6.2 Atomaufbau

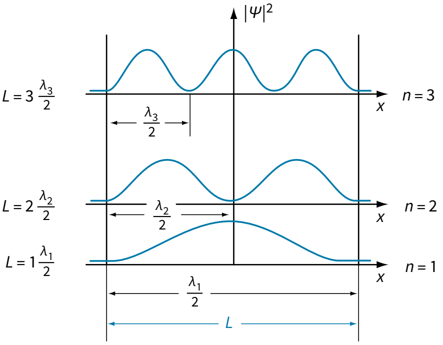

Abb. 6.7: Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen im eindimensionalen Potentialtopf

Eindimensionaler Potentialtopf

Wird eine fortschreitende elektromagnetische Welle zwischen zwei Wänden beständig reflektiert, so ergibt sich eine stehende Welle (→ Seite 93 f.) für den Abstand L der beiden Wände, wenn gilt: $L = n \cdot \lambda/2$ mit $n \in \mathbb{N}$.

In Gedanken lässt sich dieser Versuch auf Elektronen übertragen, die durch äußere Kräfte („Wände") in kleinen Bereichen zusammengehalten werden. Hier treten stehende Wahrscheinlichkeitswellen mit der DE-BROGLIE-Wellenlänge auf, das heißt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen ist an den Wänden und gegebenenfalls an Schwingungsknoten innerhalb des Potentialtopfes gleich null. Folglich kann ihnen auch keine Bewegung im klassischen Sinne zugeschrieben werden. Damit wird klar, dass die Elektronen, da sie keiner Beschleunigung bzw. Abbremsung ausgesetzt sind, auch keine Energie in Form von elektromagnetischen Wellen abstrahlen müssen (→ „Zusatzwissen" Seite 101). Da die Elektronen im Potentialtopf keine Energie verlieren, müssen sie ihre vorherige kinetische Energie $W = \frac{1}{2} m_e \cdot v^2$ behalten haben.

Mit $p^2 = m_e^2 \cdot v^2$ folgt: $W = \frac{p^2}{2 m_e}$.

Ferner gilt die DE-BROGLIE-Beziehung

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad W = \frac{h^2}{2 m_e \cdot \lambda^2}.$$

Mit der Bedingung für stehende Wahrscheinlichkeitswellen $\lambda = \frac{2L}{n}$ folgt:

$$W_n = \frac{h^2}{8 m_e \cdot L^2} n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N} \text{ und } n \geq 1$$

Die Energie der Elektronen kann nur diese diskreten Werte annehmen, sie ist gequantelt. Die Zahlen n werden als **Quantenzahlen** bezeichnet.
Für die Herleitung ist es nicht notwendig, dass es sich um Elektronen handelt, folglich gilt allgemein für Mikrogebilde der Masse m:

Eindimensionaler Potentialtopf

Die Energieniveaus in einem eindimensionalen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden betragen:

$$W_n = \frac{h^2}{8 m \cdot L^2} n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N} \text{ und } n \geq 1$$

Dreidimensionaler Potentialtopf

Wird als Potentialtopf ein Würfel der Kantenlänge L gewählt, so können sich in alle drei Raumrichtungen stehende Wahrscheinlichkeitswellen ausbilden, die sich ungestört überlagern.
Hieraus ergeben sich folgende unabhängige Wellenlängen:

$$\lambda_x = \frac{2L}{n_x} \text{ und } \lambda_y = \frac{2L}{n_y} \text{ und } \lambda_z = \frac{2L}{n_z}$$

Für die dazugehörigen Impulskomponenten ergibt sich:

$$p_x = \frac{h}{\lambda_x} = \frac{h}{2L} \cdot n_x \text{ und } p_y = \frac{h}{2L} \cdot n_y \text{ und } p_z = \frac{h}{2L} \cdot n_z$$

Der Gesamtimpuls folgt aus vektorieller Addition:

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = \frac{h^2}{2L} \cdot \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

Für die Energie eines Mikrogebildes im dreidimensionalen Potentialtopf folgt:

$$W_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8m \cdot L} \cdot \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

Die niedrigste Energie (**Nullpunkts- oder Lokalisationsenergie**) ergibt sich für

$$n_x = n_y = n_z = 1 \text{ zu } W_1 = \frac{3h^2}{8m \cdot L^2}.$$

Grundzustand

Diese Nullpunktsenergie kann auch mithilfe der **Unbestimmtheitsrelation** abgeschätzt werden. Das Elektron ist beschränkt auf $\overline{\Delta x} \approx L$. Folglich darf $\overline{\Delta p_x}$ nicht null sein, da sonst die Unbestimmtheitsrelation verletzt würde. Da sich das Elektron jedoch nicht im klassischen Sinne bewegt, muss $\overline{p} = 0$ gelten.
Angenommen p_x streue zwischen $+p_x$ und $-p_x$, so folgt $\overline{\Delta p_x} = 2p_x$.
Aus der Unbestimmtheitsrelation folgt dann $p_x \approx \frac{h}{2L}$.
Entsprechendes gilt für die y- und z-Richtung. Für die Nullpunktsenergie folgt

$$W = \frac{1}{2} m \cdot v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \cdot \left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) \approx \frac{3h^2}{8m \cdot L^2}.$$

Diese Abschätzung zeigt, dass Nullpunktsenergien bei jeder räumlichen Beschränkung des Aufenthalts von Teilchen auftreten.

Die Energieniveaus in einem dreidimensionalen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden betragen:

Dreidimensionaler Potentialtopf

$$W_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8m \cdot L} \cdot \left({n_x}^2 + {n_y}^2 + {n_z}^2\right) \text{ mit } [n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N} \text{ und } n_x, n_y, n_z \geq 1]$$