

---

# Physik IV

Atome, Moleküle, Wärmestatistik

---

**Vorlesungsskript zur Vorlesung im SS 2003**

Prof. Dr. Rudolf Gross

Walther-Meissner-Institut

Bayerische Akademie der Wissenschaften

und

Lehrstuhl für Technische Physik (E23)

Technische Universität München

Walther-Meissner-Strasse 8

D-85748 Garching

Rudolf.Gross@wmi.badw.de



# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b>	<b>xiii</b>
<b>I Physik der Atome und Moleküle</b>	<b>1</b>
<b>1 Einführung in die Quantenphysik</b>	<b>3</b>
1.1 Der Welle-Teilchen Dualismus . . . . .	4
1.1.1 Dualismus des Lichtes . . . . .	4
1.1.2 Dualismus der Materie . . . . .	6
1.2 Materiewellen und Wellenfunktionen . . . . .	10
1.2.1 Wellenpakete . . . . .	11
1.2.2 Die Heisenbergsche Unschärferelation . . . . .	13
1.2.3 Messprozess und Observable . . . . .	17
1.2.4 Dispersion von Materiewellen . . . . .	17
1.2.5 Gegenüberstellung Quantenphysik – klassische Physik . . . . .	19
1.3 Grundlagen der Quantenmechanik . . . . .	22
1.3.1 Schrödinger-Gleichung und Materiewellen . . . . .	22
1.3.2 Operatoren . . . . .	29
1.3.3 Erwartungswerte . . . . .	33
1.3.4 Eigenwerte und Eigenfunktionen . . . . .	34
1.3.5 Zulässige Operatoren . . . . .	36
1.3.6 Vertiefungsthema: Quantenmechanische Bewegungsgleichung . . . . .	37
1.3.7 Vertiefungsthema: Vertauschungsrelationen und Heisenbergsche Unschärferelation . . . . .	38
1.3.8 Anwendungen . . . . .	40
1.4 Ununterscheidbarkeit . . . . .	41
1.5 Fermionen und Bosonen . . . . .	45

1.5.1	Der Spin von Quantenteilchen . . . . .	45
1.5.2	Quantenteilchen mit ganz- und halbzahligem Spin . . . . .	46
1.6	Austauschsymmetrie und Pauli-Verbot . . . . .	48
1.6.1	Die Austauschsymmetrie . . . . .	48
1.6.2	Das Pauli-Verbot . . . . .	50
1.7	Vertiefungsthema: Zur Axiomatik der Quantenmechanik . . . . .	52
<b>2</b>	<b>Aufbau der Atome</b>	<b>57</b>
2.1	Historisches . . . . .	58
2.2	Experimenteller Nachweis der Existenz von Atomen . . . . .	59
2.3	Größe, Masse und elektrischer Aufbau von Atomen . . . . .	63
2.3.1	Größe von Atomen . . . . .	63
2.3.2	Der elektrische Aufbau von Atomen . . . . .	64
2.3.3	Bestimmung der Atommasse . . . . .	65
2.4	Die Struktur von Atomen . . . . .	69
2.4.1	Geschichtliche Entwicklung . . . . .	69
2.4.2	Grundlagen zu Streuexperimenten . . . . .	71
<b>3</b>	<b>Das Einelektronenatom</b>	<b>81</b>
3.1	Experimentelle Grundlagen . . . . .	82
3.1.1	Spektralanalyse . . . . .	82
3.1.2	Anregung von Atomen . . . . .	83
3.1.3	Das Spektrum des Wasserstoffs . . . . .	84
3.2	Das Bohrsche Atommodell . . . . .	88
3.3	Die Schrödinger-Gleichung für Einelektronenatome . . . . .	94
3.3.1	Schwerpunkt- und Relativbewegung . . . . .	94
3.3.2	Teilchen im kugelsymmetrischen Potenzial . . . . .	96
3.3.3	Winkelabhängigkeit . . . . .	98
3.3.4	Der Drehimpuls . . . . .	106
3.3.5	Die Radialabhängigkeit . . . . .	113
3.3.6	Quantenzahlen . . . . .	119
3.3.7	Aufenthaltswahrscheinlichkeiten . . . . .	122
3.4	Der Elektronenspin . . . . .	125
3.4.1	Experimentelle Fakten . . . . .	125
3.4.2	Vertiefungsthema: Theoretische Beschreibung des Spins . . . . .	127

<b>4</b>	<b>Das Wasserstoffatom</b>	<b>135</b>
4.1	Experimentelle Befunde . . . . .	136
4.2	Relativistische Korrektur der Energieniveaus . . . . .	137
4.3	Die Spin-Bahn-Kopplung: Feinstruktur . . . . .	139
4.3.1	Der Spin-Bahn-Kopplungsterm . . . . .	139
4.3.2	Der Gesamtdrehimpuls . . . . .	141
4.3.3	Energieniveaus des Wasserstoffatoms bei Spin-Bahn-Kopplung . . . . .	143
4.3.4	Die Feinstruktur beim Wasserstoffatom . . . . .	145
4.4	Die Lamb-Shift . . . . .	148
4.5	Die Hyperfeinstruktur . . . . .	154
4.6	Das Wasserstoffatom im Magnetfeld: Normaler Zeeman-Effekt . . . . .	159
4.6.1	Klassisches Teilchen im Magnetfeld . . . . .	159
4.6.2	Vertiefungsthema: Quantenmechanische Beschreibung . . . . .	165
4.7	Anomaler Zeeman- und Paschen-Back-Effekt . . . . .	168
4.7.1	Der anomale Zeeman-Effekt . . . . .	168
4.7.2	Der Paschen-Back-Effekt . . . . .	172
4.8	Der Stark-Effekt . . . . .	175
4.9	Vollständiges Termschema des Wasserstoffatoms . . . . .	176
4.10	Vertiefungsthemen . . . . .	178
4.10.1	Das Modell des Elektrons . . . . .	178
4.10.2	Vertiefungsthema: Das Korrespondenzprinzip . . . . .	180
<b>5</b>	<b>Wasserstoffähnliche Systeme</b>	<b>185</b>
5.1	$\text{He}^+$ , $\text{Li}^{++}$ und $\text{Be}^{+++}$ . . . . .	186
5.2	Die schweren Wasserstoffisotope . . . . .	187
5.3	Rydbergatome . . . . .	188
5.4	Exotische Atome . . . . .	191
5.4.1	Myonische Atome . . . . .	191
5.4.2	Anti-Wasserstoff . . . . .	193
5.4.3	Positronium . . . . .	194
5.5	Quarkonium . . . . .	196
5.6	Exzitonen . . . . .	196

<b>6</b>	<b>Übergänge zwischen Energieniveaus</b>	<b>199</b>
6.1	Übergangswahrscheinlichkeiten . . . . .	200
6.1.1	Spontane und stimulierte Übergänge . . . . .	200
6.2	Lebensdauer angeregter Zustände . . . . .	205
6.3	Linienbreiten von Spektrallinien . . . . .	208
6.3.1	Natürliche Linienbreite . . . . .	209
6.3.2	Dopplerverbreiterung . . . . .	211
6.3.3	Stoßverbreiterung . . . . .	213
6.4	Übergangsmatrixelemente . . . . .	217
6.4.1	Parität . . . . .	219
6.4.2	Auswahlregeln . . . . .	221
6.4.3	Auswahlregeln für die Bahndrehimpulsquantenzahl – Paritätsauswahlregeln . . .	222
6.4.4	Auswahlregeln für die magnetische Quantenzahl . . . . .	223
6.4.5	Auswahlregeln für die Spinquantenzahl . . . . .	227
6.4.6	Stärke des Dipolübergangs . . . . .	228
6.4.7	Vertiefungsthema: Multipol-Übergänge höherer Ordnung . . . . .	232
6.4.8	Vertiefungsthema: Zwei-Photonen-Übergänge . . . . .	232
6.4.9	Vertiefungsthema: Spektrales Lochbrennen . . . . .	234
<b>7</b>	<b>Mehrelektronenatome</b>	<b>237</b>
7.1	Das Heliumatom . . . . .	238
7.1.1	Die Zentralfeldnäherung . . . . .	239
7.1.2	Symmetrie der Wellenfunktion . . . . .	243
7.2	Numerische Methoden und Näherungsverfahren . . . . .	249
7.2.1	Das Modell unabhängiger Elektronen . . . . .	249
7.2.2	Das Hartree-Verfahren . . . . .	250
7.3	Der Gesamtdrehimpuls . . . . .	252
7.3.1	Die <b>L-S</b> - oder Russel-Saunders-Kopplung . . . . .	252
7.3.2	Die <b>j-j</b> -Kopplung . . . . .	253
7.3.3	Termschema bei <b>L-S</b> -Kopplung . . . . .	255
7.3.4	Beispiele für Drehimpulskopplungen und Termschemata . . . . .	256
7.4	Der Grundzustand des Vielelektronenatoms – Hundzsche Regeln . . . . .	258

7.5	Vertiefungsthema: Atomarer Magnetismus . . . . .	261
7.6	Die Elektronenstruktur von Vielelektronenatomen . . . . .	262
7.6.1	Schalen und Unterschalen . . . . .	263
7.6.2	Aufbau der Atomhülle mit zunehmender Kernladungszahl . . . . .	265
7.6.3	Das Periodensystem der Elemente . . . . .	270
7.7	Spektren der Mehrelektronenatomen . . . . .	273
7.7.1	Termschema des Heliumatoms . . . . .	273
7.7.2	Alkalimetalle . . . . .	275
7.7.3	Erdalkalimetalle . . . . .	278
<b>8</b>	<b>Angeregte Atomzustände</b>	<b>281</b>
8.1	Einfachanregungen . . . . .	283
8.1.1	Anregung und Rekombination durch Stoßprozesse . . . . .	284
8.2	Komplexere Anregungsprozesse . . . . .	286
8.2.1	Anregung mehrerer Elektronen – Autoionisation . . . . .	286
8.2.2	Innerschalenanregungen . . . . .	287
8.3	Röntgenstrahlung . . . . .	289
8.3.1	Erzeugung von Röntgenstrahlung . . . . .	290
8.3.2	Das Röntgenspektrum . . . . .	292
8.3.3	Die Feinstruktur der Röntgenlinien . . . . .	301
8.3.4	Vertiefungsthema: Streuung und Absorption von Röntgenstrahlung . . . . .	303
8.3.5	Vertiefungsthema: Röntgenfluoreszenz . . . . .	307
8.3.6	Vertiefungsthema: Monochromatisierung von Röntgenstrahlung . . . . .	308
<b>9</b>	<b>Moleküle</b>	<b>313</b>
9.1	Das Einelektronen-Molekül — $H_2^+$ -Molekülion . . . . .	316
9.1.1	Die Schrödinger-Gleichung des Einelektronenmoleküls . . . . .	316
9.1.2	Die adiabatische Näherung . . . . .	317
9.1.3	Lösung der elektronischen Wellengleichung . . . . .	318
9.2	Das Vielelektronen-Molekül — $H_2$ -Molekül . . . . .	328
9.2.1	Die Molekülorbitalnäherung . . . . .	328
9.2.2	Die Heitler-London Näherung . . . . .	330

9.2.3	Vergleich der Näherungen . . . . .	332
9.2.4	Die Molekülbindung . . . . .	334
9.3	Elektronische Zustände zweiatomiger Moleküle . . . . .	336
9.4	Die Kernbewegung . . . . .	340
9.4.1	Der starre Rotator . . . . .	340
9.4.2	Molekülschwingungen . . . . .	343
<b>II</b>	<b>Wärme-statistik</b>	<b>349</b>
<b>10</b>	<b>Grundlagen der Wärmelehre</b>	<b>351</b>
10.1	Systeme, Phasen und Gleichgewicht . . . . .	352
10.1.1	Systeme . . . . .	352
10.1.2	Phasen . . . . .	352
10.1.3	Gleichgewicht . . . . .	353
10.2	Zustandsgrößen . . . . .	355
10.2.1	Definitionen . . . . .	355
10.2.2	Die Temperatur . . . . .	357
10.2.3	Der Druck . . . . .	357
10.2.4	Teilchenzahl, Stoffmenge und Avogadrozahl . . . . .	358
10.2.5	Die Entropie . . . . .	359
10.3	Die thermodynamischen Potenziale . . . . .	360
10.3.1	Prinzip der maximalen Entropie und minimalen Energie . . . . .	360
10.3.2	Innere Energie als Potenzial . . . . .	360
10.3.3	Entropie als thermodynamisches Potenzial . . . . .	361
10.3.4	Die freie Energie oder das Helmholtz-Potenzial . . . . .	361
10.3.5	Die Enthalpie . . . . .	362
10.3.6	Die freie Enthalpie oder das Gibbsche Potenzial . . . . .	363
10.3.7	Die Maxwell-Relationen . . . . .	364
10.3.8	Thermodynamische Stabilität . . . . .	365
10.4	Die kinetische Gastheorie . . . . .	367
10.4.1	Druck und Temperatur . . . . .	367
10.4.2	Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung . . . . .	368
10.4.3	Freiheitsgrade . . . . .	369
10.4.4	Der Gleichverteilungssatz . . . . .	370

10.5	Energieformen, Zustandsänderungen und Hauptsätze . . . . .	371
10.5.1	Energieformen . . . . .	371
10.5.2	Energieumwandlung . . . . .	373
10.5.3	Die Wärmekapazität . . . . .	374
10.5.4	Zustandsänderungen . . . . .	375
<b>11</b>	<b>Statistische Beschreibung</b>	<b>377</b>
11.1	Grundbegriffe der Statistik . . . . .	379
11.1.1	Wahrscheinlichkeiten . . . . .	379
11.1.2	Mittelwert, Mittelwert der Abweichung, Schwankung . . . . .	380
11.2	Phasenraum und Verteilungen . . . . .	382
11.2.1	Mikro- und Makrozustände . . . . .	382
11.2.2	Der Phasenraum . . . . .	382
11.2.3	Verteilungen . . . . .	383
11.3	Das Spin-1/2 System . . . . .	386
11.3.1	Die Magnetisierung . . . . .	387
11.3.2	Entartung der Zustände . . . . .	388
11.3.3	Statistische Eigenschaften der Magnetisierung . . . . .	390
11.3.4	Die Gauß-Verteilung für große N . . . . .	392
11.3.5	Die Energie des Spin-1/2-Systems . . . . .	393
11.4	Grundlegende Annahmen der Wärmephysik . . . . .	394
11.4.1	Zeitmittel und Scharmittel . . . . .	396
11.5	Systeme in thermischem Kontakt . . . . .	399
11.6	Entropie, Temperatur und chemisches Potenzial . . . . .	406
11.6.1	Entropie . . . . .	406
11.6.2	Statistische Definition der Temperatur . . . . .	408
11.6.3	Statistische Definition des chemischen Potenzials . . . . .	408
11.6.4	Der 3. Hauptsatz . . . . .	409
11.6.5	Der 2. Hauptsatz . . . . .	409
11.6.6	Wärmefluss . . . . .	410
11.6.7	Teilchenfluss . . . . .	411
11.6.8	Zusammenhang zwischen statistischen und thermodynamischen Größen . . . . .	412
11.7	Der Zeitpfeil . . . . .	415
11.8	Magnetische Kühlung . . . . .	416

<b>12 Verteilungsfunktionen</b>	<b>423</b>
12.1 Repräsentative Ensemble . . . . .	424
12.1.1 Abgeschlossenes System . . . . .	424
12.1.2 System in Kontakt mit einem Wärmereservoir . . . . .	424
12.1.3 System in Kontakt mit einem Wärme- und Teilchenreservoir . . . . .	425
12.2 Gibbs- und Boltzmann-Faktoren . . . . .	426
12.2.1 Der Gibbs-Faktor . . . . .	428
12.2.2 Der Boltzmann-Faktor . . . . .	428
12.3 Zustandssummen und Mittelwerte . . . . .	431
12.3.1 Große Zustandssumme . . . . .	431
12.3.2 Mittelwerte . . . . .	431
12.3.3 Zustandssumme . . . . .	433
12.3.4 Verteilungsfunktionen und ihre Eigenschaften . . . . .	436
12.4 Anwendungen der Verteilungsfunktionen . . . . .	438
12.4.1 Das ideale einatomige Gas . . . . .	438
12.4.2 Gültigkeit der klassischen Näherung . . . . .	441
12.4.3 Der Gleichverteilungssatz . . . . .	442
12.5 Die Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung . . . . .	446
12.5.1 Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages . . . . .	448
12.5.2 Verteilung einer Geschwindigkeitskomponente . . . . .	451
12.5.3 Die barometrische Höhenformel . . . . .	453
12.5.4 Thermalisierung . . . . .	454
<b>13 Quantenstatistik</b>	<b>461</b>
13.1 Identische Teilchen . . . . .	462
13.1.1 Klassischer Fall: Maxwell-Boltzmann-Statistik . . . . .	462
13.1.2 Quantenmechanischer Fall . . . . .	462
13.2 Die quantenmechanischen Verteilungsfunktionen . . . . .	465
13.2.1 Quantenstatistische Beschreibung . . . . .	465
13.2.2 Photonen-Statistik . . . . .	468
13.2.3 Die Fermi-Dirac-Statistik . . . . .	469
13.2.4 Die Bose-Einstein-Statistik . . . . .	472
13.2.5 Quantenstatistik im klassischen Grenzfall . . . . .	473
13.3 Die Zustandsdichte . . . . .	477

13.3.1	Das freie Elektronengas . . . . .	480
13.3.2	Das Photonengas . . . . .	484
13.4	Vertiefungsthema:	
	Die Bose-Einstein Kondensation . . . . .	487
13.4.1	Historische Entwicklung . . . . .	487
13.4.2	Temperatur der Bose-Einstein Kondensation . . . . .	488
13.4.3	Realisierung eines Bose-Einstein Kondensats . . . . .	494
13.4.4	Beobachtung der Bose-Einstein Kondensation . . . . .	498
13.4.5	Atomlaser und Kohärenz . . . . .	500
<b>III</b>	<b>Anhang</b>	<b>505</b>
A	Rutherfordsche Streuformel . . . . .	507
B	Krummlinige Koordinaten . . . . .	512
C	$\hat{L}_i, \hat{L}^2$ in Kugelkoordinaten . . . . .	518
D	Vertauschungsrelationen $\hat{L}_i, \hat{L}^2$ . . . . .	520
E	Heliumatom . . . . .	522
F	Literatur . . . . .	525
G	SI-Einheiten . . . . .	527
G.1	Geschichte des SI Systems . . . . .	527
G.2	Die SI Basiseinheiten . . . . .	529
G.3	Einige von den SI Einheiten abgeleitete Einheiten . . . . .	530
G.4	Vorsätze . . . . .	532
G.5	Abgeleitete Einheiten und Umrechnungsfaktoren . . . . .	533
H	Physikalische Konstanten . . . . .	537

## Kapitel 2

# Aufbau der Atome

Atome sind die Bausteine der Moleküle und der festen Körper, aus denen alle makroskopische Materie besteht. Heute wissen wir, dass Atome aus einem Atomkern, der die elektrische Ladung  $+Ze$  trägt, und einer Elektronenhülle, die aus insgesamt  $Z$  Elektronen zusammengesetzt ist, besteht. Hierbei ist  $e$  der Betrag der Elementarladung und  $Z$  die *Kernladungszahl*. Letztere ist identisch mit der *Ordnungszahl* des jeweiligen Elements im Periodensystem der Elemente. Atome sind elektrisch neutral, d.h. die positive Ladung des Kerns ist vom Betrag her exakt identisch mit der negativen Ladung der Elektronenhülle. Dies ist eine rein experimentelle Erfahrung, eine theoretische Begründung dafür gibt es nicht. Atome, die ein Elektron mehr gebunden haben, also  $(Z + 1)$  Elektronen besitzen, bezeichnet man als einfach negativ geladene *Ionen*. Mehrfach negativ geladene Ionen sind nicht stabil. Entsprechend bezeichnen wir Atome, die ein oder mehrere Elektronen verloren haben, als einfach oder mehrfach positiv geladene Ionen.

Eine genaue Vorstellung von der Größe und dem Aufbau der Atome haben wir erst im Laufe der etwa letzten 100 Jahre entwickelt. Unsere heutige Kenntnis basiert auf einer langen Entwicklung, die bis in die Antike zurückgeht und oft von großen Irrtümern begleitet wurde. Erst im Laufe des 19. Jahrhunderts wurden durch immer detailliertere Experimente und theoretische Modelle klare Belege für die Existenz der atomaren Struktur der Materie gefunden. Dennoch zweifelten viele bekannte Chemiker (z.B. Wilhelm Ostwald: 1853-1932) und Physiker (z.B. Ernst Mach: 1838-1916) lange Zeit die Existenz von Atomen an und akzeptierten sie lediglich als Arbeitshypothese.

Wir wollen in diesem Kapitel einen Überblick über die wichtigsten experimentellen Hinweise auf die Existenz von Atomen geben und experimentelle Methoden zur quantitativen Bestimmung von Atomeigenschaften vorstellen.

## 2.1 Historisches

Die ältesten uns bekannten Vorstellungen zur atomaren Struktur der Materie stammen von dem griechischen Naturphilosophen **Leukipp** und seinem Schüler **Demokrit** (etwa 460 - 370 v.Chr.). Sie waren der Überzeugung, dass alle Naturkörper aus unendlich kleinen, raumfüllenden, gänzlich unteilbaren Teilchen bestehen. Sie bezeichneten diese Teilchen als *Atome* (vom griechischen atomos = unteilbar).

**Platon** (427 - 347 v.Chr.) ging mit seinen Vorstellungen zum Aufbau der Materie etwas weiter. Er griff die Vorstellung der 4 Grundelemente wieder auf. Er ordnete diesen Grundelementen (Feuer, Luft, Wasser, Erde) reguläre geometrische Körper zu, die von regelmäßigen, symmetrischen Dreiecken und Vierecken begrenzt werden (Tetraeder, Oktaeder, Ikosaeder, Würfel). Die platonische Lehre führt die Atome also nicht auf Stoffliches zurück, sondern auf rein mathematische Bauformen.

Eine moderne Vorstellung der Atome wurde erst im 17. Jahrhundert im Wesentlichen durch Chemiker entwickelt. Durch eine genaue Wägung ihrer Stoffe vor und nach Reaktionen fanden **John Dalton** (1766 - 1844) und **Joseph-Louis Proust** (1754 - 1826) heraus, dass ihre Experimente am einfachsten dadurch erklärt werden konnten, dass alle Stoffe aus Atomen bestehen, die sich zu Molekülen verbinden. Die Atomhypothese bekam dann in den Physikern **Rudolf Julius Clausius** (1822-1888), **James Clerk Maxwell** (1831-1879) und **Ludwig Boltzmann** (1844-1906) mächtige Unterstützer. Sie konnten mit Hilfe der kinetischen Gastheorie die makroskopischen Eigenschaften von Gasen wie Druck, Temperatur oder spezifische Wärme auf Atome zurückführen, die unterschiedliche kinetische Energie besitzen und durch Stöße miteinander wechselwirken.

Im 20. Jahrhundert gelang dann die Bestimmung der Atomgröße und der Atomstruktur durch Streuexperimente. Eine ausführliche Diskussion dieser Streuexperimente wird in Abschnitt 2.4 folgen. Die vollständige theoretische Beschreibung der Eigenschaften von Atomen gelang nach etwa 1930 durch die Entwicklung der Quantentheorie.



*Demokrit von Abdera (etwa 460 - 370 v.Chr.)*

## 2.2 Experimenteller Nachweis der Existenz von Atomen

### Dalton: Das Gesetz der konstanten Proportionen

Die ersten experimentellen Untersuchungen, die zu einer über die spekulativen Hypothesen der griechischen Philosophen hinausgehenden Vorstellung vom Aufbau der Materie führten, wurden von Chemikern durchgeführt. Nach mehreren Vorarbeiten über die Mengenverhältnisse der Reaktanden und Reaktionsprodukte bei chemischen Reaktionen erkannte der englische Chemiker **John Dalton** (1766-1844), dass das Massenverhältnis der Stoffe, aus denen die chemische Verbindung gebildet wird, für jede Verbindung eindeutig und konstant ist (1. Daltonsches Gesetz). Beispiele hierfür sind u.a. die Verbindungen HCl oder H<sub>2</sub>O. Man findet stets unabhängig von der Größe der Ausgangsmassen für das Verhältnis der umgesetzten Massen den gleichen Wert:  $m_{\text{Cl}} : m_{\text{H}} \simeq 35 : 1$  bzw.  $m_{\text{O}} : m_{\text{H}} \simeq 16 : 2$ . Bilden zwei Elemente verschiedenartige Verbindungen miteinander, so lassen sich die Quotienten aus ihren Massen als ganzzahlige Vielfache eines kleinsten Massenverhältnisses darstellen (2. Daltonsches Gesetz). Ein typisches Beispiel hierfür sind verschiedene Verbindungen von Sauerstoff und Stickstoff: N<sub>2</sub>O:  $m_{\text{O}}/m_{\text{N}} \simeq 16/28 = x$ ; NO:  $m_{\text{O}}/m_{\text{N}} \simeq 16/14 = 2x$ ; N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:  $m_{\text{O}}/m_{\text{N}} \simeq 48/28 = 3x$ ; NO<sub>2</sub>:  $m_{\text{O}}/m_{\text{N}} \simeq 32/14 = 4x$ ; N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:  $m_{\text{O}}/m_{\text{N}} \simeq 80/28 = 5x$ .

Aus diesen experimentellen Ergebnissen entwickelte Dalton 1803 seine Atomhypothese, wonach das "Wesen chemischer Umwandlungen in der Vereinigung oder Trennung von Atomen" besteht:

- Alle elementaren Stoffe (chemische Elemente) bestehen aus kleinsten Teilchen, die chemisch nicht weiter zerlegbar sind.
- Alle Atome desselben Elements sind in Qualität, Größe und Masse gleich. Sie unterscheiden sich aber in diesen Eigenschaften von den Atomen anderer Elemente.
- Wenn chemische Elemente eine Verbindung eingehen, so vereinigen sich immer die Atome der beteiligten Elemente, die zueinander in einem ganzzahligen Verhältnis stehen.

Da es in den damaligen Experimenten vor allem um Massenverhältnisse und nicht so sehr um absolute Massen ging, bezog Dalton alle Atommassen auf die des leichtesten Atoms (H-Atom). Er bezeichnete die relative Masse eines Atoms,  $m/m_{\text{H}}$ , als das *Atomgewicht*. **Jöns Jakob Berzelius** begann 1814 für viele Elemente die Atomgewichte durch sorgfältige Messungen genau zu bestimmen.

Heute wird nicht das H-Atom sondern das Kohlenstoff-Isotop <sup>12</sup>C, das in der Natur mit 98.9% am häufigsten vorkommende Kohlenstoff-Isotop (eine Diskussion der Isotopie folgt in Abschnitt 2.3.3) ist, als Vergleichsatom gewählt. Statt des Atomgewichts wird die *atomare Masseneinheit* AME benutzt:



John Dalton (1766 – 1844)

$$\begin{aligned}
 1 \text{ AME} &\equiv \frac{1}{12} m(^{12}\text{C}) = 1.660\,538\,73(13) \times 10^{-27} \text{ kg} \\
 &= 1 \text{ Dalton} .
 \end{aligned}
 \tag{2.2.1}$$

Mit der atomaren Masseneinheit können wir die *relative Atommasse*  $A_r(X)$  eines Elements X und die *relative Isotopenmasse* eines bestimmten Isotops <sup>i</sup>X des Elements X definieren:

$$A_r(X) \equiv \frac{m_a(X)}{AME} \quad \text{relative Atommasse} \quad (2.2.2)$$

$$A_r({}^iX) \equiv \frac{m_a({}^iX)}{AME} \quad \text{relative Isotopenmasse} \quad (2.2.3)$$

Hierbei ist  $m_a(X)$  die Masse, die einem Atom des Elements  $X$  im Mittel für das natürlich vorkommende Isotopengemisch zugeordnet werden kann. Die Zahl  $A_r$  wird auch als *Massenzahl* eines Elements bezeichnet.

### Gay-Lussac: Das Mol

**Joseph Louis Gay-Lussac** (1778-1850) und **Alexander von Humboldt** (1769-1859) entdeckten 1805, dass sich gasförmiger Sauerstoff und Wasserstoff bei gleichem Druck immer im Verhältnis von 1:2 Volumenteilen zu Wasser verbindet. Nach späteren Experimenten mit anderen Gasen stellte Gay-Lussac sein *Gesetz der konstanten Proportionen* auf:

Vereinigen sich zwei oder mehrere Gase restlos zu einer chemischen Verbindung, so stehen ihre Volumina bei gleichem Druck und gleicher Temperatur im Verhältnis ganzer Zahlen zueinander.

**Amadeo Avogadro** (1776-1856) erklärte diese Beobachtung 1811 durch die Einführung des Molekülbegriffes:

Ein Molekül ist das kleinste Teilchen eines Gases, das noch die chemischen Eigenschaften dieses Gases besitzt. Ein Molekül besteht aus zwei oder mehr Atomen.

Basierend auf den Ergebnissen von Gay-Lussac stellte Avogadro ferner folgende Hypothese auf: Bei gleichem Druck und gleicher Temperatur enthalten gleiche Volumina verschiedener Gase jeweils die gleiche Anzahl von Molekülen. Mit dieser Hypothese können Reaktionsgleichungen von Gasen erklärt werden, z.B.  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \Rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ . Die Gesamtmasse  $M$  eines Gasvolumens  $V$  mit  $N$  Molekülen ist dann



Links: Joseph Louis Gay-Lussac (1778 – 1850),  
rechts: Amadeo Avogadro (1776 – 1856)

$$M = N \cdot m \Rightarrow \frac{M_1}{m_1} = \frac{M_2}{m_2} \Rightarrow \frac{M_1}{M_2} = \frac{m_1}{m_2} \quad (2.2.4)$$

Gleiche Volumina verschiedener Gase haben also Gewichtsverhältnisse, die den Massenverhältnissen der einzelnen Atome entsprechen. Es erweist sich deshalb als zweckmäßig, eine neu einzuführende *Stoffmenge* zu definieren, mit der die Anzahl gleichartiger Objekte (Atome, Moleküle) in einem System erfasst werden kann. Da die Festlegung der Größe Stoffmenge unabhängig von der Definition anderer Größen

ist, wird sie als Grundgrößenart betrachtet. Als zugehörige Basiseinheit wird das *Molvolumen* eingeführt. Seine heutige allgemeine Definition, die auch für nicht-gasförmige Stoffe gilt, lautet:

Ein Mol ist die Stoffmenge, die ebenso viele Teilchen (Atome oder Moleküle) enthält wie 12 g Kohlenstoff  $^{12}\text{C}$ .

Die Zahl  $N_A$  der Atome in der Stoffmenge 1 mol heißt *Avogadro-Konstante* (oder oft auch Loschmidt-Zahl nach dem österreichischen Physiker **Joseph Loschmidt** genannt, der  $N_A$  als erster aus makroskopischen Gasdaten berechnete). Ihr experimenteller Wert ist:

$$N_A = 6.022\,141\,99(47) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} \quad \text{Avogadro-Konstante} \quad (2.2.5)$$

Die Masse pro Mol Kohlenstoff  $^{12}\text{C}$  ist mit dieser Definition durch

$$m_{\text{mol}}(^{12}\text{C}) = 12 \text{ g} = A_r(^{12}\text{C}) [\text{g}]$$

gegeben. Für ein beliebiges Element  $X$  gilt

$$m_{\text{mol}}(X) = \frac{m_a(X)}{\text{AME}} \text{AME} \cdot N_A = A_r [\text{g}] , \quad (2.2.6)$$

da  $\text{AME} \cdot N_A = 1 \text{ g}$ . Mit Hilfe der Avogadro-Konstanten kann ferner für ein Element  $X$  bei bekannter Massenzahl  $A_r$  die Atommasse ermittelt werden zu

$$m_a(X) = \frac{A_r(X) [\text{g}]}{N_A} . \quad (2.2.7)$$

Die Avogadro-Konstante kann man mit verschiedenen Methoden bestimmen, auf die wir hier nicht näher eingehen wollen. Man kann z.B. aus den Gasgesetzen die Gaskonstante  $R$  bestimmen und aus der barometrischen Höhenformel, der Diffusion oder aus Torsionsschwingungen die Boltzmann-Konstante  $k_B$  ermitteln. Die Avogadro-Konstante erhält man dann zu  $N_A = R/k_B$ . Eine zweite Möglichkeit besteht in der Bestimmung der Faraday-Konstanten  $F$  durch Elektrolyse und in der Bestimmung der Elementarladung  $e$  mit Hilfe des Millikan-Versuchs. Man erhält dann  $N_A = F/e$ . Eine weitere Möglichkeit besteht in der genauen Bestimmung der Gitterkonstanten  $a$  eines z.B. kubischen Einkristalls mit Hilfe von Röntgenbeugung. Die Avogadro-Konstante erhält man dann zu  $N_A = V_M/a^3$ .

Präzisionsmessungen der Atom- und Molekülmassen erfolgen heute mit Massenspektrographen. Diese ermöglichen eine Massenbestimmung bis zu einer Größenordnung von  $10^{-33} \text{ kg}$ .

### Direkte Sichtbarmachung von Atomen

Heute gibt es eine Vielzahl von Mikroskopietechniken, mit deren Hilfe es möglich ist, einzelne Atome direkt sichtbar zu machen. Diese Techniken wurden erst in der 2. Hälfte des 20. Jahrhunderts entwickelt. Im Einzelnen sind folgende Techniken zu nennen:

1. Das Feldionenmikroskop,
2. das Transmissionselektronenmikroskop,

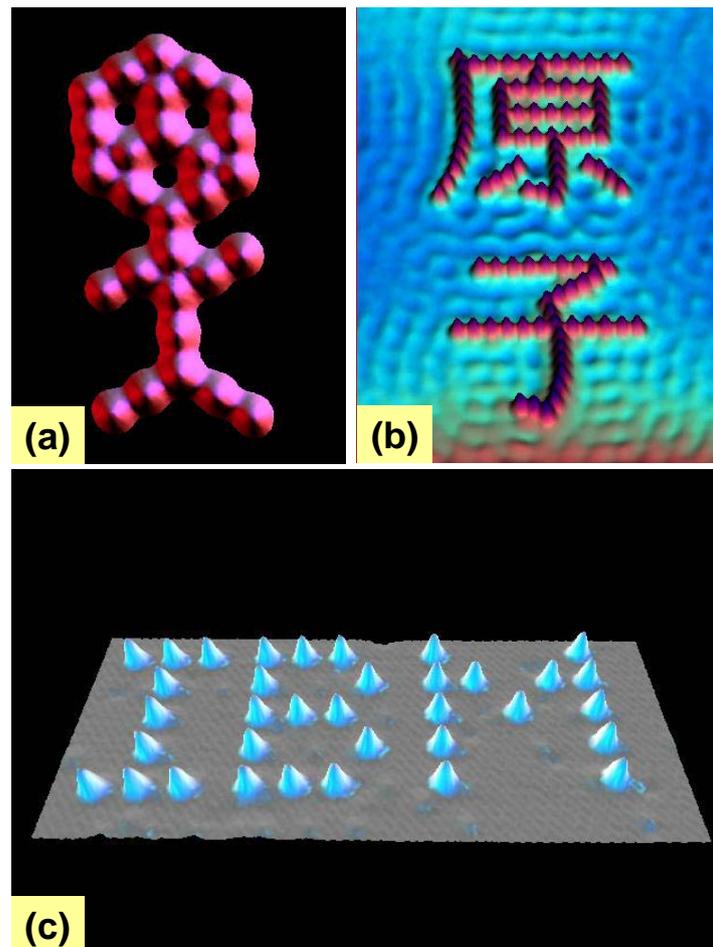


Abbildung 2.1: Sichtbarmachung von einzelnen Atomen auf Metalloberflächen mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie: (a) Der Kohlenmonoxid-Mann auf einer Pt (111) Oberfläche. (b) Das Kanji-Schriftzeichen für Atom aus Eisenatomen auf einer Cu (111) Oberfläche. (c) Das Firmenlogo von IBM geschrieben mit Xenonatomen auf einer Ni (110) Oberfläche (Quelle: Eigler, Lutz, Zeppenfeld, IBM Research Division, Almaden).

3. das Rastertunnelmikroskop und

4. das Rasterkraftmikroskop.

Als Beispiel für die Abbildung einzelner Atome ist in Abb. 2.1 die Abbildung von verschiedenen Atomen auf Metalloberflächen mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie gezeigt. In den letzten Jahren hat man gelernt, verschiedene Atome gezielt auf Oberflächen mit Hilfe des Rastertunnelmikroskops zu positionieren und dadurch künstliche Strukturen aus einzelnen Atomen zu erzeugen, die man hinterher mit dem Rastertunnelmikroskop sichtbar machen kann. Dies gelingt allerdings nur bei sehr tiefen Temperaturen (typischerweise 4 K und weniger), da bei Raumtemperatur die Atome entweder auf der Oberfläche diffundieren würden oder diese sogar thermisch aktiviert wieder verlassen könnten.

## 2.3 Größe, Masse und elektrischer Aufbau von Atomen

### 2.3.1 Größe von Atomen

Es gibt eine Vielzahl von experimentellen Methoden, mit denen man Aussagen über die Größe von Atomen gewinnen kann. Wir wollen hier nur die wichtigsten Methoden vorstellen und ihre prinzipielle Funktionsweise diskutieren. Eine obere Grenze für das Volumen  $V_a$  eines Atoms kann man immer aus dem Molvolumen  $V_M$  und der Avogadrokonstante  $N_A$  gewinnen. Es gilt  $V_a \leq V_M/N_A$  und damit für den Radius

$$r_a \leq \left( \frac{3V_M}{4\pi N_A} \right)^{1/3} . \quad (2.3.1)$$

Eine weitere Möglichkeit, das Atomvolumen abzuschätzen, bietet die *Van der Waals Gleichung*

$$\left( p + \frac{a}{V_M^2} \right) (V_M - b) = RT . \quad (2.3.2)$$

Hierbei ist  $V_M$  das Volumen, das ein mol eines Gases beim Druck  $p$  und der Temperatur  $T$  einnimmt. Die Größe  $b = 4N_A V_a$  gibt das vierfache Eigenvolumen aller  $N_A$  Atome im Volumen  $V_M$  an. Bei Kenntnis der Avogadro-Konstanten  $N_A$  kann man die Größe  $b$  durch Messung der  $p(T)$ -Kurven bei konstantem Volumen ermitteln und damit  $V_a = b/4N_A$  bestimmen.

Eine dritte Abschätzungsmöglichkeit für die Atomgröße erlaubt die Analyse der Transportkoeffizienten von Gasen. Die Transportkoeffizienten werden maßgeblich durch die mittlere freie Weglänge  $\Lambda$  der Atome in einem Gas bestimmt, die man wie folgt schreiben kann<sup>1</sup>

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{2} n \sigma} = \frac{k_B T}{\sqrt{2} p \sigma} . \quad (2.3.3)$$

Hierbei ist  $p = nk_B T$  der Gasdruck und  $\sigma$  der Streuquerschnitt. Im einfachsten Fall, für den Stoß zweier starrer Kugeln mit Radius  $r_0$ , ist der Streuquerschnitt durch  $\sigma = 4\pi r_0^2$  gegeben. Man kann leicht zeigen, dass der Wärmeleitungskoeffizient von Gasen z.B. umgekehrt proportional zum Streuquerschnitt ist. Durch eine Messung kann also  $\sigma$  und damit der Atomradius zu

$$r_a = \sqrt{\frac{k_B T}{4\sqrt{2} \pi p \Lambda}} \quad (2.3.4)$$

abgeschätzt werden.

<sup>1</sup>Für eine Herleitung dieses Ausdruckes sei auf die einschlägigen Lehrbücher verwiesen.

Eine vierte Möglichkeit, die Größe von Atomen abzuschätzen, bieten Beugungsmethoden (Röntgen-, Elektronen- oder Neutronenbeugung) mit denen man die Netzebenenabstände und die Kristallstruktur in einem regelmäßigen Kristall sehr genau bestimmen kann. Insgesamt kann dadurch das Volumen bestimmt werden, das ein einzelnes Atom in einem Kristall ausfüllt. Nimmt man an, dass Atome starre Kugeln sind, so muss man noch für die spezielle Kristallstruktur einen Füllfaktor (z.B. 0.52 für einen einfach kubischen, 0.68 für einen kubisch raumzentrierten und 0.74 für einen kubisch flächenzentrierten Kristall) ermitteln und kann dann den Atomdurchmesser bestimmen.

Insgesamt ergeben die eben beschriebenen Methoden alle die gleiche Größenordnung für den Atomradius, aber dennoch verschiedene Werte. Dies liegt natürlich insbesondere daran, dass Atome nicht als starre Kugeln betrachtet werden können. Das reale Atom muss vielmehr für die verschiedenen Prozesse durch ein Wechselwirkungspotenzial beschrieben werden, das einen weitreichenden Anteil hat. Deshalb liefern die verschiedenen experimentellen Methoden nur Werte, die in ihrer Größenordnung übereinstimmen. Die so abgeschätzte Größenordnung für den Atomradius liegt bei  $10^{-10}\text{m}$  oder 1 Ångström.

### 2.3.2 Der elektrische Aufbau von Atomen

Bis zum Ende des 19. Jahrhunderts wurde durch viele Experimente (Elektrolyse, Gasentladungen, Ionisation, Hall-Effekt, etc.) klar, dass sich Atome aus geladenen Teilchen zusammensetzen. Man kann z.B. Luft zwischen die geladenen Platten eines Kondensators bringen. Der Ausschlag eines mit den Platten verbundenen Elektrometers bleibt längere Zeit erhalten, da sich die Luft zwischen den Platten als Nichtleiter erweist. Erwärmt man aber die Luft mit einer Kerze oder bestrahlt sie mit Röntgenstrahlung, dann verändert sich der Ausschlag des Elektrometers sehr schnell: der Kondensator wird entladen. Nach dem Ladungserhaltungssatz müssen sich demnach die Atome der Luft durch Zufuhr von Energie in elektrisch geladene Partikel teilen lassen.

Solche Experimente führten zusammen mit der Vorstellung, dass Materie aus Atomen besteht, zu folgender Hypothese:

Atome sind aus elektrisch geladenen Teilchen aufgebaut und können somit nicht unteilbar sein. Die elektrisch geladenen Bausteine der Atome haben Masse und Ladung. Es gibt sowohl positiv als auch negativ geladene Bestandteile der Atome.

Viele Experimente zielten dann darauf ab zu klären, welche Eigenschaften die geladenen Bestandteile der Atome haben, wie die Atome zusammengehalten werden, wie die Bestandteile im Atom angeordnet sind, oder wie sich mit Atommodellen die makroskopischen Eigenschaften der Materie erklären lassen. Da die Coulomb-Kraft zwischen Ladungen um viele Größenordnungen größer als die Gravitationskraft ist, wurde vermutet, dass die Atome durch elektrische Kräfte zusammengehalten werden.

Zur Bestimmung des elektrischen Aufbaus der Atome wurden hauptsächlich folgende Messungen durchgeführt:

- **Untersuchung von Kathoden- und Kanalstrahlen:**

Durch die Untersuchung von Kathoden- und Kanalstrahlen konnte das Verhältnis  $e/m$  von Masse und Ladung der Teilchen bestimmt werden. Von **J. J. Thomson** wurde 1895 der erste Kathodenstrahloszillograph entwickelt und damit  $e/m$  von Elektronen bestimmt. Die Analyse von Kanalstrahlen durch **Wilhelm Wien** zeigte im Jahr 1897, dass in Kanalstrahlen der Wert von  $e/m$  sowohl positiv als auch negativ ist und dass diese aus positiv und negativ geladenen Ionen bestehen.

- **Messung der Elementarladung:**

**J. J. Thomson** konnte 1899 mit Hilfe der von seinem Schüler **Charles Wilson** entwickelten Nebelkammer erstmals die Ladung des Elektrons bestimmen. Er konnte den Wert zu  $10^{-19}\text{C}$  abschätzen.

Einen viel genaueren Wert ergab dann die von **Robert Andrews Millikan** im Jahr 1910 entwickelte Öltröpfchenmethode (siehe Physik III). Der heute akzeptierte Wert der Ladung des Elektrons ist

$$e = 1.602\,176\,462(63) \times 10^{-19} \text{ C} \quad \text{Elementarladung} \quad (2.3.5)$$

### 2.3.3 Bestimmung der Atommasse

Die einfachste Methode zur Bestimmung der Atommasse verwendet die Kenntnis der Avogadro-Konstante. Misst man die Masse  $M$  eines Mols eines atomaren Gases, so ist die Masse  $m_a$  des Atoms durch

$$m_a = \frac{M}{N_A} \quad (2.3.6)$$

gegeben. Kennt man die relative Massenzahl  $A_r = m_a / \frac{1}{12} m(^{12}\text{C})$ , so ergibt sich die absolute Masse zu (vergleiche (2.2.7))

$$m_a = \frac{A_r}{N_A} [\text{g}] \quad (2.3.7)$$

Diese Bestimmung der Masse von Atomen durch Wägung wurde hauptsächlich von Chemikern angewendet.

### Massenspektrographie

Eine elegante, hauptsächlich von Physikern verwendete Methode zur Bestimmung der Atommasse basiert auf der Bewegung von ionisierten Atomen in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern. Hierauf beruht die heute sehr häufig eingesetzte Methode der *Massenspektrometrie*. Die Trajektorie eines einfach geladenen Ions der Geschwindigkeit  $\mathbf{v} = (v_x, 0, 0)$  in einem homogenen elektrischen Feld  $\mathbf{E} = (0, E_y, 0)$  ist in Abb. 2.2 gezeigt. Die Kraft in  $y$ -Richtung ist

$$F_y = m \frac{d^2 y}{dt^2} = e E_y \quad (2.3.8)$$

Daraus ergibt sich die Ablenkung in  $y$ -Richtung nach dem Durchfliegen der Strecke  $\ell$  in  $x$ -Richtung

$$y = \frac{1}{2} \frac{e E_y}{m} t^2 = \frac{1}{2} \frac{e E_y}{m} \frac{\ell^2}{|\mathbf{v}|^2} \quad \Rightarrow \quad y \propto \frac{1}{m |\mathbf{v}|^2} \quad (2.3.9)$$

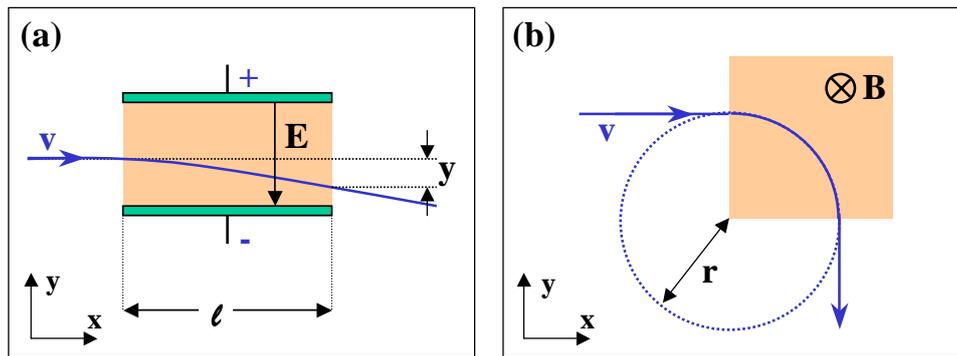


Abbildung 2.2: Ablenkung eines Ions in einem elektrischen (a) und einem magnetischen Feld (b).

In einem homogenen Magnetfeld  $\mathbf{B} = B_z$ , das senkrecht zum Geschwindigkeitsvektor  $\mathbf{v}$  ist ( $z$ -Richtung), beschreibt das Ion aufgrund der Lorentz-Kraft  $\mathbf{F} = e\mathbf{v} \times \mathbf{B} = e|\mathbf{v}|B_z$  eine Kreisbahn mit dem Radius  $r = \frac{m|\mathbf{v}|}{eB_z}$ .<sup>2</sup> Für die Ablenkung gilt analog:

$$y = \frac{1}{2} \frac{e|\mathbf{v}|B_z}{m} t^2 = \frac{1}{2} \frac{e|\mathbf{v}|B_z}{m} \frac{\ell^2}{|\mathbf{v}|^2} = \frac{1}{2} \frac{eB_z \ell^2}{m|\mathbf{v}|} \quad \Rightarrow \quad y \propto \frac{1}{m|\mathbf{v}|}. \quad (2.3.10)$$

Die Analyse zeigt, dass die Ablenkung eines geladenen Teilchens durch ein elektrisches Feld umgekehrt proportional zu seiner kinetischen Energie ist, während sie im magnetischen Feld umgekehrt proportional zu seinem Impuls ist. Entsprechend kann die Ablenkung im elektrischen Feld zur Energiemessung und die im magnetischen Feld zur Impulsbestimmung benutzt werden.

**Arthur Schuster** (1851 - 1924) benutzte im Jahr 1902 die Ablenkung von Elektronen in einem magnetischen Feld zur Bestimmung von  $e/m$ . Aus dem Radius  $r = mv/eB$  der Kreisbahn erhielt er

$$\frac{e}{m} = \frac{v}{rB}.$$

Die Geschwindigkeit der Elektronen wurde dabei durch die Potentialdifferenz  $U_B$  bestimmt, die die Elektronen zur Beschleunigung durchlaufen haben.

Für die Bestimmung der spezifischen Ladung von Ionen ist diese Methode allerdings schlecht geeignet. Da die Ionen im Vergleich zu Elektronen eine viel größere Masse haben, benötigt man, um etwa gleiche Bahnradien zu erhalten, entweder wesentlich größere Magnetfelder oder wesentlich kleiner Geschwindigkeiten. Die Erzeugung sehr großer Magnetfelder bereitet technische Probleme, die Verwendung von sehr kleinen Geschwindigkeiten erhöht die Messfehler, da dann die Geschwindigkeitsstreuung der Ionen (z.B. aufgrund von Stoßprozessen, thermischer Bewegung) stark ins Gewicht fällt. Deshalb muss eine verfeinerte Technik verwendet werden. **Joseph John Thomson**<sup>3</sup> schlug deshalb vor, dem homogenen Magnetfeld ein homogenes elektrische Feld gleicher Richtung zu überlagern. Nach dieser Grundidee baute **William Aston**<sup>4</sup> im Jahr 1919 den ersten *Massenspektrographen*. Da die Ionen auf der Ebene

<sup>2</sup>Setzt man die Lorentz-Kraft  $F = evB$  gleich der Zentrifugalkraft  $F = mv^2/r$ , so folgt für den Radius  $r = mv/eB$ .

<sup>3</sup>**Joseph John Thomson** (1857 - 1939), Nobelpreis für Physik 1906.

<sup>4</sup>**William Aston** (1877 - 1945), Nobelpreis für Physik 1922.

senkrecht zur Einfallrichtung unabhängig vom Betrag ihrer Einfallsgeschwindigkeit eine Parabel beschreiben, deren Parameter der reziproken spezifischen Ladung des Ions proportional ist, wurde dieses Instrument *Parabelmassenspektrograph* genannt.

Durch die Kombination von gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern lässt sich die Masse wie folgt bestimmen:

1. Man misst die Ablenkung  $y$  durch ein elektrisches Feld und anschließend durch ein magnetisches Feld. Dadurch kann man die Geschwindigkeit  $v$  eliminieren und erhält aus (2.3.9) und (2.3.10) die Masse.
2. Man wählt die Geschwindigkeit des Teilchens so, dass es in den gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern nicht abgelenkt wird (*Wien Filter*). Dies ist genau dann der Fall, wenn

$$e|\mathbf{E}| = e|\mathbf{v}||\mathbf{B}|, \text{ also } |\mathbf{v}| = \frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{B}|}. \quad (2.3.11)$$

Damit ist die Geschwindigkeit festgelegt. Aus einer weiteren Ablenkung in einem homogenen Magnetfeld ergibt sich dann die Masse.

Seit der Entwicklung des Parabelspektrographen durch J. J. Thomson wurden Massenspektrometer in vielfältiger Weise weiterentwickelt und lassen heute eine genaue Massenbestimmung von Atomen und Molekülen zu. Moderne Massenspektrometer sind im Gegensatz zum ursprünglichen Parabelspektrographen von Thomson als fokussierende Systeme aufgebaut, bei denen alle Ionen mit gleicher Masse aber unterschiedlichen Geschwindigkeiten auf einen Punkt (z.B. die Eintrittsblende eines Detektors) fokussiert werden. Man erreicht heute Genauigkeiten im Bereich von  $10^{-7}$ .

### Massenmessungen und Isotopie

Bei Untersuchungen mit genauen Massenspektrographen zeigte es sich, dass bestimmte chemische Elemente aus einem Gemisch von Atomen mit unterschiedlichen Massen bestehen. Man nannte die Anteile mit verschiedenen Massen *Isotope* eines Elements. Die verschiedenen Isotope eines Elements haben die gleiche Kernladungszahl  $Z$  und die gleiche Zahl von Elektronen. Die die Elektronenkonfiguration die chemischen Eigenschaften der Elemente bestimmt, haben die Isotope eines Elements auch die gleichen chemischen Eigenschaften, unterscheiden sich aber um kleine ganzzahlige Vielfache der atomaren Masseneinheit. In der Natur kommen stabile Isotope vor, aber auch solche, die nach einer bestimmten mittleren Lebensdauer zerfallen.

Für die Atome benutzt man heute folgende Nomenklatur



Hierbei bezeichnet "X" das chemische Element, das aus  $Z$  Protonen und Elektronen und  $N$  Neutronen besteht. Wir nennen  $A = Z + N$  die Massenzahl des Atomkerns. Verschiedene Isotope eines chemischen Elements haben gleiche Protonen- bzw. Kernladungszahl  $Z$ , aber unterschiedliche Neutronen- und damit unterschiedliche Massenzahlen.

Das Element Wasserstoff besitzt drei Isotope. Sie werden unterschiedlich benannt:  ${}^1\text{H}\equiv\text{H}$  wird als *Protium* oder leichter Wasserstoff,  ${}^2\text{H}\equiv\text{D}$  als *Deuterium* oder schwerer Wasserstoff und  ${}^3\text{H}\equiv\text{T}$  als *Tritium* oder überschwerer Wasserstoff bezeichnet. Ihre positiven Ionen, d.h. ihre Kerne heißen *Proton*, *Deuteron* und *Triton*. Im natürlichen Wasserstoff kommt Deuterium zu 0.015% und Tritium nur zu weniger als  $10^{-10}\%$  vor. Tritium ist radioaktiv und zerfällt mit einer Halbwertszeit von 12,262 Jahren. Es wird in der obersten Atmosphärenschicht durch Einwirkung von Neutronen der Höhenstrahlung auf Stickstoffkerne gebildet.

Die Isotopentrennung ist für viele physikalische Experiment und technische Zwecke wichtig. Zur Isotopentrennung werden z.B. Massenspektrographen, Ultrazentrifugen oder Diffusionsprozesse eingesetzt.

## 2.4 Die Struktur von Atomen

### 2.4.1 Gechichtliche Entwicklung

Die bisher diskutierten Experimente gaben Aufschluss über die Größe und Massen der Atome. Die Ionisierbarkeit von Gasen und die elektrolytische Dissoziation zeigten ferner, dass Atome aus Elektronen mit negativer Ladung und kleiner Masse und Atomkernen mit positiver Ladung und großer Masse aufgebaut sind. Allerdings konnten die bisherigen Experimente keinen Aufschluss darüber geben, wie die Atome aufgebaut sind, das heißt, wie die negativen und positiven Ladungen im Atom verteilt sind. Der innere Aufbau von Atomen konnte erst durch Streuversuche geklärt werden.

#### Streuversuche von Lenard

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts standen außer den Kathodenstrahlen (Elektronen) als natürliche geladene Teilchen die von radioaktiven Substanzen emittierten  $\alpha$ -Teilchen mit der Ladung  $q_\alpha = +2e$ , der Masse  $m_\alpha = m_{\text{He}}$  und der Energie  $E_\alpha = 1 - 9 \text{ MeV}$  zur Verfügung.

Den ersten direkten Nachweis für ihre Struktur lieferten 1903 die Streuversuche von **Philipp von Lenard**<sup>5</sup>. Er beschoss in einem Vakuumgefäß einige  $\mu\text{m}$  dicke Metallfolien mit Elektronen variabler Energie und bestimmte den Anteil der durch die Folien hindurchtretenden Elektronen. Für Elektronen mit einer Energie von weniger als 10 keV fand er den Radius des aus gaskinetischen Experimenten bestimmten Wirkungsquerschnittes der Atome von etwa  $1 \text{ \AA}$  gut bestätigt. Der Radius der streuenden Zentren verkleinerte sich aber für Elektronen mit höherer Energie auf etwa  $10^{-15} \text{ m}$ . Wegen diesen kleinen Streuquerschnittes wurden die Folien auch als *Lenard-Fenster* bezeichnet.

Mit der Vorstellung, dass Atome kompakte Kugeln mit einem Radius von etwa  $10^{-10} \text{ m}$  sind, war dieses Ergebnis nicht vereinbar, da bei den verwendeten Folien etwa  $10^5$  Atomschichten hintereinander liegen und sich deshalb deren Wirkungsquerschnitte mehrfach überdecken. Die Atome müssen deshalb vielmehr große Hohlräume besitzen. Lenard nahm deshalb an, dass die Masse der Atome fast ausschließlich im Zentrum der Atome vereinigt ist und der übrige Raum durch elektrische Felder ausgefüllt ist. Als Ursache dieser Felder wurden positive und negative Ladungen im Kern angesehen.

#### Das Thomson'sche Atommodell

**J. J. Thomson** schlug ein Atommodell vor, bei dem jedes Atom aus  $Z$  negativ geladenen Elektronen und  $Z$  positiven Ladungen besteht und deshalb insgesamt neutral ist. Für die räumliche Verteilung schlug er ein *Rosinenkuchenmodell* vor, bei dem alle Ladungen im Atom mit Radius  $R$  statistisch verteilt sein sollten. Diese Anordnung von positiven und negativen Ladungen kann als Plasma betrachtet werden, für das man eine Plasmafrequenz

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m}} = \sqrt{\frac{3Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e R^3}} \quad (2.4.1)$$

erwarten würde. Würde man die Thomson'schen Atome mit Licht bestrahlen, so würde man Resonanzen im Absorptionsspektrum bei der Frequenz  $\omega_p$  und ihren Harmonischen erwarten. Die erwarteten

<sup>5</sup> **Philipp von Lenard** (1862 – 1947), Nobelpreis für Physik 1905.

Frequenzen stimmten allerdings nicht mit dem Experiment überein. Dies war ein erster experimenteller Hinweis dafür, dass das Thomson'sche Atommodell nicht richtig sein kann.

Das stärkste Argument gegen das Thomson'sche Atommodell lieferten Streuexperimente, die nicht die erwartete Winkelverteilung lieferten. Berechnet man die Streuung eines geladenen Teilchen an einer kugelförmigen, homogenen Ladungsverteilung mit Radius  $R$ , so erwartet man für die Streuung von 5 MeV  $\alpha$ -Teilchen an Goldatomen ( $Z = 79$ ) einen mittleren Streuwinkel von nur  $\bar{\vartheta} \sim 1.8 \times 10^{-4}$  rad. Nimmt man ferner an, dass in einer einige  $\mu\text{m}$  dicken Goldfolie bei einem Durchmesser der Atome von etwa  $1\text{\AA}$  Mehrfachstreuung auftritt, so wird der erwartete mittlere Streuwinkel noch wesentlich kleiner. Wir werden im nächsten Abschnitt sehen, dass diese Erwartung nicht mit den Streuversuchen von **Rutherford**, **Geiger** und **Marsden** durchgeführten Streuexperimenten übereinstimmt.

### Streuversuche von Rutherford

Der genaue innere Aufbau der Atome wurde einige Jahre später (1906-1913) durch die Streuexperimente von **Ernest Rutherford**<sup>6</sup> und Mitarbeitern geklärt. Rutherford beschoss Goldfolien mit  $\alpha$ -Teilchen und bestimmte zunächst die möglichen Streuwinkel und die Energien der gestreuten  $\alpha$ -Teilchen. Die Experimente zeigten klar, dass auch sehr große Streuwinkel bis  $\vartheta = 180^\circ$  auftreten. Dies war zunächst sehr überraschend, weil es dem Thomson'schen Atommodell völlig widersprach.

Die Streuexperimente zeigten ferner, dass die Energie der gestreuten  $\alpha$ -Teilchen etwa gleich der Energie der einfallenden Teilchen ist. Ferner traten Streuwinkel größer  $90^\circ$  auf. In Analogie zum Stoß in der klassischen Mechanik schloss er, dass aufgrund des sehr kleinen Energieverlusts der  $\alpha$ -Teilchen die Masse  $m_K$  der Stoßpartner in der Goldfolie groß gegenüber der Masse der  $\alpha$ -Teilchen sein muss. Er bezeichnet die Stoßpartner als *Atomkerne*. Da die zweifach positiv geladenen  $\alpha$ -Teilchen von den Atomkernen abgestoßen wurden, mussten diese ebenfalls positiv geladen sein. Da die Atome aber insgesamt elektrisch neutral sind, nahm Rutherford an, dass die Atomkerne eine positive Ladung  $Ze$  besitzen und von  $Z$  negativen Elementarladungen umgeben sind. Die Masse dieser negativ geladenen Hülle musste allerdings sehr klein sein, weshalb für sie nur Elektronen in Frage kamen. Rutherford konnte aus seinen Experimenten auch bereits den maximalen Radius  $R_{\text{max}}$  des Atomkerns abschätzen. Bei einem Stoßwinkel von  $180^\circ$  wird die gesamte kinetische Energie  $W_{\text{kin}}$  der verwendeten  $\alpha$ -Teilchen (in Rutherfords Experiment  $W_{\text{kin}} = 5.5 \text{ MeV}$ ) ausschließlich zur Überwindung der Coulomb-Abstoßung aufgewendet. Wir können also schreiben

$$W_{\text{kin}} = \frac{Ze \cdot 2e}{4\pi\epsilon_0 R_{\text{max}}},$$

woraus wir mit  $Z = 79$  für Gold den Atomkernradius der Goldatome zu

$$R_{\text{max}}^{\text{Au}} \leq 4.1 \times 10^{-14} \text{ m}$$

abschätzen können.

### Das Rutherfordsche Atommodell

Aufgrund seiner Experimente konnte Rutherford folgende Hypothese für den Aufbau der Atome aufstellen:

<sup>6</sup>Ernest Rutherford (1871-1937), Nobelpreis für Physik 1908.

**Ernest Rutherford (1871 - 1937), Nobelpreis für Chemie 1908:**

**Ernest Rutherford** wurde am 30. August 1871 in Brightwater, Neuseeland geboren.

Nach außergewöhnlichen schulischen Leistungen studierte er von 1890 bis 1894 in Christchurch (Neuseeland) und von 1895 bis 1898 am Cavendish-Laboratorium in Cambridge (England). Die Entdeckung der Radioaktivität durch Antoine Henri Becquerel im Februar 1896 gab seiner Laufbahn eine bestimmende Richtung. Im Sommer 1898 erhielt er eine Berufung als Professor für Physik an die McGill-Universität in Montreal, Kanada. Hier untersuchte er die ionisierende Wirkung radioaktiver Strahlung auf Gase. Außerdem stellte er eine These über den Atomzerfall auf und identifizierte die Alphastrahlung als Heliumionen. 1902 erkannte er die Radioaktivität als Element-Umwandlung und formulierte das radioaktive Zerfallsgesetz. 1903 gelang ihm die Ablenkung von  $\alpha$ -Teilchen im starken Magnetfeld und wies deren positive Ladung nach. Dass es sich um zweifach positiv geladene Heliumionen handelt, zeigten 1908 die beiden Mitarbeiter Rutherfords, Hans Geiger und Thomas Royds. 1907 kehrte Rutherford nach England auf den Langworthy-Lehrstuhl in Manchester zurück. Für die Untersuchungen über den Zerfall der Elemente und die Chemie der radioaktiven Materie erhielt er 1908 den Nobelpreis für Chemie.



Rutherford arbeitete u.a. mit Radium, das ihm die Wiener Akademie der Wissenschaften lieh. Hans Geiger und Ernest Marsden entdeckten 1911 in Rutherfords Labor, dass einige  $\alpha$ -Teilchen beim Durchstrahlen einer sehr dünnen Goldfolie stark abgelenkt werden. Daraus entwickelte er 1911 eine Streuformel sowie ein Atommodell, das auch heute noch in Schulen gelehrt wird. Niels Henrik Bohr entwickelte das Rutherford'sche Atommodell 1913 unter Berücksichtigung der klassischen Elektrodynamik fort; Henry Moseley schloss aus den Frequenzen radioaktiver Strahlen auf die Kernladungszahl der sie aussendenden Substanzen und ordnete sie demgemäß in das Periodensystem der Elemente.

Rutherford wurde 1914 zum Ritter geschlagen. 1919 gelang ihm die erste künstlich erzielte Kernumwandlung durch Beschießen von Stickstoff mit  $\alpha$ -Teilchen. Im gleichen Jahr wurde Rutherford Direktor des Cavendish - Laboratoriums in Cambridge und hatte nach 1920 auch einen Lehrstuhl an der Royal Institution of Great Britain in London inne. Im Jahre 1925 wurde er zum Präsidenten der Royal Society gewählt und 1931 zum Lord ernannt (Lord Rutherford of Nelson).

Ernest Rutherford verstarb am 19. Oktober 1937 in Cambridge und wurde in Westminster Abbey nahe dem Grabe Newtons bestattet.

- Die Atome bestehen aus einem Atomkern und einer Atomhülle.
- Die Atomhülle ist negativ geladen und besteht aus Elektronen, sie wird deshalb auch *Elektronenhülle* genannt.
- Der Atomkern ist positiv geladen und vereinigt fast die Gesamte Atommasse in sich.
- Der Radius des Atomkerns beträgt weniger als etwa  $10^{-14}$ m.

Ausgehend von seiner Atomhypothese hat Rutherford die Anzahl der  $\alpha$ -Teilchen berechnet, die pro Zeiteinheit in einen bestimmten Winkelbereich gestreut werden, und die theoretischen Vorhersagen mit seinen Experimenten verglichen. Streuexperimente liefern ganz allgemein Aufschluss über den Verlauf des Wechselwirkungspotenzials zwischen zwei Atomen  $A$  und  $B$ , der von der Ladungsverteilung der Elektronen in  $A$  und  $B$  abhängt. Wir wollen deshalb im Folgenden auf Streuexperimente und den aus ihnen entstandenen Modellen zum Aufbau der Atome näher eingehen.

### 2.4.2 Grundlagen zu Streuexperimenten

Wir betrachten einen Strahl von Teilchen der Sorte  $A$ , der auf eine dünne Schicht mit der Dicke  $dx$  trifft, die aus Atomen der Sorte  $B$  und der Dichte  $n_B$  besteht (siehe Abb. 2.3). Der Teilchenfluss, d.h. die Zahl

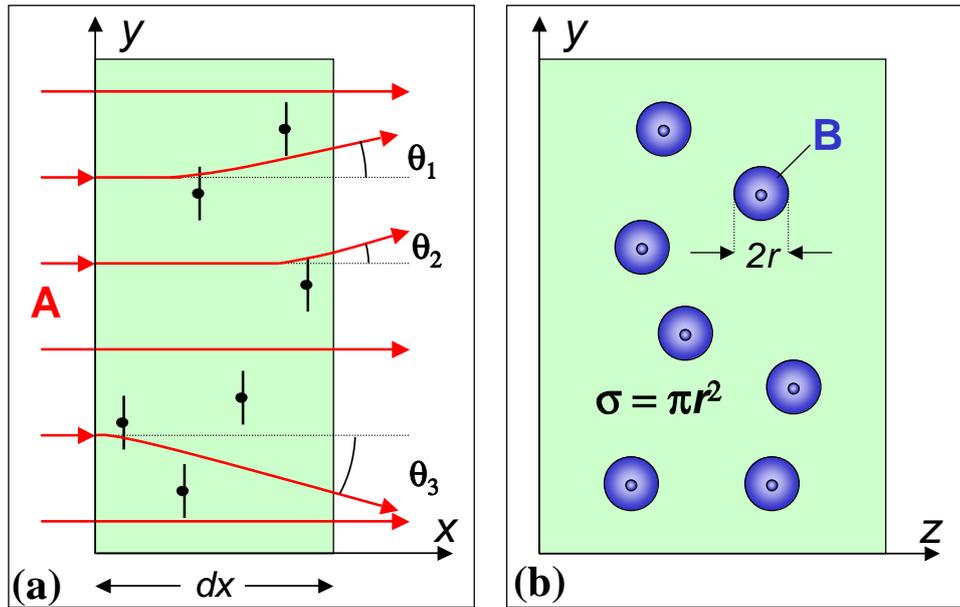


Abbildung 2.3: (a) Streuung von Atomen A an Atomen B mit der Dichte  $n_B$  in einer Schicht der Dicke  $dx$ . (b) Schematische Darstellung zur Definition des Streuquerschnitts.

der Teilchen pro Zeit, bezeichnen wir mit  $dN_A/dt = \dot{N}_A$ . Ein Teil  $d\dot{N}_A^{\text{str}}$  der Teilchen A wechselwirkt pro Zeiteinheit mit den Teilchen B im Target und wird dadurch aus seiner ursprünglichen Flugrichtung ( $x$ -Richtung) abgelenkt. Die Größe der Ablenkung hängt vom Wechselwirkungspotenzial  $V(r)$  zwischen A und B vom Abstand  $r$  zwischen A und B, von den Massen  $m_A$  und  $m_B$  sowie der Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B$  ab.

Wir wollen annehmen, dass die Dicke  $dx$  des Targets klein genug ist, so dass keine Mehrfachstreuungsprozesse auftreten, d.h. jedes Teilchen A wird höchstens einmal gestreut. Wir definieren ferner den *integralen Streuquerschnitt*  $\sigma$  für die Streuung von A an B als diejenige Fläche  $\sigma = \pi r^2$  um ein Streuatom B, durch die ein Teilchen fliegen muss, damit es noch um einen Winkel  $\theta \geq \theta_0$  abgelenkt wird. Hierbei ist  $\theta_0$  ein kleinster, gerade noch nachweisbarer Winkel. Da der Streuquerschnitt vor allem Bedeutung für mikrophysikalische Wechselwirkungen besitzt und  $\sigma$  hier immer sehr kleinen Flächen entspricht, benutzt man für  $\sigma$  meistens die Maßeinheit 1 Barn = 1 b =  $10^{-28}\text{m}^2$ . Allgemein können wir den integralen Streuquerschnitt wie folgt definieren:

$$\sigma = \frac{\text{Zahl der gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit}}{\text{Zahl der einfallenden Teilchen pro Zeiteinheit und Fläche}} = \frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}}{\dot{N}_A/F} \quad (2.4.2)$$

Entlang der Strecke  $dx$  ändert sich aufgrund der Streuung der Teilchenfluss der Teilchen A um

$$d\dot{N}_A = -d\dot{N}_A^{\text{str}} = -\frac{\dot{N}_A \sigma}{F} \cdot N_B = -\dot{N}_A \sigma n_B dx \quad (2.4.3)$$

Hierbei ist  $N_B$  die Anzahl der Streuer in der Dicke  $dx$ , die sich aus der Dichte  $n_B$  der Streuer durch Multiplikation mit dem Streuvolumen  $F dx$  ergibt, wobei  $F$  die Querschnittsfläche des streuenden Objekts senkrecht zur Richtung der einfallenden Teilchen A. Teilt man durch  $\dot{N}_A$  und integriert über  $x$ , so erhält man die nach der Strecke  $x$  verbliebene Teilchenflussdichte zu

$$\dot{N}_A = \dot{N}_{A0} \exp(-n_B \sigma x) \quad \text{mit} \quad \dot{N}_{A0} = \dot{N}_A(x=0) . \quad (2.4.4)$$

Der Ausdruck zeigt, dass der *integrale Streuquerschnitt*  $\sigma$  mit der mittleren freien Weglänge über

$$\Lambda = \frac{1}{\sigma n_B} \quad (2.4.5)$$

zusammenhängt.

In Abb. 2.4a ist eine experimentelle Anordnung zur Bestimmung des integralen Streuquerschnitts gezeigt. Ein Teilchenstrahl wird dabei durch zwei Blenden 1 und 2 kollimiert und tritt dann durch eine dünne Folie aus Atomen der Sorte  $B$ . Hinter der Blende 3 registriert ein Detektor die Anzahl der Teilchen  $A$ , die um einen Winkel kleiner als  $\theta_0$  abgelenkt wurden. Misst man nun  $\dot{N}_A$  mit dieser Anordnung als Funktion der Dicke  $x$  der Folie, so kann man bei bekannter Teilchendichte  $n_B$  in der Folie den integralen Streuquerschnitt  $\sigma$  bestimmen.

Während man bei der Bestimmung des integralen Streuquerschnitts  $\sigma$  die Abnahme der nicht gestreuten Teilchen misst, werden zur Messung des *differentiellen Wirkungsquerschnittes* die Teilchen detektiert, die um einen bestimmten Winkel  $\theta$  abgelenkt wurden. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist allgemein wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\text{Zahl der gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit und Raumwinkel}}{\text{Zahl der einfallenden Teilchen pro Zeiteinheit und Fläche}} \\ &= \frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}/\Delta\Omega}{\dot{N}_A/F} . \end{aligned} \quad (2.4.6)$$

Wir betrachten nun die Zahl  $\Delta\dot{N}_A^{\text{str}}(\theta, \Delta\Omega)$  der entlang der Strecke  $dx$  pro Zeiteinheit in den Raumwinkel  $\Delta\Omega$  um den Winkel  $\theta$  gestreuten Teilchen. Sie ist mit (2.4.6) gegeben durch

$$\Delta\dot{N}_A^{\text{str}} = \frac{\dot{N}_A}{F} \cdot N_B \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega = \dot{N}_A \cdot n_B dx \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega . \quad (2.4.7)$$

Hierbei ist wiederum  $F$  die Querschnittsfläche,  $dx$  die Länge des Streuvolumens  $V = F dx$  und  $N_B = n_B V = n_B F dx$  die Zahl der Streuer im Streuvolumen. Im Gegensatz zu  $d\dot{N}_A^{\text{str}}$  (Teilchen pro Zeiteinheit) ist die Größe  $\Delta\dot{N}_A^{\text{str}}$  jetzt eine Teilchenzahl pro Zeiteinheit und Raumwinkel, da wir jetzt die Gesamtzahl der in das Raumwinkelelement  $\Delta\Omega$  gestreuten Teilchen betrachten.

Um den differentielle Streuquerschnitt zu messen, verwendet man die in Abb. 2.4b gezeigte Anordnung. Zwei durch Blenden kollimierte Teilchenstrahlen  $A$  und  $B$  kreuzen sich im Streuvolumen  $V = F dx$ . Die in den Raumwinkel  $\Delta\Omega$  gestreuten Teilchen werden mit einem Detektor der Fläche  $A_D = R^2 \Delta\Omega$  in einem Abstand  $R$  vom Streuvolumen detektiert. Der differentielle Streuquerschnitt  $d\sigma/d\Omega$  enthält Informationen über das Wechselwirkungspotenzial  $E_{\text{pot}}(r)$  zwischen den Teilchen  $A$  und  $B$  im Abstand  $r$ . Wir wollen deshalb untersuchen, wie  $d\sigma/d\Omega$  mit  $E_{\text{pot}}(r)$  zusammenhängt.

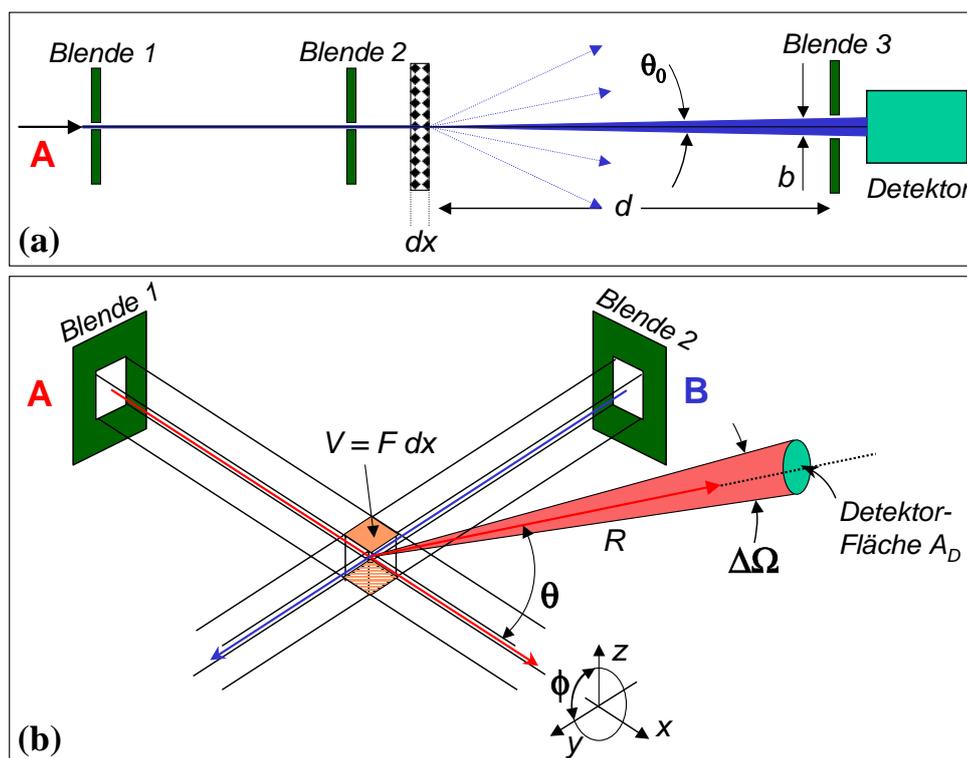


Abbildung 2.4: (a) Messung des integralen Streuquerschnitts  $\sigma$ . (b) Messung des differentiellen Streuquerschnitts  $d\sigma/d\Omega$ .

### Klassische Steutheorie

Es wurde bereits im Rahmen der Physik I diskutiert, dass die Streuung von zwei Teilchen mit Massen  $m_1$  und  $m_2$  sowie Geschwindigkeiten  $\mathbf{v}_1$  und  $\mathbf{v}_2$  mit einem gegenseitigen Wechselwirkungspotenzial  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  völlig äquivalent im Schwerpunktsystem dargestellt werden kann und zwar durch die Bewegung eines Teilchens  $A$  mit der reduzierten Masse

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.4.8)$$

und der Relativgeschwindigkeit

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2, \quad (2.4.9)$$

das sich im Potenzial  $V(r)$  bewegt. Hierbei ist  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  der Realtivabstand. Man nennt diese Beschreibung auch *Potenzialstreuung*, da zur Beschreibung der Teilchenbahn außer der reduzierten Masse  $\mu$  und der Anfangsbedingung  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$  der Teilchenbahn nur die Kenntnis des Potenzials  $V(r)$  notwendig ist. Wir wollen hier nur den Fall eines kugelsymmetrischen Potenzials behandeln, da in diesem Fall der Drehimpuls des Teilchens erhalten bleibt, so dass die die Teilchenbahn in einer Ebene, der Streuebene, verläuft.

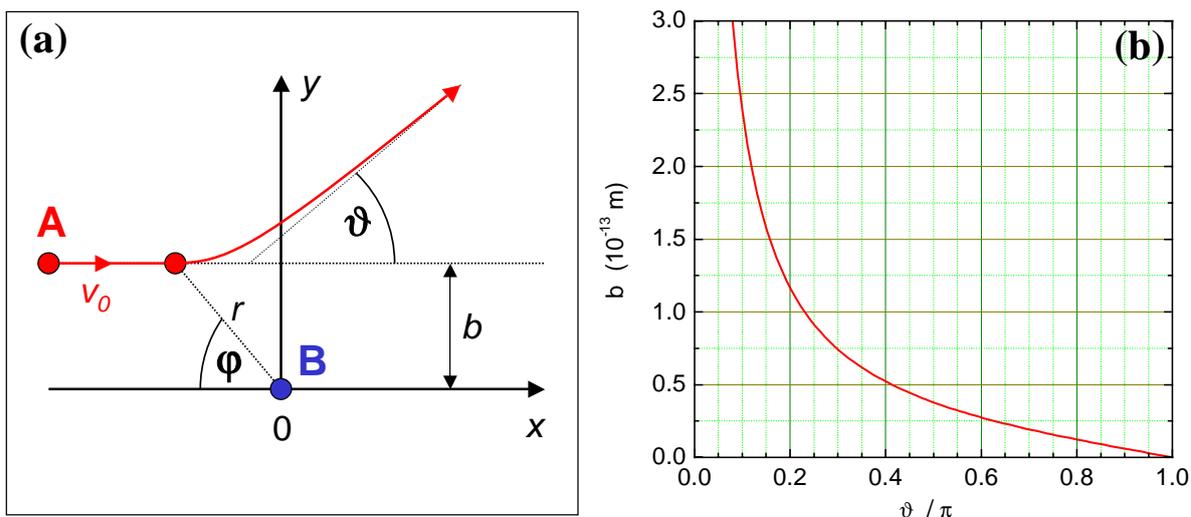


Abbildung 2.5: (a) Streuung eines Teilchens A der reduzierten Masse  $\mu$  im Potenzial  $V(r)$  mit Nullpunkt in B. (b) Ablenkfunktion von  $\alpha$ -Teilchen mit  $E_\infty = \frac{1}{2}\mu v^2 = 6 \text{ MeV}$  an Gold ( $Z = 79$ ).

Für ein kugelsymmetrisches Potenzial der Form

$$V(r) = \frac{k}{r} \tag{2.4.10}$$

gibt es einen eindeutigen Zusammenhang zwischen dem Streuwinkel  $\vartheta$  (wir benutzen für den Ablenkwinkel im Schwerpunktsystem  $\vartheta$ , um ihn vom Ablenkwinkel  $\theta$  im Laborsystem zu unterscheiden) und dem Stoßparameter  $b$  (zur Definition siehe Abb. 2.5). Dieser Zusammenhang wird in Anhang A hergeleitet, er lautet:

$$b = \frac{k}{\mu v^2} \cot \frac{\vartheta}{2} . \tag{2.4.11}$$

Der Stoßparameter  $b$  ist dabei der kleinste Abstand vom Streuzentrum (siehe Abb. 2.5a). Für zwei Punktladungen mit Ladung  $Z_1e$  und  $Z_2e$  gilt z.B.  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}(Z_1Z_2e^2)$ . Die Beziehung zwischen  $\vartheta$  und  $b$  wird im Allgemeinen als *Ablenkfunktion* bezeichnet und ist in Abb. 2.5b dargestellt. Zentrale Stöße mit Stoßparameter  $b = 0$  führen zu Rückstreuung ( $\vartheta = \pi$ ). Man sieht ferner, dass der Streuwinkel umso kleiner wird je größer der Stoßparameter ist. Die Ablenkfunktion  $b(\vartheta)$  hängt von der genauen Form des Potentials  $V(r)$  und der Anfangsenergie  $E_\infty = \frac{1}{2}\mu v_\infty^2$  ab.

Die Ablenkfunktion gibt den Zusammenhang zwischen dem Stoßparameter  $b$  und dem Streuwinkel  $\vartheta$  an. Letzterer ist messbar, der Stoßparameter ist dagegen unbekannt. Wir müssen nun noch diskutieren, wie man aus den gemessenen Streuquerschnitten, die eine statistische Information liefern, die Ablenkfunktion  $b(\vartheta)$  erhält, um gemessene und berechnete Kurven vergleichen zu können und damit Information über  $V(r)$  zu erhalten. Wir betrachten dazu einen parallelen Strahl von Teilchen A mit dem Fluss  $\dot{N}_A$ , die auf eine dünne Schicht von ruhenden Teilchen B fallen. Alle Teilchen A, die durch einen Kreisring mit Radius  $b$  und Dicke  $db$  um ein Atom B laufen, werden bei einem kugelsymmetrischen Wechselwirkungspotenzial um den Winkel  $\vartheta \pm d\vartheta/2$  abgelenkt (siehe Abb. 2.6). Durch den Kreisring laufen pro

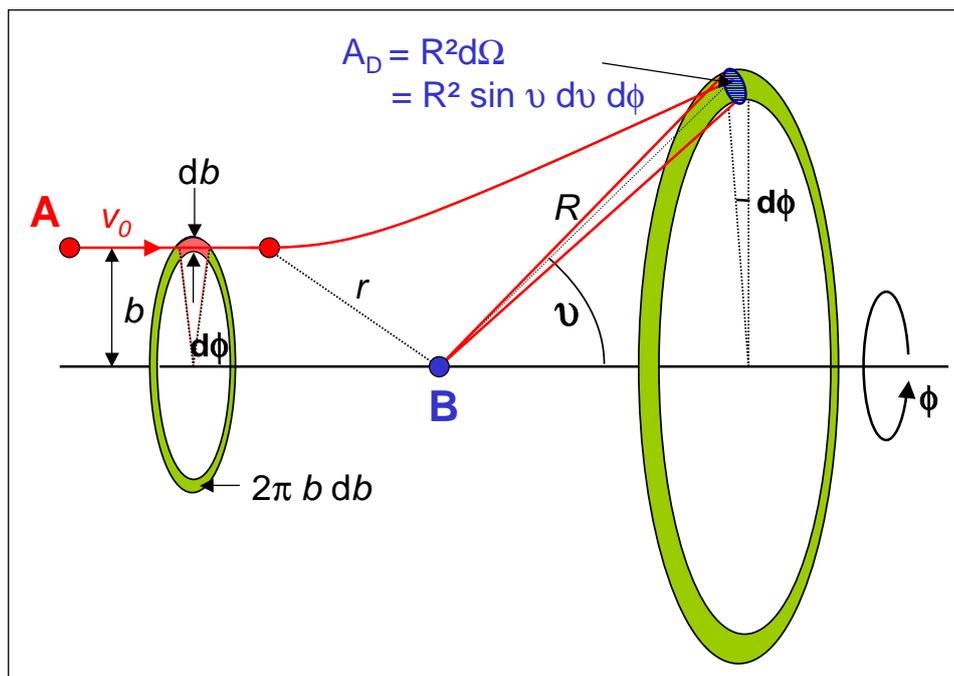


Abbildung 2.6: Zum Zusammenhang zwischen Ablenkfunktion und differentiellm Wirkungsquerschnitt.

Zeiteinheit gerade  $\dot{N}_A(b)dF = \dot{N}_A(b) \cdot 2\pi b db$  Teilchen der Sorte A. Von einem streuenden Teilchen B wird daher der Bruchteil

$$\frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}(\vartheta \pm d\vartheta/2)}{\dot{N}_A} = \frac{\dot{N}_A \cdot dF}{\dot{N}_A \cdot F} = \frac{2\pi b db}{F} = \frac{2\pi b}{F} \frac{db}{d\vartheta} d\vartheta \quad (2.4.12)$$

der pro Zeiteinheit einfallenden Teilchen A in den Winkelbereich  $\vartheta \pm d\vartheta/2$  gestreut. Von diesen Teilchen gelangt aber nur ein kleiner Anteil in den Detektor der Fläche  $A_D = R^2 d\Omega = R^2 \sin \vartheta d\vartheta d\phi$ . Hierbei ist R der Abstand des Detektors vom Streuzentrum und  $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\phi$  ist der zur Detektorfläche gehörende Raumwinkel. Das heißt, zum Detektor gelangt nur der Bruchteil

$$\frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}}{\dot{N}_A} \frac{d\phi}{2\pi} = \frac{b}{F} \frac{db}{d\vartheta} d\vartheta d\phi \quad (2.4.13)$$

der Teilchen A, der durch das Flächenelement  $b db d\phi$  des Kreisringes einfällt (siehe Abb. 2.6).

Von allen  $N_B = n_B V$  streuenden Teilchen B im Streuvolumen  $V = F \cdot dx$  wird also dann insgesamt der Bruchteil

$$\frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}}{\dot{N}_A} = \frac{n_B \cdot F dx}{F} b \frac{db}{d\vartheta} d\vartheta d\phi = n_B dx b \frac{db}{d\vartheta} d\vartheta d\phi \quad (2.4.14)$$

aller einfallenden Teilchen  $A$  in den Detektor gestreut. Der Vergleich mit dem Ausdruck (2.4.7) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt ergibt dann unter Benutzung von  $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\phi$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b \frac{db}{d\vartheta} \frac{1}{\sin\vartheta} . \quad (2.4.15)$$

Setzt man diesen Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt in (2.4.14) ein, so erhält man für den Bruchteil der zum Detektor gelangenden Teilchen den Ausdruck

$$\frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}}{\dot{N}_A} = n_B dx \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \sin\vartheta d\vartheta d\phi = \frac{N_B}{F} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega , \quad (2.4.16)$$

Wir sehen, dass der Bruchteil der zum Detektor gelangenden Teilchen proportional zur Zahl der Streuer pro Flächeneinheit, zum differentiellen Streuquerschnitt und zum mit dem Detektor abgedeckten Raumwinkelelement ist. Für ein dünnes Target ist die Zahl der aus dem Strahl herausgestreuten Teilchen klein gegenüber der Zahl der einfallenden Teilchen. Man kann deshalb  $\dot{N}_A$  dadurch bestimmen, dass man alle durch das Target in Strahlrichtung hindurchtretenden Teilchen  $A$  zählt. Die Zahl der Targetatome  $N_B = n_B F dx = n_B V$  bestimmt man durch Wägung, der Öffnungswinkel  $d\Omega$  des Detektors wird aus dessen Fläche und dem Abstand zum Target bestimmt (siehe Abb. 2.6). Den differentiellen Wirkungsquerschnitt erhält man dann durch Messung der im Detektor registrierten gestreuten Teilchen.

### Die Rutherford'sche Streuformel

Rutherford leitete mit der von ihm entwickelten Atomvorstellung (siehe oben) seine berühmte Streuformel ab, die in quantitativer Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen steht. Nehmen wir einen punktförmige, positiv geladenen Kern an, so erhalten wir mit  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} (Z_1 Z_2 e^2)$  erhalten aus (2.4.11)

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu v^2} \cot \frac{\vartheta}{2} \quad (2.4.17)$$

und damit<sup>7</sup>

$$\frac{db}{d\vartheta} = \frac{1}{2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu v^2} \frac{1}{\sin^2 \vartheta/2} . \quad (2.4.18)$$

Setzt man dies in den Ausdruck (2.4.15) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt ein, so erhält man die *Rutherford-Streuformel* zu<sup>8</sup>

<sup>7</sup>Wir benutzen  $d \cot(\vartheta/2) / d\vartheta = \frac{1}{2} \frac{1}{\sin^2(\vartheta/2)}$ .

<sup>8</sup>Hierbei benutzt man die Identität  $\sin 2x = 2 \sin x \cos x$ .

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu v^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \vartheta/2} . \quad (2.4.19)$$

Mit (2.4.15) und  $d\Omega = A_D/R^2$  erhält man für den Bruchteil der zum Detektor gelangenden  $\alpha$ -Teilchen den Ausdruck

$$\frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}}{\dot{N}_A} = \frac{1}{4} \frac{n_B dx}{R^2} \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu v^2} \right)^2 \frac{A_D}{\sin^4 \vartheta/2} . \quad (2.4.20)$$

Streut man leichte  $\alpha$ -Teilchen an schweren Kernen (z.B. Gold), so ist  $\mu \simeq m_\alpha$  und damit  $\mu v^2 \simeq 2E_{\text{kin}}$  und man erhält

$$\frac{d\dot{N}_A^{\text{str}}}{\dot{N}_A} = \frac{1}{4} \frac{n_B dx}{R^2} \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi\epsilon_0 E_{\text{kin}}} \right)^2 \frac{A_D}{\sin^4 \vartheta/2} . \quad (2.4.21)$$

**Geiger** und **Marsden** wiesen die Proportionalität von  $\Delta\dot{N}_A$  zu  $1/E_{\text{kin}}^2$  und  $1/\sin^4 \frac{\vartheta}{2}$  für Streuwinkel zwischen  $0$  und  $150^\circ$  mit großer Genauigkeit nach. Nur bei sehr großen Streuwinkeln, also sehr kleinen Stoßparametern treten Abweichungen auf. Diese Abweichung wird anomale Rutherford-Streuung genannt und wurde bereits von Rutherford richtigerweise darauf zurückgeführt, dass der Atomkern nicht punktförmig ist, sondern eine endliche Ausdehnung  $r_K$  besitzt. Für  $r \leq r_K$  findet keine reine Coulomb-Streuung mehr statt. Es treten vielmehr in diesem Bereich auch noch zusätzlich zu den elektrostatischen Kräften die kurzreichweitigen Kernkräfte auf, die zu einer Veränderung der Streufunktion führen. Aus der Abweichung der gemessenen Streufunktion von (2.4.20) kann der Radius  $r_K$  des Atomkerns abgeschätzt werden. Man findet  $r_K \approx r_0 A^{1/3}$ , wobei  $A$  die Massenzahl des Kerns und  $r_0 \approx 1.3 \times 10^{-15} \text{m}$  ist. Das Volumen des Atomkerns macht also nur einen Bruchteil  $(r_0/r_A)^3 \approx 10^{-15}$  des Atomvolumens aus.

Durch gleichzeitige Messung von  $d\dot{N}_A^{\text{str}}$  und  $\dot{N}_A$  konnte **Chadwick** 1920 die Identität von Kernladungszahl und Ordnungszahl des Atoms zeigen.

## Zusammenfassung

- Im Laufe der letzten etwa 200 Jahre wurden die Modellvorstellungen zu Atomen durch verfeinerte Experimentiertechniken zu quantitativen Modellen weiterentwickelt, die die meisten Beobachtungen richtig beschreiben.

- Typische Atomradien betragen 0.1 bis 0.3 nm.

- Die Avogadro-Konstante

$$N_A = 6.022\,141\,99(47) \times 10^{23}$$

gibt die Zahl der Atome bzw. Moleküle pro Mol an.

- Als atomare Masseneinheit benutzt man

$$1 \text{ AME} = \frac{1}{12} m(^{12}\text{C}) = 1.660\,538\,73(13) \times 10^{-27} \text{ kg}.$$

Die relative Atommasse oder Massenzahl eines Elements  $X$  ist

$$A_r(X) = \frac{m_a(X)}{\text{AME}}.$$

- 1 mol eines Stoffes ist die Stoffmenge, die gleich viele Atome bzw. Moleküle enthält wie 12 g Kohlenstoff  $^{12}\text{C}$ .

- Die Molmasse eines Elements  $X$  beträgt

$$m_{\text{mol}}(X) = A_r(X) \text{ [g]}.$$

- Die Atommasse eines Elements  $X$  beträgt

$$m_a(X) = \frac{A_r(X) \text{ [g]}}{N_A}.$$

- Neutrale Atome sind aus  $Z$  Elektronen mit Ladung  $-e = -1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$  und Masse  $m_e = 1/1836 \text{ AME}$  und einem wesentlich schwereren Kern mit Ladung  $+Ze$  und Masse  $A_r$  (in AME) aufgebaut.

Die positive Ladung  $Ze$  des Atomkerns wird durch die negative Ladung der Elektronenhülle aus  $Z$  Elektronen genau kompensiert.

Die Zahl  $Z$  wird Ordnungszahl, die Zahl  $A_r$  relative Atommasse oder Massenzahl genannt.

- Das Ladungs-Masse-Verhältnis  $e/m$  von Ionen kann mit Hilfe von Massenspektrometern bestimmt werden, die auf der Ablenkung der Ionen in gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern beruhen.

- Die Elementarladung des Elektrons kann mit Hilfe des Millikanschen Öltröpfchenversuchs gemessen werden. Sie beträgt

$$e = -1.602\,176\,462(63) \times 10^{-19} \text{ C}.$$

- Die Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Goldkernen hat zur Entwicklung des Rutherford'schen Atommodells geführt. Dieses Modell besagt, dass der weit überwiegende Teil der Atommasse im Atomkern vereinigt ist, dessen Kernradius

$$r_K \approx r_0 A^{1/3} \quad \text{mit} \quad r_0 \approx 1.3 \times 10^{-15} \text{ m}$$

zwischen etwa 1 und  $5 \times 10^{-15} \text{ m}$  liegt und damit um fünf Größenordnungen kleiner ist als der Atomradius  $r_A \approx 10^{-10} \text{ m}$ .