# 5.2.6 Elemente des quantenmechanischen Modells des Wasserstoff-Atoms (Orbitalmodell)

**Stehende Wahrscheinlichkeitswellen im eindimensionalen Potentialtopf**

Die Quantenmechanik gibt die Bohrsche Vorstellung von der punktförmigen Verteilung von Masse und Ladung auf. Masse- und Ladungsverteilung werden von ihr vielmehr aus der Amplitude der zugehörigen de-Broglie-Welle berechnet. Nach Schrödinger (Erwin, österr. Physiker, 1887 -1961, NP 1933) sind Masse und Ladung an Stellen der größten Amplitude der de-Broglie-Welle dichter als anderswo.

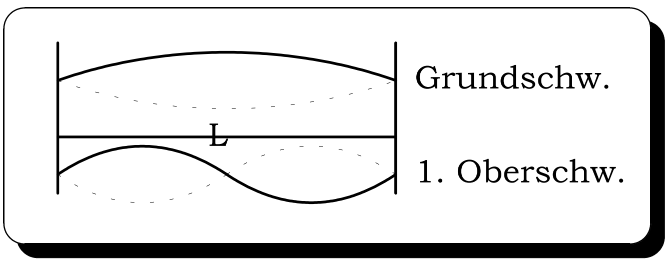
In der heutigen Deutung werden alle Teilchen als fast punktförmige Gebilde beschrieben. Der (reelle) Betrag des Amplitudenquadrats der de-Broglie-Welle gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens an (ohne Beweis).

Anmerkung:
Das Verhalten freier Elektronen wird durch eine ebene de-Broglie-Welle beschrieben, die bei Fortschreiten in x-Richtung die Form
$\Psi(x,t) = C \cdot \exp\left(i \cdot 2 \cdot \pi \cdot \left(\frac{x}{\lambda} - f \cdot t\right)\right)$ hat.

Im Folgenden soll ein Teilchen betrachtet werden, das sich kräftefrei in einem eindimensionalen Bereich, dem sog. linearen Potentialtopf, bewegt. Dies ist beim Wasserstoffatom nicht der Fall, wohl aber bei Molekülen mit linear gebauten Atomgruppen. Bei bestimmten Farbstoffmolekülen etwa sind die Atome zu linearen Ketten angeordnet, längs denen sich die Elektronen praktisch kräftefrei bewegen können.

Die Sinnhaftigkeit der Anwendung dieses Modells auf Atome kann so verstanden werden: Die Coulombkräfte der Atomkerne halten die Elektronen in einem dreidimensionalen Bereich zusammen. Zunächst beschränken wir uns auf eine Dimension und betrachten Elektronen, die auf einer Strecke der Länge L zwischen zwei Wänden eingesperrt sind. Längs dieser Strecke kann sich eine stehende Materiewelle ausbilden, vergleichbar einer stehenden mechanischen Welle zwischen zwei festen Enden (vgl. Skizze) oder stehenden Wellen am losen Begrenzungen (Chladnische Klangfiguren).

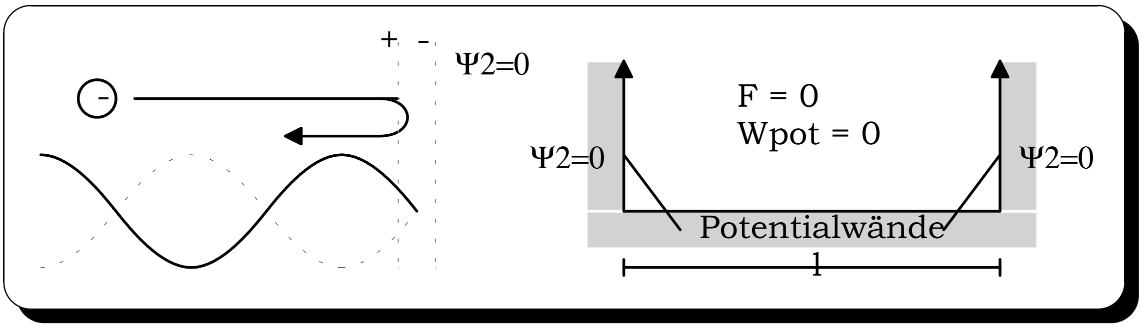
Skizze:




Gedankenversuch:

Stellt man sich einen breiten Strom von Elektronen vor, die alle den gleichen Impulsvektor besitzen, so ist die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron bei einer Ortsmessung anzutreffen, an jeder Stelle des Stroms gleich groß, d. h. das Amplitudenquadrat der Wahrscheinlichkeitswelle ist konstant. Bringt man ein metallisches Doppelnetz senkrecht zur Stromrichtung mit genügend großer und richtig gepolter Spannung in den Strom, so werden die Elektronen reflektiert. Vor dem Doppelnetz überlagern sich hin- und rücklaufende Wahrscheinlichkeitswelle zu einer stehenden Welle mit einem Knoten am Netz. (vgl. Skizze).
Nun stellt man in Gedanken ein zweites reflektierendes Doppelnetz in einem links liegenden Knoten auf; auf diese Weise ist ein Potentialtopf mit genügend hohen Wänden entstanden, in dem die gefangene stehende Welle ohne Energienachschub bestehen bleibt.

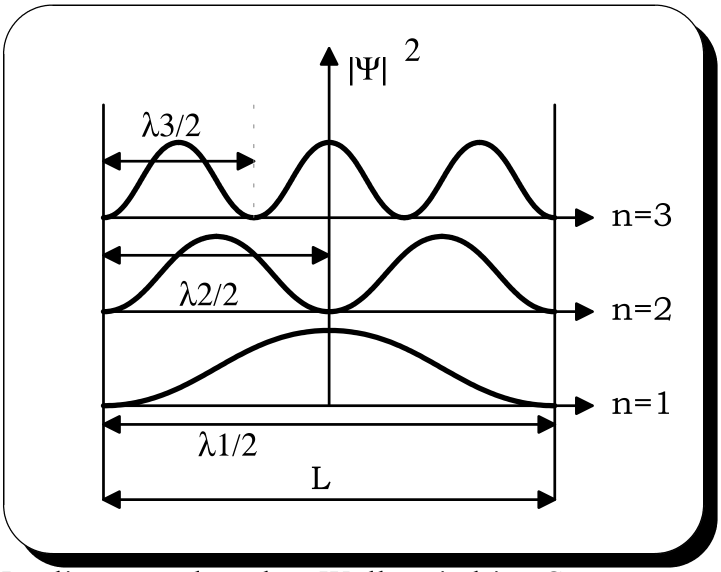
Skizzen:




Folgerungen:

1. Aus der Kräftefreiheit folgt ein konstantes Potential bzw. konstante potentielle Energie des eingeschlossenen Teilchens, die durch geeignete Wahl des Potentialnullpunkts gleich Null gesetzt werden kann.
2. An den idealen (reflektierenden) Wänden steigt das Potential praktisch sprunghaft auf Unendlich an.
3. Das Teilchen wird nie im Außenraum des Topfes angetroffen. Seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dort daher Null.
4. Da die Ψ-Funktion (ohne Beweis!) überall stetig ist, muss sie auch unmittelbar innerhalb des Netzes die Amplitude Null haben. Dies ist gleichbedeutend damit, dass die im Topf eingeschlossene stehende Welle an den Begrenzungen Knoten haben muss. Dies ist unmittelbar mit der Bedingung vergleichbar, unter der eine beiderseits eingespannte schwingende Saite stehende Wellen zeigen kann.
5. Für diese stehenden Wellen gilt:
   $L = n \cdot \frac{\lambda}{2}$.
6. Da die Schrödingergleichung für stehende Wellen die Form
   $\Psi(x,t) = 2 \cdot A \cdot \cos\left(2 \cdot \pi \cdot \frac{x}{\lambda}\right) \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot f \cdot t)$
   hat, werden solche Wellen also durch Sinusfunktionen beschrieben; $|\Psi|^2$, das Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens, ist dann eine $\sin^2$-Funktion (vgl. Skizzen).

Skizzen:




7. In dieser stehenden Welle wird im Gegensatz zur fortschreitenden Welle weder Impuls noch Energie transportiert. Die Wahrscheinlichkeitsdichte hängt nicht von der Zeit ab. Ein solcher Zustand heißt stationär, und dem Elektron kann keine Bewegung im klassischen Sinn zugeschrieben werden.

**Dreidimensionaler Potentialtopf**

Die für den linearen Potentialtopf gewonnenen Ergebnisse lassen sich leicht auf drei Dimensionen erweitern. Zweckmäßigerweise wählt man hierzu einen kubischen Topf mit den Kantenlängen
$L_x = L_y = L_z = L$.
Nach jeder Raumrichtung kann sich eine stehende "Elektronenwelle" ausbilden. Diese Wellen können verschiedene Frequenzen haben; sie überlagern sich ungestört. In anderen Richtungen können sich wegen des Fehlens einer Reflexionsbedingung keine so leicht zu berechnenden stehenden Wellen ausbilden.

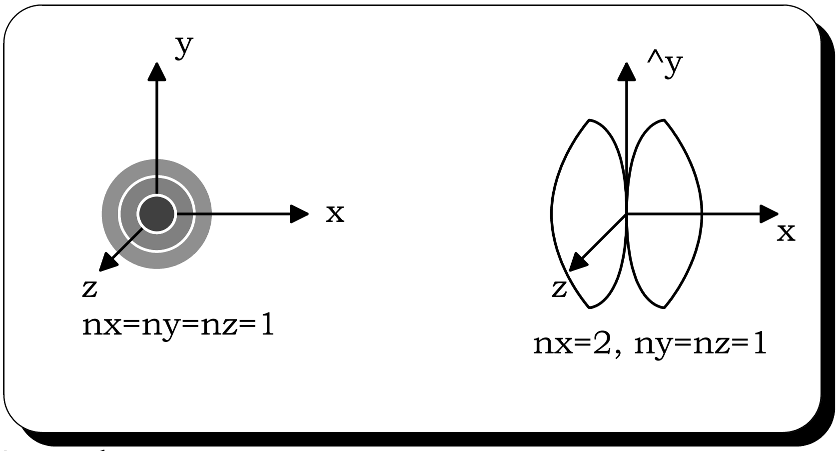
Als gemeinsame Bedingung für alle möglichen stehenden Wellen ergibt sich die Randbedingung $|\Psi|^2 = 0$ an den Wänden. Dann gilt
$L_x = n_x \cdot \frac{\lambda_x}{2};\ L_y = n_y \cdot \frac{\lambda_y}{2};\ L_z = n_z \cdot \frac{\lambda_z}{2}$
mit voneinander unabhängigen Quantenzahlen $n_x$, $n_y$ und $n_z$.

Die Verhältnisse beim kubischen Potentialtopf lassen sich mit denen vergleichen, die im Wasserstoffatom vorliegen. Die zu $n_x = n_y = n_z = 1$ gehörende Welle hat im dreidimensionalen Potentialtopf an allen sechs Wänden Knotenflächen und in der Mitte ihren Bauch mit maximaler Dichte der Antreffwahrscheinlichkeit. Orte gleicher Aufenthaltswahrscheinlichkeit liegen in Kugelschalen um die Topfmitte. Zustände, bei denen die drei

Achsenrichtungen gleichberechtigt sind, erhält man immer dann, wenn $n_x = n_y = n_z$ gesetzt wird.

Für $n_x = 2$, $n_y = n_z = 1$ findet man die nächsteinfache Welle im dreidimensionalen Potentialtopf. Denkt man sich den Ursprung eines parallel zu den Wänden orientierten Koordinatensystems in Topfmitte, so ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei x = 0, also in der y-z-Ebene, Null. Diese Ebene ist eine Knotenebene; beiderseits davon liegt ein Aufenthaltsbereich in Form einer deformierten Kugel.

Skizzen:




Anmerkungen:

1. Bereiche in der Atomhülle, auf die sich die Wahrscheinlichkeit für den Aufenthalt eines Elektrons konzentriert, heißen Orbitale. Sie sind durch stehende Wellen für die Antreffwahrscheinlichkeit des Elektrons bestimmt.
2. Der Zustand des Elektrons im Orbital, insbesondere seine Energie und die Richtung seiner Bindungsfähigkeit, werden durch drei Quantenzahlen charakterisiert.