

## Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

### Lösungen zu Übung 4: Quantenmechanik; Packungsdichte

#### Aufgabe 7: Zum Tunneleffekt (Schrödinger-Gleichung eines Potentialtopfmodells)

- a) Die Schrödinger-Gleichung des Teilchens im Gebiet (2) lautet wie folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - V_0 \psi = E \psi \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi = 0 \quad (1)$$

- b) Um zu zeigen, daß die gegebene Funktion  $\psi_2(x)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Gebiet (2) ist, wird überprüft, ob sie die Schrödinger-Gleichung erfüllt, bzw. unter welcher Voraussetzung an die Konstante  $k$  das der Fall ist:

$$\begin{aligned} \psi_2(x) &= B e^{ikx} + C e^{-ikx} \\ \psi_2'(x) &= ik B e^{ikx} - ik C e^{-ikx} \\ \psi_2''(x) &= -k^2 B e^{ikx} - k^2 C e^{-ikx} = -k^2 \psi_2(x) \end{aligned}$$

Einsetzen in Gl. (1) liefert:  $-k^2 \psi_2(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi_2(x) = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) - k^2 \right] \psi_2(x) = 0$ . Als notwendige Bedingung, um diese Gleichung zu erfüllen, folgt daraus  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)}$ .

Wegen der Exponentialfunktion mit komplexem Argument ist  $\psi_2(x)$  eine Welle, und  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  ist der Wellenvektor; er ist über die De-Broglie-Gleichung mit dem Impuls  $p$  verknüpft:  $p = \hbar k$ . Im Potentialtopf gilt offenbar:  $p = \hbar k = \sqrt{2m(E + V_0)}$ , und weil  $E + V_0$  die Differenz zwischen dem Energieniveau  $E$  und dem Boden des Potentialtopfes ist (wg.  $-V_0 < E < 0$ ), ist das identisch mit dem klassischen Energie-Impuls-Zusammenhang eines freien Teilchens: Die klassische kinetische Energie ist  $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$ , und das liefert hier  $E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{2m(E + V_0)}{2m} = E + V_0$ .

- c) Im Gebiet (3) lautet die Schrödinger-Gleichung des Teilchens wie folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (2)$$

- d) Um zu zeigen, daß die gegebene Funktion  $\psi_3(x)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Gebiet (3) ist, wird überprüft, ob sie die Schrödinger-Gleichung erfüllt:

$$\begin{aligned} \psi_3(x) &= D e^{-\alpha x} \\ \psi_3'(x) &= -\alpha D e^{-\alpha x} \\ \psi_3''(x) &= \alpha^2 D e^{-\alpha x} = \alpha^2 \psi_3(x) \end{aligned}$$

Einsetzen in Gleichung (2) liefert:  $\alpha^2 \psi_3(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_3(x) = \left[ \alpha^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E \right] \psi_3(x) = 0$ . Das kann nur erfüllt werden, falls  $\alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ ; q.e.d.

- e) Im Bereich (3) beträgt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte:  $|\psi_3(x)|^2 = \psi_3(x) \psi_3^*(x) = |D|^2 e^{-2\alpha x}$ . Daraus folgt die Gesamt-Aufenthaltswahrscheinlichkeit:  $W_3 = \int_w^\infty |D|^2 e^{-2\alpha x} dx =$

$-\frac{|D|^2}{2\alpha} [e^{-2\alpha x}]_w^\infty = \frac{|D|^2}{2\alpha} e^{-2\alpha w}$ . Dies kann geschrieben werden als  $W_3 = \frac{|\tilde{D}|^2}{2\alpha}$ , wobei  $\tilde{D} := De^{-\alpha w} = \psi_3(w)$ ; damit ist  $\psi_3(x) = De^{-\alpha x} = \tilde{D}e^{-\alpha(x-w)} = \psi_3(w) e^{-\alpha(x-w)}$ , und das ist ein exponentielles Abklingen vom Randwert aus.

Dieses Ergebnis unterscheidet sich fundamental von dem für klassische Teilchen, denn diese können sich nicht außerhalb des Potentialtopfes aufhalten, so daß  $W_{3, \text{klass}} = 0$ . Das klassische Ergebnis erhält man für den Fall  $W_3 = \frac{|\tilde{D}|^2}{2\alpha} = \frac{|\tilde{D}|^2 \hbar}{2\sqrt{-2mE}} \rightarrow 0$ . Dies ergibt sich für  $m \rightarrow \infty$  oder für  $E \rightarrow -\infty$ , was voraussetzt, daß  $V_0 \rightarrow \infty$ .

Fazit: Nur in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden ist ein quantenmechanisches Teilchen vollständig eingesperrt; für Teilchen mit genügend großer Masse reicht dazu bereits eine Potentialbarriere endlicher Höhe.

- f) Die zu  $\psi_3(x) = D'e^{+\alpha x}$  gehörende Wahrscheinlichkeitsdichte divergiert für  $x \rightarrow \infty$ . Das aber widerspricht dem Zustand des gebundenen Teilchens, das sich nur im Topf und in dessen Nähe aufhalten kann. Außerdem wäre eine solche Wellenfunktion nicht normierbar; das Integral  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$  würde divergieren, müßte aber 1 ergeben.
- g) Wegen  $x < 0$  ist hier  $\psi_1(x) = Ae^{\alpha x}$  die nicht-divergierende Lösung (mit dem gleichen  $\alpha$  wie bei  $\psi_3$ ).
- h) Aufgrund der endlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Gebiet (3), die sich bis nach  $\infty$  erstreckt, gibt es die Möglichkeit, das Teilchen in dem anderen Potentialtopf zu finden. Klassisch betrachtet, kann das Teilchen den anderen Potentialtopf nicht erreichen; bei einem quantenmechanischen Teilchen ist das möglich, man spricht dabei vom Tunneleffekt.
- i) Kurz gesagt, liegt es daran, daß wir es hier mit der Welleneigenschaft des Elektrons zu tun haben, und ein solches exponentielles Abklingen in einen „verbotenen Bereich“ hinein ist bei Wellen normal; mehr dazu am Ende der folgenden, sehr ausführlichen Erläuterung.

In der Quantenmechanik gibt es keine Kräfte wie in der klassischen Physik, wo ein Potentialtopf den exakten Wert der potentiellen Energie an der gegebenen Position angibt und  $\vec{F} = -\nabla U$  gilt, denn wegen der Heisenbergschen Unschärferelation gibt es keine exakte Teilchenposition und also auch keine exakte potentielle Energie; daher kann keine Kraft berechnet werden, die ein Teilchen zurückhalten würde. Exakt bekannt sind nur die Wellenfunktion und die Gesamtenergie; alle anderen Größen müssen daraus berechnet werden.

Trotzdem kann von einem Teilchen „in einem Potentialtopf“ gesprochen werden, wenn seine Gesamtenergie unterhalb der Oberkante des Potentialtopfs liegt: In diesem gebundenen Zustand wird Energie von außen benötigt, um das Teilchen komplett aus dem Potentialtopf zu lösen und ins Unendliche zu bringen. Denn obwohl sich das quantenmechanische Teilchen zwar nicht nur im Potentialtopf aufhält, sondern auch außerhalb desselben eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit hat, ist sein Aufenthalt im Unendlichen wegen  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} |\psi(x)|^2 = 0$  ausgeschlossen.

In der Quantenmechanik wird die „Wirkung“ des Potentialtopfs auf das Teilchen nicht anhand der Kraft, sondern über die Schrödingergleichung erfaßt; darin ist das Potential mit der 2. Ableitung der Wellenfunktion verknüpft und beeinflusst also deren Krümmung (innerhalb des Potentialtopfs) bzw. das exponentielle Abklingen (außerhalb desselben). Am Rand des Potentialtopfs sind Randbedingungen für die Wellenfunktion zu berücksichtigen (den Teil des vollständigen Lösungswegs haben wir hier weggelassen); dort ändert sich ihr Verhalten

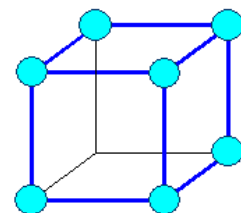
(oszillierend vs. abklingend). Ein Potentialtopf mit endlicher Tiefe führt zu einem endlichen Randwert und einem endlichen Abklingen, er kann keine strikte Ortseinschränkung bewirken.

Der quantenmechanische Tunneleffekt wirkt nur deshalb so exotisch, weil es um das Verhalten eines *Teilchens* geht. Als *Wellenphänomen* ist er nicht auf die Quantenmechanik beschränkt. Bei der klassischen Wellenausbreitung gibt es z. B. den Fall der „evaneszenten Wellen“ bei der Totalreflexion: Sie dringen in einen Bereich ein, in dem sie sich nicht ausbreiten können. Befindet sich dort jedoch in nicht zu großem Abstand ein für die Wellenausbreitung geeignetes Medium, tritt die Welle dorthin über; man spricht dann vom „optischen Tunneleffekt“.

### Aufgabe 8: Packungsdichte kubischer Gitter

- a) Zur Anzahl nächster Nachbarn: Die gezeigten Würfel sind nur Ausschnitte eines unendlich ausgedehnten Gitters, bei dem sich die Kugelanordnung des jeweiligen Würfels räumlich periodisch wiederholt.
- i) Beim kubisch-primitiven Gitter (sc) befinden sich die nächsten Nachbarn an den direkt benachbarten Eckpunkten des Gitters; zu ihnen gelangt man längs der Würfelkanten, also beträgt der Abstand eine Gitterkonstante. Aus der kubischen Symmetrie folgt, daß jede Kugel 6 nächste Nachbarn hat, weil es 3 kubische Achsen gibt (mit je 2 nächsten Nachbarn).
- ii) Beim kubisch-raumzentrierten Gitter (bcc) befinden sich die nächsten Nachbarn ebenfalls an den direkt benachbarten Eckpunkten, aber hier gelangt man vom Würfelmittelpunkt aus dorthin; also beträgt der Abstand eine halbe Raumdiagonale, d. h.  $\sqrt{3}a/2$ . Aus der kubischen Symmetrie folgt, daß jede Kugel 8 nächste Nachbarn hat, weil es 4 Raumdiagonalen gibt (mit je 2 nächsten Nachbarn).
- iii) Beim kubisch-flächenzentrierten Gitter (fcc) befinden sich die nächsten Nachbarn wiederum an den direkt benachbarten Eckpunkten, aber hier gelangt man vom Mittelpunkt der Seitenfläche aus dorthin; somit beträgt der Abstand eine halbe Flächendiagonale, d. h.  $a/\sqrt{2}$ . Aus der kubischen Symmetrie folgt, daß jede Kugel 12 nächste Nachbarn hat, weil es in jeder der drei Raumrichtungen zwei Flächendiagonalen gibt (mit je 2 nächsten Nachbarn).
- b) Zur Anzahl der Kugeln pro Einheitszelle: Beim kubisch-primitiven Gitter (sc) ragt an den acht Ecken jeweils  $\frac{1}{8}$  einer Kugel in einen Würfel hinein, also enthält ein Würfel effektiv eine ganze Kugel; beim kubisch-raumzentrierten Gitter (bcc) kommt zu dieser einen Kugel noch die ganze Mittenkugel hinzu; beim kubisch-flächenzentrierten Gitter (fcc) kommen zur Eckkugel noch sechs halbe Flächenmittenkugeln hinzu, insgesamt sind es also vier Kugeln.
- c) Zur Packungsdichte: Der Kugelradius ist immer der halbe Abstand zum nächsten Nachbarn.
- i) Beim kubisch-primitiven Gitter (sc) ist  $r = \frac{a}{2}$ . Pro Würfel mit dem Volumen  $a^3$  gibt es nur eine Kugel. Daraus folgt:

$$V_{\text{Kugeln}} = \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi \frac{a^3}{8} = \frac{\pi a^3}{6}$$
$$\text{Packungsdichte} = \frac{V_{\text{Kugeln}}}{V_{\text{Würfel}}} = \frac{\frac{\pi a^3}{6}}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0,52359 \dots$$

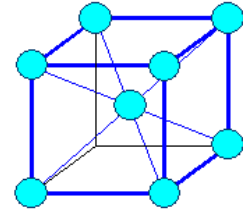


Der zur Verfügung stehende Raum wird nur zu 52,4 % von den Kugeln ausgefüllt.

ii) Beim kubisch-raumzentrierten Gitter (bcc) ist  $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ . Pro Würfel mit dem Volumen  $a^3$  gibt es zwei Kugeln: eine Eckkugel und eine Mittenkugel. Daraus folgt:

$$V_{\text{Kugeln}} = 2 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{8}{3}\pi \frac{3\sqrt{3}}{4^3}a^3 = \frac{2}{16}\pi\sqrt{3}a^3 = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi a^3$$

$$\text{Packungsdichte} = \frac{V_{\text{Kugeln}}}{V_{\text{Würfel}}} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0,68017\dots$$

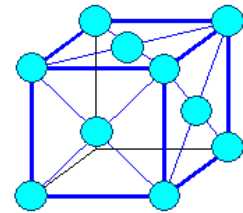


Der zur Verfügung stehende Raum wird zu 68,0 % von den Kugeln ausgefüllt.

iii) Beim kubisch-flächenzentrierten Gitter (fcc) ist  $r = \frac{1}{2\sqrt{2}}a$ . Pro Würfel mit dem Volumen  $a^3$  gibt es vier Kugeln: eine Eckkugel und drei Mittenkugeln. Daraus folgt:

$$V_{\text{Kugeln}} = 4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{16}{3}\pi \frac{a^3}{16\sqrt{2}} = \frac{1}{3\sqrt{2}}\pi a^3$$

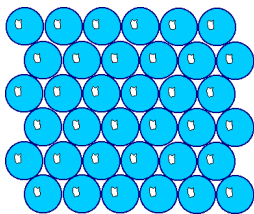
$$\text{Packungsdichte} = \frac{V_{\text{Kugeln}}}{V_{\text{Würfel}}} = \frac{1}{3\sqrt{2}}\pi = 0,74048\dots$$



Der zur Verfügung stehende Raum wird zu 74,0 % von den Kugeln ausgefüllt.

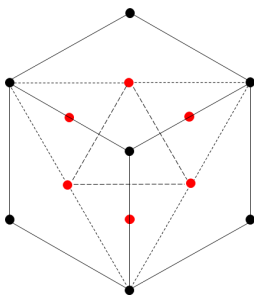
c) Es ist eine der acht möglichen  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen. Dazu dies:

Das fcc-Gitter hat die „dichteste Kugelpackung“, wie auch das hexagonal dichtest gepackte Gitter (engl. „hexagonal close-packed“, hcp). Schauen wir uns eine einzelne Lage Kugeln in hcp-Anordnung näher an:



Rund um eine beliebig herausgegriffene Kugel befinden sich sechs andere in Form eines gleichseitigen Sechsecks. Dieses Sechseck erklärt zwar die Bezeichnung „hexagonal dichtest gepackt“, lässt sich aber nicht leicht beim fcc-Würfel wiederfinden. Nur ein kleiner Ausschnitt aus der „hcp-Ebene“ ist dort zu sehen; diesen Bereich erkennt man wie folgt:

Mit je zwei benachbarten Außenkugeln zusammen bildet die Kugel im Zentrum des „hcp-Sechsecks“ ein gleichseitiges Dreieck. Ein solches Dreieck lässt sich auch bei der fcc-Anordnung finden: An jede Würfecke grenzen drei zum selben Würfel gehörende Seitenflächen, und die drei Flächenmittenkugeln dieser Seitenflächen definieren eine schräg zu den Würfel-flächen liegende Ebene; in dieser Ebene bilden sie ein gleichseitiges Dreieck (lang gestrichelt im Zentrum der folgenden Abbildung; kurz gestrichelt sind die Flächendiagonalen, die auch in der beschriebenen Ebene liegen; schwarze Kugeln: alle Ecken [auch die weiter hinten liegenden], rote Kugeln: alle Flächenmittelpunkte [auch die weiter hinten liegenden]).



Ferner gehören die Kugeln an den drei benachbarten Würfecken ebenfalls zu dieser Ebene; sie ergänzen das erstgenannte gleichseitige Dreieck um weitere gleichseitige Dreiecke, ganz analog zu den gleichseitigen Dreiecken der gezeigten hexagonalen Kugellage. Beim Blick senkrecht auf diese Ebene schaut man dem Würfel sozusagen „maximal symmetrisch“ auf eine Ecke, d. h. man schaut längs einer Raumdiagonalen durch ihn hindurch; das zeigt die nebenstehende Abbildung.