Übersicht über die Vorlesung

Festkörperelektronik
SS 2016
3. Foliensatz
22.04.2016

1.5 Quantenmechanische Erwartungswerte

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion ist (im Prinzip) bekannt.

Wie werden nun messbare Größen vorhergesagt/berechnet ??

Wir kennen schon die Aufenthaltswahrscheinlichkeit: $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$

Allgemeiner:

Der Erwartungswert bei einer Ortsmessung ist: $<x>(t) = \int dx \psi^*(x,t) x \psi(x,t)$

Er ist der Mittelwert, der sich für die Messgröße Ort ergibt, wenn eine große Anzahl von Messungen an gleichartigen quantenmechanischen Systemen gemessen wird.

Aber: Bei einer einzelnen Messung wird immer nur ein bestimmter Wert gemessen.

Damit haben wir den Ort des Teilchens quantenmechanisch im Griff !

... aber was ist mit allen anderen physikalischen Größen (Energie, Impuls etc.) ??

Quantenmechanische Erwartungswerte

3. Postulat der Quantenmechanik:

Physikalische Meßgrößen werden durch Operatoren beschrieben. Dem Teilchenort wird der Operator

x zugeordnet, der ψ(x) mit x multipliziert.

Dem Impuls wird der Operator $p = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ zugeordnet.

Bei oftmaliger Messung einer Größe F(x,p) an einem quantenmechanischen System ergibt sich als Mittelwert:

$$\langle F \rangle = \frac{\int dx \psi^*(x,t) \hat{F}(\hat{x},\hat{p}) \psi(x,t)}{\int dx \psi^*(x,t) \psi(x,t)}$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: Bsp. Ebene Welle

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

Ort: ...hatten wir im Prinzip schon.

$$<x>=\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))xA\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} = \frac{\int dxx}{\int dx} = 0$$

Erwartungswert für den Impuls:

$$<p>=\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(-j\hbar\frac{\partial}{\partial x})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} =$$

$$\frac{-j\hbar jk\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))} = \hbar k$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: Bsp. Ebene Welle

Kinetische Energie ?

$$\text{Klassisch: } W_{\text{Kin}} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Wir benutzen die „Quantisierungsvorschrift“

$$p = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

und schreiben den klassischen Ausdruck als Operator:

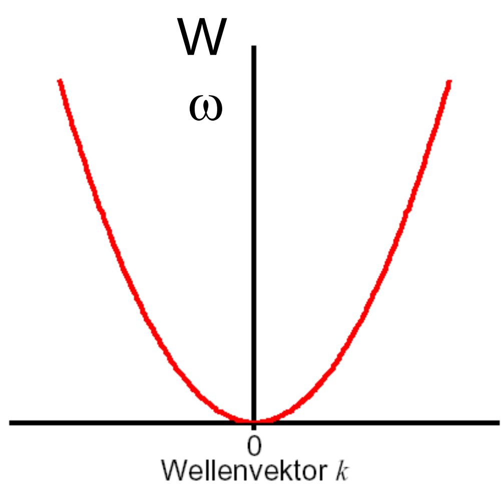
$$\text{Klassisch: } W_{Kin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$\rightarrow \text{quantenmechanisch: } \hat{W}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Quantenmechanische Erwartungswerte: Bsp. Ebene Welle

$$<\hat{W}_{kin}>=\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))}=$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}jk\frac{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))(\frac{\partial}{\partial x})A\exp(j(kx-\omega_k t))}{\int dxA\exp(-j(kx-\omega_k t))A\exp(j(kx-\omega_k t))}=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



„Dispersionsrelation“

Vergleich mit $\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$ zeigt, dass

$$\left\langle \hat{W}_{kin}\right\rangle \equiv W=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}=\hbar\omega$$

Dispersionsrelation ist auch der Zusammenhang zwischen Energie und Wellenzahl (Impuls). Dies wird uns in leicht modifzierter Form als Bandstruktur eines Halbleiters wieder begegnen.

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 in Kristallen**
5. **Halbleiter**
6. **Quantenstatistik für Ladungsträger**
7. **Dotierte Halbleiter**
8. **Halbleiter im Nichtgleichgewicht**
9. **Der pn-Übergang**

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:

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

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

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

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

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

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

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

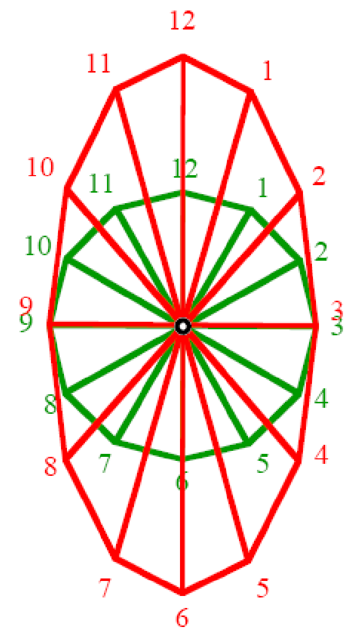
$\hat{H}$ ist der Hamiltonoperator (Hamiltonian)

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

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

Diese Situation ist näherungsweise in
vielen modernen Halbleiterbauelementen gegeben:

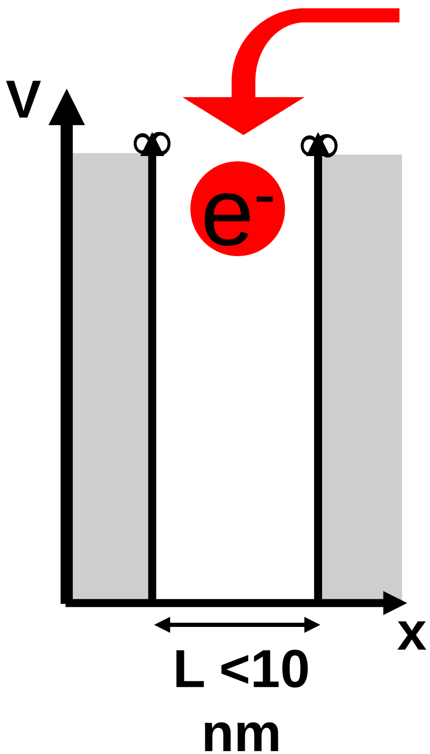
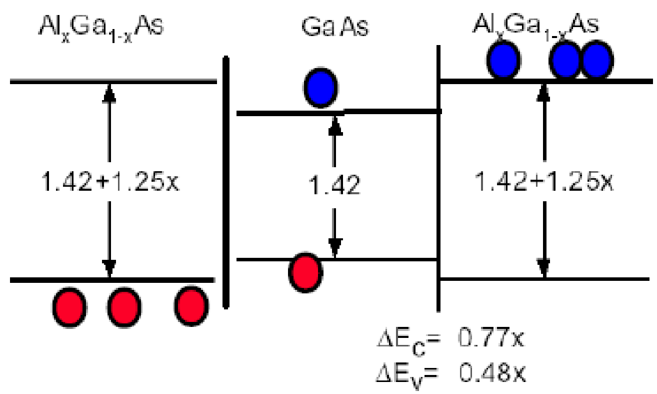
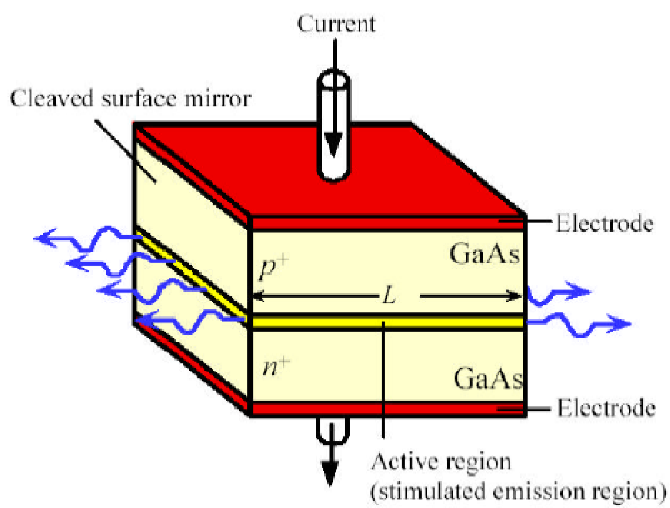


Abb.: Schema eines Elektrons im Potentialtopf





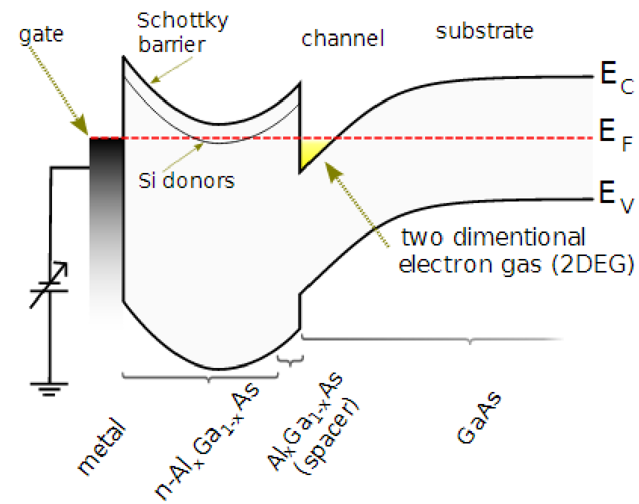


Abb.: Banddiagramm eines HEMT (high electron mobility transistors) (oben)

Abb: Schema einer Halbleiterlaserdiode (links, links oben)

Leucht- und Laserdioden: Eine Vielzahl von Potentialtöpfen

100mW Laserdiode 405nm (Blu-Ray)
Wellenlänge: 405nm
Power: max. ~150mW (CW)
Laser-Pickup: PHR-803t

Empfohlen wird ein Diodentreiber mit 100mA.
Das ergibt ca. 60-100mW Ausgangsleistung.
Mehr ist möglich, verkürzt aber die Lebensdauer der Diode.
Passt perfekt in das 5mW Lasermodul.
Dioden sind Neu. Ausgebaut aus Laser-Pickup.

Produkt ist sofort verfügbar
35,00 €
Preis zzgl. Versand

Quelle: www.insaneware.de

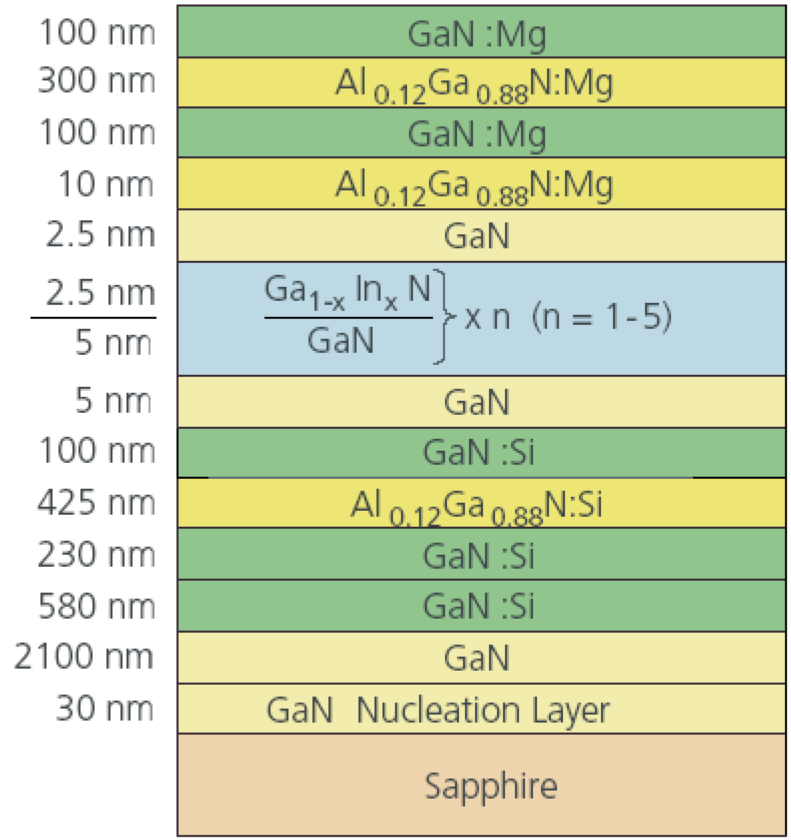
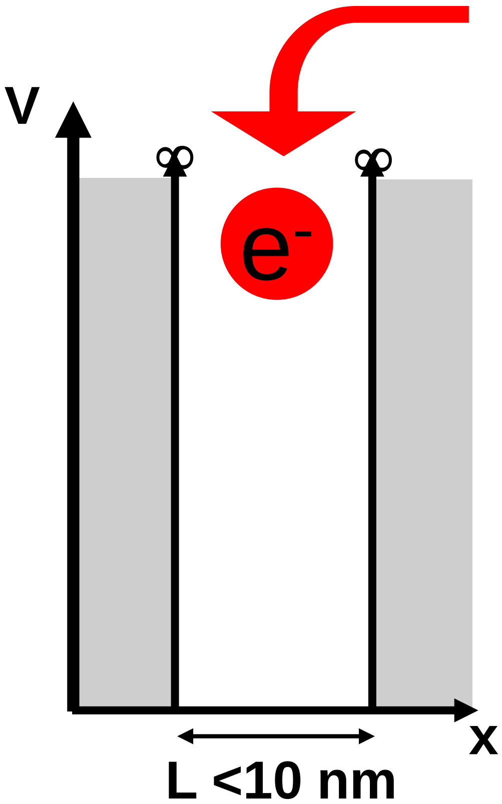


Fig. 2: Typical epitaxial layer sequence of an (AlGaIn)N-based QW diode laser.
Abb. 2: Typische epitaktische Schichtenfolge eines (AlGaIn)N-Quantenfilm-Diodenlasers.

Quelle: FHG-IAF, Freiburg

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



klassisch:

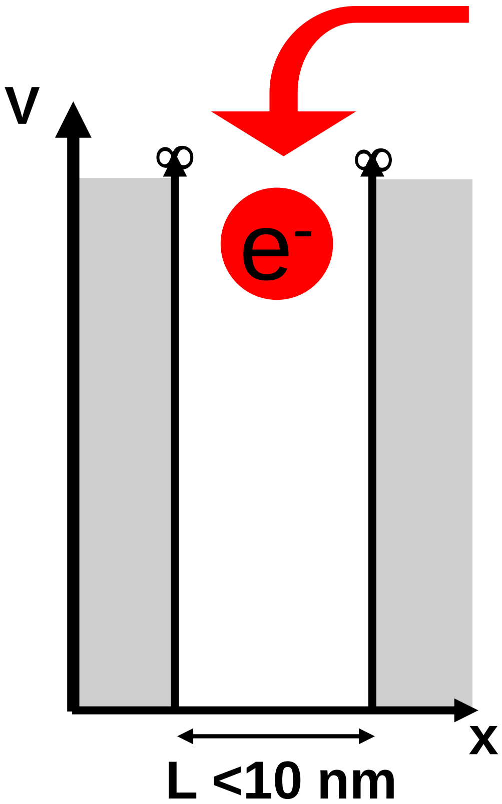
Elektron „liegt“ entweder auf dem Boden (kinetische Energie = 0)

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:

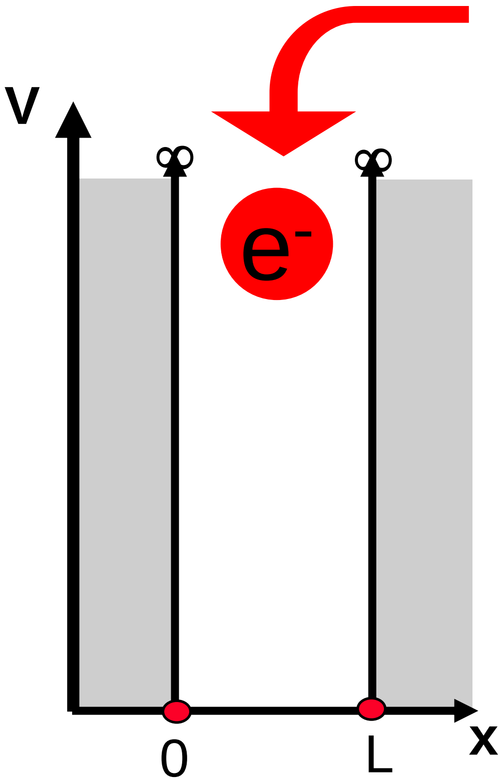
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi(x)=W\psi(x)$$

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



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

<u>Qualitatives zur Lösung:</u>

Unendlich hoher Potentialwall

↓

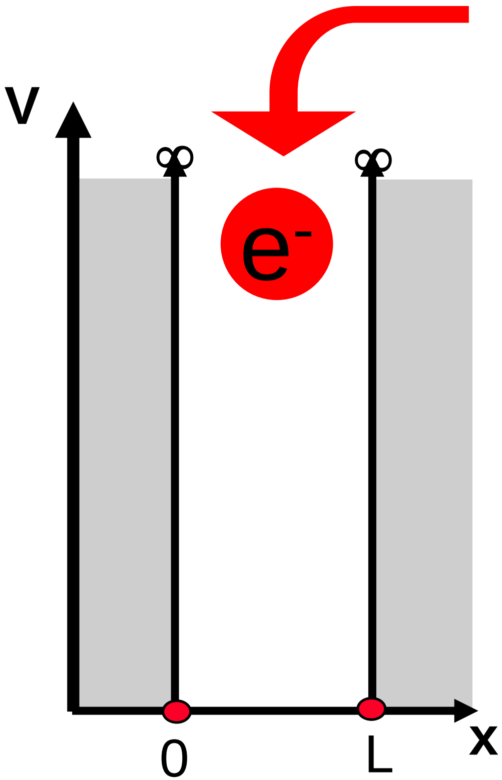
$\psi(x)$ verschwindet ausserhalb des Topfes
(„sonst gäbe es divergierende Energiedichten")

↓

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

↓

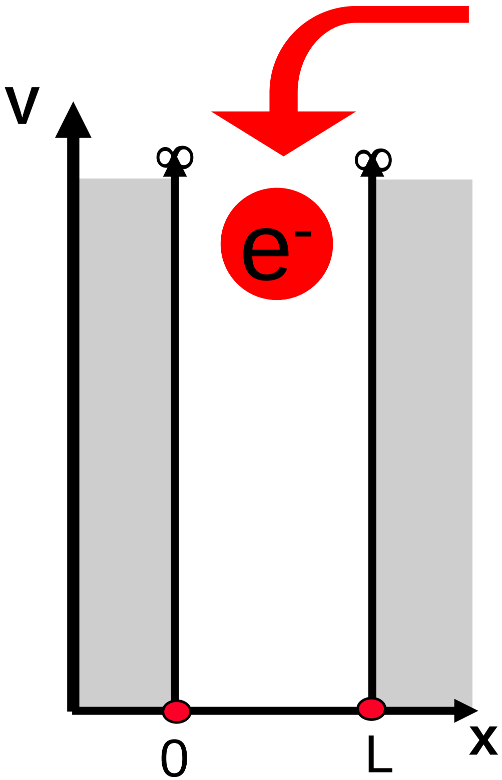
ψ(x) verschwindet ausserhalb des Topfes
(sonst gäbe es divergierende Energiedichten)

↓

mit Stetigkeit von ψ(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



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

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 $k^2=\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$

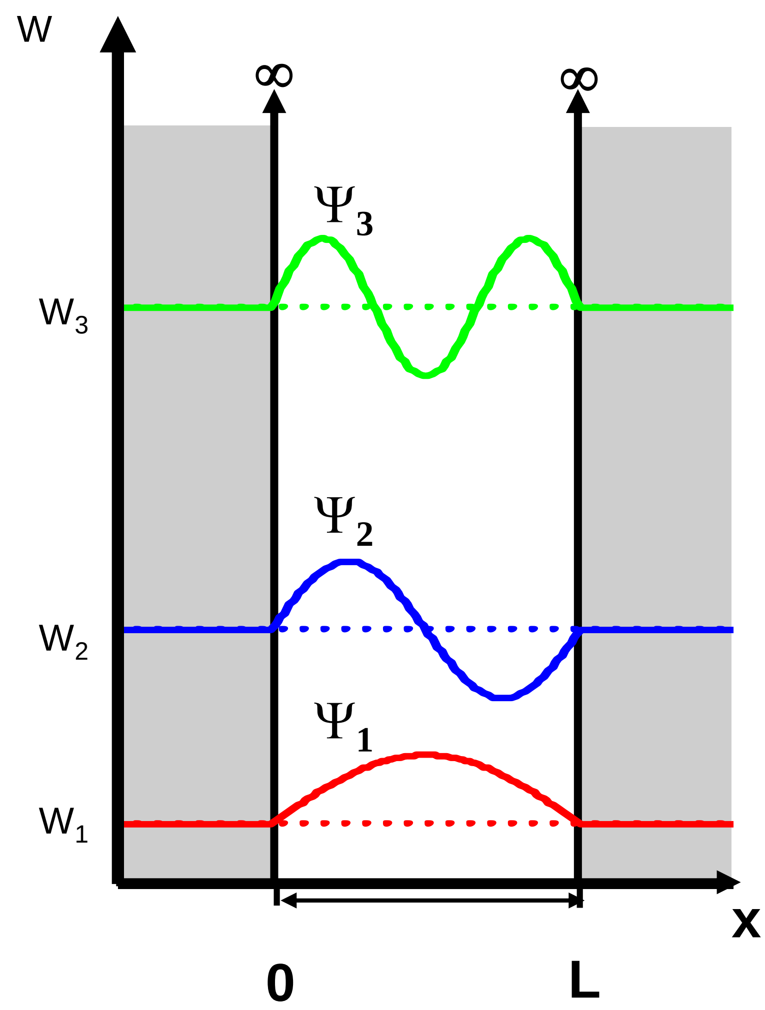
Der unendlich hohe Potentialtopf: Eigenschaften der Lösungen

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“)



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,...

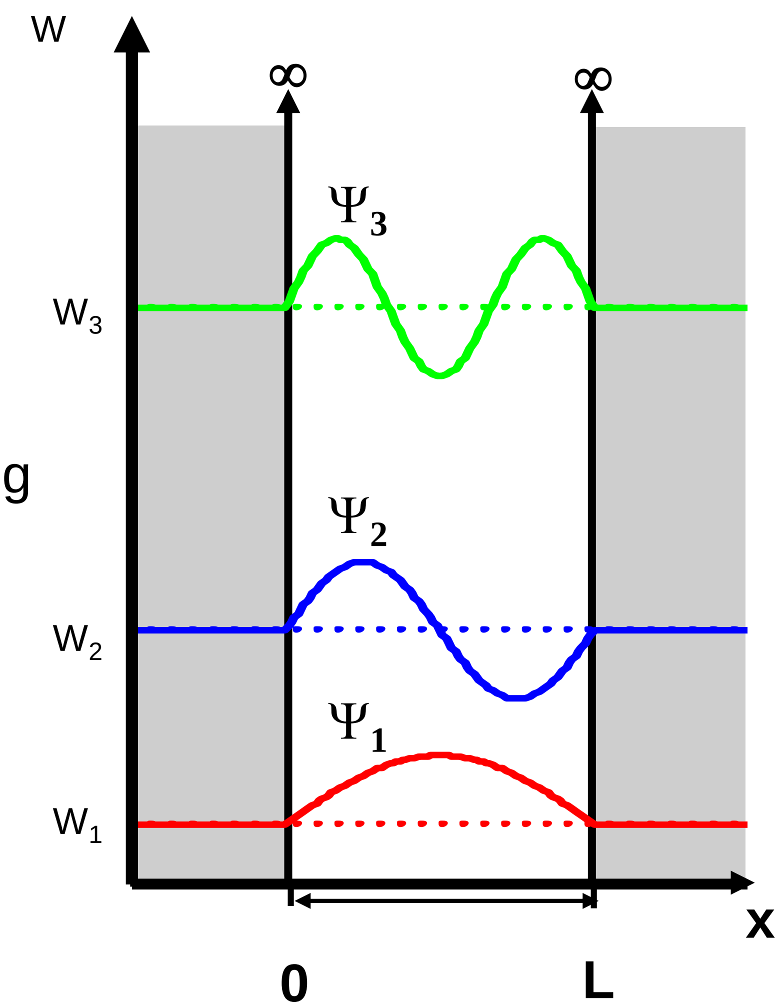
Eigenschaften der Lösungen:

-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



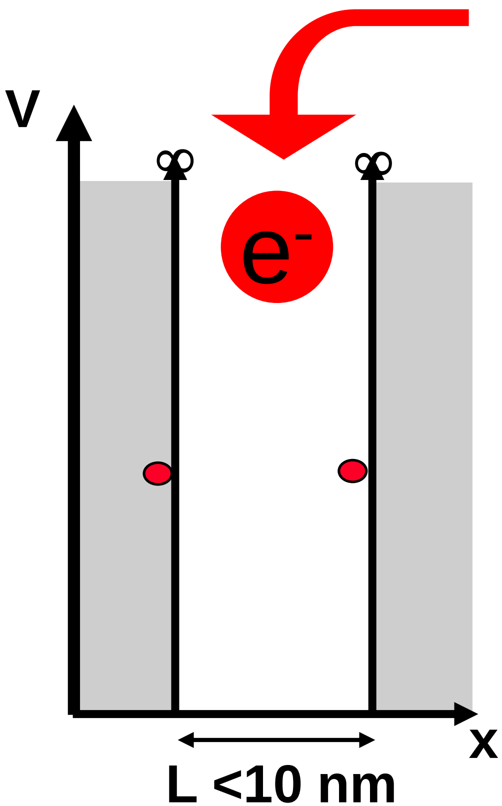
Der unendlich hohe Potentialtopf: Der konventionelle Weg

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

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

$$\Big\downarrow \text{zeitunabhängig}$$

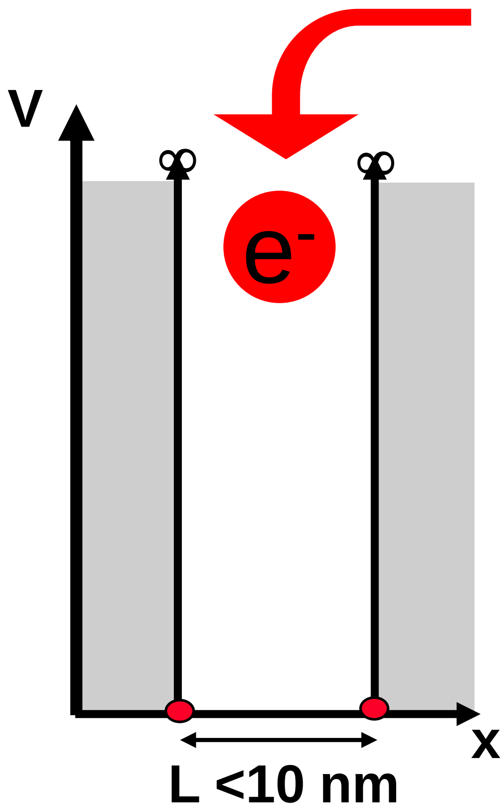
$$\psi^{+}(x) = A^{+}\exp(jkx); \;\; \psi^{-}(x) = A^{-}\exp(-jkx)$$



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

In Matrixform:

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

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:

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