Übungsblatt 4

Abgabe bearbeiteter Übungszettel bis Freitag, 3. November, 12 Uhr!

Aufgabe 1: Bragg-Bedingung

Zeigen Sie, dass die fundamentale Auswahlregel $\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i = \mathbf{G}_{hkl}$ mit dem reziproken Gittervektor \mathbf{G}_{hkl} äquivalent ist zur oft verwendeten Bragg-Bedingung ($2d \sin \theta = n\lambda$)! Erinnern Sie sich dazu daran, wie der Betrag des Vektors \mathbf{G}_{hkl} mit dem Abstand der Netzebenen mit den entsprechenden Miller-Indizes zusammenhängt.

Aufgabe 2: Wellen für Kristallstrukturanalyse

Überlegen Sie sich, welche Energien Photonen, Elektronen und Neutronen haben müssen, um damit Strukturanalyse mit einer Auflösung von 0,1 nm durchführen zu können!

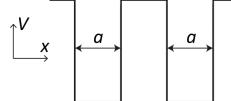
Aufgabe 3: Atomformfaktor von Wasserstoff

Benutzen Sie die Grundzustandswellenfunktion von Wasserstoff, um daraus die Elektronendichte zu ermitteln. Berechnen Sie mit dieser Elektronendichte den Atomformfaktor des Wasserstoffatoms!

Aufgabe 4: LCAO-Methode beim Doppelpotentialtopf

Der Doppelpotentialtopf kann als einfaches Modell für die Bindung eines zweiatomigen Moleküls wie Wasserstoff H_2 betrachtet werden. Aus den Energieeigenwerten im Doppelpotentialtopf kann grundsätzlicher Einblick in die Modifikation des atomaren Niveauspektrums durch Molekülbindung genommen werden.

Die Potentiallandschaft ist in der nebenstehenden Skizze $\uparrow V$ gezeigt.



Wir nehmen an, dass wir die Grundzustände $\varphi_1(x+a)$ und $\varphi_2(x-a)$ in den beiden entkoppelten

Potentialtöpfen gleicher Breite kennen, und diese Zustände wohl separiert sind von höheren Zuständen. Zur Erfassung des Einflusses der Kopplung nehmen wir an, dass man die Wellenfunktion durch lineare Superposition der entkoppelten Wellenfunktionen darstellen kann:

$$\Psi(x) = c_1 \varphi_1(x + a) + c_2 \varphi_2(x - a).$$

Ähnlich werden in der LCAO (linear combination of atomic orbitals)-Methode Molekülorbitale konstruiert. Zwei Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten c_1 und c_2 erhält man, indem



man sie in die Schrödinger-Gleichung einsetzt und einmal mit $\varphi_1^*(x+a)$ durchmultipliziert und dann über x integriert, ein andermal mit $\varphi_2^*(x-a)$ durchmultipliziert und über x integriert. Über die Koeffizientendeterminante lassen sich die Eigenwerte des gekoppelten Problems bestimmen. Interpretieren Sie dabei insbesondere die darin auftretenden Matrixelemente!

