Institut für Angewandte Physik
und Messtechnik
Dr. Werner Egger

Übungen zu Struktur der Materie
Blatt 11

Einfaches Potentialtopfmodell für Moleküle

1) Der Energiegewinn bei der Bildung von Molekülen (Bindungsenergie) aus isolierten Atomen ist auf die Absenkung der Energieniveaus der Valenzelektronen zurückzuführen.
   a) Wie groß ist der Energiegewinn beim Zusammenführen zweier atomarer Potentialtöpfe der Breite d, die mit jeweils einem Elektron besetzt sind, in einen gemeinsamen Topf der Breite $2d$? Vernachlässigen Sie die elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Elektronen.
   b) Skizzieren sie die Wellenfunktionen im Grundzustand vor und nach dem Zusammenführen. Wo ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen am größten?

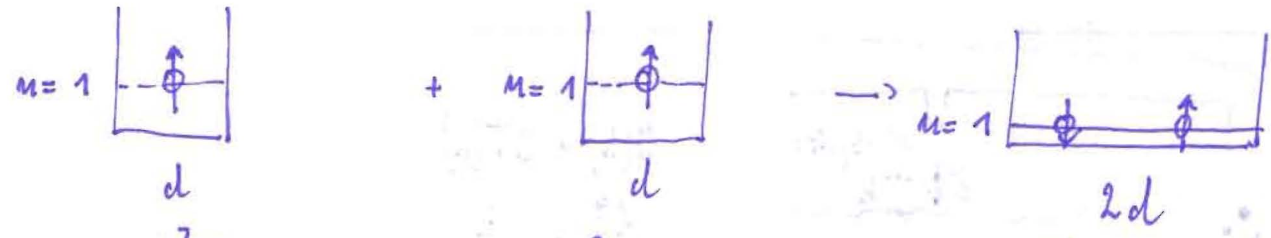
Tunnelmikroskop

2) Die atomare Topographie einer Oberfläche lässt sich mit dem Rastertunnelmikroskop direkt ausmessen. Dazu wird eine feine Spitze im Abstand h über die Oberfläche geführt und der Tunnelstrom der Elektronen durch die Potentialbarriere der Vakuumstrecke als Funktion des Abstandes h und der Oberflächenkoordinaten x gemessen. Sofern gesuchte Oberfläche und Abtastspitze aus demselben Material bestehen, ist die effektive Höhe des Potentialwalls durch die Austrittsarbeit W der Elektronen gegeben.
   a) Bestimmen Sie für W=5 eV die Tunnelwahrscheinlichkeit $T(h)$.
   b) Bestimmen Sie die Abtastempfindlichkeit $d(\ln T)/dh$. Wie genau kann die Kontur $h(x)$ gemessen werden, wenn man annimmt, dass der Tunnelstrom mit einer Genauigkeit von 1/1000 bestimmt werden kann.

Wichtige Konstanten:
Plancksches Wirkungsquantum: $\hbar c = 197$ eV· nm
Ruheenergie des Elektrons: $m_e c^2 = 511$ keV

(1)

a)



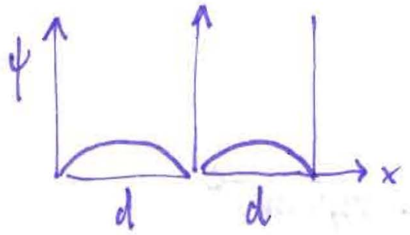
$$\epsilon = \frac{\pi \hbar^2 c^2}{2mc^2 d^2} + \frac{\pi \hbar^2 c^2}{2mc^2 d^2} \longrightarrow 2 \times \frac{\pi \hbar^2 c^2}{2mc^2 (2d)^2} = \frac{\pi \hbar^2 c^2}{mc^2 d^2} \cdot \frac{1}{4}$$

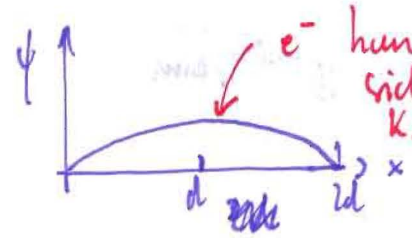
$$= \frac{\pi \hbar^2 c^2}{mc^2 d^2} = 2\,\epsilon_1(d) \longrightarrow 2\,\epsilon_1(2d)$$

$$\boxed{\epsilon_{Mol} = \frac{1}{4}\,\epsilon_{At}}$$

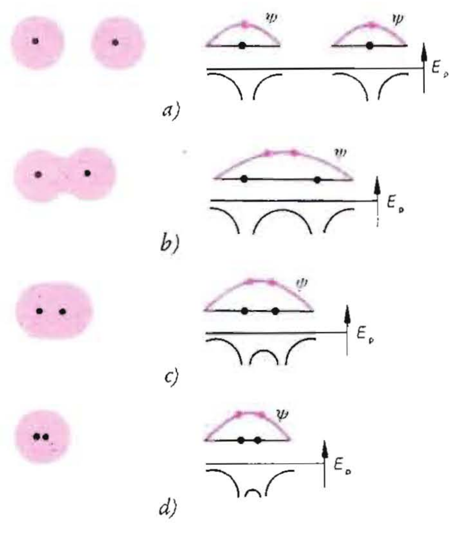
$\frac{3}{4}$ der Energie werden durch Absenken der Energieniveaus frei ≙ Bindungsenergie

b)





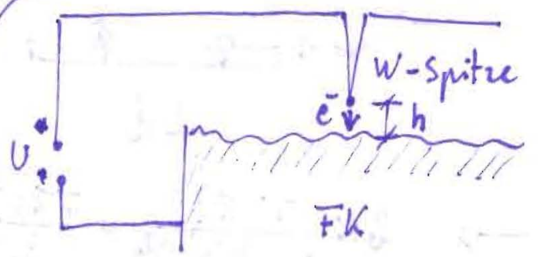
e^- konzentrieren sich zwischen Kernen



Nähert man zwei Atome aneinander an (Bilder a, b), so geraten die Elektronen in den Anziehungsbereich beider Atomkerne (Bild c). Den Elektronen steht mehr Raum zur Verfügung, und ihre Energie verringert sich. Bei zu starker Annäherung der beiden Atome (Bild d) steigt die Energie wieder an. Das Minimum der Energie bestimmt den Atomabstand im Molekül.

Sexl, Raab, Streeruwitz
"Materie in Raum und Zeit"
Diesterweg 1980

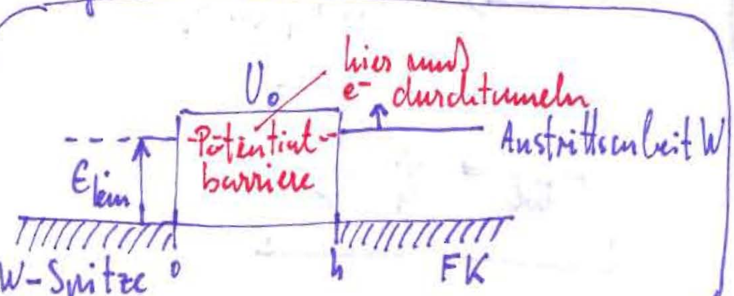
② Tunneleffekt



$$J(h) = CT(h)$$

$$\frac{\Delta J}{J} \simeq \frac{1}{1000}$$

a) Energieverhältnis



Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T(h) = \left(e^{-qh}\right)^2 = e^{-2qh}$$

$$q = \sqrt{\frac{2m(V-\epsilon)}{\hbar^2}} \simeq \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

$W \simeq 5\,eV$

$$q = \sqrt{\frac{2mc^2W}{\hbar^2 c^2}} = \sqrt{\frac{2\times 511\times 10^3 \times 5}{(197)^2}}\ nm^{-1} \simeq 11{,}5\ nm^{-1}$$

$$T(h) = e^{-2\times 11{,}5\times h/nm} = e^{-23h/nm} \simeq 10^{-10h/nm}$$

$$T(1nm) \simeq 10^{-10}$$

b) Empfindlichkeit: (wie ändert sich der (Tunnel-)Strom, wenn sich h ändert?)

$$\varepsilon \equiv \left|\frac{\Delta J}{J\,\Delta h}\right| \underset{\uparrow}{\simeq} \left|\frac{\Delta T(h)}{T(h)\,\Delta h}\right| = \left|\frac{\Delta \ln T(h)}{\Delta h}\right| = 2q = 23\ nm^{-1}$$

$J(h) \propto T(h)$

kleinste auflösbare Höhe: (mit welcher Genauigkeit kann der Kontour gefolgt werden?)

$$\Delta h = \frac{1}{\varepsilon}\frac{\Delta J}{J} \simeq \frac{10^{-3}}{23}\ nm \simeq 4\times 10^{-5}\ nm$$

keine Wärme-Fluktuationen (und Potentialfluktuationen wg e^--Bewegung) berücksichtigt