

Festkörperelektronik

Vorlesung 3

Prof. Nils Weimann

IW / Bauelemente der Höchstfrequenzelektronik (BHE)

24.04.2025



Zusammenfassung der letzten Vorlesung

- ▶ Elektronen = Wellenfunktionen
- ▶ Normierbarkeit und geometrische Randbedingungen
- ▶ Wellenpakete, Schwebung
- ▶ Bewegungsgleichung → Schrödingergleichung
- ▶ Trennung der Variablen Ort und Zeit
- ▶ zeitunabhängige Schrödingergleichung
- ▶ einfache Anwendungen dazu
 - ▶ freies Elektron – Wellenpaket
 - ▶ Potentialstufe

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 $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \cdot \Psi = -j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$
- ▶ 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
- ▶ 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
- ▶ Abkürzungen 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: 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. O. $-j\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi} = -W$ (von $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Theta''}{\Theta} - V = -j\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi}$)
→ 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

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

- ▶ 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 in zeitunabhängige Schrödingergleichung $\frac{\hbar^2}{2m} \Theta'' + (W - V)\Theta = 0$

$$\Theta'' + k^2 \Theta = 0$$
- ▶ Ansatz für die spezielle Lösung $\Theta(x) = c(k) \exp(jkx)$
- ▶ allgemeine Lösung als Überlagerung (Superposition) unendlich vieler spezieller Lösungen mit variablem k

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

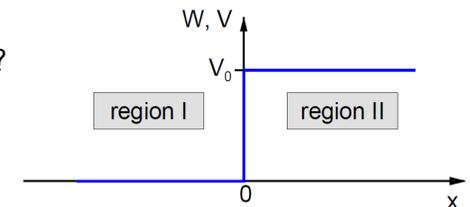
- ▶ gesamte Wellenfunktion mit Lösung der R.S.

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

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

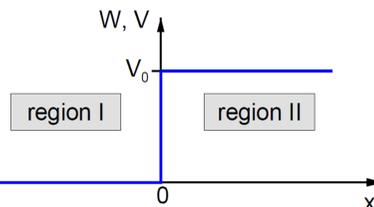
Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Beschreibung für Elektron übertretend
 - ▶ Festkörper-Vakuum-Grenzfläche (Oberfläche)
 - ▶ pn -Übergang (Diode)
 - ▶ Metall-Halbleiter-Kontakt
- ▶ Elektron trifft von links kommend auf Potentialstufe auf
- ▶ klassisches Verhalten:
 - ▶ Reflexion für $W_{kin} < V_0$
 - ▶ Transmission sonst
- ▶ Schrödingergleichung ?



Teilchen an einer Potentialstufe

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

$$\Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0)$$

$$\Psi_I'(x=0) = \Psi_{II}'(x=0)$$

- ▶ mit den Ansätzen

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

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

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

$$A_I + B_I = A_{II}$$

$$jk_I A_I - jk_I B_I = jk_{II} A_{II}$$

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ 2 Gleichungen für die 3 Unbekannten

$$A_I + B_I = A_{II}$$

$$jk_I A_I - jk_I B_I = jk_{II} A_{II}$$

- ▶ 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)

$$\begin{aligned}A_I + B_I &= A_{II} \\k_I A_I - k_I B_I &= k_{II} A_{II}\end{aligned}$$

- ▶ umformen

$$\begin{aligned}A_I &= \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 + \frac{k_{II}}{k_I}\right) \\B_I &= \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 - \frac{k_{II}}{k_I}\right)\end{aligned}$$

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ 2 umgeformte Gleichungen

$$\begin{aligned}A_I &= \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 + \frac{k_{II}}{k_I}\right) \\B_I &= \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 - \frac{k_{II}}{k_I}\right)\end{aligned}$$

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

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

Teilchen an einer Potentialstufe

- ▶ Wellenfunktionen Ψ_I und Ψ_{II}

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

- ▶ 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 $k'_{II} = k_{II}/j$

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

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

- ▶ exponentiell abklingende Amplitude mit Eindringtiefe k'_{II}
- ▶ nichtklassisches Verhalten

Fall 1: Teilchenenergie $W < V_0$

- ▶ Reflexionskoeffizient

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

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

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

- ▶ damit wird der Reflexionskoeffizient

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

Fall 1: Teilchenenergie $W < V_0$

- ▶ mit Beziehung zwischen Koeff. A, B und Wellenzahlen k
 $A_I = \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 + \frac{k_{II}}{k_I}\right)$ und $B_I = \frac{A_{II}}{2} \cdot \left(1 - \frac{k_{II}}{k_I}\right)$

- ▶ wird der Reflexionskoeffizient mit rein imag. $k_{II} = jk'_{II}$

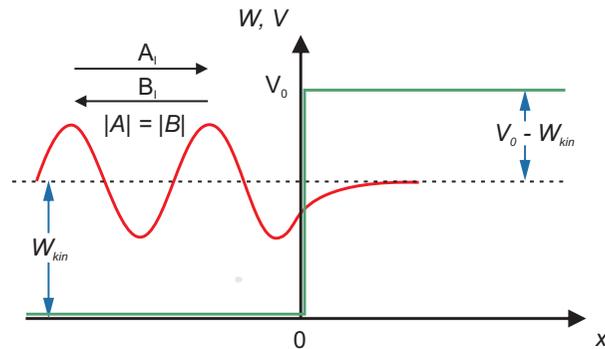
$$R = \frac{B_I B_I^*}{A_I A_I^*}$$

$$= \frac{\left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)^*}{\left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)^*} = \frac{\left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)}{\left(1 + \frac{jk'_{II}}{k_I}\right) \cdot \left(1 - \frac{jk'_{II}}{k_I}\right)} = 1$$

- ▶ $T = 1$ wegen nach rechts unendlicher Potentialstufe, in der Stufe nimmt Ψ exponentiell ab
- ▶ Teilchenerhaltung vergleichbar mit klassischer Physik

Fall 1: Teilchenenergie $W < V_0$

Verlauf der Wellenfunktion an der Potentialstufe



Fall 2: Teilchenenergie $W > V_0$

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

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

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

- ▶ mit Beziehung zwischen Geschwindigkeit und quantenmechanischem Impuls

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

- ▶ wird der Transmissionskoeffizient

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

Fall 2: Teilchenenergie $W > V_0$

- ▶ Transmissionskoeffizient

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

- ▶ 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

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

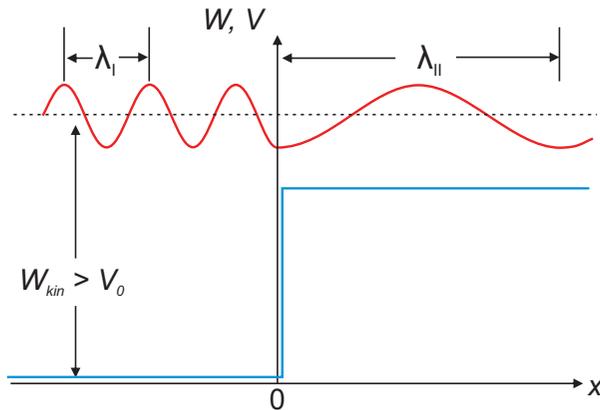
- ▶ wird der Transmissionskoeffizient

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

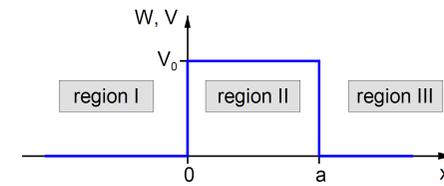
- ▶ für $W \gg V_0$ ist $k_{II} \sim k_I$ und damit $T \rightarrow 1$, vgl. klass. Mechanik
- ▶ für $W \gtrsim V_0$ ist $T < 1$ und damit $R > 0$, das gibt es nur in der Quantenmechanik!

Fall 2: Teilchenenergie $W > V_0$

- ▶ Verlauf der Wellenfunktion an der Potentialstufe
- ▶ geringere kinetische Energie über der Potentialstufe

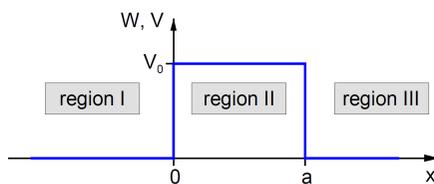


endliche Potentialbarriere



- ▶ Potentialbarriere mit endlicher Ausdehnung a
- ▶ Stufe der Höhe V_0
- ▶ ähnlicher Lösungsweg
 - ▶ Ansatz mit 3 Wellenfunktionen für die Bereiche I – III
 - ▶ Stetigkeit & Differenzierbarkeit
 - ▶ zeitunabhängige Schrödingergleichung

endliche Potentialbarriere



- ▶ Potentialverlauf
 - ▶ $V_I = 0$ für $x \leq 0$
 - ▶ $V_{II} = V_0$ für $0 \leq x \leq a$
 - ▶ $V_{III} = 0$ für $x \geq a$
- ▶ Wellenfunktionen $\Psi_I, \Psi_{II}, \Psi_{III}$
mit den Koeffizienten A_i und B_i mit $i = \{I, II, III\}$

endliche Potentialbarriere

Sechs Unbekannte in den Wellenfunktionen

$$\Psi_i(x) = A_i e^{jk_i x} + B_i e^{-jk_i x} \quad \text{mit } i = \{I, II, III\}$$

1. keine rücklaufende Welle in Bereich III, $B_{III} = 0$
2. Stetigkeit $\Psi_I = \Psi_{II}$ bei $x = 0$
3. Stetigkeit $\Psi_{II} = \Psi_{III}$ bei $x = a$
4. Diff'barkeit $\Psi'_I = \Psi'_{II}$ bei $x = 0$
5. Diff'barkeit $\Psi'_{II} = \Psi'_{III}$ bei $x = a$
6. Teilchenerhaltung im gesamten System $T + R = 1$

endliche Potentialbarriere

- ▶ mit Energieerhaltung $k_{III} = k_I$
- ▶ Transmissionskoeffizient T für $W < V_0$

$$T = \frac{A_{III}A_{III}^*}{A_I A_I^*} \frac{|\vec{v}_{III}|}{|\vec{v}_I|} = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_{II}a)}{4 \frac{W}{V_0} \left(1 - \frac{W}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

- ▶ und für $W > V_0$

$$T = \frac{A_{III}A_{III}^*}{A_I A_I^*} \frac{|\vec{v}_{III}|}{|\vec{v}_I|} = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_{II}a)}{4 \frac{W}{V_0} \left(\frac{W}{V_0} - 1\right)} \right]^{-1}$$

endliche Potentialbarriere

- ▶ Transmissionskoeffizient T für $W < V_0$

$$T = \frac{A_{III}A_{III}^*}{A_I A_I^*} \frac{|\vec{v}_{III}|}{|\vec{v}_I|} = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_{II}a)}{4 \frac{W}{V_0} \left(1 - \frac{W}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

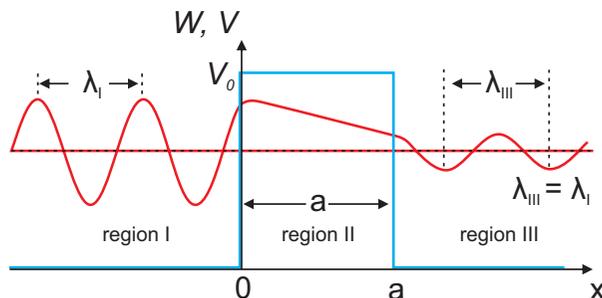
- ▶ und für $W > V_0$

$$T = \frac{A_{III}A_{III}^*}{A_I A_I^*} \frac{|\vec{v}_{III}|}{|\vec{v}_I|} = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_{II}a)}{4 \frac{W}{V_0} \left(\frac{W}{V_0} - 1\right)} \right]^{-1}$$

- ▶ es gilt für $W < V_0$ nicht $T = 0$ wie in der klass. Physik, sondern $T > 0$
- ▶ es gilt für $W > V_0$ nicht $T = 1$, sondern $T < 1$

Tunneleffekt $W < V_0$

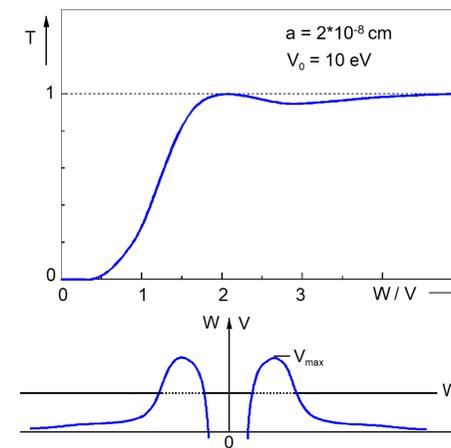
- ▶ endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Barriere, exponentiell abklingende Amplitude der Wellenfunktion
- ▶ einige Elektronen tunneln durch die Barriere: niedrigere Amplitude auf der rechten Seite
- ▶ Energieerhaltung: Wellenlänge bleibt gleich



Tunneleffekt $W < V_0$

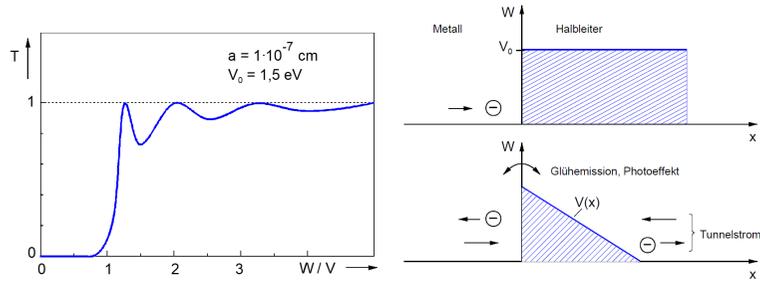
Atompotential im Festkörper:

Barrierenbreite 2 \AA , Barrierenhöhe 10 eV



Tunneleffekt $W < V_0$

Grenzfläche Halbleiter-Metall:
Barrierebreite 10 \AA , Barrierehöhe $1,5 \text{ eV}$



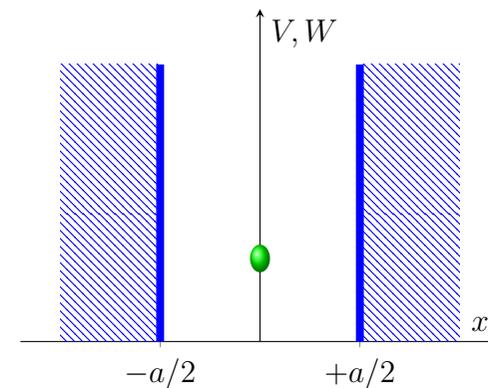
gebundene Teilchen

gebundene Teilchen

- ▶ können einen *eng begrenzten* Bereich nicht verlassen
→z.B. Elektron um einen Atomkern
- ▶ Bindung durch Potential
→z.B. Coulomb-Potential, Anziehung pos./neg. Ladung
- ▶ Quanten-Effekte bei atomar kleinem Begrenzungsvolumen

Elektron im Potentialtopf

Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden



Elektron im Potentialtopf

- ▶ zeitunabhängige S.Gl. für Wellenfunktionen im Potentialtopf und außerhalb

$$\begin{aligned} \Theta''(x) &= -k^2\Theta(x) & V &= 0 & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Theta(x) &= 0 & V &= \infty & \text{sonst} \end{aligned}$$

- ▶ Elektron ist im Potentialtopf eingesperrt
- ▶ Bedingungen an den Rändern des Potentialtopfs (wegen unendlich hoher Wände kein Eindringen des Elektrons in die Barriere)

$$\Theta\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0$$

Elektron im Potentialtopf

- ▶ Ansatz für die Lösung

$$\begin{aligned} \Theta(x) &= Ae^{jkx} + Be^{-jkx} \\ k &= \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

- ▶ Überlagerung von rechtslaufender und linkslaufender Welle
- ▶ stehende Welle $|A| = |B|$ wegen elastischer Reflexion des Elektrons an den unendlich hohen Potentialwänden

Elektron im Potentialtopf

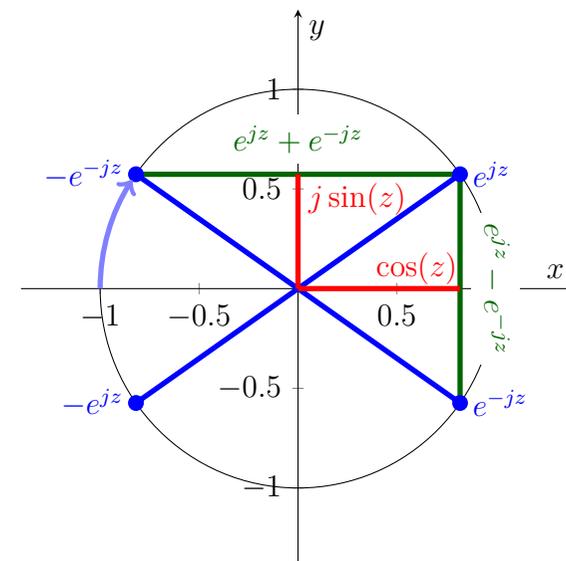
- ▶ für eine stehende Welle mit gleichen vor- und rücklaufenden Amplituden $|A| = |B|$ gibt es zwei Lösungsfunktionen

$$\begin{aligned} \Theta_u(x) &= A(e^{jk_u x} + e^{-jk_u x}) = 2A \cos(k_u x) \\ \Theta_g(x) &= A(e^{jk_g x} - e^{-jk_g x}) = 2jA \sin(k_g x) \end{aligned}$$

- ▶ Lösung Θ_u mit ungerader Symmetrie um $x = 0$
- ▶ und Lösung Θ_g mit gerader Symmetrie um $x = 0$
- ▶ allgemeine Lösung als Überlagerung von Θ_u und Θ_g mit vielen möglichen k_u und k_g , die aus den Randbedingungen folgen

Sinus, Kosinus und $\exp(jz)$

Drehung um Winkel z oder $-z$ von $\pm 1 + j0 = \pm \exp(0)$



Elektron im Potentialtopf

- ▶ Randbedingung an den Rändern des Potentialtopfs

$$\Theta\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0$$

- ▶ einsetzen in Lösungsfunktionen

$$\Theta_u(x) = 2A \cos(k_u x)$$

$$\Theta_g(x) = 2A \sin(k_g x)$$

Elektron im Potentialtopf

- ▶ gibt die erlaubten Werte für k_u

$$\Theta_u\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0 \implies 2A \cos\left(\pm k_u \frac{a}{2}\right) = 0$$

$$\implies k_u \cdot \frac{a}{2} = u \cdot \frac{\pi}{2}$$

$$\implies k_u = u \cdot \frac{\pi}{a}$$

mit

$$u = \{1, 3, 5, \dots\}$$

Elektron im Potentialtopf

- ▶ und die erlaubten Werte für k_g

$$\Theta_g\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0 \implies 2jA \sin\left(\pm k_g \frac{a}{2}\right) = 0$$

$$\implies k_g \cdot \frac{a}{2} = g \cdot \frac{\pi}{2}$$

$$\implies k_g = g \cdot \frac{\pi}{a}$$

mit

$$g = \{2, 4, 6, \dots\}$$

Elektron im Potentialtopf

- ▶ die Lösung für die Wellenfunktion ist also

$$\Theta_n(x) = 2A \cdot \begin{cases} \cos\left(n \cdot \frac{\pi}{a} x\right) & \text{für } n = \{1, 3, 5, \dots\} \\ j \sin\left(n \cdot \frac{\pi}{a} x\right) & \text{für } n = \{2, 4, 6, \dots\} \end{cases}$$

Elektron im Potentialtopf

- ▶ und mit der Beziehung zwischen k und W

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

folgt für die *erlaubten* Energiewerte

$$W_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(n \cdot \frac{\pi}{a} \right)^2 = \frac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2 \quad \text{für } n = \{1, 2, 3, \dots\}$$

- ▶ die Energie im Potentialtopf ist *gequantelt*
- ▶ der Grundzustand besitzt die Energie

$$W_1 = \frac{h^2}{8ma^2} > 0$$

denn für $n = 0$ ist $k = 0$, d.h. $\Psi = \text{konstant} \stackrel{!}{=} 0$

Zusammenfassung 3. Vorlesung

- ▶ Wellenfunktionen für Teilchen
- ▶ Schwebung mit komplexen Zahlen
- ▶ Schrödinger-Gleichung, mit Variablentrennung stationäre und zeitabhängige S.Gl.
- ▶ freies Teilchen in der Schrödingergleichung
- ▶ Teilchen an der Potentialstufe und im Potentialtopf

Ausblick

- ▶ auf 3. Übung: Rechenbeispiele für Potentialstufe
- ▶ nächste Vorlesung: Zusammenhang zwischen Potentialtopf und Elektron im Atom sowie im Kristall

Danke für Ihre Teilnahme!