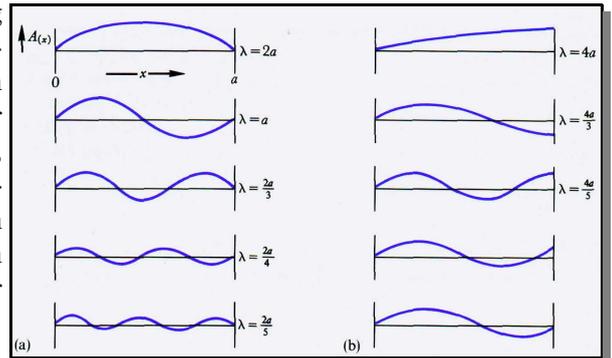


Das Orbitalmodell (VI)

Im Bohr'schen **Schalenmodell** bewegt sich das Elektron, verstanden als **Teilchen** mit **Masse** und **Energie**, auf kreisförmigen Bahnen um den Kern mit dezidierten, erlaubten Abständen. Wird das Elektron jedoch als (stehende) **Welle** verstanden, wird diese Eigenschaft durch die de-Broglie-Beziehung $\lambda = h/m \cdot v$ dargestellt. Die **Unschärferelation** von Heisenberg lässt weder eine genaue Orts- noch Impulsbestimmung zur gleichen Zeit zu. Dies alles zusammen führt zu der Überlegung, vom **Aufenthalt** des Elektrons in einem bestimmten **Raum** mit dem Atomkern als Mittelpunkt zu sprechen. Die größte Wahrscheinlichkeit, das Elektron zu einem bestimmten Zeitpunkt dort anzutreffen, wird als Elektronendichte oder **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** bezeichnet. Wie kommt man zu dieser Auffassung und wie sieht diese Aufenthaltswahrscheinlichkeit aus?

Die Bewegungen des Elektrons können mathematisch nur mit **Differentialgleichungen** beschrieben werden, da hiermit die Änderung der einen Größe (**Ort**) mit der Änderung einer anderen Größe (**Zeit**) verknüpft ist. Aus der de Broglie-Beziehung (siehe *Orbitalmodell IV*) und der Unschärferelation (siehe *Orbitalmodell V*) ergeben sich somit Informationen über ein Teilchen nur aus der Lösung einer Gleichung für eine Welle, die Informationen zu seinem Ort können nur eine Wahrscheinlichkeit angeben, das Elektron in einem bestimmten Raum zu treffen. In der Klassischen Mechanik werden Probleme von Wellengleichungen (hier als Beispiel die Schwingungen einer Saite) in folgenden Schritten gelöst:



1. Die Bewegungsgleichung einer schwingenden Saite beschreibt die Verschiebung oder Amplitude der Schwingung $A(x)$ als Funktion der Lage (Entfernung x) entlang der Saite.
2. Für eine schwingende Saite mit feststehenden Enden (stehende Welle) ist die Lösung der allgemeine Ausdruck für eine Sinus-Welle. Wellenlänge und Frequenz sind noch offen.
3. Es werden nur die Lösungen akzeptiert, bei denen die Enden der Saiten in Ruhelage bleiben. Diese Beschränkung auf akzeptable Lösungen der Wellengleichung stellt eine sog. **Randbedingung** dar.

Abb. 14: Akzeptable (a) und nicht akzeptable (b) stehende Wellen einer Saite: Die Grenzbedingungen beschränken die möglichen Wellenlängen auf die Werte $\lambda = 2a/n$ mit $a = \text{Länge der Saite}$ und $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8 \pi m}{h} [E - V(x, y, z)] \psi(x, y, z) = 0$$

$E = \text{Energie}$; Variable, die durch die der Funktion $|\psi|^2$ auferlegten Randbedingungen eingeschränkt oder quantisiert wird;
 $V(x, y, z) = E_{\text{pot}}$ des Teilchens im Punkt (x, y, z)

Die Randbedingungen und nicht die Wellengleichung sind für die Quantisierung der Wellenlängen der Saitenschwingung verantwortlich.

In der Quantenmechanik ist das weitere Vorgehen zur Klärung obiger Fragen das gleiche, wenn auch der Form nach etwas komplexer, handelt es sich doch um das Verständnis einer stehenden Welle im dreidimensionalen Raum. Die 1926 von ERWIN SCHRÖDINGER (1887-1961) vorgeschlagene Gleichung formuliert die **Funktion (Psi)** $\psi(x, y, z)$ als Analogon zur Amplitude $A(x)$ der schwingenden Saite. Das **Absolutquadrat** dieser Amplitude $|\psi|^2$ gibt die **relative Wahrscheinlichkeit** für das Teilchen im Punkt (x, y, z) an. Oder anders formuliert: befindet sich ein kleines **Volumenelement** dv im Punkt (x, y, z) , ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in diesem Volumenelement anzutreffen, durch $|\psi|^2 dv$ gegeben. Der Lösung der Schrödinger-Gleichung folgt die Setzung von Randbedingungen: die relative Wahrscheinlichkeit muss überall im Raum stetig, eindeutig und endlich sein. Die Lösungen für die Differentialgleichung der schwingenden Saite, dargestellt in **Abb. 14a**, werden durch eine einzige ganzzahlige Quantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$ charakterisiert. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für das H-Atom werden durch **drei ganzzahlige Quantenzahlen** charakterisiert: n, l und m . Dies Quantenzahlen ergeben sich bei der Lösung der Gleichung für die Wellenfunktion ψ von selbst. Die 4. Quantenzahl s (Spinquantenzahl $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$) wird später erklärt.

Quantenzahlen					Übliche Bezeichnung	Anzahl der Zustände
n	l	m	s			
1	0	0	+1/2 -1/2	1s	2	
2	0	0	+1/2 -1/2	2s	2	
2	1	-1	+1/2 -1/2	2p	6	
		0	+1/2 -1/2			
		+1	+1/2 -1/2			
3	0	0	+1/2 -1/2	3s	6	
		1	-1			+1/2 -1/2
			0			+1/2 -1/2
3	2	-2	+1/2 -1/2	3d	10	
		-1	+1/2 -1/2			
		0	+1/2 -1/2			
		+1	+1/2 -1/2			
		+2	+1/2 -1/2			
4	0	0	+1/2 -1/2	4s	2	
4	1	-1	+1/2 -1/2	4p	6	
		0	+1/2 -1/2			
		+1	+1/2 -1/2			
4	2	-2	+1/2 -1/2	4d	10	
		-1	+1/2 -1/2			
		0	+1/2 -1/2			
		+1	+1/2 -1/2			
		+2	+1/2 -1/2			
4	3	-3	+1/2 -1/2	4f	14	
		-2	+1/2 -1/2			
		-1	+1/2 -1/2			
		0	+1/2 -1/2			
		+1	+1/2 -1/2			
		+2	+1/2 -1/2			
		+3	+1/2 -1/2			