

Lichttechnisches Institut

Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

M. Sc. Nico Bolse

M. Sc. Manuel Koppitz

Engesserstraße 13

76131 Karlsruhe

Festkörperelektronik

Musterlösung zum 1. Tutorium

Besprechung:

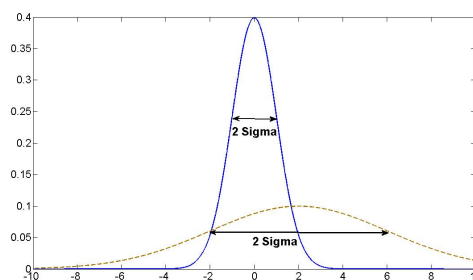
Tutorien 04. bis 08. Mai 2015

1. Dispersion I

- a) Skizzieren Sie die GAUSS-Funktion

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^2}\right) \quad (1)$$

für $\mu = 0$, $\sigma = 1$ sowie für $\mu = 2$, $\sigma = 4$. Welche Bedeutung haben die beiden Parameter?



Die Gauß-Funktion ist für $\mu = 0$ und $\sigma = 1$ (blauer Graph, durchgezogene Linie) und $\mu = 2$ und $\sigma = 4$ (brauner Graph, gestrichelte Linie) skizziert. Die σ -Umgebungen um den Mittelwert μ sind für beide Graphen eingezeichnet. Der Parameter σ bestimmt die Breite der Glockenfunktion. Bei dieser Definition der Standardabweichung erhält man die volle Halbwertsbreite (FWHM) übrigens über $FWHM = 2\sqrt{\ln 2}\sigma$.

- b) Was bedeutet der Begriff 'Dispersion' in Zusammenhang mit Wellenpaketen?

Als Dispersion bezeichnet man allgemein die Frequenzabhängigkeit der Phasengeschwindigkeit $v_{ph} = \omega/k$ einer bestimmten Welle. Zeigt eine Welle in einer bestimmten Situation Dispersion, so verändert sich die Breite eines Wellenpakets bestehend aus Wellen dieser Art mit der Zeit. Auch dieses Phänomen bezeichnet man häufig als Dispersion, obwohl es streng genommen eine Folge der Dispersion im oben genannten Sinn ist. Zeigen Wellen in einem bestimmten Medium keine Dispersion, so tritt der Effekt des Zerfließens eines Wellenpakets nicht auf. In diesem Fall ist die Gruppengeschwindigkeit gleich der Phasengeschwindigkeit.

- c) Was bezeichnet man als Dispersionsrelation? Wie sehen die Dispersionsrelationen für ein freies Elektron sowie für ein Photon im Vakuum aus?

Als Dispersionsrelation wird meistens die Abhängigkeit der Kreisfrequenz ω von der Wellenzahl k (oder dem Wellenvektor $\vec{k}$) bezeichnet, also $\omega(k)$. Da auch die Proportionalität $W = \hbar\omega$ gilt, kann man die Dispersionsrelation immer auch als Abhängigkeit der Energie W von der Wellenzahl darstellen. Für jede Welle in jedem Medium lässt sich eine solche Relation aufstellen und aus ihrer genauen Form folgen viele Eigenschaften dieser Welle. Die Dispersionsrelation für eine Lichtwelle/ein Photon kennen wir bereits aus Felder und Wellen als

$$\omega(k) = ck \quad (2)$$

mit der Lichtgeschwindigkeit c . Diese beschreibt also auch die Phasengeschwindigkeit $v_{ph} = \omega/k = c$ und ist für das Photon im Vakuum frequenzunabhängig.

Für das freie Elektron im Vakuum erhielten wir dagegen

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (3)$$

Die Phasengeschwindigkeit ergibt sich nun zu $v_{ph} = \frac{\hbar k}{2m}$. Man erkennt, dass sich Elektronen mit großer Wellenzahl, d.h. mit kurzer Wellenlänge, schneller fortbewegen, Elektronen mit kleiner Wellenzahl, d.h. großem λ , langsamer. Auch für Wasserwellen, Erdbebenwellen und so weiter lassen sich entsprechende Dispersionsrelationen angeben.

- d) Berechnen Sie die Gruppengeschwindigkeit v_G für das freie quantenmechanische Elektron und ein Vakuum-Photon.

Die Gruppengeschwindigkeit v_G lässt sich berechnen über

$$v_G = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}. \quad (4)$$

Somit erhalten wir für ein Photon $v_G = c = v_{ph}$ und für das freie Elektron $v_G = \frac{\hbar k}{m} = 2v_{ph}$. Die Gruppengeschwindigkeit ist beim freien Elektron also größer als die Phasengeschwindigkeit.

2. Fourier-Transformation der GAUSS-Funktion

Die folgenden Gleichungen definieren eine Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned} g(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-jkx} dx & g(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-j\omega t} dt \\ f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{jkx} dk & f(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega) e^{j\omega t} d\omega \end{aligned}$$

- a) Zeigen Sie, daß die Fourier-Transformation einer GAUSS-Funktion $f(x) = \exp(-ax^2)$ mit $a > 0$ wieder eine GAUSS-Funktion ergibt (Hinweis: Quadratische Ergänzung im Exponenten).

$$\begin{aligned}
g(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} e^{-jkx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2 - jkx} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x^2 + \frac{jk}{a}x)} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a\left((x + \frac{jk}{2a})^2 - \left(\frac{jk}{2a}\right)^2\right)} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{e^{-a(x + \frac{jk}{2a})^2}}_{\text{Gaußpuls}} \underbrace{e^{\frac{(jk)^2}{4a}}}_{\text{const.}} dx
\end{aligned} \tag{5}$$

Der konstante Term kann aus dem Integral gezogen werden. Der verbleibende Term stellt einen nach links verschobenen Gaußpuls dar. Das Integral über die gesamte x -Achse entspricht dem eines nicht verschobenen Gaußpulses. Formal kann man die Substitution $u = x + jk/2a$ vornehmen, wobei diese mit dem Residuensatz zu begründen ist. Das resultierende Integral ergibt sich nach Bronstein zu $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-au^2) du = \sqrt{\pi/a}$. Wir erhalten also:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{(jk)^2}{4a}} = \sqrt{\frac{1}{2a}} e^{-\frac{k^2}{4a}} \tag{6}$$

- b) In der Ultra-Kurzzeitspektroskopie kommen gepulste Laser mit einer Pulslänge von wenigen Femtosekunden zum Einsatz. Schätzen Sie die spektrale Breite $\Delta\nu$ eines GAUSS-Pulses $f(t) \propto \exp(-\frac{t^2}{2(\Delta t)^2})$ mit einer halben Breite von $\Delta t = 10$ fs ab. Vergleichen Sie hierzu die Fourier-Transformierte von $f(t)$ mit einem GAUSS-Puls im Frequenzraum $g(\omega) \propto \exp(-\frac{\omega^2}{2(\Delta\omega)^2})$.

$$\begin{aligned}
g(\omega) &\propto \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-j\omega t} dt \\
g(\omega) &\propto \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{t^2}{2(\Delta t)^2}} e^{-j\omega t} dt
\end{aligned} \tag{7}$$

Wofür wir mit dem Ergebnis von Aufgabenteil a) erhalten:

$$g(\omega) \propto e^{-\frac{1}{2}(\Delta t)^2 \omega^2} \stackrel{!}{=} e^{-\frac{\omega^2}{2(\Delta\omega)^2}} \tag{8}$$

Aus dem Vergleich der beiden Gauß-Pulse folgt unmittelbar:

$$(\Delta t)^2 = \frac{1}{(\Delta\omega)^2} \implies \Delta t \Delta\omega = 1 \tag{9}$$

oder mit $\omega = 2\pi\nu$:

$$\begin{aligned}
\Delta t \Delta\nu &= \frac{1}{2\pi} \\
\Rightarrow \Delta\nu &= \frac{1}{2\pi \Delta t} = 1,6 \cdot 10^{13} \text{ Hz} = 16 \text{ THz}
\end{aligned} \tag{10}$$

Beachten Sie bitte, dass die obige Gleichung für die Unschärfe von Energie (bzw. Frequenz) und Zeit in diesem Fall aus der vorgegebenen Definition des Gauß-Pulses im Frequenzraum entstanden ist. Die allgemeine Ableitung für Energie und Zeit ist etwas schwieriger (wenn auch durchaus durchführbar), da es keinen 'Zeitoperator' in der Standardquantentheorie gibt. Führt man die Herleitung sauber durch, ergibt sich eine Unschärferelation analog zur Orts-Impuls-Unschärfe wie sie in der Vorlesung eingeführt wurde: $\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$.

Eine etwas allgemeinere Bemerkung noch zur Größe der Unschärfe - die Werte, die Sie dort finden (z.B. $\frac{\hbar}{2}$, in anderen Quellen vielleicht auch einfach nur $\hbar$), hängen von der genauen Definition (sowohl physikalisch als auch mathematisch) der Standardabweichung ab. Lassen Sie sich also nicht irritieren, wenn Sie in der Literatur oder sogar innerhalb dieser Vorlesungsreihe manchmal andere Vorfaktoren in den Unschärfeungleichungen finden. Entscheidend ist üblicherweise die Größenordnung, nicht das exakte mathematische Ergebnis.

3. Dispersion II

- a) Als Dispersionsparameter bezeichnet man den Ausdruck $\beta = 1/2 \cdot \partial^2 \omega / \partial k^2$. Berechnen Sie β für die beiden Teilchen aus Aufgabe 1d).

Der Dispersionsparameter für das Photon ist gleich Null, für das freie Elektron folgt $\beta = \hbar/2m$.

- b) Entwickeln Sie $\omega(k)$ um eine feste Wellenzahl k_0 . Brechen Sie die Entwicklung nach dem quadratischen Term ab und benutzen Sie die Ausdrücke aus den Aufgaben 1d) und 3a), um die Ableitungen zu ersetzen.

Die geforderte Taylor-Reihe ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \omega(k_0) + \left. \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \omega(k)}{\partial k^2} \right|_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \mathcal{O}(k^3) \\ &\approx \omega(k_0) + v_G(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2 \end{aligned} \quad (11)$$

- c) Betrachten Sie folgendes GAUSSsche Wellenpaket:

$$\tilde{\psi}(k, t) = C \exp(-\alpha(k - k_0)^2) \exp(-j\omega(k)t) \quad (12)$$

Hier sind C und α positive Konstanten. Setzen Sie die Entwicklung bis zum quadratischen Glied aus der letzten Aufgabe für $\omega(k)$ ein. Nun leiten Sie den Ausdruck für die Wellenfunktion im Ortsraum $\psi(x, t)$ durch Fourier-Transformation des Wellenpakets $\tilde{\psi}(k, t)$ her.

Wir haben die Fourier-Transformation definiert zu:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k, t) \exp(jkx) dk \quad (13)$$

Nun setzen wir das in der Aufgabenstellung definierte $\tilde{\psi}(k, t)$ sowie die Entwicklung für $\omega(k)$ in diese Formel ein und erhalten:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha(k - k_0)^2) \\ &\quad \cdot \exp(-j(\omega(k_0) + v_G(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2)t) \exp(jkx) dk \\ &\stackrel{\tilde{k}=k-k_0}{=} \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha\tilde{k}^2) \\ &\quad \cdot \exp(-j(\omega(k_0) + v_G\tilde{k} + \beta\tilde{k}^2)t) \cdot \exp(j(\tilde{k} + k_0)x) d\tilde{k}\end{aligned}\quad (14)$$

Hier haben wir $\tilde{k} = k - k_0$ substituiert. Umsortieren der Terme und nachfolgendes Herausziehen der nicht von der Wellenzahl abhängigen Teile ergibt:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \exp(j(k_0x - \omega(k_0)t)) \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp(\tilde{k}^2(-\alpha - j\beta t) + j\tilde{k}(x - v_Gt)) d\tilde{k} \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \exp(j(k_0x - \omega(k_0)t)) \\ &\quad \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-(\alpha + j\beta t) \left(\tilde{k}^2 + j\tilde{k} \frac{x - v_Gt}{-(\alpha + j\beta t)}\right)\right) d\tilde{k}\end{aligned}\quad (15)$$

Diesem Integral kann man, wie in Aufgabe 2a), mit einer quadratischen Ergänzung beikommen. Diese führt erneut auf ein Integral vom Typ $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-au^2) du = \sqrt{\pi/a}$, wobei $a = \alpha + j\beta t$ ist. Abschließend erhalten wir:

$$\psi(x, t) = \frac{C}{\sqrt{2}} \frac{\exp(j(k_0x - \omega(k_0)t))}{\sqrt{\alpha + j\beta t}} \exp\left(-\frac{(x - v_Gt)^2}{4(\alpha + j\beta t)}\right) \quad (16)$$

- d) Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ρ für das Wellenpaket. Falls Sie die vorige Aufgabe nicht lösen konnten, verwenden Sie:

$$\psi(x, t) = \frac{C}{\sqrt{2}} \frac{\exp(j(k_0x - \omega(k_0)t))}{\sqrt{\alpha + j\beta t}} \exp\left(-\frac{(x - v_Gt)^2}{4(\alpha + j\beta t)}\right) \quad (17)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit berechnet man über $\rho(x, t) = \psi^*(x, t)\psi(x, t)$. damit wird der komplex-exponentielle Anteil zu Eins und der gesamte Ausdruck zu:

$$\rho(x, t) = \frac{|C|^2}{2} \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} \exp\left(-\frac{\alpha(x - v_Gt)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}\right) \quad (18)$$

- e) Was kann man über die Form des Wellenpakets aus Aufgabe 3d) sagen? Geben Sie den Ausdruck für die Breite des Wellenpakets an. Welchen fundamentalen Unterschied können Sie zwischen dem Wellenpaket des freien Elektrons und des Photons erkennen?

Bei dem Ausdruck aus Aufgabenteil 3d) handelt es sich um ein Gaußsches Wellenpaket im Ortsraum. Man identifiziert den Term $v_G t$ als Mittelwert. Der Mittelwert ist folglich zeitabhängig mit der Proportionalitätskonstante v_G . Der Schwerpunkt des Wellenpakets bewegt sich also zeitlich mit der Geschwindigkeit v_G . Das entspricht genau der Aussage, die wir über die Gruppengeschwindigkeit gemacht haben.

Die Breite des Pakets zeigt ebenfalls eine Zeitabhängigkeit und wird zu $\Delta x = \sqrt{(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}/\alpha$. Das bedeutet, dass auch die Breite des Pakets sich in der Zeit ändert. Konkret wird in unserem Fall die Breite immer größer, da der Zeit-Term durch die quadratische Abhängigkeit immer positiv ist. Somit zerfließt unser Wellenpaket mit der Zeit.

Die bisherigen Ausführungen enthalten noch keine Aussage über die Art der betrachteten Welle. Mit den Ergebnissen aus Aufgabenteil 3a) können wir einige Schlussfolgerungen für das Photon und das freie Elektron machen. Im ersten Fall war $\beta = 0$, die Breite des Pakets wird für das Photon somit zeitunabhängig. Für das Elektron erhielten wir $\beta = \hbar/2m$. Wellenpakete, die freie Elektronen beschreiben, zerfließen somit immer.

- f) Entnehmen Sie dem Ausdruck aus Aufgabe 3c) die Breite der Wellenfunktion im k -Raum. Setzen Sie diesen und die Breite im Ortsraum aus dem letzten Aufgabenteil in die Unschärferelation ein. Zeigen Sie, dass diese für ein freies Elektron für alle Zeiten erfüllt ist.

Wie in der letzten Aufgabe erwähnt, beträgt die Breite des Wellenpakets im Ortsraum $\Delta x = \sqrt{(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}/\alpha$. Aus dem Betragsquadrat der Funktion $\tilde{\psi}(k, t)$ aus Aufgabenteil 3c) erhält man für die Breite im k -Raum $\Delta k = 1/(2\sqrt{\alpha})$. Mit der Beziehung $p = \hbar k$ folgt für die Breite der Impuls-Verteilung $\Delta k = \hbar/2\sqrt{\alpha}$. Somit wird das Produkt aus Orts- und Impulsunschärfe:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2\sqrt{\alpha}} \sqrt{\frac{(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}{\alpha}} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha^2}} \quad (19)$$

Im letzten Ausdruck ist der Wurzel-Term für alle Zeiten größer als 1, woraus $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ folgt, was ja in der Unschärferelation verlangt wird.