

Lichttechnisches Institut

Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

Dipl.-Phys. Jan Mescher

M.Sc. Nico Bolse

Engesserstraße 13

76131 Karlsruhe

Festkörperelektronik

Musterlösung zum 2. Übungsblatt

24. April 2014

1. Streuung an Elektronen (T)

- 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 $13,6 \text{ eV}$ 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. Das freie Elektron (Ü)

- a) In einem Elektronenmikroskop werden Elektronen mit einer de-Broglie Wellenlänge von $\lambda = 10^{-11}$ m verwendet. Welche kinetische Energie besitzt ein einzelnes Elektron? Die nicht-relativistische Näherung sei gültig!

$$W = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2}{2m_e} = 2.41 \text{ fJ} = 15.04 \text{ keV}$$

- b) Gegeben sind folgende Dispersionsrelationen:

$$\begin{aligned}\omega_{\text{Photon}}(k) &= ck \\ \omega_{\text{Elektron}}(k) &= \frac{\hbar k^2}{2m_e}\end{aligned}$$

Berechnen sie die Phasengeschwindigkeit v_{ph} und die Gruppengeschwindigkeit v_g in beiden Fällen.

Für Photonen ergibt sich

$$v_{\text{ph}} = v_g = c,$$

für Elektronen folgt

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m_e} \text{ und } v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m_e}$$

- c) Freie Elektronen können beschrieben werden als ebene Welle,

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

Berechnen Sie mit Hilfe des Impulsoperators den Impulserwartungswert $\langle \hat{p}(t) \rangle$ und das Impulserwartungswertquadrat $\langle \hat{p}^2(t) \rangle$ für ein freies Elektron. Bestimmen Sie damit die Unschärfe des Impulses $\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2(t) \rangle - \langle \hat{p}(t) \rangle^2}$. Was folgt daraus über die Unschärferelation für die Ortsunschärfe Δx ?

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}(t) \rangle &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) (-j\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) (-j^2 \hbar k) \psi(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \hbar k \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \hbar k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}^2(t) \rangle &= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \hat{p}^2(t) \psi(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} A e^{+j(kx+\omega t)} \cdot \left(-j\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 \cdot A e^{-j(kx+\omega t)} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} A e^{+j(kx+\omega t)} \cdot \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \cdot A e^{-j(kx+\omega t)} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} A e^{+j(kx+\omega t)} \cdot (-\hbar^2 (-jk)^2) \cdot A e^{-j(kx+\omega t)} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \hbar^2 k^2 \cdot \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx} \\
&= \hbar^2 k^2
\end{aligned}$$

Mit den angegebenen Werten folgt unmittelbar:

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2(t) \rangle - \langle \hat{p}(t) \rangle^2} = 0$$

Es gilt die Unschärferelation:

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

Damit folgt

$$\Delta x \rightarrow \infty$$

Da der Impuls exakt bestimmt ist, ist der Ort also maximal unbestimmt.

3. Quantenmechanisches Messen beim unendlichen Potentialtopf (T)

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 befinde 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:

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

4. Parabolisches Potential (Ü)

Komplexe Potentiale in Quantenbauelementen können in erster Näherung häufig durch parabolische Funktionen angenähert werden. Ein entsprechender Ausdruck lautet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$. Man erkennt die Ähnlichkeiten zur potentiellen Energie eines klassischen harmonischen Oszillators mit der Federkonstanten $k = m\omega^2$, $W_{\text{pot}} = \frac{1}{2}k\hat{x}^2$, weswegen man hier von einem *quantenmechanischen harmonischen Oszillator* spricht.

- a) Recherchieren Sie, wie die Funktionen ψ_n aussehen, die die zeitunabhängige Schrödingergleichung für das parabolischen Potential lösen. Wie lautet die Formel für die zugehörigen Eigenwerte W_n ?

Für die Eigenwerte des parabolischen Potentials findet man $W_n = \hbar\omega (n + 1/2)$, hier ist für die Quantenzahl n Null oder eine natürliche Zahl einzusetzen. Die zugehörigen Eigenfunktionen ergeben sich zu:

$$\psi_n(x) = \frac{c_n}{\sqrt{b}} H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \quad (12)$$

Wobei $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ist und die c_n Normierungskonstanten sind. Die H_n stehen für die Hermiteschen Polynome, die nach der Regel $H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2)$ gebildet werden. In der Verwendung der Hermiteschen Polynome liegt auch ein Grund, warum die Zustände für den harmonischen Oszillator ab dem Zustand 0 gezählt werden - es wäre verwirrend, den ersten Zustand mit dem Hermiteschen Polynom H_0

mit dem Index 1 zu versehen. Damit unterscheidet sich der harmonische Oszillator in der Nummerierung der Zustände vom unendlichen Potentialtopf.

- b) Wie unterscheiden sich die Lösungen des parabolischen Potentials von denen des unendlich hohen Potentialtopfs? Zählen Sie zudem die Gemeinsamkeiten auf.

In beiden Fällen erhalten wir diskrete Lösungen für die Energiewerte, wobei der niedrigste Zustand eine Energie größer Null hat. Ebenso wechseln sich gerade und ungerade Lösungen ab, wobei der Grundzustand eine gerade Lösung ist. Unterschiedlich sind die Abstände der Energieniveaus, beim harmonischen Oszillator erhalten wir äquidistante, beim unendlichen Potentialtopf nimmt der Abstand quadratisch zu. Außerdem weisen die Wellenfunktionen im unendlichen Potentialtopf an dessen Grenzen einen Knoten auf.

- c) Zeigen Sie, dass $\psi_0(x)$ und $\psi_1(x)$ die SGL lösen.

H_0 :

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_0 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi_0 \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\left(\frac{c_0}{\sqrt{b}}e^{-\frac{x^2}{2b^2}}\right) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}\left(-\frac{x}{b^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\left(\frac{c_0}{\sqrt{b}}e^{-\frac{x^2}{2b^2}}\right)\end{aligned}\quad (13)$$

...

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_0 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{b^2} + \frac{x^2}{b^4}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\left(\frac{c_0}{\sqrt{b}}e^{-\frac{x^2}{2b^2}}\right) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\left(\frac{c_0}{\sqrt{b}}e^{-\frac{x^2}{2b^2}}\right) \\ &= \underbrace{\frac{1}{2}\hbar\omega}_{=W_0}\psi_0\end{aligned}\quad (14)$$

H_1 :

$$\begin{aligned}
 \hat{H}\psi_1 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi_1 \\
 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \left(\frac{c_1}{\sqrt{b}} 2 \frac{x}{b} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \right) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{c_1}{\sqrt{b}} 2 \frac{x}{b} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_1 \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left(x e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \right) \frac{2c_1}{\sqrt{b^3}} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_1 \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left(e^{-\frac{x^2}{2b^2}} - \frac{x^2}{b^2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \right) \frac{2c_1}{\sqrt{b^3}} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_1 \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{x}{b^2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} - \frac{2x}{b^2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} + \frac{x^3}{b^4} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \right) \frac{2c_1}{\sqrt{b^3}} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_1 \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{b^2} - \frac{2}{b^2} + \frac{x^2}{b^4} \right) \underbrace{\left(x e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \right)}_{=\psi_1} \frac{2c_1}{\sqrt{b^3}} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_1 \\
 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{3}{b^2} + \frac{x^2}{b^4} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi_1 \\
 &= \left(\frac{\hbar^2 \cdot 3m\omega}{2m\hbar} - \frac{\hbar^2 m^2 \omega^2 x^2}{2m\hbar^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi_1 \\
 &= \underbrace{\frac{3}{2} \hbar \omega}_{=W_1} \psi_1
 \end{aligned} \tag{15}$$

- d) Der normierte Grundzustand des eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillators ist

$$\psi_0(x) = \frac{1}{b^{1/2} \sqrt{\pi^{1/2}}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \tag{16}$$

mit der Konstanten $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Berechnen Sie den Erwartungswert für die kinetische Energie des harmonischen Oszillators im Grundzustand.

Nützliche Integrale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{17}$$

Die kinetische Energie ergibt sich zu $W_{kin} = \frac{p^2}{2m}$. In Operatorschreibweise setzen wir den Impulsoperator ein, also $\hat{p} = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, somit erhalten wir für den Operator der kinetischen Energie:

$$\hat{W}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{18}$$

Für den Erwartungswert der kinetischen Energie erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{W}_{kin} \rangle &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \hat{W} \psi_0 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_0 dx} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \hat{W} \psi_0 dx \quad (\text{da } \psi_0 \text{ bereits normiert gegeben ist}) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{b^{1/2} \sqrt{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \frac{1}{b^{1/2} \sqrt{\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{b \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)\right) dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{b \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \left(-\frac{1}{b^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) + \frac{x^2}{b^4} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)\right) dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{b \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{1}{b^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) + \frac{x^2}{b^4} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)\right) dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{b \sqrt{\pi}} \left(-\frac{1}{b^2} \sqrt{b^2 \pi} + \frac{1}{2b^2} \sqrt{b^2 \pi}\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{b \sqrt{\pi}} \frac{1}{2b^2} \sqrt{b^2 \pi} = \frac{\hbar^2}{4mb^2} = \frac{1}{4} \hbar \omega
\end{aligned} \tag{19}$$

- e) Bestimmen Sie mit dem Ergebnis des letzten Aufgabenteils den Erwartungswert der potentiellen Energie des Grundzustands und erläutern Sie ihr Vorgehen.

Die Gesamtenergie des Grundzustands des harmonischen Oszillators ist $W_T = \frac{1}{2} \hbar \omega$. Die Gesamtenergie berechnet sich aus der Summe der potentiellen und kinetischen Energie, gleiches gilt auch für die Erwartungswerte. Mit dem Ergebnis der letzten Teilaufgabe erhalten wir $\langle \hat{W}_{pot} \rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega$.

5. Variationsrechnung am dreieckigen Potential (T)

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.

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

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + e_0 F x\right) \psi(x) = W\psi(x) \tag{20}$$

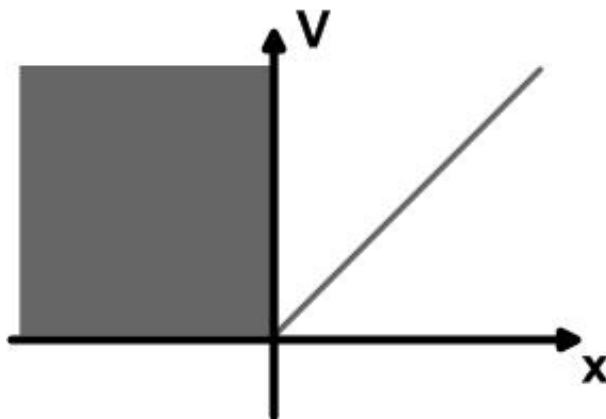


Abb. 1: Potentialverlauf

- 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

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (21)$$

Daraus folgt in unserem Fall:

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 x^2 e^{-2\alpha x} dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (22)$$

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:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (23)$$

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

$$\int_0^\infty A^2 x^2 e^{-2\alpha x} dx = A^2 \frac{2!}{(2\alpha)^3} \quad (24)$$

und somit

$$A^2 \frac{1}{4\alpha^3} \stackrel{!}{=} 1 \quad (25)$$

Unsere Normierungskonstante wird also zu:

$$A = 2\sqrt{\alpha^3} \quad (26)$$

- 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:

$$\langle W \rangle(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H} \psi dx \quad (27)$$

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

$$\langle W \rangle(\alpha) = \int_0^\infty 2\sqrt{\alpha^3} x e^{-\alpha x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + e_0 F x \right) 2\sqrt{\alpha^3} x e^{-\alpha x} dx \quad (28)$$

Die Anwendung des Differentialoperators ergibt:

$$\langle W \rangle(\alpha) = \int_0^\infty 4\alpha^3 \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} x e^{-2\alpha x} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} x^2 e^{-2\alpha x} + e_0 F x^3 e^{-2\alpha x} \right) dx \quad (29)$$

Erneut verwenden wir

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (30)$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \langle W \rangle(\alpha) &= 4\alpha^3 \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{m} \frac{1!}{(2\alpha)^2} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{2!}{(2\alpha)^3} + e_0 F \frac{3!}{(2\alpha)^4} \right) \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + e_0 F \frac{3}{2\alpha} \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + e_0 F \frac{3}{2\alpha} \end{aligned} \quad (31)$$

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

$$\frac{d\langle W \rangle(\alpha)}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - e_0 F \frac{3}{2\alpha^2} \quad (32)$$

...daraus folgt:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - e_0 F \frac{3}{2\alpha^2} \\ \frac{\hbar^2 \alpha}{m} &= e_0 F \frac{3}{2\alpha^2} \\ \alpha^3 &= e_0 F m \frac{3}{2\hbar^2} \\ \alpha &= \sqrt[3]{e_0 F m \frac{3}{2\hbar^2}} \end{aligned} \quad (33)$$

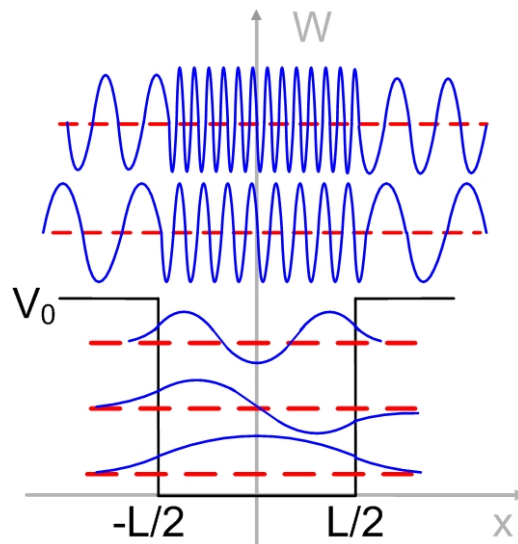


Abb. 2: Potentialverlauf und Eigenfunktionen

6. Potentialtopf mit endlich hohen Wänden (Ü)

Gegeben sei das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x < -\frac{L}{2} \\ 0 & \text{für } -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ V_0 & \text{für } x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (34)$$

eines endlichen Potentialtopfes der Tiefe V_0 .

- a) Skizzieren Sie $V(x)$.

Das Potential ist in Abbildung 4 dargestellt.

- b) Zeichnen sie die zugehörigen Eigenfunktionen für $W < V_0$ und zwei Eigenfunktionen für $W > V_0$ ein. Gehen Sie davon aus, dass es genau drei gebundene Eigenzustände gibt. Worin unterscheiden sich die Wellenfunktionen für $W < V_0$ und $W > V_0$ qualitativ?

Die Lösungen mit $W > V_0$ haben die Form von ebenen Wellen und sind daher unendlich ausgedehnt. Außerdem gibt es hier zu jeder Energie eine Lösung. Die gebundenen Lösungen dagegen fallen in der Barriere exponentiell ab, sind also im Quantentopf lokalisiert, man vergleiche Abbildung 4. Zudem ist ihr Energiespektrum diskret.

- c) Welche Gleichung liefert die Lösung für die elektronischen Zustände in einem solchen System mit $W < V_0$? Machen Sie Lösungsansätze für die drei Bereiche mit konstantem Potential und stellen Sie die zur Lösung nötigen Rand- und Nebenbedingungen auf. Setzen Sie die Ansätze in die erhaltenen Bedingungen ein. Das explizite Lösen dieses Gleichungssystems ist **nicht** verlangt!

Die stationäre Schrödingergleichung liefert die Energieeigenwerte dieses Problems. In unserem Fall zerfällt das Problem in drei Einzelprobleme mit jeweils konstantem Potential. Damit ergibt sich:

$$\text{Gebiet 1: } \psi_1(x) = A \exp(-\kappa_1 x) + B \exp(\kappa_1 x)$$

$$\text{Gebiet 2: } \psi_2(x) = C \exp(-jk_2 x) + D \exp(jk_2 x)$$

$$\text{Gebiet 3: } \psi_3(x) = E \exp(-\kappa_3 x) + F \exp(\kappa_3 x)$$

Hier wurde schon ausgenutzt, dass die Wellenzahlen in der Barriere für $W < V_0$ imaginär sind und so die oszillierenden komplexen Exponentialfunktionen in reelle Exponentialfunktionen verwandeln. Daran knüpft die Forderung an, dass in den Gebieten 1 und 3 die Lösungen exponentiell abfallen müssen, weil sonst die Wellenfunktionen weit weg vom Topf divergieren. Wir folgern $A = F = 0$. Die restlichen vier Variablen können wir mit Hilfe der Stetigkeitsbedingungen an den Übergängen 1-2 und 2-3 bestimmen.

$$\text{Nebenbedingung 1: } \psi_1(x = -L/2) = \psi_2(x = -L/2)$$

$$\text{Nebenbedingung 2: } \psi'_1(x = -L/2) = \psi'_2(x = -L/2)$$

$$\text{Nebenbedingung 3: } \psi_2(x = +L/2) = \psi_3(x = +L/2)$$

$$\text{Nebenbedingung 4: } \psi'_2(x = +L/2) = \psi'_3(x = +L/2)$$

Damit haben wir vier unabhängige Nebenbedingungen, um vier Konstanten zu bestimmen, das Problem ist lösbar. Einsetzen liefert weiterhin:

$$1: \quad B \exp(-\kappa_1 L/2) = C \exp(+jk_2 L/2) + D \exp(-jk_2 L/2)$$

$$2: \quad B(\kappa_1) \exp(-\kappa_1 L/2) = C(-jk_2) \exp(+jk_2 L/2) + D(jk_2) \exp(-jk_2 L/2)$$

$$3: \quad C \exp(-jk_2 L/2) + D \exp(+jk_2 L/2) = E \exp(-\kappa_3 L/2)$$

$$4: \quad C(-jk_2) \exp(-jk_2 L/2) + D(jk_2) \exp(+jk_2 L/2) = E(-\kappa_3) \exp(-\kappa_3 L/2)$$

- d) Zeigen und erklären Sie anhand einer Skizze, wie sich das Aussehen der Lösungen verändert, wenn $V_0 \rightarrow \infty$.

Mit unendlich hohen Wänden wird der endliche zum unendlichen Potentialtopf. Dann ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den Barrieren Null, die Wellenfunktion hat an der Grenze einen Knoten. Natürlich gibt es im unendlichen Potentialtopf auch keine ungebundenen Lösungen.

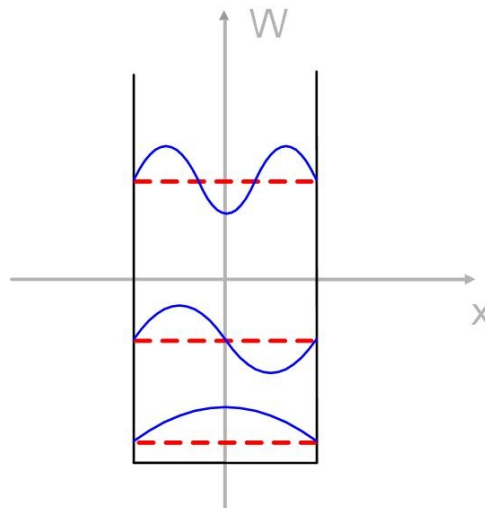


Abb. 3: Unendlicher Potentialtopf

7. Stückweise konstantes Potential (Ü)

Gegeben sei das Potential:

$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 & \text{Bereich I} \\ 0 & : 0 \leq x < a & \text{Bereich II} \\ V_0 & : a \leq x < b & \text{Bereich III} \\ \infty & : x \geq b & \text{Bereich IV} \end{cases}$$

mit $V_0 > 0$, $a > 0$ und $b > 0$.

a) Skizzieren Sie den Potentialverlauf!

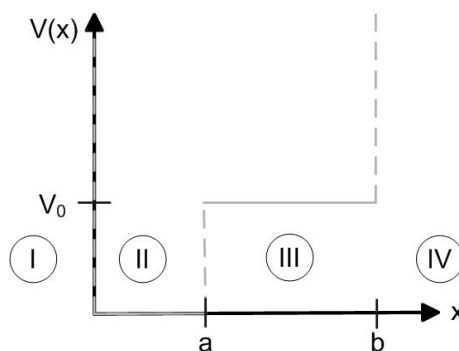


Abb. 4: Stückweise konstantes Potential

- b) Bestimmen Sie einen Ausdruck für die Energie-Eigenwerte eines Teilchens im Potential! Gehen Sie von Energien $W > V_0$ aus. Vereinfachen Sie den Ausdruck so weit wie möglich. Die resultierende Gleichung ist nur noch numerisch lösbar.

In den Bereichen I und IV muss die Wellenfunktion wegen des unendlichen Potentials Null sein. In den beiden anderen Bereichen stellen wir einen Ansatz mit ebenen

Wellen auf:

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ae^{jk_{\text{II}}x} + Be^{-jk_{\text{II}}x} \text{ mit } k_{\text{II}} = \sqrt{2mW/\hbar^2} \quad (35)$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = Ce^{jk_{\text{III}}x} + De^{-jk_{\text{III}}x} \text{ mit } k_{\text{III}} = \sqrt{2m(W - V_0)/\hbar^2} \quad (36)$$

Für den Bereich II folgt aus der Randbedingung $\psi_{\text{II}}(0) = 0$:

$$\psi_{\text{II}}(0) = Ae^{jk_{\text{II}}0} + Be^{-jk_{\text{II}}0} = A + B = 0 \quad (37)$$

und somit

$$\psi_{\text{II}}(x) = A(e^{jk_{\text{II}}x} - e^{-jk_{\text{II}}x}) = \underbrace{2jA}_{=K_{\text{II}}} \sin k_{\text{II}}x. \quad (38)$$

Analog erhalten wir für den Bereich III:

$$\psi_{\text{III}}(b) = Ce^{jk_{\text{III}}(b)} + De^{-jk_{\text{III}}(b)} = 0 \quad (39)$$

$$D = -Ce^{j2k_{\text{III}}(b)} \quad (40)$$

Einsetzen und das Ausklammern von $e^{jk_{\text{III}}(b)}$ ergibt:

$$\psi_{\text{III}}(x) = C(e^{jk_{\text{III}}(x)} - e^{j2k_{\text{III}}(b)}e^{-jk_{\text{III}}(x)}) \quad (41)$$

$$= Ce^{jk_{\text{III}}(b)}(e^{jk_{\text{III}}(x-b)} - e^{-jk_{\text{III}}(x-b)}) \quad (42)$$

$$= \underbrace{2jCe^{jk_{\text{III}}(b)}}_{=K_{\text{III}}} \sin k_{\text{III}}(x - b). \quad (43)$$

Den Ausdruck für die Gesamtenergie erhält man aus den Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktion an der Stelle $x = a$:

$$\psi_{\text{II}}(a) = \psi_{\text{III}}(a) \quad (44)$$

$$\psi'_{\text{II}}(a) = \psi'_{\text{III}}(a) \quad (45)$$

also

$$K_{\text{II}} \sin(k_{\text{II}}a) = K_{\text{III}} \sin(k_{\text{III}}(a - b)) \quad (46)$$

$$K_{\text{II}}k_{\text{II}} \cos(k_{\text{II}}a) = K_{\text{III}}k_{\text{III}} \cos(k_{\text{III}}(a - b)) \quad (47)$$

Die Konstanten K_i können eliminiert werden, indem wir Gleichung 46 durch Gleichung 47 dividieren:

$$\frac{1}{k_{\text{II}}} \tan(k_{\text{II}}a) = \frac{1}{k_{\text{III}}} \tan(k_{\text{III}}(a - b)) \quad (48)$$

$$\frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{III}}} = \frac{\tan(k_{\text{II}}a)}{\tan(k_{\text{III}}(a - b))} \quad (49)$$

$$\sqrt{\frac{W}{W - V_0}} = \frac{\tan\left(\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}a\right)}{\tan\left(\sqrt{\frac{2m(W - V_0)}{\hbar^2}}(a - b)\right)} \quad (50)$$

Dieser implizite Ausdruck enthält die Eigen-Energien des Problems, kann aber analytisch nicht gelöst werden.