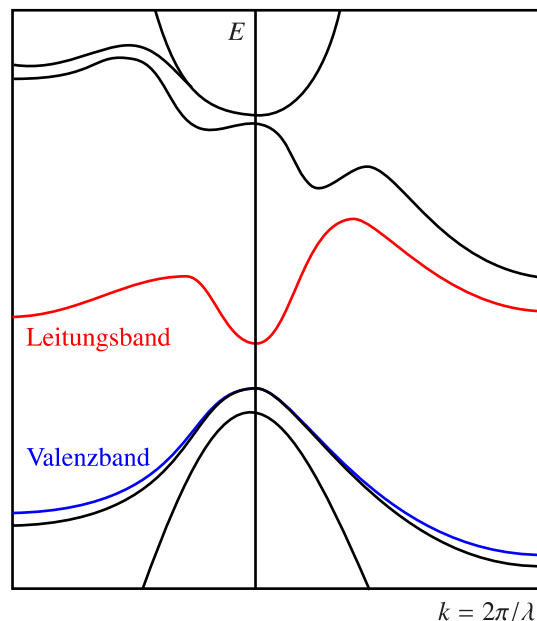


LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.3

Aufgabe 19

a.)

Wie wir schon kennengelernt haben, ist die Energie in der Quantenmechanik gequantelt; sie nimmt also nur bestimmte diskrete (aber keine beliebigen kontinuierlichen) Werte an. Die Elektronen eines Atoms bewegen sich nicht auf Bahnen wie man dies von der klassischen Mechanik erwarten würde, sondern halten sich in Wahrscheinlichkeitsräumen, sogenannten Orbitalen, auf. Jedes dieser Orbitale entspricht einer bestimmten Energie und nur diese Energien kann ein Elektron haben, andere sind nicht möglich. Betrachtet man einen Festkörper, so kann sich die Situation dramatisch ändern. Die Orbitale der benachbarten Atome überlappen sich gegenseitig und es entsteht im Prinzip ein riesiges Orbital, das sich über den ganzen Festkörper erstreckt. Elektronen können sich daher durch den ganzen Festkörper bewegen. Die Energien der Elektronen sind durch die charakteristische Dispersionsrelation $E = E(\mathbf{k})$ mit der Wellenzahl $k = |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$ (und der de-Broglie-Wellenlänge der Elektronen) gegeben; im Festkörper bezeichnet man diese Dispersionsrelation auch als Energieband. Es gibt verschiedene solcher Bänder, nämlich Valenz- und Leitungsband. Schauen wir uns als Beispiel die Bänder in Indium-Gallium-Arsenid (InGaAs) an:



Die Valenzbänder befinden sich näher am Atomkern und sind vollständig mit Elektronen besetzt. Die Elektronen sind fest an die Atomrümpfe gebunden und tragen nicht zum Stromfluss bei, wenn eine äußere Spannung an den Festkörper angelegt wird. Beitragen zu einem Stromfluss können nur Elektron-Fehlstellen (Defektelektronen oder auch Löcher) im Valenzband oder Elektronen im Leitungsband. Charakteristisch für einen Halbleiter ist, dass sich bei Zimmertemperatur nur ein winziger Bruchteil von Elektronen im Leitungsband bzw. Löcher im Valenzband befinden; man bezeichnet einen solchen Halbleiter als intrinsisch. Elektronen benötigen eine bestimmte Energie, um vom Valenz- ins Leitungsband zu geladen, da beide Bänder durch eine Energielücke (Bandlücke) voneinander getrennt sind. Fällt wiederum ein Elektron vom Leitungs- ins Valenzband, so wird eine Energiemenge frei, welche dem Energieunterschied, also der Bandlücke zwischen beiden Bändern entspricht. Diese Energiemenge entspricht bei GaInAs den angegebenen $W_B = 750 \text{ meV}$ und damit folgt nach der Planckschen Formel die Energie für ein freiwerdendes Photon:

$$W = h \cdot f \stackrel{!}{=} W_B \Rightarrow \lambda = \frac{h \cdot c}{W_B} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{750 \cdot 10^{-3} \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}} \approx 1,65 \cdot 10^{-6} \text{ m} = \boxed{1,65 \mu\text{m}}. \quad (1)$$

b.)

Die Bandlücke in Indiumphosphit (InP) ist größer als die in InGaAs, weshalb das InP wie ein Potentialwall für die Elektronen wirkt, die sich im InGaAs befinden. Das ganze System ist ein endlicher Potentialtopf und aus der Vorlesung wissen wir, dass es in einem solchen Potentialtopf eine niedrigste Energie $W_1 \neq 0$ (Nullpunktsenergie)

gibt, welche die Elektronen besitzen können. Dieser Beitrag der Nullpunktsenergie verschiebt die Energie eines (quasi freien) Elektrons im Leitungsband, also die Energielücke W_B , nach oben. Die ausgesendeten Photonen können somit eine höhere Energie und eine kleinere Wellenlänge besitzen:

$$W = h \cdot f \stackrel{!}{=} W_B + W_1 \Rightarrow W_1 = \frac{h \cdot c}{\lambda} - W_B \approx \boxed{51 \text{ meV.}} \quad (2)$$

c.)

Im Vakuum besitzen Elektronen die Dispersionsrelation

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad k = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (3)$$

mit der Elektronmasse m_e . Im Festkörper ändert sich die Dispersionsrelation in der Nähe von $k = 0$ wie folgt:

$$\boxed{E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}}, \quad (4)$$

wobei m^* nun nicht mehr die Masse m_e freier Elektronen im Vakuum, sondern die sogenannte effektive Masse ist. Die effektive Masse spiegelt wieder, wie beweglich die Atome im Festkörper sind. Im Valenzband ist die effektive Masse sehr groß und physikalisch bedeutet dies, dass die Elektronen nahe an den Atomkernen sehr fest sitzen oder durch chemische Bindungen an ihren Plätzen fixiert sind. Auf der anderen Seite ist die effektive Masse der Elektronen im Leitungsband viel kleiner als m_e , weshalb die Beweglichkeit von Elektronen im Leitungsband groß ist. Das ist auch der Grund, weshalb Elektronen, die zum elektrischen Strom beitragen, sich unbedingt im Leitungsband aufhalten müssen. Weit weg vom Punkt $k = 0$ ist die effektive Masse keine Konstante mehr, sondern hängt von der Wellenzahl ab: $m^* = m^*(\mathbf{k})$.

Die in der Aufgabe angegebenen Bedingungen für die erste Ableitungen haben was mit der Stromerhaltung in der Quantenmechanik zu tun. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ muss die sogenannte Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (5)$$

mit dem Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{i\hbar}{m} (\psi(\mathbf{x}, t) \nabla \psi(\mathbf{x}, t)^* - \psi(\mathbf{x}, t)^* \nabla \psi(\mathbf{x}, t)), \quad (6)$$

mit dem Ortsvektor $\mathbf{x} = (x, y, z)$ und dem Differentialoperator

$$\nabla = \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix}. \quad (7)$$

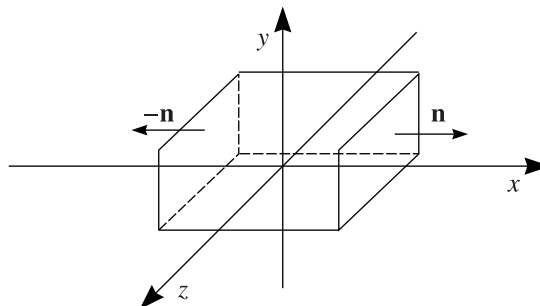
Da wir hier ein zeitunabhängiges (stationäres) Problem in einer Dimension vorliegen haben, können wir die Zeitabhängigkeit vergessen. Die Kontinuitätsgleichung vereinfacht sich dann zu

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(x) = 0, \quad \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} j(x) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0. \quad (8)$$

Wir integrieren über die letzte Gleichung und nutzen dabei den Gaußschen Satz aus:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{j}(x) dV = \oint_S \mathbf{j}(x) \cdot \mathbf{n} dS = 0. \quad (9)$$

Die letzte Gleichung besagt, dass der Strom durch eine geschlossene Oberfläche S , welche das Volumen V berandet, verschwinden muss. Wir vergessen mal kurz die effektive Masse der Elektronen und integrieren am Besten über die Oberfläche eines Quaders, wie im folgenden Bild veranschaulicht:



Die Randflächen tragen nichts zur Integration bei, weil die y - und z -Komponente des Stroms verschwinden. Es fließt also durch diese Flächen kein Wahrscheinlichkeitsstrom. Wichtig sind nur die Deckflächen, wobei wir beachten müssen, dass der Normalenvektor \mathbf{n} für $x \geq 0$ in Richtung der positiven x -Achse zeigt und für $x < 0$ in Richtung der negativen:

$$\oint_S \mathbf{j}(x) \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_A j_x(x = \varepsilon) \, dS - \int_A j_x(x = -\varepsilon) \, dS = 0. \quad (10)$$

Lassen wir nun ε (und damit die Dicke des Quaders) immer kleiner werden, so gilt

$$\begin{aligned} & \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i\hbar}{m} \int_A \left\{ \psi(\varepsilon) \frac{d\psi(x)^*}{dx} \Big|_{x=\varepsilon} - \psi(\varepsilon)^* \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=\varepsilon} - \psi(-\varepsilon) \frac{d\psi(x)^*}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} + \psi(-\varepsilon)^* \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} \right\} = \\ & = \frac{i\hbar}{m} \int_A \left\{ \psi_3(0) \frac{d\psi_3(x)^*}{dx} \Big|_{x=0} - \psi_2(0) \frac{d\psi_2(x)^*}{dx} \Big|_{x=0} + \psi_2(0)^* \frac{d\psi_2(x)}{dx} \Big|_{x=0} - \psi_3(0)^* \frac{d\psi_3(x)}{dx} \Big|_{x=0} \right\} = \\ & = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Hieraus ergibt sich dann die Stetigkeit der Wellenfunktion und deren Ableitung bei $x = 0$:

$$\psi_2(0) = \psi_3(0), \quad \frac{d\psi_2(x)}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{d\psi_3(x)}{dx} \Big|_{x=0}. \quad (12)$$

Führt man nun effektive Massen für das Elektron ein, so muss dies in (11) berücksichtigt werden:

$$\begin{aligned} & \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} i\hbar \int_A \left\{ \frac{1}{m_B} \left(\psi(\varepsilon) \frac{d\psi(x)^*}{dx} \Big|_{x=\varepsilon} - \psi(\varepsilon)^* \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=\varepsilon} \right) \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{m_T} \left(\psi(-\varepsilon) \frac{d\psi(x)^*}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} - \psi(-\varepsilon)^* \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} \right) \right\} = \\ & = i\hbar \int_A \left\{ \psi_3(0) \frac{1}{m_B} \frac{d\psi_3(x)^*}{dx} \Big|_{x=0} - \psi_2(0) \frac{1}{m_T} \frac{d\psi_2(x)^*}{dx} \Big|_{x=0} \right. \\ & \quad \left. + \psi_2(0)^* \frac{1}{m_T} \frac{d\psi_2(x)}{dx} \Big|_{x=0} - \psi_3(0)^* \frac{1}{m_B} \frac{d\psi_3(x)}{dx} \Big|_{x=0} \right\} = \\ & = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Damit sind die Stetigkeitsbedingungen für unterschiedliche effektive Massen wie folgt zu wählen:

$$\psi_2(0) = \psi_3(0), \quad \frac{1}{m_T} \frac{d\psi_2(x)}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{1}{m_B} \frac{d\psi_3(x)}{dx} \Big|_{x=0}. \quad (14)$$

Wir teilen die Halbleiterstruktur in drei Bereiche ein:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } x \leq -L/2 \text{ (Bereich 1)} \\ 0 & \text{für } -L/2 < x < L/2 \text{ (Bereich 2)} \\ V_0 & \text{für } x \geq L/2 \text{ (Bereich 3)} \end{cases}. \quad (15)$$

Die Energie E der Elektronen sei kleiner als V_0 , womit diese im Potentialtopf gefangen sind. Wir machen nun verschiedene Ansätze für die Wellenfunktion. Bereich (1) und (3) sind wegen $E < V_0$ klassisch verbotene Bereiche, weshalb hier die Wellenfunktion exponentiell abfallen muss:

$$\psi_1 = A \exp(\kappa x), \quad \psi_3 = D \exp(-\kappa x), \quad \kappa_1 = \kappa_3 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (16)$$

es gilt also $\psi_1 \rightarrow 0$ für $x \rightarrow -\infty$ und $\psi_3 \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \infty$. Dies sorgt für die Quadratintegrabilität. Für Bereich (2) machen wir einen oszillatorischen Ansatz, da es sich wegen $E > V = 0$ handelt um ein klassisch erlaubtes Gebiet:

$$\psi_2 = B \exp(jk_2 x) + C \exp(-jk_2 x), \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (17)$$

Da das Potential symmetrisch zur y -Achse ist, müssen auch die Wellenfunktionen symmetrisch sein. Hierbei unterscheiden wir zwischen zwei möglichen Fällen:

1.) Achsensymmetrie der Wellenfunktion zur y -Achse: $\psi(x) = \psi(-x)$

Sei für $x \geq 0$ die Wellenfunktion gegeben durch $\psi(x)$, $\psi(x)$ soll also die Schrödingergleichung für $x \geq 0$ lösen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (18)$$

Ersetzen wir x durch $-x$ (betrachten also den Bereich $x < 0$), so gilt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(-x)\psi(-x) = E\psi(-x). \quad (19)$$

Mit $V(-x) = V(x)$ und $\psi(x) = \psi(-x)$ erhalten wir wieder die ursprüngliche Gleichung (18). Wenn $\psi(x) = \psi(-x)$ gilt und $\psi(x)$ die Schrödingergleichung für $x \geq 0$ löst, dann auch für $x < 0$, sofern das Potential ebenso symmetrisch ist. Die Lösung ist mit $A = D$ und $B = C$ achsensymmetrisch zur y -Achse. Nun müssen wir erneut die Stetigkeitsbedingungen auswerten. Die Wellenfunktion muss auf jeden Fall bei $L/2$ stetig sein, also

$$\psi_2(L/2) = \psi_3(L/2), \quad (20)$$

gelten. Durch die effektive Masse der Elektronen, welche ungleich der Elektronenmasse im Vakuum ist, muss die Bedingung für die Stetigkeit der ersten Ableitung wie angegeben geändert werden:

$$\frac{1}{m_B} \left. \frac{d\psi_2(x)}{dx} \right|_{x=L/2} = \frac{1}{m_T} \left. \frac{d\psi_3(x)}{dx} \right|_{x=L/2}. \quad (21)$$

Aus diesen beiden Bedingungen ergibt sich das Gleichungssystem

$$A \exp\left(-\kappa_1 \frac{L}{2}\right) = F \cos\left(k_2 \frac{L}{2}\right), \quad (22a)$$

$$-A \frac{\kappa_1}{m_B} \exp\left(-\kappa_1 \frac{L}{2}\right) = -F \frac{k_2}{m_T} \sin\left(k_2 \frac{L}{2}\right). \quad (22b)$$

Das Gleichungssystem besitzt nur dann eine nichttriviale Lösung ($A \neq 0 \neq F$), falls die Determinante der Koeffizientenmatrix

$$\begin{pmatrix} \exp(-\kappa_1 L/2) & \cos(k_2 L/2) \\ \kappa_1/m_B \exp(-\kappa_1 L/2) & k_2/m_T \sin(k_2 L/2) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

verschwindet. Dies führt auf

$$\frac{k_2}{m_T} \sin\left(k_2 \frac{L}{2}\right) \exp\left(-\kappa_1 \frac{L}{2}\right) - \frac{\kappa_1}{m_B} \cos\left(k_2 \frac{L}{2}\right) \exp\left(-\kappa_1 \frac{L}{2}\right) = 0, \quad (24)$$

und somit

$$\boxed{\frac{\kappa_1 m_T}{k_2 m_B} = \tan\left(k_2 \frac{L}{2}\right)}. \quad (25)$$

2.) Punktsymmetrie der Wellenfunktion zum Ursprung: $\psi(x) = -\psi(-x)$

Ersetzen wir x durch $-x$ (betrachten also den Bereich $x < 0$), so gilt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(-x)\psi(-x) = E\psi(-x). \quad (26)$$

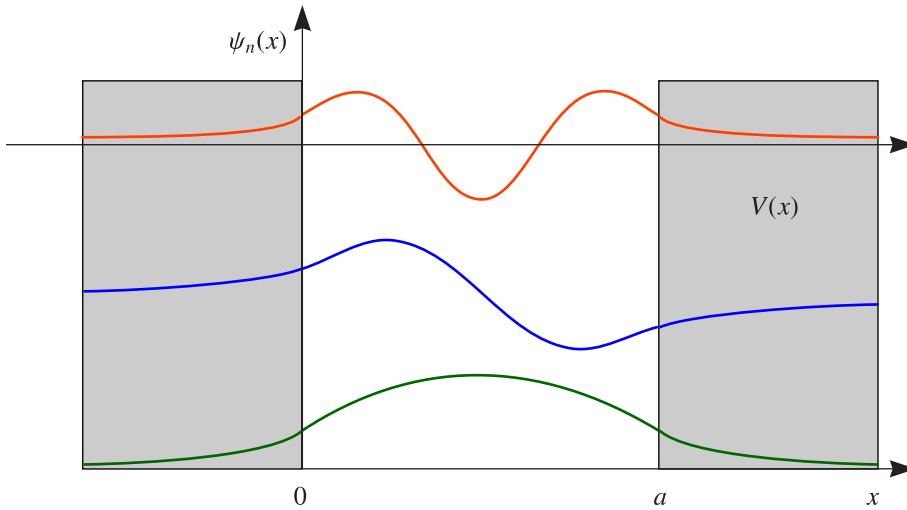
Mit $V(-x) = V(x)$ und $\psi(x) = -\psi(-x)$ erhalten wir wieder die ursprüngliche Gleichung (18). Wenn $\psi(x) = -\psi(-x)$ gilt und $\psi(x)$ die Schrödingergleichung für $x \geq 0$ löst, dann auch für $x < 0$, sofern das Potential ebenso symmetrisch ist. Die Lösung ist mit der Wahl $A = -D$ und $B = -C$ punktsymmetrisch zum Ursprung:

$$\psi_1(x) = A \exp(\kappa_1 x), \quad \psi_2(x) = E \sin(k_2 x), \quad \psi_3(x) = -A \exp(-\kappa_1 x). \quad (27)$$

Die Auswertung der Stetigkeitsbedingungen, aber dieses mal bei $x = -L/2$ führt auf eine ähnliche Gleichung:

$$\boxed{\frac{\kappa_1 m_T}{k_2 m_B} = -\cot\left(k_2 \frac{L}{2}\right)}. \quad (28)$$

Die Wellenfunktionen sehen wie folgt aus:



Im Gegensatz zum unendlich tiefen Potentialtopf fallen diese an den Potentialtopfgrenzen $x = -L/2$ und $x = L/2$ nicht auf Null ab, sondern dringen in das Potential ein. Man spricht davon, dass die Wellenfunktionen eine bestimmte Eindringtiefe besitzen und physikalisch bedeutet dies, dass sich das Elektron mit einer nicht-verschwindenden Wahrscheinlichkeit innerhalb des Potentials aufhalten kann, obwohl dessen Energie $E < V_0$ ist. In der klassischen Mechanik ist so etwas nicht möglich, in der Quantenmechanik schon.

d.)

Die beiden Gleichungen (25) und (28) sind sogenannte transzendente Gleichungen; deren Lösungen können algebraisch nicht bestimmt werden und man ist auf numerische Methoden angewiesen. Man kann die Gleichungen jedoch einfacher auch graphisch lösen. Betrachten wir dazu zunächst (25) und setzen κ_1 und k_2 ein:

$$\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \sqrt{\frac{m_B}{m_T}} = \tan\left(\frac{\sqrt{2m_T E} L}{2}\right). \quad (29)$$

Jetzt ist es sicher geschickt, über

$$y \equiv \frac{\sqrt{2m_T E} L}{2}, \quad (30)$$

eine dimensionslose Variable einzuführen und den Schnittpunkt der beiden Funktionen

$$f(y) = \sqrt{\frac{m_B}{m_T}} \sqrt{\frac{V_0 m_T L^2}{2\hbar^2} \frac{1}{y^2} - 1}, \quad g(y) = \tan(y), \quad (31)$$

graphisch zu bestimmen. Etwas Ähnliches wurde auch in Abbildung (1b) gemacht. Dies ist jedoch hier nicht verlangt. Statt dessen gehen wir von Abbildung (1b) direkt aus. Die Nullpunktenergie ist die niedrigste Energie des System $\neq 0$. Die tan-Lösung (25) liefert nach dem Schaubild eine niedrigere Energie als die cot-Lösung. Damit muss die Nullpunktenergie aus der tan-Lösung folgen. Um die Breite des Potentialtopfes schließlich zu bestimmen, lösen wir (25) nach L auf:

$$L = \frac{2}{k_2} \arctan\left(\frac{\kappa_1 m_T}{k_2 m_B}\right), \quad \kappa_1 = \frac{\sqrt{2m_B(V_0 - W_1)}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m_T W_1}}{\hbar}. \quad (32)$$

Mit den angegebenen Zahlenwerten $m_T = 0,041m_0$, $m_B = 0,08m_0$, $V_0 = 260 \text{ meV}$ und dem Ergebnis aus Aufgabenteil (b) $W_1 = 51 \text{ meV}$ ergibt sich

$$\boxed{L \approx 8,25 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 8,25 \text{ nm}.} \quad (33)$$

Der Potentialtopf ist also sehr schmal; dessen Breite liegt in der Größenordnung von einigen Atomdurchmessern ($d = 10^{-10} \text{ m}$).

Aufgabe 20

a.)

Für $x < 0$ (Bereich 1) und $x > 0$ (Bereich 2) handelt es sich wegen $W < V_0 = 0$ um ein klassisch verbotenes Gebiet. Daher sind exponentielle Lösungen anzusetzen:

$$\psi_1(x) = A \exp(-\kappa x) + B \exp(\kappa x), \quad \psi_2(x) = C \exp(-\kappa x) + D \exp(\kappa x), \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mW}}{\hbar}. \quad (34)$$

Um die Quadratintegrabilität zu gewährleisten, muss $\psi_1(x)$ für $x \mapsto -\infty$ bzw. $\psi_2(x)$ für $x \mapsto \infty$ auf Null abfallen. Dies erreicht man durch die Wahl $A = D = 0$. Damit gilt also

$$\boxed{\psi_1(x) = B \exp(\kappa x), \quad \psi_2(x) = C \exp(-\kappa x)}. \quad (35)$$

b.)

Die Wellenfunktion muss bei $x = 0$ auf jeden Fall stetig sein, also muss $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ und daher $B = C \equiv C'$ gelten. Was die erste Ableitung macht, ist zunächst nicht klar:

$$\left. \frac{d\psi_1(x)}{dx} \right|_{x=0-} = \kappa C' \exp(\kappa x)|_{x=0-} = \kappa C', \quad \left. \frac{d\psi_2(x)}{dx} \right|_{x=0+} = -\kappa C' \exp(-\kappa x)|_{x=0+} = -\kappa C'. \quad (36)$$

Hierbei bezeichnet $x = 0-$ den linksseitigen und $x = 0+$ den rechtsseitigen Grenzwert für $x \mapsto 0$. Man erkennt, dass die erste Ableitung auf jeden Fall einen Sprung machen wird! Um den Sprung zu erfassen, müssen wir die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0 \delta(x) \psi(x) = W \psi(x), \quad (37)$$

über ein kleines Intervall $[-\varepsilon, \varepsilon]$ um den Ursprung integrieren:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx + V_0 \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \psi(x) dx = W \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx, \quad (38)$$

und es ergibt sich weiter:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=\varepsilon} - \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} \right) + V_0 \psi(0) = W (\psi(\varepsilon) - \psi(-\varepsilon)). \quad (39)$$

Der Grenzübergang nach $\varepsilon \mapsto 0$ führt wegen $\psi(0+) - \psi(0-) = 0$ zu:

$$\boxed{\left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=0+} - \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=0-} = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi(0)}. \quad (40)$$

Die erste Ableitung macht somit bei δ -Potential einen Sprung. Dies war ebenso der Fall beim unendlichen Potentialtopf an den Potentialtopfgrenzen. Unter bestimmten Umständen ist also ein Sprung der ersten Ableitung der Wellenfunktion zulässig; die Wellenfunktion selbst muss jedoch immer stetig sein. Sprünge in den ersten Ableitungen treten bei diesen stark idealisierten Systemen auf, die so in der Natur nicht vorkommen.

c.)

Wir wollen nun noch die Bedingung (40) auswerten. Mit (36) gilt:

$$\kappa = -\frac{m}{\hbar^2} V_0 = \frac{m}{\hbar^2} |V_0|, \quad (41)$$

wegen $V_0 < 0$. Die Sprungbedingung für die erste Ableitung legt also die Konstante κ fest und es gilt dann:

$$\psi = \left\{ \begin{array}{ll} C' \exp\left(\frac{m|V_0|}{\hbar^2} x\right) & \text{für } x < 0 \\ C' \exp\left(-\frac{m|V_0|}{\hbar^2} x\right) & \text{für } x > 0 \end{array} \right\} = C' \exp\left(-\frac{m|V_0|}{\hbar^2} |x|\right). \quad (42)$$

Die Konstante C' kann nun noch über die Normierungsbedingung festgelegt werden.

$$C'^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1, \quad (43)$$

führt auf $C' = \sqrt{m|V_0|}/\hbar$ und somit zum Endergebnis:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{\sqrt{m|V_0|}}{\hbar} \exp\left(-\frac{m|V_0|}{\hbar^2}|x|\right)}. \quad (44)$$

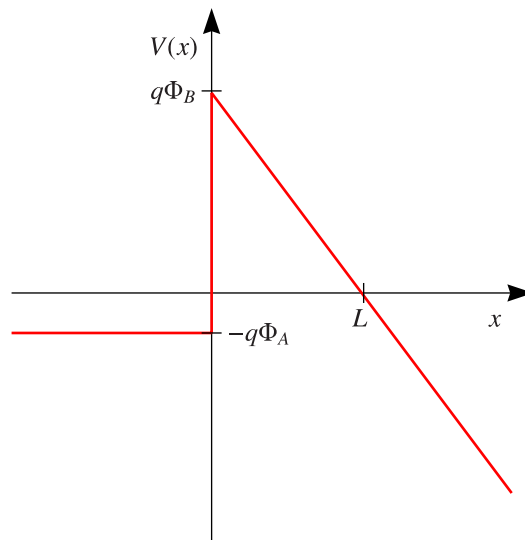
Es gibt also (anders als beim Potentialtopf oder harmonischen Oszillator) nur einen einzigen gebundenen Zustand, der durch obige Wellenfunktion charakterisiert ist.

Bemerkung: δ -funktionsförmige Potentiale sind zwar eine sehr starke Idealisierung der Natur. In erster Näherung liefern sie jedoch tatsächlich schon das richtige Verhalten für bestimmte Probleme. Beispielsweise kann man die Elektronen eines Wasserstoffmoleküls (das aus zwei Wasserstoffatomen, im Wesentlichen Protonen besteht) als Elektronen in einem doppelten δ -Potential betrachten. Die Berechnung der Wellenfunktionen liefert dann, dass es ein bindendes und ein antibindendes Orbital gibt, also die richtige quantenmechanische Beschreibung des Moleküls.

Aufgabe 3

a.)

Das Potential besitzt folgende Gestalt:



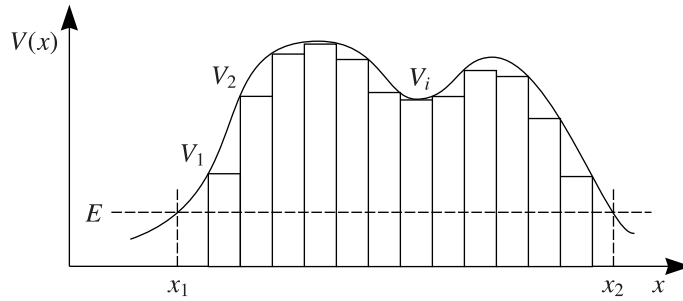
Es gilt außerdem:

$$E = -\frac{1}{q} \frac{dV}{dx} = \Phi_B/L, \quad (45)$$

für $x \geq 0$. (Dies wird in Aufgabenteil (c) benötigt.)

b.)

Man kann sich die angegebene Formel wie folgt plausibel machen. Und zwar unterteilen wir das Potential zwischen den beiden Punkten x_1 und x_2 (sogenannte klassische Umkehrpunkte, an denen die Energie W gleich dem Potential V ist) in kleine Abschnitte der Breite d , in denen das Potential als konstant angenommen wird:



Ein einzelner kleiner Potentialabschnitt V_i sorgt dafür, dass die Wellenfunktion exponentiell gedämpft wird. Sei $\psi(0)$ die Wellenfunktion vor der ersten Barriere $V_1 = \text{const.}$ Dann gilt nach Durchlaufen von V_1 :

$$\psi(d) = \psi(0) \exp(-\kappa_1 d) = \psi(0) \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_1 - W)}}{\hbar} d\right). \quad (46)$$

Anschließend wird das Potential V_2 durchlaufen und es gilt dann hinter V_2 :

$$\begin{aligned} \psi(2d) &= \psi(d) \exp(-\kappa_2 d) = \psi(d) \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_2 - W)}}{\hbar} d\right) = \\ &= \psi(0) \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_1 - W)}}{\hbar} d\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_2 - W)}}{\hbar} d\right). \end{aligned} \quad (47)$$

Durchlaufen wir n solcher Potentialwalle, gilt:

$$\psi(nd) = \psi(0) \prod_{i=1}^n \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_i - W)}}{\hbar} d\right) = \psi(0) \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{\sqrt{2m(V_i - W)}}{\hbar} d\right). \quad (48)$$

Bildet man nun den ubergang $n \mapsto \infty$ und $d \mapsto 0$, konnen wir die Summe in ein Integral ersetzen, das sich uber die Lange L des gesamten Potentials erstreckt ($L = n \cdot d$):

$$\boxed{\psi(L) = \psi(0) \exp\left(-\int_0^L \frac{\sqrt{2m(V(x) - W)}}{\hbar} dx\right)}. \quad (49)$$

Das ist die Formel aus der Aufgabe. Ein „besserer“ Beweis bekommt man unter Verwendung der WKB-Methode, welche nach den Physikern Wentzel, Kramers und Brillouin zuruckgeht. Dann ist das Ganze jedoch langlicher ;-)) Mittels der WKB-Methode kann die Schrodingergleichung fur beliebige Potentiale gelost werden, indem man eine Entwicklung der Wellenfunktion nach \hbar zugrunde legt. In der Nahe der klassischen Umkehrpunkte (wo wie Energie E dem Potential V entspricht) funktioniert die Naherung jedoch nicht und man ist auf andere Methoden angewiesen. Kommen wir nun zur Aufgabe. In dieser ist $W = 0$. Das bedeutet, dass der Potentialwall zwischen $x_1 = 0$ und $x_2 = L$ fur das Teilchen ein klassisch verbotener Bereich (wegen $W < V(x)$) darstellt. Das Teilchen kann aber nichts desto trotz quantenmechanisch durch dieses Potential tunneln. Mit der angegebenen Form des Dreieckspotentials fur $x \geq 0$

$$V(x) = q\Phi_B \left(1 - \frac{x}{L}\right), \quad (50)$$

erhalten wir:

$$\begin{aligned} \psi(L) &= \psi(0) \exp\left(-\int_0^L \frac{\sqrt{2m^* q\Phi_B \left(1 - \frac{x}{L}\right)}}{\hbar} dx\right) = \psi(0) \exp\left(-\frac{\sqrt{2m^* q\Phi_B}}{\hbar} \int_0^L \sqrt{1 - \frac{x}{L}} dx\right) = \\ &= \psi(0) \exp\left(-\frac{\sqrt{2m^* q\Phi_B}}{\hbar} \left[-\frac{2}{3}L \left(1 - \frac{x}{L}\right)^{\frac{3}{2}}\right]_0^L\right) = \boxed{\psi(0) \exp\left(-\frac{\sqrt{2m^* q\Phi_B}}{\hbar} \frac{2L}{3}\right)}. \end{aligned} \quad (51)$$

c.)

Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist gegeben durch den Quotienten aus den Aufenthaltswahrscheinlichkeiten hinter der Barriere $\psi(L)\psi(L)^*$ und vor der Barriere $\psi(0)\psi(0)^*$. Mit $L = \Phi_B/E$ folgt:

$$P = \frac{\psi(L)\psi(L)^*}{\psi(0)\psi(0)^*} = \exp\left(-\frac{\sqrt{2m^* q\Phi_B}}{\hbar} \frac{4L}{3}\right) = \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^* q}}{\hbar} \frac{\Phi_B^{\frac{3}{2}}}{E}\right). \quad (52)$$