

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

3. Übungsblatt

8. Mai 2014

Besprechung:

Übung 23. Mai 2014

Tutorien 19. - 22. Mai 2014

1. Leuchtende Quantenpunkte (T)

In der Nanotechnologie spielen Quantenpunkte eine wachsende Rolle. Mathematisch gesehen entsprechen diese Punkte einem 3-dimensionalen Potentialtopf. Betrachten Sie einen würfelförmigen Quantenpunkt der Kantenlänge L .

- a) Zeigen Sie, dass der Betrag des Wellenvektors $|\vec{k}|$ eines Elektrons im Quantenpunkt nur diskrete Werte annehmen kann und berechnen Sie diese. Nehmen Sie zur Vereinfachung des Problems außerhalb des Quantenpunktes ein Potential $V = \infty$ an (d.h., das Elektron kann den Quantenpunkt nicht verlassen).

Ansatz für die Wellenfunktion: $\psi_x(x) = Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}$. Dies beschreibt die Überlagerung einer nach links und einer nach rechts laufenden ebenen Welle. Da das Potential zeitunabhängig ist, muss der zeitabhängige Term $e^{j\omega t}$ nicht weiter betrachtet werden.

Für das Potential gilt:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 \\ 0 & : 0 \leq x \leq L \\ \infty & : L < x \end{cases} \quad (1)$$

Aufgrund des unendlich hohen Potentials außerhalb des Quantenpunktes folgt:

$$\psi_x(0) = 0 \text{ und } \psi_x(L) = 0 \quad (2)$$

Einsetzen des Ansatzes liefert

$$\psi_x(0) = Ae^0 + Be^0 \stackrel{!}{=} 0 \quad (3)$$

$$\Leftrightarrow B = -A \quad (4)$$

und

$$\psi_x(L) = Ae^{jk_x L} - Ae^{-jk_x L} \stackrel{!}{=} 0 \quad (5)$$

$$\Leftrightarrow 2jA \sin k_x L = 0 \quad (6)$$

$$\Leftrightarrow \sin k_x L = 0 \quad (7)$$

Für die x -Komponente des Wellenvektors folgt somit die Quantisierungsbedingung

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L}. \quad (8)$$

Entsprechend gilt $k_y = \frac{n_y \pi}{L}$ und $k_z = \frac{n_z \pi}{L}$. Wenn die Komponenten des Wellenvektors $\vec{k}$ diskret sind, so kann auch der Betrag des Wellenvektors nur diskrete Werte annehmen.

- b) Zeigen Sie mit Hilfe der zeitunabhängigen (stationären) Schrödingergleichung $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = W \psi$, dass gilt: $W(|\vec{k}|) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}$.

Ansatz: $\psi_x(x) = Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}$

Einsetzen in die SG liefert:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) = W_x (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) \quad (9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-Ak_x^2 e^{jk_x x} - Bk_x^2 e^{-jk_x x}) = W_x (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) \quad (10)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) = W_x (Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}) \quad (11)$$

$$W_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad (12)$$

Entsprechend gilt $W_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$ und $W_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ und damit nach Superposition

$$W(|\vec{k}|) = W_x + W_y + W_z = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}. \quad (13)$$

- c) Bestimmen Sie die Quantenzahlen zur Energie $W = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{mL^2}$. Lassen sich die Quantenzahlen eindeutig bestimmen?

Die Quantenzahlen lassen sich nicht eindeutig bestimmen. Folgende Kombinationen $n = (n_x, n_y, n_z)$ sind möglich:

$$n_1 = (2, 1, 1), n_2 = (1, 2, 1), n_3 = (1, 1, 2) \quad (14)$$

- d) Bestimmen Sie die Wellenfunktionen $\psi_{x,n_x}, \psi_{y,n_y}, \psi_{z,n_z}$ und ψ_n . Bestimmen Sie die Amplitude der Wellenfunktion so, dass gilt $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = 1$. Hinweis: Sie erleichtern sich die Rechnung, wenn Sie hier die komplexen e-Funktionen in Sinus-Funktionen wandeln.

Ansatz: $\psi_x(x) = Ae^{jk_x x} + Be^{-jk_x x}$

Wir wissen bereits: $B = -A$, $k_x = \frac{n_x \pi}{L}$

Daraus folgt:

$$\psi_x(x) = A \left(e^{j \frac{n_x \pi}{L} x} - e^{-j \frac{n_x \pi}{L} x} \right) = \underbrace{2jA}_{C} \sin \frac{n_x \pi}{L} x \quad (15)$$

Normierung der Funktion:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_x^* \psi_x dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (16)$$

Da sich das Elektron nur im Bereich $[0, L]$ aufhalten kann, können die Integrationsgrenzen eingeschränkt werden.

$$\int_0^L (C \sin \frac{n_x \pi}{L} x) (C^* \sin \frac{n_x \pi}{L} x) dx \quad (17)$$

$$= C^2 \int_0^L \left(\sin \frac{n_x \pi}{L} x \right)^2 dx \quad (18)$$

O.B.d.A wählen wir C hier reell, also $C^* = C$ (daraus folgt, dass A komplex sein muß, siehe oben).

Eine Formelsammlung (oder partielle Integration) liefert zu $\int (\sin ax)^2$ die Stammfunktion $\frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax$ und damit das Integral:

$$= C^2 \left[\frac{1}{2}x - \frac{L}{4n_x \pi} \sin 2 \frac{n_x \pi}{L} x \right]_0^L \quad (19)$$

$$= C^2 \left(\frac{1}{2}L - 0 + 0 - 0 \right) \stackrel{!}{=} 1 \quad (20)$$

$$\Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (21)$$

$$\Rightarrow \psi_x(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_x \pi}{L} x \quad (22)$$

Entsprechend ergibt sich:

$$\psi_y(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_y \pi}{L} y \quad (23)$$

$$\psi_z(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_z \pi}{L} z \quad (24)$$

Für die Gesamt-Wellenfunktion folgt daraus:

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z) = \frac{2}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n_x \pi}{L} x \right) \sin \left(\frac{n_y \pi}{L} y \right) \sin \left(\frac{n_z \pi}{L} z \right) \quad (25)$$

Anmerkung: Wegen $\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$ ist $\psi(x, y, z)$ bereits auf 1 normiert, wenn ψ_x , ψ_y und ψ_z dies sind.

- e) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\hat{x}$, $\hat{p}_x$ zu ψ_{x,n_x} .

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_x^* \hat{x} \psi_x dx = \int_0^L \psi_x^* x \psi_x dx \quad (26)$$

$$= \int_0^L \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \cdot x \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right] dx \quad (27)$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L x \cdot \left(\sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 dx \quad (28)$$

Durch partielle Integration findet man $\int x \cdot (\sin ax)^2 dx = \frac{1}{4}x^2 - \frac{1}{4a}x \sin 2ax - \frac{1}{8a^2} \cos 2ax$. Es folgt demnach:

$$\langle x \rangle = \frac{2}{L} \cdot \left[\frac{1}{4}x^2 - \frac{L}{4n_x \pi} x \sin\left(2\frac{n_x \pi}{L} x\right) - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \cos\left(2\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right]_0^L \quad (29)$$

$$= \frac{2}{L} \cdot \left[\frac{1}{4}L^2 - \frac{L}{4n_x \pi} L \sin(2n_x \pi) - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \cos(2n_x \pi) \right] \quad (30)$$

$$- \left[0 - \frac{L}{4n_x \pi} x \sin 0 - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \cos 0 \right] \\ = \frac{2}{L} \cdot \left[\frac{1}{4}L^2 - \frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} - \left[-\frac{L^2}{8n_x^2 \pi^2} \right] \right] = \frac{L}{2} \quad (31)$$

Für den Impulserwartungswert berechnen wir mit dem Impulsoperator $\hat{p} = -j\hbar \nabla$:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_x^* \hat{p} \psi_x dx = \int_0^L \psi_x^* (-j\hbar \nabla) \psi_x dx \quad (32)$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) (-j\hbar \nabla) \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) dx \quad (33)$$

$$= \frac{-2j\hbar n_x \pi}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \cos\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) dx \quad (34)$$

Durch partielle Integration findet man $\int \sin ax \cos ax dx = \frac{1}{2a} (\sin ax)^2$. Es folgt demnach:

$$\langle p \rangle = \frac{-j\hbar}{L} \left[\left(\sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 \right]_0^L = 0 \quad (35)$$

Dieses vielleicht etwas überraschende Ergebnis lässt sich anschaulich damit erklären, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x)|^2$ für einen Grundzustand (d.h. nicht-zusammengesetzter Zustand) zeitunabhängig ist, d.h. der Ortserwartungswert ändert sich nicht mit der Zeit. Daher kann die Elektronenwolke als ganzes auch keinen Impuls besitzen.

- f) Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Elektron in einem würfelförmigen Raumbereich in der Mitte des Quantenpunkts befindet, dessen Volumen einem 27stel des gesamten Quantenpunkts entspricht?

Da das Volumen ein 27stel des Gesamten Quantenpunkts betragen soll, und in der Mitte des Punktes zentriert ist, betrachten wir den Bereich $x, y, z \in [L/3, \dots, 2L/3]$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bezeichnen wir mit P .

$$P = \int_a^b \int_a^b \int_a^b \psi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) dz dy dx \quad (36)$$

Wegen $\psi(x, y, z) = \psi_x \psi_y \psi_z$ gilt:

$$P = \int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_x^* \psi_x dx \cdot \underbrace{\int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_y^* \psi_y dy}_{\hat{=} 1. Integral} \cdot \underbrace{\int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_z^* \psi_z dz}_{\hat{=} 1. Integral} \quad (37)$$

Im folgenden betrachten wir deshalb:

$$\int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \psi_x^* \psi_x dx = \int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 dx \quad (38)$$

$$= \frac{2}{L} \int_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \left(\sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \right)^2 dx \quad (39)$$

Durch partielle Integration folgt:

$$= \frac{2}{L} \left[\frac{1}{2} x - \frac{L}{4n_x \pi} \sin\left(2 \frac{n_x \pi}{L} x\right) \right]_{\frac{1}{3}L}^{\frac{2}{3}L} \quad (40)$$

$$= \frac{2}{L} \left(\left[\frac{1}{3} L - \frac{L}{4n_x \pi} \sin\left(\frac{4}{3} n_x \pi\right) \right] - \left[\frac{1}{6} L - \frac{L}{4n_x \pi} \sin\left(\frac{2}{3} n_x \pi\right) \right] \right) \quad (41)$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{2n_x \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_x \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_x \pi\right) \right) \quad (42)$$

Daraus folgt für P :

$$\begin{aligned} P &= \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_x \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_x \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_x \pi\right) \right) \right) \\ &\quad \cdot \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_y \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_y \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_y \pi\right) \right) \right) \\ &\quad \cdot \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n_z \pi} \left(\sin\left(\frac{4}{3} n_z \pi\right) - \sin\left(\frac{2}{3} n_z \pi\right) \right) \right) \end{aligned} \quad (43)$$

Daraus ergibt sich für einige ausgewählte Quantenzahlkonfigurationen konkret:

$$\begin{array}{llll} n_x = 1 & n_y = 1 & n_z = 1 & \Rightarrow P = 0, 23 \\ n_x = 1 & n_y = 1 & n_z = 2 & \Rightarrow P = 0, 20 \\ n_x = 2 & n_y = 2 & n_z = 2 & \Rightarrow P = 7, 47 \cdot 10^{-3} \\ n_x = 1000 & n_y = 1000 & n_z = 1000 & \Rightarrow P = 0, 04 \end{array} \quad (44)$$

- g) Beim Übergang eines Elektrons aus dem Zustand $n^* = (2, 1, 1)$ in den Zustand $n = (1, 1, 1)$ werde die frei werdende Energie in Form von infrarotem Licht emittiert.

Die Quantenpunkte emittieren infrarotes Licht der Wellenlänge $\lambda = 3 \mu\text{m}$. Welche Kantenlänge L haben die Quantenpunkte?

Die frei werdende Energie berechnet sich zu:

$$\Delta W = W_{n_x=2} - W_{n_x=1} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (2^2 - 1^2)}{2mL^2} \quad (45)$$

Mit $\Delta W = hf$ und $c = \lambda f$ folgt:

$$L = 1,65 \cdot 10^{-9} \text{ m} \quad (46)$$

2. Überlagerte Zustände (T)

Betrachtet werden die beiden energetisch niedrigsten Zustände in einem unendlich hohen Potentialtopf.

- a) Geben Sie diese beiden zeitabhängigen Zustände $\psi_1(x, t)$ und $\psi_2(x, t)$ explizit an.

Sei L die Breite des Topfes. Aus dem zweiten Kapitel des Skriptes folgt:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cdot e^{-j\omega_n t} \quad (47)$$

Beachten Sie, dass hier explizit nach $\psi(x, t)$ gefragt ist. Die zeitunabhängige Lösung aus dem Skript ist also um den stets vorhandenen, aber bei zeitunabhängigen Problemen nicht ausgeschriebenen harmonischen Term $e^{-j\omega_n t}$ zu ergänzen. Die Normierungskonstante ergibt sich zu:

$$A_n^2 = \frac{2}{L} \quad (48)$$

Für ψ_1 und ψ_2 gilt also:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \cdot e^{-j\omega_1 t} \quad (49)$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \cdot e^{-j\omega_2 t} \quad (50)$$

Aus der sin-Funktion lässt sich durch Vergleich mit $\sin(kx)$ außerdem ablesen, dass für die Wellenzahl $k = \frac{n\pi}{L}$ gilt.

- b) Wie lautet der Zustand $\psi(x, t)$, der sich zu gleichen Teilen aus den beiden Zuständen ψ_1 und ψ_2 zusammensetzt?

Allgemein setzen wir für einen Überlagerungszustand

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (51)$$

an, mit den komplexen Koeffizienten c_1 und c_2 . Die Forderung nach gleichen Anteilen der Zustände bedingt $c_1 = c_2 \equiv c$, also

$$\psi = c\psi_1 + c\psi_2. \quad (52)$$

Nun gilt es noch, diesen Zustand zu normieren. Wir fordern also

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (53)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (c^* \psi_1^* + c^* \psi_2^*) (c \psi_1 + c \psi_2) dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (54)$$

$$|c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_1^* \psi_1 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2) dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (55)$$

$$|c|^2 \left(\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \psi_1 dx}_{=1} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \psi_2 dx}_{=0} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^* \psi_1 dx}_{=0} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^* \psi_2 dx}_{=1} \right) \stackrel{!}{=} 1 \quad (56)$$

$$|c|^2 \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} \quad (57)$$

Der vorletzte Schritt folgt zum einen aus der Orthogonalität der Zustände ψ_1 und ψ_2 , zum anderen aus der Normiertheit der Zustände. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wählen wir nun $c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und erhalten somit:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2. \quad (58)$$

Es sei noch angemerkt, dass man bei einer Messung der Energie stets entweder die Eigenenergie zu Zustand ψ_1 , W_1 messen wird, oder die Eigenenergie zu Zustand ψ_2 , W_2 . Alle Messwerte dazwischen sind quantenmechanisch verboten! Darüber hinaus ändert eine Messung das System. Es befindet sich nach der Messung nur noch in dem Eigenzustand, zu welchem die Energie gemessen wurde. Die Überlagerung geht verloren.

- c) Bestimmen Sie mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung den Orts-Erwartungswert $\langle x \rangle(t)$.

Für den Ortserwartungswert setzen wir an

$$\langle x \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \hat{x} \psi(x, t) dx \quad (59)$$

Im Ortsraum gilt für den Ortsoperator $\hat{x} \equiv x$. Da $\psi(x, t)$ außerhalb des Topfes verschwindet, können wir die Integration auf den Topf beschränken. Nach Einsetzen von $\psi(x, t)$ erhalten wir also

$$\langle x \rangle(t) = \int_0^L \psi^*(x, t) \hat{x} \psi(x, t) dx \quad (60)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \int_0^L (\psi_1^*(x, t) x \psi_1(x, t) + \psi_1^*(x, t) x \psi_2(x, t) \\ &\quad + \psi_2^*(x, t) x \psi_1(x, t) + \psi_2^*(x, t) x \psi_2(x, t)) dx \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned}
&= \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^L (x\psi_1^*(x,t)\psi_1(x,t) + x\psi_2^*(x,t)\psi_2(x,t)) dx}_I \\
&\quad + \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^L (x\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t) + x\psi_2^*(x,t)\psi_1(x,t)) dx}_II
\end{aligned} \tag{62}$$

Wir betrachten zunächst den Teil I der Gleichung. Wegen $e^{-j\omega_1 t} \cdot e^{j\omega_1 t} = 1$ gilt $\psi_1(x,t)^*\psi_1(x,t) = \psi_1(x)^*\psi_1(x)$, ψ_2 entsprechend. Der Ortserwartungswert der Eigenzustände ψ_1 und ψ_2 allein ist jeweils also zeitunabhängig. Einsetzen der Eigenzustände ergibt

$$I = \frac{2}{L} \int_0^L \left(x \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) + x \sin^2\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \right) dx = L \tag{63}$$

Die Berechnung des Integrals folgt dabei aus partieller Integration oder mit Hilfe von Integraltabellen.

Für Teil II berechnen wir

$$II = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} e^{j\omega_1 t} x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{-j\omega_2 t} dx \tag{64}$$

$$\begin{aligned}
&+ \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{j\omega_2 t} x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} e^{-j\omega_1 t} dx \\
&= \frac{2}{L} \int_0^L x \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} \underbrace{(e^{j\omega_1 t} e^{-j\omega_2 t} + e^{j\omega_2 t} e^{-j\omega_1 t})}_{e^{j(\omega_1 - \omega_2)t} + e^{-j(\omega_1 - \omega_2)t}} dx
\end{aligned} \tag{65}$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L x \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} (2 \cos((\omega_1 - \omega_2)t)) dx \tag{66}$$

Der Integrand lässt sich mit Hilfe des Additionstheorems $\sin \alpha \sin \beta = \frac{1}{2}[\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$ umformen zu:

$$II = \frac{2}{L} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \int_0^L x \left(\cos \frac{\pi x}{L} - \cos \frac{3\pi x}{L} \right) dx \tag{67}$$

Dieses Integral ist Bronstein-integrierbar:

$$\int x \cos ax dx = \frac{\cos ax}{a^2} + \frac{x \sin ax}{a} \tag{68}$$

Daraus folgt:

$$\Pi = \frac{2}{L} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \left(\left[\frac{L^2}{\pi^2} \cos \frac{\pi x}{L} \right]_0^L + \underbrace{\left[\frac{Lx}{\pi} \sin \frac{\pi x}{L} \right]_0^L}_{=0} \dots \right. \quad (69)$$

$$\dots - \left[\frac{L^2}{9\pi^2} \cos \frac{3\pi x}{L} \right]_0^L - \underbrace{\left[\frac{Lx}{3\pi} \sin \frac{3\pi x}{L} \right]_0^L}_{=0} \left. \right) \quad (70)$$

Insgesamt erhalten wir also

$$\langle x \rangle(t) = \frac{1}{2} \left(L + \frac{2}{L} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \left[-\frac{2L^2}{\pi^2} + \frac{2L^2}{9\pi^2} \right] \right) \quad (71)$$

$$= \frac{L}{2} - \frac{16L}{9\pi^2} \cos((\omega_1 - \omega_2)t) \quad (72)$$

Nun müssen wir noch ω_1 und ω_2 aus der zeitabhängigen SG bestimmen:

$$j\hbar \frac{d}{dt} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (73)$$

Die Lösung hat die Form $\psi = Ae^{-jkx}e^{-j\omega t}$. Einsetzen ergibt:

$$j\hbar(-j\omega)\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}(-jk)^2\psi \quad (74)$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}k^2 \quad (75)$$

Einsetzen in die Lösung mit $k = \frac{n\pi}{L}$ liefert:

$$\langle x \rangle(t) = \frac{L}{2} - \frac{16L}{9\pi^2} \cos\left(\frac{3\hbar\pi^2}{2mL^2}t\right) \quad (76)$$

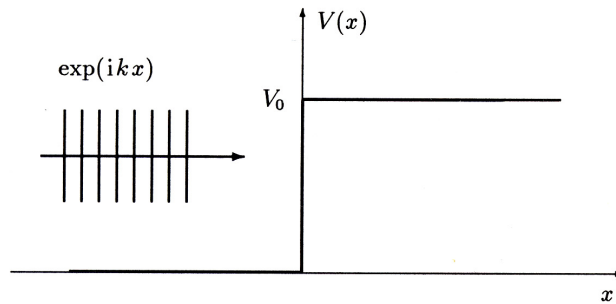
3. Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt (Ü)

Betrachten Sie die Potentialstufe

$$V_0(x) = \begin{cases} 0 & : x < 0 & \text{Bereich I} \\ V_0 & : x \geq 0 & \text{Bereich II} \end{cases}$$

Ein Elektron der Energie W_e laufe als Welle von links gegen diese Barriere. Betrachten Sie im Folgenden immer die beiden Fälle $W_e < V_0$ und $W_e > V_0$.

a) Skizzieren Sie das Potential.



b) Bestimmen Sie die Wellenzahl k des Elektrons in den Bereichen $x < 0$ und $x \geq 0$.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \quad (77)$$

Damit ergibt sich für die 1-dim-SG:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\psi(x) = W\psi(x) \quad (78)$$

Ansatz für eine ebene Welle, getrennt nach Potential-Gebieten I und II (da $k = k(W, V)$)

$$(I) \quad \psi(x) = Ae^{jkx} + Be^{-jkx} \quad \text{für } V(x) = 0 \quad (79)$$

$$(II) \quad \psi(x) = Ce^{j\kappa x} \quad \text{für } V(x) = V_0 \quad (80)$$

$$(I) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = W\psi \quad (81)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(Ae^{jkx} + Be^{-jkx}) = W(Ae^{jkx} + Be^{-jkx}) \quad (82)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = W \quad (83)$$

$$\Rightarrow k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mW} \quad (84)$$

$$(II) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\psi = W\psi \quad (85)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)Ce^{j\kappa x} = WCe^{j\kappa x} \quad (86)$$

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + V(x) = W \quad (87)$$

$$\Rightarrow \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(W - V_0)} \quad (88)$$

Im Bereich (II) muss zwischen $V_0 > W_e$ und $V_0 < W_e$ unterschieden werden:

$$(1) \quad V_0 < W_e \quad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(W - V_0)} \quad (89)$$

$$(2) \quad V_0 > W_e \quad \kappa = \frac{1}{\hbar}j\sqrt{2m(V_0 - W)} =: jq \quad (90)$$

c) Nehmen Sie eine von links einlaufende Welle $\psi_{\text{ein}}(x) = e^{jkx}$ an. Bestimmen Sie die Reflexions- und Transmissionsamplituden r und t in Abhängigkeit der Wellenzahlen.

Ansatz: $e^{jkx} + re^{-jkx} = te^{j\kappa x}$

Fall (1) $V_0 < W_e$:

$$\psi_I(x) = e^{jkx} + re^{-jkx} \quad \psi_{II}(x) = te^{j\kappa x} \quad (91)$$

Aus der Stetigkeit der Wellen an der Stelle $x = 0$ folgt:

$$(i) \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (92)$$

$$(ii) \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad (93)$$

$$(i) \quad 1 + r = t \quad (94)$$

$$(ii) \quad jk - jkr = j\kappa t \quad (95)$$

$$(i \rightarrow ii) \quad jk - jkr = j\kappa + j\kappa r \quad (96)$$

$$k - \kappa = r(k + \kappa) \quad (97)$$

$$r = \frac{k - \kappa}{k + \kappa} \quad (98)$$

$$(i) \quad t = 1 + r = 1 + \frac{k - \kappa}{k + \kappa} = \frac{2k}{k + \kappa} \quad (99)$$

Fall (2) $V_0 > W_e$:

$$\psi_I(x) = e^{jkx} + re^{-jkx} \quad \psi_{II}(x) = te^{j\kappa x} = te^{-qx} \quad (100)$$

Die gleichen Stetigkeitsbedingungen liefern in diesem Fall:

$$(i) \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (101)$$

$$(ii) \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad (102)$$

$$(i) \quad 1 + r = t \quad (103)$$

$$(ii) \quad jk - jkr = -qt \quad (104)$$

$$(i \rightarrow ii) \quad jk - jkr = -q - qr \quad (105)$$

$$jk + q = r(jk - q) \quad (106)$$

$$r = \frac{jk + q}{jk - q} \quad (107)$$

$$(i) \quad t = 1 + r = 1 + \frac{jk + q}{jk - q} = \frac{2jk}{jk - q} \quad (108)$$

- d) Durch $\vec{J} = \frac{\hbar}{2jm} (\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi)$ lässt sich eine Teilchenstromdichte definieren. Berechnen Sie diese für die einlaufenden, reflektierten und transmittierten Teilchen und überprüfen Sie deren Erhaltung.

Es gilt: $J = \frac{\hbar}{2jm}(\psi^*(\frac{d}{dx}\psi) - (\frac{d}{dx}\psi^*)\psi)$

$$J_0 = \frac{\hbar}{2jm} (e^{-jkx}(jke^{jkx}) - (-jke^{-jkx})e^{jkx}) \quad (109)$$

$$= \frac{\hbar}{2jm} (jk + jk) = \frac{\hbar k}{m} \quad (110)$$

$$J_r = \frac{\hbar}{2jm} (r^*e^{jkx}(-jkr e^{-jkx}) - (jkr^*e^{jkx})re^{-jkx}) \quad (111)$$

$$= \frac{\hbar}{2jm} (-jk|r|^2 - jk|r|^2) = -\frac{\hbar k}{m}|r|^2 \quad (112)$$

$$J_t = \frac{\hbar}{2jm} (t^*e^{-j\kappa x}(j\kappa t e^{j\kappa x}) - (-j\kappa t^*e^{-j\kappa x})te^{j\kappa x}) \quad (113)$$

$$= \frac{\hbar}{2jm} (j\kappa|t|^2 + j\kappa|t|^2) = \frac{\hbar\kappa}{m}|t|^2 \quad \text{für } V_0 < W_e \quad (114)$$

$$J_t = 0, \quad \text{da } \psi^* = \psi \quad \text{für } V_0 > W_e \quad (115)$$

Einsetzen in $J_0 + J_r = J_t$ zeigt, dass der Teilchen-Strom erhalten ist:

Fall (1) $V_0 < W_e$:

$$J_0 + J_r - J_t = \frac{\hbar k}{m} - \frac{\hbar k}{m}|r|^2 - \frac{\hbar\kappa}{m}|t|^2 \quad (116)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \left(k - k \left(\frac{k - \kappa}{k + \kappa} \right)^2 - \kappa \left(\frac{2k}{k + \kappa} \right)^2 \right) \quad (117)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{k(k + \kappa)^2 - k(k - \kappa)^2 - \kappa(2k)^2}{(k + \kappa)^2} \quad (118)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{k^3 + 2k^2\kappa + k\kappa^2 - k^3 + 2k^2\kappa - k\kappa^2 - 4k^2\kappa}{(k + \kappa)^2} = 0 \quad (119)$$

Fall (2) $V_0 > W_e$:

$$J_0 + J_r - J_t = \frac{\hbar k}{m} - \frac{\hbar k}{m}|r|^2 - 0 \quad (120)$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \left(1 - \left| \frac{jk + q}{jk - q} \right|^2 \right) = 0 \quad (121)$$

e) Vergleichen Sie die Ergebnisse mit einem „klassischen Elektron als Teilchen“

Ein „klassisches Elektron“ mit $W_e < V_0$ wird genauso wie auch das „Wellen-Elektron“ an der Barriere reflektiert. Es besteht aber ein entscheidender Unterschied: Das „Wellen-Elektron“ kann in die Barriere eindringen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nimmt dabei exponentiell mit der Eindringtiefe ab. Dies ist ein weiteres typisches Merkmal der Quantenmechanik. Quantenmechanische Teilchen können sich u.U. auch in klassisch verbotenen Bereichen aufhalten.

Ein „klassisches Elektron“ mit $W_e > V_0$ würde lediglich im Bereich des höheren Potentials langsamer werden. Reflexion würde klassisch aber nie auftreten. Quantenmechanisch wird jedoch ein Teil der Wellenfunktion, und damit auch ein Teil des Teilchenstroms reflektiert.

In beiden Fällen bildet sich quantenmechanisch aus der Überlagerung von einfallender und reflektierter Welle eine stehende Welle vor der Barriere aus, welche ebenfalls klassisch nicht zu erklären ist.

- f) Eine Elektronen-Welle mit der Energie 0,6 eV trifft eine unendlich dicke Potentialbarriere der Höhe 1,1 eV. Ist es wahrscheinlicher das Elektron im ersten Angstrom der Barriere zu finden oder weiter innerhalb der Barriere?

Als Ansatz für die von links einlaufende Welle wählt man:

$$\psi = te^{-qx} \quad (122)$$

Die Wellenzahl innerhalb der Barriere ergibt sich zu:

$$q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - W)}}{\hbar} = 3,62 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} \quad (123)$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron innerhalb des ersten Å (10^{-10} m) der Barriere zu finden (wir gehen von einer Barriere aus, die bei $x = 0$ beginnt und in positiver x -Richtung liegt) berechnen wir zu:

$$P_1 = \int_0^{x_0} |\psi|^2 dx = \int_0^{x_0} |t|^2 e^{-2qx} dx = |t|^2 \frac{1}{-2q} |e^{-2qx}|_0^{x_0} = \frac{|t|^2}{-2q} (e^{-2qx_0} - 1) \quad (124)$$

Und gleichermaßen für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Rest der Barriere:

$$P_{\text{Rest}} = \int_{x_0}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{x_0}^{\infty} |t|^2 e^{-2qx} dx = |t|^2 \frac{1}{-2q} |e^{-2qx}|_{x_0}^{\infty} = \frac{|t|^2}{-2q} (-e^{-2qx_0}) \quad (125)$$

Die einfachste Lösung des Problems erhalten wir, indem wir das Verhältnis der beiden Wahrscheinlichkeiten betrachten:

$$\frac{P_1}{P_{\text{Rest}}} = \frac{e^{-2qx_0} - 1}{-e^{-2qx_0}} = -1 + e^{+2qx_0} = 1,06 \quad (126)$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron im ersten Å der Barriere zu finden, ist also größer.

- g) Sei nun

$$V_1(x) = \begin{cases} 0 & : x < 0 & \text{Bereich I} \\ V_0 & : 0 \leq x \leq d & \text{Bereich II} \\ 0 & : d < x & \text{Bereich III} \end{cases}$$

Was ändert sich gegenüber dem vorhergehenden Fall? Stellen Sie mit Hilfe geeigneter Randbedingungen ein Gleichungssystem auf. (★)

Wir beschränken uns im folgenden auf den interessanteren Fall $W_e < V_0$.

Es besteht nun eine endliche Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron die Barriere durchtunneln kann. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons nimmt exponentiell mit der Eindringtiefe ab. D.h. aber, dass diese Wahrscheinlichkeit nie Null wird. Das Elektron kann damit das andere Ende der Barriere erreichen und

diese dort wieder verlassen.

Zur quantitativen Analyse setzt man wie folgt an:

$$\psi_{\text{I}}(x) = e^{jkx} + re^{-jkx} \quad (127)$$

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{-qx} + De^{qx} \quad (128)$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = te^{jkx} \quad (129)$$

Im klassisch verbotenen Bereich II könnte man analog auch $\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{-jkx} + De^{jkx}$ ansetzen, allerdings wissen wir aus den vorherigen Berechnungen, dass wir hier eine exponentiell abklingende Funktion mit $q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e(V - W)}$ erwarten können, wobei q reell ist.

Die Stetigkeitsbedingungen (Randbedingungen) lauten wie folgt:

$$(1) \quad \psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0) \quad (130)$$

$$(2) \quad \psi'_{\text{I}}(0) = \psi'_{\text{II}}(0) \quad (131)$$

$$(3) \quad \psi_{\text{II}}(d) = \psi_{\text{III}}(d) \quad (132)$$

$$(4) \quad \psi'_{\text{II}}(d) = \psi'_{\text{III}}(d) \quad (133)$$

Daraus ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$(1) \quad 1 + r = C + D \quad (134)$$

$$(2) \quad jk - jkr = -qC + qD \quad (135)$$

$$(3) \quad Ce^{-qd} + De^{qd} = te^{jkd} \quad (136)$$

$$(4) \quad -qCe^{-qd} + qDe^{qd} = jkte^{jkd} \quad (137)$$

Dieses Gleichungssystem ist analytisch lösbar. In der Praxis wird man derartige Systeme aber von algebraischen Programmen wie Mathematica oder Maple lösen lassen, da das Lösen auf dem Papier sehr zeitintensiv und fehleranfällig ist.

h) Wie verändert sich der Sachverhalt für $V_0 \rightarrow \infty$?

Die mittlere Eindringtiefe des Elektrons nimmt für größer werdendes V_0 ab, da gilt:

$$\psi = Ce^{-qx}, \quad q \propto \sqrt{V - W} \quad (138)$$

Im Falle von $V_0 \rightarrow \infty$ kann das Elektron gar nicht mehr in die Barriere eindringen.

4. Harmonischer Oszillator in 2D und 3D (Ü)

Für den zweidimensionalen harmonischen Oszillator sieht der Hamilton-Operator wie folgt aus:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2\hat{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2\hat{y}^2$$

mit den Ortskoordinaten x und y .

- a) Stellen Sie die stationäre Schrödingergleichung für das Problem auf.

Wie üblich lautet die stationäre Schrödingergleichung $\hat{H}\psi = W\psi$. Der Hamilton-Operator ist vorgegeben, die Wellenfunktion ist in diesem Fall zweidimensional, also $\psi(x, y)$. Somit folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \psi(x, y) + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 \psi(x, y) = W \psi(x, y) \quad (139)$$

- b) Machen Sie einen Produktansatz der Form $\psi(x, y) = f(x)g(y)$ und zeigen Sie, wie sich die Gleichung aus a) mit Hilfe dieses Ansatzes lösen lässt.

Mit dem Ansatz $\psi(x, y) = f(x)g(y)$ folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f(x)g(y) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 f(x)g(y) + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 f(x)g(y) = W f(x)g(y) \quad (140)$$

Im vorderen Teil stehen Ableitungen nach x , die nur auf $f(x)$ wirken, beziehungsweise nach y , die nur auf $g(y)$ wirken. Daher können wir die Gleichung umformen zu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} g(y) \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) - \frac{\hbar^2}{2m} f(x) \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 f(x)g(y) + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 f(x)g(y) = W f(x)g(y) \quad (141)$$

Nun können wir, analog zum dreidimensionalen Quantenpunkt, durch $f(x)g(y)$ dividieren und erhalten:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{f(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{g(y)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 = W \quad (142)$$

In dieser Gleichung ergibt die Addition der Terme auf der linken Seite eine Konstante. daher kann wieder eine Separation der Variablen durchgeführt werden. Die von x abhängigen Terme müssen, genau wie die von y abhängigen, jeweils konstant sein, sonst kann die Gleichung nicht für alle Orte (x, y) erfüllt werden. Wählen wir nun die (suggestiven) Namen W_x und W_y für die beiden Konstanten, können wir zwei getrennte Gleichungen für die Ortsvariablen aufschreiben.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 f(x) = W_x f(x) \quad (143)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 g(y) = W_y g(y) \quad (144)$$

Jede dieser Gleichungen ist eine zeitunabhängige Gleichung für einen eindimensionalen Oszillator, deren Lösungen wir bereits kennen.

- c) Wie sehen die Eigenenergien und Eigenfunktionen des zweidimensionalen Oszillators aus? Die Lösungen des eindimensionalen Problems finden Sie auf dem 2. Übungsblatt, Aufgabe 4.

Mit der Argumentation des Aufgabenteils b) folgt $W = W_x + W_y = \hbar\omega_x(n_x + 1/2) + \hbar\omega_y(n_y + 1/2)$ und für die Wellenfunktion:

$$\psi(x, y) = f(x)g(y) = \frac{c_{nx}c_{ny}}{\sqrt{b_x b_y}} H_{nx}\left(\frac{x}{b_x}\right) H_{ny}\left(\frac{y}{b_y}\right) e^{-\left(\frac{x^2}{2b_x^2} + \frac{y^2}{2b_y^2}\right)} \quad (145)$$

Wobei $b_x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}}$, $b_y = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_y}}$ und die c_n Normierungskonstanten sind.

- d) Nun sei $\omega_x = \omega_y$. Erläutern Sie den Begriff „Entartung von Energieniveaus“ am Beispiel des zweidimensionalen Oszillators.

In diesem Fall erhalten wir für die Eigenenergien $W = W_x + W_y = \hbar\omega(n_x + 1/2) + \hbar\omega(n_y + 1/2) = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$. Setzen wir $n_x = 1$ und $n_y = 2$, erhalten wir denselben Energieeigenwert wie für $n_x = 2$ und $n_y = 1$. Der Energieeigenwert ist folglich nicht mehr eindeutig einer Wellenfunktion zugeordnet, er ist entartet.

- e) Stellen Sie den Ausdruck für den Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators in drei Dimensionen auf. Wie lauten hier die Energie-Eigenwerte?

Wir erhalten:

$$\int e^{-x^2} dx \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 \hat{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2 \hat{y}^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 \hat{z}^2$$

Der dreidimensionale harmonische Oszillator lässt sich genauso wie der zweidimensionale separieren, heraus kommt $W = W_x + W_y + W_z = \hbar\omega_x(n_x + 1/2) + \hbar\omega_y(n_y + 1/2) + \hbar\omega_z(n_z + 1/2)$.