Übersicht über die Vorlesung

Festkörperelektronik
SS 2016
2. Foliensatz
22.04.2016

1.4 Das freie quantenmechanische Elektron

Zeitabhängige S-Glg.

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

Analogie zu den elektromagnetischen Wellen, „Materiewellen“, intuitives Raten etc.

$\longrightarrow$ Wellenansatz: $\psi(x,t)=A\exp(j(kx-\omega t))$

<u>linke Seite</u>: $j\hbar\frac{\partial}{\partial t}A\exp(j(kx-\omega t))=j\hbar(-j\omega)A\exp(j(kx-\omega t))=A\hbar\omega\exp(j(kx-\omega t))$

<u>rechte Seite</u>:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right\}A\exp(j(kx-\omega t))=-\frac{\hbar^2 jk}{2m}\frac{\partial}{\partial x}A\exp(j(kx-\omega t))$$

$$=\frac{\hbar^2k^2}{2m}A\exp(j(kx-\omega t))$$

Die Lösungen der Schrödinger-Glg. für das freie Teilchen

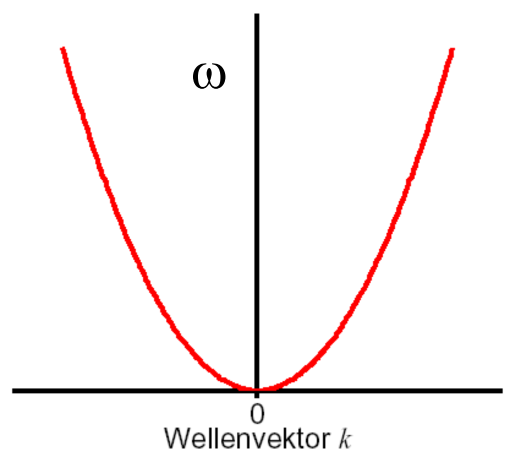
$$\Rightarrow \left\{ \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\} A \exp(j(kx - \omega t)) = 0$$

-muss erfüllt sein für alle Zeiten t, d. h. wir erhalten mögliche Lösungen für die ω und k, für die die Beziehung $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ gilt.

$\longrightarrow$ unendlich viele Lösungen

Für alle $-\infty < k < \infty$ gibt es jeweils ein passendes ω, so dass die Gleichung erfüllt wird.

Dieser Zusammenhang wird als Dispersionsrelation bezeichnet.

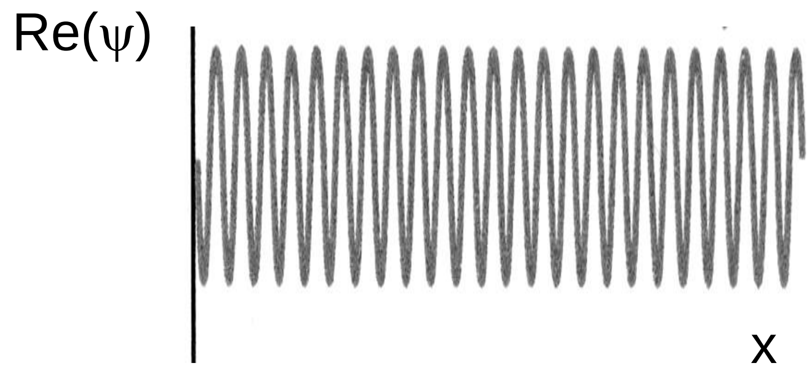


„Dispersionsrelation“

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Ebene Welle:

$$\psi(x,t) = A \exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

1. Der Ort des Teilchens:

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist proportional zum Absolutquadrat der Wellenfunktion:

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

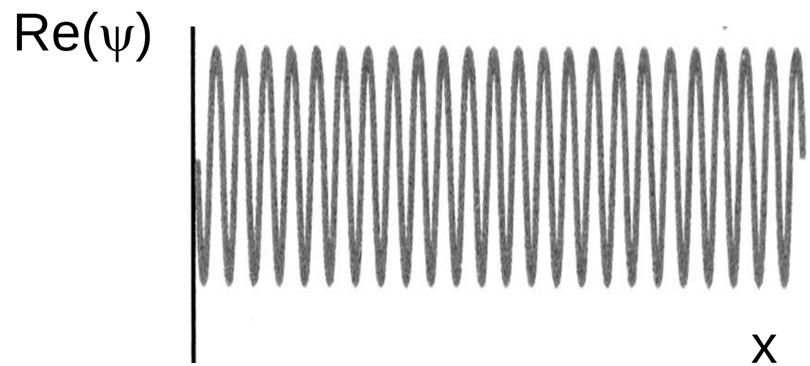
$$|A|^2 \exp(jkx - jkx - j\omega t + j\omega t) = |A|^2$$

...aha, räumlich konstant !?

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Ebene Welle:

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

2. Phasengeschwindigkeit:

Wie schnell bewegt sich ein Punkt konstanter Phase ? Das heisst, wir suchen die x-Werte, für die das Argument in der Wellenfunktion gleich bleibt:

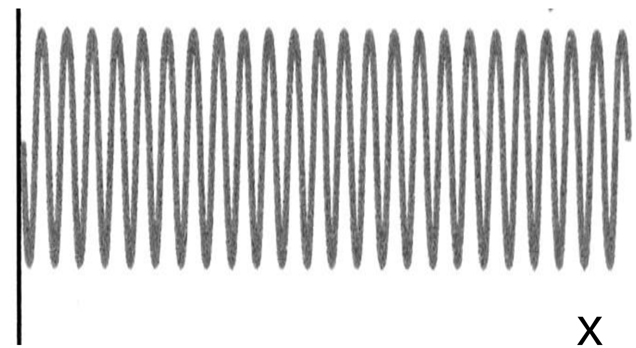
$$(kx - \omega_k t) = const. \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(kx - \omega_k t) = 0$$

$$\Rightarrow kv_p - \omega_k = 0 \Rightarrow v_p = \frac{\omega_k}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Ebene Welle:

$$\psi(x,t) = A\exp(j(kx - \omega_k t))$$



..schön und gut, aber wie komme ich wieder an reale Größen ??

<u>3. Der Impuls</u> (klassisch *p=mv*):

Zusammenhang wurde schon von Louis de Broglie 1923 erkannt:


Louis de Broglie
(1892-1987)

$\boxed{\text{Wellenlänge } \lambda = \frac{h}{p}}$

Mit $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ folgt $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k.$

Jeder Welle mit Wellenzahl(vektor) k „entspricht“ ein Elektron mit Impuls $p=hk$.
(Eine „sauberere “ Einführung erfolgt später.)

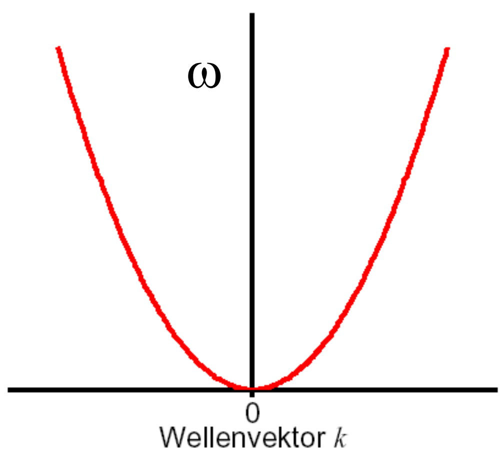
Es handelt sich um ein „merkwürdiges“ Elektron, da total delokalisiert.

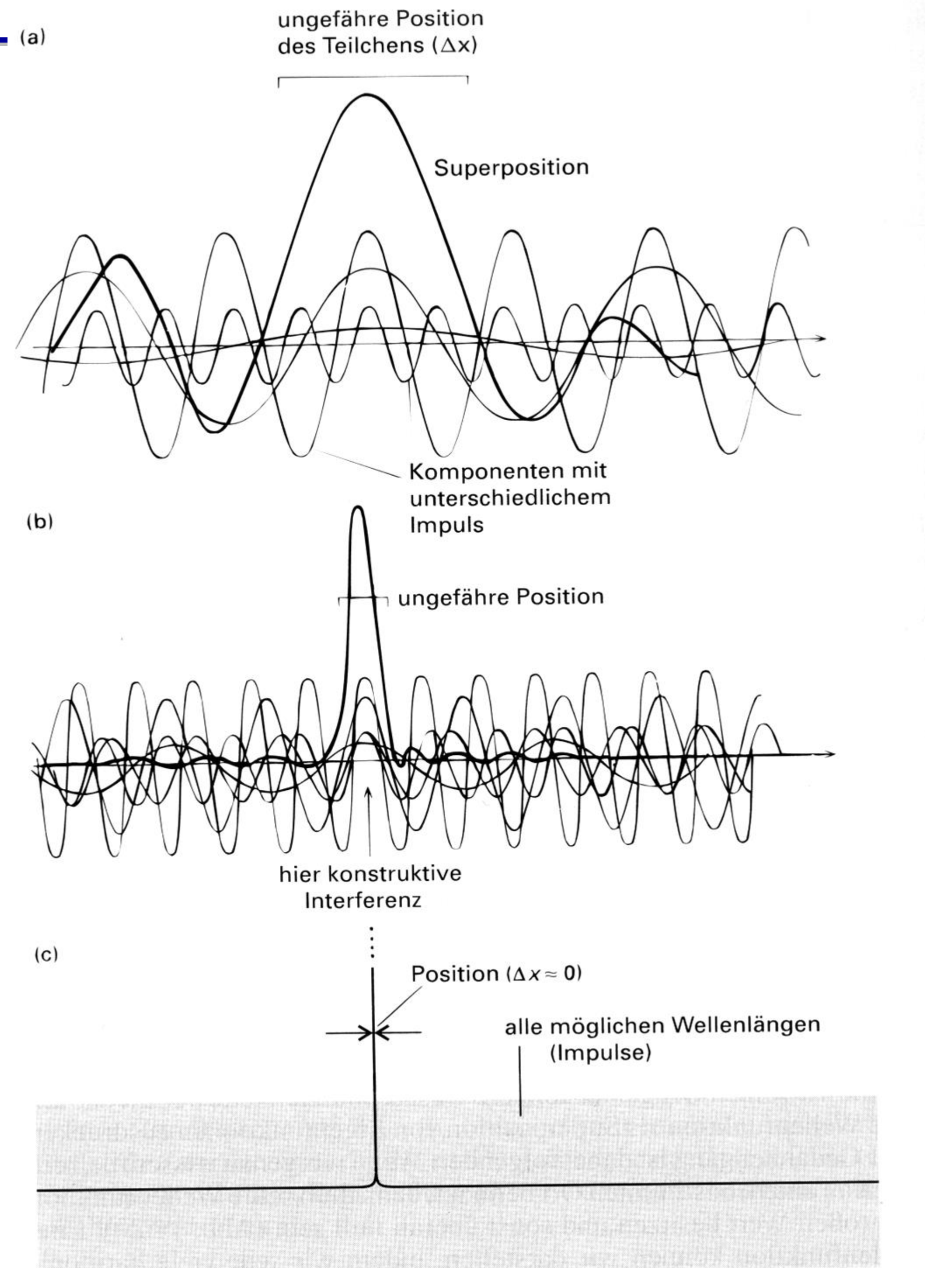
Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Superposition

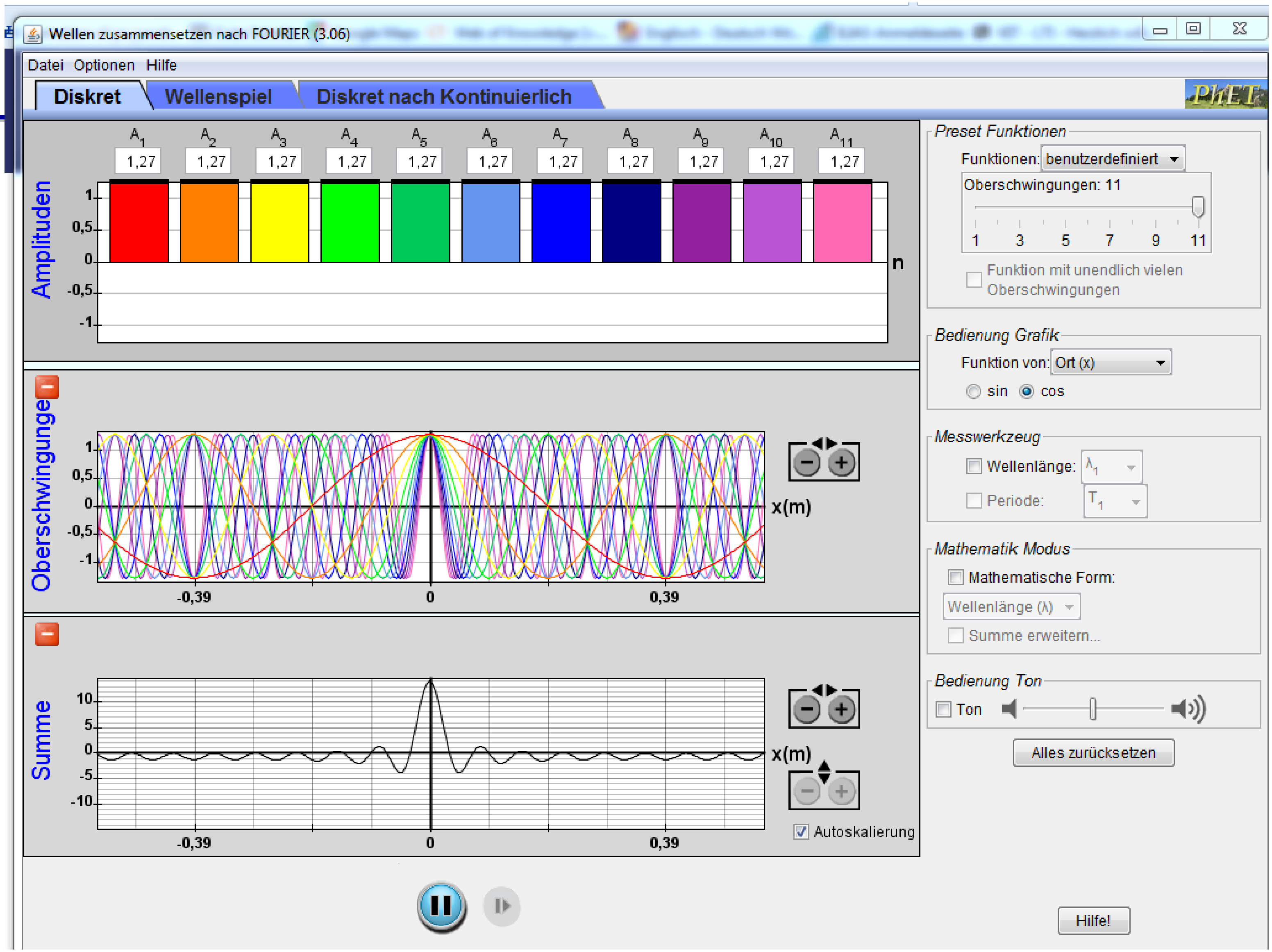
Aufgrund des Superpositionsprinzips kann man beliebig Lösungen mit verschiedenen Impulsen überlagern:

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

$$\int dkA(k)\exp(j(kx-\omega_k t))$$







Visualisierung der Überlagerung von periodischen Funktionen (hier Kosinus)

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

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

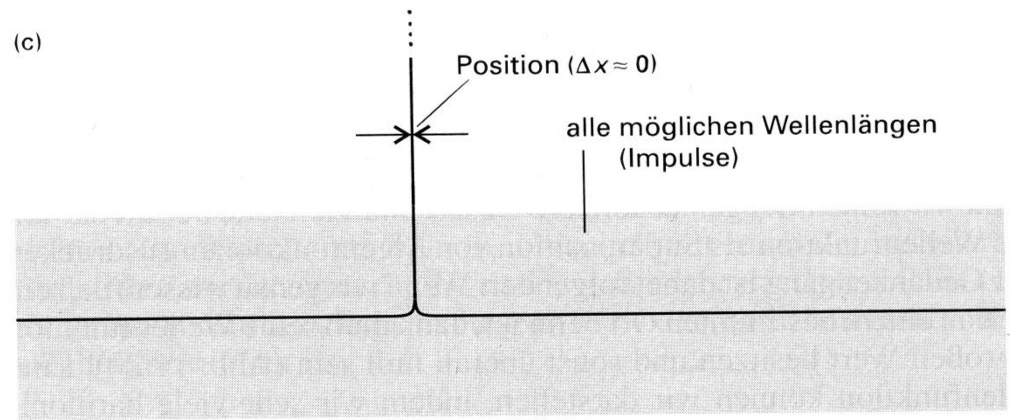
Übergang von einer Darstellung im „**Ortsraum**“ $\psi(x,t)$
zu einer Darstellung im „**k-Raum**“ $\tilde{\psi}(k,t)$ (Spezialfall einer Fouriertrafo.).

Übergang von der einen zur anderen Darstellung:

$$\tilde{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x,t) \exp(-jkx)$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k,t) \exp(jkx)$$

Bsp.: Elektron für t=0 vollkommen lokalisiert im Raum bei x=0



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Darstellung eines lokalisierten Elektrons kann durch die *Dirac'sche Delta-Funktion* erfolgen.

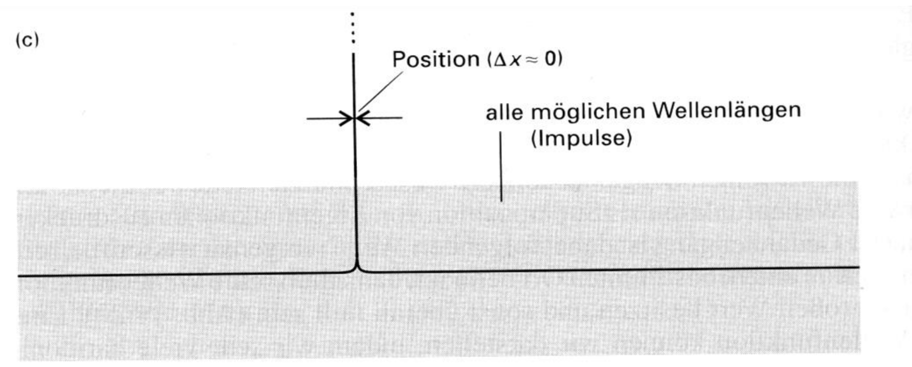
$$\psi(x,0) = \delta(x)$$

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty \text{ für } x = 0 \\ 0 \text{ sonst} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1\,; \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0)$$

Für die Darstellung im Impulsraum, also die Fouriertransformierte ergibt sich dann zum Zeitpunkt t=0:

$$\tilde{\psi}(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(x)\exp(-jkx) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen

Für die einzelnen ebenen Wellen kennen wir jetzt die Zeitabhängigkeit:

$$\tilde{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-j\omega t) \qquad \text{mit} \qquad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

und können jetzt für alle Zeiten durch die Rücktrafo

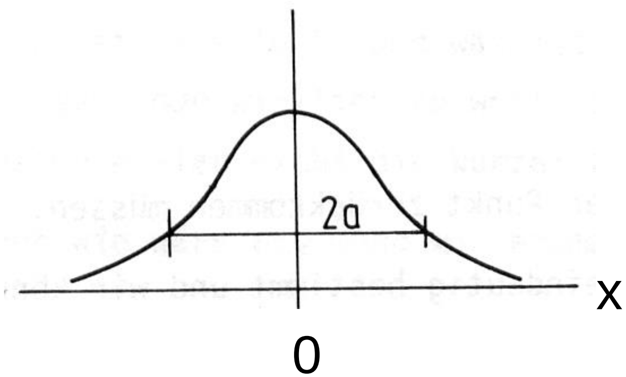
$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k,t) \exp(jkx)$$

die Wellenfunktion durch eine „einfache“ Integration berechnen.

- keine explizite Lösung der S-Glg. mehr erforderlich !

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete

Mathematisch einfacher zu handhaben: $\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp(-\frac{x^2}{2a^2}) \exp(jk_0 x)$

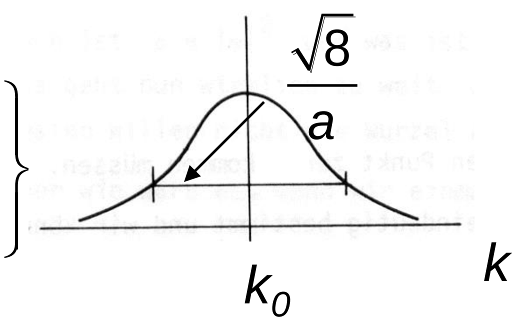


Aufenthaltswahr-
scheinlichkeit $\rho(x,0) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp(-\frac{x^2}{a^2})$

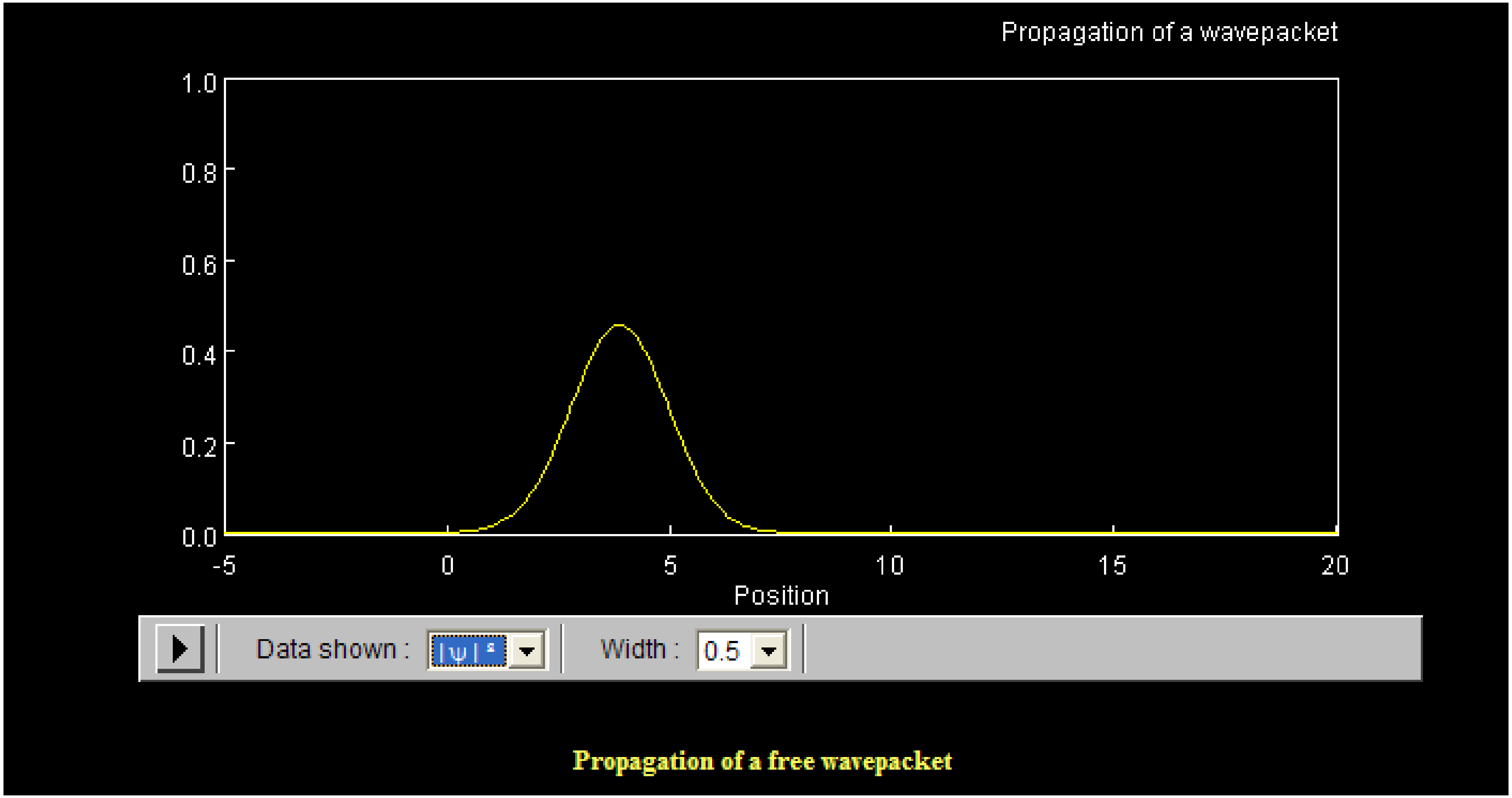
... einigermassen auf Δx=2a lokalisiertes Teilchen

Wir basteln uns das Ganze aus ebenen Wellen zusammen: (Fouriertrafo)

$$\psi(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x,0) \exp(-jkx) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} \exp\left\{ -\left(\frac{k-k_0}{\sqrt{2}/a} \right)^2 \right\}$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



Quelle: http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/en/index.html

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete

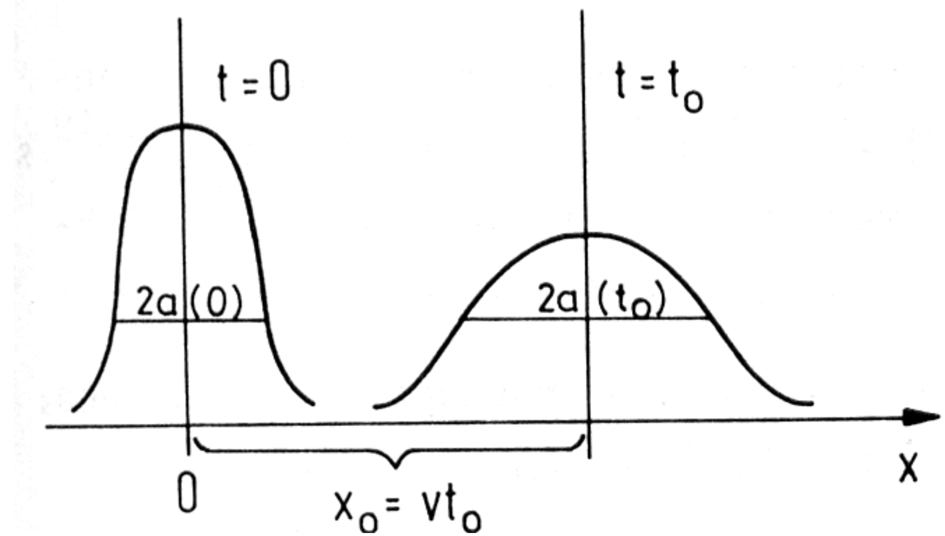
- damit ergibt sich eine qualitative Aussage über das Verhältnis von Δx und Δk

- Lösung für alle Zeiten, denn wir müssen jetzt die ebenen Wellen nur noch „loslaufen“ lassen

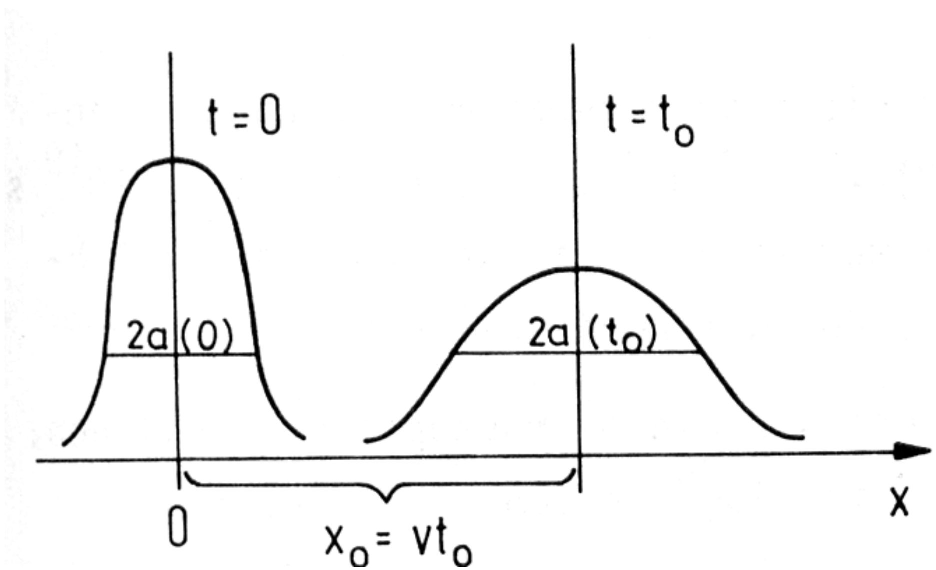
$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}\,\frac{1}{\sqrt{a^2+\frac{j\hbar t}{m}}}\exp\left(-\frac{a^2k_0{}^2}{2}\right)\exp\left\{\frac{\frac{1}{2}\left((a^2k_0+jx)^2\right)}{\left(a_2+\frac{j\hbar t}{m}\right)}\right\}$$

bzw. für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(x,t)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a(t)}\exp\left\{-\left[\frac{x-\frac{\hbar k_0 t}{m}}{a(t)}\right]^2\right\}$$



Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



- Wellenpaket zerfliesst im Laufe der Zeit !

- Schwerpunkt bewegt sich mit einer Geschwindigkeit

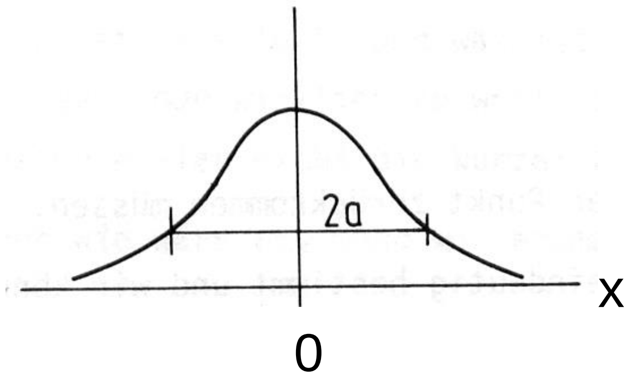
$$v = \frac{\hbar k_0}{m} \quad \text{oder} \quad mv = p = \hbar k_0$$

Gruppengeschwindigkeit: $$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = 2v_p$$

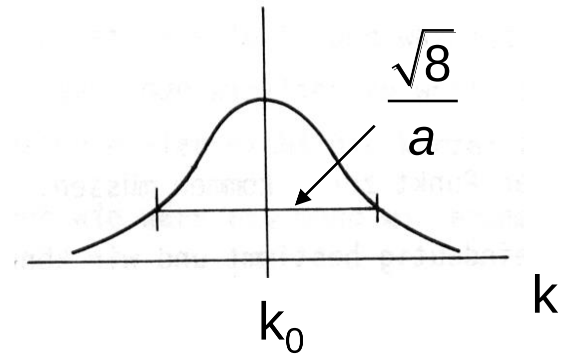
Nettes Applet zur Visualisierung der Wellenpaket-Dynamik:

http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/en/index.html

Die Lösungen der S.-Glg. für das freie Teilchen: Wellenpakete



„Ortsraum“



„Impulsraum“

Breite der Funktionen im Orts- bzw. Impulsraum verhalten sich reziprok zueinander

Ganz allgemein gilt:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \qquad\qquad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Heisenberg‘sche Unschärferelation für Impuls und Ort !