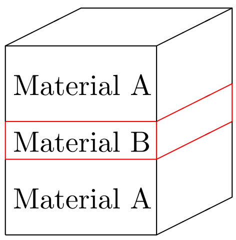
Einführung in die Quantenmechanik

Aufgaben

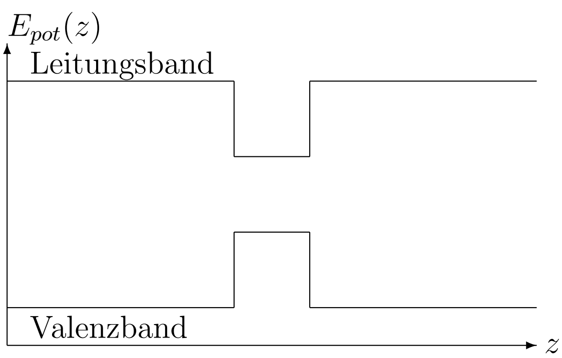
19.08.2008

1 Quantumwell

Unter Halbleiter-Heterostrukturen versteht man eine Struktur mit unterschiedlichen Halbleitern. Wir wollen nun eine Struktur betrachten, bei der zwei Halbleiter mit unterschiedlichen Bandlücken wie in der folgenden Abbildung übereinander geschichtet werden:



Die potentielle Energie in z-Richtung hat dann diese Form:



Es ergibt sich also in z-Richtung ein eindimensionaler Potentialtopf für die Elektronen im Leitungsband. Elektronen haben in Festkörpern in unterschiedliche Richtungen unterschiedliche effektive Massen. Die Schrödingergleichung für die Elektronen im Leitungsband lautet damit:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_x}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{m_y}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{m_z}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+E_{pot}(z)\right]\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z) \tag{1}$$

a) Verwenden Sie den Separationsansatz $\Psi(x,y,z)=\varphi(z)\cdot e^{i\mathbf{k}_\parallel(x,y)}$ und bestimmen Sie die Schrödingergleichung für die Bewegung in z-Richtung und für die Bewegung in der x-y-Ebene.

Lösung:

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_x}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{m_y}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{m_z}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+E_{pot}(z)\right]\varphi(z)\cdot e^{i\mathbf{k}_\parallel(x,y)}=E\varphi(z)\cdot e^{i\mathbf{k}_\parallel(x,y)} \tag{2}$$

Durch Umsortieren kann man eine Schrödingergleichung für die Bewegung in der x-y-Ebene finden:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_x}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{m_y}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)e^{i\mathbf{k}_\parallel(x,y)}=E_\parallel e^{i\mathbf{k}_\parallel(x,y)} \tag{3}$$

Für die Schrödingergleichung in z-Richtung ergibt sich

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_z}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+E_{pot}(z)\right]\varphi(z)=E_\perp\varphi(z) \tag{4}$$

b) Bestimmen Sie die kinetische Energie $E_\parallel$ für die Bewegung in der x-y-Ebene. Nehmen Sie dazu an das gilt: $m_x=m_y=m_\parallel$

Lösung: Aus der Schrödingergleichung ergibt sich:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{-k_{\parallel,x}^2}{m_\parallel}+\frac{-k_{\parallel,y}^2}{m_\parallel}\right)e^{i\mathbf{k}_\parallel(x,y)} = E_\parallel e^{i\mathbf{k}_\parallel(x,y)} \tag{5}$$

$$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2k_\parallel^2}{2m_\parallel} \tag{6}$$

Im folgendem soll die potentielle Energie folgende Form haben:

$$E_{pot}(z)=\begin{cases}0 & z<\frac{L}{2}\\ -V_B & \frac{L}{2}\leq z\leq\frac{L}{2}\\ 0 & z>\frac{L}{2}\end{cases} \tag{7}$$

c) Lösen Sie die Schrödingergleichung für die Bewegung in z-Richtung für ein Elektron mit einer negativen Energie $E_\perp$

Lösung:

Zunächst wird die z-Achse in zwei Bereiche aufgeteilt:

- Bereich I: $z < \frac{L}{2}$ und $z > \frac{L}{2}$
- Bereich II: $\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2}$

Als Ansatz für den Bereiche I wählen wir:

$$\varphi_I(z) = e^{ik_{\perp,I}|z|} \tag{8}$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert:

$$\frac{\hbar^2 k_{\perp,I}^2}{2m_z} = E_\perp \tag{9}$$

$$\Rightarrow k_{\perp,I} = \sqrt{\frac{2m_z E_\perp}{\hbar^2}} \tag{10}$$

Da $E_\perp$ negativ ist, ist $k_{\perp,I}$ imaginär. Die exponentiell abfallende Lösung für den Bereich I lautet:

$$\varphi_I(z) \propto e^{-k_{\perp,I}|z|} \tag{11}$$

Als Ansatz für den Bereich II wählen wir analog zum unendlich hohem Potentialtopf

$$\varphi_{II}(z) \propto sin(k_{\perp,II} z) \tag{12}$$

$$\varphi_{II}(z) \propto cos(k_{\perp,II} z) \tag{13}$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert

$$k_{\perp,II} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_z(E_\perp + V_B} \tag{14}$$

Die Gesamtwellenfunktion muß bei $z = \pm\frac{L}{2}$ stetig differenzierbar sein. Für die gerade Lösung ergeben sich damit folgende Gleichungen:

$$I) \quad e^{-k_{\perp,I}\frac{L}{2}} = cos(k_{\perp,II}\frac{L}{2}) \tag{15}$$

$$II) \quad k_{\perp,I} e^{-k_{\perp,I}\frac{L}{2}} = k_{\perp,II} sin(k_{\perp,II}\frac{L}{2}) \tag{16}$$

Damit ergibt sich folgende Gleichung für die Energie $E_\perp$

$$k_{\perp,I} = \sqrt{\frac{2m_z E_\perp}{\hbar^2}} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_z(E_\perp + V_B} \tan\left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_z(E_\perp + V_B}\right) \tag{17}$$

Analog ergibt sich für die ungerade Lösung

$$k_{\perp,I} = \sqrt{\frac{2m_z E_\perp}{\hbar^2}} = -\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_z(E_\perp + V_B}\cot\left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_z(E_\perp + V_B}\right) \tag{18}$$

Diese beiden Gleichungen können nur numerisch nach $E_\perp$ aufgelöst werden.

2 Comptoneffekt

Beim Comptoneffekt streut ein Photon an einem freiem, ruhendem Elektron.

a) Bestimmen Sie den Wellenlängenunterschied $\Delta\lambda$ zwischen einfallendem und gestreutem Photon.

Lösung:

Beim elastischem Stoß müssen Energie und Impuls erhalten sein. Außerdem muß man diesen Prozess relativistisch betrachten. Die relativistische Energie-Impuls-Beziehung lautet für das Elektron nach dem Stoß:

$$E_e'^2 = m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2 \tag{19}$$

Die Energie E_e' und der Impuls p_e des Elektrons nach dem Stoß ergibt sich aus Energie- und Impulserhaltung:

$$\begin{aligned} E_\gamma + m_e c^2 &= E_e' + E_\gamma' &(20)\\ \vec{p_\gamma} &= \vec{p_e} + \vec{p_\gamma'} &(21)\end{aligned}$$

Einsetzen in die Energie-Impulsbeziehung liefert

$$\left(E_\gamma + m_e c^2 - E_\gamma'\right)^2 = m_e^2 c^4 + c^2\left(\vec{p_\gamma} - \vec{p_\gamma'}\right)^2 \tag{22}$$

$$\begin{aligned} E_\gamma^2 + m_e^2 c^4 + E_\gamma'^2 + 2m_e c^2(E_\gamma - E_\gamma') - 2E_\gamma E_\gamma' = &(23)\\ = m_e^2 c^4 + p_\gamma^2 c^2 + p_\gamma'^2 c^2 - 2c^2 \vec{p_\gamma}\vec{p_\gamma'} &(24)\end{aligned}$$

Da $p_\gamma = \frac{E}{c}$ folgt

$$\begin{aligned} m_e c^2(E_\gamma - E_\gamma') &= E_\gamma E_\gamma'(1 - \cos\vartheta) &(25)\\ \frac{m_e c^2}{E_\gamma'} - \frac{m_e c^2}{E_\gamma} &= 1 - \cos\vartheta &(26)\end{aligned}$$

Mit $E_\gamma = \frac{hc}{\lambda}$ ergibt sich für den Wellenlängenunterschied $\Delta\lambda$

$$\boxed{\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{m_e c}{h}(1 - \cos\vartheta)} \tag{27}$$

Im Folgendem wir ein Detektor betrachtet, der die Energie misst, die von Photonen im Detektor deponiert wird. Dabei sollen die Photonen nur eine Wechselwirkung haben, also entweder Photoeffekt oder Comptoneffekt und dann gegebenenfalls den Detektor verlassen. Die vom Photon erzeugten Elektronen können den Detektor nicht verlassen und deponieren ihre gesammte kinetische Energie im Detektor.

b) Bestimmen Sie die Energie E_C, die beim Comptoneffekt bei Rückstreuung ($\vartheta = \pi$) im Detektor deponiert wird. (Diese Energie wird als Comptonkante bezeichnet)

Lösung:

Gesucht ist die Differenz zwischen der Energie des einlaufendem und auslaufendem Photon ($E_C = E_\gamma - E'_\gamma$). Im Teil a) haben wir gesehen, dass gilt:

$$\frac{m_e c^2}{E'_\gamma} - \frac{m_e c^2}{E_\gamma} = 1 - \cos\vartheta \tag{28}$$

Bei der Rückstreuung ist $\vartheta = \pi$.

$$\Rightarrow m_e c^2 \left(\frac{1}{E'_\gamma} - \frac{1}{E_\gamma}\right) = 2 \tag{29}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{E'_\gamma} = \frac{1}{E_\gamma} + \frac{2}{m_e c^2} = \frac{m_e c^2 + 2E_\gamma}{E_\gamma m_e c^2} \tag{30}$$

Damit ergibt sich für die Comptonkante:

$$E_C = E_\gamma - E'_\gamma = E_\gamma - \frac{E_\gamma m_e c^2}{2E_\gamma + m_e c^2} \tag{31}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_C = \frac{2E_\gamma^2}{2E_\gamma + m_e c^2}} \tag{32}$$

Beim Zerfall von ^{60}Co entstehen zwei Photonen, dabei hat eins eine Energie von 1.17 MeV und das andere 1,33 MeV.

c) Welche relative Energieauflösung $\frac{\Delta E}{E}$ muß der Detektor haben um den Photopeak der 1,17 MeV-Linie von der Comptonkante der 1,33 MeV-Linie zu trennen?

Lösung:

Einsetzen in die Formel aus b) ergibt für die Comptonkante:

$$E_C = 1,12\text{MeV} \tag{33}$$

Die Energieauflösung muß also besser sein als

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{E_P - E_C}{E_P} = \frac{1,17\text{MeV} - 1,12\text{MeV}}{1,17\text{MeV}} = 4,3\% \tag{34}$$

3 Transmission und Reflexion an einer eindimensionalen Potenzialstufe

a) Die x-Achse wird drei Bereiche unterteilt, für $x < 0$ (Bereich I) und $x > a$ (Bereich III) ist $E_{pot}(x) = 0$, im dazwischen liegenden Bereich II ist $E_{pot}(x) = E_0$. Folgender Ansatz für die Wellenfunktionen in den drei Bereichen:

$$\begin{aligned}
\psi_I &= A \cdot e^{ik_1 x} + B \cdot e^{-ik_2 x} && (35)\\
\psi_{II} &= C \cdot e^{ik_2 x} + D \cdot e^{-ik_2 x} && (36)\\
\psi_{III} &= A' \cdot e^{ik_1 x} && (37)
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
k_1 &= \sqrt{2mE/\hbar 2} && (38)\\
k_2 &= \sqrt{2m(E - E_0)/\hbar 2} = i \cdot \alpha && (39)
\end{aligned}$$

Die Randbedingungen sind die Stetigkeit der Funktion und deren ersten Ableitung:

$$\begin{aligned}
&\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) && (40)\\
&\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0), \quad \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) && (41)
\end{aligned}$$

Hinweis: Im Bereich II ist die Energie des Teilchens $E' = E - E_0 < 0$ dadurch wir die Schrödingergleichung zu

$$\begin{aligned}
\frac{d2\psi}{dx2} + \frac{2m}{\hbar 2}(E - E_0)\psi &= 0 \qquad \text{mit } \alpha = \sqrt{2m(E - E_0)}/\hbar && (42)\\
\rightarrow \frac{d2\psi}{dx2} - \alpha 2\psi &= 0 && (43)\\
\rightarrow \psi &= C \cdot e^{\alpha \cdot x} + D \cdot e^{-\alpha \cdot x} && (44)
\end{aligned}$$

Es folgen die Gleichungen der obigen vier Randbedingungen:

$$
\begin{aligned}
A + B &= C + D & (45)\\
C \cdot e^{ik_2a} + D \cdot e^{-ik_2a} &= A' \cdot e^{ik_1a} & (46)\\
k_1(A - B) &= k_2(C - D) & (47)\\
k_2\left(C \cdot e^{ik_2a} - D \cdot e^{-ik_2a}\right) &= k_1 \cdot A' \cdot e^{-ik_1a} & (48)
\end{aligned}
$$

Es folgt (nach längerer Rechnung):

$$
\begin{aligned}
A &= \left[cos(k_2a) - i\frac{k_12 + k_22}{2k_1k_2}sin(k_2a)\right] \cdot e^{ik_1a} \cdot A' & (49)\\
B &= i\frac{k_12 - k_22}{2k_1k_2}sin(k_2a) \cdot e^{ik_1a} \cdot A' & (50)\\
\rightarrow R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k_12 - k_22) \cdot sin2(k_2a)}{4k_1^2k_22 + (k_12 - k_22)^2 sin2(k_2a)} & (51)\\
\rightarrow T &= \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2k_22}{4k_1^2k_22 + (k_12 - k_22)^2 sin2(k_2a)} & (52)
\end{aligned}
$$

$$\rightarrow R + T = 1 \qquad (53)$$

mit der Ersetzung von k_1 und k_2 folgt:

$$T = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{4E(E - E_0)}{4E(E - E_0) + E_02 \cdot sin2((2m(E - E_0))^{1/2} \cdot (a/\hbar))} \qquad (54)$$

und mit $E < E_0$ und $sin(ix) = isinh(x)$ dann schliesslich:

$$T = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{1 - E/E_0}{(1 - E/E_0) + (E_0/(4E)) \cdot sinh2(\alpha \cdot a)} \text{ mit } \alpha = \sqrt{2 \cdot m \cdot (E_0 - E)}/\hbar \qquad (55)$$

Für $E = 0.5 \cdot E_0$ folgt:

$$T = \frac{0.5}{0.5 + 0.5sinh2(2 \cdot \pi)} = 1.4 \cdot 10^{-5} \qquad (56)$$

Für $E = (1/3) \cdot E_0$ ergibt sich $T = 6.8 \cdot 10^{-8}$.
b) Die Zwischenergebnisse (Rechnung wie oben): $E = 0.8eV$, $E_0 = 1eV \rightarrow E/E_0 = 0.8$, $\alpha = 2.28 \cdot 109m^{-1}$, $a = 10^{-9}m \rightarrow sinh2(\alpha \cdot a) = 24.4 \rightarrow T(0.8eV) \approx 0.03$ und $T(1.2eV) = 0.625$.