

Lichttechnisches Institut

Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

M. Sc. Manuel Koppitz

M. Sc. Noah Strobel

Engesserstraße 13

76131 Karlsruhe

Festkörperelektronik

Lösung zum 3. Übungsblatt

Besprechung: 03. Juni 2016

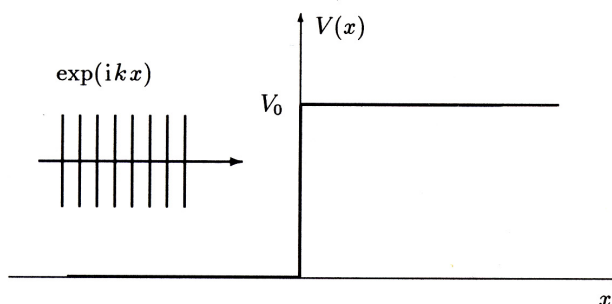
1. Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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 $x \geq 0$.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \quad (1)$$

Damit ergibt sich für die 1-dim-SG:

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

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

$$k(W, V))$$

$$(I) \quad \psi(x) = Ae^{jk_1x} + Be^{-jk_1x} \quad \text{für } V(x) = 0 \quad (3)$$

$$(II) \quad \psi(x) = Ce^{jk_2x} \quad \text{für } V(x) = V_0 \quad (4)$$

$$(I) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = W\psi \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (Ae^{jk_1x} + Be^{-jk_1x}) = W (Ae^{jk_1x} + Be^{-jk_1x}) \quad (6)$$

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = W \quad (7)$$

$$\Rightarrow k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW} \quad (8)$$

$$(II) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi = W\psi \quad (9)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) Ce^{jk_2x} = WCe^{jk_2x} \quad (10)$$

$$\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V(x) = W \quad (11)$$

$$\Rightarrow k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(W - V_0)} \quad (12)$$

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

$$(1) \quad V_0 < W_e \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(W - V_0)} \quad (13)$$

$$(2) \quad V_0 > W_e \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} j \sqrt{2m(V_0 - W)} =: jq \quad (14)$$

- 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: $e^{jk_1x} + re^{-jk_1x} = te^{jk_2x}$

Fall (1) $V_0 < W_e$:

$$\psi_I(x) = e^{jk_1x} + re^{-jk_1x} \quad \psi_{II}(x) = te^{jk_2x} \quad (15)$$

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

$$(i) \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (16)$$

$$(ii) \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad (17)$$

$$(i) \quad 1 + r = t \quad (18)$$

$$(ii) \quad jk_1 - jk_1r = jk_2t \quad (19)$$

$$(i \rightarrow ii) \quad jk_1 - jk_1r = jk_2 + jk_2r \quad (20)$$

$$k_1 - k_2 = r(k_1 + k_2) \quad (21)$$

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad (22)$$

$$(i) \quad t = 1 + r = 1 + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (23)$$

Fall (2) $V_0 > W_e$:

$$\psi_I(x) = e^{jk_1x} + re^{-jk_1x} \quad \psi_{II}(x) = te^{jk_2x} = te^{-qx} \quad (24)$$

Die gleichen Stetigkeitsbedingungen liefern in diesem Fall:

$$(i) \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (25)$$

$$(ii) \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad (26)$$

$$(i) \quad 1 + r = t \quad (27)$$

$$(ii) \quad jk_1 - jk_1r = -qt \quad (28)$$

$$(i \rightarrow ii) \quad jk_1 - jk_1r = -q - qr \quad (29)$$

$$jk_1 + q = r(jk_1 - q) \quad (30)$$

$$r = \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} \quad (31)$$

$$(i) \quad t = 1 + r = 1 + \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} = \frac{2jk_1}{jk_1 - q} \quad (32)$$

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

$$J_0 = \frac{\hbar}{2jm} (e^{-jk_1x}(jk_1e^{jk_1x}) - (-jk_1e^{-jk_1x})e^{jk_1x}) \quad (33)$$

$$= \frac{\hbar}{2jm} (jk_1 + jk_1) = \frac{\hbar k_1}{m} \quad (34)$$

$$J_r = \frac{\hbar}{2jm} (r^*e^{jk_1x}(-jk_1re^{-jk_1x}) - (jk_1r^*e^{jk_1x})re^{-jk_1x}) \quad (35)$$

$$= \frac{\hbar}{2jm} (-jk_1|r|^2 - jk_1|r|^2) = -\frac{\hbar k_1}{m}|r|^2 \quad (36)$$

$$J_t = \frac{\hbar}{2jm} (t^*e^{-jk_2x}(jk_2te^{jk_2x}) - (-jk_2t^*e^{-jk_2x})te^{jk_2x}) \quad (37)$$

$$= \frac{\hbar}{2jm} (jk_2|t|^2 + jk_2|t|^2) = \frac{\hbar k_2}{m}|t|^2 \quad \text{für } V_0 < W_e \quad (38)$$

$$J_t = 0, \quad \text{da } \psi^* = \psi \quad \text{für } V_0 > W_e \quad (39)$$

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

Fall (1) $V_0 < W_e$:

$$J_0 + J_r - J_t = \frac{\hbar k_1}{m} - \frac{\hbar k_1}{m}|r|^2 - \frac{\hbar k_2}{m}|t|^2 \quad (40)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \left(k_1 - k_1 \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 - k_2 \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 \right) \quad (41)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{k_1(k_1 + k_2)^2 - k_1(k_1 - k_2)^2 - k_2(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (42)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{k_1^3 + 2k_1^2k_2 + k_1k_2^2 - k_1^3 + 2k_1^2k_2 - k_1k_2^2 - 4k_1^2k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 0 \quad (43)$$

Fall (2) $V_0 > W_e$:

$$J_0 + J_r - J_t = \frac{\hbar k_1}{m} - \frac{\hbar k_1}{m} |r|^2 = 0 \quad (44)$$

$$= \frac{\hbar k_1}{m} \left(1 - \left| \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} \right|^2 \right) = 0 \quad (45)$$

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:

$$\psi = te^{-qx} \quad (46)$$

Die Wellenzahl innerhalb der Barriere ergibt sich zu:

$$q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - W)}}{\hbar} = 3,62 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} \quad (47)$$

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:

$$P_1 = \int_0^{x_0} |\psi|^2 dx = \int_0^{x_0} |t|^2 e^{-2qx} dx = |t|^2 \frac{1}{-2q} |e^{-2qx}|_0^{x_0} = \frac{|t|^2}{-2q} (e^{-2qx_0} - 1) \quad (48)$$

Und gleichermaßen für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Rest der Barriere:

$$P_{\text{Rest}} = \int_{x_0}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{x_0}^{\infty} |t|^2 e^{-2qx} dx = |t|^2 \frac{1}{-2q} |e^{-2qx}|_{x_0}^{\infty} = \frac{|t|^2}{-2q} (-e^{-2qx_0}) \quad (49)$$

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

$$\frac{P_1}{P_{\text{Rest}}} = \frac{e^{-2qx_0} - 1}{-e^{-2qx_0}} = -1 + e^{+2qx_0} = 1,06 \quad (50)$$

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:

$$\psi_{\text{I}}(x) = e^{jkx} + re^{-jkx} \quad (51)$$

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{-qx} + De^{qx} \quad (52)$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = te^{jkx} \quad (53)$$

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:

$$(1) \quad \psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0) \quad (54)$$

$$(2) \quad \psi'_{\text{I}}(0) = \psi'_{\text{II}}(0) \quad (55)$$

$$(3) \quad \psi_{\text{II}}(d) = \psi_{\text{III}}(d) \quad (56)$$

$$(4) \quad \psi'_{\text{II}}(d) = \psi'_{\text{III}}(d) \quad (57)$$

Daraus ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$(1) \quad 1 + r = C + D \quad (58)$$

$$(2) \quad jk - jkr = -qC + qD \quad (59)$$

$$(3) \quad Ce^{-qd} + De^{qd} = te^{jkd} \quad (60)$$

$$(4) \quad -qCe^{-qd} + qDe^{qd} = jkte^{jkd} \quad (61)$$

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:

$$\psi = Ce^{-qx}, \quad q \propto \sqrt{V - W} \quad (62)$$

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

2. 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 .

- 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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 \psi(x, y) + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 \psi(x, y) = W\psi(x, y) \quad (63)$$

- 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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f(x)g(y) + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 f(x)g(y) + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 f(x)g(y) = Wf(x)g(y) \quad (64)$$

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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} g(y) \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) - \frac{\hbar^2}{2m} f(x) \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 f(x)g(y) + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 f(x)g(y) = Wf(x)g(y) \quad (65)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{f(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{g(y)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 = W \quad (66)$$

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.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 f(x) = W_x f(x) \quad (67)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} g(y) + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 g(y) = W_y g(y) \quad (68)$$

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 2.

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:

$$\psi(x, y) = f(x)g(y) = \frac{c_{nx}c_{ny}}{\sqrt{b_x b_y}} H_{nx}\left(\frac{x}{b_x}\right) H_{ny}\left(\frac{y}{b_y}\right) e^{-\left(\frac{x^2}{2b_x^2} + \frac{y^2}{2b_y^2}\right)} \quad (69)$$

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:

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

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