Übersicht über die Vorlesung

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

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

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitunabh. S-Glg:

$$\boxed{j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,\cancel{t}) \right\} \psi(x,t)}$$

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

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

Ist das Potential zeitunabhängig, so kann die Wellenfunktion als Produkt von einem Phasenfaktor und einem zeitunabhängigen Term angesetzt werden:

$$\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-j\omega t}$$

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

$$\boxed{j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,\cancel{t})\right\}\psi(x,t)}$$

Ist das Potential zeitunabhängig, so kann die Wellenfunktion als Produkt von einem Phasenfaktor und einem zeitunabhängigen Term angesetzt werden:

$$\psi(x,t)=\varphi(x)e^{-j\omega t}$$

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

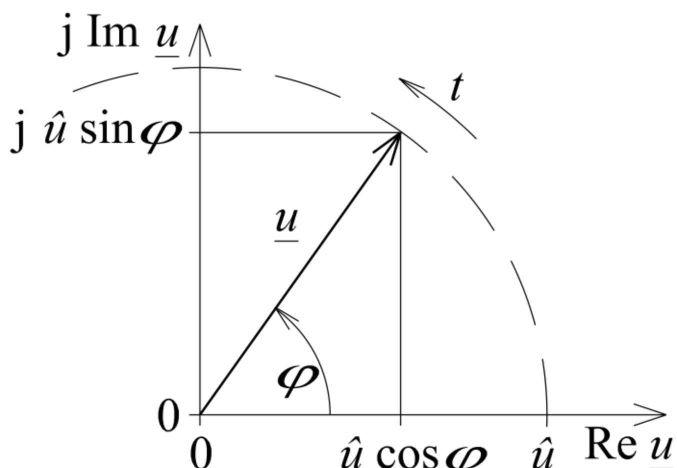
$$\boxed{j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,\cancel{t})\right\}\psi(x,t)}$$

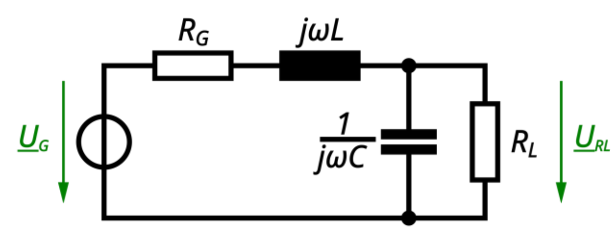
Ist das Potential zeitunabhängig, so kann die Wellenfunktion als Produkt von einem Phasenfaktor und einem zeitunabhängigen Term angesetzt werden:

$$\psi(x,t)=\varphi(x)e^{-j\omega t}$$

ähnliches Vorgehen wie beim Wechselstromkreis:

Betrachtung der Situation für ein bestimmtes ω:





Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

$$\boxed{j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,\cancel{t}) \right\} \psi(x,t)}$$

Ist das Potential zeitunabhängig, so kann die Wellenfunktion als Produkt von einem Phasenfaktor und einem zeitunabhängigen Term angesetzt werden:

$$\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-j\omega t}$$

Einsetzen:

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = j\hbar \frac{\partial}{\partial t}\big(\varphi(x)\exp(-j\omega t)\big) = j\hbar\varphi(x)\exp(-j\omega t)(-j\omega) = \hbar\omega\varphi(x)\exp(-j\omega t)$$

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

$$\boxed{j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,\cancel{t})\right\}\psi(x,t)}$$

Ist das Potential zeitunabhängig, so kann die Wellenfunktion als Produkt von einem Phasenfaktor und einem zeitunabhängigen Term angesetzt werden:

$$\psi(x,t)=\varphi(x)e^{-j\omega t}$$

Einsetzen:

$$j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=j\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\varphi(x)\exp(-j\omega t)\right)=j\hbar\varphi(x)\exp(-j\omega t)(-j\omega)=\hbar\omega\varphi(x)\exp(-j\omega t)$$

$$=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\varphi(x)\exp(-j\omega t)=\exp(-j\omega t)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\varphi(x)$$

Die zeitunabhängige S-Glg.

Die zeitabh. S-Glg:

$$\boxed{j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,\cancel{t}) \right\} \psi(x,t)}$$

Ist das Potential zeitunabhängig, so kann die Wellenfunktion als Produkt von einem Phasenfaktor und einem zeitunabhängigen Term angesetzt werden:

$$\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-j\omega t}$$

Einsetzen:

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = j\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Big(\varphi(x)\exp(-j\omega t)\Big) = j\hbar\varphi(x)\exp(-j\omega t)(-j\omega) = \hbar\omega\varphi(x)\exp(-j\omega t)$$

$$= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \varphi(x)\exp(-j\omega t) = \exp(-j\omega t)\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \varphi(x)$$

$$\Rightarrow \hbar\omega\varphi(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \varphi(x)$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\varphi(x)=\underset{W}{\hbar\omega}\,\varphi(x)$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\varphi(x)=\underbrace{\hbar\omega}_{W}\varphi(x)$$

nehmen wir wieder ψ statt φ:

$$\left\{\underbrace{\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{W_{kin}}+\underbrace{V(x)}_{W_{pot}}}_{W_{ges}}\right\}\psi(x)=W\psi(x)$$

„Zeitunabhängige“ (stationäre) Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x)=W\psi(x)$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\varphi(x)=\underbrace{\hbar\omega}_{W}\,\varphi(x)$$

nehmen wir wieder ψ statt φ:

$$\left\{\underbrace{\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{W_{kin}}+\underbrace{V(x)}_{W_{pot}}}_{W_{ges}}\right\}\psi(x)=W\psi(x)$$

„Zeitunabhängige“ (stationäre)
Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x)=W\psi(x)$$

$\hat{H}$ ist der Hamiltonoperator (Hamiltonian)

Wiliam Rowan Hamilton
*1805 (Dublin) †1865 (Dublin)

Die zeitunabhängige S-Glg. als Eigenwertproblem

Operator angewendet auf die Funktion ergibt wieder die Funktion selber, multipliziert mit einer Konstanten ....

$$\hat{H}\psi(x) = W\psi(x)$$

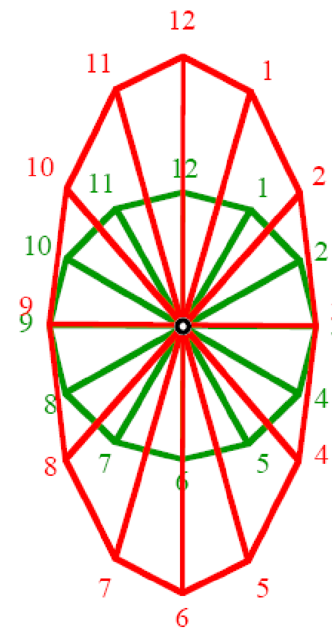
Gesucht sind also im Allgemeinen **Eigenfunktionen** und **Eigenwerte** zum Hamiltonoperator.

Die zeitunabhängige S-Glg. als Eigenwertproblem

Operator angewendet auf die Funktion ergibt wieder die Funktion selber, multipliziert mit einer Konstanten ....

…analog zum Eigenwertproblem der linearen Algebra !

$$\hat{A}\vec{e} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \vec{e} = E_\lambda \vec{e}$$



Gesucht sind also im allgemeinen **Eigenfunktionen** und **Eigenwerte** zum Hamiltonoperator.
Die weitreichenden Analogien sind noch offenkundiger in der Matrizenmechanik, der Heisenberg'schen Formulierung der Quantenmechanik.

Übersicht über die Vorlesung

1. **Grundlagen der Quantenmechanik**
2. **Elektronische Zustände**
    - 2.1 Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung
    - 2.2 Der unendlich hohe Potentialtopf
    - 2.3 Der endliche Potentialtopf
    - 2.4 Potentialbarrieren
    - 2.5 Eigentliche und uneigentliche Zustände, Normierung
    - 2.6 Quantenmechanische Messungen
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**

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf

Diese Situation ist näherungsweise in vielen modernen Halbleiterbauelementen gegeben:

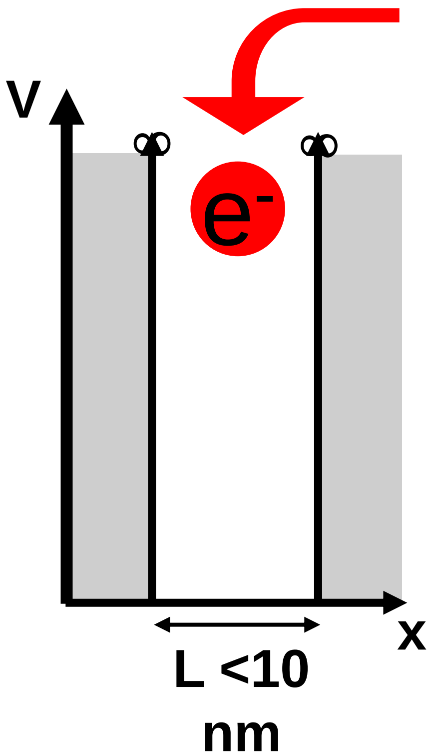
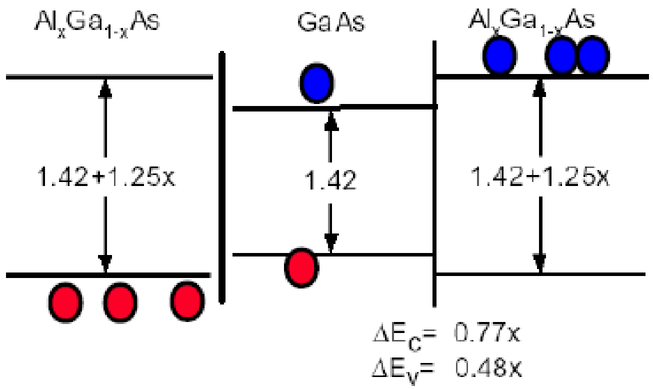
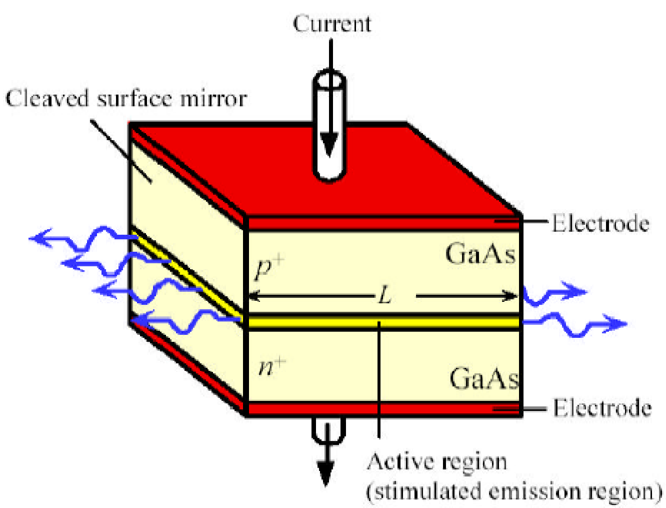


Abb.: Schema eines Elektrons im Potentialtopf





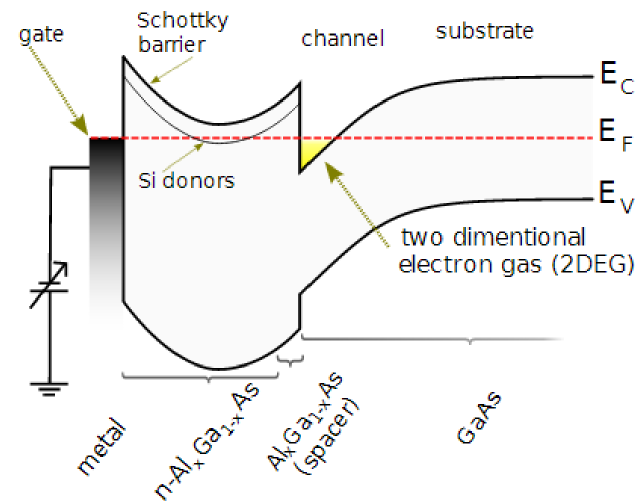
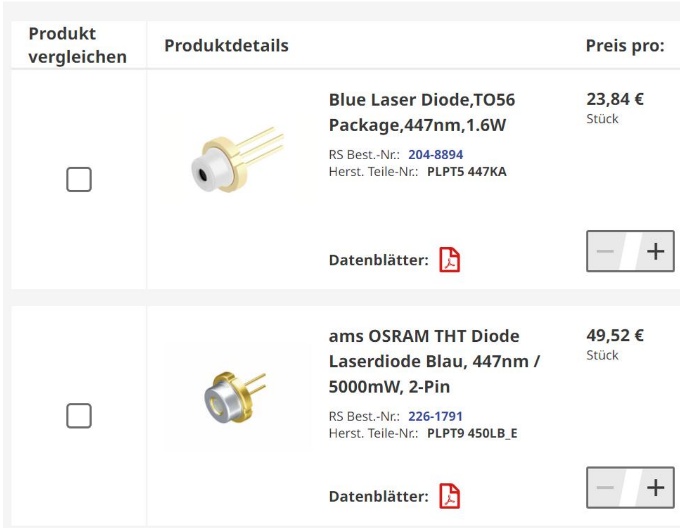


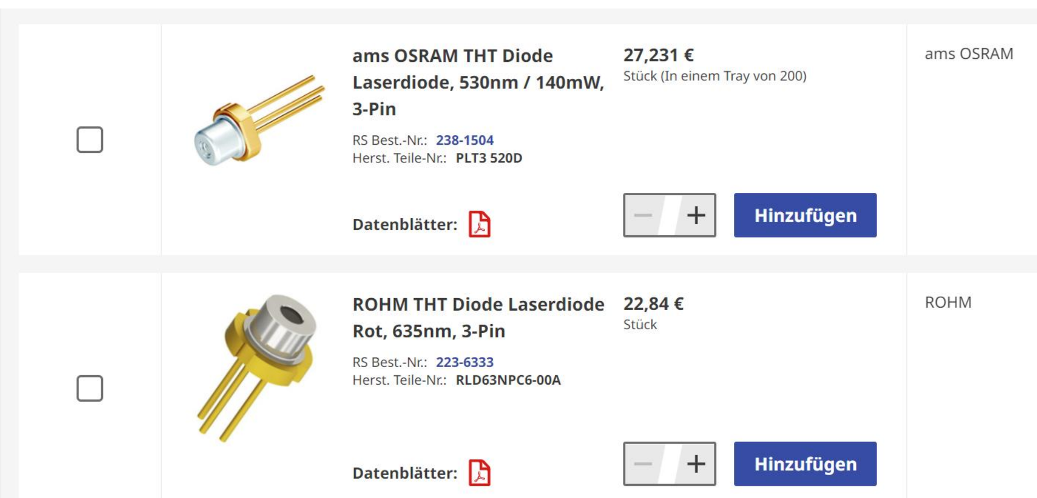
Abb.: Banddiagramm eines HEMT (high electron mobility transistors) (oben)

Abb: Schema einer Halbleiterlaserdiode (links, links oben)

Leucht- und Laserdioden: Eine Vielzahl von Potentialtöpfen



https://de.rs-online.com/web/c/displays-und-optoelektronik/lasermodule-und-komponenten/laser-dioden/?pn=1&rpp=20&sortBy=attributes.Peak_Wavelength&sortType=ASC



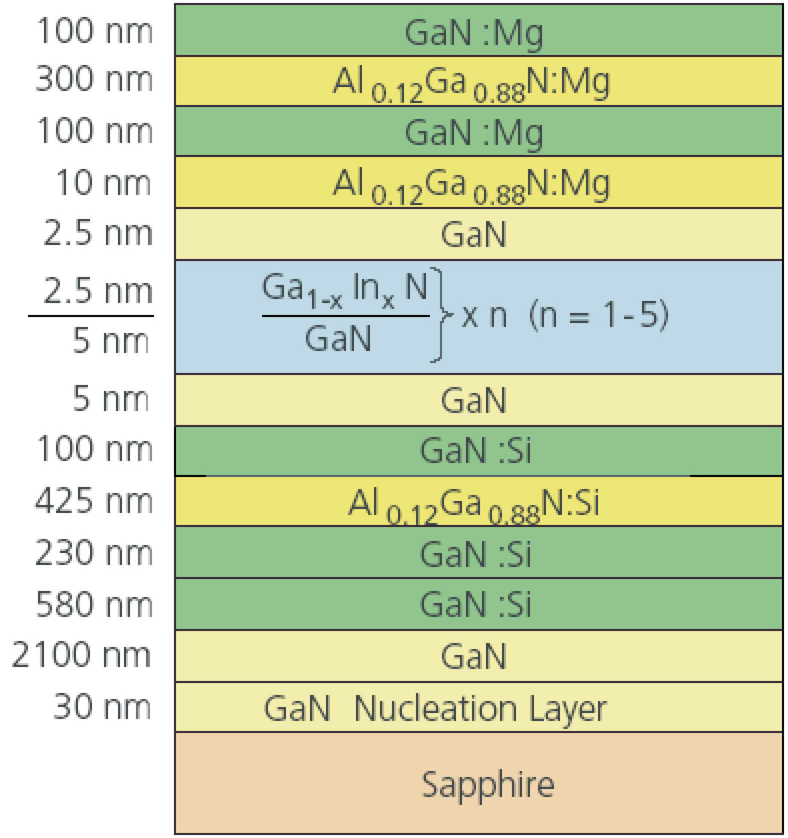
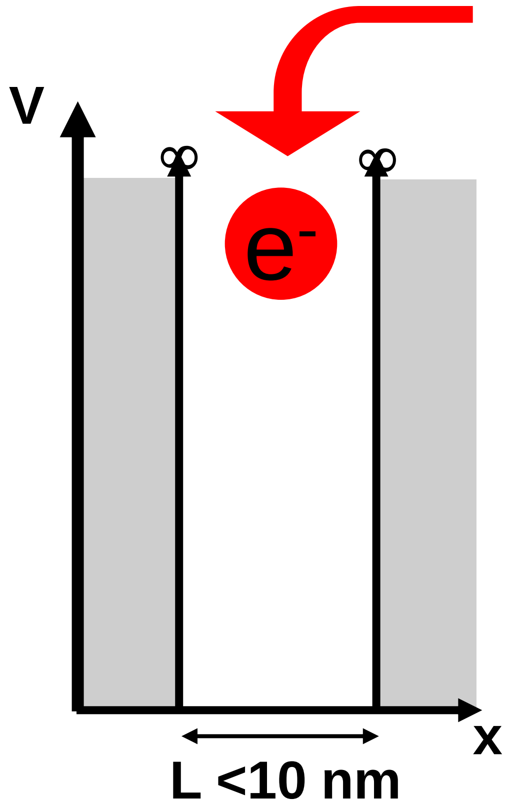


Fig. 2: Typical epitaxial layer sequence of an (AlGaIn)N-based QW diode laser.
Abb. 2: Typische epitaktische Schichtenfolge eines (AlGaIn)N-Quantenfilm-Diodenlasers.

Quelle: FHG-IAF, Freiburg

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



klassisch:

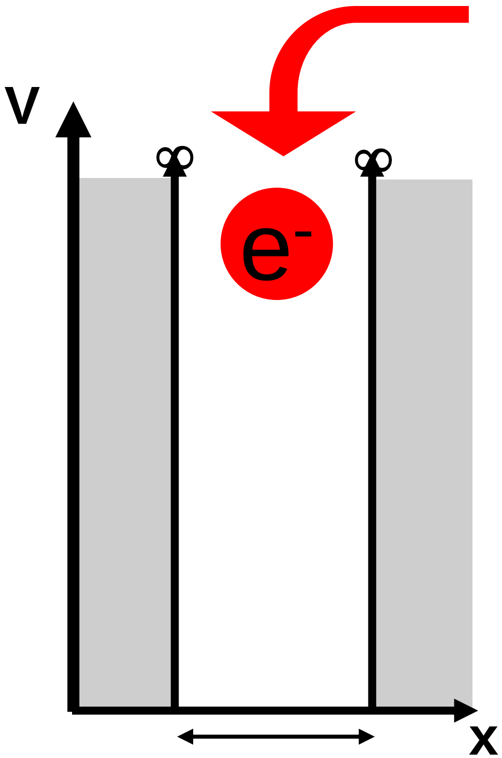
Elektron „liegt“ entweder auf dem Boden
(kinetische Energie = 0)

oder

-bewegt sich wie ein Ping-Pong-Ball
hin und her

-stösst jeweils gegen die Wand und kehrt
Impuls und Geschwindigkeit um

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



Quantenmechanisch:

Suche Eigenfunktionen und Eigenwerte zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung:

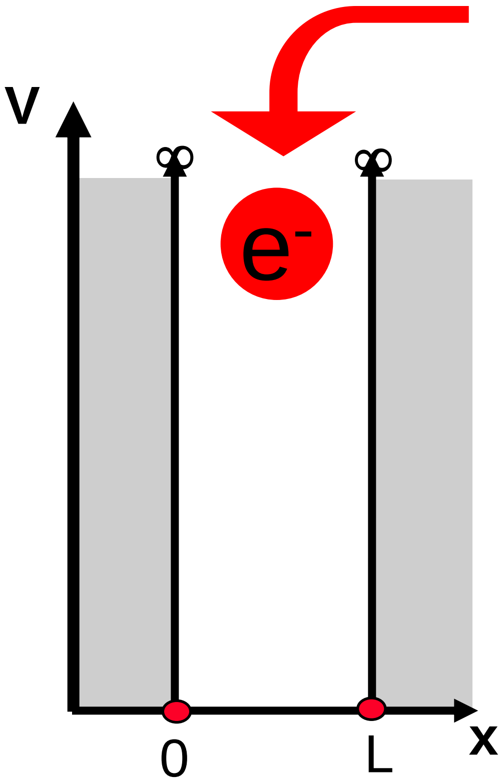
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi(x)=W\psi(x)$$

mit

$$V(x)=\begin{cases}0: 0<x<L\\ \infty: \quad \text{sonst}\end{cases}$$

…vollkommen analog zum elektromagnetischen Hohlraumresonator !

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



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

Qualitatives zur Lösung:

Unendlich hoher Potentialwall

↓

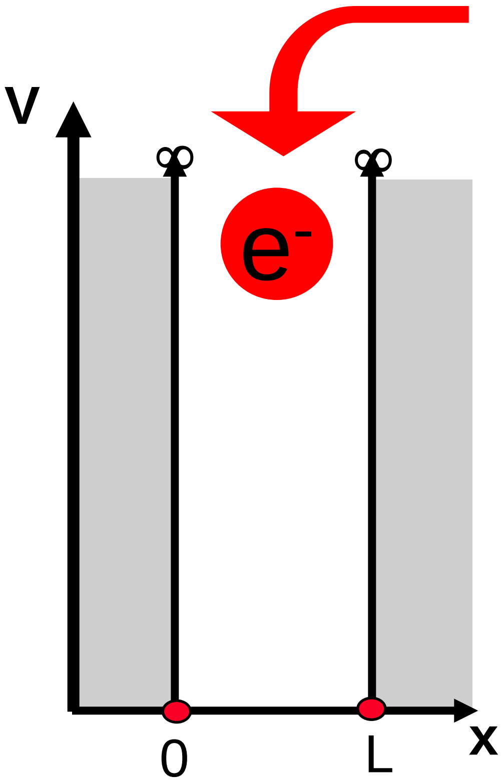
$\psi(x)$ verschwindet ausserhalb des Topfes
(„sonst gäbe es divergierende Energiedichten“)

↓

mit Stetigkeit von $\psi(x)$ folgt dann $\psi(0)=\psi(L)=0$

(Die Stetigkeitsbedingung fällt hier noch ein wenig vom Himmel und wird später noch einmal genauer diskutiert!)

Die zeitunabhängige S-Glg. für den (unendlich hohen) Potentialtopf



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

Qualitatives zur Lösung:

Unendlich hoher Potentialwall

↓

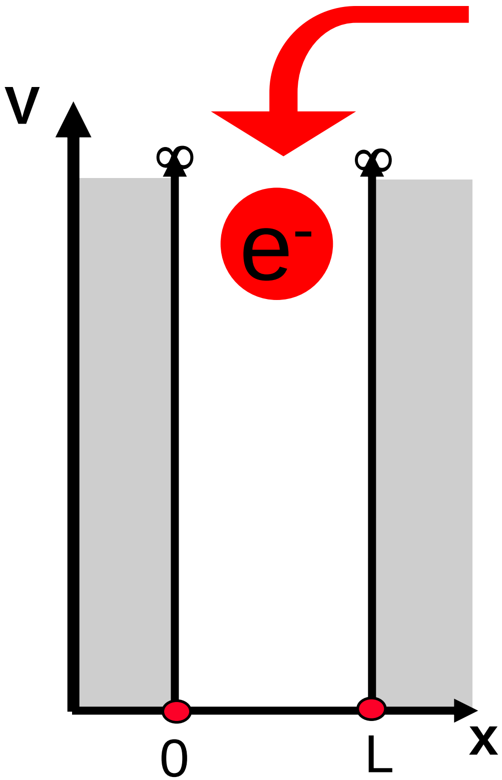
$\psi(x)$ verschwindet ausserhalb des Topfes
(sonst gäbe es divergierende Energiedichten)

↓

mit Stetigkeit von $\psi(x)$ folgt dann $\psi(0)=\psi(L)=0$

Zwischen 0 und L muss gelten: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)=W\psi(x)$$

2.2.1 Lösung durch scharfes Hingucken



$$\psi(0)=\psi(L)=0 \;; \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)=W\psi(x)$$

hmm ... eine Funktion, die zweimal abgeleitet sich selbst multipliziert mit einem Faktor ergibt ??

... wie wäre es mit einer Sinusfunktion ?

$$\psi(x)=A\,\sin(kx)$$

Einsetzen: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)=\frac{\hbar^2}{2m}k^2 A\sin(kx)=WA\sin(kx)$

O.K., S-Glg. ist gelöst für $W=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$\psi(0)=\psi(L)=0$: $\sin(kL)=0 \Rightarrow kL=n\pi$ wobei n ganz bzw. $k=\frac{n\pi}{L}$ und $k^2=\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$

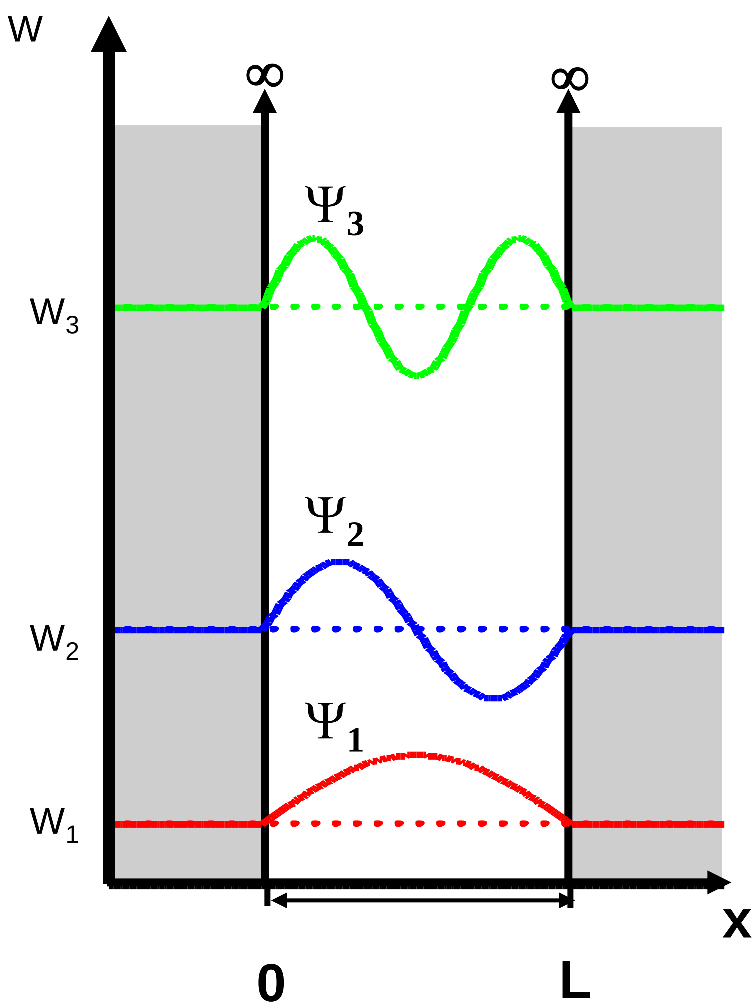
Der unendlich hohe Potentialtopf: Eigenschaften der Lösungen

Lösungen haben die Form: $\psi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$; $W_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ wobei n=1,2,...

Eigenschaften der Lösungen:

-es gibt nur bestimmte diskrete Energien („Quantelung“)

-es gibt eine Minimalenergie E≠0 !! („Nullpunktsenergie“)



https://www.falstad.com/qm1d/

Der unendlich hohe Potentialtopf: Eigenschaften der Lösungen

Lösungen haben die Form: $\psi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$; $W_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ wobei n=1,2,...

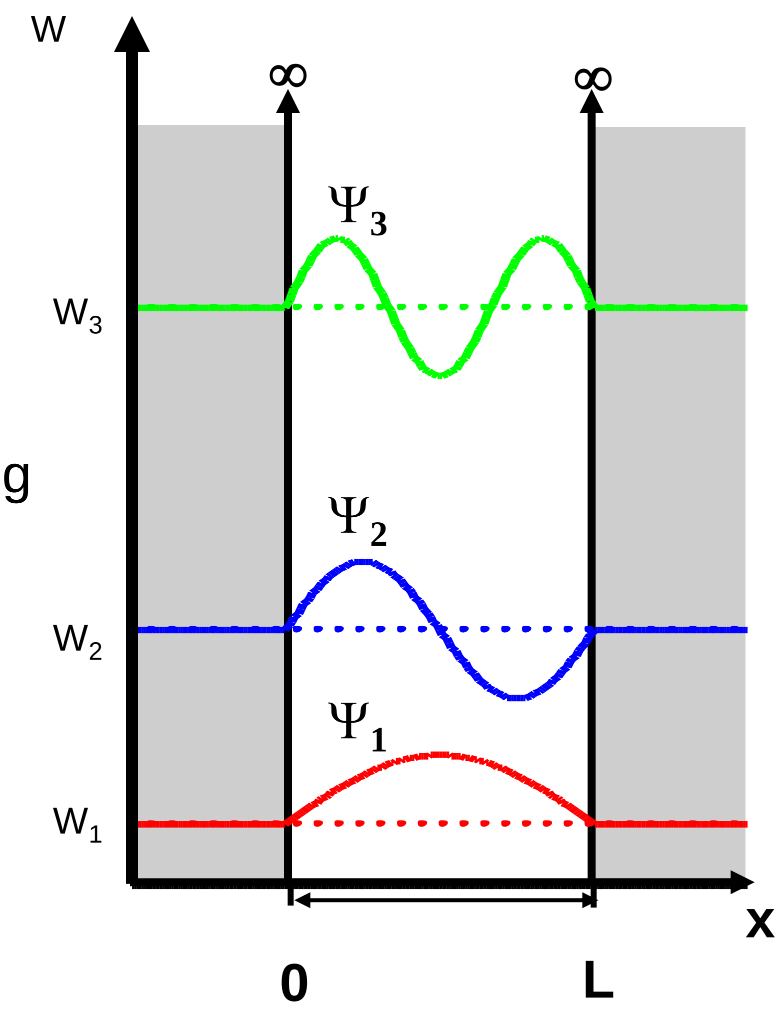
Eigenschaften der Lösungen:

-das Elektron ist über den ganzen Topf „verschmiert“, aber nicht gleichmässig

-die niedrigste Lösung hat keinen Nulldurchgang (Knoten)

- je höher die Energie, desto mehr Knoten

-abwechselnd symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen



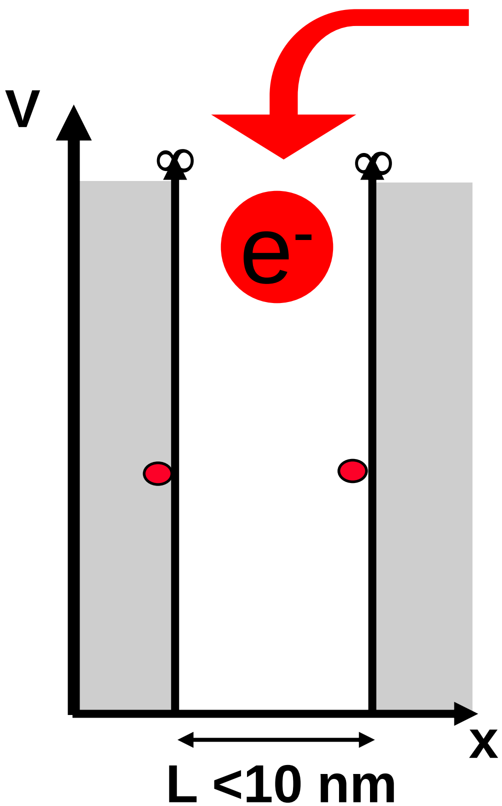
Der unendlich hohe Potentialtopf: Der konventionelle Weg

Wir wissen: Im Inneren des Topfes (0<x<L) erwarten wir
ebene Wellen (freies Teilchen, entweder nach links oder nach rechts laufend):

$$\psi^+(x,t) = A^+ \exp(j(kx - \omega_k t)); \quad \psi^-(x,t) = A^- \exp(j(-kx - \omega_{-k} t))$$

$\downarrow$ zeitunabhängig

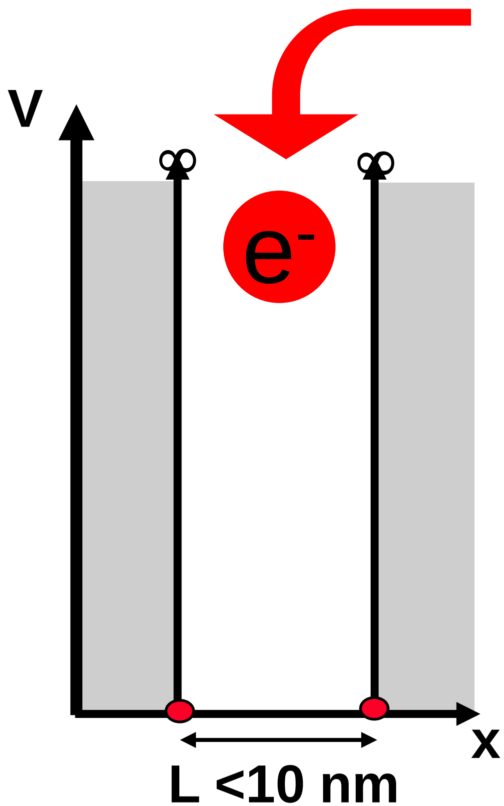
$$\psi^+(x) = A^+ \exp(jkx); \; \psi^-(x) = A^- \exp(-jkx)$$



Ansatz zur Lösung der zeitunabhängigen S.-Glg.:

$$\psi(x) = A^+ \exp(jkx) + A^- \exp(-jkx)$$

Der unendlich hohe Potentialtopf: Der konventionelle Weg



Es muss aber auch erfüllt werden: $\psi(0)=\psi(L)=0$

$$\psi(0) = A^{+}\exp(jk0) + A^{-}\exp(-jk0) = A^{+} + A^{-} = 0$$

$$\psi(L) = A^{+}\exp(jkL) + A^{-}\exp(-jkL) = 0$$

$\rightarrow$ Lineares Gleichungssystem für A^+ und A^- d

<u>In Matrixform:</u>

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \exp(jkL) & \exp(-jkL) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{+} \\ A^{-} \end{pmatrix} = 0$$

Nichtriviale Lösung, falls Determinante verschwindet:

$$\det(\ldots) = \exp(-jkL) - \exp(jkL) = -2j\sin(kL) = 0 \qquad \Rightarrow k_n = n\frac{\pi}{L};\ \text{n ganze Zahl}$$

Der unendlich hohe Potentialtopf: Der konventionelle Weg

Für die Wellenfunktionen ergibt sich dann:

$$\psi_n(x) = A^+ \exp(jk_n x) - A^+ \exp(-jk_n x) = 2A^+ j \sin(k_n x)$$

o.B.d.A.: wähle $B_n = 2A^+ j$

Eigenfunktionen haben die Form:	$\psi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$	wobei n=1,2,...

Eigenwerte:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_n(x) = W_n \psi_n(x)$$

Einsetzen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Diskrete Energieeigenwerte:

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