
Grundlagen der Physik

Atom- und Kernphysik

Das Demokrit-Modell

Das erste Atommodell geht auf die beiden griechischen Philosophen **Leukipp** und seinen Schüler **Demokrit** zurück. Beide waren der Ansicht, dass sich Materie nicht beliebig weit zerteilen lasse. Vielmehr müsse es ein kleinstes Teilchen geben, das nicht weiter zerteilbar ist: Das „Urkorn“ oder „Atom“ (*atomos* = griech. unteilbar).

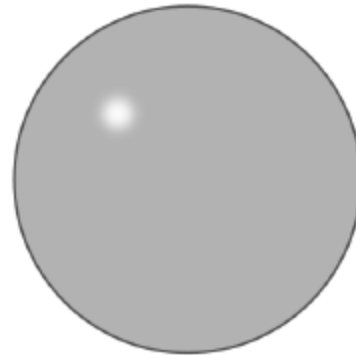


Abb. 209: Das Atommodell nach Demokrit: Atome als „Grundbausteine“ der Materie.



Das Dalton-Modell

Im Jahr 1803 griff der Chemiker und Lehrer **John Dalton** – inspiriert durch das vom Chemiker **Joseph-Louis Proust** formulierte Gesetz der konstanten Mengenverhältnisse –

Demokrits Vorstellung von unteilbaren Materiebausteinen wieder auf. Er entwickelte ein Atommodell mit folgenden Hypothesen:

- Jede Materie besteht aus Grundbausteinen, den unteilbaren Atomen.
- Die Atome eines Elements sind untereinander gleich, die Atome verschiedener Elemente unterscheiden sich stets in ihrer Masse und Größe.
- Jeweils eine ganze Zahl an Atomen verschiedener Elemente bildet Verbindungen.

Das Dalton-Modell

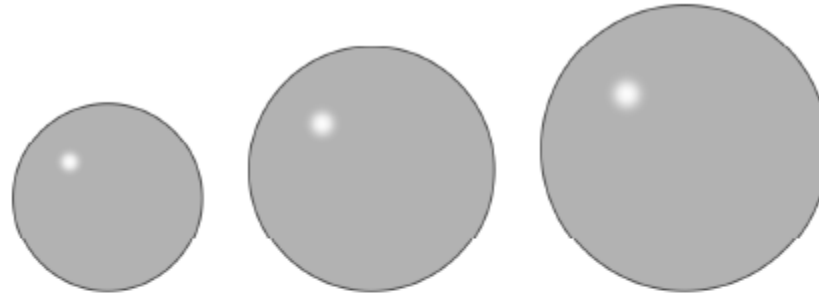


Abb. 210: Das Atommodell nach Dalton: Unterschiedliche Elemente besitzen unterschiedlich große bzw. schwere Atome.

Durch diese Atomhypothese war Dalton in der Lage, das Gesetz von der Erhaltung der Masse, das Gesetz der konstanten Proportionen und das Gesetz der multiplen Proportionen zu erklären.



Das Thomson-Modell

Im Jahr 1897 entdeckte **Joseph John Thomson** bei Untersuchungen einer Glühkathode, dass es sich bei der austretenden Strahlung um einen Strom von Teilchen handeln müsse. Diese auf diese Weise entdeckten „Elektronen“ ließen sich durch ein Magnetfeld ablenken und besaßen eine fast 2000 mal kleinere Masse als das leichteste bekannte Atom (Wasserstoff).¹

Da Thomson diesen „Elektronen“-Strahl aus jedem Metall durch Erhitzen gewinnen konnte, mussten diese Teilchen bereits im Metall enthalten sein; Atome konnten folglich nicht die kleinsten Bausteine der Materie bzw. unteilbar sein.

Das Thomson-Modell

Thomson schlug daher im Jahr 1904 folgendes Atommodell vor:

- Jedes Atom besteht aus einer elektrisch positiv geladenen Kugel, in die elektrisch negativ geladene Elektronen eingelagert sind – wie Rosinen in einem Kuchen.
- Die Atome sind nach außen hin neutral. Sie können jedoch Elektronen abgeben oder zusätzliche aufnehmen.
- Bei der Abgabe von Elektronen entstehen aus den ursprünglich neutralen Atomen positiv geladene Ionen, bei der Aufnahme von Elektronen entstehen entsprechend negativ geladene Ionen.

Das Thomson-Modell

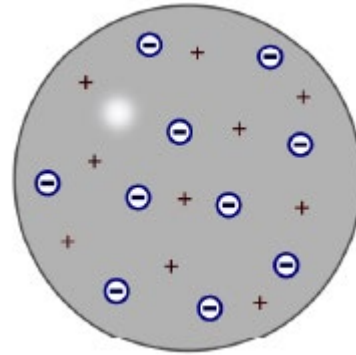


Abb. 211: Das Atommodell nach Thomson: Atome als positiv geladene Kugeln, in die Elektronen eingelagert sind.

Durch sein Atommodell konnte Thomson die Kathodenstrahlung sowie die Erkenntnisse aus der Elektrolyse-Forschung von [Michael Faraday](#) erklären.



Das Rutherford-Modell

Im Jahr 1911 führte Ernest Rutherford ein Experiment durch, bei dem er einen Strahl radioaktiver Alpha-Teilchen (${}^4_2\text{He}^{2+}$) auf eine dünne Goldfolie lenkte. Die meisten Alpha-Teilchen konnten die Goldfolie ungehindert durchdringen, nur wenige wurden (teilweise sehr stark) abgelenkt.

Dieses Ergebnis ließ sich nicht durch die Vorstellung kompakter Atomkugeln (Thomson-Modell) erklären. Der wesentliche Teil der Masse und die positive Ladung des Atoms mussten sich vielmehr in einem kleinen Bereich im Inneren befinden, an dem die auftreffenden Alpha-Teilchen abprallen konnten. Das meiste Volumen hingegen musste die masselose, negativ geladene und aufgrund der geringen Größe der Elektronen weitgehend „hohle“ Hülle des Atoms einnehmen.

Das Rutherford-Modell

Rutherford fasste seine Erkenntnisse in folgendem Atommodell zusammen:

- Das Atom besteht aus einem Atomkern und einer Atomhülle.
- Der Atomkern ist elektrisch positiv geladen und befindet sich im Zentrum des Atoms.
- Der Durchmesser des Atomkerns beträgt nur ein Zehntausendstel des gesamten Atomdurchmessers.
- In der Atomhülle befinden sich negativ geladene Elektronen, die um den Atomkern kreisen. (Durch ihre schnelle Bewegung verhindern die Elektronen, dass sie in den entgegengesetzt geladenen Atomkern stürzen.)
- Die Atomhülle ist ein fast „leerer“ Raum, da die Elektronen noch viel kleiner sind als der Atomkern.

Das Rutherford-Modell

Mit seinem Atommodell konnte Rutherford allerdings noch keine Aussagen über die Bahnform der Elektronen und über ihre Energieverteilung treffen.

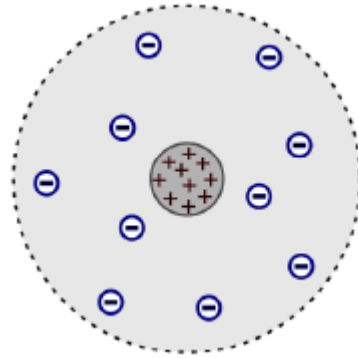


Abb. 212: Das Atommodell nach Rutherford: Atom als positiv geladener Atomkern mit einer negativ geladenen Elektronenhülle.



Das Bohrsche Atommodell

Im Jahr 1913 formulierte Niels Bohr ein Atommodell, das von einem planetenartigen Umlauf der Elektronen um den Atomkern ausgeht. Damit konnte er – beeinflusst durch die Quantentheorie Max Plancks und die Entdeckung des Photoeffekts durch Albert Einstein – erstmals die im Mikrokosmos stets in bestimmten Vielfachen auftretenden Energiesprünge deuten. Diese waren seit der Untersuchung der Spektren von Gasentladungsröhren – insbesondere seit der von Johann Jakob Balmer im Jahr 1885 gefundenen Formel² für die Verteilung der im Spektrum des Wasserstoffs auftretenden Wellenlängen – eines der größten Rätsel der damaligen Physik.

Das Bohrsche Atommodell

Bohr setzte in seinen Berechnungen die elektrostatische Anziehungskraft zwischen Elektron und Kern gleich der Zentrifugalkraft, die sich aus der Umlaufgeschwindigkeit des Elektrons ergibt. Hierdurch konnte er die Verteilung der Spektrallinien von Wasserstoff in allgemeiner Form³ erklären.

² Balmer entdeckte die Tatsache, dass sich die Wellenlängen λ aller Linien im sichtbaren Teil des Wasserstoffspektrums durch eine einfache mathematische Reihenformel beschreiben lassen:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Hierbei stehen $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}$ für die Rydberg-Konstante und $n > 2$ für eine ganze Zahl.

Weitere Spektrallinien des Wasserstoffs im nicht sichtbaren Bereich wurden später zu Ehren ihrer Entdecker Lyman-Serie (1906), Paschen-Serie (1908) und Brackett-Serie (1922) genannt.

³ Sämtliche Spektrallinien des Wasserstoffs lassen sich allgemein nach der folgenden „Balmer-Formel“ berechnen:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n_a^2} \right)$$

Hierbei steht $n = 1, 2, 3, \dots$ für die Elektronenbahn des Ausgangszustandes und $n_a > n$ für die Elektronenbahn des angeregten Zustands.



Das Bohrsche Atommodell

Bohr war sich zudem bewusst, dass das Modell kreisförmiger Elektronenbahnen einen Widerspruch mit sich führte: Da jede Kreisbahn einer beschleunigten Bewegung entspricht und beschleunigte Ladungen elektromagnetische Wellen abstrahlen, müssten Elektronen ständig Energie abgeben und dadurch immer langsamer werden. Sie würden somit – angezogen von der positiven Ladung des Atomkerns – in nur wenigen Bruchteilen einer Sekunde spiralförmig in den Atomkern stürzen.

Das Bohrsche Atommodell

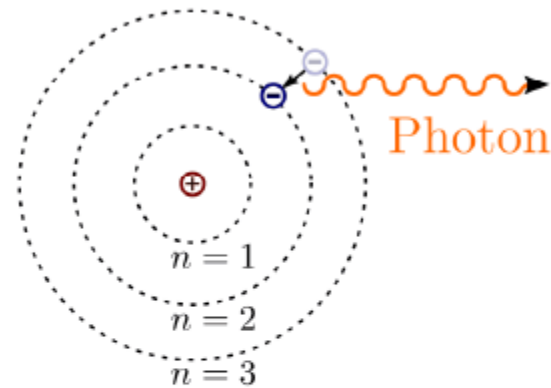


Abb. 213: Das Atommodell für Wasserstoff nach Bohr: Jedes Elektron umkreist den Atomkern auf einer Kreisbahn. Beim Übergang eines Elektrons von einer äußeren Elektronenbahn in eine innere Elektronenbahn wird ein Lichtquant (Photon) ausgesendet.

Das Bohrsche Atommodell

Um sein Atommodell zu retten, das auch mit anderen experimentellen Ergebnissen bestens übereinstimmte, führte Bohr die beiden folgenden Postulate ein⁴:

1. Die Elektronen umkreisen den Atomkern strahlungsfrei, d.h. ohne Abgabe von Energie, in bestimmten Bahnen. Dabei nimmt die Energie der Elektronen nur ganz bestimmte, durch die jeweilige Bahn charakterisierte Werte an.
2. Der Übergang zwischen einer kernfernen zu einer kernnahen Bahn erfolgt sprunghaft unter Abgabe einer Strahlung (eines Photons) mit der Frequenz f , so dass gilt:

$$\Delta E = h \cdot f$$



Das Bohrsche Atommodell

Hierbei ist $\Delta E = E_{n_a} - E_{n_i}$ die Energiedifferenz zwischen der äußeren und inneren Elektronenbahn und $h = 6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ die Planck-Konstante. Im umgekehrten Fall lässt sich ein Elektron durch ein Photon der entsprechenden Frequenz in einen energiereicheren (weiter außen gelegenen) Zustand anheben.



Die Sommerfeld-Erweiterung

Im Jahr 1916 formulierte **Arnold Sommerfeld** eine Erweiterung des Bohrschen Atommodells. Es ging anstelle von Kreisbahnen allgemeiner von elliptischen Bahnen der Elektronen um den Atomkern aus. Eine Ellipse besitzt neben einer großen Halbachse, deren Größe nach Sommerfeld dem Radius einer Kreisbahn im Bohrschen Atommodell und somit einem Energieniveau entsprach, auch eine kleine Halbachse. Sommerfeld ging davon aus, dass auch die Größe dieser Halbachse nur bestimmte Werte annehmen kann. Er führte somit neben der „Hauptquantenzahl“ n für das Energieniveau eine zusätzliche „Nebenquantenzahl“ l ein, welche im Wesentlichen die Form der Ellipse bestimme.

Die Sommerfeld-Erweiterung

Arnold Sommerfeld konnte damit erklären, warum in den optischen Spektren eines Atoms – wie man dank einer höheren Auflösung zwischenzeitlich erkannte – nicht nur einzelne Linien, sondern eher mehrere sehr dicht beieinander liegende Linien auftreten. Diese „Feinstruktur“ war ein Hinweis darauf, dass in einem Atom mehrere Energieniveaus existieren, die sehr nahe zusammen liegen müssen. Nach Sommerfelds Vorstellung war durch das Vorhandensein von möglichen Ellipsenbahnen (abhängig vom Energieniveau) ein Grund für derartig feine Energie-Abstufungen gefunden.

Auch das Atommodell nach Sommerfeld kommt nicht ohne das Bohrschen Postulat aus, wonach Elektronen den Atomkern strahlungsfrei umkreisen. Die beiden Atommodelle von Bohr und Sommerfeld liefern für das Wasserstoff-Atom sehr genaue Ergebnisse, sind jedoch für Atome mit mehreren Elektronen unzureichend. Die Einführung einer Hauptquantenzahl durch Bohr und einer Nebenquantenzahl durch Sommerfeld hat sich dennoch, wie sich später herausstellte, als sinnvoll erwiesen.



Das Orbital-Modell

Die Elektronenbahnen im Orbitalmodell werden als Lösungen der so genannten „Schrödinger-Gleichung“ angesehen. Diese entspricht formal einer Wellengleichung und berücksichtigt den Welle-Teilchen-Dualismus der Elektronen.⁵ Zudem kann nach der „Unschärferelation“, die Werner Heisenberg formulierte, der Ort und die Geschwindigkeit eines Teilchens niemals gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden. Es können damit nur bestimmte Raumbereiche angegeben werden, innerhalb derer sich ein jeweiliges Elektron mit einer sehr großen Wahrscheinlichkeit ($> 90\%$) aufhält. Diese dreidimensionalen Aufenthaltsräume werden Orbitale genannt.



Das Orbital-Modell

Die Elektronenbahnen im Orbitalmodell werden als Lösungen der so genannten „Schrödinger-Gleichung“ angesehen. Diese entspricht formal einer Wellengleichung und berücksichtigt den Welle-Teilchen-Dualismus der Elektronen.⁵ Zudem kann nach der „Unschärferelation“, die Werner Heisenberg formulierte, der Ort und die Geschwindigkeit eines Teilchens niemals gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden. Es können damit nur bestimmte Raumbereiche angegeben werden, innerhalb derer sich ein jeweiliges Elektron mit einer sehr großen Wahrscheinlichkeit ($> 90\%$) aufhält. Diese dreidimensionalen Aufenthaltsräume werden Orbitale genannt.

Das Orbital-Modell

Die konkrete Form eines Orbitals hängt dabei von *vier* Quantenzahlen ab:

- Die Hauptquantenzahl n gibt – wie in den Atommodellen nach Bohr und Sommerfeld – das Energieniveau eines Elektrons an.
- Die Nebenquantenzahl l legt die räumliche Form eines Orbitals und die kleinen Energieunterschiede innerhalb eines Energieniveaus fest.
- Die Magnetquantenzahl m berücksichtigt das unterschiedliche Verhalten der Elektronen in einem von außen angelegten Magnetfeld.
- Die Spinquantenzahl s berücksichtigt die unterschiedlichen Eigenrotationen der Elektronen, den so genannten Spin.

Jedes Elektron wird durch die obigen Quantenzahlen genau charakterisiert.

Das Orbital-Modell

Auswahlregeln

Die vier Quantenzahlen n , l , m und s können nur bestimmte, ganzzahlige Werte annehmen:

- Für die Hauptquantenzahl n gilt:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (179)$$

Die Werte der Hauptquantenzahl n entsprechen somit formal den unterschiedlich weit vom Atomkern entfernten „Planetenbahnen“ des Bohrschen Atommodells.



Das Orbital-Modell

Auswahlregeln

- Für die Nebenquantenzahl l gilt:

$$l = 0, 1, \dots, n - 1 \quad (180)$$

Die Werte der Nebenquantenzahl l entsprechen formal den Abweichungen von einer exakten Kreisbahn im Sommerfeldschen Atommodell. Bei einem bestimmten Energieniveau n treten entsprechend auch n verschiedene Formen an Orbitalen auf.



Das Orbital-Modell

Auswahlregeln

- Für die Magnetquantenzahl m gilt:

$$m = -l, \dots, 0, \dots, +l \quad (181)$$

Bei einer bestimmten Nebenquantenzahl l sind somit $(2 \cdot l + 1)$ verschiedene Werte für die Magnetquantenzahl möglich. Diese Werte haben eine unterschiedliche räumliche Ausrichtung der jeweiligen Orbitale zur Folge.



Das Orbital-Modell

Auswahlregeln

- Für die Spinquantenzahl s gilt:

$$s = \pm \frac{1}{2} \quad (182)$$

In jedem Orbital kann ein Elektron somit – unabhängig von den anderen Quantenzahlen – entweder den Spinzustand $s = +\frac{1}{2}$ oder $s = -\frac{1}{2}$ besitzen.

Nach dem im Jahr 1925 von [Wolfgang Pauli](#) formulierten und nach ihm benannten „Pauli-Prinzip“ müssen sich alle Elektronen eines Atoms in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden.

Das Orbital-Modell

Orbitalformen

Das Aussehen der Orbitale hängt von der Nebenquantenzahl l sowie von der Magnetquantenzahl m ab:

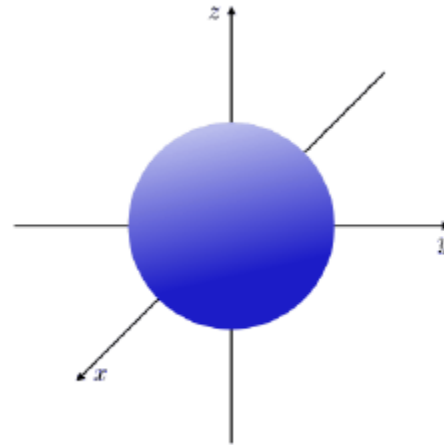


Abb. 214: Raumstruktur des s -Orbitals.

Das Orbital-Modell

Orbitalformen

- Orbitale mit der Nebenquantenzahl $l = 0$ haben eine kugelförmige Raumstruktur. Sie werden aus historischen Gründen auch als „*s*-Orbitale“ bezeichnet.
- Orbitale mit der Nebenquantenzahl $l = 1$ haben eine hantelförmige Raumstruktur. Sie werden aus historischen Gründen auch als „*p*-Orbitale“ bezeichnet. In Abhängigkeit vom Wert der Magnetquantenzahl $m = -1, 0, +1$ ergeben drei Orbitale, die sich in ihrer räumlichen Ausrichtungen unterscheiden.

Das Orbital-Modell

Orbitalformen

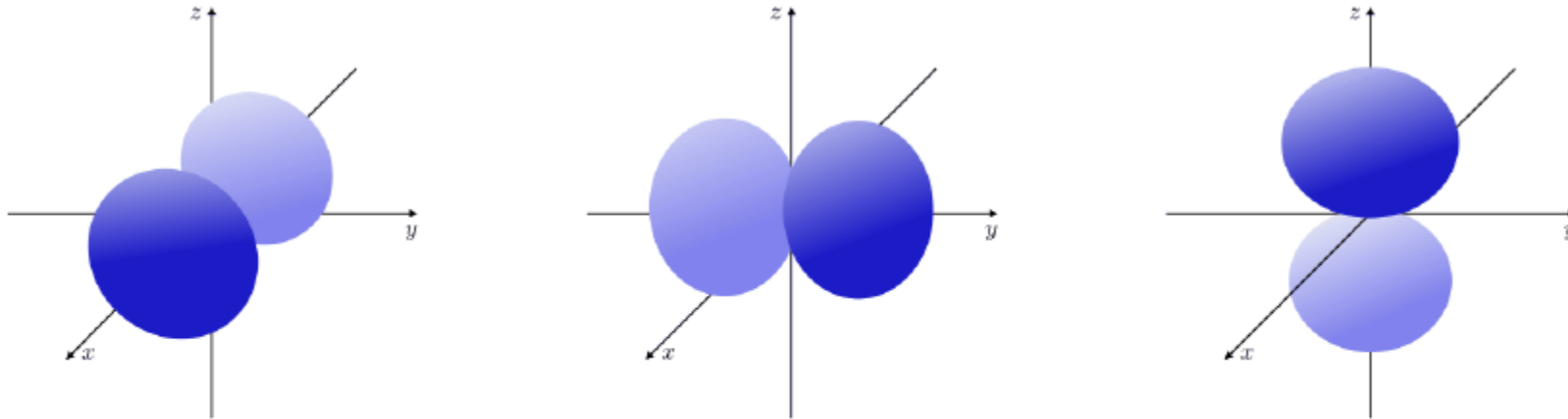


Abb. 215: Raumstruktur der drei p -Orbitale (p_x , p_y und p_z).



Das Orbital-Modell

Orbitalformen

- Orbitale mit der Nebenquantenzahl $l = 2$ haben eine rosettenförmige Raumstruktur. Sie werden aus historischen Gründen auch als „*d*-Orbitale“ bezeichnet. In Abhängigkeit vom Wert der Magnetquantenzahl $m = -2, -1, 0, +1, +2$ ergeben sich fünf Orbitale, die sich in ihrer räumlichen Ausrichtung und Form unterscheiden.
- Orbitale mit der Nebenquantenzahl $l = 3$ haben ebenfalls eine rosettenförmige, noch weiter untergliederte Raumstruktur. Sie werden aus historischen Gründen auch als „*f*-Orbitale“ bezeichnet. In Abhängigkeit vom Wert der Magnetquantenzahl $m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$ ergeben sich sieben Orbitale, die sich in ihrer räumlichen Ausrichtung und Form unterscheiden.

Das Orbital-Modell

Orbitalformen

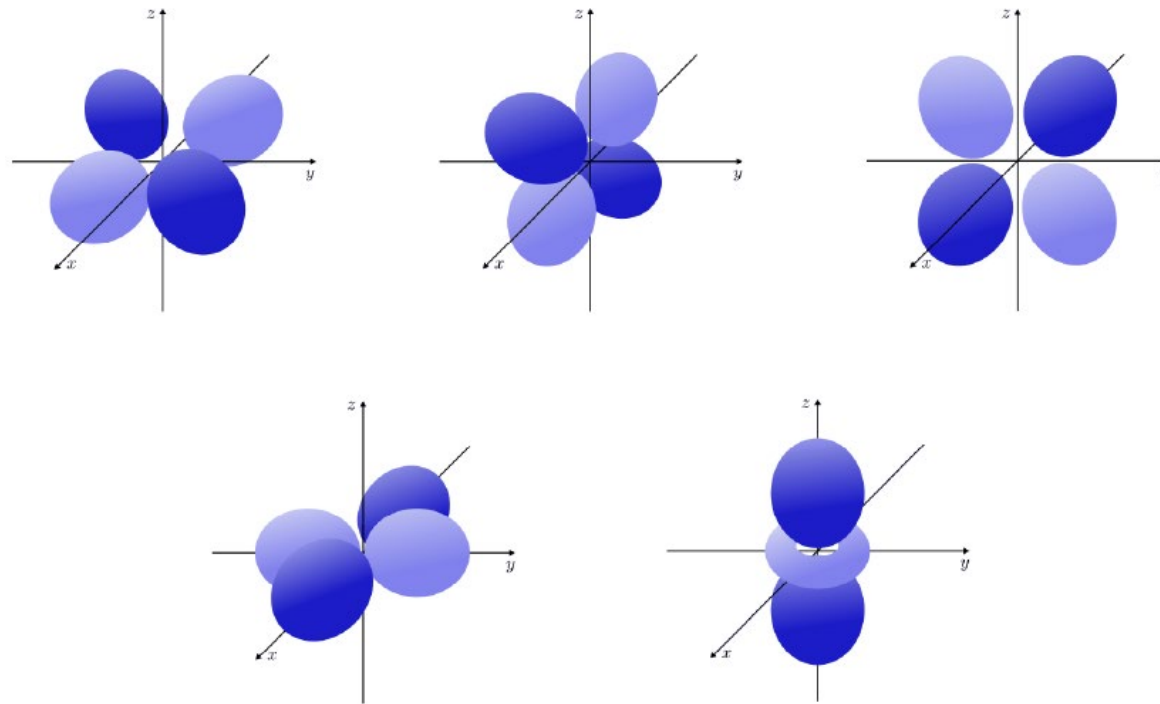


Abb. 216: Raumstruktur der fünf d -Orbitale (d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2}).



Das Schalenmodell

Die konkrete Berechnung der Energieniveaus und der resultierenden Atomorbitale erfordert einen hohen mathematischen Aufwand. Viele Phänomene der Physik und Chemie lassen sich allerdings auch gut mit einem vereinfachten „Schalenmodell“ erklären, das einerseits an das Bohrsche Atommodell aufbaut, andererseits um Elemente aus dem Orbitalmodell erweitert ist.



Das Schalenmodell

Das Schalenmodell geht von folgender Vorstellung aus:

- Die Elektronen eines Atoms befinden sich auf konzentrischen Schalen um den Atomkern.
- Jede Schale stellt ein bestimmtes Energieniveau dar und kann eine bestimmte Zahl an Elektronen aufnehmen.



Das Schalenmodell

Die Hauptquantenzahl n gibt – von innen nach außen gezählt – die Nummer der Schale an. Die maximale Anzahl an Elektronen auf Schale Nummer n ist gleich $2 \cdot n^2$. Im Periodensystem der Elemente entspricht die Schalennummer jeweils einer Periode (Reihe) an Elementen.

Die Orbitalformen, die sich aus der Nebenquantenzahl l ergeben, werden Unterschalen genannt. Sie beinhalten, je nach Typ, 1, 3, 5 oder 7 Orbitale, wodurch die Magnetquantenzahl m Berücksichtigung findet. Jedes Orbital kann seinerseits zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin ($s = \pm \frac{1}{2}$) aufnehmen.

Das Schalenmodell

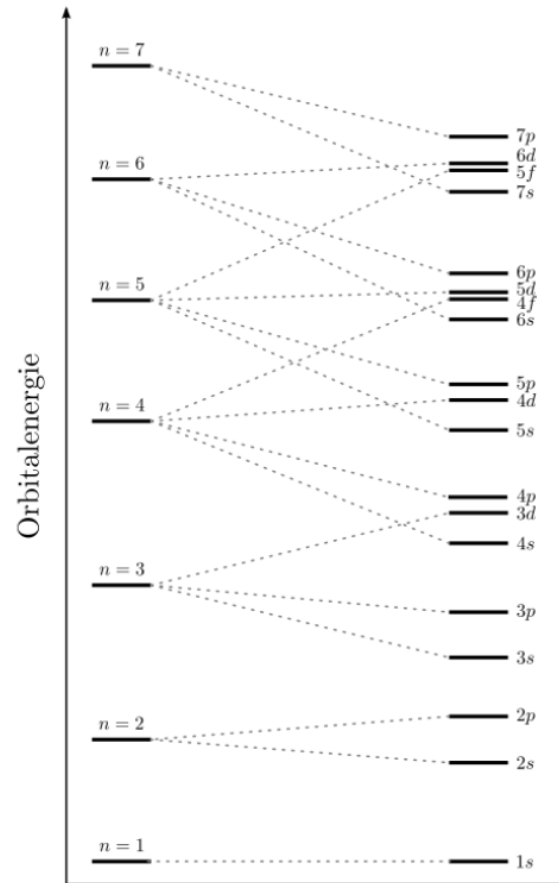
Elektronenverteilung im Schalenmodell

Nummer der Schale n	Name der Unterschalen	Maximale Anzahl an Elektronen (gesamt)
1	s	2
2	s, p	8
3	s, p, d	18
4	s, p, d, f	32
5	s, p, d, f, g	50
6	s, p, d, f, g, h	72

Das Schalenmodell

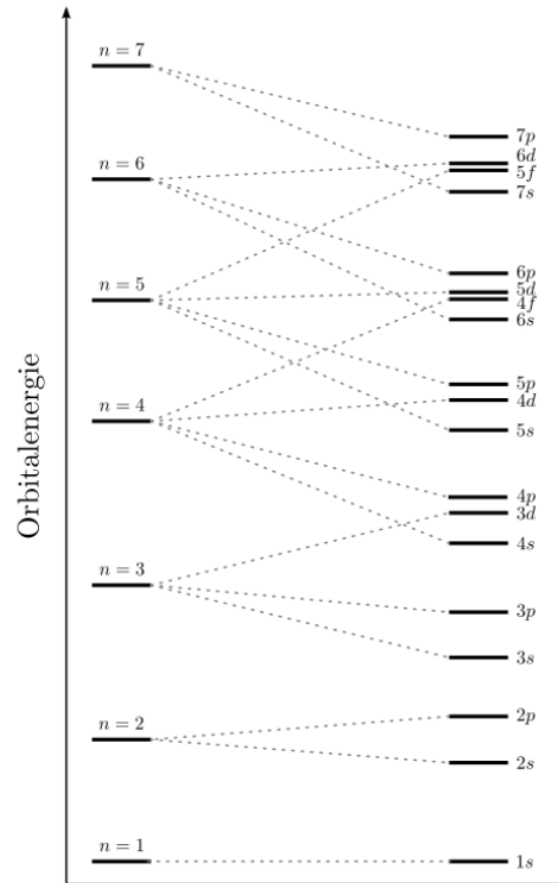
Hinzu kommende Elektronen füllen die einzelnen Orbitale eines Atoms nach zunehmendem Energieniveau auf. Die Energieniveaus der Schalen, durch die Hauptquantenzahl n bestimmt, spalten sich durch den Einfluss der übrigen Quantenzahlen in entsprechend viele, jeweils nur einmalig vorkommende Energieniveaus auf. Dies führt bei Atomen mit vier oder mehr Schalen dazu, dass die Schalennummer n die Auffüllreihenfolge nicht mehr alleinig bestimmt.

Das Schalenmodell



Orbitalenergie der bislang bekannten Atome.

Das Schalenmodell



Orbitalenergie der bislang bekannten Atome.