

Übersicht über die Vorlesung

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 2015
3. Foliensatz
24.04.2015

1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion ist (im Prinzip) bekannt.

Wie werden nun messbare Größen vorhergesagt/berechnet ??

Wir kennen schon die

Aufenthaltswahrscheinlichkeit: $\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t)$

Allgemeiner:

Der Erwartungswert bei einer Ortsmessung ist: $\langle \mathbf{x} \rangle (t) = \int d\mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}, t)$

Er ist der Mittelwert, der sich für die Messgröße Ort ergibt, wenn eine große Anzahl von Messungen an gleichartigen quantenmechanischen Systemen gemessen wird.

Aber: Bei einer einzelnen Messung wird immer nur ein bestimmter Wert gemessen.

Damit haben wir den Ort des Teilchens quantenmechanisch im Griff !

... aber was ist mit allen anderen physikalischen Größen (Energie, Impuls etc.) ??

Quantenmechanische Erwartungswerte

3. Postulat der Quantenmechanik:

Physikalische Meßgrößen werden durch Operatoren beschrieben. Dem Teilchenort wird der Operator

x zugeordnet, der $\psi(x)$ mit x multipliziert.

Dem Impuls wird der Operator $p = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ zugeordnet.

Bei oftmaliger Messung einer Größe $F(x,p)$ an einem quantenmechanischen System ergibt sich als Mittelwert:

$$\langle F \rangle = \frac{\int dx \psi^*(x,t) \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) \psi(x,t)}{\int dx \psi^*(x,t) \psi(x,t)}$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: Bsp. Ebene Welle

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

Ort: ...hatten wir im
Prinzip schon.

$$\langle x \rangle = \frac{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) x A \exp(j(kx - \omega_k t))}{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) A \exp(j(kx - \omega_k t))} = \frac{\int dx x}{\int dx} = 0$$

Erwartungswert für den Impuls:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) \left(-j\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) A \exp(j(kx - \omega_k t))}{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) A \exp(j(kx - \omega_k t))} = \\ &= \frac{-j\hbar j k \int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) A \exp(j(kx - \omega_k t))}{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) A \exp(j(kx - \omega_k t))} = \hbar k \end{aligned}$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: Bsp. Ebene Welle

Kinetische Energie ? Klassisch: $W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

Wir benutzen die „Quantisierungsvorschrift“ $p = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

und schreiben den klassischen Ausdruck als Operator:

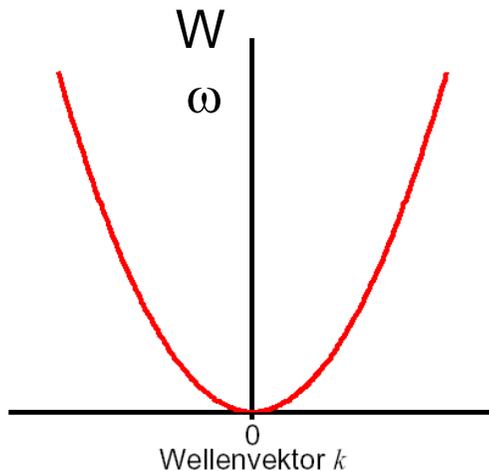
Klassisch: $W_{\text{kin}} = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

→ quantenmechanisch: $\hat{W}_{\text{kin}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Quantenmechanische Erwartungswerte: Bsp. Ebene Welle

$$\langle \hat{W}_{kin} \rangle = \frac{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) A \exp(j(kx - \omega_k t))}{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) A \exp(j(kx - \omega_k t))} =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} jk \frac{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) A \exp(j(kx - \omega_k t))}{\int dx A \exp(-j(kx - \omega_k t)) A \exp(j(kx - \omega_k t))} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



„Dispersionsrelation“

Vergleich mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ zeigt, dass

$$\langle \hat{W}_{kin} \rangle \equiv W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

Dispersionsrelation ist auch der Zusammenhang zwischen Energie und Wellenzahl (Impuls). Dies wird uns in leicht modifizierter Form als Bandstruktur eines Halbleiters wieder begegnen.

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**

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

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

Ist das Potential zeitunabhängig, so kann die Wellenfunktion als Produkt von einem Phasenfaktor und einem zeitunabhängigen Term angesetzt werden:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \varphi(\mathbf{x}) e^{-j\omega t}$$

Einsetzen:

$$\begin{aligned} j\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= j\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(\mathbf{x}) \exp(-j\omega t)) = j\hbar \varphi(\mathbf{x}) \exp(-j\omega t) (-j\omega) \\ &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) \right\} \varphi(\mathbf{x}) \exp(-j\omega t) = \exp(-j\omega t) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) \right\} \varphi(\mathbf{x}) \\ \hbar\omega\varphi(\mathbf{x}) &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) \right\} \varphi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) \right\} \varphi(\mathbf{x}) = \hbar \omega \varphi(\mathbf{x})$$

W

nehmen wir wieder ψ statt φ :

$$\left\{ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2}}_{W_{kin}} + \underbrace{V(\mathbf{x})}_{W_{pot}} \right\} \psi(\mathbf{x}) = W \psi(\mathbf{x})$$

W_{ges}

„Zeitunabhängige“ (stationäre)
Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} \psi(\mathbf{x}) = W \psi(\mathbf{x})$$

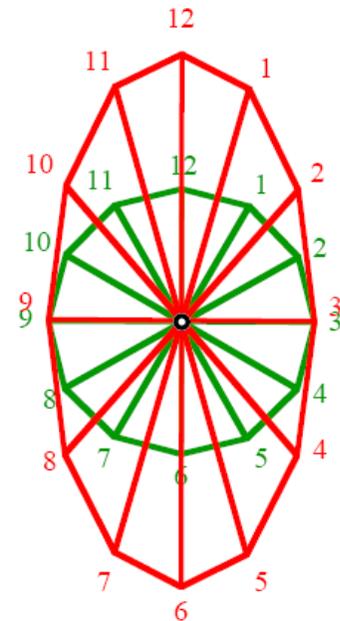
\hat{H} ist der Hamiltonoperator (Hamiltonian)

Die zeitunabhängige S-Glg. als Eigenwertproblem

Operator angewendet auf die Funktion ergibt wieder die Funktion selber, multipliziert mit einer Konstanten

...analog zum Eigenwertproblem der linearen Algebra !

$$\hat{A}\vec{e} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \vec{e} = E_{\lambda} \vec{e}$$



Gesucht sind also im allgemeinen **Eigenfunktionen** und **Eigenwerte** zum Hamiltonoperator.

Die weitreichenden Analogien sind noch offenkundiger in der Matrizenmechanik, der Heisenberg'schen Formulierung der Quantenmechanik.

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 im Kristall**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Ladungsträgerdynamik im Halbleiter**
9. **Der pn-Übergang**

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf

Diese Situation ist näherungsweise in vielen modernen Halbleiterbauelementen gegeben:

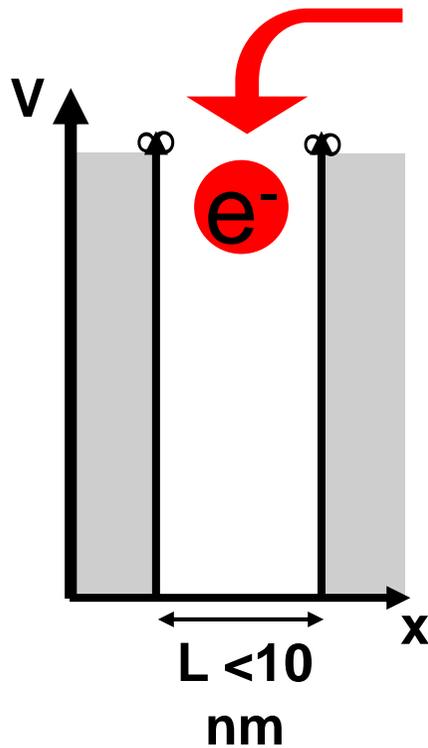


Abb.: Schema eines Elektrons im Potentialtopf

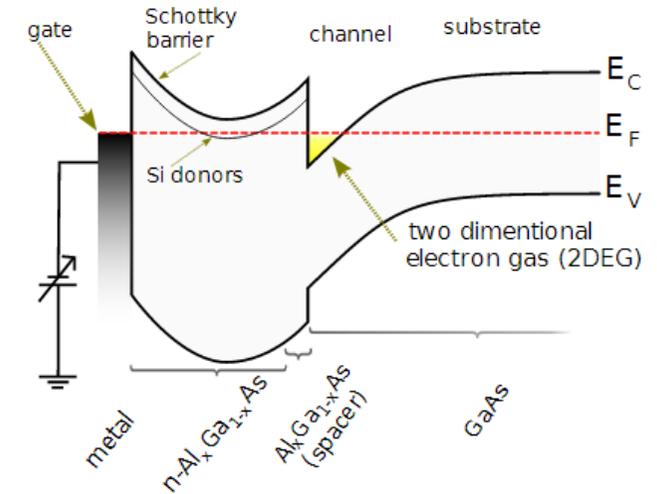
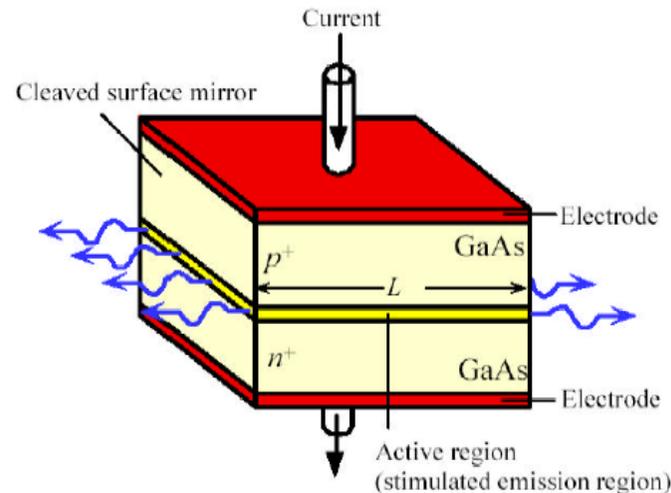
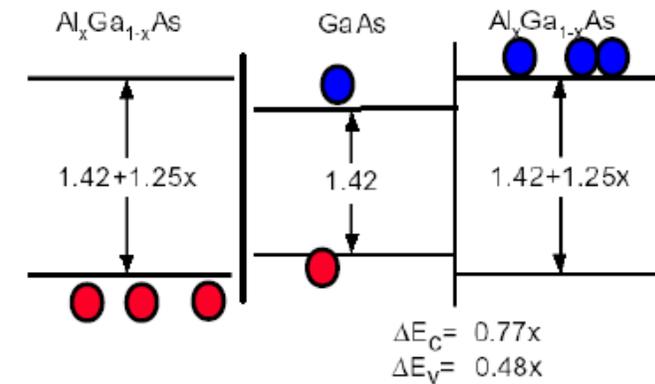


Abb.: Banddiagramm eines HEMT (high electron mobility transistors) (oben)

Abb.: Schema einer Halbleiterlaserdiode (links, links oben)

Leucht- und Laserdioden: Eine Vielzahl von Potentialtöpfen



100mW Laserdiode 405nm (Blu-Ray)

Wellenlänge: 405nm

Power: max. ~150mW (CW)

Laser-Pickup: PHR-803t

Empfohlen wird ein Diodentreiber mit 100mA.

Das ergibt ca. 60-100mW Ausgangsleistung.

Mehr ist möglich, verkürzt aber die Lebensdauer der Diode.

Passt perfekt in das 5mW Lasermodul.

Dioden sind Neu. Ausgebaut aus Laser-Pickup.

Produkt ist sofort verfügbar

35,00 €

Preis zzgl. [Versand](#)

Quelle: www.insaneware.de

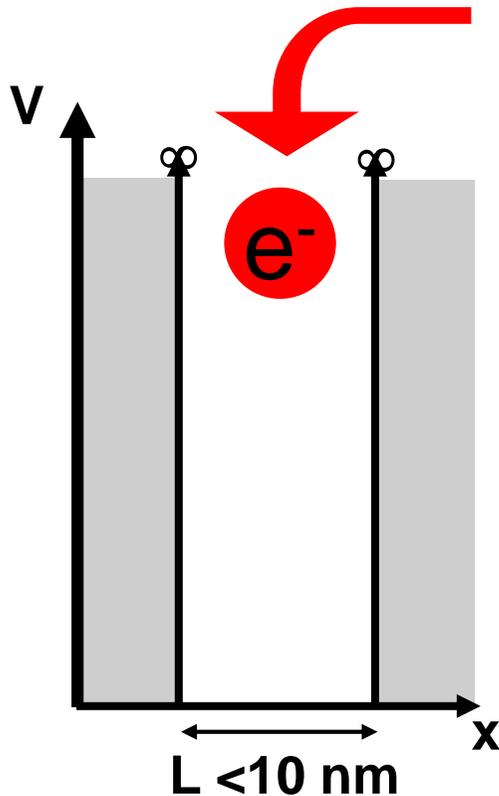
100 nm	GaN :Mg
300 nm	$\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}:\text{Mg}$
100 nm	GaN :Mg
10 nm	$\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}:\text{Mg}$
2.5 nm	GaN
2.5 nm	$\left. \begin{array}{c} \text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N} \\ \text{GaN} \end{array} \right\} x n \quad (n = 1-5)$
5 nm	
5 nm	GaN
100 nm	GaN :Si
425 nm	$\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}:\text{Si}$
230 nm	GaN :Si
580 nm	GaN :Si
2100 nm	GaN
30 nm	GaN Nucleation Layer
	Sapphire

Fig. 2: Typical epitaxial layer sequence of an (AlGaIn)N-based QW diode laser.

Abb. 2: Typische epitaktische Schichtenfolge eines (AlGaIn)N-Quantenfilm-Diodenlasers.

Quelle: FHG-IAF, Freiburg

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



klassisch:

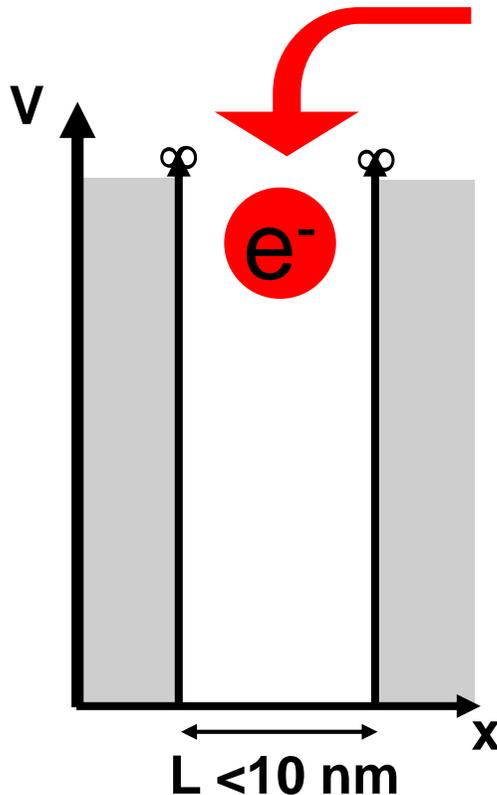
Elektron „liegt“ entweder auf dem Boden
(kinetische Energie = 0)

oder

-bewegt sich wie ein Ping-Pong-Ball
hin und her

-stösst jeweils gegen die Wand und kehrt
Impuls und Geschwindigkeit um

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



Quantenmechanisch:

Suche Eigenfunktionen und
Eigenwerte zur zeitunabhängigen
Schrödinger-Gleichung:

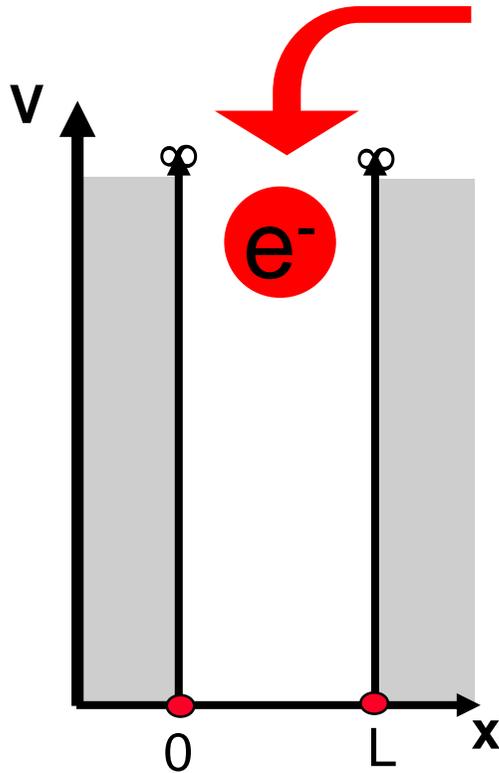
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x) = W \psi(x)$$

mit

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : 0 < x < L \\ \infty & : \text{sonst} \end{cases}$$

...vollkommen analog zum elektromagnetischen Hohlraumresonator !

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



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

Qualitatives zur Lösung:

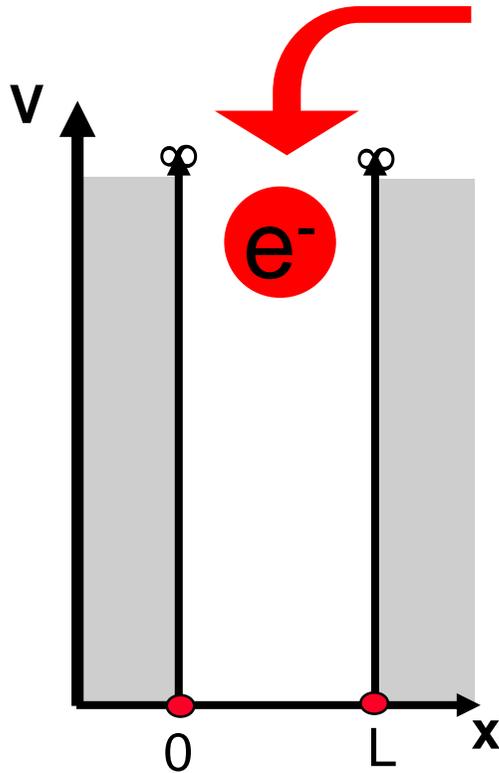
Unendlich hoher Potentialwall

↓
 $\psi(x)$ verschwindet ausserhalb des Topfes
 („sonst gäbe es divergierende Energiedichten“)

↓
 mit Stetigkeit von $\psi(x)$ folgt dann $\psi(0)=\psi(L)=0$

(Die Stetigkeitsbedingung fällt hier noch ein wenig vom Himmel und wird später noch einmal genauer diskutiert!)

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



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

Qualitatives zur Lösung:

Unendlich hoher Potentialwall

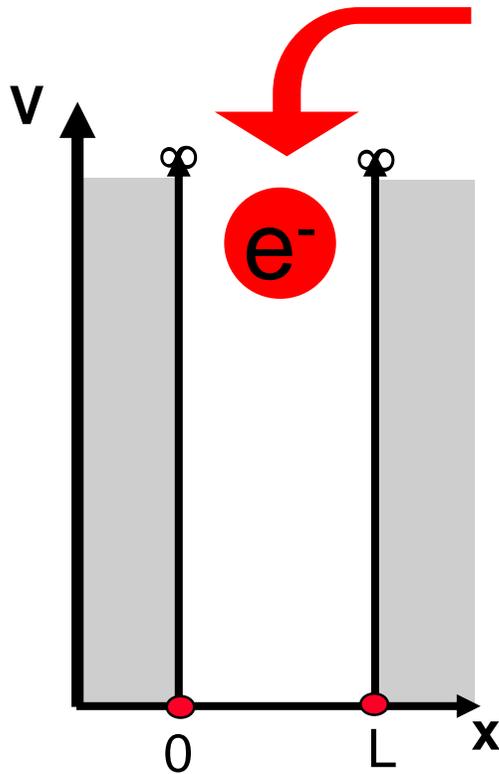
↓
 $\psi(x)$ verschwindet ausserhalb des Topfes
 (sonst gäbe es divergierende Energiedichten)

↓
 mit Stetigkeit von $\psi(x)$ folgt dann $\psi(0)=\psi(L)=0$

Zwischen 0 und L muss gelten:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = W\psi(x)$$

2.2.1 Lösung durch scharfes Hingucken



$$\psi(0)=\psi(L)=0 ; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = W\psi(x)$$

hmm ... eine Funktion, die zweimal abgeleitet sich selbst multipliziert mit einem Faktor ergibt ??

... wie wäre es mit einer Sinusfunktion ?

$$\psi(x) = A \sin(kx)$$

$$\text{Einsetzen: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 A \sin(kx) = W A \sin(kx)$$

$$\text{O.K., S-Glg. ist gelöst für } W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\psi(0)=\psi(L)=0: \quad \sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \text{ wobei } n \text{ ganz} \quad \text{bzw.} \quad k = \frac{n\pi}{L} \text{ und } k^2 = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

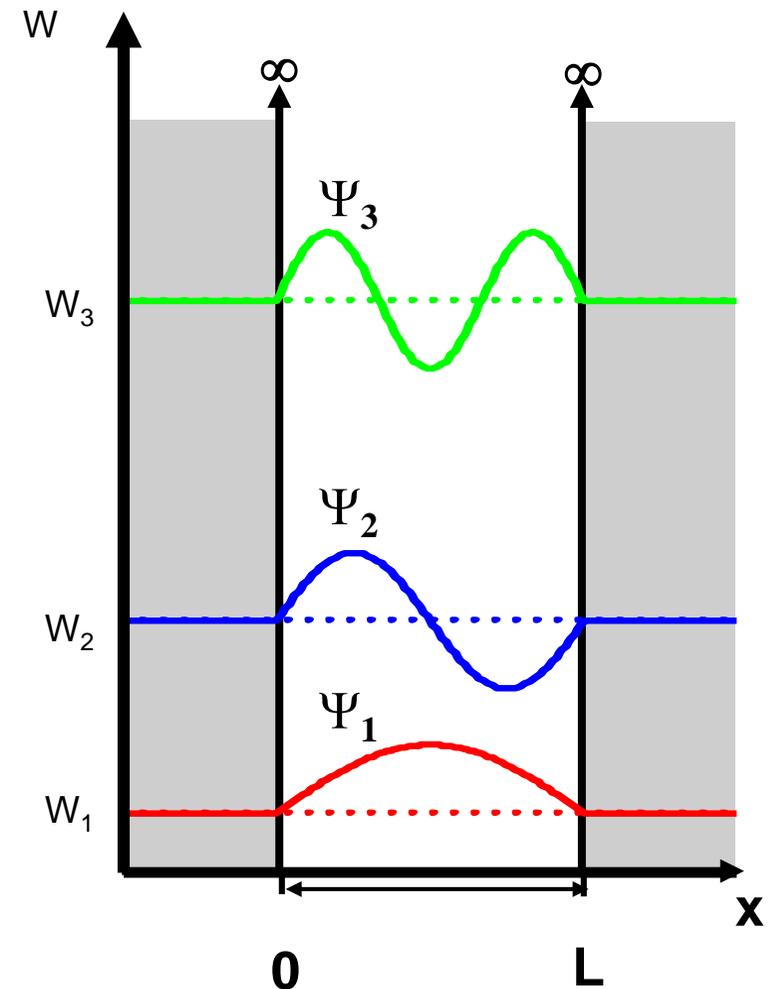
Der unendlich hohe Potentialtopf: Eigenschaften der Lösungen

Lösungen haben die Form: $\psi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$; $W_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ wobei $n=1,2,\dots$

Eigenschaften der Lösungen:

-es gibt nur bestimmte diskrete Energien („Quantelung“)

-es gibt eine Minimalenergie $E \neq 0$!! („Nullpunktsenergie“)

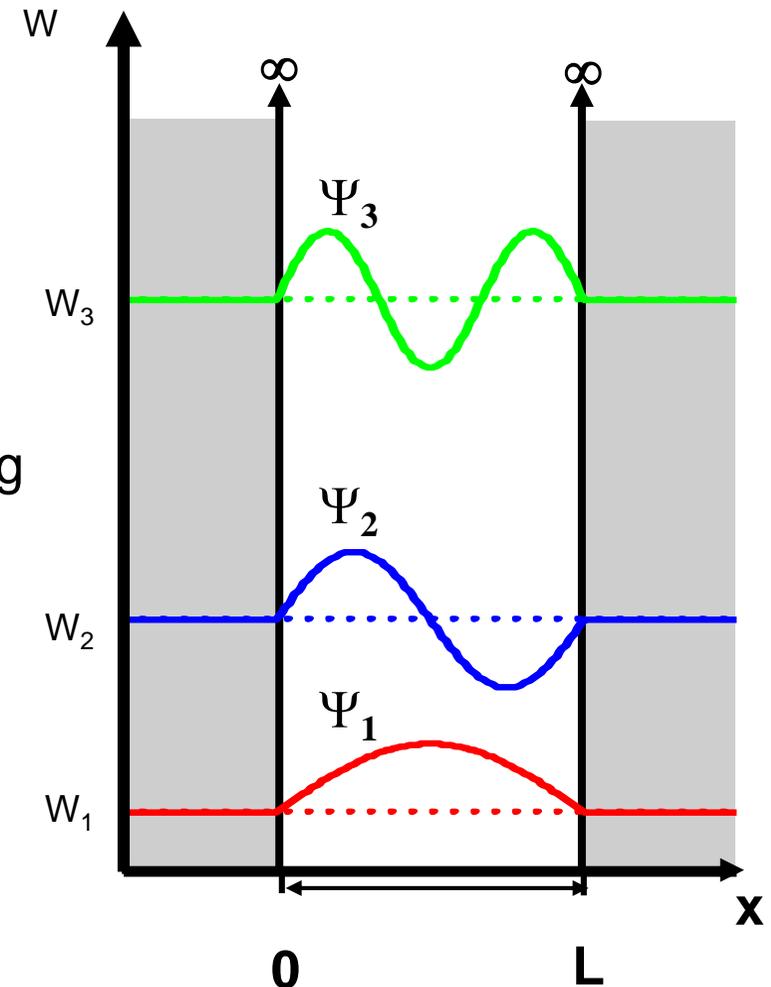


Der unendlich hohe Potentialtopf: Eigenschaften der Lösungen

Lösungen haben die Form: $\psi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$; $W_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ wobei $n=1,2,\dots$

Eigenschaften der Lösungen:

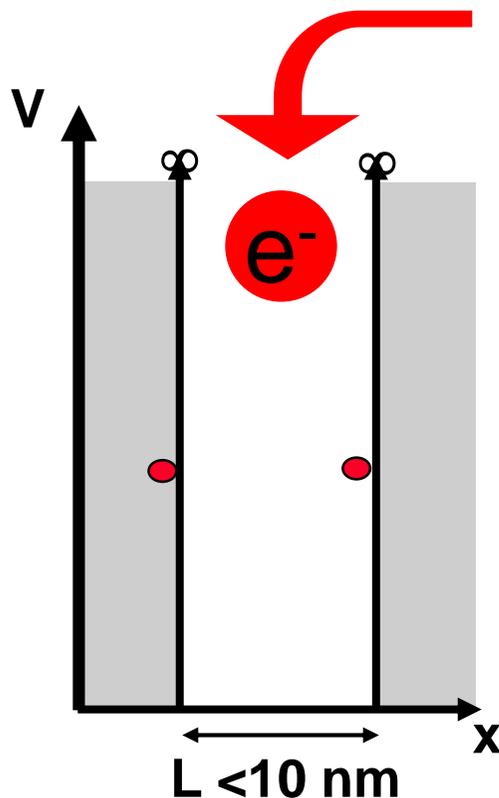
- das Elektron ist über den ganzen Topf „verschmiert“, aber nicht gleichmässig
- die niedrigste Lösung hat keinen Nulldurchgang (Knoten)
- je höher die Energie, desto mehr Knoten
- abwechselnd symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen



Der unendlich hohe Potentialtopf: Der konventionelle Weg

Wir wissen: Im Inneren des Topfes ($0 < x < L$) erwarten wir ebene Wellen (freies Teilchen, entweder nach links oder nach rechts laufend):

$$\psi^+(x, t) = A^+ \exp(j(kx - \omega_k t)); \quad \psi^-(x, t) = A^- \exp(j(-kx - \omega_{-k} t))$$



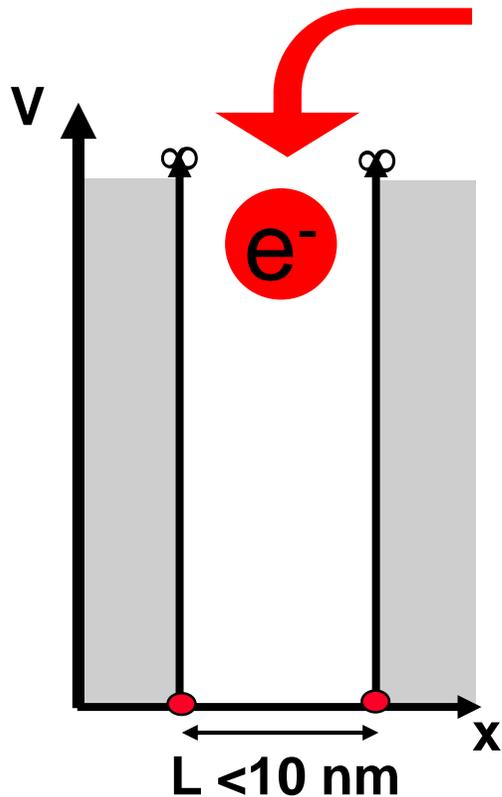
↓ zeitunabhängig

$$\psi^+(x) = A^+ \exp(jkx); \quad \psi^-(x) = A^- \exp(-jkx)$$

Ansatz zur Lösung der zeitunabhängigen S.-Glg.:

$$\psi(x) = A^+ \exp(jkx) + A^- \exp(-jkx)$$

Der unendlich hohe Potentialtopf: Der konventionelle Weg



Es muss aber auch erfüllt werden: $\psi(0)=\psi(L)=0$

$$\psi(0) = A^+ \exp(jk0) + A^- \exp(-jk0) = A^+ + A^- = 0$$

$$\psi(L) = A^+ \exp(jkL) + A^- \exp(-jkL) = 0$$

→ Lineares Gleichungssystem für A^+ und A^-

In Matrixform:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \exp(jkL) & \exp(-jkL) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^+ \\ A^- \end{pmatrix} = 0$$

Nichttriviale Lösung, falls Determinante verschwindet:

$$\det(\dots) = \exp(-jkL) - \exp(jkL) = -2j \sin(kL) = 0 \quad \Rightarrow \quad k_n = n \frac{\pi}{L}; \quad n \text{ ganze Zahl}$$

Der unendlich hohe Potentialtopf: Der konventionelle Weg

Für die Wellenfunktionen ergibt sich dann:

$$\psi_n(x) = A^+ \exp(jk_n x) - A^+ \exp(-jk_n x) = 2A^+ j \sin(k_n x)$$

o.B.d.A.: wähle $B_n = 2A^+ j$

Eigenfunktionen haben die Form: $\psi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ wobei $n=1,2,\dots$

Eigenwerte:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x) = W_n \psi_n(x)$$

Einsetzen:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Diskrete Energieeigenwerte:
$$W_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$