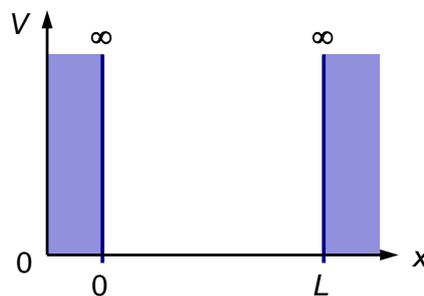


Saalübung	Di, 23.04.2013, 11:30 – 13:00 Uhr
Themengebiet	Aufbau von Atomen und Festkörpern
Übungsleiter	Dipl.-Ing. Michael Schönleber Dipl.-Phys. Julian Szász

A1: Bedeutung von Quantenzahlen: Die Schrödinger-Gleichung

Eine beliebte theoretische Anordnung um zu zeigen wie Quantelung von erlaubten Energiezuständen, sowie Gebiete unterschiedlicher Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen zwanglos durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben werden, ist der sogenannte „Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden“.



a) Machen Sie sich anschaulich klar, wie ein solcher Potentialverlauf im klassischen Sinne auf ein Elektron wirken würde. Welche Kräfte würde ein -klassisch punktförmig- gedachtes Elektron an den Positionen

- i. $x = 0$
- ii. $0 < x < L$
- iii. $x = L$

erfahren?

b) Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ist im Inneren des Potentialtopfes gegeben durch

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = E\Psi$$

Bestimmen sie die Lösung dieser Differentialgleichung und zeigen Sie, dass die Energie E nur diskrete Werte annehmen kann. Gehen Sie dazu wie folgt vor:

- 1) Finden Sie einen geeigneten Ansatz.
Hinweis: Welche Funktion ergibt nach zweifacher Ableitung ein skaliertes negatives ihrer selbst?
- 2) Prüfen Sie für welche Werte der Energie E Ihr Ansatz die Schrödinger-Gleichung löst.

- 3) Bestimmen Sie die freien Konstanten Ihrer Ansatzfunktion mit Hilfe der Randbedingungen

$$\begin{aligned} \text{i.} \quad & |\Psi(x=0)|^2 = 0 \\ \text{ii.} \quad & |\Psi(x=L)|^2 = 0 \\ \text{iii.} \quad & \int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1 \end{aligned}$$

Warum müssen diese Randbedingungen gelten?

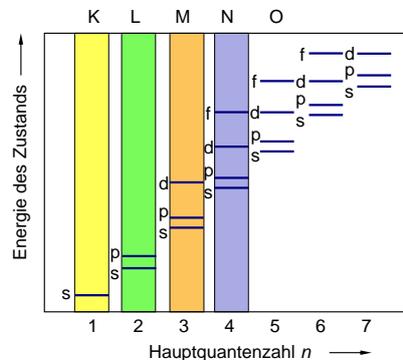
- c) Die korrekte Lösung der Schrödinger-Gleichung lautet

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons sowie seine Energie ändert sich hier also lediglich mit der „Hauptquantenzahl“ n . Was ändert sich, wenn die Schrödinger-Gleichung statt für einen eindimensionalen Potentialtopf für ein dreidimensionales Coulomb-Potential gelöst werden muss?

A2: Besetzungsregeln für Atomorbitale: Pauli-Prinzip und Hund'sche Regel

Gegeben sind die durch Hauptquantenzahl n sowie Drehimpulsquantenzahl l vollständig bestimmten möglichen Energiezustände eines Elektrons in einem Atom.



Zeichnen Sie die besetzten Zustände für Kalium in Pauling-Schreibweise. Beachten Sie bei der Besetzung sowohl das Pauli-Prinzip als auch die Hund'sche Regel.

A3: Bindungstypen

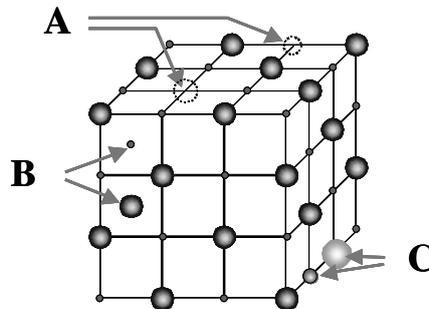
Atome gehen untereinander verschiedene Arten von Bindungen ein. Die Art der eingegangenen Bindung entscheidet beispielsweise über elektronische Leitfähigkeit sowie mechanische Stabilität eines Materials.

- Nennen sie die drei Hauptbindungstypen, erläutern Sie diese und nennen Sie jeweils einen typischen Vertreter.
- Materialien welches Bindungstyps weisen in der Regel die höchste elektronische Leitfähigkeit auf und warum?
- Welcher Bindungstyp tritt im Kaliumbromid-Kristall (KBr) auf und warum?
- Erwarten Sie bei kristallinem Kaliumbromid eine gute oder schlechte elektronische Leitfähigkeit? Begründen Sie!
- Warum bildet Helium keine He_2 - Moleküle aus?

A4: Kristallgitter und Defekte

Der vorherrschende Bindungsmechanismus entscheidet unter anderem darüber, welche Gitterstruktur eine große Ansammlung gebundener Atome -sprich ein Festkörper- annimmt. Die angenommene Struktur wiederum ist entscheidend für das Auftreten spezieller Eigenschaften, die in elektronischen Bauteilen ausgenutzt werden können.

- Aus 7 Grundgittern kann durch Verschiebung und periodische Wiederholung der Grundgitter jede in der Natur vorkommende Gitterstruktur beschrieben werden. Mit Hilfe welches Grundgitters kann das kubisch-raumzentrierte Gitter erzeugt werden?
- Was entscheidet bei ionischer Bindung, was bei kovalenter Bindung über die gebildete Gitterstruktur?
- Kann die gebildete Gitterstruktur durch äußere Faktoren beeinflusst werden? Falls ja, nennen Sie ein Beispiel.
- Benennen Sie die Punktdefekte A, B und C im dargestellten Kristallgitter.



- Ist die Bildung von Schottky-Defekten mit einer Volumenänderung des Kristalls verbunden? Geben Sie eine kurze Begründung.
- Was beschreiben die Begriffe „Korn“ und „Korngrenze“?