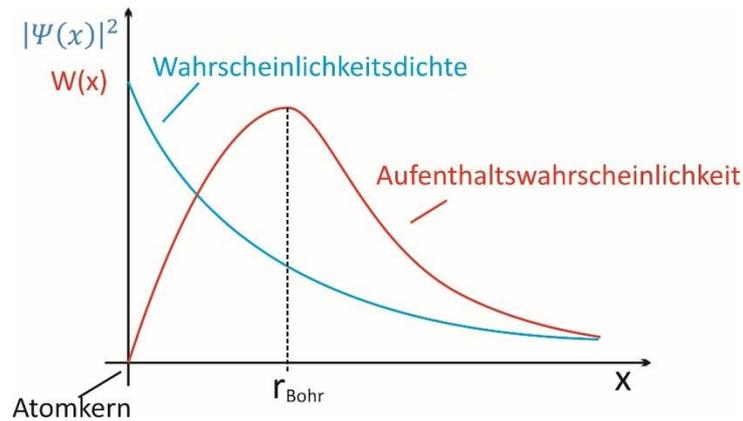
$$\Psi(0) = A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot 0\right) = 0$$

Bei $x = 0$ liegt also ein Knoten der Welle vor. Für den rechten Rand des Potentialtopfs ($x = n \cdot \frac{\lambda}{2}$) erhält man:

$$\begin{aligned}\Psi\left(n \cdot \frac{\lambda}{2}\right) &= A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot n \cdot \frac{\lambda}{2}\right) \\ &= A \cdot \sin(n \cdot \pi) = 0\end{aligned}$$

Auch am rechten Rand des Potentialtopfes liegt somit ein Knoten vor.

Bildet man das Quadrat der Wellenfunktion $|\Psi(x)|^2$ so erhält man die sog. Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Elektron an einem bestimmten Ort im Atom anzutreffen. Mathematisch erhält man durch Quadrieren der Wellenfunktion eine Sinusquadratfunktion. Trägt man $\Psi(x)$ und $|\Psi(x)|^2$ nebeneinander auf, so ist zu erkennen, dass an den Knoten der Wellen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Elektron gegen Null geht, wohingegen an den Bäuchen die Wahrscheinlichkeit ein Maximum annimmt.



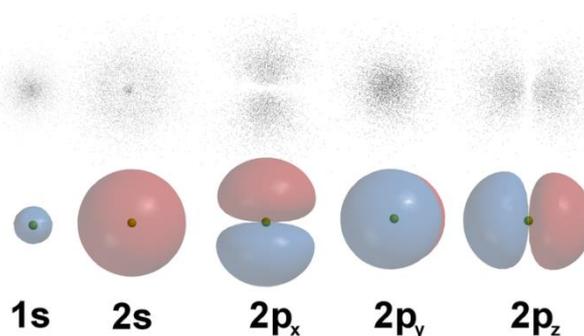
Genauere Rechnungen zeigen nun, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit, den Verlauf einer Kurve mit einem Hochpunkt an der Stelle $r = r_{Bohr}$ besitzt. In einer Entfernung vom Atomkern, die dem Bohrschen Radius entspricht, ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen am größten, da dort sowohl das Volumen als auch die Wahrscheinlichkeitsdichte Werte annehmen, die beim Integrieren ein Maximum ergeben. Durch analoge Überlegungen können auch die Bahnen von angeregten Atomen berechnet werden.

Anmerkung:

Ein ähnlicher Sachverhalt ist aus dem Mathematikunterricht aus dem Bereich der Extremwertaufgaben bekannt. So nimmt ein Rechteck seinen größten Flächeninhalt nicht an, wenn eine der beiden Rechtecksseiten besonders lang und die andere Seite besonders kurz ist, sondern wenn beide Seiten weder besonders lang noch besonders kurz sind. Der maximale Flächeninhalt ergibt sich in diesem Fall, wenn beide Seiten gleich lang sind, also ein Quadrat vorliegt.

Dreidimensionale Wahrscheinlichkeitsdichten

Überträgt man diese Überlegungen ins dreidimensionale, so ergeben sich je nach Quantenzahl n räumliche Figuren, in denen sich die Elektronen aufhalten. Diese Figuren nennt man Elektronenwolken bzw. Orbitale. Außerhalb der Orbitale geht die Wahrscheinlichkeit ein Elektron anzutreffen gegen Null.



[54] Orbitale

Orbitale können z.B. kugelförmig oder hantelförmig sein. Die Form der Orbitale wird durch vier Quantenzahlen bestimmt auf die hier nur in Ansätzen eingegangen werden soll. Die vier Quantenzahlen beschreiben Elektronenzustände verschiedener Energie und Geometrie.

1. Hauptquantenzahl n

Die Hauptquantenzahl gibt die Energieniveaus der Elektronen an. Sie entspricht einer bestimmten Bahn im Bohrschen Atommodell. (Die maximale Elektronenzahl auf einem Energieniveau beträgt $2n^2$)

2. Nebenquantenzahl l

Die Nebenquantenzahl gibt die Raumorientierung der Orbitale mit gleichem Energieniveau an. Die Nebenquantenzahlen können Werte von 0 bis $n - 1$ annehmen.

3. Magnetquantenzahl m

Die Magnetquantenzahl beschreibt die Orientierung der Orbitale in einem äußeren elektrischen oder magnetischen Feld. Die Magnetquantenzahl m kann die Werte $-l \dots 0 \dots +l$ annehmen.

4. Die Spinquantenzahl s

Die Spinquantenzahl beschreibt den so genannten Spin (Eigendrehimpuls) der Elektronen. Dieser kann die Werte $+1/2$ und $-1/2$ annehmen.

Einen wichtigen Zusammenhang zwischen den vier Quantenzahlen formulierte im Jahre 1925 der Physiker Wolfgang Pauli im nach ihm benannten Pauli-Prinzip:

Alle Elektronen in einem Atom müssen sich in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden.

Damit ergeben sich für die Elektronen folgende mögliche Zustände:

$n = 1$	$l = 0$	$m = 0$	1s-Orbital
$n = 2$	$l = 0$	$m = 0$	2s-Orbital
	$l = 1$	$m = -1, 0, +1$	2p _x -Orbital, 2p _y -Orbital, 2p _z -Orbital
$n = 3$	$l = 0$	$m = 0$	3s-Orbital
	$l = 1$	$m = -1, 0, +1$	3p _x -Orbital, 3p _y -Orbital, 3p _z -Orbital
	$l = 2$	$m = -2, -1, 0, +1, +2$	Fünf 3d-Orbitale
usw.			

10.7.5 Die Schrödinger-Gleichung

Die wohl bekannteste Gleichung der Quantenmechanik ist die sog. Schrödinger-Gleichung:

$$H\psi = E\psi$$

Mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung können die Energieniveaus der Elektronen in Atomen berechnet werden. Um ein erstes Verständnis der Schrödinger-Gleichung zu gewinnen, wird diese in stark vereinfachter Form als Differentialgleichung der Wellenfunktion $\psi(x)$ dargestellt:

$$\psi''(x) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot E \cdot \psi(x) = 0$$

Die Lösung der vereinfachten Schrödinger-Gleichung ergibt sich durch zweifaches Ableiten der Wellenfunktion und anschließendes Einsetzen:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right) \\ \Rightarrow \psi'(x) &= A \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right) \\ \Rightarrow \psi''(x) &= -A \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right)\end{aligned}$$

Einsetzen:

$$\begin{aligned}-A \cdot \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot E \cdot A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right) &= 0 \\ \left(-\frac{1}{\lambda^2} + \frac{2m}{h^2} \cdot E\right) \cdot A \cdot 4\pi^2 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right) &= 0\end{aligned}$$

Gemäß der Produkt-Null-Regel ergibt die Gleichung den Wert Null, wenn einer der Faktoren den Wert Null annimmt. Hieraus folgt:

$$-\frac{1}{\lambda^2} + \frac{2m}{h^2} \cdot E = 0$$

Umgestellt nach der Energie der Elektronen ergibt sich:

$$E = \frac{h^2}{2m \cdot \lambda^2}$$

Mit der Wellenlänge für stehende Elektronenwellen im Potentialtopf $\lambda = \frac{2L}{n}$ erhält man schließlich:

$$E = \frac{h^2}{2m \cdot (2L)^2} \cdot n^2$$

bzw.

$$E = \frac{1}{8} \cdot \frac{h^2}{m \cdot L^2} \cdot n^2$$

Dieser Zusammenhang entspricht der bereits mit Hilfe des Potentialtopf hergeleiteten Energiequantisierung der Elektronen.

Anmerkung: Die stark vereinfachte Schrödingergleichung ermöglicht, die Berechnung der Energieniveaus der Elektronen in Atomen. Darüber hinaus bildet die allgemeine Schrödingergleichung
© M.Brennscheidt

das Fundament für fast alle praktischen Anwendungen der Quantenmechanik. Mit Hilfe der Schrödingergleichung konnten seit 1926 eine Vielzahl an Eigenschaften auch von größeren Atomen und Molekülen sowie von Festkörpern beschrieben werden. Die Schrödingergleichung behebt somit grundlegend die Mängel des Bohrschen Atommodells, das lediglich genaue Aussagen über die Vorgänge im Wasserstoffatom zulässt.
