

## 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**  $\psi$ . 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  $\psi$  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.

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

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**  $n = 1, 2, 3, \dots$

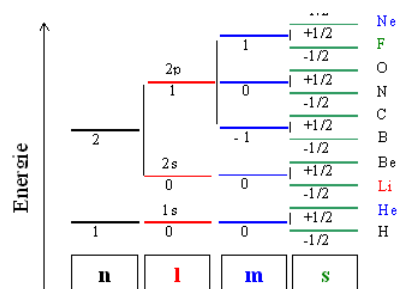
**Nebenquantenzahl**  $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

**Magnetische Quantenzahl**  $m = l, l-1, \dots, 0, \dots, -l$

**Spinquantenzahl**  $s = +1/2 \text{ oder } -1/2$

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