Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion

Basics

- Die *absolute* Wahrscheinlichkeit w, ein Elektron in einem differentiell kleinen Volumen **d*V*** zu finden ist .

$$w = \psi \cdot \psi^* \cdot dV$$

  - Dabei ist w *immer* eine reelle *Zahl* zwischen **0** und **1**.
  - Die Zahl die man erhält wenn man **ψ·ψ*** mit dem *differentiellen Volumen* $dV = dxdydz$ multipliziert, geht natürlich gegen **0** für **d*V*** gegen Null.
  - Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron an einem konkreten Punkt (mit Ausdehnung **0**) zu finden ist deshalb *immer* **0** - *und das ist nicht sehr hilfreich*.
- Dividiert man w durch **d*V*** erhält man **ψ·ψ***; dies ist dann eine *Dichte*, nämlich die **Wahrscheinlichkeitsdichte** am Punkt **(*x, y, z*)**.
  - Diese Zahl kann *beliebige* Werte annehmen, sie kann insbesondere auch **> 1** sein (was eine absolute Wahrscheinlichkeit *nicht* darf).
- Die Wahrscheinlichkeits*dichte* **ψ·ψ*** für **s** - Elektronen ist nun offenbar *im Atomkern, d.h. bei $r = 0$ am höchsten*.
  - *Aber so paradox das auch klingen mag*: Das sagt aber nicht unbedingt etwas darüber aus, wo man ein Elektron bei einem gegebenen Experiment *am ehesten* finden wird.
  - Sucht man in einem **d*V*** um einen gegebenen *Punkt* **(*x,y,z*)**, ist es tatsächlich umso wahrscheinlicher ein Elektron zu finden, je näher man dem Kern kommt. Denn in diesem Fall ist **ψ·ψ*** mit $dV = dxdydz = \text{const}$ zu multiplizieren.
  - Das ist jedoch *kein* sinnvolles Suchkriterium beim Vorliegen einer *Radialsymmetrie*, d.h. wenn ψ nur eine Funktion des Abstands r ist.
- Sinnvoller ist dann die Frage: Wie groß die Wahrscheinlichkeit **W(r)**, das Elektron *irgendwo im Abstand* r, oder genauer gesagt, in der Kugelschale zwischen r und $r + dr$ zu finden.
  - Dazu ist $\psi(r) \cdot \psi(r)^*$ mit dem (differentiellen) Volumen dieser Kugelschale zu multiplizieren.
  - Dieses Volumen **d*V*(*r*)** ist gegeben durch die Oberfläche der Kugel bei r , multipliziert mit der (differentiell kleinen) Höhe **d*r***; wir haben

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

- Um **W(r)** zu erhalten müssen wir also die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi \cdot \psi^*$ mit $4\pi \cdot r^2 \cdot dr$ multiplizieren. Wir erhalten zunächst $W(r = 0) = 0$, und bei genauerem Überlegen eine Funktion, die bei einem bestimmten r ein Maximum hat und im Atomkern Null ist - also ein komplett verschiedenes Ergebnis.
  - Die Funktion **W(r)** heißt **radiale Verteilungsfunktion**. Der Ort des Maximums entspricht dann genau dem Bohrschen Radius r_0
- Ähnliche Betrachtungen gelten für alle Fälle, in denen *radialsymmetrische* Strukturen vorliegen.
  - Bei amorphen Körpern ist z.B. die Wahrscheinlichkeit, ein Atom im Abstand r von einem gewählten Ursprung zu finden, in alle Raumrichtungen gleich (dies ist die Definition von "Amorph").
- Die exakt gleiche Thematik wird uns beim Grundphänomen der Diffusion wieder beschäftigen.
  - Zur mentalen Gymnastik dazu stellen wir uns mal folgende einfache Frage: Wir betrachten eine Folge von Volltrunkenen, die aus einer bei $x,y = 0$ gelegenen Kneipe heraustorkeln und eine **Zufallsbewegung** (random walk) ausführen. Jeder Schritt ist **50 cm** lang und führt mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach vorne, hinten, links und rechts (wir haben (zweidimensionale) Radialsymmetrie).
  - Wir lassen eine große Zahl von Betrunkenen "laufen" und messen die Verteilung nach **100** Schritten, d.h. wir fragen nach der Wahrscheinlichkeit, bei **(*x,y*)** einen Betrunkenen zu finden.
  - Alternativ fragen wir nach der Wahrscheinlichkeit, im Abstand r von der Kneipe einen Betrunkenen zu finden. Die Antwort, die zu einer der wichtigsten Formeln der Materialwissenschaft führt, paßt genau in das obige Schema.