

5.2.4 Atommodell von Bohr als historischer Zwischenschritt

Grenzen des Rutherfordmodells; Bohrsche Postulate

Das Atommodell von Rutherford steht teilweise im Widerspruch zu einigen gesicherten Erkenntnissen der klassischen Physik. So müsste ein kreisendes Elektron in seiner Umgebung ein veränderliches Magnetfeld hervorrufen, das seinerseits ein veränderliches elektrisches Feld hervorrufen würde. Als Folge würde das Elektron ein elektromagnetisches Wechselfeld aussenden, ähnlich wie ein strahlender Dipol, und dauernd Energie verlieren. Dann würde sich das Elektron auf Spiralenbahnen dem Kern nähern. Das Rutherfordmodell beschreibt also Gebilde, die instabil sein müssten.

Die vorangegangenen Versuche (Spektrallinien, Franck-Hertz-Versuch) zeigen eindeutig, dass es im Atom nur diskrete Energiezustände gibt. Im Rutherfordmodell existieren dagegen keine diskreten Energieniveaus, da die Elektronen auf Bahnen in beliebigen Abständen um den Kern laufen können.

Niels Bohr (1885 - 1962, dänischer Physiker, NP 1922) behob die aufgetretenen Schwierigkeiten etwas gewaltsam durch die Annahme, dass es für die Elektronen der Atomhülle Bahnen geben müsse, auf denen die Elektronen ohne Energieaussendung kreisen könnten. Diese Bahnen brachte er in Zusammenhang mit dem Planckschen Wirkungsquantum. Im einzelnen formulierte er seine Postulate so (1913):

1. Beim Umlauf eines Elektrons um einen Atomkern sind nur Kreisbahnen erlaubt, bei denen der mit der Bahnlänge $2 \cdot r_n \cdot \pi$ multiplizierte Impuls $p = m_e \cdot v_n$ gleich einem ganzzahligen Vielfachen des Planckschen Wirkungsquantums h ist:

$$2 \cdot r_n \cdot \pi \cdot m_e \cdot v_n = n \cdot h.$$
 Auf solchen Bahnen laufen Elektronen strahlungsfrei um.
2. Beim Übergang eines Elektrons von einer Bahn mit der Gesamtenergie W_1 zu einer Bahn mit der Gesamtenergie W_2 werden Strahlungsquanten absorbiert oder emittiert, für deren Frequenz die Bedingung gilt:

$$h \cdot f = |W_1 - W_2|.$$

Anmerkungen:

1. Die Bohrschen Postulate erscheinen zunächst recht willkürlich. Ihre Rechtfertigung liegt in ihren Erfolgen.
2. Die erste Bohrsche Bedingung kann man mit Hilfe der Vorstellungen von de Broglie aus dem Jahr 1924 plausibel machen. Formt man nämlich die erste Bohrsche Bedingung geringfügig um, so erhält man die Gleichung

$$2 \cdot r_n \cdot \pi = n \cdot \frac{h}{m_e \cdot v_n} = n \cdot \lambda_{\text{deBroglie}}.$$

Ein strahlungsfreier Umlauf eines Elektrons um einen Kern soll also

nur dann möglich sein, wenn der Bahnumfang ein ganzzahliges Vielfaches der Materiewellenlänge ist, wenn sich also eine stehende Materiewellenlänge ausbilden kann. Diese Deutung stellt bereits eine Verknüpfung zu moderneren Vorstellungen her, hält freilich an klassischen Größen wie Bahnradius und Bahngeschwindigkeit fest.

Bahnradien, Geschwindigkeiten und Energiestufen im Wasserstoffatom

Für das einfachste Atom, das Wasserstoffatom aus einem Proton als Kern und einem umkreisenden Elektron sollen im folgenden die in der Überschrift angeführten Größen berechnet werden.

Das Elektron wird durch die Coulombkraft auf seiner Bahn gehalten; zusätzlich soll der Kern ruhen. Dann gilt als Gleichgewichtsbedingung für ein mit der Geschwindigkeit v_n im Abstand r_n um den Kern kreisendes Elektron der Masse m und der (Elementar-)Ladung e

$$(I) \quad m \cdot \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_n^2}$$

und außerdem die Bohrsche Quantenbedingung

$$(II) \quad 2 \cdot r_n \cdot \pi \cdot m \cdot v_n = n \cdot h.$$

Die Gleichung für den Bahnradius r_n erhält man z. B. durch Auflösen der zweiten Gleichung nach v_n und Einsetzen in die erste Gleichung:

$$v_n = \frac{n \cdot h}{2 \cdot r_n \cdot \pi \cdot m} \Rightarrow \dots \Rightarrow r_n = \frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot e^2 \cdot m} \cdot n^2.$$

Wenn man diesen Term für r_n in die Gleichung für v_n einsetzt, so folgt nach einigem Kürzen

$$v_n = \frac{e^2}{2 \cdot \epsilon_0 \cdot h} \cdot \frac{1}{n}.$$

Für Wasserstoff folgen daraus

$$r_1 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m und } v_1 = 2,2 \cdot 10^6 \text{ m/s.}$$

Mit dem Term für die Geschwindigkeit auf der n -ten Quantenbahn lässt sich die kinetische Energie W_{kin} sofort angeben:

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v_n^2 = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Die potentielle Energie W_{pot} lässt sich durch die Arbeit im Coulombfeld berechnen, wobei der Potentialnullpunkt (vgl. letztes Kapitel) im Unendlichen liegen soll.

$$W_{\text{pot}} = \int_{\infty}^{r_n} e \cdot E(r) dr = \int_{\infty}^{r_n} \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} dr = \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} \cdot \int_{\infty}^{r_n} \frac{1}{r^2} dr$$

bzw.

$$W_{\text{pot}} = \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} \cdot \left[-\frac{1}{r} \right]_{\infty}^{r_n} = \frac{-e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_n}.$$

Mit dem bereits berechneten r_n in Abhängigkeit von n ergibt sich für W_{pot}

$$W_{\text{pot}} = \frac{-m \cdot e^4}{4 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Anmerkung:

Das negative Vorzeichen bringt zum Ausdruck, dass die potentielle Energie bei Annäherung des Elektrons an den Kern, also bei Verkleinerung von r , abnimmt. Es muss dem Elektron Energie zugeführt werden, um es wieder vom Kern zu entfernen.

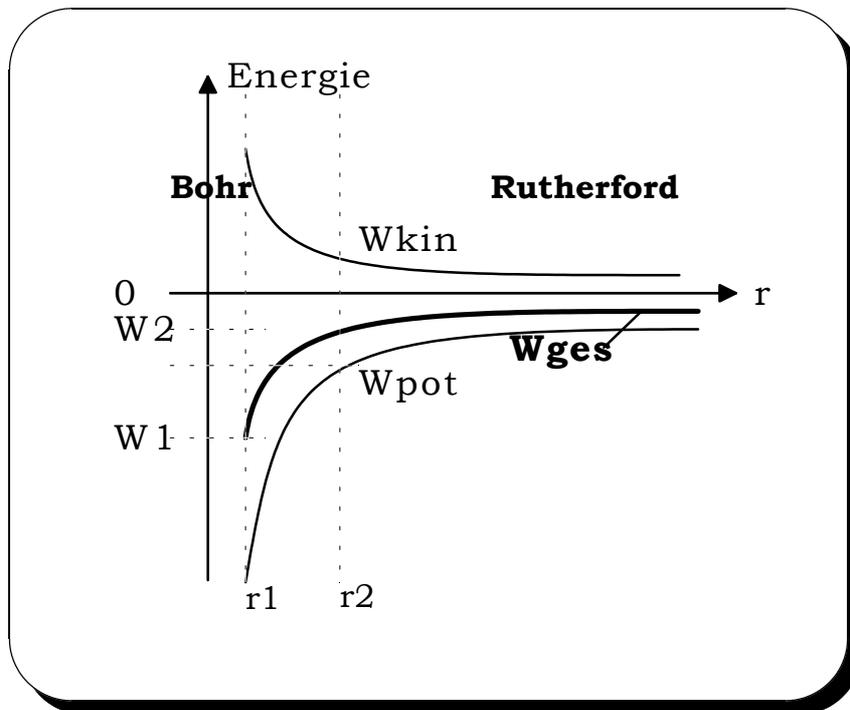
Es ist leicht zu sehen, dass die kinetische Energie genau halb so groß ist wie der Betrag der potentiellen Energie. Für die Gesamtenergie W_{ges} folgt daraus
$$W_{\text{ges}} = W_{\text{pot}} + W_{\text{kin}} = -W_{\text{kin}} = \frac{-m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Im Term für die Gesamtenergie sind außer der Bahnnummer nur Konstanten enthalten. Setzt man deren Werte in die Gleichung ein, so ergibt sich für die Gesamtenergie auf der n -ten Quantenbahn schließlich

$$W_{\text{ges},n} = -13,6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Die Energien im Bohrschen Modell des Wasserstoffs lassen sich über den Abständen vom Kern auftragen:

Skizze:



Mit der letzten Gleichung für die Energiestufen lässt sich ein Energieniveauschema erstellen, das dem bereits im letzten Kapitel erhaltenen gleicht. Dabei bedeutet der durch $n = 1$ gekennzeichnete Zustand den Grundzustand, Niveaus mit $n > 1$ sind angeregte Zustände. Die obere Grenze des diskreten Energie-Termschemas ($n \rightarrow \infty$ bzw. $r \rightarrow \infty$) gibt den Übergang zu freien Elektronenzuständen an, bei denen das Elektron nicht mehr an den Kern gebunden ist.

Anmerkungen:

1. Die Energie $-13,6 \text{ eV}$ im Grundzustand bedeutet, dass man dem Wasserstoffelektron im Grundzustand mindestens $13,6 \text{ eV}$ an Energie

zuführen muss, um es aus dem Anziehungsbereich des Kerns zu entfernen. Diese Energie heißt daher auch Ionisierungsenergie.

- Die Energiestufen des Wasserstoffatoms können mit einer "Energiegrube" der Tiefe 13,6 verglichen werden, in denen verschiedene diskrete Absätze existieren, während der Rand das Nullniveau kennzeichnet.

Serienformeln, Rydbergkonstante

Mit Hilfe des zweiten Bohrschen Postulats lassen sich aus den Energietermen die Emissionsfrequenzen und Wellenlängen berechnen:

$$h \cdot f = W_n - W_m \quad (m < n)$$

$$h \cdot \frac{c}{\lambda} = \frac{-m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ bzw.}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{-m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot c} \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Der aus Konstanten bestehende Term $R_H = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot c}$ heißt Rydbergkonstante

R_H und hat den Wert

$$R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

Damit nimmt die Serienformel die Form

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

an. Die Gesamtenergie lässt sich dann so schreiben:

$$W_{\text{ges}} = -R_H \cdot h \cdot c \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Anmerkung:

Die Rydbergkonstante ist von der Kernmasse abhängig; sie ist für größere Kernmassen geringfügig größer als für Wasserstoff ($R_H = 1,096775 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, $R_\infty = 1,097373 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$).

Wasserstoffähnliche Eielektronensysteme

Die großen Erfolge, die mit dem Bohrschen Modell bei der Beschreibung des Wasserstoffatoms erzielt werden konnten, veranlassten die Physiker, diese Modell auch auf andere, komplizierter gebaute Atome zu übertragen und die von diesen Atomen ausgesandten Spektrallinien in ähnlicher Weise wie beim Wasserstoff zu berechnen.

Unter den hier betrachteten wasserstoffähnlichen Systemen sollen Ionen verstanden werden, die übrig bleiben, wenn man aus der Atomhülle durch Ionisation so viele Elektronen entfernt, dass nur noch ein einziges übrig bleibt (Beispiele: He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} usw.).

Allen wasserstoffähnlichen Systemen ist gemeinsam, dass sie als Zweikörperprobleme behandelt werden können: Um einen (als ruhend angenommen) Kern mit der Kernladung $Z \cdot e$ bewegt sich ein Elektron mit der Ladung $-e$. Der Unterschied zum Wasserstoffatom besteht nur darin, dass in den Berechnungen von Radien, Geschwindigkeiten und Energien statt der

Kernladung e des Wasserstoffs $Z \cdot e$ einzusetzen ist. Dies wirkt sich folgendermaßen aus:

$$r_n = \frac{r_{n,H}}{Z}, \quad v_n = Z \cdot v_{n,H}, \quad W_n = Z^2 \cdot W_{n,H}.$$

Für die Serienformeln folgt daraus

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 \cdot R_Y \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

Zusammenfassung: Das Bohrsche Atommodell hat sich bei der Beschreibung folgender Erfahrungstatsachen gut bewährt:

1. Der aus dem Modell sich ergebende Durchmesser des Wasserstoffatoms stimmt in der Größenordnung mit den Messergebnissen aus klassischen Versuchen überein.
2. Die Spektren des Wasserstoffatoms und der wasserstoffähnlichen Ionen können in Übereinstimmung mit der Erfahrung berechnet werden.
3. Die berechneten Ionisierungsenergien stimmen mit den gemessenen Werten überein.

Das Bohrsche Korrespondenzprinzip

Das Bohrsche Atommodell entstand aus einer Mischung zwischen klassischen und quantenmechanischen Ansätzen. Bohr war diese Widersprüchlichkeiten durchaus bewusst, und er konnte eine Brücke zwischen diesen beiden Welten schlagen.

In der klassischen Physik müssen die Umlauffrequenzen mit den Frequenzen der ausgesandten Strahlung übereinstimmen (vgl. Dipolstrahlung). Die nachfolgende Abschätzung zeigt, dass für große Quantenzahlen klassische und quantenmechanische Frequenz beinahe übereinstimmen (korrespondieren).

Für die Umlauffrequenz f_n des Wasserstoffelektrons auf der n -ten Quantenbahn gilt

$$f_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{v_n}{2 \cdot \pi \cdot r_n}.$$

$$\text{Mit } v_n = \frac{e^2}{2 \cdot \epsilon_0 \cdot h \cdot n} \text{ und } r_n = \frac{\epsilon_0 \cdot h^2 \cdot n^2}{m \cdot \pi \cdot e^2}$$

folgt daraus

$$f_n = \frac{m \cdot e^4}{4 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot n^3}.$$

Die Frequenz f des emittierten Lichtquants beim Sprung von der m -ten auf die n -te Bahn ist gegeben durch

$$f_{mn} = \frac{\Delta E}{h} = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3} \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Die beiden Frequenzen stimmen nicht überein, wenn man etwa $n = 1$ und $m = 2$ nimmt.

Betrachtet man dagegen einen Sprung zwischen benachbarten Zuständen n und $n + 1$ auf hohem Niveau (das Elektron ist dann nur noch schwach gebunden), dann erhält man für die Abstrahlungsfrequenz

$$f_{(n+1)n} = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3} \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3} \cdot \frac{n^2 + 2n + 1 - n^2}{n^2 \cdot (n+1)^2} = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3} \cdot \frac{2n+1}{n^2 \cdot (n+1)^2}.$$

Für große n gilt näherungsweise

$$2n + 1 \approx 2n \text{ und } (n + 1)^2 \approx n^2$$

$$\text{(Beispiel: } n = 1000 \Rightarrow \frac{2n+1}{(n+1)^2} = \frac{2001}{1001^2} = 1,997 \cdot 10^{-3} \approx \frac{2n}{n^2} = \frac{2}{n} = \frac{2}{1000} = 2 \cdot 10^{-3} \text{).}$$

Damit lässt sich der Term für f vereinfachen:

$$f_{(n+1)n} \approx \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3} \cdot \frac{2n}{n^2 \cdot n^2} = \frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3} \cdot \frac{2}{n^3} = \frac{m \cdot e^4}{4 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot n^3}.$$

Dies ist aber genau die Umlauffrequenz der n -ten Bahn, der Wert also, der nach der klassischen Rechnung zu erwarten war.

Zusammenfassung: Aussagen der Quantenphysik gehen für große Quantenzahlen in die ihnen entsprechenden (korrespondierenden) Aussagen der klassischen Physik über.

Anmerkung:

Dieser Sachverhalt lässt sich auch so formulieren: Beim Übergang eines gebundenen Elektrons in ein freies gehen auch die Ergebnisse der Quantenphysik in die der klassischen Physik über.