

Tunneleffekt und Schrödingergleichung in 3D

3. Übung Festkörperelektronik

Lichttechnisches Institut (LTI)

Sommersemester 2014

Nico Bolse, Jan Mescher

Terminübersicht

Tag/Monat	April	Mai	Juni	Juli
1		Tag der Arbeit		
2				
3	Karfreitag		Ausgabe T3	Ü5, Ausgabe Ü6/T6
4		Tut-Woche 1	Fronleichnam	
5			Brückentag	
6	Ostermontag			Tut-Woche 6
7		V4		
8		Ü2	Tut-Woche 3	
9				V12
10				Ü6, Ausgabe Ü7/T7
11			V8	
12			V9, Ausgabe Ü4/T4	
13	Beginn VLZ, Ausgabe Ü1	Ausgabe Ü3/T2		Tut-Woche 7
14		Christi Himmelfahrt		
15		Brückentag	Tut-Woche 4	
16	Ü1			V13
17				Ü7
18		Tut-Woche 2		
19			Ü4	
20				
21		V5		
22		Ü3		
23	V1			
24	V2, Ausgabe Ü2/T1			
25		Pfingstmontag	V10, IF	
26			V11, Ausgabe Ü5/T5	
27				
28		V6		
29		V7	Tut-Woche 5	
30	V3			
31				

Wochenende
Feiertag
Vorlesung
Übung
Tutorium
IF: Institutsführung
Brückentag

Ausgabe: Ü/T wird in ILIAS veröffentlicht

Stand: 24.04.2015

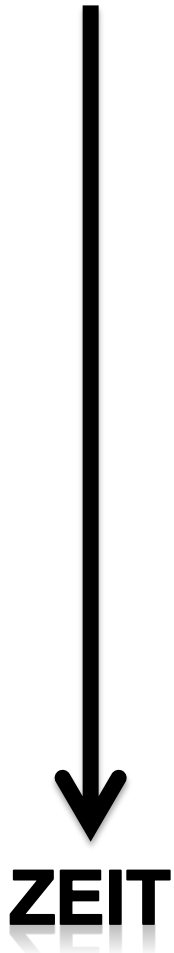
alle Donnerstagstermine finden von 11.30 - 13.00 Uhr im MTI-Hörsaal (Geb. 30.33) statt
alle Freitagstermine finden von 11.30 - 13.00 Uhr im NTI-Hörsaal (Geb. 30.10) statt

Organisatorisches: Tutorien

- Tutorien 7 und 8 (dienstags 8:00-9:30) werden ab sofort zusammengelegt und im selben Raum abgehalten
 - Raum 119 in Gebäude 30.34 (LTI)

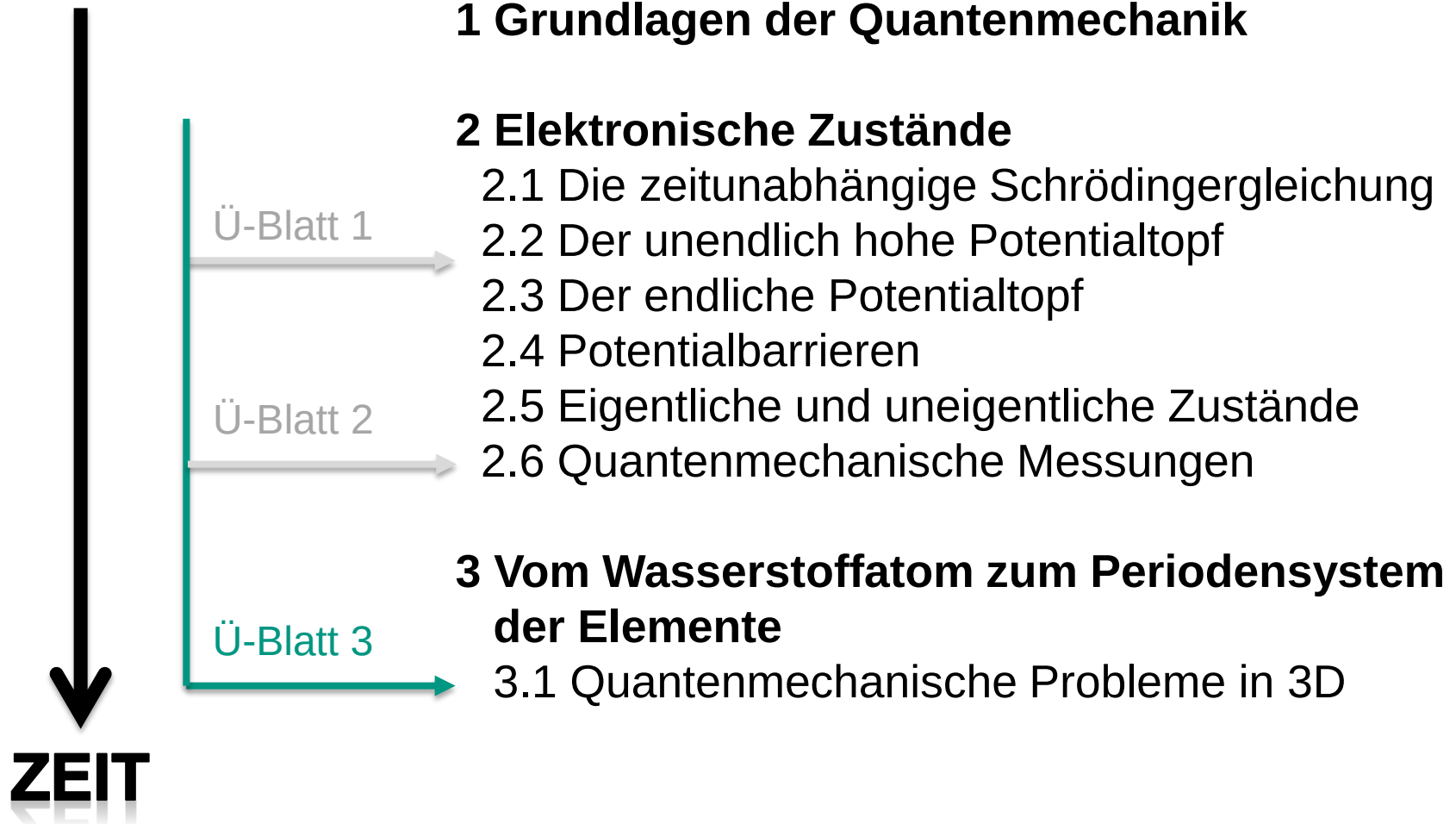
- Tutorien 14 und 15 (mittwochs 15:45-17:15) werden ab sofort zusammengelegt und im selben Raum abgehalten
 - Raum 119 in Gebäude 30.34(LTI)

Stand der Dinge



1. Grundlagen der Quantenphysik
2. Elektronische Zustände
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

Stand der Dinge



Wiederholung

■ Operatoren

■ Bekannte Operatoren:

$$\hat{x} = x$$

Ort

$$\hat{p} = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Impuls

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$$

Energie „Hamiltonian“

■ Erwartungswert eines Operators

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

Wiederholung

■ Normierung

■ Normierte Wellenfunktion

$$\psi_n(x) = \frac{\psi(x, t)}{\sqrt{\int \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx}}$$

■ Vereinfachter Erwartungswert

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi_n^*(x, t) \hat{A} \psi_n(x, t) dx$$

Wiederholung

- Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$\rho(x, t) = \psi^*(x, t)\psi(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

$$\int \rho_n(x, t) dx = \int \psi_n^*(x, t)\psi(x, t) dx = 1$$

- Ergibt ρ über Ort integriert eins, gilt: im betrachteten Raum muss das Teilchen existieren
- Eigentlicher Zustand

Wiederholung

■ Zeitabhängige Schrödingergleichung

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

■ Zeitunabhängige Schrödingergleichung

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

Wiederholung

■ Unendlicher Potentialtopf

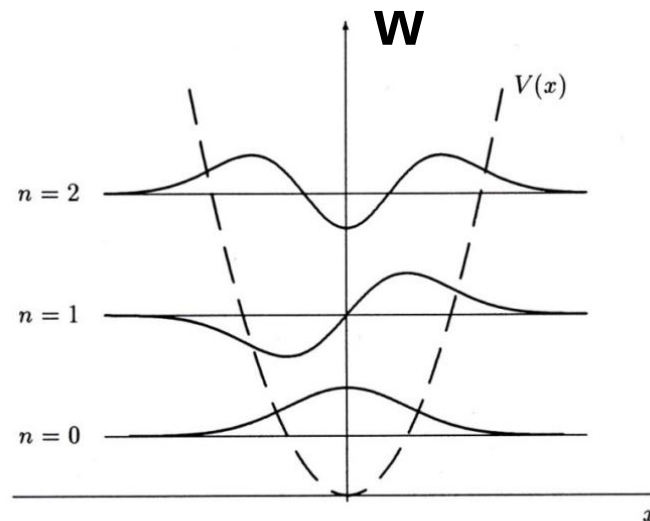
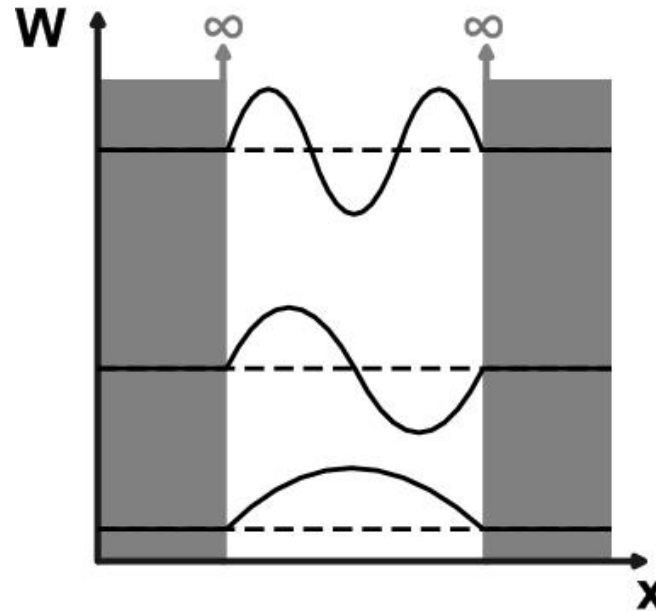
$$W_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2$$

$$W_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 > 0$$

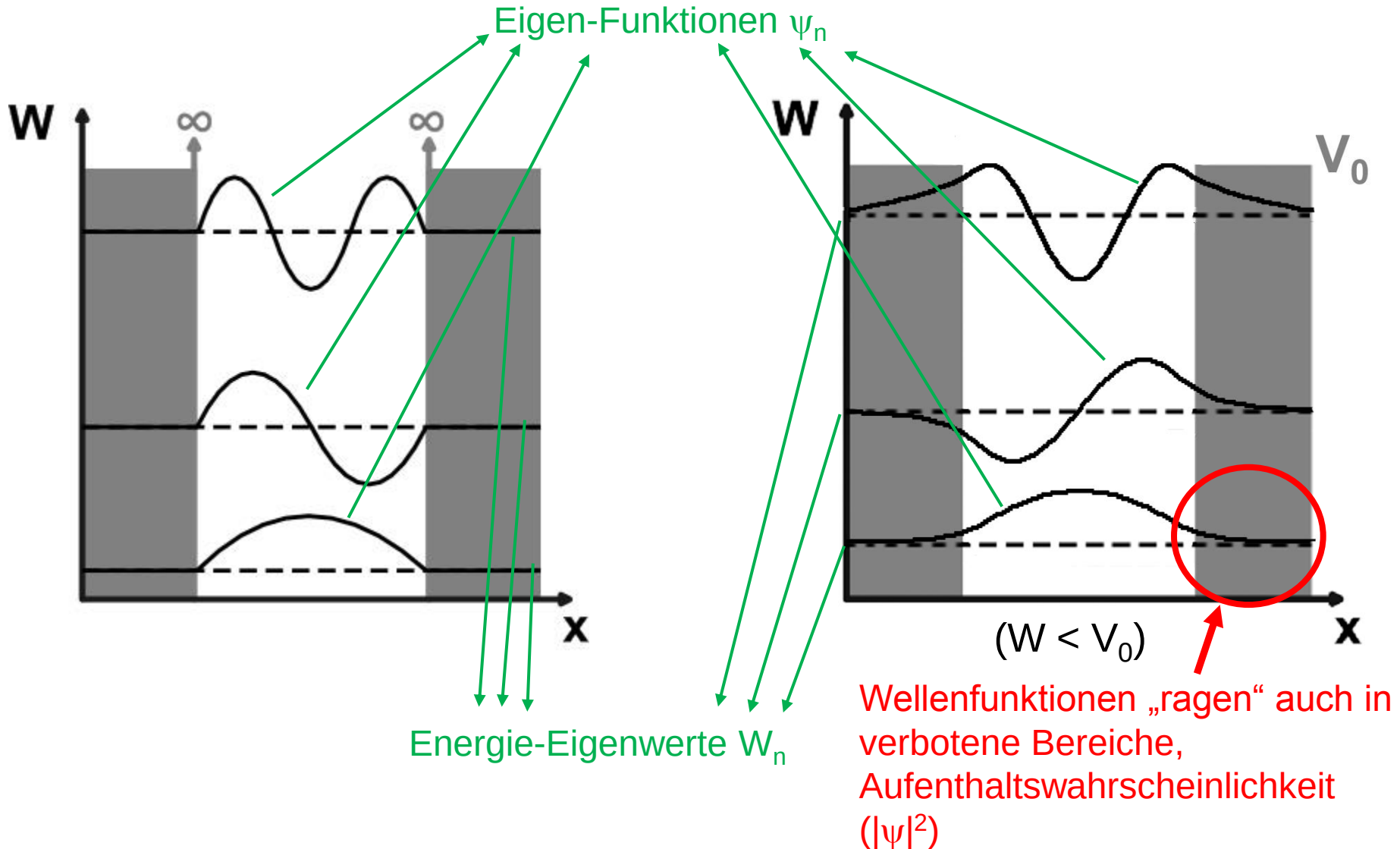
■ Harmonisches Potential

$$W_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$W_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega > 0$$



Wdh.: Endlicher und unendlicher Quantenpotentialtopf



A1 Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

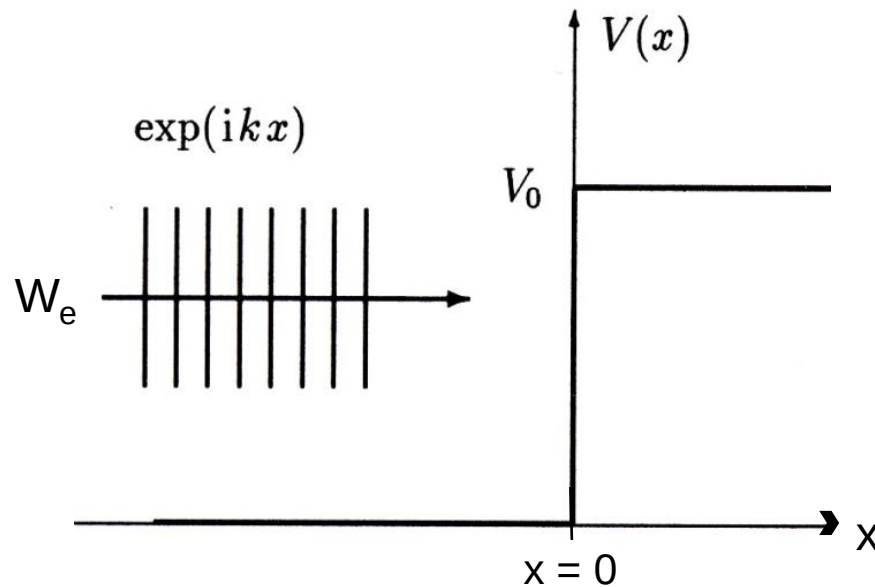
Betrachten Sie die Potentialstufe

$$V_0(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases}$$

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 $W_e > V_0$.

A1 a) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

Skizzieren Sie das Potential



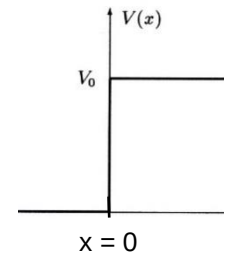
A1 b) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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

■ Ansatz mit ebenen Wellen:

$$(I) \quad \psi(x) = Ae^{jk_1x} + Be^{-jk_1x} \quad \text{für } V(x) = 0$$

$$(II) \quad \psi(x) = Ce^{jk_2x} \quad \text{für } V(x) = V_0$$



■ Aus SGL folgt:

$$(I) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = W \psi$$
$$\Rightarrow k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW}$$

$$(II) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi = W \psi$$
$$\Rightarrow k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(W - V_0)}$$

■ Fallunterscheidung im Bereich (II):

$$(II) \quad (1) \quad V_0 < W_e \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(W - V_0)}$$
$$(2) \quad V_0 > W_e \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} j \sqrt{2m(V_0 - W)} =: jq$$

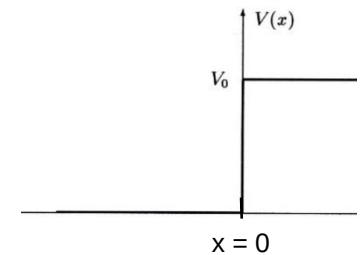
A1 c) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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.

■ Fall (1) $V_0 < W_e$:

■ Ansatz:

$$\psi_I(x) = e^{jk_1x} + re^{-jk_1x} \text{ und } \psi_{II}(x) = te^{jk_2x}$$



Stetigkeit der Welle in $x=0$:

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

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



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

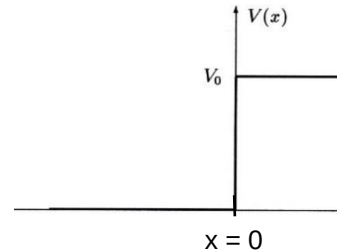
$$(ii) \quad jk_1 - jk_1r = jk_2t$$



$$\begin{aligned} r &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ t &= 1 + r = 1 + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{aligned}$$

A1 c) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

■ Fall (2) $V_0 > W_e$:



■ Ansatz: $\psi_I(x) = e^{jk_1x} + re^{-jk_1x}$ und $\psi_{II}(x) = te^{jk_2x}$

mit $k_2 = jq$ aus Teilaufgabe b) folgt $\psi_{II}(x) = te^{-qx}$

Stetigkeit der Welle in $x=0$:

$$\begin{array}{ll} (i) & \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \\ (ii) & \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \end{array} \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} r = \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} \\ t = 1 + r = 1 + \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} = \frac{2jk_1}{jk_1 - q} \end{array}$$

A1 d) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

Durch $\vec{j} = \frac{\hbar}{2jm} (\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi)$ lässt sich eine Teilchenstromdichte definieren. Obwohl in der Aufgabenstellung nicht danach gefragt wurde, betrachten wir zunächst die quantenmechanische Kontinuitätsgleichung etwas genauer.

- Ansatz: Kontinuitätsgleichung (E-Dynamik) – Erhaltungssatz für elektrische Ladung

Ladungsdichte

Stromdichte

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

- Teilchenanzahl: Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \psi^* \psi$ statt Ladungsdichte und $\vec{j}$ aus Aufgabenstellung

$$\frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} + \operatorname{div} \frac{\hbar}{2jm} (\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi) = 0$$

Keine Teilchen werden erzeugt oder vernichtet

A1 d) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

- Aus Gründen der Übersichtlichkeit schreiben wir ψ statt $\psi(x, t)$ und V statt $V(x, t)$

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

- 1. Schritt: SGL für ψ mit ψ^* sowie SGL adjungieren und mit ψ multiplizieren

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{j\hbar} \hat{H}\psi \quad (1)$$

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{-1}{j\hbar} \hat{H}^* \psi^* \quad (2)$$

$$\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{j\hbar} \psi^* \hat{H} \psi \quad (1')$$

$$\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{-1}{j\hbar} \psi \hat{H}^* \psi^* \quad (2')$$

- 2. Schritt: $(1') + (2')$

$$\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{1}{j\hbar} (\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*)$$

- 3. Schritt: Produktregel

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{j}{\hbar} (\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*) = 0$$

A1 d) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

- 4. Schritt: $\hat{H}$ und $\hat{H}^*$ einsetzen

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \frac{j}{\hbar}(\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*) = 0$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V = \hat{H}^*$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2jm}(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = 0$$

- 5. Schritt: erweitern und verallgemeinerte Produktregel anwenden

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2jm}(\psi^* \nabla^2 \psi + \nabla \psi \nabla \psi^* - \nabla \psi \nabla \psi^* - \psi \nabla^2 \psi^*) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2jm} \nabla(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0$$

Teilchenstromdichte, besser
Wahrscheinlichkeitsstromdichte

„QM-Kontinuitätsgleichung“

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \operatorname{div} \frac{\hbar}{2jm}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0$$

A1 d) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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 Einhaltung.

Ansatz: $\psi_0(x) = e^{jk_1x}$, $\psi_r(x) = re^{-jk_1x}$, $\psi_t(x) = te^{jk_2x}$

$$\begin{aligned} J_0 &= \frac{\hbar}{2jm} (e^{-jk_1x} (jk_1 e^{jk_1x}) - (-jk_1 e^{-jk_1x}) e^{jk_1x}) \\ &= \frac{\hbar}{2jm} (jk_1 + jk_1) = \frac{\hbar k_1}{m} \end{aligned}$$

$$J_r = -\frac{\hbar k_1}{m} |r|^2$$

$$J_t = \frac{\hbar k_2}{m} |t|^2 \quad \text{für} \quad V_0 < W_e$$

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

A1 d) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

■ Einsetzen in $J_0 + J_r = J_t$ zeigt, dass der Teilchenstrom erhalten ist:

■ Fall (1) $V_0 < W_e$:

$$\begin{aligned} J_0 + J_r - J_t &= \frac{\hbar k_1}{m} - \frac{\hbar k_1}{m} |r|^2 - \frac{\hbar k_2}{m} |t|^2 \\ &= \frac{\hbar}{m} \left(k_1 - k_1 \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 - k_2 \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 \right) = 0 \end{aligned}$$

■ Fall (2) $V_0 > W_e$:

$$\begin{aligned} J_0 + J_r - J_t &= \frac{\hbar k_1}{m} - \frac{\hbar k_1}{m} |r|^2 - 0 \\ &= \frac{\hbar k_1}{m} \left(1 - \left| \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} \right|^2 \right) = 0 \end{aligned}$$

A1 e) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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

Quantenmechanisch

Klassisch

Reflexion an Potentialstufe

Reflexion an Potentialstufe

kann in Potentialstufe eindringen
(Aufenthaltswahrscheinlichkeit nimmt
exponentiell mit Eindringtiefe ab)

kann nicht in Potentialstufe eindringen

auch oberhalb der Potentialstufe Reflexion

oberhalb der Potentialstufe keine Reflexion,
Teilchen würde durch das höhere Potential
nur langsamer werden

Ausbildung einer stehenden Welle vor der
Barriere aufgrund der Reflexion, auch wenn
 $V_0 < W$

Klassisch nicht erklärbar, wenn $V_0 < W$

A1 f) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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

■ Ansatz: $\psi = te^{-qx}$ mit $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - W)}}{\hbar} = 3,62 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$

■ Wahrscheinlichkeiten

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

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

→ $\frac{P_1}{P_{Rest}} = \frac{e^{-2qx_0} - 1}{-e^{-2qx_0}} = -1 + e^{+2qx_0} = 1,06$

A1 g) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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.

■ Ansatz für $V_0 > W_e$:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= e^{jkx} + re^{-jkx} \\ \psi_{\text{II}}(x) &= Ce^{-qx} + De^{qx} \\ \psi_{\text{III}}(x) &= te^{jkx} \end{aligned}$$

■ Stetigkeitsbedingungen:

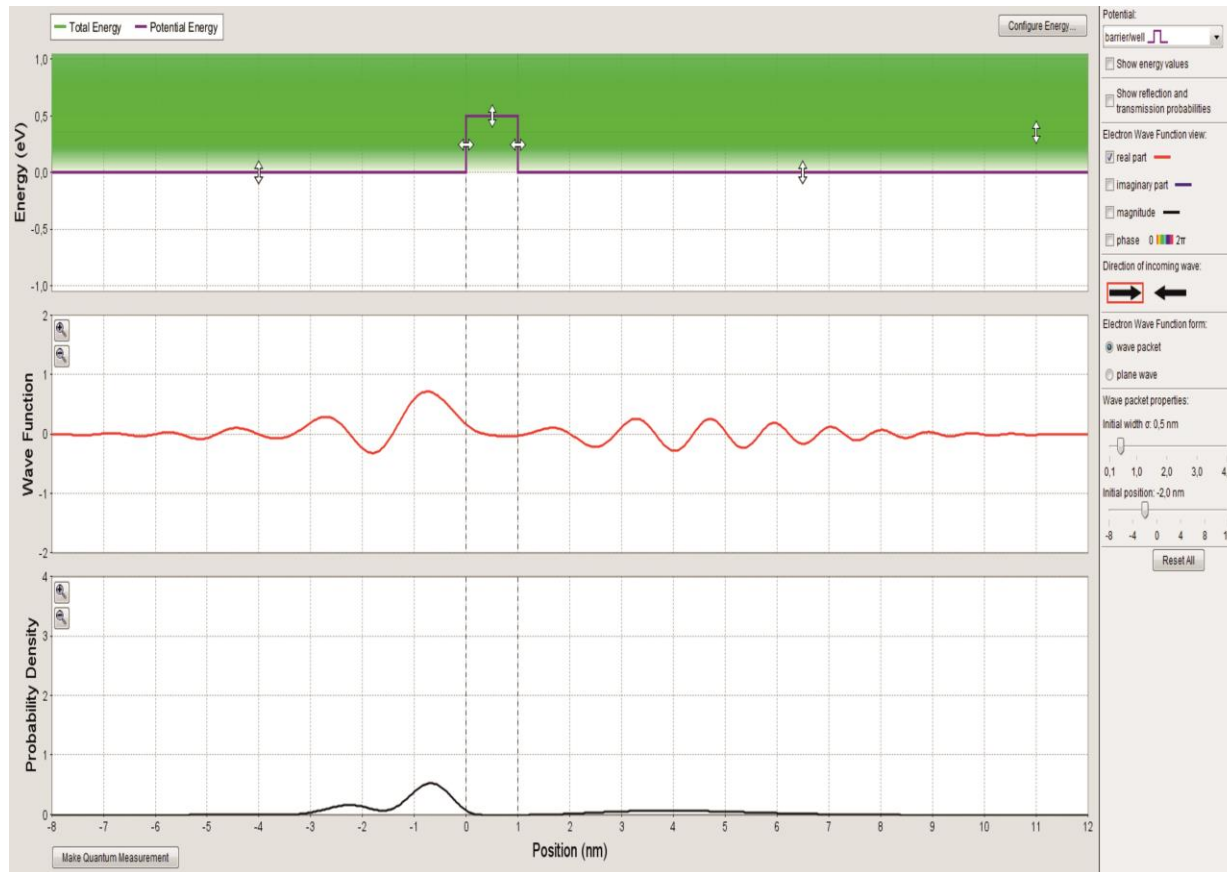
$$\begin{aligned} (1) \quad \psi_{\text{I}}(0) &= \psi_{\text{II}}(0) \\ (2) \quad \psi'_{\text{I}}(0) &= \psi'_{\text{II}}(0) \\ (3) \quad \psi_{\text{II}}(d) &= \psi_{\text{III}}(d) \\ (4) \quad \psi'_{\text{II}}(d) &= \psi'_{\text{III}}(d) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} (1) \quad 1 + r &= C + D \\ (2) \quad jk - jkr &= -qC + qD \\ (3) \quad Ce^{-qd} + De^{qd} &= te^{jkd} \\ (4) \quad -qCe^{-qd} + qDe^{qd} &= jkte^{jkd} \end{aligned}$$

A1 g) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

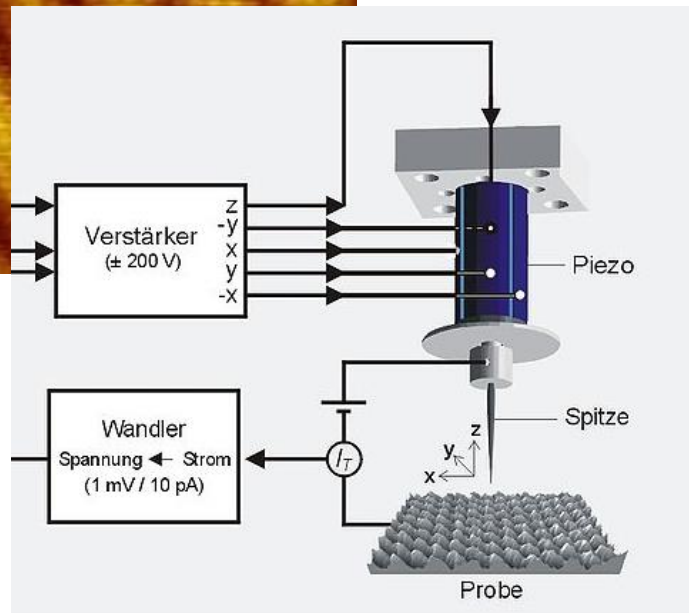
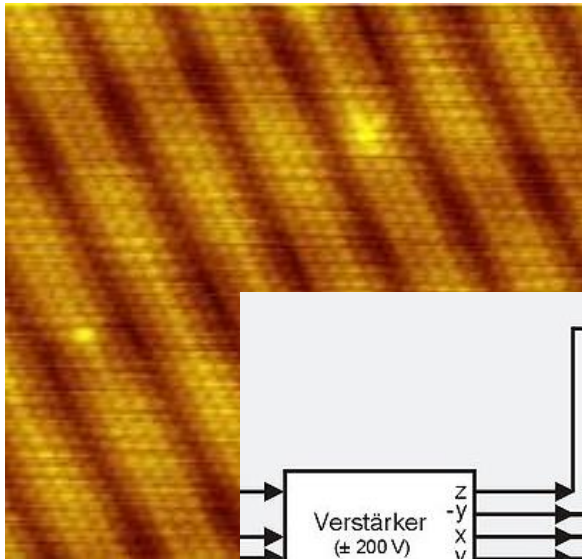
- Simulation zur Veranschaulichung
- <http://phet.colorado.edu/en/simulation/quantum-tunneling>



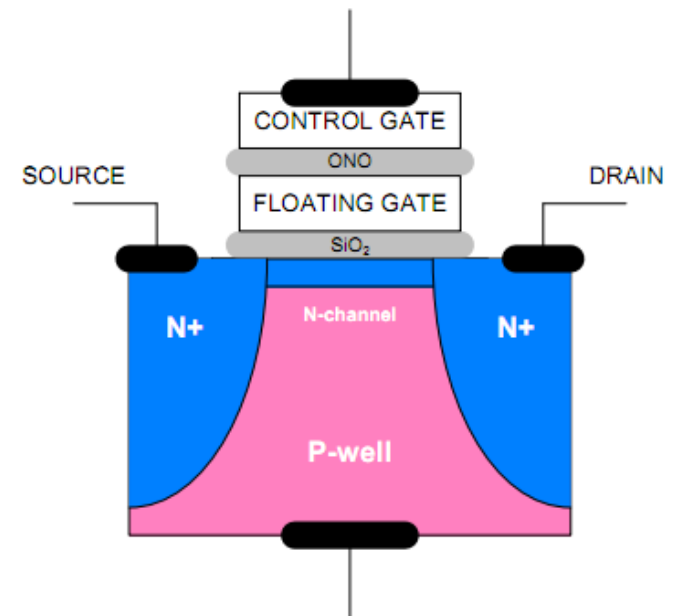
A1 g) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

■ Anwendungen des Tunneleffekts

■ Rastertunnelmikroskop



■ Flash-Speicher



A2 a) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

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 .

Stellen Sie die stationäre Schrödingergleichung für das Problem auf.

■ Stationäre Schrödingergleichung: $\hat{H}\psi = W\psi$

■ Impulsoperator:

Ortsoperator:

$$\hat{p}_x = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_y = -j\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{y} = y$$

■ Es folgt:

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

A2 b) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

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.

- Ansatz in SGL einsetzen:

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

- Klammer auflösen:

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

- Durch $f(x)g(y)$ teilen:

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

A2 b) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

■ Separation der Variablen:

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

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



Problem auf den 1D-Oszillator zurückgeführt → aus Ü2 bekannt.

A2 c) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

Wie sehen die Eigenenergien und Eigenfunktionen des zweidimensionalen Oszillators aus?

- Für den 1D-Oszillator aus Übung 2 galt:

$$W_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

- Für den 2D-Oszillator galt die Zurückführung auf zwei 1D-Oszillatoren:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 f(x) &= W_x f(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 g(y) &= W_y g(y) \end{aligned}$$

- Überlagerung der Eigenenergien aus den Teillösungen:

$$\rightarrow W = W_x + W_y = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right)$$

A2 c) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

■ Anmerkungen zum Separationsansatz

- Stationäre Schrödingergleichung: $\hat{H}\psi(x, y) = W\psi(x, y)$

W_i sind die Eigenwerte zu den Eigenfunktionen ψ_i

- Allgemeines Vorgehen:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi(x, y) &= \left(\hat{H}_x + \hat{H}_y\right) \psi_x \psi_y \\ &= \hat{H}_x \psi_x \psi_y + \hat{H}_y \psi_x \psi_y \\ &= \psi_y \left(\hat{H}_x \psi_x\right) + \psi_x \left(\hat{H}_y \psi_y\right) \\ &= \psi_y (W_x \psi_x) + \psi_x (W_y \psi_y) \\ &= (W_x + W_y) \psi_x \psi_y \\ &= W \psi_x \psi_y\end{aligned}$$

A2 c) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

- Berechnung der Eigenfunktionen:
- Erinnerung 1D harmonischer Oszillator: Hermite'sche Polynome

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

- Ansatz:

$\psi(x, y) = f(x)g(y)$ mit $f(x)$ und $g(y)$ als Lösungen des 1D-Oszillators

- In 2D folgt dann:

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

mit

$$b_x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}}, \quad b_y = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_y}}$$

A2 d) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

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

- $W_{n_x, n_y} = W_{n_x} + W_{n_y} = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$
- Beispiel Entartung:
 - $W_{1,2} = W_1 + W_2 = \hbar\omega(1 + 2 + 1) = 4\hbar\omega \rightarrow$ Eigenfunktion $\psi_{1,2}(x, y)$
 - $W_{2,1} = W_2 + W_1 = \hbar\omega(2 + 1 + 1) = 4\hbar\omega \rightarrow$ Eigenfunktion $\psi_{2,1}(x, y)$
- Der Energieeigenwert $4\hbar\omega$ kann nicht mehr eindeutig einer Wellenfunktion zugeordnet werden

A2 e) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

Stellen Sie den Ausdruck für den Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators in drei Dimensionen auf. Wie lauten hier die Energieeigenwerte?

■ Erinnerung 1D:
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_x^2\hat{x}^2$$

$$W = W_x = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right)$$

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

$$W = W_x + W_y = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right)$$

■ Lösung 3D:

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

$$W = W_x + W_y + W_z = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2} \right)$$

Zusammenfassende Fragen

- Wie wird ein Elektron an einer Potentialstufe reflektiert und transmittiert?
- Was ist der Tunneleffekt, wie löse ich quantenmechanische Probleme zum Tunneleffekt und in welchen Anwendungen wird der Tunneleffekt ausgenutzt?
- Wie kann ich quantenmechanische 2D- und 3D-Probleme auf einfache 1D-Probleme übertragen?
- Wie wende ich den Separationsansatz an?
- Was ist ein harmonischer Oszillator (klassisch & quantenmechanisch)?
- Weitere Lernziele werden in den Tutorien vermittelt

Ankündigungen

■ Tutorien zur 3. Übung: 8. – 12. Juni 2015

■ Lösungen zur 3. Übung: 22. Mai 2015

■ Nächste Übung (Ü4): 19. Juni 2015