

Ein klassischer Ansatz für die De Broglie-Welle auf Basis des Bohr'schen H-Atom-Modells

Thomas Allmendinger

CH-8152 Glattbrugg/Zürich E-Mail: inventor@sunrise.ch

Inhalt

Dank einer dreidimensionalen Erweiterung des Wasserstoff-Atommodells von Bohr/De Broglie ist es – entgegen der Heisenberg'schen Unschärferelation - möglich, die Bahnen des angeregten Elektrons mittels klassischer Relationen exakt zu beschreiben.

Einleitung

Obwohl das Bohr'sche Atommodell als überholt gilt, wird es auch heute noch namentlich im Chemie-Unterricht erwähnt, und zwar zur Erklärung des Schalenbaus der Elektronenhüllen bei den Elementen sowie des Aufbaus des Periodensystems. Doch dieser Vergleich ist unzulässig, denn das von *Niels Bohr* im Jahre 1914 publizierte Modell [1] bezieht sich lediglich auf atomaren Wasserstoff und erklärt die Struktur seines diskreten Spektrums, welches durch Anregung mit elektromagnetischer Strahlung exakt gemessen werden kann und welches ganz bestimmte, u.a. von *Balmer* festgestellte mathematisch beschreibbare Gesetzmässigkeiten aufweist [2]. Die elektronische Struktur komplizierterer Elemente in ihrem Grundzustand - und erst recht in ihren elektronisch angeregten Zuständen - kann damit aber nicht beschrieben werden.

Bohr gelang es, mittels einfacher physikalischer Gesetzmässigkeiten sowie unter Verwendung der von *Einstein* im Jahre 1905 gefundenen Relation für den Photoeffekt [3] den Grundzustand des Wasserstoffatoms zu beschreiben und die Energieniveaus der angeregten Zustände des Elektrons - und damit das Wasserstoffspektrum – weitgehend zu erklären, indem er eine Quantelung des elektronischen Drehimpulses annahm. Nicht erklären konnte er jedoch den Grund für diese Quantelung. Die Erklärung dazu lieferte *Louis de Broglie* in seiner Dissertation 1924, indem er eine *wellenförmige* Bewegung des Elektrons postulierte, und indem er annahm, dass die (metastabilen) angeregten Zustände des Elektrons durch *stehende Wellen* bedingt seien.

Eine exakte Beschreibung dieser Elektronenbahnen gelang jedoch nicht, sodass man zu einem dreidimensionalen, diffusen »Orbital«-Modell Zuflucht nahm, wo sich für den Grundzustand des Elektrons nicht eine planare, sondern eine kugelförmige, dreidimensionale Bahn ergibt. Dieses von *Schrödinger* und anderen entwickelte, auch die magnetischen Eigenschaften berücksichtigende mathematische Modell gilt im Prinzip auch heute noch, obwohl die ihm zugrunde liegende, von *Heisenberg* formulierte »Unschärferelation« dem Konzept der stehenden, also äusserst exakt beschreibbaren Welle zutiefst widerspricht, und obwohl weitherum ein Verständnisproblem besteht, welches den ehemaligen Nobelpreisträger *Richard P. Feynman* zum Bonmot verleitete: „Diese nicht auf dem gesunden Menschen-

verstand fussende Theorie mutet zwar blödsinnig an, ist es aber nicht“. Feynman vertrat dabei die Ansicht, anfänglich hätte noch keine Vorstellung über die Wechselwirkung von Licht und Materie bestanden, was in der Folge zur Entwicklung der sog. *Quantenelektrodynamik (QED)* geführt habe [4]. Dabei übersah er - wie alle andern auch -, dass ja das Bohr-/De Broglie-Modell gerade auf diesem Zusammenhang beruht, d.h. dass – wie nachfolgend hergeleitet wird - ein direkter Zusammenhang zwischen Lichtfrequenz und Elektronenfrequenz besteht.

Dass es darüber hinaus durchaus sogar möglich ist, ausgehend vom Modell von Bohr und von De Broglie (sog. »BDB-Modell«) beim Wasserstoffatom die stehenden Wellen der angeregten Zustände aufgrund klassischer physikalischer Relationen exakt zu beschreiben bzw. zu berechnen, soll anschliessend gezeigt werden, wobei Bezug auf die grundlegende, umfassende Arbeit des Autors genommen wird [5].

Die herkömmliche Ableitung des Bohr-Modells für das Wasserstoff-Atom

Gemäss dem von Dieter Meschede revidierten Standardwerk »Physik« von Ch. Gerthsen [6] ist „das Bohrmodell das letzte Modell, das auch der Anfänger wirklich verstehen kann.“ Voraus zu schicken bei der folgenden Berechnung ist, dass die Gravitationskraft gegenüber der elektrostatischen Coulomb-Kraft vernachlässigt werden kann. Ausserdem wird die Lage des Protons - d.h. des Atomkerns – als unveränderlich, und die Bahn des Elektrons als kreisförmig angenommen. Und schliesslich werden allfällige relativistische Effekte vernachlässigt.

Kasten 1: Abkürzungen und Einheiten

r Radius [m]

t Zeit [s]

u Geschwindigkeit [ms^{-1}]

v Frequenz [s^{-1}]

λ Wellenlänge [m]

ω Winkelgeschwindigkeit [rads^{-1}] wobei $2\pi \div 360^\circ$

p Impuls [kgms^{-1}]

L Drehimpuls [$\text{Js} = \text{kgm}^2\text{s}^{-1}$]

F Kraft [$\text{N} = \text{kgms}^{-2}$]

E Energie = Arbeit [$\text{J} = \text{Ws} = \text{kgm}^2\text{s}^{-2}$]

Elektronenmasse $m_e = 9,109382 \cdot 10^{-31}$ kg

Elementarladung $e = 1,6021765 \cdot 10^{-19}$ C

Influenzkonstante $\epsilon_0 = 8,854187817 \cdot 10^{-12}$ $\text{AsV}^{-1}\text{m}^{-1}$

Planck'sches Wirkungsquantum $h = 6,626069 \cdot 10^{-32}$ Js

Zunächst ist die *Gleichgewichtsbedingung* (1) zwischen *Zentrifugalkraft* und *Coulomb-Kraft* zu berücksichtigen:

$$\frac{m_e u^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad \text{bzw. umgewandelt:} \quad u^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \quad (1)$$

Zweitens gilt für das Drehmoment L_n die Bohr'sche Quantenbedingung (2), welches dieselbe Dimension wie das Planck'sche Wirkungsquantum h aufweist und über die Quantenzahl n damit verbunden ist:

$$|L_n| = m_e \cdot u_n \cdot r_n = \frac{n \cdot h}{2\pi} \quad (2)$$

Die Kombination dieser Gleichungen liefert die Ausdrücke für die Rotationsgeschwindigkeit u_n wie auch für den Radius r_n :

$$\boxed{u_n = \frac{e^2}{2n\epsilon_0 h} = \frac{u_1}{n}} \quad (3) \quad \text{wobei } u_1 = 2.1877 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1} \approx c_{\text{Licht}}/137$$

$$\boxed{r_n = \frac{n^2 \epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} = r_n \cdot n^2} \quad (4) \quad \text{wobei } r_1 = 0.5292 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.5292 \text{ \AA} \text{ (sog. Bohr-Radius)}$$

Berücksichtigt man die Einstein'sche Gleichung (5), welche den Zusammenhang zwischen Energiedifferenz und Lichtfrequenz des adsorbierten bzw. emittierten des Lichts liefert,

$$\Delta E = h \nu_{\text{light}} \quad (5)$$

und nimmt man an, dass die jeweilige Energiedifferenz der Differenz zwischen zwei Energieniveaus des angeregten Elektrons entspricht, lässt sich ein Zusammenhang zwischen den Lichtfrequenzen und den Energieniveaus herleiten. Hierzu können die Energieniveaus auf einfache, klassische Weise als Summe von potentieller und kinetischer Energie berechnet werden. Dabei ist dem Ausdruck für die potentielle Energie ein negatives Vorzeichen zuzuordnen, was bedeutet, dass jene bei unendlichem Abstand den Wert Null aufweist, während sie bei kleiner werdendem Radius negativ wird und beim Radius Null gar unendlich negativ würde.

$$E_{\text{pot}} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -m_e u^2 \quad (6)$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m_e u^2 \quad (7)$$

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = -\frac{1}{2} m_e u^2 = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (8)$$

Setzt man nun in Gleichung (8) für den Radius Gleichung (4) ein, so ergibt sich für die totale Energie Gleichung (9):

$$\boxed{E_{\text{tot}} = -\frac{m_e e^4}{8n^2 \epsilon_0^2 h^2}} \quad (9)$$

Und schliesslich lassen sich die Lichtfrequenzen bei Elektronensprüngen zwischen zwei Niveaus mit den Quantenzahlen n_x und n_y einfacherweise gemäss (10) berechnen:

$$\boxed{\nu_{\text{Licht}} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n_x^2} - \frac{1}{n_y^2} \right)} \quad (10) \quad \text{wobei } n_y > n_x \text{ und } n_x \geq 1 \text{ sein muss.}$$

Es hat etwas durchaus Faszinierendes, dass sich das Wasserstoffspektrum mit dieser Gleichung recht genau erklären lässt. Der Ausdruck vor der Klammer entspricht übrigens der *Rydberg-Konstanten*. Ihr Wert beträgt $3.2899 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$.

Der Miteinbezug der De Broglie-Relation und der Bezug zur Lichtfrequenz

Bisher wurde die für den Impuls des Elektrons geltende De Broglie-Beziehung (11) noch nicht berücksichtigt. Es lässt sich indessen zeigen [5] [6], dass sie mit dem klassischen Bohr-Modell kongruent ist. Dabei folgt aus der Hypothese der stehenden Wellen naheliegenderweise der Zusammenhang (12) zwischen Wellenlänge des Elektrons und dem Umfang und damit dem Radius der Elektronenbahn.

$$p_e = m_e \cdot u_n = h / \lambda_{\text{Elektron}} \quad (11)$$

$$n \cdot \lambda_{\text{Elektron}} = 2\pi \cdot r_n \quad (12)$$

Für die folgende Überlegung gilt es zu unterscheiden zwischen der *Rotationsfrequenz* ν_{rot} des Elektrons und seiner *Vibrationsfrequenz* ν_{vib} , welche der De Broglie-Welle zuzuordnen ist. Für die erstere gilt die Relation

$$\nu_{\text{rot}} = u_n / 2\pi r_n \quad (13) \quad \text{wobei } u_n = u_{\text{rot}}$$

Für die letztere gilt zunächst die einfache Relation

$$\nu_{\text{vib}} \cdot \lambda_{\text{Elektron}} = u_n \quad (14)$$

Durch Kombination der Gleichungen (12), (13) und (14) ergibt sich die Relation (15):

$$\boxed{\nu_{\text{vib}} = n \cdot \nu_{\text{rot}}} \quad (15)$$

Gleichung (15) besagt, dass die beiden Frequenzen über die Quantenzahl n miteinander verbunden sind, wobei sie bei $n = 1$ (also im Grundzustand) gleich gross sind.

Bei Berücksichtigung der übrigen Gleichungen erhält man schliesslich

$$\boxed{\nu_{\text{Licht}} = \frac{1}{2}(\nu_{\text{vib1}} - \nu_{\text{vib2}})} \quad (16)$$

Mit andern Worten entspricht die Frequenz des absorbierten bzw. emittierten Lichts der Hälfte der Differenz der entsprechenden Vibrationsfrequenzen des Elektrons, wobei allerdings der Faktor $1/2$ unverständlich ist. Entscheidend ist jedoch die Feststellung, dass die Frequenz des Elektrons direkt proportional zu derjenigen des involvierten Lichts ist.

Wie der in [6] durchgeführte Vergleich mit der für den sog. Hertz'schen Oszillator üblicherweise angenommenen Formel (Herleitung siehe [7]) ergeben hat, gilt jene Formel hier nicht. Aufgrund obiger Überlegungen strahlt das Wasserstoffatom nur in den angeregten Zuständen ab, d.h. nur dann, wenn eine Differenz bei den Vibrationsfrequenzen vorliegt. Der Grundzustand ist somit stabil. Unklar ist allerdings, weshalb das Elektron nicht auf direktem Wege auf den Kern stürzt, wenn es – aus dem Unendlichen kommend – vom Kern angezogen wird. Als Erklärung hierfür kommt die Annahme der Entstehung einer senkrecht zur Flugbahn stattfindenden magnetischen Abstossung in Frage.

Die dreidimensionale Modifikation des BDB-Modells

Aufgrund der obigen Überlegungen muss also beim BDB-Modell des Wasserstoffatoms zusätzlich zur Rotationsbewegung noch eine *Vibrationsbewegung* des Elektrons vorliegen, deren Frequenz n -mal so gross ist wie die Rotationsfrequenz und welche in Kombination mit der Rotation zu einer Wellenbewegung führt. Um dies angehen zu können, muss für die angeregten Zustände die 2-Dimensionalität der Elektronenbahn aufgegeben und durch eine *dreidimensionale*, kompliziertere Beschreibung ersetzt werden, welche nebst einer horizontalen Rotation noch eine dazu senkrecht stehende vertikale Vibration umfasst. Dabei liegt es nahe, für das Elektron einen *harmonischen Oszillator* anzunehmen, welcher um das Kern-Proton herum rotiert und im Endeffekt eine wellenförmige, auf einer zylindrischen Oberfläche verlaufende Bewegung des Elektrons erzeugt. Weil sich dabei der Abstand des Elektrons zum Kern laufend ändert, ändert sich auch dessen potentielle Energie, wobei sie sich in kinetische Energie umwandelt und schliesslich – nach Durchlaufen eines Geschwindigkeitsmaximums – wieder zurückverwandelt. Das Elektron nimmt somit *drei Extrempositionen* ein, nämlich zwei – einander entgegengesetzte – *Top-Positionen*, wo das Elektron bezüglich der Oszillation stillsteht, und eine in der Mitte liegende *Äquator-Position*, bei welcher die Elektronengeschwindigkeit maximal ist.

Wie weiterführende, die physikalischen Gesetzmässigkeiten wie namentlich den Energie- und den Drehimpulssatz berücksichtigenden Überlegungen ergeben haben, ist die Sache allerdings nicht ganz so einfach. Es hat sich nämlich herausgestellt, dass die Elektronenbewegung nicht genau auf der Oberfläche eines Zylinders verläuft (wie es beim harmonischen Oszillator der Fall wäre), sondern auf derjenigen eines *Hyperboloïds*. Somit handelt es sich nicht um einen gewöhnlichen harmonischen Oszillator mit geradem Verlauf, sondern um einen ungewöhnlichen Oszillator mit leicht gewölbtem Verlauf. Nebst der Oszillation findet somit auch noch eine senkrecht dazu stehende und somit waagrecht verlaufende *Pulsation* statt, d.h. der bisher mit »Vibration« bezeichnete Vorgang setzt sich aus einer Oszillation und einer Pulsation zusammen. Ausserdem muss klar sein, dass – wie bei jedem Modell – gewisse Hypothesen zu machen sind, welche nicht zwingend hergeleitet, sondern lediglich aus der – empirisch bestätigten - Korrektheit ihrer Konsequenzen bestätigt werden können. Und schliesslich dürfte es sehr schwierig wenn nicht unmöglich sein, dieses Modell makro-physikalisch nachzubauen.

Das Koordinatensystem

Um diesen Prozess beschreiben zu können, empfiehlt es sich, ein *mit kartesischen Koordinaten kombiniertes polares Koordinatensystem* zu verwenden und entsprechende *zeitabhängige Variable* einzuführen (siehe Kasten 2). Die bereits im Bohr-Modell vorkommenden Grössen werden zur Indizierung der Variabilität mit einem Stern versehen. Der neu eingeführte variable Radius r^* unterscheidet sich somit vom Radius r des Bohr-Modells, der ja bei einem bestimmten Wert von n konstant ist. Doch auch alle anderen hier aufgeführten Grössen sind zeitabhängig. Zur Beschreibung sind drei besondere Elektronen-Positionen hervorzuheben, nämlich die (extreme) Top-Position (Abb. 1a), eine beliebige

Position (Abb. 1b), sowie die Position beim Äquator (Abb. 1c). Die jeweilige Position kann bei der Abkürzung der entsprechenden Variablen im Suffix vermerkt werden, wobei »eq« Äquator bedeutet. Es versteht sich von selbst, dass all diese variablen Grössen zusätzlich noch von der Quantenzahl n abhängen, d.h. jeweils andere, nur für ein bestimmtes n gültige Werte aufweisen.

Kasten 2: Variablen beim modifizierten Modell

r^*	<i>effektiver Radius</i>
r_{rot}^*	<i>Rotationsradius</i>
d	<i>Oszillationsdistanz</i>
u_{rot}^*	<i>Rotationsgeschwindigkeit</i>
u_{osc}	<i>Oszillationsgeschwindigkeit</i>
u_{puls}	<i>Pulsationsgeschwindigkeit</i>
ψ^*	<i>Rotationswinkel</i>
φ	<i>Auslenkungswinkel</i>

Die grundlegenden Hypothesen für das Modell

Um ein System mit derart vielen Variablen lösen zu können, sind mehrere Hypothesen erforderlich. Die grundlegende Hypothese besteht darin, dass die energetische Anregung des Elektrons durch eine *seitliche elektromagnetische Einwirkung* zustande kommt, welche senkrecht zur virtuellen Rotationsebene steht und eine vertikale Auslenkung des Elektrons zur Folge hat. Der Grad der maximal möglichen Auslenkung hängt mit dem Energieinhalt der elektromagnetischen Einwirkung zusammen. Ausserdem stimmt er hinsichtlich Radius und Geschwindigkeit genau mit den Werten des Bohr'schen Modells überein. Das Elektron bleibt jedoch nicht in der ausgelenkten, durch eine höhere potentielle Energie gekennzeichneten Stellung, sondern strebt zum Ausgangspunkt zurück und schwingt in die Gegenrichtung, sodass im Endeffekt – in Kombination mit der Rotation – eine wellenförmige Bewegung resultiert. Zulässig sind dabei nicht alle Auslenkungen möglich, sondern – entsprechend der De Broglie-Hypothese - lediglich diejenigen, welche zu stehenden Wellen führen.

Als Konsequenz dieser Annahme folgt, dass der im Grundzustand vorliegende Rotations-Drehimpuls des Elektrons auch in den angeregten Zuständen konstant bleiben muss, was mit Gleichung (17) formulierbar ist:

$$u_{rot}^* \cdot r_{rot}^* = u_1 \cdot r_1 \quad (17)$$

Dabei entsprechen u_1 und r_1 den Bohr'schen Werten für den Grundzustand. Zu bedenken ist, dass u_{rot}^* wie auch r_{rot}^* während eines Umlaufs – also bei konstantem n – variieren, dass also ihre Werte nicht ohne Weiteres zu ermitteln sind.

Die Relation (17) ist deshalb unerwartet – und hat lange Zeit den Stolperstein bei der Findung der nun vorliegenden Lösung gebildet -, weil ja beim Bohr-Modell der *totale* Drehimpuls gequantelt ist, also in den angeregten Zuständen nicht mehr demjenigen des

Grundzustands entspricht. Nur geht das Bohr-Modell von der Annahme aus, dass die Bahn des Elektrons in den angeregten Zuständen planar bleibt, was bedeutet, dass sich die Richtung des Drehimpuls-Vektors nicht verändert. Im dreidimensionalen Fall trifft dies jedoch nicht mehr zu, da der totale Drehimpulsvektor umherpendelt und lediglich in den Extrempositionen den Werten des Bohr-Modells entspricht – allerdings nur dem Betrage nach, nicht auch der Richtung nach.

Selbstverständlich muss auch der *Energiesatz* gelten. Nur sind die Verhältnisse hier wesentlich komplizierter als beim einfachen Bohr-Modell, wo in allen Fällen ein stationärer Zustand angenommen wird, d.h. wo die kinetische wie auch die potentielle Energie jeweils konstant ist. Bei diesem Modell ist das nicht der Fall, wandelt sich doch die potentielle Energie laufend in kinetische um, bzw. umgekehrt. Die totale Energie, gegeben mit Formel (8), bleibt jedoch konstant. Kommt hinzu, dass die kinetische Energie mehrere Komponenten aufweist, und zwar nebst der *Rotations-* und der *Oszillationsenergie* auch noch die *Pulsationsenergie*. Dabei gilt (18):

$$E_{kin} = E_{rot} + E_{osc} + E_{puls} \quad \text{bzw. (weil } m_e = \text{konst.)} \quad (u_{tot})^2 = (u_{rot}^*)^2 + (u_{osc})^2 + (u_{puls})^2 \quad (18)$$

Das Hinzukommen dieser Variablen bringt das Erfordernis nach zusätzlichen Bedingungen respektive Gleichungen mit sich. Daher sind weitere Hypothesen erforderlich. Eine davon ist recht einfach, betrifft aber lediglich den Zustand beim Äquator, wo die Pulsationsgeschwindigkeit Null ist. Hier wird in Anlehnung an den *Gleichverteilungssatz der Energie* angenommen, dass die Rotationsenergie gleich der Oszillationsenergie* wird:

$$u_{rot,eq}^* = u_{osc,eq} \quad (19) \quad \rightarrow \quad (u_{tot})^2 = 2(u_{rot,eq}^*)^2 \quad (20)$$

Überhaupt spielen die Grenzfälle für die Berechnung eine grosse Rolle. Dabei wird wie gesagt angenommen, dass dieses modifizierte Modell insofern kompatibel ist mit dem Bohr-Modell, als beim modifizierten Modell die beiden Top-Positionen der Situation im Bohr-Modell entsprechen, d.h. dass dort sowohl die Oszillations- wie auch die Pulsations-Geschwindigkeit Null wird, während der Radius genau dem Bohr-Radius entspricht:

$$u_{rot,top}^* = u_{tot,top} = u_n = \frac{u_1}{n} \quad (21) \quad \text{bzw.} \quad r_{top}^* = r_n = r_1 \cdot n^2 \quad (22)$$

Damit allein ist aber das System noch nicht lösbar, insbesondere wenn man die Positionen des Elektrons berechnen will und daher auch noch die anderen, im Kasten 2 aufgeführten Variablen berücksichtigen muss. Daher sind noch weitere Hypothesen erforderlich, abgesehen von der De Broglie-Hypothese, welche die Bedingungen für die stehenden Wellen liefert. Dabei liegt es einerseits nahe, die Gleichung für den *harmonischen Oszillator* mit einzubeziehen, wobei die Bohr'sche Rotation als Pulsgeber dient. Wie über die Berechnung der Grenzfälle gezeigt werden kann, ist dies jedoch nur näherungsweise möglich. Andererseits muss noch eine Relation für den *Verlauf der Pulsation* – und damit zusammenhängend des

* In der Originalpublikation [5] liegt bei der entsprechenden Formel (42) insofern ein Druckfehler vor, als dort statt der Oszillationsgeschwindigkeit die Pulsationsgeschwindigkeit eingesetzt ist. Der Rest ist jedoch korrekt.

Rotationsradius r_{rot}^* - gefunden werden, was insofern schwierig ist, als bisher kein ähnlicher Fall bekannt ist. Diese Hypothese ist somit die spekulativste von allen, liefert indessen ein plausibles Resultat. Sie setzt die Einführung weiterer Variablen respektive Relationen voraus und kann daher erst im Verlaufe der anschliessenden Herleitung formuliert werden.

Die detaillierte Herleitung und Berechnung

Ausgehend von den Abbildungen 1a-c gilt aufgrund des Satzes von Pythagoras die Relation

$$(r_{rot}^*)^2 + d^2 = (r^*)^2 \quad (23)$$

Ferner lässt sich aufgrund des Energiesatzes und der Relation (8) ein Zusammenhang zwischen den – zeitabhängigen Variablen r^* und u_{tot} herleiten:

$$E_{tot} = E_{pot} + E_{kin} \rightarrow -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^*} + \frac{1}{2} m_e \cdot (u_{tot})^2 \rightarrow \frac{2r_1}{r^*} = \frac{1}{n^2} + \frac{(u_{tot})^2}{u_1^2} \quad (24)$$

Schliesslich folgt bei Kombination mit den Gleichungen (21) und (22) die Relation

$$\boxed{r_{rot,top}^* = r_1 \cdot \frac{u_1}{u_{rot,top}^*} = r_1 \cdot n} \quad (25), \text{ die für } n = 2 \text{ den Wert } 2r_2 \text{ und für } n = 3 \text{ den Wert } 3r_3 \text{ etc. ergibt.}$$

Die Kenntnis von $r_{top}^* = r_n$ und von $r_{rot,top}^*$ ermöglicht die Bestimmung von φ_{top} gemäss

$$\boxed{\cos \varphi_{top} = \frac{r_{rot,top}^*}{r_{top}^*} = \frac{1}{n}} \quad (26), \text{ was die Werte } \varphi_{top,2} = 60^\circ \text{ und } \varphi_{top,3} = 70,53^\circ \text{ ergibt. Andererseits gilt}$$

$$\boxed{\sin \varphi_{top} = \frac{d_{top}}{r_{top}^*} = \frac{d_{top}}{r_1 \cdot n^2}} \quad (27), \text{ was die Berechnung von } d_{top} \text{ ermöglicht und die Werte } 3,4641 r_1$$

bzw. $8,4853 r_1$ für $n = 2$ bzw. für $n = 3$ ergibt.

(Zum Vergleich: Die entsprechenden Werte von r_n betragen $4 r_1$ und $9 r_1$)

Die zur Ermittlung der Verhältnisse am Äquator nötige hypothetische Gleichsetzung von Rotations- und Oszillationsenergie wurde bereits erwähnt, siehe (19) und (20). Ausserdem gilt

$$r_{rot,eq}^* = r_{eq}^* \quad (28)$$

Setzt man diese Terme in (24) ein und berücksichtigt man ausserdem noch die Drehimpulsbedingung (17), so erhält man die quadratische Gleichung

$$\boxed{\frac{2u_{rot,eq}^*}{u_1} = \frac{1}{n^2} + \frac{2(u_{rot,eq}^*)^2}{u_1^2}} \quad (29), \text{ welche die Lösung}$$

$$\boxed{\frac{u_{rot,eq}^*}{u_1} = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{n^2 - 2}}{2n}} \quad (30) \text{ bzw. - in Kombination mit (17) - auch die Werte für } r_{rot,eq}^* \text{ ergibt.}$$

Die bisher ermittelten Werte sind in Tab. 1 zusammengefasst, wobei die Radien als Vielfaches von r_1 und die Geschwindigkeiten als Vielfaches von u_1 aufgeführt sind.

Abbildungen 1a – c: Modell-Skizzen für verschiedene Elektronenpositionen

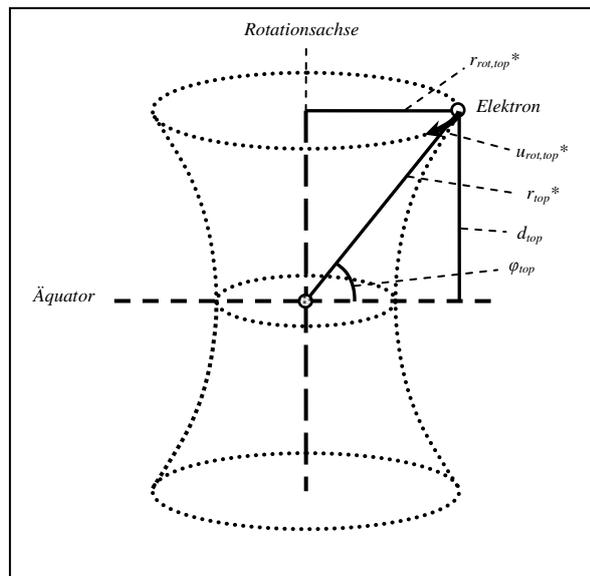


Abb. 1a: Top-Position

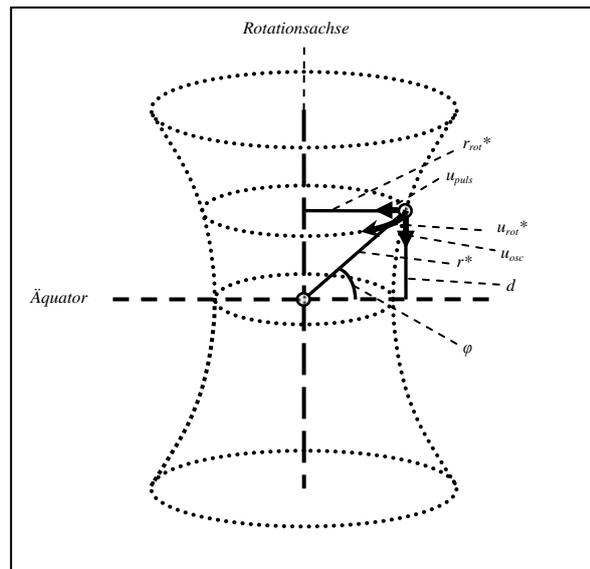


Abb. 1b: intermediäre Position

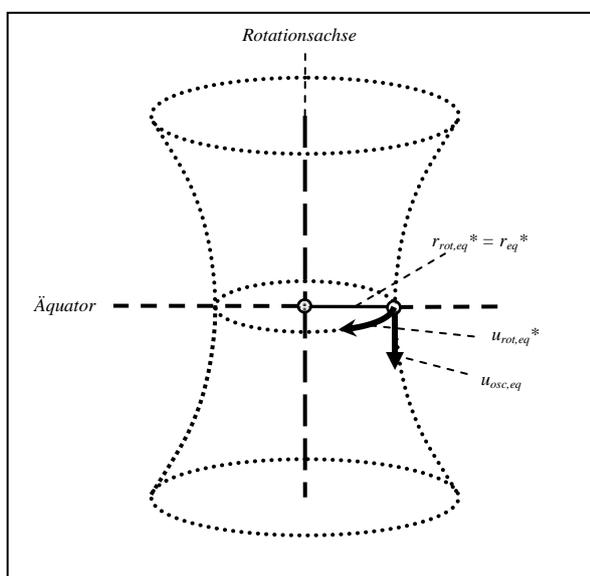


Abb. 1c: Position am Äquator

n	r_n	$r_{rot,top}^*$	$r_{rot,eq}^*$	d_{top}	φ_{top}	u_n	$u_{rot,top}^*$	$u_{rot,eq}^*$
2	4	2	1,17	3,46	60,0°	0,50	0,50	0,85
3	9	3	1,06	8,49	70,5°	0,33	0,33	0,96

Tabelle 1: Relativwerte (als Vielfache von r_1 bzw. u_1) bei speziellen Positionen

Nachdem nun die Verhältnisse bei den Grenzfällen geklärt sind, ist die wesentlich schwierigere Frage der *intermediären Zustände* zu klären, namentlich diejenige des zeitlichen Verlaufs der Auslenkung d . Weil dieses Modell auf dem Bohr-Modell basiert, liegt es nahe anzunehmen, dass die *Bohr'sche Rotation*, d.h. deren Winkelgeschwindigkeit ω_n , den Rhythmus des ganzen Prozesses bestimmt. Wie bereits erwähnt, kommt hierzu vorab die Anwendung eines *harmonischen Oszillators* in Frage, auch wenn die hier vorliegenden Verhältnisse nicht exakt dieselben sind wie etwa bei einem Federpendel, dessen sinusförmiger Verlauf ohne weiteres von der entsprechenden Differentialgleichung abgeleitet werden kann. Daher lässt sich der folgende Ansatz formulieren:

$$d = d_{top} \cdot \sin(n \cdot \omega_n \cdot t) = d_{top} \cdot \sin(n \cdot \psi) \quad (31) \quad \text{mit} \quad \omega_n = \frac{u_n}{r_n} = \frac{u_1}{r_1 \cdot n^3}$$

$$\dot{d} = u_{osc} = n \cdot \omega_n \cdot d_{top} \cdot \cos(n \cdot \psi) = \frac{u_1}{r_1 \cdot n^2} \cdot d_{top} \cdot \cos(n \cdot \psi) \quad (32)$$

Beim Äquator wird der Kosinus 1, sodass sich Gleichung (32) vereinfacht zu

$$\dot{d}_{eq} = u_{osc,eq} = \frac{u_1}{r_1 \cdot n^2} \cdot d_{top} \quad (33)$$

Weil gemäss (19) die Oszillationsgeschwindigkeit dann gleich der Rotationsgeschwindigkeit ist, kann d_{top} auf zwei verschiedene Weisen berechnet werden: nämlich einerseits anhand des harmonischen Oszillator-Ansatzes gemäss Gleichung (33) sowie des gemäss Gleichung (20) ermittelten Werts für die Rotationsgeschwindigkeit, und andererseits über den Sinus des Winkels bei Maximalausschlag gemäss Gleichung (27). Vergleicht man die in der Tab. 2 aufgeführten Werte, so ergibt sich eine recht gute Übereinstimmung, was die Brauchbarkeit des harmonischen Oszillators als Näherungslösung bestätigt.

n	d_{top} (direkt bestimmt)	d_{top} (bestimmt via harmon. Osz.)	Übereinstimmung
2	3,4641 r_1	3,4142 r_1	98,6 %
3	8,4853 r_1	8,4965 r_1	100,1 %

Tabelle 2: Vergleich der Werte von d_{top} entsprechend verschiedenen Berechnungsmethoden

Der nächste Schritt besteht darin, Gesetzmässigkeiten für die *intermediären Zustände* - d.h. für die Bahnverläufe - zu finden, insbesondere als Funktion des Rotationswinkels ψ^* . Am einfachsten ergibt sich der Verlauf von d als Funktion von u_{osc} , da beide gemäss den Gleichungen (31) und (32) als Funktion des Bohr'schen Rotationswinkels ψ ausgedrückt werden können, was für $n = 2$ bzw. 3 die Abbildungen 2a bzw. 2b ergibt.

Die Bestimmung von r_{rot}^* ist erheblich schwieriger. Da eine logische Herleitung nicht möglich scheint, wurde – wie bereits einleitend erwähnt – die hypothetische Relation (34) postuliert, welche nicht nur die Randbedingungen erfüllt, sondern auch einen plausiblen Kurvenverlauf ergibt:

$$\boxed{r_{rot}^* = r_{rot,eq}^* + (r_{rot,top}^* - r_{rot,eq}^*) \cdot (\sin(n \cdot \psi))^2} \quad (34)$$

Zur Ermittlung der entsprechenden, für $n = 2$ bzw. 3 geltenden Kurven in den Abbildungen 3a und 3b wurde d wiederum mittels der Gleichung (31) berechnet. Demgemäss verläuft die Oszillation auf der Oberfläche eines *Hyperboloïds*. Nimmt man in Gleichung (34) anstelle des quadratischen Sinus-Terms lediglich einen einfachen, direkt proportionalen an, so wird der Kurvenverlauf nahezu linear, d.h. es entsteht ein V mit einem Knick beim Äquator, was nicht plausible ist.

Ausserdem lässt sich die Formel (34) auch zur Berechnung der Pulsationsgeschwindigkeit u_{puls} heranziehen, und zwar indem man den Ausdruck differentiell nach der Zeit ableitet:

$$\boxed{u_{puls} = \dot{r}_{rot}^* = \frac{2u_1}{r_1 \cdot n^2} (r_{rot,top}^* - r_{rot,eq}^*) \cdot \sin(n \cdot \psi) \cdot \cos(n \cdot \psi)} \quad (35)$$

Die entsprechenden Diagramme (u_{puls} vs d) für $n = 2$ bzw. 3 sind in den Abbildungen 4 a bzw. 4b wiedergegeben. Verglichen mit dem in Abb. 3 wiedergegebenen Verlauf von u_{osc} ist derjenige von u_{puls} geringer, was im Hinblick auf die kürzeren Distanzen verständlich ist.

Die letzte Hürde besteht darin, einen Zusammenhang zwischen dem als Taktgeber benutzten Bohr'schen Rotationswinkel ψ und dem im vorliegenden Modell vorgesehenen, in der Äquatorebene liegenden Rotationswinkel ψ^* zu finden, denn nur der letztere erlaubt die visuelle Darstellung des zeitlichen Verlaufs von einzelnen Parametern. Hierfür wird am besten die Tatsache herangezogen, dass die Periode T für einen vollumfänglichen Umlauf bei beiden Prozessen gleich sein muss. Dabei ist zu bedenken, dass der erstere Umlauf zwar konstant, jedoch nur virtuell erfolgt, während die letztere, reale Rotation zeitlich variabel ist. Dieser Sachverhalt lässt sich mit Hilfe des folgenden Integrals formulieren:

$$\int_0^{T_n} \omega^* \partial t = \int_0^{T_n} \frac{u_{rot}^*}{r_{rot}^*} \partial t = 2\pi \quad (36)$$

Darin ergibt sich der Wert von r_{rot}^* aus (34), und derjenige von u_{rot}^* in der Folge aus (17).

Da für dieses Integral keine explizite Lösung gefunden werden konnte, wurde das Problem über infinitesimales Aufsummieren gelöst (siehe [5]). Die Resultate sind in den Abbildungen 5 bis 8 wiedergegeben. Diese erklären sich von selbst und bedürfen wohl keiner weiteren Erläuterung. Zum Vergleich: Im Grundzustand ist die Elektronenbahn wie gesagt planar und identisch mit derjenigen im Bohrmodell, während in den angeregten Energiezuständen bei den Extrempositionen die Elektronenradien in Abhängigkeit von n gemäss (4) r_1 , $4 r_1$, $9 r_1$ etc. und die Rotationsgeschwindigkeiten gemäss (3) u_1 , $u_1/2$, $u_1/3$ etc. betragen.

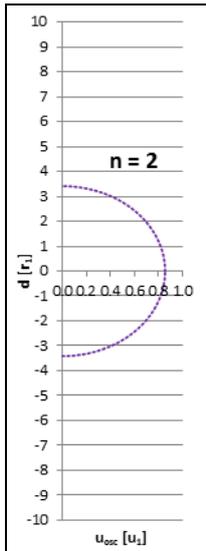


Abb. 2a

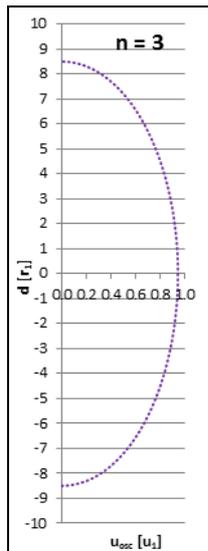


Abb. 2b

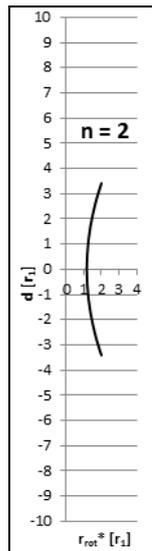


Abb. 3a

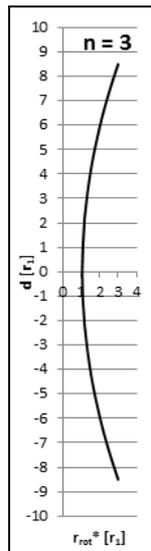


Abb. 3b

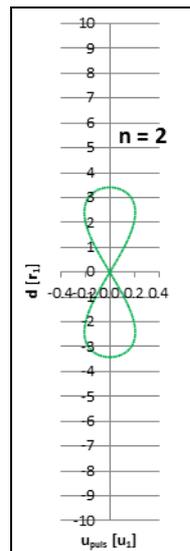


Abb. 4a

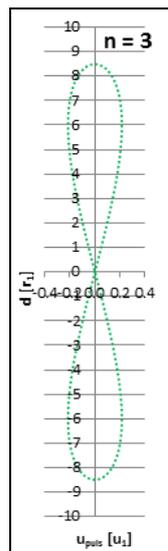


Abb. 4b

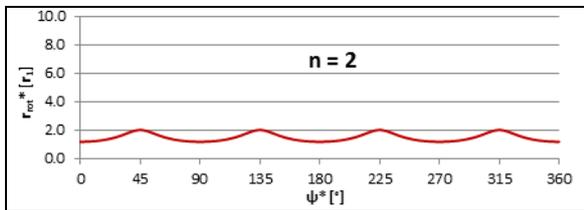


Abbildung 5a

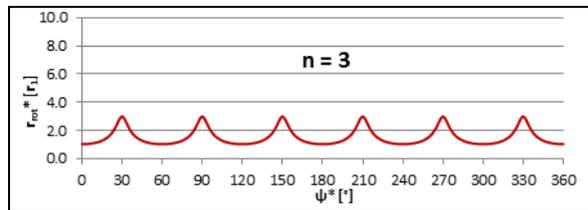


Abbildung 5b

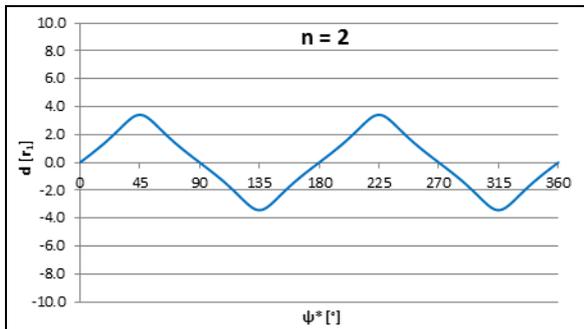


Abbildung 6a

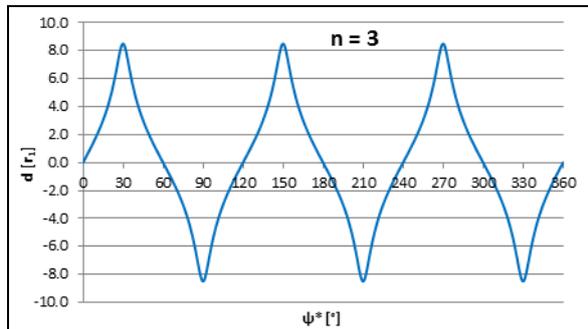


Abbildung 6b

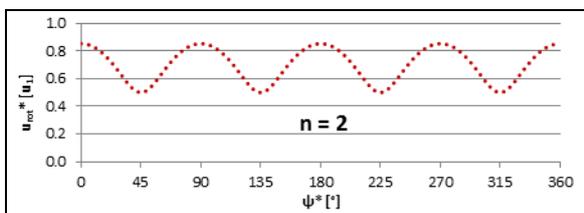


Abbildung 7a

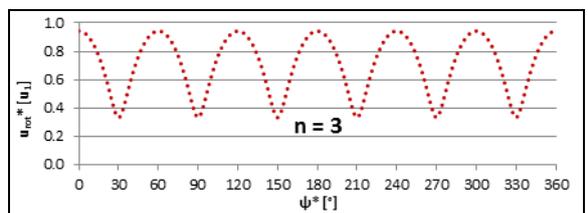


Abbildung 7b

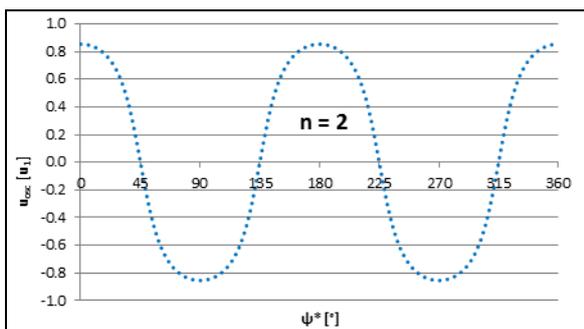


Abbildung 8a

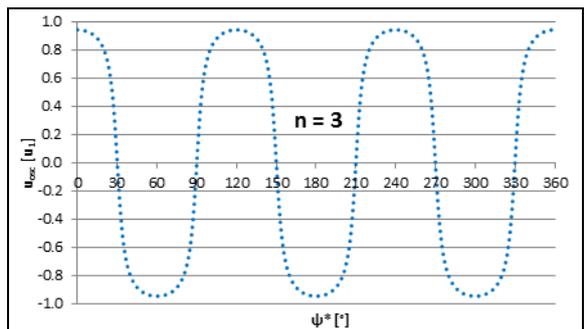


Abbildung 8b

Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Ausgehend von der Bedingung für stehende Wellen ergibt sich beim BDB-Modell ein direkter Zusammenhang zwischen der Rotationsfrequenz des Elektrons und seiner Vibrationsfrequenz über die Quantenzahl n bzw. eine Identität der letzteren mit der Lichtfrequenz. Zur Erfassung der höheren, metastabilen Elektronenbahnen muss das Modell dreidimensional erweitert werden. Dabei wird angenommen, dass die Anregung senkrecht zur Rotationsebene über seitlich einfallendes Licht erfolgt, sodass ein rotierender Oszillator entsteht. Zur Berechnung sind mehrere Hypothesen erforderlich, insbesondere diejenige, dass der Drehimpuls des Grundzustands konstant bleiben muss. Das Zustandekommen des Grundzustandes lässt sich vermutlich damit erklären, dass das Elektron beim Anflug Richtung Kern durch die dabei zu erwartende magnetische Kraft derart abgelenkt wird, dass es nicht auf den Kern stürzt, sondern eine planare Umlaufbahn einnimmt. Eine entsprechende Berechnung kann hier aber nicht geliefert werden. Ebenfalls nicht berechenbar sind die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Elektrons in den angeregten Zuständen, auch wird der Einfluss magnetischer Felder auf das Spektrum ausser Acht gelassen. Insbesondere ist das Modell nicht ohne weiteres übertragbar auf Mehrelektronensysteme, sodass für die Erklärung des Periodensystems der Elemente wie auch für das Zustandekommen chemischer Bindungen nach wie vor das anschauliche Kimball'sche Kugelwolkenmodell nützlich scheint, auch wenn die Kugelform nicht stimmen kann. Als Erklärung kommt die Trägheit des Kerns in Frage, sodass infolge der hohen Elektronengeschwindigkeit der Eindruck entsteht, es handle sich um Wolken. Das herkömmliche Orbitalmodell der Quantenmechanik wird durch das vorgeschlagene Modell insofern in Frage gestellt, als bei jenem der Drehimpulssatz überhaupt nicht berücksichtigt wird. Dies kommt schon beim Grundzustand des Wasserstoffatoms zum Ausdruck, für welchen – in Form des $1s$ -Orbitals - ein sphärischer Aufenthaltsraum mit variablem Abstand angenommen wird, während er gemäss dem hier vorgeschlagenen Modell einer planaren Elektronenbahn mit konstantem Radius - und somit derjenigen beim Bohr-Modell - entspricht.

Literatur

- [1] N. Bohr: „On the Constitution of Atoms and Molecules“, *Philosoph. Magazine* **26** (1913), 1-25
- [2] Johann Jakob Balmer: „Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs“, *Ann. Phys.* **261/5** (1885), S. 80-87
- [3] Albert Einstein: „Ueber einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichts betreffenden heuristischen Gesichtspunkt“, *Ann. Phys.* **322/6** (1905)
- [4] Richard P. Feynman: „QED – Die seltsame Theorie des Lichts und der Materie“, Piper 1992/2004 (Original: „QED - The Strange Theory of Light and Matter“, Princeton 1985)
- [5] Thomas Allmendinger: „A Classical Approach to the De Broglie-Wave Based on Bohr's H-Atom-Model“, *International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics* **2(1)**, (2016) 1-15
<http://article.sciencepublishinggroup.com/pdf/10.11648.j.ijamtp.20160201.11.pdf>
- [6] Dieter Meschede: „Gerthsen Physik“, 21. völlig neu bearbeitete Auflage, Springer 2001
- [7] Wolfgang Nolting: „Grundkurs Theoretische Physik 3 (Elektrodynamik), Springer 2002/2004, S. 340-345