

# **Repetitorium zu den Grundlagen der Atomphysik mit Computerprogrammen**

von Oliver Gößwein

# Inhaltsverzeichnis

	Seite
1 Einleitung .....	3
2 Tabellarische Übersicht .....	5
3 Vorgeschichte der Atomphysik .....	7
3.1 Von der Postulierung bis zum Existenzbeweis von Atomen .....	7
3.2 Einige grundlegende quantenphysikalische Phänomene .....	8
3.2.1 Strahlung eines schwarzen Körpers .....	9
3.2.2 Photoelektrischer Effekt.....	9
3.2.3 COMPTONEffekt.....	9
3.2.4 Materiewellen .....	9
4 Atommodelle und ihre Anwendungen.....	10
4.1 RUTHERFORDSches Atommodell und Streuversuche.....	10
4.1.1 RUTHERFORDSches Atommodell.....	10
4.1.2 RUTHERFORD-Streuung .....	11
4.2 Wasserstoffspektrum und BOHRsches Atommodell.....	16
4.2.1 Wasserstoffspektrum.....	16
4.2.2 BOHRsches Atommodell.....	17
4.2.3 Korrespondenzprinzip .....	20
4.2.4 FRANCK-HERTZ-Versuch .....	21
4.2.5 SOMMERFELDSche Erweiterung des BOHRschen Atommodells .....	22
4.2.6 Kritik am BOHRschen Atommodell .....	24
4.3 Das wellenmechanische Modell des Wasserstoffatoms .....	26
4.3.1 Zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Zentralkraftfeld .....	26
4.3.2 Interpretation der Wellenfunktion.....	26
4.3.3 Separationsansatz.....	27
4.3.4 Lösungsfunktionen der Schrödingergleichung.....	28
4.3.5 Bahndrehimpuls des Elektrons .....	33
4.4 Feinstruktur des Wasserstoffatoms .....	36
4.4.1 Berücksichtigung relativistischer Effekte .....	36
4.4.2 Magnetisches Moment der Bahnbewegung.....	37
4.4.3 Spin des Elektrons .....	38
4.4.4 Spin-Bahn-Kopplung .....	40
4.4.5 Energie der Spin-Bahn-Kopplung.....	42
4.4.6 Energieniveaus und Auswahlregeln für das Einelektronensystem nach der Quantentheorie .....	44
5 Zusammenfassung.....	47
Anhang: Hinweise zur Installation der Programme .....	48
Literaturverzeichnis .....	49

# 1 Einleitung

Die Atomphysik ist in unserem Jahrhundert zu einem der bedeutendsten Teilgebiete der Physik herangewachsen. Erkenntnisse aus diesem Gebiet wirkten sich auch auf andere Bereiche der Naturwissenschaften aus. Vielfach ist ein Studium dieser anderen Disziplinen nicht ohne Grundkenntnisse der Physik der Atomhülle möglich. Auch bei den Staatsexamensaufgaben aus der Experimentellen Physik bildet die Atomphysik einen Schwerpunkt.

Nach meinen Erfahrungen stellt die Beschäftigung mit einem Computer für Studenten der Physik keine Hemmschwelle dar, sondern wirkt eher motivierend auf sie. Der Computer erlaubt die animierte Darstellung komplexer Zusammenhänge und ermöglicht das Wechselwirken zwischen Benutzer und Programm, wie dies bei einem gedruckten Lehrbuch nicht der Fall sein kann. Der Einsatz eines Computerprogramms beim Lernen bietet also für dieses Fachgebiet eine hervorragende Gelegenheit den Leser zu aktivieren. Im Rahmen dieser Arbeit wurden deshalb drei Computerprogramme **Rutherford**, **Bohr** und **Schrödinger** entwickelt, die dem Studenten das Verstehen des zugehörigen Lerninhalts aus der Atomphysik erleichtern sollen. Die Lauffähigkeit der Programme ist sowohl unter Windows 3.1x als auch unter Windows 95 ausführlich getestet. Ein mathematischer Coprozessor ist nicht erforderlich, für einen angemessenen Programmablauf aber wünschenswert. Die Benutzung aller Programme setzt allerdings die Vertrautheit mit der Bedienung von Windows-Applikationen voraus.

Untersuchungen mit Studienanfängern von Dr. RAIMUND GIRWIDZ haben jedoch gezeigt, daß die Möglichkeiten der Computerprogramme, die ohne entsprechende begleitende Lektüre erscheinen, oft nicht genutzt werden. Die Ursache dafür liegt zum einen darin, daß den Benutzern teilweise der relevante theoretische Hintergrund fehlt, oder zum anderen darin, daß sinnvolle Fragestellungen, die mit den Programmen gelöst werden könnten, den Anwendern nicht einfallen. Deshalb wurde ergänzend zu den Computerprogrammen ein Repetitorium geschrieben, das versucht die Grundlagen der Atomphysik komprimiert darzustellen.

Es basiert auf dem Vorlesungsskript von Herrn Prof. Dr. HANS-PETER STEINRÜCK zur Vorlesung Einführung in die Physik III und kann deshalb als Unterstützung für diese Vorlesung, aber etwa auch für die Vorlesung Moderne Physik I benutzt werden. Als besondere Verständnishilfen werden dann innerhalb des Repetitoriums als Anregung zu verstehende Arbeitsaufträge erteilt, die mit den entsprechenden Computerprogrammen zu bearbeiten sind und den zurückliegenden Lerninhalt veranschaulichen und auch neue Aspekte beitragen. Auf diese Weise wird erhofft, daß es zu einer vertiefenden und weiterführenden Beschäftigung mit dem jeweils behandelten Stoff kommt. Für jedes Programm gibt es außerdem eine Hilfedatei (Aufruf mit F1), die dem Benutzer die Funktionsweise der Schalter und die Einstellungsmöglichkeiten erläutert. Eine Hilfedatei-Version dieses Repetitoriums kann in den Programmen ebenfalls aufgerufen werden (Strg + F1). Darüberhinaus wird am Ende jedes Absatzes auch auf die entsprechende weiterführende Literatur verwiesen.

Eine Tabelle im zweiten Kapitel gibt sowohl den Studenten als auch Dozenten einen schnelle Übersicht über Lernziele, Lerninhalte und verwendete Hilfsmittel im Repetitorium. Im dritten Kapitel wird kurz die Vorgeschichte der Atomphysik skizziert und es werden einige bedeutende Quantenphänomene angeführt. Im Hauptkapitel werden dann verschiedene Atommodelle und ihre Anwendungen vorgestellt. Da die quantenmechanischen Rechnungen und Herleitungen zum Teil sehr komplex und umfangreich sind, geht dem Anfänger dabei leicht der rote Faden oder noch schlimmer der physikalische Hintergrund verloren. Zum wellenmechanischen

Atommodell werden daher nur die physikalisch wichtigen Ansätze und Ideen beschrieben. Abgeschlossen wird das Repetitorium durch eine Betrachtung der Feinstrukturen im Wasserstoffspektrum.

Im Anhang befinden sich Installationshinweise zu Computerprogrammen.

## 2 Tabellarische Übersicht

Lernziele	Lerninhalte	Hilfsmittel
Vorgeschichte der Atomphysik	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ursprung des Wortes Atom</li> <li>• Nachweis der Existenz von Atomen und ihre ungefähre Größe</li> </ul>	
Quantenphänomene	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Strahlung schwarzer Körper</li> <li>• Photoelektrischer Effekt</li> <li>• COMPTONEffekt</li> <li>• Materiewellen</li> </ul>	
RUTHERFORDsches Atommodell RUTHERFORD-Streuung	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Versuchsaufbau und Durchführung</li> <li>• Modellannahmen</li> <li>• Streuformel</li> <li>• Experimentelle Befunde</li> <li>• Grenzen</li> <li>• Anwendung</li> </ul>	⇒ Programm <b>Rutherford: (Trickfilm)</b> ⇒ Programm <b>Rutherford: (Flugbahn)</b> ⇒ Folienvorlage: <b>Atomskizze von RUTHERFORD</b> ⇒ Programm <b>Rutherford: (Simulation)</b>
Wasserstoffspektrum	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Serienstruktur</li> <li>• RYDBERGformel</li> </ul>	⇒ Programm <b>Bohr: Fenster Linenspektrum</b>
BOHRsches Atommodell	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Postulate</li> <li>• Ergebnisse</li> <li>• Berücksichtigung der Mitbewegung des Atomkerns</li> <li>• Vergleich mit experimentellen Befunden</li> <li>• Korrespondenzprinzip</li> <li>• FRANCK-HERTZ-Versuch</li> <li>• SOMMERFELDSche Erweiterung des BOHRschen Atommodells</li> <li>• Auswahlregeln</li> <li>• Kritik an der BOHR-SOMMERFELDSchen Theorie</li> </ul>	⇒ Programm <b>Bohr</b> ⇒ Programm <b>Bohr: Option Mitbewegung des Kerns</b>  ⇒ Programm <b>Bohr: Modell Sommerfeld</b>  ⇒ Programm <b>Bohr: Option Auswahlregeln</b>

Lernziele	Lerninhalte	Hilfsmittel
Wellenmechanisches Atommodell	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Zeitunabhängige SCHRÖDINGERgleichung für ein Zentralfeld</li> <li>• Interpretation der Wellenfunktion</li> <li>• Separationsansatz Lösungsfunktionen: (zugeordnete) Kugelflächenfunktionen, Radialfunktion</li> <li>• Gesamtlösung</li> <li>• Aufenthaltswahrscheinlichkeit</li> <li>• Bahndrehimpuls des Elektrons</li> </ul>	<p>⇒ Programm <b>Schrödinger</b>  Fenster (<b>zugeordnete</b>) <b>Kugelflächenfunktionen</b>; Fenster <b>Radialfunktion</b></p> <p>⇒ Fenster <b>Punktdichtedarstellung, Farbdarstellung</b> und <b>dreidimensionale Darstellung</b></p> <p>⇒ Fenster <b>Radialfunktion</b> mit Einstellung <math>r^2 R^2</math></p>
Feinstruktur des Wasserstoffatoms	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Berücksichtigung relativistischer Effekte</li> <li>• Magnetisches Moment der Bahnbewegung des Elektrons</li> <li>• Spin des Elektrons</li> <li>• Spin-Bahn-Kopplung</li> <li>• Magnetische Momente, LANDÉsche g-Faktoren</li> <li>• Energieniveaus und Auswahlregeln für das Einelektronensystem nach der Quantentheorie</li> </ul>	<p>⇒ Folienvorlage: <b>STERN-GERLACH-Versuch</b></p> <p>⇒ Folienvorlage: <b><i>l</i>-s-Kopplung</b></p> <p>⇒ Folienvorlage: <b>Addition der magnetischen Momente</b></p>

Bem.: Die Folienvorlagen befinden sich im Anhang C hinter dem Foliensatz zur Vorlesung Einführung in die Physik III.

*„Wenn in einer Sintflut alle wissenschaftlichen Kenntnisse zerstört würden und nur ein Satz an die nächste Generation weitergereicht werden sollte, welche Aussage würde dann die größte Aussage in den wenigsten Worten enthalten? Ich bin überzeugt, daß dies die Atomhypothese (oder welchen Namen sie auch immer hat) wäre“*

FEYNMAN, [1]

### 3 Vorgeschichte der Atomphysik

#### 3.1 Von der Postulierung bis zum Existenzbeweis von Atomen

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über das Wissen über den Atomismus bis kurz nach Anfang des 20. Jahrhunderts, bevor es also zur Entwicklung von Modellen für den Aufbau von Atomen kam.

##### *Atomhypothese*

Die griechischen Philosophen LEUKIPP und DEMOKRIT formulierten im 5. Jahrhundert vor Christus bereits den Gedanken, daß alles in der Welt aus kleinsten unteilbaren Teilchen, den Atomen (griech. atomos: „ungeschnitten, unteilbar“), aufgebaut sein muß und daß es sonst nur „Leere“ gebe. In den darauf folgenden Jahrtausenden ergaben sich viele verschiedene Theorien über die Zusammensetzung der Materie, von denen sich zunächst jedoch keine zwingend durchsetzen konnte. (vgl. [2])

##### *Erste Gesetzmäßigkeiten*

Die ersten quantitativen Zusammenhänge in der Atomistik erkannte der Engländer DALTON (1766-1844) und formulierte für chemische Reaktionen das **Gesetz von der Erhaltung der Masse**, das **Gesetz der konstanten Proportionen** und das **Gesetz der multiplen Proportionen**. (vgl. [3])

AVOGADRO stellte die Hypothese auf, daß gleiche Gasvolumina die gleiche Anzahl von Molekülen enthalten. Eine erste Abschätzung für diese Konstante wurde von LOSCHMIDT (1821-1895) mit  $2 \cdot 10^{18}$  Molekülen pro  $\text{cm}^3$  bei Normalbedingungen angegeben. Das entspricht einer Zahl von  $4 \cdot 10^{23}$  Molekülen pro mol. Dabei ist **1 mol** die Stoffmenge eines Systems, das aus ebenso vielen Atomen, Molekülen oder Ionen besteht wie in 12g des reinen Kohlenstoffisotops  $^{12}\text{C}$  (vgl. [4]). Genauere Messungen haben für die **AVOGADRO-Konstante**  $N_A = 6,02205 \cdot 10^{23}$  Moleküle pro mol ergeben. Indem man die Gewichte gleicher Stoffmengen mit Hilfe des Gesetzes der multiplen Proportionen von verschiedenen Elementen miteinander verglich, war es möglich, relative Atommassen  $A_{\text{rel}}$  und eine **atomare Masseneinheit u** einzuführen. Heute ist 1 u definiert als 1/12 der Masse eines neutralen Kohlenstoff-Atoms mit der Kernladungszahl 6 und der Massenzahl 12. (vgl. [3])

Durch die Kenntnis der AVOGADRO-Konstanten war es auch erstmals möglich eine Abschätzung für die Größe eines Atoms zu erhalten.

Bsp.: 1 kmol Kupfer hat die Masse 63,5 kg. Die Dichte beträgt 8,9 kg/dm<sup>3</sup>. Man erhält für das molare Volumen  $V_m$ :

$$V_m = \frac{63,5 \text{ kg} / \text{kmol}}{8,9 \text{ kg} / \text{dm}^3} = 7,1 \text{ dm}^3 / \text{kmol}$$

Nimmt man einmal vereinfachend an, daß die Kupferatome würfelförmig sind (siehe Abbildung 1), so erhält man das Volumen eines einzigen Atoms indem man  $V_m$  durch  $N_A$  teilt, da sich in einem kmol  $6,02205 \cdot 10^{26}$  Moleküle befinden. Das Volumen eines einzigen Elementarwürfels ergibt sich dann zu  $V_I = 1,2 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$ . Für die Kantenlänge eines Elementarwürfels und damit für den ungefähren Atomdurchmesser folgt daraus

$$d = \sqrt[3]{1,2 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3} = 2,3 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

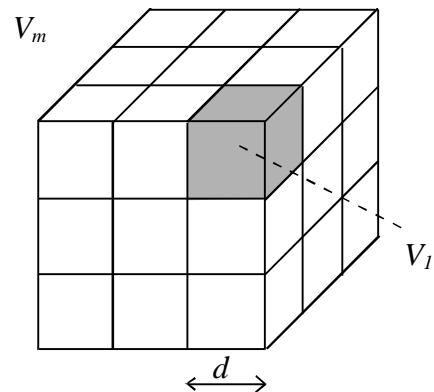


Abbildung 1: Zum „Elementarwürfel“  
(vgl. [3])

Zum Vergleich: Aus der Gitterkonstante (Festkörperphysik) von Kupfer läßt der Abstands eines Kupferatoms zu seinen nächsten Nachbarn berechnen. Er beträgt ungefähr  $2,54 \cdot 10^{-10} \text{ m}$  (vgl. [5]).

Die Atomdurchmesser sind also von der Größenordnung  $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ Å}$ . (vgl. [3])

### Elektrizität in den Atomen

FARADAY (1791-1867) fand mit seinen beiden **Gesetzen der Elektrolyse** einen Zusammenhang zwischen den elektrischen Eigenschaften von Elementen und ihrer relativen Atommasse. Dabei erwies sich, daß die elektrische Ladung gequantelt ist.

J. J. THOMSON (1856-1940) entdeckte 1897, daß Atome doch nicht unteilbar sind, sondern daß man ihnen Teilchen negativer Elektrizität entreißen kann. Diese Teilchen wurden später **Elektronen** genannt. (vgl. [3])

### Direkter Nachweis der Atome

Obwohl die von Dalton und Faraday erkannten Zusammenhänge auf die Existenz von Atomen schließen lassen, waren sie jedoch nur indirekte Hinweise. Ein direkter Beweis dafür, daß sich Materie aus Atomen zusammensetzt, gelang erst 1905 mit Hilfe der **BROWNSchen Bewegung**. Einstein konnte mit einer theoretischen Arbeit, die die Atomhypothese als Grundlage hatte, als einziger die Temperaturabhängigkeit der BROWNSchen Bewegung schlüssig erklären, woran zuvor alle anderen Erklärungsversuche gescheitert waren. (vgl. [2])

## 3.2 Einige grundlegende quantenphysikalische Phänomene

In diesem Abschnitt sind kurzgefaßt einige historisch wichtige Erkenntnisse zusammengestellt, die zeigen, daß man bestimmte atomistische Phänomene mit den Annahmen der klassischen Physik nicht erklären kann, denn gerade sie waren für die Entwicklung der Atommodelle von besonderer Bedeutung.



### 3.2.1 Strahlung eines schwarzen Körpers

Im Jahre 1900 gelang es PLANCK (1858-1947) die **Strahlung eines schwarzen Körpers** zu erklären. Der wichtigste Schritt dabei war sicherlich die Einführung der sogenannten **Quantenhypothese**. Diese besagt, daß ein Oszillator nicht mit beliebiger Energie schwingen kann, sondern nur diskrete Werte der Form  $E_n = n \times h \cdot \nu$  annehmen kann. Dabei ist  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ,  $h = 6,626176 \times 10^{-34} \text{ Js}$  das PLANCKsche Wirkungsquantum, eine von PLANCK neu eingeführte Naturkonstante, und  $\nu$  die Frequenz der Strahlung.

Mit noch einigen anderen Postulaten konnte PLANCK eine Strahlungsformel herleiten, die sich mit allen experimentellen Ergebnissen deckt. Alle klassischen Erklärungsversuche (RAYLEIGH-JEANS bzw. WIEN) waren daran gescheitert, das Verhalten bei hohen bzw. niedrigen Frequenzen vorauszusagen (vgl. [6]).

### 3.2.2 Photoelektrischer Effekt

1905 ging EINSTEIN (1879-1955) mit der Formulierung der **Lichtquantenhypothese** jedoch noch weiter. Diese besagt u. a., daß nicht allein der strahlende Oszillator (vgl. Planck) nur bestimmte Energiezustände annehmen kann, sondern daß die Strahlung selbst bezüglich der Energie eine gequantelte Struktur hat. Die Strahlung setzt sich nämlich aus Energiequanten sogenannten Photonen zusammen, zwischen deren Energie und Frequenz der Zusammenhang  $E = h \times \nu$  besteht. Durch die Lichtquantenhypothese konnte der schon vorher untersuchte, aber unaufgeklärt gebliebene, **Photoeffekt** verstanden werden.

### 3.2.3 COMPTONEffekt

1922 hatte COMPTON bei der Untersuchung von Kristallen, die er mit Röntgenstrahlen durchleuchtete, eine Streustrahlung festgestellt, deren Wellenlänge größer war als die der einfallenden Strahlung. COMPTON konnte diesen Effekt dadurch deuten, daß die einfallenden Strahlen (= Photonen) mit Elektronen elastisch stoßen, und diesen so Energie übertragen, die sich in einem Energieverlust der Photonen (= Zunahme der Wellenlänge) bemerkbar macht. Dabei ordnete er den **Photonen** den **Impuls**  $p = h\nu/c$  zu. Setzt man diese Beziehung in den Energie und den Impulserhaltungssatz ein, so kann man die beobachtete Wellenlängenverschiebung in Abhängigkeit vom Streuwinkel der Strahlung korrekt vorhersagen.

Klassisch wäre keine Wellenlängenänderung der Strahlung, sondern eine Abnahme der Intensität zu erwarten gewesen.

### 3.2.4 Materiewellen

Nachdem es gelungen war, Lichtwellen als Teilchen zu beschreiben, kam DE BROGLIE 1924 auf die Idee, bewegter Materie auch Welleneigenschaften zuzuschreiben. Dabei sollte den **Teilchen** die **Wellenlänge**  $\lambda = h/p$  zugeordnet werden. Diese Vermutung konnten 1927 DAVISSON und GERMER mit der Beugung von Elektronen an Kristallen bestätigen. Es zeigte sich nämlich, daß bei der Beugung von Elektronen ein ähnliches Interferenzmuster entsteht wie bei der Beugung von Röntgenstrahlen. Dies ist aber in einem Teilchenbild der Materie nicht erklärbar. Später konnten analoge Experimente mit Neutronen und Protonen gemacht werden, die alle die DE BROGLIEsche Beziehung nachwiesen.

*„Seit der Entdeckung der Spektralanalyse konnte kein Kundiger zweifeln, daß das Problem des Atoms gelöst sein würde, wenn man gelernt hätte, die Sprache der Spektren zu verstehen“*

SOMMERFELD, [7]

## 4 Atommodelle und ihre Anwendungen

Wie jedes Modell in der Physik hat auch ein Atommodell nur einen vorläufigen, unvollkommenen Charakter. Es kann prinzipiell nur einen bestimmten Ausschnitt der Wirklichkeit darstellen und seine Grenzen sind manchmal von Anfang an klar oder stellen sich erst im Laufe der Zeit heraus.

Die ersten Modelle für den inneren Aufbau der Atome wurden von THOMSON und LENARD entwickelt, bewährten sich jedoch in der Folgezeit nicht. In diesem Kapitel werden, in der historischen Reihenfolge ihrer Entstehung, Atommodelle beschrieben, die - trotz einiger Unzulänglichkeiten und Einschränkungen - heute noch Verwendung finden. So kann es je nach Anwendungsgebiet genügen, Rechnungen mit einem vergleichsweise einfachen, mathematisch relativ leicht handhabbaren Modell durchzuführen, als mit einem exakteren, aber dafür komplexeren Modell.

### 4.1 RUTHERFORDSches Atommodell und Streuversuche

#### 4.1.1 RUTHERFORDSches Atommodell

##### *Experimentelle Vorgeschichte*

Nach einem Vorschlag von RUTHERFORD untersuchten GEIGER und MARSDEN die Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an einer dünnen Goldfolie (Abbildung 2 zeigt einen späteren Aufbau). Ein radioaktives Präparat R befindet sich in einem evakuierten Raum und liefert  $\alpha$ -Teilchen, die an der Folie F gestreut werden. Unter einem Mikroskop M werden die Szintillationen auf dem Schirm S beobachtet. Die ganze Anordnung ist auf einer Platte C drehbar angeordnet. Bei der Versuchsdurchführung wurden dann die Szintillationen gezählt, die unter einem bestimmten Blickwinkel registriert werden. Unerwarteterweise waren auch unter großen Ablenkungswinkeln noch  $\alpha$ -Teilchen festzustellen. (vgl. [8])

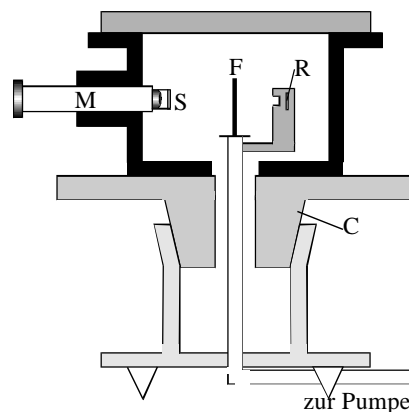


Abbildung 2: Versuchsaufbau des GEIGER-MARSDEN-Experiments (aus [8])

##### *Modellannahmen*

Angeregt durch diese ersten Ergebnisse entwickelte RUTHERFORD ein **Atommodell** (siehe Abbildung 3), das von den folgenden Annahmen ausgeht:

- Das Atom besteht aus einer Hülle und einem kleinen (idealisiert punktförmigen), massiven Kern, der fast die ganze Masse des Atoms beinhaltet.
- Um den positiv geladenen Kern gibt es ein COULOMB-Feld; die negativ geladenen Elektronen bilden die Atomhülle.

- Die Anzahl positiver Elementarladungen im Kern (=Kernladungszahl) ist ebenso groß wie die Zahl der Elektronen des ganzen Atoms, so daß es nach außen hin neutral erscheint. (vgl. [6])

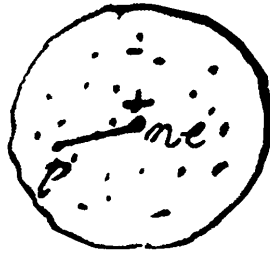


Abbildung 3: Originalskizze von Rutherford [9, S. 128]

Der Kern trägt die Ladung  $nxe$  und ist umgeben von Elektronen.

Die Skizze diente als Überlegungsfigur zur Herleitung des elektrischen Feldes im Punkt  $p$ .

### Probleme

Über die Verteilung der Elektronen macht das RUTHERFORDSCHE Modell keine Aussagen. Nimmt man jedoch an, daß die klassischen elektrodynamischen Gesetze auch für gebundene Elektronen gelten, dann bewegen sich diese ähnlich Planetenbahnen um den positiven Kern. Als beschleunigte Ladungen müßten die Elektronen somit ständig Strahlung aussenden und wegen dieses Energieverlustes innerhalb von sehr kurzer Zeit in den Kern stürzen. RUTHERFORD war das Problem der „Instabilität“ seines Atommodells sehr wohl bewußt. Eine Erklärung dafür, warum die Gesetze der klassischen Elektrodynamik für ein Elektron im Atom nicht gelten sollten, konnte er jedoch nicht geben. (vgl. [9], S.322ff)

## 4.1.2 RUTHERFORD-Streuung

### Grundannahmen

Um exakte Ergebnisse zu erhalten, mußten GEIGER und MARSDEN die oben bereits erwähnten Streumessungen jahrelang fortsetzen. Ihre Resultate bestätigten schließlich die Grundannahmen des RUTHERFORDschen Atommodells, denn RUTHERFORD konnte unter Zugrundelegung seines Modells eine Formel ableiten, die das beobachtete Streuverhalten richtig vorhersagt. Zur Herleitung dieser Streuformel werden folgende vereinfachende Annahmen gemacht:

- Sowohl der Atomkern als auch das  $\alpha$ -Teilchen sind punktförmig.
- Die Abschirmung der Kernladung durch die Elektronen kann vernachlässigt werden, da die ausschlaggebende Ablenkung der  $\alpha$ -Teilchen tief im Atominneren stattfindet.
- Zwischen Streuteilchen und Kern mit Ladungszahl  $Z$  findet nur elektrostatische Wechselwirkung statt. Für das elektrische Feld  $E$  gilt also:

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z \cdot e}{r^3} \cdot \vec{r} \quad (1)$$

- Der Kern ruht beim Streuvorgang. Diese Vereinfachung ist sinnvoll, da die Masse  $M$  eines schweren (Gold-)Kerns viel größer als die Masse  $m$  des  $\alpha$ -Teilchens ist, so daß man  $M \approx \infty$  setzen kann.
- Die  $\alpha$ -Teilchen werden nur einmal gestreut. (vgl. [6])

**Ableitung der Streuformel**

Zur Berechnung der Abhängigkeit des Streuwinkels  $J$  vom Stoßparameter  $b$ , der Anfangsgeschwindigkeit  $v_0$  des  $\alpha$ -Teilchens, der Ladung  $2e$  des  $\alpha$ -Teilchens und der Ladung  $Z \cdot e$  des Streuteilchens (siehe Abbildung 4) benutzt man den Energieerhaltungssatz und den Drehimpulserhaltungssatz (Zentralkraftproblem mit  $F \propto r^{-2}$ ).

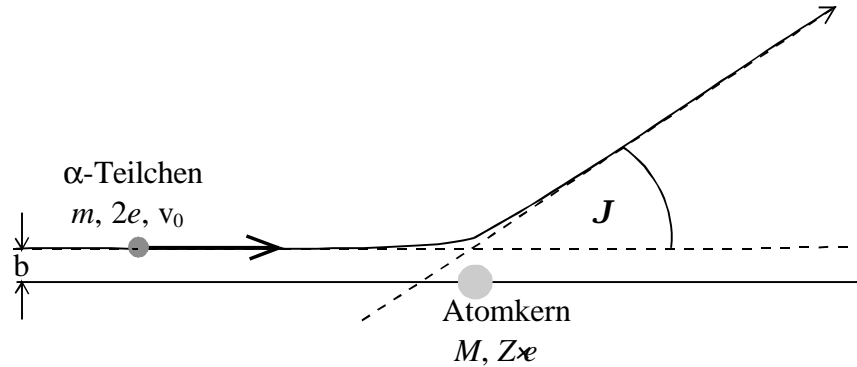


Abbildung 4: Streugeometrie

Es ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen Ablenkwinkel  $J$  und Stoßparameter  $b$ :

$$b = \frac{Z \cdot e^2}{4p e_0} \cdot \frac{1}{\frac{1}{2} m v_0^2} \cdot \cot(J/2) \quad (2)$$

Beim Experiment nimmt der Szintillationszähler S von der Folie F aus gesehen stets den Raumwinkel  $d\Omega$  ein und wird in einer Ebene (hier angedeutet durch den Ring R) geschwenkt (Abbildung 5). Alle unter dem Winkel  $J$  abgelenkten Teilchen fliegen durch das Raumwinkelement  $dW^I$ . Der Szintillationszähler stellt aber nur einen Ausschnitt aus dieser Kreisfläche dar. Es werden also von all den Teilchen mit Streuwinkel  $J$  nur jeweils diejenigen registriert, die auch noch in den Raumwinkel  $dW$  (Szintillationszähler) abgelenkt werden. Aus weiteren Überlegungen ergibt sich, daß die Anzahl der gestreuten Teilchen proportional zur Dicke  $D$  und zur Atomkonzentration  $N$  der Streufolie ist. Berücksichtigt man dies alles (vgl. [6]), so erhält man nach etwas längerer Rechnung die sogenannte **RUTHERFORDsche Streuformel**, die das Verhältnis der in einem Raumwinkel  $dW$  unter dem Winkel  $J$  registrierten  $\alpha$ -Teilchenzahl  $dn$  zur Gesamtanzahl  $n$  der von der radioaktiven Quelle ausgesendeten Teilchen angibt:

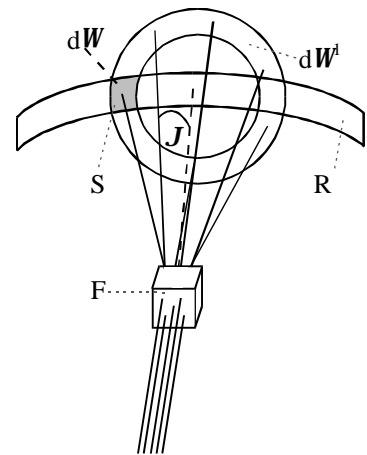


Abbildung 5: Nur die unter dem Winkel  $J$  in den Raumwinkel  $dW$  abgelenkten  $\alpha$ -Teilchen werden tatsächlich registriert.

$$\frac{dn(J, dW)}{n} = \frac{Z^2 e^4 D \cdot N}{(4p e_0)^2 \cdot m^2 v_0^4 \cdot \sin^4(J/2)} dW \quad (3)$$

mit:  $Z$ : Kernladungszahl des Streukerns  
 $e$ : Elementarladung  
 $D$ : Dicke der Streufolie  
 $N$ : Atomkonzentration in der Folie (Atome/m<sup>3</sup>)

$m$ : Masse des  $\alpha$ -Teilchens  
 $v$ : Geschwindigkeit des  $\alpha$ -Teilchens  
 $J$ : Streuwinkel

Der Bruchteil  $dn(J,dW)/n$  der unter dem Winkel  $J$  auf den Schirm abgelenkten Teilchen ist also proportional zum Quadrat der Kernladungszahl, aber indirekt proportional zum Quadrat der kinetischen Energie. Die  $\sin^4(J/2)$ -Abhängigkeit im Nenner ist charakteristisch für die Streuung an einem  $1/r$ -Potential (hier speziell: COULOMB-Potential)

#### COMPUTERPROGRAMM "RUTHERFORD"

Starten Sie das Programm **Rutherford**

##### **Versuchsablauf**

Machen Sie sich den Ablauf des Experiments nochmals mit dem **Programmteil Trickfilm** klar.

Vorsicht! Das dargestellte Streuverhalten ist nicht originalgetreu. Große Ablenkwinkel treten aus Demonstrationsgründen häufiger auf als im realen Experiment zu erwarten wäre.

#### **Experimentelle Befunde**

Die Meßergebnisse von GEIGER und MARSDEN stimmten auch noch bei  $\alpha$ -Teilchen der kinetischen Energie 5 MeV und Streuwinkeln von  $150^\circ$  mit der Streuformel überein. Ein solches  $\alpha$ -Teilchen nähert sich dem in der Formel als punktförmig angenommenen Zentrum der Ladung bis auf ungefähr  $10^{-14}$  m. Würde der Kern eine größere Ausdehnung als  $10^{-14}$  m besitzen, so wäre durch das Eindringen des  $\alpha$ -Teilchens in den Kern eine Abweichung vom COULOMBSchen Kraftgesetz und damit von der Streuformel zu erwarten (anomale RUTHERFORD-Streuung). Da diese jedoch ausbleibt, darf man schließen, daß die Modellannahmen berechtigt waren. Das Atom besitzt also einen Kern, der die ganze positive Ladung, sowie fast die gesamte Masse des Atoms beinhaltet und dessen Radius kleiner als  $10^{-14}$  m ist. (vgl. [6])

#### COMPUTERPROGRAMM "RUTHERFORD"

Das Programm berücksichtigt bei der Berechnung der Flugbahnen nur die elektrostatische Abstoßung zwischen  $\alpha$ -Teilchen und Atomkern.

##### **Aussehen der Flugbahnen**

Starten Sie den Programmteil Flugbahn (**Datei@Flugbahn** oder **F6**) und lassen Sie sich verschiedene Flugbahnen zeichnen. Wie ändern sich die Flugbahnen bei Variation der Energie der  $\alpha$ -Teilchen bzw. Veränderung der Kernladungszahl? Benutzen Sie verschiedene Zeichenfarben und Strichdicken, um die Unterschiede deutlich zu machen.

##### **Abschätzen des Kernradius**

Stellen Sie die **Energie** des  $\alpha$ -Teilchens auf **5 MeV** ein, wählen Sie die **Kernladungszahl 79** und versuchen Sie einen **Streuwinkel** von  $J = 150^\circ$  zu erzeugen. Wie nahe kommt das Teilchen dem Ladungszentrum? Welche Abschätzung kann man für den Kernradius erhalten, wenn man weiß, daß die experimentellen Ergebnisse für diese  $\alpha$ -Teilchen noch mit den von der Streuformel vorhergesagten Ergebnissen übereinstimmen? Den minimalen Abstand  $\alpha$ -Teilchen - Streuzentrum können Sie mit dem Hilfsmittel **Kreisradius** (Bedienfeld) bestimmen.

### Einige Grenzen

Die von der Streuformel vorhergesagten Ergebnisse weichen von den experimentellen natürlich dann ab, wenn der Streuwinkel des  $\alpha$ -Teilchens sehr klein ist, wenn also das Teilchen in „größerer“ Entfernung den Kern passiert. Der Abschirmeffekt der Elektronen ist dann nicht mehr zu vernachlässigen. Bei der Ableitung der Streuformel wurde außerdem  $\alpha$ -Teilchen beliebig große Streuparameter haben können. Im realen Experiment kann jedoch der Streuparameter nie größer als die halbe Gitterkonstante des beschossenen Materials werden.

Steigert man die Energie der  $\alpha$ -Teilchen und vergleicht die Versuchsergebnisse für konstanten Streuwinkel mit den Vorhersagen der RUTHERFORDschen Streuformel (Abbildung 6), so stellt man ab einem gewissen Schwellenwert der Energie deutliche Diskrepanzen fest. Ihre Ursache liegt in den extrem kurzreichweitigen Kernkräften (Reichweite  $\approx 2\text{-}3\text{ fm}$ ). Diese rufen durch ihre anziehende Wirkung auf die  $\alpha$ -Teilchen eine Abweichung vom reinen COULOMB-Potential hervor. (vgl. [11] und [10])

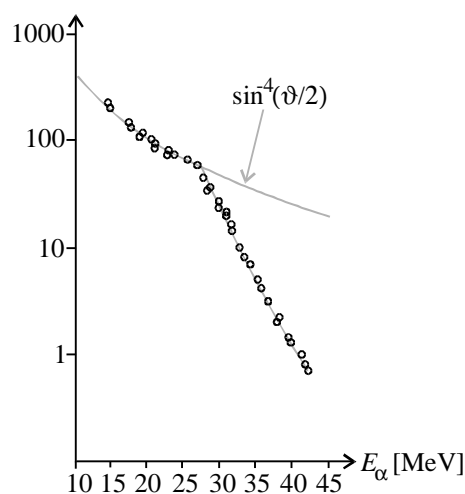


Abbildung 6:  $\alpha$ -Teilchen mit konstantem Streuwinkel von  $60^\circ$  weichen ab einer kinetischen Energie von ungefähr 25 MeV von der RUTHERFORD-Streuung ab. Auf der y-Achse sind willkürliche Einheiten aufgetragen (aus [10]) (Streuung an Gold)

### Anwendung

Das Periodensystem der Elemente war damals nur nach zunehmenden molaren Massen geordnet. Ein Zusammenhang mit den Kernladungszahlen war nicht bewiesen. RUTHERFORD z.B. hatte für Gold noch mit einer geschätzten Kernladungszahl von 100 gerechnet. (vgl. [11] und [6]). Es gab jedoch die Vermutung, daß die **Ordnungszahl** eines Elements identisch ist mit seiner **Kernladungszahl**.

Dividiert man die Streurrate  $dn_A/n_A$  des Elementes  $A$  für einen bestimmten Winkel durch die Streurrate  $dn_B/n_B$  eines anderen Elementes  $B$  für denselben Winkel, so kann man (unter Berücksichtigung der Dicke und der Atomkonzentrationen) mit Gleichung 3 auf das Verhältnis der Kernladungszahlen  $Z_A : Z_B$  der beteiligten Streuatome schließen. Mit Hilfe von mehreren Messungen kann man dann auf die absoluten Kernladungszahlen (natürliche Zahlen!) der beteiligten Materialien schließen, wie dies CHADWICK 1920 gelang, der durch seine Messungen bestätigen konnte, daß die Ordnungszahl eines Elements seiner Kernladungszahl entspricht. (vgl. [6])

**COMPUTERPROGRAMM "RUTHERFORD"*****Ermitteln einer unbekannten Kernladungszahl mit Hilfe der Simulationsdaten***

Wir wollen nun eine Streucharakteristik von Gold ( $Z = 79$ ) vergleichen mit den Simulationsergebnissen eines Elements unbekannter Kernladungszahl.

Wenn wir (vereinfachend) annehmen, daß die Atomkonzentrationen und Dicken der Materialien gleich sind, können wir auf diese Weise die unbekannte Kernladungszahl berechnen.

Starten Sie den Programmteil Simulation (**Datei@Simulation** oder **F7**). Laden Sie den Datensatz "**Gold.dat**" und übertragen Sie die Daten in den Speicher 1 (**Daten@Speicher 1**). Starten Sie nun eine Simulation mit einer unbekannten Kernladungszahl. Lassen Sie den Computer eine ausreichend große Zahl von  $\alpha$ -Teilchen simulieren (einige Minuten) und übertragen Sie anschließend die Ergebnisse in den Speicher 2 (**Daten@Speicher 2**). Gelingt es Ihnen durch Vergleich der Meßergebnisse (**Daten@Speicher 1 und 2 vergleichen**) die unbekannte Kernladungszahl zu berechnen?

***Ausblick***

Mit künstlich beschleunigten  $\alpha$ -Teilchen wurden später Streuexperimente an einer großen Zahl von Elementen gemacht, um den Kernradius zu bestimmen. Dabei konnte man aus den Ergebnissen näherungsweise folgenden Zusammenhang zwischen Radius  $r$  des Kerns und der Gesamtanzahl  $A$  der Nukleonen (Zahl der Protonen und Neutronen zusammen) im Kern feststellen (vgl. [12]):

$$r = r_0 \cdot \sqrt[3]{A} \quad , \quad \text{mit } r_0 = 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ m} \quad (4)$$

Bem.: Für den Kernradius gibt es verschiedene Näherungsformeln, die die Kerne bestimmter Elemente unterschiedlich gut approximieren. Die aufgeführte Gleichung 4 ist von besonders einfacher Form.

## 4.2 Wasserstoffspektrum und BOHRsches Atommodell

### 4.2.1 Spektrum des Wasserstoffatoms

#### *Linienpektren*

Freie Atome zeigen, im Gegensatz zur Hohlraumstrahlung aus Kap. 3.2.1, ein diskretes Emissions-/Absorptionsspektrum, das charakteristisch für den jeweiligen Stoff ist. Zur Aufnahme eines Spektrums kann man z.B. verdünntes Gas in einem abgeschlossenen Glaskolben mittels eingeführter Elektroden zur Entladung bringen. Durch Stöße mit Elektronen werden die Gasatome angeregt und senden Licht aus. Ein Prisma lenkt dieses Licht je nach Wellenlänge unterschiedlich ab. Beim Nachweis des Lichts mit Hilfe einer Photoplatte entstehen bei einem diskreten Spektrum Linien auf dem Schirm (siehe Abbildung 7). Deswegen werden solche Spektren auch Linienspektren genannt. Im weiteren werden wir uns mit dem Wasserstoffspektrum beschäftigen. Dieses Spektrum ist zwar vergleichsweise einfach strukturiert, aber gerade deshalb geeignet, wesentliche Grundlagen aufzuzeigen. (vgl. [12])

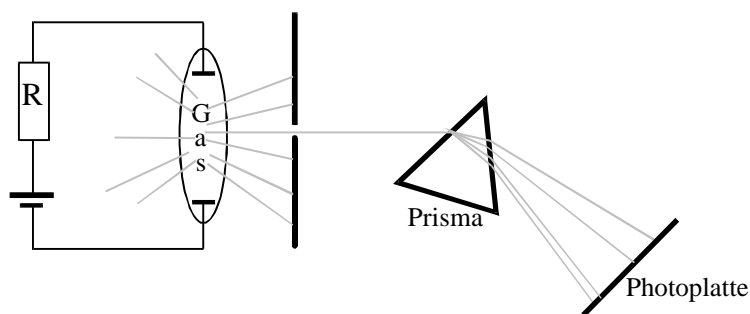


Abbildung 7: Linienspektrograph

#### *Serien des Wasserstoffspektrums*

Untersucht man die Spektren, so stellt man fest, daß sich in bestimmten Wellenlängenbereichen Linien häufen. Solche Linien werden dann zu Serien zusammengefaßt. Als Erster fand BALMER eine Regelmäßigkeit für die Serie des Wasserstoffatoms im sichtbaren Bereich.

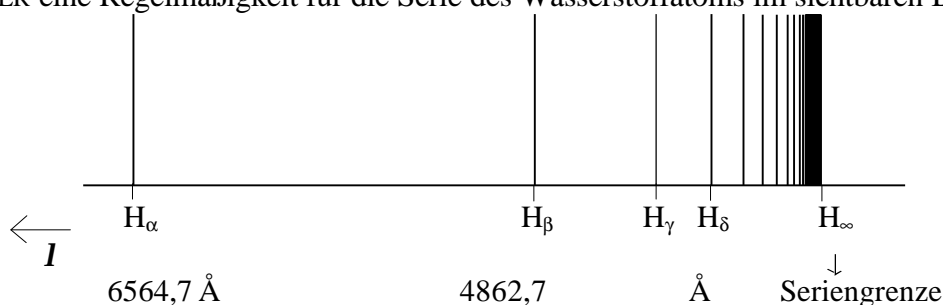


Abbildung 8: Linienspektrum der BALMER Serie des Wasserstoffs (weitestgehend maßstäblich)

Später wurden noch viele weitere Serien im ultravioletten bzw. infraroten Spektralbereich gefunden, die jeweils nach ihren Entdeckern benannt wurden. RYDBERG konnte 1890 die von BALMER gefundene Formel so verallgemeinern, daß alle Serien beschrieben werden. Nach RYDBERG gehorchen alle **Wellenzahlen**  $\bar{\nu}$  der folgenden Gesetzmäßigkeit:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right); \quad R_H = 109677,5810 \text{ cm}^{-1} \quad (5)$$



Dabei ist  $R_H$  die RYDBERG-Konstante,  $n_1$  eine natürliche Zahl, die die Serie festlegt. Der Laufindex  $n_2$  ist eine natürliche Zahl größer als  $n_1$ , die die einzelnen Linien innerhalb der Serie beschreibt. Untenstehende Tabelle gibt die Namen der Serien für einige  $n_1$  an. (vgl. [6])

$n_1$	Serienname
1	LYMAN
2	BALMER
3	PASCHEN
4	BRACKETT
5	PFUND
...	...

Tabelle 1: Einige Serien des Wasserstoffspektrums

Beachte: In manchen Büchern wird  $R'_H$  statt  $R_H$  verwendet (mit  $R'_H = R_H \cdot c$ ). Dann ist meist die RYDBERG-Formel nicht für Wellenzahlen sondern für Frequenzen formuliert.

## 4.2.2 BOHRsches Atommodell

BOHR entwickelte 1913 auf Grundlage des RUTHERFORDschen Atommodells (kleiner geladener Atomkern) eine Atomvorstellung, aus der sich das Spektrum des Wasserstoffatoms ableiten lässt. Dabei verwendete er sowohl die Quantelung der Energie als auch die Lichtquantenhypothese. Das **BOHRsche Atommodell** basiert zum einen Teil auf klassischer Mechanik und zum anderen Teil auf zwei weiter nicht begründeten Postulaten („Grundannahmen“), die der klassischen Physik völlig fremd sind. (vgl. [6])

### 1. Postulat

Elektronen können den Atomkern nur auf ganz bestimmten Kreisen umlaufen. Dabei gilt für den Drehimpuls  $L$  des Elektrons:

$$L = n \cdot \frac{h}{2\pi} = n \cdot \hbar; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

Auf diesen quantisierten Bahnen ist die klassische Mechanik anwendbar, jedoch wird in ihnen keine Strahlung emittiert. Mit der sog. **(Haupt-)Quantenzahl  $n$**  ist gleichzeitig auch der Energiezustand des Einelektronensystems festgelegt.

Bem.: Hier wird im Gegensatz zu den in Kapitel 3.2 behandelten Beispielen nicht die Energie, sondern der Drehimpuls quantisiert.

In manchen Büchern werden die im ersten Postulat aufgestellten Bedingungen als zwei getrennte Postulate formuliert. Dann ergeben sich insgesamt drei BOHRsche Postulate.

### 2. Postulat

Eine Änderung des Energiezustandes des Atoms kann nur durch Übergang von einem stationären Zustand in einen anderen erfolgen. Die Frequenz  $\nu$  der bei einem solchen Übergang ausgestrahlten bzw. absorbierten Strahlung ergibt sich aus der Differenz der beiden Energiezustände des Atoms:

$$E_1 - E_2 = h \cdot \nu \quad (7)$$

### *Bahnradius und Gesamtenergie*

Mit Hilfe dieser Postulate lassen sich die Gesamtenergie des Wasserstoffatoms und - da sich nach dem BOHRschen Modell das Elektron auf einer Kreisbahn bewegt - auch der klassische Bahnradius des Elektrons berechnen.

**Bahnradius:**

$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = r \cdot m_e v = n \cdot \hbar \quad (1. \text{ Postulat})$$

$$\Rightarrow v = \frac{n \cdot \hbar}{r \cdot m_e}$$

$$\frac{m_e \cdot v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z \cdot e^2}{r^2} \quad (\text{Zentripetalkraft} = \text{elektrostatische Kraft; klass. Mechanik im Orbit})$$

Einsetzen von v liefert:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0}{Z \cdot e^2} \cdot \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m_e} \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots \quad \text{BOHRscher Radius (8)}$$

Der Radius der Kreisbahn nimmt quadratisch mit  $n$  zu. Es gibt also im BOHRschen Modell zwar eine untere aber keine obere Grenze für den Atomradius.

Bsp.:  $Z = 1$  ;  $n = 1 \Rightarrow r_1 = a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA}$ .

Der Radius der ersten BOHRschen Bahn wird häufig mit  $a_0$  oder  $r_H$  abgekürzt.

**Energie:**

$$E_n = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z \cdot e^2}{r} = \frac{1}{2} m_e \left( \frac{n \cdot \hbar}{m_e \cdot r} \right)^2 - \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \left( \frac{Z \cdot e^2 \cdot m_e}{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2} \right)$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \cdot \frac{Z^2 \cdot e^4 \cdot m_e}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot n^2 \hbar^2} \quad \text{Energie des Einelektronensystems (9)}$$

Die Ionisierungsenergie des Einelektronensystems ist also proportional zu  $1/n^2$ .

Bsp.: Für  $Z = 1$  gilt:  $E_n = -13,6 \text{ eV}/n^2$ . Speziell:  $n = 1 \Rightarrow E_1 = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -13,6 \text{ eV}$  ;

**Vergleich mit experimentellen Befunden**

Um einen Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen zu erhalten, berechnen wir jetzt die RYDBERG-Konstante  $R_H$ , wie sie sich nach dem BOHRschen Atommodell für das Wasserstoffatom ergibt. Der Energieunterschied  $\Delta E$  zwischen dem höheren Zustand 1 und dem niedrigeren Zustand 2 ist dabei gleich der Energie des ausgesandten Photons:

$$\begin{aligned} |\Delta E| &= |E_2 - E_1| = \left| -\frac{1}{2} \cdot \frac{m_e \cdot e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot \hbar^2} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \right| = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} \\ \Rightarrow \frac{1}{\lambda} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{m_e \cdot e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot \hbar^2 \cdot h \cdot c} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

Ein Vergleich von Gleichung 10 mit der RYDBERG-Formel (Gleichung 5) liefert (vgl. [3]):

jetziger Zustand  $n = 1$  ; neuer Zustand  $n = 2$ ), im Vergleich zur Energie, die man bracht um es zu ionisieren (jetziger Zustand  $n = 1$  ; neuer Zustand  $n = \infty$ , auf **Ion** klicken)? (Die Daten können Sie aus den **Informationen über das Photon** ablesen.)

#### *Lage des Linienspektrums*

Vergleichen Sie die Wellenlängen der verschiedenen Serien im **Fenster Linienspektrum**. Welche Serie liegt im sichtbaren Bereich? Kommt es vor, daß sich die Wellenlängenbereiche verschiedener Serien überlappen?

#### *Mitbewegung des Atomkerns*

Der Wert von  $R_{H,BOHR}$  stimmt schon bis auf 0,54 % mit den experimentellen Ergebnissen überein. Die Genauigkeit läßt sich noch verbessern, wenn man die Mitbewegung des Atomkerns berücksichtigt. Bisher wurde nur die Rotation des Elektrons beachtet und so implizit ein quasi unendlich schwerer Kern angenommen. Bei einer endlichen Kernmasse kreisen Elektron und Proton aber um den gemeinsamen Schwerpunkt S (siehe Abbildung 9).

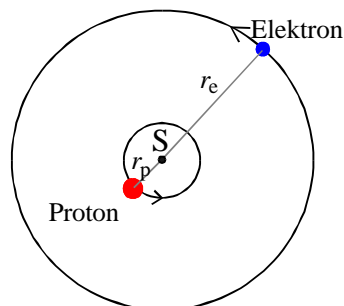


Abbildung 9: Proton und Elektron rotieren um den gemeinsamen Schwerpunkt S. (Proportionen sind in der Skizze aus Gründen der Übersichtlichkeit stark verzerrt)

In der Mechanik wird gezeigt, daß die Gesamtenergie der beiden Teilchen gleich dem eines einzigen fiktiven Teilchens mit einer sog. reduzierten Masse  $m$  ist. In unserem Fall gilt also:

$$m = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} \quad (11)$$

Modifiziert man die Energie- und Drehimpulsgleichung entsprechend, so muß man überall  $m_e$  durch  $\mathbf{m}$  ersetzen. Auf diese Weise erhält man mit  $R_{H,\mathbf{m}} = 109677,57 \text{ cm}^{-1}$  eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit der RYDBERG-Konstanten, so daß wir im folgenden  $R_{H,\mathbf{m}} = R_H$  setzen können. Mit  $R_H$  können wir die Energietermine auch in der Form

$$E_n = -R_H \cdot hc \cdot \frac{1}{n^2} \quad (12)$$

schreiben. (vgl. [6] und [12])

#### COMPUTERPROGRAMM "BOHR"

##### *Berücksichtigung der Mitbewegung des Atomkerns*

Wählen Sie im **Menü Optionen** den Menüpunkt **Mitbewegung des Atomkerns**. Bringt die Berücksichtigung der Mitbewegung des Kerns eine Absenkung oder eine Erhöhung der Energieniveaus des Elektrons? Um welche Faktoren Energien bzw. Wellenlängen der emittierten/absorbierten Photonen?

#### *Absorptionslinien*

Ein Atom kann prinzipiell jede Linie, die es emittiert auch absorbieren, d.h. zu jedem Übergang  $E_1 \rightarrow E_2$  gibt es auch einen  $E_2 \rightarrow E_1$ . Allerdings muß ein Atom, um z.B. soviel Energie zu absorbieren, daß es vom 3. Zustand in den 4. Zustand gelangt, sich erst einmal im 3. Zustand befinden. Im allgemeinen befindet sich das Atom jedoch im Grundzustand und so treten nur solche Absorptionslinien auf, deren niedrigerer Zustand der Grundzustand ist. (vgl. [3])

### 4.2.3 Korrespondenzprinzip

#### *Formulierung des Korrespondenzprinzips*

Wie gesehen kann man das Spektrum des Wasserstoffatoms aus dem BOHRschen Atommodell ableiten. Die aufgestellten Postulate lassen sich aber mit den Mitteln der klassischen Physik nicht interpretieren. Die Gesetze der klassischen Physik sollten sie jedoch als Grenzfall enthalten, um beim Übergang zu makroskopischen Objekten keine Widersprüche hervorzurufen. Aus diesem Grund fordert das von BOHR aufgestellte **Korrespondenzprinzip**, daß für hohe Quantenzahlen die Gesetze der Quantenmechanik in die Gesetze der klassischen Physik übergehen.

#### *Bohrsches Atommodell und Korrespondenzprinzip*

Überprüfen wir nun, ob das BOHRsche Atommodell diesem Prinzip standhält:

Zur Vereinfachung setzen wir  $R_H = R_{H,Bohr}$ . Nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik sendet ein beschleunigtes Elektron Strahlung mit der Frequenz  $\mathbf{n}$  aus, mit der es um den Kern läuft. Für die Umlauffrequenz auf der  $n$ -ten Bahn gilt:

$$\mathbf{n} = \frac{\text{Geschwindigkeit}}{\text{Umfang}} = \frac{v}{2\pi \cdot r_n} = \frac{\frac{n \cdot \hbar}{r_n \cdot m_e}}{2\pi \cdot r_n} = R_H \cdot c \cdot \frac{2}{n^3} \quad (13)$$

Für die Frequenz der Strahlung, die ein Elektron beim Übergang vom Zustand  $n+1$  in den Zustand  $n$  aussendet, gilt bei  $n \gg 1$ :

$$n_{n+1,n} = R_H \cdot c \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) = R_H \cdot c \cdot \left( \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \right) \underset{n \rightarrow \infty}{=} R_H \cdot c \cdot \frac{2}{n^3} \quad (14)$$

Beim BOHRschen Atommodell korrespondiert also für große Quantenzahlen  $n$  die Strahlungsfrequenz mit der Umlauffrequenz. (vgl. [14])

#### 4.2.4 FRANCK-HERTZ-Versuch

FRANCK und HERTZ haben 1913 einen Versuch entworfen (siehe Abbildung 10) der die Energiestufen im Atom direkt nachweist und so das zweite BOHRsche Postulat bestätigt.

##### Versuchsaufbau

In einem mit Quecksilber unter niedrigem Druck gefüllten Glaskolben werden Elektronen durch eine Heizspannung aus der Glühkathode losgelöst und mit einer variablen Spannung  $U_B$  in Richtung eines Gitters beschleunigt (siehe Abbildung 10). Die Elektronen laufen, nachdem sie das Gitter passiert haben, gegen eine Spannung  $U_{\text{gegen}}$  an. Falls sie genügend Bewegungsenergie haben, fließen sie an der Anode ab. Andernfalls kehren sie um und fallen auf das Gitter zurück. (vgl. [3])

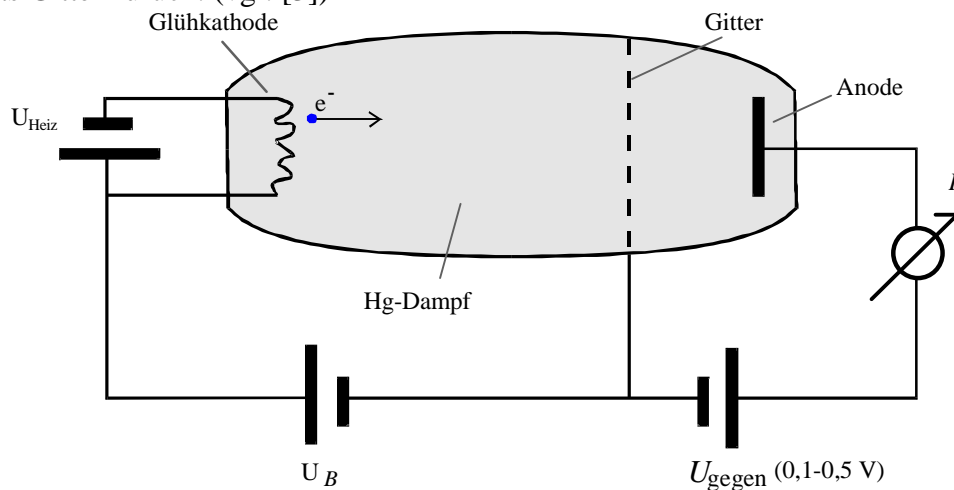


Abbildung 10: Versuchsaufbau beim FRANCK-HERTZ-Versuch

##### Versuchsergebnis

Bei der Versuchsdurchführung wird folgender Stromfluß in Abhängigkeit der Beschleunigungsspannung  $U_B$  beobachtet. (vgl. [3])

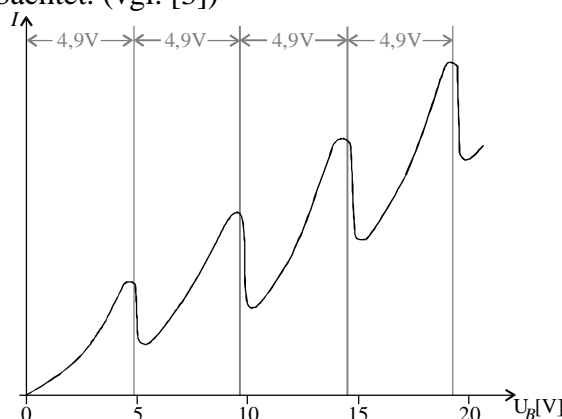


Abbildung 11: Prinzipieller Strom-Spannungs-Verlauf beim FRANCK-HERTZ-Versuch

### Erklärung des Versuchsergebnisses

Liegt  $U_B$  unterhalb einer kritischen Spannung  $U_{krit}$  (4.9 V), so führen die Elektronen lediglich elastische Stöße mit den Hg-Atomen aus und der Strom  $I$  steigt mit  $U_B$  an. Ist  $U_B$  im Bereich von  $U_{krit}$  so setzen unelastische Stöße ein, d.h. die Elektronen geben Energie an die Hg-Atome ab und können nicht mehr gegen  $U_{gegen}$  anlaufen, so daß  $I$  rapide absinkt. Oberhalb von  $U_{krit}$  steigt  $I$  rasch wieder an. Im Bereich von  $2 \cdot U_{krit}$  können die Elektronen zwei unelastische Stöße ausführen und  $I$  sinkt wieder.

Die Erklärung dieses Verhaltens ist, daß die Quecksilberatome nur Energie von 4,9 eV aufnehmen können und nicht beliebig kleinere Energiebeträge. Diese Anregungsenergie der Hg-Atome wird als Strahlung abgegeben, die als zugehörige Hg-Resonanzlinie bei 2537 Å ( $I = h \times c / E$ ;  $E = 4,9$  eV) beobachtet wird. (vgl. [13])

## 4.2.5 SOMMERFELDSche Erweiterung des BOHRschen Atommodells

### Experimentelle Ergebnisse

Mit zunehmender Meßgenauigkeit stellte man fest, daß viele Linien des Wasserstoffspektrums eine Feinstruktur besitzen (siehe Abbildung 12). Als Beispiel sehen wir uns die  $H_\alpha$ -Linie an.  $H_\alpha$  bezeichnet die Linie niedrigster Energie der BALMER-Serie. (vgl. [6])

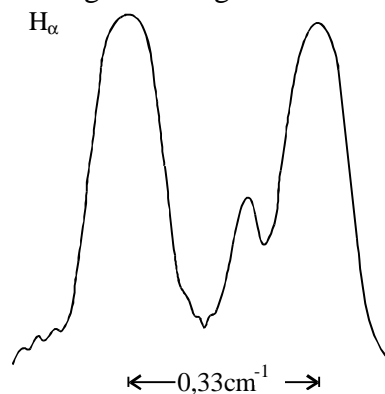


Abbildung 12:  $H_\alpha$ -Linie des Wasserstoffspektrums bei höherer Auflösung mit DOPPLERverbreiterung (aus [6]).

### Erweiterung des BOHRschen Atommodells

Zur Erklärung dieser Multipletts schlug SOMMERFELD 1916 eine Erweiterung des Atommodells von BOHR vor, die er aus einer Analogiebetrachtung in der Mechanik gewonnen hatte. Das **SOMMERFELDSche Atommodell** ist gegenüber dem BOHRschen in folgenden Punkten modifiziert (vgl. [6] und [3]):

- Die Elektronen umlaufen den Atomkern auf Ellipsenbahnen. Der Kern befindet sich dabei in einem der Brennpunkte der Ellipse.

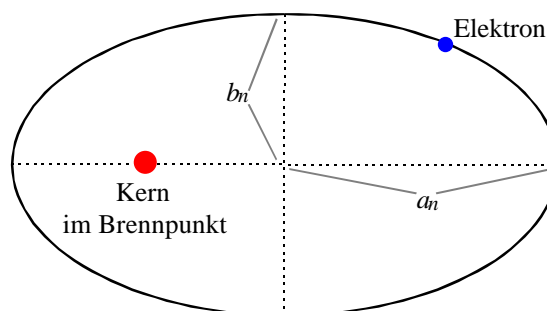


Abbildung 13: Die Bahn des Elektrons ist eine Ellipse. In einem der Brennpunkte befindet sich der Kern.

- Die große **Halbachse**  $a_n$  ist ebenso groß wie der Bohrradius  $r_n$ . Es gilt also:

$$a_n = r_n = \frac{4\pi e_0}{Z \cdot e^2} \cdot \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m_e} \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots \quad (15)$$

- Zusätzlich gibt es eine zweite Quantenzahl  $1 \leq k \leq n$ , die den **Betrag des Bahndrehimpulses**  $L$  des Elektrons bestimmt und somit die **kleine Hauptachse**  $b_n$  festlegt. Die Quantenzahl  $k$  wird **Nebenquantenzahl** genannt. Es gilt:

$$L = k \cdot \hbar; \quad k = 1, 2, 3, \dots, n \quad (16)$$

$$b_n = a_n \cdot \frac{k}{n} \quad (17)$$

Bem.: In der Quantenmechanik wird später die Nebenquantenzahl  $k$  durch die **Drehimpulsquantenzahl**  $l = k - 1$  ersetzt. Um ein Umlernen zu vermeiden, wird im folgenden nur  $l$  verwendet.

In Termschemata werden aus historischen Gründen meist nicht die  $l$ -Werte direkt angegeben, sondern man benutzt Buchstaben um bestimmte Zustände zu kennzeichnen. Diese Abkürzungen sind aus alten Bezeichnungen der Spektroskopie entstanden.

$l$	0	1	2	3	4	...
Bezeichnung	s (sharp)	p (principal)	d (diffus)	f (fundamental)	g	...

- Die von der BOHRschen Theorie abweichenden Energieniveaus resultieren aber erst aus folgender Betrachtung:

In Kernnähe erreicht das Elektron auf stark exzentrischen Ellipsen so große Geschwindigkeiten, daß eine Vernachlässigung der sog. relativistischen Massenänderung nicht mehr möglich ist. Als Folge führt das Elektron Periheldrehungen (anschaulich Rosettenbewegung) um den Atomkern aus und durch die Massenänderung ist es stärker gebunden.

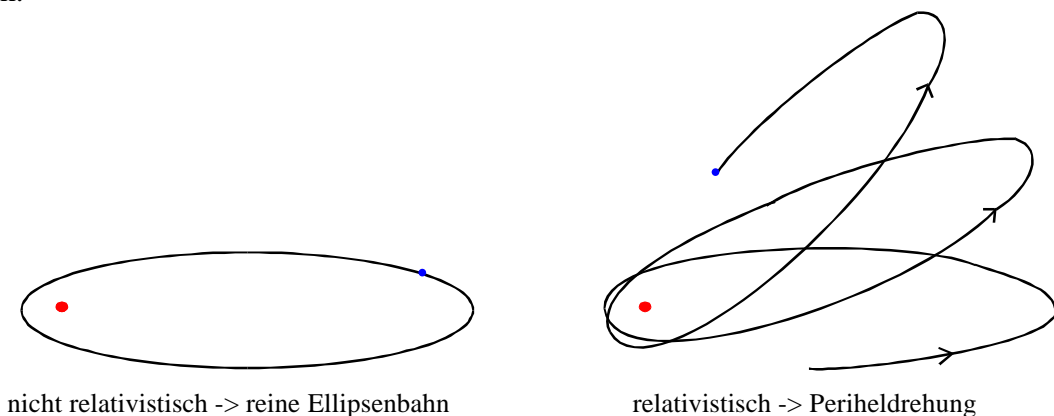


Abbildung 14: Veranschaulichung der Periheldrehung (nicht maßstäblich)

Je kleiner also die kleine Halbachse  $b_n$  ist, d.h. je kleiner  $l$  ist, um so größer ist die Energieabsenkung. Genaue Rechnungen ergeben für ein Einelektronensystem mit einem Atomkern der Kernladungszahl  $Z$  folgenden Zusammenhang:

$$E_{n,l} = -R_H \cdot hc \cdot \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{a^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) + \text{höhere Korrekturglieder} \right] \quad (18)$$

$a$  ist die **SOMMERFELDSche Feinstrukturkonstante**. Für sie gilt:

$$\alpha = \frac{\text{Geschwindigkeit des Elektrons auf der 1. Bohrschen Bahn}}{\text{Lichtgeschwindigkeit}} = \frac{e^2}{2\epsilon_0 \cdot hc} \approx \frac{1}{137} \quad (19)$$

### Auswahlregel

Bei einer hohen Auflösung des Spektrums stellt man fest, daß nicht alle vorhergesagten Linien auftreten, sondern nur die, bei denen sich die Drehimpulsquantenzahl um Eins ändert. Deswegen stellt man noch die Forderung  $l' = l \pm 1$  an die Übergänge. Dies ist energetisch nicht zu verstehen, läßt sich aber mit dem Drehimpulserhaltungssatz erklären, denn jedes Photon besitzt einen Drehimpuls vom Betrag  $1 \hbar$ .

Mit dem SOMMERFELDSchen Atommodell und dieser Auswahlregel kann man sehr gut die **Alkalispektren** erklären (vgl. [3] oder [6]).

### COMPUTERPROGRAMM "BOHR"

Wählen Sie im **Menü Modell** den Menüpunkt **Sommerfeld**.

Bem.: Das Programm stellt aus Gründen der Übersichtlichkeit die Periheldrehung des Elektrons nicht dar. Die relativistischen Energiekorrekturen werden aber berücksichtigt.

### Umlaufgeschwindigkeiten

Bringen Sie das Elektron in den Zustand ( $n = 2$  ;  $l = 0$ ). Beobachten Sie die Geschwindigkeitsänderung beim Umlauf um den Kern. Wie verhalten sich die Umlaufzeiten des Elektrons um den Kern bei gleicher Hauptquantenzahl  $n$  und verschiedenem  $l$ ? Sie können dazu die **Stoppuhr** aus dem **Menü Optionen** benutzen. Schätzen Sie ab, um welchen Faktor die Computeranimation gegenüber der im Atommodell angenommenen Bewegung verlangsamt ist.

### Größenordnung der relativistischen Korrektur

Wie groß sind die Energieunterschiede zwischen den einzelnen Bahnen gleicher Hauptquantenzahl? Welche Modifikation des ursprünglichen BOHRschen Modells ergibt die größeren Korrekturen, die Berücksichtigung der Mitbewegung des Kerns oder die Berücksichtigung der relativistischen Massenänderung?

## 4.2.6 Kritik an BOHR-SOMMERFELD-Theorie

### Vorteile

Eine Stärke des BOHR-SOMMERFELDSchen Ansatzes ist sicherlich, daß er anschaulich die gequantelten Energiezustände des Elektrons als Kreise/Ellipsen zu interpretieren vermag. Auch können mit seiner Hilfe schon recht genau die Grob- und Feinstrukturen des Wasserstoffatoms abgeleitet werden. So wird deutlich, daß die Einführung von Quantenbedingungen eine Beschreibung der Experimente im Bereich der Mikrophysik ermöglicht.



**Nachteile**

Die Theorie birgt jedoch einen inneren Widerspruch in sich. Denn einerseits werden die klassischen Gesetze außer Kraft gesetzt, andererseits werden aber die Bahnen mit ihnen berechnet. Es läßt sich also kein tieferer Sinn in den Postulaten erkennen. Unbefriedigend ist auch die Form der Atome, die nach der BOHR-SOMMERFELD-Theorie, zumindest für das Wasserstoffatom, nur flache Scheiben wären. Der größte Nachteil ist aber sicherlich, daß die Theorie schon bei etwas komplizierteren Atomen mit zwei Elektronen falsche Voraussagen macht.

## 4.3 Wellenmechanisches Modell des Wasserstoffatoms

### 4.3.1 Zeitunabhängige SCHRÖDINGERGleichung für ein Zentralkraftfeld

Wie in Kapitel 3.2.4 erwähnt, gelang DE BROGLIE die Beschreibung von Materie durch Wellen. SCHRÖDINGER kam deshalb 1926 auf die Idee, auch das Elektron im Atom durch eine **Wellenfunktion**  $\mathbf{y}$  zu beschreiben. Die genaue Herleitung seiner Gleichung würde zu weit führen. Hier wird nur das Endergebnis der Betrachtungen angegeben und diskutiert. Die **zeitunabhängige SCHRÖDINGERGleichung** für ein gebundenes Elektron im Zentralpotential eines Atomkerns mit Kernladungszahl  $Z$  lautet:

$$\hat{H}\mathbf{y} = E\mathbf{y} \quad (20)$$

$$\text{mit } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V \text{ und } V = V(r) = -\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

$\hat{H}$  ist der sogenannte **Hamiltonoperator**. (Er ist aus der klassischen Gesamtenergie des Elektrons herzuleiten, indem man den Impuls  $\vec{p}$  durch den **Impulsoperator**  $-\hbar\vec{\nabla}$  ersetzt). Für das Elektron sind nur solche Wellenfunktionen  $\mathbf{y}$  erlaubt, die diese Gleichung erfüllen.

Bem.: Die mathematische Struktur der obigen Gleichung 20 ist gleich der für einen Eigenwert  $\mathbf{I}$  und Eigenvektor  $x$  einer Matrix  $A$  ( $Ax = \mathbf{I}x$ ). Deshalb werden die Wellenfunktionen  $\mathbf{y}$ , die diese Gleichung erfüllen, **Eigenfunktionen** und die zugehörigen Energien  $E$  **Energieeigenwerte** genannt.

Die Energieeigenwerte  $E$  entsprechen den möglichen Meßwerten für die Energie des Elektrons. Ist umgekehrt ein Energiewert kein Energieeigenwert, dann sagt die SCHRÖDINGERSche Wellenmechanik voraus, daß man ein Elektron mit einer solchen Energie nie messen wird.

Um die Mitrotation des Kerns zu berücksichtigen, verwenden wir an dieser Stelle gleich die reduzierte Masse  $m$ . Wir müssen also die folgende Eigenwert-Differentialgleichung lösen:

$$\Delta\mathbf{y} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\mathbf{y} = 0 \quad (21)$$

### 4.3.2 Interpretation der Wellenfunktion

Der Wellenfunktion  $\mathbf{y}$  ist nicht direkt eine beobachtbare Größe zuzuordnen, sondern lediglich ihrem Betragsquadrat  $|\mathbf{y}|^2$ . Die **Wahrscheinlichkeit**, zur Zeit  $t$  ein Teilchen im Volumenelement  $\Delta V$  am Ort  $(x, y, z)$  anzutreffen ist nach BORN:

$$W(x, y, z, t) = \iiint_{\Delta V} |\mathbf{y}|^2 dx \cdot dy \cdot dz \quad (22)$$

Diese statistische Interpretation der Wellenfunktion konnte durch zahlreiche Versuche bestätigt werden.

### 4.3.3 Separationsansatz

Da es sich um ein kugelsymmetrisches Problem handelt, werden zweckmäßigerweise Kugelkoordinaten eingeführt (siehe Abbildung 15):

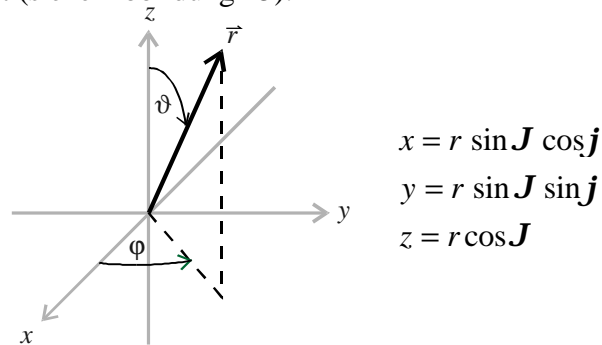


Abbildung 15: Koordinatentransformation

Der LAPLACE-Operator  $\Delta$  muß dabei ebenfalls in Kugelkoordinaten umgerechnet werden. Dieser Gleichung:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin J} \frac{\partial}{\partial J} \left( \sin J \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial J} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 J} \frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial j^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \right) \mathbf{y} = 0 \quad (23)$$

Wegen der Kugelsymmetrie des Problems sind **Radial- und Winkelanteil** unabhängig voneinander. Mit dem Ansatz  $\mathbf{y}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R(r) \cdot Y(\mathbf{J}, \mathbf{j})$  läßt sich durch Separation die SCHRÖDINGERGleichung in einen Radialanteil  $R(r)$  und einen Winkelanteil  $Y(\mathbf{J}, \mathbf{j})$  trennen. Man erhält zwei Differentialgleichungen:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E - V) = -\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin J} \frac{d}{dJ} \left( \sin J \frac{dY}{dJ} \right) + \frac{1}{\sin^2 J} \frac{d^2 Y}{dj^2} \right\} = C_1 \quad (24)$$

Die linke Seite hängt nur von  $r$ , die rechte Seite nur von  $\mathbf{J}$  und  $\mathbf{j}$  ab. Da die Koordinaten unabhängig voneinander variiert werden können, ist eine solche Gleichung nur erfüllbar, wenn beide Seiten gleich einer gemeinsamen Konstanten  $C_1$ , der sog. **Separationskonstanten**, sind.

Der Winkelanteil läßt sich nochmals in  $Y(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = Q(\mathbf{J}) \cdot F(\mathbf{j})$  separieren. Dabei benutzt man  $C_2$  als Separationskonstante:

$$\sin^2 J \left[ \frac{1}{Q \sin J} \frac{d}{dJ} \left( \sin J \frac{dQ}{dJ} \right) + C_1 \right] = -\frac{1}{F} \frac{d^2 F}{dj^2} = C_2 \quad (25)$$

Man hat also insgesamt drei Differentialgleichungen zu lösen.

$$\frac{d^2 F}{dj^2} + C_2 F = 0 \quad \text{Azimutalgleichung (26)}$$

$$\frac{1}{Q \sin J} \frac{d}{dJ} \left( \sin J \frac{dQ}{dJ} \right) + C_1 - \frac{C_2}{\sin^2 J} = 0 \quad \text{Polargleichung (27)}$$

$$\frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{C_1 \hbar^2}{2mr^2} \right] = 0 \quad \text{Radialgleichung (28)}$$

(vgl. [13])

### 4.3.4 Lösungsfunktionen

#### Physikalische Randbedingungen

Nicht alle mathematischen Lösungen  $\mathbf{y}$  sind auch physikalisch für unser Problem sinnvoll. Deshalb stellen wir noch vier zusätzliche Forderungen an die Lösungsfunktionen für dieses spezielle Problem. (vgl. [13])

- Eine Funktion  $\mathbf{y}$ , und damit jeder einzelne ihrer Faktoren, soll eindeutig auf der Kugeloberfläche sein, d.h. :  $\mathbf{y}(r, \mathbf{J} + \mathbf{p}\mathbf{j} + 2\mathbf{p}) = \mathbf{y}(r, \mathbf{J}\mathbf{j})$  (29)

- Da es sich um einen gebundenen Zustand handelt, soll die Wellenfunktion plausiblerweise (Gleichung 22) für sehr große Abstände vom Ursprung Null werden, also:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \mathbf{y}(r, \mathbf{J}\mathbf{j}) = 0 \quad (30)$$

- Da das Absolutquadrat der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert wird soll die Integration über den gesamten Raum sich auf Eins normieren lassen:

$$\int_{r=0}^{\infty} \int_{\mathbf{j}=0}^{2\mathbf{p}} \int_{\mathbf{J}=0}^{\mathbf{p}} \mathbf{y}^*(r, \mathbf{J}\mathbf{j}) \cdot \mathbf{y}(r, \mathbf{J}\mathbf{j}) r^2 \sin J d\mathbf{j} d\mathbf{J} dr = 1 \quad (31)$$

- Die Wellenfunktion  $\mathbf{y}$  soll in jedem Raumpunkt stetig differenzierbar sein.

Die Herleitung der Lösungsfunktionen der drei Differentialgleichungen erfordert längere Rechnungen. Deswegen werden hier nur die Vorschriften zur Gewinnung der Funktionen  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{Q}$  und  $\mathbf{R}$  angegeben. Außerdem wird kurz auf das für die Physik interessante Zustandekommen der Quantenzahlen eingegangen. Ausführliche Herleitungen finden Sie z.B. in [13] und [16].

#### Lösung der Azimutalgleichung

Die Lösungen der azimutalen Differentialgleichung sind für  $C_2 \neq 0$  von der Form:

$$\mathbf{F}(\mathbf{j}) = A \cdot e^{i\sqrt{C_2}\mathbf{j}} + B \cdot e^{-i\sqrt{C_2}\mathbf{j}} \quad (32)$$

Bei der Festlegung des Koordinatensystems haben wir die z-Achse willkürlich gewählt (Abbildung 15). Da jedoch das Zentralkraftfeld vollkommen symmetrisch ist, sollte die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\mathbf{y}^* \cdot \mathbf{y}$  rotationssymmetrisch bezüglich der z-Achse und damit unabhängig von  $\mathbf{j}$  sein. Für  $\mathbf{F}^* \cdot \mathbf{F}$  erhalten wir nach Gleichung 32:

$$\mathbf{F}^*(\mathbf{j}) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{j}) = |A|^2 + |B|^2 + A^* \cdot B \cdot e^{-2i\sqrt{C_2}\mathbf{j}} + A \cdot B^* \cdot e^{2i\sqrt{C_2}\mathbf{j}}$$

$\mathbf{F}^* \cdot \mathbf{F}$  und damit auch  $\mathbf{y}^* \cdot \mathbf{y}$  sind also nur dann unabhängig von  $\mathbf{j}$ , wenn  $A$  oder  $B = 0$  ist. Wir setzen  $B = 0$  und erhalten:

$$\mathbf{F}(\mathbf{j}) = A \cdot e^{i\sqrt{C_2}\mathbf{j}} \quad (33)$$

Für  $C_2 = 0$  ist die Lösung von der Form:

$$\mathbf{F}(\mathbf{j}) = A' + B'\mathbf{j} \quad (34)$$

Falls  $B' \neq 0$  gelten würde, wäre  $\mathbf{F}$  und damit auch  $\mathbf{y}$  für  $\mathbf{j} \rightarrow \infty$  divergent. Nach unserer zweiten physikalischen Randbedingung (Gleichung 30) ist dies aber untersagt. Es folgt daher  $B' = 0$ .

Da allgemein  $F(\mathbf{j}) = \Phi(\mathbf{j} + 2\mathbf{p})$  gefordert wird (Gleichung 29), muß  $C_2$  das Quadrat einer ganzen Zahl sein. Aus Gründen, die später noch erläutert werden, wird diese Zahl **magnetische Quantenzahl**  $m_l$  genannt ( $C_2 = m_l^2$ ). Die normierte Lösung für  $m_l = 0$  als auch  $m_l \neq 0$  der azimuthalen Differentialgleichung lautet für beide Fälle ( $C_2 = 0$  und  $C_2 \neq 0$ ) also:

$$F_{m_l}(\mathbf{j}) = \frac{1}{\sqrt{2p}} e^{im_l j} \quad (35)$$

mit der magnetischen Quantenzahl  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  (vgl. [13])

### Lösung der Polargleichung

Die Polargleichung entspricht einer LEGENDRESchen Differentialgleichung, die durch einen Potenzreihenansatz in  $\cos(\mathbf{J})$  gelöst werden kann. Wegen der Forderung der Normierbarkeit darf  $Q$  nicht divergieren. So ergibt sich, daß die Lösung eine endliche Potenzreihe, also ein Polynom sein muß. Man bezeichnet den Grad des Polynoms (eine ganze, nichtnegative Zahl) mit  $l$ . Aus der Forderung der Stetigkeit von  $Q$  folgt dann, daß  $C_1 = l(l+1)$  und  $-l \leq m_l \leq l$  gelten muß. Da hierbei  $l$  nur 0 oder eine natürliche Zahl sein darf, hat man also eine weitere Quantisierungsbedingung gefunden.  $l$  wird **Drehimpulsquantenzahl** genannt.

$$Q_l^{m_l}(\mathbf{J}) = N_l^{m_l} P_l^{m_l}(\cos \mathbf{J}) \quad (36)$$

mit den Werten  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Die Polynome  $P$  werden für  $m_l = 0$  als **LEGENDRE-Polynome** bzw. für  $m_l \neq 0$  als **zugeordnete LEGENDRE-Polynome** bezeichnet. Sie können durch folgende Ableitungsvorschrift gewonnen werden (vgl. [16]):

$$P_l^{m_l}(\cos \mathbf{J}) = \frac{(-1)^{m_l}}{2^l l!} (1 - \cos^2 \mathbf{J})^{\frac{m_l}{2}} \cdot \frac{d^{l+m_l}(\cos^2 \mathbf{J} - 1)}{(d \cos \mathbf{J})^{l+m_l}} \quad (37)$$

Der zu  $Q$  gehörige Normierungsfaktor ist:

$$N_l^{m_l} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} \quad (38)$$

### Lösung des Winkelanteils

Für den Winkelanteil  $Y_{l,m_l}(\mathbf{J}, \mathbf{j})$  an  $\mathbf{y}$  erhält man also folgende Gesamtlösung:

$$Y_{l,m_l}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = Q_l^{m_l}(\mathbf{J}) \cdot F_{m_l}(\mathbf{j}) = \frac{1}{\sqrt{2p}} \cdot N_l^{m_l} P_l^{m_l}(\cos \mathbf{J}) \cdot e^{im_l j} \quad (39)$$

Die Funktionen  $Y_{l,0}$  werden **Kugelflächenfunktionen**, die Funktionen  $Y_{l,m_l}$  ( $m_l \neq 0$ ) **zugeordnete Kugelflächenfunktionen** genannt. Sie bestimmen die räumliche Gestalt der Wellenfunktionen und sind z.B. für die Bindung an einem Molekül ausschlaggebend. Deshalb werden in der Chemie statt der Wellenfunktion  $\mathbf{y}$  oft nur die (zugeordneten) Kugelflächenfunktionen  $Y_{l,m_l}$  betrachtet (Orbitalmodelle).

Bem.: Man kann zeigen, daß die Summe über  $m_l$  aller  $Y_{l,m_l}$  für ein bestimmtes  $l$  stets eine Konstante ergibt.

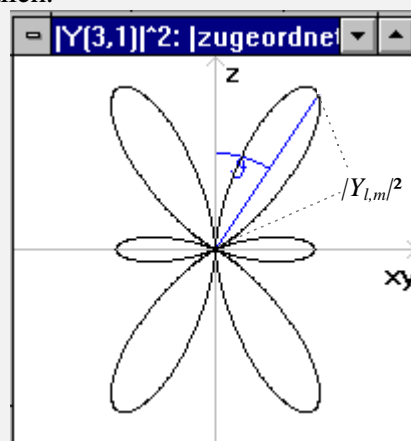
Die  $Y_{l,m_l}$  sind zwar in Polarkoordinaten angegeben, da wir sie uns i.a. aber besser in einem kartesischen Koordinatensystem veranschaulichen können, übertragen wir sie in ein solches. Dabei müssen wir auch eine z-Achse definieren, von der aus der Winkel  $\mathbf{J}$  gemessen wird. Die Wahl der z-Achse erfolgt willkürlich, solange nicht durch ein äußeres Feld die Isotropie des Raumes gestört wird. Ist aber eine Richtung im Raum durch z.B. ein Magnetfeld ausgezeichnet, dann definiert man diese Richtung als z-Achse. Die z-Achse wird deshalb gewählt, weil dies die mathematische Behandlung vereinfacht, da in dem von uns gewählten Koordinatensystem (Abbildung 15) die z-Koordinate nur von  $\mathbf{J}$ , alle anderen Koordinaten eines Punktes aber sowohl von  $\mathbf{J}$  als auch von  $\mathbf{j}$  abhängen.

Die Darstellung der  $Y_{l,m_l}$  ist in einem dreidimensionalen Raum nicht möglich, weil sie auch komplexe Werte annehmen können. Deshalb wird oft nur ihr Realteil oder ihr Betragsquadrat in einem Polardiagramm dargestellt.

#### COMPUTERPROGRAMM "SCHRÖDINGER"

##### Vorbemerkungen

Das Programm Schrödinger stellt das Betragsquadrat  $|Y_{l,m}|^2$  der (zugeordneten) Kugelflächenfunktionen in einem Polardiagramm dar. Durch den Betrag entfällt für die  $Y_{l,m}$  die Abhängigkeit von  $\mathbf{j}$ , so daß die x-Achse und die y-Achse in dieser Darstellung zusammenfallen.



Ein solches Polardiagramm ist folgendermaßen zu interpretieren:

Die Entfernung vom Ursprung bis zum Rand der schwarzen Kurve gibt die Größe von  $|Y_{l,m}|^2$  für den Winkel  $\mathbf{J}$  an.

Starten Sie das Programm **Schrödinger**.

##### Aussehen der Kugelflächenfunktionen

Aktivieren Sie das **Fenster  $|Y_{l,m}|^2$ : |Kugelflächenfunktion|^2** über das Menü **Fenster** und wählen Sie  $n = 10$ . Variieren Sie die Quantenzahlen  $l$  und  $m$  und machen Sie sich so mit den verschiedenen Typen der (zugeordneten) Kugelflächenfunktionen vertraut.

##### Auswirkung der magnetischen Quantenzahl

Wählen Sie  $l = 6$  und  $m_l = 0$ . Erhöhen Sie jetzt schrittweise die magnetische Quantenzahl. Beobachten Sie dabei, wie sich die Form der Kurve immer mehr der xy-Ebene nähert.

##### Ähnlichkeiten der Kugelfunktionen untereinander

Ändern Sie  $l$  und  $m_l$  jetzt so, daß die Differenz zwischen ihnen konstant 1 (oder 2 usw.) ist. Was fällt Ihnen auf? Können Sie nur anhand der Graphik feststellen, ob es sich um eine (zugeordnete) Kugelflächenfunktion mit größeren oder kleineren Quantenzahlen handelt?

### Lösung der Radialgleichung

Die radiale Differentialgleichung besteht aus einem exponentiell fallenden Anteil (wegen  $\lim_{r \rightarrow \infty} \mathcal{Y}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = 0$ ) und einem Polynomfaktor, der ähnlich wie bei der Polargleichung, durch einen Potenzreihenansatz zustandekommt. Dabei ergibt sich wieder eine neue Quantenzahl  $n$  aus der Abbruchbedingung für die Reihe. Diese **Hauptquantenzahl**  $n$  muß aus Stetigkeitsgründen eine natürliche Zahl und größer als die Drehimpulsquantenzahl  $l$  sein. Die normierte Radialfunktion lautet (nach [16]):

$$R_{n,l}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \cdot \frac{2^{l+1}}{n^{l+2}} \cdot \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \cdot \left(\frac{r \cdot Z}{a_0}\right)^l \cdot e^{-\frac{r \cdot Z}{n \cdot a_0}} \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r \cdot Z}{n \cdot a_0}\right) \quad (40)$$

mit der **Hauptquantenzahl**  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,

den **LAGUERRE-Polynomen**:  $L_k^j(x) = \frac{1}{k!} \cdot x^{-j} \cdot e^x \cdot \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} \cdot x^{k+j}) = \sum_{n=0}^k \binom{k+j}{k-n} \cdot \frac{(-x)^n}{n!}$

und der Abkürzung  $a_0 = \frac{4\pi e_0}{e^2} \cdot \frac{\hbar^2}{m}$  (Bahnradius des  $e^-$  im Grundzustand beim H-Atom)

Setzt man die Reihendarstellung der LAGUERRE-Polynome direkt ein, so ist die Struktur von  $R_{n,l}$  leichter zu überschauen.

$$R_{n,l}(r) = N \cdot e^{-\frac{r \cdot Z}{n \cdot a_0}} \cdot r^l \cdot \sum_{n=0}^{n-(l+1)} c_n \cdot r^n \quad (41)$$

Dabei sind sowohl die Normierungskonstante  $N$  als auch die Koeffizienten  $c_n$  reelle Zahlen. Die Radialfunktionen bestimmen die radialen Wahrscheinlichkeitsdichten. Sie legen daher fest, wie wahrscheinlich es ist, das Elektron in einer bestimmten Entfernung vom Kern zu finden.

### COMPUTERPROGRAMM "SCHRÖDINGER"

#### Aussehen der Radialfunktionen

Aktivieren Sie das **Fenster  $R_{n,l}$ : Radialfunktion** über das Menü **Fenster** und lassen Sie sich verschiedene Radialfunktionen zeichnen. Erkennen Sie eine Abhängigkeit der Anzahl der Nullstellen von  $R_{n,l}$  von den Quantenzahlen  $n$  und  $l$ ? Für welche  $l$  ist bei  $r=0$  eine Nullstelle?

**Gesamtlösung**

Die Wellenfunktion  $\mathbf{y}$  setzt sich aus dem Produkt der Radial- und der Kugelfunktion zusammen und ist bereits normiert, da  $R_{n,l}$  und  $Y_{l,m_l}$  normiert sind:

$$\mathbf{y}_{n,l,m_l}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j}) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m_l}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \quad \text{mit } n > l-1 \geq |m_l| \quad (42)$$

Bem.: Die Quantenzahlen  $n, l, m_l$  wurden nicht wie beim BOHRschen Atommodell durch Quantisierungspostulate eingeführt, sondern haben sich bei der Herleitung auf natürliche Weise aus den physikalischen Randbedingungen ergeben.

**COMPUTERPROGRAMM " SCHRÖDINGER "****Verschiedenartige Darstellungen**

Wählen Sie die Option **Alle Fenster sichtbar** im Menü **Fenster** und vergleichen Sie die verschiedenen Darstellungsarten der Wellenfunktion.

Wählen Sie jetzt  $n = 4$  und  $l = 2$ . Was fällt Ihnen bei einem Vergleich zwischen der Punktdichtedarstellung und der Farbdarstellung auf? Welche Bereiche werden durch die Farbdarstellung nicht mehr wiedergegeben?

Stellen Sie nun  $n = 4$  und  $l = 1$  ein. Da die Werte von  $|\mathbf{y}|^2$  relativ schnell mit zunehmenden Abstand vom Kern abfallen, erweckt die Farbdarstellung den Eindruck einer stärkeren Bindung des Elektrons an den Kern, als die von Zufallszahlen abhängige Punktdichtedarstellung. Dies wird besonders für  $n = 4$  und  $l = 0$  deutlich.

**Myonenatom**

Wählen Sie im Menü Teilchen  $\rightarrow$  Orbit das Myon (einfach negativ geladenes Teilchen mit ungefähr der 207fachen Elektronenmasse). Wie ändern sich die Einheit des Koordinatensystems und die Wahrscheinlichkeitsdichten? Ist Ihnen klar warum?

**Aufenthaltswahrscheinlichkeit**

Nach Kap. 4.3.2 gibt  $|\mathbf{y}|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte an. Um die Wahrscheinlichkeit  $W(r)$  dafür zu berechnen, ein Elektron unabhängig von  $\mathbf{J}$  und  $\mathbf{j}$  irgendwo zwischen  $r$  und  $r + dr$  zu finden, integrieren wir  $\mathbf{y}$  über die Raumwinkel:

$$W(r) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\mathbf{y}(r, \mathbf{J}, \mathbf{j})|^2 \cdot r^2 \sin(\theta) \cdot dr d\mathbf{J} d\mathbf{j} = 4\pi \cdot R(r)^2 \cdot r^2 \cdot dr \quad (43)$$

Die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** eines Elektrons in radialer Richtung an einer Stelle  $r$  (mit der Unsicherheit  $dr$ ) ist also proportional zu  $r^2 R^2$ . (vgl. [13])

**COMPUTERPROGRAMM " SCHRÖDINGER "**

Wählen Sie wieder die Standardteilchen **Proton** als Kern und **Elektron** im Orbit.

**Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit**

Schalten Sie das Fenster **Radialfunktion** auf Vollbilddarstellung. Stellen Sie zunächst am Bedienfeld im Feld **Radial** den Schalter auf  $R^2$ . Wählen Sie  $n = 1$  und  $l = m_l = 0$ . Schalten Sie jetzt auf  $r^2 R^2$ . Machen Sie sich den Unterschied zwischen den beiden Funktionen klar. Welche Bedeutung kann man ihnen jeweils zuordnen?



**Vergleich mit BOHRschem Atommodell**

Welchen Wert muß  $l$  in Abhängigkeit von  $n$  annehmen, damit das Maximum der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit genau beim entsprechenden BOHRschen Maximum liegt?

**Erwartungswert des radialen Abstands**

Die **blaue Linie** gibt im **Fenster Radialfunktion** den Erwartungswert des Abstands zwischen Kern und Orbit-Teilchen an. (Nur im Modus  $r^2R^2$ .) Welchen Wert erwartet man also im Mittel für den Abstand Proton-Elektron beim Wasserstoffatom im Grundzustand nach dem wellenmechanischen Atommodell? Vergleichen Sie den Erwartungswert mit dem entsprechenden BOHRschen Radius auch für andere Zustände.

**Entartung der Energie**

Bei der Lösung der radialen Differentialgleichung ergibt sich außerdem, daß die Energien ( $E < 0$ ) von  $n$  abhängen, also gequantelt sind:

$$E_n = -\frac{1}{2} \cdot \frac{Z^2 \cdot m \cdot e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot n^2 \hbar^2} = -R_H \cdot hc \cdot \frac{1}{n^2} \quad (44)$$

Das Erstaunliche ist, daß wir dieselben Energiezustände erhalten wie beim BOHRschen Atommodell (8).

Da trotz unterschiedlicher  $l$  und/oder  $m_l$  dem Elektron die gleiche Energie zugeschrieben wird, spricht man deshalb von **Entartung der Energiezustände**.

Aus der Bedingung  $-l \leq m_l \leq l$  folgt, daß  $m_l$  für jedes  $l$  insgesamt  $2l+1$  verschiedene Werte annehmen kann. Weil  $l$  alle Zahlen von 0 bis  $n-1$  durchlaufen kann, gibt es also für jeden

$n$ -Wert  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$  verschiedene Eigenfunktionen, die zum gleichen Energiewert  $E_n$  gehören. Jeder Zustand ist darum  $n^2$ -fach entartet. (vgl. [13])

**4.3.5 Bahndrehimpuls des Elektrons****Quantenmechanischer Drehimpulsoperator**

Beim Übergang vom klassischen Impuls zum Impulsoperator ersetzen wir  $\vec{p}$  durch  $-i\hbar\vec{\nabla}$ . Genauso gehen wir jetzt vor um den **quantenmechanischen Drehimpulsoperator** zu finden (vgl. [13]):

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times -i\hbar \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = -i\hbar \cdot \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_x \\ l_y \\ l_z \end{pmatrix}$$

Rechnet man  $\vec{l}$  in Polarkoordinaten um, so erhält man für die einzelnen Komponenten:

$$l_x = i\hbar \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (45)$$

$$l_y = i\hbar \left( -\cos \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} + \cot \mathbf{J} \cdot \sin \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \right) \quad (46)$$

$$l_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{j}} \quad (47)$$

### Eigenwerte des Drehimpulses

Für  $\vec{l}^2$  erhält man:

$$\vec{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \mathbf{J}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} \left( \sin \mathbf{J} \frac{\partial}{\partial \mathbf{J}} \right) + \frac{1}{\sin^2 \mathbf{J}} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{j}^2} \right]$$

Der Ausdruck  $-\vec{l}^2/\hbar^2$  entspricht genau dem Operator für den Winkelanteil der Schrödingergleichung (siehe Gleichung 20). Darum gilt:

$$\vec{l}^2 \cdot Y_{l,m_l}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) = l(l+1)\hbar^2 \cdot Y_{l,m_l}(\mathbf{J}, \mathbf{j}) \quad (48)$$

$\vec{l}^2$  hat die Eigenfunktionen  $Y_{l,m_l}$  und die Eigenwerte  $l(l+1) \cdot \hbar$ . Nach dem Grundpostulat der Quantentheorie sind die Eigenwerte gleich den möglichen Meßwerten. Danach sind also für den Betrag des Drehimpulses nur folgende Meßwerte feststellbar:

$$|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar \quad (49)$$

mit  $l=0, 1, 2, \dots$

Der Betrag des Drehimpulses ist daher durch  $l$  quantisiert. Daher kommt auch die Bezeichnung Drehimpulsquantenzahl für  $l$ .

Vorsicht:  $l$  steht hier und im folgenden ausschließlich für die Drehimpulsquantenzahl. Es gilt  $|\vec{l}| \neq l$ . In der weiterführenden Literatur wird manchmal nicht streng zwischen Drehimpuls und Drehimpulsquantenzahl unterschieden.

Außerdem erweist sich  $-l_z^2/\hbar^2$  als identisch mit dem Operator für  $\mathbf{F}_{m_l}$  in der Azimutalgleichung (Gleichung 26), denn es gilt:

$$l_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{j}^2} \quad (50)$$

Wenden wir  $-l_z^2/\hbar^2$  auf  $\mathbf{F}_{m_l}$  an und erhalten:

$$-\frac{1}{\hbar^2} l_z^2 \cdot \mathbf{F}_{m_l} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{j}^2} \cdot \mathbf{F}_{m_l} = -m_l^2 \cdot \mathbf{F}_{m_l} \Rightarrow l_z \cdot \mathbf{F}_{m_l} = m_l \hbar \cdot \mathbf{F}_{m_l} \quad (51)$$

Also folgt:

$$l_z = m_l \cdot \hbar \quad (52)$$

mit  $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

$m_l$  ist daher die Quantenzahl der z-Komponente des Bahndrehimpulses.  $l_z$  unterliegt dadurch ebenfalls einer Quantelung.

Aus weitergehenden Betrachtungen der Quantenmechanik folgt, daß lediglich der Betrag und eine Richtungskomponente des Drehimpulses (in unserem Fall die z-Richtung) gleichzeitig meßbar sind. D.h.  $l_x$  und  $l_y$  sind nicht gleichzeitig beobachtbare Größen und unterliegen daher keiner Quantelungsvorschrift. (vgl. [13])

### Illustration

Wir wollen uns den festgestellten Sachverhalt an einem Beispiel für  $l = 3$  veranschaulichen (siehe Abbildung 16).

Aus  $l = 3$  können wir lediglich auf den Betrag des Drehimpulsvektors schließen. In unserem Beispiel ist er  $|\vec{l}| = \sqrt{3(3+1)} \cdot \hbar$  und endet deshalb irgendwo auf dem grauen Kreis in Abbildung 16. Für  $m_l$  und damit wegen Gleichung 49 auch für  $l_z$  ergeben sich  $(2 \cdot l + 1) = 2 \cdot 3 + 1 = 7$  Einstellmöglichkeiten. Die z-Komponente des Drehimpulses ist also immer ein ganzzahliges Vielfaches von  $\hbar$ . Im BOHRschen Atommodell war dagegen der Betrag des Drehimpulses ein natürliches Vielfaches von  $\hbar$  (siehe 4.2.2) (vgl. [13])

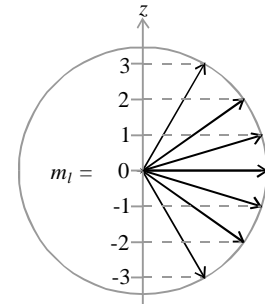


Abbildung 16:  
Einstellmöglichkeiten  
des Drehimpulsvektors bzgl.  
der z-Achse (aus [13])

Als nächstes sei außer  $l = 3$  auch noch  $m_l = 3$  bekannt. Jetzt ist neben der Länge des Drehimpulsvektors  $|\vec{l}| = \sqrt{3(3+1)} \cdot \hbar$  auch noch der Wert seiner z-Komponente  $l_z = m_l \cdot \hbar = 3 \cdot \hbar$  festgelegt. Die genaue Richtung von  $\vec{l}$  ist nicht bestimmbar, da durch die Festlegung von  $l_z$  die Anteile  $l_x$  und  $l_y$  nicht mehr gleichzeitig scharf definiert sind. Der Drehimpulsvektor befindet sich also irgendwo auf dem Kegelmantel (siehe Abbildung 17), den man sich klassisch als Präzessionskegel des Drehimpulses vorstellen kann. In diesem Modell sind dann nur diejenigen Größen meßbar, die zeitlich konstant sind ( $|\vec{l}|$  und  $l_z$ , aber nicht  $l_x$  und  $l_y$ ). (vgl. [13])

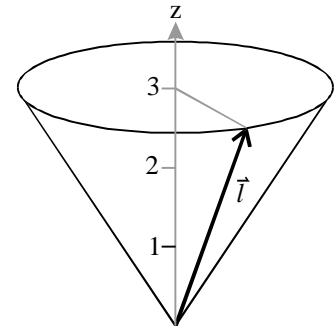


Abbildung 17:  
Unschärfe des Drehimpuls-  
vektors (aus [13])

## 4.4 Feinstruktur des Wasserstoffatoms

Wie bereits festgestellt haben, erhalten wir mit dem SCHRÖDINGERSchen Atommodell die gleichen Energiewerte wie beim BOHRschen. Mit zunehmender Meßgenauigkeit der spektroskopischen Apparate konnten immer mehr Feinheiten des Spektrums aufgelöst werden, die durch den in Kapitel 4.3 gemachten Ansatz nicht erklärt werden (vgl. auch Kapitel 4.2.5). Da die quantenmechanisch exakte Behandlung des Wasserstoffatoms mit der DIRACschen Theorie über die Grundlagen der Atomphysik hinausgeht, sollen in diesem Abschnitt anhand von anschaulichen Modellen die Ursachen für die Feinstruktur der Linienspektren erklärt werden.

### 4.4.1 Berücksichtigung relativistischer Effekte

In den bisherigen Betrachtungen zum wellenmechanischen Atommodell wurde eine mögliche relativistische Massenänderung vernachlässigt. Die kinetische Energie  $E_{kin}$  des Elektrons beträgt je nach Anregungszustand einige Elektronenvolt während die Ruheenergie  $E_0$  des Elektrons ungefähr 0,5 MeV ist. Das Verhältnis von  $E_{kin}$  zu  $E_0$  liegt also im Bereich von  $10^{-5}$ . Die zu erwartenden relativistischen Korrekturen sind von der gleichen Größenordnung.

Die (effektive) Masse  $m(v)$  des Elektrons hängt nach der speziellen Relativitätstheorie auch von der Geschwindigkeit  $v$  ab. Für die kinetische Energie  $E_{kin}$  des Elektrons ergibt sich folglich ein anderer Ausdruck:

$$E_{kin} = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 \quad (53)$$

Da  $p^2 c^2$  in unserem Fall relativ klein gegenüber  $m_0^2 c^4$  ist, kann die kinetische Energie  $E_{kin}$  näherungsweise in eine Reihe nach  $p$  entwickelt werden:

$$E_{kin}(v) \approx \frac{p^2}{2m_0} + \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} + \underbrace{\dots}_{\text{Abbruch nach dem 2. Glied}} \quad (54)$$

Bildet man den Hamiltonoperator mit diesem entwickelten Ausdruck für die kinetische Energie ( $p$  wieder durch  $-i\hbar\vec{\nabla}$  ersetzen) und löst dafür die SCHRÖDINGERgleichung (Gleichung 20), so ändern sich als Konsequenz die Energieeigenwerte  $E_{n,l}$  in folgender Weise ab:

$$E_{n,l} = -R_H \cdot hc \cdot \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{a^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (55)$$

Dabei ist  $a$  wieder die SOMMERFELDSche Feinstrukturkonstante (vgl. Gleichung 18). Man erhält also bis auf geringfügige Unterschiede ( $l+1 \rightarrow l+\frac{1}{2}$ ) das gleiche Ergebnis wie beim Atommodell von SOMMERFELD. Die Zusatzenergie  $\Delta E_{rel}$  durch die relativistische Korrektur ist also:

$$\Delta E_{rel} = -R_H \cdot hc \cdot \frac{a^2 Z^4}{n^4} \cdot \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \quad (56)$$

Beim Wasserstoffatom liegt  $\Delta E_{rel}$  im Bereich von  $10^{-5}$  eV.

Bem.: Diese relativistische Korrektur der Energietermine ist vereinfacht. Aus der DIRACschen Theorie folgen noch zusätzliche Korrekturterme, da mit Hilfe dieser Theorie auch die Existenz des Elektronenspins abgeleitet werden kann (vgl. Kapitel 4.4.3).

### 4.4.2 Magnetisches Moment der Bahnbewegung des Elektrons

Ein Elektronenzustand mit  $l \neq 0$  besitzt ein magnetisches Dipolmoment. Die folgende klassische Betrachtung macht die Ursache dieses Moments verständlich.

#### Klassisch

Ein mit der Frequenz  $f$  auf einer Kreisbahn mit Radius  $r$  und der Geschwindigkeit  $v$  umlaufendes Elektron entspricht einem elektrischen Strom  $I$  der Stärke:

$$I = \dot{Q} = -e \cdot f = -\frac{e}{T} = -\frac{e \cdot v}{2\pi \cdot r} \quad (57)$$

Es erzeugt daher ein magnetisches Dipolmoment  $\mathbf{m}$  (nicht zu verwechseln mit der reduzierten Masse):

$$\mathbf{m} = I \cdot A = I \cdot \pi r^2 = -\frac{e \cdot v}{2} \cdot r \quad (58)$$

Mit Hilfe des Betrags des Bahndrehimpulses  $|\vec{l}|$  können wir  $v$  schreiben als:

$$v = \frac{|\vec{l}|}{m_e \cdot r} \quad (59)$$

Da das magnetische Moment der Bahnbewegung und der Drehimpuls antiparallel sind (negative Ladung des Elektrons), erhalten wir schließlich:

$$\vec{m} = -\frac{e}{2m_e} \vec{l} \quad (60)$$

Die potentielle Energie  $E_{\text{mag}}$  des magnetischen Dipols ist dann:

$$E_{\text{mag}} = -\vec{m} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l} \cdot \vec{B} \quad (61)$$

#### Larmor-Präzession

Das Magnetfeld übt nach den Gesetzen der Elektrodynamik ein Drehmoment  $\vec{M}$  auf den Dipol aus:

$$\vec{M} = \vec{m} \times \vec{B} \quad (62)$$

Folglich ist  $\vec{l} = -2m_e \cdot \vec{m} / e$  nicht mehr zeitlich konstant, sondern präzediert mit einer Frequenz  $\omega$  um  $\vec{B}$  (siehe Abbildung 18).

Aus der Abbildung erkennt man  $|\Delta l| = |\vec{l}| \cdot \omega \cdot \sin \vartheta \cdot \Delta t$ ,

also gilt auch  $M = \frac{d|\vec{l}|}{dt} = \frac{|\Delta \vec{l}|}{\Delta t} = |\vec{l}| \cdot \omega \cdot \sin \vartheta$  und mit  $M = \vec{m} \cdot \vec{B} \cdot \sin \vartheta$  folgt für die sogenannte **LARMOR-Frequenz**  $\omega$  der Bahnbewegung:

$$\omega = \frac{\vec{m} \cdot \vec{B}}{|\vec{l}|} = \frac{e \cdot B}{2m_e} \quad (63)$$

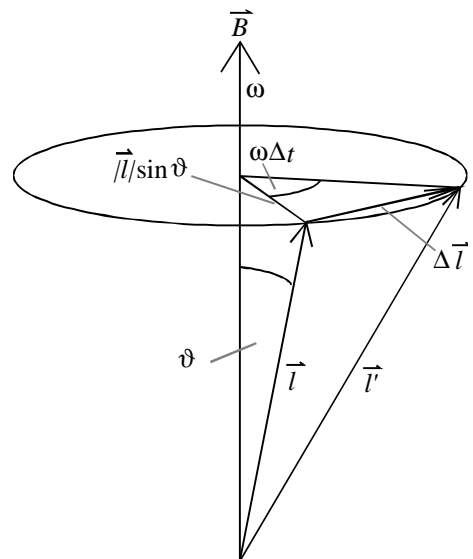


Abbildung 18: LARMOR-Präzession

### Quantenmechanisch

Es soll hier nochmals betont werden, daß die bisher durchgeführten klassischen Rechnungen lediglich eine Plausibilitätsbetrachtung darstellen. Für eine quantenmechanische Behandlung des Problems müssen wir den Hamiltonoperator um den Term  $V_{mag} = -\vec{m}\vec{B}$  erweitern, der die Energie eines Dipols im Magnetfeld darstellt, und die Energieeigenwerte dieser Gleichung berechnen.

Aus einer quantenmechanischen Störungsrechnung erhält man für kleine magnetische Potentiale  $V_{mag}$  (im Verhältnis zum COULOMB-Potential):

$$E_{mag} = -\vec{m}\vec{B} = g_l \cdot \frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l}\vec{B} \quad (64)$$

Dabei stellt die Proportionalitätskonstante  $g_l$ , der sog. **LANDÉsche g-Faktor**, einen Zusammenhang zwischen dem magnetischen Moment der Bahnbewegung und dem Bahndrehimpuls des Elektrons her. Nach der obigen klassischen Herleitung wäre  $g_l = 1$ . Der g-Faktor ist also auch ein Maß dafür, wie sehr sich das quantenmechanische magnetische Moment von dem klassisch berechneten unterscheidet.

Da im SCHRÖDINGERSchen Atommodell der Drehimpuls  $\vec{l}$  des Elektrons quantisiert ist, ist auch die potentielle Energie des Dipols gequantelt. Zeigt das Magnetfeld  $\vec{B} = (0,0,B)$  ausschließlich in z-Richtung (oder wählt man die z-Achse entsprechend), so ergibt sich mit der Quantisierung des Drehimpulses in z-Richtung  $l_z = m_l \cdot \hbar$  für die potentielle Energie des Dipols der folgende Ausdruck:

$$E_{mag} = g_l \cdot \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} \cdot m_l \cdot B \quad (65)$$

Der Faktor

$$\mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} \approx 57,88 \mu\text{eV} / \text{T} = 0,927 \cdot 10^{23} \cdot \text{A} \cdot \text{m}^2 \quad (66)$$

wird **BOHRsches Magneton** genannt. (vgl. [13]).

Für ein einzelnes Elektron erhält man aus dem Experiment  $g_l = 1$ , d.h. die vorher durchgeführte klassische Betrachtung liefert das richtige Ergebnis (vgl. [13]).

### 4.4.3 Spin des Elektrons

#### STERN-GERLACH-Versuch

In einem Hochvakuum führten 1922 STERN und GERLACH einen Strahl Silberatome, die sich im Grundzustand befanden, durch ein stark inhomogenes Magnetfeld. Dabei zeigten sich auf der Photoplatte zwei in Richtung des Feldgradienten getrennte Flecke (Abbildung 19). Ein ähnlicher Versuch wurde von PHIPPS und TAYLOR mit atomarem Wasserstoff wiederholt. Es ergab sich ebenfalls eine Aufspaltung des Strahls in zwei Komponenten. Wegen der Einfachheit des Wasserstoffatoms diskutieren wir im folgenden das Phänomen für dieses Element. (vgl. [12])

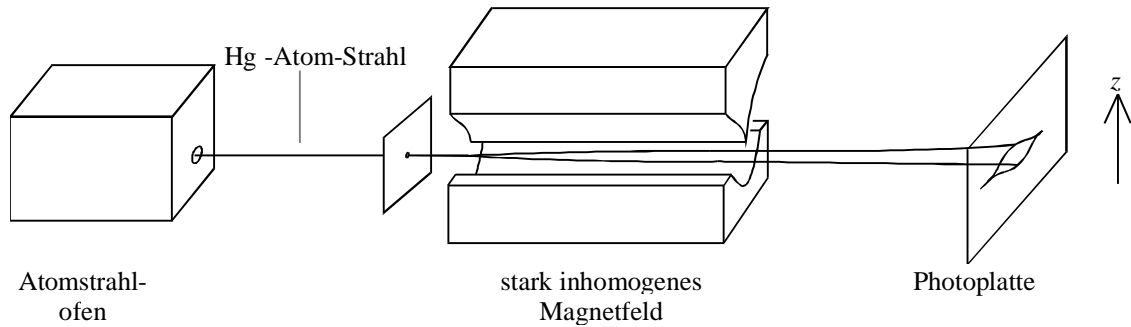


Abbildung 19: Schematische Darstellung des STERN-GERLACH-Versuches

Die Ursache für die Aufspaltung muß in einer Wechselwirkung des magnetischen Moments der Wasserstoffatome mit dem Magnetfeld liegen. Auf die Atome wirkt im Magnetfeld in  $z$ -Richtung die Kraft  $F_z$ :

$$F_z = -\frac{\partial V_{\text{mag}}}{\partial z} = -\frac{\partial(-\vec{m}\vec{B})}{\partial z} = m_z \frac{\partial B}{\partial z} \quad (67)$$

Da sich die Wasserstoffatome im Grundzustand befinden, hat das Elektron keinen Bahndrehimpuls. Nach Gleichung 56 wäre kein magnetisches Moment und daher keine ablenkende Kraft zu erwarten.

Bem.: Bei den Silberatomen kompensieren sich die magnetischen Momente der inneren Elektronen gegenseitig und so ist allein das magnetische Moment des äußeren Elektrons (mit  $l=0$ ) für das gesamte magnetische Moment des Atoms verantwortlich. Bei den Silberatomen liegen also ähnliche Voraussetzungen vor wie beim Wasserstoffatom.

Wie wir sehen werden, läßt sich die Aufspaltung des Atomstrahls jedoch deuten, wenn man dem Elektron einen Eigendrehimpuls zuordnet, der anschaulich von einer Drehung des Elektrons um sich selbst herrührt. Diese Eigendrehung wird **Spin** (engl. „schnelle Drehung, Drall“) genannt.

### Spin

In Analogie zum Drehimpuls wird der Spin ebenfalls durch einen Vektor  $\vec{s}$  beschrieben, für den gilt:

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar \quad (68)$$

und

$$s_z = m_s \cdot \hbar \quad (69)$$

mit der **magnetischen Spinquantenzahl**  $m_s = -s, -s+1, \dots, s$

$m_s$  stellt eine vierte Quantenzahl zur Charakterisierung des Elektronenzustands dar.

$s_z$  bzw.  $m_s$  kann  $2s+1$  Werte annehmen. Da wir im Experiment eine Aufspaltung in zwei Komponenten erhalten haben, gilt für die Spinquantenzahl  $s$ :

$$s = \frac{1}{2} \quad (70)$$

Wie der Drehimpuls  $\vec{l}$  unterliegt auch  $\vec{s}$  einer räumlichen Quantelung, wobei seine genaue Richtung unbestimmbar bleibt. Bekannt ist, daß für den Betrag des Eigendrehimpulses stets  $|\vec{s}| = \sqrt{3/4} \cdot \hbar$  gilt und seine z-Komponente  $s_z$  entweder den Wert  $+\hbar/2$  oder  $-\hbar/2$  hat.  $\vec{s}$  ist also niemals parallel zur z-Achse, sondern befindet sich irgendwo auf dem oberen ( $m_s = +1/2$  bzw. unteren ( $m_s = -1/2$ ) Kegelmantel (siehe Abbildung 20). Ist die z-Richtung festgelegt, dann sind die Komponenten  $s_x$  und  $s_y$  nicht mehr bestimmbar.

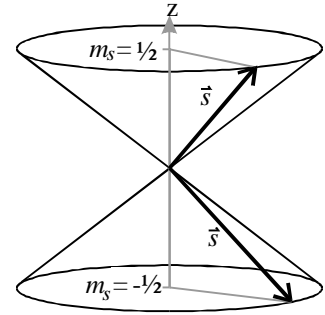


Abbildung 20: Richtungsquantelung des Spins

Der Spin verursacht ein magnetisches Moment  $\vec{m}_s$ . In Analogie zu den Regeln für den Drehimpuls legen wir dabei einen Proportionalitätsfaktor  $g_s$ , den **LANDÉschen g-Faktor des Elektronenspins**, fest

$$\vec{m}_s = -g_s \cdot \vec{m}_B \cdot \frac{\vec{s}}{\hbar} \quad (71)$$

Für die z-Komponente  $m_{s,z}$  gilt dann wieder:

$$m_{s,z} = -g_s \cdot m_B \cdot m_s \quad (72)$$

Mit Hilfe des EINSTEIN-DE HAAS-Effekts kann man zum Beispiel das magnetische Moment  $\vec{m}_{s,z}$  des Elektronenspins bestimmen. Dabei ergibt sich, daß der Betrag von  $\vec{m}_{s,z}$  ungefähr gleich dem BOHRschen Magneton  $m_B$  ist. Wegen  $|m_s| = 1/2$  ist folgt aus Gleichung 72, daß  $g_s$  ungefähr 2 ist.

Neuere und wesentlich aufwendigere Experimente, die andere Effekte ausnutzen, ergeben  $g_s = 2,002319304386 \pm 2 \cdot 10^{-11}$ . Für unsere Zwecke genügt es aber mit der Näherung  $g_s \approx 2$  zu rechnen (vgl. [17]).

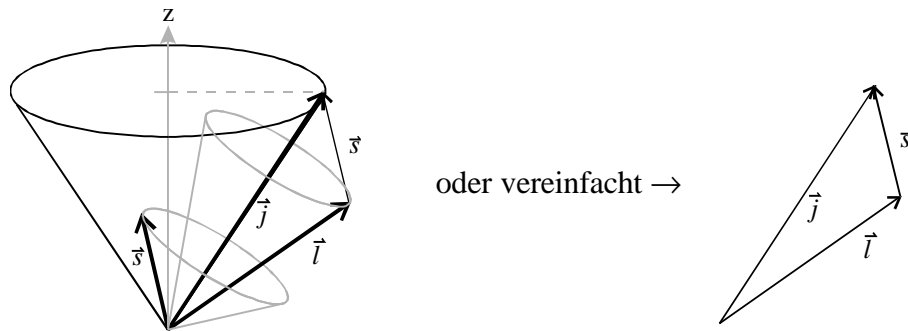
#### 4.4.4 Spin-Bahn-Kopplung

Die Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Spinmoment und dem Magnetfeld aufgrund der Bahnbewegung führt bei einem Eielektronensystem dazu, daß Bahndrehimpuls  $\vec{l}$  und Eigendrehimpuls  $\vec{s}$  nicht mehr unabhängig voneinander sind. Ohne äußeres Magnetfeld addieren sich  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  vektoriell zu einem konstanten **Gesamtdrehimpuls**  $\vec{j}$ .

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (73)$$

$\vec{l}$  und  $\vec{s}$  präzedieren durch die Kopplung nicht mehr um die z-Achse, sondern um  $\vec{j}$ . Ihre z-Komponenten  $l_z$  und  $s_z$  sind nicht mehr beobachtbar.  $|\vec{l}|$ ,  $|\vec{s}|$ ,  $|\vec{j}|$  und  $j_z$  sind aber sehr wohl gleichzeitig scharf meßbar. Dies kann man sich in einem klassischen Bild mit den Präzessionskegeln aus Abbildung 21 veranschaulichen. Dabei stellt man sich vor, daß die Vektoren jeweils ihre Kegelmäntel „umlaufen“. Meßbare Größen besitzen dann jeweils zeitlich konstanten Werte, während nicht meßbare Größen keine zeitlich festen Werte haben.



Abbildung 21 und Abbildung 22:  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  koppeln sich zu  $\vec{j}$ 

Für die neue **Gesamtdrehimpulsquantenzahl**  $j$  gibt es dann die Möglichkeiten

$$j = l + s \quad (74)$$

und falls  $l > s$

$$j = l - s \quad (75)$$

$$\begin{aligned} \text{Bsp.: } l = 0 ; s = \frac{1}{2} &\Rightarrow j = \frac{1}{2} \\ l = 1 ; s = \frac{1}{2} &\Rightarrow j = \frac{1}{2} \text{ oder } j = \frac{3}{2} \end{aligned}$$

Für den **Gesamtdrehimpuls**  $\vec{j}$  gelten wieder die alten Rechenregeln:

$$|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar \quad (76)$$

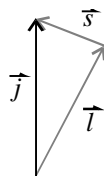
$$j_z = m_j \cdot \hbar \quad (77)$$

mit der **magnetischen Gesamtdrehimpulsquantenzahl**  $m_j = -j, (-j+1), \dots, (j-1), j$  kann daher insgesamt  $2j+1$  Werte annehmen. (vgl. [16])

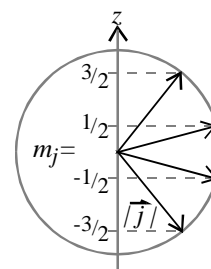
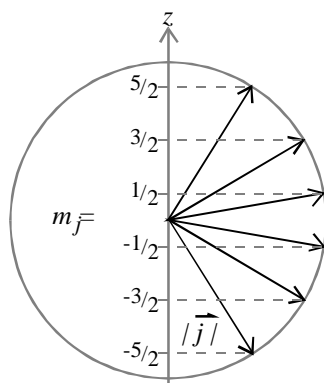
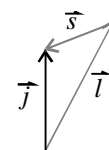
Bsp.:

$$l = 2 ; s = \frac{1}{2} \quad \text{oder}$$

$$j = \frac{5}{2} \\ |\vec{j}| = \sqrt{\frac{35}{4}} \cdot \hbar$$



$$j = \frac{3}{2} \\ |\vec{j}| = \sqrt{\frac{15}{4}} \cdot \hbar$$



Auch die Magnetmomente  $\vec{m}_l$  und  $\vec{m}_s$  setzen sich vektoriell zu einem additiven Magnetmoment  $\vec{m}_{l,s}$  zusammen (Abbildung 23). Zwar sind  $\vec{m}_l$  bzw.  $\vec{m}_s$  jeweils antiparallel zu  $\vec{l}$  bzw.  $\vec{s}$ , weil aber der g-Faktor des Spins (etwa) doppelt so groß ist wie der des Bahndrehimpulses, ist  $\vec{m}_{l,s}$  nicht antiparallel zu  $\vec{j}$ . Ohne äußeres Magnetfeld präzediert  $\vec{m}_{l,s}$  um  $\vec{j}$  und bildet im zeitlichen Mittel ein **magnetisches Moment  $\vec{m}_j$  des Gesamtdrehimpulses**, da sich die Komponenten von  $\vec{m}_{l,s}$  senkrecht zu  $\vec{m}_j$  im zeitlichen Mittel gegenseitig kompensieren. Für  $\vec{m}_j$  gilt dann:

$$\vec{m}_j = -g_j \cdot \vec{m}_B \cdot \frac{\vec{j}}{\hbar} \quad (78)$$

bzw. für seine z-Komponente

$$m_{j,z} = -g_j \cdot m_B \cdot m_j \quad (79)$$

Den zugehörigen **LANDÉschen g-Faktor des Gesamtdrehimpulses  $g_j$**  kann man über den Kosinussatz ableiten. Man erhält:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2 \cdot j(j+1)} \quad (80)$$

Für den LANDÉschen g-Faktor des Gesamtdrehimpulses gilt stets folgende Bedingung:

$$g_l < g_j < g_s \quad (81)$$

Verschaffen wir uns nun mit der folgenden Tabelle einen Überblick über die Quantenzahlen, Drehimpulse und magnetischen Momente des Einelektronensystems (vgl. [16]):

Bezeichnung	Quantenzahlen	Drehimpuls	Magnetisches Moment	g-Faktor
„Bahn“	$l = 0, 1, \dots (n-1)$ $m_l = -l, \dots, (l-1), l$	$ \vec{l}  = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$ $l_z = m_l \cdot \hbar$	$\vec{m}_l = -g_l \cdot \vec{m}_B \cdot \frac{\vec{l}}{\hbar}$ $m_{l,z} = -g_l \cdot m_B \cdot m_l$	$g_l = 1$
„Spin“	$s = 1/2$ $m_s = -1/2, +1/2$	$ \vec{s}  = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar$ $s_z = m_s \cdot \hbar$	$\vec{m}_s = -g_s \cdot \vec{m}_B \cdot \frac{\vec{s}}{\hbar}$ $m_{s,z} = -g_s \cdot m_B \cdot m_s$	$g_s \approx 2$
„Gesamt“	$j = l+s,  l-s $ $m_j = -j, \dots, (j-1), j$	$ \vec{j}  = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$ $j_z = m_j \cdot \hbar$	$\vec{m}_j = -g_j \cdot \vec{m}_B \cdot \frac{\vec{j}}{\hbar}$ $m_{j,z} = -g_j \cdot m_B \cdot m_j$	$g_j$

Tabelle 2 : Quantenzahlen, Drehimpulse, magnetische Momente und g-Faktoren des Einelektronensystems

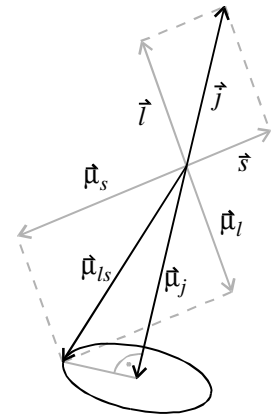


Abbildung 23:  
Addition der magnetischen Momente

#### 4.4.5 Energie der Spin-Bahn-Kopplung

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir uns mit den magnetischen Momenten des Einelektronensystems beschäftigt. Diese machen Korrekturen der Energieterme notwendig, falls sich die Dipole in einem Magnetfeld befinden. Folgende anschauliche Überlegung mit Hilfe des

BOHRschen Modells zeigt, daß die atomaren Magnetmomente auch ohne die Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes schon einem inneren Magnetfeld ausgesetzt sind.

Wir haben bisher ein Kern-Elektron-System immer vom Bezugssystem des Kerns aus betrachtet (Abbildung 24). Nach der Relativitätstheorie kann dieses System aber auch vom Ruhesystem des Elektrons aus betrachtet (Abbildung 25) werden. (vgl. [13])

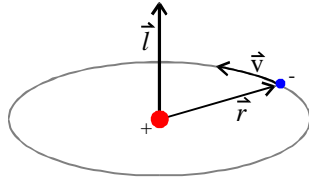


Abbildung 24:

Im Ruhesystem des Kerns umläuft das Elektron den Kern.

Wechsel ins Ruhesystem  
des Elektrons →

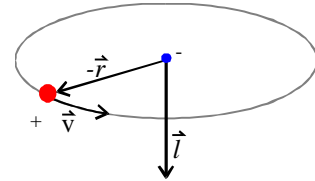


Abbildung 25:

Im Ruhesystem des Elektrons umläuft der Kern das Elektron

Für  $l \neq 0$  erzeugt dann vom Elektron aus gesehen der kreisende Kern ein Magnetfeld am Ort des Elektrons. Dieses Feld würde man klassisch mit Hilfe des BIOT-SAVART-Gesetzes berechnen. Man erhält:

$$\vec{B}_l = \frac{\vec{m}_b \cdot Z \cdot e}{4\pi r^3 \cdot m_e} \cdot \vec{l} \quad (82)$$

Die Rücktransformation ins Ruhesystem des Kerns ist nicht trivial. Die Berücksichtigung relativistischer Effekte führt auf einen zusätzlichen Faktor  $1/2$  (**THOMAS-Faktor**). Da das magnetische Potential relativ klein gegenüber dem Coulombschen Potential ist, ergibt eine Störungsrechnung, daß die Zusatzenergie  $\Delta E_{l,s}$  infolge der Spin-Bahn-Wechselwirkung gleich dem Erwartungswert der potentiellen Energie des magnetischen Dipols:

$$\Delta E_{l,s} = \langle -\vec{m}_s \cdot \vec{B}_l \rangle = \left\langle +g_s \cdot \vec{m}_B \cdot \vec{s} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\vec{m}_b \cdot Z \cdot e}{4\pi r^3} \vec{l} \right\rangle = g_s \cdot \vec{m}_B \cdot \frac{\vec{m}_b \cdot Z \cdot e}{8\pi r^3} \cdot \langle \vec{s} \vec{l} \rangle \quad (83)$$

Um das Vektorprodukt  $\langle \vec{s} \vec{l} \rangle$  auszudrücken benutzen wir geschickt einen Umweg über den Gesamtdrehimpuls  $\vec{j}$ :

$$\vec{j}^2 = (\vec{l} + \vec{s}) \cdot (\vec{l} + \vec{s}) = \vec{l}^2 + 2\vec{l} \vec{s} + \vec{s}^2 \quad (84)$$

$$\langle \vec{s} \vec{l} \rangle = \frac{1}{2} (\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2) = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \hbar^2 \quad (85)$$

Im BOHRschen Modell könnten wir für den Abstand  $r$  den Bahnradius  $r_n$  (vgl. Gleichung 8) einsetzen. Die Verwendung des Erwartungswerts von  $1/r^3$  aus dem wellenmechanischen Atommodell liefert aber die besseren Ergebnisse. Man erhält (vgl. [12])

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{n^3 \cdot (l+1) \cdot (l+1/2) \cdot l} \cdot \frac{Z^3}{a_0^3} \quad (86)$$

mit  $a_0$  als Radius der ersten BOHRschen Bahn. Jetzt können wir die **Spin-Bahn-Kopplungsenergie**  $\Delta E_{l,s}$  aus Gleichung (83) mit Gleichung (85) und Gleichung (86) ohne Vektoren schreiben:

$$DE_{l,s} = g_s \cdot m_B \frac{m_0 \cdot Z^4 \cdot e}{8p \cdot n^3 \cdot l \cdot (l + \frac{1}{2}) \cdot (l + 1) \cdot a_0^3} \cdot \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \cdot \hbar^2 \quad (87)$$

Setzen wir  $g_s=2$  und benutzen  $a$  sowie  $R_H$ , so läßt sich  $E_{l,s}$  etwas einfacher schreiben:

$$\Delta E_{l,s} = R_H \cdot hc \cdot \frac{a^2 \cdot Z^4}{n^3} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l \cdot (2l+1) \cdot (l+1)} \quad (88)$$

Bem.: Eine quantenmechanische Störungsrechnung liefert den gleichen Korrekturterm  $\Delta E_{l,s}$  wie die hier gezeigte anschauliche Ableitung. (vgl. [13])

Die Korrekturen sind im Vergleich zu den entsprechenden BOHR-SCHRÖDINGERSchen Energieniveaus grob von der Größenordnung  $Z^2 a^2/n \approx 5 \cdot 10^{-5} \cdot Z^2/n$ . Der Energieunterschied  $\Delta E$  zwischen einem Zustand mit  $j=l+s$  und einem mit  $j=l-s$  bei sonst gleichen Quantenzahlen ist:

$$\Delta E \approx \underbrace{R_H \cdot hc \cdot \frac{1}{n^2}}_{\text{Bohr-Schrödinger}} \cdot 5,33 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{Z^2}{n \cdot l \cdot (l+1)} \quad (89)$$

#### 4.4.6 Energieniveaus und Auswahlregeln für das Einelektronensystem nach der Quantentheorie

##### Energieniveaus

Als Abschluß unserer Betrachtungen wollen wir nun die Energieterme für das Einelektronensystem zusammenfassen. Dabei addieren wir zu den Energietermen  $E_n$ , wie sie sich nach dem SCHRÖDINGERSchen Atommodell ergeben haben, die Korrekturterme für die relativistische Massenänderung  $\Delta E_{\text{rel}}$  und die Spin-Bahn-Wechselwirkung  $\Delta E_{l,s}$  (vgl. [13]):

$$\begin{aligned} E_{n,l,s} &= E_n + DE_{\text{rel}} + DE_{l,s} = -R_H \cdot hc \cdot \frac{Z^2}{n^2} - R_H \cdot hc \cdot \frac{a^2 \cdot Z^4}{n^4} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \\ &\quad + R_H \cdot hc \cdot \frac{a^2 \cdot Z^4}{n^3} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l \cdot (2l+1) \cdot (l+1)} = \\ &= -R_H \cdot hc \cdot \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{a^2 \cdot Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) - \frac{a^2 \cdot Z^2}{n} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l \cdot (2l+1) \cdot (l+1)} \right] \end{aligned} \quad (90)$$

Erweitern wir den letzten Term in der eckigen Klammer mit  $n$  und verwenden  $j = l \pm \frac{1}{2}$  und  $s = \frac{1}{2}$  (Einelektronensystem!) können wir den Ausdruck weiter vereinfachen, so daß die Energie nur noch von den Quantenzahlen  $n$  und  $j$  abhängt. Das Energieniveau  $E_{n,j}$  eines Elektrons berechnet sich nach der Quantentheorie (ohne äußeres Feld) also folgendermaßen:

$$E_{n,j} = -R_H \cdot hc \cdot \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{a^2 \cdot Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (91)$$

Der zweite Summand in der Klammer bestimmt die Aufspaltung der Energieterme (**Feinstruktur**) für unterschiedliche Gesamtdrehimpulsquantenzahlen  $j$ . Die Addition der beiden Energieterme  $E_{n,l}$  und  $E_{l,s}$ , die beide von  $l$  abhängen, führte dazu, daß das Ergebnis nicht mehr explizit von  $l$  abhängt.  $E_{n,j}$  ist also bezüglich  $l$  und  $m_l$  entartet. Ein Zustand mit  $n=2$ ,  $l=0$ ,  $j=\frac{1}{2}$  ist demnach energetisch gleich mit dem Zustand  $n=2$ ,  $l=1$ ,  $j=\frac{1}{2}$ . Außer für  $l=0$

kann  $j$  für ein bestimmtes  $l$  jeweils zwei verschiedene Werte annehmen. Man erhält daher zum gleichen  $l$  fast immer zwei Energieniveaus (**Duplett-Terme**).

Bem.: Die Berechnung der Energiezustände für das Einelektronensystem nach der mathematisch viel anspruchsvolleren DIRACschen Theorie führt zu den gleichen Energietermen, wie wir sie in Gleichung 91 erhalten haben.

Da der Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $j$  jetzt eine entscheidende Bedeutung zukommt ergänzt man die bisherige Nomenklatur für die Energieterme durch einen Index  $j$ . Schließlich stellt man die Multiplizität des jeweiligen Niveaus, die gleich  $2s+1$  ist (Anzahl möglicher Einstellungen des Spins), an eine Stelle nach der Hauptquantenzahl  $n$  hoch vor den Großbuchstaben  $L$ , der für die jeweils zugehörige spektroskopische Bezeichnung steht (siehe 2.2.5). Das allgemeine Schema sieht also folgendermaßen aus:

$$n^{2s+1}L_j$$

Die Abkürzung  $2^2P_{3/2}$  steht also für einen Zustand mit  $n=2$ ,  $s=\frac{1}{2}$ ,  $l=1$  und  $j=\frac{3}{2}$ .

Bem.: Für  $l=0$  erhält man zwar keine Duplett-Struktur nach Gleichung (90), man verwendet aber trotzdem  $2s+1$  zur Kennzeichnung der Multiplizität und sagt, daß die Multiplizität nicht voll entwickelt ist.

### Auswahlregeln

Genauere quantenmechanische Betrachtungen liefern für erlaubte elektrische Dipolübergänge die folgenden Auswahlregeln (vgl. [12]):

$$E_{n,j} \neq E_{n',j'}; \Delta l = \pm 1; \Delta j = (0; \pm 1); \Delta m = (0; \pm 1) \quad (92)$$

### Termschema

Abbildung 26 stellt ein Termschema nach Gleichung 91 dar. Die Pfeile deuten die nach den Auswahlregeln erlaubten Übergänge für die  $H_\beta$ -Linie des Wasserstoffatoms an.

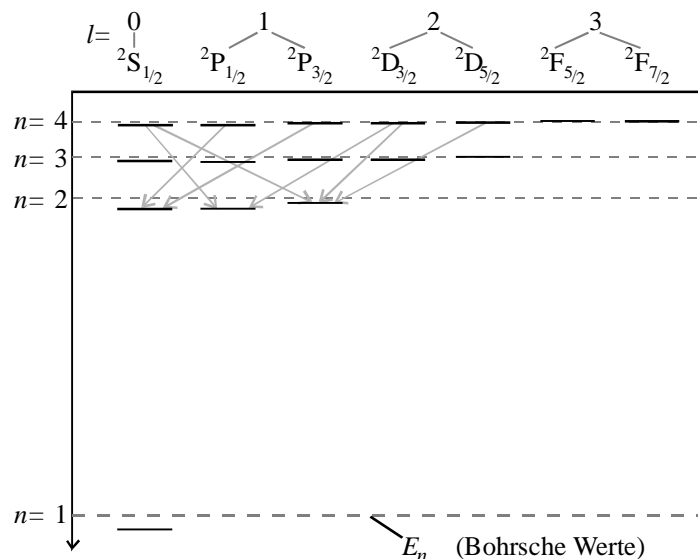


Abbildung 26: Energieschema nach Gleichung 90.

Die gestrichelten Linien deuten die entsprechenden BOHR'schen Energiewerte an.

Es sind zwar sieben verschiedene Übergänge erlaubt, aber nach Gleichung (91) unterscheiden sich nur fünf auch energetisch voneinander. (vgl. [13])

**Ausblick**

Auch die nach Gleichung (90) identischen Energieniveaus  $2^2S_{1/2}$  und  $2^2P_{1/2}$  erweisen sich in sehr empfindlichen Experimenten nicht als vollkommen energetisch gleich, wie dies LAMB und RETHERFORD nachweisen konnten. Die beiden Niveaus trennt ein geringfügiger Energieunterschied im Bereich von  $4 \cdot 10^{-6}$  eV. Diese sog. **LAMB-Verschiebung** kann erst durch die Quantenelektrodynamik erklärt werden.

Es bleibt außerdem zu klären, welche Auswirkungen äußere Felder auf die Energieterme in Atomen haben. (**ZEEMAN-Effekte**, **PASCHEN-BACK-Effekt** und **STARK-Effekte**)

Schließlich sei noch angemerkt, daß auch der Atomkern selbst einen Spin besitzen kann, der auch zu Modifikationen der Energieniveaus führt (**Hyperfeinstruktur**). Eine sich daraus ergebende Anwendung ist die Kernspin-Tomographie. (vgl. [13])

## 5 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden drei Computerprogramme entwickelt. Dazu gehört außerdem ein Repetitorium, das die physikalischen Grundlagen zusammenstellt, damit der Benutzer die Programme lernwirksam einsetzen kann. Die Programme lernt man am besten über konkrete Aufgabenstellungen innerhalb des Repetitoriums kennen. Diese Arbeitsaufträge bieten dem Studenten auch die Gelegenheit nochmals über den gelesenen Inhalt nachzudenken, ihn zu vertiefen und mit den Programmen zu „experimentieren“. Das Zusammenwirken von Repetitorium und Programm soll das Lernen zielstrebig und effektiv gestalten.

Nach der Einleitung und einer tabellarischen Übersicht orientiert sich das dritte Kapitel zunächst an der geschichtlichen Entwicklung der Atomphysik. Dem Leser wird kurz der historische Ursprung der Atomhypothese und der lange Weg bis zu ihren endgültigen Beweis vorgestellt. Der anschließende Abschnitt über grundlegende Quantenphänomene ruft den Leser nochmals die Phänomene ins Gedächtnis, die es in einer „Welt“ von atomaren Dimensionen zu beachten gilt.

Im vierten Kapitel werden dann verschiedene Atommodelle und ihre Anwendungen vorgestellt. Den Anfang macht dabei das RUTHERFORDSche Atommodell. Mit diesem Modell wurde eine wesentliche Erkenntnis über die Zusammensetzung des Atoms gewonnen, wovon alle nachfolgenden Modelle profitierten. Der Leser lernt hier den entscheidenden Streuversuch kennen und kann mit Hilfe der angegebenen experimentellen Rohergebnisse und des **Programms Rutherford** eine Abschätzung für den Kernradius gewinnen. Eine Nachahmung des Versuches von CHADWICK mit Hilfe des Programms Rutherford rundet dieses Kapitel ab.

Als nächstes wird das Modell von BOHR vorgestellt. BOHR machte mit seinem Modell den notwendigen Schritt zur Entwicklung von Atomvorstellungen auf Grundlage von Quantisierungsvorschriften. Dadurch gelang es die bekannten Probleme, die das RUTHERFORDSche Modell beinhaltet, zu umgehen. Mit dem Bohrschen Atommodell konnten auch erstmals das Spektrum des Wasserstoffatoms erklärt werden. Das **Programm Bohr** widmet sich diesem Modell. Mit seiner Hilfe kann der Benutzer die Zuordnung zwischen den verschiedenen Bahnübergängen und den zugehörigen Spektrallinien nachvollziehen. Daneben können im Programm auch Optionen aktiviert werden, um die Mitrotation des Kerns oder auch die SOMMERFELDSche Erweiterung des BOHRschen Modells in den Berechnungen des Programms zu berücksichtigen.

Mit der Entwicklung des wellenmechanischen Atommodells durch SCHRÖDINGER konnte der Erklärungsnotstand, in dem sich das BOHRsche Modell noch befand (Postulate), überwunden werden. Dieses Modell ist jedoch weitaus unanschaulicher als seine Vorgänger. Deshalb wurde ihm ein besonderer Wert darauf gelegt, dem Leser die Ursprünge der Quantisierungsbedingungen und die damit verbundenen Quantenzahlen  $n$ ,  $l$  und  $m_l$  zu erläutern. Zum anderen werden in den Fenstern des **Programms Schrödinger** die unterschiedlichen Veranschaulichungsmöglichkeiten der wellenmechanischen Vorstellung angeboten, wie sie auch in den verschiedenen Lehrbüchern zu finden sind. Auch exotische Teilchensysteme, wie z.B. ein Proton-Myon-System, können mit dem Programm Schrödinger berechnet werden.

Aus Gründen der Vollständigkeit werden abschließend die Ursachen für die Feinstrukturen im Spektrum des Wasserstoffatoms erläutert. Mittels anschaulicher Begründungen gelangt man dabei zu den gleichen Energietermen wie die mathematisch anspruchsvollere DIRACsche Theorie.

## Anhang : Hinweise zur Installation der Programme

Zur Installation der Programme starten Sie unter Windows, die Datei **INSTALL.EXE** auf der **Diskette Nr. 1**. Mit Hilfe des Installationsprogramms können Sie auch das Laufwerk und das Verzeichnis auswählen, in das die Dateien kopiert werden sollen. Bitte beachten Sie, daß die Dateien auf den Disketten komprimiert sind. Zur vollen Installation sollte das von Ihnen gewählte Laufwerk mindestens **4 MB freien Speicher** aufweisen. Bei Aufforderung legen Sie bitte die **Diskette Nr. 2** ein.

Alle benötigten Dateien werden ausschließlich in das von Ihnen gewählte Verzeichnis kopiert. Falls Sie die Programme nicht mehr benötigen, dann entfernen Sie einfach das Verzeichnis, in dem sich die Dateien befinden.

Nach der erfolgreichen Installation wird automatisch eine Programmgruppe Atom mit den Dateien **Rutherford**, **Bohr**, **Schrödinger**, den zugehörigen **Hilfedateien** und dem Word-Dokument **RepAtom** eingerichtet. Die Dateien starten Sie dann durch Doppelklicken.

Um das Dokument **RepAtom** zu öffnen benötigen Sie **Microsoft Word 6.0** oder höher. Falls Sie dieses Programm nicht besitzen sollten Sie zunächst probieren, ob sich das Dokument mit Hilfe Ihres Textverarbeitungsprogramms öffnen/importieren läßt. Leider wurde festgestellt, daß dabei manchmal Schwierigkeiten z.B. bei Kapitelnummern, Grafiken und Tabellen auftreten. Deshalb liegt auf der Diskette Nr. 3 das kostenlose Programm **Word Viewer** von Microsoft bei, mit dem Sie **RepAtom** problemlos öffnen betrachten und ausdrucken können. Das Bearbeiten des Dokuments ist mit diesem Programm jedoch nicht möglich. Die Installationsanleitung für dieses Programm entnehmen Sie bitte der Datei **INSTALL.TXT** auf der Diskette.



## Literaturverzeichnis

- [1] FEYNMAN, R. P.: Vorlesungen über Physik. Bd. 1, Teil 1 München 1974, S. 1-2.
- [2] SCHWANEBERG, R.: Die Brownsche Bewegung im Unterricht der Sekundarstufe I und II, In: Physica didactica 13, Heft 1, 1986
- [3] KACHER, H./ MEYER, H.: Skriptum Atomphysik, 2.Auflage, Springer-Verlag Berlin 1988
- [4] DIN DEUTSCHES INSTITUT FÜR NORMUNG E.V. (Hrsg.): Normen für Größen und Einheiten in Naturwissenschaft und Technik, 5. Auflage, AEF-Verlag 1978
- [5] MENDE, D. / SIMON, G.: Physik, Fachbuchverlag Leipzig 1967
- [6] HAKEN, H./ WOLF, H. C.: Atom- und Quantenphysik, 4.Auflage, Springer-Verlag Berlin 1990
- [7] SOMMERFELD, A.: Atombau und Spektrallinien, 1. Band, 5. umgearbeitete Auflage, Friedr. Vieweg & Sohn Aktiengesellschaft Braunschweig 1931
- [8] TRIGG, G. L., Experimente der modernen Physik, Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft Braunschweig 1984
- [9] WILSON, D.: Rutherford, Hodder and Stoughton London 1983
- [10] DEMTRÖDER, W., Experimentalphysik III, Springer-Verlag Berlin 1996
- [11] KUHN, W.: Entwicklung der Atomvorstellungen in der Zeit von 1900 bis 1920 Teil 2, In: Praxis der Naturwissenschaften - Physik 3/92, S. 39-40
- [12] OTTER, G. / HONECKER, R.: Atome - Moleküle - Kerne, Band I Atomphysik, B. G. Teubner Stuttgart 1993
- [13] MAYER-KUCKUK, T.: Atomphysik, 4. Auflage, B. G. Teubner Stuttgart 1994
- [14] KUHN, W.: Physik, Band III E, Quantenphysik, Georg Westermann Verlag Braunschweig 1976
- [15] KNEUBÜHL, F. K.: Repetitorium der Physik, 4. Auflage, B. G. Teubner Stuttgart 1990
- [16] KALVIUS, G. M./ LUCHNER, K./ VONACH, H.: Physik IV, Physik der Atome und Moleküle, Physik der Wärme, 4. Auflage, Oldenbourg Verlag München Wien 1995
- [17] BETHGE, K. / GRUBER, G., Physik der Atome und Moleküle, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1990

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. Hans-Peter Steinrück für die interessante Aufgabenstellung und die jederzeit angebotene Unterstützung danken. Besonderes hervorheben möchte ich auch seine Vorstellung und den intensive Einsatz meiner Computerprogramme in der Vorlesung Einführung in die Physik III.

Bei Herrn Dr. Raimund Girwidz bedanke ich mich für die zahlreichen fördernden Diskussionen und die hervorragende Betreuung, die wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat. Darüberhinaus möchte ich mich nochmals für die Gelegenheit bedanken, diese Arbeit im Rahmen einer Lehrerfortbildung vorstellen zu dürfen.

Außerdem möchte ich Prof. Dr. Wolfgang Faschinger meinen Dank aussprechen, der mir die Vorführung der Computerprogramme in der Vorlesung Moderne Physik I ermöglichte.

Schließlich bedanke ich mich noch bei allen freiwilligen Programmtestern der Vorlesungen Einführung in die Physik III und Moderne Physik I des Wintersemesters 1996/97. Mein Dank gilt dabei insbesondere Simon Rothenhöfer, Ralph Scheicher und Bernd Treuheit für ihre detaillierten Anmerkungen und Verbesserungsvorschläge.