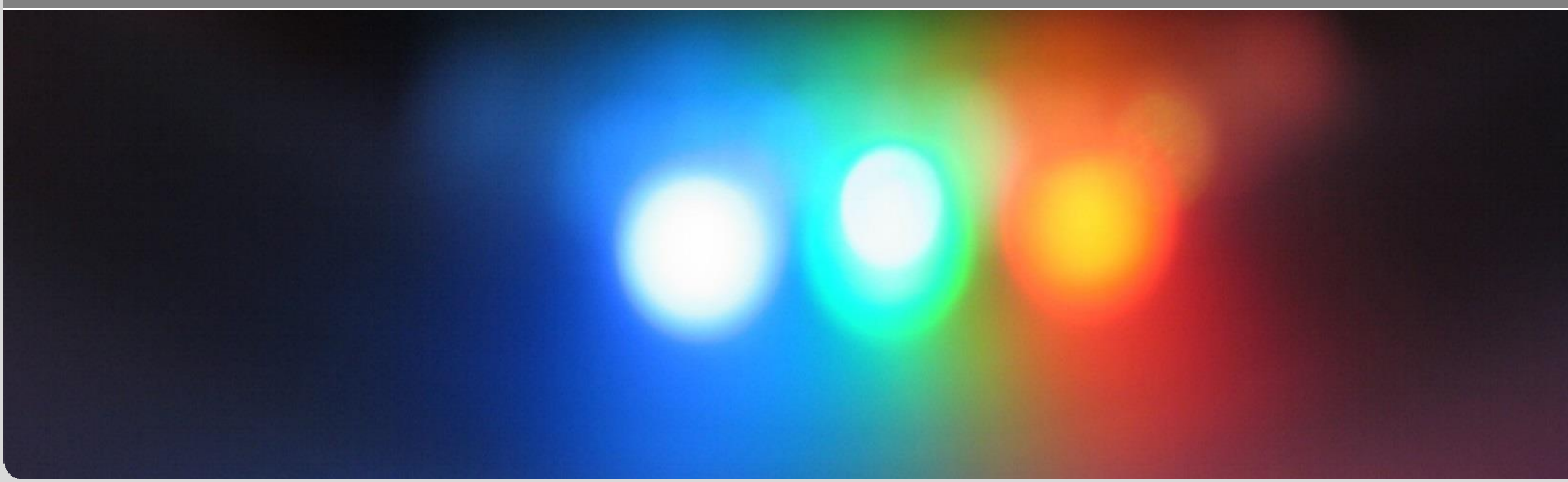
Tunneleffekt und Schrödingergleichung in 3D

4. Übung Optik und Festkörperelektronik

Lichttechnisches Institut (LTI)

Sommersemester 2020 Benjamin Fritz, Henning Mescher



Terminübersicht

Tag/Monat	April	Mai	Juni	Juli
1		1. Mai Feiertag	Pfingstmontag	
2			V11 FE (8)	V17 FE (14)
3				Ü8 FE (7), Ausgabe T7
4			V12 FE (9)	
5		V4 FE (1)	U5 FE (4), Ausgabe T3	
6				Tut 6
7		V5 FE (2), Ausgabe Ü2		V18 FE (15)
8				
9			V13 FE (10)	V19 FE (16), (Institutsführung)
10			Ausgabe Ü6/T4	Ausgabe Ü9/T8
11		Tut 1	Fronleichnam	
12		V6 FE (3), Ausgabe Ü3	Brückentag	
13				Tut 7
14		Ü2 FE (1)		V20 FE (17)
15		V7 FE (4), Ausgabe T2	Tut 3	
16			V14 FE (11)	
17				Ü9 FE (8), Ausgabe Ü10
18				
19		Ü3 FE (2)	Ü6 FE (5), Ausgabe Ü7/T5	
20	VL-Beginn	Ausgabe Ü4		Tut 8
21	V1 Optik (1), Ausgabe Ü1	Christi Himmelfahrt		V21 FE (18)
22		V8 FE (5)	Tut 4	
23	V2 Optik (2)		V15 FE (12)	V22 FE (19)
24				Ü10 FE (9), VL-Ende
25		Tut 2		
26		V9 FE (6)	Ü7 FE (6), Ausgabe Ü8/T6	
27				
28	V3 Optik (3)	V10 FE (7)		
29	Deadline Tut.-Anmeldung	Ü4 FE (3), Ausgabe Ü5	Tut 5	
30	U1 Optik, Ausgabe T1		V16 FE (13)	
31		Pfingsten		

Wochenende
Feiertag
Vorlesung
Übung
Tutorium
Brückentag
Ausgabe:
Ü/T wird in ILIAS veröffentlicht

Stand:04.05.2020

Dienstagstermine: 11:30 - 13:00, 30.46 Chemie, Neuer Hörsaal
Donnerstagstermine: 11:30 - 13:00, 30.46 Chemie, Neuer Hörsaal
Freitagstermine: 11:30 - 13:00, 11.40 Johann-Gottfried-Tulla-Hörsaal

Organisatorisches

- 5. Übung am Freitag den 05.06.20

Tutorien

Zeit	Montag	Dienstag	Mittwoch	Donnerstag	Freitag
08:00-09:30		Tut 4, 30.10 IPQ Raum 3.42 Sitzplätze: 21 Tut 3, 30.34 R119 Sitzplätze: 22	Tut 9: 30.33 SR ITE Sitzplätze: 21	Tut 12, 30.10 IPQ Raum 3.42 Sitzplätze: 21	Tut 15: 30.36 IEH Raum 11 Sitzplätze: 21 Tut 16, 30.34 R119 Sitzplätze: 22
09:45-11:15		Tut 5: 30.36 IEH Raum 11 Sitzplätze: 21 Tut 6, 30.34 R119 Sitzplätze: 22			
11:30-13:00	Tut 1, 30.36 IEH Raum 11 Sitzplätze: 21 Tut 2, 30.34 R119 Sitzplätze: 22	**Vorlesung/Übung**		**Vorlesung/Übung**	**Vorlesung/Übung**
14:00-15:30		Tut 7: 30.33 SR ITE Sitzplätze: 21 Tut 8, 30.34 R119 Sitzplätze: 22	Tut 10: 30.36 IEH Raum 11 Sitzplätze: 21 Tut 11, 30.34 R119 Sitzplätze: 22		
15:45-17:15				Tut 13: 30.33 SR ITE Sitzplätze: 21 Tut 14, 30.34 R119 Sitzplätze: 22	Tut 17: 30.36 IEH Raum 11 Sitzplätze: 21 Tut 18, 30.34 R119 Sitzplätze: 22

Tutoriumswochen:

T1: 11. - 15. Mai, T2: 25. - 29. Mai, T3: 15. - 19. Juni, T4: 22. - 26. Juni, T5: 29. Juni - 3. Juli, T6: 6. - 10. Juli, T7: 13. - 17. Juli, T8: 20. - 24. Juli

Stand der Dinge

ZEIT

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

Ü-Blatt 2

1 Grundlagen der Quantenmechanik

Ü-Blatt 3

2 Elektronische Zustände

2.1 Die zeitunabhängige Schrödingergleichung
2.2 Der unendlich hohe Potentialtopf
2.3 Der endliche Potentialtopf
2.4 Potentialbarrieren
2.5 Eigentliche und uneigentliche Zustände
2.6 Quantenmechanische Messungen

Ü-Blatt 4

3 Vom Wasserstoffatom zum Periodensystem der Elemente

3.1 Quantenmechanische Probleme in 3D

ZEIT

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

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

Wiederholung

- Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

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

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

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

Wiederholung

- Normierung
  - Normierte Wellenfunktion

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

  - Vereinfachter Erwartungswert

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

$$\psi_n = N\psi$$

$$\int \rho_n \, dx \overset{!}{=} 1$$

$$\int \psi_n^* \psi_n \, dx = \int N\psi^* N\psi \, dx$$

$$= N^2 \int \psi^* \psi \, dx = 1$$

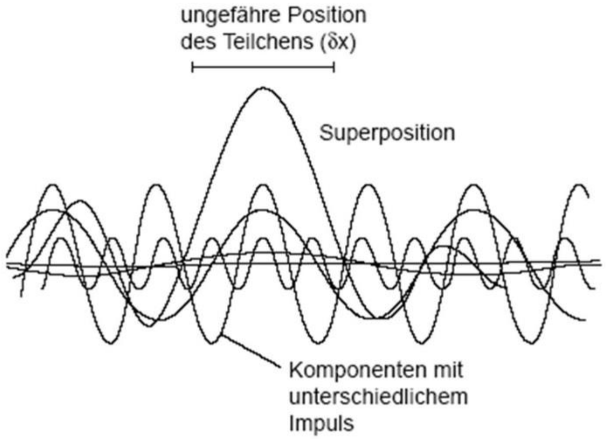
$$\Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{\int \psi^* \psi \, dx}}$$

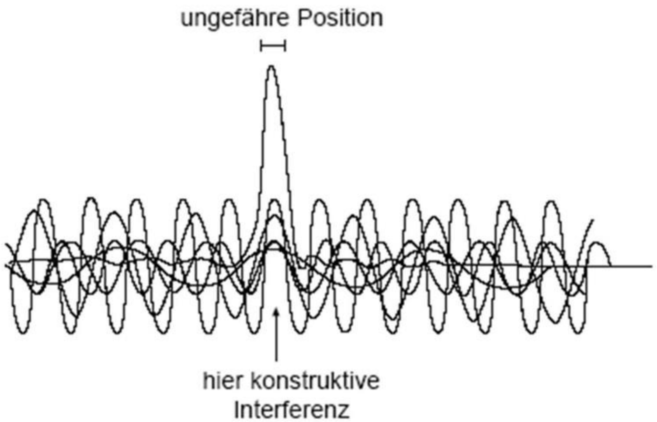
Einschub - Wellenpakete

- Superposition ebener Wellen für lokalisiertes Teilchen

  - Viele verschiedene Frequenzen

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{j(kx-\omega_k t)} dk$$





- Fouriertransformation: Impulsraum ⟷ Ortsraum

https://phet.colorado.edu/de/simulation/fourier

Einschub - Dispersion

- Geschwindigkeit des Schwerpunktes des Wellenpaketes heißt Gruppengeschwindigkeit

- Gruppengeschwindigkeit und Phasengeschwindigkeit

  - Allgemein: $v_G = \frac{\partial\omega(k)}{\partial k}$ $v_{Ph} = \frac{\omega(k)}{k}$

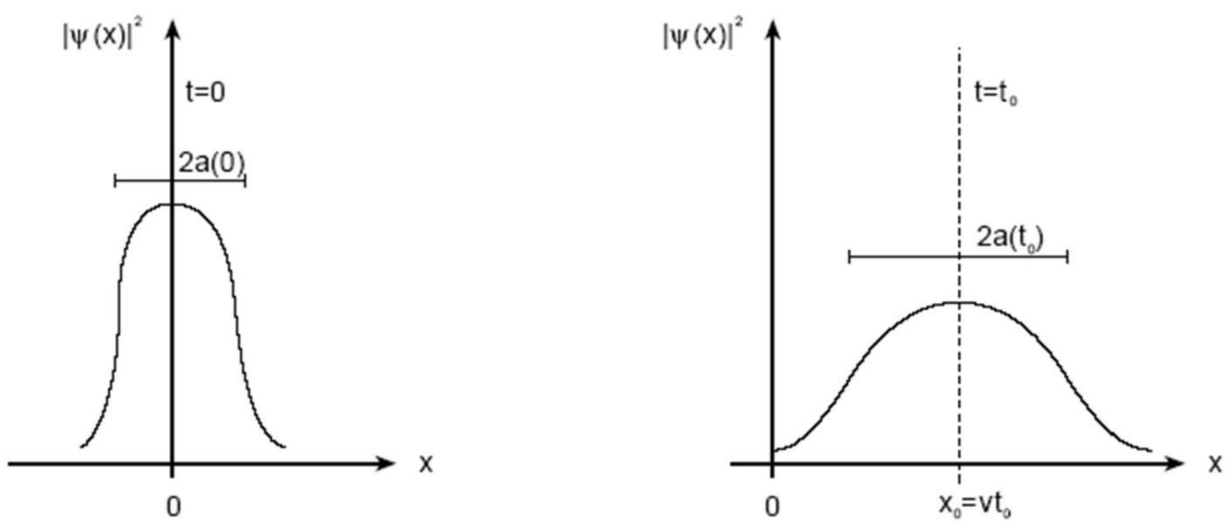
  - Photonen im Vakuum: $v_G = c$ $v_{Ph} = c$

  - Freie Elektronen im Vakuum: $v_G = \frac{\hbar k}{m}$ $v_{Ph} = \frac{\hbar k}{2m}$

https://www.youtube.com/watch?annotation_id=annotation_2326273631&feature=iv&src_vid=v9DPzMoWpc0&v=tlM9vq-bepA
http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/1/pc/pc_11/pc_11_01/pc_11_01_01.vlu/Page/vsc/de/ch/1/pc/pc_11/pc_11_01/pc_11_01_07.vscml.html

Einschub - Dispersion von Wellenpaketen

- Frequenzabhängigkeit der Phasengeschwindigkeit
- Die unterschiedlichen monochromatischen Wellen bewegen sich mit unterschiedlicher Phasengeschwindigkeit fort
- Folge: Wellenpakete können zerfließen



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

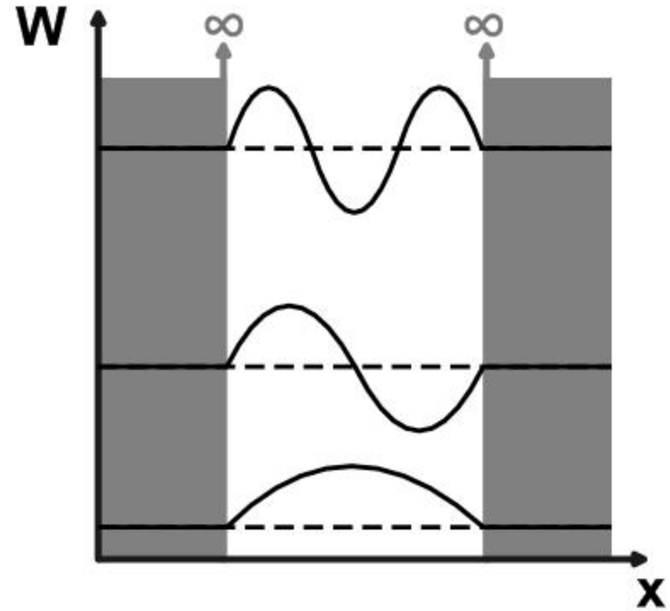
$$W\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

Wiederholung

- Unendlicher Potentialtopf

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

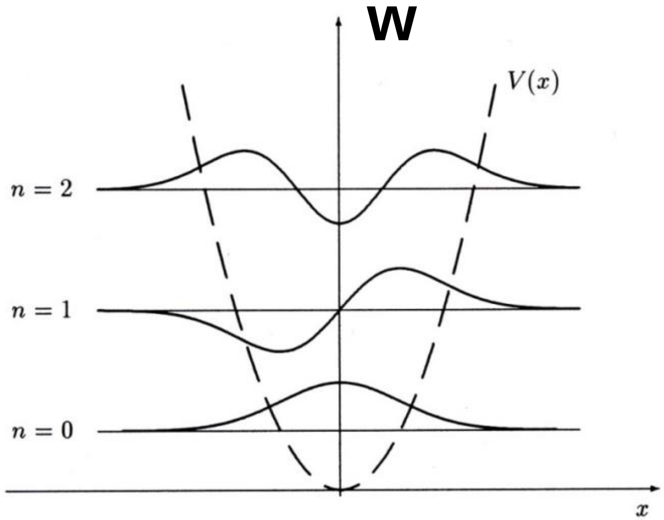
$$W_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 > 0$$



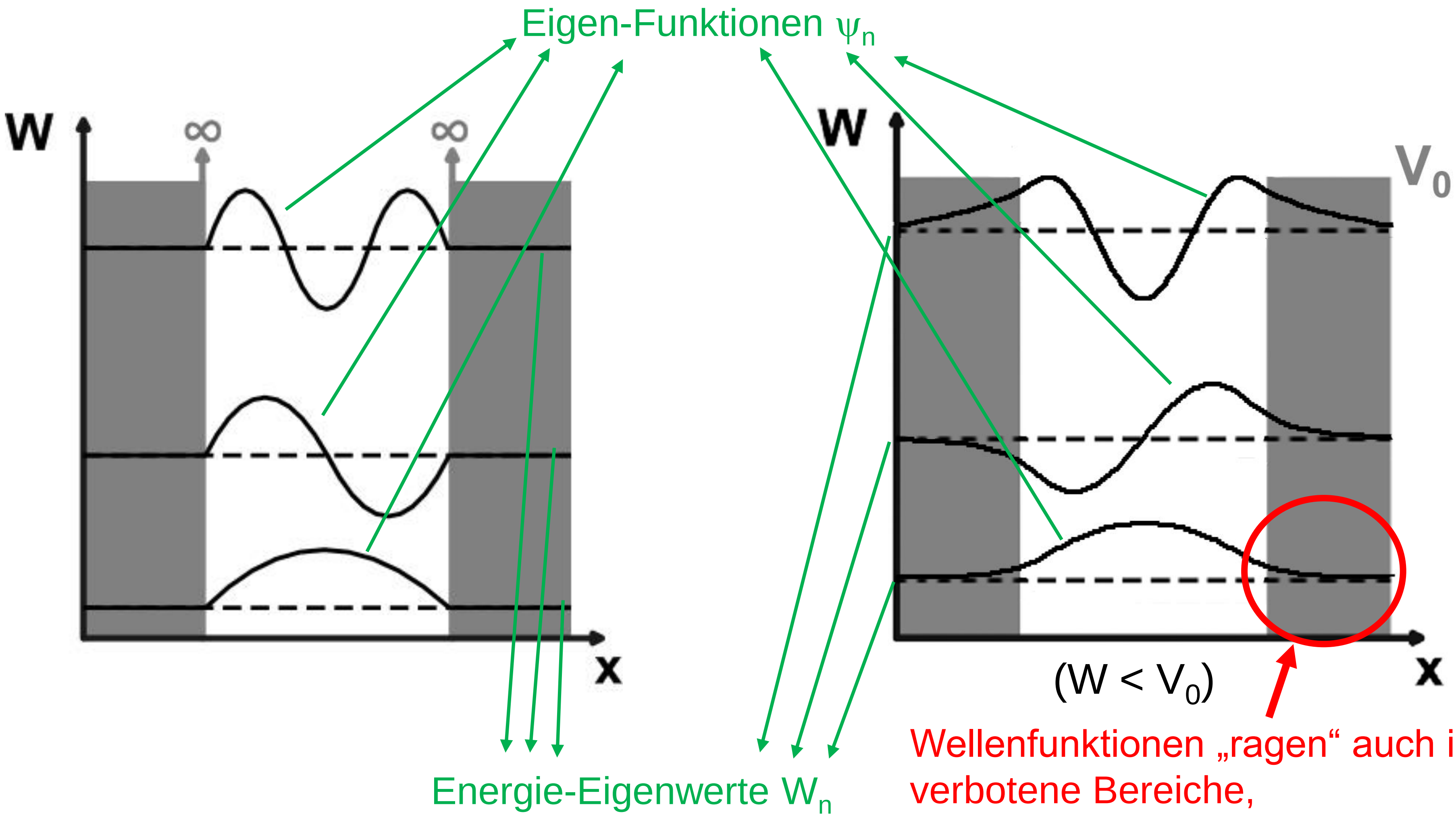
- Harmonisches Potential

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

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



Wdh.: Endlicher und unendlicher Quantenpotentialtopf



Wellenfunktionen „ragen“ auch in verbotene Bereiche, Aufenthaltswahrscheinlichkeit ($|\psi|^2$)

A1 Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

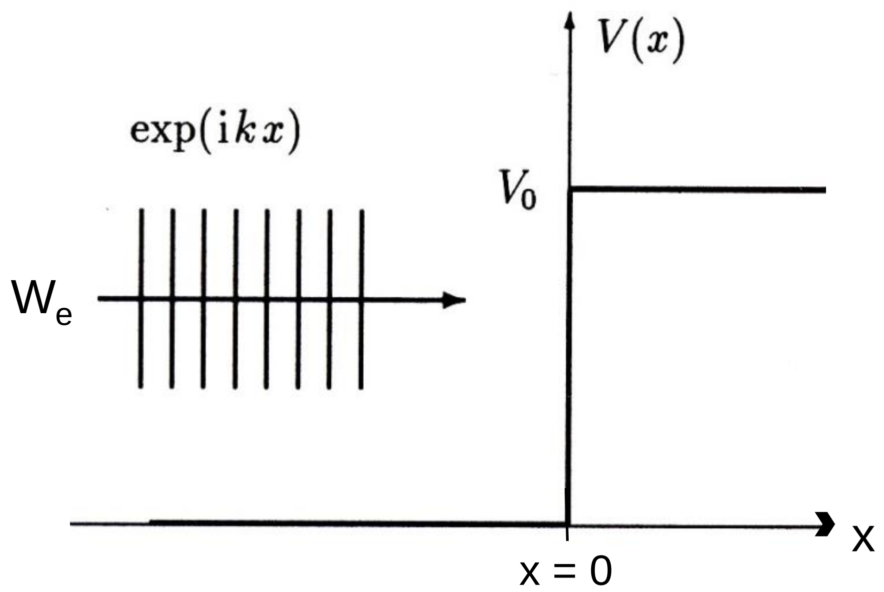
Betrachten Sie die Potentialstufe

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

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

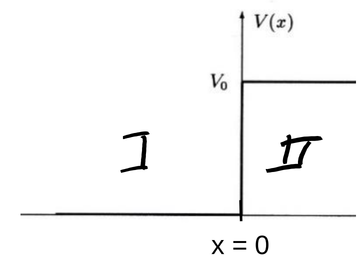


A1 b) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

Bestimmen Sie die Wellenzahl *k* des Elektrons in den Bereichen *x* < 0 und *x* ≥ 0.

(I) $\psi = A e^{jk_1 x} + B e^{-jk_1 x}$

(II) $\psi = C e^{jk_2 x}$



SGL: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V\right)\psi = W\psi$

(I) $-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\partial_x^2 \psi}_{-k_1^2\psi} = W\psi$

$\Rightarrow +\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}\psi = W\psi$

$\Rightarrow k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mW}$

(II) $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_0\right)\psi = W\psi$

$\partial_x^2 \psi = -k_2^2 \psi$

$\Rightarrow \left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V_0\right)\psi = W\psi$

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

$V_0 > W$ $\quad W - V_0 = -(V_0 - W)$

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

A1 b) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

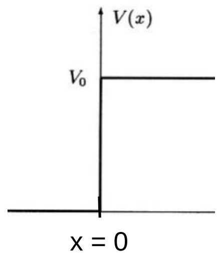
Karlsruher Institut für Technologie

Bestimmen Sie die Wellenzahl *k* des Elektrons in den Bereichen *x* < 0 und *x* ≥ 0.

- Ansatz mit ebenen Wellen:

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

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



- Aus SGL folgt:

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

$$\Rightarrow k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mW} \qquad\qquad \Rightarrow k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(W - V_0)}$$

- Fallunterscheidung im Bereich (II):

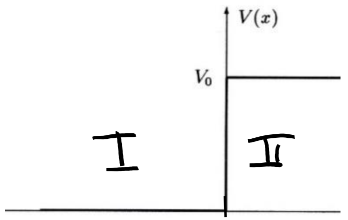
$$(II) \quad \begin{array}{lll} (1) & V_0 < W_e & k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(W - V_0)} \\ (2) & V_0 > W_e & k_2 = \frac{1}{\hbar}j\sqrt{2m(V_0 - W)} =: jq \end{array}$$

A1 c) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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

- Fall (1) $V_0 < W_e$:

$$\psi_I = e^{jk_1x} + re^{-jk_1x} \qquad \psi_{II} = te^{jk_2x}$$



$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \Rightarrow \quad 1 + r = t$$

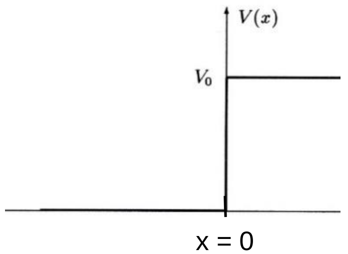
$$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0) \quad \Rightarrow \quad jk_1 + r(-jk_1) = t\,jk_2$$

A1 c) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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

- Fall (1) $V_0 < W_e$:
  - Ansatz:

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



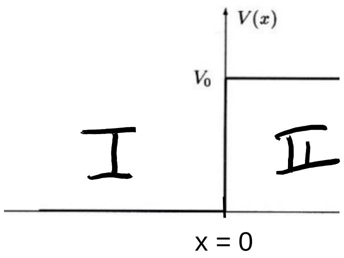
Stetigkeit der Welle in x=0:

$$\begin{aligned} (i) \quad & \psi_{\mathrm{I}}(0) && = \psi_{\mathrm{II}}(0) \\ (ii) \quad & \psi'_{\mathrm{I}}(0) && = \psi'_{\mathrm{II}}(0) \end{aligned} \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} (i) \quad & 1 + r && = t \\ (ii) \quad & jk_1 - jk_1 r && = jk_2 t \end{aligned}$$

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

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:

$$\begin{aligned} (i) \quad \psi_{\mathrm{I}}(0) &= \psi_{\mathrm{II}}(0) \\ (ii) \quad \psi'_{\mathrm{I}}(0) &= \psi'_{\mathrm{II}}(0) \end{aligned} \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} r &= \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} \\ t &= 1 + r = 1 + \frac{jk_1 + q}{jk_1 - q} = \frac{2jk_1}{jk_1 - q} \end{aligned}$$

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

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\,\vec{J} = 0$$

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

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

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

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

A1 d) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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

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

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

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

- 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

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

„QM-Kontinuitätsgleichung“

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.

$$\Psi_I = \underbrace{e^{jk_1x}}_{\Psi_0} + \underbrace{r e^{-jk_1x}}_{\Psi_r} \qquad \Psi_{II} = \underbrace{t e^{jk_2x}}_{\Psi_t}$$

$$J_0 = \frac{\hbar}{2jm}\left(e^{-jk_1x}\left(jk_1 e^{jk_1x}\right) - \left(-jk_1 e^{-jk_1x}\right)e^{jk_1x}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2jm}\left(jk_1 + jk_1\right) = \frac{\hbar k_1}{m}$$

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

$$\begin{aligned} J_0 &= \frac{\hbar}{2jm}\left(e^{-jk_1x}(jk_1e^{jk_1x}) - (-jk_1e^{-jk_1x})e^{jk_1x}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2jm}(jk_1 + jk_1) = \frac{\hbar k_1}{m} \end{aligned}$$

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

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

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

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

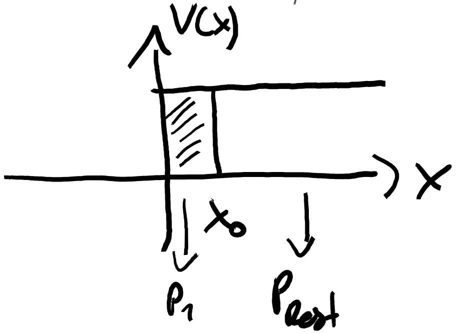
Vergleichen Sie die Ergebnisse mit einem „klassischen Elektron als Teilchen".

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



$$P_1 = \int_0^{x_0} |\psi|^2 dx = \int_0^{x_0} |t|^2 e^{-2qx} dx$$

$$= |t|^2 \frac{1}{-2q} \left| e^{-2qx} \right|_0^{x_0}$$

$$= \frac{|t|^2}{-2q}\left(e^{-2qx_0} - 1\right)$$

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

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

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

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

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

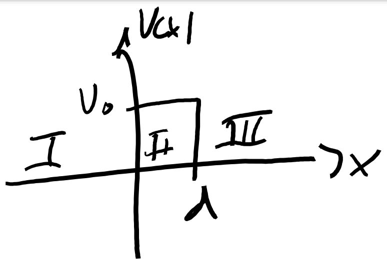
$$\rightarrow \quad \frac{P_1}{P_{\text{Rest}}} = \frac{e^{-2qx_0} - 1}{-e^{-2qx_0}} = -1 + e^{+2qx_0} = 1,06$$

A1 g) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

Sei nun
$$V_1(x)\begin{cases} 0 & : \quad x < 0 \qquad \text{Bereich I} \\ V_0 & : \quad 0 \leq x \leq d \qquad \text{Bereich II} \\ 0 & : \quad d < x \qquad \text{Bereich III} \end{cases}$$
Was ändert sich gegenüber dem vorhergehenden Fall? Stellen Sie mit Hilfe geeigneter Randbedingungen ein Gleichungssystem auf.

- Ansatz für $V_0 > W_e$:

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



- Stetigkeitsbedingungen:

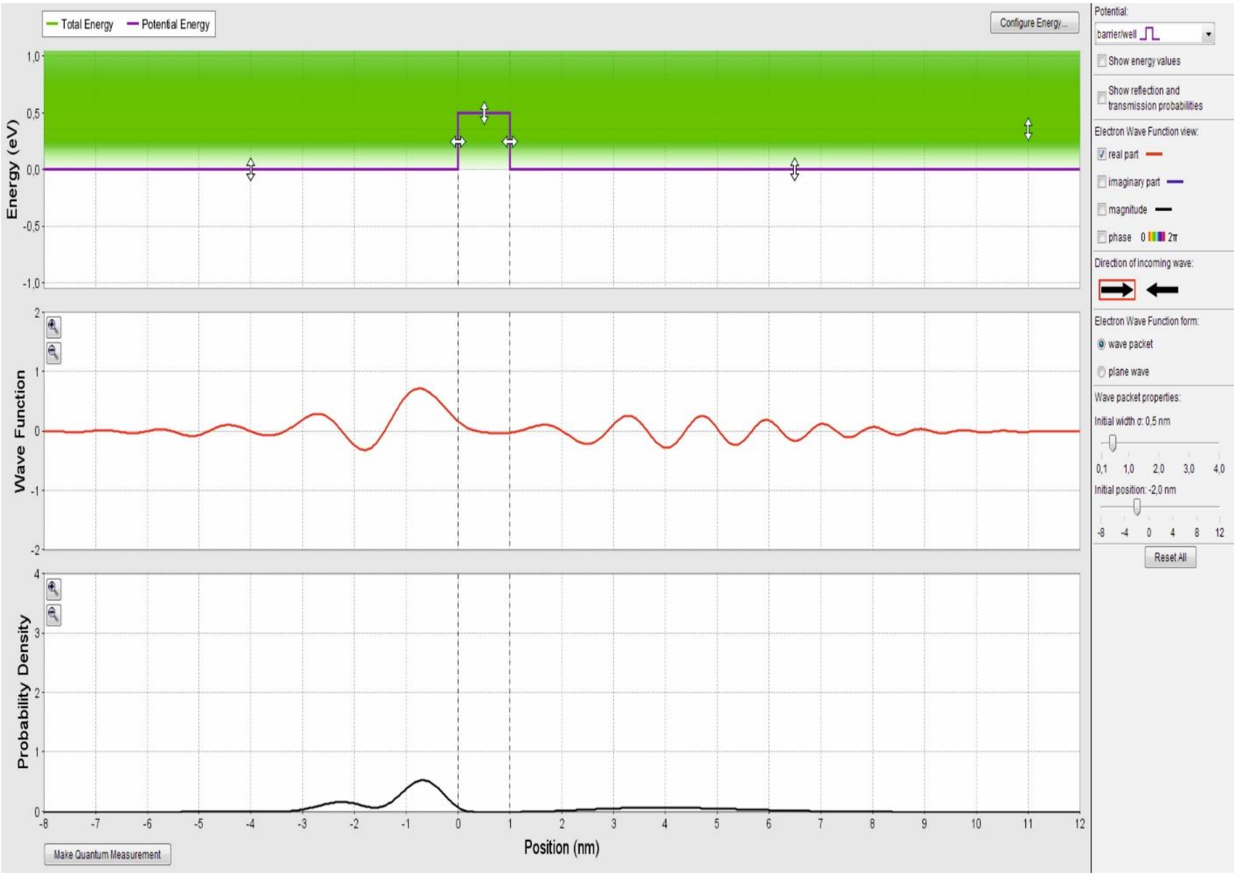
$$\begin{aligned} &(1) \quad \psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0) \\ &(2) \quad \psi'_{\mathrm{I}}(0) = \psi'_{\mathrm{II}}(0) \\ &(3) \quad \psi_{\mathrm{II}}(d) = \psi_{\mathrm{III}}(d) \\ &(4) \quad \psi'_{\mathrm{II}}(d) = \psi'_{\mathrm{III}}(d) \end{aligned}$$

$\rightarrow$

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

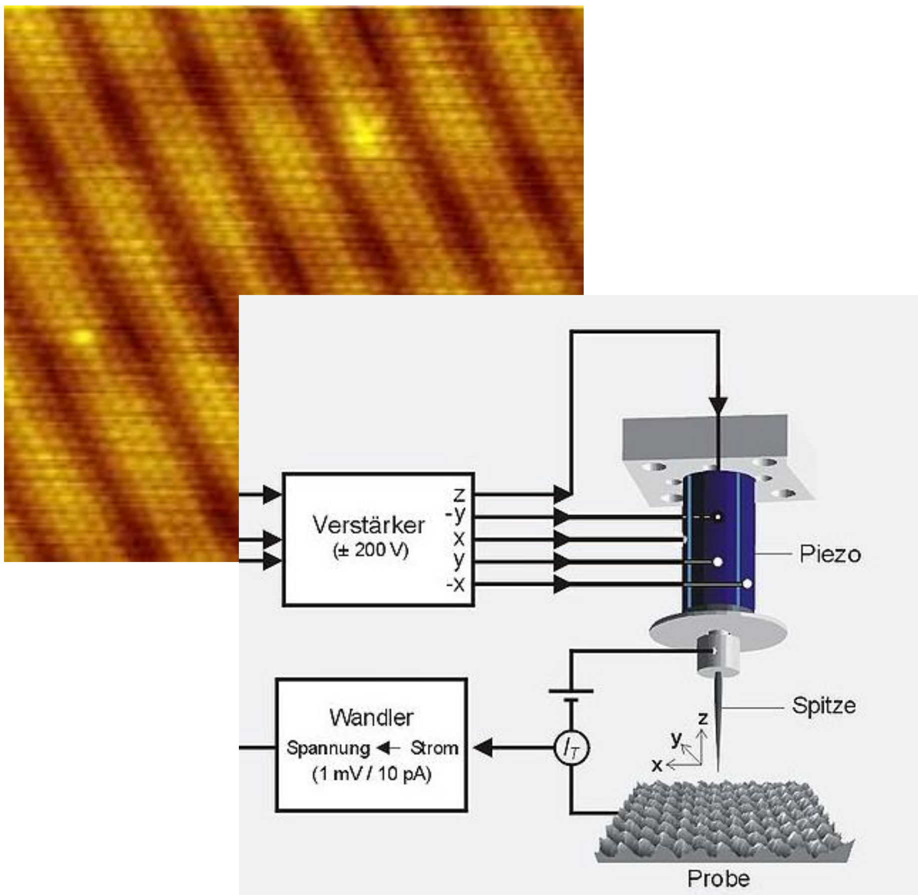
A1 g) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

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

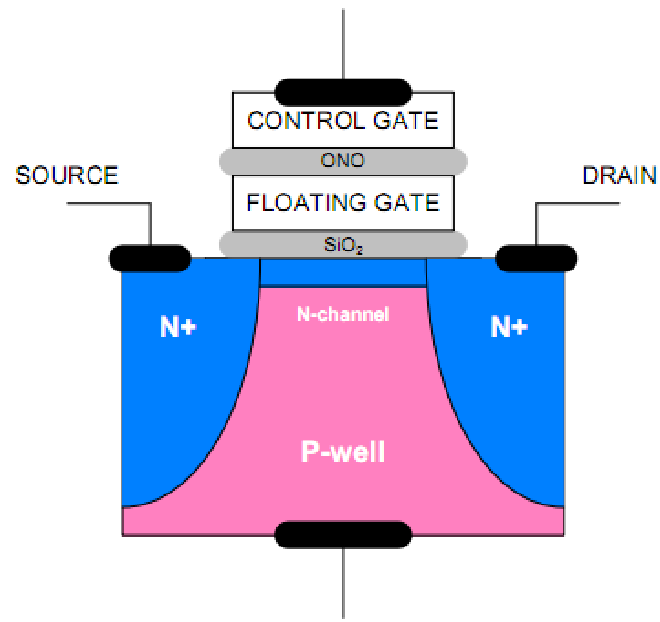


A1 g) Reflexion an Potentialstufe und Tunneleffekt

- 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:

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

Ortsoperator:

$$\hat{x} = x \qquad \hat{y} = y$$

- 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.

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

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

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

A2 b) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

Karlsruher Institut für Technologie

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:

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

- Klammer auflösen:

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

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

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

$F(x) + S(y) = W$

A2 b) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

- Separation der Variablen:

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

$$\downarrow$$

Problem auf den 1D-Oszillator zurückgeführt → aus Ü3 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 3 galt:

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

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

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

- Überlagerung der Eigenenergien aus den Teillösungen:

$$\rightarrow \quad W = W_x + W_y = \hbar\omega_x(n_x + 1/2) + \hbar\omega_y(n_y + 1/2)$$

A2 c) Harmonischer Oszillator in 2D und 3D

- Berechnung der Eigenfunktionen:

- Erinnerung 1D harmonischer Oszillator: Hermitesche Polynome

$$\Psi_{\mathrm{n}} = \frac{c_{\mathrm{n}}}{\sqrt{b}} H_{\mathrm{n}}\left(\frac{x}{b}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

- 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

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

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:

- $W_{1,2} = W_1 + W_2 = \hbar\omega(1 + 2 + 1) = 4\hbar\omega$ → Eigenfunktion $\psi_{1,2}(x,y)$
- $W_{2,1} = W_2 + W_1 = \hbar\omega(2 + 1 + 1) = 4\hbar\omega$ → 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?

Ankündigungen

- Tutorien 3: 15.06.20 - 19.06.20

- Lösungen zur 4. Übung: 29.05.20

- Nächste Übung (Ü5): 05.06.20