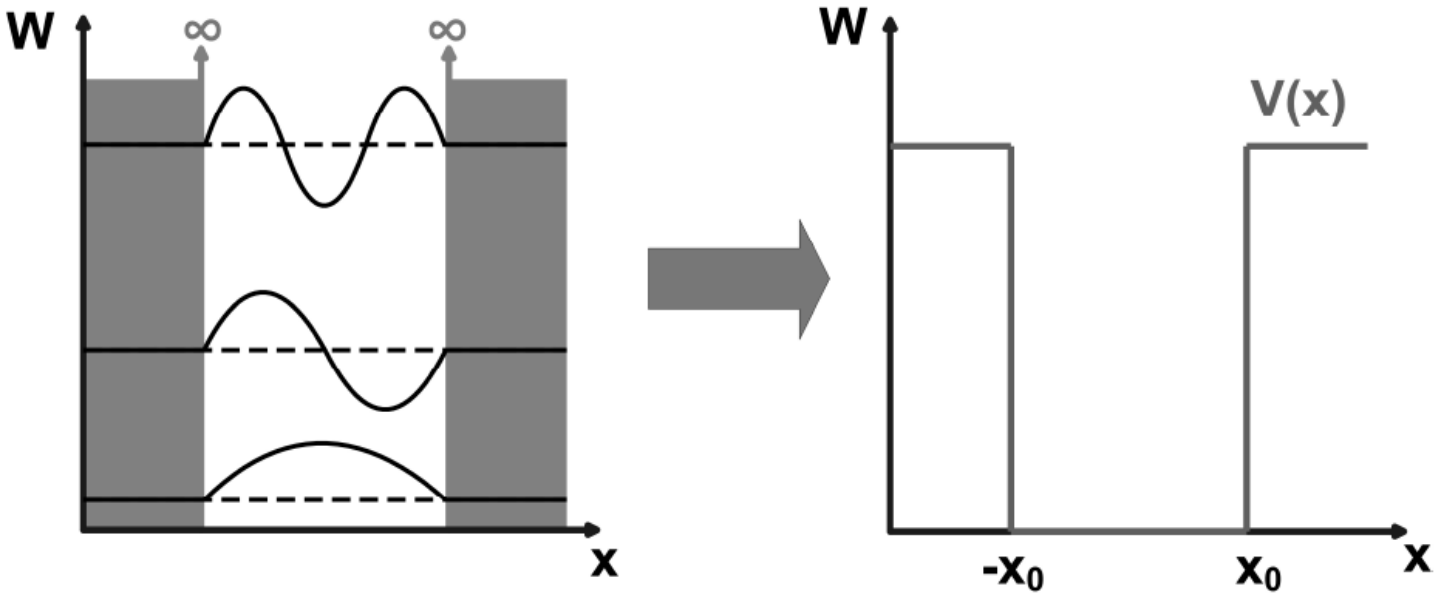
Übersicht über die Vorlesung

1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
   - 2.1 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung
   - 2.2 Der unendlich hohe Potentialtopf
   - 2.3 Der endliche Potentialtopf
   - 2.4 Potentialbarrieren
   - 2.5 Eigentliche und uneigentliche Zustände, Normierung
   - 2.6 Quantenmechanische Messungen
3. **Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
4. **Elektronen in Kristallen**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
9. **Der pn-Übergang**

Festkörperelektronik
SS 2013
4. Foliensatz
02.05.2013

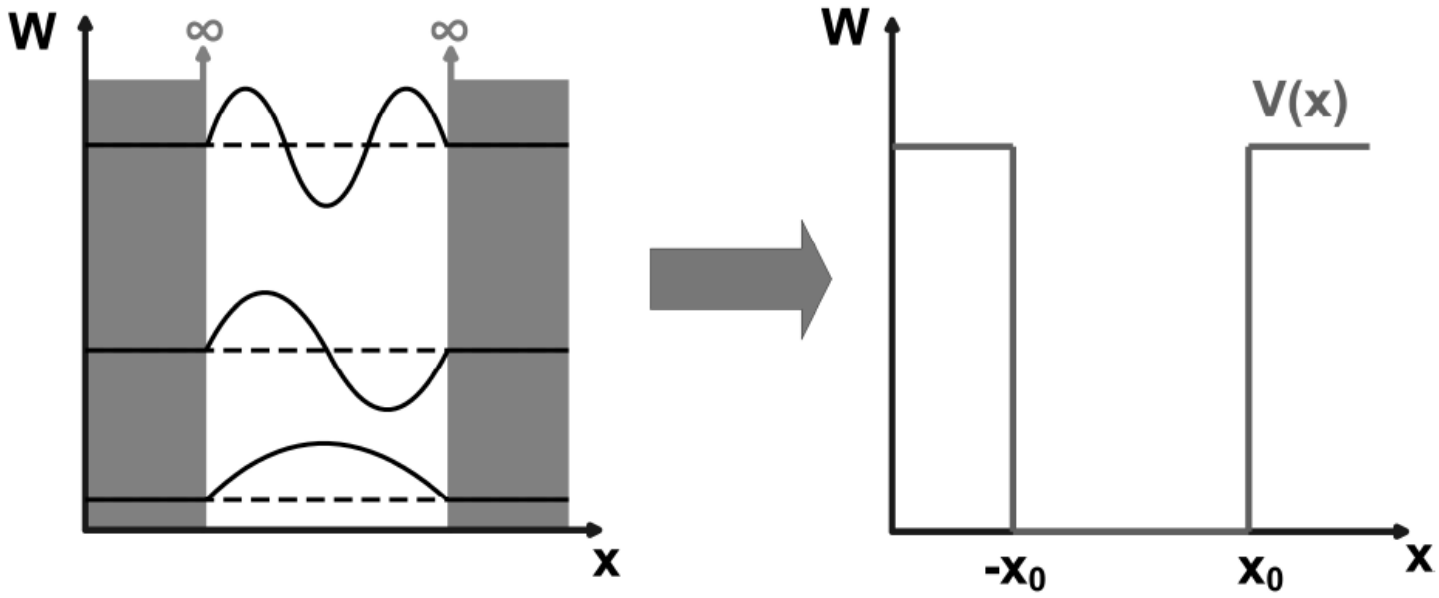
2.3.1 Der endliche Potentialtopf: Stetigkeitsbedingungen



Beim Übergang vom unendlichen zum endlichen Potentialtopf ändern sich die Lösungen qualitativ.

Eine wichtige Rolle spielen die Stetigkeitsbedingungen...

2.3.1 Stetigkeitsbedingungen: Qualitativ



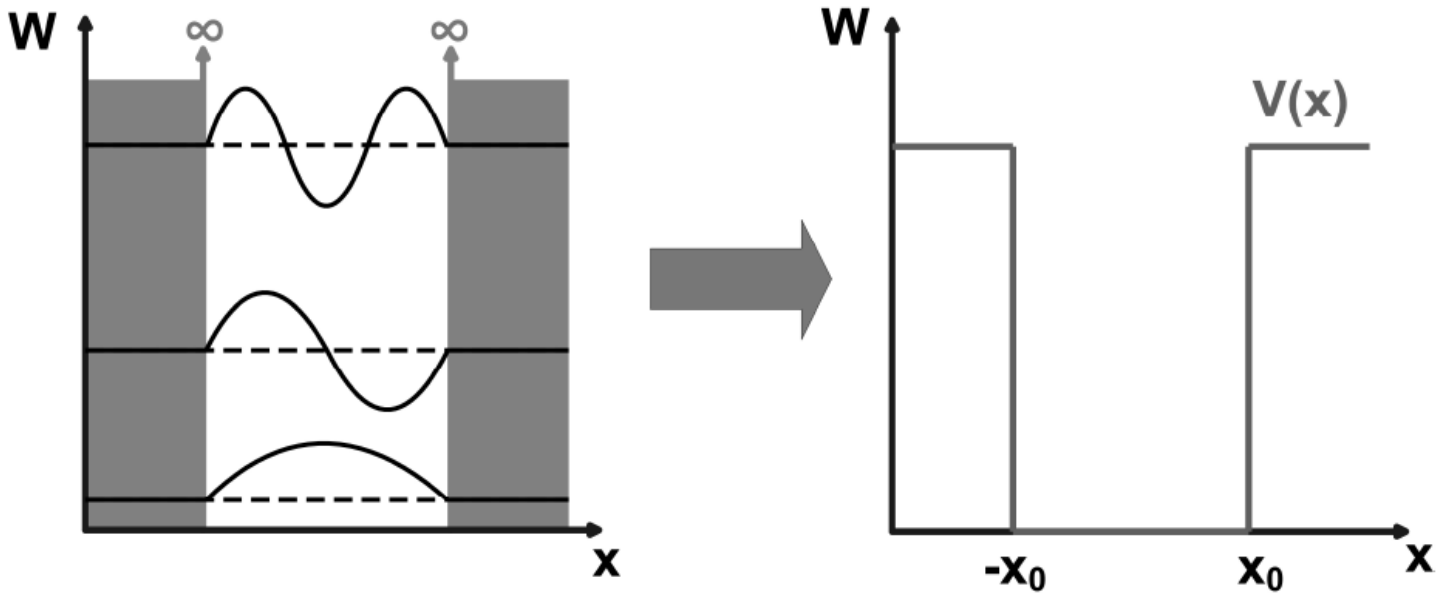
Wir haben schon gefordert, dass
- *im Gebiet des unendlichen Potentials die Wellenfunktion* ψ *verschwindet.*

Begründung:

$$\psi^*(x)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi(x)$$

ist sowas wie eine Energiedichte. Wenn ψ nicht Null ist, dann divergiert die Energiedichte. Dies erscheint unsinnig.

2.3.1 Stetigkeitsbedingungen: Qualitativ



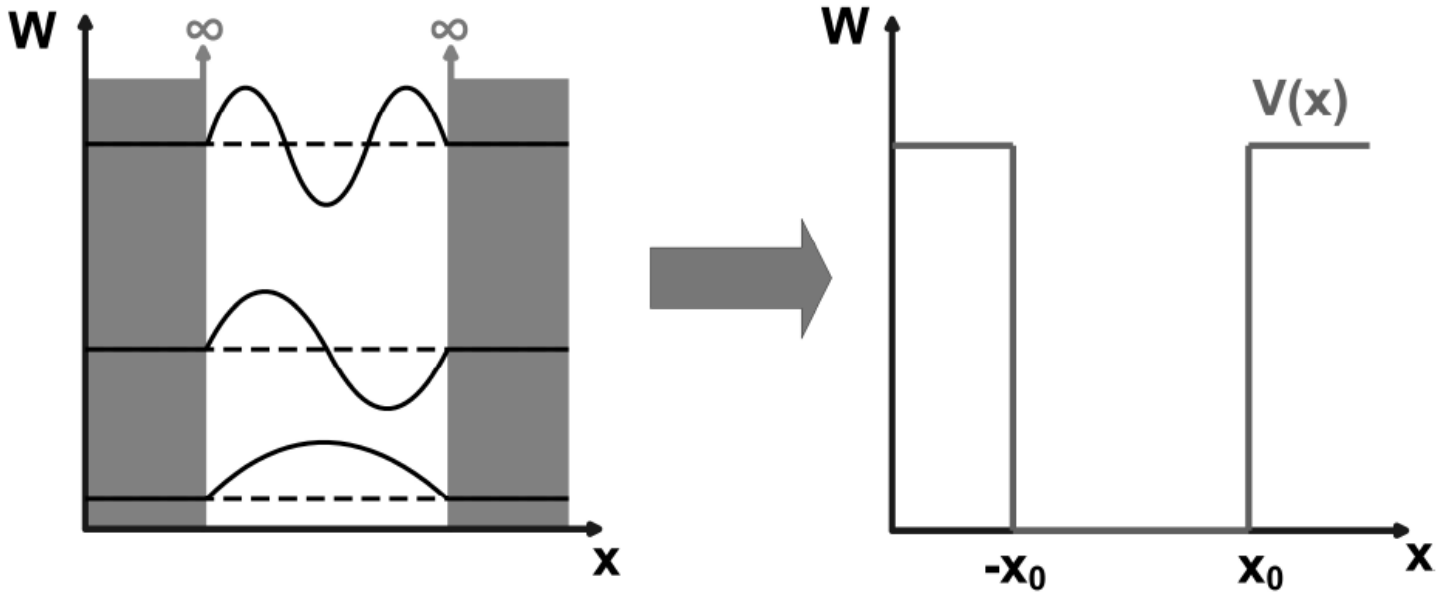
Wir haben auch schon gefordert, dass
- *die Wellenfunktion stetig ist.*

Begründung:

$$\psi^*(x)\left(-\hbar j\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)$$

ist sowas wie eine Impulsdichte (proportional zum Strom).
Wenn ψ unstetig ist, dann divergiert diese Dichte. Dies erscheint ebenso unsinnig.

2.3.1 Stetigkeitsbedingungen: Quantitativ

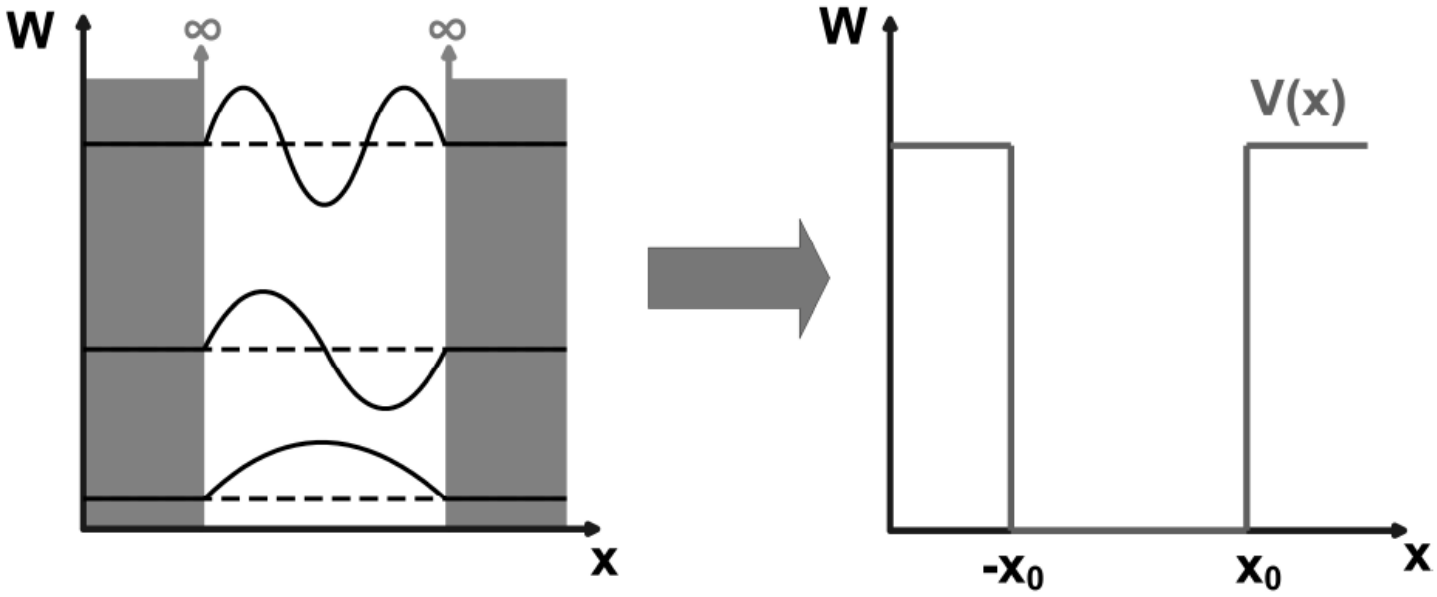


Formaler Zugang: Wie sieht die Wellenfunktion $\psi(x)$ an einer Sprungstelle x_0 aus ?

Ausgehend von der S-Glg.: $\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi(x)=W\psi(x)$ integrieren rund um x_0:

Integration der S-Glg. von x_0-δ bis x_0+ δ : $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi'(x_0+\delta)-\psi'(x_0-\delta)\right)+\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}V(x)\psi(x)dx=\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}W\psi(x)dx$

2.3.1 Stetigkeitsbedingungen: Quantitativ



Formaler Zugang: Wie sieht die Wellenfunktion $\psi(x)$ an einer Sprungstelle x_0 aus ?

Ausgehend von der S-Glg.: $\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi(x)=W\psi(x)$ integrieren rund um x_0:

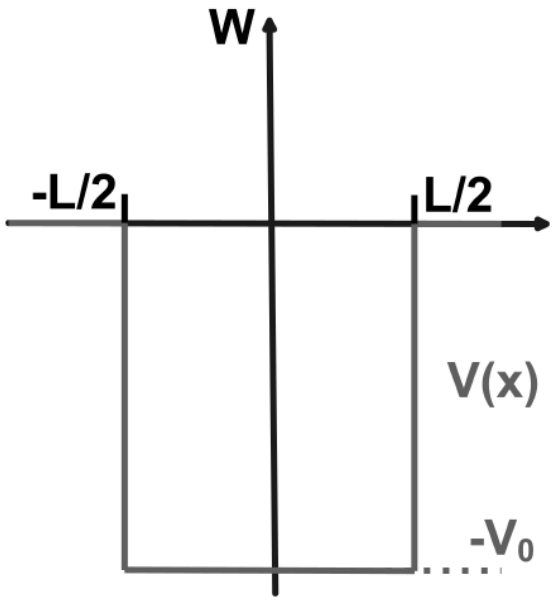
Integration der S-Glg. von x_0-δ bis x_0+ δ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi'(x_0+\delta)-\psi'(x_0-\delta)\right)+\underbrace{\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}V(x)\psi(x)dx}_{\to 0 \text{ für } \delta\to 0 (\textit{falls } V(x) \text{ endlich})}=\underbrace{\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}W\psi(x)dx}_{\to 0 \text{ für } \delta\to 0}$$

→ ψ ist stetig differenzierbar falls ΔV endlich, sonst nur stetig

2.3.2: Der endliche Potentialtopf: Struktur der Lösungen

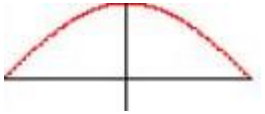
Die „übliche“ Darstellung des Potentialtopfes:



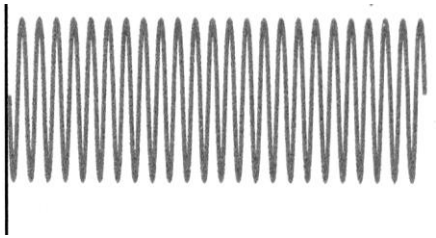
$$V(x) = \begin{cases} 0: & |x| > \frac{L}{2} \\ -V_0: & |x| \le \frac{L}{2} \end{cases}$$

Wir vermuten zwei qualitativ unterschiedliche Lösungsarten:

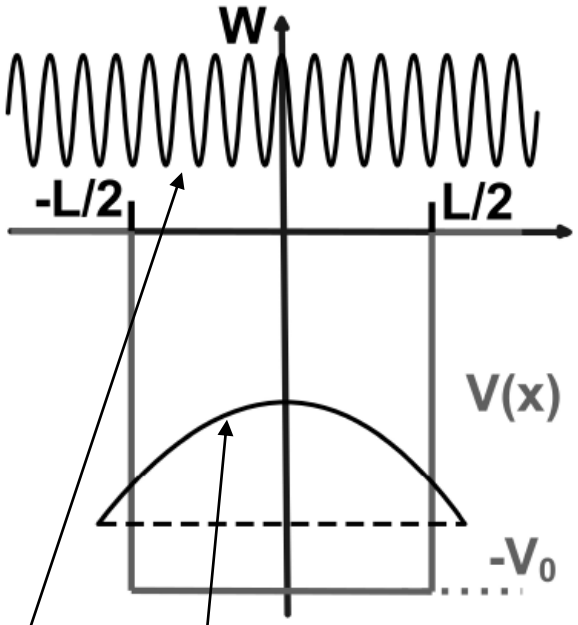
- lokalisierte, gebundene Zustände, die so ähnlich aussehen wie beim Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden (Wellenfunktion verschwindet im Unendlichen)



-ebene Wellen, die irgendwie durch den Topf in ihrer Ausbreitung gestört werden (sehr delokalisiert, ähnlich dem freien Elektron)



2.3.2: Der endliche Potentialtopf: Struktur der Lösungen



$$V(x) = \begin{cases} 0: & |x| > \frac{L}{2} \\ -V_0: & |x| \le \frac{L}{2} \end{cases}$$

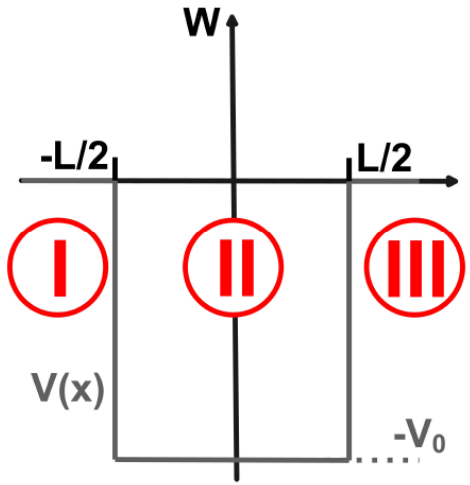
Wir vermuten zwei qualitativ unterschiedliche Lösungsarten:

- lokalisierte, gebundene Zustände, die so ähnlich aussehen wie beim Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

-ebene Wellen, die irgendwie durch den Topf in ihrer Ausbreitung gestört werden (ähnlich dem freien Elektron)

2.3.3: Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen

Gebundene Lösungen klassisch:
-Gesamtenergie < 0
- Teilchen läuft wie Ping-Pong-Ball im Topf hin und her



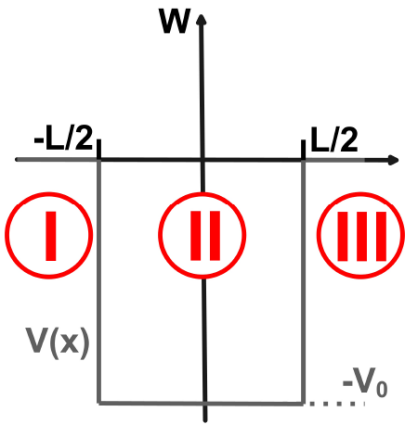
Gebundene Lösung quantenmechanisch:
- Energieeigenwert < 0
- Wellenfunktion verschwindet im Unendlichen

Der Ansatz, der (fast) immer funktioniert: $\psi(x) = A_{II}^{+} \exp(jkx) + A_{II}^{-} \exp(-jkx)$

Aber: Die gebundene Wellenfunktion muss im Unendlichen verschwinden, ebene Wellen kommen also nicht in Frage !

Ein solcher Ansatz ergibt gebundene Lösungen, falls $k=j\kappa$ imaginär ist.

2.3.3: Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen



Ansatz für die Wellenfunktionen im Aussenbereich:

$$\psi_I(x) = A_I \exp(\kappa x)$$
$$\psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x)$$

Einsetzen in S-Glg. für Bereich I:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right\} A_I \exp(\kappa x) = -\frac{\hbar^2}{2m} A_I \kappa^2 \exp(\kappa x) = W A_I \exp(\kappa x)$$

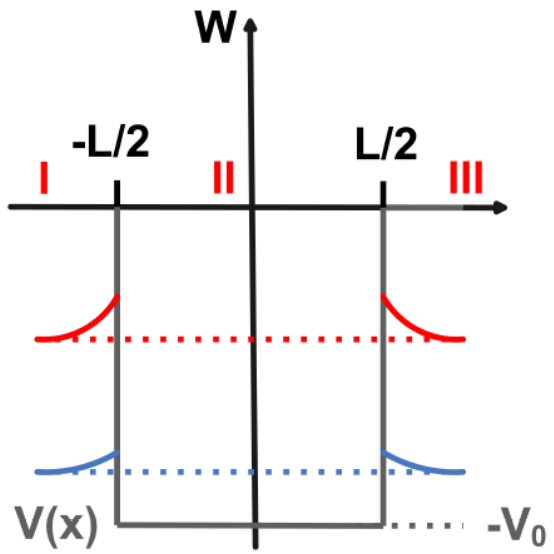
$$\Rightarrow \kappa^2 = -\frac{2mW}{\hbar^2} \quad \text{bzw.} \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

Für den Bereich III ergibt sich dasselbe Ergebnis.

Es gibt also zunächst einmal im Außenbereich unendlich viele Lösungen von exponentiell abfallenden Wellenfunktionen.

2.3.3: Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen

- Damit ist die Struktur der Lösungen im Außenraum klar
→ abfallende Exponentialfunktionen



Was ist los im Bereich II ?

Der „bewährte“ Ansatz lautet:

$$\psi(x) = A_{II}^{+} \exp(jkx) + A_{II}^{-} \exp(-jkx)$$

$$\text{mit } k^2 = \frac{2m(W+V_0)}{\hbar^2}$$

Die Lösung lautet also:

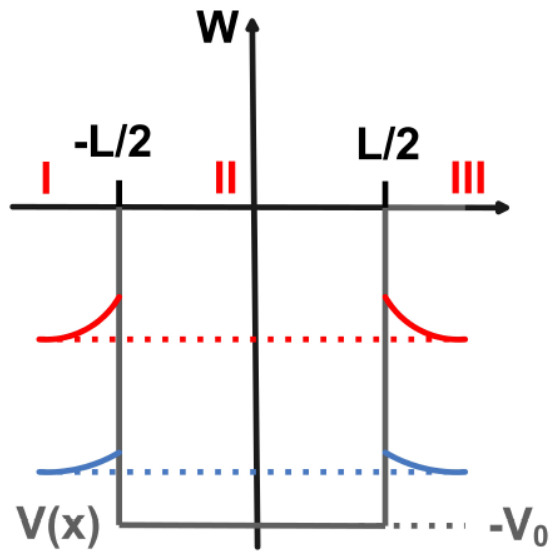
$$\psi(x) = \begin{cases} A_I \exp(\kappa x): & x \le -L/2 \\ A_{II}^{+} \exp(jkx) + A_{II}^{-} \exp(-jkx): & \frac{-L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ A_{III} \exp(-\kappa x): & x \ge L/2 \end{cases}$$

$$\left(\text{mit } \kappa^2 = -\frac{2mW}{\hbar^2} \text{ bzw. } \kappa = \sqrt{-\frac{2mW}{\hbar^2}} \right)$$

Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen

Die diskrete Natur der Lösungen ergibt sich jetzt aus den Stetigkeitsbedingungen:

$$\psi_I(-L/2)=\psi_{II}(-L/2) \quad \psi_I'(-L/2)=\psi_{II}'(-L/2)$$
$$\psi_{II}(L/2)=\psi_{III}(L/2) \quad \psi_{II}'(L/2)=\psi_{III}'(L/2)$$



→ 4 Gleichungen für die 4 Unbekannten

$A_I, A_{II}^+, A_{II}^-, A_{III}$ (mit k bzw. κ als Parameter)

Gleichungssystem hinschreiben

↓

Determinanten = 0 setzen

↓

Bedingungen für k bzw. κ

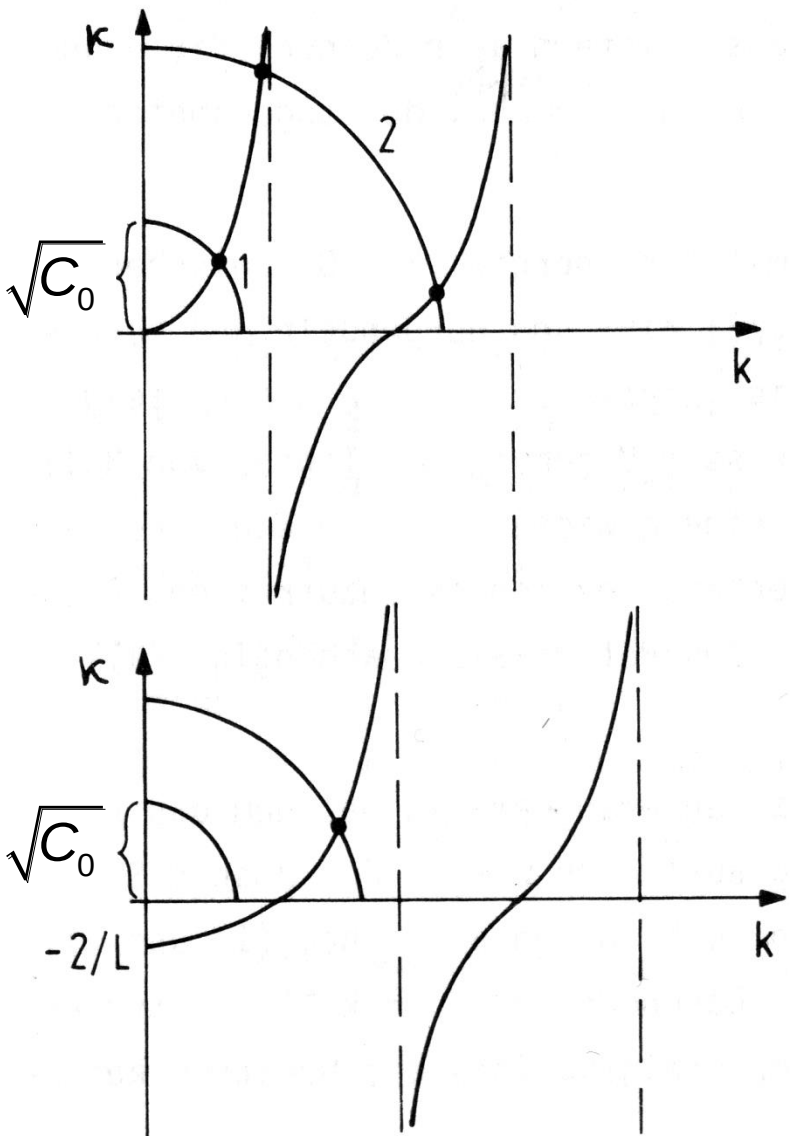
→

$\kappa = k\tan\left(\frac{kL}{2}\right)$ für symm. ψ (cosinusartig)

$\kappa = k\cot\left(\frac{kL}{2}\right)$ für antisymm. ψ (sinusartig)

Weiterhin gilt: $\kappa^2+k^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}=C_0$

Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen



Visualisierung durch graphische Darstellung:

- es existiert auf jeden Fall eine symmetrische Lösung

-nur ab einer bestimmten Mindestgröße von V_0 gibt es eine antisymmetrische Lösung

-je größer V_0, desto mehr Schnittpunkte und desto mehr Lösungen existieren

$$\kappa = k \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$$ für symm. ψ (cosinusartig)

$$\kappa = k \cot\left(\frac{kL}{2}\right)$$ für antisymm. ψ (sinusartig)

Weiterhin gilt: $\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = C_0$

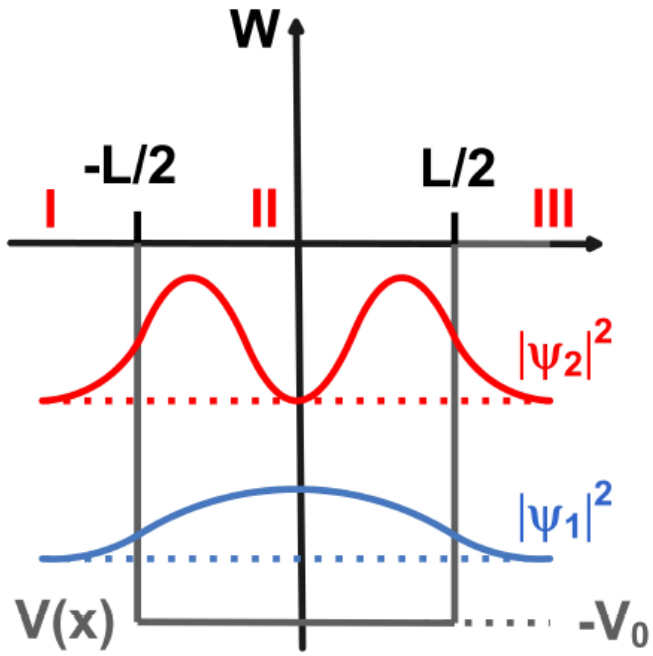
Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen

Symmetrische (gerade) Lösungen:

$$u_{g,n}(x) = \begin{cases} A_n \cos(k_n x) & \text{für} \quad |x| \le \frac{L}{2} \\ A_n \cos(k_n \frac{L}{2}) \exp\left(\kappa_n (\frac{L}{2} - |x|) \right) & \text{für} \quad |x| > \frac{L}{2} \end{cases}$$

Antisymmetrische (ungerade) Lösungen:

$$u_{u,m}(x) = \begin{cases} B_m \sin(k_m x) & \text{für} \quad |x| \le \frac{L}{2} \\ B_m \sin(k_m \frac{L}{2}) \exp\left[\kappa_m (\frac{L}{2} - |x|) \right] & \text{für } x > \frac{L}{2} \\ -B_m \sin(k_m \frac{L}{2}) \exp\left[\kappa_m (\frac{L}{2} - |x|) \right] & \text{für } x < -\frac{L}{2} \end{cases}$$



-Stetigkeitsbedingungen werden nur für
-diskrete k_n erfüllt:

→endliche Anzahl von Eigenfunktionen mit diskreten Energieeigenwerten

-im Gegensatz zur klassischen Lösung endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit außerhalb des Topfes !!

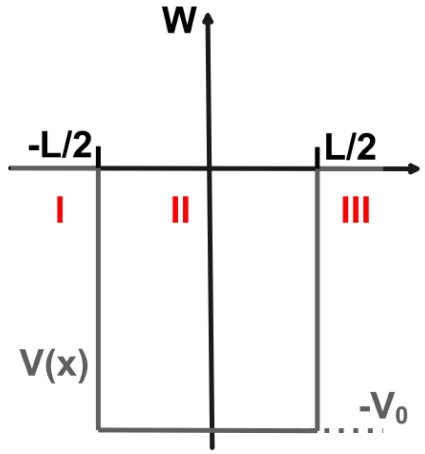
„Quantenmechanischer Tunneleffekt“

„Teilchen tunnelt aus dem Topf heraus “

2.3.4: Kontinuumslösungen beim Potentialtopf

Klassisch für W>0:

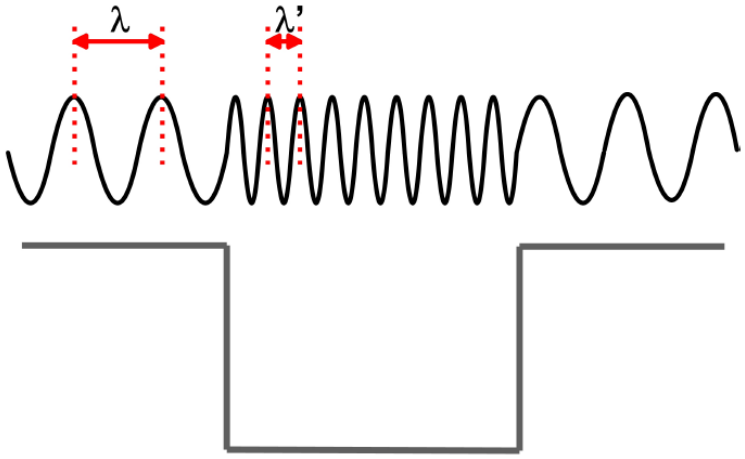
Teilchen rauscht über den Topf hinweg
(wird beschleunigt und dann wieder abgebremst)



Quantenmechanik für W>0:

Wieder der Ansatz, der (fast) immer funktioniert: $\psi(x) = A^{+}\exp(jkx) + A^{-}\exp(-jkx)$

Periodische Lösungen auch außerhalb des Topfes.



Qualitatives Bild der Lösungen:

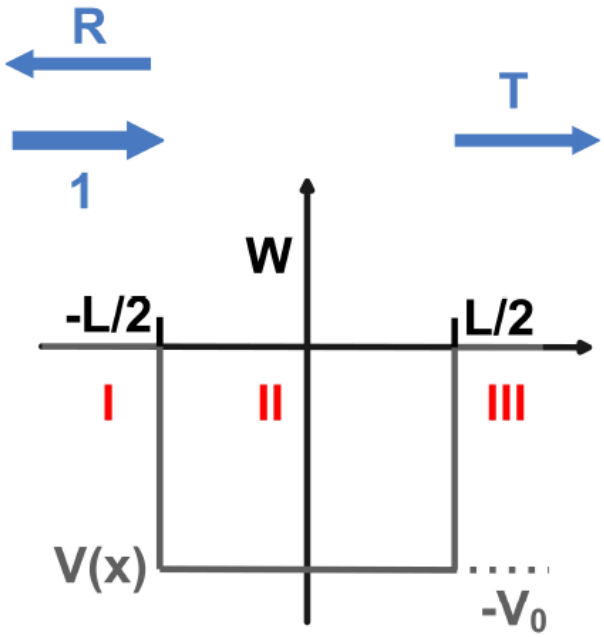
-grössere kinetische Energien entsprechend
kleinerer Wellenlängen im Bereich desTopfes

Kontinuumslösungen beim Potentialtopf

Ansatz für die Lösung also:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_I^+ \exp(jkx) + A_I^- \exp(-jkx): & x \le -L/2 \\ A_{II}^+ \exp(jk'x) + A_{II}^- \exp(-jk'x) & : \ -L/2 < x < L/2 \\ A_{III}^+ \exp(jkx) + A_{III}^- \exp(-jkx): & x \ge L/2 \end{cases}$$

… ergibt eine üble Rechnerei.



Typischere Situation:
Elektron kommt nur einer Seite:
Ebene Welle läuft von links nach rechts

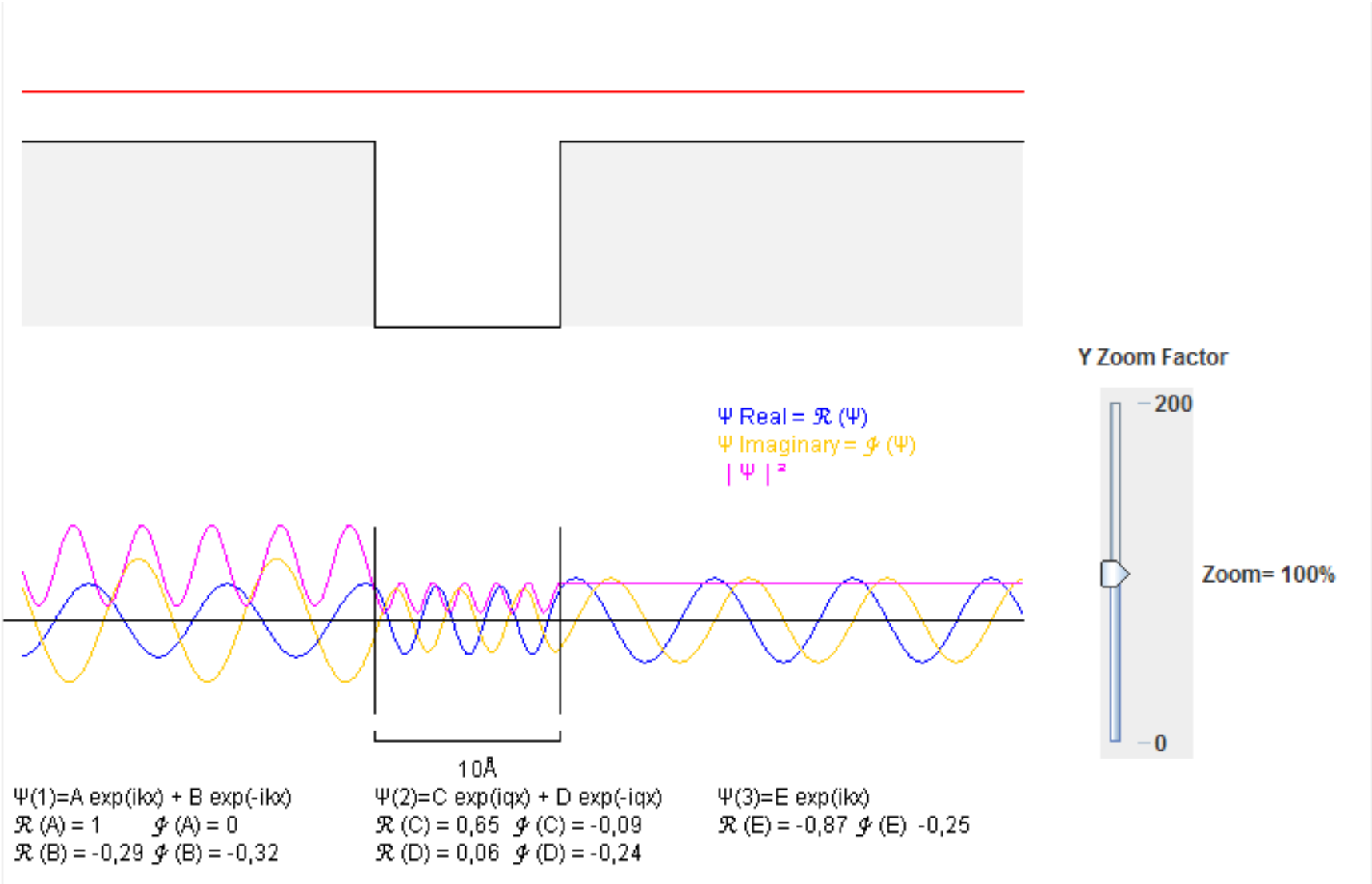
Die Rechnerei ist damit immer noch heftig.

Was interessiert uns denn eigentlich ?

Ähnlich zur Elektrodynamik sind die Reflexions- und der Transmissionskoeffizienten (die Ströme) relevant.

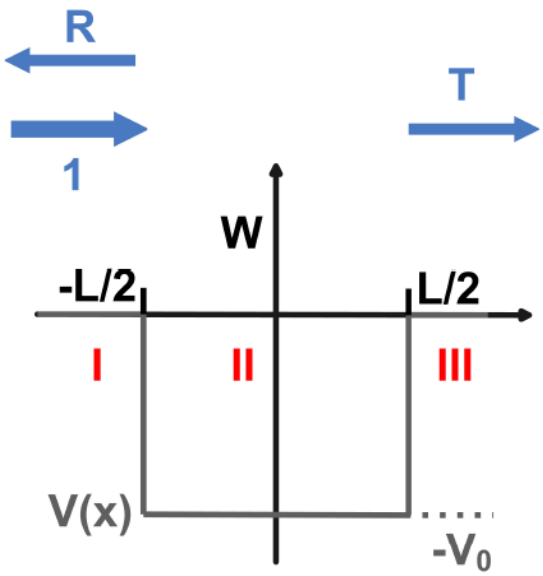
(R+T=1)

Kontinuumslösungen beim Potentialtopf



Quelle: http://www.abdn.ac.uk/~wpe001/vpl/well/applet.html

Potentialtopf: W>0, Kontinuumslösungen

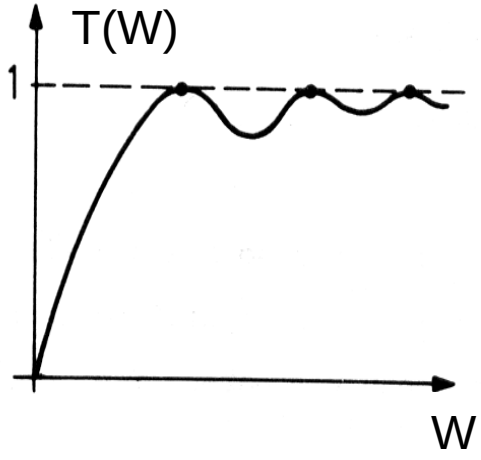


$$T = \frac{\left|A_{III}^{+}\right|^2}{\left|A_{I}^{+}\right|^2}$$

$$R = \frac{\left|A_{I}^{-}\right|^2}{\left|A_{I}^{+}\right|^2}$$

$$T(W>0) = \left(1 + \frac{\sin^2\left(L\sqrt{\frac{2m(W+V_0)}{\hbar^2}}\right)}{4\frac{W}{V_0}\left(\frac{W}{V_0}+1\right)}\right)^{-1}$$

$$= \left(1 + \frac{\sin^2(Lk')}{4\frac{W}{V_0}\left(\frac{W}{V_0}+1\right)}\right)^{-1}$$

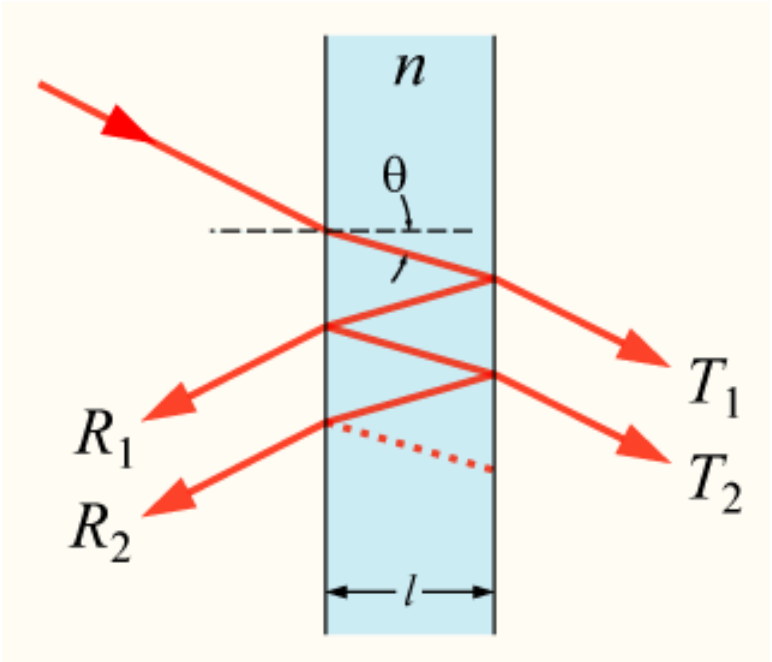


Resonanzen für $k' = \frac{n\pi}{a}$

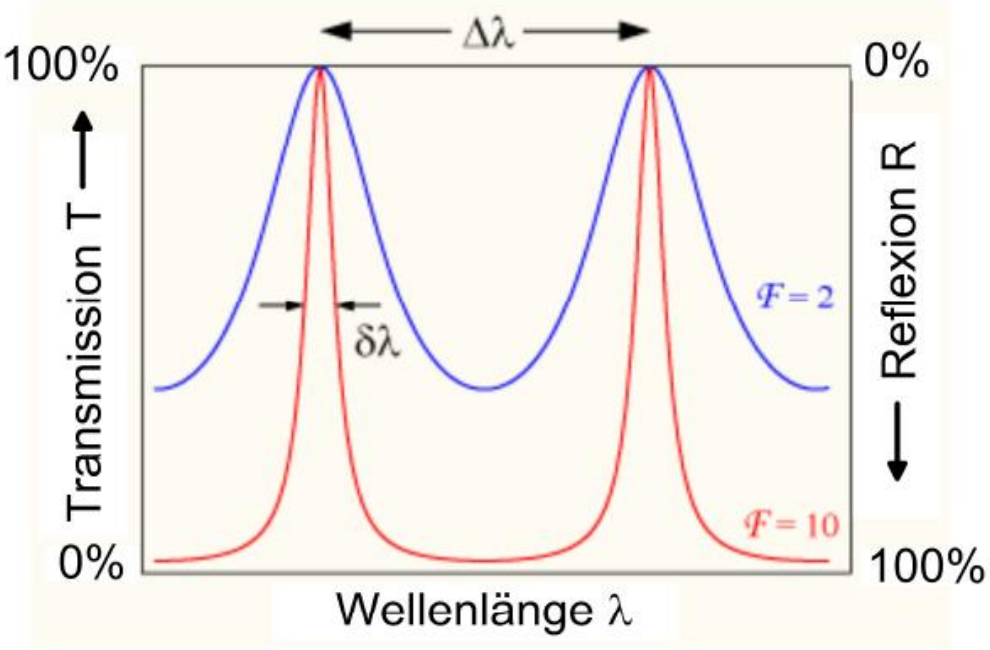
also immer dann, wenn die halbe Materiewellenlänge oder ein ganzzahliges Vielfaches davon in den Potentialtopf „hineinpasst“.

Analogie zur Elektrodynamik/Optik

Ähnliches Verhalten wie beim Durchgang von Licht (=elektromagnetische Welle) durch ein Fabry-Perot-Interferometer:



Funktionsprinzip eines Fabry-Perot-Etalons.



Durchlässigkeit eines Fabry-Perot-Etalons für verschiedene Güten.

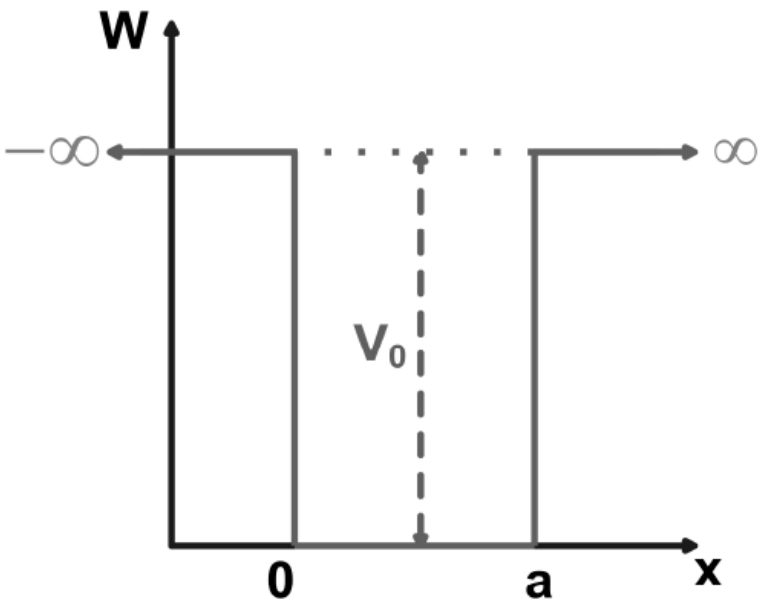
Quelle: www.wikipedia.org

Übersicht über die Vorlesung

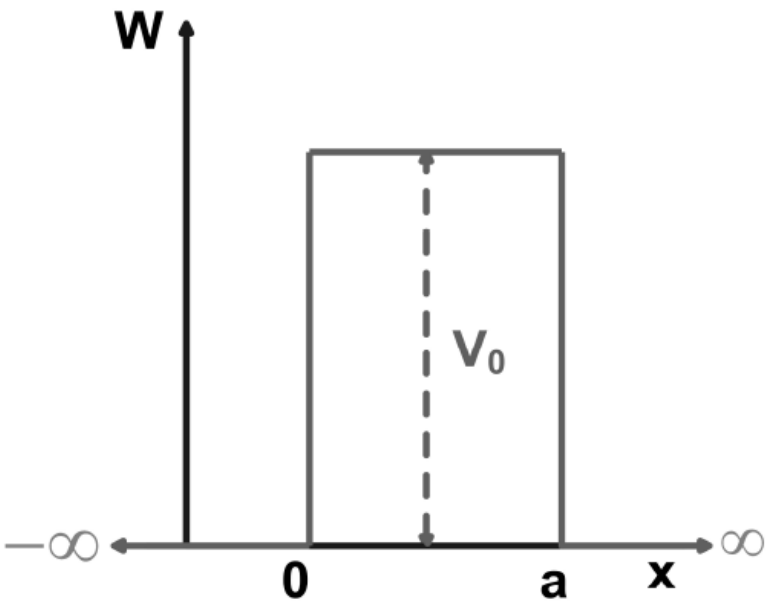
1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
   - 2.1 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung
   - 2.2 Der unendlich hohe Potentialtopf
   - 2.3 Der endliche Potentialtopf
   - 2.4 Potentialbarrieren
   - 2.5 Eigentliche und uneigentliche Zustände, Normierung
   - 2.6 Quantenmechanische Messungen
3. **Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente**
4. **Elektronen in Kristallen**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
9. **Der pn-Übergang**

2.4: Potentialbarrieren

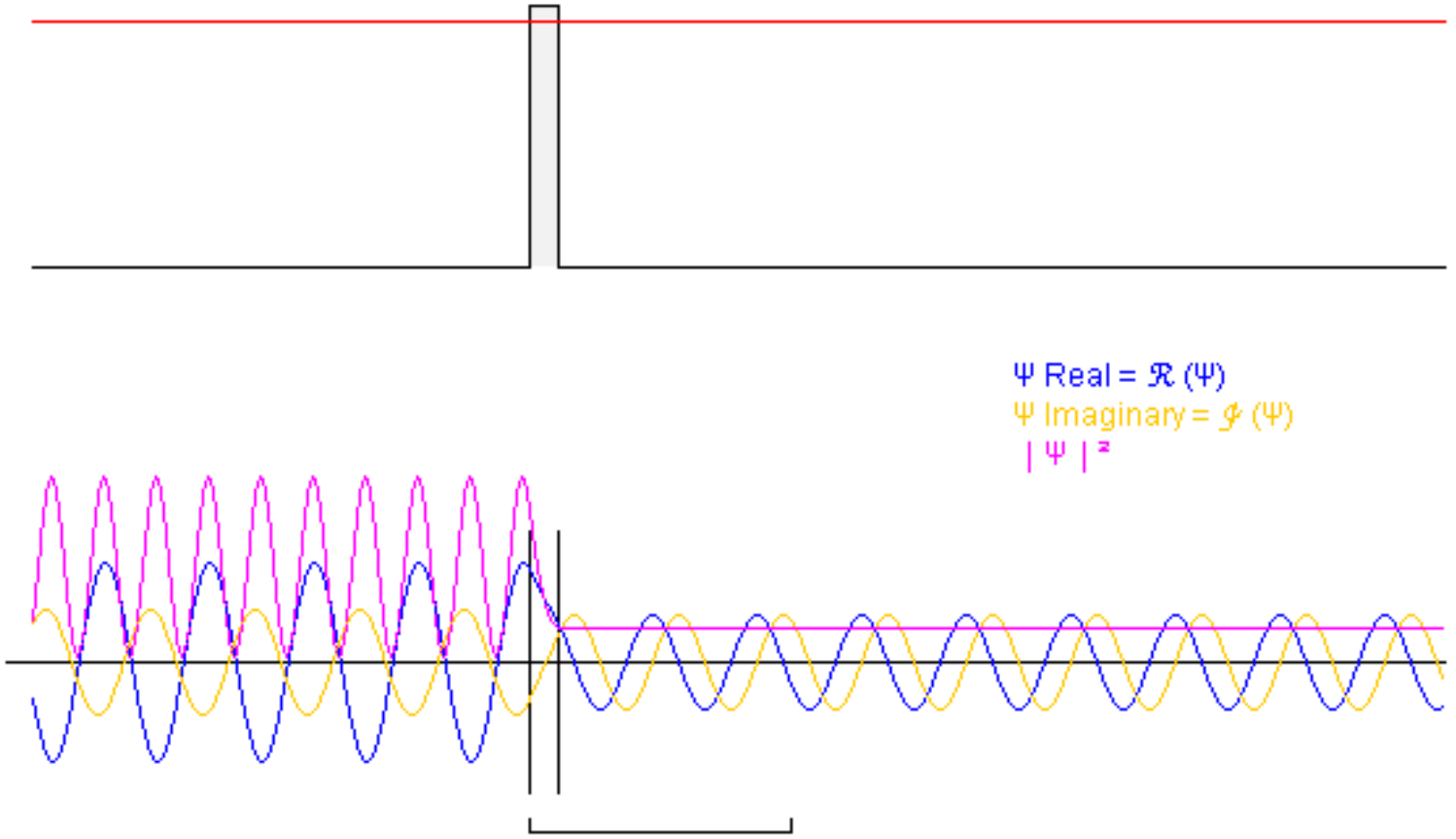
„Potentialtopf“



„Potentialbarriere“



Potentialbarriere



Ψ(1)=A exp(ikx) + B exp(-ikx)
ℜ (A) = 1 ℑ (A) = 0
ℜ (B) = 0,42 ℑ (B) = -0,55

Ψ(2)=C exp(qx) + D exp(-qx)
ℜ (C) = -0,38 ℑ (C) = 0,88
ℜ (D) = 1,79 ℑ (D) = -1,43

Ψ(3)=E exp(ikx)
ℜ (E) = 0,34 ℑ (E) -0,64

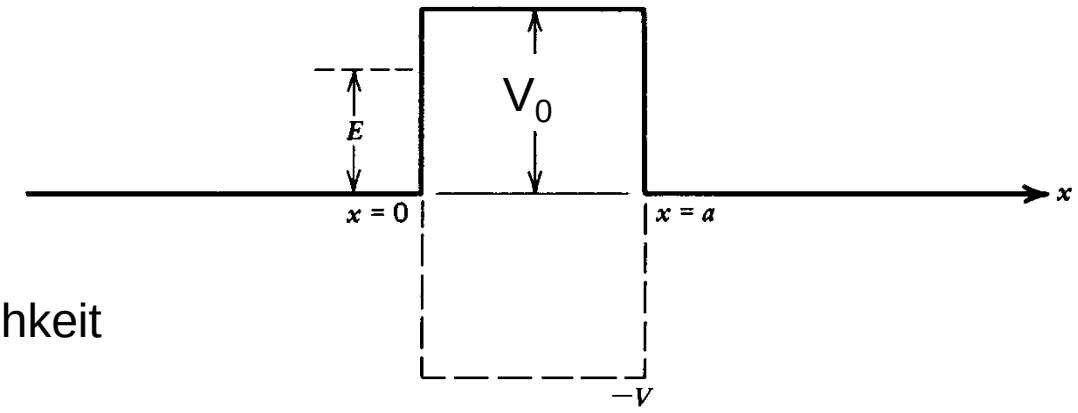
http://www.abdn.ac.uk/~wpe001/vpl/barrier/applet.htm

Potentialbarriere

$W<V_0$:

Tunneleffekt in Reinkultur

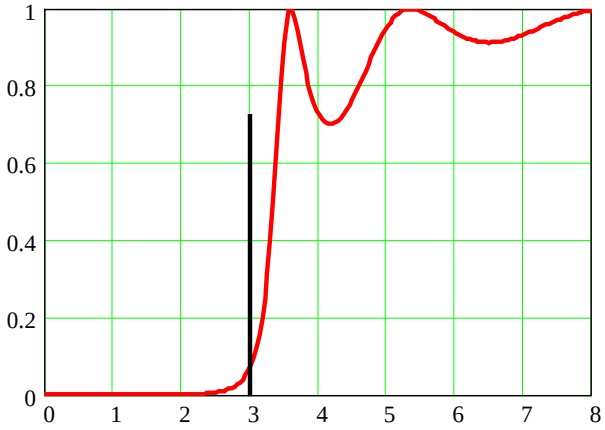
denn: ⊢



Klassisch würde das Elektron an der Barriere mit 100%iger Wahrscheinlichkeit reflektiert werden.

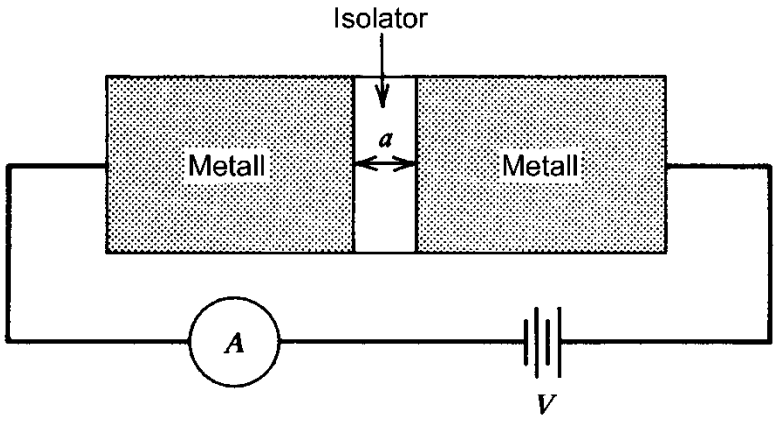
Quantenmechanisch „durchtunnelt“ es mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit die Barriere

$$T(W<V_0)=\left(1+\frac{\sinh^2(a\sqrt{2m(V_0-W)/\hbar^2})}{4(W/V_0)(1-W/V_0)}\right)^{-1}$$



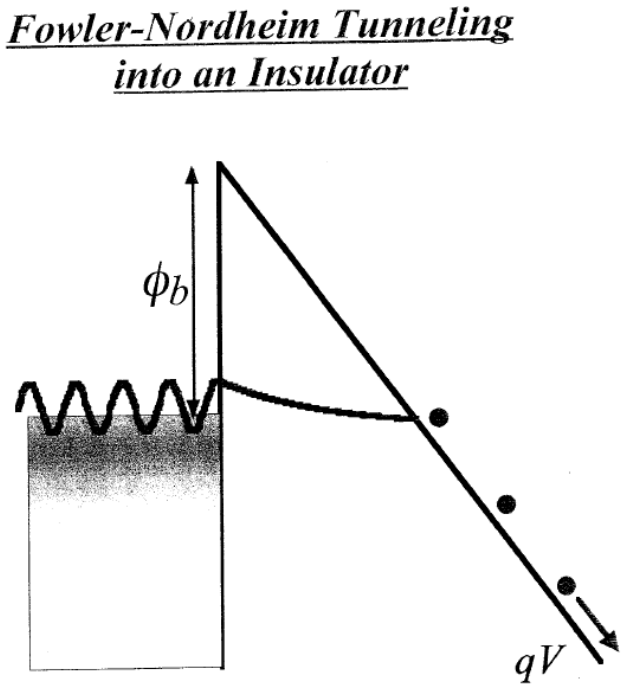
E [eV] (V_0=3eV)

Anwendung von Potentialbarriere: Die Tunneldiode



Metall-Isolator-Tunneldiode

Tunneldiode in Mikrowellenschaltkreisen



Sehr starke Feldabhängigkeit,
hohe Nichtlinearität des Bauelementes

Anwendung von Potentialtopf und -barriere: Die resonante Tunneldiode

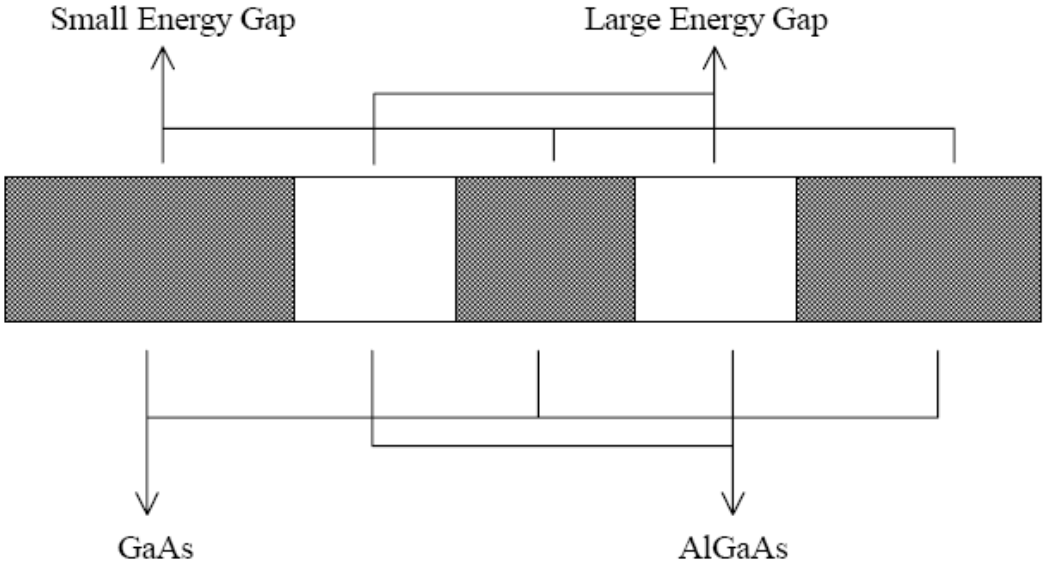


Figure 5 RTD Structure

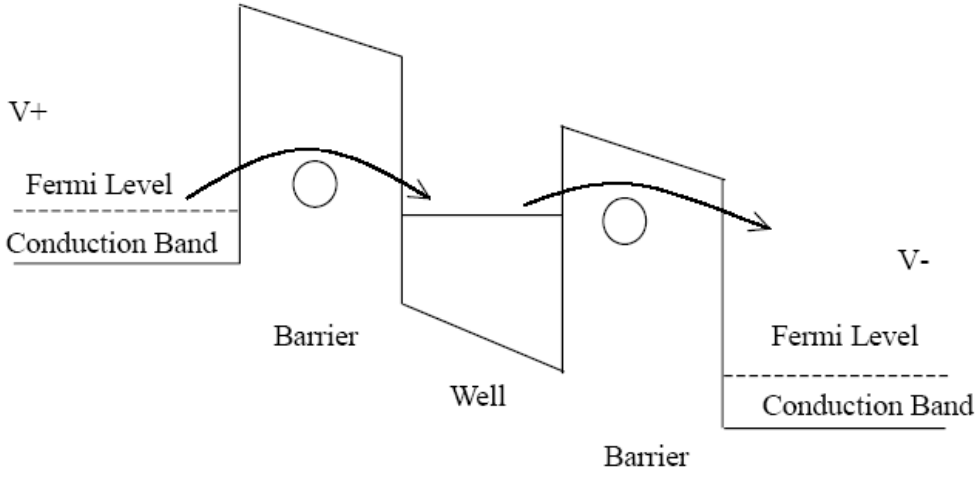


Figure 7 Energy band diagram of RTD with small bias voltage

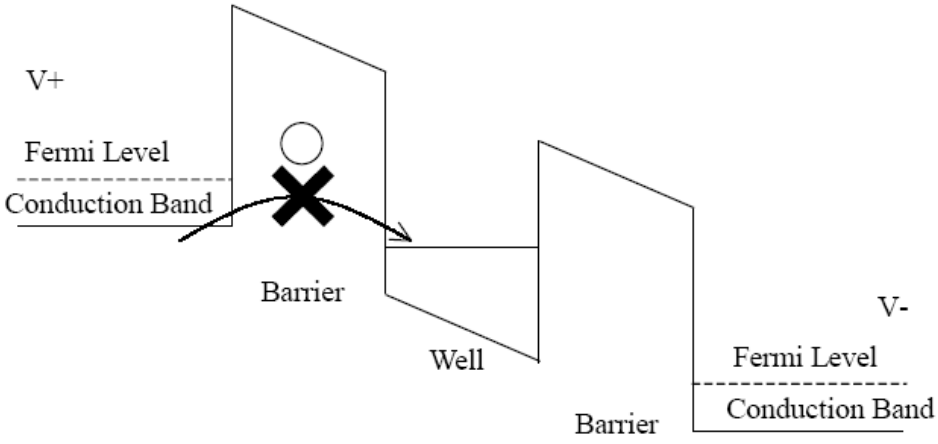
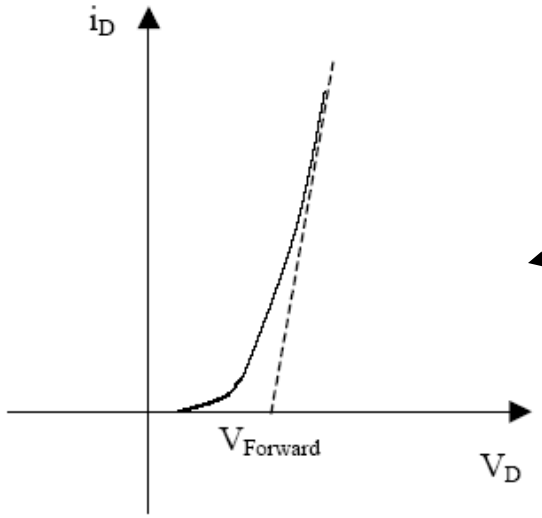


Figure 8 Energy band diagram of RTD with large bias voltage

Anwendung von Potentialtopf und -barriere: Die resonante Tunneldiode



(b) I-V Characteristic

statt „normaler“ Dioden-kennlinie

-Bereich mit negativem differentiellen Widerstand

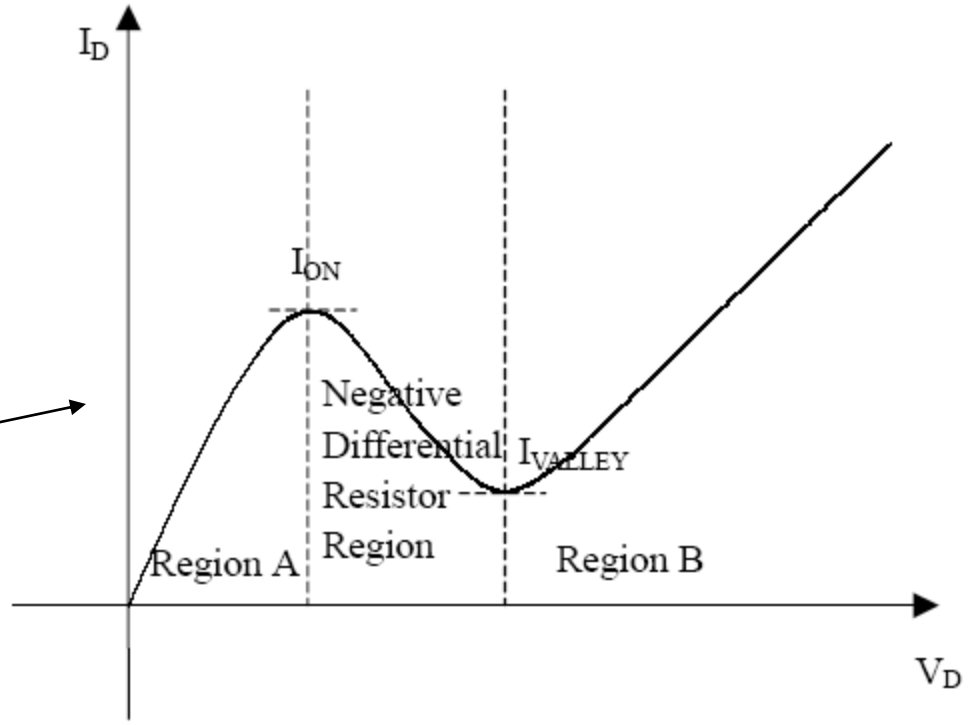
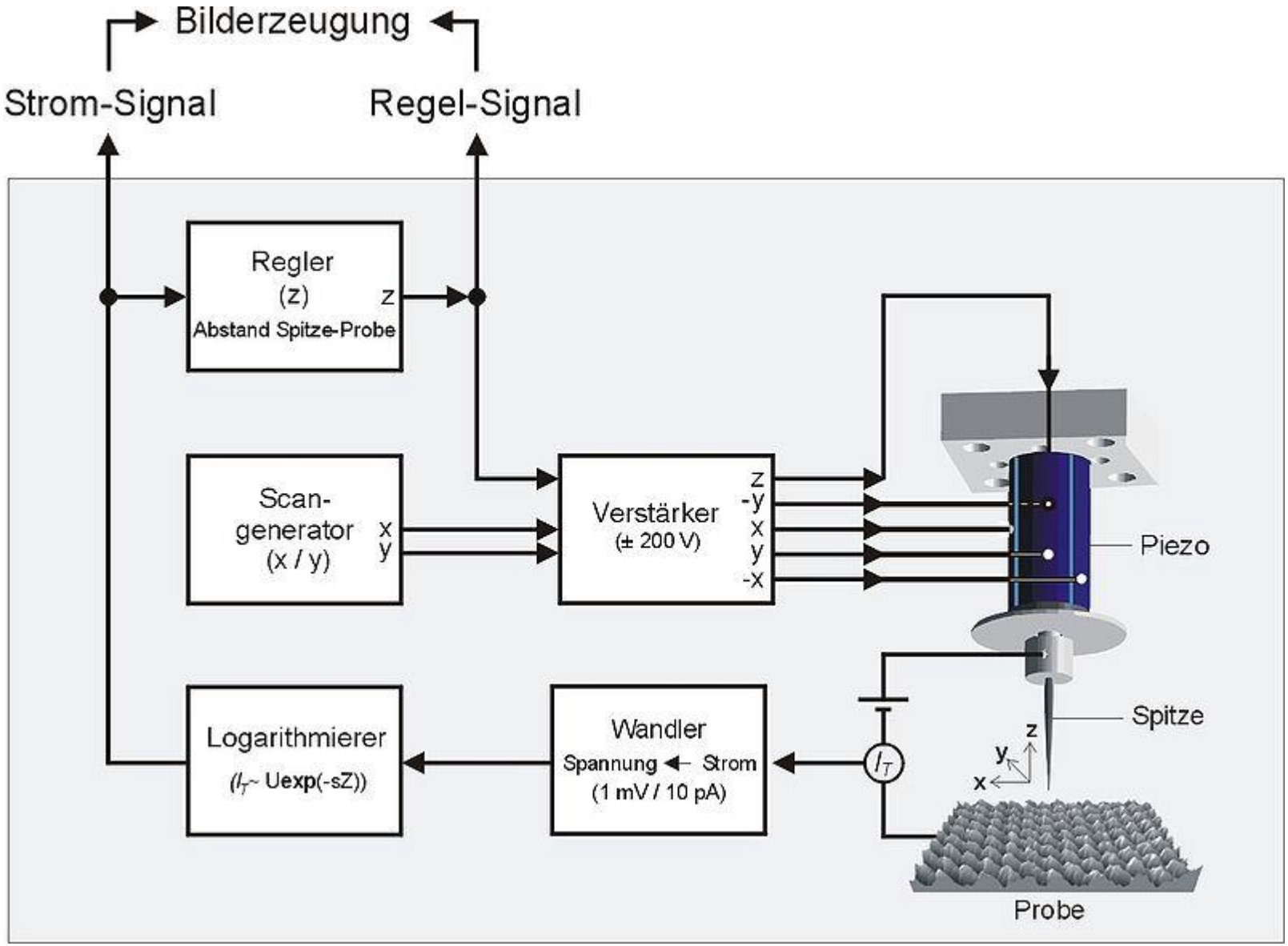


Figure 9 I-V characteristic of resonant tunneling diode

Anwendung von Potentialbarrieren: Das Rastertunnelmikroskop