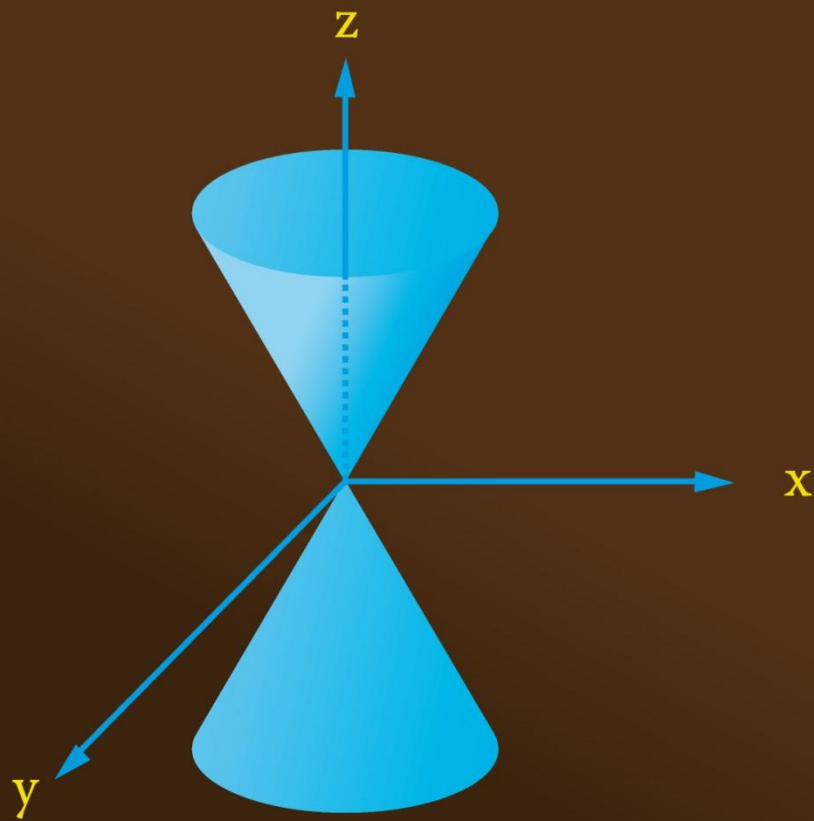




QUANTENCHEMIE UND CHEMISCHE BINDUNG

Günter Baars

Quantenchemie und Chemie farbiger Stoffe

Modul 2: Quantenchemie und chemische Bindung

Korrekturat: Dina Baars, Bern

Illustrationen: Christoph Frei, Bern

3. Auflage 2026

Inhaltsverzeichnis

1	Die Wellenfunktionen des Wasserstoff-Atoms	5
1.1	Lernziele	5
1.2	Der Grundzustand; die 1s-Wellenfunktion	5
1.2.1	Die ψ_{1s} -Wellenfunktion (Amplitudenfunktion)	5
1.2.2	Die Energien des Wasserstoff-Atoms im Grundzustand	8
1.2.3	Die Elektronendichte ψ^2_{1s} ; die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{1s} \cdot dV$	10
1.2.4	Die radiale Elektronendichte ψ^2_{1s} ; die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{1s} \cdot 4\pi r^2 dr$	12
1.2.5	Aufenthaltsraum (Ladungswolke, Elektronenwolke) des Elektrons im Grundzustand des Wasserstoff-Atoms	15
1.2.6	Zusammenfassung des Grundzustands ψ_{1s} des Wasserstoff-Atoms	16
1.3	Der erste angeregte Energiezustand des Wasserstoff-Atoms (2. Energiezustand); die ψ_{2s} Wellenfunktion	17
1.3.1	Die Wellenfunktion ψ_{2s}	17
1.3.2	Die Energie des Wasserstoff-Atoms im ersten angeregten Energiezustand ψ_{2s}	20
1.3.3	Die Elektronendichte ψ^2_{2s} ; die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{2s} \cdot dV$	21
1.3.4	Die radiale Elektronendichte ψ^2_{2s} ; die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{2s} \cdot 4\pi r^2 dr$	22
1.3.5	Zusammenfassung des ersten angeregten Zustands ψ_{2s}	24
1.4	Der erste angeregte Energiezustand des Wasserstoff-Atoms (2. Energiezustand); die 2p-Wellenfunktionen	25
1.4.1	Darstellung von Raumpunkten in Polarkoordinaten	25
1.4.2	Die Wellenfunktionen ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} und ψ_{2p_z}	27
1.4.3	Die Energie des Wasserstoff-Atoms im ersten angeregten Zustand (die drei ψ_{2p} -Wellenfunktionen)	32
1.4.4	Die Elektronendichten ψ^2_{2p} ; die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\psi^2_{2p} \cdot dV$	33
1.4.5	Die radialen Elektronendichten ψ^2_{2p} ; die radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\psi^2_{2p} \cdot 4\pi r^2 dr$	36
1.4.6	Zusammenfassung des ersten angeregten Zustands ψ_{2p} des Wasserstoff-Atoms	38
1.5	Die höheren Energiezustände	39
1.6	Die Wellenfunktionen im Überblick	42
1.7	Übungen mit Lösungen zum Kapitel 1	44
2	Die Atombindung im Wasserstoff-Molekül	50
2.1	Lernziele	50
2.2	Der bindende Zustand	50
2.3	Der antibindende Zustand	53
2.4	Das Orbitalenergieschema	54
2.5	Übungen mit Lösungen zum Kapitel 2	55

3	Mehrelektronensysteme	59
3.1	Lernziele	59
3.2	Die Wellenfunktionen in höheren Atomen: Atomorbitale	59
3.3	Von Atom- zu Molekülorbitalen; σ - und π -Bindungen	63
3.4	Moleküle der Elemente der 2. Periode	66
3.4.1	Das Li ₂ -Molekül	67
3.4.2	Das Be ₂ -Molekül	67
3.4.3	Die B ₂ -, C ₂ - und N ₂ -Moleküle	68
3.4.4	Die O ₂ -, F ₂ - und Ne ₂ -Moleküle	69
3.4.5	Die CO- und NO-Moleküle	71
3.5	Übungen mit Lösungen zum Kapitel 3	73
4	Anhang	77
4.1	Konstanten, Zeichen, Einheiten und Formeln	77
4.2	Herleitung der Wellenfunktion ψ_{1s} ; Berechnung der kinetischen, potenziellen und Gesamtenergie des Wasserstoff-Atoms im Grundzustand	81
4.3	Die Einheit für ψ am Beispiel der Wellenfunktion ψ_{1s}	90
4.4	Berechnung der Wahrscheinlichkeit, das Elektron eines Wasserstoff-Atoms im Innern einer Kugel mit verschiedenen Radien anzutreffen	91

1 Die Wellenfunktionen des Wasserstoff-Atoms

1.1 Lernziele

Die Schülerinnen und Schüler

1. kennen die Wellenfunktionen der ersten beiden Energiezustände des Wasserstoff-Atoms.
2. wissen qualitativ, wie hoch die Wahrscheinlichkeit ist, ein Elektron in einem bestimmten Abstand vom Atomkern anzutreffen.
3. sind in der Lage, einen Überblick über mögliche Energiezustände des Wasserstoff-Atoms zu geben.

1.2 Der Grundzustand des Wasserstoff-Atoms

Im Grundzustand besitzt das Wasserstoff-Atom eine minimale Gesamtenergie. Sein Elektron lässt sich, gemäss dem Welle-Teilchen-Dualismus, als dreidimensionale stehende Welle beschreiben. Um die potenzielle, kinetische und Gesamtenergie des Systems zu erhalten, muss man dem Wasserstoff-Elektron eine Wellenfunktion zuordnen, aus der man dann mithilfe der Schrödinger-Gleichung die gesuchten Werte erhält.

1.2.1 Die ψ_{1s} -Wellenfunktion (Amplitudenfunktion)

Die Wellenfunktion ψ_{1s}

Funktionen für Elektronen-Materiewellen stellen einen Zusammenhang zwischen der Amplitude ψ (psi) und dem Elektronenabstand r zum Atomkern her. Gemäss der Aussage von Max Born (1882-1970) ist das Quadrat der Wellenamplitude ψ ein Mass für die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron in einem bestimmten Raumbereich anzutreffen (Elektronendichte; Modul „Wellen, Licht und Elektronen“, Abschnitt 3.3).

$$\psi^2 = \frac{dW}{dV} \quad (\psi: \text{Amplitude der Materiewelle; } W: \text{Wahrscheinlichkeit; } V: \text{Raumvolumen})$$

Ist also die Wellenfunktion ψ bekannt, so muss die Antreffwahrscheinlichkeit für das Elektron im Abstand 0 bis ∞ den Wert 1 annehmen. Aufgrund der Coulomb-Kräfte (elektrostatische Anziehungskräfte zwischen Elektron und Atomkern) ist ausserdem die Antreffwahrscheinlichkeit umso kleiner, je weiter das Elektron vom Kern entfernt ist. Diese beiden Tatsachen sowie die minimale Energie sind die Voraussetzungen dafür, die Wellenfunktion ψ_{1s} für das Wasserstoff-Atom im Grundzustand zu „finden“ (Abschnitt 4.2). Dabei handelt es sich um eine abklingende Exponentialfunktion, die die Abhängigkeit der Amplitude ψ vom Abstand Elektron-Atomkern beschreibt. Nahe am Kern erreicht die Amplitude ein Maximum, wird dann mit zunehmenden Abstand kleiner und geht im Unendlichen gegen null. Die Funktion besitzt weder eine Nullstelle noch negative Werte für ψ .

Wellenfunktion für das Elektron im Wasserstoff-Atom (Grundzustand):

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

a_0 : = $0.53 \cdot 10^{-10}$ m (Bohrscher Radius)

e : Eulersche Zahl = 2.718...

r : Abstand des Elektrons vom Atomkern

ψ : Amplitude der Materiewelle

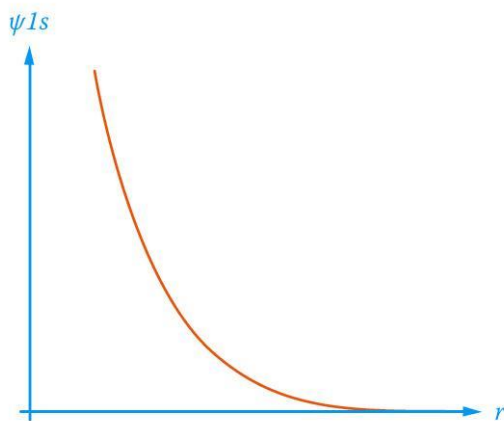


Abb. 1.1 Grafische Darstellung der Wellenfunktion ψ_{1s}

Da die Wellenfunktion ψ_{1s} nur von der Variablen r abhängt, ist der Verlauf der Kurve nach allen Raumrichtungen gleich. Somit lässt sich die Funktion auf einfache Weise räumlich darstellen. Dabei kennzeichnet man den Abstand r_1 eines bestimmten Funktionswerts (z. B. $\psi = 0.01$) vom Atomkern und dreht das Koordinatensystem in der Zeichenebene um den Ursprung (in der Abb. 1.5 um jeweils 22.5°). r_1 liegt nun auf einem Kreis (Abb. 1.3). Wird die Drehung nach allen Raumrichtungen vorgenommen, so erhält man eine Kugeloberfläche, d. h. den geometrischen Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi = 0.01$ (Abb. 1.4). Für jeden Wert der Wellenfunktion ψ_{1s} existiert eine solche Kugeloberfläche. Je kleiner der Wert ψ ist, desto weiter ist die Kugeloberfläche vom Koordinatennullpunkt, dem Atomkern, entfernt. Damit lässt sich das Symbol ψ_{1s} folgendermaßen interpretieren: Die 1 bedeutet den 1. Energiezustand des Elektrons im Wasserstoff-Atom (Grundzustand); s: der geometrische Ort aller Punkte mit dem gleichen Funktionswert ψ ist eine Kugeloberfläche.

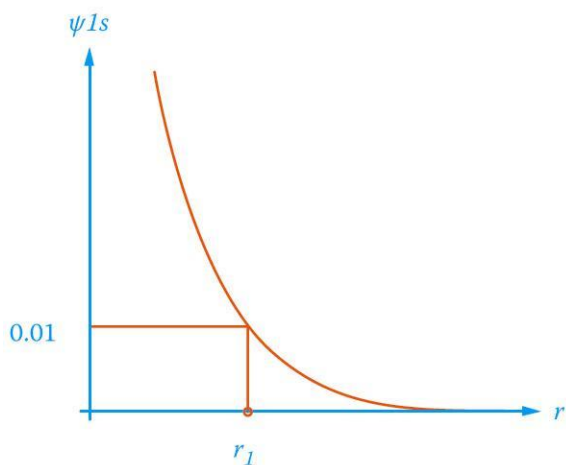


Abb. 1.2 Darstellung des Funktionswerts $\psi = 0.01$ mit dem Abstand r_1 vom Atomkern

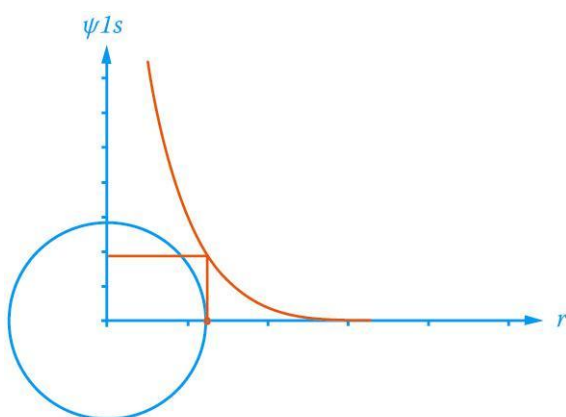


Abb. 1.3 Darstellung des Funktionswerts $\psi = 0.01$ im Abstand r_1 in der Zeichenebene durch Drehung des Koordinatensystems (schematisch)



Abb. 1.4 Geometrischer Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi = 0.01$ im Abstand r_1 vom Atomkern (räumliche Darstellung)

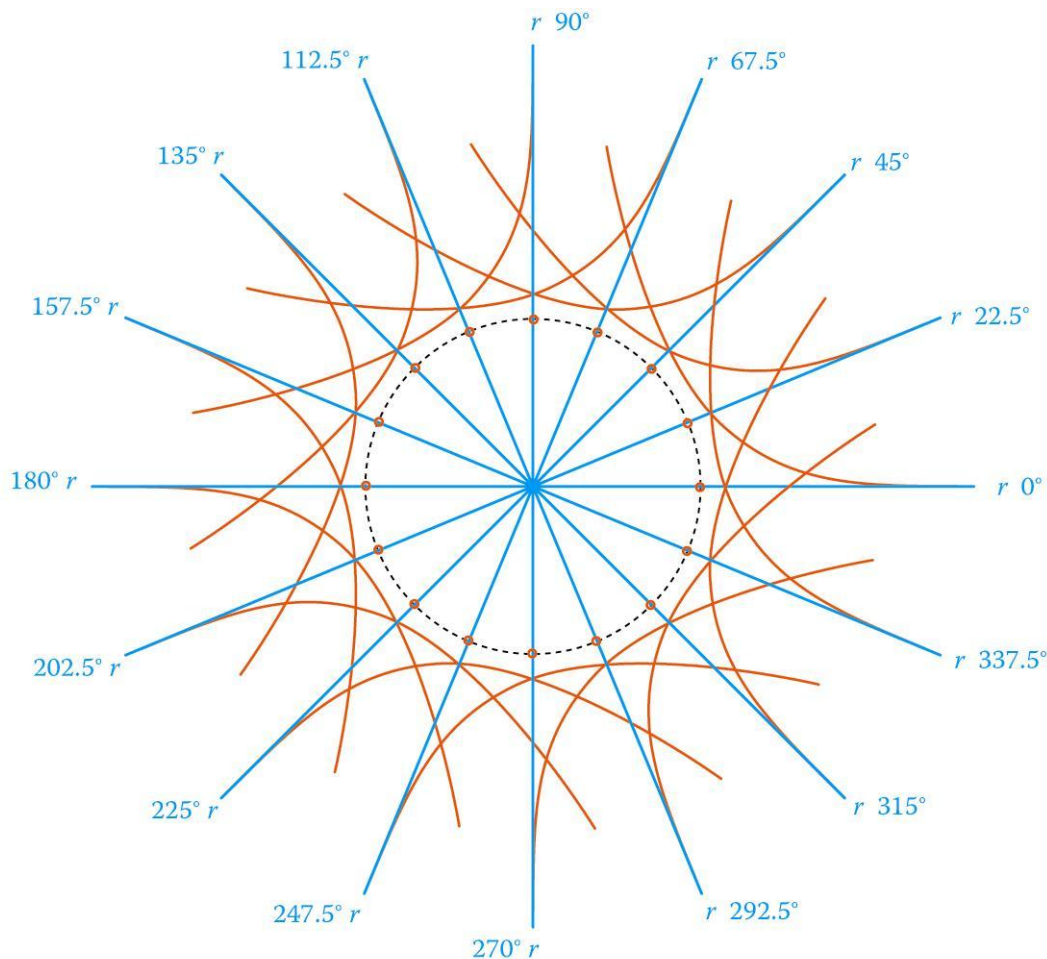


Abb. 1.5 Darstellung des Funktionswerts $\psi_{1s} = 0.01$ im Abstand r_1 vom Atomkern in der Zeichenebene durch Drehung der r -Achse um jeweils 22.5°

Den Funktionswerten (den Amplituden) ψ der Elektronenmateriewelle kommt keinerlei physikalische Bedeutung zu. Sie lassen sich nicht beobachten und damit auch nicht messen: sie sind nicht observabel. Hingegen kann man mit der Wellenfunktion ψ_{1s} die kinetische, potenzielle und Gesamtenergie des Wasserstoff-Atoms im Grundzustand berechnen (Abschnitt 4.2).

1.2.2 Die Energien des Wasserstoff-Atoms im Grundzustand

Durch Einsetzen der Funktion ψ_{1s} in die Schrödinger-Gleichung (Abschnitt 4.1) erhält man die Gesamtenergie, die potenzielle und die kinetische Energie des Elektrons im H-Atom für den Grundzustand [in der Quantentheorie ist das Zeichen für die kinetische Energie T und für die potenzielle Energie V . Da das Elektron dauernd in Bewegung ist (Teilchenmodell!), handelt es sich dabei um die **mittlere** kinetische bzw. potenzielle Energie ($\bar{T}$; $\bar{V}$):

Wellenfunktion für den 1s-Zustand:
$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Kinetische Energie des Elektrons:
$$\bar{T}_{1s} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0}$$

Potenzielle Energie des Elektrons: $\overline{V}_{1s} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0}$

Gesamtenergie des H-Atoms: $E_{1s} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0}$

Für

$$a_0 = 4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \frac{h^2}{4\pi^2 \cdot m \cdot e^2} = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m } [0.53 \text{ \AA}]$$

und

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js (Planck'sches Wirkungsquantum)}$$

$$\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{J}^{-1} \text{m}^{-1} \text{ (Dielektrizitätskonstante)}$$

$$e_0 = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ As (Elektronenladung)}$$

erhält man:

Gesamtenergie: $E_{1s} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = -21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [-13.586 \text{ eV}]$

Mittlere kinetische Energie: $\overline{T}_{1s} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = 21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [+13.586 \text{ eV}]$

Mittlere potenzielle Energie: $\overline{V}_{1s} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0} = -2 \cdot 21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [-27.172 \text{ eV}]$

Mittlere Geschwindigkeit des Elektrons (berechnet aus der kinetischen Energie des Elektrons): $\overline{v} = \sqrt{\frac{2 \cdot \overline{T}}{m}} = 2.22 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

Die auf diese Weise berechnete Gesamtenergie (-13.586 eV) entspricht der Ionisierungsenergie des Elektrons, wenn dieses vom Atom abgespalten wird (vgl. Tabelle mit den Ionisierungsenergien in einem Chemielehrbuch). Um Proton und Elektron eines Wasserstoff-Atoms voneinander zu trennen, ist also ein Energieaufwand von $21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ nötig, die umgekehrt frei werden, wenn sich die beiden Teilchen (Teilchenmodell des H-Elektrons!) zu einem Wasserstoff-Atom verbinden. Dabei geht man von der Energie gleich null aus, wenn Proton und Elektron einen unendlich grossen Abstand voneinander aufweisen und in Ruhe sind. Je näher sie sich kommen, desto grösser wird die kinetische Energie des Elektrons (Teilchenmodell) und umso geringer die potenzielle Energie. Die Zunahme der kinetischen Energie ist dabei geringer als die Abnahme der potenziellen Energie.

Interessant ist die Tatsache, dass die mittlere potenzielle Energie $\overline{V}$ des H-Atoms im Grundzustand betragsmässig der Summe von kinetischer und Gesamtenergie entspricht, oder, anders formuliert, dass die kinetische Energie (wiederum betragsmässig) gleich der Gesamtenergie ist.

Dieser Zusammenhang wird als Virialtheorem bezeichnet (Abb. 1.5; das Virialtheorem ist auch für Moleküle gültig, wenn sie eine minimale Energie aufweisen):

Virialtheorem:

$$E = -\bar{T}$$

$$\bar{V} = 2 \cdot \bar{T} = \bar{T} + E$$

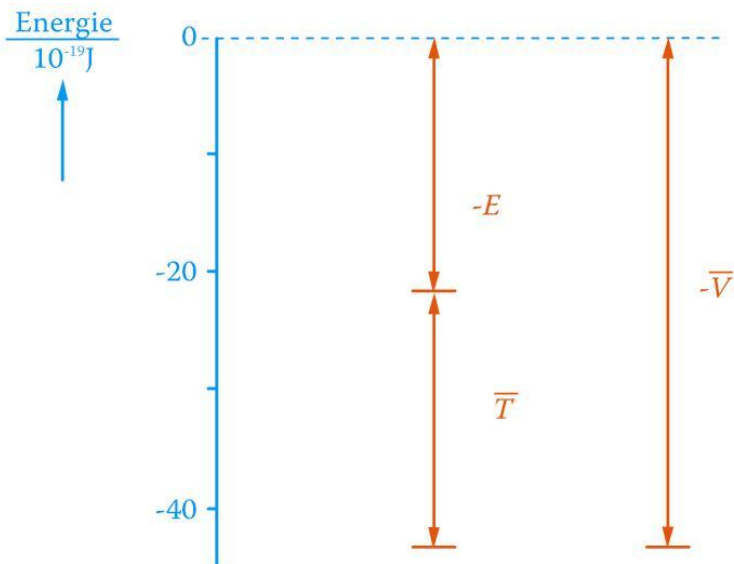


Abb. 1.6 Gesamtenergie E , potenzielle Energie $\bar{V}$ und kinetische Energie $\bar{T}$ für das Wasserstoff-Atom im Grundzustand

1.2.3 Die Elektronendichte $\psi^2 1s$; die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 1s \cdot dV$

Das Quadrat der Wellenamplitude $\psi 1s$ ist ein Mass für die Wahrscheinlichkeit, das Elektron eines Wasserstoff-Atoms in einem minimalen Raumbereich dV anzutreffen (Modul 1, Abschnitt 3.3). Da es sich um die Antreffwahrscheinlichkeit pro Volumenelement handelt, spricht man von der Elektronendichte. Mit dieser Grösse lässt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Volumenelement dV mit unterschiedlichem Abstand r vom Kern berechnen.

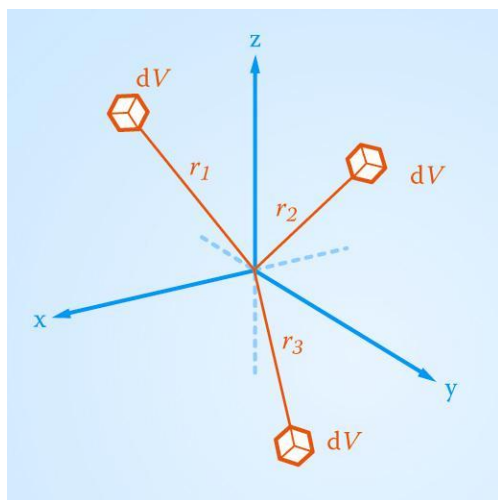


Abb. 1.7 Drei Volumenelemente dV in unterschiedlichen Raumrichtungen und Abständen vom Atomkern

- Elektronendichte: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Grundzustand eines H-Atoms in Bezug zum Volumenelement dV :

$$\psi^2 1s = \frac{dW}{dV} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

(dW : Aufenthaltswahrscheinlichkeit; dV : Volumenelement)

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit: Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem Volumenelement dV im Abstand r vom Atomkern anzutreffen:

$$\psi^2 1s \cdot dV = dW = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot dV$$

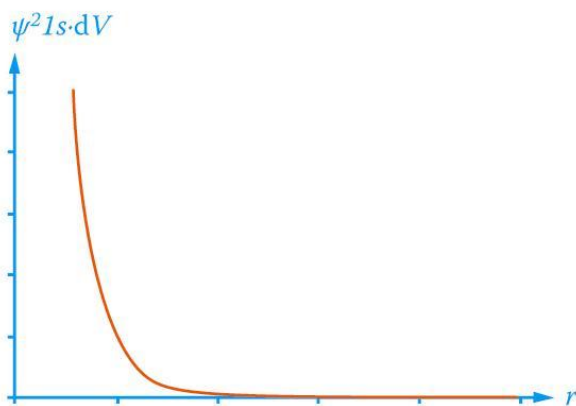


Abb. 1.8 Grafische Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 1s \cdot dV$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Elektron in der Nähe des Kerns in einem Raumelement dV aufhält, ist sehr gross. Aufgrund der anziehenden Kräfte zwischen Elektron und Proton war dies auch zu erwarten. Mit zunehmendem Abstand nimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nach allen Raumrichtungen rasch ab und geht im Unendlichen gegen null. Dies entspricht einer kugelsymmetrischen Elektronendichte.

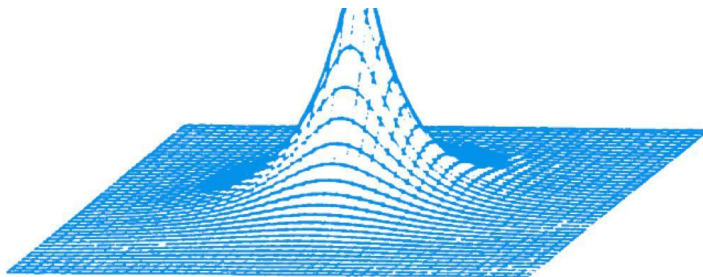


Abb. 1.9 Computerdarstellung der Elektronendichte $\psi^2 1s$

Die Visualisierung der Elektronendichte erfolgt oft durch die sogenannte Wolkendarstellung. Dabei betrachtet man das Elektron als Teilchen (Teilchenmodell), von dem viele Momentaufnahmen übereinander projiziert wurden.

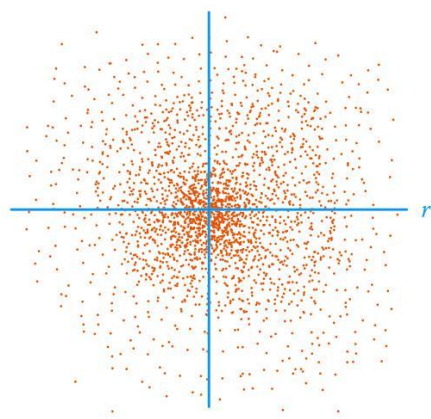


Abb. 1.10 Wolkendarstellung der Elektronendichte $\psi^2 1s$

Die Elektronendichte vergleicht die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in gleichen Volumenteilen dV , wenn diese verschiedene Abstände vom Atomkern aufweisen.

1.2.4 Die radiale Elektronendichte $\psi^2 1s$; die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 1s \cdot 4\pi r^2 dr$

Die Elektronendichte in einem bestimmten Abstand vom Atomkern ist in allen Raumrichtungen gleich gross. Die Addition der Volumenelemente dV mit diesem Abstand ergibt eine Kugelschale mit dem Durchmesser dr , in der die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons überall gleich gross ist. In diesem Fall handelt es sich um die radiale Elektronendichte, die eine Aussage über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in Bezug auf das Volumen einer Kugelschale ($4\pi r^2 dr$; r = Abstand der Kugelschale zum Atomkern) macht. Daraus wiederum lässt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einer Kugelschale mit beliebigem Abstand r vom Atomkern berechnen (radiale Elektronendichte).

- Radiale Elektronendichte: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons eines Wasserstoff-Atoms in einer Kugelschale mit dem Durchmesser dr in Bezug auf das Volumen einer Kugelschale $V = 4\pi r^2 dr$ in unterschiedlichen Abständen vom Atomkern:

$$\frac{dW}{4\pi r^2 dr} = \psi^2 1s = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

dW : Aufenthaltswahrscheinlichkeit; r : Abstand Kern-Kugelschale; dr : Durchmesser Kugelschale; $4\pi r^2 dr$: Volumen einer Kugelschale mit dem Durchmesser dr

- Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit: Wahrscheinlichkeit, das Elektron im Grundzustand eines H-Atoms in einer Kugelschale mit dem Durchmesser dr im Abstand r vom Atomkern anzutreffen:

$$dW = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} 4\pi r^2 \cdot dr$$

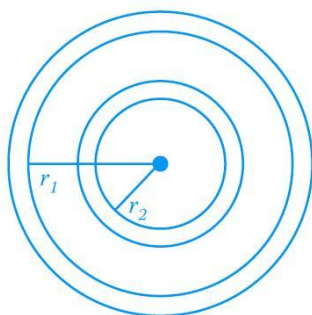


Abb. 1.11 Schnitt durch zwei Kugelschalen mit dem Durchmesser dr im Abstand r_1 bzw. r_2 vom Atomkern

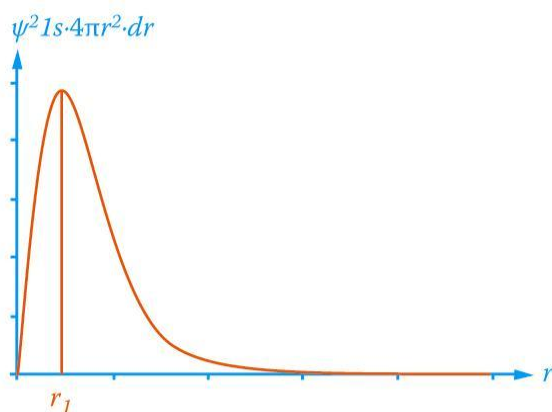


Abb. 1.12 Grafische Darstellung der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 1s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$ des Elektrons im Grundzustand eines Wasserstoff-Atoms

Die Funktion für die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit setzt sich aus den beiden Teilfunktionen

$\frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$ und $4\pi r^2 dr$ zusammen. Bei kleinen Zahlen für r nimmt der Wert von $4\pi r^2 dr$ rascher zu (Parabelfunktion) als derjenige für $\frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$ abnimmt (abklingende Exponentialfunktion).

Wird der Abstand r_1 erreicht, ist es gerade umgekehrt.

Da im Atomkern $r = 0$ ist, gibt es dort keine Kugelschale. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist null. Sie steigt dann bis zum Maximum bei r_1 , nimmt schliesslich stetig ab und geht im Unendlichen gegen null. Mithilfe der Infinitesimalrechnung lässt sich r_1 berechnen (1. Ableitung der

Funktion $dW = \psi^2 1s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} ; \text{Aufgabe 1.2})$.

Das Wasserstoff-Atom, wie auch alle anderen Elektronensysteme, hat keine Grenzen! Obwohl das Elektron des H-Atoms an verschiedenen Orten anzutreffen ist, hält es sich mit grösster Wahrscheinlichkeit in einer Kugelschale mit dem Durchmesser dr im Abstand r_1 vom Kern auf. Diese Kugelschale entspricht der K-Schale des Wasserstoff-Atoms.

Eine Elektronenschale ist eine Kugelschale, in der die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit ein Maximum erreicht.

Der Verlauf der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit lässt sich veranschaulichen, indem man über die Wolkendarstellung der Elektronendichte einmal Querschnitte von Volumenelementen dV und ein andermal Querschnitte von Kugelschalen legt (Abb. 1.13 und 1.14). Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem Volumenelement dV anzutreffen, nimmt mit zunehmendem Abstand zum Atomkern ab, da die Elektronendichte kleiner wird. Anders ist es, wie bereits erwähnt, bei der radialen Elektronendichte. Sie nimmt zwar nach aussen hin ab, die Volumina der Kugelschalen nehmen hingegen zu. Damit ergibt sich ein Maximum im Abstand r_1 .

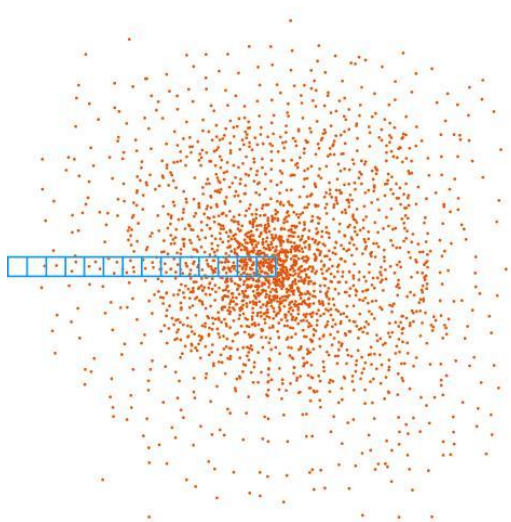
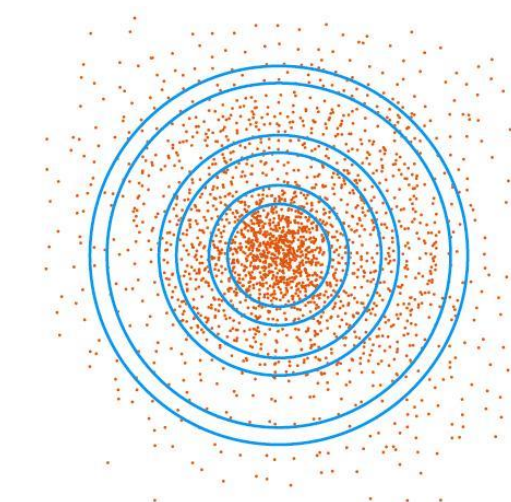


Abb. 1.13 Wolkendarstellung der Elektronendichte mit darüber gelegten Querschnitten von Volumenelementen dV



*Anzahl Punkte:
 Innerster Ring: ca. 58
 Mittlerer Ring: ca. 66
 Äusserster Ring ca. 42*

Abb. 1.14 Wolkendarstellung der Elektronendichte mit darüber gelegten Querschnitten von Kugelschalen mit gleichem Durchmesser

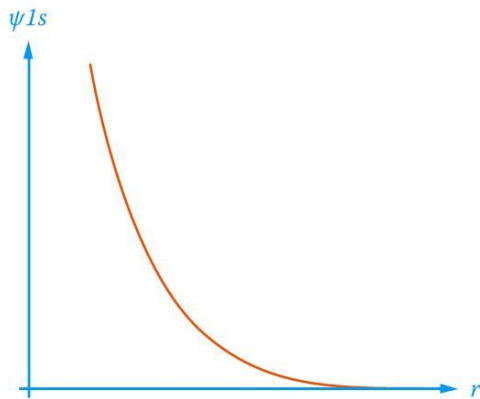
1.2.5 Aufenthaltsraum (Ladungswolke, Elektronenwolke) des Elektrons im Grundzustand des Wasserstoff-Atoms

Von der Elektronendichte leiten sich die in der chemischen Fachliteratur verwendeten Begriffe Elektronenwolke, Ladungswolke und Aufenthaltsraum her. Alle drei Ausdrücke werden im gleichen Sinne und, z. B. bei der Verteilung der Aussenelektronen eines Atoms, auf einfach und doppelt besetzte Elektronenwolken verwendet. Dabei handelt es sich um einen Raum, in dem ein Elektron mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit (z. B. 95%) anzutreffen ist, ohne dass man auf die detaillierte Elektronendichteverteilung in diesem Raum eingeht (zur Berechnung der Grösse dieser Räume vgl. Abschnitt 4.4). Die Abbildung der Wellenfunktion ψ_{1s} für einen bestimmten Funktionswert im Abstand r (eine Kugeloberfläche) lässt sich somit umdeuten als die Begrenzung einer Kugel, in der sich das Elektron mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit aufhält.

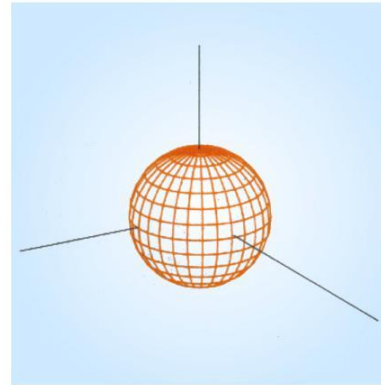


Abb. 1.15 Elektronenwolke (Ladungswolke, Aufenthaltsraum), in der sich das Elektron des Wasserstoff-Atoms mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit (z. B. 95%) aufhält

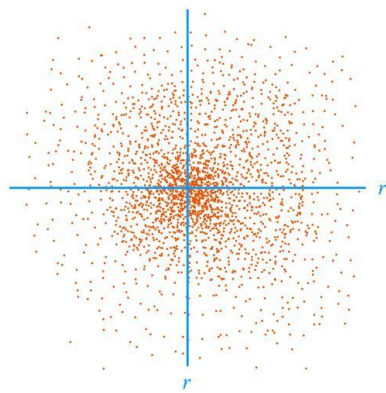
1.2.6 Zusammenfassung des Grundzustands ψ_{1s} des Wasserstoff-Atoms



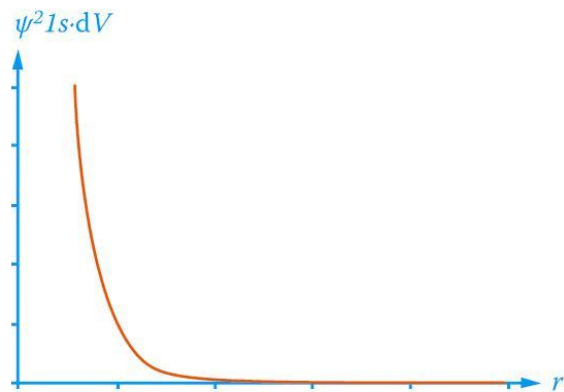
Grafische Darstellung der Wellenfunktion ψ_{1s}



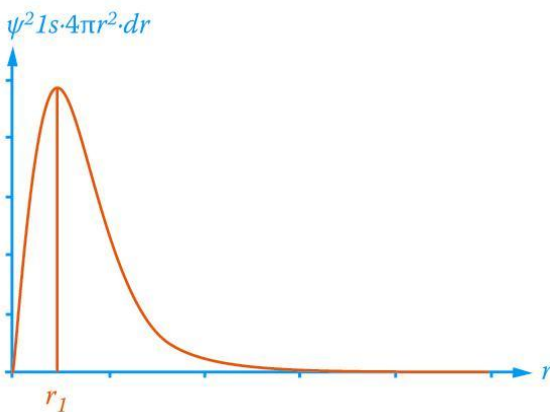
Geometrischer Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi = 0,01$



Wolkendarstellung der Elektronendichte



Grafische Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{1s} dV$



Grafische Darstellung der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{1s} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$ des Elektrons



Elektronenwolke (Ladungswolke, Aufenthaltsraum), in der sich das Elektron des Wasserstoff-Atoms mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit (z. B. 95%) aufhält

1.3 Der erste angeregte Energiezustand des Wasserstoff-Atoms (2. Energiezustand); die ψ_{2s} -Wellenfunktion

Energiezufuhr bewirkt den Übergang eines Wasserstoff-Atoms in den ersten angeregten Zustand, in dem das Elektron mit vier Wellenfunktionen beschrieben wird:

- Eine 2s Wellenfunktion (ψ_{2s}), bei der Punkte mit dem gleichen Funktionswert wie bei ψ_{1s} auf Kugeloberflächen liegen (ψ_{2s} : 2 für den zweiten Energiezustand und s für Kugeloberflächen als geometrische Örter).
- Drei 2p Wellenfunktionen (ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} , ψ_{2p_z}), bei denen Punkte mit gleichen Funktionswerten im Bereich der drei Koordinatenachsen liegen ($\psi_{2p_{x,y,z}}$: 2 für den zweiten Energiezustand; p für hantelförmige geometrische Örter und x, y, z für die Koordinatenachsen; Abschnitt 1.4).

Diese vier Wellenfunktionen beschreiben gleichzeitig (!) das eine Elektron im 2. Energiezustand eines Wasserstoff-Atoms. Daraus resultiert insgesamt eine kugelsymmetrische, homogene Verteilung der negativen Ladung.

1.3.1 Die Wellenfunktion ψ_{2s}

Die vollständige Wellenfunktion für das Elektron im zweiten Energiezustand des Wasserstoff-Atoms hat folgende Form:

$$\psi_{2s} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$a_0 = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ (Bohrscher Radius)
 e : Eulersche Zahl = 2.718...
 r : Abstand des Elektrons vom Atomkern
 ψ : Amplitude der Materiewelle

Im Gegensatz zur Wellenfunktion ψ_{1s} besitzt ψ_{2s} eine Nullstelle wenn $r = 2a_0$, da damit der 3. Klammerausdruck null wird:

$$\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right): \text{für } r = 2a_0 \text{ daraus folgt: } 1 - 1 = 0 \text{ und damit } \psi_{2s} = 0$$

Auch bei den auf einer Feder mit einem Exzenter erzeugten stehenden Wellen beobachtete man im 2. Schwingungszustand einen Knoten zwischen den beiden Aufhängevorrichtungen der Feder (Modul „Wellen, Licht und Elektronen“, Abb. 1.13). Anders als im Grundzustand des Wasserstoff-Atoms nehmen die Funktionswerte von ψ_{2s} negative Werte an, wenn $r > 2a_0$, da dann der 3. Klammerausdruck negativ wird.

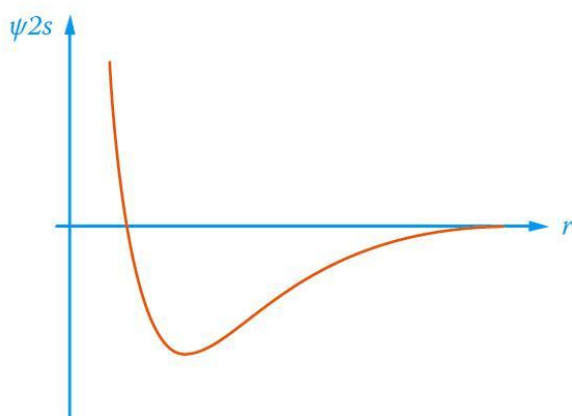


Abb. 1.16 Grafische Darstellung der Wellenfunktion ψ_{2s}

Die Werte (die Amplituden) der Funktion ψ_{2s} sind in der Nähe des Atomkerns hoch, sinken dann auf null ab, werden negativ, erreichen ein Minimum, steigen dann wieder an und gehen im Unendlichen gegen null. Da die Wellenfunktion ψ_{2s} , ebenso wie ψ_{1s} , nur vom Abstand r (Kern-Elektron) abhängt, ist ihr Verlauf nach allen Raumrichtungen gleich. Ihre räumliche Darstellung ist damit auch in diesem Fall sehr einfach. Man kennzeichnet wiederum den Abstand r_1 eines bestimmten Funktionswerts ψ_1 (z. B. 0.01) vom Atomkern und dreht das Koordinatensystem in der Ebene um den Ursprung (Abb. 1.17 und 1.18; in Abb. 1.18 um jeweils 22.5°). Drehung in alle Raumrichtungen führt zu Kugeloberflächen, den geometrischen Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi = 0.01$. Da der Wert 0.01 in drei verschiedenen Entfernungen vom Atomkern auftritt, ergeben sich daraus drei Kugeloberflächen, auf denen die Amplitude den Wert ± 0.01 besitzt, auf der innersten mit positivem und auf den beiden äussersten mit negativen Werten (Abb. 1.19). Eine Kugeloberfläche, auf der alle Punkte den Funktionswert $\psi = 0$ aufweisen, wird als Knotenfläche bezeichnet. Dies ist im Abstand $r = 2a_0$ der Fall (Abb. 1.20).

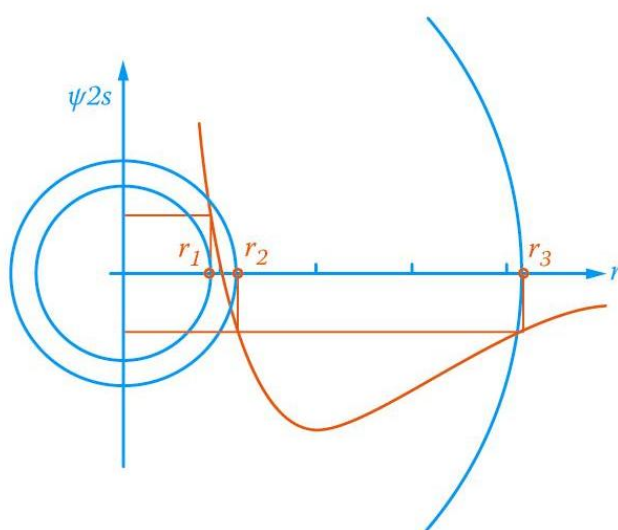


Abb. 1.17 Darstellung des Funktionswerts $\psi_{12s} = \pm 0.01$ in den Abständen r_1 , r_2 und r_3 in der Zeichenebene durch Drehung des Koordinatensystems

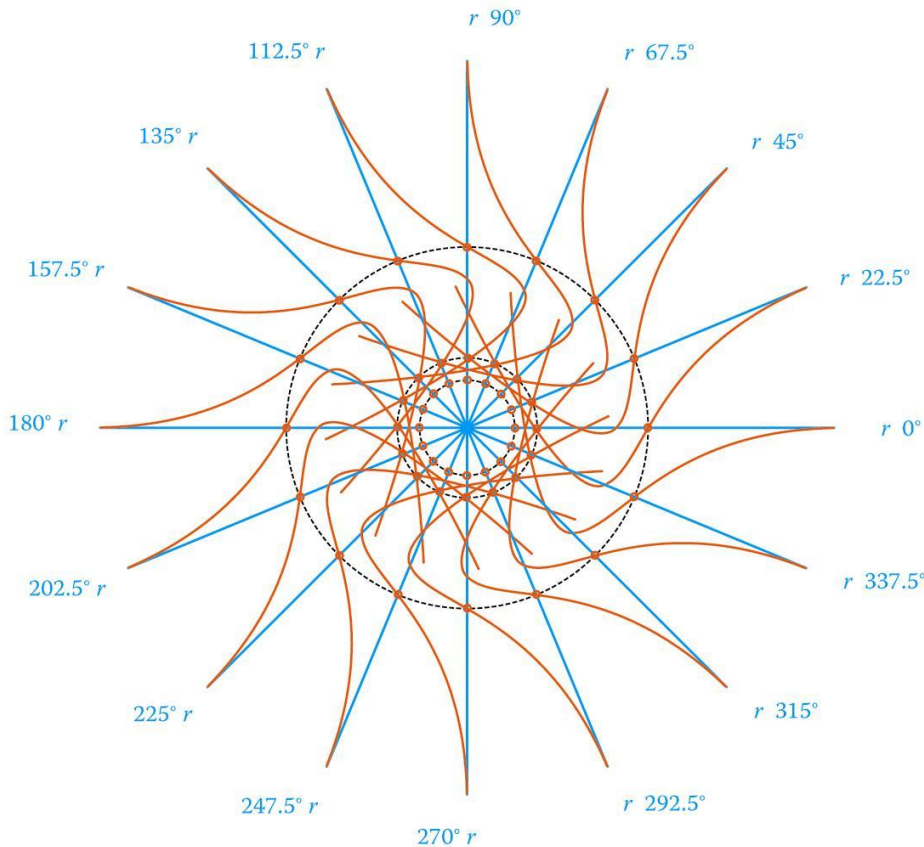


Abb. 1.18 Darstellung des Funktionswerts $\psi_{12s} = \pm 0.01$ in den Abständen r_1 , r_2 und r_3 vom Atomkern in der Zeichenebene durch Drehung des Koordinatensystems um jeweils 22.5°

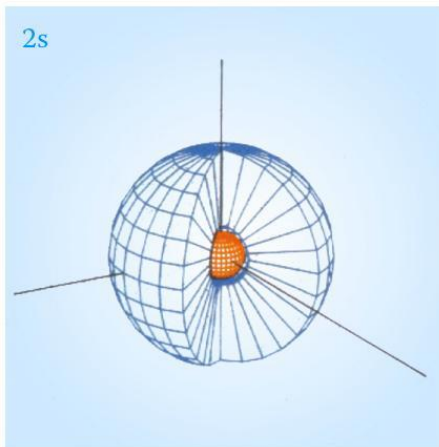


Abb. 1.19 Geometrischer Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi_{12s} = \pm 0.01$ in den Abständen r_1 , r_2 und r_3 vom Atomkern (räumliche Darstellung)

Die Darstellung in Abb. 1.19 ist so gewählt, dass alle drei Kugeloberflächen sichtbar sind, wobei die zweite von unten her gesehen werden muss. Die Farben geben die Vorzeichen der Funktionswerte an: rot bedeutet positiv und blau negativ. Die rote Kugeloberfläche entspricht dem positiven, die darauf folgende dem negativen Wert 0.01. Dazwischen findet der Vorzeichenwechsel über die hier nicht gezeichnete Knotenfläche ($\psi_{2s} = 0$; Abb. 1.20) statt. Die äusserste Kugelober-

fläche, die am weitesten vom Kern entfernt ist, ist ebenfalls der geometrische Ort aller Punkte für $\psi = -0.01$.

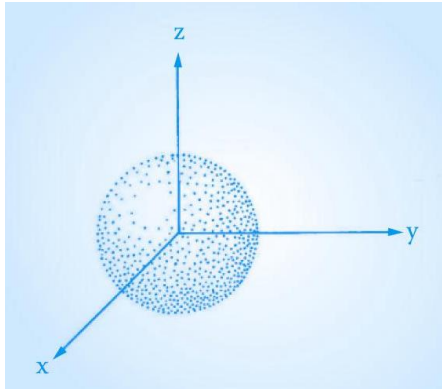


Abb. 1.20 Knotenfläche der ψ_{2s} -Wellenfunktion als Kugeloberfläche

1.3.2 Die Energie des Wasserstoff-Atoms im ersten angeregten Energiezustand 2s

Mithilfe der Schrödinger-Gleichung lässt sich, wie im Grundzustand, die Energie des ersten angeregten Zustands berechnen:

Gesamtenergie E_{2s} des Wasserstoff-Atoms im ersten angeregten Zustand:

$$E_{2s} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{4}$$

E_{2s} : Energie des Wasserstoff-Atoms im ersten angeregten Zustand

$a_0 = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ (Bohrscher Radius)

$\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$ (Dielektrizitätskonstante)

$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ (Elektronenladung)

Ein Vergleich mit der Gesamtenergie E_{1s} zeigt, dass die Energie $\frac{1}{4}$ mal so gross ist wie die Energie im Grundzustand des Wasserstoff-Atoms. Da der Zahlenwert ein negatives Vorzeichen aufweist, ist die Energie des Systems entsprechend höher.

$$E_{1s} = -\frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = -21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [-13.586 \text{ eV}]$$

Gesamtenergie im Grundzustand: $E_{1s} = -21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [-13.586 \text{ eV}]$

Gesamtenergie im ersten angeregten Zustand: $E_{2s} = -5.45 \cdot 10^{-19} \text{ J } [-3.40 \text{ eV}]$

1.3.3 Die Elektronendichte ψ^2_{2s} ; die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{2s} \cdot dV$

Um ein Mass für die Wahrscheinlichkeit zu erhalten, das Elektron des Wasserstoff-Atoms im 1. angeregten Zustand im Raumbereich dV anzutreffen (Abschnitt 1.2.3), muss man die Wellenfunktion ψ_{2s} quadrieren. Aus der dabei erhaltenen Elektronendichte lässt sich, wie bei ψ^2_{1s} , die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Volumenelement dV berechnen:

- Quadrat der Wellenfunktion ψ_{2s} :

$$\psi^2_{2s} = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{\frac{-r}{a_0}}$$

- Elektronendichte: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in Bezug zum Volumenelement dV :

$$\psi^2_{2s} = \frac{dW}{dV} = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{\frac{-r}{a_0}}$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit: Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem Volumenelement dV im Abstand r vom Atomkern anzutreffen:

$$\psi^2_{2s} \cdot dV = dW = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{\frac{-r}{a_0}} \cdot dV$$

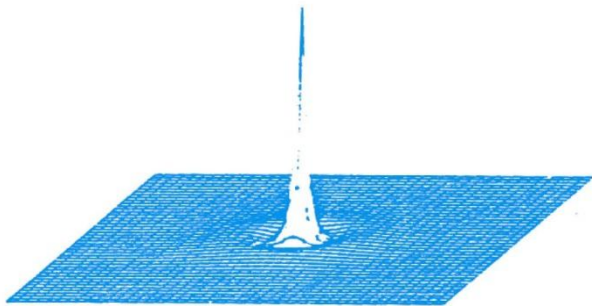


Abb. 1.21 Computerdarstellung der Elektronendichte $\frac{dW}{dV} = \psi^2_{2s}$

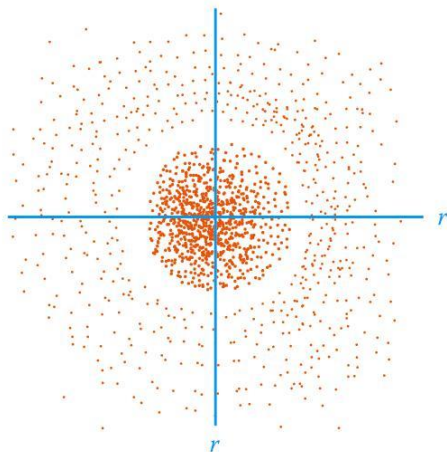


Abb. 1.22 Wolkendarstellung der Elektronendichte $\frac{dW}{dV} = \psi^2_{2s}$

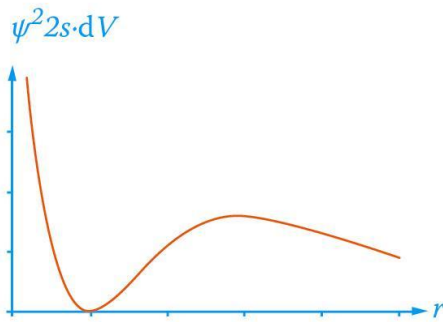


Abb. 1.23 Grafische Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2s \cdot dV$

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem Volumenelement dV in der Nähe des Kerns anzutreffen, ist sehr gross. Mit zunehmendem Abstand Elektron-Kern geht die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf null zurück, erreicht anschliessend ein kleines Maximum, um im Unendlichen gegen null zu gehen.

1.3.4 Die radiale Elektronendichte $\psi^2 2s$; die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2s \cdot 4\pi r^2 dr$

Die radiale Elektronendichte macht eine Aussage über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in Kugelschalen mit dem Durchmesser dr im Abstand r vom Atomkern (Abschnitt 1.2.4).

- Radiale Elektronendichte: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in Bezug auf eine Kugelschale mit dem Durchmesser dr und dem Volumen $V = 4\pi r^2 dr$.

$$\psi^2 2s = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{\frac{-r}{a_0}}$$

r : Abstand Kern-Kugelschale; dr : Durchmesser Kugelschale

- Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit: Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einer Kugelschale mit dem Durchmesser dr im Abstand r vom Atomkern anzutreffen.

$$\psi^2 2s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{\frac{-r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$4\pi r^2 dr$: Volumen einer Kugelschale mit dem Durchmesser dr im Abstand r vom Atomkern

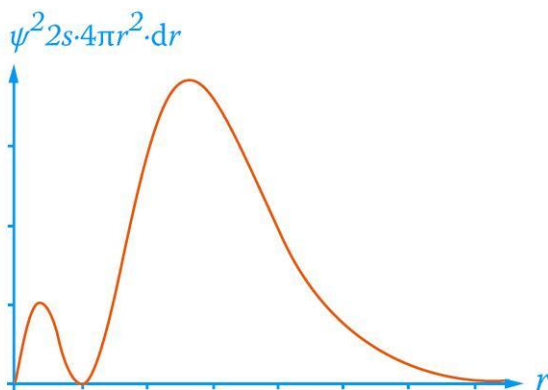
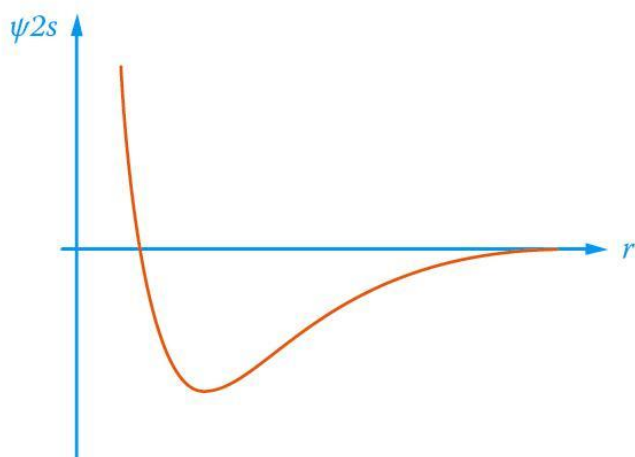


Abb. 1.24 Grafische Darstellung der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$ des Elektrons im ersten angeregten Zustand eines Wasserstoff-Atoms

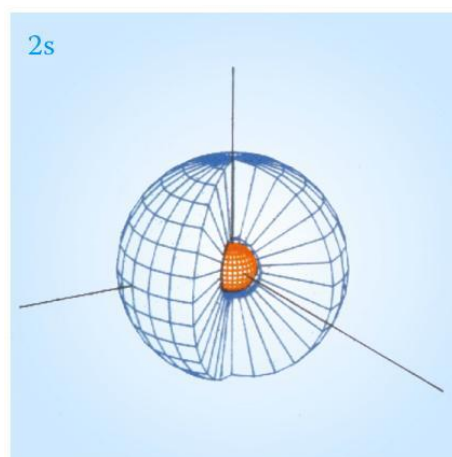
Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron im Atomkern anzutreffen ist gleich null ($r = 0$). Sie steigt dann auf ein kleines Maximum und erreicht anschliessend wiederum den Wert null. Mit weiter zunehmendem Abstand r wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit maximal, um im Unendlichen gegen null zu gehen.

Im ersten angeregten Zustand $2s$ des Wasserstoff-Atoms kann sich das Elektron an beliebigen Orten mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten aufhalten. Eine Ausnahme bildet die Kugelschale, in der die Aufenthaltswahrscheinlichkeit null ist ($r = 2a_0$). Die beiden Maxima entsprechen den Elektronenschalen 1 und 2, wobei sich das Elektron häufiger in der 2. Schale aufhält, entsprechend dem ersten angeregten Zustand bzw. dem zweiten Energiezustand.

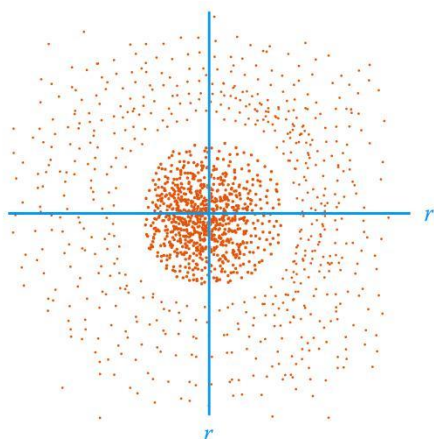
1.3.5 Zusammenfassung des ersten angeregten Zustands ψ_{2s}



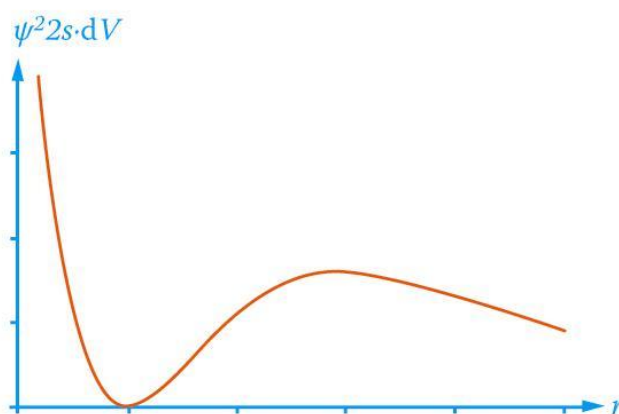
Grafische Darstellung der Wellenfunktion ψ_{2s}



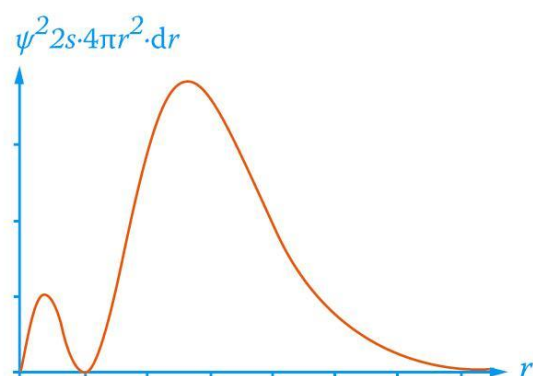
Geometrischer Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi_{12s} = \pm 0.01$



Wolkendarstellung der Elektronendichte



Grafische Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{2s} dV$



Grafische Darstellung der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{2s} 4\pi r^2 dr$

1.4 Der erste angeregte Energiezustand des Wasserstoff-Atoms (2. Energiezustand); die 2p-Wellenfunktionen

Die Funktionswerte der drei Wellenfunktionen (ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} , ψ_{2p_z}), mit denen das Elektron im 2. Energiezustand beschrieben werden kann, sind nicht nur vom Abstand r vom Atomkern, sondern auch von der Distanz zu den jeweiligen Koordinatenachsen abhängig. Aus diesem Grund ist es einfacher, Punkte im Raum mit Polarkoordinaten statt mit einem rechtwinkligen kartesischen Koordinatensystem darzustellen.

1.4.1 Darstellung von Raumpunkten in Polarkoordinaten

Mit den Werten der drei Koordinaten x , y und z lassen sich Punkte im Raum eindeutig festlegen. Ihre Lage kann aber auch bestimmt werden, indem man den Abstand r vom Koordinatenursprung und die Winkel zu den Koordinatenachsen verwendet (Polarkoordinaten). Dazu sind die Winkelfunktionen Sinus und Kosinus nötig, die sich anhand des „Einheitskreises“ ($r = 1$) leicht verständlich darstellen lassen.

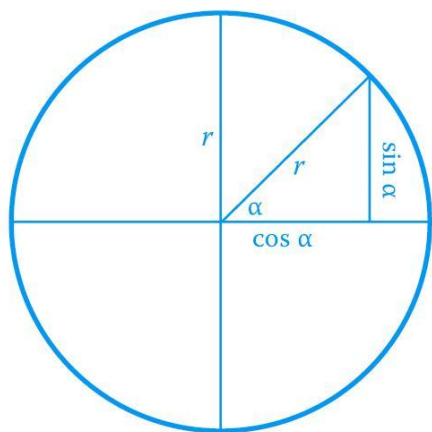


Abb. 1.25 Darstellung der Winkelfunktionen Sinus und Kosinus mit dem Einheitskreis

Die Winkelfunktion Sinus ist definiert als Gegenkathete durch Hypotenuse in einem rechtwinkligen Dreieck, der Kosinus als Ankathete durch Hypotenuse. Der Wert von Sinus ist bei $\alpha = 0^\circ$ 0, nimmt mit grösser werdendem Winkel zu und erreicht das Maximum bei 90° , um wieder auf 0 bei 180° abzusinken. Für 270° bzw. 360° ist der Sinus im Einheitskreis -1 bzw. 0. Die Funktion Kosinus beginnt mit dem Wert 1 bei $\alpha = 0^\circ$.

Tabelle 1.1 Funktionswerte für Sinus und Kosinus bei verschiedenen Winkeln α im Einheitskreis

Winkel α	sin	cos
0°	0	1
90°	1	0
180°	0	-1
270°	-1	0
360°	0	1

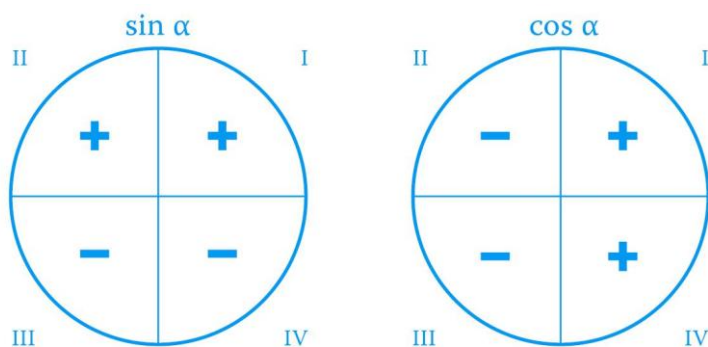
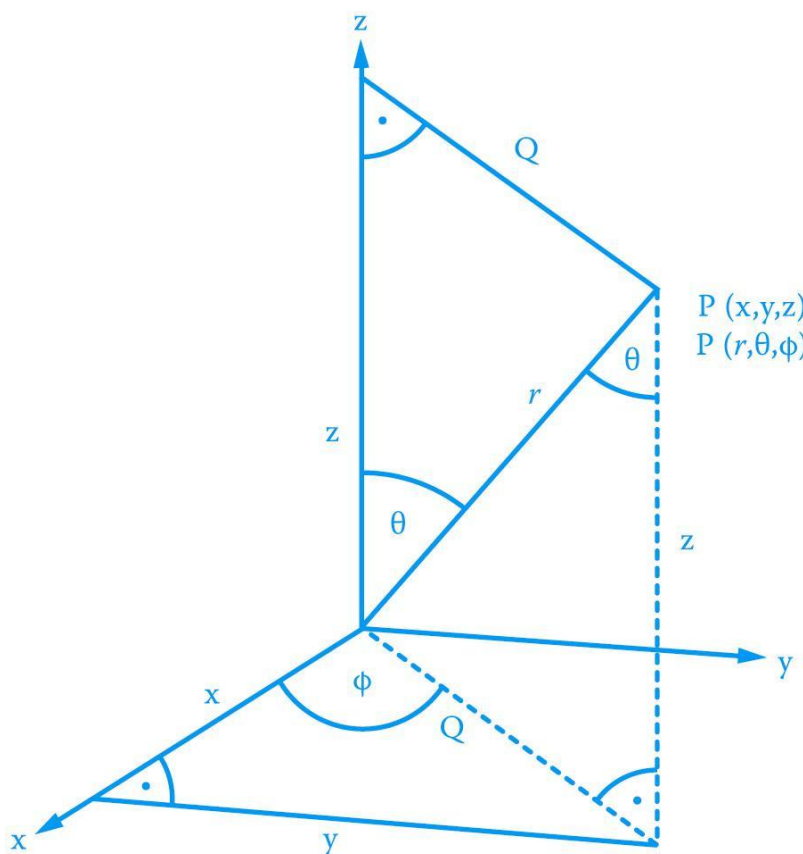


Abb. 1.26 Vorzeichen der Winkel-funktionen Sinus und Kosinus in den vier Winkelfeldern

Abb. 1.27 zeigt einen Punkt P, dessen Lage durch die kartesischen Koordinaten x , y und z sowie den Polarkoordinaten r , φ und θ wiedergegeben wird. Bei r handelt es sich, wie bereits erwähnt, um den Abstand des Zentrums vom Punkt P. Der Winkel φ (phi) beschreibt die Drehung (im Gegenuhrzeigersinn) in der zy -Ebene, ausgehend von der positiven x -Achse, der Winkel θ (theta) den Abstand von der z -Achse.

Abb. 1.27 Angabe der Lage eines Punkts P durch kartesische sowie Polarkoordinaten



Der Vollständigkeit halber seien an dieser Stelle die Formeln zur Umrechnung von kartesischen in Polarkoordinaten angegeben.

Tabelle 1.2 Umrechnung von kartesischen in Polarkoordinaten

Winkelfunktion	Umrechnung
$\cos \theta = \frac{z}{r}$	$z = r \cdot \cos \theta$
$\sin \theta = \frac{Q}{r}$	$Q = r \cdot \sin \theta$
$\sin \varphi = \frac{y}{Q} = \frac{y}{r \cdot \sin \theta}$	$y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi$
$\cos \varphi = \frac{x}{Q} = \frac{x}{r \cdot \sin \theta}$	$x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi$
$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$	
$r \geq 0 \quad 0 \leq \theta \leq \pi$	$0 \leq \varphi \leq 2\pi$

1.4.2 Die Wellenfunktionen ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} und ψ_{2p_z}

Die Wellenfunktionen ψ_{2p} haben folgende Formen:

$$\psi_{2p_x} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_{2p_y} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_{2p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \cos\theta \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Auffällig an diesen drei Wellenfunktionen ist die Tatsache, dass, wie bei der ψ_{2s} -Funktion, neben der Nullstelle im Atomkern ($r = 0$) die Funktionswerte ψ auch negative Vorzeichen haben können. Dies hängt damit zusammen, dass die Winkelfunktionen im III. und IV. ($\sin$) bzw. im II. und III. ($\cos$) Winkelfeld negativ sind (Abb. 1.26). Die sich aus der räumlichen Darstellung der ψ_{2p} -Wellenfunktionen ergebenden Knotenflächen sind in der yz - (ψ_{2p_x}), xz - (ψ_{2p_y}) und xy - (ψ_{2p_z}) Ebene unendlich ausgedehnt (Abb. 1.28).

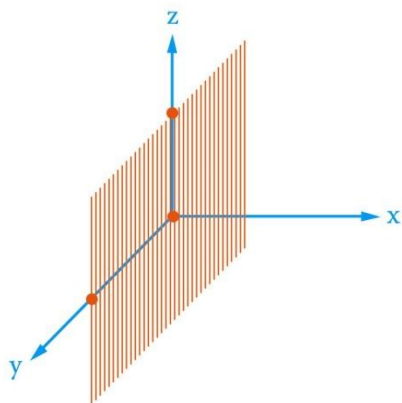


Abb. 1.28 Unendlich ausgedehnte Knotenebene der ψ_{2p_x} -Wellenfunktion

Wenn man die Funktionswerte entlang den Koordinatenachsen betrachtet, so gilt Folgendes:

- **x-Achse:** Die x-Achse liegt in der xy -Ebene, also 90° von der z -Achse entfernt ($\theta = 90^\circ$). Positiver und negativer Teil der x -Achse bilden einen Winkel von 180° , womit für den Winkel φ die Werte 0° bzw. 180° gelten. Damit vereinfacht sich die Winkelfunktion ψ_{2p_x} , da der Sinus von $90^\circ = 1$ und der Kosinus von 0° bzw. 180° jeweils ± 1 beträgt.

$$\psi_{2p_x} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (1) \cdot (\pm 1) \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

- **y-Achse:** Die y -Achse liegt ebenfalls in der xy -Ebene ($\theta = 90^\circ$). Der positive Achsenabschnitt bildet mit der positiven x -Achse einen Winkel von 90° , der negative Teil einen von 270° . Damit sind die Werte für $\varphi = 90^\circ$ bzw. 270° . Der Sinus dieser beiden Winkel beträgt ± 1 . Folglich gilt für die Winkelfunktion ψ_{2p_y} auf der y -Achse:

$$\psi_{2p_y} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (1) \cdot (\pm 1) \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

- z-Achse: Für die z-Achse ist nur der Winkel θ massgebend, der 0° bzw. 180° beträgt. Folglich müssen für den Ausdruck $\sin = 0^\circ$ bzw. $\sin = 180^\circ$ die Werte ± 1 eingesetzt werden:

$$\psi_{2p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (\pm 1) \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

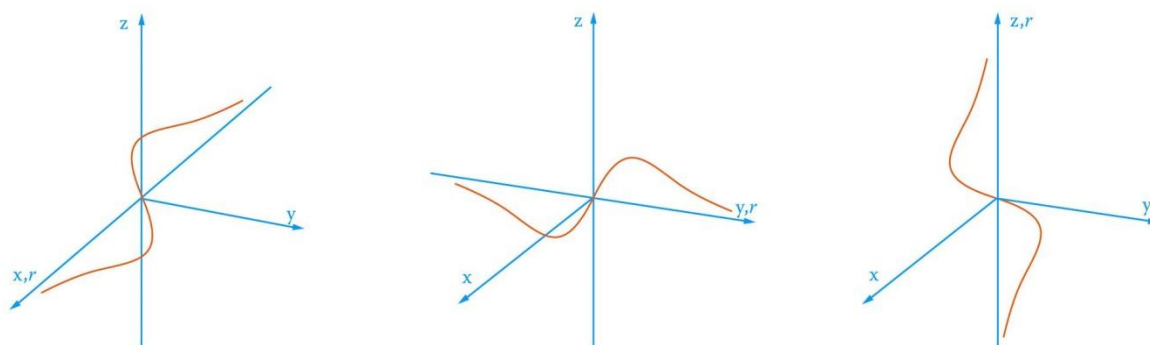


Abb. 1.29 Grafische Darstellung der Wellenfunktionen ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} und ψ_{2p_z} entlang den Koordinatenachsen

„Wandert“ man vom Nullpunkt aus den drei Achsen entlang, so nimmt der Wert für ψ von null ausgehend jeweils in beiden Richtungen auf ein Maximum bzw. Minimum (negative Achsenabschnitte) zu. Er wird dann kleiner und geht im Unendlichen gegen null.

Die Werte ψ aller drei Wellenfunktionen werden mit zunehmendem Abstand von den Achsen immer kleiner. Für ψ_{2p_x} und ψ_{2p_y} ist der Winkel θ immer 90° und damit der Sinus = 1, während mit wachsenden Winkeln φ die Amplituden ψ abnehmen ($\cos\varphi$ für die x- und $\sin\varphi$ für die y-Achse). Entfernt man sich von der z-Achse, so nehmen mit steigendem Winkel θ die Grössen der Amplituden der ψ_{2p_z} -Wellenfunktion entsprechend der Winkelfunktion $\cos\theta$ ab, bis in der xy-Ebene die Werte null erreicht sind. In den folgenden drei Abbildungen ist der Verlauf der Funktion ψ_{2p_z} für die Winkel $\theta = 0^\circ$ bzw. 180° , $\theta = 30^\circ$ bzw. 210° und $\theta = 60^\circ$ bzw. 240° dargestellt.

Für $\theta = 0^\circ$ bzw. 180° gilt ($\cos 0^\circ = 1$; $\cos 180^\circ = -1$):

$$\psi_{2p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (\pm 1) \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

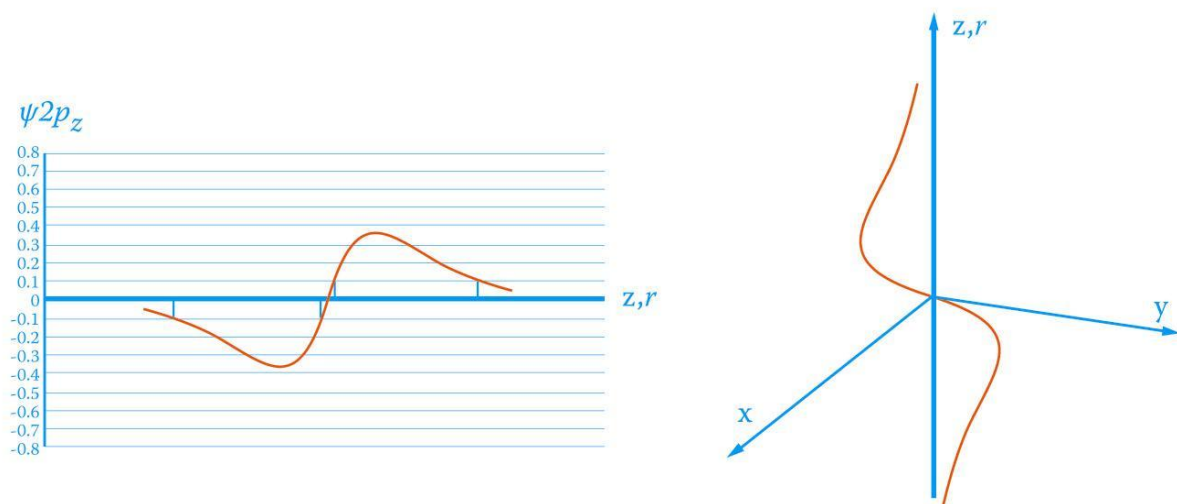


Abb. 1.30 Verlauf der Funktionswerte ψ_{2p_z} auf der z-Achse in Abhängigkeit von r und den Winkeln $\theta = 0^\circ$ und $\theta = 180^\circ$

Geht nun der Winkel θ von 0° gegen 90° , so werden die Funktionswerte entsprechend dem $\cos\theta$ immer kleiner und bei 90° schliesslich null. Zwischen 90° und 180° steigen die Werte für ψ_{2p_z} wiederum an. Am Beispiel der Winkel 30° bzw. 210° und 60° bzw. 240° sei das entsprechende Vorgehen erläutert.

Für $\theta = 30^\circ$ bzw. 210° gilt ($\cos 30^\circ = 0.8$; $\cos 210^\circ = -0.8$):

$$\psi_{2p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (\pm 0.8) \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

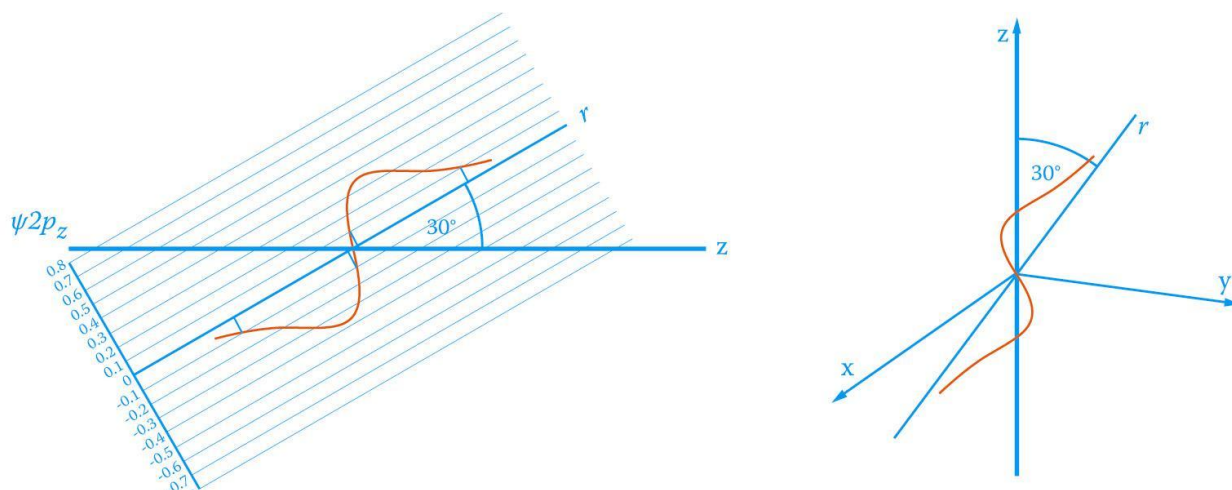


Abb. 1.31 Verlauf der Funktionswerte ψ_{2p_z} , 30° bzw. 210° von der z-Achse entfernt und damit in Abhängigkeit von r und den Winkeln $\theta = 30^\circ$ und $\theta = 210^\circ$

Für $\theta = 60^\circ$ bzw. 240° gilt ($\cos 60^\circ = 0.5$; $\cos 240^\circ = -0.5$):

$$\psi_{2p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (\pm 0.5) \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

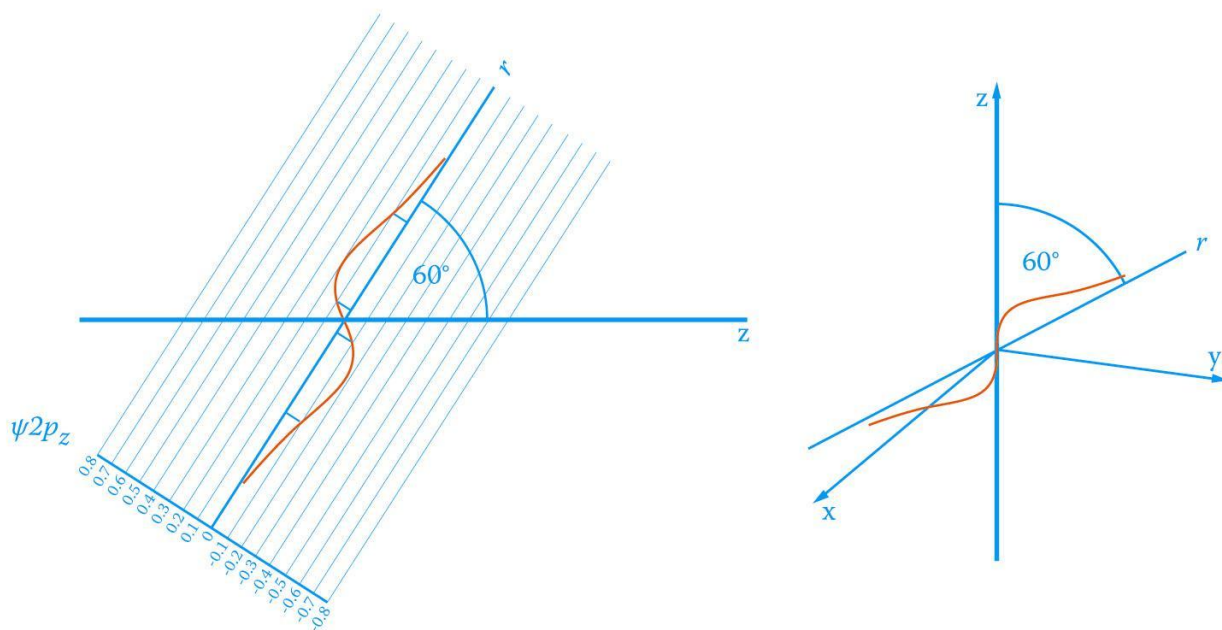


Abb. 1.32 Verlauf der Funktionswerte ψ_{2p_z} , 60° bzw. 240° von der z-Achse entfernt und damit in Abhängigkeit von r und den Winkeln $\theta = 60^\circ$ und $\theta = 240^\circ$

Die in den drei Abbildungen eingetragenen Abstände r für die Werte $\psi_{2p_z} = \pm 0.1$ (je vier pro Abbildung) wurden in Abb. 1.33 übereinander projiziert und miteinander verbunden. Das Ergebnis ist der geometrische Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi_{2p_z} = \pm 0.1$. Lässt man die Kurven um die z-Achse rotieren, erhält man die räumliche Darstellung dieses geometrischen Orts (Abb. 1.34). Entsprechendes Vorgehen für ψ_{2p_x} und ψ_{2p_y} führt zu den gleichen „hantelförmigen“ Figuren. Auf deren Oberfläche ist in allen Punkten der Funktionswert $\psi_{2p} = \pm 0.1$.

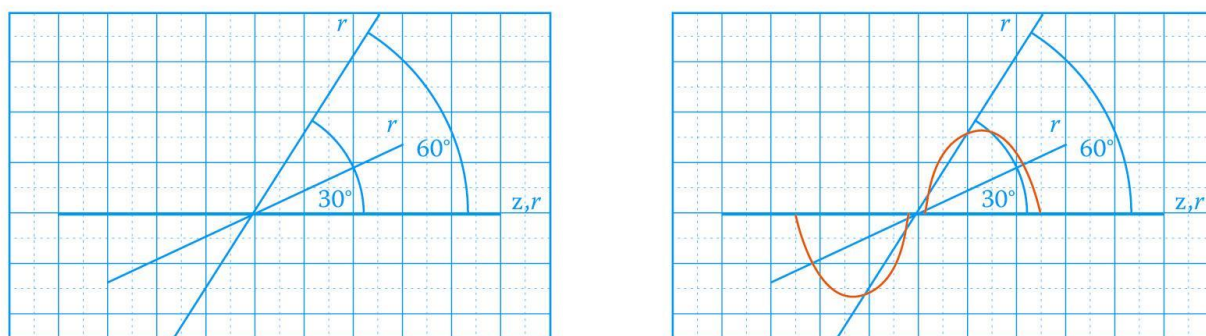
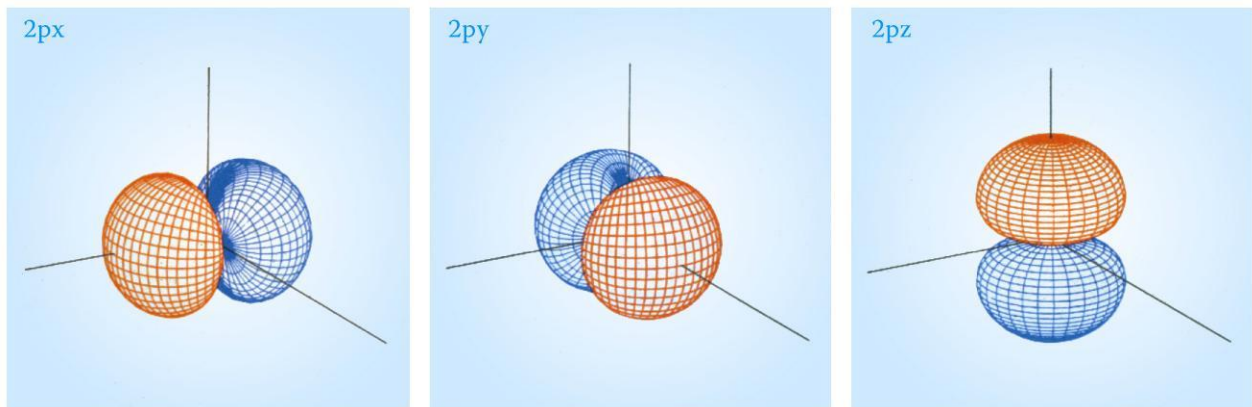


Abb. 1.33 Darstellung des geometrischen Orts aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi_{2p_z} = \pm 0.1$ in der Zeichenebene



1.34 Räumliche Darstellung der geometrischen Örter aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi_{2p} = \pm 0.01$

Das oben skizzierte Verfahren in der Ebene ist nochmals in Abb. 1.35 dargestellt, wobei jeweils um einen Winkel von $22,5^\circ$ gedreht wurde. Abb. 1.36 zeigt die geometrischen Örter verschiedener Werte ψ für ψ_{2p_z} .

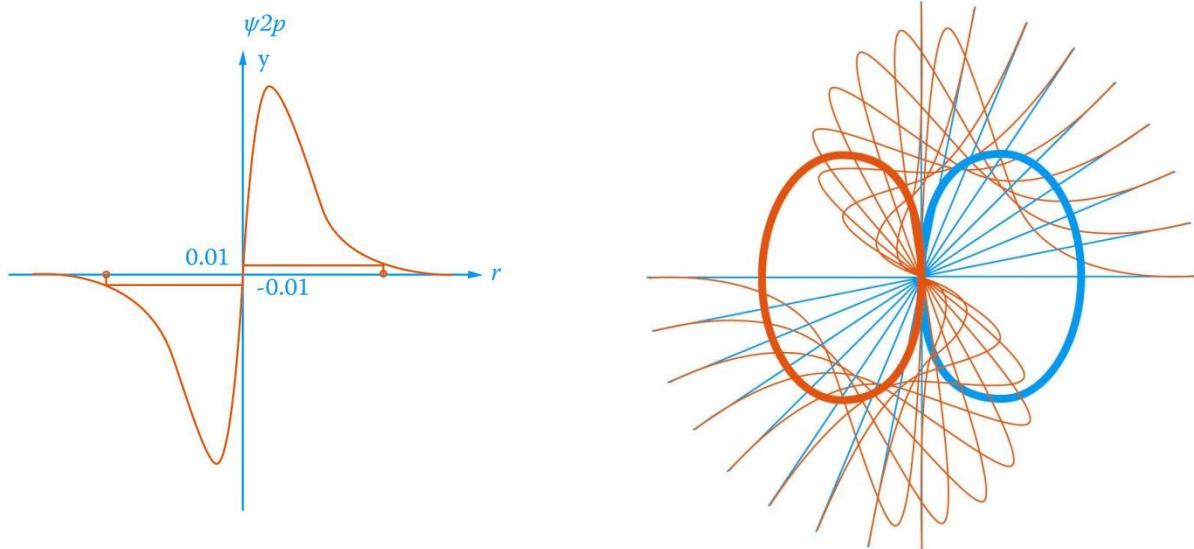


Abb. 1.35 Darstellung des Funktionswerts $\psi_{2p} = \pm 0.01$ durch Drehung des Koordinatensystems um jeweils 22.5°

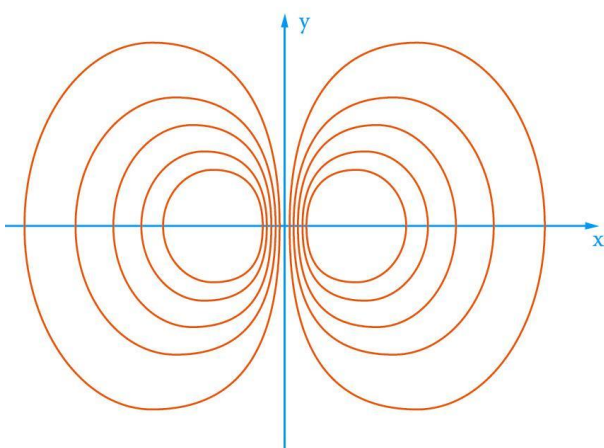


Abb. 1.36 Linien gleicher Amplituden einer ψ_{2p_x} -Wellenfunktion (die ψ_{2p_y} - und ψ_{2p_z} -Wellenfunktionen zeigen den gleichen Verlauf)

1.4.3 Die Energie des Wasserstoff-Atoms im ersten angeregten Zustand (die drei ψ_{2p} Wellenfunktionen)

Die Energie des Wasserstoff-Atoms für die drei ψ_{2p} -Wellenfunktionen lässt sich mit der Schrödinger-Gleichung berechnen. Das Ergebnis stimmt mit demjenigen der Wellenfunktion ψ_{2s} überein. Die ψ_{2s} - sowie die drei ψ_{2p} -Wellenfunktionen sind entartet, sie besitzen dieselbe Energie.

Gesamtenergie E_{2p} des Wasserstoff-Atoms im ersten angeregten Zustand:

$$E_{2p} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{4}$$

E_{2p} : Energie des Wasserstoff-Atoms im 1. angeregten Zustand 2p; a_0 : Bohrscher Radius; ϵ_0 : Dielektrizitätskonstante; e : Elektronenladung

1.4.4 Die Elektronendichten ψ^2_{2p} ; die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\psi^2_{2p} \cdot dV$

Das Quadrat der Wellenfunktionen ψ_{2p} macht eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit, das Wasserstoff-Elektron in einem Raumvolumen dV im Abstand r vom Atomkern anzutreffen. Aus der damit erhaltenen Elektronendichte berechnet sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einem Raumvolumen dV .

Quadrat der Wellenfunktionen ψ_{2p} :

$$\psi^2_{2p_x} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2_{2p_y} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2_{2p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Elektronendichte der Wellenfunktionen ψ_{2p} :

$$\psi^2_{2p_x} = \frac{dW}{dV} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2_{2p_y} = \frac{dW}{dV} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2_{2p_z} = \frac{dW}{dV} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Raumvolumen dV :

$$\psi^2_{2p_x} \cdot dV = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot dV$$

$$\psi^2 2p_y \cdot dV = dW = \left(\frac{3}{4\pi} \right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0} \right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0} \right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot dV$$

$$\psi^2 2p_z \cdot dV = dW = \left(\frac{3}{4\pi} \right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0} \right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0} \right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot dV$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit verläuft entlang den Koordinatenachsen (x: $\theta = 90^\circ$, $\varphi = 0$ bzw. 180° ; y: $\theta = 90^\circ$, $\varphi = 90^\circ$ bzw. 270° ; z: $\theta = 0^\circ$ bzw. 180°) in beiden Richtungen gleich (keine negativen Werte, da die Funktionen quadriert wurden). Im Atomkern ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit null, steigt anschliessend auf ein Maximum und geht dann im Unendlichen gegen null (Abb. 1.38 für die z-Achse). Mit zunehmenden Winkeln θ und φ verringern sich die Werte und werden in den entsprechenden Koordinatenebenen null. Am Beispiel der $\psi^2 2p_z$ -Funktion (nur von einem Winkel abhängig), lässt sich dieser Sachverhalt einfach zeigen (Abb. 1.37 bis 1.39):

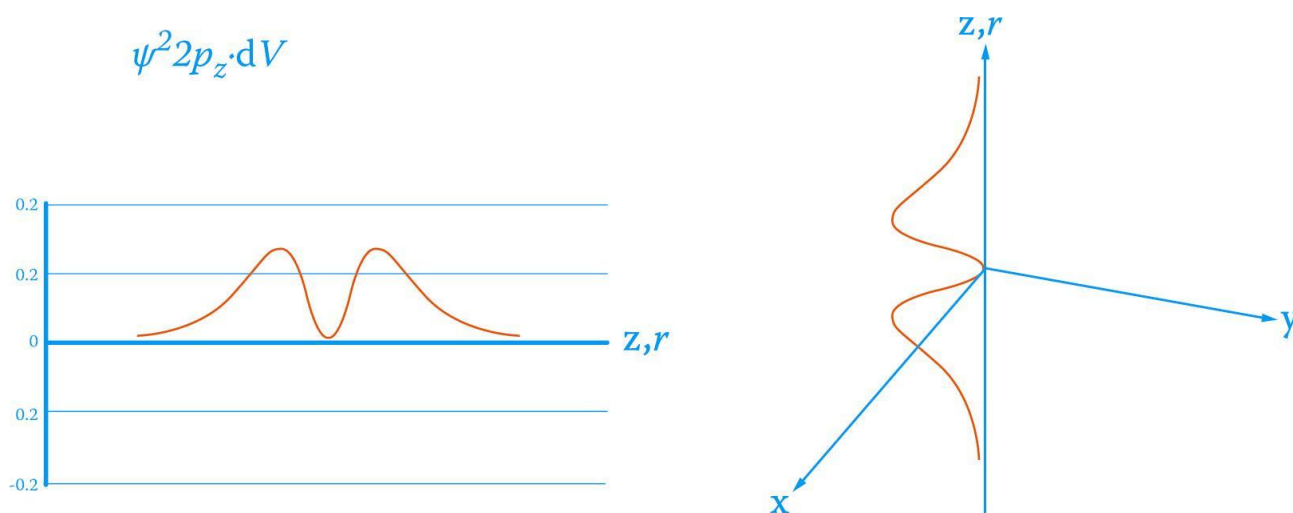


Abb. 1.37 Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2p_z \cdot dV$ auf der z-Achse für $\theta = 0^\circ$ bzw. $180^\circ \Rightarrow \cos = 1$

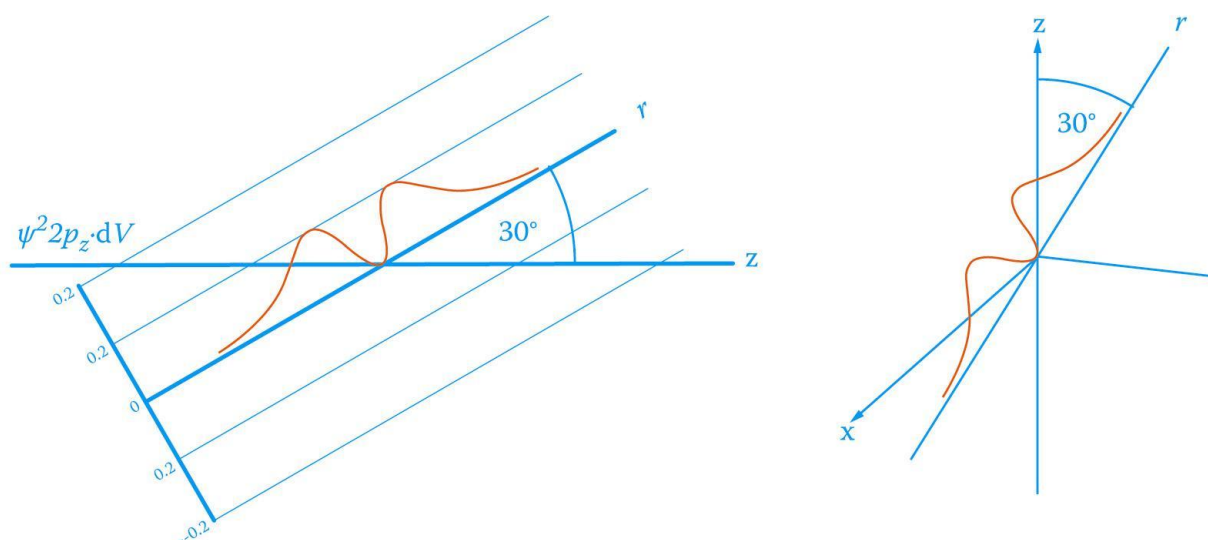


Abb. 1.38 Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2p_z \cdot dV$, 30° von der z-Achse entfernt für $\theta = 30^\circ$ bzw. $150^\circ \Rightarrow \cos = 0.75$

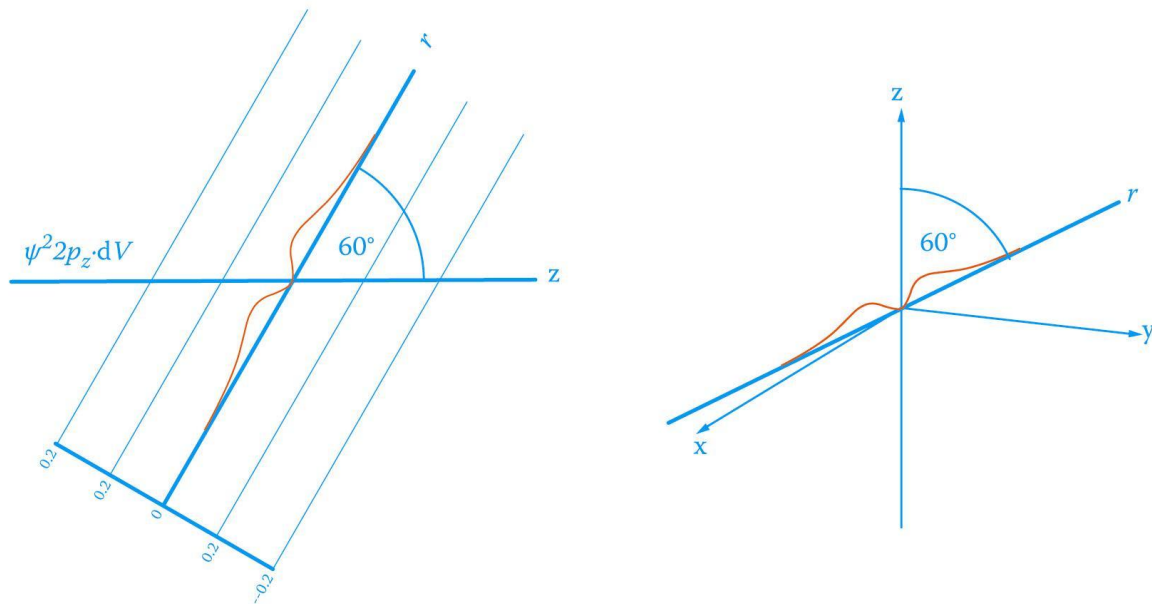


Abb. 1.39 Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2p_z \cdot dV$, 60° von der z-Achse entfernt für $\theta = 60^\circ$ bzw. $120^\circ \Rightarrow \cos = 0.25$

Wie bereits dargelegt, ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Atomkern null ($r = 0$), steigt mit zunehmendem Abstand vom Kern auf ein Maximum an und geht im Unendlichen gegen null. Mit zunehmenden Winkeln θ und ϕ werden die Werte kleiner, bis sie in den entsprechenden Koordinatenebenen null sind (Knotenflächen: xy-Ebene für $\psi^2 2p_z$; yz-Ebene für $\psi^2 2p_x$; xz-Ebene für $\psi^2 2p_y$). Abb. 1.40 zeigt die Wolkendarstellungen der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Elektrons für die Wellenfunktionen $\psi 2p$.

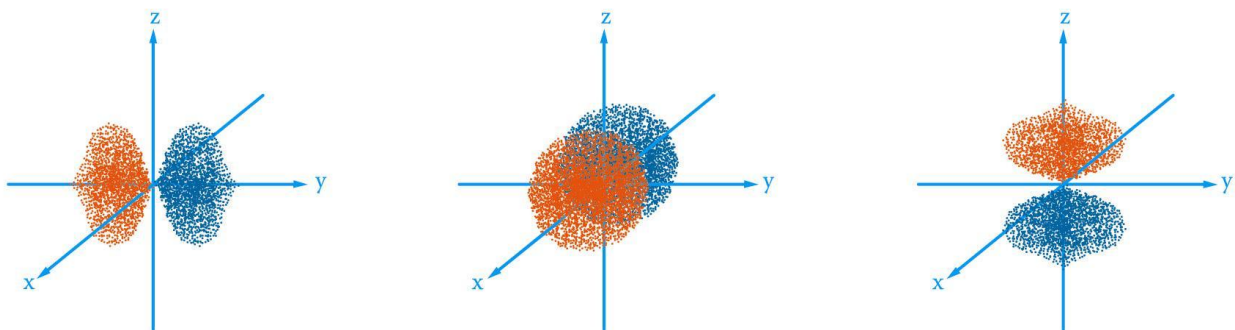


Abb. 1.40 Wolkendarstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\psi^2 2p_x \cdot dV$, $\psi^2 2p_z \cdot dV$ und $\psi^2 2p_y \cdot dV$

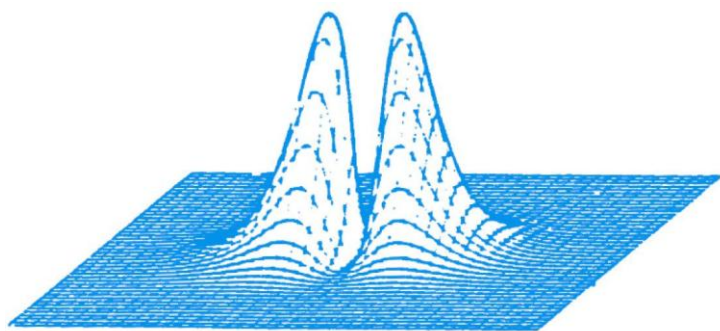


Abb. 1.41 Computerdarstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $\psi^2 2p \cdot dV$

1.4.5 Die radialen Elektronendichten $\psi^2 2p$; die radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\psi^2 2p \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$

Die radiale Elektronendichte $\psi^2 2p$ macht eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit, das Wasserstoff-Elektron pro Volumen einer Kugelschale im Abstand r vom Atomkern anzutreffen. Daraus lässt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einer Kugelschale berechnen.

Radiale Elektronendichten:

$$\psi^2 2p_x = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2 2p_y = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2 2p_z = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeiten:

$$\psi^2 2p_x \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$\psi^2 2p_y \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$\psi^2 2p_z \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

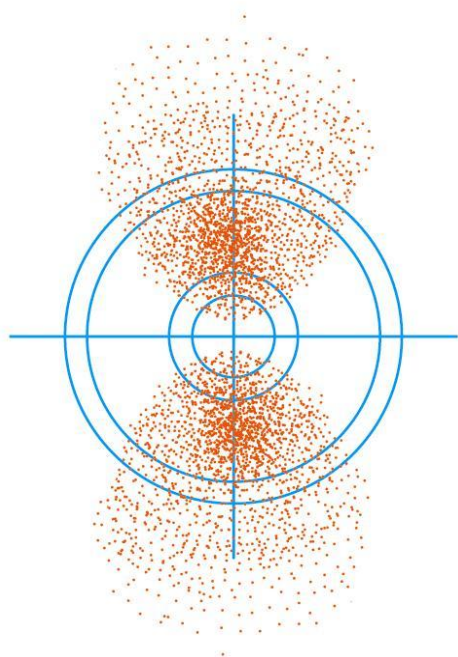


Abb. 1.42 Wolkendarstellung der Elektronendichte ψ^2_{2p} mit dem Querschnitt zweier Kugelschalen des Durchmessers dr

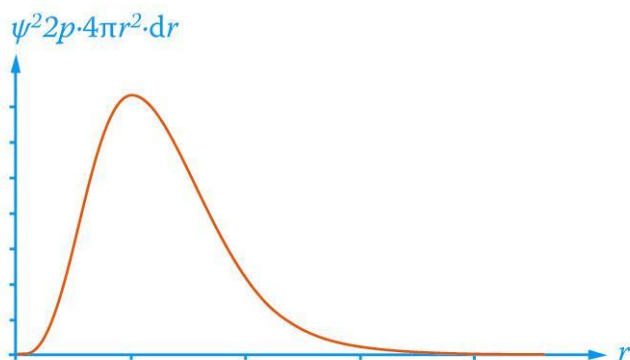
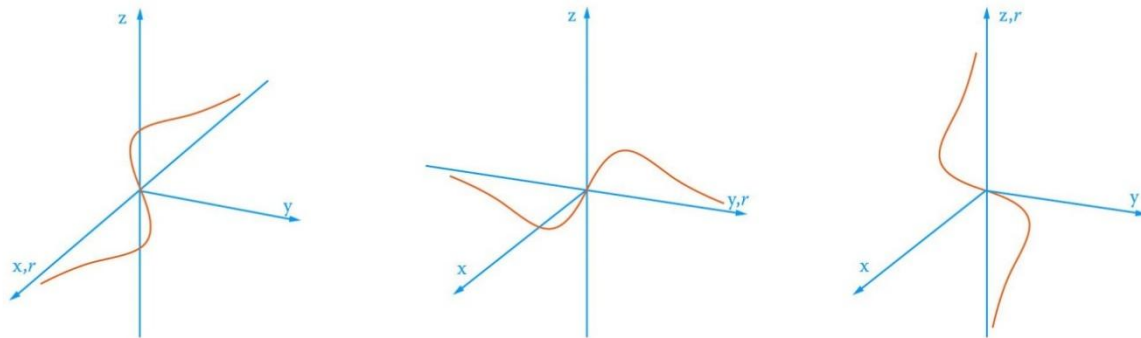


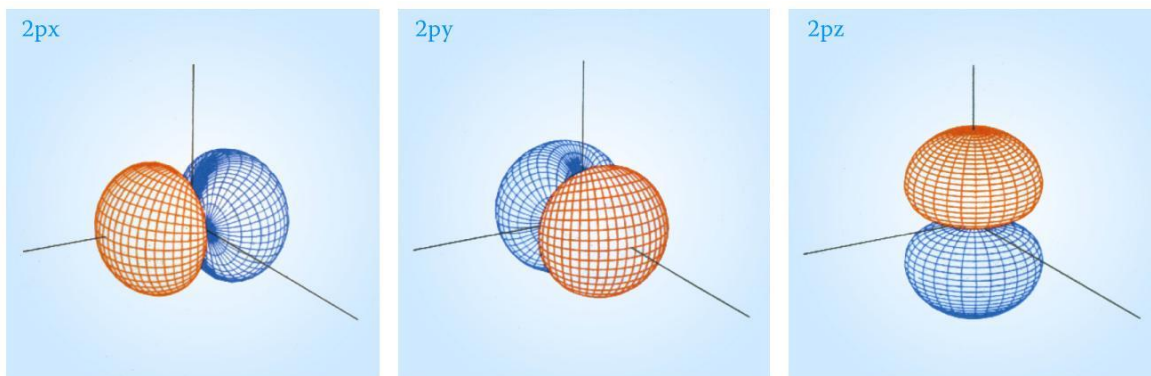
Abb. 1.43 Grafische Darstellung der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2_{2p} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einer Kugelschale mit dem Durchmesser dr im Abstand r vom Atomkern anzutreffen, ist im Kern gleich null, steigt dann auf ein Maximum, wird geringer und geht im Unendlichen gegen null.

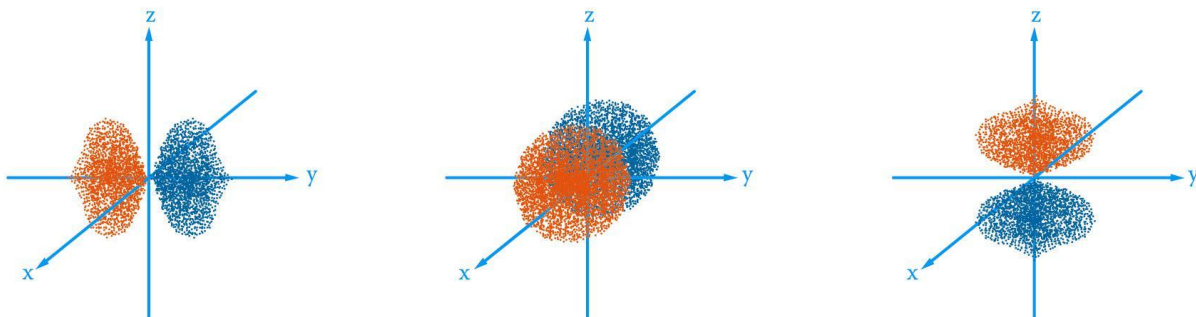
1.4.6 Zusammenfassung des ersten angeregten Zustands ψ_{2p} des Wasserstoff-Atoms



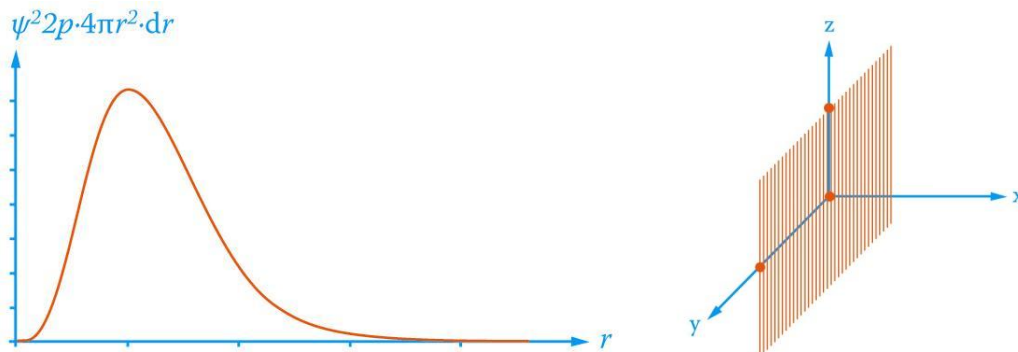
Verlauf der Wellenfunktionen ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} und ψ_{2p_z} entlang den Koordinatenachsen



Geometrischer Ort aller Punkte mit dem Funktionswert $\psi_{2p} = \pm 0.01$



Wolkendarstellung der Elektronendichten $\psi^2_{2p_x}$, $\psi^2_{2p_y}$ und $\psi^2_{2p_z}$



Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit
 $\psi^2_{2p} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$

Unendlich ausgedehnte Knotenebene
der ψ_{2p_x} -Wellenfunktion

1.5 Die höheren Energiezustände

Neben dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand eines Wasserstoff-Atoms gibt es noch weitere, höhere Energieniveaus. Ganz allgemein werden diese, ausgehend vom Grundzustand, mit den Zahlen 1, 2, 3... durchnummeriert. Man bezeichnet sie als Hauptquantenzahlen (Hauptenergieniveaus), die den Elektronenschalen K, L, M entsprechen. Mit zunehmender Hauptquantenzahl erhöht sich auch die Anzahl der Wellenfunktionen, mit denen das Elektron beschrieben werden kann. Innerhalb eines Hauptenergieniveaus unterscheidet man n^2 verschiedene Funktionen mit jeweils $n-1$ Knotenflächen. Wie bereits erwähnt, sind die Energiewerte eines bestimmten Hauptenergieniveaus identisch, sie sind entartet. Neben den s- (sharp) und p- (principal) Funktionen gibt es weiter sogenannte d- (diffus) und f- (fundamental) Funktionen. In den folgenden Abbildungen sind die Wellenfunktionen bis zum 4. Hauptenergieniveau schematisch aufgezeichnet (Abb. 1.44), die Grafen und radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten einiger Funktionen skizziert (Abb. 1.45) sowie der Funktionswert $\psi = \pm 0.01$ für ψ_{2s} bis ψ_{3d} räumlich dargestellt (Abb. 1.46).

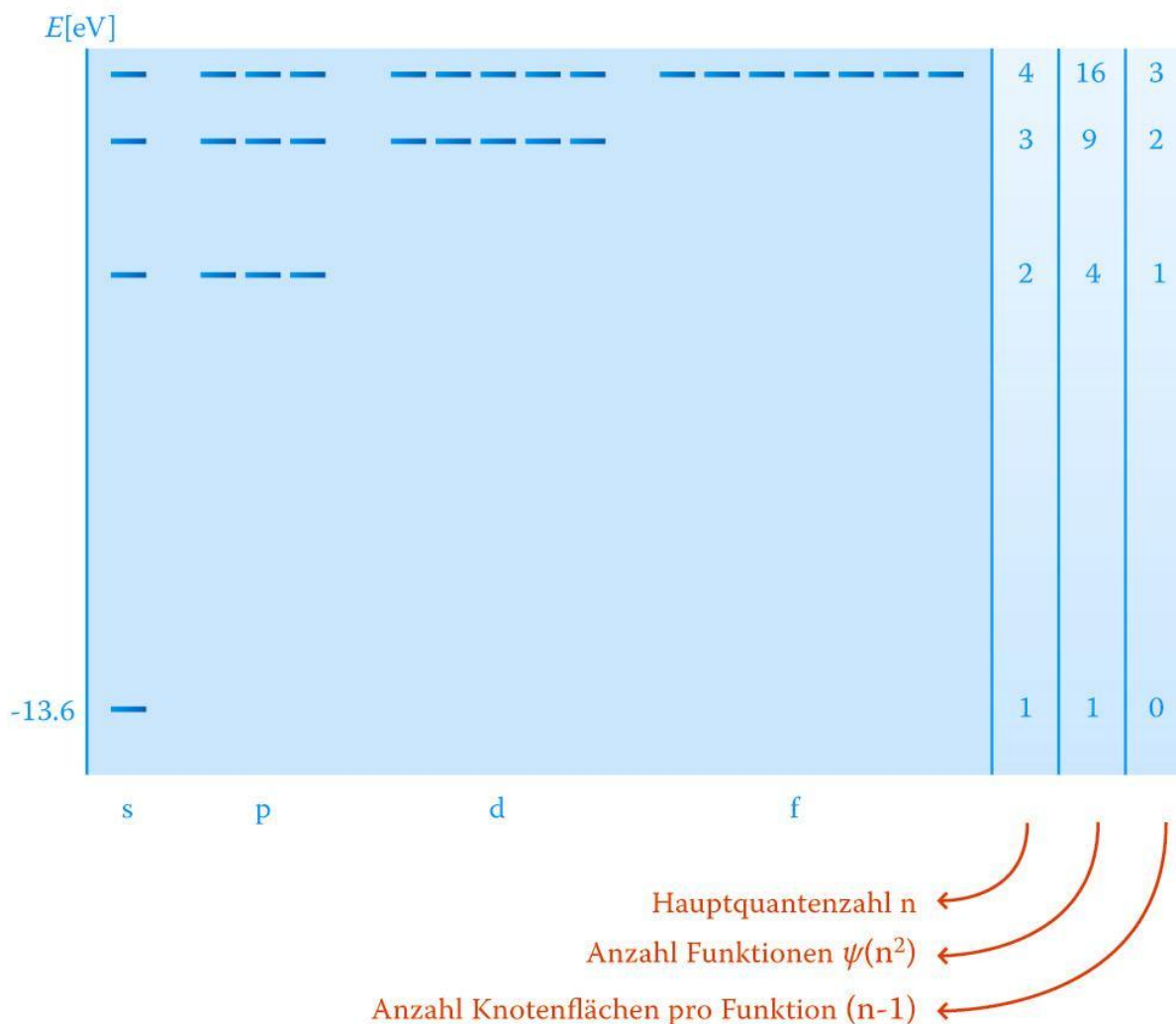


Abb. 1.44 Hauptquantenzahlen, Anzahl Funktionen und Knotenflächen für das Wasserstoff-Atom

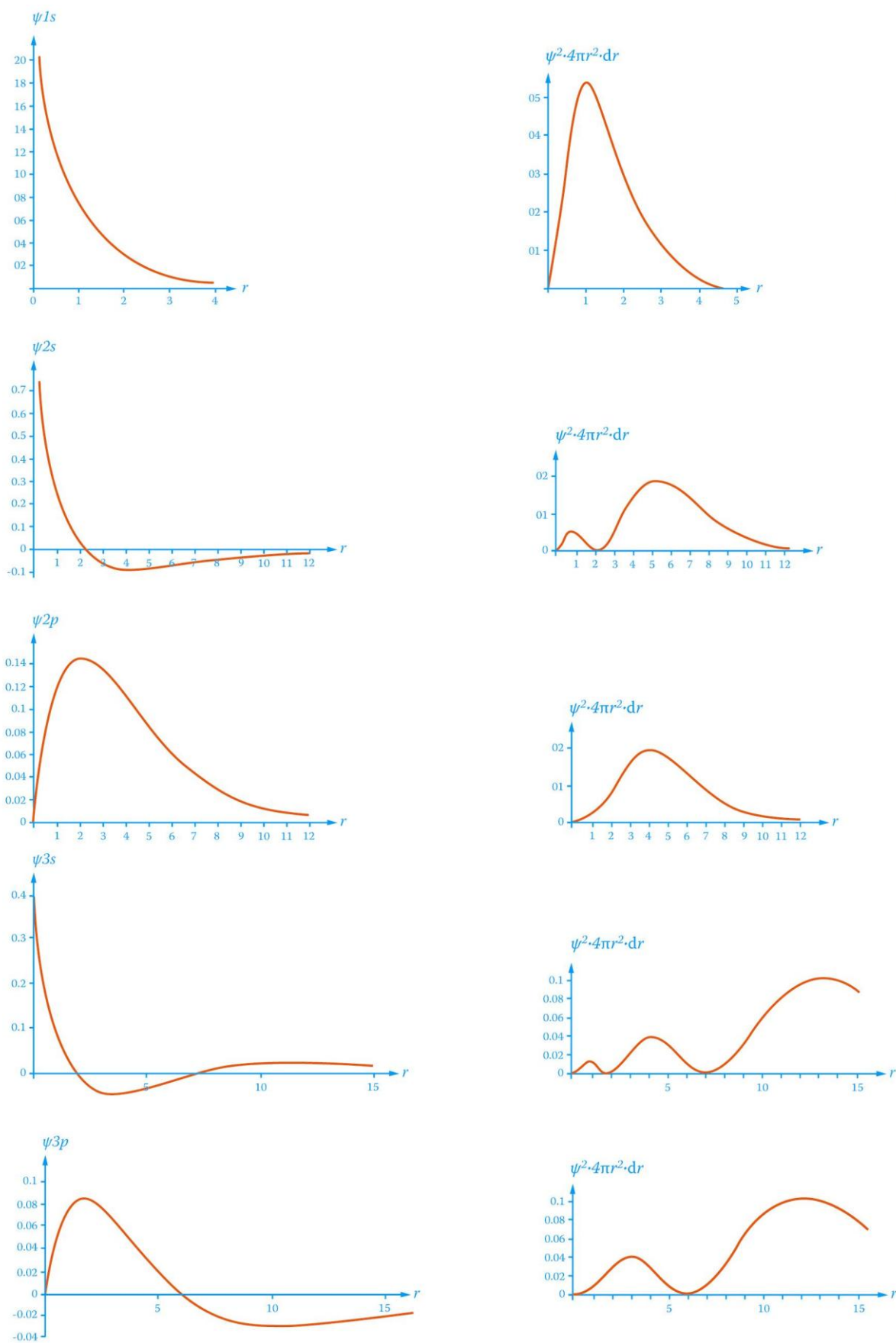


Abb. 1.45 Grafische Darstellung der Wellenfunktionen ψ_{1s} , ψ_{2s} , ψ_{3s} , ψ_{3p} sowie die davon abgeleiteten radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

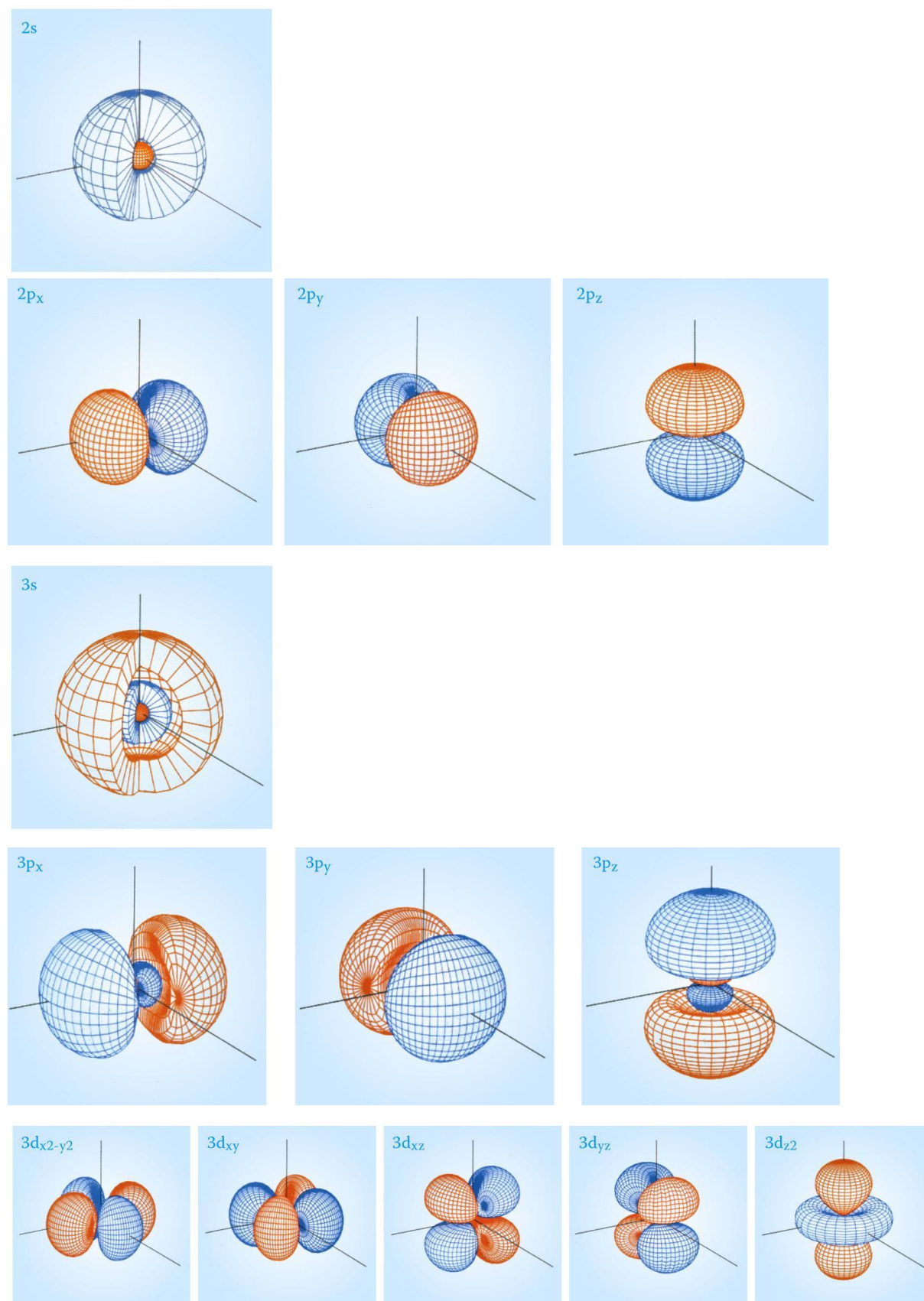


Abb. 1.46 Räumliche Darstellung der Wellenfunktionen ψ_{2s} , ψ_{2p} , ψ_{3s} , ψ_{3p} , ψ_{3d} für den Funktionswert $\psi = \pm 0,01$. Jeder Punkt auf der Oberfläche der Figuren besitzt den gleichen Funktionswert ψ . Rot steht für positive, blau für negative Funktionswerte

1.6 Die Wellenfunktionen im Überblick

s-Wellenfunktionen

Die Größen der Amplituden der s-Wellenfunktionen sind nur vom Abstand r zum Atomkern abhängig. Ab dem 2. Energiezustand weisen die Funktionen Nullstellen (Knotenflächen) und damit auch negative Werte auf. Gleiche Funktionswerte liegen auf Oberflächen von Kugeln (geometrische Örter) mit dem Atomkern als Zentrum. In Abb. 1.46 z. B. ist der geometrische Ort aller Punkte der Funktion ψ_{3s} für den Wert $\psi = \pm 0.01$ dargestellt. Dieser existiert auf 5 Kugeloberflächen mit den Vorzeichen plus, minus, minus, plus, plus. Der zweimalige Wechsel des Vorzeichens deutet auf die beiden Knotenflächen hin (vgl. auch Abb. 1.47).

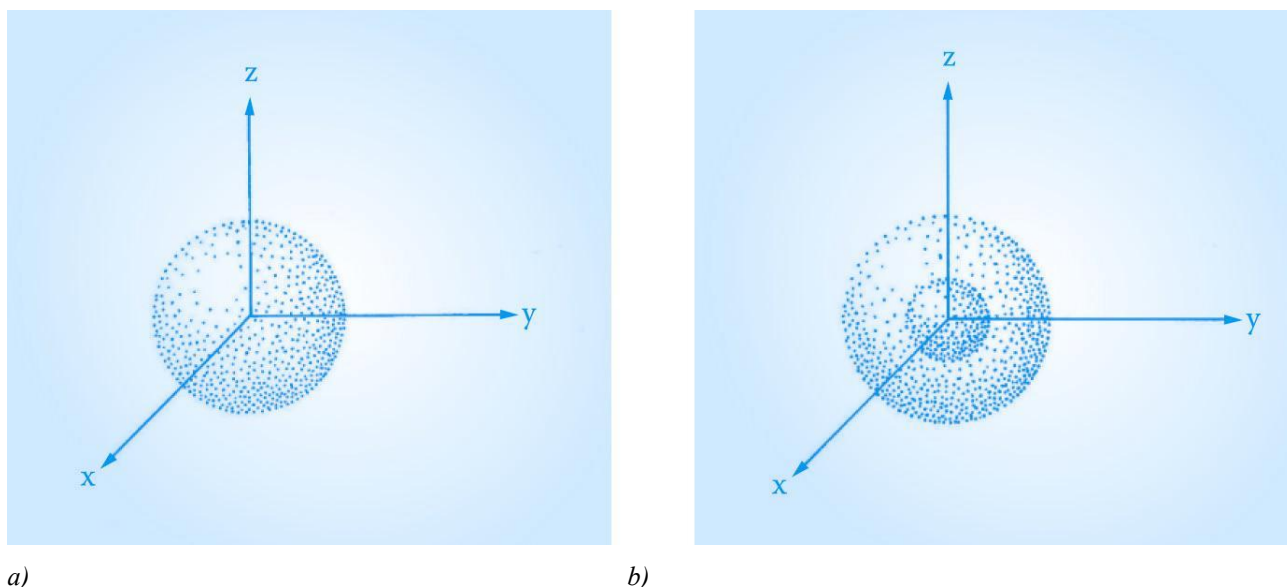
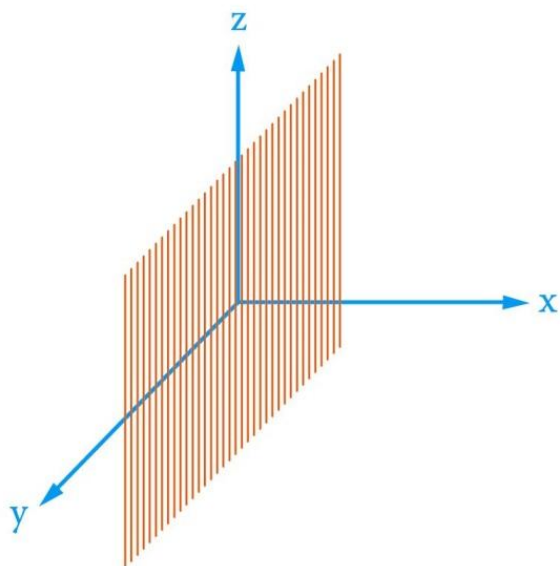


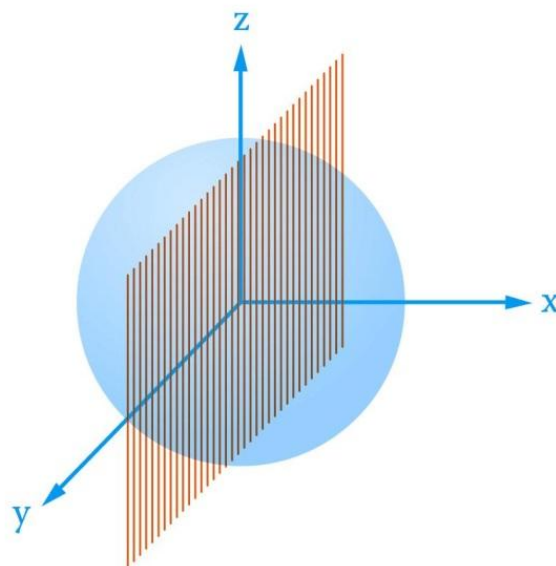
Abb. 1.47 a) Kugeloberfläche als Knotenfläche der ψ_{2s} -Wellenfunktion; b) zwei Kugeloberflächen als Knotenflächen der ψ_{3s} -Funktion

p-Wellenfunktionen

Neben den Abständen zum Atomkern ist die Größe der Amplituden von p-Wellenfunktionen auch durch die Winkel θ und φ bestimmt. Alle p-Funktionen haben positive und negative Werte sowie eine Nullstelle (Knotenfläche) durch den Atomkern, zu denen weitere Nullstellen bei den höheren Hauptquantenzahlen hinzukommen. p-Funktionen gibt es erst ab dem 2. Energiezustand. Der geometrische Ort aller Punkte mit dem gleichen Funktionswert ψ ist die Oberfläche von „hantelförmigen“ Körpern, die sich symmetrisch um eine Koordinatenachse ausrichten.



a)

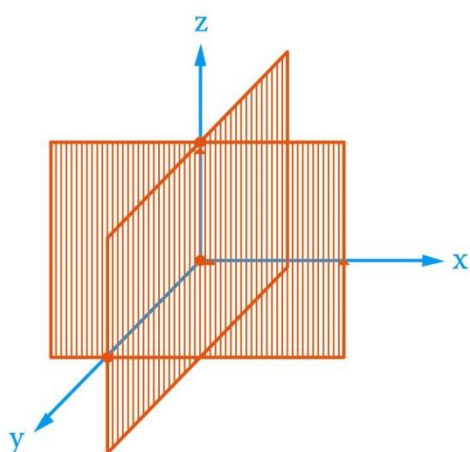


b)

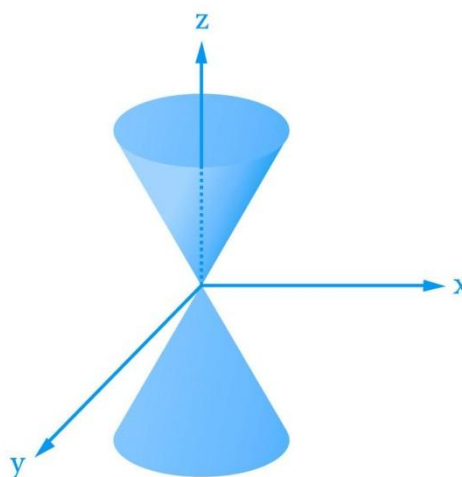
Abb. 1.48 a) Eine (unendlich ausgedehnte) Knotenebene der ψ_{2p_x} -Wellenfunktion; b) zwei Knotenflächen einer ψ_{3p_x} -Wellenfunktion: eine Kugeloberfläche und eine (unendlich ausgedehnte) Knotenebene

d-Wellenfunktionen

Die d-Wellenfunktionen, die erst ab dem 3. Energiezustand das Elektron im Wasserstoff-Atom beschreiben, besitzen zwei und mehr Knotenflächen sowie positive und negative Werte. Die geometrischen Örter aller Punkte mit dem gleichen Funktionswert ψ sind Oberflächen komplizierter geometrischer Formen (Abb. 1.46). Sie ordnen sich im 3. Hauptenergieniveau zwischen den Koordinatenachsen ($\psi_{3d_{xy}}$: zwischen der x- und der y-Achse; $\psi_{3d_{xz}}$: zwischen der x- und der z-Achse; $\psi_{3d_{yz}}$: zwischen der y- und der z-Achse), entlang den Achsen ($\psi_{3d_{x^2-y^2}}$: auf der x- und y-Achse) oder entlang der z-Achse und in der xy-Ebene ($\psi_{3d_{z^2}}$).



a)



b)

Abb. 1.49 a) Zwei (unendlich ausgedehnte) Knotenebenen der $\psi_{3d_{xy}}$ -Funktion; b) zwei (unendlich ausgedehnte) Knotenflächen als zwei Kegeloberflächen der $\psi_{3d_{z^2}}$ -Funktion

1.7 Übungen mit Lösungen zum Kapitel 1

Übungen

- A 1.1 Bei welchem Wert r ist die Elektronendichte im Grundzustand des Wasserstoff-Atoms auf 1/1000 des Maximalwerts abgesunken? Hinweis: das Maximum ist bei $r = 0$.

Mathematik: (wie löst man eine Funktion nach x auf, wenn dieses im Exponent einer Potenz steht?)

$$y = a^x \Rightarrow \ln y = x \ln a \Rightarrow x = \frac{\ln y}{\ln a} \quad \ln e = 1$$

- A 1.2 Wenn für Sie das Differenzieren kein Problem ist, berechnen Sie den Abstand r_1 der Kugelschale, in dem die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Grundzustand ein Maximum ist (vgl. Abb. 1.12). Mathematischer Hinweis: Eine Funktion $y = f(x)$ hat an der Stelle $x = x_0$ ein Extremum, wenn ihre Ableitung $f'(x) = 0$ ist (Steigung der Tangente = 0).

$$y_1 = e^{2x} \quad y_1' = 2e^{2x}$$

$$y_2 = 2x \quad y_2' = 2$$

$$y_3 = u \cdot v \quad y_3' = u \cdot v' + v \cdot u'$$

- A 1.3 Wenn Ihnen das Integrieren keine Probleme bereitet, so lösen Sie folgende Aufgabe: Wie gross ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron eines Wasserstoff-Atoms im Grundzustand in einer Kugel mit dem Radius $r = 2.2 \text{ \AA}$ anzutreffen? (Die Wahrscheinlichkeit W berechnet sich aus der Summe der Wahrscheinlichkeiten, das Elektron in Kugelschalen der Dicke dr im Abstand 0 bis r anzutreffen.)
- A 1.4 Welche Gemeinsamkeiten weist das Elektron im Wasserstoff-Atom mit einer stehenden mechanischen Welle auf?

A 1.5

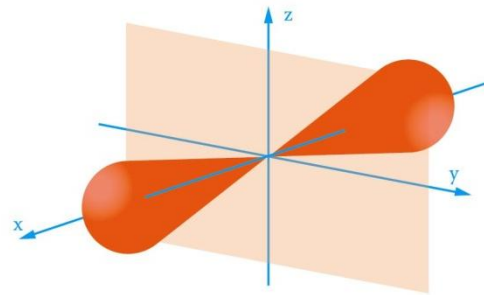
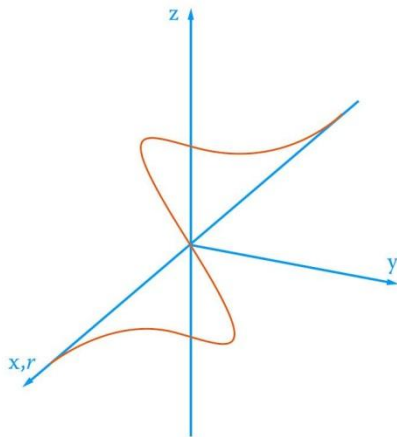
- a) Skizzieren Sie den Graphen der Funktion $\psi = a \cdot e^{-br}$.
- b) Wie lautet die entsprechende Formel für ψ^2 ? Wie interpretieren Sie ψ^2 ?

- A 1.6 Worin liegt der Unterschied zwischen der Elektronendichte und der radialen Elektronendichte?

- A 1.7 Zeichnen Sie die Wolkendarstellung für den angeregten Zustand 2s des Wasserstoff-Atoms.

A 1.8

- a) Skizzieren und interpretieren Sie den Graphen der Wellenfunktion ψ_{1s} . Zeichnen Sie für diesen Zustand den Verlauf der Wahrscheinlichkeit auf, ein Elektron in Kugelschalen in verschiedenen Abständen vom Atomkern anzutreffen!
- b) Interpretieren Sie die folgenden Abbildungen:



A 1.9

- a) Was versteht man unter der Wolkendarstellung der Elektronendichte?
- b) Welche Informationen lassen sich aus den räumlichen Darstellungen der Wellenfunktionen ψ_{2p} gewinnen?
- c) Was bedeutet der Ausdruck "angeregter Zustand"? Geben Sie mindestens zwei angeregte Zustände des Wasserstoff-Atoms an.

A 1.10

- a) Wie unterscheiden sich die drei Zustände ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} , und ψ_{2p_z} energetisch?
- b) Wie viele Wellenfunktionen sind für den zweiten angeregten Zustand des Wasserstoff-Atoms möglich?
- c) Was ist der wesentliche Unterschied zwischen den Funktionen ψ_{2s} und ψ_{2p} bezüglich ihrer räumlichen Darstellung?

Lösungen

A 1.1 $\psi^2 1s = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}}$ Das Maximum der Funktion $\psi^2 1s$ liegt bei $r = 0$.

für $r = 0$ gilt: $\psi^2 1s = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot 1$

$$\frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot \frac{1}{1000}$$

$$e^{-\frac{2r}{a_0}} = \frac{1}{1000} \quad | \ln$$

$$-\frac{2r}{a_0} \cdot \ln e = -3 \cdot \ln 10 \Rightarrow r = \frac{3}{2} \cdot \ln 10 \cdot a_0 = 1.83 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

1.2 $\psi 1s = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \quad \frac{dW}{4\pi \cdot r^2 \cdot dr} = \psi^2 1s \Rightarrow dW = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot 4\pi \cdot r^2 \cdot dr$

$$\frac{dW}{dr} = -\frac{2}{a_0} \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot 4\pi \cdot r^2 + \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot 8\pi \cdot r = 0$$

$$r = a_0 \quad (\text{Bohrscher Radius; } a = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m})$$

A 1.3 $\psi 1s = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \Rightarrow \psi^2 1s = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}}$

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \cdot \frac{h^2}{4\pi^2 \cdot m_e \cdot e_0^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.529 \text{ \AA}$$

$$W = \int_0^r \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

Substitution:

$$u = \frac{2r}{a_0} \Rightarrow r = \frac{ua_0}{2} \Rightarrow \frac{dr}{du} = \frac{a_0}{2} \Rightarrow dr = \frac{a_0}{2} \cdot du$$

$$r^2 = \frac{2^2 r^2 a_0^2}{a_0^3 2^2} = \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2 = u^2 \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2 \quad \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 = u^2$$

$$W = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2 \cdot \frac{a_0}{2} \cdot \int_0^r e^{-u} \cdot u^2 \cdot du = \frac{1}{2} \int_0^r e^{-u} \cdot u^2 \cdot du$$

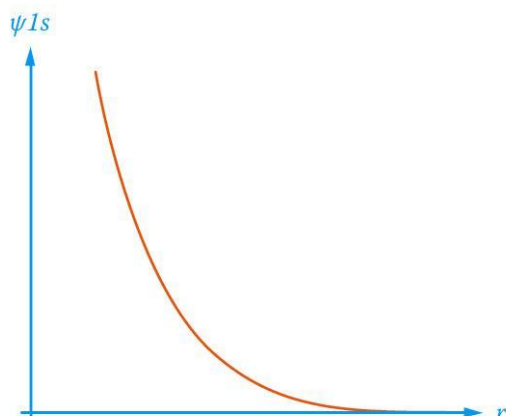
$$W = \frac{1}{2} \int_0^r e^{-u} \cdot u^2 \cdot du = -\frac{1}{2} \left[e^{-u} (u^2 + 2u + 2) \right]_{r=0}^r = -\frac{1}{2} \left[e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot \left\{ \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 + \frac{4r}{a_0} + 2 \right\} - 2 \right]$$

Für $r = 2.2 \text{ \AA} = 4.2 a_0 \Rightarrow W = -\frac{1}{2} \left[e^{-\frac{2 \cdot 2.2}{0.529}} \left\{ \left(\frac{2 \cdot 2.2}{0.529}\right)^2 + \frac{4 \cdot 2.2}{0.529} + 2 \right\} - 2 \right] = 0.989$

A 1.4 Eine stehende, mechanische Welle ist an Randbedingungen gebunden. Sie kann nur bestimmte (diskrete) Schwingungszustände annehmen. Das Elektron stellt man sich als dreidimensionale stehende Welle vor. Auch sie kann im Coulomb-Potential des Atomkerns nur bestimmte Schwingungszustände besitzen.

A 1.5

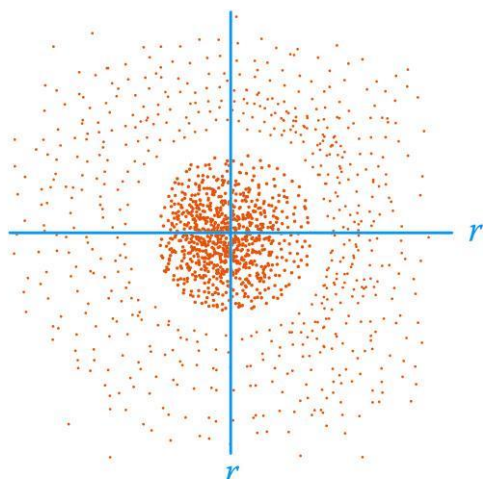
a)



- b) $\psi^2 = a^2 \cdot e^{-2br}$. Wird die Wellenfunktion ψ quadriert, so ergibt sich daraus die Elektronendichte (Wahrscheinlichkeitsdichte, Ladungsdichte). Mit dieser Grösse lässt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einem bestimmten Volumenelement dV berechnen.

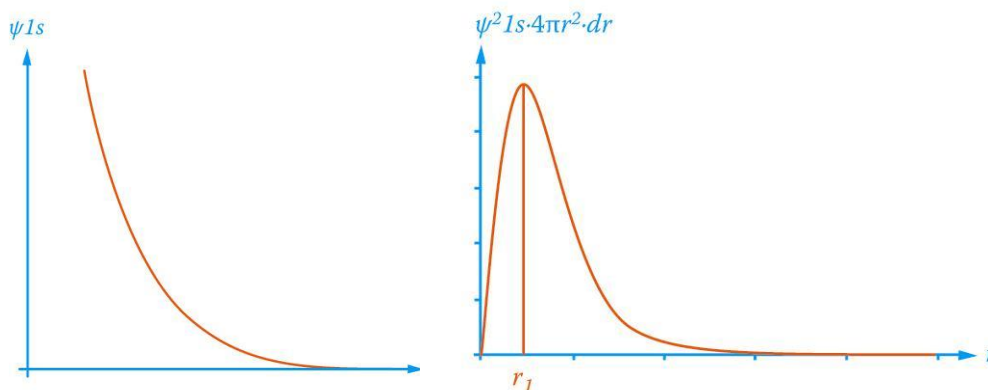
A 1.6 Die Elektronendichte vergleicht die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in gleichen Volumenteilen dV , wenn diese verschiedene Abstände vom Atomkern aufweisen. Die radiale Elektronendichte vergleicht die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in Kugelschalen gleicher Dicke dr , wenn diese verschiedene Abstände r vom Atomkern aufweisen.

A 1.7



A 1.8

a)



Die Amplitude der Materiewelle hat in der Nähe des Atomkerns hohe Werte. Je grösser der Abstand Elektron-Proton ist, desto kleiner wird die Amplitude. Im Unendlichen streben die Werte von ψ_{1s} gegen null.

Der Wert für W ist im Atomkern null. Die Kurve durchläuft dann ein Maximum, da einerseits e^{-2r} mit zunehmendem Radius r exponentiell abnimmt und andererseits das Volumen der Kugelschale $4\pi r^2 dr$ quadratisch zunimmt. Je weiter man sich vom Atom entfernt, umso unwahrscheinlicher wird es, ein Elektron in einer Kugelschale bei dieser Entfernung anzutreffen. Die Funktion geht gegen null.

- b) Die erste Abbildung zeigt den Verlauf der Amplitude der Wellenfunktion ψ_{2p_x} entlang der x-Achse. Man erkennt, dass für verschiedene Werte r gleiche Funktionswerte ψ möglich sind. Die zweite Abbildung symbolisiert den geometrischen Ort aller Punkte mit dem gleichen Funktionswert ψ_{2p_x}

A 1.9

- a) Die Elektronendichte kann man mit der Wolkendarstellung anschaulich darstellen. Diese entspräche einer Überlagerung vieler Momentaufnahmen des Elektrons. Hierbei liegt die Vorstellung des Elektrons als Punktladung (Teilchen) im Vordergrund.
- b) Die räumliche Darstellung der Wellenfunktionen ψ_{2p} stellt den geometrischen Ort aller Punkte dar, welche den gleichen Funktionswert ψ besitzen. Man erkennt, dass gleiche Funktionswerte bei verschiedenen Abständen vom Atomkern auftreten. Das ist möglich, weil die Funktion ψ_{2p} auch einen winkelabhängigen Teil aufweist.
- c) Ein Atom lässt sich durch Energiezufuhr (z. B. Wärme, Licht) in Zustände höherer Energie überführen. Solche Zustände nennt man "angeregt". Für die verschiedenen Energiezustände des Wasserstoff-Atoms existieren bestimmte Wellenfunktionen. Angeregte Zustände sind z. B. ψ_{2p_x} und ψ_{3s} .

A 1.10

- a) Die Energiewerte innerhalb eines bestimmten Energieniveaus sind identisch; man spricht in einem derartigen Fall von entarteten Energiezuständen.
- b) Die Energiezustände bezeichnet man mit kleinen ganzen Zahlen, den Hauptquantenzahlen. Sie entsprechen den Elektronenschalen (Hauptenergieniveaus). Der zweite angeregte Zustand hat die Hauptquantenzahl $n = 3$. Für die Energiezustände des Wasserstoff-Atoms liefern die Berechnungen für die Quantenzahl n jeweils n^2 Wellenfunktionen, welche die Schrödinger-Gleichung erfüllen. Für $n = 3$ existieren also 9 Wellenfunktionen.
- c) ψ_{2s} : Gleiche Funktionswerte liegen auf der Oberfläche von Kugeln (geometrische Örter) mit dem Atomkern als Zentrum.
 ψ_{2p} : Neben den Abständen zum Atomkern ist die Grösse der Amplituden auch durch die Winkel θ und φ bestimmt. Der geometrische Ort aller Punkte mit dem gleichen Funktionswert ist die Oberfläche von „hantelförmigen“ Körpern.