MUSTERLÖSUNG 2

Aufgabe 1: In diesem Übungsblatt ist das Elektron wieder in einem 1-dim. Potentialtopf mit unendlich hohen Barrieren bei $x=0$ und $x=a$, wie beim Übungsblatt 1.

a) Um die ausführliche Lösung der (zeitunabhängigen) Schrödinger-Gleichung zu lesen, siehe bitte die Musterlösung vom ersten Blatt. Allerdings wird hier das Lösungsschema stichwortartig nochmal erläutert:

0. Das Potential $V(x)$ aus der Struktur des Potentialtopfs ablesen. (hier stückweise konstant, daher in Bereichen unterteilen und die Schrödinger-Gl. in allen Bereichen durch das Einsetzen des entsprechenden Potentials bestimmen.

Spezialfall: Für $V(x) \to \infty$ gilt $\Psi(x)=0$ im dementsprechenden Bereich. Für alle andere Bereiche soll die Schrödinger-Gl. wie folgt gelöst werden. (in diesem Fall nur Bereich II).

1. Allgemeinen Lösungsansatz schreiben: $\Psi(x) = \underbrace{C_1 e^{jkx}}_{\text{einfallende Welle}} + \underbrace{C_2 e^{-jkx}}_{\text{reflektierte Welle}}$

2. Randbedingungen wegen der Stetigkeit von $\Psi(x)$ aufschreiben (hier $\Psi(0)=0$ und $\Psi(a)=0$).

3. Mithilfe der RBen C_2 in Abhängigkeit von C_1 und k in Abhängigkeit von a (Topfbreite) und n (Quantenzahl) bestimmen. Dabei in jedem Schritt den Ansatz für $\Psi(x)$ vereinfachen.

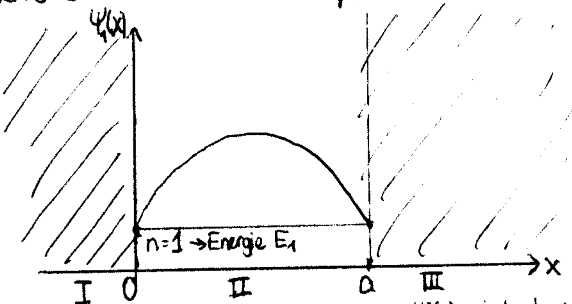
4. Durch Normierung die letzte unbekannte Konstante bestimmen. (Lösung lautet im 1-dim. $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$)

5. Durch Einsetzen der nun stehenden Lösung in die Schrödinger-Gl. die Energie E in Abhäng. von n, a und m^* (effektive Masse des Elektrons) bestimmen. (Es gilt also hier: $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} n^2 = \frac{k_x^2 \hbar^2}{2m^*}$)

b) Die Wellengleichung ist ja quantisiert mit der Quantenzahl n. Um die x-Abhängigkeit der Lösung der Schrödinger-Gleichung im ersten und zweiten Zustand zu bestimmen, soll man lediglich $n=1$ bzw. $n=2$ in die Wellenfunktion einsetzen.

• Erster Zustand (Grundzustand des Elektrons in diesem Potentialtopf, d.h. Elektron ist nicht angeregt):

$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{a} \cdot x\right)$, $n=1 \Rightarrow$

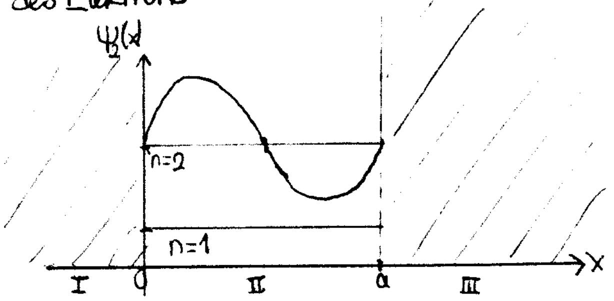


Die Zeichnung stellt $\Psi_1(x)$ im Grundzustand des Potentialtopfs dar. Die darf aber nicht verwirrend wirken, da in diesem Fall es so ausschaut als ob $\Psi(0)>0$ wäre. Es gelten die Randbedingungen $\Psi(0)=\Psi(a)=0$ immer noch. Die Abbildung deutet nur an, dass $\Psi(x)$ sich beim Energieniveau E_1 (des Grundzustands) befindet. Daher wird Ψ von der Energie aufgehoben. Diese Darstellungsweise gilt auch für weitere Abbildungen in dieser Musterlösung.

• Zweiter Zustand (Erster angeregter Zustand des Elektrons):

$\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{a} \cdot x\right) \Rightarrow$

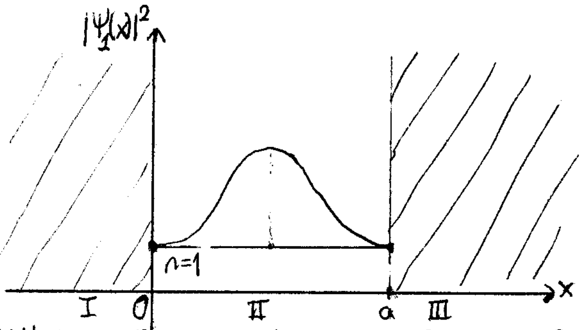
$(n=2)$



Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen in einem Energiezustand wird allgemein durch die W.keitdichte $\Psi^*(x) \cdot \Psi(x)$ definiert, was auch als $|\Psi(x)|^2$ geschrieben werden kann. Da in diesem Fall $\Psi_n(x)$ rein reell ist, kann man den Betrag weglassen und die Skizze von $\Psi(x)^2$ machen. Die Skizzen sehen folgendermaßen aus:

• Erster Zustand ($n=1$):

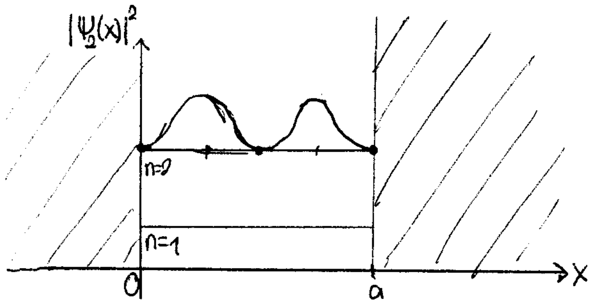
$$\Psi_1(x)^2 = \frac{2}{a} \cdot \sin^2\left(\frac{\pi}{a} \cdot x\right) \quad \Rightarrow$$



Interpretation der Skizze: Das Elektron befindet sich am wahrscheinlichsten genau in der Mitte ($x=\frac{a}{2}$) des Potentialtopfs, kann aber sich mit kleinerer W.keit im Bereich II bis zu den Grenzen $x=0$ und $x=a$ irgendwo aufenthalten. Innerhalb der Barrieren befindet sich das Elektron nie.

• Zweiter Zustand ($n=2$):

$$\Psi_2(x)^2 = \frac{2}{a} \cdot \sin^2\left(\frac{2\pi}{a} \cdot x\right) \quad \Rightarrow$$



Interpretation der Skizze: Am wahrscheinlichsten ist das Elektron bei $x=\frac{a}{4}$ oder $x=\frac{3a}{4}$. Im Potentialtopf kann sich das Elektron mit kleinerer W.keit auch befinden, wobei bei $x=0$, $x=a$ und $x=\frac{a}{2}$ sich das Elektron nie befindet. Innerhalb der Barrieren kann es sich auch nicht aufenthalten.

c) Die minimale Grenzenergie der Elektronen im Potentialtopf (1-dimensional) ist die Energie E_1 ($n=1$) des Grundzustands, also gilt:

$$E_{min} = E_1 = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2m^* a^2}$$

d) Die Energieeigenwerte der Elektronen bestimmt man mit der aus der Schrödinger-Gl. hergeleiteten Formel $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} n^2$. Deshalb gilt mit $m^* = 0{,}3 \cdot m_0 = 0{,}3 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}\,kg$ und $a = 5\,nm$ aus der Angabe:

$1\,eV = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,J$

• Grundzustand:

$$(n=1) \Rightarrow E_1 = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2m^* a^2} \cdot 1^2 = \frac{(1{,}055 \cdot 10^{-34}\,Js)^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot 0{,}3 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31}\,kg \cdot (5 \cdot 10^{-9}\,m)^2} \cong 8{,}04 \cdot 10^{-21}\,J \approx 50{,}2\,meV$$

• Zweiter Zustand:

$$(n=2) \Rightarrow E_2 = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2m^* a^2} \cdot 2^2 = 4 E_1 = 4 \cdot 8{,}04 \cdot 10^{-21}\,J = 3{,}22 \cdot 10^{-20}\,J \approx 201\,meV$$

e) Ein würfelförmiger Potentialtopf, auch „Quantum Dot" genannt, stellt ein Bereich für Elektronen dar, das in allen 3 Dimensionen beschränkt ist. Die Energieniveaus so einer Struktur sind deshalb in allen 3 Dimensionen quantisiert und es gibt dafür drei Quantenzahlen $n, m, \ell = 1, 2, \ldots$. Um die Wellengleichung und Energieniveaus in diesem Potentialtopf zu bestimmen, soll man die Schrödinger-Gl. lösen, indem man einen Separationsansatz $\Psi(\vec{r}) = \Psi(x) \cdot \Phi(y) \cdot \varphi(z)$ macht und in allen 3 Richtungen die Gleichung separat löst. Das wird aber hier nicht gefragt. Die Lösung und Energieeigenwerte lauten:

$$\Psi_{nm\ell}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{m\pi}{b} \cdot y\right) \cdot \sin\left(\frac{\ell \cdot \pi}{a} z\right) \quad \text{und} \quad E_{nm\ell} = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2m^* a^2} (n^2 + m^2 + \ell^2)$$

Da n, m, ℓ mindestens den Wert 1 haben (anders als beim Wasserstoffatom), hat das Elektron die niedrigste Energie, wenn $n=m=\ell=1$ gilt. Deswegen gilt:

$E_{111} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}(1^2+1^2+1^2) = 3 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2} = 3 \cdot 8{,}04 \cdot 10^{-21} J = 2{,}412 \cdot 10^{-20} J \approx 150{,}6\, meV$

f) Um die Anzahl der Energieeigenwerte mit Energien $E < 50 meV$ zu bestimmen, soll man die Formel $E_{nml} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}(n^2+m^2+l^2)$ in die Ungleichung einsetzen und diejenige Kombinationen der Werte der Quantenzahlen n, m, l bestimmen, die diese Ungleichung erfüllen. Es gilt also mit $a = 1 \mu m$ laut Angabe

$$E_{nml} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}(n^2+m^2+l^2) < 50 meV \Leftrightarrow n^2+m^2+l^2 < 50 meV \cdot \frac{2 \cdot 0{,}3 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31} kg \cdot (1 \cdot 10^{-6} m)^2}{(1{,}055 \cdot 10^{-34} Js)^2 \cdot \pi^2} = 39806{,}58$$

$$\Leftrightarrow n^2+m^2+l^2 < 39807$$

Diese Ungleichung beschreibt eine Kugel in einem 3-dimensionalen Raum, aufgespannt von n, m, l mit dem Radius $r = \sqrt{39807}$. Da aber n, m, l nur positive Werte aufnehmen dürfen, ist nur ein Oktant, also $\frac{1}{8}$ der Kugel zu betrachten. Die genaue Anzahl der Kombinationen der Quantenzahlen zu bestimmen ist nur per Abzählen möglich und ist zu aufwendig. Man kann aber eine approximative Anzahl bestimmen, indem die maximale Werte der Quantenzahlen in einzelnen Richtungen bestimmt werden, d.h.:

$$m=1, l=1 \Rightarrow n^2+2 < 39807 \Leftrightarrow n^2 < 39805 \underset{\substack{\text{nur } n>0 \\ \text{sind sinnvoll}}}{\Leftrightarrow} n < \sqrt{39805} = 199{,}51 \Rightarrow n_{max} = 199$$

Analog gilt $m_{max} = l_{max} = 199$. Also liegt die Kugel mit dem Radius 199 auf jeden Fall in der Kugel mit dem Radius 199,51. Die Anzahl der Zustände in der Kugel mit dem Radius 199 ist gleich zu dem Volumen des $\frac{1}{8}$ der Kugel. Mit der Volumenformel der Kugel $V = \frac{4}{3}\pi r^3$ gilt für die Anzahl der Zustände N (Kombinationen):

$$N = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot 199^3 = 4{,}13 \cdot 10^6$$

Die Anzahl der Energieeigenwerte ist jedoch doppelt so groß, da jeder Zustand mit zwei Elektronen mit unterschiedlichen Spins besetzt werden können. Es gilt also:

$$N' = 2 \cdot N = 2 \cdot 4{,}13 \cdot 10^6 = 8{,}26 \cdot 10^6$$

Diese Zahl ist aber approximativ, da es immer noch Kombinationen von Quantenzahlen geben kann, die nicht in der Kugel mit dem Radius 199, aber trotzdem in der Kugel mit dem Radius 199,51 liegen. Mit großen Radien ist der Fehler dabei vernachlässigbar und auch in diesem Beispiel ist die Approximation genug gut.

g) Siehe Musterlösung des Lehrstuhls.