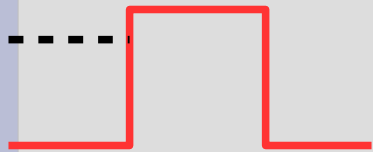


Лекция 4. Потенциальные барьеры и потенциальные ямы

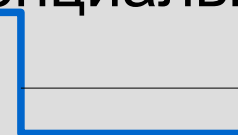
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + U(x) \Psi = E \Psi$$



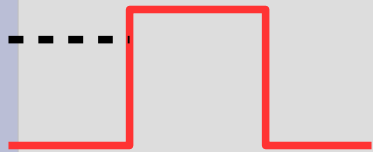
барьер



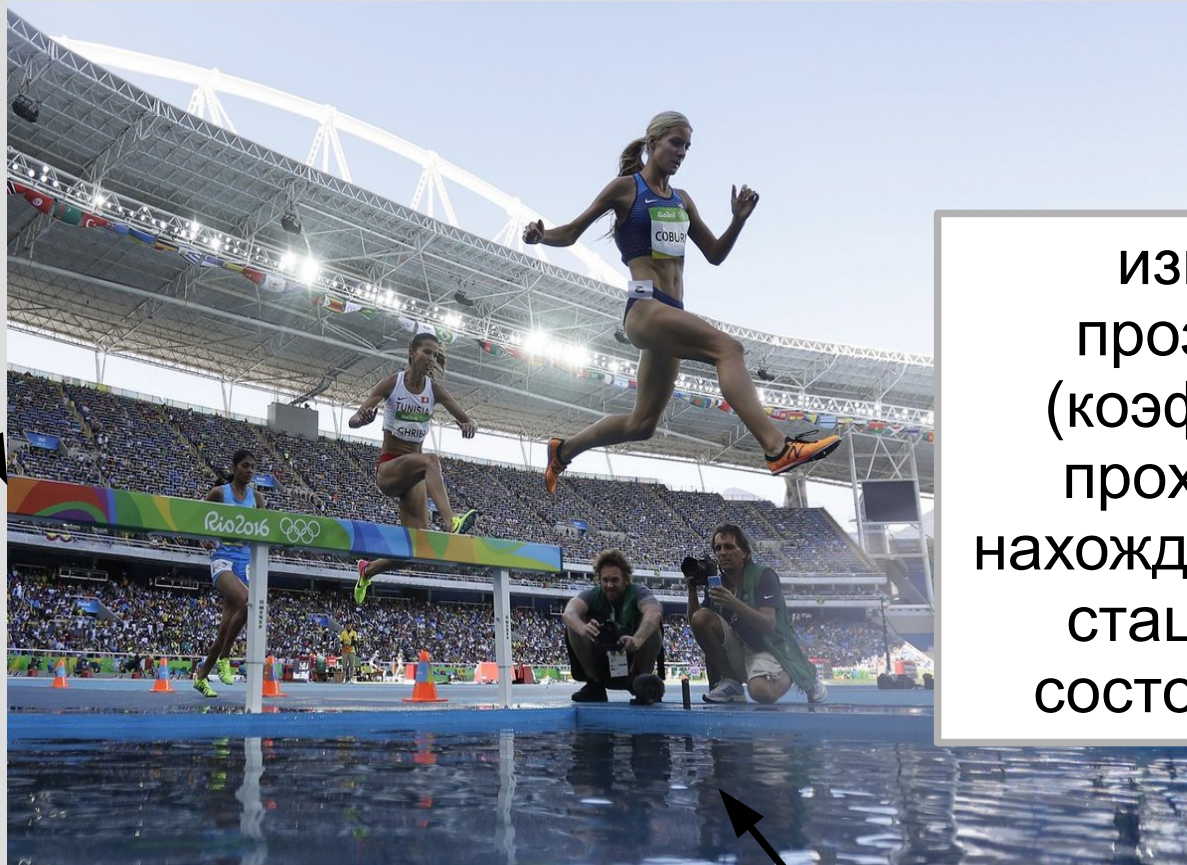
потенциальная яма



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + U(x) \Psi = E \Psi$$



барьер



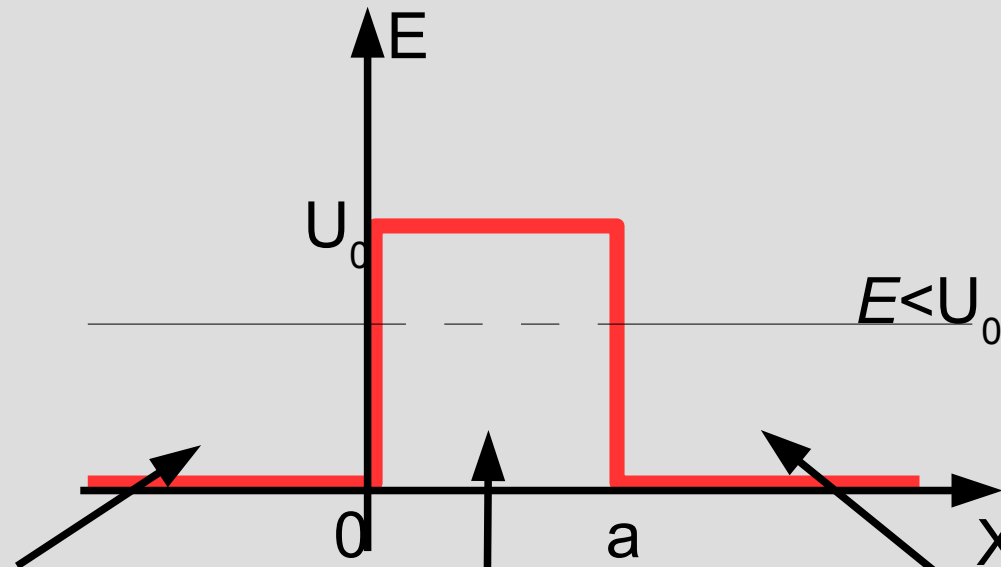
измерение прозрачности (коэффициента прохождения), нахождение энергии стационарных состояний в яме

потенциальная яма



Часть 1. Туннельный эффект

Задача 1: подбарьерное туннелирование



$$\Psi_1 = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

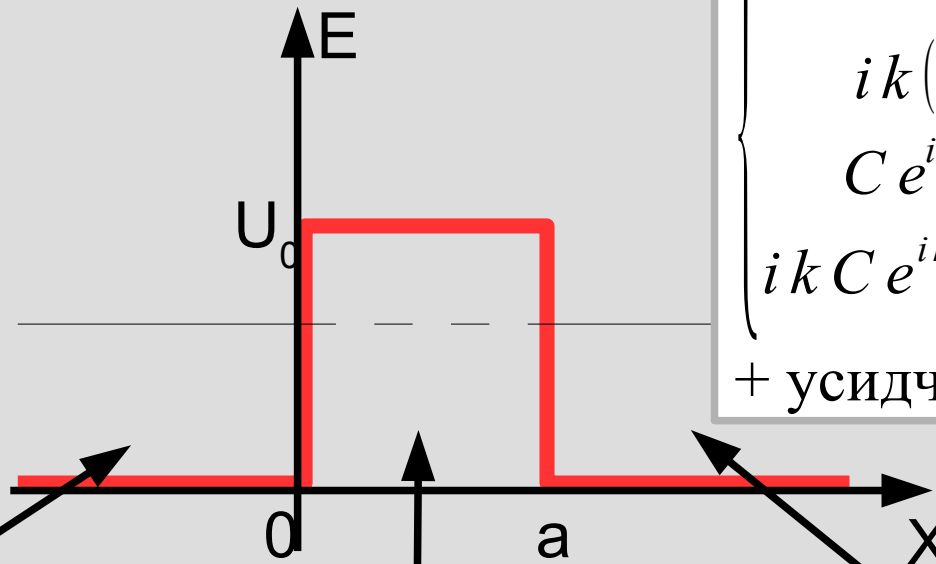
$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_3 = Ce^{ikx}$$

$$\Psi_2 = B_1 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Задача 1: подбарьерное туннелирование



$$\begin{cases} 1 + A = B_1 + B_2 \\ ik(1 - A) = \kappa(B_1 - B_2) \\ C e^{ika} = B_1 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a} \\ ikC e^{ika} = \kappa[B_1 e^{\kappa a} - B_2 e^{-\kappa a}] \end{cases}$$

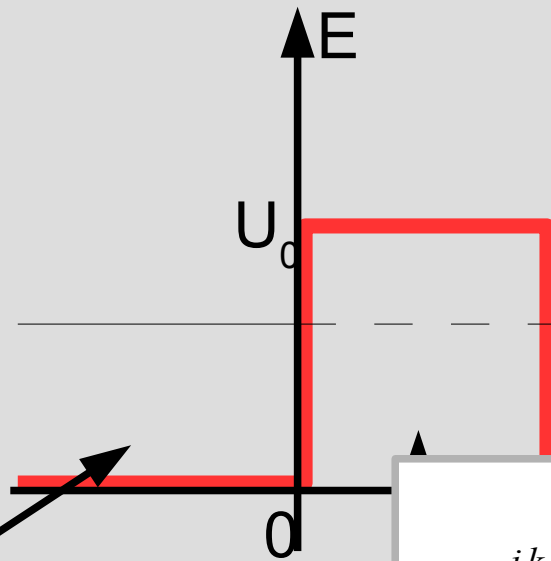
+ усидчивость...

$$\Psi_1 = e^{ikx} + A e^{-ikx}$$
$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_2 = B_1 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}$$
$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_3 = C e^{ikx}$$

Задача 1: подбарьерное туннелирование



$$\begin{cases} 1 + A = B_1 + B_2 \\ ik(1 - A) = \kappa(B_1 - B_2) \\ C e^{ika} = B_1 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a} \\ ik C e^{ika} = \kappa [B_1 e^{\kappa a} - B_2 e^{-\kappa a}] \end{cases}$$

+ усидчивость...

$$\Psi_1 = e^{ikx} + A e^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_2 = C e^{ikx}$$

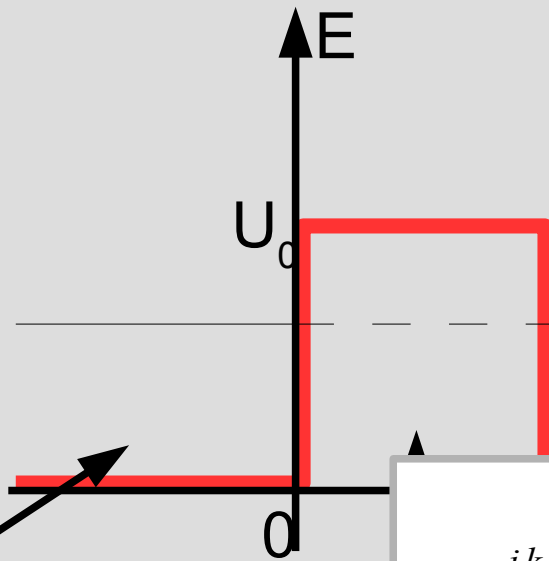
$$\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

$$C e^{ika} = \frac{4i \frac{k}{\kappa}}{-2 \left(1 - \frac{k^2}{\kappa^2}\right) sh(\kappa a) + 4i \frac{k}{\kappa} ch(\kappa a)}$$

коэффициент прохождения

$$D = \frac{j_{прош}}{j_{над}} = |C|^2 = \frac{4k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 sh^2(\kappa a)}$$

Задача 1: подбарьерное туннелирование



$$\begin{cases} 1 + A = B_1 + B_2 \\ ik(1 - A) = \kappa(B_1 - B_2) \\ C e^{ika} = B_1 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a} \\ ik C e^{ika} = \kappa [B_1 e^{\kappa a} - B_2 e^{-\kappa a}] \end{cases}$$

+ усидчивость...

$$\Psi_1 = e^{ikx} + A e^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_2 = D e^{ikx}$$

$$\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

$$C e^{ika} = \frac{4i \frac{k}{\kappa}}{(k^2 - \kappa^2) \cosh(\kappa a) + 4i \frac{k}{\kappa} \sinh(\kappa a)}$$

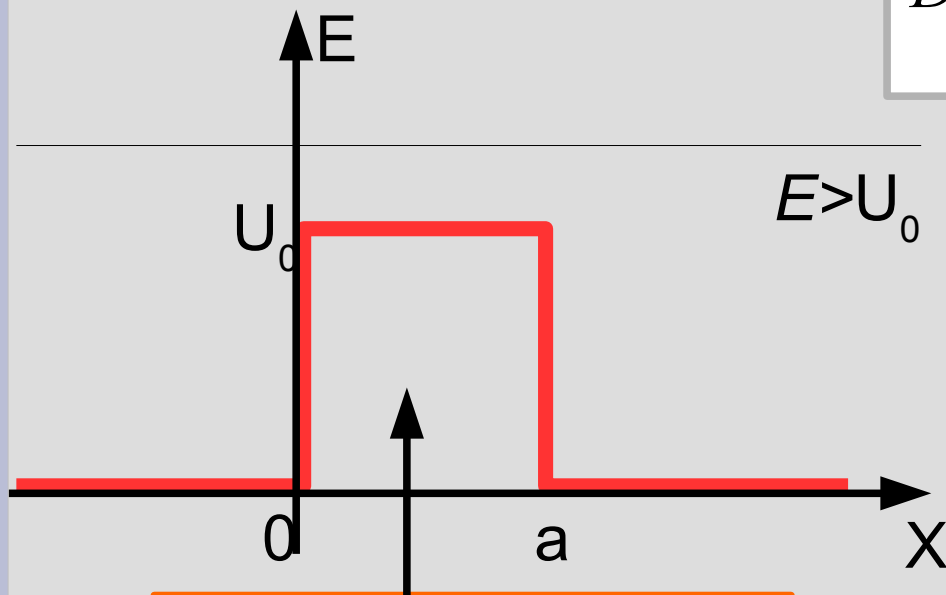
$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$$

коэффициент отражения

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{над}}} = |C|^2 = \frac{4k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \text{sh}^2(\kappa a)}$$

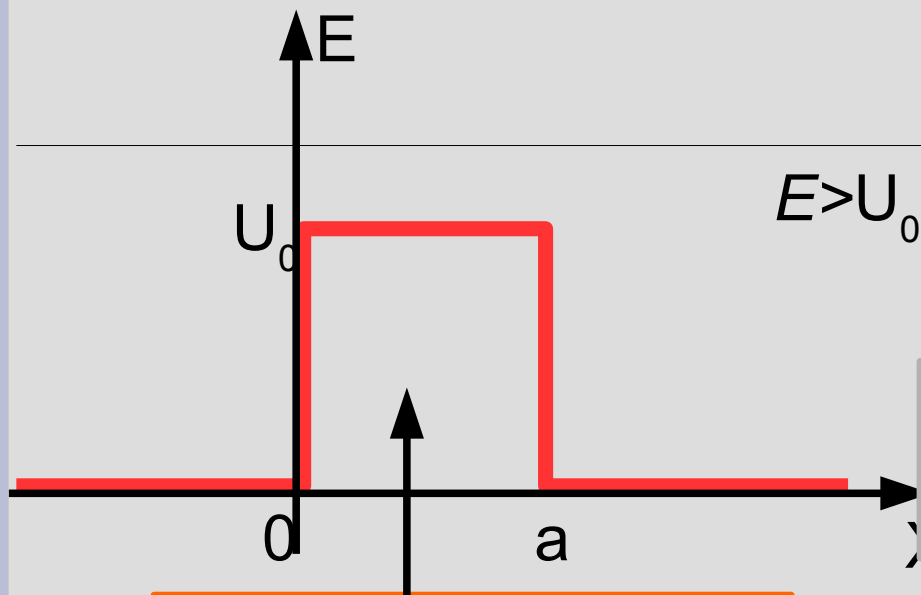
Бонус: надбарьерное отражение

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{над}}} = |C|^2 = \frac{4k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2(\kappa a)}$$



$$\Psi_2 = B_1 e^{i k' x} + B_2 e^{-i k' x}$$
$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = i \kappa$$

Бонус: надбарьерное отражение



$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{над}}} = \frac{4k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \text{sh}^2(\kappa a)}$$

$$\kappa = -ik'$$

$$\text{sh}(\kappa a) = -i \sin(k' a)$$

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{над}}} = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k' a)}$$

$$\Psi_2 = B_1 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}$$

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = i\kappa$$

просветление при
 $k' a = \pi n$

Предельные случаи

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{над}}} = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2(\kappa a)}$$

$$(\kappa a) \gg 1$$

широкий/высокий барьер

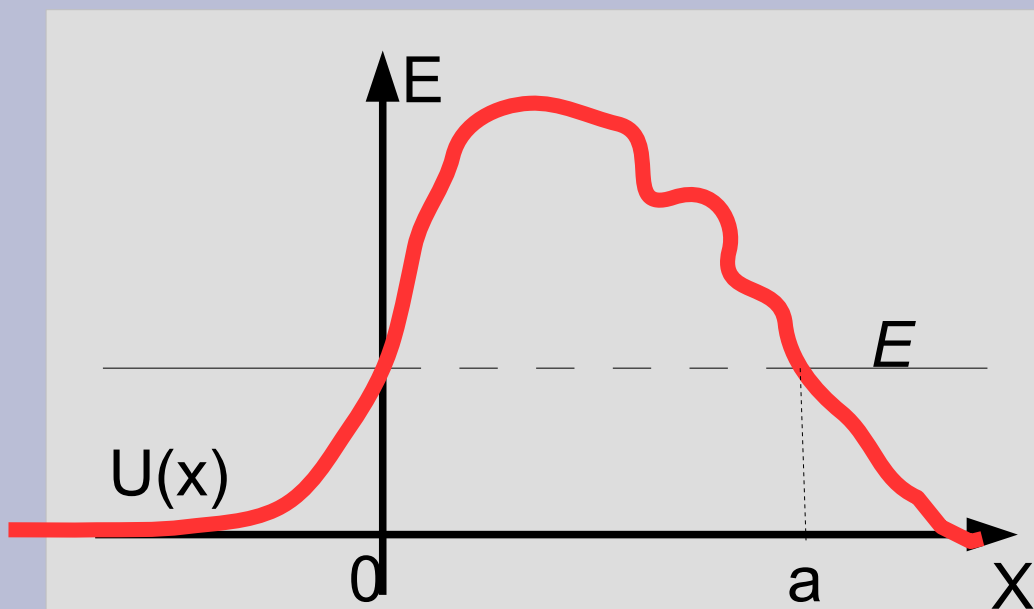
$$D \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a} \simeq e^{-2\kappa a}$$

$$(\kappa a) \ll 1$$

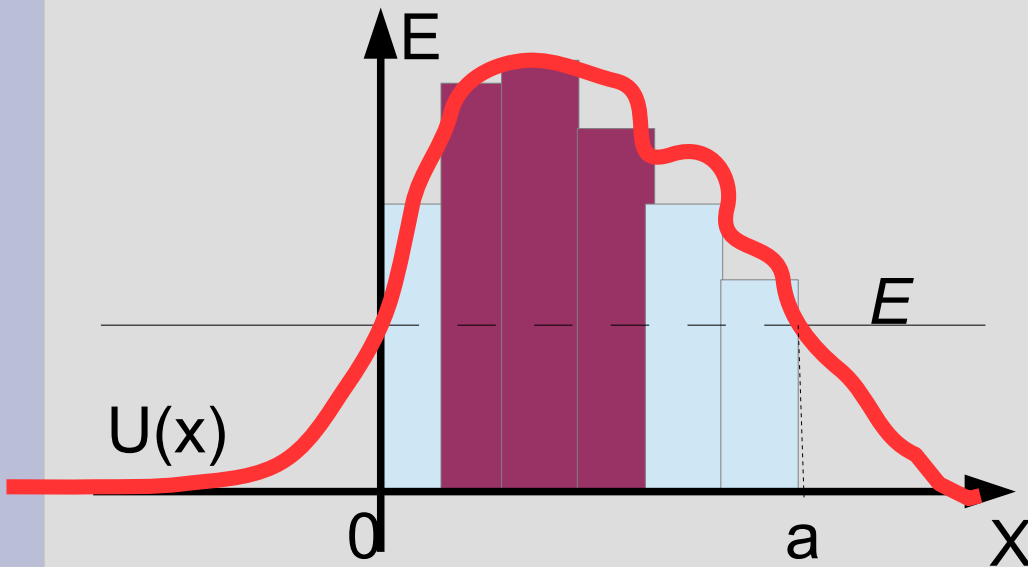
узкий/невысокий барьер

$$D \approx \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2k}\right)^2 a^2}$$

Приближенная формула для проницаемости барьера произвольной формы



Приближенная формула для барьера произвольной формы



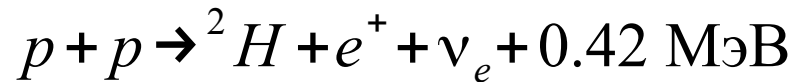
$$D \approx \prod_i D_i \approx \prod_i e^{-2\kappa_i a_i} =$$
$$= \exp\left(-\sum_i 2\kappa_i a_i\right) = \exp\left(-2 \int_0^a \sqrt{\frac{2m(U(x)-E)}{\hbar^2}} dx\right)$$

Примеры эффекта подбарьерного туннелирования

- 1) Реакции ядерного синтеза и альфа-распад
- 2) Туннельные контакты проводников и туннельный микроскоп
- 3) Оптическая аналогия

Пример 1

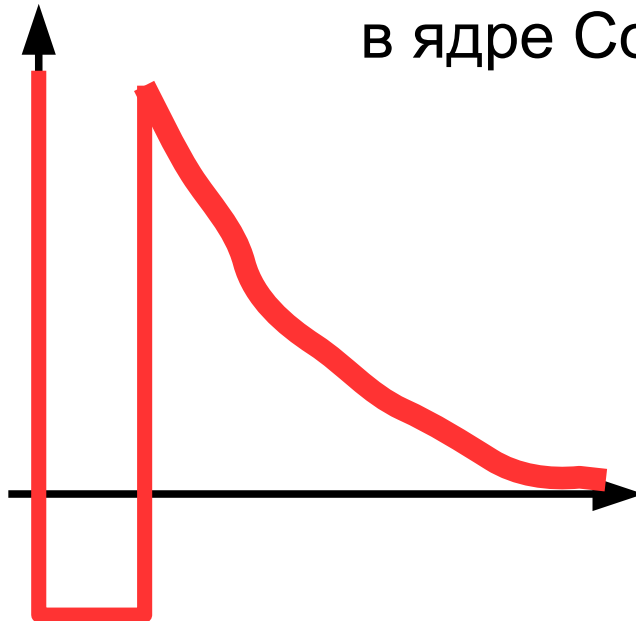
протон-протонный цикл в звёздах



размер ядра ~ 1 фм

$$E_{\text{кул}} = \frac{e^2}{r} = \frac{(4.8 \times 10^{-10})^2}{10^{-13}} \text{ эрг} = 23 \times 10^{-7} \text{ эрг} = 1.5 \text{ МэВ}$$

1 эВ ≈ 10000 К, 1 МэВ $\approx 10^{10}$ К = 10 млрд. К
в ядре Солнца 14 млн.К

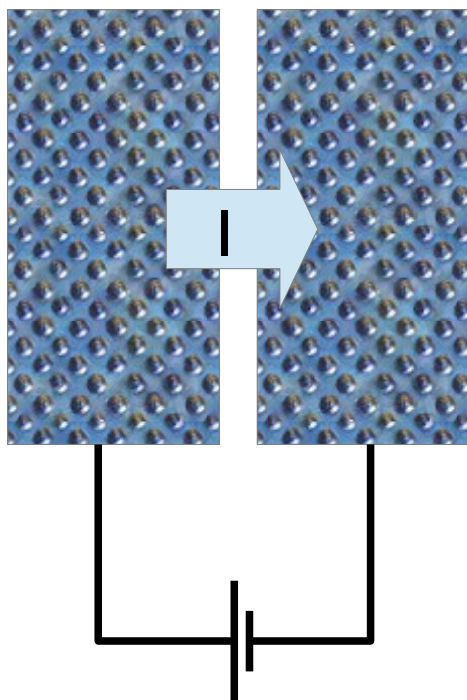


альфа-распад плутония:
энергия альфа-частицы 5.6 МэВ
высота барьера вблизи ядра
($Z_\alpha = 2, Z' = 92$) ~ 200 МэВ

- 1) Реа
- 2) Тун
- МИК
- 3) Оп

Пример 2

- 1) Реа
- 2) Тун
микро
- 3) Опти



Высота барьера определяется работой выхода (2..4 эВ)

Туннельный ток пропорционален прозрачности барьера D

Оценка:

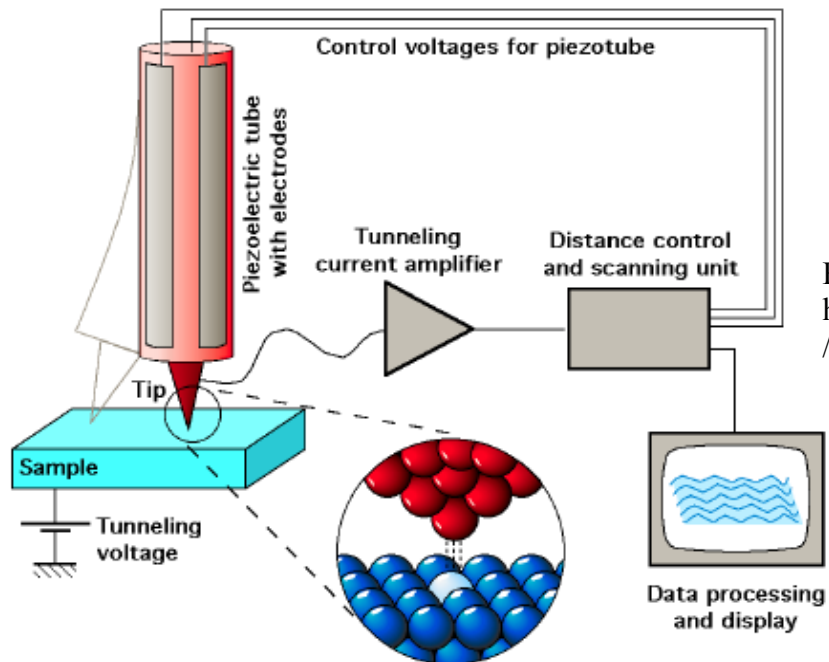
$$D \approx \exp(-2 \kappa d) \approx \exp\left(-2 \sqrt{\frac{2 m A_{\text{вых}}}{\hbar^2}} d\right)$$

$$L = \frac{\hbar}{2 \sqrt{2 m A_{\text{вых}}}} = \frac{10^{-27}}{2 \sqrt{2 \times 10^{-27} \times 3 \times 1.6 \times 10^{-12}}} \approx 10^{-8} \text{ см} = 1 \text{ \AA}$$

П

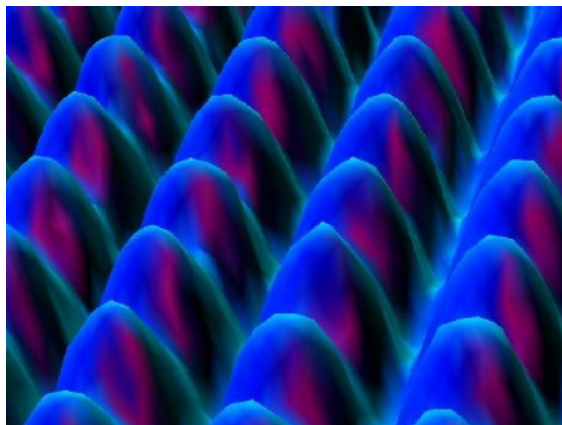
Пример 2

- 1) Реа
- 2) Тун
- МИК
- 3) Оп

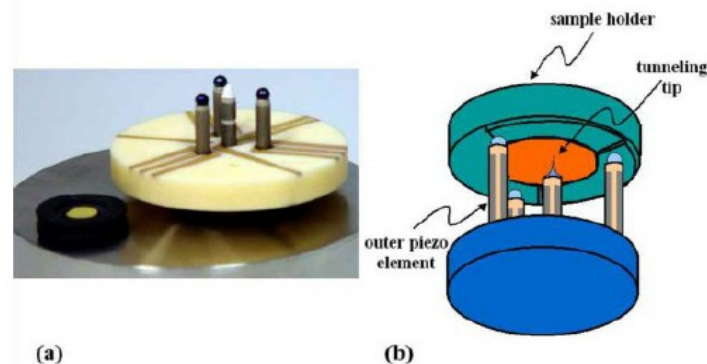


Википедия, Сканирующий туннельный микроскоп,
http://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_tunneling_microscope

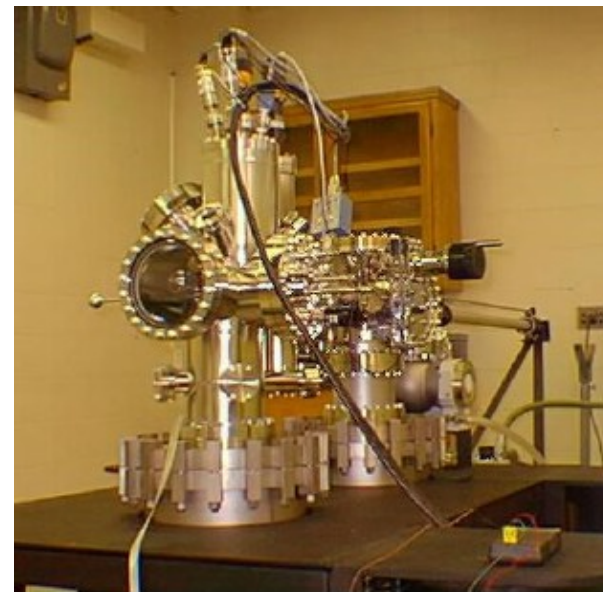
Ni



IBM Corp., STM Images Gallery, <http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html>



FZ Juelich, STM Group, Scanning Probe Microscopy,
http://www.fz-juelich.de/ibn/Scanning_probe_microscopy

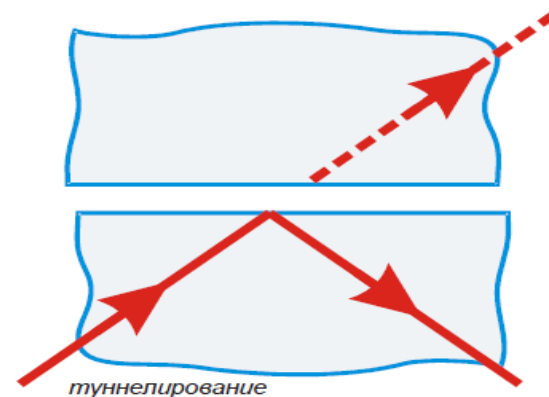
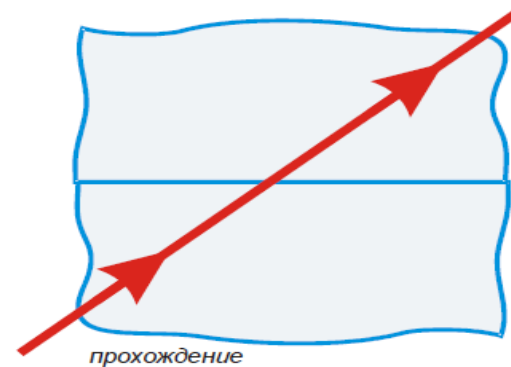
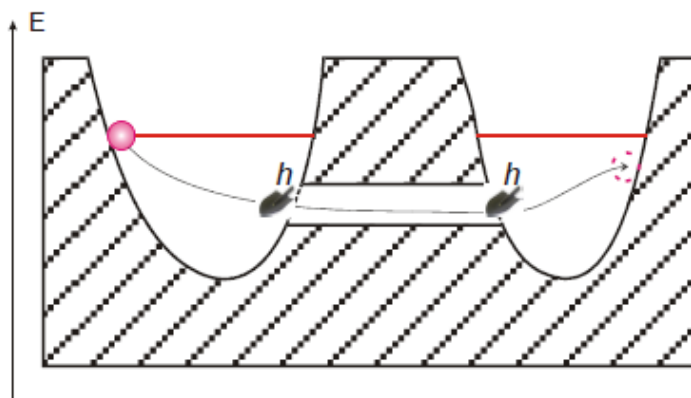
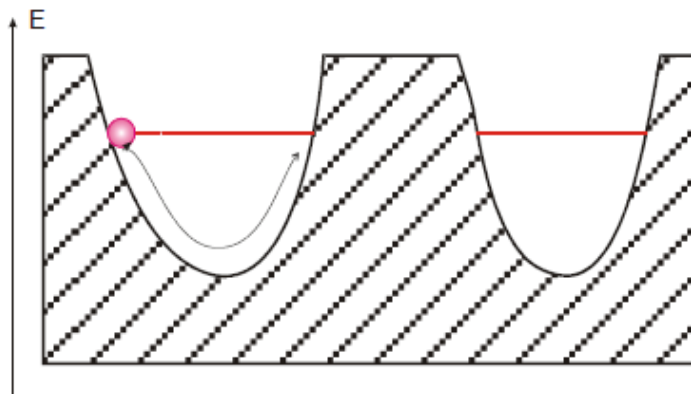


Wake Forest University, STM Group,
<http://www.wfu.edu/nanotech/Microscopy%20Facility/STMInstructions.html>

П

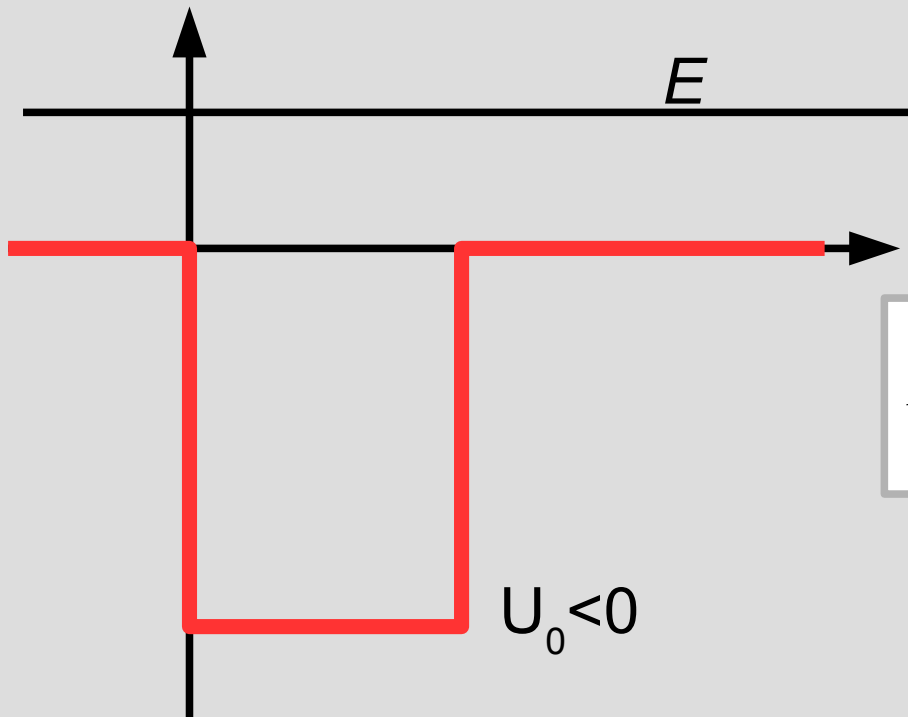
Оптическая аналогия

- 1) Рефракция
- 2) Туннельное микроскопирование
- 3) Оптика



Часть 2. Потенциальные ямы

Прохождение над ямой (эффект Рамзауэра)

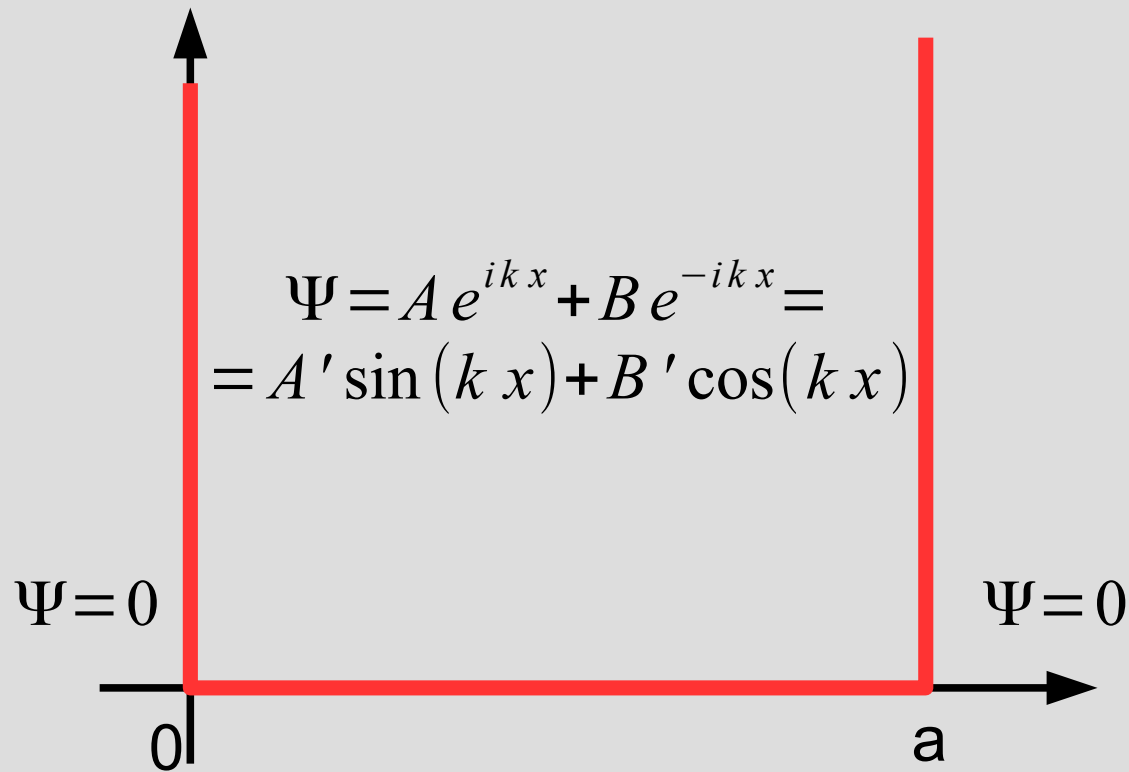


$$D = \frac{J_{\text{прош}}}{J_{\text{над}}} = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)}$$

$$k'a = \pi n$$

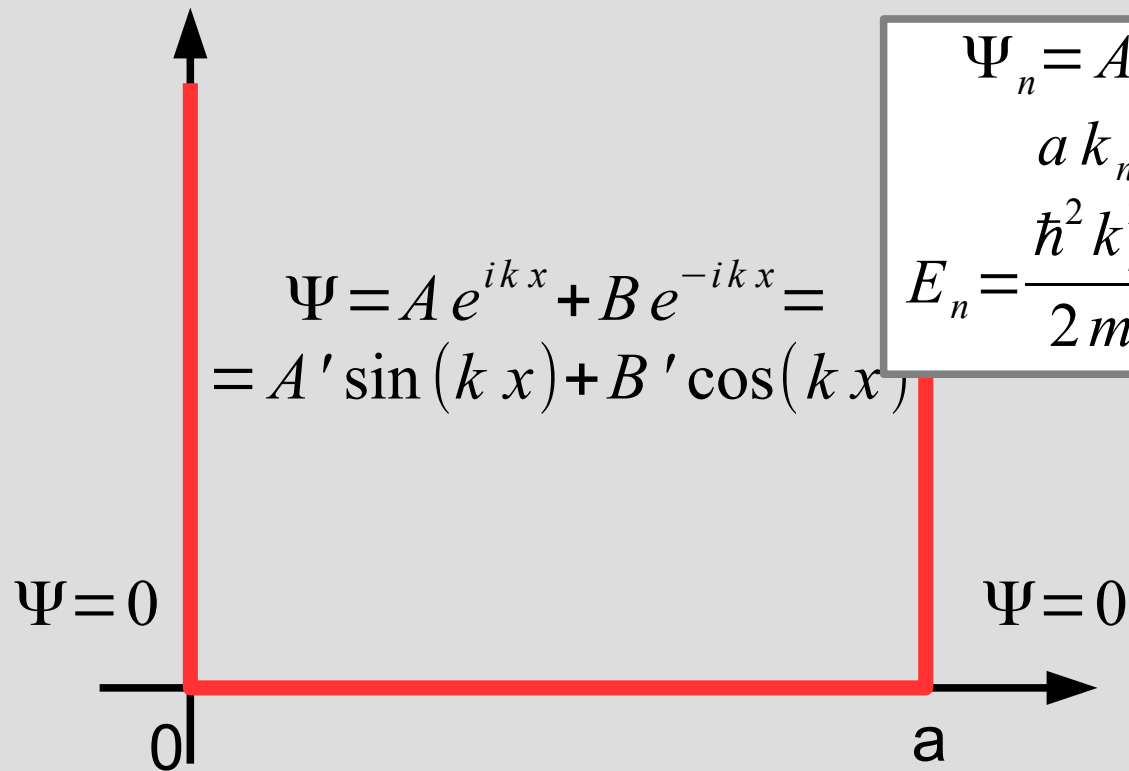
На длине ямы
укладывается целое
число полуволен де
Бройля

Задача 2: Одномерная яма с бесконечными стенками



$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x < 0 \text{ или } x > a \end{cases}$$

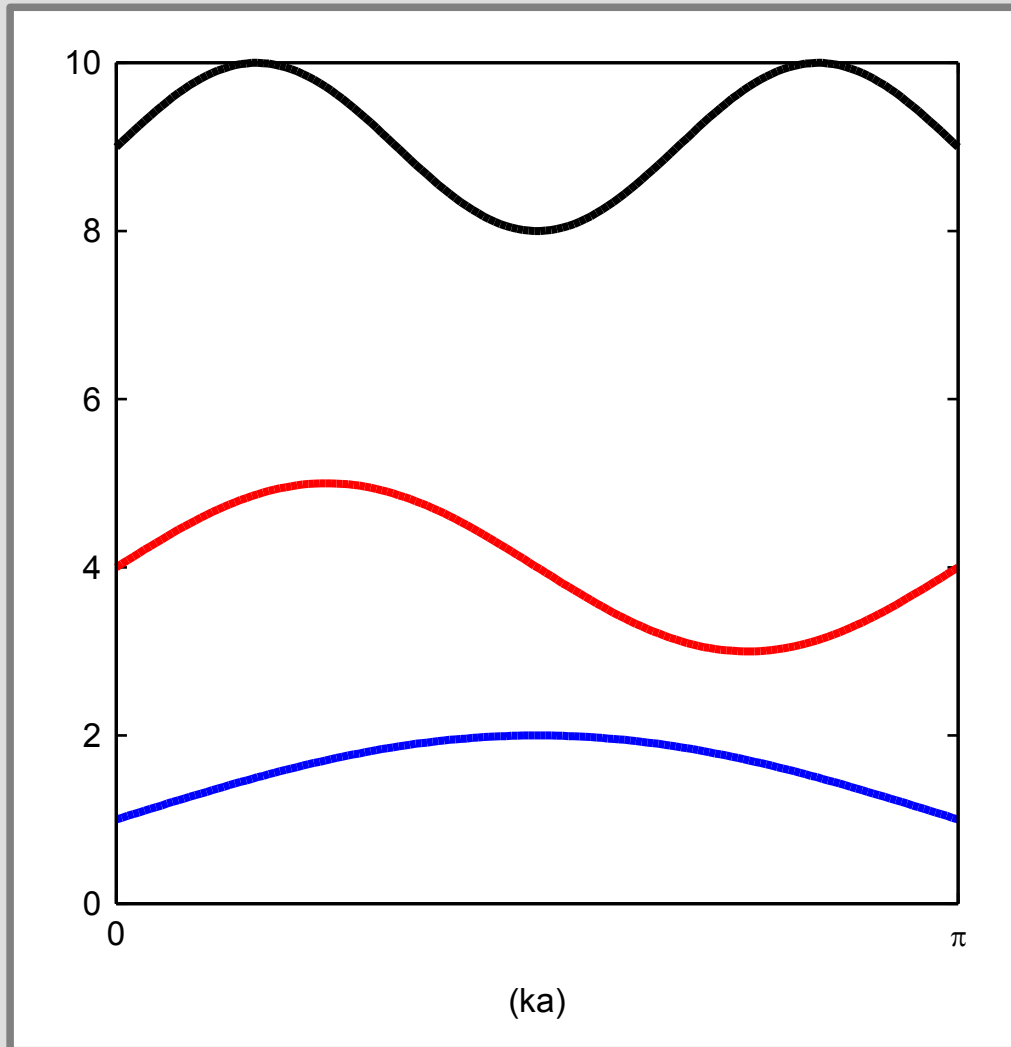
Задача 2: Одномерная яма с бесконечными стенками



$$\Psi_n = A_n \sin k_n x$$
$$a k_n = \pi n$$
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m a^2}$$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x < 0 \text{ или } x > a \end{cases}$$

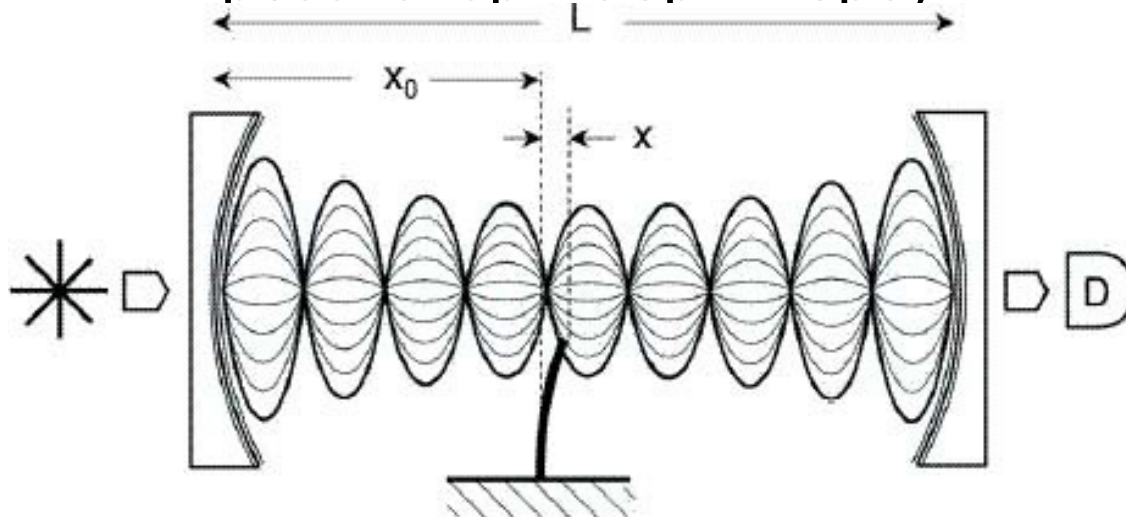
Общие свойства волновой функции в потенциальной яме



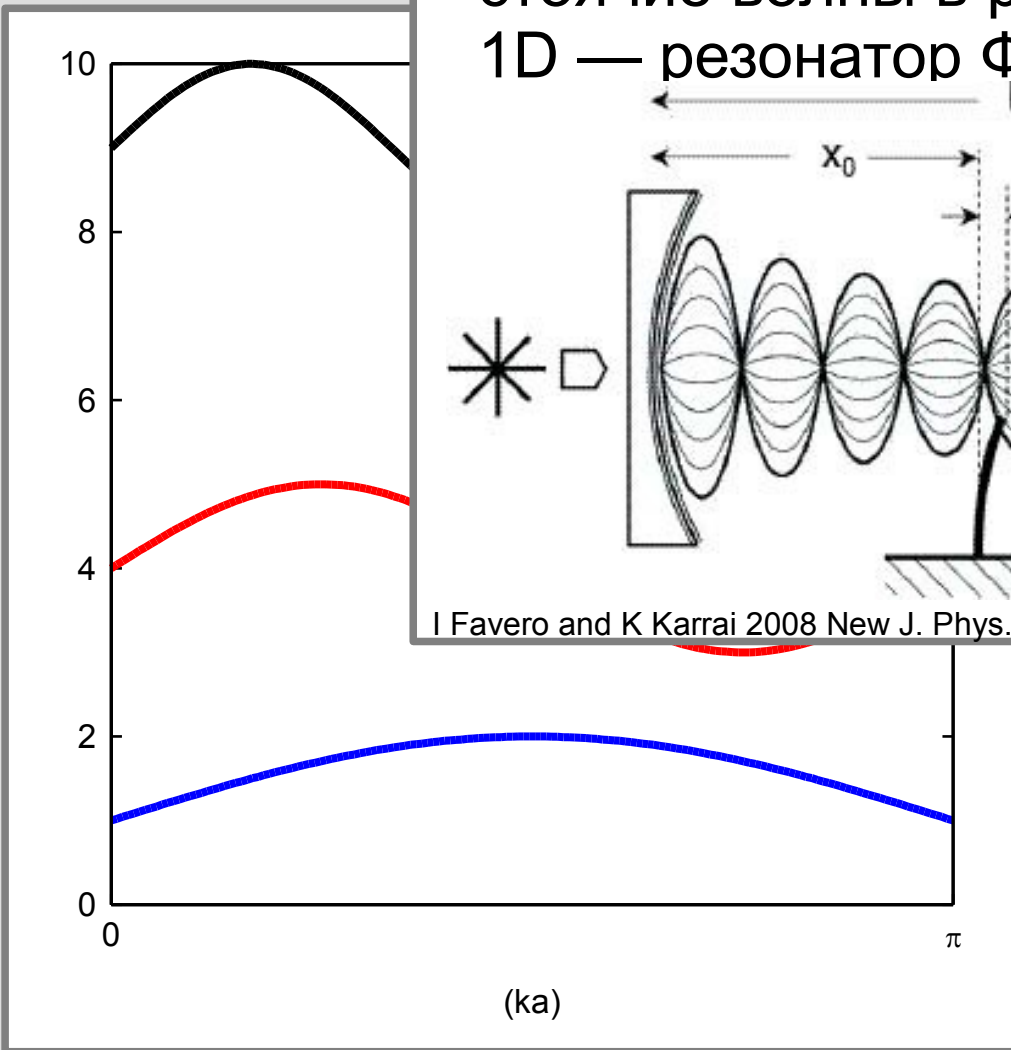
- В связанном состоянии имеются дискретные уровни энергии, маркируемые набором квантовых чисел
- в 1D число нулей волновой функции растет с ростом энергии

Оптическая аналогия:

стоячие волны в резонаторах (для 1D — резонатор Фабри-Перо)



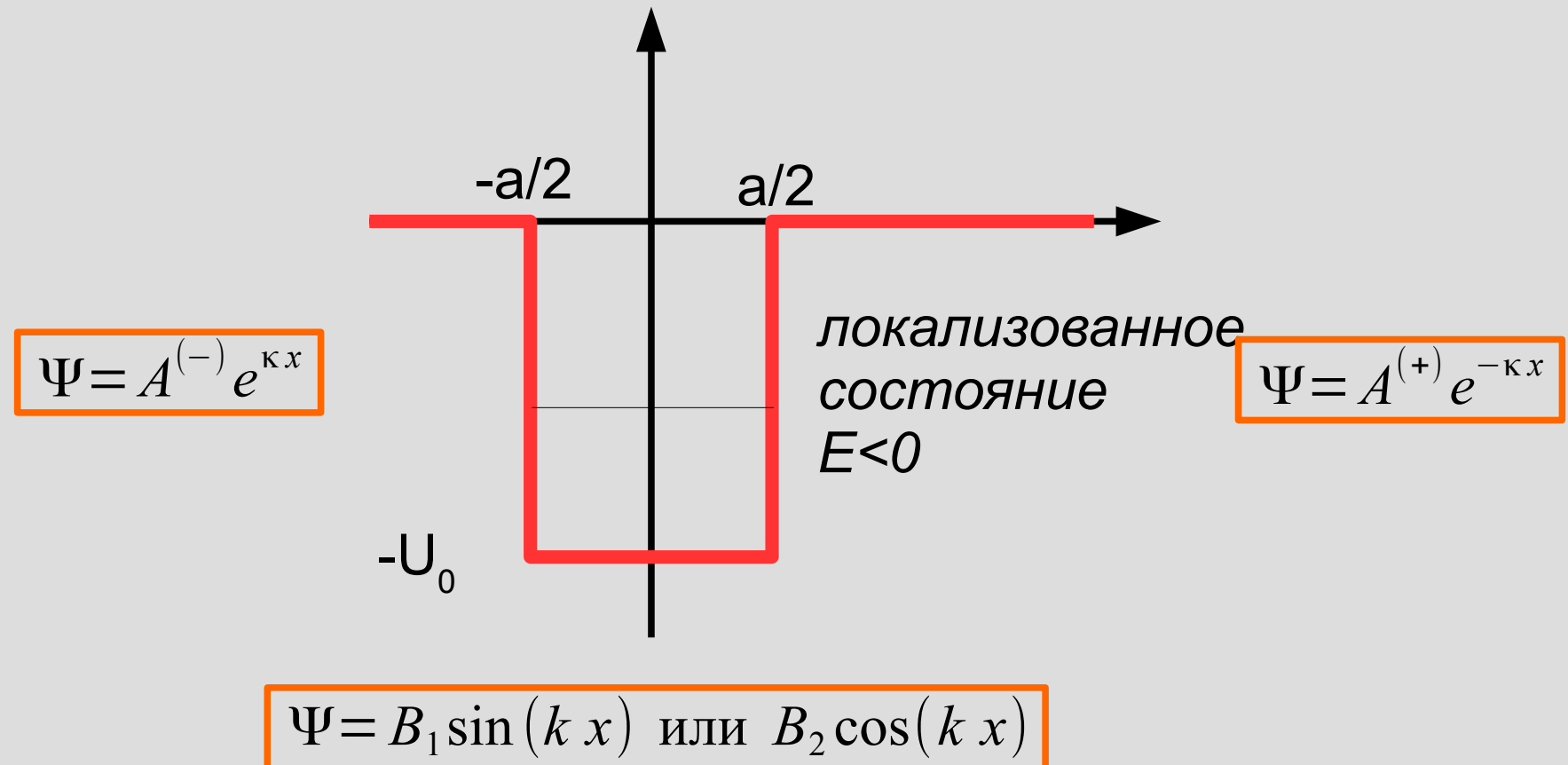
I Favero and K Karrai 2008 New J. Phys. 10 095006



остоянии
етные
,
лабором
л
ей
ции
л

энергии

Задача 3: Уровни симметричной одномерной яма конечной глубины



Симметрия потенциала требует чётности или нечётности волновой функции

типа
COS

типа
SIN

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ -k \sin(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{array} \right. \left| \right. \left\{ \begin{array}{l} \sin(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ k \cos(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{array} \right.$$

$$\Psi = A^{(-)} e^{\kappa x}$$



локализованное
состояние
 $E < 0$

$$\Psi = A^{(+)} e^{-\kappa x}$$

$$\Psi = B_1 \sin(k x) \text{ или } B_2 \cos(k x)$$

типа
COS

типа
SIN

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ -k \sin(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \sin(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ k \cos(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{array} \right.$$

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \frac{\kappa}{k}$$

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = -\frac{k}{\kappa}$$

$$\Psi = A^{(-)} e^{\kappa x}$$

локализованное
состояние
 $E < 0$

$$\Psi = A^{(+)} e^{-\kappa x}$$

$$\Psi = B_1 \sin(k x) \text{ или } B_2 \cos(k x)$$

$-U_0$

$-a/2$

$a/2$

типа
COS

типа
SIN

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ -k \sin(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \sin(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ k \cos(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{array} \right.$$

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \frac{\kappa}{k}$$

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = -\frac{k}{\kappa}$$

-a/2

a/2

$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2m U_0}{\hbar^2} \rightarrow \kappa = \sqrt{\frac{2m U_0}{\hbar^2} - k^2}$$

ное

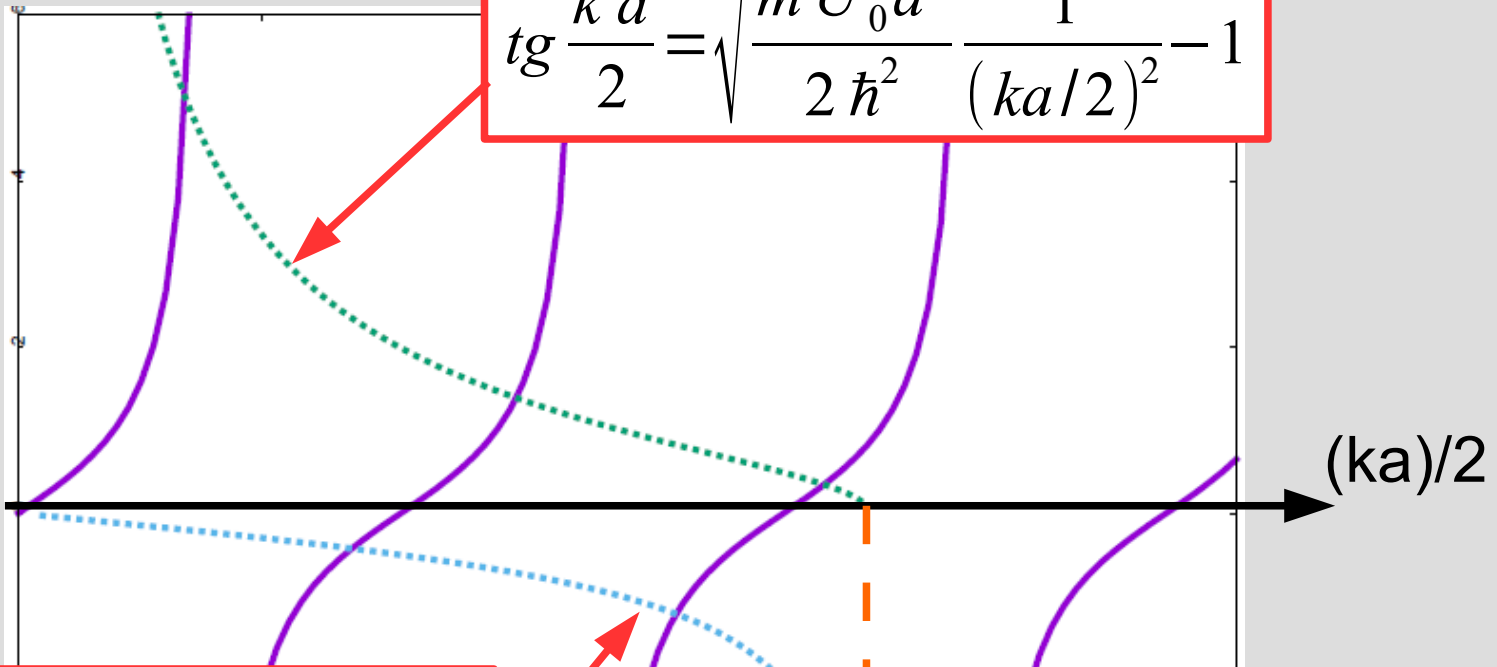
состояние

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{(k a/2)^2} - 1}$$

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \frac{-1}{\sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{(k a/2)^2} - 1}}$$

Задача 3: Уровни симметричной одномерной яма конечной глубины

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{(k a / 2)^2} - 1}$$

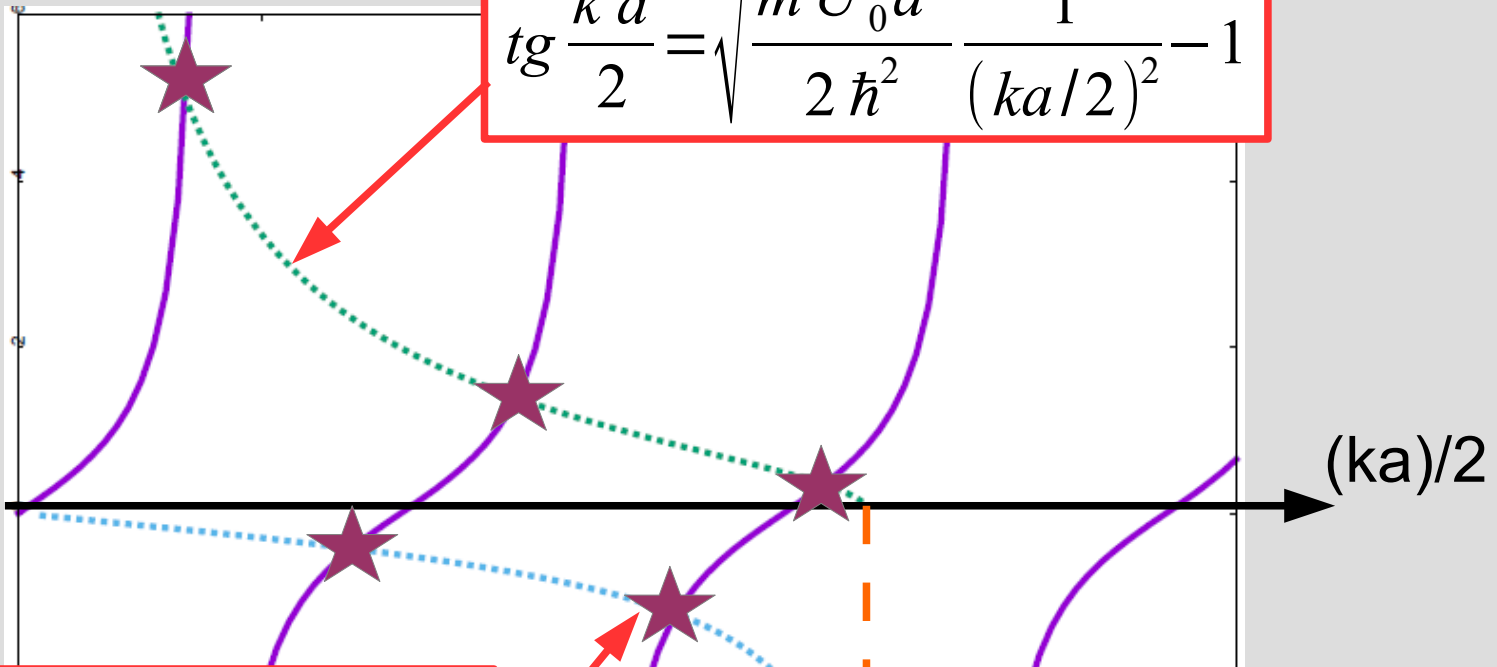


$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \frac{-1}{\sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{(k a / 2)^2} - 1}}$$

$$A = \sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2}}$$

Задача 3: Уровни симметричной одномерной яма конечной глубины

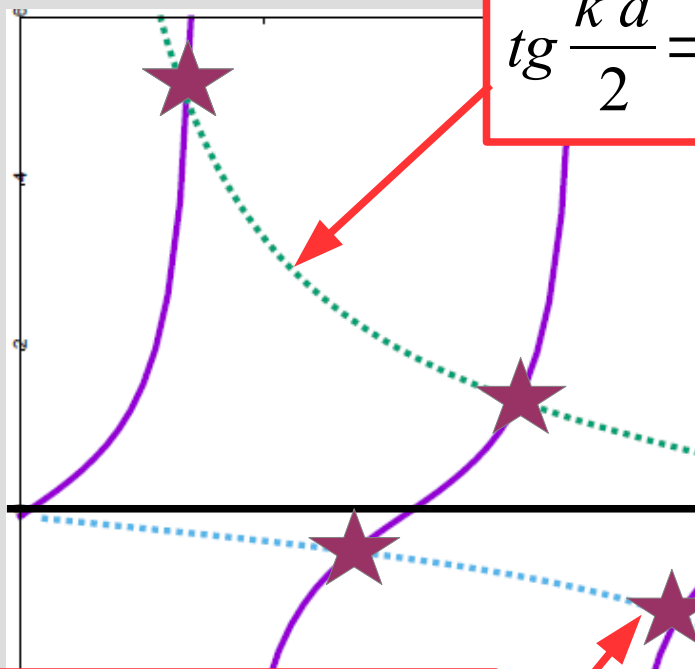
$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{(k a / 2)^2} - 1}$$



$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \frac{-1}{\sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{(k a / 2)^2} - 1}}$$

$$A = \sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2}}$$

Задача 3: Уровни одномерной яма ко



$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} =$$

- В прямоугольной яме конечной глубины — конечное число связанных состояний
- В одномерном случае связанное состояние есть всегда
- В достаточно мелкой яме — единственное связанное состояние при

$$\sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2}} < \frac{\pi}{2}$$

$$\operatorname{tg} \frac{k a}{2} = \frac{-1}{\sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2} \frac{1}{(ka/2)^2} - 1}}$$

$$A = \sqrt{\frac{m U_0 a^2}{2 \hbar^2}}$$

Бонус: Сферическая прямоугольная потенциальная яма

$$U(r) = \begin{cases} U_0, r < R (U_0 < 0) \\ 0, r > R \end{cases}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(r) \Psi = E \Psi$$

$$\Delta \Psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) \quad \text{если } \Psi \text{ от углов не зависит}$$

- 1) для $f = \Psi/r$ получим одномерное уравнение Шредингера
- 2) т.к. $r > 0$, то яма «полубесконечная», решения (для f !) только типа SIN
- 3) в трёхмерной яме решения есть при условии

$$\sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}} > \frac{\pi}{2}$$

Примеры потенциальных ям

- 1) Атом
- 2) Гармонический осциллятор
- 3) Реализации в полупроводниках и наночастицах
- 4) Одноэлектронный транзистор

Примеры потенциальных ям

- 1) Атом
- 2) Гармон
- 3) Реали
- 4) Одноэ

Пример 1: Атом

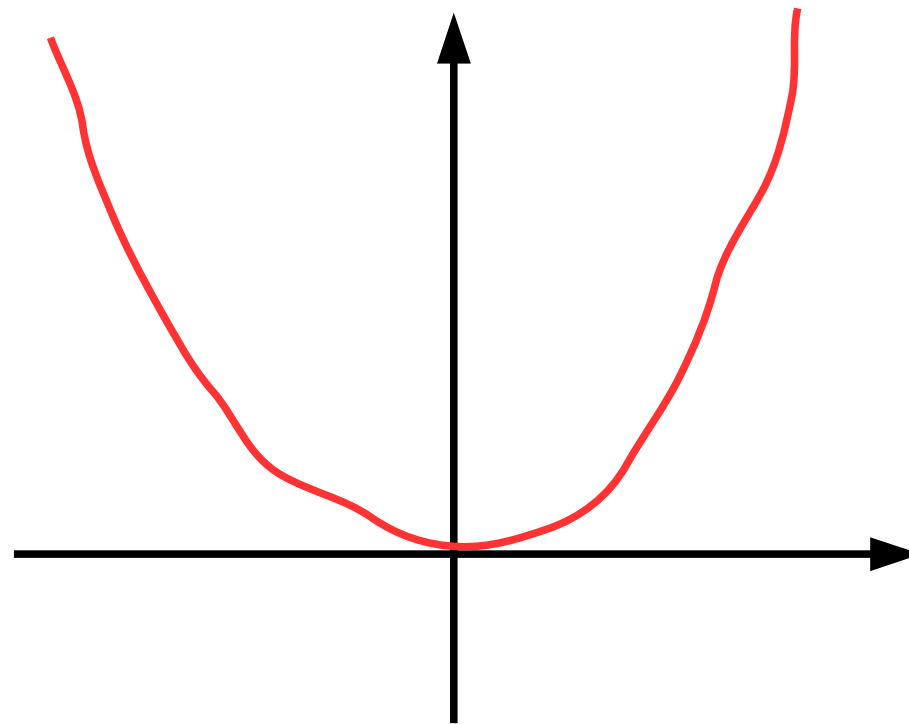


Кулоновское взаимодействие создает потенциальную яму для электрона вблизи ядра. Стационарные состояния электрона в такой яме и есть «орбиты» электрона.

Примеры потенциальных ям

- 1) Атом
- 2) Гармон
- 3) Реали
- 4) Одноэ

Пример 2: Гармонический осциллятор



$$U = \frac{k x^2}{2}$$

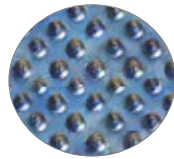
Задача решается точно (в полиномах Эрмита). В 1D эквидистантные невырожденные уровни

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Примеры потенциальных ям

- 1) Атом
- 2) Гармон
- 3) Реали
- 4) Одноэ

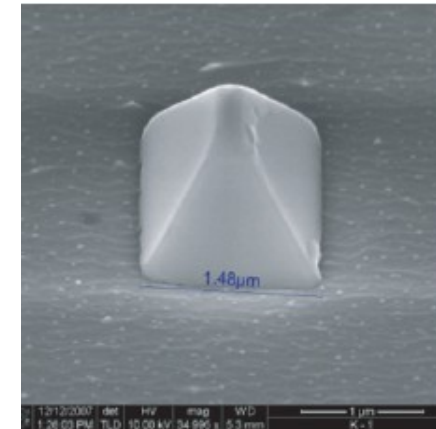
Пример 3: Реализации в полупроводниках и наночастицах



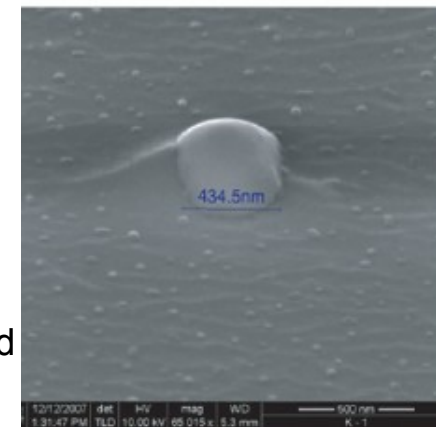
металлическая
гранула
размера ~нм

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

Journal of Physics D Applied
Physics 41(16):162004



(b)



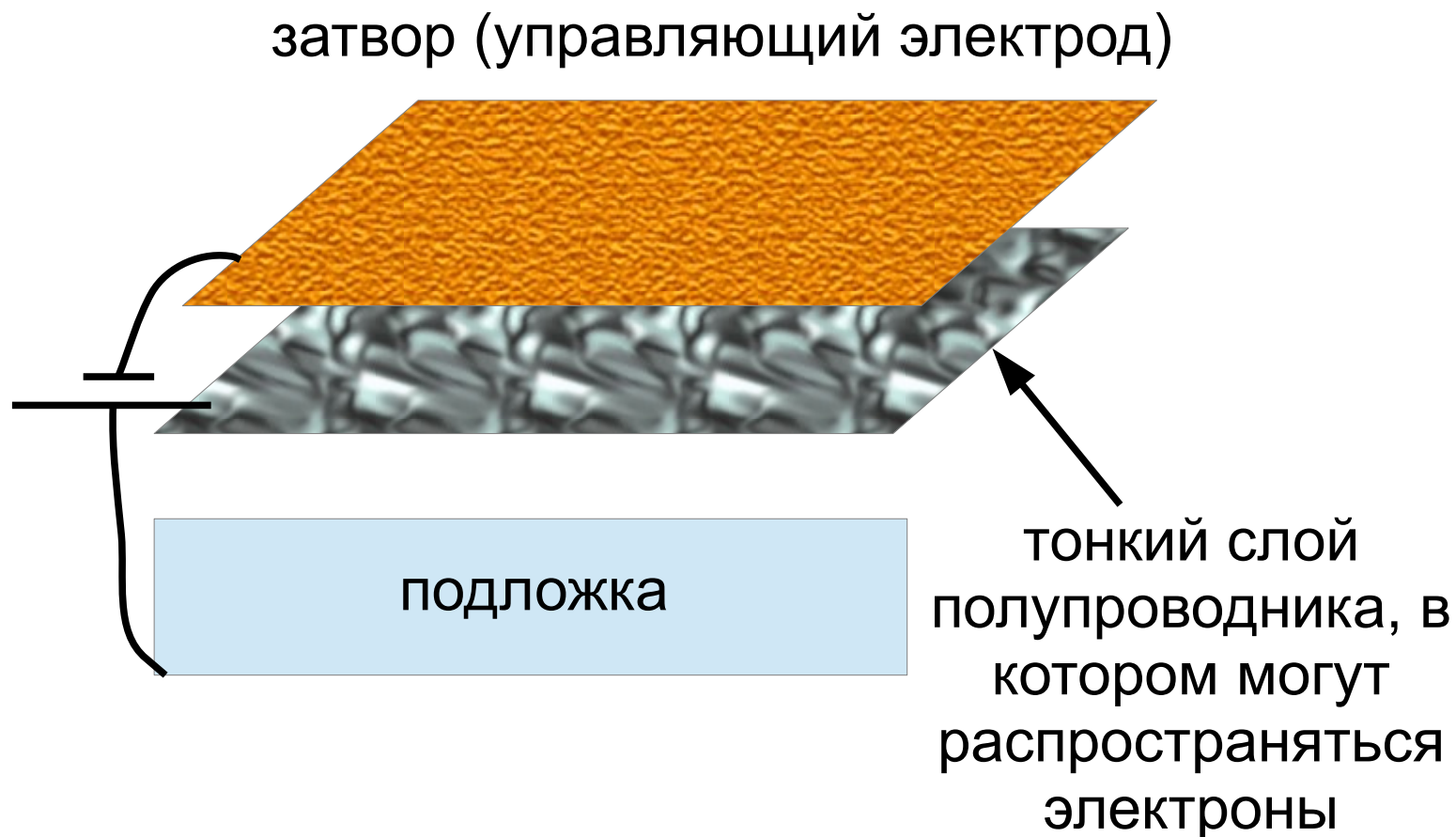
(e)

The self-assembled InAsSbP-based strain-induced islands grown by LPE on InAs substrate

Примеры потенциальных ям

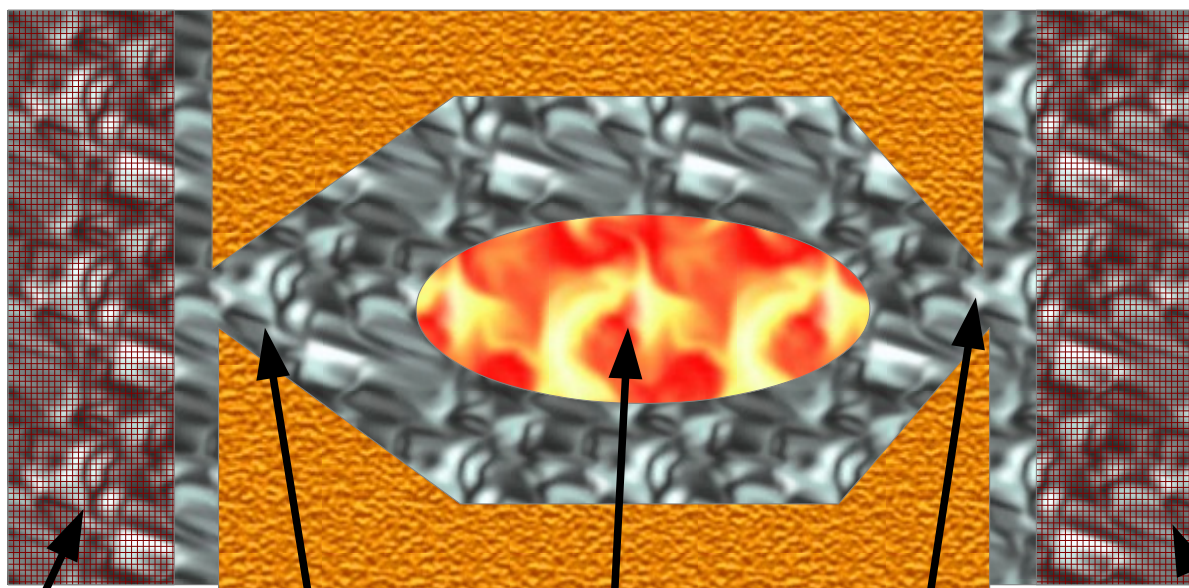
Пример 4: Одноэлектронный транзистор (наивно)

- 1) Атом
- 2) Гарм
- 3) Реал
- 4) Одно



Примеры потенциальных ям

живно)



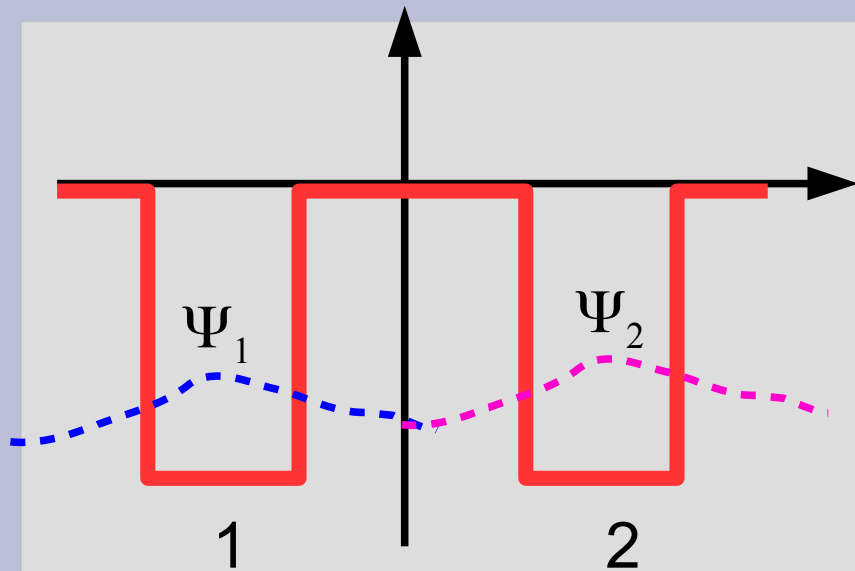
берег 1
(исток)

туннельный промежуток

«квантовая
точка»

берег 2
(сток)

Задача 4: Связанные ямы

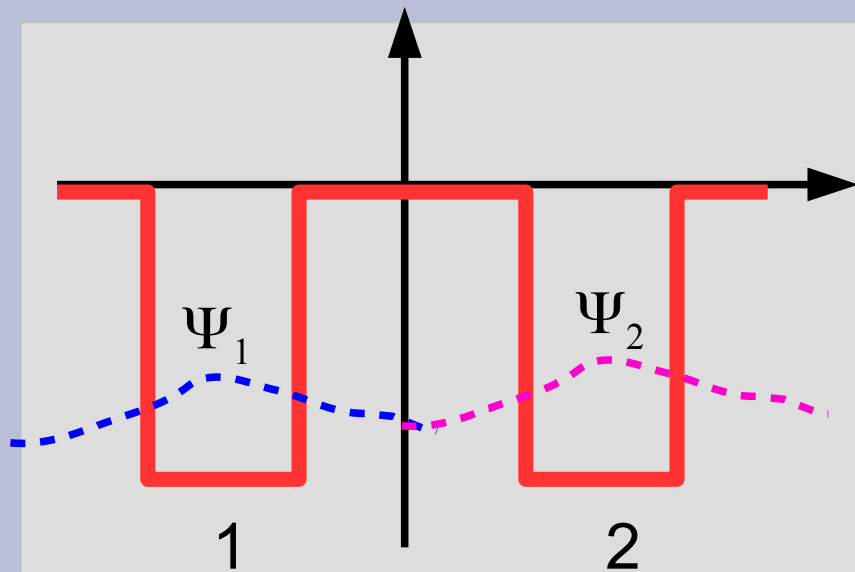


$$\hat{H}_0 \Psi_{1,2} = E_0 \Psi_{1,2}$$

Оператор туннелирования

$$\hat{T} \Psi_{1,2} = \hbar T \Psi_{2,1}$$

Задача 4: Связанные ямы

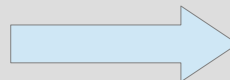


$$\hat{H}_0 \Psi_{1,2} = E_0 \Psi_{1,2}$$

Оператор туннелирования

$$\hat{T} \Psi_{1,2} = \hbar T \Psi_{2,1}$$

туннельное
расщепление
уровня энергии

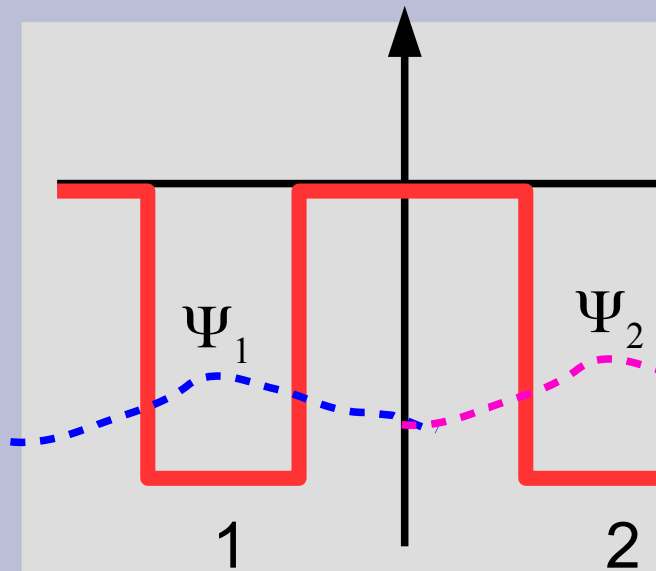


$$(\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi = E \Psi$$

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 \pm \Psi_2)$$

$$E^{(\pm)} = E_0 \pm \hbar T$$

Задача



$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi$$

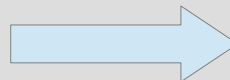
$$\Psi(t=0) = \Psi_1$$

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi^{(+)} e^{-iE^{(+)}t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi^{(-)} e^{-iE^{(-)}t/\hbar} = \\ &= e^{-iE_0t/\hbar} [\Psi_1 \cos(Tt) - \Psi_2 \sin(Tt)] \end{aligned}$$

$$w_1 = \cos^2(Tt)$$

$$w_2 = \sin^2(Tt)$$

туннельное
расщепление
уровня энергии



$$(\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi = E \Psi$$

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 \pm \Psi_2)$$

$$E^{(\pm)} = E_0 \pm \hbar T$$

Задача

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi$$

$$\Psi(t=0) = \Psi_1$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi^{(+)} e^{-iE^{(+)}t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi^{(-)} e^{-iE^{(-)}t/\hbar} =$$

$$= e^{-iE_0 t/\hbar} [\Psi_1 \cos(Tt) - \Psi_2 \sin(Tt)]$$

$$w_1 = \cos^2(Tt)$$

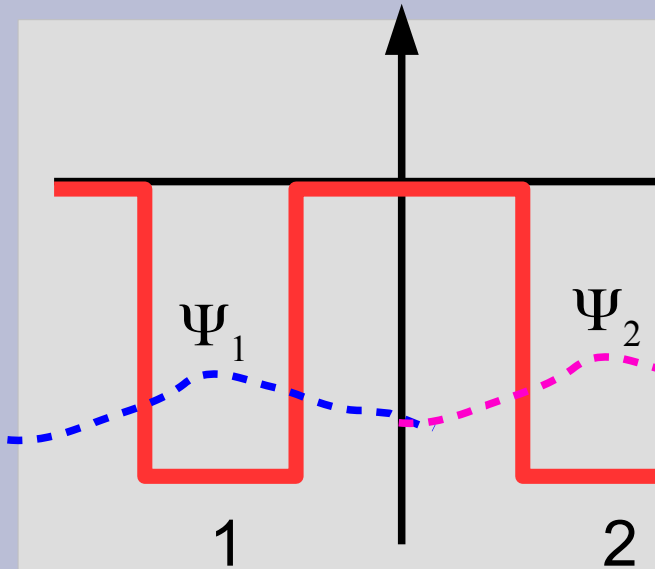
$$w_2 = \sin^2(Tt)$$

Время нахождения в определенном состоянии:

$$\tau \sim \frac{1}{T} \sim \frac{\hbar}{\Delta E}$$

тун
расщепление
уровня энергии

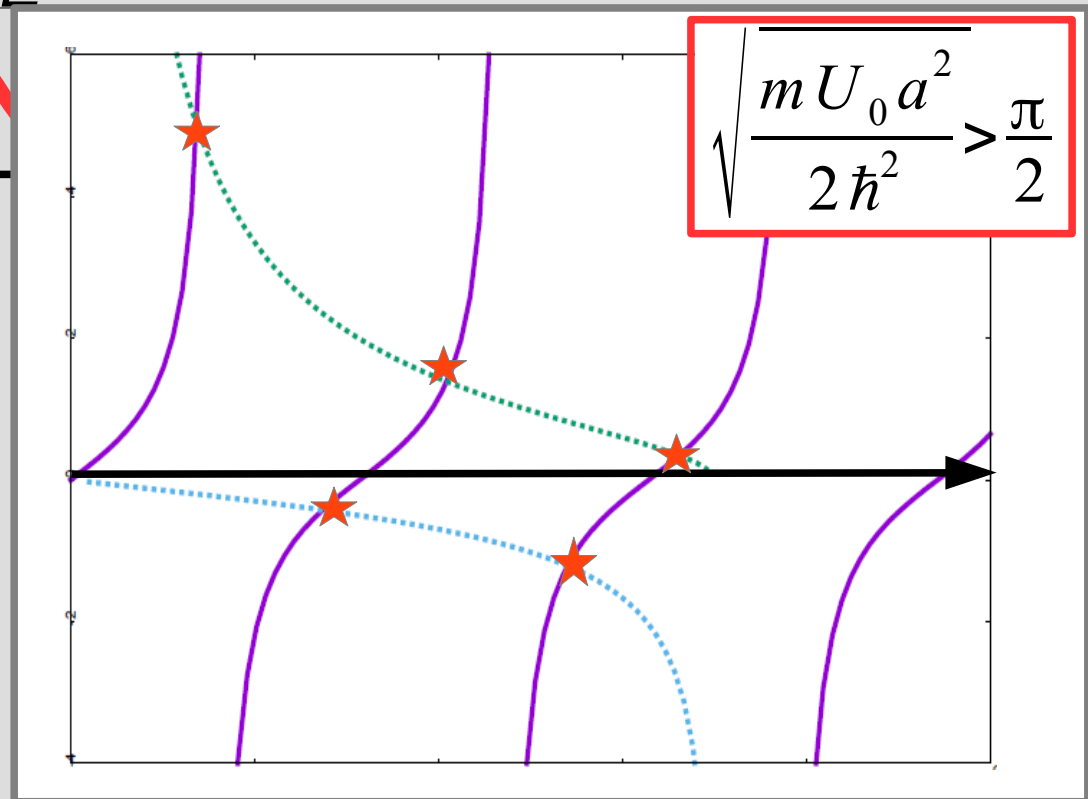
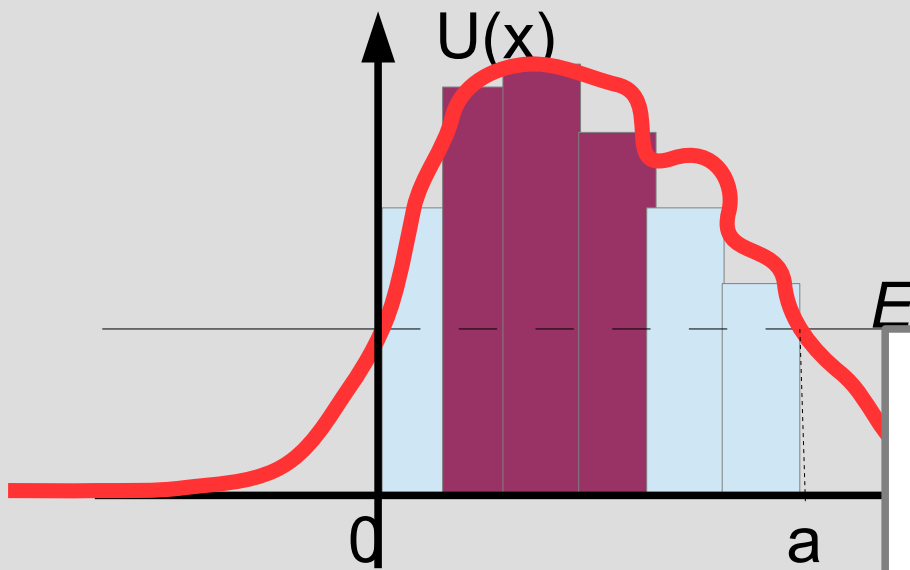
$$E = E_0 \pm \hbar T$$



Главное на лекции

$$k_n a = \pi n$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2 m a^2}$$



$$D \approx \prod_i D_i \approx \prod_i e^{-2 \kappa_i a_i} =$$

$$= \exp\left(-2 \sum_i \kappa_i a_i\right) =$$

$$= \exp\left(-2 \int_0^a \sqrt{\frac{2m(U(x)-E)}{\hbar^2}} dx\right)$$