

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

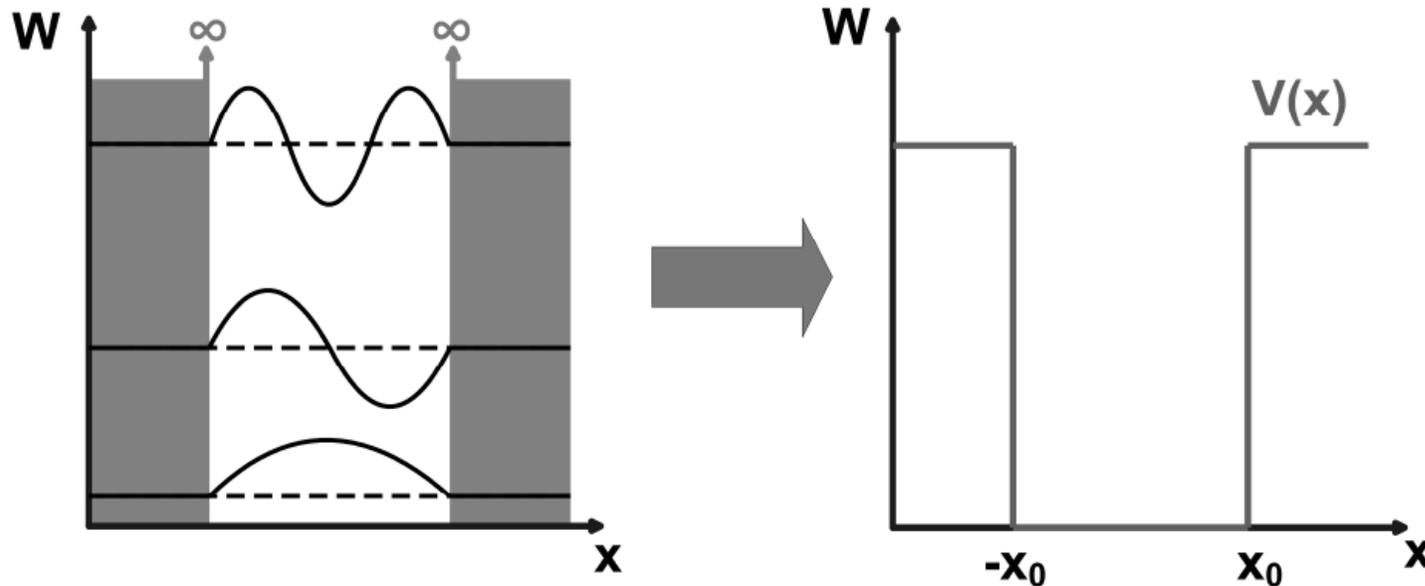
7. Dotierte Halbleiter

8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht

9. Der pn-Übergang

Festkörperelektronik
SS 2014
4. Foliensatz
09.05.2014

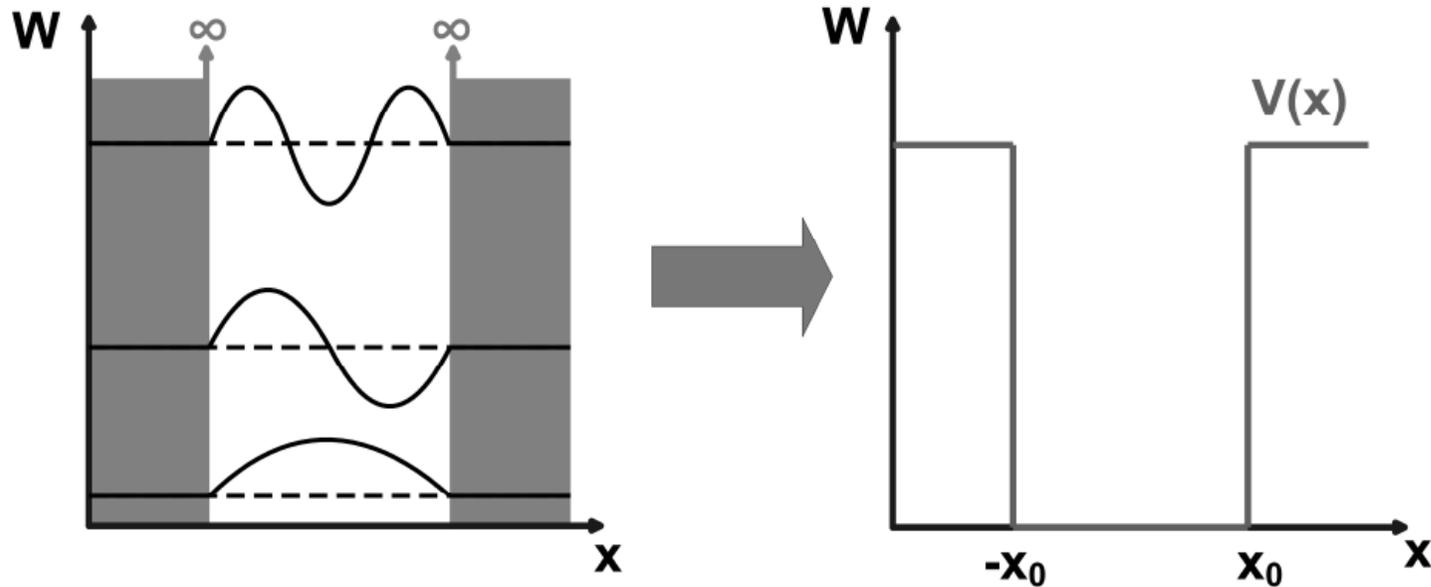
2.3.1 Der **endliche** Potentialtopf: Stetigkeitsbedingungen



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

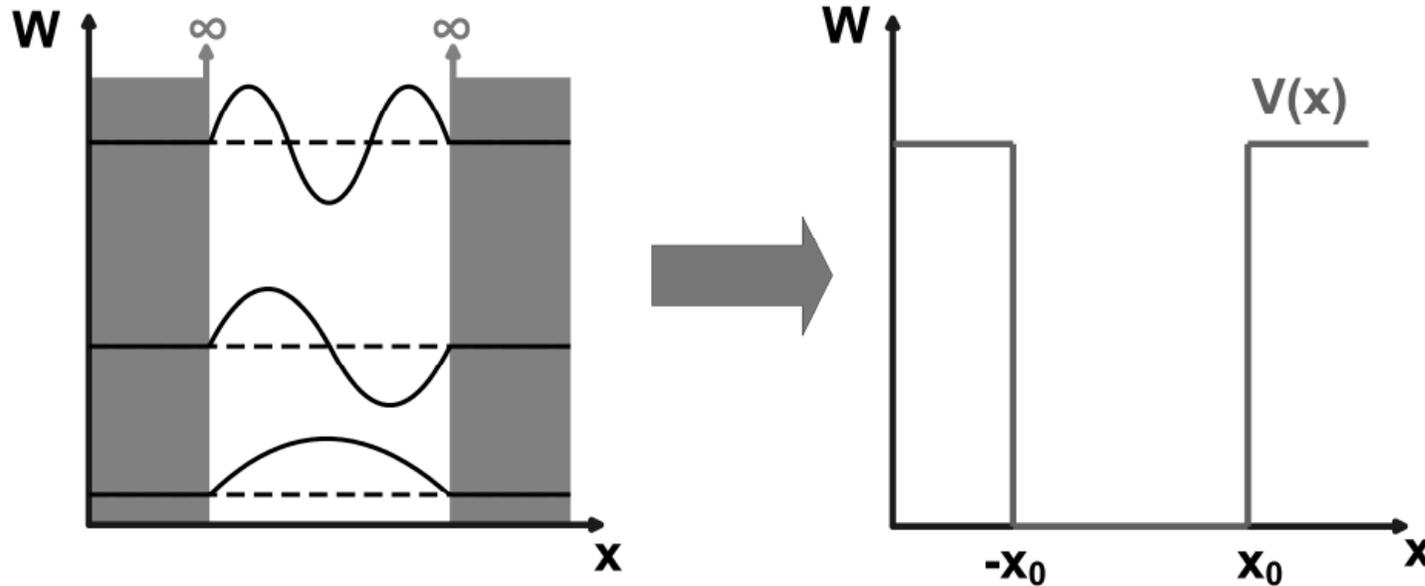
- im Gebiet des unendlichen Potentials die Wellenfunktion ψ verschwindet.

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.*

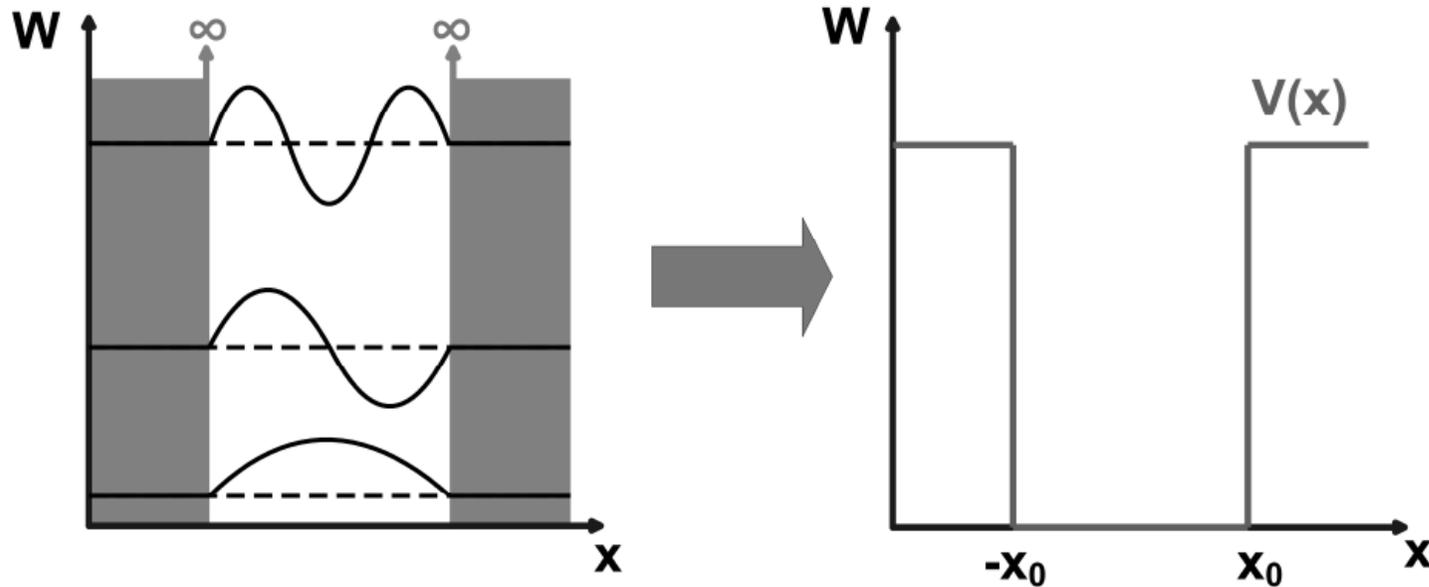
Begründung:

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

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

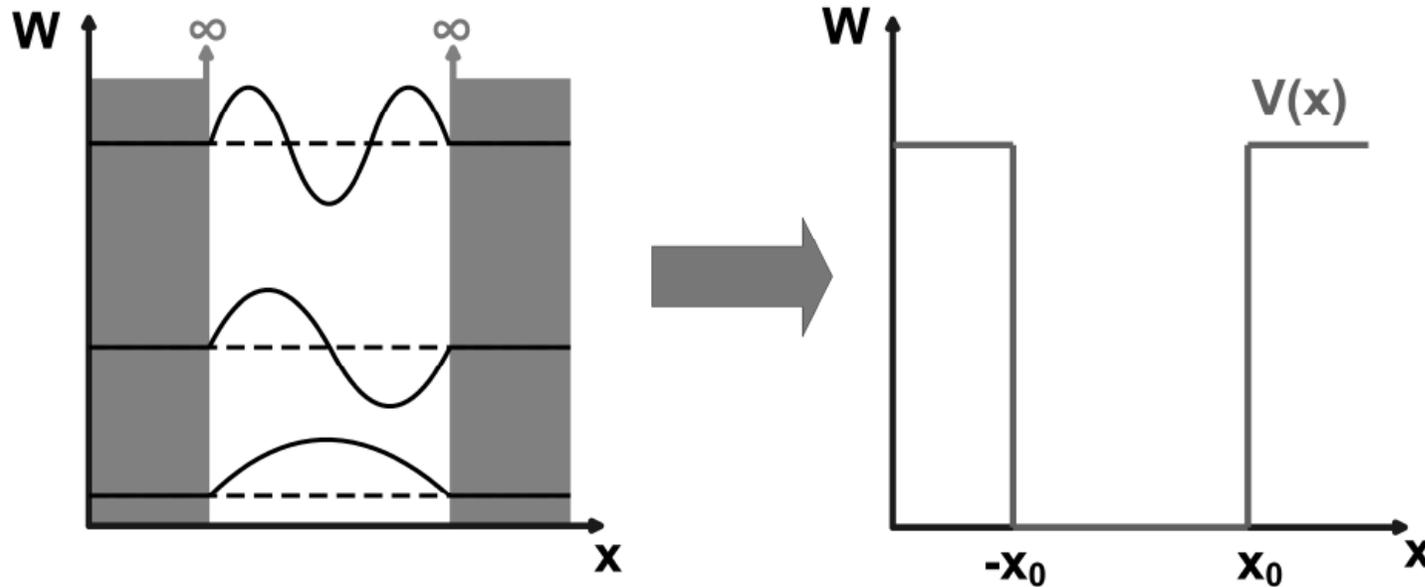


Formaler Zugang: Wie sieht die Wellenfunktion $\psi(x)$ an einer Sprungstelle x_0 aus ?

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 $x_0 - \delta$ bis $x_0 + \delta$: $-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(x_0 + \delta) - \psi'(x_0 - \delta)) + \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} V(x)\psi(x)dx = \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} W\psi(x)dx$

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 :

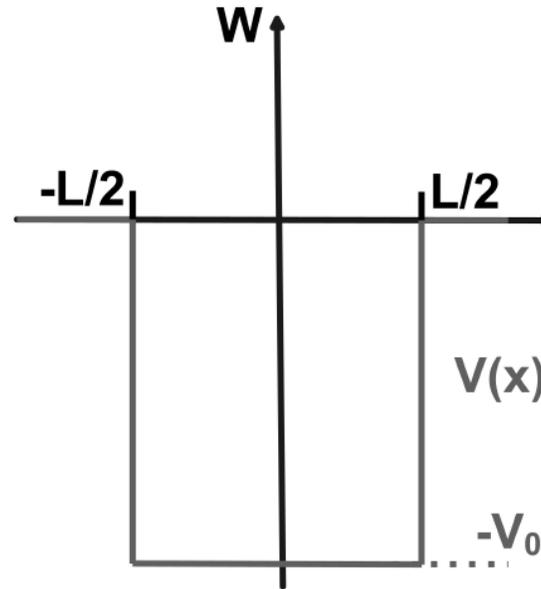
Integration der S-Glg. von $x_0 - \delta$ bis $x_0 + \delta$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(x_0 + \delta) - \psi'(x_0 - \delta)) + \underbrace{\int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} V(x) \psi(x) dx}_{\rightarrow 0 \text{ f\u00fcr } \delta \rightarrow 0 \text{ (falls } V(x) \text{ endlich)}} = \underbrace{\int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} W \psi(x) dx}_{\rightarrow 0 \text{ f\u00fcr } \delta \rightarrow 0}$$


ψ ist stetig differenzierbar falls ΔV endlich, sonst nur stetig

2.3.2: Der **endliche** Potentialtopf: Struktur der Lösungen

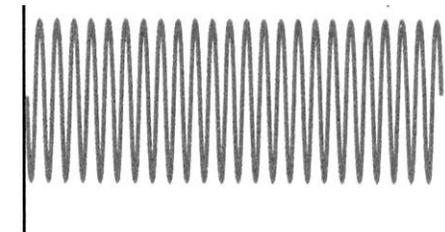
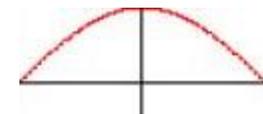
Die „übliche“ Darstellung des Potentialtopfes:



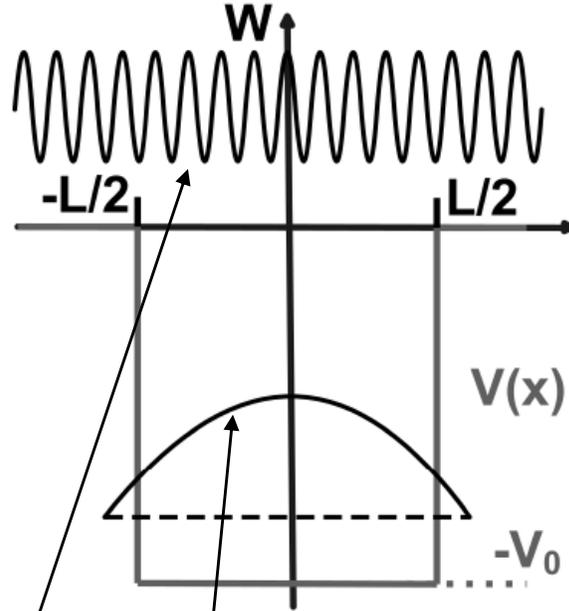
$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > \frac{L}{2} \\ -V_0 & |x| \leq \frac{L}{2} \end{cases}$$

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



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

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)

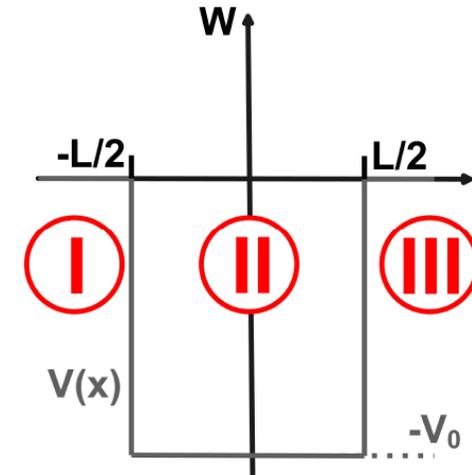
2.3.3: Der **endliche** Potentialtopf: Gebundene Lösungen

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



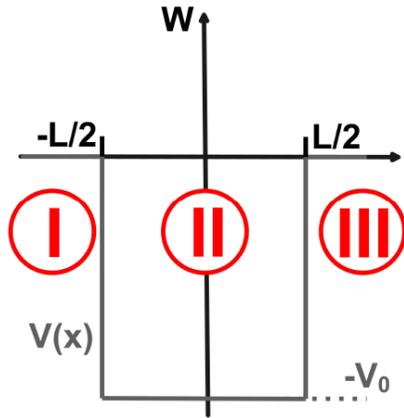
Der Ansatz, der (fast) immer funktioniert:

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

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:

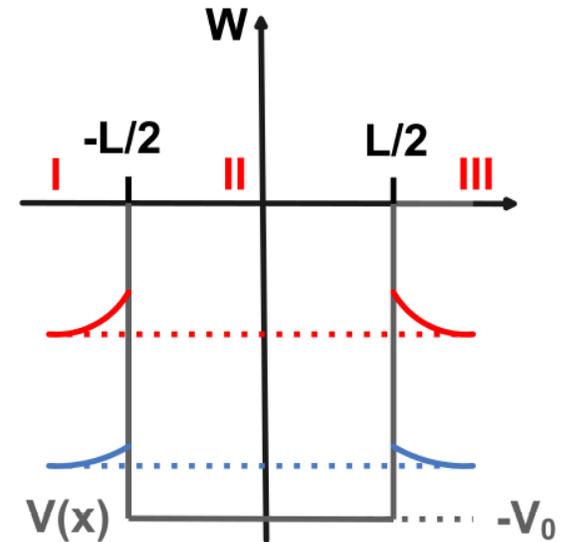
$$\psi(x) = A_{II}^+ \exp(jkx) + A_{II}^- \exp(-jkx)$$

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

Die Lösung lautet also:

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

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



Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen

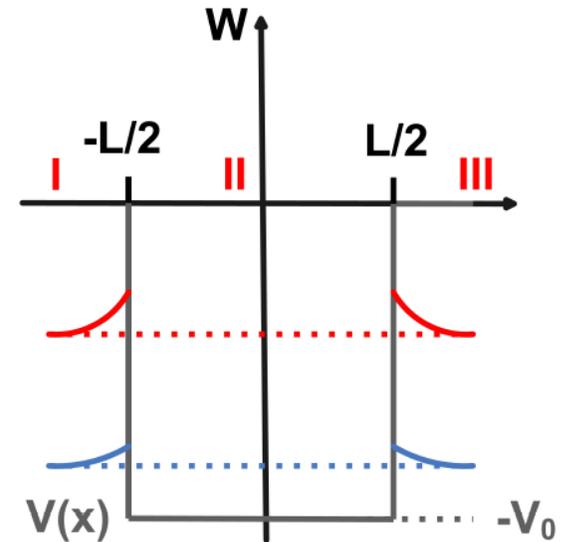
Die **diskrete** Natur der Lösungen ergibt sich jetzt aus den Stetigkeitsbedingungen:

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

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

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



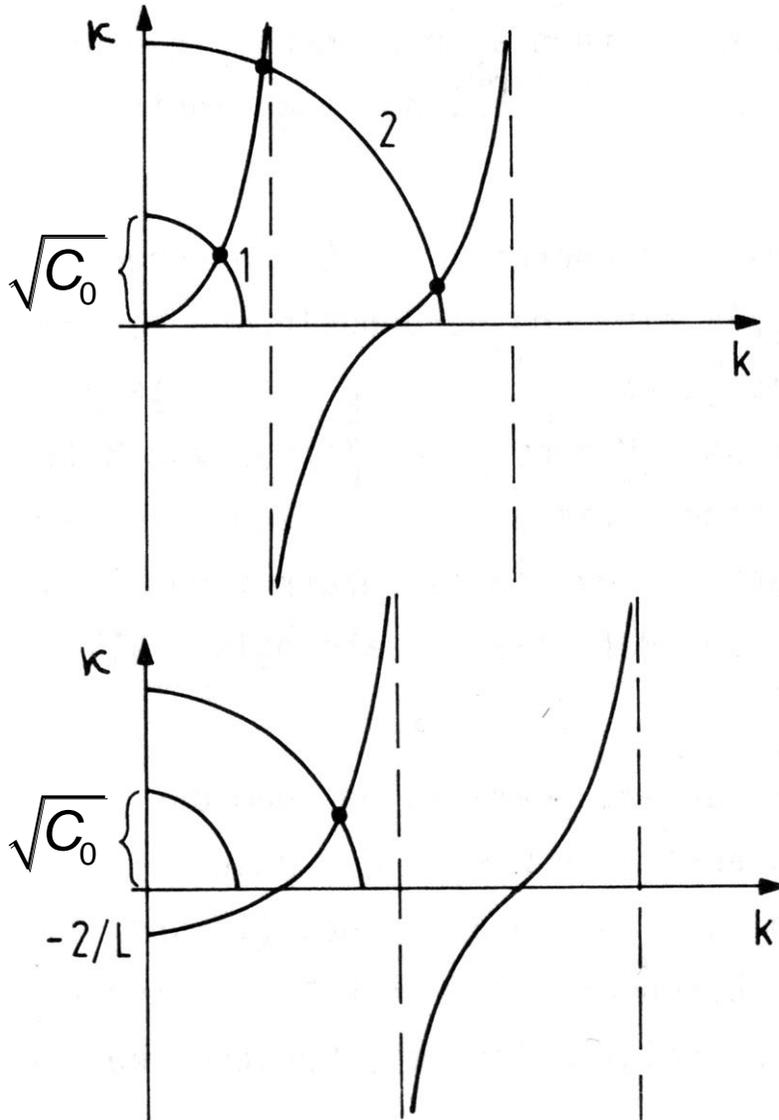
Bedingungen für k bzw. κ

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

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

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

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

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

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

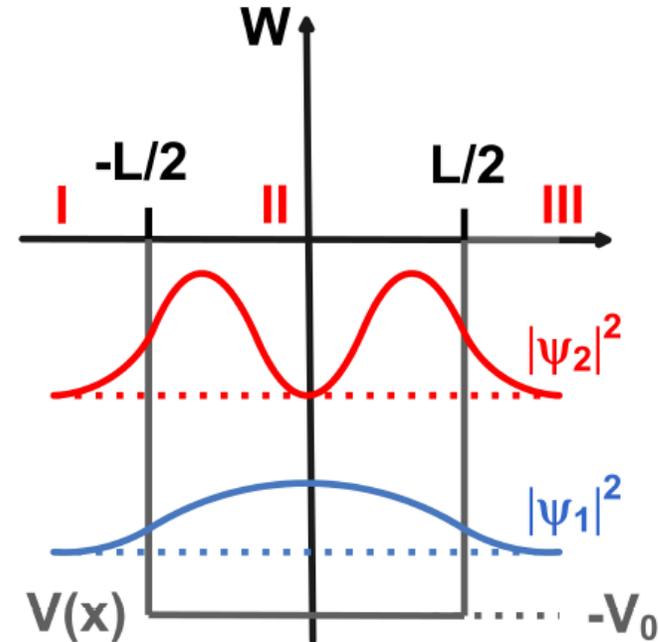
Der endliche Potentialtopf: Gebundene Lösungen

Symmetrische (gerade) Lösungen:

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

Antisymmetrische (ungerade) Lösungen:

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



-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 !!

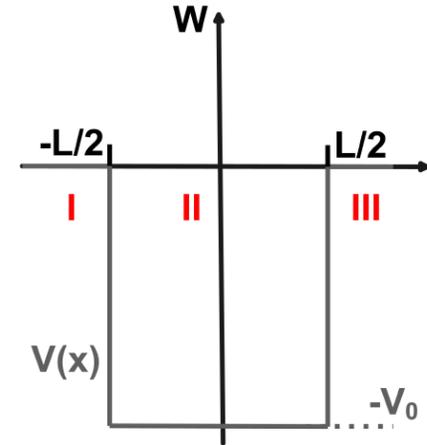
„Quantenmechanischer Tunneleffekt“

„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)



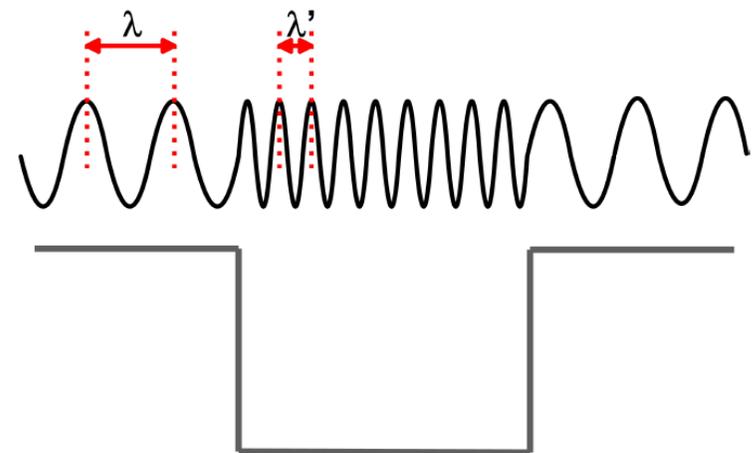
Quantenmechanik für $W > 0$:

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 des Topfes



Kontinuumslösungen beim Potentialtopf

Ansatz für die Lösung also: $\psi(x) = \begin{cases} A_I^+ \exp(jkx) + A_I^- \exp(-jkx) & : x \leq -L/2 \\ A_{II}^+ \exp(jk'x) + A_{II}^- \exp(-jk'x) & : -L/2 < x < L/2 \\ A_{III}^+ \exp(jkx) + A_{III}^- \exp(-jkx) & : x \geq L/2 \end{cases}$

... ergibt eine üble Rechnerei.

Typischere Situation:

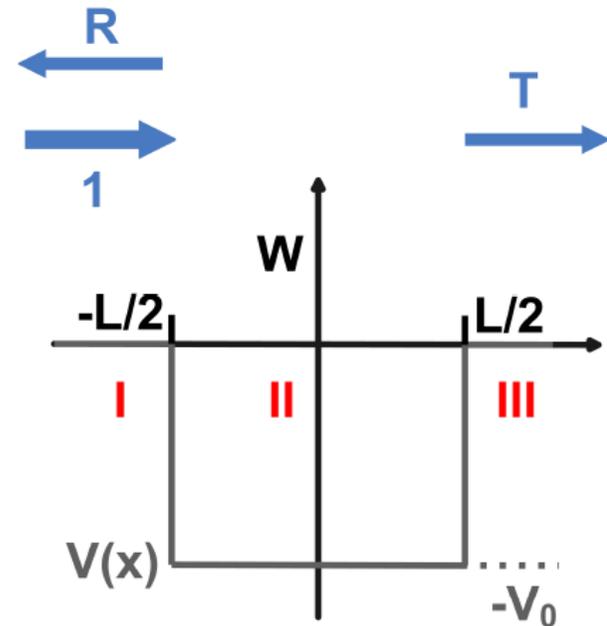
Elektron kommt nur einer Seite:
Ebene Welle läuft von links nach rechts

Die Rechnerei ist damit immer noch heftig.

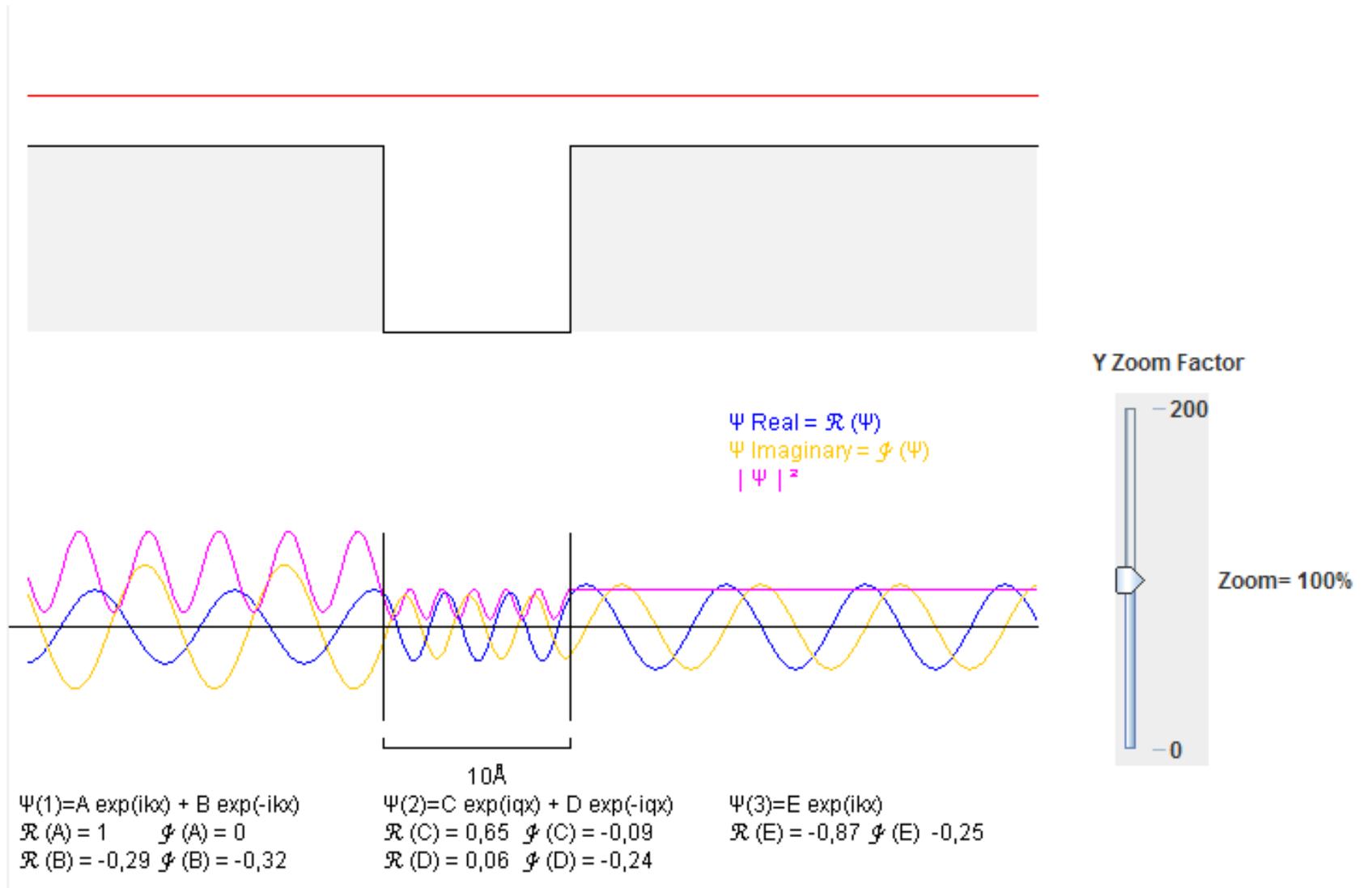
Was interessiert uns denn eigentlich ?

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

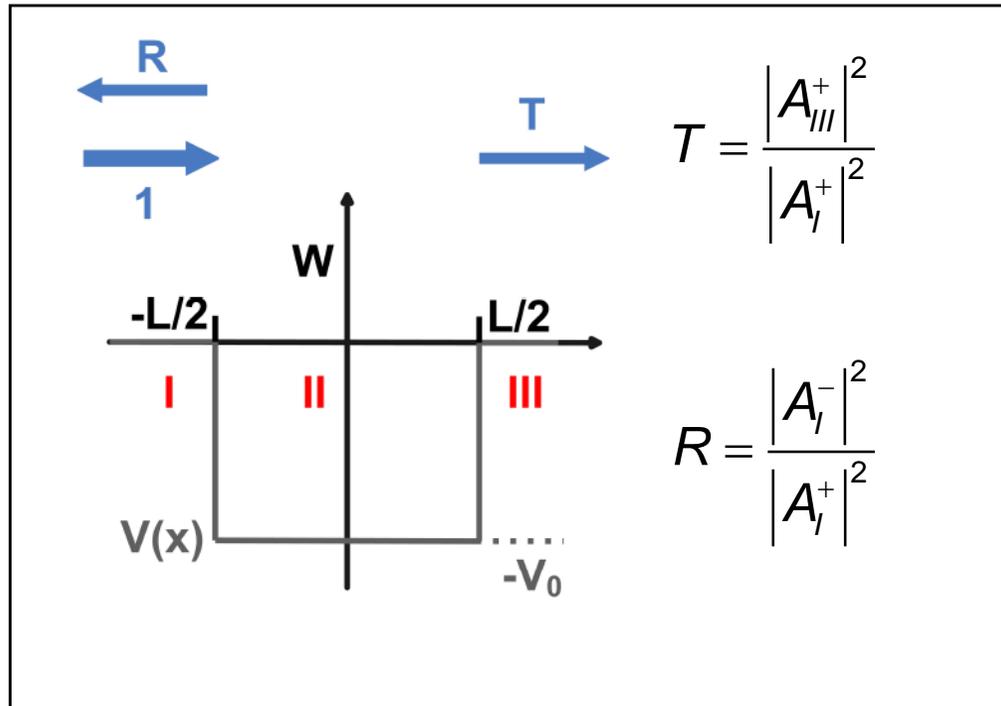
$$(R+T=1)$$



Kontinuumslösungen beim Potentialtopf

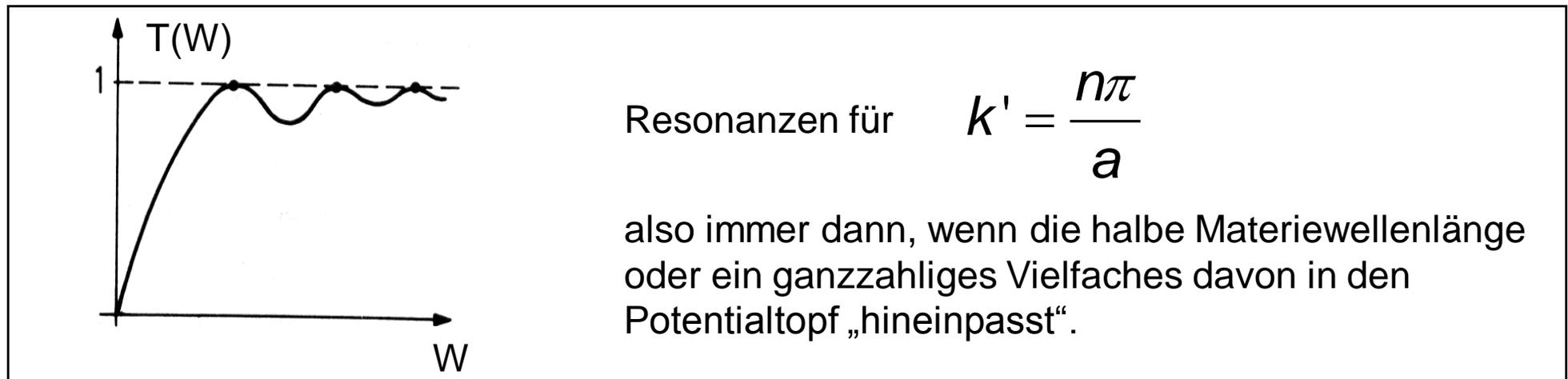


Potentialtopf: $W > 0$, Kontinuumslösungen



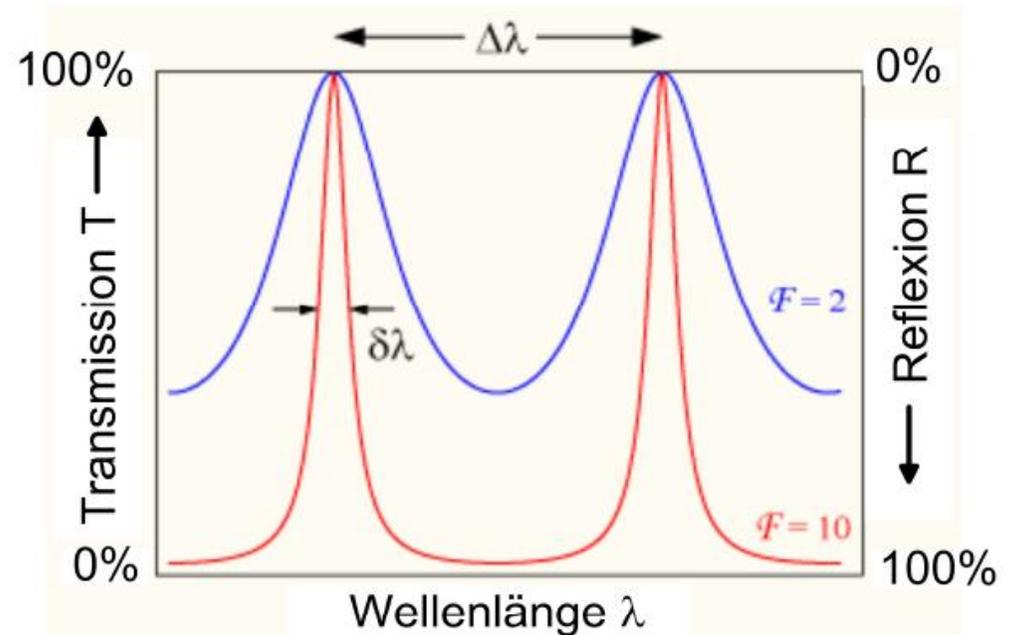
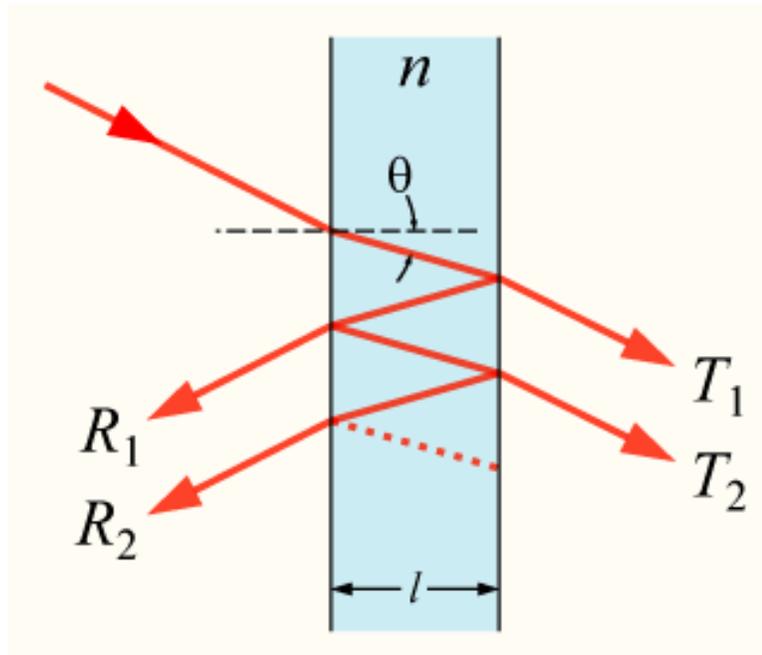
$$T(W > 0) = \left(1 + \frac{\sin^2\left(L\sqrt{\frac{2m(W + V_0)}{\hbar^2}}\right)}{4\frac{W}{V_0}\left(\frac{W}{V_0} + 1\right)} \right)^{-1}$$

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



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.

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

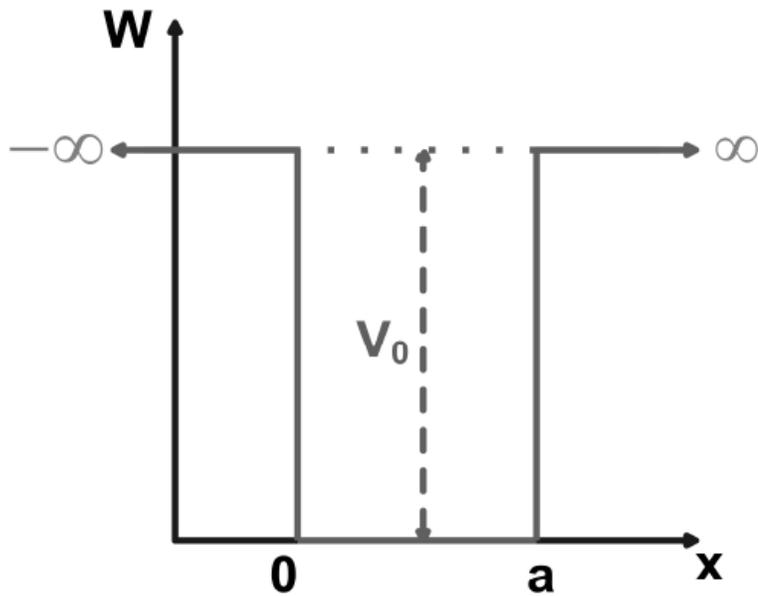
7. Dotierte Halbleiter

8. Halbleiter im Nichtgleichgewicht

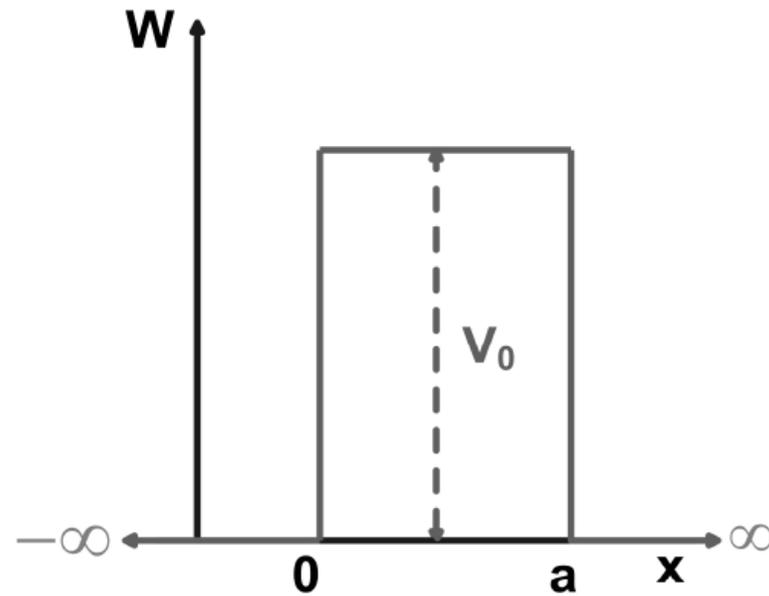
9. Der pn-Übergang

2.4: Potentialbarrieren

„Potentialtopf“



„Potentialbarriere“

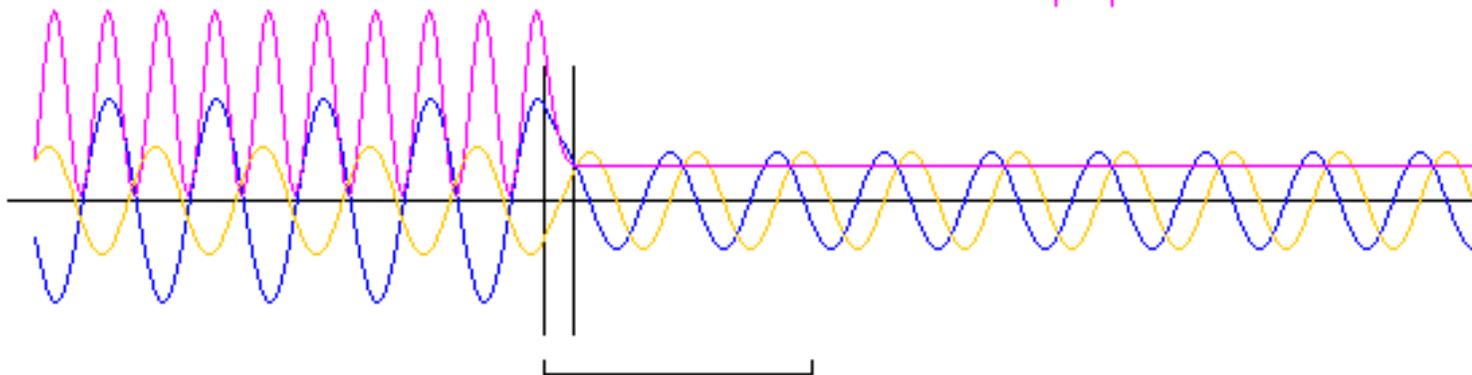




Ψ Real = $\Re(\Psi)$

Ψ Imaginary = $\Im(\Psi)$

$|\Psi|^2$



10Å

$$\Psi(1) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

$$\Re(A) = 1 \quad \Im(A) = 0$$

$$\Re(B) = 0,42 \quad \Im(B) = -0,55$$

$$\Psi(2) = C \exp(qx) + D \exp(-qx)$$

$$\Re(C) = -0,38 \quad \Im(C) = 0,88$$

$$\Re(D) = 1,79 \quad \Im(D) = -1,43$$

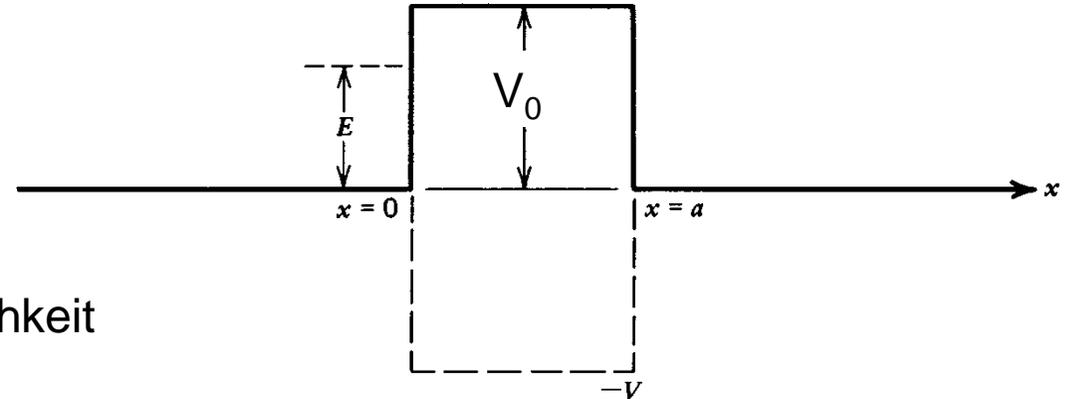
$$\Psi(3) = E \exp(ikx)$$

$$\Re(E) = 0,34 \quad \Im(E) = -0,64$$

Potentialbarriere

$W < V_0$: Tunneleffekt in Reinkultur

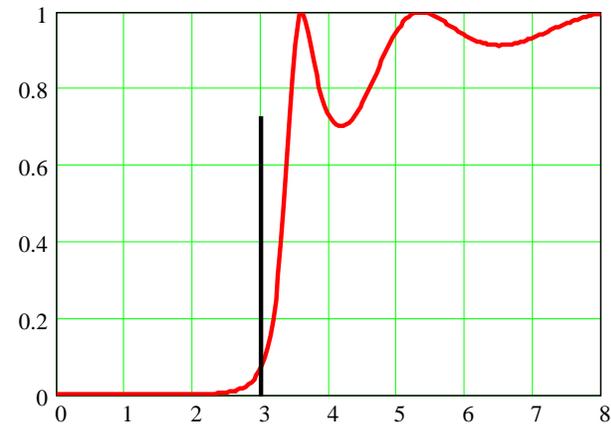
denn:



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

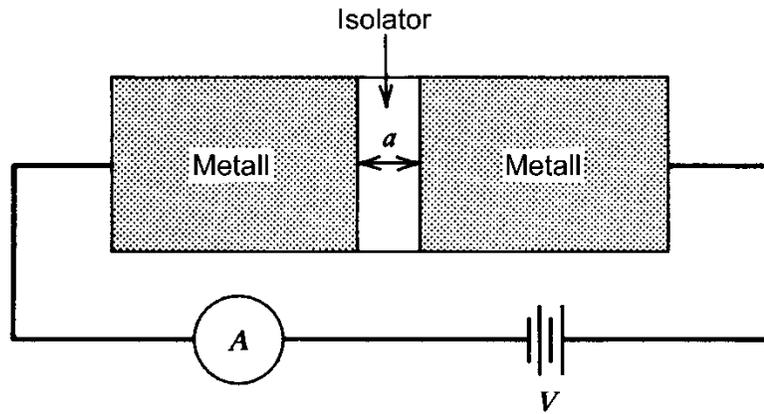
Quantenmechanisch „durchtunnelt“ es mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit die Barriere

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



E [eV] ($V_0 = 3\text{eV}$)

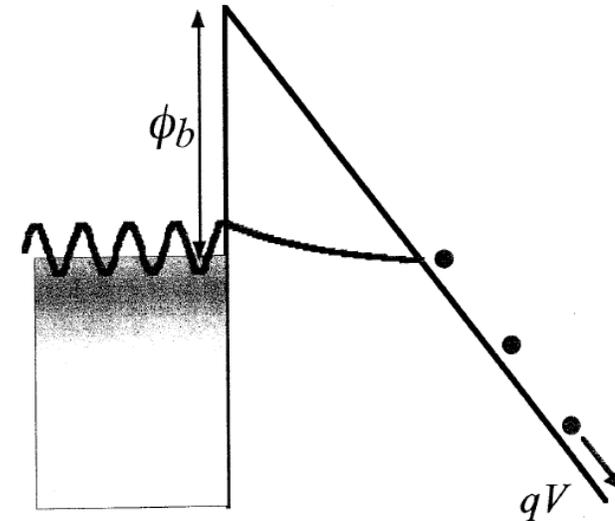
Anwendung von Potentialbarriere: Die Tunneldiode



Metall-Isolator-Tunneldiode

Tunneldiode in Mikrowellenschaltkreisen

Fowler-Nordheim Tunneling into an Insulator



Sehr starke Feldabhängigkeit,
hohe Nichtlinearität des Bauelementes

Anwendung von Potentialtopf und -barriere: Die resonante Tunneldiode

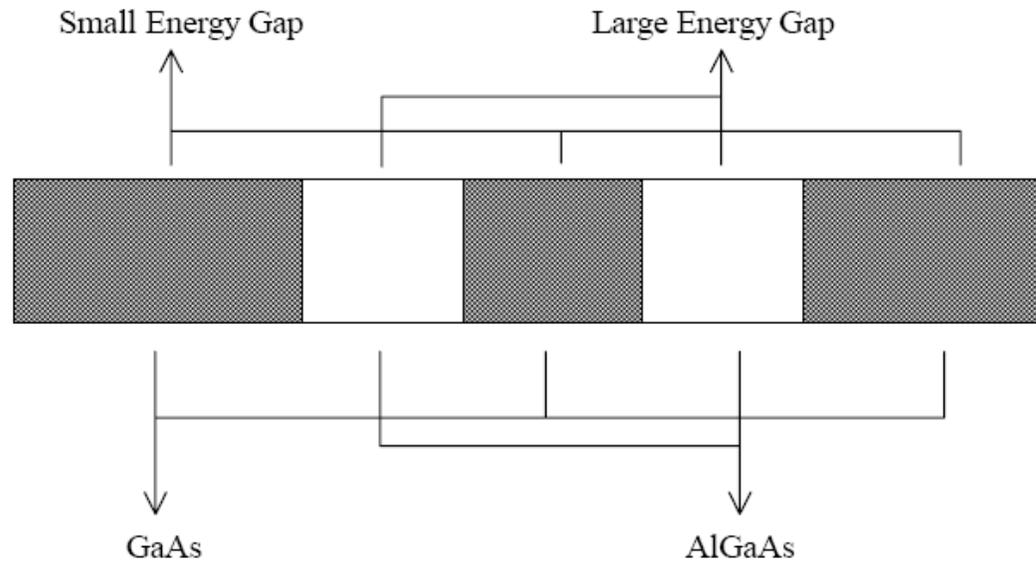


Figure 5 RTD Structure

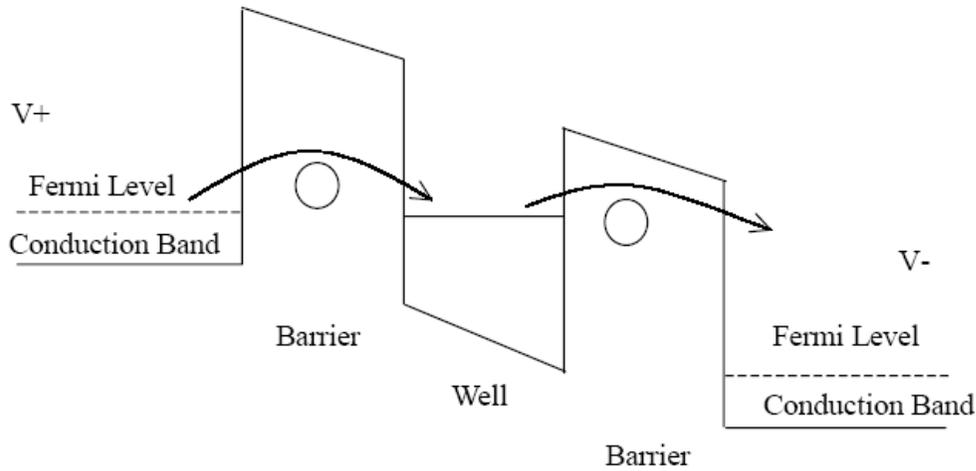


Figure 7 Energy band diagram of RTD with small bias voltage

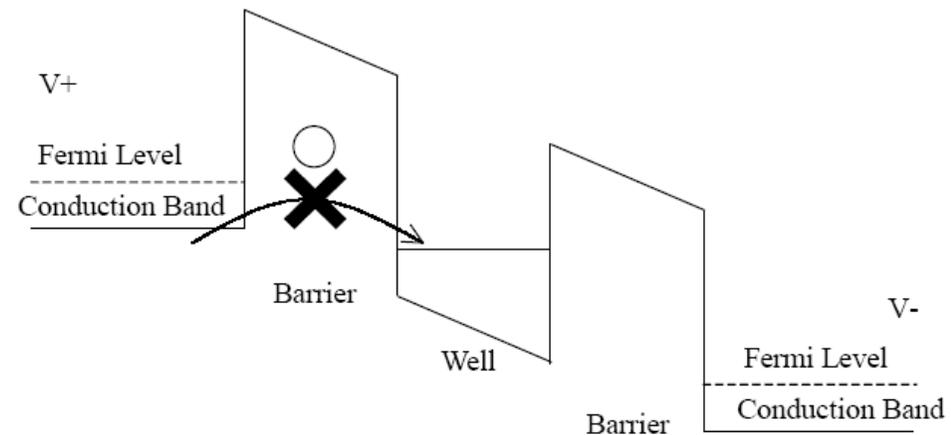
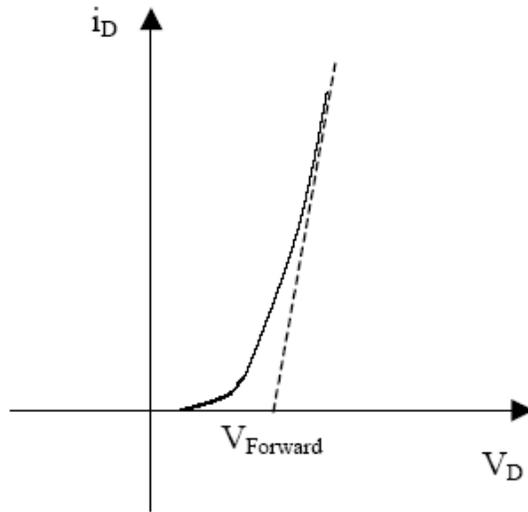


Figure 8 Energy band diagram of RTD with large bias voltage



(b) I-V Characteristic

statt „normaler“ Diodenkennlinie

-Bereich mit negativem differentiellen Widerstand

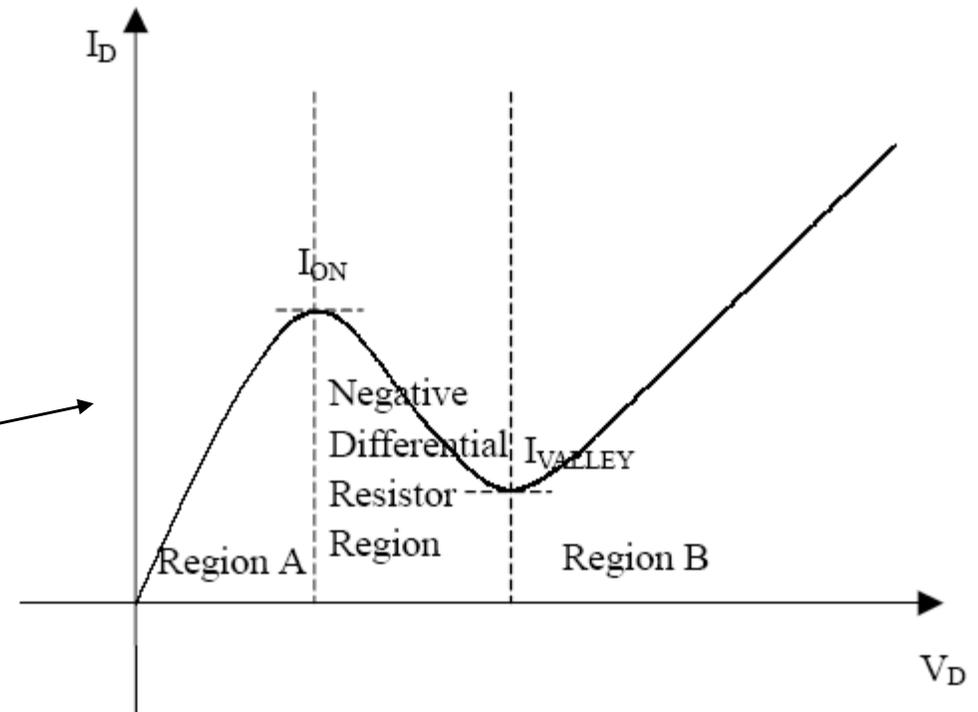


Figure 9 I-V characteristic of resonant tunneling diode

