

X Ersetzung der Entartungsenergie durch eine Nullpunktsenergie.

(1)

Nach Verf. hat an die Stelle der Entartungsenergie nach

Gl. (30) die Energie

$$\langle E_{kin} \rangle = -\frac{1}{2} \langle U \rangle = (2\pi^2 a_0^3 n)^{1/3} (2\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{5/3} = (2\pi^2)^{1/3} \frac{e^2}{2} n^{4/3} \quad (31)$$

zu treten.

Der dimensionslose Faktor $(2\pi^2 a_0^3 n)^{1/3}$ nimmt bei $n = n_0 = 3.4 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, also etwa bei Festkörperdichte, den Wert eins^{cm}. Der übrige Faktor gibt (bis auf den Zahlenfaktor $3^{5/3}/3 \approx 1.2$) die konventionelle Entartungsenergie nach Gl. (30) wieder. Man sieht dem diesen ersetzenden Ausdruck nach Gl. (31) unmittelbar an, daß mit ihm der Virialsatz erfüllt werden kann; wenn $-e^2/a \equiv -(2\pi^2 n)^{1/3} e^2$ die mittlere potentielle Energie eines Elektrons darstellt, ergibt sich die mittlere kinetische Energie und damit die Gl. (31) durch Multiplikation mit $-\frac{1}{2}$.

Die Gl. (31) wurde vom Verf. c.c. durch Korrespondenzbetrachtung hergeleitet. Es wurde festgestellt, daß sich aus dem "statistischen Gewicht" freier Elektronen, d.h. aus der Anzahl ihrer Phasenraumzellen

$$\frac{4\pi p^2 \Delta p V}{h^3} \quad (32)$$

wie sie soeben mit der Beziehung (27) zur Ableitung der Entartungsenergie verwendet wurde, das statistische Gewicht j^2 eines gebundenen Wasserstoffelektrons ergibt (von Spin wird abgesehen), wenn darin für das Impulsquadrat dessen quantenmechanischer Erwartungswert für das gebundene Elektron

$$p^2 = \langle p^2 \rangle = \left(\frac{j \hbar}{a_0 j^2} \right)^2 = \left(\frac{m e^2}{\hbar} \frac{1}{j} \right)^2 \quad (33)$$

(j = Hauptquantenzahl) und daraus

$$|\Delta p| = \frac{m e^2}{\hbar} \frac{1}{j^2} \Delta j = p \frac{1}{j} \quad \text{mit } \Delta j = 1 \quad (34)$$

sowie für das Volumen V den auf den Bohrschen Radius $a_B j^2$ bezogene Wert

$$V = \frac{3\pi}{2} \frac{4\pi}{3} (a_B j^2)^3 = 2\pi^2 a_B^3 j^6 \quad (35)$$

eingesetzt wird. Dies gilt nicht nur im *limes* großer Quantenzahlen, sondern für alle Quantenzahlen.

Die Werte der Volumina nach Gl. (35) sind begrenzt durch die Anzahl n_f der Ionen im Kubikzentimeter, die in dünnen Plasmen mit $n_f < n_B$ gleich der freier Elektronen ist. Denn offenbar kann sich eine Bohrsche Bahn nur innerhalb des Volumens, das einem Ion zur Verfügung steht, ausbilden. Auf Bahnen, die aus diesem Volumen hinausreichen, wechselt das Elektron von einem Proton zum benachbarten.

Indem wir nach Gl. (35)

$$V = V_f = 2\pi^2 a_B^3 j_f^6 = 1/n_f \quad (36)$$

im Mittel

setzen, bestimmen wir die größte zu realisierende Bahn und damit die größtmögliche Quantenzahl j_f . Drückt man diese nach der letzten Gleichung durch n_f aus und setzt in Gl. (33) ein, so ergibt sich

$$\frac{1}{2m} < p^2 > = (2\pi^2)^{1/3} \frac{1}{2} e^2 n_f^{1/3} \quad (37)$$

und nach Multiplikation mit n_f formal die "neue Entartungsenergie" nach Gl. (31).

← Die kinetische Energie nach Gl. (37) ist die kleinste mögliche. Gäbe es ein Elektron mit einer kleineren mittleren kinetischen Energie, so könnte es das Volumen nicht verlassen, es würde vom Proton angezogen und - unter Energieabgabe - in einer tieferen Bahn gebunden. Hier hat es eine größere ^{kinetische} Energie, aber eine niedrigere Gesamtenergie, die dem

Absolutbetrag ^{nach} gleich der kinetischen Energie ist.

Damit ist der Virialsatz wieder erfüllt, während er im Ausgangszustand wegen der zu kleinen kinetischen Energie nicht erfüllt war. (In stationären Systemen wird ein solcher Übergang durch den inversen kompensiert. In den Formeln des thermodynamischen Gleichgewichts sind Größen, welche Übergänge repräsentieren, nicht enthalten.)

Der mit der Gl. (37) gegebene Wert ist - bis auf einen schwankenden Faktor der Größenordnung eins - in der Literatur als "Erniedrigung der Ionisationsenergie" wohlbekannt. Er wird z.B. zum Abschneiden der ansonsten divergenten Zustandssumme gebundener Elektronen benötigt. Bei Verfasser findet er l.c. darüber hinaus wie hier als unterer Grenzwert der kinetischen Energie freier Elektronen Verwendung, was eine Modifizierung der Sahagleichung und die Ausdehnung ihrer Gültigkeit auf den Dichtebereich der Entartung zur Folge hat.

Für $n = n_0$ stellt die Gl. (31) die kinetische Energie im Grundzustand des Wasserstoffatoms und damit den absoluten Betrag der Nullpunktsenergie dar. →

Dem entspricht es, daß das Verhältnis von de Broglie Wellenlänge λ zum Teilchenabstand $n^{-1/3}$ für $n \geq n_B$ größer als eins ist, wenn die neue Nullpunktsernergie zugrundegelegt wird, da sich

$$\lambda n^{1/3} = (4\pi)^{1/3} (2\pi^2 a_B^3 n)^{1/6}, \quad n \geq n_B \quad (38)$$

ergibt, wohingegen mit der konventionellen Entartungsenergie das konstante Verhältnis

$$\lambda n^{1/3} = (4\pi)^{1/3}, \quad n \geq n_B \quad (39)$$

folgt. Somit kann sich nach der konventionellen Theorie die de Broglie Wellenlänge auch bei hohen Dichten um ein Proton schließen, wie es bei $n = n_B$ auf der Wasserstoffgrundbahn der Fall ist, obwohl es als markantes Ergebnis der Quantentheorie feststeht, daß es engere als die Bohrsche Grundbahn nicht gibt.

Außer daß mit unserer Gl. (38) der Virialsatz erfüllt ist, liefert sie sofort auch eine zunächst pauschale Erklärung der elektrischen Leitfähigkeit. Da bei kleinen Dichten die Broglie Wellenlänge kleiner als der Teilchenabstand ist, sind Bahnen um das Proton existent. Damit ein Elektron das spezifische Volumen $1/n$ verlassen und bei Vorhandensein eines elektrischen Feldes durch das System hindurch wandern kann, bedarf es einer Anregung über die Energie der oben definierten größtmöglichen Bahn hinaus. Das Plasma ist ein Halbleiter, dessen Leitfähigkeit mit vergrößerter Energiezufuhr zunimmt. Von der Dichte $n = n_B$ an ist ^{da gegen} eine Energiezufuhr zur Herstellung von Leitfähigkeit nicht nötig. Die Elektronen können sich nicht in Bahnen um ein Proton aufhalten,

sie werden vielmehr an den Protonen gestreut und können ^{dabei} in Richtung eines elektrischen Feldes wandern. (In einer in Arbeit befindlichen Mitteilung ^{gehen} können wir eine Gleichung ~~angeben~~, welche die elektrische Leitfähigkeit der Alkalien und Erdalkalien qualitativ richtig wiedergibt. Nach der konventionellen Auffassung sollten Erdalkalien wegen ihres vollbesetzten s-Bandes gar nicht leitfähig sein. Die Gleichung legt es nahe, die Supraleitung als ^{aus} einen dem Mößbauer Effekt verwandten Effekt anzusehen.)

Die Erweiterung des Gültigkeitsbereichs der Gl. (37) in den Bereich hoher Dichten soll ^{noch einmal} am Vorgang ihrer Herleitung erörtert werden. Wir sind von dem Ausdruck (32) ausgegangen und haben damit den Anschluß an die Behandlung freier Teilchen, die das gesamte zur Verfügung stehende Volumen V einnehmen können, gewonnen. Für das Volumen wurde sodann das nach Gl. (35) einem Wasserstoffelektron zugeordnete Volumen eingeführt, welches wie die Impuls-
werte nach den Gleichungen (33) und (34) seinerseits von der Hauptquantenzahl j abhängt. Es wäre daher und allemal vom Standpunkt der Quantenmechanik konsequent, statt vom Ausdruck (32) von dem folgenden Ausdruck zu fordern, daß er gleich j^2 sei;

$$\Delta \left(\frac{\frac{4\pi}{3} p(j)}{h^3} \propto \frac{\frac{4\pi}{3} (a_0 j^3)^3}{h^3} \right) = j^2 \quad (40)$$

← Darin ist α ein → aus
dieser Gleichung zu bestimmende Faktor. →

Mit $p^3 = (\langle p^2 \rangle)^{3/2}$ nach Gl. (33) und
 Ap. nach Gl. (34) ergibt sich wieder der von der Haupt-
 quantenzahl unabhängige Faktor $\alpha = \frac{3\pi}{2}$, wie er in der
 Gleichung (35) zur Festlegung des Bohrschen Volumens enthalten ist.
 Dies kommt ^{also mehr zufällig} Zustände, weil $p^3 \sim 1/j^3$ und $p^3 (a_B j^2)^3 \sim j^3$ ist,
 so daß die Differentiation in der alten wie der jetzigen
 Ableitung für den Absolutbetrag jeweils den Faktor 3 bringt.
 Da wir p^3 durch den quantenmechanischen Erwartungswert ^{$\langle p^3 \rangle$} aus-
 gedrückt haben, ist es ^{aber} gerechtfertigt, den Faktor α , wie ge-
 schehen, dem Volumen zuzuschlagen. Dies wird ~~sehr~~ sofort dadurch
 gestützt, daß sich für den Erwartungswert des Volumens im
 Grundzustand $\frac{4\pi}{3} \langle r^3 \rangle = \frac{4\pi}{3} \int r^3 \frac{1}{4\pi} 4\pi r^2 dr = \frac{3.5}{2} \frac{4\pi}{3} a_B^3$
 ergibt, ein Wert also, der $5/\pi$ mal größer ist als der mit Gl. (35)
 eingeführte Faktor $\frac{3\pi}{2}$. (Dieser ^{läßt sich} ^{verstehen} ~~herleiten~~ im klassisch korrespondenzmäßigen Sinne, wenn Ellipsen-
 bahnen folgendermaßen in Rechnung gestellt werden: Man
 berechne Kugelvolumina mit Radien, die gleich dem Abstand von
 Proton zum "Aphel" der Elektronenbahn sind, und gewichte sie ~~mit~~
 ^{$2(j-1)+1$, d.h.} mit der Anzahl der Einstellmöglichkeiten der Bahnen in einem
 äußeren Feld, ~~$2(j-1)+1$~~ . Mit dem Mittel dieser so gewichteten
 Volumina ergeben sich dann für $j = 1, 3, 6$ ^{und} 20 die Konstanten
 $\alpha_1 = \frac{2}{3\pi} \frac{3\pi}{2} = 0.21 \frac{3\pi}{2}$, $\alpha_3 = 0.66 \frac{3\pi}{2}$, $\alpha_6 = 0.83 \frac{3\pi}{2}$ und
 $\alpha_{20} = 0.98 \frac{3\pi}{2}$. Da sich α theoretisch wird nicht
 genau bestimmen lassen, behalten wir den
 Faktor $\alpha = \frac{3\pi}{2}$ bei.)