

**Lichttechnisches Institut**

Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

M. Sc. Benjamin Fritz

M. Sc. Henning Mescher

Engesserstraße 13

76131 Karlsruhe

**Optik und Festkörperelektronik**

Lösungen zum 5. Übungsblatt

Besprechung: 05. Juni 2020

**1. Das Wasserstoffatom**

- a) Die Eigenenergien des Wasserstoff-Elektrons im Potential eines Protons (dem Wasserstoff-Kern) lassen sich zu  $W_n = -\frac{e^4 m_e}{8h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$  mit  $n = 1, 2, \dots$  berechnen. Durch Absorption von Licht, kann das Elektron in einen höheren Zustand gelangen, durch Emission in einen niedrigeren. Stellen Sie eine Formel für die Wellenlängen des Lichtes auf, das emittiert wird, wenn ein Elektron ausgehend von einem höheren Zustand in den Zustand  $n = 2$  relaxiert (Balmer-Serie). Bestimmen Sie die Wellenlängen, die im sichtbaren Spektralbereich liegen. Welche Farbe hat das Licht?

*Die bei einer Relaxation in den Zustand  $n = 2$  freiwerdende Energie berechnet sich zu*

$$W = W_n - W_2 = -\frac{e^4 m_e}{8h^2 \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{4} \right) = -W_{\text{Ryd}} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{4} \right) \quad (1)$$

*mit der Rydberg-Konstante*

$$W_{\text{Ryd}} = 13.6 \text{ eV} = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J.} \quad (2)$$

*Ferner gilt:*

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{W} \quad (3)$$

*Damit berechnet sich die Balmer-Serie zu:*

n	W[J]	W[eV]	$\lambda$ [nm]	Farbe
3	$3.0263 \cdot 10^{-19}$	1.8	656	rot
4	$4.0855 \cdot 10^{-19}$	2.6	486	türkis
5	$4.5758 \cdot 10^{-19}$	2.9	434	blau
6	$4.8421 \cdot 10^{-19}$	3.0	410	violett
7	$5.0027 \cdot 10^{-19}$	3.1	397	UV
8	$5.1069 \cdot 10^{-19}$	3.2	388	UV

*Anmerkung: Diese Werte weichen etwas von den tatsächlich gemessenen ab.*

- b) Was bezeichnet man als „Orbital“ eines Atoms? Was genau trägt man auf, wenn man Orbitale skizziert?

Löst man das physikalische Problem „einzelnes Elektron im Atom“ quantenmechanisch, so erhält man Lösungen für die Wellenfunktionen, die durch die vier Quantenzahlen  $n$ ,  $l$ ,  $m$  und  $s$  parametrisiert sind. Die zu einem bestimmten Satz Quantenzahlen  $(n, l, m)$  gehörige Wellenfunktion nennt man Orbital. Speziell für das Wasserstoffatom ergeben sich im Gegensatz zu dem Bohrschen Atommodell keine Kreisbahnen, sondern mehr oder minder verschmierte räumliche Verteilungen der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen. Beim Zeichnen von Orbitalen stellt sich das Problem, dass eine dreidimensionale Verteilung (Wellenfunktion oder Aufenthaltswahrscheinlichkeit in 3D) dargestellt werden müsste. Man behilft sich hier oft durch das Auftragen von bestimmten Flächen gleicher Aufenthaltswahrscheinlichkeit oder gleichen Realteils der Wellenfunktion. Auch üblich ist die Darstellung von  $|\psi|^2$  durch eine räumlich variierende Punktdichte. Gelegentlich findet man zudem Schnittzeichnungen entlang von Symmetrieebenen, in denen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit farbig codiert aufgetragen ist.

- c) Zählen Sie die Quantenzahlen auf, die den Zustand eines Elektrons im Wasserstoffatom bezeichnen. Warum tragen die Quantenzahlen ihren jeweiligen Namen und welche Bedeutung haben die verschiedenen Quantenzahlen anschaulich (Energieniveaus, Form der Orbitale...)?

Die Quantenzahl  $n$  heißt Hauptquantenzahl und legt den Energieeigenwert zum Orbital fest. (Anmerkung: Wenn man genauer hinschaut, wird man feststellen, dass auch die anderen Quantenzahlen Einfluss auf die Energieeigenwerte haben. Dieser Effekt sei hier jedoch vernachlässigt.) Je größer die Hauptquantenzahl, desto weiter ist das Elektron vom Kern entfernt. Die Nebenquantenzahl oder Drehimpulsquantenzahl  $l$  hat großen Einfluss auf die Form des Orbitals. So sind alle Orbitale mit  $l = 0$  sphärisch symmetrisch während die mit  $l = 1$  auch für große Hauptquantenzahlen eine „Hantelform“ haben. Der Name „Drehimpulsquantenzahl“ bezieht sich auf die Tatsache, dass von  $l$  auch der Bahndrehimpuls des jeweiligen Elektrons abhängt. Für  $l = 0$  ist dieser gleich Null, allgemein gilt:

$$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (4)$$

Die Magnetquantenzahl beschreibt, welche räumliche Ausrichtung das Orbital bezüglich eines äußeren Magnetfeldes einnimmt. Daher unterscheiden sich diese Orbitale oft nur in der Ausrichtung zu einer willkürlich gewählten Achse. Die Komponente des Bahndrehimpulses entlang dieser ausgezeichneten Achse, welche wir hier beliebig mit  $z$  bezeichnen wollen, beträgt

$$L_z = \hbar m \quad (5)$$

Darüber trägt jedes Elektron einen Spin, welcher durch die Spinquantenzahl  $s$  beschrieben wird. Sie kann die Werte  $s = \pm 1/2$  annehmen und beschreibt den Eigendrehimpuls des Elektrons, welcher sich ergibt zu

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (6)$$

- d) Welche Quantenzahlen können im Wasserstoffatom für einen Zustand mit  $n = 5$  auftreten?

Für  $n = 5$  können die Bahnquantenzahlen  $l = 0, 1, 2, 3, 4$  auftreten. Zu jeder dieser Bahnquantenzahl können die magnetischen Quantenzahlen von  $m = -l$  bis  $m = +l$ , also  $2l + 1$  Stück, auftreten. Außerdem können zu jedem Zustand zwei Spineinstellungen vorkommen.

- e) Berechnen Sie die Anzahl der verschiedenen elektronischen Zustände zu einer Hauptquantenzahl  $n$ .

Aus den Überlegungen der letzten Aufgabe folgt, dass die Anzahl  $A_n$  der Zustände zu einer Hauptquantenzahl  $n$  sich zu

$$A_n = 2 \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 \underset{l'=l+1}{=} 2 \sum_{l'=1}^n 2l' - 1 \underset{\text{arithm. Reihe}}{=} 2 \left( 2 \frac{n(n+1)}{2} - n \right) = 2n^2 \quad (7)$$

ergibt. Die Gesamtzahl der Zustände  $A_G$  für die Quantenzahlen  $n = 1 \dots n'$  folgt hieraus zu:

$$A_G = \sum_{n=1}^{n'} 2n^2 = \frac{n'(n'+1)(2n'+1)}{3} \quad (8)$$

- f) Recherchieren Sie, wie die Wellenfunktion für das Wasserstoffatom  $\psi$  lautet.

Da das Wasserstoffatom kugelsymmetrisch ist, betrachtet man es am besten in Kugelkoordinaten. Hier kann man die Wellenfunktion als Produkt zweier Terme betrachten  $\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\phi, \theta)$ . Der erste Term ist nur vom Abstand  $r$  abhängig und hat als Parameter die Quantenzahlen  $n$  und  $l$ , der zweite enthält die Winkelabhängigkeiten. Dieser Term ist parametrisiert mit  $l$  und  $m$ . Die magnetische Quantenzahl hat folglich keinen Einfluss auf die radiale Abhängigkeit der Wellenfunktion, während die Hauptquantenzahl für die Form der Orbitale nicht erheblich ist. Die Spinquantenzahl kommt gar nicht vor und spielt somit keine Rolle für die Wellenfunktion. Die ersten Terme sind in den Tabellen 1 und 2 gegeben.

$n$	$l$	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2Ne^{-x}$
2	0	$2Ne^{-x}(1-x)$
2	1	$\frac{2}{\sqrt{3}}Ne^{-x}$

Tabelle 1: Normierte radiale Eigenfunktionen ( $N = (1/(na_0))^{3/2}$ ,  $x = r/na_0$ ,  $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e_0^2$ )

$l$	$m$	$Y_{l,m}(\theta, \phi)$
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	$\pm 1$	$\mp \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm j\phi}$
1	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$

Tabelle 2: Kugelflächenfunktionen

- g) Berechnen Sie den mittleren Abstand zwischen dem Elektron und dem Proton im Grundzustand und vergleichen Sie diesen mit dem Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte sowie dem Bohr'schen Radius  $a_0$ .

Der Grundzustand hat die Wellenfunktion:

$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} e^{-r/a_0} \quad (9)$$

Da es sich um eine exponentiell abfallende Funktion handelt, wird diese maximal für  $r = 0$ . Die entscheidende physikalische Größe ist aber das Betragsquadrat der Wellenfunktion (= Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte). Um die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zu berechnen, muss die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte über ein radiales Volumenelement integriert werden. Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsverteilung liegt dann genau am Bohrschen Radius. Zur Berechnung des Ortserwartungswert muss der Ortsoperator berücksichtigt werden (hier:  $r$ ). Hinweis: Die Wellenfunktion ist bereits normiert. Eine Normierung muss deshalb nicht durchgeführt werden.

Wir wollen nun den Ortserwartungswert berechnen. Wir setzen an:

$$\langle r \rangle = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} r \frac{1}{\pi} a_0^{-3} e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta dr d\phi d\theta \quad (10)$$

$$= \int_{r=0}^{\infty} \frac{4\pi}{\pi a_0^3} r^3 e^{-2r/a_0} dr \quad (11)$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \underbrace{\int_{r=0}^{\infty} r^3 e^{-2r/a_0} dr}_{\text{Bronstein: } \int_{x=0}^{\infty} x^n e^{-ax} dx = n!/a^{n+1}} \quad (12)$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} \quad (13)$$

$$= \frac{3}{2} a_0 \quad (14)$$

Der Erwartungswert für den Aufenthaltsort stimmt also nicht mit dem Ort des Maximums der Wahrscheinlichkeitsverteilung, also mit dem Bohrschen Radius  $a_0$ , überein.

- h) Skizzieren Sie die Orbitale des Wasserstoffs für die niedrigsten drei Hauptquantenzahlen.

Die niedrigsten drei Quantenzahlen sind  $n = 1$ ,  $n = 2$  und  $n = 3$ . Die möglichen anderen Quantenzahlen ergeben sich aus der Hauptquantenzahl zu  $l = 0 \dots n - 1$  und  $-l < m < l$ . In Abbildung 1 ist die Form der zugehörigen Orbitale skizziert.

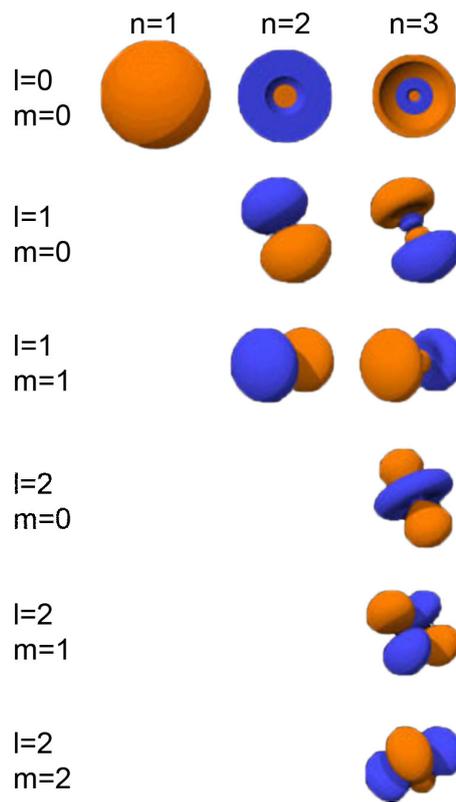


Abb. 1: Orbitale des Wasserstoffatoms

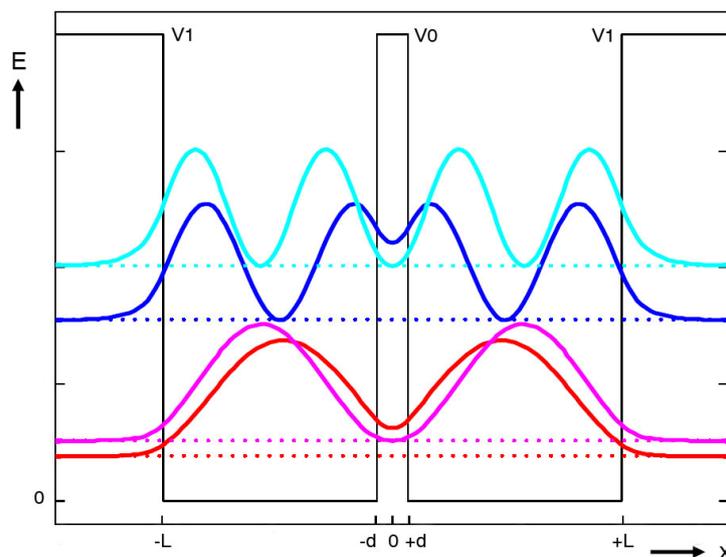
Abgebildet sind Flächen gleichen  $|\psi|^2$ , sog. Niveauflächen. Rote und blaue Bereiche markieren dabei gegenphasige Bereiche, also z.B. positives und negatives  $\psi$ . Zur weiteren Veranschaulichung der Orbitale sollten Sie sich das im Studierendenportal verlinkte Applet ebenfalls genauer anschauen.

## 2. Gekoppelte Potentialtöpfe

Seien  $V_1 > 0$ ,  $L > 0$ ,  $d > 0$  und  $L > d$ . Betrachten Sie den gekoppelten Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & : |x| > L \\ 0 & : L > |x| > d \\ V_0 & : d > |x| \end{cases}$$

- a) Sei  $V_0 = V_1$ . Skizzieren Sie das gegebene Potential. Skizzieren Sie zwei eigentliche Zustände eines Elektrons in diesem Potential.



- b) Was verändert sich, wenn die Länge  $d$  sehr groß oder sehr klein wird?

*$2d$  bestimmt die Dicke der Barriere. Wird diese sehr groß, so können die beiden Töpfe in guter Näherung als getrennt angenommen werden. Ihre Energieniveaus sind dann gleich. Bei kleiner werdendem  $d$  spalten diese immer stärker auf.*

*Anmerkung: Gleiches passiert im Falle des „Potentialtopfs“ Atom. Die Energieniveaus der Atome fächern bei geringem Abstand (z.B. in Kristallen) zu Bändern auf.*

- c) Ein Elektron der Energie  $W_{q1} > V_1$  laufe von links ein. Wie verhält es sich im angegebenen Potentialgebiet?

*Über dem Gebiet mit  $V=0$  gewinnt das Elektron Energie, die Wellenlänge verkürzt sich.*

- d) Wie verhält sich ein klassisches Elektron mit der Energie  $W_{k1} < V_1$  bzw. der Energie  $W_{k2} > V_1$ ?

*Das Elektron mit der Energie  $W_{k1} < V_1$  bewegt sich wie ein Ball ENTWEDER im linken ODER im rechten Topf hin und her.*

*Das Elektron mit der Energie  $W_{k2} > V_1$  erhält an den Stellen  $\pm d$  und  $\pm L$  einen Kraftstoß, der das Elektron beschleunigt oder abbremst.*

- e) Sei nun  $V_0 = \infty$ . Wie verhält sich nun ein quantenmechanisches Elektron der Energie  $W_{q2} < V_1$  und wie ein quantenmechanisches Elektron mit  $W_{q1} > V_1$ ? (Keine Rechnung nötig.)

*Das Elektron der Energie  $W_{q2} < V_1$  dringt nicht in die Barriere zwischen den beiden Töpfen ein, wohingegen es in das Potentialgebiet mit  $V = V_1$  eindringen kann.*

*Das Elektron der Energie  $W_{q1} > V_1$  wird am Gebiet  $V = \infty$  reflektiert, ebenfalls ohne in die Barriere einzudringen.*

- f) Geben Sie den Impulserwartungswert des Elektrons mit der Energie  $W_{q2} < V_1$  an und begründen Sie Ihre Antwort. (Keine Rechnung.)

*Da sich das Elektron im Topf mit der gleichen Wahrscheinlichkeit nach links wie nach rechts bewegt, ist der Impuls-Erwartungswert  $\langle \hat{p} \rangle = 0$*

### 3. Kristalle

- a) Wann ist ein Festkörper kristallin? Welche Informationen benötigt man, um einen Kristall eindeutig zu beschreiben?

*Ein Kristall zeichnet sich durch vollkommene Translationssymmetrie in allen Raumrichtungen aus. Das bedeutet, dass durch das Aneinanderreihen identischer Bausteine der Raum lückenlos gefüllt wird. Diesen elementaren «Baustein» bezeichnet man als Einheitszelle des Kristalls. Gleichwertig hiermit ist die Definition von drei linear unabhängigen Vektoren, die die Einheitszelle aufspannen. Bewegt man sich um ein ganzzahliges Vielfaches dieser Vektoren im Kristall, erreicht man immer eine zum Ausgangspunkt gleichartige Position (Hier ist wie häufig die Annahme vorausgesetzt, dass der Kristall unendlich ausgedehnt ist.)*

*Durch Angabe der Einheitszelle oder der Gittervektoren wird eine Anordnung von Punkten im Raum, das Kristallgitter, definiert. Um den materiellen Kristall komplett zu beschreiben, benötigt man noch die Angabe der **Basis**. Es gilt also: Kristall=Gitter+Basis. Die Basis ist das Objekt, das gemäß der räumlichen Ordnung des Kristallgitters angeordnet wird. Bei der Basis kann es sich um einzelne Atome, um Gruppen von Atomen bis hin zu komplexen Molekülen bestehend aus vielen Millionen von Atomen handeln. Im Falle des Silizium-Kristalls besteht die Basis zum Beispiel aus zwei Silizium-Atomen. Die Einheitszelle ist hier kubisch-flächenzentriert, also ein Würfel mit Gitterplätzen an den Ecken und zusätzlich je einem Gitterplatz in der Mitte der Seitenflächen. Auf jede dieser Positionen muss nun die zweiatomige Basis platziert werden, um den Si-Kristall zu bilden.*

- b) Welche Herstellungsmethoden von hochreinen kristallinen Festkörpern kennen Sie? Beschreiben Sie deren Funktionsweise.

*Sehr große Kristalle von guter Qualität können aus der Schmelze gezogen werden. Hier wird ein bereits sehr reines Vorgängermaterial in einem Tiegel geschmolzen und ein kleiner Brocken kristallinen Materials hineingetunkt. Bewegt man nun sehr langsam und unter genau kontrollierten Bedingungen den Kristall nach oben, so bleibt*

die untere Seite immer mit Schmelze benetzt, welche dort abkühlt. Die sich so anlagernden Atome kommen fast immer auf einem regulären Gitterplatz zur Ruhe. So können fast perfekte Kristalle von mehr als einem Meter Länge und etlichen 10 Zentimeter Durchmesser entstehen. Eine weitere Variante der Herstellung von Kristallen ist die Epitaxie. Hier werden die Ausgangsmaterialien in fester, flüssiger oder gasförmiger Phase mit einem Substrat in Kontakt gebracht, wobei eine Schicht des Zielmaterials auf diesem «wächst». So können zum Beispiel die Ausgangsmaterialien unter Vakuum verdampft und der Gasstrom auf ein beheiztes Substrat gerichtet werden.

- c) Wann spricht man von polykristallinen, wann von amorphen Festkörpern?

Im amorphen Festkörper existiert keine Fernordnung, also auch keine Translations-symmetrie wie in Kristallen. In polykristallinen Materialien existieren Bereiche mit strenger Ordnung, die Bereiche untereinander weisen jedoch keine Symmetrien auf.

- d) Kauft man einen Siliziumwafer, so ist genau gekennzeichnet, entlang welcher Kristallebene der Schnitt verläuft. Warum ist das in Kristallen wichtig? Ist eine solche Angabe auch für eine Schicht amorphen Siliziums oder Glas sinnvoll?

Kristalline Strukturen haben, je nach Raumrichtung, verschiedene Geometrien. Da hiervon auch die physikalischen Eigenschaften abhängen, ist es wichtig zu wissen, entlang welcher Gitterebene der Einkristall geschnitten wurde. So kann es zum Beispiel Bewegungsrichtungen im Kristall geben, entlang derer die Elektronenbeweglichkeit besonders hoch ist. In amorphen Materialien gibt es solche Vorzugsrichtungen nicht, in Näherung bietet sich in jede Richtung das gleiche Bild. Daher sind auch die Eigenschaften isotrop und eine Kennzeichnung einer bestimmten Ebene nicht möglich und nötig.