Festkörperelektronik

Vorlesung 4

Prof. Nils Weimann

IW / Bauelemente der Höchstfrequenzelektronik (BHE)

08.05.2025

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN

Offen im Denken

Ziele der 4. Vorlesung

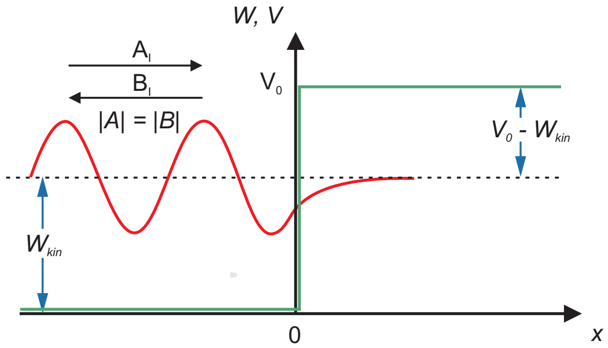
- endlicher Potentialtopf
- Wasserstoff-Atommodell
- Periodensystem

Zusammenfassung der letzten Vorlesung

- Anwendungen der Schrödingergleichung für ideale 1-Partikel Systeme
  - Potentialstufe – unendlich ausgedehnt und endlich
  - Quantentopf
  - endliche Eindringtiefe in Potentialwand
  - Transmissionswahrscheinlichkeit $0 < T < 1$

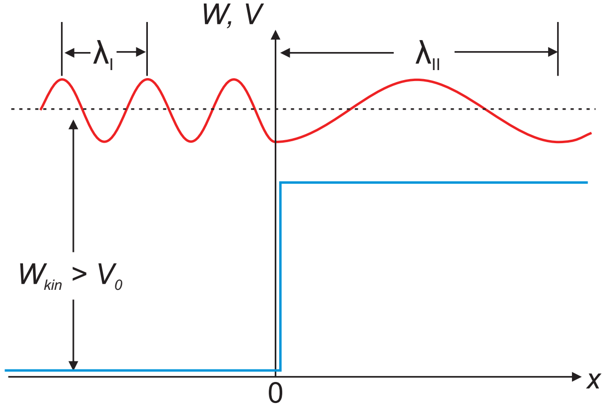
endliche Potentialstufe

- Wellenfunktion an der Potentialstufe für $W < V_0$
- endlicher Transmissionskoeffizient $0 < T < 1$

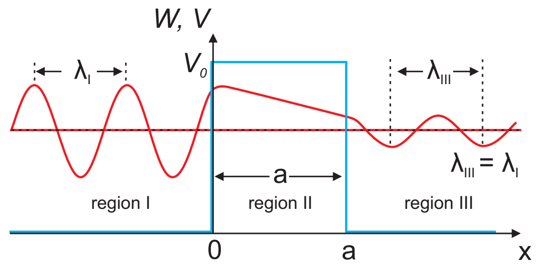


endliche Potentialstufe

- Wellenfunktion an der Potentialstufe für $W > V_0$
- geringere kinetische Energie über der Potentialstufe
- Reflektionskoeffizient $R > 0$



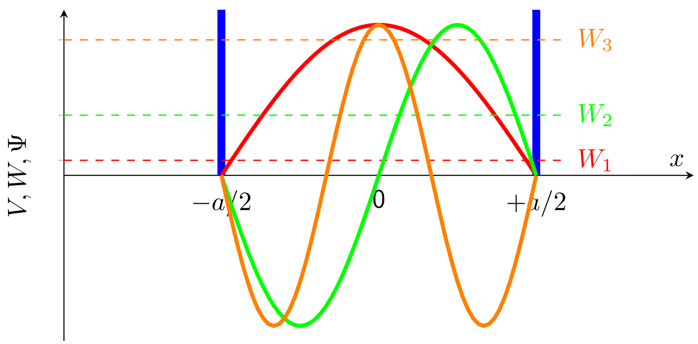
Tunneleffekt



- endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Barriere, exponentiell abklingende Amplitude der Wellenfunktion
- auch für $W < V_0$ kann ein Teil der einfallenden Elektronen durch die Barriere tunneln: reduzierte Amplitude auf der rechten Seite
- Energieerhaltung: Wellenlänge bleibt gleich

Potentialtopf

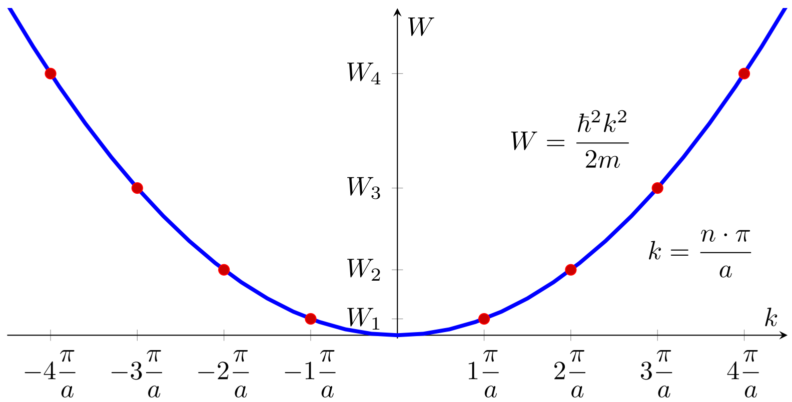
Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden



- gequantelte Energie $W_n = \dfrac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2$ für $n = 1, 2, 3, \ldots$

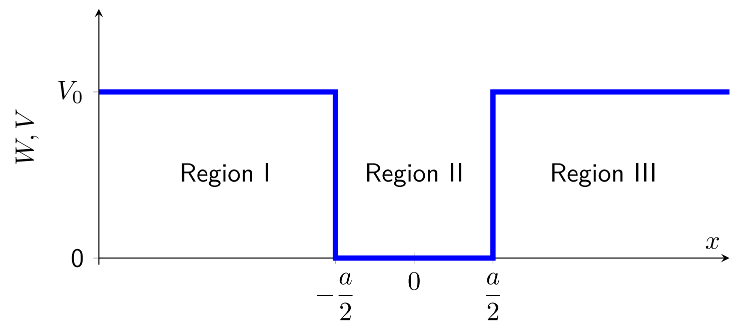
Potentialtopf

erlaubte Energiewerte im Potentialtopf



endlicher Potentialtopf

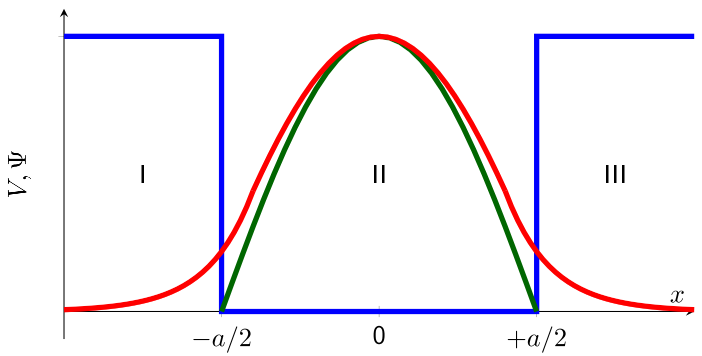
endlicher Potentialtopf



- Teilchen befindet sich in Region II
- vorgegebenes Potential $V_I = V_{III} = V_0$ und $V_{II} = 0$
- gebundene Lösungen für $W < V_0$

Wellenfunktion im endlichen Potentialtopf

Potentialtopf mit endlich hohen Wänden



- Teilchen befindet sich in Region II
- vorgegebenes Potential $V_I = V_{III} = V_0$ und $V_{II} = 0$
- gebundene Lösungen für $W < V_0$, $\Psi \to 0$ für $|x| \to \infty$

Wellenfunktion im endlichen Potentialtopf

- exponentiell abklingende Amplitude in I und III, $k'' \in \mathbb{R}$

$$\Psi_I(x) = A_I \exp\left(k''_I x\right) \qquad \text{(hier ist } x < 0\text{)}$$
$$\Psi_{III}(x) = A_{III} \exp\left(-k''_{III} x\right) \qquad \text{(hier ist } x > 0\text{)}$$

- Überlagerung links- und rechtslaufender Welle in II

$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \exp\left(jk_{II}x\right) + B_{II} \exp\left(-jk_{II}x\right)$$

- analog zu den vorher behandelten Fällen gilt hierbei

$$k_{II}^2 = 2mW/\hbar^2 \qquad \text{im Bereich II}$$
$$k''^2_I = k''^2_{III} = -2m\left(V_0 - W\right)/\hbar^2 \qquad \text{in I und III}$$

- und durch Ausnutzen der Symmetrie der Geometrie

$$k''_I = k''_{III}$$

Lösungsweg für endlichen Potentialtopf

- Ansätze und Randbedingungen Stetigkeit und Differenzierbarkeit an den Grenzflächen zwischen den Regionen
- Schrödingergleichung (Dgl.) $\rightarrow$lineares Gleichungssystem
- für „echte“ Probleme mit 3D-Potentialverlauf kann dies numerisch gelöst werden
- im einfachen Fall mit $V_0 = const.$ außerhalb des 1D-Quantentopfs kann weiter analytisch gerechnet werden …

Ergebnisse der Randbedingungen

- Ansätze in den Bereichen

$$\Psi_i(x) = A_i \exp\left(-|k_i|'' x\right) \qquad i = \{I, III\}$$
$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \exp\left(jk_{II}x\right) + B_{II} \exp\left(-jk_{II}x\right)$$

- man findet für symmetrische (gerade) Lösungen $\Psi \sim \cos$

$$k_{II,g} \cdot \tan\left(k_{II,g} \cdot \frac{a}{2}\right) = k_I''$$

- es gilt für k_I'', der Eindringtiefe in die Barriere, auch

$$k_I'' = \sqrt{\frac{2m\left(V_0 - W\right)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_{II,g}^2}$$

wobei die kinetische Energie W mit dem Impuls im Potentialtopf $\hbar k_{II,g}$ ausgedrückt wird

Lösung des Gleichungssystems (gerade Wellenfunktion)

- transzendentes Gleichungssystem

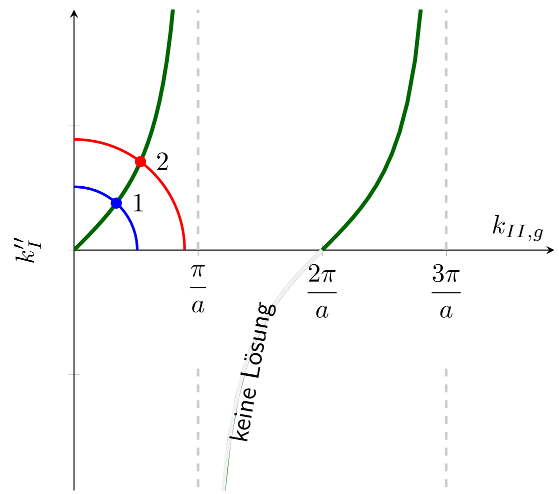
$$k_{II,g} \cdot \tan\left(k_{II,g} \cdot \frac{a}{2}\right) = k_I''$$

$$k_I''^2 + k_{II,g}^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv C_0$$

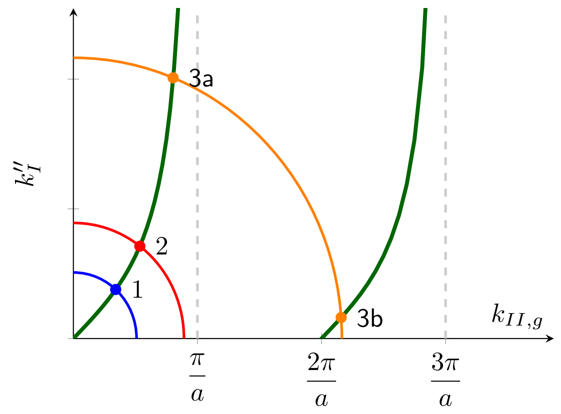
- Lösungsmenge gegeben durch Werte für $k_{II,g}$ und k_I'', die beide Gleichungen erfüllen $\rightarrow$graphische Lösung
- Parameter C_0 entspricht der Tiefe des Potentialtopfs, d.h. dem Potential V_0, und ist neben der Geometrie $a/2$ vorgegeben

graphische Lösung

gerade Wellenfunktion

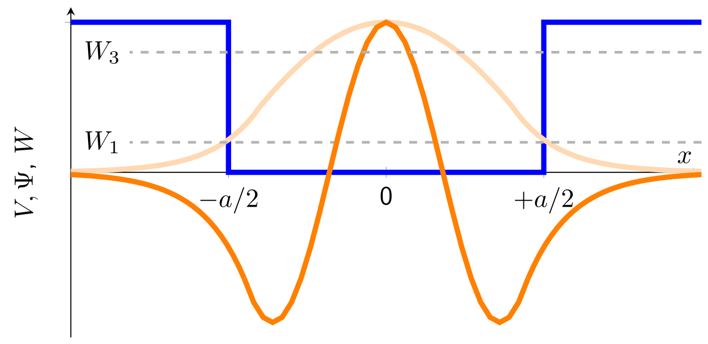


graphische Lösung gerade Wellenfunktion



- für tieferen Potentialtopf mehr als eine Lösung!

gerade Wellenfunktionen im endlichen Potentialtopf



Lösung des Gleichungssystems (ungerade Wellenfunktion)

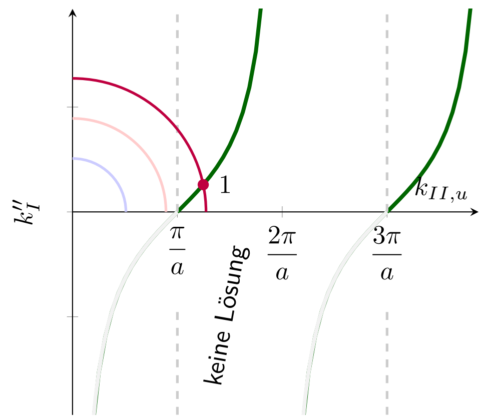
- transzendentes Gleichungssystem

$$-k_{II,u} \cdot \cot\left(k_{II,u} \cdot \frac{a}{2}\right) = k_I''$$

$$k_I''^2 + k_{II,u}^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv C_0$$

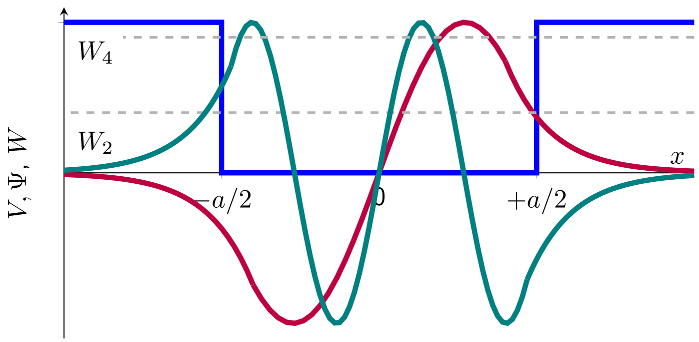
- Lösungsmenge gegeben durch Werte für $k_{II,g}$ und k_I'', die beide Gleichungen erfüllen $\rightarrow$graphische Lösung
- Parameter C_0 entspricht der Tiefe des Potentialtopfs, d.h. dem Potential V_0, und ist neben der Geometrie $a/2$ vorgegeben

graphische Lösung – ungerade

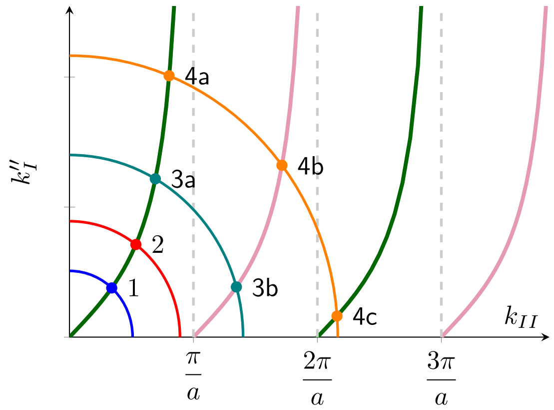


- nur für eine Mindesttiefe $V_{0,min} > \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ gibt es eine ungerade Lösung!

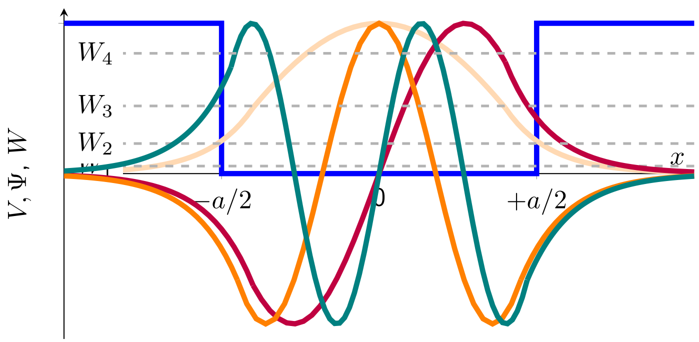
ungerade Wellenfunktionen im endlichen Potentialtopf



graphische Lösung – zusammengesetzt



gerade und ungerade Wellenfunktionen im endlichen Potentialtopf



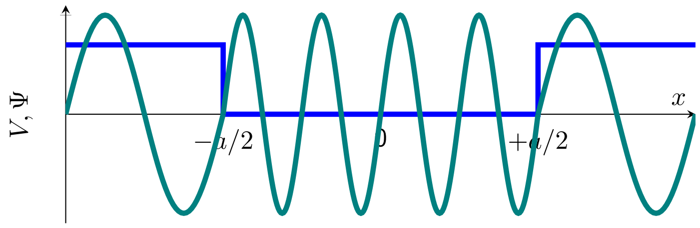
Fazit: Zustände im Potentialtopf

- graphische Lösung
- Kreisbögen schneiden periodische $\tan$ und $\cot$-Funktionen
- für ein gegebenes Potential V_0 sind nur endlich viele *diskrete* Wellenfunktionen Ψ_n mit zugehörigen Energiewerten W_n erlaubt
- der Grundzustand hat $W_1 > 0$ und ist gerade, dieser existiert für beliebig flache Potentialtöpfe
- für die höheren gebundene Zustände wechseln sich ungerade und gerade Symmetrie ab
- nur die Zustände sind gebunden, für die $W < V_0$ gilt
- was passiert für $W > V_0$?

Kontinuumslösungen für den endlichen Potentialtopf mit $W > V_0$

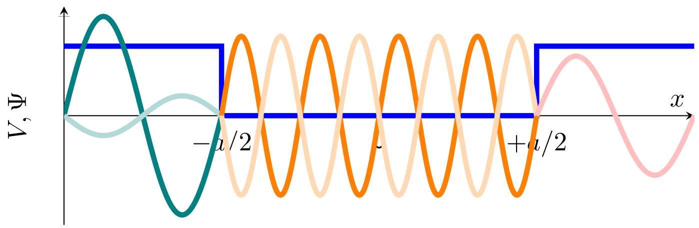
- Welle kommt von links
- klassisch: Teilchen fliegt über den Potentialtopf und merkt nichts
- Quantenmechanik?

Kontinuumslösungen für den endlichen Potentialtopf mit $W \gg V_0$



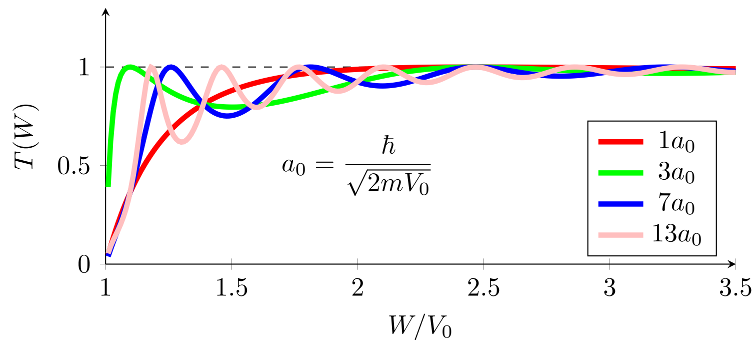
- höhere kinetische Energie über dem Topf
  $\rightarrow$dort kürzere Wellenlänge

Kontinuumslösungen für den endlichen Potentialtopf mit $W \gtrsim V_0$



- Reflektion an Diskontinuitäten führt zu stehender Welle
- reduzierte Amplitude aufgrund von $T < 1$
- bei erfüllter Resonanzbedingung im Topf
  $\rightarrow$höhere Transmission

Kontinuumslösungen für den endlichen Potentialtopf mit $W \gtrsim V_0$



$$T(W > V_0) = \left(1 + \frac{\sin^2(a \cdot k_{II})}{4\frac{W}{V_0}\left(\frac{W}{V_0} + 1\right)}\right)^{-1} \quad \text{mit } W = \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m}$$

Wasserstoffatom

- Ausnutzung der radialen Symmetrie: H-Atom ist physikalische Anwendung des 1D-Quantentopfs
- Coulomb-Potential hängt nur von $|r|$ ab:

$$V(r) = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r}$$

- mit den Ladungen $Q_{1,2}$ von Kern und Elektron, $\epsilon_r = 1$

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

- Kraft aus Orts-Ableitung des Potentials

$$F(r) = -\frac{V}{r} = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2}$$

Wasserstoffatom

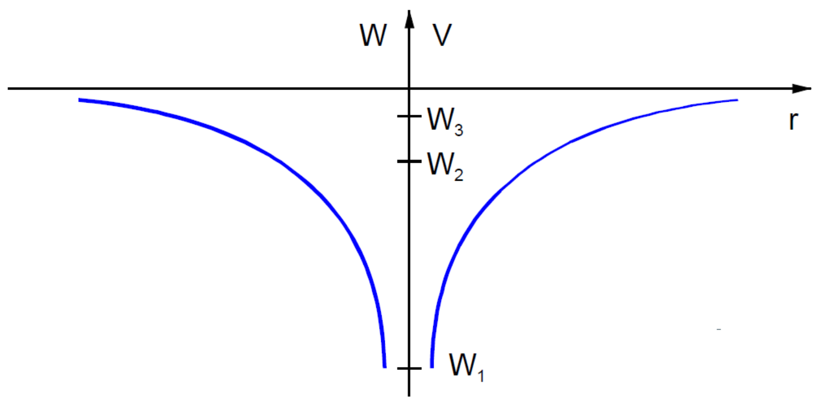
- schreibe die Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} x &= r\sin(\theta)\cos(\varphi) \\ y &= r\sin(\theta)\sin(\varphi) \\ z &= r\cos(\varphi) \end{aligned}$$

- transformiere den Laplace-Operator (durch Anwendung der Kettenregel)

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \end{aligned}$$

Wasserstoffatom



Wasserstoffatom

- Ergebnis liefert das *Eigenwertspektrum* des Wasserstoffs

$$W_n = -\frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 r_0} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{mit } n = \{1, 2, 3, \ldots\}$$

- darin steckt der Bohr'sche Atomradius

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{mq^2} = 5{,}29 \cdot 10^{-9}\,\text{cm}$$

- wir sehen wieder diskrete Energiewerte, diese rücken näher zusammen mit $W_n \to 0$
- W_n beschreibt eine Bindungsenergie, ist daher negativ
- diese muss aufgewendet werden, um das Elektron aus dem Atom zu befreien

$$W_{ion} = |W_\infty - W_1| = \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 r_0} = 13{,}6\,\text{eV}$$

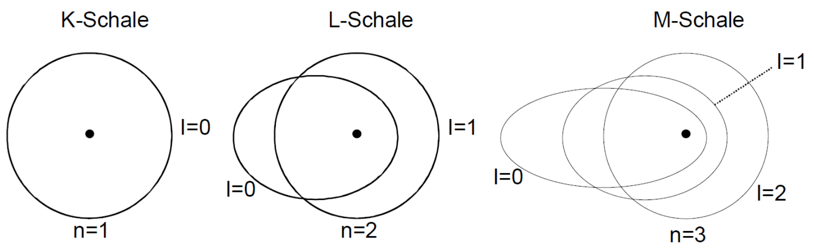
Bohr'sches Atommodell

- Bohr'sches Modell beschreibt Elektronen auf Bahnen, die um den Kern kreisen
- neben der Energie ist auch der Drehimpuls quantisiert, d.h. kann nur feste Werte annehmen →Quantenzahl l
- der Drehimpuls entspricht einer bewegten Ladung und hat damit ein magnetisches Moment, das sich im Magnetfeld nur in festen Schritten ausrichten kann →Quantenzahl m
- Elektronen drehen sich um ihre eigene Achse, dieser sogenannte Spin s beschreibt einen Kreisstrom, ist im Magnetfeld nachweisbar
- Satz von Quantenzahlen $\{n, l, m, s\}$ kann das Periodensystem beschreiben

Bohr'sches Atommodell

- vollständiger Satz von Quantenzahlen $\{n, l, m, s\}$ kann das Periodensystem beschreiben
- n, l, m können nur ganzzahlige Werte annehmen
  - Energie-Hauptquantenzahl $n = \{1, 2, 3 \ldots\}$
  - Drehimpuls-Nebenquantenzahl $l \leq n - 1$
  - Drehmipulsausrichtungs-Nebenquantenzahl m, hier gilt $-l \leq m \leq l$
- Spinquantenzahl $s = \{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\}$

Bohr'sches Atommodell

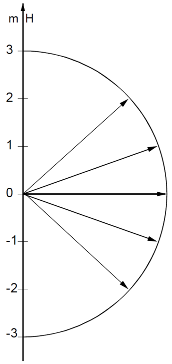


- höchste Exzentrizität, z.B. $l = 0$ bei $n = 3$, ist Zustand niedrigster Energie in Schale $n = 3$

Pauli-Prinzip

- Elektronen eines Atoms unterscheiden sich in mindestens einer Quantenzahl
- Zustände werden von unten, d.h. von der niedrigsten Energie her, aufgefüllt
- es sind jeweils 2 Elektronen in einem Zustand, der von $\{n, l, m\}$ bestimmt wird

Orientierungsquantenzahl



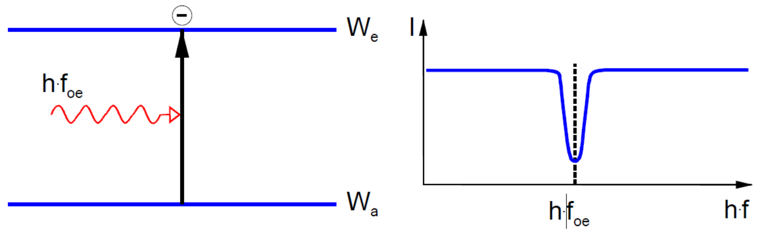
- im Magnetfeld führt die Ausrichtung m zu einer Aufspaltung der Energieniveaus

Periodensystem

n	l	m	s	Schale	max. Anz. der Elektronen in der Schale	Element (Kernladung)	Besetzung der Schalen	Anz. der verschiedenen Elektronen in der jeweiligen Schale
1	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	K	2 (1s)	1^{H}		1x1s
						2^{He}		2x1s
2	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	L	2 (2s)	3^{Li}	L K	1x2s 2x1s
	1	-1	$\pm\frac{1}{2}$		6 (2p)	4^{Be}		2x2s 2x1s
		0	$\pm\frac{1}{2}$			5^{B}		2x2s 2x1s + 1x2p
		+1	$\pm\frac{1}{2}$			6^{C}		2x2s 2x1s + 2x2p
						7^{N}		.
						8^{O}		.
						9^{F}		
					$\sum 8$	10^{Ne}		2x2s 2x1s + 6x2p
3	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	M	2 (3s)	11^{Na}	M L K	1x3s 2x2s 2x1s + 6x2p
	1	-1	$\pm\frac{1}{2}$		6 (3p)	12^{Mg}		.
		0	$\pm\frac{1}{2}$			13^{Al}		.
		+1	$\pm\frac{1}{2}$			14^{Si}		2x3s + 2x3p 2x2s + 6x2p 2x1s
					10 (3d)	15^{P}		.
						16^{S}		.
						17^{Cl}		
						18^{Ar}		2x3s + 6x3p 2x2s + 6x2p 2x1s
	2	-2	$\pm\frac{1}{2}$		$\sum 18$			

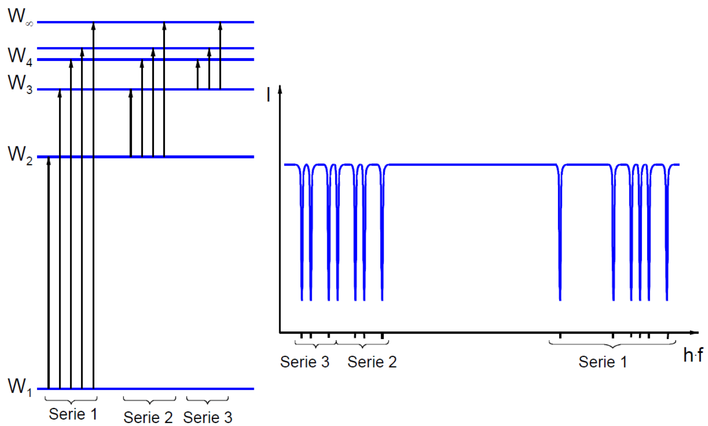
Prinzip der Spektroskopie

$$h \cdot f_{ae} \;=\; W_e - W_a$$

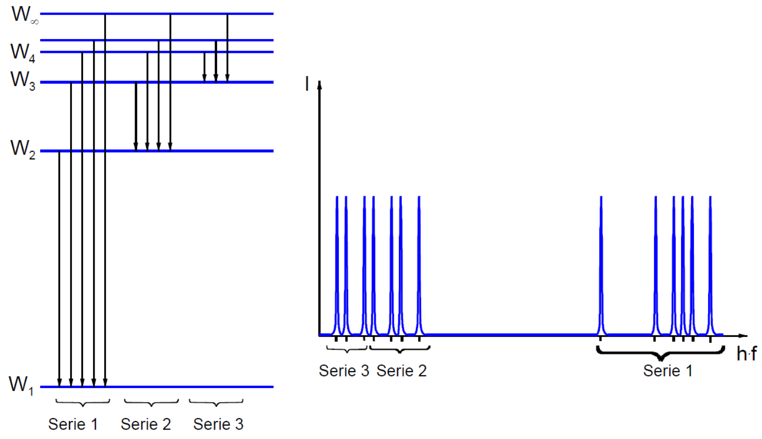


- Energie des Lichtquants entspricht der Übergangsenergie →Resonanz →Energieübertrag
- Auswahlregeln müssen beachtet werden (Drehimpuls ist erhalten!)

Absorptionsspektroskopie



Emissionsspektroskopie



Zusammenfassung 4. Vorlesung

- endlicher Potentialtopf
  - gerade und ungerade Lösungen
  - grafische Methode zum Auffinden der erlaubten Energiewerte
  - gebundene Zustände
  - resonantes Tunneln – Kontinuumszustände
- Atommodell und Periodensystem
  - Wasserstoffatom, Bohr'sches Modell aus radialsymmetrischer Sgl.
  - Quantenzahlen
  - Pauli-Prinzip
  - Messung der Übergänge mit Spektroskopie

Ausblick

- auf 4. Übung: Rechenbeispiele für Potentialstufe
- nächste Vorlesung: Erweiterung des Potentialtopf-Modells auf Kristalle, d.h. periodische Strukturen

Danke für Ihre Teilnahme!