2. Ältere Quantentheorie nach Bohr und Sommerfeld

Ziel: Erklärung diskreter Atomspektren

2.1. Bohr'sche Postulate

Grundannahme: Dynamik im Prinzip durch klassische Mechanik beschrieben, aber nur bestimmte Zustände realisierbar

Bohr'sche Postulate (ad hoc!):

(1) Periodische Bewegungen können nur mit bestimmten Energien $E_1, E_2, \ldots$ erfolgen. Sie sind strahlungslos.

(2) Übergänge zwischen erlaubten periodischen Bahnen mit Energien E_n und E_m erfolgen unter Emission oder Absorption von elektromagnetischer Strahlung mit Frequenz $\nu = \frac{|E_n - E_m|}{h}$.

2.2 Die Quantisierungsregeln von Bohr und Sommerfeld

2.2.1. Das Wasserstoff-Atom

Korrespondenzprinzip (Bohr):

Die klassische Mechanik muss in der Quantenmechanik als Grenzfall enthalten sein

Beispiel (Grenzfall kontinuierliches Atomspektrum):

- Quantenmechanischer Übergang zwischen benachb. Niveaus: $\nu = \dfrac{E_n - E_{n-1}}{h}$
- Klassischer Grenzfall:

(a) $E_n - E_{n-1} \ll E_n$ (kontinuierliches Spektrum) $\Leftrightarrow n \gg 1$

(b) $\underset{\text{Abstrahl-frequenz}}{\nu} \approx \underset{\text{Umlauf-frequenz}}{\nu_{Bahn}}$ (Hertz'scher magnetischer Dipol)

$$\overset{n \gg 1}{\Longrightarrow} \quad \nu_{Bahn}(E_n) = \frac{1}{h}(E_n - E_{n-1}) \approx \frac{1}{h}\frac{dE_n}{dn}$$

$$\underset{\text{Trennung der Variablen}}{\Longrightarrow} \quad \int_{E_{n_0}}^{E_n} \frac{dE'}{\nu_{Bahn}(E')} = h \int_{n_0}^{n} dn' = (n - n_0)h$$

Lösung des Kepler-Problems: $\nu_{Bahn}(E_n) = \dfrac{1}{T(E_n)} = \dfrac{1}{\pi}\,\dfrac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\sqrt{\dfrac{2|E_n|^3}{m_e}}$

$$\Rightarrow \int_{E_{n_0}}^{E_n} \frac{dE'}{\frac{1}{\pi}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\sqrt{\frac{2|E'|^3}{m_e}}} = \frac{e^2}{4\varepsilon_0}\sqrt{\frac{m_e}{2}}\underbrace{\int_{E_{n_0}}^{E} \frac{dE'}{|E'|^{3/2}}}_{\left.\frac{2}{\sqrt{-E'}}\right|_{E_{n_0}}^{E_n} \;(E'<0)} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0}\sqrt{\frac{m_e}{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{-E_n}} - \frac{1}{\sqrt{-E_{n_0}}}\right) \overset{!}{=} (n - n_0)h$$

Integrationskonstanten

$$\Rightarrow \quad E_n = - \frac{e^4 m_e}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{(n+\gamma)^2} \quad (*)$$

beinhaltet E_{n_0} und n_0

Vergleich Rydberg-Formel: $\nu = \frac{c}{\lambda} = R_\infty c \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$

$$\xrightarrow{\text{2. Bohr'sches Postulat}} \quad E_n = - R_\infty c h \frac{1}{n^2} \quad , \quad n = 1,2,3,\dots$$

Übereinstimmung mit (*) für $\gamma = 0$ und

$$\boxed{R_\infty = \frac{e^4 m_e}{8 \varepsilon_0^2 c h^3}}$$ Rydberg-Konstante

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{E_R = \frac{e^4 m_e}{8 \varepsilon_0^2 h^2} = R_\infty c h = 13.6\,\text{eV}}$$ Rydberg-Energie

2.2.2. Quantisierungsregel für beliebige Freiheitsgrade

Bemerkung (beliebige periodische Systeme mit einem Freiheitsgrad):

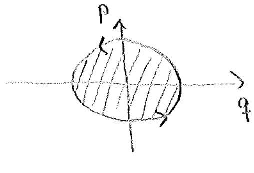
generalisierter Impuls

$$\int_{E_{min}}^{E} \frac{dE'}{\nu_{Bahn}(E')} = \oint_{H(q,p)=E} dq \; p$$

"Wirkungsintegral"
(von der Bahnkurve eingeschlossene Fläche im Phasenraum)
(Übungsaufgabe 2.2)

kleinste klassisch erlaubte Energie

generalisierte Koordinate



Allgemeine Quantisierungsregel:

$$\boxed{\oint_{H(p,q)=E} dq \; p = (n + \gamma) h \quad \text{mit } n = 0,1,2,\dots \text{ und } \gamma = \text{const.}}$$

Beispiel (harmonischer Oszillator):

Hamilton-Funktion: $H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2$

Wirkungsintegral: $\oint dq\, p = \frac{2\pi E}{\omega}$ (Übungsaufgabe 2.2)

Energieniveaus: $\boxed{E_n = (n+\gamma)\hbar\omega \quad \text{mit } n = 0,1,2,\ldots}$

Integrationskonstante
(moderne Quantenmechanik: $\gamma = \frac{1}{2}$)

2.2.3. Mängel der älteren Quantentheorie

- Notwendigkeit von ad-hoc-Annahmen (Unvollständigkeit der Theorie)
- Keine Aussagen über ungebundene Bewegungen
- Widerspruch zum Experiment: Wasserstoff nichtmagnetisch (Bahndrehimpuls $= 0$)!