ETH
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

Institut für Integrierte Systeme
Integrated Systems Laboratory

Halbleiterbauelemente

Übungsserie 1: *Halbleiterphysik*

Abgabe: 21.03.2011 in der Übungsstunde

9. März 2011

Anhand einfacher Modellsysteme soll in dieser Übung die Entstehung einiger wesentlicher Züge der Quantenmechanik nachvollzogen werden. Prominente Quantenphänomene wie die Energiequantisierung und das Tunneln von Teilchen durch Barrieren werden thematisiert. Hierzu löst man die Grundgleichung der nichtrelativistischen Quantenmechanik, nämlich die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x},t)\right)\Psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} \tag{1}$$

mit der Planckschen Konstanten $\hbar$ (*gesprochen: h quer*), der Energie E, der Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{x},t)$ und $\Delta = \nabla^2 = \partial^2/\partial\mathbf{x}^2$ (Δ heisst Laplace-Operator und ∇ ist der Nabla-Operator). Im folgenden werden zeitunabhängige Probleme betrachtet, d.h. es gilt $V(\mathbf{x},t) = V(\mathbf{x})$. Gleichung (1) lässt sich dann mit dem Produktansatz $\Psi(\mathbf{x},t) = \psi(\mathbf{x})\phi(t)$ in folgende Form bringen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \ . \tag{2}$$

Gleichung (2), die zeitunabhängige oder auch stationäre Schrödinger-Gleichung, soll Ausgangspunkt anstehender Berechnungen sein.

1. **Energiequantisierung**

   Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden:

   $$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \tag{3}$$

   Es handelt sich hierbei um ein freies (d.h. kräftefreies) Teilchen in $x \in (0,a)$, welches in einem endlichen eindimensionalen Raum eingesperrt (*engl. confinement*) wird.
   Zur Lösung des Problems setzt man das Potential (3) in die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung ein:

   $$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\Psi(x) = E\Psi(x) \ . \tag{4}$$

(a) Die Wellenfunktion eines kräftefreien Teilchens (mit $V(x) = 0$) ist eine ebene Welle:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) = Ae^{i(\pm kx - \omega t)} \tag{5}$$

mit einer Amplitude A, der Wellenzahl k und der Kreisfrequenz ω. Beweisen Sie diese Aussage, indem sie Gleichung (5) in die eindimensionale Form von Gleichung (1) einsetzen. Hieraus ergibt sich die Dispersionsrelation, d.h. die Beziehung zwischen Energie E und Wellenzahl k des Teilchens. Wie sieht die Dispersionsrelation für ein kräftefreies Teilchens aus? Bedenken Sie, dass $E = \hbar\omega$ gilt.

(b) Im Innern des Potentialtopfes, d.h. für $x \in (0, a)$, ist der Lösungsansatz

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \ . \tag{6}$$

Das entspricht einer Überlagerung einer nach links und rechts laufenden ebenen Welle. Da $|\psi(x)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte am Ort x angibt und das Teilchen nicht in eine unendlich hohe Potentialwand eindringen kann, ergeben sich hieraus die Randbedingungen

$$\psi(0) = 0 \tag{7}$$
$$\psi(a) = 0 \ . \tag{8}$$

Berechnen Sie die Quantisierungsbedingung für die Wellenzahl k. Werten Sie hierzu Gleichung (6) an den Randstellen aus und benutzen Sie (7) und (8). Folgende Beziehung wird Ihnen hilfreich sein: $sin(z) = (e^{iz} - e^{-iz})/(2i)$.

(c) Welche diskreten Werte kann die Wellenzahl annehmen und welche die Wellenlänge des Teilchens?

(d) Aus der Quantisierung der Wellenzahl folgt die Energiequantisierung. Welche quantisierten Werte kann die Energie annehmen? Hinweis: Benutzen Sie die Dispersionsrelation. Berechnen Sie nun die ersten drei erlaubten Energien (n=1,2,3) in meV für die Topfbreite a = 2.5 nm.

(e) Schliesslich interessieren wir uns für die allgemeine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $w(x) = \psi^*(x) \cdot \psi(x) = |\psi(x)|^2$ des Teilchens im Potentialtopf. Berechnen Sie zuerst die Wellenfunktion des Problems bis auf die Normierungskonstante. Die Rechnungen aus Teilaufgabe (b) werden Ihnen dabei hilfreich sein. Zeichnen Sie qualitativ $w(x)$ für die Fälle $n = 1$, 2 und 3.
(Die Wellenfunktion muss normiert werden, damit $|\psi(x)|^2$ als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann. Die Normierungskonstante ist hier $\sqrt{(2/a)}$.)

Bemerkung: Die Quantisierung der Energie ist die Folge von zu erfüllenden Randbedingungen, die wiederum aufgrund des dem Teilchen zur Verfügung stehenden begrenzten Raumes zu fordern sind.

2. **Tunneleffekt**

Ein Teilchen befinde sich in folgender Potentiallandschaft:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{falls } 0 < x < a \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \tag{9}$$

wobei $V_0 > 0$ ist. Der Ansatz für die Wellenfunktion ist

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x} & \text{falls } -\infty < x \leq 0 \\ B_1 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} & \text{falls } 0 < x < a \\ C e^{ik_1 x} & \text{falls } a \leq x < +\infty \end{cases} \tag{10}$$

(a) Berechnen Sie die Dispersionsrelation des Teilchens, welches sich im Bereich $x \in (0, a)$ aufhält. Gehen Sie dabei ähnlich vor wie in Aufgabe (1a).

(b) Formen Sie die $E(k_2)$-Beziehung nach k_2 um und diskutieren Sie die zwei Fälle $E < V_0$ und $E \geq V_0$.

(c) Wie lautet die Wellenfunktion im Bereich $x \in (0, a)$ für die zwei Fälle $E < V_0$ und $E \geq V_0$? Erklären Sie anhand dieser Wellenfunktion, warum ein von links kommendes Teilchen der Energie $E < V_0$ in den klassisch verbotenen Bereich $x \in [a, +\infty)$ vordringen kann.

(d) Der Transmissionskoeffizient ist für $E \ll V_0$ näherungsweise durch

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa a} \tag{11}$$

gegeben. Berechenen sie diesen Koeffizienten für $a = 1$ nm, $E = 0.1$ eV, $V_0 = 3$ eV. Berechnen Sie den Koeffizienten erneut für $a = 0.5$ nm, $E = 0.5$ eV, $V_0 = 3$ eV und vergleichen Sie.

(e) **Aufgabe für Hochmotivierte**
Berechnen Sie den exakten Transmissionskoeffizienten

$$T = \left| \frac{C}{A_1} \right|^2 . \tag{12}$$

Um die Koeffizienten vor der Wellenfunktion (A_1, A_2, B_1, B_2, C) zu berechnen, ist es notwendig, die Stetigkeit der Wellenfunktion $\psi(x)$ und ihrer ersten Ableitung $d\psi(x)/dx$ an den Unstetigkeitsstellen des Potentials einzubeziehen. Hieraus ergeben sich vier Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten. Für den Grenzfall $E \ll V_0$ ergibt sich dann (wie in der Vorlesung und in Aufgabe 2 (d) angegeben):

$$T \propto e^{-2\kappa a} , \tag{13}$$

wobei $k_2 = i\kappa$ ist.
(Obwohl das betrachtete Potential unstetig ist, kann man zeigen, dass die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung stetig bleiben, unter der Vorausstetzung, dass das zugrunde liegende Potential beschränkt ist.)