Halbleiterbauelemente

Übungsserie 1: *Lösungen*

21. März 2011

1. **Energiequantisierung**

(a) Die eindimensionale zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für ein kräftefreies Teilchen ist

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx^2}+V(x)\right)\psi(x,t)=i\hbar\frac{d\psi(x,t)}{dt}\ . \tag{1}$$

Der Ansatz, um diese Differentialgleichung zu lösen ist eine ebene Welle:

$$\Psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}\ . \tag{2}$$

Für die weitere Rechnung benötigt man

$$\frac{d\Psi(x,t)}{dt}=-i\omega\cdot Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{3}$$

und

$$\frac{d\Psi(x,t)}{dx} = ik\cdot Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{4}$$

$$\frac{d^2\Psi(x,t)}{dx^2} = -k^2\cdot Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{5}$$

Setzt man (3) und (5) in (1) ein, ergibt sich

$$-\frac{\hbar^2}{2m}k^2Ae^{i(kx-\omega t)}=-i^2\hbar\omega Ae^{i(kx-\omega t)}\ . \tag{6}$$

Hieraus ergibt sich

$$\hbar\omega=E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{7}$$

(b) Die Randbedingung $\psi(0)=0$ führt auf

$$\psi(0)=A+B=0 \tag{8}$$

$$\hookrightarrow B=-A\ . \tag{9}$$

Die Randbedingung $\psi(a) = 0$ führt auf

$$\psi(a) = Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \tag{10}$$

mit (9) wird dies zu

$$e^{ika} - e^{-ika} = 0 = 2i \cdot sin(ka) \tag{11}$$
$$\hookrightarrow \sin(ka) = 0 \ , \tag{12}$$

wobei im letzten Schritt $\sin z = (e^{iz} - e^{-iz})/(2i)$ ausgenutzt wurde.

(c) Gleichung (12) ist erfüllt für

$$ka = n\pi \tag{13}$$
$$\hookrightarrow k = \frac{n\pi}{a} = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{14}$$
$$\hookrightarrow \lambda = \frac{2a}{n} \ , \tag{15}$$

wobei $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$ ist. $n = 0$ muss ausgeschlossen werden: Wie weiter unten noch ersichtlich wird, führt $n = 0$ auf $\psi(x) = 0$. Das bedeutet, das Teilchen befindet sich nirgends, was der Voraussetzung, das Teilchen befindet sich irgendwo, nämlich im Potentialtopf, widerspricht. Für $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$ führen die negativen, sowie die positiven ganzen Zahlen jeweils auf dieselben Eigenenergien. Die Eigenfunktionen unterscheiden sich lediglich um einen Phasenfaktor. Somit ergeben sich keine neuen Eigenlösungen für negative n. Es reicht somit, Gleichungen (13) bis (15) für $n = 1, 2, 3, \ldots$ zu betrachten.

(d) Setzt man Gleichung (14) in Gleichung (7) ein, so ergibt sich

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 \tag{16}$$

mit $n = 1, 2, 3, \ldots$.
Für $a = 2.5$ nm:
$n = 1$: 60.16 meV,
$n = 2$: 240.66 meV,
$n = 3$: 541.48 meV.

(e) Die Lösung für die stationäre Schrödinger-Gleichung ist

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \ . \tag{17}$$

Aus einer der Randbedingungen folgte Gleichung (9). Somit ergibt sich für die Wellenfunktion

$$\psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = 2iA\sin(kx) = \underbrace{2iA}_{\tilde{A}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \ , \tag{18}$$

wobei $\sin z = (e^{iz} - e^{-iz})/(2i)$ ausgenutzt wurde. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte wird somit zu

$$w(x) = \psi^*(x)\psi(x) = -2iA\sin(kx) \cdot 2iA\sin(kx) = 4A^2\sin^2(kx) \tag{19}$$
$$\propto \sin^2(kx) = \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{20}$$

Die Diagramme zu $w_n(x)$ für die Fälle $n = 1, 2, 3$ finden Sie im Vorlesungsskript.
Der Vollständigkeit halber soll nun $\tilde{A}$ so bestimmt, dass $\psi(x)$ normiert ist, d.h. es muss

$$\int_0^a \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \tag{21}$$

gelten. Setzt man die Wellenfunktion in obige Relation ein, so wird

$$\begin{aligned}\int_0^a \left(\tilde{A}^* \sin(kx)\right) \cdot \left(\tilde{A} \sin(kx)\right) dx &= |\tilde{A}|^2 \int_0^a \sin^2(kx)dx = |\tilde{A}|^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4k}\sin(2kx)\right]_0^a \\ &= |\tilde{A}|^2 \left[\left(\frac{a}{2} - \frac{1}{4k}\underbrace{\sin\left(2\frac{n\pi}{a}a\right)}_{=0}\right) - 0\right] = |\tilde{A}|^2\frac{a}{2} = 1 \qquad (22) \\ \hookrightarrow \tilde{A} &= \sqrt{\frac{2}{a}}\end{aligned}$$

Somit ist die normierte Wellenfunktion durch

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{23}$$

gegeben.

2. **Tunneleffekt**

(a) Die Schrödinger-Gleichung für ein konstantes Potential V_0 ist durch

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{24}$$

$$\hookrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \underbrace{(E - V_0)}_{\tilde{E}}\psi(x) \ . \tag{25}$$

Gleichung (25) hat die gleiche Form wie die kräftefreie Schrödinger-Gleichung, deren Dispersionsrelation bereits in Aufgabe 1 bestimmt wurde:

$$\tilde{E} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \tag{26}$$

$$\hookrightarrow E = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V_0 \ . \tag{27}$$

(b) Aus (27) ergibt sich

$$k_2 = \pm\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)} \ . \tag{28}$$

- Für $E \geq V_0$ ist $2m(E-V_0) \geq 0$ und somit $k_2 = 1/\hbar\sqrt{2m(E-V_0)} \in \mathbb{R}$.
- Für $E < V_0$ ist $2m(E-V_0) < 0$ und somit $k_2 = 1/\hbar\sqrt{2m(E-V_0)} \in \mathbb{C}$. In diesem Fall ist $k_2 = 1/\hbar\sqrt{2m(E-V_0)} = 1/\hbar\sqrt{-2m(V_0-E)} = i/\hbar\sqrt{2m(V_0-E)} = i\kappa$.

(c) Der Ansatz für die Wellenfunktion für den Bereich $x \in (0,a)$ ist

$$\psi(x) = B_1 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x} \ . \tag{29}$$

- Für $E \geq V_0$ ist

$$\psi(x) = B_1 e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(E-V_0)}x} + B_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(E-V_0)}x} \ . \tag{30}$$

  Somit handelt es sich hierbei um eine oszillatorische Lösung des Problems.

- Für $E < V_0$ ist

$$\psi(x) = B_1 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x} = B_1 e^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}x} + B_2 e^{\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}x} \ . \tag{31}$$

  Hierbei handelt es sich somit um eine exponentiell abnehmende Lösung.
  Trifft ein Teilchen von links kommend mit der Energie $E < V_0$ an die Potentialbarriere, so nimmt die Wellenfunktion im Bereich der Barriere zwar exponentiell ab, doch ist im klassisch verbotenen Bereich die Amplitude der oszillierenden Wellenfunktion ungleich Null. Somit ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Teilchen von Null verschieden.

(d) $a = 1$ nm, $E = 0.1$ eV, $V_0 = 3$ eV: $T = 1.36e-08$,
$a = 0.5$ nm, $E = 0.5$ eV, $V_0 = 3$ eV: $T = 6.74e-04$. Die Transmissionswahrscheinlichkeit reagiert sehr sensibel auf Änderungen in a und E.

(e) **Lösung für Hochmotivierte**
Die Wellenfunktion setzt sich aus drei Teilwellenfunktionen zusammen, die durch Stetigkeitsbedingungen aneinandergebracht werden. Hierzu werden $\psi_I(x)$ für den Bereich $-\infty < x \leq 0$, $\psi_{II}(x)$ für den Bereich $0 < x < a$ und $\psi_{III}(x)$ für den Bereich $a \leq x < +\infty$ definiert.
Die Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion liefert

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0) && (32)\\ &\hookrightarrow A_1 + A_2 = B_1 + B_2 && (33)\\ & && (34) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a) && (35)\\ &\hookrightarrow B_1 e^{-\kappa a} + B_2 e^{\kappa a} = C e^{ik_1 a} && (36) \end{aligned}$$

Die Stetigkeit der ersten Ableitung der Wellenfunktion liefert

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_I(0)}{dx} &= \frac{d\psi_{II}(0)}{dx} && (37)\\ &\hookrightarrow ik_1(A_1 - A_2) = \kappa(B_2 - B_1) && (38)\\ & && (39) \end{aligned}$$

und

$$\frac{d\psi_{II}(a)}{dx} = \frac{d\psi_{III}(a)}{dx} \tag{40}$$

$$\hookrightarrow \kappa(B_2 e^{\kappa a} - B_1 e^{-\kappa a}) = ik_1 C e^{ik_1 a} \ . \tag{41}$$

Es existieren also vier Bestimmungsgleichungen für fünf Unbekannte. Da lediglich die relative Abhängigkeit bezüglich A_1 interessiert, sind es in diesem Sinne vier Unbekannte. Das lineare Gleichungssystem kann mit bekannten Methoden gelöst werden. Schliesslich ergibt sich nach etwas Rechnung für den Transmissionskoeffiezienten

$$T = \left|\frac{C}{A_1}\right|^2 = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar\right)} \ . \tag{42}$$

Für den Grenzfall $V \gg E$, d.h. für grosse κ ist

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa a} \ . \tag{43}$$