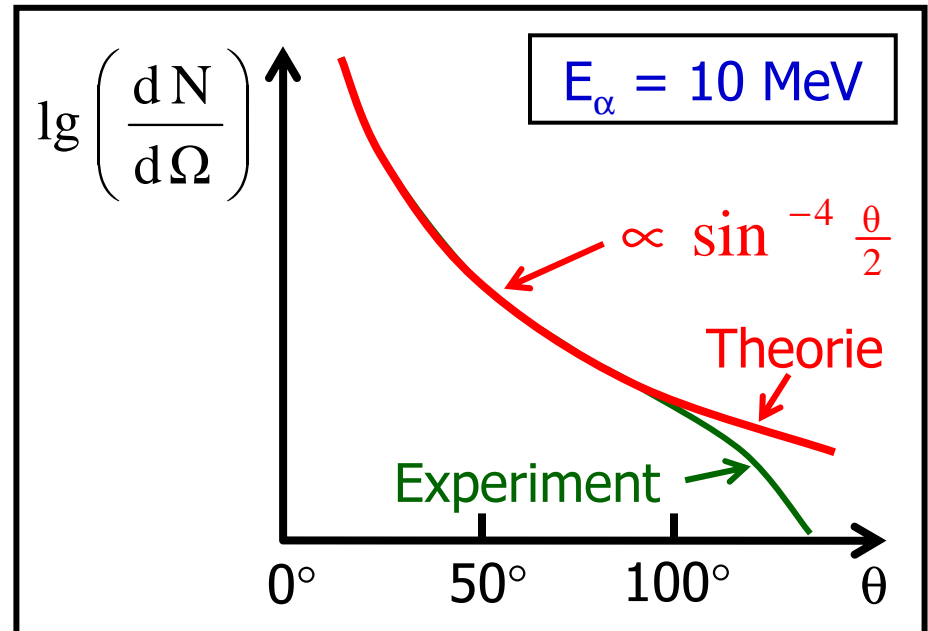


1.3.1 Rutherford'sches Atommodell



$$\frac{1}{N_0} \frac{dN}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{E_\alpha^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

Theorie experimentell bestätigt, solange $E_\alpha \sin^2 \frac{\theta}{2}$ nicht zu groß, bzw. **minimaler Kernabstand** nicht zu klein



Folgerung: Abschätzung von Kerngrößen aus Abweichungen von Rutherford'scher Streuwinkelverteilung

$$r_K \approx r_0 A^{1/3}$$

$$r_0 \approx 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 1,3 \text{ fm}$$

A = # Protonen + # Neutronen
= **Kernmassenzahl**

Kerne sind um 5 Größenordnungen kleiner als Atome!

1.3.1 Rutherfordsches Atommodell



Ungeklärte Probleme des Rutherfordschen Atommodells:

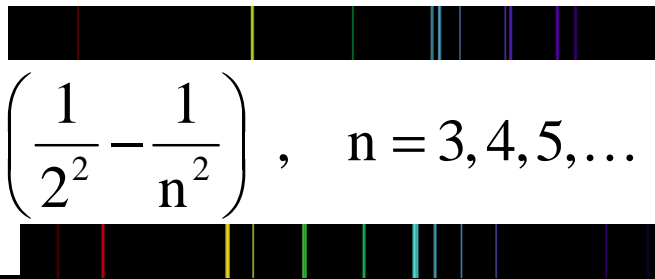
- Beschleunigte Ladungen strahlen e.m. Energie ab. Warum stürzen die um den Kern kreisenden Hüllenelektronen nicht ins Zentrum des Atoms? Wieso sind Atome also **stabil**?
- Atome strahlen elektromagnetische Strahlung u. a. in Form von **Linienpektren** ab. Was ist deren Ursprung?
- Wie kommt es zu **chemischen Bindungen** zwischen Atomen und was ist deren Natur?
-

Antwort: Die klassische Physik ist auf atomaren Skalen nicht mehr anwendbar. Wir benötigen ein quantenmechanisches Atommodell!

1.3.1 Bohrsches Atommodell

Wasserstoff: Kern → 1 Proton ; Hülle → 1 Elektron ; einfachstes Atom

Beobachtung (Jakob Balmer, 1885): Ex. Serie von Emissionslinien im sichtbaren Bereich (VIS) mit einfacher geometrischen Systematik (He/C):



$$\frac{1}{\lambda_n} = Ry \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

Rydbergkonstante des Wasserstoffs

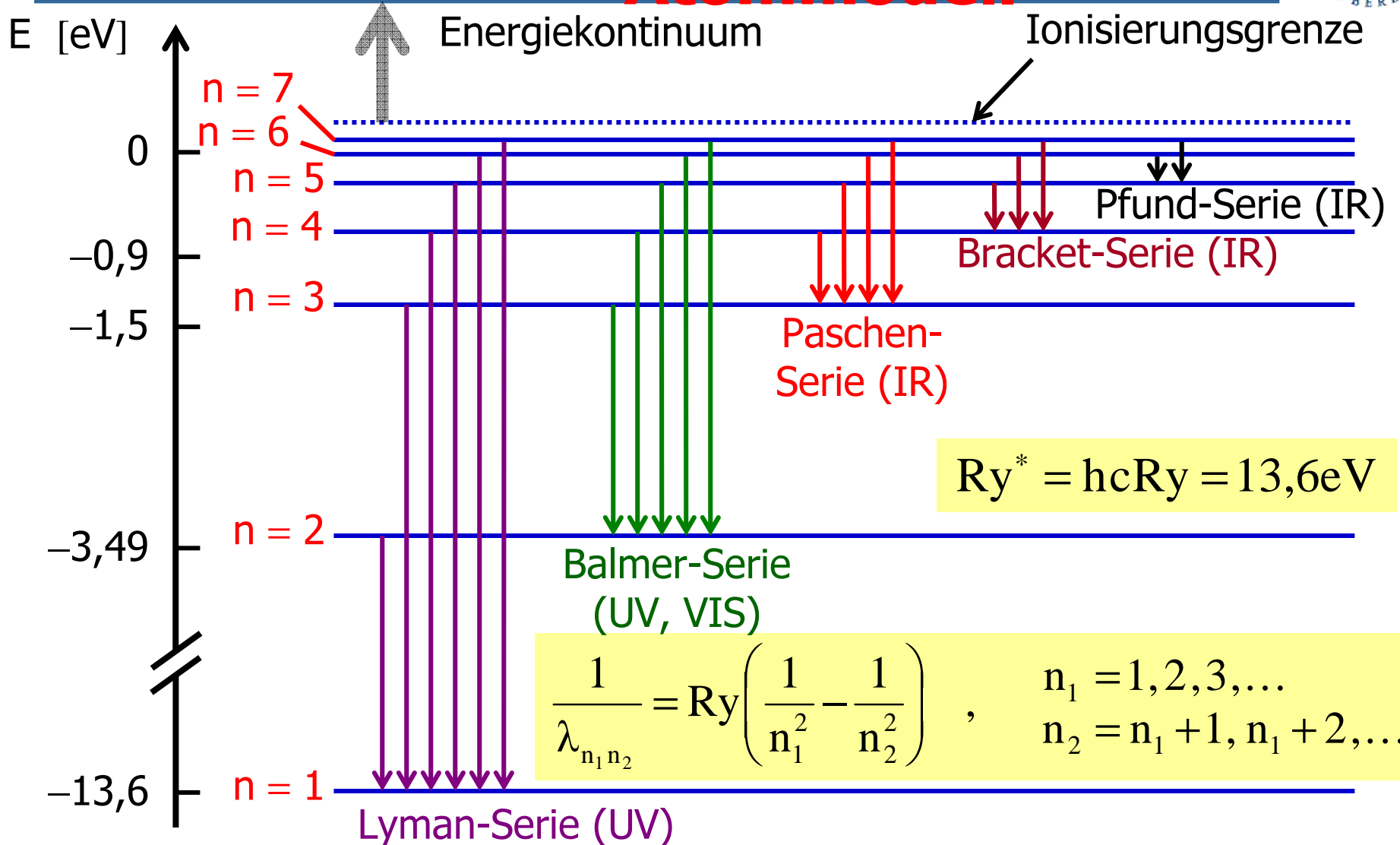
$$Ry = 109678 \text{ cm}^{-1}$$

... Entdeckung weiterer Serien (Lyman, Paschen, Brackett, Pfund, ...)

$$\frac{1}{\lambda_{n_1 n_2}} = Ry \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad \begin{array}{l} n_1 = 1, 2, 3, \dots \\ n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots \end{array}$$

Interpretation: Dem Hüllenelektron stehen im Potentialtopf des Kern-Coulombfeldes unendlich viele **Energieeigenzustände** zur Verfügung. **Übergänge** zwischen Zuständen mit Energiedifferenz ΔE können durch **Emission / Absorption von Photonen** mit $\omega = E/\hbar$ vermittelt werden.

1.3.1 Bohrsches Atommodell



1.3.1 Bohrsches Atommodell

Betrachte wasserstoffartiges Atom: Kern der Ladung $Z e$ mit Masse $m_K \gg m_e$, „umgeben“ von einem einzelnen Hüllenelektron

Postulat (1): Das Elektron bewegt sich auf einer **Kreisbahn** um den Kern (genauer: um den gemeinsamen Schwerpunkt).

(1913, Nobelpreis 1922)

reduzierte Masse:

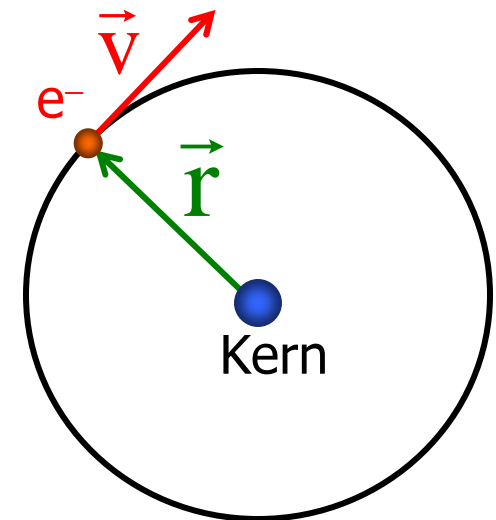
$$\mu = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K} \approx m_e$$

Kräftegleichgewicht:

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \quad (*)$$

\Rightarrow

$$r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\mu v^2} \quad (**)$$



1.3.1 Bohrsches Atommodell



Postulat (2): Die Materiewelle des Elektrons ist stationär, d. h. der Kreisumfang ist ein ganzzahliges Vielfaches der de Broglie-Wellenlänge (periodische Randbedingung).

mathematisch: $2\pi r_n = n\lambda = n \frac{h}{\mu v_n}$, $n = 1, 2, \dots$

⇒ für feste **Quantenzahl n** sind r_n und v_n festgelegt.

$$v_n = n \frac{\hbar}{\mu} \frac{1}{r_n} \quad (***)$$

(**)

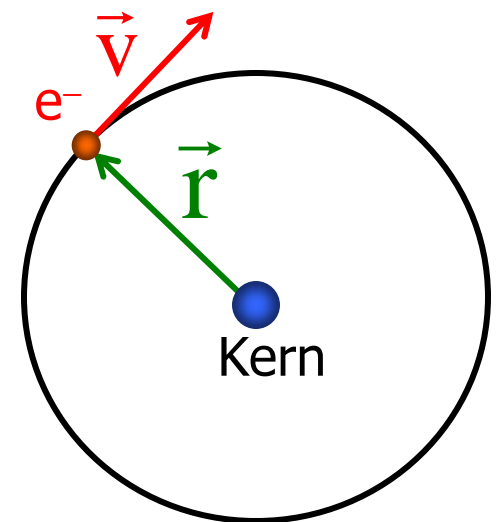
$$\Rightarrow r_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\mu v_n^2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\mu} \frac{\mu^2}{n^2 \hbar^2} r_n^2$$

⇒ Quantisierte Bahnradien:

$$r_n = \frac{a_0}{Z} n^2$$

$$a_0 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi \mu e^2} = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

Bohrscher Radius



1.3.1 Bohrsches Atommodell



Postulat (3): Die Bahn jeder Quantenzahl n gehört zu einem Energie-Eigenzustand:


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

$$E_{\text{kin},n} = \frac{1}{2} \mu v_n^2 = \frac{r_n}{2} \frac{\mu v_n^2}{r_n} \stackrel{(*)}{=} \frac{r_n}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_n^2} = -\frac{1}{2} E_{\text{pot},n}$$

$$\Rightarrow E_n = E_{\text{kin},n} + E_{\text{pot},n} = -E_{\text{kin},n} \stackrel{(***)}{=} -\frac{1}{2} \mu v_n^2 = -\frac{1}{2} \mu \frac{\hbar^2}{\mu^2} \frac{n^2}{r_n^2}$$

$$r_n = \frac{a_0}{Z} n^2 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{\pi \mu e^2 Z} \Rightarrow E_n = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 \mu} \frac{\pi^2 \mu^2 e^4 Z^2}{\epsilon_0^2 \hbar^4 n^2}$$

$$E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \equiv -Ry^* \frac{Z^2}{n^2}$$

$$E_n = hc\lambda_n^{-1}$$


Rydbergkonstante

$$Ry^* = hcRy = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Ry hängt über μ von Kernmasse m_K ab:

$$Ry(m_K) = Ry_\infty \cdot \frac{\mu}{m_e}$$

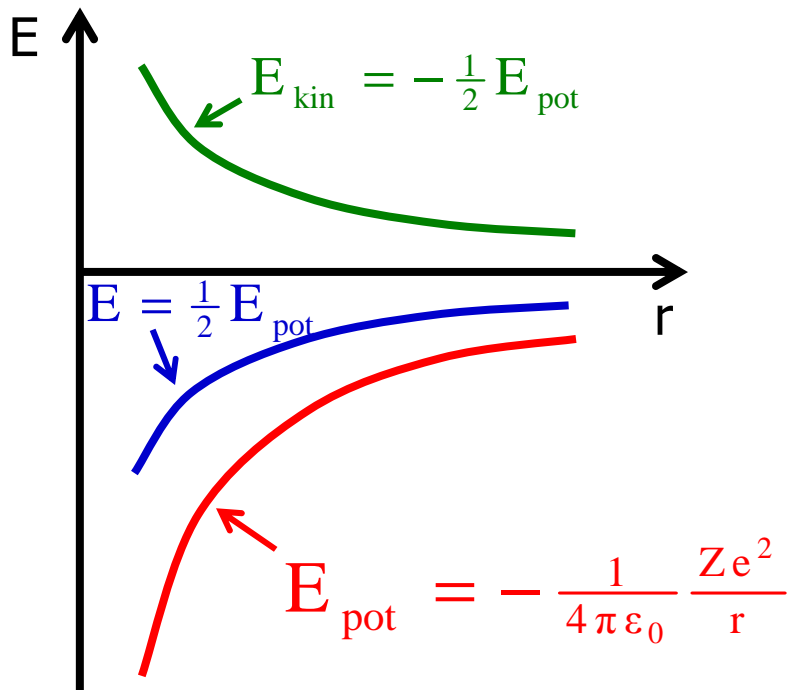
$$Ry_\infty = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c} = 109737,31534 \text{ cm}^{-1}$$

1.3.1 Bohrsches Atommodell



Bemerkung: Bedeutung des Postulats (3)

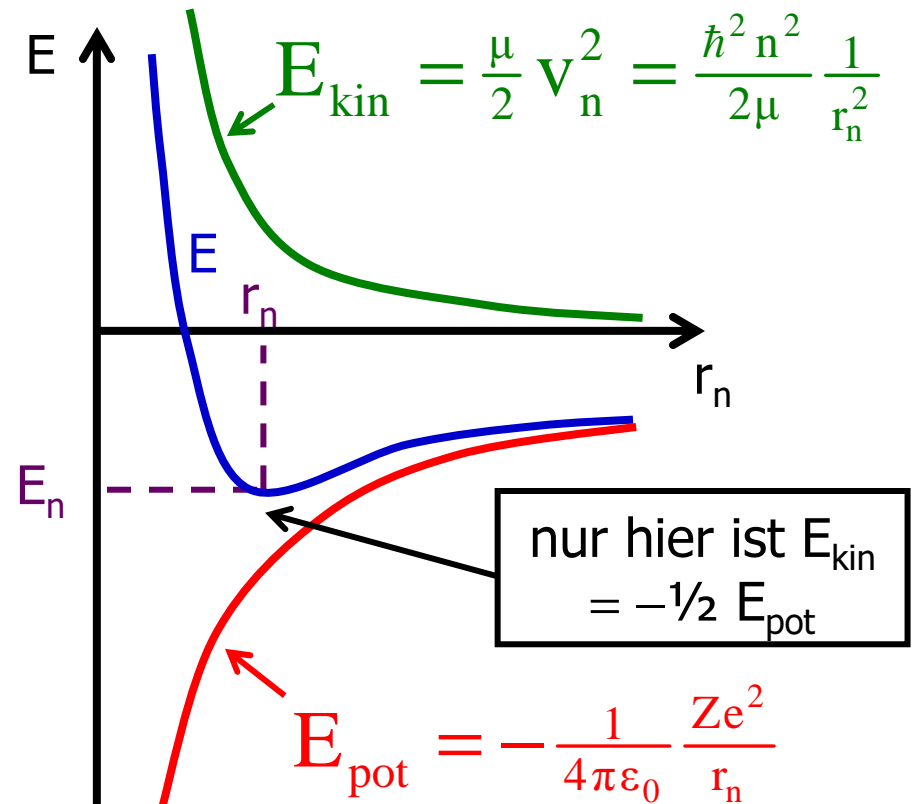
klassisch



Es gibt keinen Zustand minimaler Energie. Das Elektron stürzt in den Kern.

quantenmechanisch

n fest



Es gibt einen Zustand minimaler Energie. Die Elektronenbahn ist stabil.

1.3.1 Bohrsches Atommodell



Bemerkung: Bedeutung von...

Postulat (2): Die Materiewelle des Elektrons ist stationär, d. h. der Kreisumfang ist ein ganzzahliges Vielfaches der de Broglie-Wellenlänge (periodische Randbedingung).

$$2\pi r_n = n\lambda = n \frac{h}{\mu v_n} \quad \Rightarrow \quad v_n = n \frac{\hbar}{\mu r_n}$$

Folgerung: $|\vec{L}| = \mu v_n r_n = n\hbar$

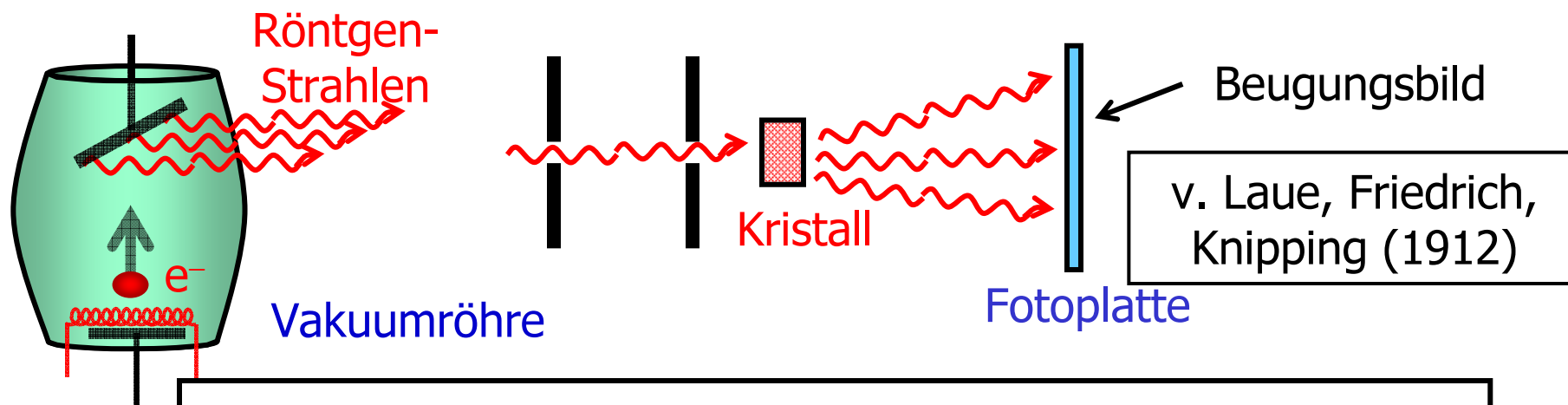
Der (**Bahn-**) **Drehimpuls** des Elektrons (relativ zum Kern) ist in Einheiten von \hbar **quantisiert**.

1.3.2 Welleneigenschaften von Materie



Röntgenbeugung (Max von Laue: Experiment 1912, Nobelpreis: 1914)

- 1912 bekannt: Harte e.m. Strahlung (X , γ) hat Teilchencharakter
- Offene Frage: Hat harte e.m. Strahlung auch Wellencharakter?
- Problem: Wellenlängen harter Strahlung im Å-Bereich. Wie stellt man Beugungsgitter her?
- Max von Laue → Verwende Kristallgitter zur Röntgenbeugung!

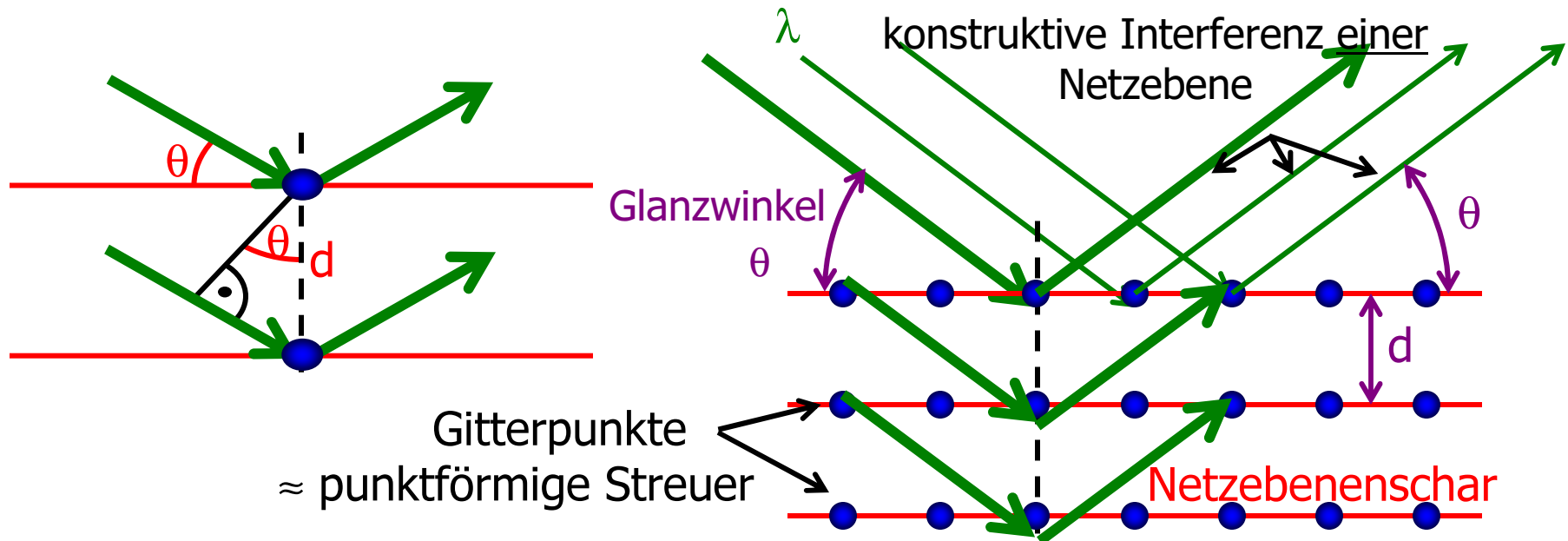


Resultat: a) Welle / Teilchen Dualität der e.m. Strahlung
b) Kristalle haben periodische Raumgitterstruktur

1.3.2 Welleneigenschaften von Materie



Beispiel: Monochromatische Röntgenbeugung (Bragg-Reflexion)



Konstruktive Interferenz aller Netzebenen:

$\lambda, \theta \Rightarrow$ Messung von d
 d, θ fest \Rightarrow Monochromator für λ

Bragg-Bedingung

$$2d \sin \theta = m \lambda$$

$$m = 1, 2, \dots$$

$\lambda > 2 d_{\max} \Rightarrow$ keine Bragg-Reflexe; Medium wird **optisch homogen**.

Typischer Wert: $d_{\max} \approx 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Vergleich: $\lambda_{\text{vis}} \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$

1.3.2. De Broglie-Wellenlänge



Photonen: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$
 $E = \hbar \omega$

...sind e.m.-Wellen $(\omega, \vec{k}) \Rightarrow \omega = c |\vec{k}|$
...und masselose Teilchen $(E, \vec{p}) \Rightarrow E = c |\vec{p}|$

Hypothese: (de-Broglie 1924, Nobelpreis 1929)

Umgekehrt haben auch „Teilchen“ (Elektronen, Atome, Kristalle, Katzen, ...) Wellencharakter mit

$$\vec{k} = \frac{1}{\hbar} \vec{p}$$

$$\omega = \frac{1}{\hbar} E$$

Nichtrelativistische „Teilchen“ der Masse m :

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \frac{1}{\lambda^2} \Rightarrow$$

de-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

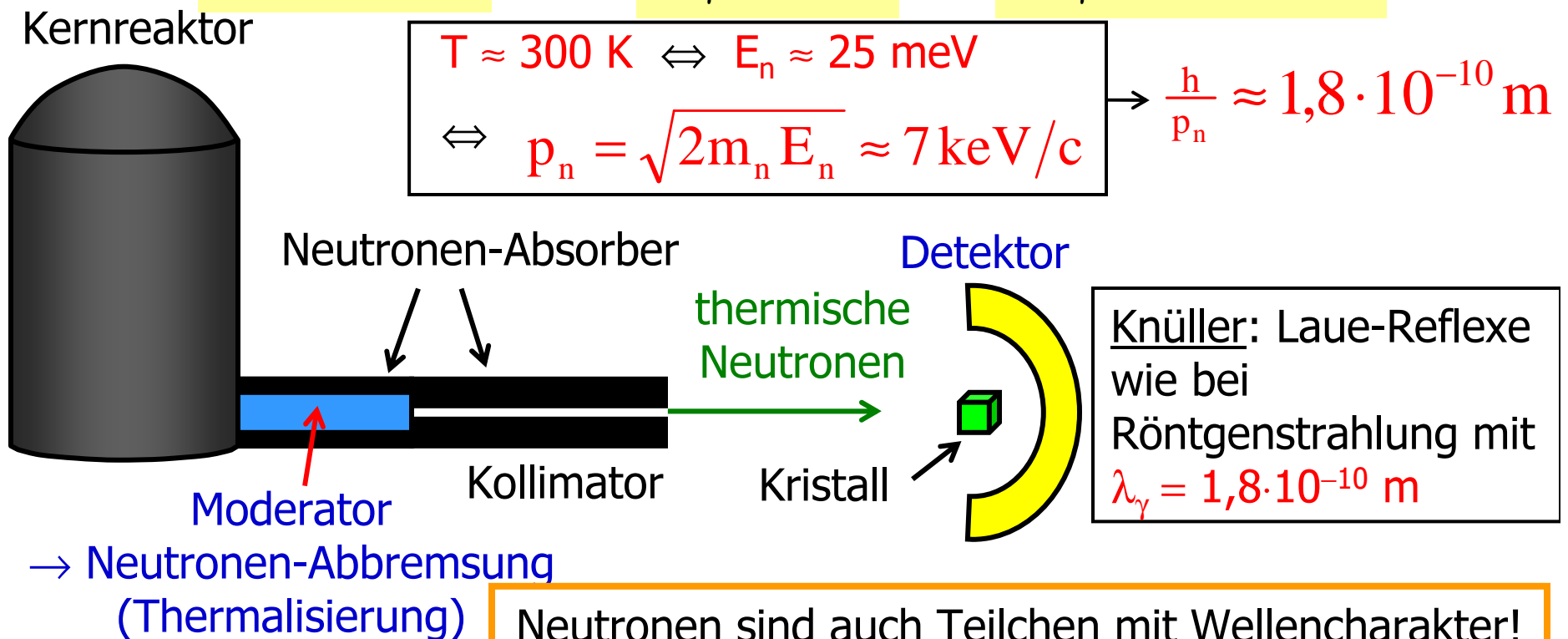
1.3.2 Welleneigenschaften von Materie

Röntgenstrahlung hat sowohl Wellencharakter (Kristall-beugung...) als auch Teilchencharakter (Comptoneffekt,...). Das gilt auch generell für EM Strahlung.

$$E_\gamma = \hbar \omega$$

$$\vec{p}_\gamma = \hbar \vec{k}$$

$$|\vec{p}_\gamma| = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

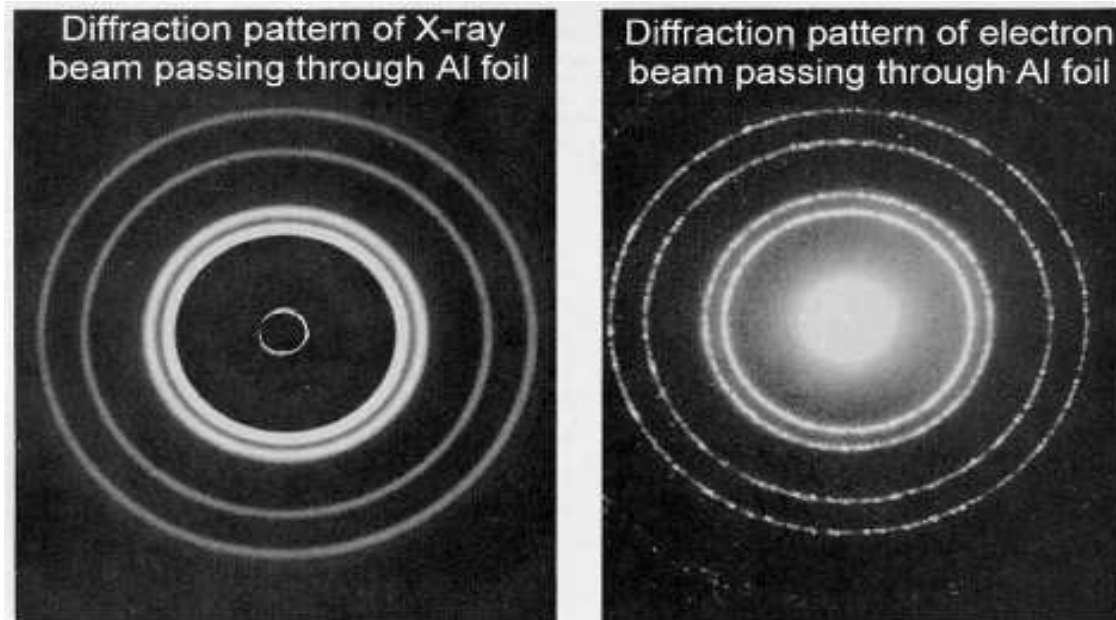


1.3.2 Welleneigenschaften von Materie



... und Elektronen ?

Dito !



Hypothese: Alle „Teilchen“ (Neutrinos, Kerne, Moleküle, Kristalle, Katzen, Planeten, ...) haben Wellencharakter und alle „Kraftfeldwellen“ (elektromagnetisch, Gravitation, ...) haben Teilchencharakter.

Quantentheorie → Teilchen sind Wellen

Quantenfeldtheorie → Kraftfeldwellen sind Teilchen

1.3.2. Elektronenbeugung

$$m_e c^2 = 511 \text{ keV}$$

Beschleunigungsspannung:

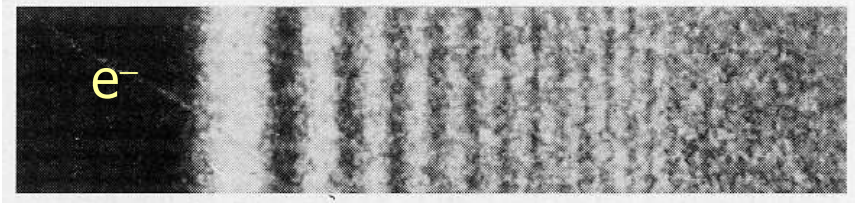
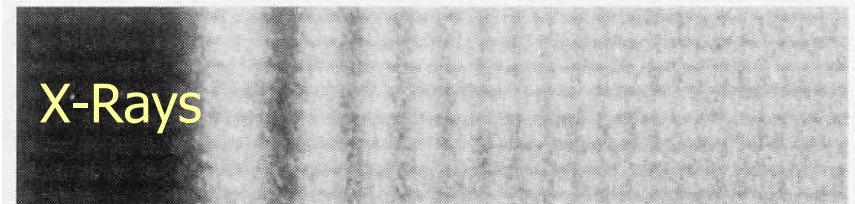
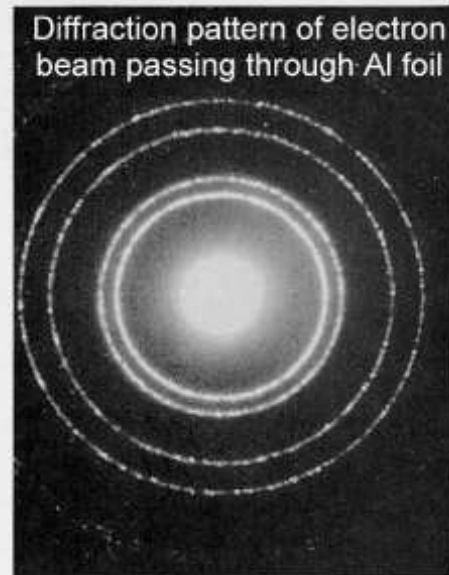
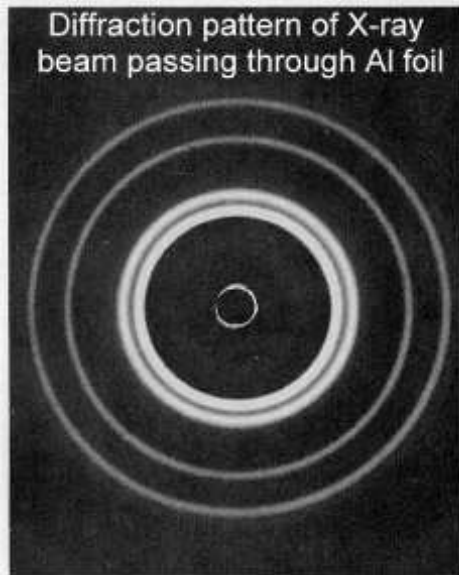
$$U \ll 511 \text{ kV}$$

$$E = eU \Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}} = \frac{1,22 \text{ nm}}{\sqrt{U/V}}$$

$$U = 100 \text{ V} \Rightarrow \lambda = 0,12 \text{ nm}$$

Gitterkonstanten $\approx (0,3 \dots 0,7) \text{ nm}$

Kristallbeugung ist möglich
(Experiment: Davisson, Germer
1926, Nobelpreis 1937)



Kantenbeugung am MgO-Einkristall