

2.1.7 Merkpunkte zu Kapitel 2.1: Quantentheorie der Atome

Die wesentlichen Punkte, die wir zum Thema "**Quantentheorie der Atome**" behalten wollen sind:

- Die primäre Größe, die den Zustand des Quantensystems beschreibt, ist die **Wellenfunktion** ψ . Sie enthält **alles**, was man über das System wissen kann. Die Wellenfunktion ist prinzipiell eine **komplexe** Funktion.
- Das Absolutquadrat der Wellenfunktion, $\psi \cdot \psi^* dV$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das (oder die) Teilchen in dem betrachteten (differenziellen) Volumen dV zu finden. Integriert über den ganzen Raum ergibt sich die **Normierungsbedingung**

$$\iiint \psi \cdot \psi^* = 1$$

Die Wellenfunktion ψ eines Systems errechnet sich aus der (für unsere Zwecke ausreichenden zeitunabhängigen) **Schrödingergleichung**.

- Dabei ist (für unsere Zwecke), die **potentielle Energie** $U(x,y,z)$ des Systems als Funktion der Teilchenpositionen die einzige "Input"größe.
- Die (nebenstehende) Schrödingergleichung müssen wir **nicht** auswendig können; sie ist i.d.R. nicht leicht zu lösen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial z^2} \right) + (U(x,y,z) - E) \cdot \psi(x,y,z) = 0$$

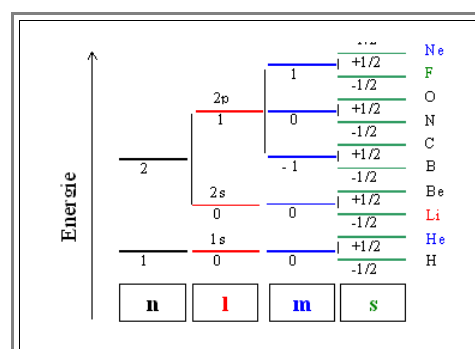
Exakte Lösungen zum Wasserstoffatom sind möglich, sie definieren die **Quantenzahlen** n, l, m und die zu einem dadurch gegebenen Zustand gehörende (konstante) **Gesamtenergie** E .

- Darüberhinaus muß der **Spin** s der Teilchen berücksichtigt werden. Das **Pauli Prinzip** postuliert, daß Teilchen mit halbzahligem Spin ($s = \pm 1/2; \pm 3/2, \dots$) **nicht** in allen Quantenzahlen übereinstimmen dürfen.

Lösungen:	$\psi = \psi_{n, l, m, s}(x, y, z)$
Zugehörige Energien:	$E = E_{n, l, m, s}$
Hauptquantenzahl n	= 1, 2, 3, ...
Nebenquantenzahl l	= 0, 1, 2, 3, ..., $n - 1$
Magnetische Quantenzahl m	= $l, l - 1, \dots, 0, \dots, -l$
Spinquantenzahl s	= $+1/2$ oder $-1/2$

Die Übertragung auf beliebige Atome führt zu einem **Termschema** mit Besetzungssystematik. Dabei zeigt sich, daß gefüllte Schalen besonders stabil sind, es liegen Edelgase vor.

- Das Bestreben nach gefüllten Schalen regelt die "**Chemie**". Es kann quantifiziert werden durch die Materialparameter "**Ionisationsenergie**" und "**Elektronenaffinität**".



Fragebogen
Multiple Choice Fragen zu 2.1