

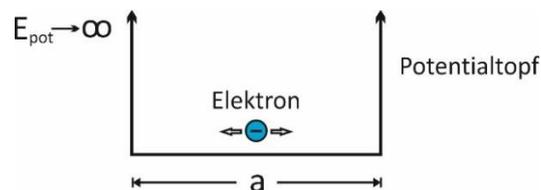
Das Wasserstoffatom nach Schrödinger

Das chemische Element Wasserstoff stellt mit einem Anteil von ca. 90% den größten Teil der beobachtbaren Materie des Universums dar, wenn man von der zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht experimentell nachgewiesenen „dunklen Materie“ absieht. Das Wasserstoffatom besticht durch seine Einfachheit, besteht es doch nur aus einem einzigen Proton, das von einem einzelnen Elektron begleitet wird. Trotz dieser Schlichtheit hat es viele Jahrhunderte gedauert, bis das Wasserstoffatom vollständig physikalisch verstanden wurde. Erst Werner Heisenberg und Erwin Schrödinger gelang es auf verschiedenen Wegen in ihren Arbeiten zur Quantenmechanik, ein umfassendes Verständnis der physikalischen Vorgänge im Wasserstoff zu erlangen. Aufgrund des etwas anschaulicheren Zuganges zur Quantenmechanik, wird im Folgenden Schrödingers Ansatz näher betrachtet.

In den klassischen Atommodellen des frühen 20. Jahrhunderts herrschte die Vorstellung, dass sowohl Protonen als auch Elektronen winzig kleine Kügelchen sind. Dabei bewegt sich das wesentlich leichtere Elektron aufgrund der Zentripetalkraft (hier die zwischen positiv geladenem Proton und negativ geladenem Elektron wirkenden Coulombkraft) auf einer Kreisbahn. Die Mängel eines solchen Modells wurden im vorangegangenen Kapitel ausführlich diskutiert und sollen hier nicht erneut thematisiert werden. Wiederholend ist anzumerken, dass ein klassisches Elektron, aufgrund der bei der Kreisbewegung auftretenden Radialbeschleunigung, elektromagnetische Strahlung abgeben und durch den Energieverlust letztlich in den Atomkern stürzen müsste.

1. Eigenwerte

Im Gegensatz zu den klassischen Atommodellen, in denen sich die Elektronen auf diskreten Kreisbahnen bewegen, wird nach Schrödinger die Bewegung der Elektronen nur durch die Wände des Potentialtopfs eingeschränkt, der durch das elektrische Feld des Protons in dessen Umgebung entsteht (siehe Kapitel „Moderne Atommodelle“). Im einfachsten Fall bewegt sich ein Elektron in diesem Potentialtopf geradlinig zwischen den Wänden hin und her.



Da nach De-Broglie einem Elektron neben seinen Teilcheneigenschaften auch Welleneigenschaften zugeordnet werden können, kann dieser Vorgang auch wellenmechanisch betrachtet werden. Zwischen den Wänden des Potentialtopfs bildet sich eine stehende Elektronenwelle, deren Amplitude ψ an den Wänden den Wert Null annehmen muss:

$$\psi(0) = 0 \quad \text{und} \quad \psi(a) = 0$$

Zwischen der Breite des Potentialtopfs a und der Wellenlänge λ der Elektronenwellen besteht der Zusammenhang:

$$a = n \cdot \frac{\lambda}{2}$$

Es sind also nur solche Wellen möglich, bei denen ein ganzzahliges Vielfaches der halben Wellenlänge der Breite des Potentialtopfs entspricht. Elektronenwellen, die nicht diese Bedingung erfüllen, interferieren destruktiv und löschen sich gegenseitig aus.

Für die Wellenlänge der Elektronenwellen ergibt sich umgestellt die Bedingung:

$$\lambda = \frac{2a}{n}$$

Die Wellengleichung der stehenden Elektronenwelle kann zunächst mit einer Sinusfunktion beschrieben werden:

$$\psi(t) = \psi_0 \cdot \sin(\omega \cdot t) = \psi_0 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{T} \cdot t\right)$$

Mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle $v = \frac{\lambda}{T} \Leftrightarrow T = \frac{\lambda}{v}$ ergibt sich:

$$\psi(t) = \psi_0 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot v \cdot t\right)$$

Man erhält schließlich eine zeitunabhängige Wellengleichung, die die Auslenkung der Welle in Abhängigkeit vom Ort x beschreibt:

$$\psi(x) = \psi_0 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot x\right)$$

Mit Hilfe der obigen Bedingung für stehende Wellen $\lambda = \frac{2a}{n}$ kann die Wellengleichung nun weiter umgeformt werden:

$$\psi(x) = \psi_0 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\frac{2a}{n}} \cdot x\right) = \psi_0 \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x\right)$$

Die Wellengleichung kann nun zweimal nach x abgeleitet (differenziert) werden:

$$\begin{aligned}\psi'(x) &= \psi_0 \cdot \frac{n \cdot \pi}{a} \cdot \cos\left(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x\right) \\ \psi''(x) &= -\psi_0 \cdot \frac{n^2 \cdot \pi^2}{a^2} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x\right) \\ &= -\frac{n^2 \cdot \pi^2}{a^2} \cdot \psi_0 \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi}{a} \cdot x\right)\end{aligned}$$

Bei der zweiten Ableitung erhält man erneut die Wellenfunktion $\psi(x)$, die mit dem Faktor $-\frac{n^2 \cdot \pi^2}{a^2}$ multipliziert wird. Es gilt also offensichtlich:

$$\psi''(x) = -\frac{n^2 \cdot \pi^2}{a^2} \cdot \psi(x)$$

Umgestellt erhält man für die stehenden Elektronenwellen somit eine homogene Differentialgleichung 2. Ordnung, eine vereinfachte Form der Schrödingergleichung:

$$\psi''(x) + \frac{n^2 \cdot \pi^2}{a^2} \cdot \psi(x) = 0$$

Den Parameter $k = \frac{n^2 \cdot \pi^2}{a^2}$ bezeichnet man als Eigenwert der stehenden Elektronenwelle bzw. genauer der Wellenfunktion (auch Eigenfunktion). Er bestimmt die möglichen Schwingungsformen, die die Elektronen ausführen können.

Mit der Bedingung für stehende Wellen $a = n \cdot \frac{\lambda}{2}$ kann der Eigenwert umgeformt werden:

$$k = \frac{n^2 \cdot \pi^2}{a^2} = \frac{n^2 \cdot \pi^2}{\left(n \cdot \frac{\lambda}{2}\right)^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$$

Es ist zu erkennen, dass der Eigenwert hier ausschließlich durch die Wellenlänge bestimmt wird. Eingesetzt erhält man schließlich eine alternative Schreibweise der obigen Differentialgleichung:

$$\psi''(x) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi(x) = 0$$

2. Dreidimensionale Differentialgleichung der stehenden Elektronenwellen

In der obigen Überlegung zu stehenden Elektronenwellen im Potentialtopf wurde vernachlässigt, dass das Wasserstoffatom ein dreidimensionales Gebilde ist. Es wurde zunächst nur eine stehende Elektronenwelle entlang von einer Raumachse, zum Beispiel der x-Achse, betrachtet. In der Realität können sich die stehenden Elektronenwellen jedoch in allen drei Raumdimensionen, also in x-, y- und z-Richtung, ausbilden. Die obige Differentialgleichung muss deshalb komponentenweise für alle drei Raumrichtungen notiert werden.

Hierzu wird zunächst die aus der Schule bekannte Schreibweise für Ableitungen mit Strichen, ψ' oder ψ'' , durch die in der Physik gängige Schreibweise mit Hilfe von Differentialquotienten umgeschrieben. Dies ist notwendig, da in der „Strichschreibweise“ nicht deutlich wird, nach welcher Variablen eine Funktion abgeleitet wird. Für die Ableitung der Funktion ψ nach der Variablen x wird der Differentialquotient $\frac{d\psi}{dx}$ geschrieben. Um zu verdeutlichen, dass es sich um eine Ableitung handelt, wird der Differentialquotient nicht „ $d\psi$ geteilt durch dx “ ausgesprochen, sondern „ $d\psi$ abgeleitet nach dx “ bzw. kurz „ $d\psi$ nach dx “.

Analog wird für die Ableitung von ψ nach der Variablen y der Differentialquotient $\frac{d\psi}{dy}$ und für die Ableitung von ψ nach der Variablen z der Differentialquotient $\frac{d\psi}{dz}$ verwendet. Die zweite Ableitung einer Funktion wird ebenso mit einem Differentialquotienten geschrieben:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

Analog erhält man die zweiten Ableitungen für die beiden anderen Raumkoordinaten:

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{d\psi}{dy} \right) = \frac{d^2\psi}{dy^2}$$

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{d\psi}{dz} \right) = \frac{d^2\psi}{dz^2}$$

Mit dieser mathematischen Schreibweise ist es nun möglich die Differentialgleichung der stehenden Elektronenwellen für alle drei Raumkoordinaten zu notieren.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi = 0$$

Dabei ist die Wellenfunktion ψ nicht mehr wie oben nur von der x-Koordinate abhängig, sondern eine Funktion von allen drei Raumkoordinaten, also $\psi(x, y, z)$. Aus Anschaulichkeitsgründen wird jedoch in den meisten Fällen auf die Klammer verzichtet und die Wellenfunktion einfach nur mit ψ bezeichnet.

Die drei einzelnen Differentialgleichungen für die x-, y- und z-Richtung können nun vektoriell zu einer gemeinsamen Differentialgleichung zusammengefasst werden:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial y} \\ \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial z} \end{pmatrix} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi(x, y, z) = 0$$

Die einzelnen Differentialquotienten, werden hier mit „geschwungenen“ Buchstaben geschrieben, um zu zeigen, dass es sich nur um die Ableitung nach einer einzelnen Raumkoordinate handelt. Statt $\frac{d}{dx}$ wird also $\frac{\partial}{\partial x}$ geschrieben, wobei der geschwungene Buchstabe ∂ wie ein „del“ ausgesprochen wird.

Die vektorielle Differentialgleichung kann nun etwas vereinfacht werden. Hierzu wird zunächst die Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$ gewissermaßen aus dem Differentialquotienten „ausgeklammert“ und dann das Skalarprodukt der Differentialquotienten gebildet:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \psi(x, y, z) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi(x, y, z) = 0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi(x, y, z) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi(x, y, z) = 0$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi(x, y, z) = 0$$

Zur Vereinfachung der Gleichung wird die erste Klammer durch den sog. Laplace-Operator Δ ersetzt, der die zweiten Ableitungen für alle Raumdimensionen in einem einzelnen Symbol zusammenfasst:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Für die dreidimensionale Wellengleichung ergibt sich somit:

$$\Delta \psi(x, y, z) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi(x, y, z) = 0$$

bzw. kurz:

$$\Delta \psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi = 0$$

3. Die Schrödingergleichung

Aus der dreidimensionalen Differentialgleichung der stehenden Elektronenwellen kann schließlich die Schrödinger-Gleichung abgeleitet werden. Hierzu geht man zunächst einen Schritt zurück und betrachtet die Elektronen wieder klassisch im Teilchenmodell. Die Gesamtenergie eines klassischen Elektrons setzt sich im Wasserstoffatom aus kinetischer und potentieller Energie zusammen:

$$E_{Ges} = E_{kin} + E_{pot}$$

Für die kinetische Energie kann aufgrund nicht relativistischer Geschwindigkeiten mit der aus der Mechanik bekannten Gleichung $E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v^2$ gerechnet werden.

Eingesetzt und umgestellt erhält man daraus für die Geschwindigkeit der Elektronen:

$$E_{Ges} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v^2 + E_{pot}$$

$$E_{Ges} - E_{pot} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v^2$$

$$v = \sqrt{\frac{2}{m_e} \cdot (E_{Ges} - E_{pot})}$$

Nach De-Broglie gilt für Elektronen der Welle-Teilchen-Dualismus $p = \frac{h}{\lambda}$, also:

$$m_e \cdot v = \frac{h}{\lambda}$$

$$m_e \cdot \sqrt{\frac{2}{m_e} \cdot (E_{Ges} - E_{pot})} = \frac{h}{\lambda}$$

Diese Gleichung kann zunächst quadriert und dann nach der Wellenlänge λ umgestellt werden:

$$m_e^2 \cdot \frac{2}{m_e} \cdot (E_{Ges} - E_{pot}) = \frac{h^2}{\lambda^2}$$

$$2m_e \cdot (E_{Ges} - E_{pot}) = \frac{h^2}{\lambda^2}$$

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2m_e \cdot (E_{Ges} - E_{pot})}$$

Um nun die Schrödinger-Gleichung zu erhalten, wird das Wellenlängenquadrat in die Differentialgleichung der Elektronenwellen eingesetzt:

$$\Delta\psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi = 0$$

$$\Delta\psi + \frac{4\pi^2}{\left(\frac{h^2}{2m_e \cdot (E_{Ges} - E_{pot})}\right)} \cdot \psi = 0$$

Durch Umstellen ergibt sich schließlich die berühmte Schödingersche Wellengleichung, kurz Schrödingergleichung, für Elektronen in einem Wasserstoffatom:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot (E_{Ges} - E_{pot}) \cdot \psi = 0$$

Mit Hilfe von dieser Gleichung können nun die einzelnen Energieniveaus der Elektronen im Wasserstoffatom näher untersucht werden.

4. Das Wasserstoffatom

Im Wasserstoffatom herrscht zwischen Proton (+e) und Elektron (-e) die elektrisch anziehende Coulombkraft

$$F_C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(-e) \cdot (+e)}{r^2} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}$$

Dabei ist r der Abstand zwischen Proton und Elektron.

Die potentielle Energie der Elektronen im elektrischen Feld erhält man durch Integration der Coulombkraft:

$$\begin{aligned} E_{pot}(r) &= \int_r^\infty F_C \cdot dr \\ &= \int_r^\infty -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \cdot dr \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_r^\infty \frac{1}{r^2} \cdot dr \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[-\frac{1}{r} \right]_r^\infty \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \left(\lim_{r \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{r} \right) - \left(-\frac{1}{r} \right) \right) \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \left(0 + \frac{1}{r} \right) \\ &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \end{aligned}$$

Diese kann nun in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt werden:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot (E_{Ges} - E_{pot}) \cdot \psi = 0$$

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \left(E_{Ges} - \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \right) \cdot \psi = 0$$

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \left(E_{Ges} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \cdot \psi = 0$$

Ziel der folgenden Rechnungen ist es nun, die Lösungen dieser Differentialgleichungen zu finden, die sog. Eigenfunktionen bzw. Wellenfunktionen. Hierzu sind zunächst einige Vorüberlegungen anzustellen.

Das elektrische Feld des Protons ist kugelsymmetrisch, das heißt es hängt vom Abstand r zum Kugelmittelpunkt ab. Der Abstandsvektor zwischen Proton und Elektron kann deshalb recht einfach mit einem dreidimensionalen Ortsvektor, dessen Koordinatenursprung im Proton liegt, angegeben werden:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Der Betrag von \vec{r} ergibt sich:

$$|\vec{r}| = r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$$

Bildet man nun die partielle Ableitung von r nach x so erhält man durch Anwenden der Kettenregel:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{1}{2} \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot 2x \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot 2x \\ &= \frac{x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{x}{r} \end{aligned}$$

Also gilt:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$$

Analog lässt sich die partielle Ableitung von r nach y und z bilden:

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r}$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r}$$

Mit diesem Zusammenhang lässt sich nun durch Anwenden der Kettenregel (**Innere Ableitung** multipliziert mit **äußerer Ableitung**: $\frac{df(h(x))}{dx} = \frac{dh(x)}{dx} \cdot \frac{df(h)}{dh}$) die Wellenfunktion ψ , die in einem kugelsymmetrischen Atom vom Radius $r(x)$ abhängt, nach x ableiten.

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial \psi(r(x))}{\partial x} = \frac{\partial r(x)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi(r(x))}{\partial r} = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

Also gilt:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

Analog erhält man für die y- und z-Koordinaten:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{y}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{z}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

Im nächsten Schritt wird nun die zweite partielle Ableitung der Wellenfunktion, wie sie in der Schrödinger-Gleichung benötigt wird, berechnet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(x \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(x \cdot \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(x \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \end{aligned}$$

Diese recht komplexe Ableitung wird mit Hilfe der Produktregel von drei Faktoren berechnet. Hierzu wird jeweils ein Faktor abgeleitet, wobei die anderen beiden Faktoren beibehalten werden. Anschließend werden die drei einzelnen Terme summiert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(x \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ &= \frac{\partial x}{\partial x} \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left((x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \right) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + x \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ &= 1 \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + x \cdot \left(-\frac{1}{2} \right) \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{3}{2}} \cdot 2x \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + x \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung kann nun wieder die anfängliche Beziehung $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$ für den Betrag von \vec{r} verwendet werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - x^2 \cdot \frac{1}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + x \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ &= \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \end{aligned}$$

Zum Schluss muss noch der letzte Summand $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$ berechnet werden. Hierzu wird die Wellenfunktion wie bei der ersten Ableitung als Funktion des Radius aufgeschrieben und mit Hilfe der Kettenregel abgeleitet:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi(r(x))}{\partial r} \right) = \frac{\partial r(x)}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \psi(r)}{\partial r} \right)$$

Vereinfacht notiert ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{\partial r}{\partial x} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Und mit der Anfangsüberlegung $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$ folgt:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Durch Einsetzen in die Gleichung für die zweite Ableitung der Wellenfunktion ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ &= \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x}{r} \cdot \frac{x}{r} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \\ &= \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \end{aligned}$$

Es gilt also die Gleichung:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Der interessierte Leser kann diese Herleitung auch für die y- und z-Komponenten durchführen. Analog ergibt sich also für die anderen beiden Ableitungen:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{y^2}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{y^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{z^2}{r^3} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{z^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Für den ersten Teil der Schrödinger-Gleichung $\Delta \psi$ können diese drei Ableitungen jetzt addiert werden.

$$\Delta \psi + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \left(E_{Ges} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \cdot \psi = 0$$

$$\begin{aligned} \Delta \psi &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi \\ &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \end{aligned}$$

$$\Delta\psi = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{y^2}{r^3} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{y^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{z^2}{r^3} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{z^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}$$

Durch das Zusammenfassen von gleichartigen Termen erhält man:

$$\begin{aligned}\Delta\psi &= \frac{3}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{x^2 + y^2 + z^2}{r^3} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{x^2 + y^2 + z^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} \\ &= \frac{3}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{r^2}{r^3} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{r^2}{r^2} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} \\ &= \frac{3}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} \\ &= \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} \\ &= \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r}\end{aligned}$$

Nach Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung erhält man:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \left(E_{Ges} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \cdot \psi = 0$$

Nach diesen Vorüberlegungen kann nun nach einer Lösung für die Schrödinger-Gleichung gesucht werden. Es fällt zunächst auf, dass die Wellenfunktion ψ in der Schrödinger, sowohl nicht abgeleitet als auch in der ersten und zweiten Ableitung vorkommt. Aus dem Mathematikunterricht ist nur eine Funktion bekannt, die sich beim Ableiten nicht verändert und somit als Lösung für die Schrödingergleichung in Frage kommt. Diese Funktion ist die natürliche Exponentialfunktion, kurz e-Funktion.

Für die Lösung der Schrödingergleichung wird deshalb als Ansatz eine Exponentialfunktion mit der Gleichung

$$\psi = \psi_0 \cdot e^{-k \cdot r}$$

verwendet. Dieser Ansatz wird nun zunächst zweimal abgeleitet und dann in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt:

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = \psi_0 \cdot (-k) \cdot e^{-k \cdot r} = -k \cdot \psi_0 \cdot e^{-k \cdot r} = -k \cdot \psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = \psi_0 \cdot (-k)^2 \cdot e^{-k \cdot r} = k^2 \cdot \psi_0 \cdot e^{-k \cdot r} = k^2 \cdot \psi$$

Es folgt:

$$k^2 \cdot \psi + \frac{2}{r} \cdot (-k) \cdot \psi + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \left(E_{Ges} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \cdot \psi = 0 \quad | \text{ausklammern}$$

$$\left[k^2 - \frac{2k}{r} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \left(E_{Ges} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \right] \cdot \psi = 0$$

Aus der Produkt-Null-Regel folgt nun für die Klammer:

$$k^2 - \frac{2k}{r} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \left(E_{Ges} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) = 0$$

$$k^2 - \frac{2k}{r} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e \cdot E_{Ges}}{h^2} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} = 0$$

$$k^2 - \frac{2k}{r} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e \cdot E_{Ges}}{h^2} + \frac{2\pi \cdot m_e}{h^2 \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} = 0$$

$$k^2 + \frac{8\pi^2 \cdot m_e \cdot E_{Ges}}{h^2} + \frac{2\pi \cdot m_e}{h^2 \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} - \frac{2k}{r} = 0$$

Mit dieser Gleichung lässt sich nun zunächst die Energie berechnen, die benötigt wird, um ein Elektron aus dem Wasserstoffatom auszulösen, also um das Wasserstoffatom zu ionisieren. In diesem Fall geht der Abstand r zwischen Proton und Elektron gegen Unendlich.

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left(k^2 + \frac{8\pi^2 \cdot m_e \cdot E_{Ges}}{h^2} + \frac{2\pi \cdot m_e}{h^2 \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} - \frac{2k}{r} \right) = 0$$

$$k^2 + \frac{8\pi^2 \cdot m_e \cdot E_{Ges}}{h^2} = 0$$

Umgestellt nach E_{Ges} erhält man:

$$\frac{8\pi^2 \cdot m_e \cdot E_{Ges}}{h^2} = -k^2$$

$$E_{Ges} = -\frac{k^2 \cdot h^2}{8\pi^2 \cdot m_e}$$

An dieser Stelle ist der Parameter k noch unbekannt, weshalb noch weitere Überlegungen angestellt werden müssen.

Aus der obigen Randbetrachtung folgt, dass der **erste Teil** der obigen Gleichung für $r \rightarrow \infty$ den Wert Null annimmt.

$$k^2 + \frac{8\pi^2 \cdot m_e \cdot E_{Ges}}{h^2} + \frac{2\pi \cdot m_e}{h^2 \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} - \frac{2k}{r} = 0$$

$$0 + \frac{2\pi \cdot m_e}{h^2 \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} - \frac{2k}{r} = 0 \text{ für } r \rightarrow \infty$$

Damit die Gleichung aber auch weiterhin erfüllt bleibt muss auch der **zweite Teil** der Gleichung den Wert Null annehmen. Für $r \rightarrow \infty$ gilt also:

$$\frac{2\pi \cdot m_e}{h^2 \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} - \frac{2k}{r} = 0$$

Diese Gleichung lässt sich nun nach dem noch fehlenden Parameter k umstellen:

$$\frac{2\pi \cdot m_e \cdot e^2}{h^2 \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} = \frac{2k}{r}$$

$$k = \frac{\pi \cdot m_e \cdot e^2}{h^2 \cdot \epsilon_0}$$

Eingesetzt in die Formel für die Gesamtenergie ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_{Ges} &= -\frac{k^2 \cdot h^2}{8\pi^2 \cdot m_e} \\ &= -\frac{\left(\frac{\pi \cdot m_e \cdot e^2}{h^2 \cdot \epsilon_0}\right)^2 \cdot h^2}{8\pi^2 \cdot m_e} \\ &= -\frac{1 \cdot \pi^2 \cdot m_e^2 \cdot e^4 \cdot h^2}{8 \cdot \pi^2 \cdot m_e \cdot h^4 \cdot \epsilon_0^2} \\ E_{Ges} &= -\frac{1}{8} \cdot \frac{m_e \cdot e^4}{h^2 \cdot \epsilon_0^2} \end{aligned}$$

Durch Einsetzen der Naturkonstanten erhält man einen Betrag von 13,6eV, was der bekannten Ionisierungsenergie des Wasserstoffs entspricht. Es ist schon sehr erstaunlich, dass Niels-Bohr mit seinem klassischen Atommodell zu einer identischen Formel und somit zum gleichen Ergebnis für die Ionisierungsenergie gelangt, wie Schrödinger im Rahmen der Wellenmechanik. An dieser Stelle zeigt sich erneut sehr deutlich der Dualismus von Teilchen- und Welleneigenschaften der Materie.

Eine weitere Analogie zum Bohrschen-Atommodell fällt auf, wenn man den Parameter k der Wellenfunktion $\psi = \psi_0 \cdot e^{-k \cdot r}$, also der Lösung der Schrödinger-Gleichung betrachtet:

$$k = \frac{\pi \cdot m_e \cdot e^2}{h^2 \cdot \epsilon_0} = \frac{1}{r_{Bohr}}$$

Dieser entspricht genau dem Kehrwert des Bohrschen Radius, also des Bahnradius des Elektrons im Grundzustand. Für die Wellenfunktion gilt somit abschließend:

$$\psi = \psi_0 \cdot e^{-\frac{r}{r_B}}$$

5. Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

Die Wellenfunktion $\psi = \psi_0 \cdot e^{-\frac{r}{r_B}}$ ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung, mit der es zum Beispiel möglich ist Energieniveaus im Wasserstoffatom zu berechnen. Es ist jedoch nicht möglich mit der Wellenfunktion den Aufenthaltsort eines Elektrons im Wasserstoffatom zu bestimmen. Die Wellenfunktion selbst besitzt grundsätzlich nur eine mathematische Bedeutung als Lösung der Schrödinger-Gleichung, aber darüber hinaus keine physikalische Bedeutung, wie man sie von Wellengleichungen in mechanischen Wellen kennt. Dort gibt zum Beispiel die Amplitude A_0 die maximale Auslenkung einer mechanischen Welle, also zum Beispiel einer Wasser- oder Schallwelle, an. Im Gegensatz dazu hat der Wert ψ_0 keine weitere physikalische Relevanz. Erst wenn man das Quadrat der Wellenfunktion $|\psi|^2$ bildet erhält man eine physikalisch relevante Größe. So gibt dieses Quadrat

die Wahrscheinlichkeiten dafür an, ein Elektron an einem bestimmten Ort im Wasserstoffatom anzutreffen, genauer betrachtet die sog Wahrscheinlichkeitsdichte, also die Wahrscheinlichkeit ein Elektron in einem bestimmten Teilvolumen des Wasserstoffatoms anzutreffen (kurz: Wahrscheinlichkeit pro Volumen):

$$|\psi(r)|^2 = \frac{dW}{dV}$$

Diese Wahrscheinlichkeitsdichte soll nun im Folgenden mathematisch untersucht werden. Hierzu wird zunächst die Wellenfunktion quadriert:

$$|\psi|^2 = \left| \psi_0 \cdot e^{-\frac{r}{r_B}} \right|^2 = \psi_0^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}}$$

Dabei wurde das 5. Potenzgesetz angewendet, nach dem Potenzen potenziert werden, indem man die Exponenten miteinander multipliziert.

Diese tatsächliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit W erhält man nun, indem man die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi|^2$ über das Volumen V des Atomkerns integriert:

$$W = \int |\Psi|^2 dV$$

Zunächst soll die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das gesamte Wasserstoffatom berechnet werden, also von $r = 0$ bis $r \rightarrow \infty$. Dazu muss zunächst das Differential dV , also letztlich die Variable, nach der die Wahrscheinlichkeitsdichte integriert wird, in ein Differential, das nur vom Radius abhängt umgeformt werden.

Das Volumendifferential dV entspricht einer infinitesimal dünnen Kugelschale, die sich anschaulich mit der sehr dünnen Schale eines Apfels vergleichen lässt. Eine Kugelschale lässt sich berechnen, indem man die Oberfläche der Kugelschale $4\pi r^2$ mit der infinitesimal kleinen Dicke dr der Kugelschale multipliziert:

$$dV = 4\pi \cdot r^2 \cdot dr$$

Das Differential dV kann hiermit durch das Differential dr ersetzt werden, so dass das Integral nur noch in Abhängigkeit vom Radius berechnet werden muss:

$$W = \int |\Psi|^2 dV = \int |\Psi|^2 \cdot 4\pi \cdot r^2 \cdot dr$$

Durch Einsetzen der Wahrscheinlichkeitsdichte und der Integrationsgrenzen erhält man:

$$\begin{aligned} W &= \int_0^{\infty} \psi_0^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot 4\pi \cdot r^2 \cdot dr \\ &= 4\pi \cdot \psi_0^2 \cdot \int_0^{\infty} r^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr \end{aligned}$$

(Anmerkung: Auf das korrekte Setzen der Betragsstriche wird hier aus Übersichtlichkeitsgründen verzichtet. Am Ende der Rechnung, müssen diese jedoch wieder berücksichtigt werden.)

Dieses Integral kann nun in mehreren Schritten mit Hilfe des Verfahrens der partiellen Integration gelöst werden. Allgemein gilt:

$$\int u(x) \cdot v'(x) \cdot dx = u(x) \cdot v(x) - \int u'(x) \cdot v(x) \cdot dx$$

Angewendet auf den Sachzusammenhang erhält man:

$$u(x) = r^2 \Rightarrow u'(x) = 2r$$

$$v'(x) = e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \Rightarrow v(x) = -\frac{r_B}{2} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}}$$

Daraus ergibt sich für das obige Integral:

$$\int_0^{\infty} r^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr = \left[r^2 \cdot \left(-\frac{r_B}{2} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \right) \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} 2r \cdot \left(-\frac{r_B}{2} \right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr$$

Durch Einsetzen der Integrationsgrenzen in die Stammfunktion erhält man für die eckige Klammer den Wert Null, da auf der einen Seite für $r \rightarrow \infty$ die e-Funktion den Wert Null annimmt und auf der anderen Seite für $r = 0$ der Faktor r^2 den Wert Null annimmt. Es bleibt also als Ergebnis das Integral:

$$\int_0^{\infty} r^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr = \int_0^{\infty} r \cdot r_B \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr = r_B \cdot \int_0^{\infty} r \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr$$

Hier kann nun ein zweites Mal die partielle Integration angewendet werden:

$$u(x) = r \Rightarrow u'(x) = 1$$

$$v'(x) = e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \Rightarrow v(x) = -\frac{r_B}{2} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}}$$

Daraus folgt für das Integral:

$$\int_0^{\infty} r \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr = \left[r \cdot \left(-\frac{r_B}{2} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \right) \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} 1 \cdot \left(-\frac{r_B}{2} \right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr$$

Hier ist erneut die eckige Klammer gleich Null und bleibt schließlich das Integral:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} r^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr &= r_B \cdot \int_0^{\infty} -\frac{r_B}{2} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr \\ &= -\frac{r_B^2}{2} \cdot \int_0^{\infty} e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr \end{aligned}$$

$$= -\frac{r_B^2}{2} \cdot \left[-\frac{r_B}{2} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \right]_0^\infty$$

Beim Einsetzen der Grenzen erhält man für $r \rightarrow \infty$ erneut den Wert Null. Für die untere Grenze $r = 0$ nimmt die e-Funktion jedoch den Wert 1 an, sodass man für das Integral den folgenden Zusammenhang erhält:

$$\int_0^\infty r^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr = -\frac{r_B^2}{2} \cdot \left[0 - \left(-\frac{r_B}{2} \cdot 1 \right) \right] = -\frac{r_B^3}{4}$$

Unter korrekter Anwendung der Betragstriche (siehe Anmerkung oben) erhält man:

$$\left| \int_0^\infty r^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr \right| = \frac{r_B^3}{4}$$

Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im gesamten Wasserstoffatom, also von $r = 0$ bis $r \rightarrow \infty$ ergibt sich also:

$$W = 4\pi \cdot \psi_0^2 \cdot \left| \int_0^\infty r^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \cdot dr \right| = 4\pi \cdot \psi_0^2 \cdot \frac{r_B^3}{4} = \pi \cdot r_B^3 \cdot \psi_0^2$$

Da sich aber in einem nicht ionisierten Wasserstoffatom immer genau ein Elektron befindet, muss für das gesamte Wasserstoffatom die Aufenthaltswahrscheinlichkeit genau 1 bzw. 100% sein. Daraus folgt:

$$W = \pi \cdot r_B^3 \cdot \psi_0^2 = 1$$

Umgestellt ergibt sich für ψ_0^2 somit:

$$\psi_0^2 = \frac{1}{\pi \cdot r_B^3}$$

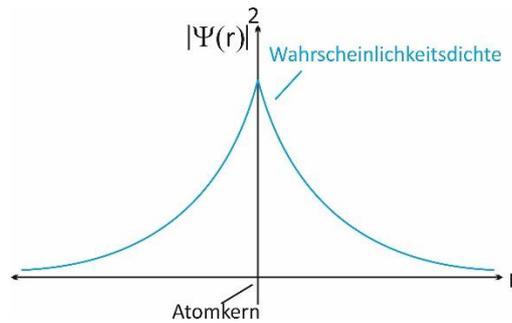
Und für die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &= \psi_0^2 \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \\ &= \frac{1}{\pi \cdot r_B^3} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \end{aligned}$$

Also:

$$|\psi(r)|^2 = \frac{1}{\pi \cdot r_B^3} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}}$$

Jedem Wert r kann also genau eine Wahrscheinlichkeitsdichte zugeordnet werden. Trägt man die Wahrscheinlichkeitsdichte in Abhängigkeit von r in einem Koordinatensystem auf, so ergibt sich der folgende Kurvenverlauf:



Es ist zu beobachten, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte im Atomkern für $r = 0$ am größten ist. Nach außen hin nimmt die Wahrscheinlichkeitsdichte exponentiell ab. Das Wasserstoffatom nach Schrödinger ist also kein fest begrenztes Gebilde mit diskreten Bahnen, wie sie noch im Bohrschen Atommodell angenommen wurden, sondern ein unscharfer kugelsymmetrischer Raum, in dem das Elektron nur mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit an einem bestimmten Ort anzutreffen ist. Der genaue Ort, an dem sich ein Elektron aufhält, bleibt bis zu einer Messung unscharf. Die Elektronen befinden sich also im Zustand der Superposition, wie er bereits vom berühmten Doppelspaltexperiment bekannt ist.

Zum Abschluss soll nun noch berechnet werden, an welcher Stelle, genauer bei welchem Radius, die tatsächliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit für die Elektronen im Wasserstoffatom am größten ist. So ist zwar die Wahrscheinlichkeitsdichte für $r = 0$ am größten und nimmt dann nach außen hin exponentiell ab, allerdings ist für $r = 0$ das Volumen, in dem sich die Elektronen aufhalten können, infinitesimal klein, sodass die tatsächliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit trotz hoher Wahrscheinlichkeitsdichte dort gegen Null geht.

Gesucht ist im Folgenden also eine Kugelschale im Abstand r um den Atomkern, mit der infinitesimal kleine Dicke dr , in der die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für die Elektronen am größten ist. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte gilt:

$$|\psi(r)|^2 = \frac{dW}{dV}$$

Umgestellt ergibt sich:

$$\begin{aligned} dW &= |\psi(r)|^2 \cdot dV \\ &= |\psi(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr \\ &= \frac{1}{\pi \cdot r_B^3} \cdot e^{-2\frac{r}{r_B}} \cdot 4\pi r^2 dr \\ &= \frac{4\pi r^2}{\pi \cdot r_B^3} \cdot e^{-2\frac{r}{r_B}} \cdot dr \\ &= \frac{4}{r_B^3} \cdot r^2 \cdot e^{-2\frac{r}{r_B}} \cdot dr \end{aligned}$$

Da nun der Radius mit der größten Aufenthaltswahrscheinlichkeit gesucht ist, muss in der obigen Formel der Ausdruck

$$f(r) = r^2 \cdot e^{-2\frac{r}{r_B}}$$

ein Maximum annehmen. Dieses wird analog zu Extremwertproblemen in der Mathematik mit Hilfe der Nullstellen der Ableitungsfunktion berechnet. Für Extremstellen gilt das notwendige Kriterium:

$$f'(r) = 0$$

Mit der Produktregel ergibt sich für die erste Ableitung:

$$\begin{aligned} f'(r) &= 2r \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} + r^2 \cdot \left(-\frac{2}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \\ &= 2r \cdot \left(1 - \frac{r}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \end{aligned}$$

Wird die Ableitung gleich nun gleich Null gesetzt, so ergibt sich aufgrund der Produkt-Null-Regel:

$$\begin{aligned} 2r \cdot \left(1 - \frac{r}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} &= 0 \\ \Rightarrow 2r = 0 \quad \vee \quad 1 - \frac{r}{r_B} = 0 \end{aligned}$$

Aufgelöst nach dem Radius erhält man zwei mögliche Extremstellen:

$$r = 0 \quad \vee \quad r = r_B$$

Es gilt nun noch zu überprüfen, bei welcher der beiden Extremstellen ein Maximum vorliegt. Hierzu wird die zweite Ableitung von f herangezogen:

$$\begin{aligned} f''(r) &= 2 \left(1 - \frac{r}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} + 2r \cdot \left(-\frac{1}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} + 2r \cdot \left(1 - \frac{r}{r_B}\right) \cdot \left(-\frac{2}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \\ &= 2 \left(1 - \frac{r}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} - \frac{2r}{r_B} \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} - \frac{4r}{r_B} \cdot \left(1 - \frac{r}{r_B}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \\ &= 2 \cdot \left(\left(1 - \frac{r}{r_B}\right) - \frac{r}{r_B} - \frac{2r}{r_B} \cdot \left(1 - \frac{r}{r_B}\right) \right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \\ &= 2 \cdot \left(1 - \frac{r}{r_B} - \frac{r}{r_B} - \frac{2r}{r_B} + \frac{2r^2}{r_B^2}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \\ &= 2 \cdot \left(1 - \frac{4r}{r_B} + \frac{2r^2}{r_B^2}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r}{r_B}} \end{aligned}$$

In die zweite Ableitung können nun die beiden Extremstellen eingesetzt werden:

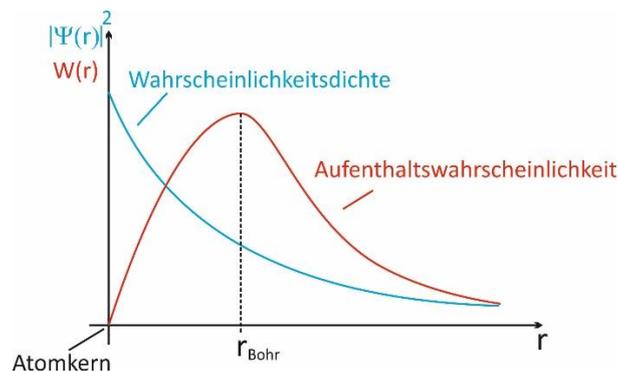
$$f''(r = 0) = 2 \cdot \left(1 - \frac{4 \cdot 0}{r_B} + \frac{2 \cdot 0^2}{r_B^2}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{0}{r_B}} = 2 \cdot 1 \cdot 1 = 2 > 0$$

Für $r = 0$ nimmt die zweite Ableitung einen Wert größer als Null an. Bei der Extremstelle handelt es sich also um ein lokales Minimum. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Elektron im Atomkern, also im Proton ist somit minimal.

$$f''(r = r_B) = 2 \cdot \left(1 - \frac{4r_B}{r_B} + \frac{2r_B^2}{r_B^2}\right) \cdot e^{-2 \cdot \frac{r_B}{r_B}}$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \cdot (1 - 4 + 2) \cdot e^{-2} \\
&= 2 \cdot (-1) \cdot e^{-2} \\
&= -2 \cdot e^{-2} < 0
\end{aligned}$$

Für $r = r_B$ nimmt die zweite Ableitung einen negativen Wert an. Bei der Extremstelle handelt es sich also um ein lokales Maximum. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für eine Elektron ist also in einem Abstand von einem Bohrschen Radius maximal. Dies entspricht interessanter Weise im Bohrschen Atommodell gerade dem Elektron im Grundzustand.



Die diskrete Kreisbahn mit dem Radius r_B , auf der sich das Elektron im Bohrschen Atommodell um den Atomkern bewegt, wird also von Schrödinger durch eine Kugelschale ersetzt, in der die Wahrscheinlichkeit, das Elektron anzutreffen, am größten ist. Hierdurch wird das eingangs erwähnten Problems der instabilen Atome gelöst, da sich die Elektronen im Atommodell von Schrödinger nicht mehr auf Kreisbahnen bewegen und somit auch keine elektromagnetische Strahlung mehr abgeben können. Der Aufenthaltsort der Elektronen bleibt unbestimmt und kann mit Hilfe der Wellenfunktion lediglich in Form von Aufenthaltswahrscheinlichkeiten angegeben werden.

Abschließende Bemerkung:

Die Ausführungen zum Wasserstoffatom nach Schrödinger stellen nur einen kleinen Ausblick in die Welt der Quantenmechanik dar. Bei der Erstellung des Textes und der Rechnungen wurde darauf geachtet, dass die Inhalte mit den mathematischen Mitteln der gymnasialen Oberstufe nachvollzogen werden können. Auf physikalische Schreibweisen, wie sie im Studium der Physik verwendet werden, wurde hier bewusst verzichtet, auch wenn es dadurch vielleicht an der ein oder anderen Stelle an der mathematischen bzw. physikalischen Präzision mangelt. Die durch diese didaktische Reduktion entstandenen Ungenauigkeiten bitte ich zu entschuldigen. Dem physikalisch interessierten Leser empfehle ich für das weitere Studium und zum Erlangen eines tieferen Verständnisses die Vorlesungen von Richard Feynman zur Quantenmechanik. Physikalisch interessierten Schülerinnen und Schülern empfehle ich zudem das Buch „Atomphysik in der Schule“ von Wilfried Kuhn. Der Aufbau meiner Ausführungen ist grob an Kuhns Kapitel II „Die Atommodelle der modernen Physik“ angelehnt.