Dieses Lernskript soll nochmals die einzelnen Atommodelle zusammenstellen und die Bedeutung der einzelnen Atommdelle veranschaulichen.

Das Rutherfordsche Atommodelle

Entstehung des Modells

Rutherford beschoss eine Goldfolie mit Alphastrahlen. Dabei kam er zu folgenden Ergebnissen:

- Die meisten Alphastrahlen verlaufen ohne Ablenkung durch die Goldfolie.
- Wenige Alphastrahlen werden von ihrer geradlinigen Bahn abglenkt.
- Ein kleiner Teil der Alphastahlen wird reflektiert und besitzt die gleiche Geschwindigkeit wie ein nicht reflektierter Strahl.

Die Konsequenz für das Atommodell

- Die Masse des Atoms wird im Atomkern vereinigt.
- Die Elektronen umkreisen in einem Abstand von 10^{-10} m den Atomkern.
- Die negative Ladung der Elektronen in der Atomhülle gleichen die positive Kernladung aus.
- Der Raum zwischen Kern und Hülle ist leer.

Leistungsfähigkeit des Modells

- Das Modell erklärt die Kern- Hüllenstruktur des Atoms.

Rutherford wandte eine der wichtigsten Methoden in der Physik zum ersten mal an, die sogenannten Streuexperimente. Dabei wird ein geeigneter Teilchenstrahl auf ein Zielmaterial, den sogenannten Target gerichtet. Eine genaue Analyse der realtiven Häufigkeiten über die auftretenden Streuwinkel lassen Rückschlüsse über den Aufbau des Zielmaterials zu und lassen auch auf die Wechselwirkungen zwischen Zielmaterial und Teilchenstrahl zu. Dies ist das Arbeitsprinzip aller Teilchenbeschleuniger.

Das Bohrsche Atommodell

Eine weitere Möglichkeit zur Untersuchung von Atomen ist die Untersuchung von einem Lichtspektrum, das von leuchtenden Gasen emittiert wird. Dabei fand man heraus:

$$\boxed{\text{Das Spektrum von einatomigen Gasen besteht aus diskreten Linien}}$$

Zur Berechnung von allen möglichen Frequenzen des emittierten Wasserstoffspektrums benutzt man die Rydberg- Formel:

$$f = f_R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Dabei ist f_R die Rydbergkonstante

$$f_R = \frac{4c}{k}$$

mit

$$k = 3{,}29 \cdot 10^{15}\,\mathrm{Hz}$$

Die Entdeckung der diskreten Spektren führten zu dem folgenden Ansatz:

- Es existieren in einem Atom nur ganz bestimmte Energiestufen.
- Im Normalfall befindet sich ein Atom auf der niedrigsten Energiestufe, dem sogenannten Grundniveau.
- Bei einer Energiezufuhr kann ein Atom so viel Energie absobieren, dass es die nächste Energiestufe erreicht.
- Bei der Rückkehr auf das Grundniveau wird ein zu dieser Frequenz gehörendes Lichtquant emittiert.

Diese Feststellungen widersprechen dem Atommodell von Rutherford in den folgenden Punkten:

- Da bei dem Rutherford- Modell für den Bahnradius keine Einschränkungen gegeben sind, erwartet man anstelle eines diskreten ein kontinuierliches Spektrum, da das Elektron nach einer Emission von Energie jeden beliebigen Radius einnehmen kann.
- Bei der Bewegung eines Elektrons auf einer Kreisbahn entsteht ein elektromagnetisches Feld, welches dann ein elektrisches Feld induziert. Die Folge davon müsste sein, dass die Elektronen dabei elektromagnetische Wellen emittieren müssten. Dadurch würden die Elektronen allerdings Energie verlieren. Durch den Energieverlust würden sich die Elektronen auf einer Spiralbahn auf den Kern zu bewegen und letztlich in den Kern stürzen.

- Damit handelt es sich bei dem Modell von Rutherford um ein letztlich instabiles Atom.

Nils Bohr griff daher den Rutherford- Ansatz auf und entwickelte diesen mit Hilfe der Arbeiten von Max Planck und Albert Einstein weiter. Das Resultat wird in der Literatur als das Bohrsche Atommodell bezeichnet.

Entstehung des Modells

Das Bohrsche Atommodell entstand aufgrund der Entdeckung der diskreten Spektren von den zum Leuchten angeregten, einatomigen Gasen.

Die Eckpunkte des Modells

Das Fundament dieses Atommodells bestehen aus den zwei Bohrschen Postulaten:

- Die Energie von einem Atom kann nur bestimmte, d.h. diskrete Werte annehmen. Zu diesen diskreten Energiewerten gehören bestimmte Bahnradien im Atom, auf denen die Elektronen sich bewegen. Solange alle Elektronen auf diesen Bahnen sich befinden umlaufen sie den Atomkern ohne Strahlungsemission.

- Das Produkt aus der Bahnlänge und dem Impuls eines Elektrons ist immer ein ganzzahliges Vielfaches des Planckschen Wirkungsquantums.

  $$2\pi r_n \cdot m_\mathrm{e} v_n = nh$$

  n ist eine natürliche Zahl und wird als Hauptquantenzahl bezeichnet.

- Wechselt ein Elektron von zum nächstniedrigeren Energiezustand, dann wird die Energiedifferenz in Form eines Lichtquants mit der Frequenz f emittiert.

  $$\Delta E = E_n - E_m = hf$$

Bedeutung und Einsatzgebiete des Modells

- Das Modell erklärt die diskreten Spektren der zum Leuchten angeregten einatomigen Gase.
- Das Wasserstoffatom kann mit diesem Modell gut beschrieben werden.
- Der Rydberg- Ansatz kann mit diesem Modell gut erklärt werden.
- Die Ionisierungsenergie des Wasserstoffatoms kann berechnet werden.

Anwendung des Bohrschen Atommodells

Um den Radius des Wasserstoffatoms zu berechnen geht man wieder von dem Kräftegleichgewicht zwischen Columb- Kraft und der Zentripetalkraft aus:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} = \frac{m_\mathrm{e} v^2}{r}$$

Aus dem ersten Bohrschen Postulat folgt:

$$v_n = \frac{nh}{2\pi r_n m_\mathrm{e}}$$

Setzt man dies an der Stelle von v ein, dann folgt:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 \cdot r_n^3 m_\mathrm{e}}$$

Löst man nun noch nach r_n auf, dann ergibt sich:

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 \cdot h^2}{e^2 \cdot \pi \cdot m_\mathrm{e}} \cdot n^2$$

Damit hat das Wassestoffatom im Grundzustand den Radius

$$r_0 = \frac{h^2 \varepsilon_0}{e^2 \pi m_\mathrm{e}} = 5{,}30 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{m}$$

Man kann mit Hilfe des Columbpotentials die Energiestufen des Wasserstoffs berechnen (siehe Übungsaufgabe)

$$E_\mathrm{n} = -\frac{e^4 \cdot m_\mathrm{e}}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

Im Grundzustand beträgt die Energie des Wasserstoffatoms dann

$$E_1 = -13{,}5\,\mathrm{eV}$$

Anhand der Energieformel erkennt man, dass für größe n die Unterschiede der einzelnen Energiestufen immer kleiner werden, so dass beinahe kontinuierliche Übergänge möglich sind. Diesen Bereich bezeichnet man als Grenzkontinuum.

Die Gesetze der klassischen Physik lassen sich aus den Gesetzen der Quantenmechanik für große n folgern. Dies nennt man das Bohrsche Korrespondenzprinzip.

Das Sommerfeldsche Atommodell

Genauere Untersuchungsmethoden der Lichtspektren von ein atomigen Gasen zeigt, dass die Linien der Spektren sich aufspalten und damit eine Feinstruktur besitzen, die mit dem Bohrschen Atommodell nicht erklärt werden können. Damit musst dieses Modell weiterentwickelt werden. Dies wurde durch die Sommerfeldschen Ergänzugen erreicht, die dann in dem Schalenmodell münden.

Sommerfeld- Ergänzungen

- Die Elektronen bewegen sich auf elliptischen Bahnen.
- Die Hauptquantenzahl n charakterisiert die große Halbachse der Ellipsen. Alle Ellipsen mit gleicher großer Halbachse bilden eine Schale. Diese werden mit K, L, M, N,... bezeichnet.
- Die Schalen unterscheiden sich in der kleinen Halbachse, die von dem Bahndrehimpuls abhängig ist. Der Bahndrehimpuls wird durch die Nebenquantenzahl l gequantelt und damit erzielt man eine gute Übereinstimmung mit der Feinstruktur der Spektrallinien. Für l gilt:

$$0 \leq l < n$$

- Durch die Bahnelektronen wird ein magnetisches Feld erzeugt. Aus mehreren Experimenten wurde geschlossen, dass diese magnetische Felder relativ zu den äußeren elektrischen und magnetischen Feldern nur bestimmte Richtungen einnehmen kann. Diese werden durch die magnetische Quantenzahl m beschrieben, die der Bedingung

$$-l \leq m \leq l$$

- Einen weiteren Unterschied verursacht die Rotation der Elektronen. Diese wird durch den Spin, der wiederum durch die Quantenzahl s beschrieben wird mit

$$s = +\frac{1}{2} \bigvee s = -\frac{1}{2}$$

Einsatz des Schalenmodells

Das Sommerfeldsche Schalenmodell erklärt den Aufbau des Periodensystems der Elemente.

Anwendung des Sommerfeldmodells

Man kann mit dem Sommerfeldmodell die Höchstzahl der Elektronenkonfigurationen einer Schale ermitteln, wenn man das Pauliprinzip berücksichtigt:

> In einem Atom können zwei Elektronen nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen. Dies nennt man das Ausschlussprinzip von Pauli.

Man kann damit die Elektronenkonfiguration der $L \Rightarrow n = 2$ Schale bestimmen:

n	l	m	s
2	0	0	$+\frac{1}{2}$
	0	0	$-\frac{1}{2}$
	1	-1	$+\frac{1}{2}$
		-1	$-\frac{1}{2}$
		0	$+\frac{1}{2}$
		0	$-\frac{1}{2}$
		1	$+\frac{1}{2}$
		1	$-\frac{1}{2}$

Die maximale Anzahl der Elektronenkonfigurationen auf der L- Schale beträgt 8.

Das quantenmechanische Atommodell

Das von Sommerfeld aufgestellte Schalenmodell kann den Aufbau des Periodensystems erklären, aber berücksichtigt die Welleneigenschaften der Elektronen noch nicht, die von de Broglie anfang des 20. Jahrhunderts beschrieben wurde. Nach dieser Theorie wird jedem Elektron eine Wellenfunktion zugeordnet, mit deren Hilfe man über das Quadrat der Wellenfunktion die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons an einem bestimmten Ort angeben kann.
Daher wurde von dem Physiker Erwin Schrödinger das Atommodell entwickelt, das sowohl die Arbeiten von de Broglie und die Unschärferelation von Heisenberg berücksichtigt.

- Da ein Elektron die Atomhülle in der Regel nicht verlassen kann, wurde die Vorstellung geprägt, dass das Elektron zwischen zwei unendlich hohen Potentialwellen eingesperrt ist.

- In dem Bereich zwischen den beiden Potentialbarrieren ist die potentielle Energie Null. Denn im Inneren des Topfs wirken durch den Topf selbst keine Kräfte, so dass das Elektron eine Energieänderung erfahren würde.
- Im Gegensatz zur klassischen Physik wird die de- Broglie Welle zum Gegenstand der Betrachtung.
- An den Wänden müssen Schwingngskonten einer stehenden Welle liegen, weil die stehende Welle durch die Reflexion der de- Broglie Wellen an den Topfrändern zu stande kommt. Die Bedingung dafür ist:

  $$a = n\frac{\lambda}{2} \Rightarrow \lambda = \frac{a}{2} \cdot n$$

  Nach den Broglie gilt:

  $$\lambda = \frac{h}{mv} \Rightarrow v = \frac{h}{2ma} \cdot n$$

  Weil im Topf die potentielle Energie Null ist muss folgen, dass die Gesamtenergie des Elektrons der kinetischen Energie des Elektrons entspricht:

  $$E_n = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m \cdot \frac{h^2}{4m^2a^2} \cdot n^2$$

  $$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2$$

- Dabei bezeichnet die Energie E_n die Energie auf der Stufe n. Die Energieniveaus haben zum Grundniveau den Abstand n^2.
- Bei endlichen Potentialtöpfen besteht aufgrund der Energieunschärferelation die Möglichkeit, dass die Elektronen die Energiebarriere kurzzeitig überwinden und daher in die Potentialbarriere eindringen. Der Graph der Wellenfunktion konvergiert in der Barriere gegen 0.
- Ist die Breite der Potentialbarriere gering, dann können die Elektronen die Potentialbarriere sogar durchdringen. Die Wellenfunktion hinter der Potentialbarriere unterscheidet sich nur in der Amplitude, die während des Durchdringens der Potentialbarriere exponentiell abnimmt. Die Wellenlänge bleibt auch nach der Potentialbarriere gleich.
- Elektronen, die eine höhere kinetische Energie als die Potentialbarriere bilden einen sogenannten Streuzustand. Für die Wellenlänge eines Streuzustands gilt:
  - Vor und nach dem Potentialtopf:

    $$E - E_{\text{Barriere}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2m(E - E_{\text{Barriere}})}$$
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - E_{\text{Barriere}})}}$$

– Über dem Topf gilt:

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

Zusammengefasst kann man das Potentialtopfmodell wie folgt schildern:

- Bei einem unendlichen Potentialtopf sind die Elektronen zwischen zwei unendlich hohen Potentialbarrieren eingesperrt, deren Abstand dem doppelten Atomradius entspricht.
- Ein Elektron kann sich dabei auf verschiedenen Energieniveaus befinden, die durch
$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2$$
berechnet werden.
- Besitzt ein Potentialtopf nur endlich hohe Energiebarrieren, dann können die Elektronen aufgrund der Energieunschärfe in die Potentialbarriere eindringen.
- Ist die Potentialbarriere nur von geringer Breite, dann können die Elektronen sie durchdringen. Man spricht dann vom Tunneleffekt.
- Bei einem endlich hohen Potentialtopf bilden Elektronen mit höherer kinetischer Energie als die Potentialbarriere einen Streuzustand. Für deren Wellenlänge gilt dann:
  - Vor und nach dem Topf
  $$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E - E_{\text{Barriere}})}}$$
  - Über dem Topf
  $$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$