

Wie sieht ein Atom aus?

P. Bronner, H. Hauptmann u. F. Herrmann

1 Bilder von Atomen

Das Aussehen eines Gegenstandes beinhaltet seine Größe, Gestalt und Farbe, seine Transparenz und seine Oberflächenbeschaffenheit. Ein Atom hat aber die meisten dieser Eigenschaften nicht. Man könnte also auf die Frage der Überschrift gleich antworten: Das Atom hat kein Aussehen. Dann würde man aber vergessen, dass man sonst gar kein Problem damit hat, sich ein Bild zu machen, oder Bilder zu machen von Dingen, die unsichtbar sind, oder die kein Aussehen haben. So enthält ein Atlas „Ansichten“ der Erdoberfläche, die es in Wirklichkeit gar nicht gibt. Wir finden im Atlas physische Karten, politische Karten, geologische, klimatologische Karten, Karten mit Waren- und mit Touristenströmen. Auch Physikbücher enthalten Bilder auf denen Dinge oder Erscheinungen „zu sehen“ sind, die in Wirklichkeit unsichtbar sind: den Fluss der elektrischen Ladung in einem Leiter, elektrische und magnetische Felder, die Temperaturverteilung in einem Gegenstand, Röntgenstrahlen, Infrarotstrahlen und vieles andere mehr. So können wir natürlich auch Bilder vom Atom erzeugen. Wir wollen daher im Folgenden nicht fragen: „Wie sieht ein Atom aus?“, sondern: „Was für Bilder kann man vom Atom erzeugen?“, und damit auch: „Was für ein Bild kann man sich vom Atom machen?“

Die Bilder des Atoms, die wir betrachten werden, sind, genauso wie die Bilder von elektrischen oder magnetischen Feldern, Schöpfungen des menschlichen Geistes. Und doch sind sie nicht reine Fiktion. Sie beruhen auf Zahlenwerten und diese wiederum stammen aus Messungen oder aus einer Theorie, die sich bewährt hat.

Manche physikalischen Erscheinungen kann man durch mehrere unterschiedliche Theorien beschreiben, und es kann sein, dass die eine Theorie andere Bilder nahe legt oder ermöglicht als die andere. Genau das ist bei der Quantentheorie der Fall: Es gibt zwei Versionen von ihr, die *Heisenberg'sche* Matrizen-Mechanik und die *Schrödinger'sche* Fassung, die mit Differenzialgleichungen operiert. Die Bilder, die wir hier zeigen, beruhen auf der *Schrödinger'schen* Version der Quantenphysik. Sie sind grafische Darstellungen der Lösungen der Schrödingergleichung.

Man sieht diesen Bildern viele Eigenschaften des Atoms unmittelbar an: seinen Platzbedarf, seinen Drehimpuls und seinen Magnetismus. Man sieht, warum das Atom in bestimmten Zuständen nicht strahlt und warum es in anderen strahlt. Man sieht, ob die Strahlung stark oder schwach ist, und ob sie linear oder zirkular polarisiert ist. Am Ende mag man sogar das Gefühl haben, man wisse doch, wie das Atom aussieht.

Wir beschränken uns hier auf das Wasserstoffatom, da die entsprechenden Lösungen der Schrödingergleichung analytisch angegeben werden können. Die Berechnung der Bilder und Animationen ist daher sehr bequem.

2 Das Verfahren

Wir betrachten die Schrödingergleichung für ein Eielektronensystem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t).$$

Die Lösungen nennt man Wellenfunktionen. Wir definieren mithilfe der Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$, d. h., einer Lösung der Schrödingergleichung, zwei Ausdrücke. Erstens:

$$\rho := \psi^* \psi \quad (1)$$

und zweitens:

$$\vec{j} := \frac{\hbar^2}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (2)$$

Die Kenntnis der beiden Funktionen $\rho(\vec{r}, t)$ und $\vec{j}(\vec{r}, t)$ ist bei Eielektronensystemen zur Kenntnis der Wellenfunktion äquivalent. Jede Aussage, die aus der Wellenfunktion folgt, folgt also auch aus $\rho(\vec{r}, t)$ und $\vec{j}(\vec{r}, t)$.

Unter Verwendung der Schrödingergleichung und der Ausdrücke (1) und (2) erhält man [1]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (3)$$

Diese Gleichung hat die Form einer Kontinuitätsgleichung. Multipliziert man die Größen ρ und \vec{j} mit der Elektronenladung e :

$$\rho_e = e \rho,$$

$$\vec{j}_e = e \vec{j},$$

so kann man Gleichung (3) auch schreiben:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_e = 0. \quad (4)$$

Wenn man ρ und \vec{j} mit der Elektronenmasse m multipliziert, also:

$$\rho_m = m \rho,$$

$$\vec{j}_m = m \vec{j},$$

so erhält man aus (3):

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0. \quad (5)$$

Man kann nun Gleichung (4) als Kontinuitätsgleichung der elektrischen Ladung und Gleichung (5) als Kontinuitätsgleichung der Masse lesen.

Wir erinnern daran, welche Aussage eine Kontinuitätsgleichung macht: Wenn der Wert der Ladung (bzw. Masse) an einer Stelle abnimmt, so muss von dieser Stelle ein Ladungs- (bzw. Massen-)strom wegfließen. Nimmt die Ladung (bzw. Masse) zu, so muss ein entsprechender Strom hinfließen. Die Kontinuitätsgleichung bringt also einfach die Erhaltung einer im Raum verteilten extensiven Größe zum Ausdruck.

Diese Interpretation bedeutet, dass man sich vorstellt, die Hülle des Atoms bestehe aus einem kontinuierlich in der Umgebung des Kerns verteilten Stoff, der im Allgemeinen auch strömt. *Döring* [2] bezeichnet diesen gedachten Stoff als „Elektronenmaterie“. Wir wollen ihn etwas kürzer „Elektronium“ nennen.

Das Elektron besteht in diesem Modell aus Elektronium, so wie ein See aus Wasser oder eine Münze aus Metall. Das Modell ist so alt wie die Quantenmechanik selbst. Es wurde bereits von *Schrödinger* vorgeschlagen [3]. Man findet es aber auch in neueren Lehrbüchern zur Quantenphysik. Besondere Unterstützung hat es in jüngerer Zeit durch die Dichtefunktionaltheorie [4] erfahren.

Wir wollen nun untersuchen, wie sich unsere Dichte und Stromdichte für verschiedene Lösungstypen der Schrödingergleichung verhalten. Die Schrödingergleichung hat spezielle Lösungen der folgenden Gestalt:

$$\psi(\vec{r}, t) = u_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \quad (6)$$

Die zugehörigen Zustände nennt man Eigenzustände. Die Lösungen und die entsprechenden Zustände sind durchnummeriert mit dem Index k . Zu jeder solchen Lösung gehört ein bestimmter Wert E_k der Energie, der Energie-Eigenwert. Man beachte, dass in (6) die Orts- und die Zeitabhängigkeit schön voneinander getrennt sind. Die Ortsabhängigkeit steckt nur im ersten Faktor $u_k(\vec{r})$, die Zeitabhängigkeit nur in der Exponentialfunktion.

Nun ist auch jede Linearkombination dieser Eigenzustandslösungen eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k u_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}.$$

Die Zustände, die durch eine solche Summe beschrieben werden, nennt man Überlagerungszustände, denn sie stellen eine Überlagerung von Eigenzuständen dar.

Wenn man von den Lösungen der Schrödingergleichung spricht, so denkt man oft nur an die Eigenzustände. Der Grund dafür ist, dass diese sich von den Überlagerungszuständen in einer wichtigen Eigenschaft unterscheiden: Für die Eigenzustände sind Dichte und Stromdichte zeitunabhängig, für die Überlagerungszustände nicht. Wir wollen das kurz zeigen:

Für einen Eigenzustand ergibt sich für die Dichte des Elektroniums:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= u_k^*(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E_k t} u_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \\ &= u_k^*(\vec{r}) u_k(\vec{r}). \end{aligned}$$

Das Produkt der beiden Exponentialfunktionen ist gleich eins, die Zeitabhängigkeit verschwindet also oder in ande-

ren Worten: Die Dichte ist zeitlich konstant. Die Berechnung der Stromdichte ergibt ein entsprechendes Ergebnis. Auch sie ist zeitlich konstant (aber nicht unbedingt null). Man nennt daher die Eigenzustände auch stationäre Zustände.

Wir betrachten nun einen Überlagerungszustand. Wir nehmen dazu das einfachste Beispiel, das man sich denken kann: die Überlagerung von nur zwei Eigenzuständen. Die Summe besteht also aus nur zwei Summanden:

$$\psi(\vec{r}, t) = c_A \psi_A(\vec{r}, t) + c_B \psi_B(\vec{r}, t)$$

mit

$$\psi_A(\vec{r}, t) = u_A(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_A t} \quad \text{und} \quad \psi_B(\vec{r}, t) = u_B(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_B t}.$$

Da die Berechnung von ρ etwas umständlich ist, führen wir sie hier nicht aus, sondern geben nur das Ergebnis an. Es ist ein Ausdruck der Form

$$\rho(\vec{r}, t) = C_0(\vec{r}) + C_1(\vec{r}) \cos(\omega t) + C_2(\vec{r}) \sin(\omega t).$$

Man sieht, dass die Dichte zeitabhängig ist. Dabei ist $\omega = (E_A - E_B)/\hbar$. Wir sehen auch noch genauer: Die Dichte setzt sich zusammen aus einem nur ortsabhängigen Term, und einem Rest, der harmonisch schwingt. Auch hier gilt das Entsprechende für die Stromdichte. Diese Zustände sind also nicht-stationär.

3 Bilder und Animationen

Alle Bilder des Wasserstoffatoms, die wir zeigen und interpretieren, sind Darstellungen der Dichte und der Stromdichte des Elektroniums. Für stationäre Zustände werden wir meist stehende Bilder betrachten, während wir nicht-stationäre Zustände als Animationen darstellen. Im Text erscheinen allerdings nur einige wenige Abbildungen. Viel mehr Bilder sowie alle Animationen befinden sich auf der diesem Heft beiliegenden CD. Die CD enthält auch Programme, mit denen man Bilder und Animationen selbst berechnen kann.

3.1 Die Gestalt des Atoms

Wir betrachten zunächst die Dichteverteilung des Elektroniums in verschiedenen stationären Zuständen, Abb. 1 (siehe auch wie alle folgenden Abbildungen farbig auf der letzten Umschlagseite). Zur Bezeichnungsweise: Ein Eigenzustand der Energie ist charakterisiert durch die drei Quantenzahlen n , l und m . Die Bezeichnung (4, 3, 2) bedeutet entsprechend $n = 4$, $l = 3$ und $m = 2$. Der Spin wird in unseren Bildern nicht visualisiert. In den meisten Bildern entspricht einem bestimmten Dichtewert eine bestimmte Farbe. Blau bedeutet Dichte gleich Null, Rot ist maximale Dichte. Dabei ist die Zuordnung zwischen Dichtewert und Farbe für verschiedene Abbildungen im Allgemeinen unterschiedlich.

Man sieht diesen Bildern zunächst die Gestalt des Atoms in den verschiedenen Zuständen an. In manchen Zuständen ist das Atom kugelförmig, in anderen hat es eine geringere Symmetrie.

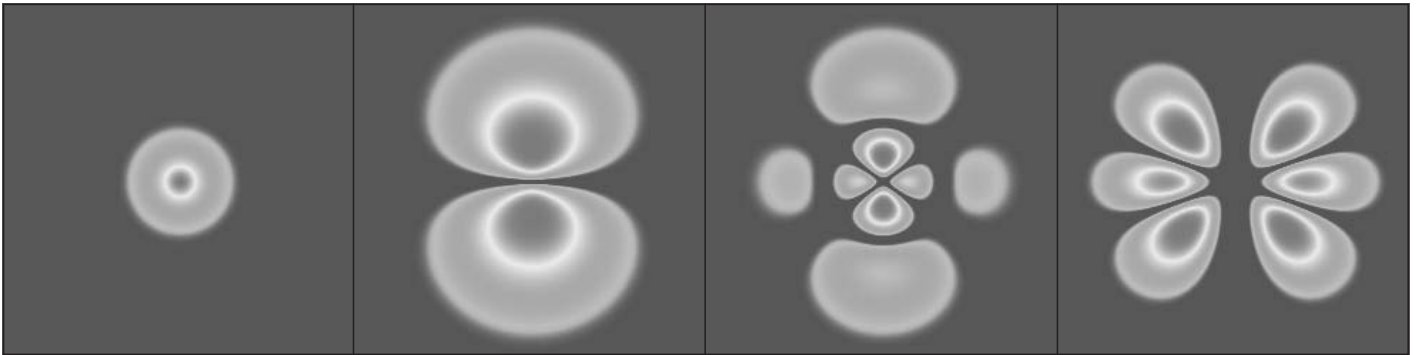


Abb. 1: Elektroniumdichte im H-Atom in den stationären Zuständen (1, 0, 0), (2, 1, 0), (4, 2, 0) und (6, 5, 3)

3.2 In stationären Zuständen strahlt das Atom nicht.

Bisher haben wir uns nur die Dichte des Elektroniums angesehen. Die Stromdichte ist nur für Zustände mit $m \neq 0$ von null verschieden. Da die Stromdichte eine Vektorgröße ist, ist ihre Darstellung schwieriger. Abb. 2 zeigt für den Zustand (3,2,1) links oben die Dichte, darunter die Stromdichte, genauer: den Betrag der Stromdichte, in einer Schnittebene durch den Kern. Der Stromdichtevektor steht senkrecht zur Zeichenebene. Die Farbe Blau bedeutet, dass der Strom in die Bildebene hineinfließt, Rot bedeutet, dass er aus ihr herausfließt. Das rechte, große Teilbild zeigt noch eine Kombination von Dichte und Stromdichte. Die Stromdichte ist hier durch Pfeile angedeutet. Was kann man aus diesen Bildern lernen?

Aus der Tatsache, dass sowohl die Ladungsverteilung als auch die Stromverteilung zeitlich konstant sind, können wir schließen, dass das Atom keine Strahlung emittiert. Eine unbewegte Ladung hat ein statisches elektrisches Feld und ein konstanter Strom hat ein stationäres magnetisches Feld. Nach dem *Bohr*'schen Modell mit den umlaufenden Körperchen bekommen wir bekanntlich einen Widerspruch zur Elektrodynamik, denn die Körperchen müssten strahlen. Man setzt in diesem Fall die Elektrodynamik mithilfe des ersten *Bohr*'schen „Postulats“ kurzerhand außer Kraft. Wenn man das Elektroniummodell verwendet, braucht man dieses Postulat nicht. Man braucht die Elektrodynamik nicht außer Kraft zu setzen. Im Gegenteil: Genau sie sagt uns, dass das Atom nicht emittiert [2].

3.3 Drehimpuls und magnetisches Moment

Wir betrachten noch einmal die Stromdichte. In Zuständen mit $m \neq 0$ existiert eine Strömung des Elektroniums mit kreisförmigen Stromlinien. Wir haben damit einen kreisförmigen Strom von Masse und von elektrischer Ladung. Dass ein kreisförmiger Massenstrom vorliegt, bedeutet aber, dass das System Drehimpuls hat. Diesen kann man aus der Massestromverteilung (die ja bekannt ist) berechnen. Man findet denselben Wert, den auch die quantenmechanische Eigenwertgleichung liefert. Das ist kein Wunder, denn schließlich enthält ja die Stromdichteverteilung, von der wir bei der Berechnung ausgehen, die Lösung der Schrödingergleichung. Man kann damit sagen, dass man den Bildern, die die Elektroniumstromdichte zeigen, den Drehimpuls des Atoms regelrecht ansieht.

Außer einem Massenstrom haben wir in den Zuständen mit $m \neq 0$ auch noch einen elektrischen Kreisstrom. Ein solcher Strom bedeutet, dass das Atom ein magnetisches Moment hat. Auch dieses kann man aus der Stromverteilung berechnen. Und wieder stimmt das Ergebnis mit dem der Quantenmechanik überein. Wir sehen unseren Bildern also

auch das magnetische Moment des Atoms an. Genauer müsste man sagen: das Bahnmoment. Denn der Spin ist auf unseren Bildern nicht wiedergegeben.

3.4 Übergänge zwischen Zuständen

Bisher haben wir nur stationäre Zustände betrachtet. Wir kommen jetzt zu den nichtstationären Überlagerungszuständen. Dabei beschränken wir uns auf die Überlagerung von zwei Zuständen:

$$\psi(\vec{r}, t) = c_A \psi_A(\vec{r}, t) + c_B \psi_B(\vec{r}, t) \quad (7)$$

Wir hatten in Abschnitt 2 gesehen, dass für solche Zustände Dichte und Stromdichte mit der Kreisfrequenz

$$\omega = \frac{E_A - E_B}{\hbar}$$

oszillieren.

Als erstes Beispiel betrachten wir den Überlagerungszustand aus (2, 1, 0) und (1, 0, 0), wobei die beiden Teilzustände zu je 50% in der Überlagerung enthalten sein sollen. Die Dichte des Elektroniums im Überlagerungszustand ist zeitlich nicht konstant. Aus dieser Tatsache ziehen wir eine wichtige Lehre: In einem solchen Zustand kann das Atom nicht verharren. Wir haben ja eine schwingende Ladungsverteilung und auch eine schwingende Stromverteilung. Eine schwingende Ladungs- und Stromverteilung führt aber im Allgemeinen zur Emission einer elektromagnetischen Welle. Dadurch verliert das Atom Energie. Und das bedeutet, dass das Atom nicht in dem Zustand bleiben kann, den wir als Anfangszustand angenommen hatten. Es geht viel mehr nach und nach in den Zustand niedrigerer Energie über. Der Anteil von $\psi_A(\vec{r}, t)$, der der höheren Energie entspricht, nimmt ab, der von $\psi_B(\vec{r}, t)$ nimmt zu. Für einen nicht stationären Zustand müssen also die Gewichtungsfaktoren in Gleichung (7) zeitabhängig sein:

$$\psi(\vec{r}, t) = c_A(t) \psi_A(\vec{r}, t) + c_B(t) \psi_B(\vec{r}, t)$$

Wir nehmen nun an, das Atom sei am Anfang in einem angeregten, stationären Zustand, d. h., $c_A = 1$ und $c_B = 0$. Der Übergang in den Zustand B kann nun allerdings ohne fremde Hilfe nicht beginnen. Tatsächlich verharrt ein Atom auch eine gewisse Zeit in einem solchen angeregten Zustand.

Das Gleichgewicht ist aber prekär. Eine kleine Störung genügt, um den Übergang einzuleiten. Hierfür sorgen Stöße mit anderen Atomen oder die Fluktuationen des elektromagnetischen Feldes in seinem Grundzustand. Diese Beschreibung eines elektronischen Übergangs, bei der das Elektron quantenmechanisch, die Strahlung aber klassisch behandelt wird, nennt man „halbklassisch“.

Der Energieverlust pro Schwingungsperiode durch Abstrahlung ist nun allerdings außerordentlich gering. Der Übergang $(2, 1, 0) \rightarrow (1, 0, 0)$ dauert etwa 10^{-8} s, die Schwingungsdauer ist etwa 10^{-15} s. Das Elektronium macht also während des Übergangs etwa 10^7 Schwingungen. Während dieser Zeit nimmt der Anteil von $\psi_A(\vec{r}, t)$ von 100% auf 0% ab, der von $\psi_B(\vec{r}, t)$ nimmt von 0% auf 100% zu.

Die gesamten 10^7 Schwingungen kann man natürlich nicht als Animation darstellen. Wenn in der Animation eine Schwingung eine Sekunde dauern würde, so würde man für den ganzen Übergang ungefähr ein halbes Jahr brauchen. Um den Vorgang mithilfe einer Animation sichtbar zu machen, wurden verschiedene Verfahren angewendet. Bei einigen Animationen überspringt die Darstellung größere Zeitintervalle. Man sieht also Teile des Übergangs zu verschiedenen Zeiten, und zwar am Anfang, dann nachdem etwa 20 % des Übergangs abgelaufen sind, dann nach 40%, 60 %, 80% und schließlich 100%. Noch eleganter ist eine andere Methode, die man als stroboskopisches Verfahren bezeichnen könnte: Es werden Momentaufnahmen des Übergangs aneinander gereiht, die in gleichmäßigen, größeren Zeitschritten aufgenommen werden. Die Zeitpunkte sind so gewählt, dass die Phase der Schwingung zwischen zwei aufeinander folgenden Bildern nur wenig zunimmt. So entsteht der Eindruck einer langsamen Schwingung. Abb. 3 (siehe letzte Umschlagseite) zeigt einige Momentaufnahmen aus dem Übergang $(2, 1, 0) \rightarrow (1, 0, 0)$.

Man sieht an der entsprechenden Animation, dass die Ladung oszilliert, und zwar ähnlich wie die einer makroskopischen Dipolantenne. Man kann also direkt schließen, dass das Atom bei diesem Übergang stark emittiert. Einen solchen Dipolcharakter hat die Ladungsschwingung immer dann, wenn für den Übergang $\Delta l = \pm 1$ ist. Die entsprechenden Übergänge heißen Dipolübergänge. Bei einem Dipolübergang strahlt das Atom stark, und das bedeutet, dass der Übergang schnell abläuft. Man sagt auch, der Übergang sei erlaubt.

3.5 Langsame Übergänge

Wie schnell ein Übergang ist, d. h., wie schnell sich die Gewichtsfaktoren c_A und c_B ändern, hängt davon ab, wie stark die schwingende Ladung elektromagnetische Strahlung emittiert, und das hängt von der räumlichen Verteilung und der zeitlichen Änderung von Ladungs- und Stromdichte ab. Mit etwas Übung sieht man einer Animation der Funktion $\rho(\vec{r}, t)$ an, ob der Übergang schnell, langsam oder gar nicht vonstatten geht. (Die Dauer der Animation ist natürlich kein Maß für die Dauer des Übergangs, denn wir haben ja die Stroboskopfrequenz willkürlich vorgegeben.)

Wir hatten gesehen, dass die Ladungsschwingung für $\Delta l = \pm 1$ Dipolcharakter hat, und dass das Atom in diesem Fall stark emittiert – genau so wie eine makroskopische Dipolantenne. Ist Δl gleich 0 oder ± 2 , so hat die Schwingung Quadrupolcharakter, und das Atom strahlt viel schwächer – genau so wie es eine makroskopische Quadrupolantenne machen würde (d.h. zwei nebeneinander stehende, im Gegentakt schwingende Dipolantennen). Abb. 4 zeigt einige Moment-

aufnahmen aus dem Übergang $(5, 2, 0) \rightarrow (4, 0, 0)$. Ein interessanter Überlagerungszustand ist der, bei dem für beide beteiligten Zustände $l = 0$ ist. Die Ladungsverteilung hat hier immer Kugelsymmetrie. Sie kann daher prinzipiell nicht emittieren. Ein Übergang kann nicht stattfinden.

3.6 Die Polarisation der Strahlung

Wenn die Quantenzahl m in Anfangs- und Endzustand denselben Wert hat (und $\Delta l = \pm 1$ ist), so macht das Elektronium eine Hin- und Herbewegung. Es strahlt wie eine gewöhnliche Dipolantenne, d.h., es strahlt linear polarisiertes Licht ab. Das war der Fall für die Dipolübergänge, die wir betrachtet hatten. Wenn sich die magnetischen Quantenzahlen m der beteiligten Zustände aber um eins unterscheiden, wenn also $\Delta m = \pm 1$ ist, so macht die Ladungsverteilung eine Art Kreisbewegung, Abb. 5 (auf der letzten Umschlagseite oder die entsprechende Animation auf der CD). Das Atom emittiert eine zirkular polarisierte Welle.

4 Schlussbemerkungen

Mithilfe der Wellenfunktion eines Einelektronensystems lassen sich zwei Größen ρ und \vec{j} definieren, die in einer Gleichung auftreten, welche man als Kontinuitätsgleichung lesen kann. Das legt nahe, diese Größen als Dichte bzw. Stromdichte der elektrischen Ladung bzw. der Masse eines im Raum verteilten gedachten Stoffes zu interpretieren. Aus der Verteilung dieses „Elektroniums“ und aus ihrer zeitlichen Änderung lassen sich mehrere Eigenschaften des Atoms mit Hilfe von bewährten physikalischen Gesetzen korrekt vorhersagen.

- Da Ladungsdichte und elektrische Stromdichte stationär sind, folgt, dass ein Atom in einem Eigenzustand der Energie nicht strahlt. Das erste *Bohr*'sche Postulat wird also nicht gebraucht.
- Aus der Massen- und Ladungsstromverteilung folgt der korrekte Wert des Bahndrehimpulses und des magnetischen Moments.
- Aus der Art wie die Ladungsverteilung eines Überlagerungszustandes schwingt, kann man ablesen, ob das Atom stark oder schwach oder gar nicht strahlt (ob ein Übergang erlaubt oder verboten ist).
- An der Schwingung der Ladungsverteilung erkennt man wie die emittierte Strahlung polarisiert ist.

Literatur

- [1] W. Döring: Einführung in die Quantenmechanik, Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen 1960, S. 147 ff.
- [2] W. Döring: Atomphysik und Quantenmechanik, II. Die allgemeinen Gesetze, Walter de Gruyter, Berlin 1976, S. 20: „Die [...] Bohr'schen Postulate ergeben sich ohne Schwierigkeiten aus bekannten physikalischen Gesetzen, wenn man nicht das Partikelmodell, sondern das Wellenmodell für die Elektronen zugrunde legt, wenn man also annimmt, dass die Elektronenmaterie kontinuierlich verteilt ist mit einer Dichte proportional zum Absolutquadrat $|\psi|^2$ einer komplexen Wellenfunktion....“
- [3] E. Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem, Erste Mitteilung. Ann. Phys. 79 (1926), S. 361.
- [4] S. K. Gosh and B. M. Deb: Densities, density-functionals and electron fluids. Physics reports 92 (1982), S. 1 - 44.

Anschrift der Verfasser:

Patrik Bronner, Dr. Holger Hauptmann, Prof. Dr. Friedrich Herrmann, Abteilung für Didaktik der Physik, Universität, 76128 Karlsruhe