

Festkörperelektronik

Vorlesung 2

Prof. Nils Weimann

IW / Bauelemente der Höchstfrequenzelektronik (BHE)

17.04.2025



Zusammenfassung der letzten Vorlesung

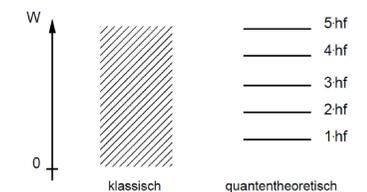
- ▶ Vorgänge im Festkörper: el. Leitung, Leuchten, Absorption
→ Elektronen
- ▶ welchen Gesetzen folgen sehr kleine Teilchen?
- ▶ Quantenmechanik
- ▶ Beschreibung z.B. von Elektronen mit **Wellenfunktionen**
- ▶ Einfluss von und Wechselwirkung mit Licht
 - ▶ Absorption von Lichtquanten mit Quantenenergie
 - ▶ Emission als Umkehrprozess
- ▶ Experimente: Planck'sches Strahlungsgesetz, Photoeffekt, Compton-Effekt

Bewegungsgleichung

- ▶ Bewegungsgleichung beschreibt Antwort auf Kräfte
- ▶ klassische Mechanik: Newton $F = m \cdot a$
- ▶ Lösung der Newtonschen Gleichungen durch Koordinaten x_i und Geschwindigkeiten v_i
- ▶ Quantenmechanik: Schrödingergleichung
- ▶ Lösung durch spezielle Wellenfunktionen
- ▶ heutige Vorlesung:
 - ▶ genauere Definition von Begriffen in der Quantenmechanik
 - ▶ Betrachtung einfacher QM Systeme

Quantennatur des Lichts

- ▶ abzählbare diskontinuierliche Energiezustände $W_n = n \cdot h \cdot f$
 - ▶ Quantenzahl $n = \{1, 2, 3, \dots\}$
 - ▶ Wirkungsquantum $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
 - ▶ Frequenz f
- ▶ Einstein
 - ▶ Photonenergie $W_{ph} = h \cdot f = m_{ph} \cdot c^2$
 - ▶ Impuls $p_{ph} = m_{ph} \cdot c = h \cdot f / c$
 - ▶ Geschwindigkeit $v_{ph} = c$
 - ▶ Ruhemasse $m_{ph,0} = 0$



Photonenenergie, -impuls und Wellenzahl

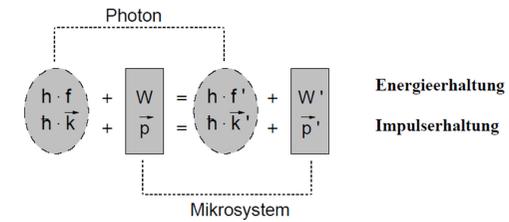
▶ Photon

- ▶ Photonenenergie $W_{ph} = h \cdot f = m_{ph} \cdot c^2$
- ▶ Impuls $p_{ph} = m_{ph} \cdot c = h \cdot f/c$
- ▶ Geschwindigkeit $v_{ph} = c$
- ▶ Ruhemasse $m_{ph,0} = 0$

▶ Welle und Frequenz $\lambda \cdot f = c$

- ▶ eingesetzt in Impuls $p_{ph} = h \cdot f/c = h/\lambda$
- ▶ mit Wellenzahl $k \equiv 2\pi/\lambda$ und $\hbar = h/(2\pi)$
- ▶ Impuls $p = \hbar \cdot k$
- ▶ \vec{k} und \vec{p} sind Vektoren → Richtung der Ausbreitung

Erhaltungssätze



▶ Mikrosystem: Elektronen im ...

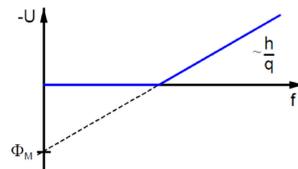
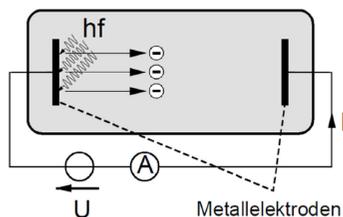
- ▶ Atom
- ▶ Kristall
- ▶ allg. Festkörper

▶ Wechselwirkung mit Licht (Photonen)

- ▶ Absorption
- ▶ Emission
- ▶ Streuung

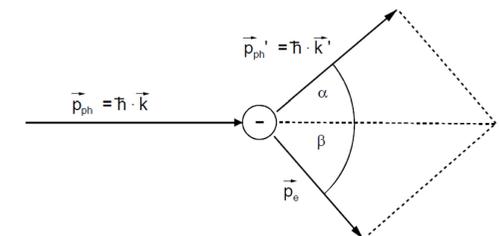
▶ ... überprüfbar mit einfachen Experimenten

Energieerhaltung - Photoeffekt



Impulserhaltung - Compton-Effekt

- ▶ Experiment: Streuwinkel-Verteilung für Elektronen und Photonen
- ▶ Ausnutzung der Energieerhaltung
- ▶ kann nur mit Impulsübertrag erklärt werden



Materiewellen

- ▶ deBroglie: Umkehrung der Licht-Quantenhypothese
 - ▶ Teilchenimpuls $p = m \cdot v = h/\lambda = \hbar \cdot k$
 - ▶ Teilchenenergie $W = \frac{1}{2}mv^2 = h \cdot f = \hbar \cdot \omega$ mit Kreisfrequenz $\omega = 2\pi f$
- ▶ einem Teilchen mit Masse m wird zugeordnet
 - ▶ über den Impuls: eine Wellenzahl k und damit eine Wellenlänge λ
 - ▶ über die Energie: eine Frequenz f bzw. ω
- ▶ das führt zur Wellenfunktion Ψ für das Teilchen $\Psi(\vec{r}, t) = C \cdot \exp[j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t)] \rightarrow$ ebene Welle

Wellenpaket

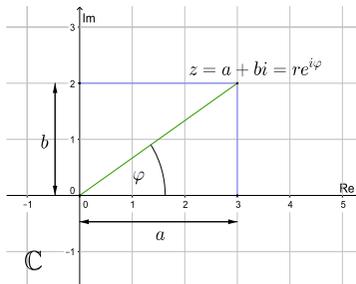
- ▶ ebene Welle hat keinen Schwerpunkt \rightarrow Teilchenerhaltung?
- ▶ Summation von unendlich vielen ebenen Wellen zu einem *Wellenpaket*

$$\Psi(x) = \frac{4a}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{\sin(2n+1)x}{2n+1} \right]$$

- ▶ Wellenpaket bewegt sich mit Gruppengeschwindigkeit
- ▶ Ortswahrscheinlichkeit?
 - ▶ Absolutquadrat $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$
 - ▶ Ψ^* ist konjugiert komplexe Größe

konjugiert komplexe Größe

$$\begin{aligned}(a + jb)^* &= (a - jb) \\ |(a + jb)|^2 &= (a + jb) \cdot (a + jb)^* \\ &= (a + jb) \cdot (a - jb) = a^2 + b^2\end{aligned}$$



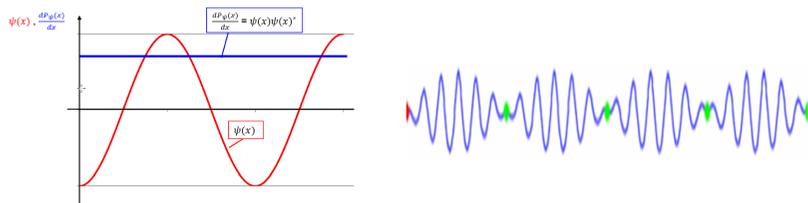
Teilchenort und Normierung der Wellenfunktion

- ▶ Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Ort zur Zeit t im Volumenelement dV zu finden

$$dP_{\Psi}(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \Psi(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t)^* dV$$

- ▶ Teilchenerhaltung: ein Teilchen muss sich im betrachteten Raum befinden
 - ▶ Integration über den ganzen Raum muss 1 ergeben
 - ▶ Normierung $\int_V dP_{\Psi} = \int_V \Psi \Psi^* dV \stackrel{!}{=} 1$
 - ▶ funktioniert für Wellenpaket

Ebene Welle und Wellenpaket



Teilchengeschwindigkeit

- ▶ ebene Welle $\Psi(\vec{r}, t) = C \cdot \exp[j(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t)]$
- ▶ Phasengeschwindigkeit
 - ▶ stationäre Wellenfront $\rightarrow \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t = 0$
 - ▶ daraus folgt $v_{ph} = \frac{r}{t} = \frac{\omega}{k}$
- ▶ Gruppengeschwindigkeit (aus Wellenpaket)
 - ▶ $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ beschreibt die Bewegung des Schwerpunkts des Wellenpakets
 - ▶ das ist der wahrscheinlichste Ort, das Teilchen anzutreffen
 - ▶ Teilchenbewegung \leftrightarrow Bewegung der Schwerpunktkoordinate des Wellenpakets

Herleitung Gruppengeschwindigkeit

- ▶ verallgemeinertes Wellenpaket bei $t = 0$

$$\alpha(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{jkx}$$

- ▶ Zeitentwicklung mit Phasenfaktor $e^{-j\omega(k) \cdot t}$

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

- ▶ fast monochromatisches Paket, $A(k) \rightarrow 0$ für $k \not\approx k_0$
- ▶ ermöglicht Linearisierung um k_0 , d.h. $\omega(k) \approx \omega_0 + (k - k_0)\omega'_0$ mit $\omega_0 = \omega(k_0)$ und $\omega'_0 = \left. \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \right|_{k=k_0}$
- ▶ einsetzen in Wellenpaket und "0" Terme aussortieren

$$\alpha(x, t) = \underbrace{e^{j(k_0 x - \omega_0 t)}}_{\text{ebene Welle (Phase)}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{j(k - k_0)(x - \omega'_0 t)}}_{\text{Einhüllende (Schwerpunkt)}}$$

Unschärferelation

- ▶ bestimmte Paare von physikalischen Größen lassen sich nicht gleichzeitig messen
- ▶ konjugierte Größen mit Produkt "Wirkung" [Js]
- ▶ Ort und Impuls $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$
- ▶ Energie und Zeit $\Delta W \cdot \Delta t \geq \hbar/2$
- ▶ grundlegendes Prinzip der Quantenmechanik
- ▶ folgt aus der Wellennatur der Beschreibung von Zuständen

Unschärferelation: Beispiel

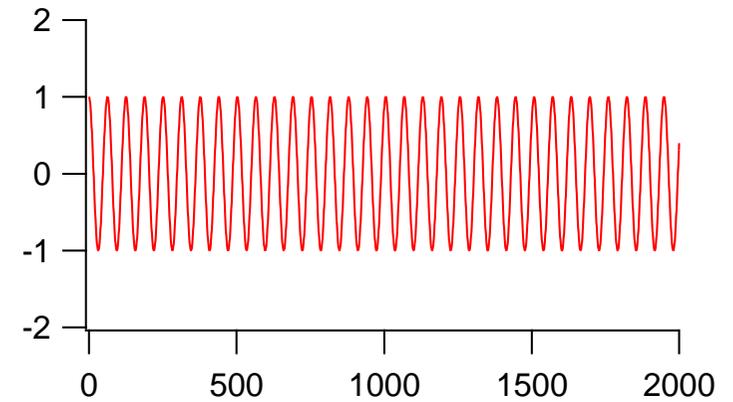
- ▶ Überlagerung von zwei ebenen Wellen – Schwebung
- ▶ zwei Wellenfunktionen mit leicht unterschiedlicher ...
 - ▶ Wellenzahl k und $k + \Delta k$
 - ▶ Frequenz ω und $\omega + \Delta\omega$

$$\Psi_1 = C_1 \cdot e^{j(kx - \omega t)}$$

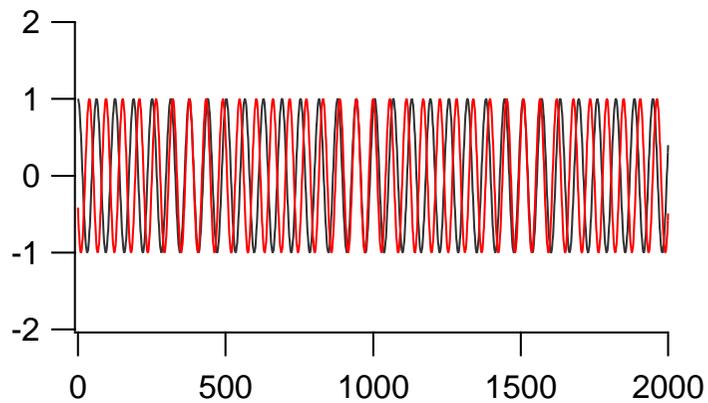
$$\Psi_2 = C_2 \cdot e^{j[(k + \Delta k)x - (\omega + \Delta\omega)t]}$$

- ▶ Überlagerung: Summation $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$

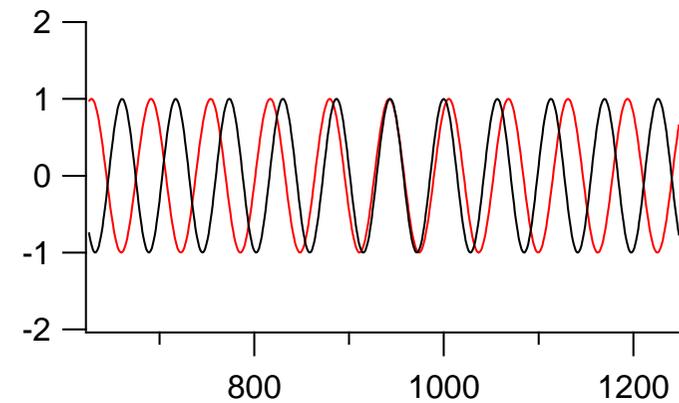
Schwebung: eine Welle



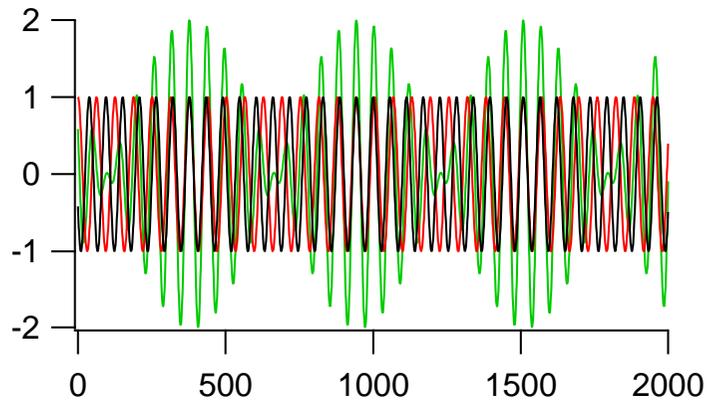
Schwebung: zwei Wellen



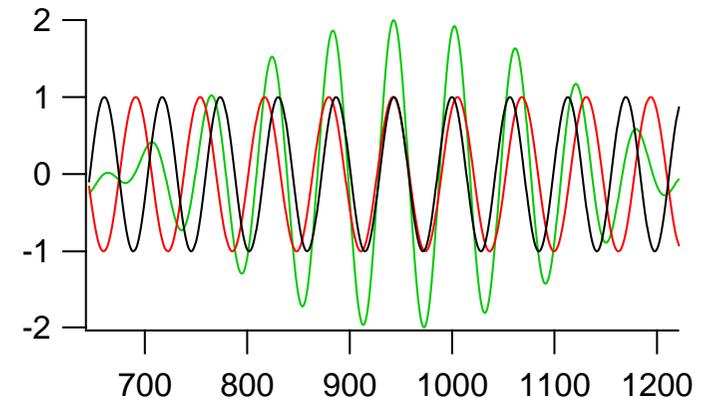
Schwebung: zwei Wellen (Detail)



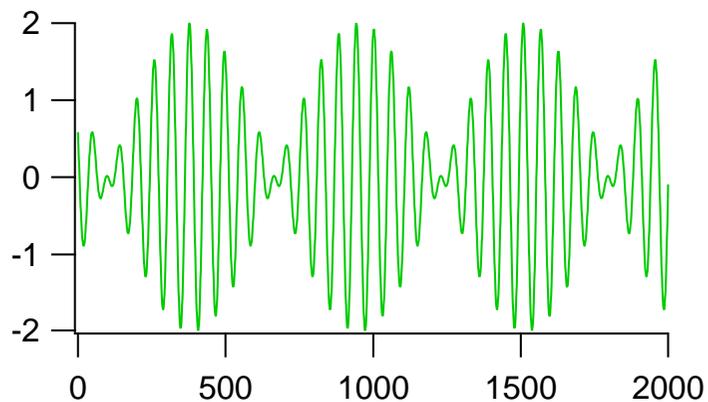
Schwebung: zwei Wellen und Summe



Schwebung: zwei Wellen und Summe (Detail)



Schwebung: Summe = Überlagerung

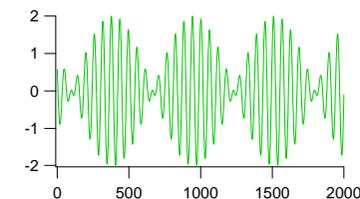


$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = C \cdot \exp\{j(kx - \omega t)\} \cdot [1 + C \cdot \exp\{j(\Delta kx - \Delta \omega t)\}]$$

Abstand der Maxima in der Schwebung $\Lambda/2 = 2\pi/\Delta k$

Schwebung & Unschärfe

- ▶ Ortsunschärfe - Ausdehnung eines Wellenbauchs $\Delta x \sim 2\pi/\Delta k$
- ▶ dazu Impuls aus Wellenzahl $p = \hbar k \rightarrow \Delta p = \hbar \Delta k$
- ▶ eingesetzt: $\Delta x \cdot \Delta k \sim 2\pi \hbar = h$
(genaue Herleitung: zusätzlicher Faktor 2)
- ▶ Unschärferelation hat nichts mit Messfehlern zu tun!
- ▶ wegen der Wellenbeschreibung sind die konjugierten Größen nicht gleichzeitig exakt bestimmbar



Zusammenfassung der Konzepte

- ▶ Beschreibung der Zustände mit Wellenfunktionen
- ▶ freie Teilchen als Wellenpakete darstellbar – erfüllen Unschärferelation und Normierbarkeit
- ▶ Es gelten im Mikrosystem (z.B. Elektron + Photon) Erhaltungssätze
 - ▶ für die Energie
 - ▶ für den Impuls
- ▶ Energie ist gequantelt, d.h. die Energie in einem Zustand ist ein ganzzahliges Vielfaches einer kleinsten Portion, z.B. Photonenenergie $W_{ph} = n \cdot h\nu$
- ▶ quantenmechanischer Impuls $\vec{p}_{ph} = \hbar \cdot \vec{k}$

Bewegungsgleichung

Bewegungsgleichung

- ▶ Beschreibung der Zustände mit Wellenfunktionen
- ▶ Einfluss durch Felder
- ▶ Entwicklung des Systems beschrieben durch *Bewegungsgleichung*
- ▶ klassische Mechanik: Newton, Hamiltonfunktion
- ▶ Quantenmechanik: Schrödingergleichung

Schrödingergleichung

- ▶ Bewegungsgleichung der Quantenmechanik

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \cdot \Psi = -j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

- ▶ Laplace-Operator: Impulsoperator² → kinetische Energie

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

- ▶ Potential V (inneres und äußeres)
- ▶ Energieoperator $-j\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
→ Gesamtenergie des Mikrosystems

Schrödingergleichung

- ▶ kann nicht abgeleitet werden $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \cdot \Psi = -j\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$
- ▶ alle bekannten quantenmechanischen Vorgänge sind aber Lösung der SG
→ Beleg für ihre Gültigkeit
- ▶ Äquivalenz zum Hamilton-Operator der klassischen Mechanik
→ dieser gilt für makroskopische Körper, und die SG geht für große Massen in diesen über
 $\mathcal{H}(q, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$

Lösung des Problems

1. Formulierung für V , z.B. Coulomb-Potential
2. Randbedingungen aus der Geometrie
3. suche eine Funktion, die Lösung dieser SG → das ist die gesuchte Wellenfunktion Ψ
4. alle weiteren Größen (besser, deren Erwartungswerte) können dann aus Ψ berechnet werden, indem *Operatoren* angewendet werden
 - ▶ Ortskoordinate mit Absolutbetrag $\Psi^* \Psi$
 - ▶ Geschwindigkeit mit Impulsoperator $-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi$
 - ▶ Zustandsenergie mit Energieoperator $-j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$
5. Erwartungswertbildung durch Integration, z.B.

$$\bar{p} = -j\hbar \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi d^3x$$

Vereinfachungen

- ▶ Schrödingergleichung ist partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung in den Variablen x und t
→ allgemeine Lösung nicht so einfach
- ▶ abkürzende Schreibweisen Ψ' für $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ und $\dot{\Psi}$ für $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ in 1-D

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V \cdot \Psi &= -j\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ \implies \frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' - V \cdot \Psi &= -j\hbar \dot{\Psi} \end{aligned}$$

Vereinfachungen

- ▶ Idee: trenne Zeit- und Ortsabhängigkeit
 - ▶ Potential $V = f(x)$ und $V \neq f(t)$ → zeitliche Konstanz
 - ▶ gilt für Festkörper-Elektronen, da sich die (relativ) schweren Atome nur langsam im Vergleich zu den Elektronen bewegen
- ▶ Ansatz $\Psi(x, t) = \Theta(x) \cdot \varphi(t)$ in S.Gl. einsetzen

Vereinfachungen: Variablentrennung

- ▶ Ansatz $\Psi(x, t) = \Theta(x) \cdot \varphi(t)$ einsetzen in S.Gl.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' - V \cdot \Psi = -j\hbar \dot{\Psi}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Theta'' \cdot \varphi - V \cdot \Theta \cdot \varphi = -j\hbar \Theta \dot{\varphi}$$

- ▶ Division durch $\Theta \cdot \varphi$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Theta''}{\Theta} - V = -j\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi}$$

- ▶ linke Seite nur von x abhängig, rechte Seite nur von t !!
- ▶ weil x und t voneinander unabhängig sind, muss gelten L.S. = R.S. $\equiv -W$ (Konstante)

rechte Seite

- ▶ Dgl. 1. Ordnung $-j\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi} = -W$ (von $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Theta''}{\Theta} - V = -j\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi}$)
- ▶ Dgl. 1. O. \rightarrow kann mit Differentialen $d\varphi, dt$ rechnen

$$\begin{aligned} -j\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi} = -W &\implies -j\hbar \frac{d\varphi}{dt} \cdot \frac{1}{\varphi} = -W \\ &\implies -j\hbar \frac{d\varphi}{\varphi} = -W \cdot dt \end{aligned}$$

- ▶ Integration: $-j\hbar \ln \varphi = -W \cdot t + A$ (Konstante $A \stackrel{!}{=} 0$)

$$\ln \varphi = -j \frac{W}{\hbar} \cdot t \implies \varphi = \exp\left(-j \frac{W}{\hbar} t\right)$$

- ▶ DeBroglie-Welle $\varphi = \exp(-j\omega t)$ mit $W = \hbar\omega$

linke Seite

- ▶ Schrödingergleichung in getrennten Variablen

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Theta''}{\Theta} - V = -j\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi}$$

- ▶ Dgl. 2. Ordnung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Theta''}{\Theta} - V = -W$$

- ▶ Multiplizieren mit Θ

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m} \Theta'' + (W - V)\Theta = 0}$$

- ▶ zeitunabhängige (stationäre) Schrödingergleichung
- ▶ beschreibt z.B. Bewegung von Elektronen im Festkörper, die ihre Energie beibehalten (elastische Streuung)

Beispiele zur Lösung der Schrödingergleichung

freies Teilchen ($V = 0$)

- ▶ wir definieren $k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} W$
- ▶ Einsetzen mit $V = 0$ in zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Theta'' + (W - V)\Theta = 0$$
$$\Theta'' + k^2 \Theta = 0$$

- ▶ Ansatz $\Theta(x) = c(k) \exp(jkx)$ ist eine spezielle Lösung (speziell für das eine k , das beliebig gewählt werden kann)
- ▶ sieht man direkt durch Einsetzen,
2. Ableitung \rightarrow Faktor $-k^2$

freies Teilchen ($V = 0$)

- ▶ spezielle Lösung $\Theta(x) = c(k) \exp(jkx)$
- ▶ allgemeine Lösung als Überlagerung (Superposition) unendlich vieler spezieller Lösungen mit variablem k

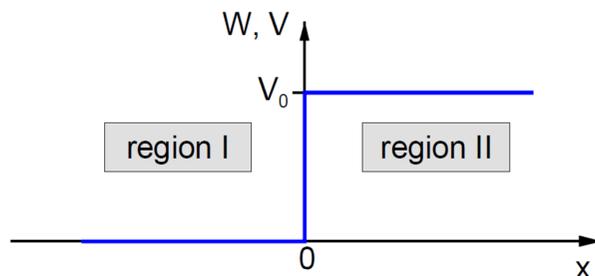
$$\Theta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) \exp(jkx) dk$$

- ▶ gesamte Wellenfunktion mit Lösung der R.S.

$$\Psi(x, t) = \Theta(x) \cdot \varphi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) \exp[j(kx - \omega t)] dk$$

- ▶ mit $c(k) \rightarrow 0$ für $|k| \rightarrow \infty \dots$ Wellenpaket

Teilchen an einer Potentialstufe



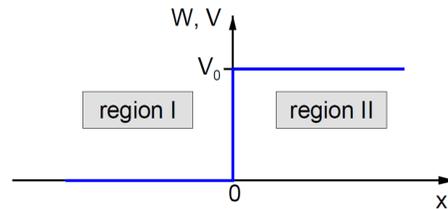
- ▶ Elektron trifft von links kommend auf Potentialstufe auf
- ▶ klassisches Verhalten:
 - ▶ Reflexion für $W_{kin} < V_0$
 - ▶ Transmission sonst
- ▶ Schrödingergleichung ?

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Beschreibung für Elektron an ...
 - ▶ Festkörper-Vakuum-Grenzfläche (Oberfläche)
 - ▶ p - n -Übergang (Diode)
 - ▶ Metall-Halbleiter-Kontakt
- ▶ direkter Bezug zu elektronischen und optischen Bauelementen

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Region I ($x \leq 0$)
 - ▶ $V_I = 0$
 - ▶ $W_I = W_{\text{kin},I}$
- ▶ Region II ($x > 0$)
 - ▶ $V_{II} = V_0$
 - ▶ $W_{II} = W_{\text{kin},II} + V_0$



- ▶ Lösungsweg
 - ▶ Ψ wird in Regionen I und II getrennt berechnet (verschiedene Ansätze Ψ_I und Ψ_{II})
 - ▶ Anpassung der Ansätze bei $x = 0$; *Stetigkeit und Differenzierbarkeit*

Stetigkeit und Differenzierbarkeit

- ▶ Stetigkeit $\Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0)$
 - ▶ Wellenfunktion muss kontinuierlich sein, darf keine Sprünge machen
 - ▶ sonst wäre die Kontinuitätsgleichung verletzt
 - ▶ Teilchenerhaltung beim Durchgang durch Grenzfläche
- ▶ Differenzierbarkeit $\Psi'_I(x=0) = \Psi'_{II}(x=0)$
 - ▶ Ableitung der Wellenfunktion nach dem Ort muss kontinuierlich sein
 - ▶ Impulsoperator = Ortsableitung
 - ▶ Erhaltungssatz für Impuls

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Aufstellen der stationären Schrödingergleichung in Regionen I und II

$$\Psi_I'' = -k_I^2 \Psi_I$$

$$\Psi_{II}'' = -k_{II}^2 \Psi_{II}$$

$$k_I = \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m(W - V_0)}{\hbar^2}}$$

- ▶ getrennte Ansätze auf beiden Seiten – spezielle Lösung bei konstantem Potential

$$\Psi_I(x) = A_I \exp(jk_I x) + B_I \exp(-jk_I x)$$

$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \exp(jk_{II} x)$$

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ drei Unbekannte in den Ansätzen

$$\Psi_I(x) = A_I \exp(jk_I x) + B_I \exp(-jk_I x)$$

$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \exp(jk_{II} x)$$

mit rechtslaufenden Wellenamplituden A_I, A_{II} und linkslaufender Amplitude B_I

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Stetigkeit und Differenzierbarkeit

$$\Psi_{\text{I}}(x=0) = \Psi_{\text{II}}(x=0)$$

$$\Psi'_{\text{I}}(x=0) = \Psi'_{\text{II}}(x=0)$$

- ▶ mit den Ansätzen

$$\Psi_{\text{I}}(x) = A_{\text{I}} \exp(jk_{\text{I}}x) + B_{\text{I}} \exp(-jk_{\text{I}}x)$$

$$\Psi_{\text{II}}(x) = A_{\text{II}} \exp(jk_{\text{II}}x)$$

- ▶ bei $x=0$ ist der Phasenfaktor $\exp(\dots) = 1$ und Stetigkeit und Diff'barkeit geben 2 Gleichungen für die 3 Unbekannten

$$A_{\text{I}} + B_{\text{I}} = A_{\text{II}}$$

$$jk_{\text{I}}A_{\text{I}} - jk_{\text{I}}B_{\text{I}} = jk_{\text{II}}A_{\text{II}}$$

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ 2 Gleichungen für die 3 Unbekannten

$$A_{\text{I}} + B_{\text{I}} = A_{\text{II}}$$

$$jk_{\text{I}}A_{\text{I}} - jk_{\text{I}}B_{\text{I}} = jk_{\text{II}}A_{\text{II}}$$

- ▶ aber: es interessiert nur das Verhältnis von vor- zu rücklaufendem Teilchenstrom:
Transmissions- und Reflexionskoeffizient
- ▶ also nur zwei Unbekannte in zwei Gleichungen → eindeutig lösbar

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ 2 Gleichungen für die 3 Unbekannten (2. Gl durch j geteilt)

$$A_{\text{I}} + B_{\text{I}} = A_{\text{II}}$$

$$k_{\text{I}}A_{\text{I}} - k_{\text{I}}B_{\text{I}} = k_{\text{II}}A_{\text{II}}$$

- ▶ umformen

$$A_{\text{I}} = \frac{A_{\text{II}}}{2} \cdot \left(1 + \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right)$$

$$B_{\text{I}} = \frac{A_{\text{II}}}{2} \cdot \left(1 - \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right)$$

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ 2 umgeformte Gleichungen

$$A_{\text{I}} = \frac{A_{\text{II}}}{2} \cdot \left(1 + \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right)$$

$$B_{\text{I}} = \frac{A_{\text{II}}}{2} \cdot \left(1 - \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right)$$

- ▶ einsetzen in die Ansätze für die Wellenfunktionen in Bereich I und II

$$\Psi_{\text{I}}(x) = \frac{A_{\text{II}}}{2} \cdot \left[\left(1 + \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right) e^{jk_{\text{I}}x} + \left(1 - \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right) e^{-jk_{\text{I}}x} \right]$$

$$\Psi_{\text{II}}(x) = A_{\text{II}} \cdot e^{jk_{\text{II}}x}$$

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Wellenfunktionen Ψ_I und Ψ_{II}

$$\Psi_I(x) = \frac{A_{II}}{2} \cdot \left[\left(1 + \frac{k_{II}}{k_I} \right) e^{jk_I x} + \left(1 - \frac{k_{II}}{k_I} \right) e^{-jk_I x} \right]$$

$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \cdot e^{jk_{II} x}$$

- ▶ A_{II} ist ein unbestimmter Faktor
- ▶ es interessieren nur die Verhältnisse
 - ▶ Reflexionskoeffizient R
= refl. Teilchenstrom / einf. Teilchenstrom = B_I/A_I
 - ▶ Transmissionskoeffizient T
= transm. Teilchenstrom / einf. Teilchenstrom = A_{II}/A_I

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Teilchenstromdichte $\vec{S} = n \cdot \vec{v}$
 - ▶ Konzentration $[n] = \text{cm}^{-3}$
 - ▶ Geschwindigkeit $[v] = \text{cm/s}$
- ▶ Konzentration aus der Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit der Gesamt-Teilchenzahl N

$$n = N \cdot \Psi\Psi^*$$

- ▶ Normierung auf 1 Teilchen und Einsetzen in Stromdichte

$$\begin{aligned} \vec{s} &= \vec{S}/N \\ &= \Psi\Psi^* \cdot \vec{v} \end{aligned}$$

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Wellenfunktionen mit
 - ▶ rechtslaufenden Wellenamplituden A_I, A_{II} und
 - ▶ zurücklaufender Wellenamplitude B_I

$$\Psi_I(x) = A_I \exp(jk_I x) + B_I \exp(-jk_I x)$$

$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \exp(jk_{II} x)$$

- ▶ Stromdichte $\vec{s} = \Psi\Psi^* \cdot \vec{v}$
- ▶ Reflexionskoeffizient R und Transmissionskoeffizient T

$$R = \frac{\overleftarrow{s}_I}{\overrightarrow{s}_I} = \frac{B_I B_I^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{\overleftarrow{v}_I}{\overrightarrow{v}_I}$$

$$T = \frac{\overrightarrow{s}_{II}}{\overrightarrow{s}_I} = \frac{A_{II} A_{II}^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{\overrightarrow{v}_{II}}{\overrightarrow{v}_I}$$

Fall 1: Teilchenenergie $W < V_0$

- ▶ rein imaginäre Wellenzahl in $\Psi_{II}(x) = A_{II} \exp(jk_{II} x)$

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m(W - V_0)}{\hbar^2}}$$

- ▶ Definition einer reellen Größe $k'_{II} = k_{II}/j$

$$\begin{aligned} k'_{II} &= \frac{1}{j} \cdot \sqrt{\frac{2m(W - V_0)}{\hbar^2}} = \frac{1}{j} \cdot \sqrt{-1} \cdot \sqrt{\frac{2m(V_0 - W)}{\hbar^2}} \\ &= \sqrt{\frac{2m(V_0 - W)}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

- ▶ exponentiell abklingende Amplitude
- ▶ Eindringtiefe $1/k'_{II} \rightarrow$ nichtklassisches Verhalten

Fall 1: Teilchenenergie $W < V_0$

- ▶ Reflektionskoeffizient

$$R = \frac{\overleftarrow{s}_I}{\overrightarrow{s}_I} = \frac{B_I B_I^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{\overleftarrow{v}_I}{\overrightarrow{v}_I}$$

- ▶ elastische Streuung: kein Energieübertrag an die Potentialstufe, kinetische Energie ist erhalten

$$|\overrightarrow{v}| = |\overleftarrow{v}|$$

- ▶ damit wird der Reflektionskoeffizient

$$R = \frac{B_I B_I^*}{A_I A_I^*}$$

Fall 1: Teilchenenergie $W < V_0$

- ▶ mit Beziehung zwischen Koeff. A, B und Wellenzahlen k

$$A_I = \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 + \frac{k_{II}}{k_I}\right) \text{ und } B_I = \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 - \frac{k_{II}}{k_I}\right)$$

- ▶ und rein imag. $k_{II} = jk'_{II}$ folgt für R

$$\begin{aligned} R &= \frac{B_I B_I^*}{A_I A_I^*} \\ &= \frac{\left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)^*}{\left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)^*} = \frac{\left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)}{\left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)} = 1 \end{aligned}$$

- ▶ alle Teilchen werden reflektiert, weil die Potentialstufe unendlich weit ausgedehnt ist und die Amplitude der Wellenfunktion in der Stufe exponentiell abnimmt

Fall 2: Teilchenenergie $W > V_0$

- ▶ aus den Wellenfunktionen mit reellem k_I, k_{II} von sich fortbewegenden Teilchen

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= \frac{A_{II}}{2} \cdot \left[\left(1 + \frac{k_{II}}{k_I}\right) e^{jk_I x} + \left(1 - \frac{k_{II}}{k_I}\right) e^{-jk_I x} \right] \\ \Psi_{II}(x) &= A_{II} \cdot e^{jk_{II} x} \end{aligned}$$

- ▶ mit Beziehung zwischen Geschwindigkeit und quantenmechanischem Impuls

$$v_{II} = \frac{\hbar}{m} k_{II} \text{ und } v_I = \frac{\hbar}{m} k_I$$

- ▶ wird der Transmissionskoeffizient T

$$T = \frac{\overrightarrow{s}_{II}}{\overrightarrow{s}_I} = \frac{A_{II} A_{II}^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{\overrightarrow{v}_{II}}{\overrightarrow{v}_I} = \frac{A_{II} A_{II}^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{k_{II}}{k_I}$$

Fall 2: Teilchenenergie $W > V_0$

- ▶ Transmissionskoeffizient T

$$T = \frac{\overrightarrow{s}_{II}}{\overrightarrow{s}_I} = \frac{A_{II} A_{II}^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{\overrightarrow{v}_{II}}{\overrightarrow{v}_I} = \frac{A_{II} A_{II}^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{k_{II}}{k_I}$$

- ▶ Amplituden A_I und A_{II} beschreiben die Ortswahrscheinlichkeit und können wegen der Normierung der Wellenfunktion $\int \Psi \Psi^* dV = 1$ als reell gewählt werden: $A_i = A_i^*$, also $A_i A_i^* = A_i^2$

$$T = \frac{A_{II} A_{II}^*}{A_I A_I^*} \cdot \frac{k_{II}}{k_I} = \frac{A_{II}^2}{A_I^2} \cdot \frac{k_{II}}{k_I}$$

Fall 2: Teilchenenergie $W > V_0$

- ▶ mit Beziehung zwischen Amplituden A_i und Wellenzahlen k_i

$$A_{\text{I}} = \frac{A_{\text{II}}}{2} \cdot \left(1 + \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right)$$

- ▶ wird der Transmissionskoeffizient

$$T = \frac{A_{\text{II}}^2}{A_{\text{I}}^2} \cdot \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} = 4 \frac{\frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}}{\left(1 + \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}\right)^2}$$

- ▶ für $W \gg V_0$ ist $k_{\text{II}} \sim k_{\text{I}}$ und damit $T \rightarrow 1$, vgl. klass. Mechanik
- ▶ für $W \gtrsim V_0$ ist $T < 1$ und damit $R > 0$, das gibt es nur in der Quantenmechanik!

Zusammenfassung 2. Vorlesung

- ▶ Wellenpaket und Teilchengeschwindigkeit
- ▶ Schwebung mit komplexen Zahlen
- ▶ Schrödinger-Gleichung, mit Variablentrennung stationäre und zeitabhängige S.Gl.
- ▶ freies Teilchen in der Schrödingergleichung
- ▶ Teilchen an der Potentialstufe
- ▶ Stetigkeit und Differenzierbarkeit zur Lösung der S.Gl.

Ausblick auf 2. Übung

- ▶ Photoeffekt mit Rechnungen
- ▶ Unschärfe in der QM und in der klassischen Physik

Danke für Ihre Teilnahme