

Hieronder de relativistische berekening van de energie niveaus van het waterstof atoom, bekeken vanuit de kern (het proton).  $m_e$  (massa elektron) is voor een juiste berekening gelijk aan de gereduceerde massa.

Beschouw nu het gebonden stelsel van het elektron met het proton (waterstof atoom). Energie schillen worden gevormd door de eis dat de door het elektron opgewekte golf een geheel aantal malen de golflengte past op de omtrek van de doorlopen baan. De golflengte wordt daarbij gegeven door:

$\lambda = h/p$  waarin  $p$  de impuls is. Voor een cirkelvormige baan geldt:  $2\pi \cdot r = n \cdot \lambda$ , waarin  $n$  het hoofdkwantumgetal is. Combineren van beide formules geeft:

$$2\pi \cdot r = n \cdot \lambda = n \cdot h/p = n \cdot h/(m_e \cdot v) \rightarrow m_e \cdot v = n \cdot h/(2\pi \cdot r) \quad (2)$$

Voor de cirkelbeweging geldt (krachtenevenwicht):

$$m_e \cdot v^2/r = e^2/(4\pi\epsilon_0 \cdot r^2) \rightarrow m_e \cdot v^2 = e^2/(4\pi\epsilon_0 \cdot r) \quad (3)$$

Deel nu formule 3 door 2:

$$v = (e^2/(2\epsilon_0 \cdot h)) \cdot 1/n \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{Energie behoud (relativistisch) geeft: } E &= E_{\text{kin+rust}} + E_{\text{pot.}} = m_e \cdot c^2 - e^2/(4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r) = m_e \cdot c^2 - m_e \cdot v^2 \\ &= m_e \cdot (c^2 - v^2) = m_0 \cdot c / (\sqrt{(c^2 - v^2)} \cdot (c^2 - v^2)) = m_0 \cdot c \cdot \sqrt{(c^2 - v^2)} \end{aligned}$$

Ik krijg dus voor de energie van een elektron in een baan om het proton:

$$E = m_0 \cdot c \cdot \sqrt{(c^2 - v^2)} \quad (5)$$

Men ziet dat de energie dus altijd positief is vanwege de wortel vorm. Theoretisch zou dan de energie naar nul kunnen gaan als  $v$  de lichtsnelheid benaderd. De eis dat de baanomtrek een geheel aantal malen de opgewekte golflengte moet zijn, voorkomt dat.

De reeksontwikkeling van  $\sqrt{(c^2 - x^2)}$  is als volgt:

$$\sqrt{c^2} - \frac{x^2}{2\sqrt{c^2}} - \frac{\sqrt{c^2} x^4}{8c^4} - \frac{\sqrt{c^2} x^6}{16c^6} - \frac{5\sqrt{c^2} x^8}{128c^8} + O(x^9)$$

(Taylor series)

$$\text{Ingevuld in (5) : } E = m_0 \cdot c^2 - \frac{1}{2}m_0 \cdot v^2 - \frac{1}{8}m_0 \cdot v^4/c^2 - \frac{1}{16}m_0 \cdot v^6/c^4 - \frac{5}{128} \cdot m_0 \cdot v^8/c^6 - \text{etc.}$$

Nu substitueer ik formule 4 in formule 5 en dan verkrijg ik:

$$E = m_0 \cdot c \cdot (c^2 - e^4/(2\epsilon_0 \cdot h)^2) \cdot 1/n^2)^{1/2}$$

maak ik er weer een reeksontwikkeling van mbv formule 4:

$$E = m_0 \cdot c^2 - \frac{1}{2}m_0 \cdot e^4/(2\epsilon_0 \cdot h)^2 \cdot 1/n^2 - \text{etc.} = m_0 \cdot c^2 - m_0 \cdot e^4/8(\epsilon_0 \cdot h)^2 \cdot 1/n^2 - \text{etc.}$$

In een cirkelbaan is de energie dus puur afhankelijk van de snelheid die hoort bij het hoofdkwantum getal (voor een cirkelbaan is de absolute waarde van de potentiële energie tweemaal zo groot als de kinetische energie). Dus:

$$v = (e^2 / (2\epsilon_0 h)) \cdot 1/n \quad \text{en} \quad E = m_0 c \sqrt{c^2 - v^2}$$

Dit is een belangrijk resultaat. Het blijkt dat de totale energie in elke schil constant is en enkel afhankelijk is van  $n$ . Dit geldt ook voor elliptische banen, ook voor deze banen is de totale energie  $E$  ( $E_{\text{rust}} + E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$ ), constant (er wordt immers geen energie uitgestraald of geabsorbeerd). Er is hier relativistisch gerekend aan de baanenergie en het blijkt dus dat de grondtoestand wordt bereikt voor de grootst mogelijke elektron snelheid bij een waarde voor  $n = 1$ .

Daarbij wordt de baanenergie dus steeds minder als men gaat van hogere  $n$  naar lagere  $n$  onder uitzending van een foton. Dat komt omdat de potentiële energie zoveel groter is dan de kinetische energie en de potentiële energie negatief is (aantrekkende kracht, bij een afstotende kracht is de potentiële energie positief (dit gaat een rol spelen bij atomen met meerdere elektronen, zij stoten elkaar immers af))!

**Samengevat:** een gebonden elektron beweegt in een baan met constante energie. De grondtoestand is die toestand waarvoor geldt dat  $n = 1$ , en dat betekent tevens dat de baanomtrek dan 1 keer de golflengte is van de door het elektron opgewekte golf in het vacuüm (dit is in de vacuüm energie ruimte). Het elektron volgt de baan van de golf (de golf beweegt immers met de lichtsnelheid). Deze zienswijze impliceert dus dat lading het vacuüm polariseert, zodanig dat de golf een baan van constante energie volgt, afhankelijk van de startvoorwaarden (na uitzending van het foton). Deze voorwaarde geldt natuurlijk ook voor moleculen. Zie het voorbeeld van het  $H_2$  molecuul.

De bijbehorende straal volgt uit formule 2:

$$r = n^2 \cdot (h^2 \cdot \epsilon_0) \cdot (\pi \cdot e^2 \cdot m_0 \cdot c)^{-1} \cdot \sqrt{c^2 - v^2}$$

waarbij  $r$  dus bij benadering evenredig is met  $n^2$ .  $v^2$  is immers ook afhankelijk van  $n$ . Alleen als  $v \ll c$ , dan geldt:

$$r = n^2 \cdot (h^2 \cdot \epsilon_0) / (\pi \cdot e^2 \cdot m_0)$$

De impuls  $p$  is gerelateerd aan de opgewekte golflengte door de relatie  $p = h/\lambda$ . In een cirkel beweging is de snelheid constant en dus ook de golflengte. De opgewekte golf beweegt met de lichtsnelheid en haalt op een gegeven moment het elektron in waarna de golf gereflecteerd wordt aan de achterkant van het elektron en vervolgens terugkeert naar het naderende elektron. Omdat er sprake is van een geheel aantal malen de golflengte dooft de golf uit bij aankomst. De golf heeft dan precies 2 keer de golflengte afgelegd en dooft dan uit. De voorkant van het elektron is dan eigenlijk een soort knoop.

Dit is een belangrijk resultaat want het zorgt ervoor dat het elektron zijn beweging ongestoord kan vervolgen zonder door tegemoet komende golven te worden gehinderd.

Voor elliptische banen geldt eenzelfde soort redenering, de enige voorwaarde is dat de baanomtrek een geheel aantal malen de golflengte moet zijn.

Men weet dat er maximaal 2 elektronen in een baan kunnen zitten met tegengestelde spins. De tegengestelde spins zorgen ervoor dat de 2 elektronen uit elkaar worden gedreven tezamen met de afstotende elektrische ladingen. Ze zullen zich op een baanafstand van een  $\frac{1}{2}\lambda$  bewegen daar de uitgaande golf van het achterste elektron gereflecteerd wordt op het voorgaande elektron en dan uitdooft aan de voorkant van het achterste elektron (voor  $n=1$ ). De golf heeft dan precies 1 keer de golflengte afgelegd.

Michiel Bischof, energie niveaus van het waterstof atoom + betekenis 'de Broglie' golf

Het elektron beweegt dan in een baan zonder golftrillingen aan de voorkant. Dit verklaart perfect waarom er zich maar 2 elektronen per baan kunnen bevinden op een onderlinge afstand, via de baanomtrek, van een  $\frac{1}{2}\lambda$ , gestabiliseerd via de tegengestelde spins en afstotende onderlinge ladingen.

Bedenk tevens dat het hoofdkwantum getal enkel aangeeft dat een schil elektronen bevat waarvoor geldt dat de baanomtrek een geheel aantal malen de opgewekte golflengte is. Dus:

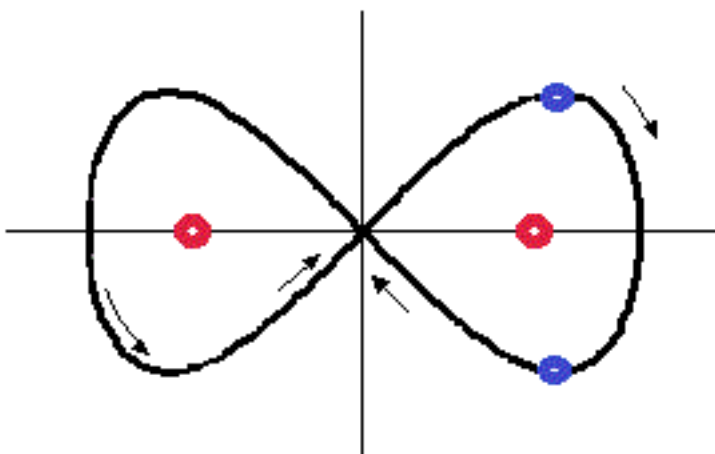
$$\text{Baanomtrek} = n \cdot \lambda$$

Dit betekent ook dat per schil iedere subschil niet dezelfde golflengte heeft! De cirkel en elliptische banen hebben ieder een eigen golflengte! Voor een cirkel is de golflengte op ieder moment tijdens een omloop hetzelfde, dat geldt niet voor een ellips, doch de fases van een golf zijn bij een halve elliptische baanomtrek tegengesteld en doven elkaar dan uit. In een elliptische baan bevinden beide elektronen zich dan op een baanafstand van een halve omtrek. Bij een elliptische baan is dan sprake van een golfpakket (er zijn zwevingen door de niet constante baansnelheid) dat een basis golffrequentie heeft en zichzelf uitdooft bij het elektron. Het elektron beweegt dan in een punt dat een trillings uitwijking heeft van nul (een knoop).

Dit is van belang bij een enkelvoudige binding (2 elektronen in de gemeenschappelijke achtbaan) maar ook bij een dubbele binding (4 elektronen in een gemeenschappelijke achtbaan) en een drievoudige binding (6 elektronen in een gemeenschappelijke achtbaan). Hierbij zijn de onderlinge afstanden dan gelijk aan een  $\frac{1}{2}\lambda$ .

De golflengte die hierbij hoort is afhankelijk van de schil waartoe de elektronen behoren van de afzonderlijke atomen. Bij koolstof is dat  $n=2$  en de dubbele binding bijv. zorgt ervoor dat de elektronen een hogere snelheid hebben, dichterbij de 2 kernen zitten en dus de golflengte kleiner zal zijn. Echter de totale energie is toegenomen door de positieve potentiële energie van de elektronen onderling! Reden waarom er zoveel energie zit in een dubbele en drievoudige binding. Zie daarvoor het waterstof molecuul dat apart behandeld zal worden.

Zie ook ter verduidelijking van bovenstaande, figuur 1 van het waterstof molecuul.



figuur 1, model waterstofmolecuul.

Hierin is de baanomtrek  $2\lambda$  en de kortste onderlinge afstand  $\frac{1}{2}\lambda$  en grootste onderlinge afstand  $\frac{3}{2}\lambda$ . Gereflecteerde golven leggen dan respectievelijk in totaal een afstand van  $\lambda$  en  $3\lambda$  af. Het is duidelijk dat het elektronen paar de binding verzorgt waar ze zich ook maar bevinden in de baanomtrek.

Bij een dubbele binding bevindt het 2e elektronenpaar zich in de andere lus, waarbij de 4 elektronen gescheiden zijn van elkaar op een onderlinge afstand van  $\frac{1}{2} \lambda$ , bij een baanomtrek van  $2\lambda$ .

Bij een drievoudige binding moet de baanomtrek dan  $3\lambda$  zijn, want er zijn dan 3 elektronenparen bij betrokken, in totaal 6 elektronen, op een onderlinge afstand van  $\frac{1}{2} \lambda$ . Dit betekent een fors hogere baansnelheid van de 6 elektronen in vergelijking met de dubbele binding en enkelvoudige binding. Dit geeft bijv. een zeer goede verklaring voor de bouw van het CO (koolstof monoxide) molecuul. Het massa middelpunt van de achtbaan ligt dichterbij de zuurstof kern dan de koolstof kern. Dit betekent tegelijkertijd dat er zich aan de koolstofkant meer elektronen bevinden dan aan de zuurstofkant (gemiddeld in de tijd): er is een dipool, negatief aan de koolstof kant, positief aan de zuurstofkant.

Het stikstof molecuul heeft een vergelijkbare structuur doch hierbij zijn de beide atoomkernen identiek en het massa middelpunt van de achtbaan (oorsprong van het coördinatenstelsel) ligt precies tussen beide kernen in.