

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 2. Tutorium

18.-22. Mai 2015

1. Streuung an Elektronen

- a) Sie wollen mittels eines Streuexperiments nachprüfen, ob sich Elektronen wirklich wie im Bohrschen Atommodell vorausgesagt auf Kreisbahnen um den Kern bewegen. Um eine vernünftige Auflösung zu erhalten, müssen Sie Strahlung verwenden, deren Wellenlänge höchstens $1/20$ der aufzulösenden Strukturgröße beträgt. Strahlung welcher Frequenz benötigen Sie mindestens, wenn Sie ein Wasserstoffatom im Grundzustand vermessen wollen? Der Bohrsche Radius beträgt $a_0 = 5,3 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}$.

Der Bohrsche Radius für den Grundzustand ist $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$. So brauchen wir Strahlung mit einer Wellenlänge von höchstens $\lambda = 2,645 \cdot 10^{-12} \text{ m}$. Für die Frequenz ergibt sich über $c = \lambda\nu$:

$$\nu = c/\lambda = 1,13 \cdot 10^{20} \text{ Hz} \quad (1)$$

- b) Berechnen Sie die Energie eines Photons der Mess-Strahlung aus dem letzten Aufgabenteil. Vergleichen Sie die erhaltene Energie mit der Ionisierungsenergie von Wasserstoff und erläutern Sie, was das für das im letzten Aufgabenteil vorgestellte Experiment bedeutet.

Die Energie der Photonen der Mess-Strahlung angegeben in eV berechnet sich zu:

$$W = h\nu = 468,7 \text{ keV} \quad (2)$$

Wenn man bedenkt, dass die Ionisierungsenergie für Wasserstoff bei 13,6 eV liegt, wird das Dilemma offensichtlich. Die Streuung des Photons am Elektron während des Messprozesses führt unweigerlich zu einer deutlichen Veränderung seines Zustands (in unserem Fall wahrscheinlich der Ionisation). Damit kann keine weitere Ortsmessung an dem Wasserstoffatom im Grundzustand vorgenommen werden, da der Zustand durch die Messung verändert wird. Dies zeigt deutlich, dass die klassische Annahme einer idealisiert wechselwirkungsfreien Messung auf quantenmechanischen Energieskalen unzulässig ist.

- c) Wie muss man vorgehen, um trotzdem Ergebnisse mit der vorgestellten Messung zu erhalten?

Will man trotzdem Aussagen über den Aufenthaltsort eines Elektrons im Wasserstoffatom machen, so muss man für die oben beschriebene Messung für eine große Anzahl von gleichartigen Atomen durchführen. Da glücklicherweise alle Wasserstoffatome gleich sind, ist solch eine Ensemble-Messung bei sorgfältiger Durchführung auch mit guter Genauigkeit möglich. Man erhält pro Atom somit einen Messwert, danach muss man am nächsten Atom weitermessen. Mit einer großen Zahl an Messwerten lässt sich dann eine statistische Aussage über den Aufenthaltsort des Elektrons um den Kern machen. Bei sorgfältiger Messung werden Sie feststellen, dass für den Abstand des Elektrons vom Kern der Mittelwert der Aufenthaltswahrscheinlichkeit beim Bohrschen Radius liegt. (Auf einer Kreisbahn bewegt sich das Elektron allerdings nicht. Um dies zu zeigen, müssen Sie weitere Experimente durchführen, da hier nur der Ort betrachtet wurde.)

2. Quantenmechanisches Messen beim unendlichen Potentialtopf

In einem unendlich hohen Potentialtopf der Breite a (Potential $V(x) = 0$ zwischen $x = 0$ und $x = a$ ($a > 0$) und $V(x) = \infty$ sonst) befindet sich ein Elektron im ersten angeregten Zustand.

- a) Leiten Sie den Ausdruck für die möglichen Werte der Energie der Elektronen im Topf her. Welche Energie wird man an dem System messen?

Im Topf machen wir den Ansatz:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (3)$$

Hier gilt $k = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$. Da es sich um einen unendlich hohen Topf handelt, muss die Wellenfunktion an den Rändern verschwinden, um der Stetigkeitsbedingung zu genügen. So folgt:

$$\psi(0) = B = 0 \quad (4)$$

Des weiteren erhält man:

$$\psi(a) = A \sin(ka) + B \cos(ka) \stackrel{\text{mit Gl. 4}}{=} A \sin(ka) = 0 \quad (5)$$

Das kann nur gelten, wenn $A = 0$ oder $ka = n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$. Die erste Bedingung führt auf die triviale Lösung $A = 0$ und $B = 0$, wir betrachten daher den zweiten Fall. Mit $k = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$ kann man schreiben

$$n\pi/a = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}} \rightarrow W = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2. \quad (6)$$

Der erste angeregte Zustand hat die Quantenzahl $n = 2$. Wenn das System in diesem Zustand ist, wird mit Sicherheit die zugehörige Energie $W = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$ gemessen.

- b) Nun wird eine Ortsmessung durchgeführt. Rechnen Sie die Wahrscheinlichkeit aus, das Elektron entweder zwischen $a/6$ und $2a/6$ oder zwischen $4a/6$ und $5a/6$ zu finden.

$$1 = \int_0^a A^2 \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx = A^2 \left| \frac{1}{2}x - \frac{a}{8\pi} \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right|_0^a = \frac{A^2 a}{2} \quad (7)$$

Somit wird $A = \sqrt{2/a}$. Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den oben genannten Bereichen ergibt sich:

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{a/6}^{2a/6} \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx + \int_{4a/6}^{5a/6} \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx \\ &= 2 \int_{a/6}^{2a/6} \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx = \frac{4}{a} \left| \frac{1}{2}x - \frac{a}{8\pi} \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right|_{a/6}^{2a/6} \\ &= \frac{4}{a} \left(\frac{a}{12} + \frac{a\sqrt{3}}{8\pi} \right) \approx 0,61 \end{aligned} \quad (8)$$

Wobei die Achsensymmetrie der Lösungen um die Mitte des Topfs ausgenutzt wurde.

- c) Nun wird in die Mitte des Topfs eine dünne Zwischenwand eingefügt, die das Elektron nicht durchtunneln kann. Das Elektron befindet sich in dem rechten der beiden Töpfe. Wie sieht die (normierte) Wellenfunktion des Elektrons im niedrigsten Eigenzustand nach dem Einschieben der Trennwand aus?

Der niedrigsten Eigenzustand nach dem Einschieben der Zwischenwand ist:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & : 0 \leq x < a/2 \\ C \sin \frac{2\pi x}{a} & : a/2 \leq x < a \end{cases} \quad (9)$$

Die Normierungskonstante erhält man mit

$$1 = \int_{a/2}^a C^2 \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx = C^2 \left| \frac{1}{2}x - \frac{a}{8\pi} \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right|_{a/2}^a = \frac{C^2 a}{4} \quad (10)$$

zu $C = \sqrt{4/a}$. Also sieht die Wellenfunktion folgendermaßen aus:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & : 0 \leq x < a/2 \\ \sqrt{4/a} \sin \frac{2\pi x}{a} & : a/2 \leq x < a \end{cases} \quad (11)$$

3. Variationsrechnung am dreieckigen Potential

An der Grenzschicht von zwei Halbleitermaterialien kann man interessante Effekte beobachten, die in Heterostruktur-Bauelementen ausgenutzt werden. Zum Beispiel ist bei

geschickter Wahl der Materialien die Elektronenbeweglichkeit nahe der Grenzfläche zwischen diesen höher als im Inneren des Materials. Damit können zum Beispiel schnelle Transistoren verwirklicht werden. Ein sehr gutes Modell für die Begebenheiten an einer solchen Grenzfläche stellt das trianguläre Potential dar. Im Eindimensionalen wollen wir vereinfacht annehmen, dass sich bei $x \leq 0$ eine unendlich hohe Barriere befindet. Für Orte $x > 0$ nehmen wir einen linearen Verlauf des Potentials $V(x) = e_0 F x$ mit konstantem F an.

- a) Zeichnen Sie den Potentialverlauf!

Der Verlauf ist in Abbildung 1 dargestellt.

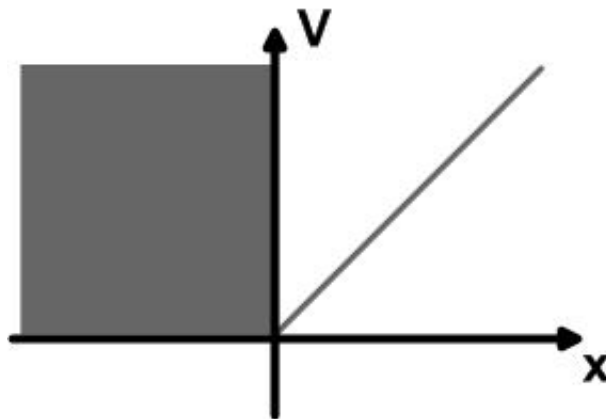


Abb. 1: Potentialverlauf

- b) Stellen Sie die Schrödinger-Gleichung für das stationäre Problem auf!

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + e_0 F x \right) \psi(x) = W\psi(x) \quad (12)$$

- c) In vielen Fällen interessiert man sich besonders für den niedrigsten Energiezustand W_0 eines Systems. Dieser kann mit der Methode der Variationsrechnung approximiert werden. Dazu geht man wie folgt vor:
- i. Durch Vorwissen oder geschicktes Raten stellt man eine Testfunktion $\psi(x, \alpha)$ auf, die von einem Parameter α abhängt.
 - ii. Nun berechnet man den Erwartungswert der Energie $\langle W(\alpha) \rangle$.
 - iii. Abschließend bedient man sich der Tatsache, dass physikalische Systeme ihre Energie minimieren. Da wir in unsere Testfunktion einen Parameter α eingebracht haben, können wir nun eine Minimumsuche bezüglich dieses Parameters durchführen. Damit erhalten wir eine Näherungslösung für die Nullpunktsenergie.

Nehmen Sie eine Testfunktion $\psi(x, \alpha) = A x e^{-\alpha x}$ an. Berechnen Sie zunächst die Normierungskonstante A über die Normierungsbedingung.

Wie üblich setzen wir für die Normierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (13)$$

Daraus folgt in unserem Fall:

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 x^2 e^{-2\alpha x} dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (14)$$

Unser Integrationsgebiet kann auf $x > 0$ beschränkt werden, da die Wellenfunktion im unendlichen Potential für $x < 0$ verschwindet. Das Integral $\int x^2 e^{ax} dx$ kann man durch partielles Integrieren lösen oder in eine Formelsammlung schauen, man erhält:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (15)$$

Hier ist $a = 2\alpha$. Wir erhalten also:

$$\int_0^{\infty} A^2 x^2 e^{-2\alpha x} dx = A^2 \frac{2!}{(2\alpha)^3} \quad (16)$$

und somit

$$A^2 \frac{1}{4\alpha^3} \stackrel{!}{=} 1 \quad (17)$$

Unsere Normierungskonstante wird also zu:

$$A = 2\sqrt{\alpha^3} \quad (18)$$

- d) Errechnen Sie nun den Erwartungswert für die Energie $\langle W(\alpha) \rangle$ in Abhängigkeit von α .

Für den Energie-Erwartungswert müssen wir folgenden Ausdruck auswerten:

$$\langle W \rangle(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H} \psi dx \quad (19)$$

Wenn wir unsere Schätzfunktionen und den Hamilton-Operator aus den vorigen Aufgabenteilen einsetzen, erhalten wir:

$$\langle W \rangle(\alpha) = \int_0^{\infty} 2\sqrt{\alpha^3} x e^{-\alpha x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + e_0 F x \right) 2\sqrt{\alpha^3} x e^{-\alpha x} dx \quad (20)$$

Die Anwendung des Differentialoperators ergibt:

$$\langle W \rangle(\alpha) = \int_0^{\infty} 4\alpha^3 \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} x e^{-2\alpha x} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} x^2 e^{-2\alpha x} + e_0 F x^3 e^{-2\alpha x} \right) dx \quad (21)$$

Erneut verwenden wir

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (22)$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \langle W \rangle(\alpha) &= 4\alpha^3 \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} \frac{1!}{(2\alpha)^2} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{2!}{(2\alpha)^3} + e_0 F \frac{3!}{(2\alpha)^4} \right) \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + e_0 F \frac{3}{2\alpha} \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + e_0 F \frac{3}{2\alpha} \end{aligned} \quad (23)$$

- e) Bestimmen Sie das α , das den Energie-Erwartungswert minimiert und daraus die Wellenfunktion.

$$\frac{d\langle W \rangle(\alpha)}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - e_0 F \frac{3}{2\alpha^2} \quad (24)$$

...daraus folgt:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - e_0 F \frac{3}{2\alpha^2} \\ \frac{\hbar^2 \alpha}{m} &= e_0 F \frac{3}{2\alpha^2} \\ \alpha^3 &= e_0 F m \frac{3}{2\hbar^2} \\ \alpha &= \sqrt[3]{e_0 F m \frac{3}{2\hbar^2}} \end{aligned} \quad (25)$$