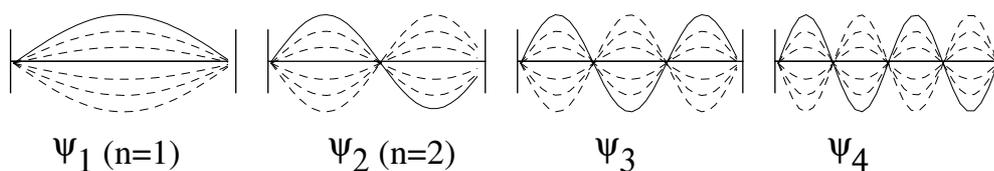


### Kapitel 3: Eindimensionale stehende Wellen

In der klassischen Physik wird das Elektron als gewöhnliches Teilchen betrachtet, welches den Gesetzen der Mechanik gehorcht. In der quantenchemischen Betrachtungsweise wird zuerst einmal die dem Elektron zugehörige Materiewelle berechnet. Dann wird das Verhalten dieser Materiewelle im Anziehungsfeld des Atomkerns oder der Atomkerne untersucht. Es handelt sich hier immer um stehende Wellen, welche durch ihre Auslenkungen am Ort  $x$  Rückschlüsse auf die Wahrscheinlichkeit ein Elektron an diesem Ort im Atom anzutreffen zulassen. Wie die Elektronen von einem Ort zum anderen gelangen, ist ungeklärt. Es geht nun in erster Linie einmal darum anhand des einfachsten Falles von stehenden Wellen, den eindimensionalen stehenden Wellen, deren Verhalten und Eigenschaften genauer zu untersuchen. Die gewonnenen Erkenntnisse können dann auf die etwas komplizierteren zwei- und dreidimensionalen stehenden Wellen übertragen werden.

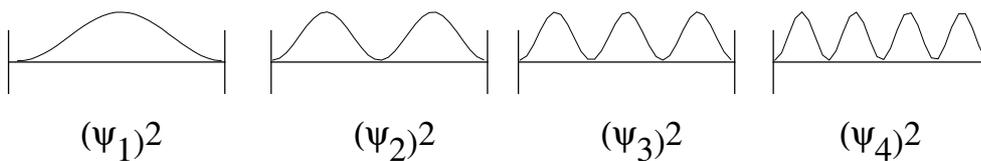
Eindimensionale stehende Wellen lassen sich sehr schön mittels eines Gummibandes darstellen, welches an zwei Punkten befestigt und an einem Ende zum Schwingen angeregt wird. Die erzeugten Wellen laufen über das Gummiband zum gegenüberliegenden Befestigungspunkt, werden dort reflektiert und laufen über den nachfolgenden Wellenzug zurück. Das sind genau die Bedingungen, welche zu stehenden Wellen führen können. Durch die Befestigungspunkte des Gummibandes sind bereits zwei Knoten vorgegeben. Weitere Knoten können sich aber nur gleichmässig über das Band verteilen, wenn ein Vielfaches der halben Wellenlänge genau auf dem Band Platz hat. Ansonsten entsteht eine chaotisch fortschreitende Welle. Im Extremfall löscht sich die Welle gleich selber aus.

Eine stehende Welle kann durch eine Schwingungsfunktion  $\psi$  (griech. Psi, Symbol für eine stehende Welle) beschrieben werden. In dieser Funktion enthalten sind die Bandlänge  $L$  und die Anzahl Wellenberge und -täler in der Schwingung  $n$ . Bei gleicher Bandlänge unterscheiden sich die Wellenfunktionen nur durch den Faktor  $n$ . Die einfachste mögliche Schwingung besitzt den Wert  $n=1$ , dann folgen die Schwingungen mit  $n=2$ ,  $n=3$  usw.



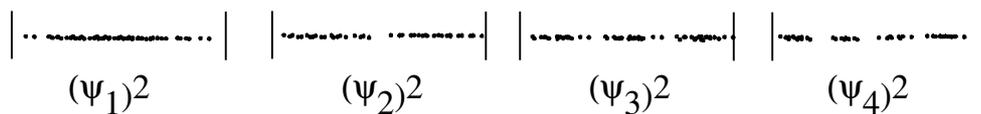
(Die durchgezogene Linie stellt einen möglichen Schwingungszustand mit grösstmöglicher Auslenkung dar. Die gestrichelten Linien zeigen, wie die Linie (Gummiband) schwingt.)

Stellen wir uns anstelle des Gummibandes eine Materiewelle vor, so würde das Quadrat der Materiewelle Auskunft geben über die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen an einem bestimmten Ort auf der Strecke zwischen den beiden Enden der Schwingung anzutreffen. Auf der nächsten Bildsequenz sind die Quadrate der oben mit durchgezogenen Linien gezeichneten Schwingungen gezeichnet:



Je grösser nun die Auslenkung an einem bestimmten Ort auf der Strecke zwischen den beiden Befestigungspunkten ist, desto grösser ist die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen zu einem bestimmten Zeitpunkt genau an diesem Ort anzutreffen. Mit einem Gedankenexperiment können wir diese Tatsache verdeutlichen:

Wir stellen uns einen Photoapparat vor, mit dem wir die Strecke z.B. 50 mal photographieren. Je höher die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens an einem bestimmten Ort auf der Strecke ist, desto öfters sollte man es an diesem Ort photographieren können. Zur besseren Uebersicht werden die 50 Bilder übereinandergelagert. Es gibt dann für die zuvor erwähnten Schwingungen folgende Bilder:

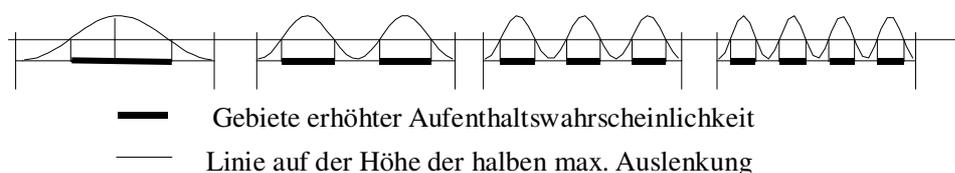


### Fragen zu Kapitel 3

1. Was bedeutet es für ein Elektron, wenn dessen Materiewelle eine Wellenlänge hat, welche im zur Verfügung stehenden Raum keine stehende Welle bilden kann?
2. Welche Bedeutung hat der griechische Buchstabe  $\Psi$ ?
3. Markieren Sie auf den Schwingungstrecken der eindimensional stehenden Wellen diejenigen Gebiete, wo die Aufenthaltswahrscheinlichkeit mehr als  $1/2$  des Quadrats der Amplitude beträgt.
4. Wird in der Quantenchemie das Elektron nicht mehr als Teilchen, sondern als elektromagnetische Welle betrachtet?
5. Wo könnte man in unserer makroskopischen Umgebung stehende Wellen beobachten?
6. Welche der Schwingungsfunktionen  $\Psi_1 - \Psi_4$  ist die Energiereichste?

### Antworten zu Kapitel 3

1. Das Quadrat der Auslenkung an einem bestimmten Ort ist ein Mass für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons an diesem Ort. Wellen mit Wellenlängen, welche die Bedingungen für stehende Wellen nicht erfüllen überlagern sich in geschlossenen Räumen so, dass sie sich selber auslöschen. Das Elektron hat keine stehende Welle und damit auch keine Aufenthaltswahrscheinlichkeiten.
2. Der Buchstabe  $\Psi$  symbolisiert eine Wellenfunktion. Er steht stellvertretend für eine mögliche stehende Welle. Die rechts daneben geschriebenen Indizes beschreiben die Anzahl Wellenberge und -täler.
- 3.



Durch eine dicke schwarze Linie sind die Gebiete eingezeichnet, in denen sich die Elektronen mit einer bestimmten Mindestwahrscheinlichkeit (hier  $1/2$  des Amplitudenquadrates) aufhalten. Auch der Begriff "Elektronenschale" beruht auf dieser Darstellung mit genau definierten Grenzen. In Wirklichkeit hat eine Elektronenschale keine festen Grenzen, genau gleich wie im oben gezeichneten Fall die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in Richtung der Knotenpunkte langsam gegen Null auslaufen.

Durch die Darstellung von Gebieten mit erhöhter Aufenthaltswahrscheinlichkeit erreicht man eine bessere Uebersicht, vorallem wenn es um die Darstellung von komplizierteren Wellenfunktionen geht.

4. Nein! Das Elektron bleibt ein Teilchen im klassischen Sinn, nur lässt sich seine Bewegung nicht mit den Newton'schen Gesetzen der Mechanik vorbestimmen. Zu jedem Körper, der eine Masse hat, lässt sich eine Materiewelle bestimmen. Wenn die Wellenlänge in den Bereich der sich dem Körper in den Weg stellenden Hindernisse gerät, verliert der Körper die Möglichkeit sich an beliebigen Orten aufzuhalten. Das ist in der Regel dann der Fall, wenn der Körper entweder sehr klein oder sehr langsam ist. Je schneller und je grösser der Körper ist, desto weniger manifestieren sich die quantentheoretischen Eigenschaften. In diesem Sinn ist die Newton'sche Mechanik nur ein Sonderfall der allgemein gültigen Prinzipien der Quantentheorie.
5. Zum Beispiel an einer Hafenummauer, wo Wellen reflektiert werden und über die nachfolgenden Wellenzüge zurücklaufen. Die entstehenden stehenden Wellen werden oft "Kabelwasser" genannt.
6. Bei  $\Psi_4$ . Auf der selben Strecke hat es am meisten Wellenberge und Wellentäler, also ist die Frequenz am grössten. Je grösser die Frequenz, desto energiereicher ist die Schwingung. (vgl. Kapitel 1)