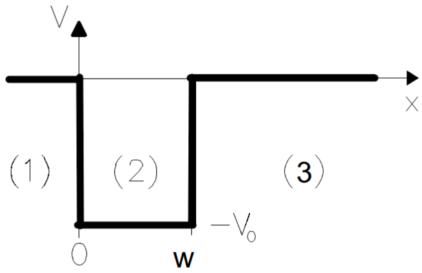
Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Übung 4: Quantenmechanik; Packungsdichte

Aufgabe 7: Zum Tunneleffekt (Schrödingergleichung eines Potentialtopfmodells)

Ein quantenmechanisch zu beschreibendes Teilchen bewege sich in diesem Potential:



Dieses Potential wird definiert durch:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x \leq 0\text{: Gebiet (1)} \\ -V_0 & \text{für } 0 < x < w\text{: Gebiet (2)} \\ 0 & \text{für } x \geq w\text{: Gebiet (3)} \end{cases}$$

Das Teilchen habe eine Energie E, für die gelten soll: $-V_0 < E < 0$ (gebundener Zustand).

a) Wie lautet die Schrödinger-Gleichung des Teilchens im Gebiet (2)?

b) Zeigen Sie, daß $\psi_2(x) = B\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + C\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ (B, C = const.; $B, C \neq 0$; $\mathrm{i}^2 = -1$) eine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Gebiet (2) ist. Was bedeutet k physikalisch, und wie hängt es mit E zusammen? Welche anschauliche Bedeutung hat die Summe $E + V_0$? (Hinweis: Für ein Teilchen, das sich in einem gebundenen Zustand befindet, kann die obige Bedingung für seine Energie E geschrieben werden als $0 < E + V_0 < V_0$.)

c) Wie lautet die Schrödinger-Gleichung des Teilchens im Gebiet (3)?

d) Zeigen Sie, daß $\psi_3(x) = D\mathrm{e}^{-\alpha x}$ (D = const., $D \neq 0$) eine Lösung der Schrödinger-Gleichung im Gebiet (3) ist. Wegen $E < 0$ ist dabei $\alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$.

e) Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_3(x)|^2$ sowie die Gesamt-Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Gebiet (3) und vergleichen Sie das Ergebnis mit Ihrer Erwartung für ein klassisches (also nicht quantenmechanisches) Teilchen. Welche Grenzfälle führen für den quantenmechanischen Potentialtopf auf das klassische Ergebnis?

f) Warum ist die Lösung $\psi_{3'}(x) = D'\mathrm{e}^{\alpha x}$ für das Gebiet (3) physikalisch sinnlos?

g) Wie lautet die physikalisch sinnvolle Lösung für das Gebiet (1)?

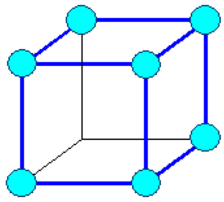
h) Was für eine Konsequenz hat das Ergebnis von Aufgabe e) für den Fall, daß sich irgendwo im Gebiet (3) ein weiterer Potentialtopf (mit gleicher Tiefe) befindet; was kann prinzipiell passieren? (Hinweis: Klassisch gesehen, wäre das nicht möglich.)

i) * Der Tunneleffekt ist ein besonders eindrückliches Quantenphänomen, das unmittelbar mit den Grundprinzipien der Quantenmechanik zusammenhängt – mit welchen? Was am „quantenmechanischen Teilchen **im** Potentialtopf“ führt (zusammen mit der Berechnung von Aufenthaltswahrscheinlichkeiten) zur „Funktionsweise“ des Tunnelns? (Hinweis: Was ist klassisch bzw. quantenmechanisch mit dem **„im“** gemeint?)

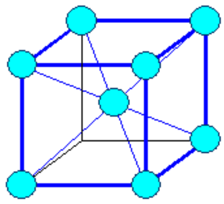
Aufgabe 8: Packungsdichte kubischer Gitter

Unter einem Gitter versteht man eine räumlich periodisch wiederholte Anordnung desselben geometrischen Objekts (hier: Kugeln). Es gibt die folgenden drei Typen kubischer Gitter, veranschaulicht anhand eines charakteristischen Teils des Gitters (Einheitszelle: Würfel der Kantenlänge a; gezeigt sind nur die perspektivisch sichtbaren Kugeln, plus die Mittenkugel beim bcc-Gitter):

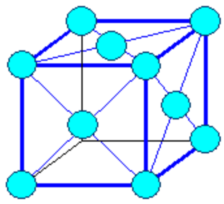
(i) kubisch-primitiv (engl. „simple cubic“ bzw. „sc“):



(ii) kubisch-raumzentriert (engl. „body-centered cubic“ bzw. „bcc“):



(iii) kubisch-flächenzentriert (engl. „face-centered cubic“ bzw. „fcc“):



a) Geben Sie für jedes der drei kubischen Gitter an, wieviele jeweils gleich weit entfernte direkte Nachbarn (engl. „first-nearest neighbors“) jede der Kugeln hat. Wie weit sind diese jeweils entfernt, bezogen auf die Kantenlänge a? Ignorieren Sie dabei die Ausdehnung der Kugeln; der gesuchte Abstand gilt von Kugelmitte zu Kugelmitte.

b) * Geben Sie für jedes der drei kubischen Gitter an, wieviele ganze Kugeln sich jeweils effektiv in einer Einheitszelle befinden.

c) In ein gegebenes Volumen sollen harte Kugeln vom Radius r mit einer Anordnung entsprechend der drei kubischen Gitter eingebracht werden. Wie groß ist jeweils der Anteil (in Prozent) des gegebenen Volumens, der von den Kugeln ausgefüllt wird? (Hinweis: Betrachten Sie, wie sich a und r bei einer Berührung der Kugeln zueinander verhalten.)

d) Die gleiche Packungsdichte wie beim fcc-Gitter kann auch bei einer hexagonalen Anordnung der Kugeln erreicht werden (engl. „hexagonal close-packed structure“ bzw. „hcp“). Diese hexagonale Anordnung unterscheidet sich nur unwesentlich von der des fcc-Gitters. Drehen Sie den hier gezeigten fcc-Würfel vor Ihrem geistigen Auge so hin, daß die Ähnlichkeit zur hexagonalen Anordnung direkt erkennbar wird; berücksichtigen Sie dabei auch die hier nicht eingezeichneten Kugeln. Entlang welcher Raumrichtung schauen Sie dann durch den hier behandelten fcc-Würfel hindurch?