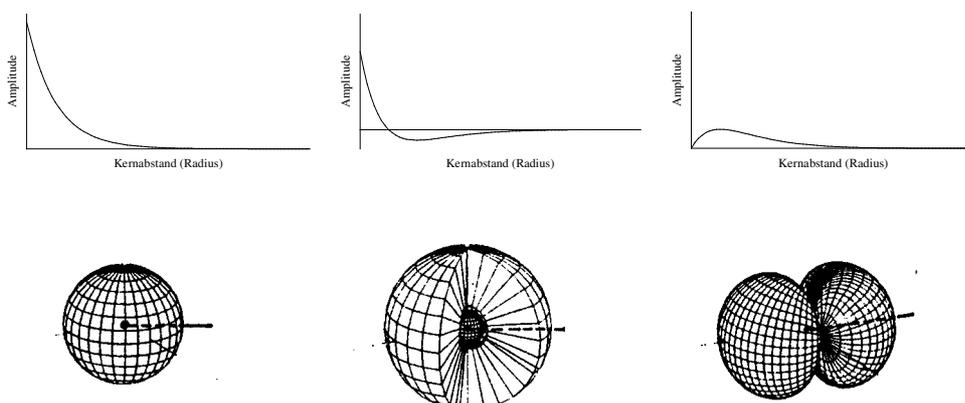


## Kapitel 6: Atomare Wellenfunktionen

Der Einfachheit halber werden Orbitale oder Wellenfunktionen häufig nicht mit  $\Psi_{100}$  oder ähnlich bezeichnet, sondern mit einer speziellen Kurzbezeichnung. Dabei wird die Hauptquantenzahl vorangestellt, gefolgt von einem kleinen Buchstaben für die Drehimpulsquantenzahl. s steht für die Drehimpulsquantenzahl 0, p für 1, d für 2 und f für die Drehimpulsquantenzahl 3. Das  $\Psi_{100}$ -Orbital wird somit als 1s-Orbital bezeichnet. In T5 sind die Kurzschreibweisen aufgeführt. Dort sind auch die Bezeichnungen für die magnetischen Quantenzahlen ersichtlich, welche aber meist weggelassen werden.

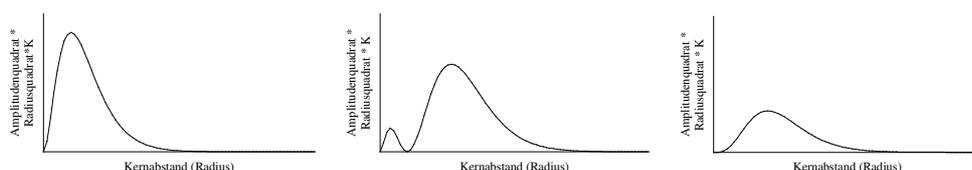
Kugelschalendarstellungen von Räumen mit erhöhter Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit basieren auf quadrierten Wellenfunktionen und eignen sich sehr schön zur Veranschaulichung der Orbitale. Sie sind aber nicht geeignet wenn z.B. die Resultate von Ueberlagerungen von Wellenfunktionen zweier verschiedener Atome abgeschätzt werden sollen. In solchen Fällen ist es wichtig zu wissen, welche Auslenkungen Berge und welche Täler sind. Zu diesem Zweck können die Kugelschalen zum Beispiel mit Farben oder Mustern versehen werden, welche auf die ursprünglichen Amplituden hinweisen.

Oft wird aber zur besseren Uebersicht auf die dreidimensionale Darstellung verzichtet. Es kann stattdessen eine eindimensionale Darstellung der Wellenfunktion gewählt werden, welche aber abhängig ist von den beiden Raumwinkeln  $\vartheta$  und  $\varphi$ . Das bedeutet konkret: Bei einem ausgewählten konstant gehaltenen Raumwinkelpaar  $\vartheta$  und  $\varphi$  wird die Amplitude als Funktion des Abstandes vom Kern gezeichnet. Diese auf eine Dimension reduzierten Wellenfunktionen folgen aus der Schrödingergleichung und sind im Prinzip die Grundlage für alle anderen Darstellungen der Orbitale. Den Orbitalen 1s, 2s und 2p liegen z.B. folgende winkelabhängige Wellenfunktionen zugrunde. (Die Linie durch die Kugelschalen zeigt an, bei welchen Raumwinkeln die Funktionen gezeichnet wurden.)



Erstaunlich ist die Tatsache, dass die Amplitude im Abstand 0 vom Kern bei den 1s und 2s Orbitalen nicht Null ist, was bedeuten würde, dass auf der Kernoberfläche eine hohe Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit herrscht! Dieser Befund bedarf einer Erklärung.

Wir nehmen zuerst an, dass der Kern im Vergleich mit der Elektronenhülle unendlich klein ist. Von diesem unendlich kleinen Punkt aus verlaufen strahlförmig die Abszissen der eindimensionalen Wellenfunktionen bei allen möglichen Raumwinkeln. Quadriert man nun die Wellenfunktionen erhält man die Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeiten auf einem dieser Strahlen, nicht aber diejenige in einer Kugelschale in einem bestimmten Abstand vom Kern. Das Volumen dieser Kugelschalen nimmt mit zunehmendem Kernabstand zu und ist in unendlich kleinem Abstand vom punktförmigen Kern gleich Null. Will man also die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen in einer Kugelschale in einem bestimmten Abstand vom Kern darstellen, muss man die Wellenfunktion zuerst quadrieren und dann mit dem Faktor  $4\pi r^2$ , welcher der Grösse der Kugelschale Rechnung trägt, multiplizieren. Beim Abstand  $r$  gleich Null wird dieser Faktor Null und damit auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im oder am Kern.

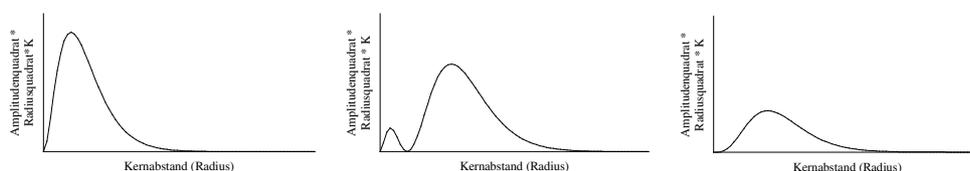


## Fragen zu Kapitel 6

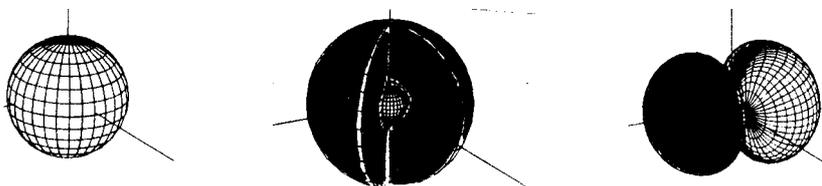
1. Welche Kurzbezeichnung hätte das Orbital  $\Psi_{32}$ ?
2. Wieviele entartete 4d-Orbitale gibt es?
3. Markieren Sie in den Grafiken der quadrierten Wellenfunktionen ungefähr diejenigen Gebiete, welche in diesem Kapitel als Kugelschalen gezeichnet wurden.
4. Färben Sie in den in diesem Kapitel gezeichneten Kugelschalen von  $\Psi_{100}$ ,  $\Psi_{200}$  und  $\Psi_{210}$  die Kugelschalen, welche aus Tälern hervorgegangen sind, schwarz ein.
5. Kommt ihnen der Faktor  $4\pi r^2$  aus der Mathematik irgendwie bekannt vor? Wenn ja in welchem Zusammenhang?
6. Wie gross wäre der Kern in Wirklichkeit auf den oben gezeichneten Abszissen? (Mit Hilfe von L2, Chemiegrundkurs)

## Antworten zu Kapitel 6

1. Es handelt sich um ein 3d-Orbital. Die Ausrichtung der Orbitale im kartesischen x,y,z-Koordinatensystem kann zusätzlich in Form von Indizes angegeben werden. Diese Angaben würden den magnetischen Quantenzahlen entsprechen. z.B.  $2p_y$  für das p-Orbital, welches rotationssymmetrisch bezüglich der y-Achse ist. Die Verhältnisse werden ab den d-Orbitalen komplizierter und sind hier ohne Belang.
2. Die entarteten d-Orbitale unterscheiden sich in ihren magnetischen Quantenzahlen. Nach Frage 4, Kapitel 5, können die magnetischen Quantenzahlen betragsmässig höchstens den Wert der Drehimpulquantenzahl annehmen, allerdings sind negative Werte möglich. Mit  $l=2$  (d-Orbital) darf  $m=2,1,0,-1,-2$  sein. Es gibt 5 entartete d-Orbitale. Die fünf Orbitale sind ebenfalls in T5 dargestellt.
- 3.



4.



Aus Tabelle 7 kann abgeleitet werden, dass die beiden Schwingungsbäuche in den p-Orbitalen gerade entgegengesetzte Auslenkungen haben. Man muss sich die Schwingung im p-Orbital ähnlich wie eine Schwingung einer Kinderschaukel vorstellen. Geht es auf der einen Seite hinauf, so geht es auf der anderen Seite hinunter.

5. Mit  $4\pi r^2$  kann die Oberfläche einer Kugel mit dem Radius  $r$  berechnet werden. Eine Kugelschale kleiner Dicke hat ungefähr das Volumen  $4\pi r^2$  mal die Dicke. Wenn Kugelschalen gleicher Dicke verglichen werden, ist das Volumen nur abhängig von der Oberfläche der Schale. Man kann mit  $4\pi r^2$  dem Volumen der Kugelschale bei der Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit Rechnung tragen.
6. Nach L2 beträgt der Durchmesser des Kerns ca.  $1/10000$  des Atomdurchmessers. Auf der Abszisse von 3 cm wären das gerade 0.003 mm, also nicht sichtbar  $>0$ .