Berechnung der Energiezustände im Wasserstoffatom
Bohrsches Atommodell

Nachdem Ernest Rutherford 1909/1911 gezeigt hatte, dass ein Atom im Wesentlichen leer ist, fast die gesamte Masse im positiv geladenen kleinen Atomkern vereinigt ist und der Raum darum die leichten negativ geladenen Elektronen enthält, stellte man sich das Innere des Atoms wie ein Sonnensystem vor: Die Elektronen umkreisen den in der Mitte befindlichen Atomkern auf verschieden großen Bahnen wie Planeten die Sonne.

Das ergibt aber einen Widerspruch, denn die Elektronen führen auf ihrer Kreisbahn eine beschleunigte Bewegung durch und verlieren daher stetig Energie, sodass sie nach kurzer Zeit in den Kern fallen müssten.

Niels Bohr erweiterte deshalb das Rutherfordsche Atommodell mit Hilfe des von Max Planck entdeckten Wirkungsquantums h durch zwei sogenannte Postulate, die so sinnvoll gewählt wurden, dass sie ein stabiles Atom gewährleisten und die Berechnung der Energiezustände im Wasserstoffatom ermöglichen.

1. Postulat

Elektronen bewegen sich im Atom auf stabilen Bahnen, ohne durch Strahlung Energie zu verlieren. Die Bahndrehimpulse dieser Bahnen $L_n = r \cdot m_e \cdot v_n$ können nur folgende diskrete Werte annehmen:

$L_n = n \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi}$ mit $n = 1, 2, 3, \ldots$

Die Energien die Bahnen werden mit E_n bezeichnet, wobei n die Quantenzahl der Bahn angibt.

2. Postulat

Die Elektronen im Atom können nur Energien aufnehmen und abgeben, die einer Differenz zweier Energien E_m und E_n entsprechen: $\Delta E = E_m - E_n = h \cdot f$.
Dabei gibt $h \cdot f$ die Energie des Photons an, das die Anregung des Atoms verursacht bzw. das vom Atom abgestrahlt wird.

Die Gesamtenergie der Elektronen auf den Bohrschen Bahnen mit der Quantenzahl n berechnet sich aus der kinetischen und der potentiellen Energie des Elektrons:

$E_n = E_{kin,n} + E_{pot,n}$

Die kinetische Energie hängt von der Masse des Elektrons und seiner Geschwindigkeit ab:

$E_{kin,n} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_n^2$

Die potentielle Energie in einem radialsymmetrischen Feld ergibt sich aus der Formel für die Coulombkraft $F_C = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r^2} = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{-e^2}{r^2}$ durch Integration zu $E_n = -\frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n}$.

Es ergibt sich die Gesamtenergie $E_n = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_n^2 - \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n}$.

In dieser Formel sind die Werte für v_n und r_n noch unbekannt und müssen durch zusätzliche Überlegungen ermittelt werden:

Die Coulombkraft F_C ist gleich der Zentripetalkraft F_Z bei der Kreisbewegung.
Unter Berücksichtigung des 1. Bohrschen Postulats ergibt sich

$$F_C = \frac{1}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r_n^2}\ ;\ F_Z = \frac{m_e\cdot v_n^2}{r_n}\ \rightarrow\ \frac{1}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r_n^2} = \frac{m_e\cdot v_n^2}{r_n}\ \xrightarrow{\cdot r_n^2}\ \frac{e^2}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0} = r_n\cdot m_e\cdot v_n^2 = L\cdot v_n = n\cdot\frac{h}{2\cdot\pi}\cdot v_n$$

und damit $v_n = \dfrac{e^2\cdot 2\cdot\pi}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0\cdot h\cdot n} = \dfrac{e^2}{2\cdot\varepsilon_0\cdot h\cdot n}$.

Um r_n zu berechnen, wird v_n in die vorherige Gleichung eingesetzt:

$$\frac{e^2}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0} = r_n\cdot m_e\cdot\left(\frac{e^2}{2\cdot\varepsilon_0\cdot h\cdot n}\right)^2 = r_n\cdot m_e\cdot\frac{e^4}{4\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}\ \rightarrow$$

$$r_n = \frac{e^2}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0}\cdot\frac{4\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}{m_e\cdot e^4} = \frac{\varepsilon_0\cdot h^2\cdot n^2}{\pi\cdot m_e\cdot e^2}$$

Daraus folgt für die Energien:

$$E_{kin,n} = \frac{1}{2}\cdot m_e\cdot v_n^2 = \frac{1}{2}\cdot m_e\cdot\frac{e^4}{4\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2} = \frac{1}{8}\cdot\frac{m_e\cdot e^4}{\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}$$

$$E_{pot,n} = \frac{-e^2}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r_n} = \frac{-e^2}{4\cdot\pi\cdot\varepsilon_0}\cdot\frac{\pi\cdot m_e\cdot e^2}{\varepsilon_0\cdot h^2\cdot n^2} = -\frac{1}{4}\cdot\frac{m_e\cdot e^4}{\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}$$

Da die Brüche mit den Konstanten identisch sind, ergibt sich als Gesamtenergie

$$E_n = \left(\frac{1}{8} - \frac{1}{4}\right)\cdot\frac{m_e\cdot e^4}{\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2} = -\frac{1}{8}\frac{m_e\cdot e^4}{\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2} = -\frac{m_e\cdot e^4}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

Mit den Näherungswerten

$m_e = 9{,}1\cdot 10^{-31}\,kg$

$e = 1{,}6\cdot 10^{-19}\,C$

$\varepsilon_0 = 8{,}85\cdot 10^{-12}\,\dfrac{A\cdot s}{V\cdot m}$

$h = 6{,}6\cdot 10^{-34}\,J\cdot s$

ergeben sich die Beziehung $E_n = -2{,}19\cdot 10^{-18}\,J\cdot\dfrac{1}{n^2} = 13{,}6\,eV\cdot\dfrac{1}{n^2}$

und für die ersten 4 Energieniveaus die Werte

$E_1 = 13{,}6\,eV\ ;\ E_2 = 3{,}4\,eV\ ;\ E_3 = 1{,}5\,eV\ ;\ E_4 = 0{,}85\,eV$.

Achtung:

Gibt man die Werte für den Bruch mit den Konstanten „wie üblich“ ein, also erst den ganzen Nenner und dann geteilt durch den ganzen Nenner, so zeigt der Taschenrechner das Ergebnis 0. Das kommt daher, dass die Zehnerpotenz im Zähler 10^{-108} beträgt, was aber im Taschenrechner nicht darstellbar ist: Alle Werte kleiner als 10^{-99} werden als 0 interpretiert.

Sicherer ist es, abwechselnd einen Faktor aus dem Zähler und aus dem Nenner einzugeben, weil dann die Zehnerpotenz im gültigen Bereich bleibt.

Noch besser ist es, erst alle Koeffizienten in den Taschenrechner einzugeben und dann die Zehnerpotenz im Kopf auszurechnen.