

Ausarbeitung des Seminarvortrags

Ballistischer Transport von Elektronen durch Nanostrukturen

Frederik Edens

gehalten am 10. Februar 2016

Inhaltsverzeichnis

1. Motivation	2
2. Einführendes Beispiel - Streuung an Doppelbarriere	2
2.1. Mathematische Vorüberlegung	3
2.2. Untersuchung des Transmissionsverhalten	4
3. Allgemeine Methodik - Streuung an beliebigen 1D-Potentialen	5
3.1. Herleitung	5
3.2. Probe: Vergleich mit Doppelpotential	8
4. Komplexeres Beispiel: Streuung an Potentialtopf mit periodischem Potential im Inneren	9
4.1. Analyse des Transmissionsverhalten	9
5. Zusammenfassung	12
A. Anhang	12

1. Motivation

Der ballistische Transport von Elektronen kann angenommen werden, falls die mittlere freie Weglänge dieser deutlich größer ist, als die betrachtete Größenordnung. Dies ist Fall, falls der elektrische Widerstand sehr gering wird, oder falls sehr kleine Strukturen betrachtet werden. Hier wird insbesondere der zweite Fall betrachtet.

Das Wissen über das Verhalten der Elektronen in Nanostrukturen ermöglicht zum einen technische Verfahren wie die Ballistische Elektronenemissionsmikroskopie, einer Abwandlung der Rastertunnelmikroskopie, zum anderen auch den gezielten Entwurf von Nanostrukturen mit gewünschten Eigenschaften.

2. Einführendes Beispiel - Streuung an Doppelbarriere

Die Streuung an einer Doppelbarriere stellt ein gutes einführendes Beispiel dar. Es lässt sich direkt auf das Trivialbeispiel, den rechteckigen Potentialwall, zurückführen. Zudem ist dieses Potential oft schon aus der Einführungsvorlesung zur Quantenmechanik bekannt.

Die Doppelbarriere besteht aus zwei rechteckigen Barrieren, zu sehen in Abbildung 1. Sie

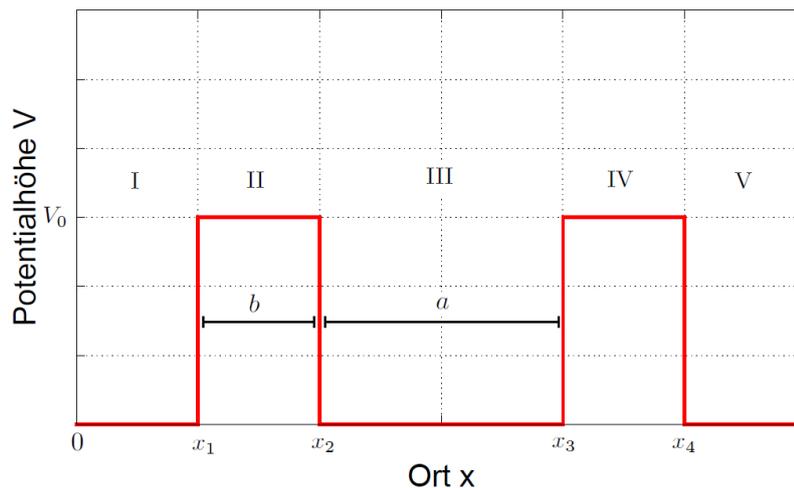


Abbildung 1: Doppelbarriere der Höhe V_0 in Abhängigkeit der Parameter a , b [Drü11]

lässt sich in 5 Bereiche, in der Abbildung durch römische Zahlen gekennzeichnet, aufteilen. Die Bereiche I und V sind die Grenzbereiche. Das Potential ist hier 0. Die Bereiche II und IV sind die beiden Rechteckpotentiale der Doppelbarriere. Diese verfügen jeweils über die Breite b und Höhe V_0 . Zwischen den beiden Rechteckpotentialen im Bereich III ist ein potentialfreier Raum der Breite a .

2.1. Mathematische Vorüberlegung

Das Transmissionsverhalten lässt sich mit der zeitunabhängigen eindimensionalen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

bestimmen. Gesucht ist insbesondere die Amplitude der Wellenfunktion $\psi(x)$. Zur Lösung der Gleichung betrachtet man diese zunächst bereichsweise. Das Potential wird in die 5 anfangs beschriebenen Bereiche unterteilt. Es ergeben sich die 5 Gleichungen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_n\right) \psi(x) = E_n\psi(x), \quad n = 1, 2, \dots, 5 \quad (2)$$

Da V_n jeweils konstant ist, sind die Differentialgleichungen trivial lösbar durch

$$\psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x}, \quad k_n = \frac{\sqrt{2m(E - V_n)}}{\hbar} \quad (3)$$

Die Potentiale sind endlich, daher muss die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung an allen Stellen, insbesondere auch an den Übergängen, stetig sein.

$$\psi_1(x_1) = \psi_2(x_1), \quad \psi_2(x_2) = \psi_3(x_2), \quad \dots \quad (4)$$

$$\psi'_1(x_1) = \psi'_2(x_1), \quad \psi'_2(x_2) = \psi'_3(x_2), \quad \dots \quad (5)$$

Mit der zuvor bestimmten Lösung (3) der Differentialgleichung ergeben sich daraus die folgenden Beziehungen:

$$\psi : \quad A_n e^{ik_n x_n} + B_n e^{-ik_n x_n} = A_{n+1} e^{ik_{n+1} x_n} + B_{n+1} e^{-ik_{n+1} x_n} \quad (6)$$

$$\psi' : \quad ik_n (A_n e^{ik_n x_n} - B_n e^{-ik_n x_n}) = ik_{n+1} (A_{n+1} e^{ik_{n+1} x_n} - B_{n+1} e^{-ik_{n+1} x_n}) \quad (7)$$

Es bietet sich an, die Lösung dieses Gleichungssystems als Matrix darzustellen.

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathbf{R}_n \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_3 \mathbf{R}_4 \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$\text{mit } \mathbf{R}_n = \frac{1}{2k_n} \begin{pmatrix} (k_n + k_{n+1})e^{i(-k_n + k_{n+1})x_n} & (k_n - k_{n+1})e^{i(-k_n - k_{n+1})x_n} \\ (k_n - k_{n+1})e^{i(k_n + k_{n+1})x_n} & (k_n + k_{n+1})e^{i(k_n - k_{n+1})x_n} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Der Transmissionskoeffizient T lässt sich aus \mathbf{R}_n direkt bestimmen.

$$T = \frac{k_5}{k_1} \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 \quad (10)$$

$$\text{aus (8):} \quad A_1 = (1 \ 0) \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_3 \mathbf{R}_4 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} A_5 \quad (11)$$

$$\Rightarrow T = \frac{k_5}{k_1} \left| (1 \ 0) \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_3 \mathbf{R}_4 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^{-2} \quad (12)$$

Die bisherigen Rechenschritte sind für alle fünfstufige endliche Potentiale gültig. Für das Doppelpotential aus Abbildung 1 gelten die folgenden Parameter:

$$\begin{aligned}
 x_2 - x_1 &= x_4 - x_3 = b \\
 x_3 - x_2 &= a, \\
 V_1 &= V_3 = V_5 = 0, \\
 V_2 &= V_4 = V_0 \\
 k_1 &= k_3 = k_5 = k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\
 k_2 &= k_4 = i\kappa = i \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}
 \end{aligned}$$

Setzt man diese in (12) ein, ergibt sich die folgende Transmission:

$$T = \left(1 + V_0^2 \sinh^2(\kappa b) \frac{H^2}{4E^2(V_0 - E)^2} \right)^{-1} \quad (13)$$

$$\text{mit } H = 2\sqrt{E(V_0 - E)} \cosh(\kappa b) \cos(ka) - (2E - V_0) \sinh(\kappa b) \sin(ka) \quad .$$

An (13) lässt sich erkennen, dass abgesehen von den trivialen Lösungen $V_0 = 0$ oder $b = 0$, also verschwindende Barriere, maximale Transmission erreicht wird für

$$\sinh(\kappa b) = 0 \quad \text{oder} \quad H = 0 \quad .$$

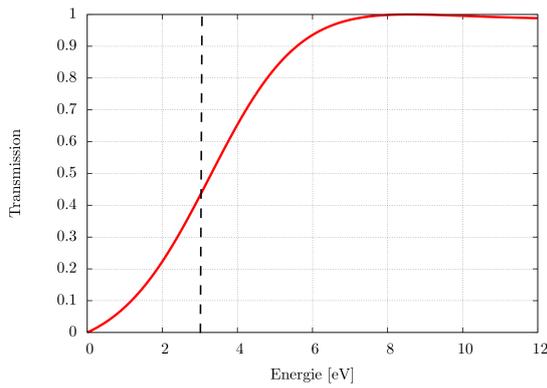
Man spricht in beiden Fällen von Resonanz. Die erste Bedingung kann nur erfüllt werden für $E > V_0$, da κ imaginär werden muss. Das genaue Verhalten und die Lage der Maxima wird im nächsten Abschnitt genauer untersucht.

2.2. Untersuchung des Transmissionsverhalten

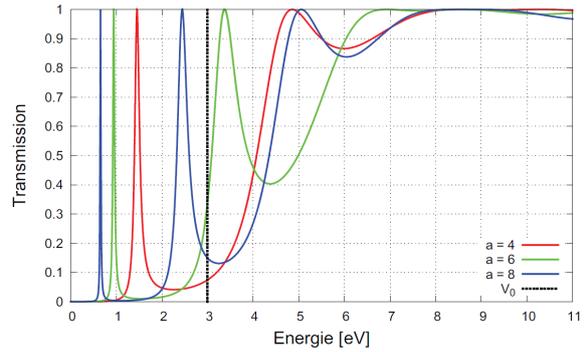
Die im folgenden verwendeten Abbildungen stammen aus der Bachelor-Arbeit von Matthias Drüppel [Drü11]. Sie wurden mit der zuvor ermittelten Transmissionsformel erstellt.

In Abbildung 2 ist die Transmission an verschiedenen Doppelpotentialen und einem Rechteckpotential mit gleicher Potentialbreite b zu sehen. In den beiden Graphen ist das zuvor errechnete Verhalten zu erkennen. Beim Rechteckpotential kommt es gerade zum Maximum, wenn $\sinh(\kappa b) = 0$ erfüllt ist. Da dies auch eine Bedingung für ein Maximum beim Doppelpotential ist, kommt es auch beim Doppelpotential für diese Energie zum Transmissionsmaximum. Entsprechend liegen die anderen Maxima an Stellen mit $H(E) = 0$ und es kommt zur Resonanz zwischen den beiden Rechteckpotentialen. Es ist deutlich erkennbar, dass für größere Abstände mehr und schärfere Maxima auftreten. Dies findet sich in Formel (13) wieder. H ist von $\cos(ka)$ und $\sin(ka)$ abhängig. Mit steigendem Abstand a verringert sich die Periodenbreite dieser.

In Abbildung 3 ist die Transmission am Doppelpotential mit verschiedenen Potentialbreiten b aufgetragen. Für $E < V_0$ sind die Positionen der Maxima nahezu identisch. Dies ist dadurch erklärbar, dass in den beiden Rechteckpotentialen für $E < V_0$ die Wellenfunktion exponentiell



(a) Rechteckpotential, Maximum bei 8,6 eV



(b) Doppelpotential mit verschiedenen Abständen a [Å]

Abbildung 2: Transmission an (a) einzelmem Rechteckpotential und (b) Doppelpotential im Vergleich, Parameter: $b = 4 \text{ \AA}$, $V_0 = 3 \text{ eV}$, [Drü11, S. 13]

abfällt. Totale Transmission ist in diesem Energiebereich für ein einzelnes Rechteckpotential unmöglich. Die Resonanz hängt daher hauptsächlich vom Bereich zwischen den Potentialen ab, der in diesem Fall konstant gehalten wird. Durch diesen exponentiellen Abfall wird zudem die Transmission, falls keine Resonanz auftritt, mit zunehmender Breite b stark reduziert. Im Bereich $E > V_0$ hat $\sinh(\kappa b)$ Nullstellen. Jedoch ist dies für keine Transmissionsmaxima im betrachteten Bereich verantwortlich. Für $b = 4 \text{ \AA}$ liegt die erste Nullstelle bei $E = 8,3 \text{ eV}$, wie zuvor gesehen wurde, und für geringere Breiten b erhöht sich diese Energie. Die Position der Maxima hängt daher auch in diesem Bereich stärker vom Potentialabstand a ab.

Zusammenfassend ist Anzahl und Position der Maxima am stärksten vom Potentialabstand a beeinflusst, während Breite der Maxima und Stärke der Absorption abseits der Maxima am stärksten von der Potentialbreite b abhängt.

3. Allgemeine Methodik - Streuung an beliebigen 1D-Potentialen

Die zuvor beschriebene Methode lässt sich auf beliebige endliche Stufenpotentiale anwenden. Die einzige notwendige Änderung besteht darin, andere Parameter für x_n, V_n und k_n einzusetzen. Nicht anwendbar ist sie jedoch auf kontinuierliche Potentiale. Eine Methode, um auch kontinuierliche Potentiale zu lösen, ist das **Wave Function Matching**. Auf diese Methode gehe ich in diesem Abschnitt ein.

3.1. Herleitung

Wave Function Matching ist eine numerische Methode zur Bestimmung von Transmissionskoeffizienten. Dazu wird das Potential entsprechend Abbildung 4 in N gleich breite Abschnitte diskretisiert. Die Ableitung in der Schrödinger-Gleichung wird durch den Differenzenquotienten genähert. Zudem wird die Abkürzung $\Delta = x_{n+1} - x_n$ eingeführt. Δ ist konstant bezüglich

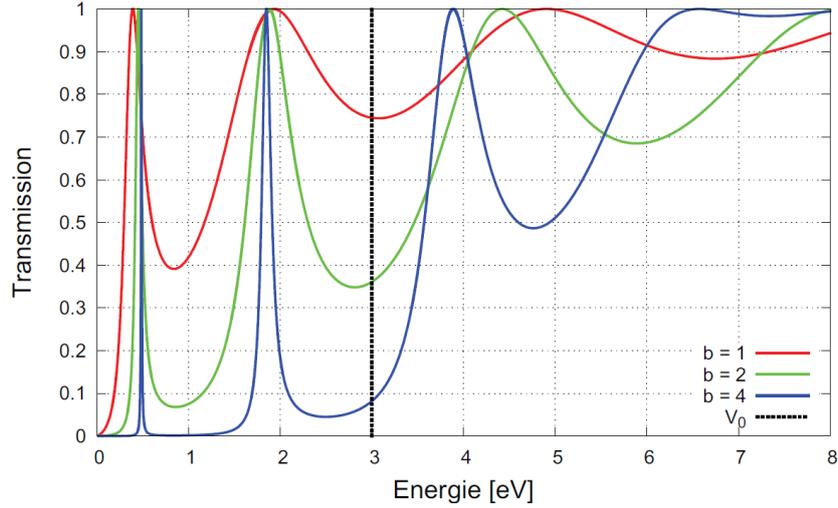


Abbildung 3: Transmission in Abhängigkeit der Potentialbreite b [Å] bei der Doppelbarriere, Parameter: $V_0 = 3 \text{ eV}$, $a = 10 \text{ Å}$ [Drü11, S. 16]

n und hängt nur von der gewählten Anzahl der Unterteilungen des Potentials ab. Damit lässt sich die Schrödingergleichung nähern und umschreiben zu

$$E\psi_n + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(\psi_{n+1} - \psi_n) - (\psi_n - \psi_{n-1})}{\Delta^2} \right) - V_n\psi_n = 0 \quad (14)$$

$$\text{mit } n = 0, 1, \dots, N + 1 \quad (15)$$

Es bietet sich an, diese Gleichungen in eine Matrixgleichung umzuschreiben. Jedoch müssen dafür zunächst die Ränder betrachtet werden ψ_{-1} und ψ_{N+2} , welche außerhalb des betrachteten Bereichs liegen. An beiden Rändern wird angenommen, dass sich das dortige Potential konstant bis ins Unendliche fortsetzt. Am linken Rand erhält man

$$E\psi_0 + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} (\psi_1 - 2\psi_0 + \psi_{-1}) - V_0\psi_0 = 0 \quad (16)$$

Es gilt ψ_{-1} anders auszudrücken. Es wird im Randbereich ein konstantes Potential angenommen. Damit lässt sich ψ_{-1} umschreiben und einsetzen in (16).

$$\psi_{-1} = Ae^{-ik_L\Delta} + Be^{ik_L\Delta} = Ae^{-ik_L\Delta} + (\psi_0 - A)e^{ik_L\Delta} \quad (17)$$

$$E\psi_0 + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} (\psi_1 - 2\psi_0 + e^{ik_L\Delta}\psi_0) - V_0\psi_0 \quad (18)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} A (e^{ik_L\Delta} - e^{-ik_L\Delta}) \quad (19)$$

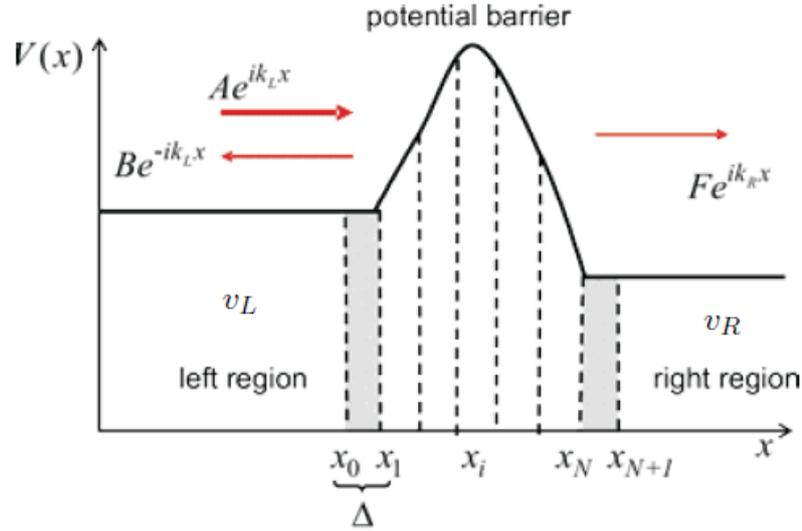


Abbildung 4: Diskretisierung des Potentials [Drü11, S. 6]

Am rechten Rand schreibt man ψ_{N+2} analog um und setzt ein.

$$E\psi_{N+1} + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} (\psi_{N+2} - 2\psi_{N+1} + \psi_N) - V_{N+1}\psi_{N+1} = 0 \quad (20)$$

$$\psi_{N+2} = Fe^{ik_R(N+2)\Delta} = \psi_{N+1}e^{ik_R\Delta} \quad (21)$$

$$E\psi_{N+1} + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} (\psi_{N+1}e^{ik_R\Delta} - 2\psi_{N+1} + \psi_N) - V_{N+1}\psi_{N+1} = 0 \quad (22)$$

Nach Betrachtung der Randbereiche lassen sich die Gleichungen in Matrixdarstellung bringen.

$$(E\mathbf{1} - \mathbf{H})\vec{\Psi} = \vec{q} \quad (23)$$

mit:

$$\vec{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N+1} \end{pmatrix}$$

$$H_{n,n'} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{m\Delta^2} + V_n - \frac{\hbar}{2m\Delta^2}e^{ik_L\Delta} & \text{für } n = n' = 0 \\ \frac{\hbar^2}{m\Delta^2} + V_n & \text{für } 1 \leq n = n' \leq N \\ \frac{\hbar^2}{m\Delta^2} + V_n - \frac{\hbar}{2m\Delta^2}e^{ik_R\Delta} & \text{für } n = n' = N + 1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} & \text{für } n = n' \pm 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} q_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad q_0 = \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}A(e^{ik_L\Delta} - e^{-ik_L\Delta}) \quad (24)$$

Das Gleichungssystem lässt sich zum Beispiel durch numerische Matrixinversion lösen. Der Transmissionskoeffizient T ist gegeben durch

$$T = \left| \frac{v_R}{v_L} \right| \left| \frac{\psi_{N+1}}{A} \right|^2 \quad (25)$$

mit

$$\left| \frac{v_R}{v_L} \right| = \left| \frac{J_R}{J_L} \right|$$

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_n \frac{\psi_{n+1}^* - \psi_n^*}{\Delta} - \psi_n^* \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta} \right)$$

$$\Rightarrow J_{L/R} = \frac{i\hbar|A|^2}{2m\Delta} (e^{-ik_{L/R}\Delta} - e^{ik_{L/R}\Delta}) \quad .$$

3.2. Probe: Vergleich mit Doppelpotential

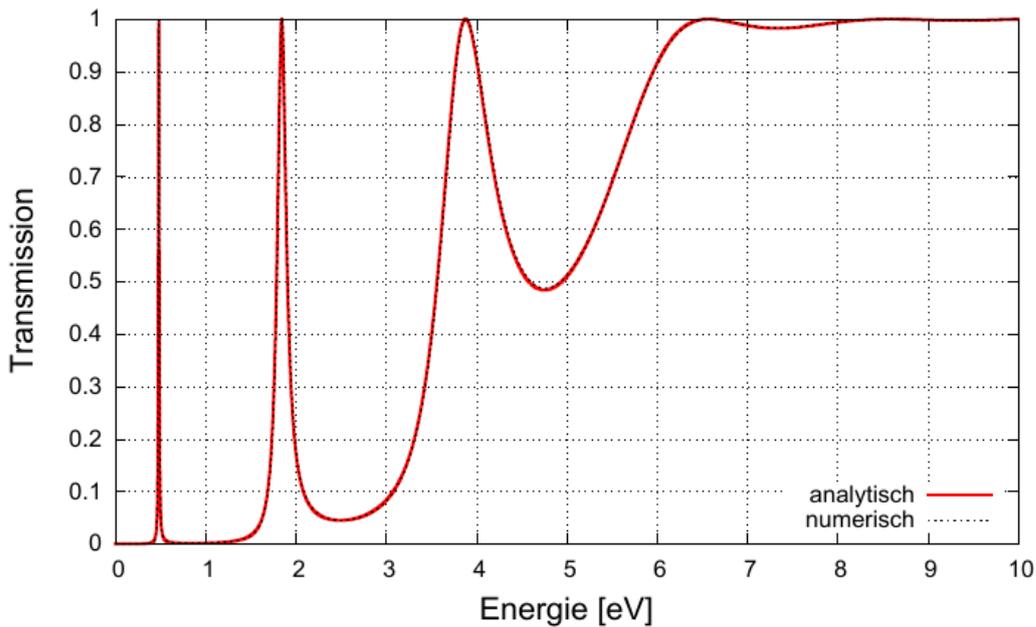


Abbildung 5: Numerische Lösung mit $N = 1000$ Stützstellen, Parameter: $V_0 = 3 \text{ eV}$, $b = 4 \text{ \AA}$, $a = 10 \text{ \AA}$ [Drü11]

Um grobe Fehler auszuschließen, wird die eben hergeleitete Methode auf ein bereits berechnetes Potential angewendet. Dazu wird das zuvor betrachtete Doppelpotential gewählt. In Abbildung 5 wird die analytische Lösung mit der durch Wave Function Matching bestimmten numerischen Lösung verglichen. Es ist praktisch kein Unterschied zu erkennen. Jedoch sollte man beachten, dass das Doppelpotential bereits diskret ist. Es kann daher nicht direkt angenommen werden, dass bei einem anderen Potential ebenfalls das exakte Ergebnis erhalten wird.

4. Komplexeres Beispiel: Streuung an Potentialtopf mit periodischem Potential im Inneren

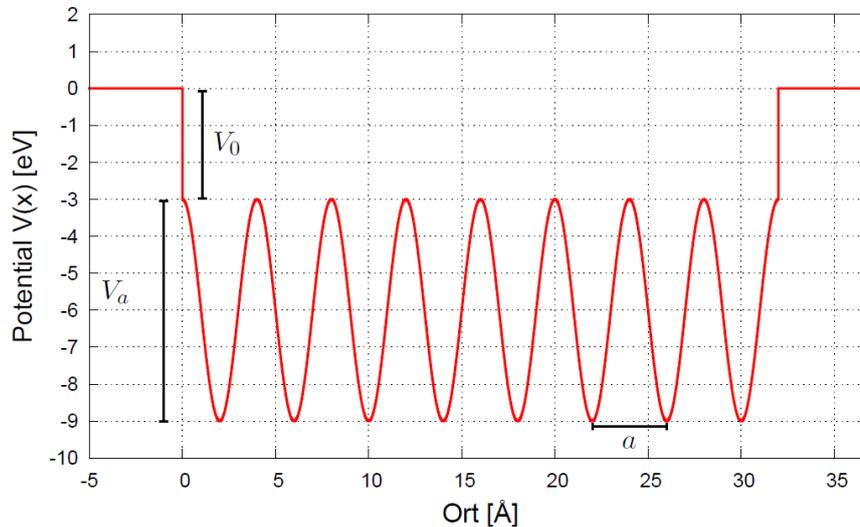


Abbildung 6: Potentialtopf mit Mathieu-Potential im Inneren [Drü11, S. 45]

In diesem Abschnitt geht es darum, ein Potential mit komplexerer Struktur zu untersuchen. Verwendet wird das Potential aus Abbildung 6. Dabei handelt es sich um ein periodisches Potential in einem Potentialtopf. N_a sinusförmige Perioden der Breite sind um V_0 abgesenkt. Formal ausgedrückt wird das Potential durch

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 + \frac{V_a}{2} \left(\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - 1 \right) & \text{falls } 0 < x < N_a \cdot a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (26)$$

Wendet man die zuvor hergeleitete numerische Methode auf dieses Gitter an, erhält man das Transmissionsverhalten aus Abbildung 7. Es ist zu erkennen, dass für $E > 1$ eV nahezu totale Transmission vorliegt. Im Energiebereich zwischen 6 eV und 7 eV befindet sich jedoch ein Transmissionsminimum. Die Intensität und Schärfe des Minimums nimmt mit zunehmender Periodenzahl zu. Zudem sind Nebenminima erkennbar, deren Anzahl mit der Zahl der Perioden zunimmt. Um den Einfluss des periodischen Potentials genauer zu untersuchen, bietet es sich an, den Grenzfall für ein unendliches periodisches Potential zu betrachten.

4.1. Analyse des Transmissionsverhalten

Zur Analyse des Transmissionsverhalten wird mit $N_a \rightarrow \infty$ und $V_0 = 0$ gerechnet. Damit resultiert aus (26) das Potential

$$V(x) = -\frac{V_a}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \right) \quad (27)$$

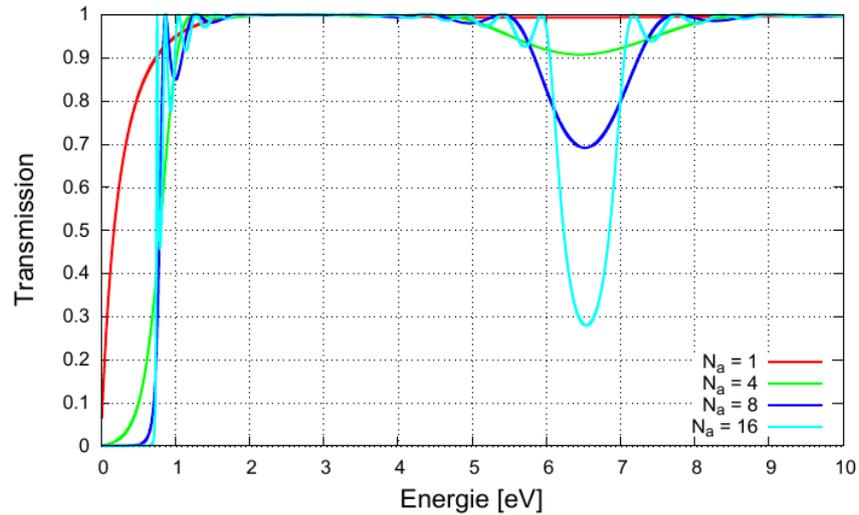


Abbildung 7: Transmission an Potential in Abhängigkeit der Periodenzahl N_a . Parameter: $V_0 = 0, V_a = 6 \text{ eV}, a = 4 \text{ \AA}$ [Drü11, S. 45]

Bei periodischen Potentialen lässt sich das *Bloch Theorem* anwenden. Dieses besagt, dass bei periodischen Potentialen die Wellenfunktion $\psi(x)$ dargestellt werden kann durch

$$\psi(x) = e^{ikx} u(x) \quad , \quad (28)$$

wobei $u(x)$ die gleiche Periodizität aufweist wie $V(x)$. Daher lässt sich $u(x)$ als Fourier-Entwicklung darstellen und damit folgt für die Wellenfunktion

$$\psi(x) = e^{ikx} \sum_j c_j e^{iG_j x} = \sum_j c_j e^{i(k+G_j)x} \quad , \quad \text{mit } G_j = \frac{2\pi}{a} j \quad . \quad (29)$$

Eingesetzt in die Schrödingergleichung (1):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - E \right) \sum_j c_j e^{i(k+G_j)x} = 0 \quad (30)$$

$$\sum_j \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k + G_j)^2 + V(x) - E \right) e^{ikx} e^{iG_j x} c_j = 0 \quad . \quad (31)$$

Auf beiden Seiten wird mit $\frac{1}{a} \int_0^a dx e^{-ikx} e^{-iG_{j'}x}$ multipliziert. Daraus folgt mit

$$\frac{1}{a} \int_0^a e^{i(G_j - G_{j'})x} = \delta_{j,j'} \quad (32)$$

$$\Rightarrow \sum_j \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k + G_j)^2 \delta_{j,j'} - E \delta_{j,j'} + \underbrace{\frac{1}{a} \int_0^a dx V(x) e^{i(G_j - G_{j'})x}}_{\text{Fouriertransformierte } \tilde{V}(G_j - G_{j'})} \right) c_j = 0 \quad (33)$$

$$\sum_j \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k + G_j)^2 \delta_{j,j'} + \tilde{V}(G_j - G_{j'}) \right) c_j = E_{j'} c_{j'} \quad (34)$$

$$\text{mit } \tilde{V}(G_j - G_{j'}) = -\frac{V_a}{2} \delta_{j,j'} + \frac{V_a}{4} (\delta_{j-1,j'} + \delta_{j+1,j'}) \quad (35)$$

Dies entspricht einem Eigenwertproblem

$$\mathbf{H}\vec{c} = E\vec{c} \quad (36)$$

$$\text{mit } H_{n,n'} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} (k + G_n)^2 - \frac{V_a}{2} & \text{für } n = n' \\ \frac{V_a}{4} & \text{für } n = n' \pm 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (37)$$

Aus der Lösung dieser Eigenwertgleichung lässt sich die Bandstruktur bestimmen. Diese ist in der ersten Brillouin-Zone in Abbildung 8 graphisch dargestellt.

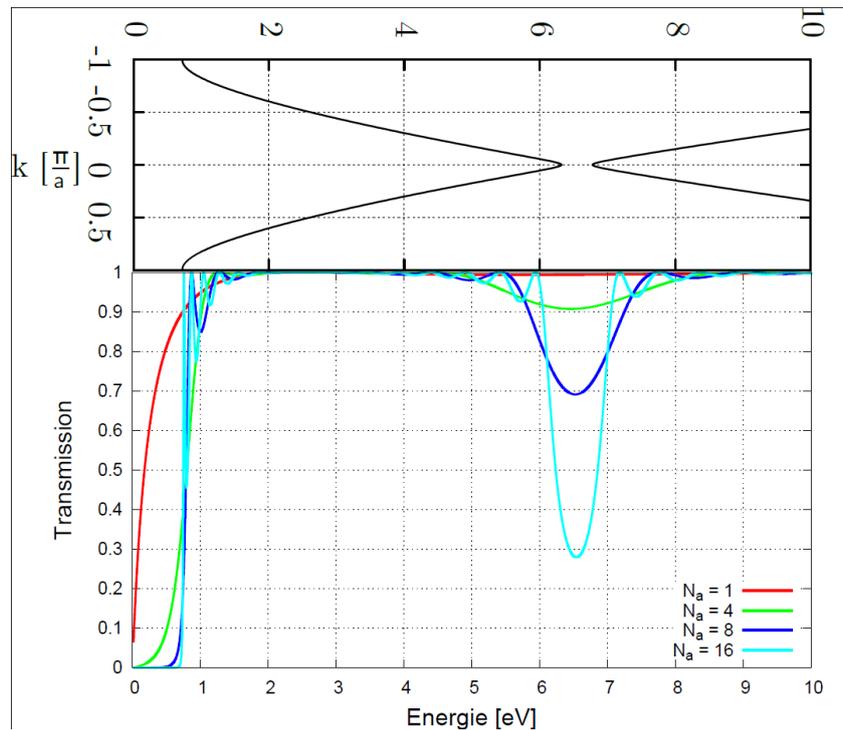


Abbildung 8: Bandstruktur und zuvor bestimmte Transmission im Vergleich (siehe Abbildung 7), Parameter: $V_0 = 0, V_a = 6 \text{ eV}, a = 4 \text{ \AA}$ [Drü11, S. 40]

In Abbildung 8 ist zu erkennen, dass an genau der Stelle, an der zuvor das Hauptminimum beobachtet wurde, eine Bandlücke des unendlichen Potentials liegt. Zudem liegt im Bereich bis etwa $E = 0,7\text{eV}$ eine weitere Bandlücke. Es ist gut zu erkennen, dass auch hier die Transmission minimal wird. Es wird deutlich, dass auch für relativ geringe Periodenzahlen die Transmission sich dem unendlichen Grenzfall schon merklich annähert. Die Bereiche der Minima liegen im Grenzfall für große N_a in der verbotenen Zone der Bandstruktur. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons mit solcher Energie im Potential ist 0. Daher folgt auch aus der Bandstruktur, dass an den gleichen Stellen ein Transmissionsminimum auftreten muss, für große N_a wird Transmission bei diesen Energien sogar unmöglich. In technischen Anwendungen wäre dieses Transmissionsverhalten beispielsweise für Konstruktion einer Bandsperre nützlich.

5. Zusammenfassung

Mit dem Wave-Funtion-Matching wurde eine nützliche Methode zur Lösung der Schrödinger-Gleichung für beliebige eindimensionale Potentiale erarbeitet. Diese wurde daraufhin auf ein analytisch vollständig lösbares Potential, das Doppelpotential, angewendet. Daraufhin wurde sie auf ein komplexeres Potetial angewendet, welches analytisch nicht lösbar gewesen wäre. Die Anwendung auf das Doppelpotential diente in erster Linie der Kontrolle. Jedoch konnte auch gezeigt werden, dass eine hinreichend feine Näherung praktisch ununterscheidbar von der exakten Lösung wird.

Bei der Anwendung auf das Doppelpotential konnten Informationen gewonnen werden, die man analytisch nicht erhalten hätte. Mit Hilfe des Bloch Theorem ließ sich hier zum Vergleich die Bandstruktur des unendlichen Potentials bestimmen. Damit war es möglich, den numerisch errechneten Transmissionsverlauf physikalisch zu interpretieren.

A. Anhang

Literatur

[Drü11] Matthias Drüppel. *Elektronen in Nanostrukturen: Berechnung der Transmission und Reflexion, Bachelorarbeit*. Münster, Dez. 2011.