

Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion

Basics

Die **absolute** Wahrscheinlichkeit w , ein Elektron in einem differentiell kleinen Volumen dV 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 $\psi \cdot \psi^*$ mit dem **differentiellen Volumen** $dV = dx dy dz$ multipliziert, geht natürlich gegen **0** für dV 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 dV erhält man $\psi \cdot \psi^*$; 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** $\psi \cdot \psi^*$ 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 dV 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 $\psi \cdot \psi^*$ mit $dV = dx dy dz = \text{const}$ 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 $dV(r)$ ist gegeben durch die Oberfläche der Kugel bei r , multipliziert mit der (differentiell kleinen) Höhe dr , 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.