

1. Grundlagen der Quantenmechanik
 - 1.1 Einleitung
 - 1.2 Historisches
 - 1.3 Die Schrödinger-Gleichung
 - 1.4 Das freie quantenmechanische Elektron
 - 1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte
2. Elektronische Zustände
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 2014
2. Foliensatz
24.04.2014

1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right\} \psi(x,t)$$

Analogie zu den elektromagnetischen Wellen, „Materiewellen“, intuitives Raten etc.

————> Wellenansatz: $\psi(x,t) = A \exp(j(kx - \omega t))$

linke Seite: $j\hbar \frac{\partial}{\partial t} A \exp(j(kx - \omega t)) = j\hbar(-j\omega) A \exp(j(kx - \omega t)) = A\hbar\omega \exp(j(kx - \omega t))$

rechte Seite: $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} A \exp(j(kx - \omega t)) = -\frac{\hbar^2 jk}{2m} \frac{\partial}{\partial x} A \exp(j(kx - \omega t))$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} A \exp(j(kx - \omega t))$$

Die Lösungen der Schrödinger-Glg. für das freie Teilchen

$$\Rightarrow \left\{ \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\} A \exp(j(kx - \omega t)) = 0$$

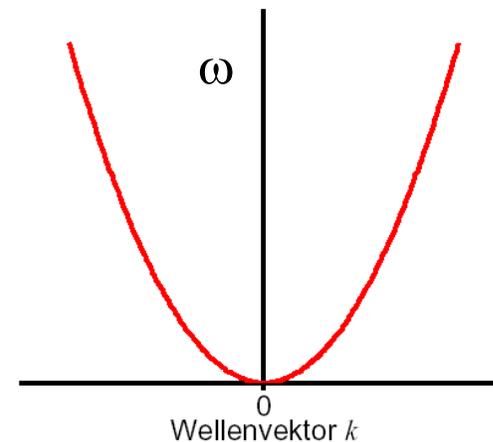
-muss erfüllt sein für alle Zeiten t , d. h. wir erhalten mögliche Lösungen für die ω und k , für die die Beziehung

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{gilt.}$$

→ unendlich viele Lösungen

Für alle $-\infty < k < \infty$ gibt es jeweils ein passendes ω , so dass die Gleichung erfüllt wird.

Dieser Zusammenhang wird als Dispersionsrelation bezeichnet.

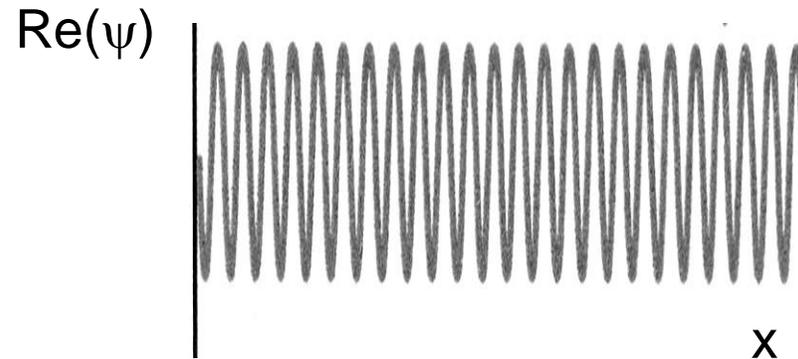


„Dispersionsrelation“

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Ebene Welle:

$$\psi(x, t) = A \exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

1. Der Ort des Teilchens:

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist proportional zum Absolutquadrat der Wellenfunktion:

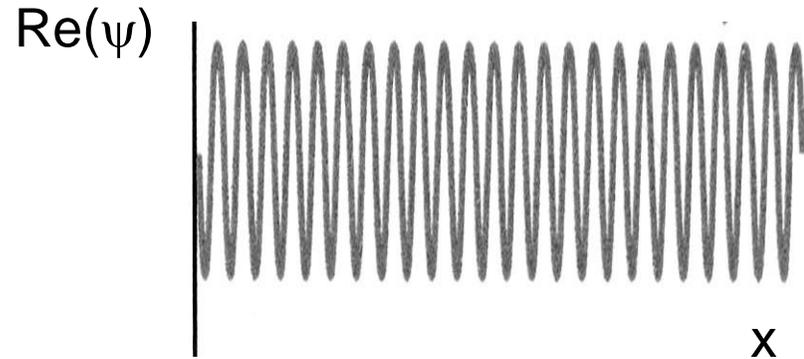
$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t)\psi(x, t) = \\ &|A|^2 \exp(jkx - jkx - j\omega t + j\omega t) = |A|^2 \end{aligned}$$

...aha, räumlich konstant !?

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Ebene Welle:

$$\psi(x, t) = A \exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

2. Phasengeschwindigkeit:

Wie schnell bewegt sich ein Punkt konstanter Phase ? Das heisst, wir suchen die x-Werte, für die das Argument in der Wellenfunktion gleich bleibt:

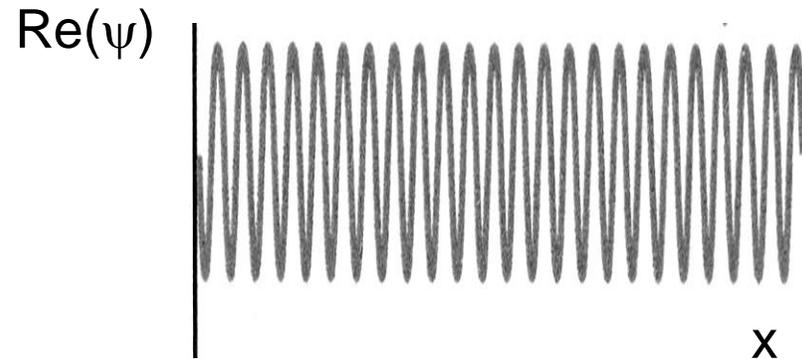
$$(kx - \omega_k t) = \text{const.} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (kx - \omega_k t) = 0$$

$$\Rightarrow kv_p - \omega_k = 0 \Rightarrow v_p = \frac{\omega_k}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Ebene Welle:

$$\psi(x, t) = A \exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

3. Der Impuls (klassisch $p=mv$):

Zusammenhang wurde schon von Louis de Broglie 1923 erkannt:

Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p}$

Mit $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ folgt $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k$

Jeder Welle mit Wellenzahl(vektor) k „entspricht“ ein Elektron mit Impuls $p=\hbar k$.
(Eine „sauberere“ Einführung erfolgt später.)

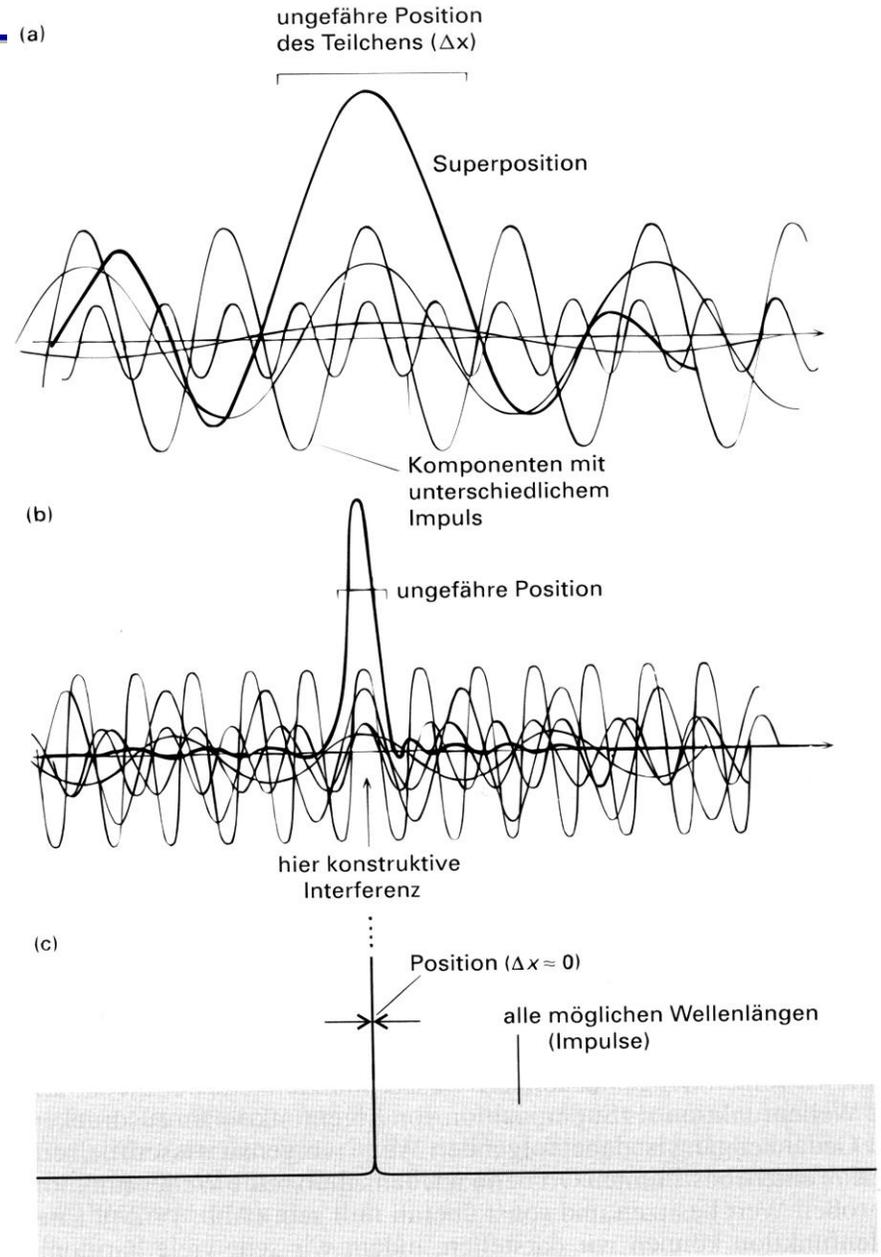
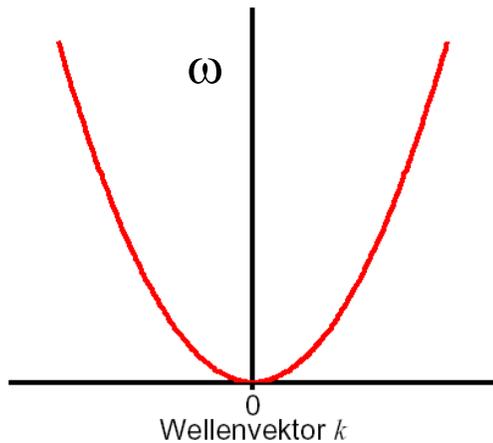
Es handelt sich um ein „merkwürdiges“ Elektron, da total delokalisiert.

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Superposition

Aufgrund des Superpositionsprinzips kann man beliebig Lösungen mit verschiedenen Impulsen überlagern:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp(j(kx - \omega_k t)) dk \equiv$$

$$\int dk A(k) \exp(j(kx - \omega_k t))$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

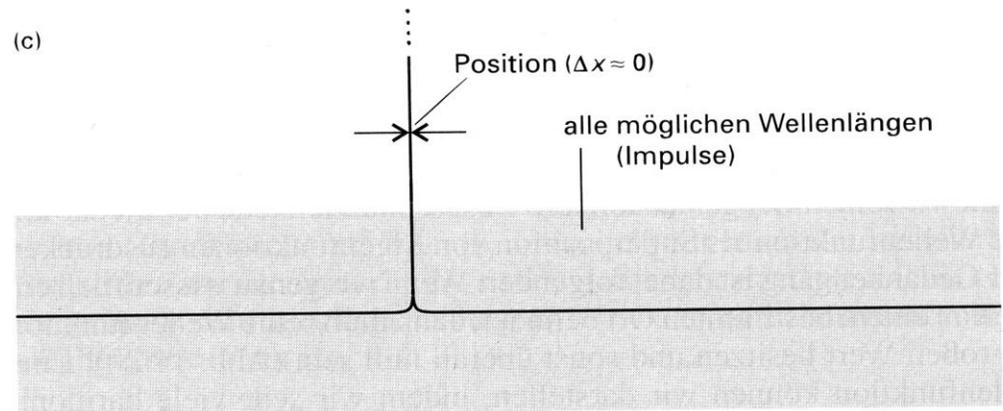
Übergang von einer Darstellung im „Ortsraum“ $\psi(x, t)$
zu einer Darstellung im „k-Raum“ $\tilde{\psi}(k, t)$ (Spezialfall einer Fouriertrafo.).

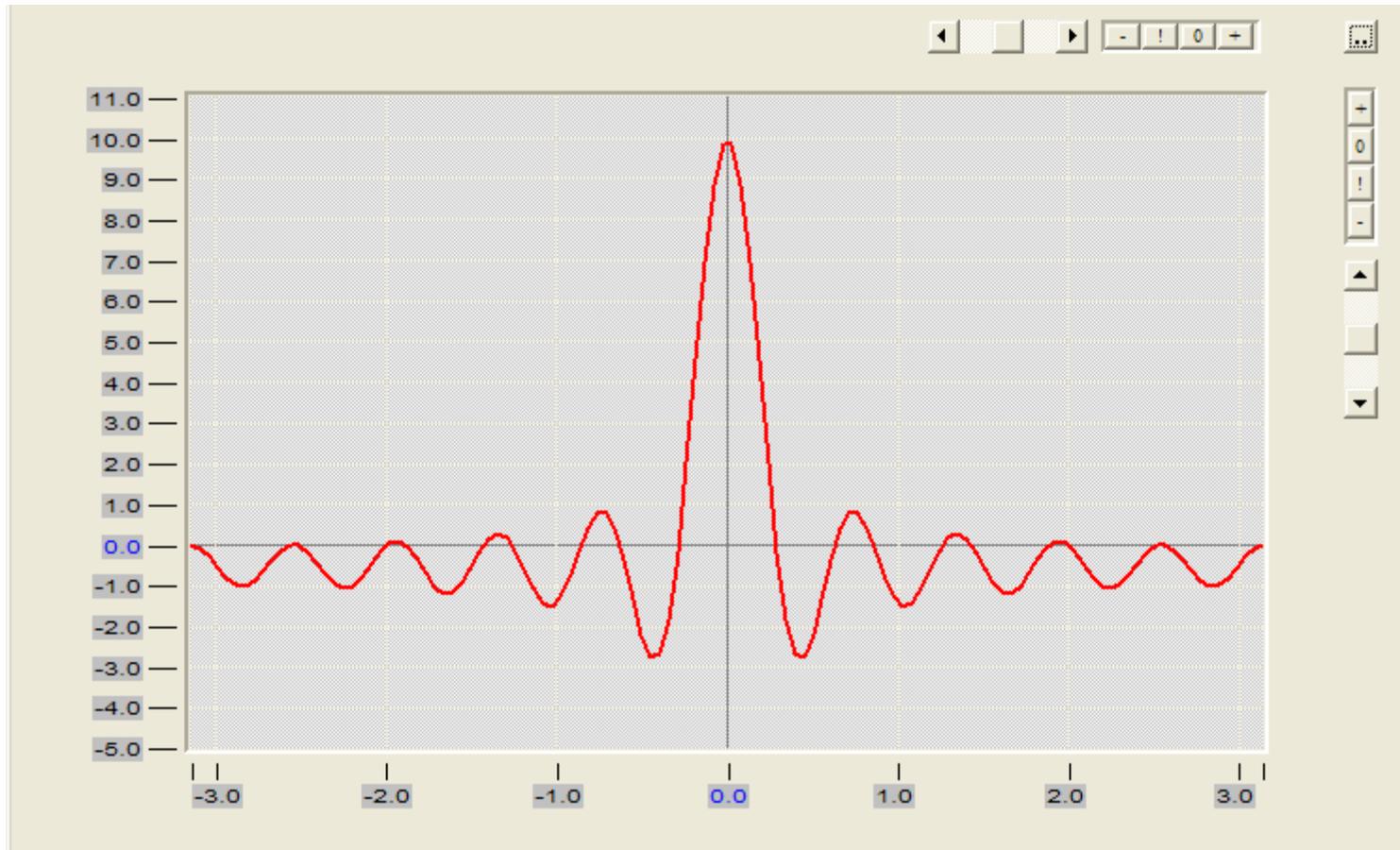
Übergang von der einen zu anderen
Darstellung:

$$\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x, t) \exp(-jkx)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k, t) \exp(jkx)$$

Bsp.: Elektron für $t=0$ vollkommen
lokalisiert im Raum bei $x=0$





Visualisierung der Überlagerung von periodischen Funktionen (hier Kosinus)

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Darstellung eines lokalisierten Elektrons kann durch die *Dirac'sche Delta-Funktion* erfolgen.

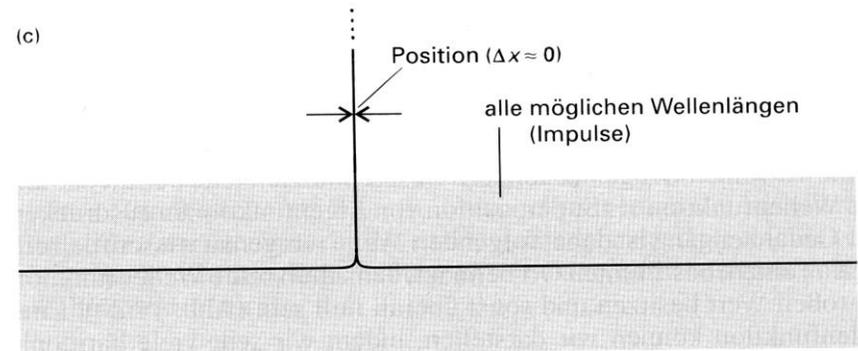
$$\psi(x,0) = \delta(x)$$

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x = 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 ; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$

Für die Darstellung im Impulsraum, also die Fouriertransformierte ergibt sich dann zum Zeitpunkt $t=0$:

$$\tilde{\psi}(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) \exp(-jkx) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Für die einzelnen ebenen Wellen kennen wir jetzt die Zeitabhängigkeit:

$$\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-j\omega t) \quad \text{mit} \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

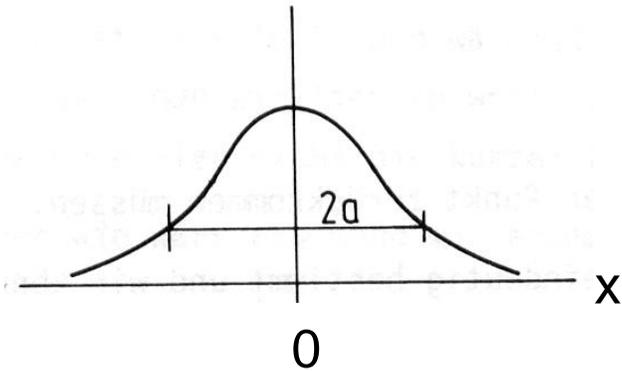
und können jetzt für alle Zeiten durch die Rücktrafo

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k, t) \exp(jkx) \quad \text{die Wellenfunktion durch eine „einfache“ Integration berechnen.}$$

- keine explizite Lösung der S-Glg. mehr erforderlich !

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete

Mathematisch einfacher zu handhaben: $\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) \exp(jk_0 x)$



Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$\rho(x,0) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$$

... einigermaßen auf $\Delta x=2a$ lokalisiertes Teilchen

Wir basteln uns das Ganze aus ebenen Wellen zusammen: (Fouriertrafo)

$$\psi(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x,0) \exp(-jkx) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \exp\left\{-\left(\frac{k-k_0}{\sqrt{2}/a}\right)^2\right\}$$

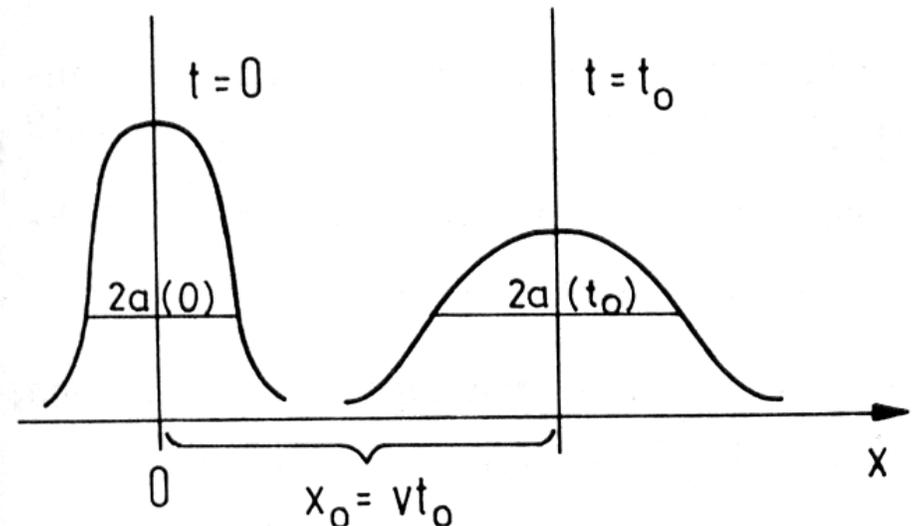
Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete

- damit ergibt sich eine qualitative Aussage über das Verhältnis von Δx und Δk
- Lösung für alle Zeiten, denn wir müssen jetzt die ebenen Wellen nur noch „loslaufen“ lassen

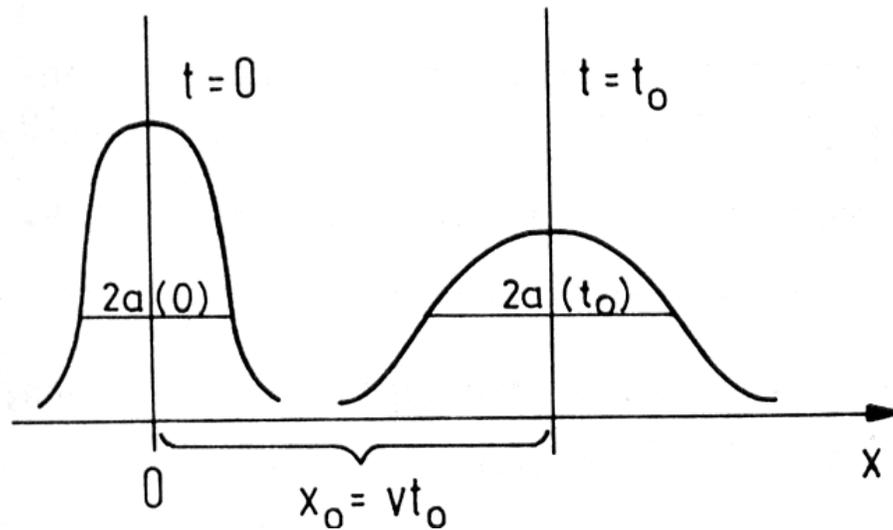
$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{a^2 + \frac{j\hbar t}{m}}} \exp\left(-\frac{a^2 k_0^2}{2}\right) \exp\left\{\frac{\frac{1}{2}((a^2 k_0 + jx)^2)}{\left(a_2 + \frac{j\hbar t}{m}\right)}\right\}$$

bzw. für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a(t)} \exp\left\{-\left[\frac{x - \frac{\hbar k_0 t}{m}}{a(t)}\right]^2\right\}$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



- Wellenpaket zerfließt im Laufe der Zeit !

- Schwerpunkt bewegt sich mit einer Geschwindigkeit

$$v = \frac{\hbar k_0}{m} \quad \text{oder} \quad mv = p = \hbar k_0$$

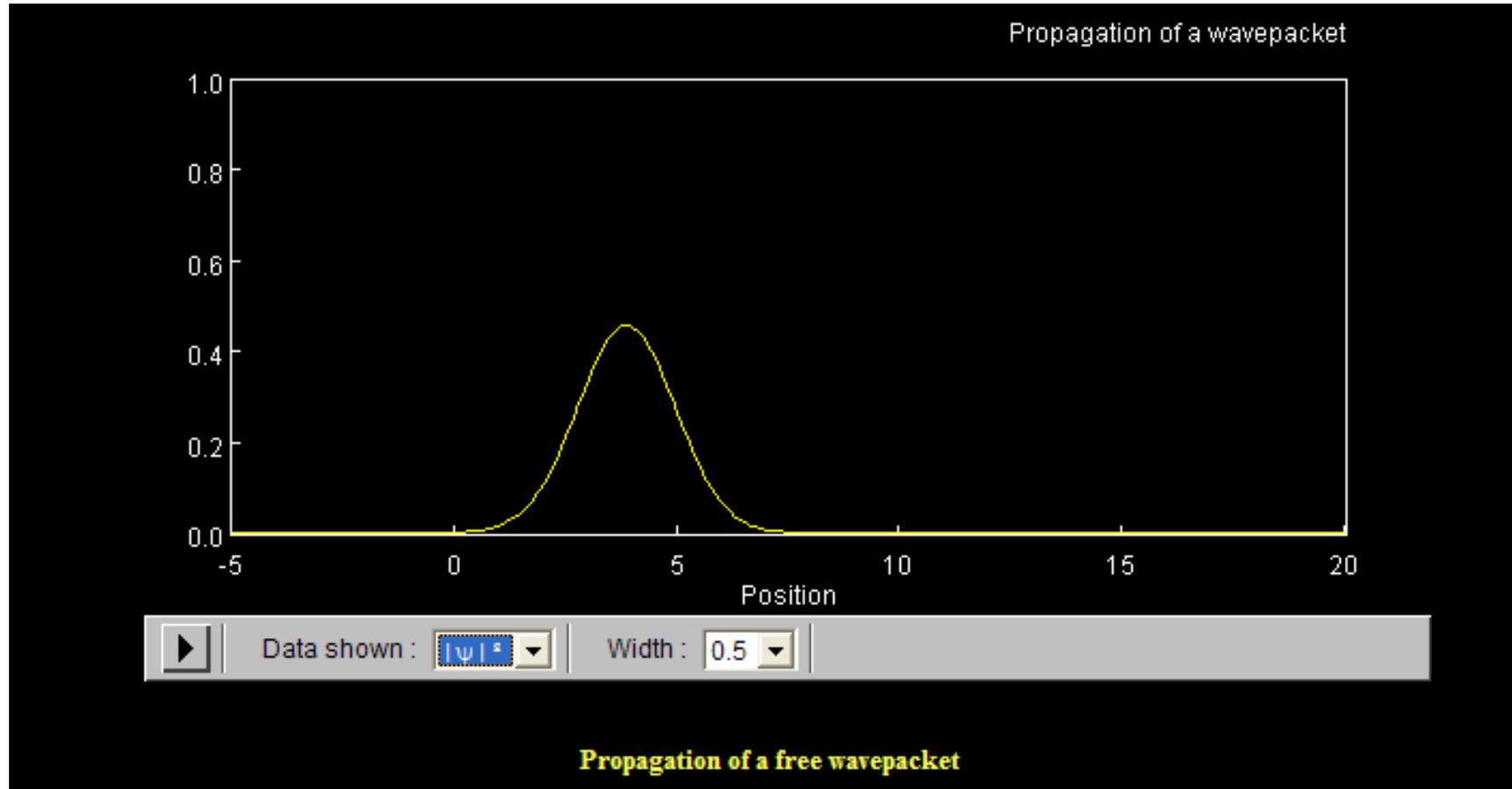
Gruppengeschwindigkeit:

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = 2v_p$$

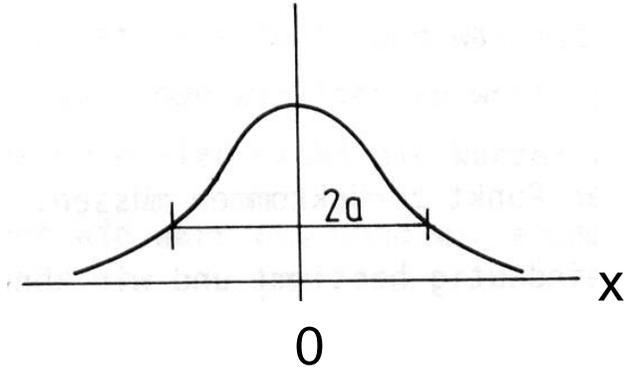
Nettes Applet zur Visualisierung der Wellenpaket-Dynamik:

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/en/index.html>

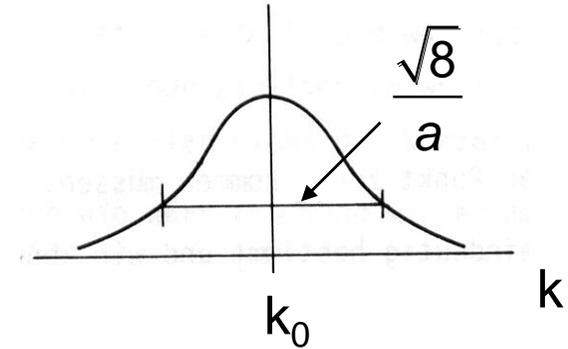
Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



„Ortsraum“



„Impulsraum“

Breite der Funktionen im Orts- bzw. Impulsraum verhalten sich reziprok zueinander

Ganz allgemein gilt:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Heisenberg'sche Unschärferelation für Impuls und Ort !