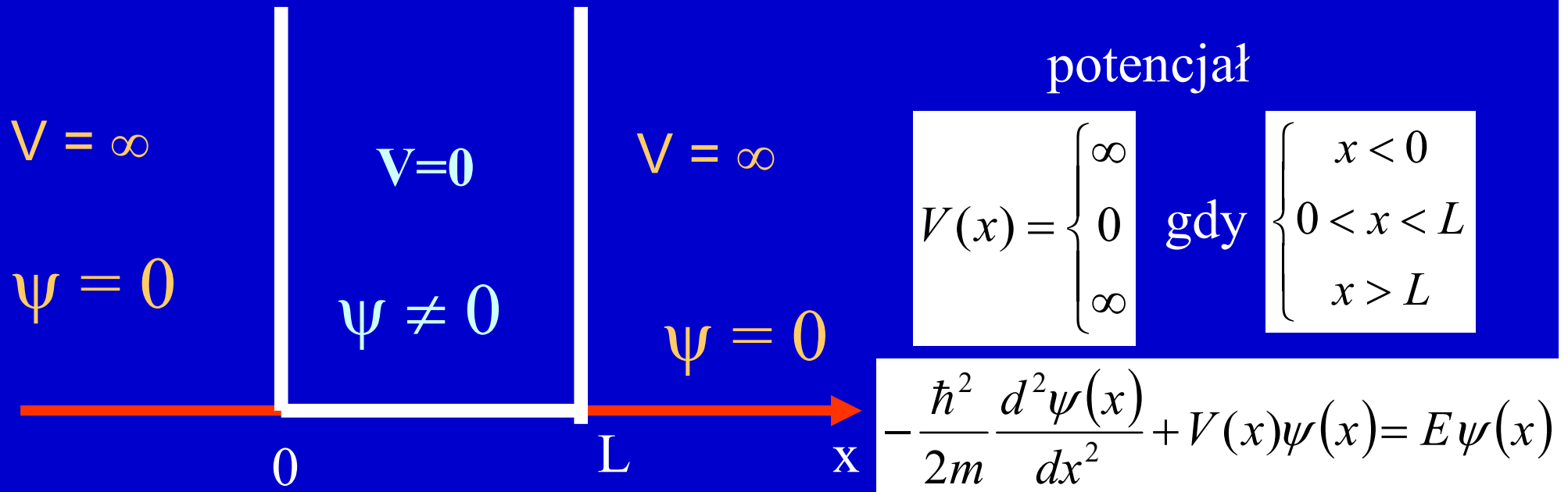


Własności cząstki znajdującej się w studni
potencjału o nieskończonej i skończonej
głębokości, praktyczne realizacje studni i ich
możliwe wykorzystanie

Efekt tunelowy i jego możliwe wykorzystanie
w opisie zjawisk fizycznych i konstrukcji
urządzeń

Cząstka kwantowa o energii $E > 0$ w nieskończenie głębokiej jednowymiarowej studni potencjału



Według klasycznej mechaniki w punktach o $x=0$ i $x=L$ na cząstkę działa impulsowa siła w kierunku wnętrza studni $F=-dV/dx$. Ruch cząstki zachodzący ze stałą wartością prędkości jest ograniczony do obszaru studni $0 < x < L$, (poza tym obszarem czyli w barierach energia kinetyczna byłaby < 0). Energia cząstki jest dowolna.

Według mechaniki kwantowej ponieważ $V = \infty$ dla $x < 0$ i dla $x > L$ to funkcja falowa opisującą cząstkę kwantową jest różna od zera również tylko w obszarze $0 < x < L$.

Ruch cząstki jest więc ograniczony do obszaru $0 < x < L$, ale jej energia przyjmuje tylko wartości dyskretne. W celu opisu zachowania się cząstki trzeba znaleźć na początku funkcję falową spełniającą równanie Schrödingera i nałożyć na nią dodatkowe warunki, które musi ona spełniać.

Gdy rozważamy cząstkę swobodną (na którą klasycznie nie działa siła) poruszającą się w obszarze stałego potencjału mniejszego od energii cząstki

$$V(x) = V_0 = \text{const} < E$$

to równanie Schrödingera niezależne od czasu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$$

gdzie

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \frac{|p|}{\hbar}$$

$$k^2 > 0$$

jest równaniem różniczkowym liniowym jednorodnym o stałych współczynnikach dla którego możemy zapisać równanie charakterystyczne i znaleźć jego pierwiastki

$$r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r = ik \quad \text{lub} \quad r = -ik$$

Ogólne rozwiązanie równania różniczkowego

$$\psi = C_1 \exp(r_1 x) + C_2 \exp(r_2 x)$$

$$\psi = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx)$$

C_1, C_2 , -stałe dowolne

Drugi człon w powyższym rozwiązaniu jest związany z opisem cząstki poruszającej się w przeciwnym kierunku do zwrotu osi Ox

Gdy przyjmiemy iż $V_0=0$ to

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

Rozwiązanie równania Schrödingera niezależnego od czasu dla przedziału $0 < x < L$ (obszar studni o potencjale $V=0 < E$) ma więc postać:

$$\psi = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx)$$

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

$$e^{-i\alpha} = \cos \alpha - i \sin \alpha$$

$$e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$$

Można je równoważnie zapisać w postaci

$$\psi = C \sin(kx) + D \cos(kx)$$

$$\text{gdzie} \quad D = C_1 + C_2 \quad C = i(C_1 - C_2)$$

Funkcja falowa jest ograniczona, jednoznaczna i ciągła zarówno w obszarze studni jak i poza studnią gdzie $\psi=0$. Należy jednak narzucić warunek ciągłości ψ w punktach $x=0$ i $x=L$. Z uwagi na nieskończony skok potencjału w $x=0$ i $x=L$ w tych punktach nie obowiązuje warunek ciągłości dla pochodnej.

Dla $x = 0$ warunek ciągłości funkcji falowej przyjmuje postać

$$\psi(x=0) = 0 \quad \text{skąd wynika np. iż} \quad D=0 \quad (C_2=-C_1) \Rightarrow \psi = C \sin(kx)$$

Funkcja falowa dla $0 < x < L$

$$\psi = C \sin(kx)$$

Dla $x = L$ warunek ciągłości ma postać

$$\psi(x = L) = 0$$

a zatem

$$\sin(kL) = 0$$

czyli

$$kL = n\pi$$



$$k = \frac{n\pi}{L}$$

n -liczba całkowita

Ostatecznie

$$\psi = \psi_n(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

przy czym $n = 1, 2, 3, \dots$ (liczba całkowita dodatnia)

$n \neq 0$, gdyż dla $n=0$, funkcja ψ byłaby tożsamościowo równa zeru, a zatem nie mogła by opisywać żadnej cząstki.

Zmiana znaku n prowadzi tylko do zmiany znaku funkcji falowej. Ze względu na to iż bezpośredni sens fizyczny ma tylko kwadrat modułu funkcji falowej funkcje o ujemnym n opisują te same stany cząstki co funkcje o $n > 0$ i rozwiązania o $n < 0$ odrzucamy.

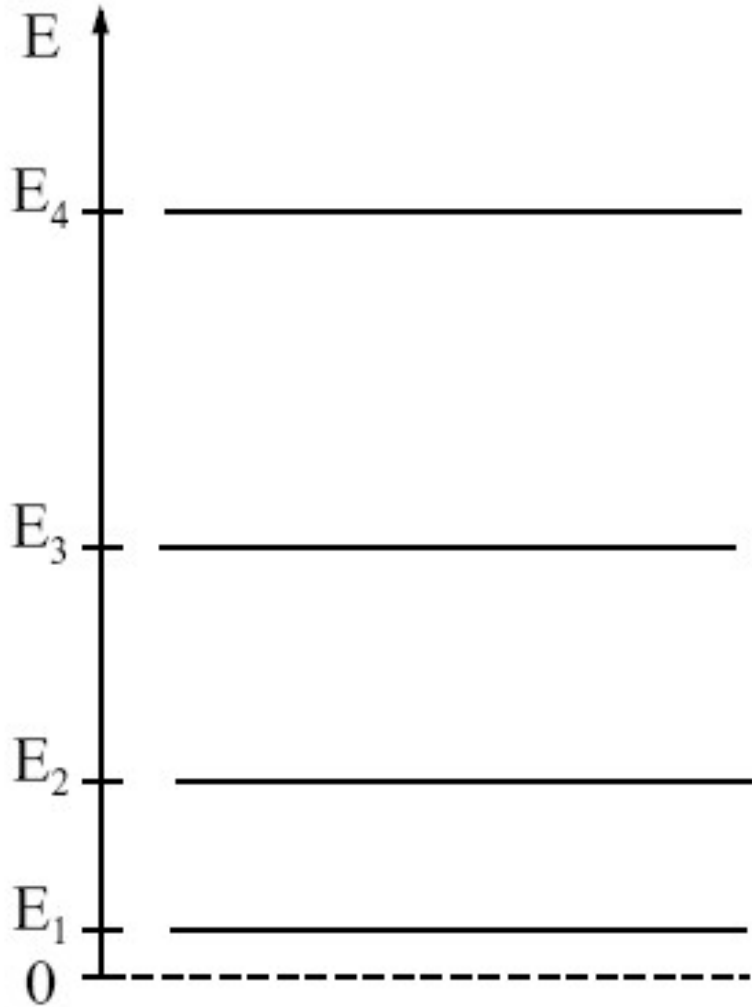
Warunek $kL = n\pi$ oznacza iż na długości studni potencjału mieści się całkowita wielokrotność połowy długości fali związanej z opisywaną cząstką gdyż

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

a zatem $\frac{2\pi}{\lambda} L = n\pi$ czyli $L = \frac{n\lambda}{2}$

Warunek analogiczny jak w przypadku powstania fali stojącej na strunie o długości L umocowanej sztywno na obu jej końcach.

Kwantowanie energii



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

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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

$n=1,2,3,\dots$

Energia cząstki w studni potencjału jest skwantowana (może przyjmować tylko dyskretne wartości) określone powyższym wzorem. Z kwantowaniem energii mamy do czynienia zawsze wtedy ruch cząstki jest ograniczony w przestrzeni.

Wartość najmniejszej energii jak i odstęp między dozwolonymi wartościami energii maleją przy zwiększaniu się szerokości studni kwantowej i wzroście masy cząstki.

Odstępy między sąsiednimi poziomami energetycznymi nie są sobie równe.

Kwantowanie energii

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

$n=1,2,\dots$ liczba kwantowa

Najmniejsza wartość energii cząstki jest większa od zera

$$E \geq E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0$$

elektron $m=9,11 \cdot 10^{-31} \text{kg}$; $L=10^{-10} \text{m}$, $E_1=37 \text{eV}$

neutron $m=1,67 \cdot 10^{-27} \text{kg}$; $L=10^{-15} \text{m}$, $E_1=204 \text{MeV}$

piłeczka $m=100 \text{g}$, $L=1 \text{m}$, $E_1=34 \cdot 10^{-49} \text{eV}$

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

Cząstka nie może przyjąć energii równej zeru, gdyż oznaczałoby to również że kwadrat pędu jak i sam pęd cząstki byłby równy zeru. A zatem nieoznaczoność pędu cząstki Δp_x byłaby również równa zeru. Na mocy zasady nieoznaczoności Heisenberga $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ nieoznaczoność położenia Δx musiała by być nieskończona a więc położenie cząstki musiało by być całkowicie nieokreślone, co nie ma miejsca ze względu na ograniczenie możliwych położzeń cząstki do obszaru skończonego.

Normowanie funkcji falowej

$$\psi = \psi_n(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad \text{dla } 0 < x < L$$

$n = 1, 2, 3, \dots$

Stałą C można wyznaczyć z dokładnością do stałej o module 1 z warunku normowania

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int \sin^2(kx) dx = \frac{1}{2} \int (1 - \cos(2kx)) dx = \frac{1}{2} \left[x - \frac{1}{2k} \sin(2kx) \right]$$

$$|C|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = 1 \quad \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = \frac{1}{2} x \Big|_0^L - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(2 \frac{n\pi}{L} x\right) \Big|_0^L = \frac{L}{2}$$

$$|C| = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

Rozwiązanie równania Schrödingera zależnego od czasu dla cząstki znajdującej się w jednowymiarowej nieskończonej studni potencjału w stanie stacjonarnym (o ustalonej energii)

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

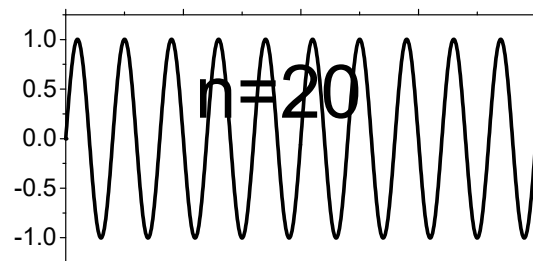
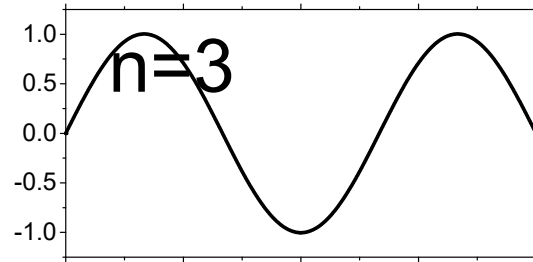
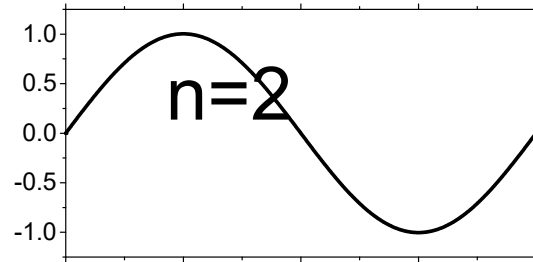
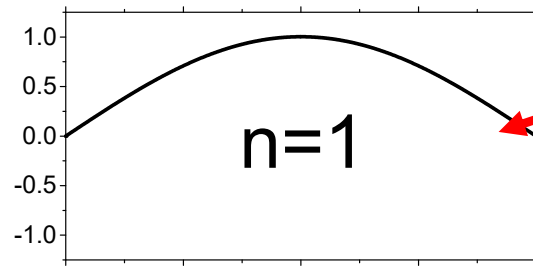
ma w obszarze studni czyli dla x z zakresu $0 < x < L$ postać

$$\begin{aligned} \Psi_n(x, t) &= \psi_n(x) f_n(t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \exp\left(-i \frac{\pi^2 \hbar n^2}{2mL^2} t\right) \end{aligned}$$

Poza obszarem studni czyli dla $x < 0$ lub $x > L$ mamy

$$\Psi_n(x, t) = 0$$

Gęstość prawdopodobieństwa $\rho(x)$ oscyluje między wartością maksymalną równą $2/L$ a zerem (według mechaniki klasycznej gęstość prawdopodobieństwa powinna być stała i równa $1/L$ w przedziale $[0, L]$).



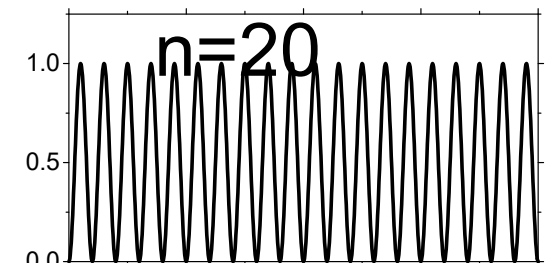
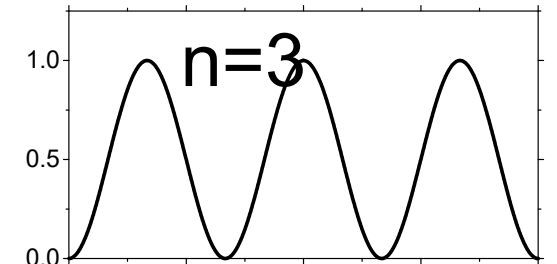
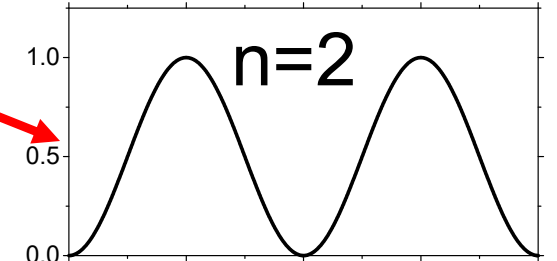
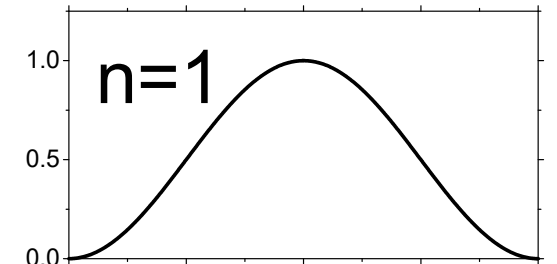
0

L

$$\sqrt{\frac{L}{2}}\psi(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$\rho(x) \cdot \frac{L}{2} = \Psi^* \Psi \frac{L}{2} = \psi^* \psi \cdot \frac{L}{2} = \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

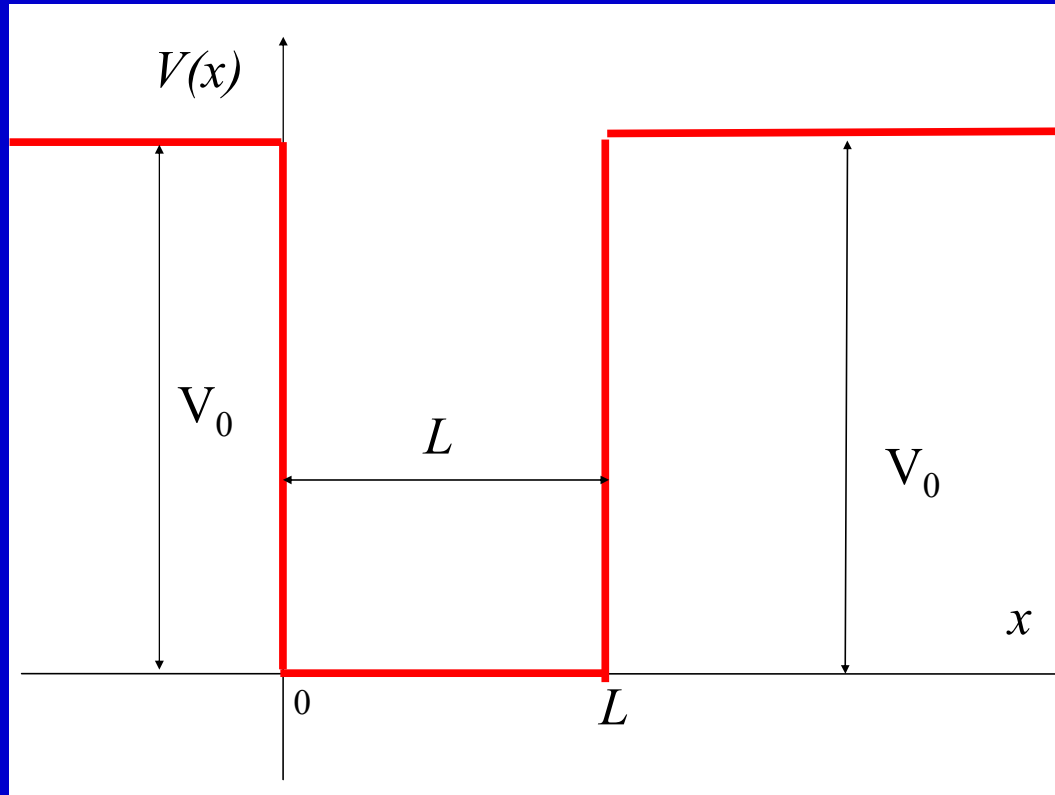
Dla dużych n odstępów między punktami dla których gęstość $\rho(x)$ osiąga maksymalne i minimalne wartości są bardzo niewielkie. Gęstość uśredniona po x jest stała i równa gęstości określonej dla cząstki klasycznej (przejaw zasady korespondencji)



0

L

Cząstka o energii $0 < E < V_0$ w skończonej jednowymiarowej symetrycznej studni potencjału



$$V(x) = \begin{cases} V_0 \\ 0 \\ V_0 \end{cases} \text{ gdy } \begin{cases} x < 0 \\ 0 < x < L \\ x > L \end{cases}$$

Według mechaniki klasycznej cząstka o energii $0 < E < V_0$ mogła by się poruszać tylko w obszarze studni $0 < x < L$ a nie wnika w obszar barier $x < 0$ i $x > L$ gdyż musiała by posiadać w barierach ujemną energię kinetyczną, co wyklucza możliwość tam jej przebywania.

Według mechaniki kwantowej istnieje skończone prawdopodobieństwo wniknięcia cząstki w obszar bariery potencjału o $x < 0$ lub $x > L$.

Równanie Schrödingera niezależne od czasu dla przedziału $x > L$ lub $x < 0$ (obszar barier potencjału $E < V_0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\psi = 0$$

Wprowadźmy oznaczenie

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Wówczas równanie różniczkowe przyjmuje postać

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0$$

Równanie charakterystyczne i jego pierwiastki

$$r^2 - \kappa^2 = 0 \Rightarrow r = \kappa \quad \text{lub} \quad r = -\kappa$$

Ogólne rozwiązanie równania różniczkowego ma postać:

$$\psi = A \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x)$$

A, B -stałe dowolne, w ogólności różne w obszarach $x < 0$ oraz $x > L$

$$\psi = A \exp(\kappa x) + \tilde{B} \exp(-\kappa x)$$

dla $x < 0$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\psi = \tilde{A} \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x)$$

dla $x > L$

Powyżej określona funkcja falowa dążyłaby do ∞ dla $x \rightarrow \pm\infty$, co jest niedopuszczalne. Żeby zapobiec temu trzeba przyjąć iż

$$\tilde{B} = 0 \quad \text{oraz} \quad \tilde{A} = 0$$

W obszarze $x < 0$ zatem

$$\psi = \psi_1 = A \exp(\kappa x)$$

W obszarze $x > L$ zatem

$$\psi = \psi_3 = B \exp(-\kappa x)$$

Funkcja falowa wnika w głąb barier, ale maleje wykładniczo ze wzrostem odległości od studni.

Gdy $V_0 \rightarrow \infty$ to $\kappa \rightarrow \infty$ czyli funkcja falowa w obszarze bariery o nieskończonej wysokości jest tożsamościowo równa zeru (funkcja falowa nie wnika w obszar barier o nieskończonej wysokości)

Ostatecznie

$$\psi = \psi_1 = A \exp(\kappa x)$$

dla $x < 0$

$$\psi = \psi_2 = C \sin(kx) + D \cos(kx)$$

dla $0 < x < L$

$$\psi = \psi_3 = B \exp(-\kappa x)$$

dla $x > L$

$$\frac{d\psi_1}{dx} = \kappa A \exp(\kappa x)$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = k[C \cos(kx) - D \sin(kx)]$$

$$\frac{d\psi_3}{dx} = -\kappa B \exp(-\kappa x)$$

Ponieważ w punktach nieciągłości potencjału $x=0$ i $x=L$ zmiana potencjału jest skończona to w punktach tych ciągła musi być zarówno funkcja ψ jak i jej pochodna $d\psi/dx$. Równania ciągłości w punktach $x=0$ oraz $x=L$ przyjmują postać:

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$$



$$A = D$$

$$\psi_2(x=L) = \psi_3(x=L)$$



$$C \sin(kL) + D \cos(kL) = B \exp(-\kappa L)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}(x=0) = \frac{d\psi_2}{dx}(x=0)$$



$$\kappa A = kC$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}(x=L) = \frac{d\psi_3}{dx}(x=L)$$



$$k[C \cos(kL) - D \sin(kL)] = -\kappa B \exp(-\kappa L)$$

$$A = D \Rightarrow A - D = 0$$

$$C \sin(kL) + D \cos(kL) = B \exp(-\kappa L) \Rightarrow C \sin(kL) + D \cos(kL) - B \exp(-\kappa L) = 0$$

$$\kappa A = kC \Rightarrow \kappa A - kC = 0$$

$$k[C \cos(kL) - D \sin(kL)] = -\kappa B \exp(-\kappa L) \Rightarrow k[C \cos(kL) - D \sin(kL)] + \kappa B \exp(-\kappa L) = 0$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \sin(kL) & \cos(kL) & -\exp(-\kappa L) \\ \kappa & -k & 0 & 0 \\ 0 & k \cos(kL) & -k \sin(kL) & \kappa \exp(-\kappa L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A \\ C \\ D \\ B \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A \\ C \\ D \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}A + a_{12}C + a_{13}D + a_{14}B \\ a_{21}A + a_{22}C + a_{23}D + a_{24}B \\ a_{31}A + a_{32}C + a_{33}D + a_{34}B \\ a_{41}A + a_{42}C + a_{43}D + a_{44}B \end{bmatrix}$$

Znalezione równania stanowią jednorodny układ równań na współczynniki A, C, D, B który można zapisać w postaci macierzowej

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \sin(kL) & \cos(kL) & -\exp(-\kappa L) \\ \kappa & -k & 0 & 0 \\ 0 & k \cos(kL) & -k \sin(kL) & \kappa \exp(-\kappa L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A \\ C \\ D \\ B \end{bmatrix} = 0 \quad (*)$$

Warunkiem istnienia jego niezerowego rozwiązania jest zerowanie się wyznacznika macierzy kwadratowej złożonej ze współczynników występujących w powyższych równaniach co prowadzi do uwikłanego równania na dozwolone dyskretne wartości energii cząstki, które można rozwiązać graficznie lub numerycznie

$$\kappa^2 - k^2 + 2\kappa k \operatorname{ctg}(kL) = 0$$

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

$$\kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$kL = n\pi - 2\operatorname{arctg}\left(\frac{k}{\kappa}\right)$$

n -liczba naturalna

Układ równań (*) dla znalezionych uprzednio dozwolonych energii cząstki pozwala na wyrażenie wartości trzech współczynników poprzez czwarty, którego wartość z dokładnością do stałej o module 1 można określić z warunku normalizacji funkcji falowej, co pozwala na określenie unormowanej postaci funkcji falowej.

Sposób dojścia do równania

$$kL = n\pi - 2\operatorname{arctg}\left(\frac{k}{\kappa}\right)$$

$$\kappa^2 - k^2 + 2\kappa k \operatorname{ctg}(kL) = 0 \Rightarrow \operatorname{ctg}(kL) = -\frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \Rightarrow \operatorname{tg}(kL) = -\frac{2\kappa k}{\kappa^2 - k^2}$$

$$kL = \tilde{n}\pi + \operatorname{arctg}\left(-\frac{2\kappa k}{\kappa^2 - k^2}\right) = \tilde{n}\pi - \operatorname{arctg}\left(\frac{2\kappa k}{\kappa^2 - k^2}\right) = \tilde{n}\pi - \operatorname{arctg}\left(\frac{2\frac{k}{\kappa}}{1 - \left(\frac{k}{\kappa}\right)^2}\right)$$

$\tilde{n}$ -liczba całkowita

Ponieważ

$$2\operatorname{arctg}(x) = \begin{cases} \operatorname{arctg}\left(\frac{2x}{1-x^2}\right) & \text{gdy } |x| < 1 \\ \operatorname{arctg}\left(\frac{2x}{1-x^2}\right) + \pi & \text{gdy } x > 1 \\ \operatorname{arctg}\left(\frac{2x}{1-x^2}\right) - \pi & \text{gdy } x < -1 \end{cases}$$

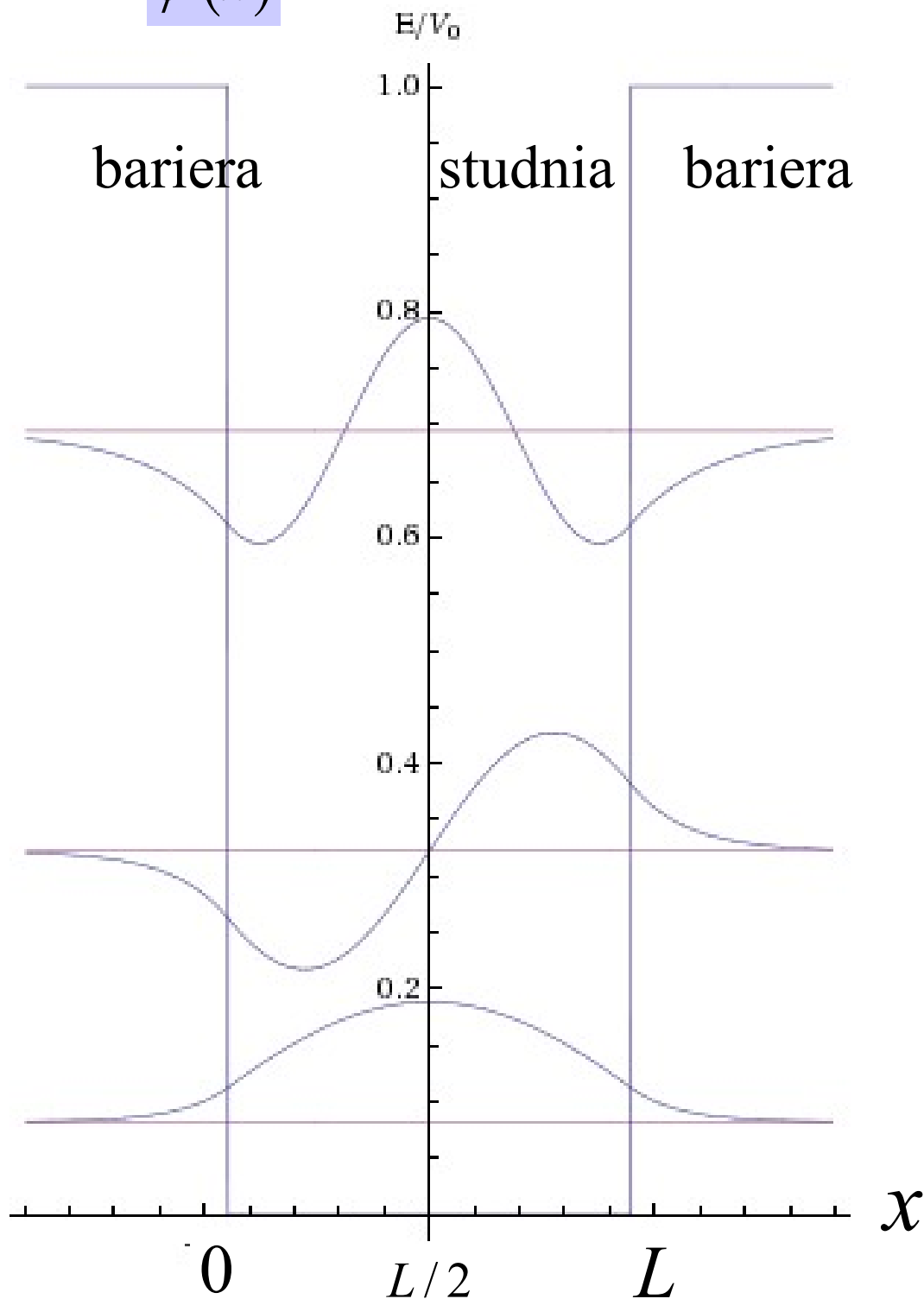
$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

to równanie to jest równoważne równaniu

$$kL = n\pi - 2\operatorname{arctg}\left(\frac{k}{\kappa}\right)$$

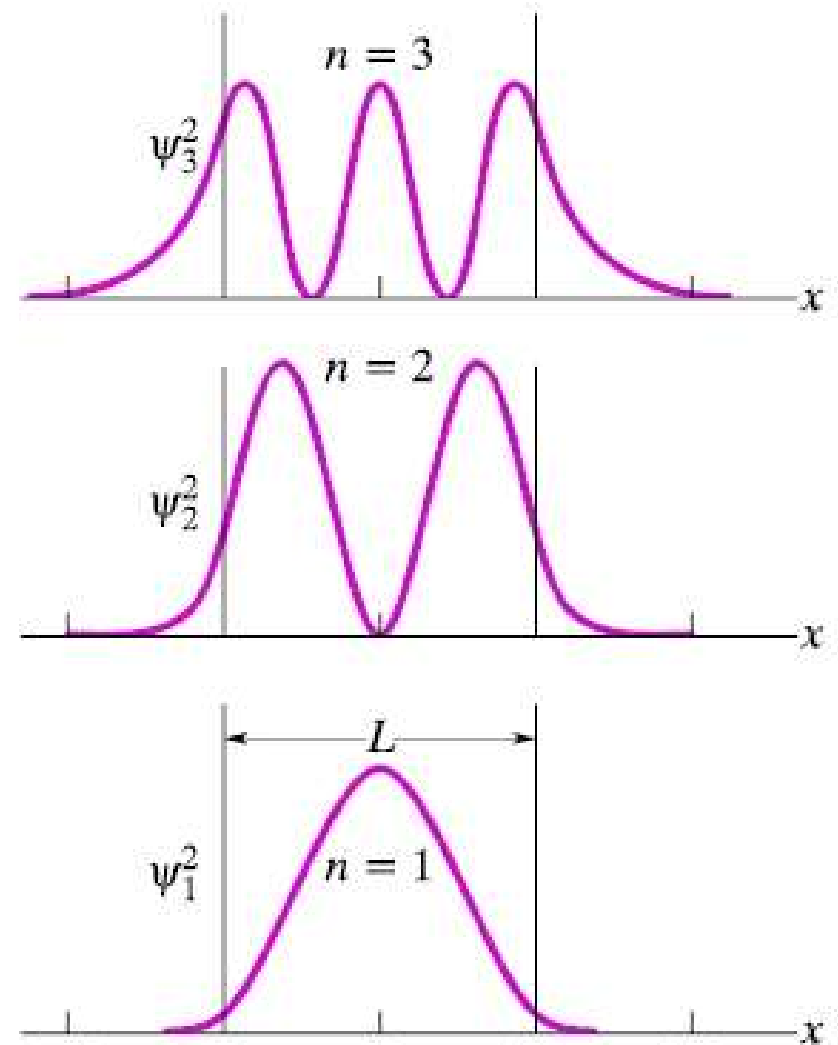
n -liczba całkowita

Równanie powyższe nie ma rozwiązania dla $n < 0$. Gdy $n = 0$ to $k = 0$, ale wówczas funkcja falowa jest równa tożsamościowo zeru i nie opisuje żadnej cząstki, a zatem do indeksowania stanów cząstki kwantowej można wykorzystać liczbę kwantową n będącą liczbą naturalną dodatnią

$\psi(x)$ 

Przykładowe funkcje falowe i odpowiadające im gęstości prawdopodobieństwa $\rho(x) = \Psi^* \Psi = \psi^* \psi$ dla cząstki w symetrycznej studni o skończonej wysokości barier

bariera studnia bariera



Własności cząstki znajdującej się w skończonej studni potencjału

- 1) Istnieje skończone prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarze poza studnią potencjału czyli w obszarze barier w którym klasycznie cząstka nie mogła by przebywać gdyż posiadała by ujemną energię kinetyczną. Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w barierze o określonej wysokości rośnie ze wzrostem energii cząstki. Gęstość prawdopodobieństwa maleje wykładniczo w miarę oddalania się od granic studni.
- 2) W obszarze studni gęstość prawdopodobieństwa nie jest opisana funkcją stałą (w przeciwieństwie do przewidywań mechaniki klasycznej) .
- 3) Energia cząstki może przyjmować tylko dyskretne wartości. Minimalna energia jest większa od zera (oba wnioski są sprzeczne z przewidywaniami mechaniki klasycznej).
- 4) W studni symetrycznej istnieje zawsze stan podstawowy o najniższej energii mniejszej od wysokości bariery opisany symetryczną funkcją falową względem punktu $x=L/2$. Jego energia rośnie ze wzrostem wysokości barier. W stanie tym gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki osiąga maksimum w środku studni.
- 5) Gdy występują w takiej studni stany o wyższych energiach to kolejne stany są opisane na zmianę funkcjami antysymetrycznymi i symetrycznymi względem punktu $x=L/2$. W takich stanach gęstość prawdopodobieństwa w obszarze studni spada do zera w pewnych punktach, których ilość wzrasta ze wzrostem energii cząstki. Ze wzrostem tej energii maleje odległość między punktami odpowiadającymi maksimum i minimum tej gęstości (gęstość po uśrednieniu w stanach w których ta odległość staje się bardzo mała można opisać funkcją stałą co jest zgodne z przewidywaniami mechaniki klasycznej)
- 6) Ze wzrostem szerokości studni a w mniejszym stopniu również ze zmniejszaniem się jej głębokości maleje najniższa dozwolona energia cząstki jak i odstęp pomiędzy dozwolonymi kolejnymi wartościami energii cząstki.

Cząstka kwantowa w nieskończonej trójwymiarowej studni potencjału

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + V\psi = E\psi$$

$$V = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 < x < L_x \text{ oraz } 0 < y < L_y \text{ oraz } 0 < z < L_z \\ \infty & \text{poza obszarem studni} \end{cases}$$

Poza obszarem studni

$$\psi = 0$$

W obszarze studni

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] = E \psi$$

Rozwiązanie poszukujemy w postaci

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z)$$

Można łatwo pokazać (np. stosując metodę rozdzielania zmiennych) iż równanie rozważane jest równoważne 3 równaniom rozważanym przy opisie studni jednowymiarowej

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} = E_x \psi_x$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} = E_y \psi_y$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} = E_z \psi_z$$

Przy czym musi zachodzić relacja określająca dodatnią energię cząstki $E = E_x + E_y + E_z$

Rozwiązanie tego równania spełniające warunki ciągłości funkcji falowej na

granicy studni $\psi(x=0) = \psi(x=L_x) = \psi(y=0) = \psi(y=L_y) = \psi(z=0) = \psi(z=L_z) = 0$

można zapisać np. w postaci $\psi(x, y, z) = C \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$

przy czym $k_x = \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}}$ $k_y = \sqrt{\frac{2mE_y}{\hbar^2}}$ $k_z = \sqrt{\frac{2mE_z}{\hbar^2}}$ oraz $k_x = \frac{\pi n_x}{L_x}$ $k_y = \frac{\pi n_y}{L_y}$ $k_z = \frac{\pi n_z}{L_z}$

A zatem dozwolone energie cząstki są równe

$$E = E_{n_x, n_y, n_z} = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m} [k_x^2 + k_y^2 + k_z^2] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

$$n_x = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right] = E_x + E_y + E_z$$

$$n_x = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Gdy ruch cząstki ograniczony jest we wszystkich kierunkach to mamy do czynienia z pełną kwantyzacją energii, która może przyjmować tylko dyskretne wartości.

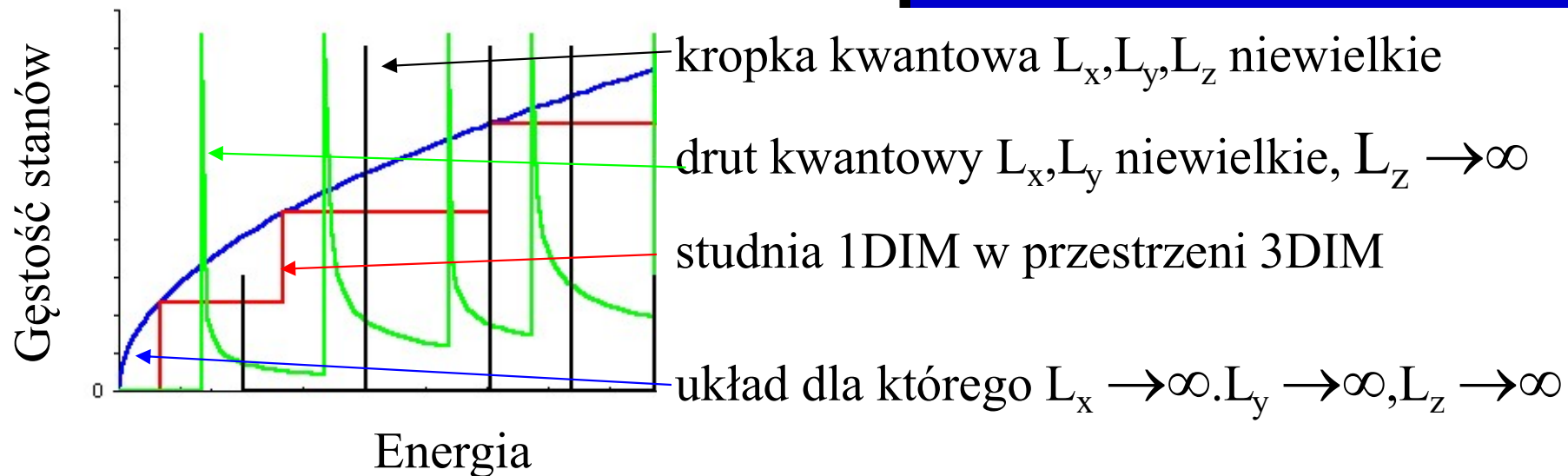
Gdy $L_y, L_z \rightarrow \infty$, to efektywnie mamy do czynienia tylko z kwantowaniem energii cząstki w ruchu wzdłuż osi Ox. Odległości pomiędzy dozwolonymi energiami związanymi z ruchem cząstki wzdłuż osi Oy i Oz stają się bardzo małe. W rozpatrywanym układzie ze względu na to iż energia $E_x > 0$ to całkowita energia cząstki nie może być równa zeru. Cząstka może przyjmować za to w zasadzie wszystkie energie wyższe od stanu o najniższej energii, gdyż odległości między dozwolonymi wartościami energii stają się bardzo małe. Dla opisu takich układów o quasi-dyskretnym widmie energetycznym wprowadza się funkcje gęstości stanów.

Funkcja gęstości stanów $g(E)$ pomnożona przez nieskończenie wąski przedział energii dE określa ile jest stanów które mogą zajmować cząstki w przedziale energii $(E, E+dE)$ w jednostce objętości układu.

Jej kształt zależy od tego czy efektywnie ruch cząstki jest ograniczony w jednym kierunku, dwóch kierunkach czy też w ogóle nie jest ograniczony w przestrzeni gdy

$$L_x, L_y, L_z \rightarrow \infty$$

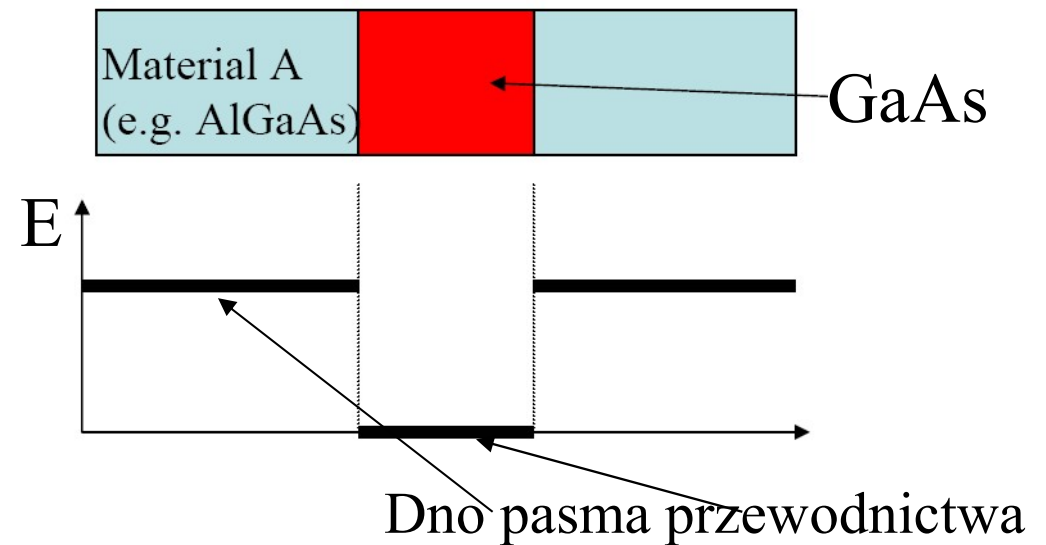
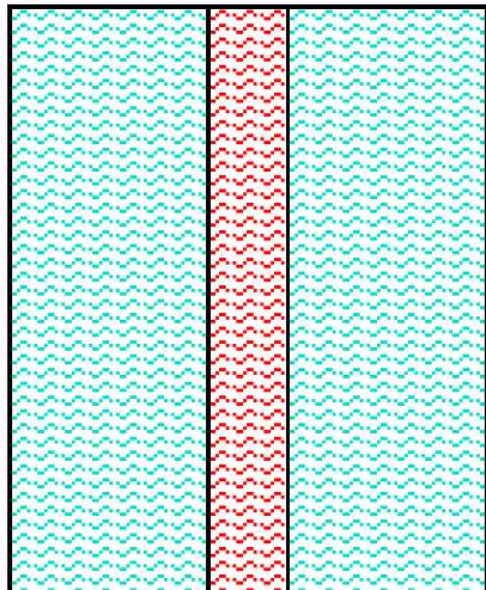
W układzie w którym ruch cząstki jest ograniczony w jednym kierunku obserwuje się skokowy wzrost funkcji gęstości stanów przy przekraczaniu w skali energii poziomu podstawowego w studni. W układzie w którym ruch cząstki nie jest efektywnie ograniczony w żadnym kierunku gęstość stanów dla najniższych energii jest znacznie mniejsza (jest proporcjonalna do pierwiastka kwadratowego z energii). W studni mamy większą gęstość stanów dla energii odpowiadającej stanowi podstawowemu o najniższej energii.



Z kwantowaniem energii cząstek związaną z ich ruchem w jednym kierunku (powstaniem studni 1DIM) mamy do czynienia w przypadku cienkich warstw metalicznych lub heterostruktur złożonych z cienkich warstw utworzonych z różnych półprzewodników, gdzie skwantowana jest energia związana z ruchem cząstki w kierunku prostopadłym do tych warstw.

Heterostruktury są utworzone z warstw wykonanych z różnych półprzewodników o różnej przerwie energetycznej

(GaAl)As GaAs (GaAl)As



Niższe położenie dna pasma przewodnictwa w GaAs niż AlGaAs powoduje to iż w GaAs pojawiają się dyskretne poziomy dla energii elektronów związanej z ich ruchem w kierunku prostopadłym do interfejsów. Kwantowanie to w paśmie przewodnictwa występuje dla energii mniejszych od dna pasma przewodnictwa w AlGaAs (warstwy GaAs stają się studniami kwantowymi)

Heterostruktury można wytwarzać np. przy pomocy metody MBE (epitaksji z wiązek molekularnych) lub MOCVD (osadzanie warstw na powierzchni materiałów poprzez stosowanie związków metaloorganicznych w formie gazowej).

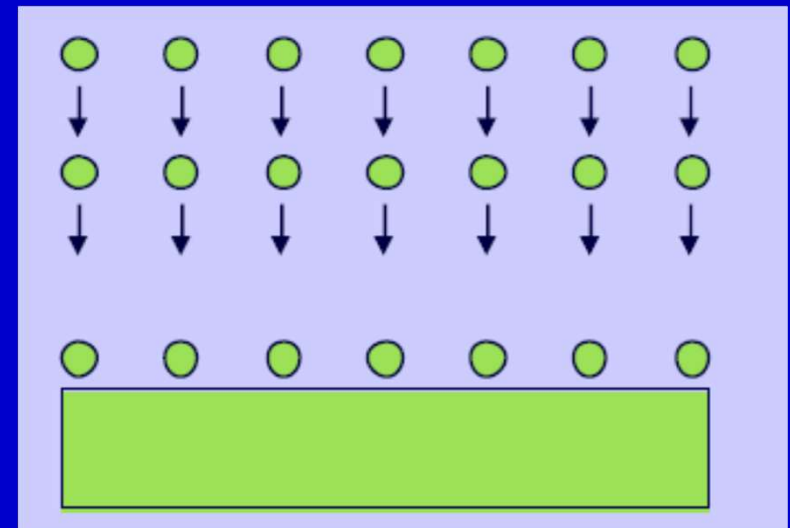
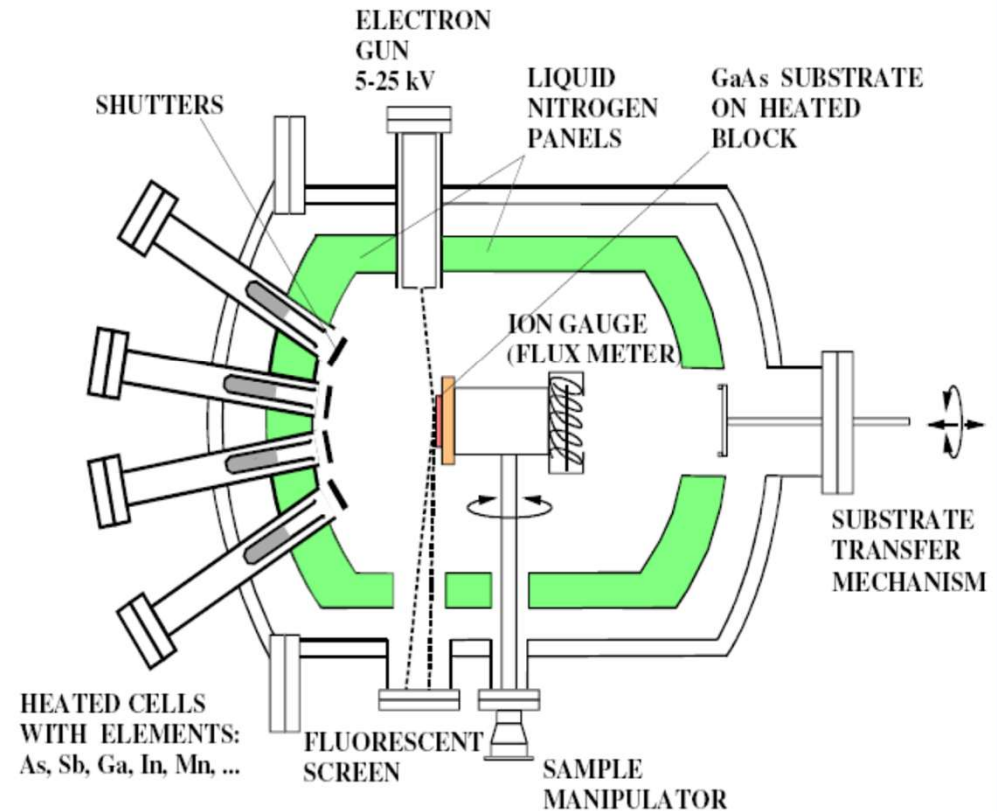
Epitaksja - MBE

Reaktor MBE

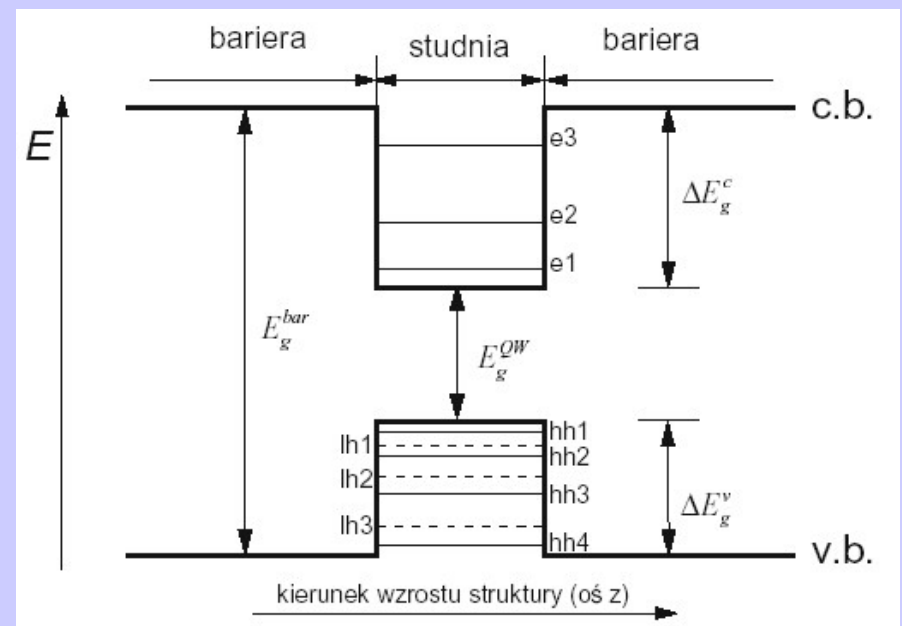
Rozgrzaną płytkę podłoża naświetla się w wysokiej próżni (10^{-8} Pa) wiązkami molekularnymi, utworzonymi z par cząsteczek lub atomów pochodzących ze źródeł (komórek efuzyjnych), gdzie wytwarza się je przy pomocy grzania. Istnieje możliwość regulowania rodzaju i natężenia użytych wiązek co stwarza możliwość regulowania składu i grubości powstałych warstw. Podłoże ma temperaturę 500, 600 °C żeby umożliwić migrację termiczną atomów. Zbudowane jest z kryształu o stałej sieci zbliżonej do stałej sieci hodowanej warstwy krystalicznej. Reaktory MBE mają wbudowane spektroskopy rentgenowskie czy też dyfraktometry elektronowe, dzięki którym można na bieżąco kontrolować wzrost warstwy.

Wadą procesu jest długi czas wzrostu warstwy: 0.5 - 1 $\mu\text{m/h}$. ale za to istnieje możliwość otrzymywania heterostruktur o grubościach warstw określonych kryształów rzędu pojedynczych warstw atomowych oraz sterowania domieszkowaniem heterostruktur.

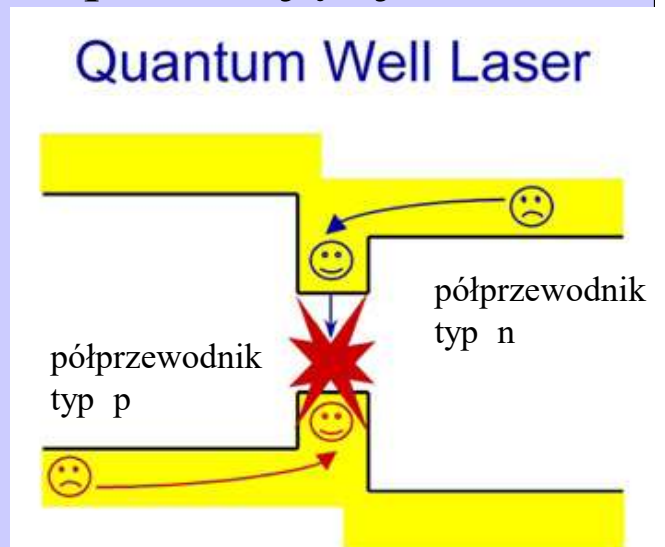
ULTRA-HIGH VACUUM CHAMBER
 10^{-10} - 10^{-9} Tr



Z kwantowaniem energii możemy mieć do czynienia nie tylko w przypadku elektronów w paśmie przewodnictwa ale także dziur w paśmie walencyjnym. Przy przechodzeniu elektronów między poziomami w paśmie przewodnictwa i w paśmie walencyjnym (rekombinacji pary elektron–dziura) może dojść do emisji promieniowania elektromagnetycznego w tym światła.



Długość emitowanej fali zależy od różnicy energii poziomów energetycznych i można ją regulować zmieniając szerokość studni kwantowej a częściowo również wysokość barier poprzez zmianę składu chemicznego materiałów tworzących bariery. Efekt ten wykorzystuje się przy konstruowaniu laserów opartych na studniach. W analizowanych heterostrukturach mamy większą gęstość stanów dla energii odpowiadającej stanowi podstawowemu w studni 1DIM, ponadto elektronom tym trudniej jest studnie opuścić. Ułatwia to osiągnięcie stanu inwersji obsadzeń w laserach półprzewodnikowych opartych na studniach kwantowych. Dzięki temu prąd potrzebny do zainicjowania akcji laserowej w laserach opartych na studniach może być zwykle mniejszy niż w innych typach laserów półprzewodnikowych. Natężenie prądu może być rzędu 10-20 mA.



Drut kwantowy

Układ w którym ruch cząstek jest ograniczony w dwóch kierunkach .
Mamy tu do czynienia z efektywnym kwantowaniem energii ruchu cząstki w dwóch kierunkach.

Kropka kwantowa

Z pełną efektywną kwantyzacją energii cząstki mamy do czynienia w kropce kwantowej zwanej sztucznym atomem czyli w układzie w którym ruch cząstek jest ograniczony we wszystkich kierunkach.

Kropki te możemy wytwarzać np.

- a) przy pomocy metod litograficznych, którym poddaje się strukturę warstwową
- b) elektrostatycznie przy pomocy dodatkowych elektrod wytwarzających pole elektryczne ograniczające ruch cząstek naładowanych
- c) wymuszając wzrost kryształu w postaci wysp. W przypadku kropek samoorganizujących się wzrost taki następuje podczas próby tworzenia przy pomocy metody MBE warstwy krystalicznej na podłożu krystalicznym różniącym się stałą sieci (odległością pomiędzy sąsiednimi atomami) od hodowanego kryształu.
- d) wywołania dyfuzji atomów w strukturach warstwowych z barier potencjału do odpowiednich obszarów studni w celu ograniczenia rozmiarów studni
- e) wytrącania półprzewodnikowych kryształów koloidalnych o wymiarach nanometrycznych z roztworu odpowiedniego materiału w cieczy

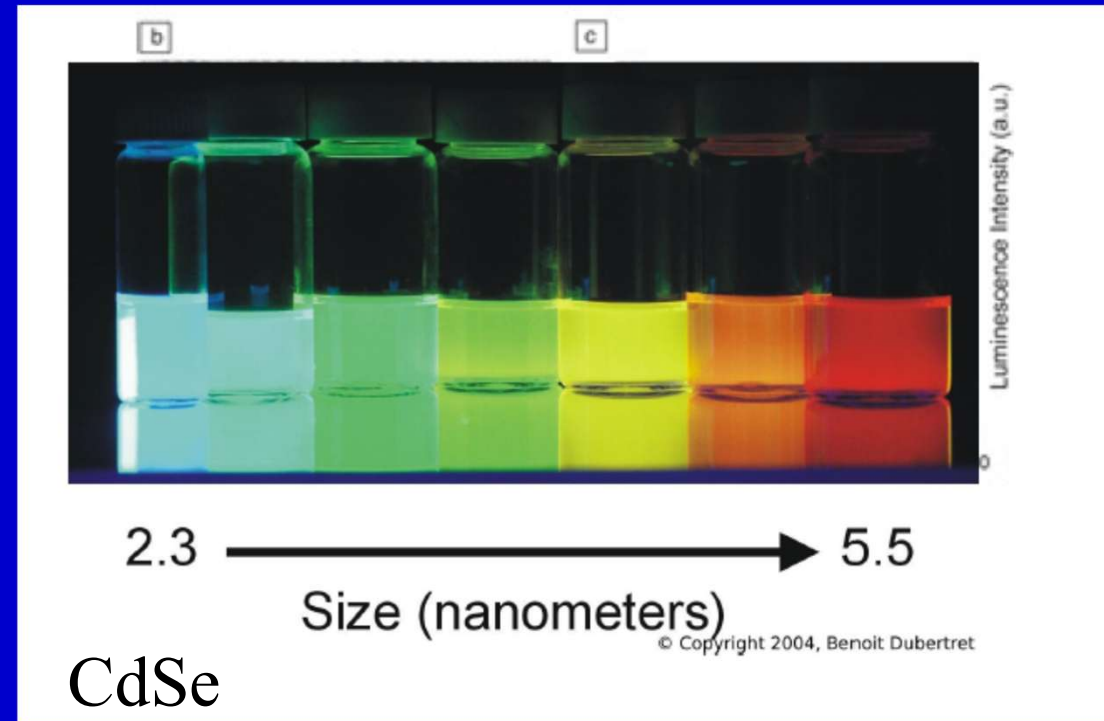
Potencjalne wybrane zastosowania kropek kwantowych

a) lasery i diody świecące emitujące promieniowanie o długości fali zależnej od rozmiaru kropki (częstotliwość promieniowania rośnie wraz ze zmniejszaniem rozmiarów kropki na skutek wzrostu odległości w skali energii pomiędzy poziomami energetycznymi)

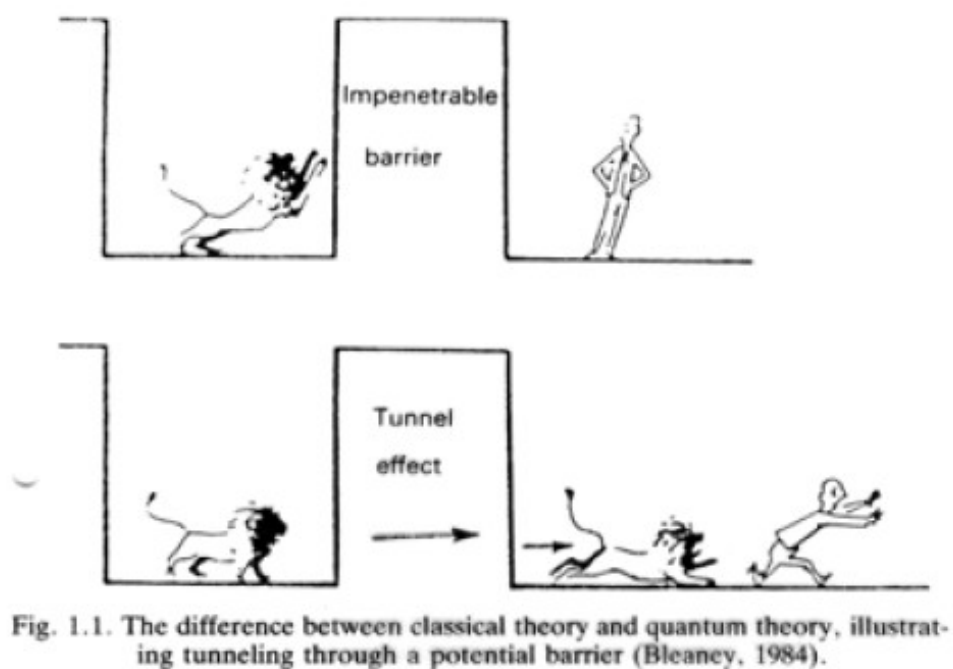
b) komputery kwantowe

c) markery służące do określania ruchu pewnych obiektów w organizmach żywych oraz nośniki substancji dostarczanych do wybranych komórek organizmów żywych

d) tranzystory jednoelektronowe



Efekt tunelowy

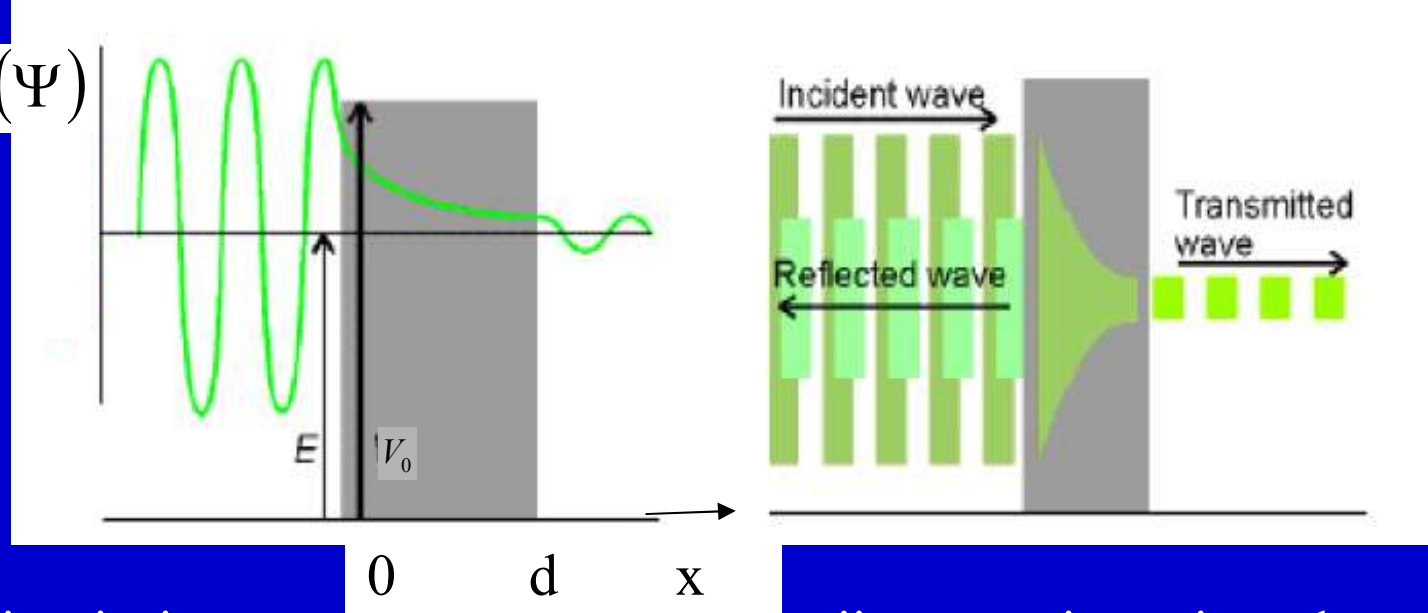


Cząstka klasyczna nie może przejść przez barierę, której wysokość przewyższa jej energię $E < V_0$ gdyż nie może ona przebywać w obszarze bariery. W myśl klasycznej mechaniki **prawdopodobieństwo przeniknięcia przez barierę takiej cząstki jest równe zeru.**

Fala materii związana z cząstką kwantową wnika w obszar bariery potencjału i może osiągnąć przeciwną granicę bariery.

Mechanika kwantowa dopuszcza sytuację, że cząstka o energii mniejszej od wysokości bariery potencjału może przedostać się do obszaru leżącego na prawo od bariery o ile masa cząstki oraz wysokość i szerokość bariery jest odpowiednio mała.

Prawdopodobieństwo przejścia cząstki kwantowej przez barierę jest różne od zera

$\text{Re}(\Psi)$ 

Fale materii opisujące cząstki o ustalonej energii poruszające się w lewo lub w prawo w obszarze leżącym na lewo od bariery ($x < 0$) oraz poruszające się w prawo w obszarze na prawo od bariery ($x > d$) wyrażają odpowiednio dobrane do powyższych przypadków zespolone harmoniczne fale płaskie. W obszarze bariery o szerokości d i wysokości V_0 z cząstką o energii $E < V_0$ wiążemy funkcję falową malejącą w przybliżeniu wykładniczo ze wzrostem x . Gdy wartość tej funkcji jest różna od zera dla $x = d$ to łączy się ona płynnie z falą płaską w obszarze $x > d$ co gwarantuje możliwość zaistnienia efektu tunelowego.

To że cząstka może przebywać w stanie o energii $E < V_0$ można też rozumieć jako przejaw zasady nieoznaczoności Heisenberga dla energii i czasu gdyż czas przebywania cząstki w barierze jest skończony (czasu tego, który może być rzędu ps nie można określić posługując się do opisu cząstek fal płaskich, jak to czynimy na wykładzie).

Przyjęty tu opis pozwala na określenie współczynników transmisji i odbicia określających prawdopodobieństwa tego iż cząstka o określonej energii przejdzie (odbije się) od bariery.

Współczynnik transmisji definiujemy jako

$$T = \frac{|j_t(x \rightarrow \infty)|}{|j_p(x \rightarrow -\infty)|}$$

Współczynnik odbicia definiujemy jako

$$R = \frac{|j_r(x \rightarrow -\infty)|}{|j_p(x \rightarrow -\infty)|}$$

gdzie

j_p -oznacza gęstość prądu prawdopodobieństwa dla fali opisującej cząstkę padającą z lewej strony na barierę potencjału poruszającą się w prawo w obszarze położonym na lewo od bariery ($x < 0$).

j_r -oznacza gęstość prądu prawdopodobieństwa dla fali opisującej cząstkę odbitą od bariery poruszającą się w lewo w obszarze o $x < 0$.

j_t -oznacza gęstość prądu prawdopodobieństwa dla fali opisującej cząstkę, która przekroczyła barierę poruszającą się w prawo w obszarze o $x > d$.

Zawsze zachodzi $R + T = 1$ co wyraża fakt iż suma R - prawdopodobieństwa tego iż cząstka odbije się i wróci do obszaru $x < 0$ oraz T - prawdopodobieństwa tego, iż cząstka przejdzie do obszaru $x > d$ musi być równa 1.

Przy rozpatrywaniu strumienia cząstek padających opisywanych jednakowymi funkcjami falowymi T określa stosunek ilość cząstek przechodzących przez barierę potencjału do ilości cząstek padających na barierę. R określa stosunek ilości cząstek odbitych do ilości cząstek padających.

Gęstość prądu prawdopodobieństwa

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t) \right)$$

$$\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right] \quad \text{-gradient}$$

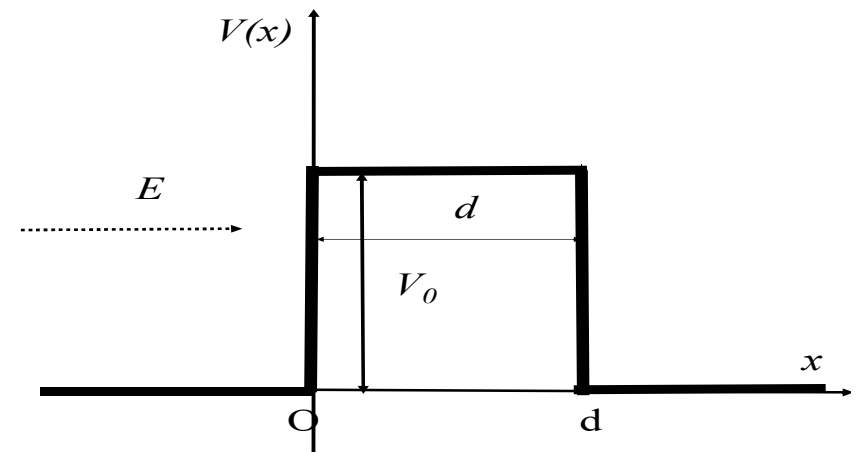
W przestrzeni jednowymiarowej

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \right)$$

Ψ^* -
funkcja
zespolona
sprzężona
do funkcji
falowej

Gęstość prądu prawdopodobieństwa jest wektorem i określa prędkość przepływu gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni. Np. moduł składowej x-owej tego wektora w danym punkcie jest wielkością proporcjonalną do prawdopodobieństwa transmisji cząstki przez infinitezymalnie małą płaską powierzchnię na której leży ten punkt, prostopadłą do osi Ox, w jednostce czasu. Znak tej składowej związany jest z kierunkiem transmisji cząstki. Dodatni znak oznacza iż transmisja następuje w kierunku wzrastających wartości x

Rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki o ustalonej energii $E > 0$ w obszarze $x < 0$ (na lewo od bariery) w którym $V(x) = 0$ ma postać



$$\Psi_1(x, t) = A \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) + B \exp(-ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = \Psi_{1,p}(x, t) + \Psi_{1,r}(x, t)$$

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

$$\Psi_{1,p}(x, t) = A \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

opisuje falę biegnącą w prawo (padającą na barierę)

Odpowiada jej gęstość prądu prawdopodobieństwa

$$j_{1,p} = \frac{\hbar}{2mi} [2ikA^* A] = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

$$\Psi_{1,r}(x, t) = B \exp(-ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

opisuje falę biegnącą w lewo (odbitą od bariery)

Odpowiada jej gęstość prądu prawdopodobieństwa

$$j_{1,r} = \frac{\hbar}{2mi} [-2ikB^* B] = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2$$

Rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki o ustalonej energii $E > 0$ w obszarze $x > d$ (na prawo od bariery) w którym $V(x) = 0$ ma postać

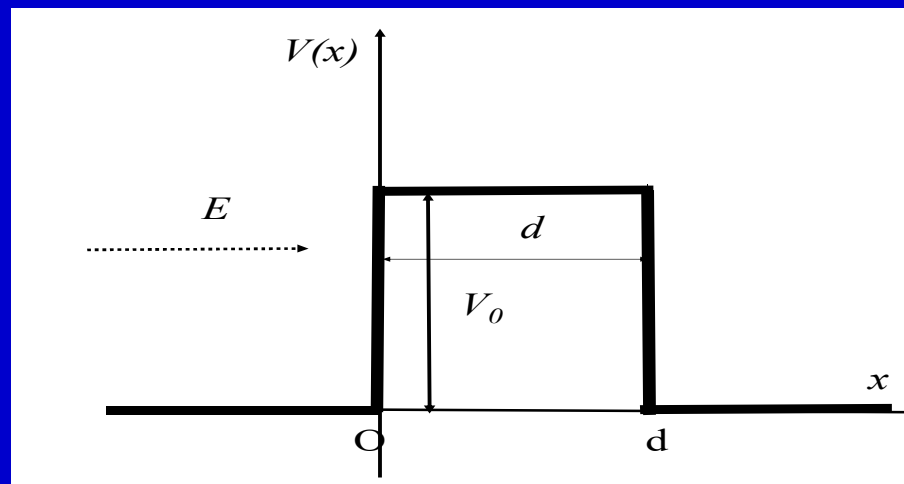
$$\Psi_3(x, t) = F \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) + G \exp(-ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) =$$
$$= \Psi_{3,t}(x, t) + \Psi_{3,r}(x, t)$$
$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Ponieważ funkcja falowa ma opisywać falę biegnącą w prawo (w obszarze leżącym na prawo od bariery cząstka nie może ulec odbiciu) to nie może zawierać wyrazu opisującego falę biegnącą w lewo. Z tego powodu przyjmujemy iż $G=0$ i

$$\Psi_3(x, t) = \Psi_{3,t}(x, t) = F \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

Gęstość prądu prawdopodobieństwa dla fali przechodzącej

$$j_{3t} = \frac{\hbar k}{m} |F|^2$$



Rozwiązanie równania Schrödingera dla cząstki o ustalonej energii $E < V_0$ w obszarze bariery $0 < x < d$ (w którym $V(x) = V_0 > E$) ma postać

$$\Psi_2(x, t) = [C \exp(\kappa x) + D \exp(-\kappa x)] \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Współczynnik C nie musi być równy zero gdyż szerokość bariery jest skończona i funkcja falowa w żadnym punkcie w barierze nie osiąga wartości nieskończonej

$$\Psi_1 = \Psi_{1,p} + \Psi_{1,r} = A \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) + B \exp(-ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad x < 0$$

$$\Psi_2 = [C \exp(\kappa x) + D \exp(-\kappa x)] \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad 0 < x < d$$

$$\Psi_3 = \Psi_{3,t} = F \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad x > d$$

Znaleziona funkcja falowa i jej pochodna po zmiennej x musi być ciągła w punktach $x=0$ oraz $x=d$, co prowadzi do układu czterech równań pozwalających na uzależnienie stałych B, C, D, F od stałej A

Współczynniki transmisji T i odbicia R

$$T = \frac{|j_{3t}|}{|j_{1p}|} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |F|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \left| \frac{F}{A} \right|^2$$

$$R = \frac{|j_{1r}|}{|j_{1p}|} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

Wyznaczenie współczynnika transmisji (dla osób zainteresowanych)

$$\Psi_1 = \Psi_{1,p} + \Psi_{1,r} = A \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) + B \exp(-ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad x < 0$$

$$\Psi_2 = [C \exp(\kappa x) + D \exp(-\kappa x)] \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad 0 < x < d$$

$$\Psi_3 = \Psi_{3,t} = F \exp(ikx) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad x > d$$

Warunki ciągłości funkcji falowej i jej pochodnej po zmiennej przestrzennej przyjmują postać

$$\Psi_1(x=0) = \Psi_2(x=0) \quad (A+B) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = (C+D) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (1)$$

$$\frac{d\Psi_1}{dx}(x=0) = \frac{d\Psi_2}{dx}(x=0) \quad ik(A-B) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = \kappa(C-D) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (2)$$

$$\Psi_2(x=d) = \Psi_3(x=d) \quad (C \exp(\kappa d) + D \exp(-\kappa d)) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = F \exp(ikd) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (3)$$

$$\frac{d\Psi_2}{dx}(x=d) = \frac{d\Psi_3}{dx}(x=d) \quad \kappa(C \exp(\kappa d) - D \exp(-\kappa d)) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = ikF \exp(ikd) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (4)$$

Po podzieleniu równań (1-4) przez czynnik $\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$ otrzymujemy układ równań

$$A + B = C + D \quad (1)$$

$$ik(A - B) = \kappa(C - D) \quad (2)$$

$$C \exp(\kappa d) + D \exp(-\kappa d) = F \exp(ikd) \quad (3)$$

$$\kappa(C \exp(\kappa d) - D \exp(-\kappa d)) = ikF \exp(ikd) \quad (4)$$

Dodając stronami równanie (1) pomnożone obustronnie przez ik oraz równanie (2) otrzymujemy $2ikA = (ik + \kappa)C + (ik - \kappa)D$

czyli

$$A = \frac{(ik + \kappa)}{2ik} C + \frac{(ik - \kappa)}{2ik} D \quad (5)$$

Dodając stronami równanie (3) pomnożone obustronnie przez κ oraz równanie (4) otrzymujemy $2\kappa \exp(\kappa d)C = (\kappa + ik)\exp(ikd)F$

czyli

$$C = \frac{(\kappa + ik)}{2\kappa} \exp(-\kappa d) \exp(ikd) F \quad (6)$$

Odejmując stronami od równania (3) pomnożonego obustronnie przez κ równanie (4) otrzymujemy $2\kappa \exp(-\kappa d)D = (\kappa - ik)\exp(ikd)F$

czyli

$$D = \frac{(\kappa - ik)}{2\kappa} \exp(\kappa d) \exp(ikd) F \quad (7)$$

Wstawiając równania (6) i (7) do (5) otrzymujemy

$$\frac{A}{F} = \frac{\exp(ikd)}{4ik\kappa} \left[(ik + \kappa)^2 \exp(-\kappa d) - (ik - \kappa)^2 \exp(\kappa d) \right].$$

$$\frac{A}{F} = \frac{\exp(ikd)}{4ik\kappa} \left[(ik + \kappa)^2 \exp(-\kappa d) - (ik - \kappa)^2 \exp(\kappa d) \right].$$

$$\frac{A}{F} = \frac{\exp(ikd)}{4ik\kappa} \left[(\kappa^2 - k^2) [\exp(-\kappa d) - \exp(\kappa d)] + 2ik\kappa [\exp(-\kappa d) + \exp(\kappa d)] \right]$$

Ponieważ

$$\exp(x) + \exp(-x) = 2 \cosh(x)$$

oraz

$$\exp(x) - \exp(-x) = 2 \sinh(x)$$

to

$$\frac{A}{F} = \frac{\exp(ikd)}{2ik\kappa} \left[-(\kappa^2 - k^2) \sinh(\kappa d) + 2i\kappa k \cosh(\kappa d) \right]$$

$$\frac{F}{A} = 2ik\kappa \exp(-ikd) \left[2i\kappa k \cosh(\kappa d) - (\kappa^2 - k^2) \sinh(\kappa d) \right]^{-1} \quad (8)$$

Współczynnik transmisji jest równy

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 \kappa^2}{4\kappa^2 k^2 \cosh^2(\kappa d) + (\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2(\kappa d)}$$

Współczynnik transmisji

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 \kappa^2}{4\kappa^2 k^2 \cosh^2(\kappa d) + (\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2(\kappa d)}$$

$$\cosh^2(x) = 1 + \sinh^2(x)$$

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 \kappa^2}{4\kappa^2 k^2 + (\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2(\kappa d)}$$

Współczynnik odbicia

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1 - T = \frac{(\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2(\kappa d)}{4\kappa^2 k^2 + (\kappa^2 + k^2)^2 \sinh^2(\kappa d)}$$

$$\cosh(x) = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$$

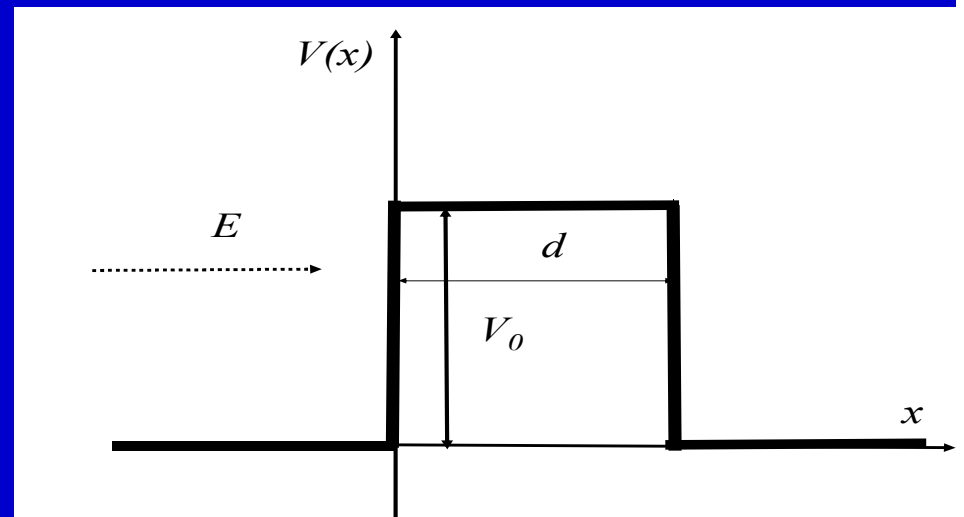
$$\sinh(x) = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x})$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

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

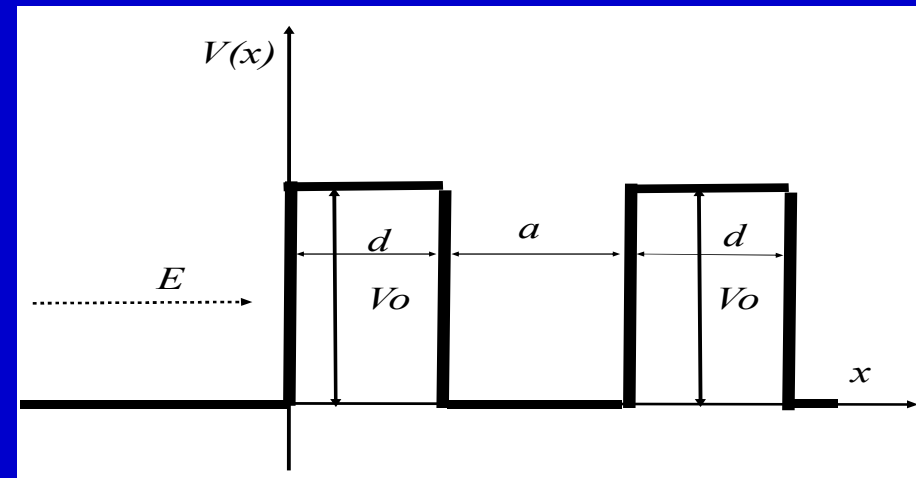
$$\kappa d \gg 1 \Rightarrow T \approx \frac{16k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} \exp(-2\kappa d)$$

Gdy bariera nie jest bardzo wąska to współczynnik transmisji dla cząstki o $E < V_0$ maleje w przybliżeniu wykładniczo ze wzrostem grubości bariery

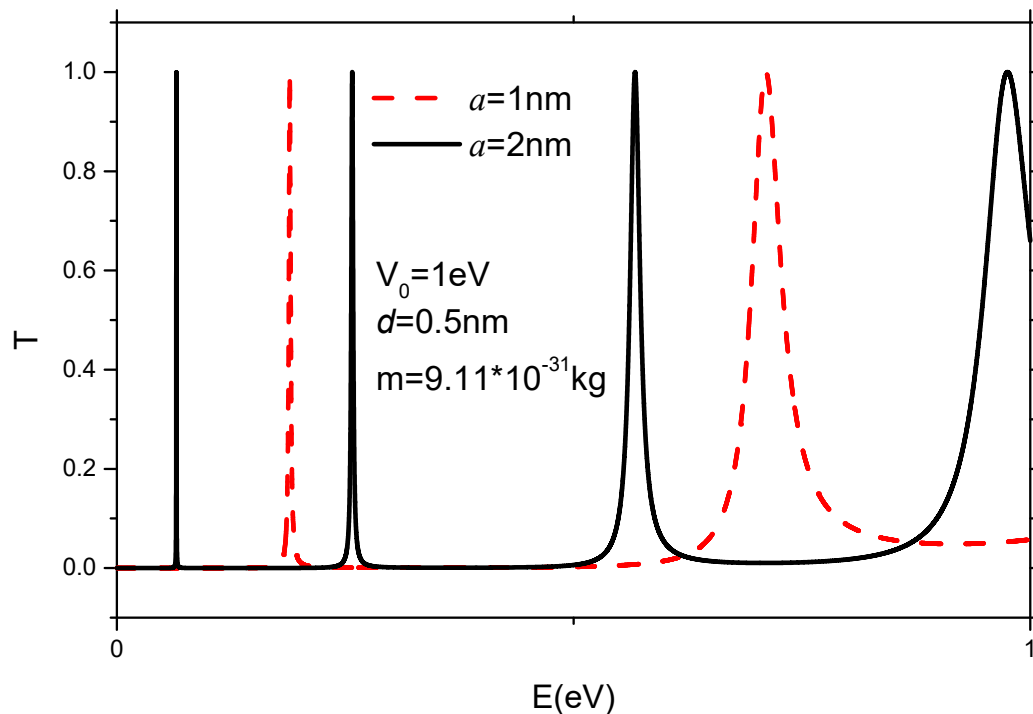


Współczynnik transmisji maleje także w przybliżeniu wykładniczo ze wzrostem wysokości bariery i wzrostem masy cząstki a rośnie ze wzrostem jej energii.

W przypadku tunelowania przez pojedynczą barierę gdy $E < V_0$ współczynnik transmisji jest zawsze mniejszy od 1. Uzyskanie współczynnika transmisji równego $T=1$ jest możliwe w przypadku tunelowania przez podwójną barierę potencjału



$$T = \left\{ 1 + \left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right)^2 \sinh^2(\kappa d) \left[\cos(ka) \cosh(\kappa d) + \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right) \sin(ka) \sinh(\kappa d) \right]^2 \right\}^{-1}$$



$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

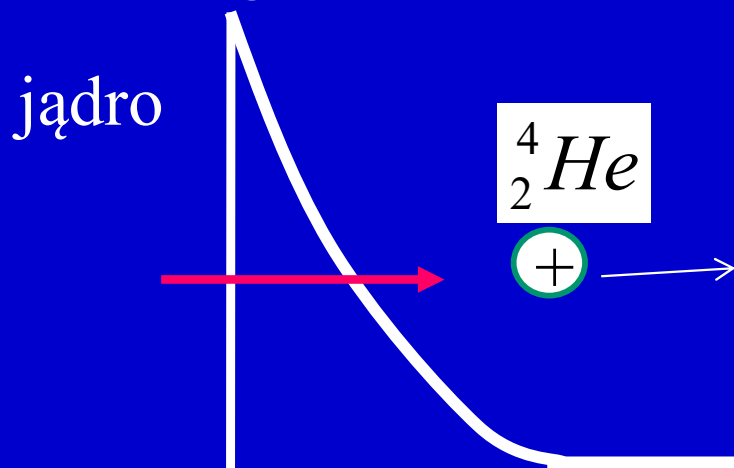
$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Tunelowanie rezonansowe z $T=1$ występuje dla energii bliskich tym jakie posiadać by mogła cząstka umieszczona w studni potencjału pomiędzy barierami

Efekt tunelowy w fizyce jądrowej

Efekt tunelowania tłumaczy możliwość wydostania się cząstki α (podwójnie zjonizowanego atomu helu) z jądra w trakcie przemiany jądrowej α (G. Gamow 1928). Szacuje się iż wysokość bariery potencjału wynikającej z oddziaływania kolumbowskiego cząstki z jądrem jest dla ^{238}U nie mniejsza niż 8,8 MeV, podczas gdy energia cząstek α opuszczających takie jądro może wynosić tylko 4,2 MeV. Wynika z tego iż zgodnie z klasyczną mechaniką cząstki te nie mogły by opuścić jądra. Mogą one jednak opuścić jądro na skutek efektu tunelowego.

Od energii emitowanych cząstek bardzo silnie zależy prawdopodobieństwa tunelowania a tym samym emisji cząstki α prowadzącej do rozpadu jądra, determinujące średni czas życia jąder promieniotwórczych (od 10^{-6}s do 10^{10} lat).



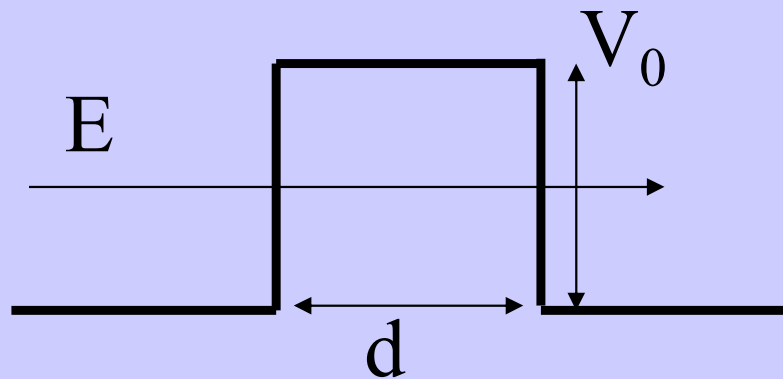
Efekt tunelowy zmniejsza energię niezbędną do zaistnienia syntezy jader lekkich pierwiastków niezbędną do pokonania ich elektrostatycznego odpychania.

Tunelowanie przez barierę -prąd tunelowy

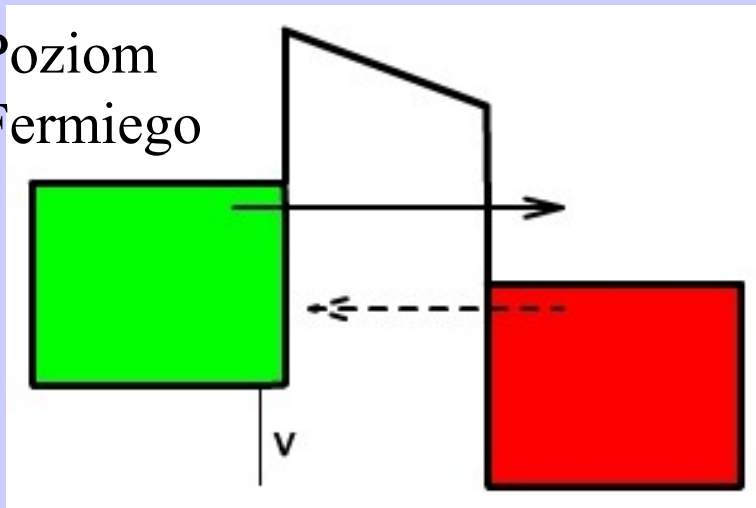
Prawdopodobieństwo tunelowania

$$T \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} \exp(-2\kappa d)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$



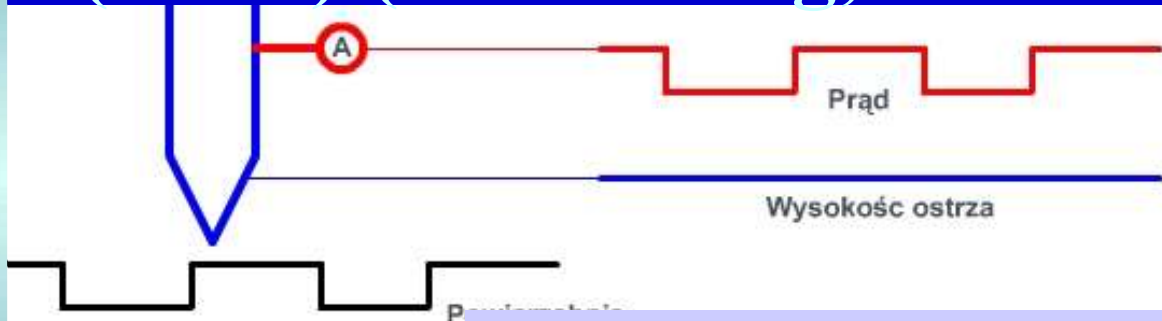
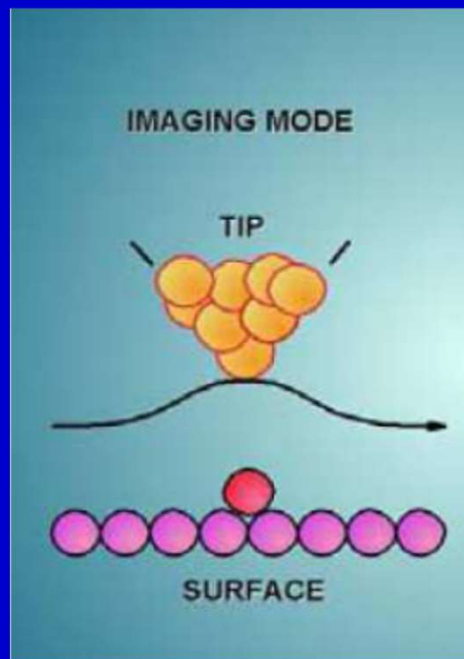
Poziom
Fermiego



Po przyłożeniu napięcia między dwoma przewodzącymi materiałami rozdzielonymi przez barierę potencjału (warstwę izolatora lub próżnię) płynie pomiędzy nimi prąd wtedy gdy bariera jest odpowiednio cienka ($\sim 0.1-1$ nm). Główny wkład do prądu tunelowego wnoszą elektrony o najwyższych dozwolonych energiach w elektrodzie źródłowej znajdujące się poniżej poziomu Fermiego w tej elektrodzie (poziom ten oddziela stany obsadzone od nieobsadzonych w temperaturze $T=0K$).

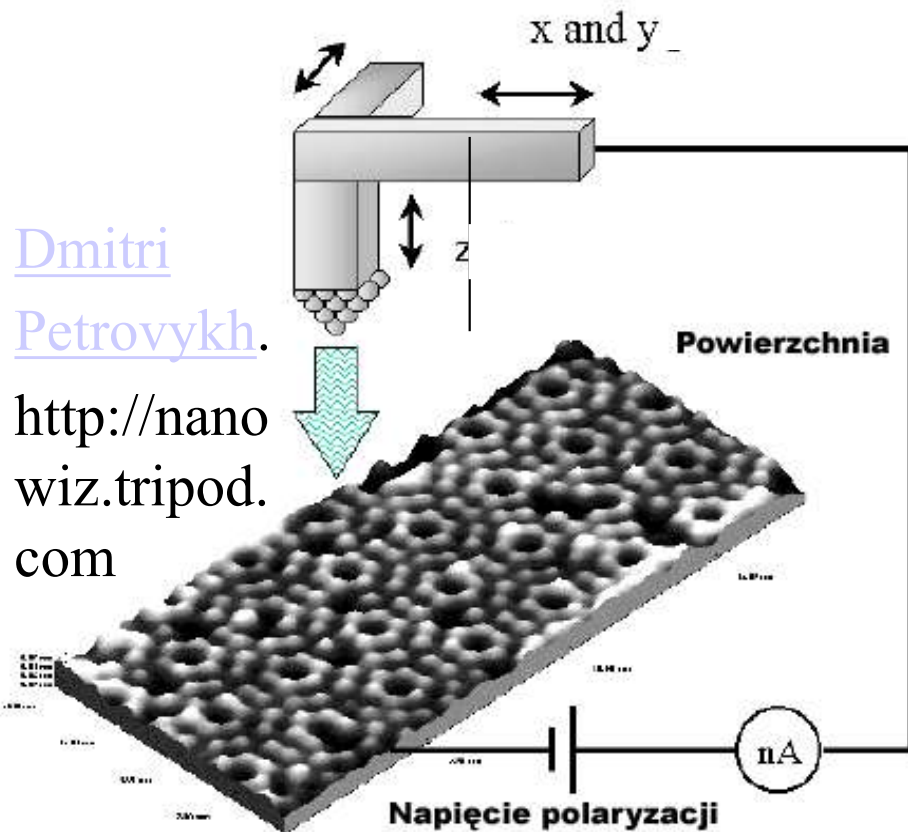
Natężenie prądu tunelowego I jest niezwykle czułe na zmianę grubości bariery (wzrost grubości o około $0,5$ nm zmniejsza prąd o czynnik rzędu 10^4 –zależność wykładnicza). Natężenie prądu zależy także od gęstości stanów w obu elektrodach w zakresie energii leżącej pomiędzy poziomami Fermiego w obu elektrodach.

Skaningowy Mikroskop Tunelowy (STM) (G. Binning, H. Rohrer 1982)



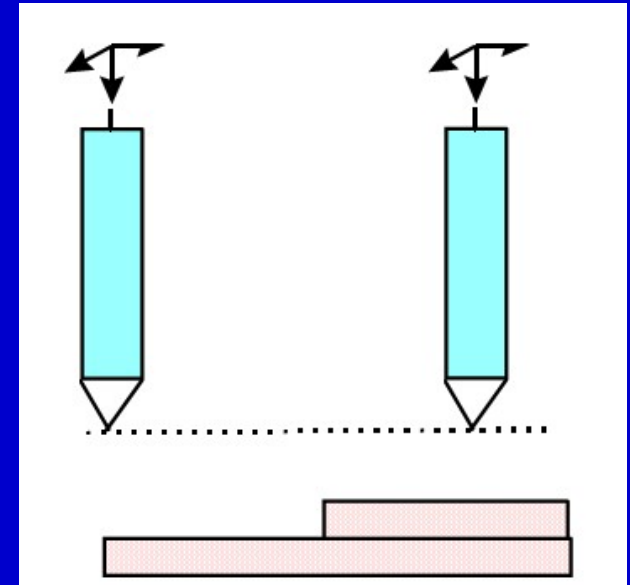
STM pozwala na pomiar prądu o natężeniu rzędu 0,1-10 nA płynącego po przyłożeniu napięcia pomiędzy badaną powierzchnią materiału nie będącego izolatorem i igłą mikroskopu, a przez to określenie położenia atomów w próbce oraz kształtu powierzchni dzięki wykorzystaniu omawianych własności prądu. W celu otrzymania wysokiej rozdzielczości (rzędu 0,1 nm w poziomie i 0,001nm w pionie) obrazu igła mikroskopu jest bardzo cienka (może być zakończona pojedynczym atomem).

Dmitri Petrovykh.
<http://nanowiz.tripod.com>



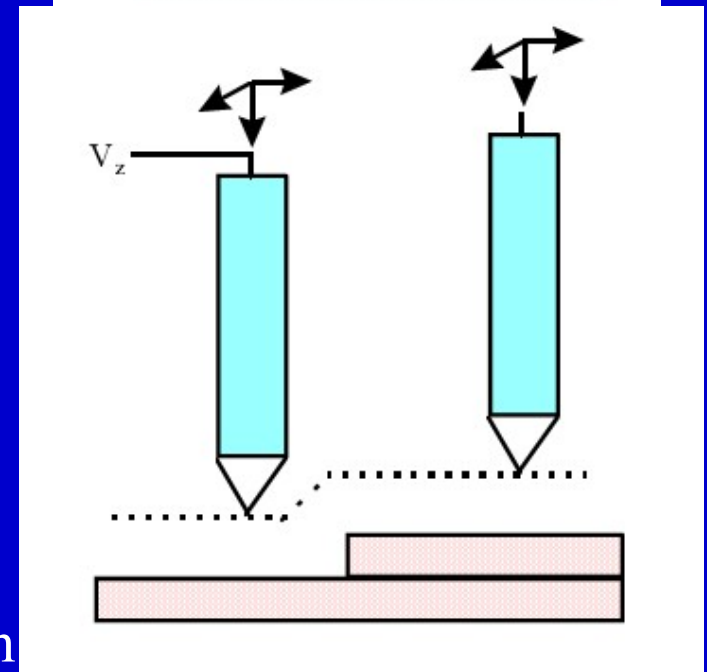
metody badania powierzchni

1) metoda stałej wysokości – położenie końcówki skanującej się nie zmienia.



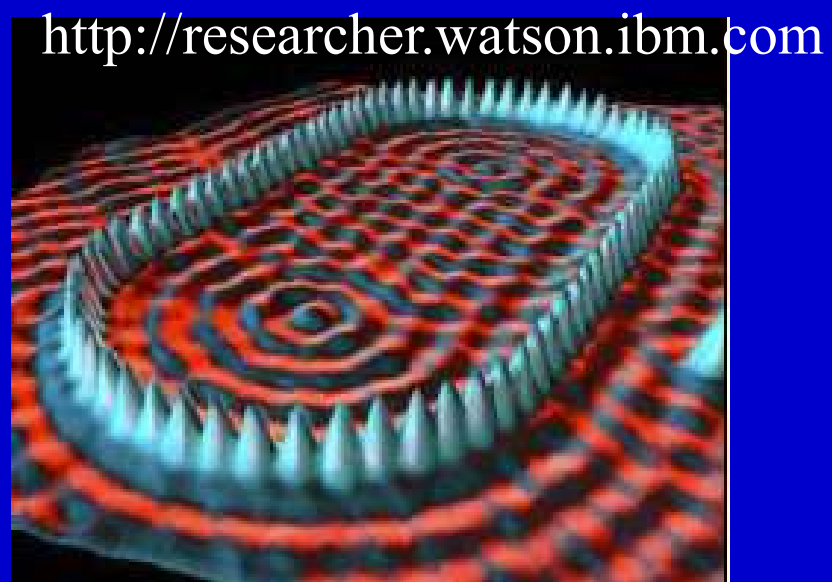
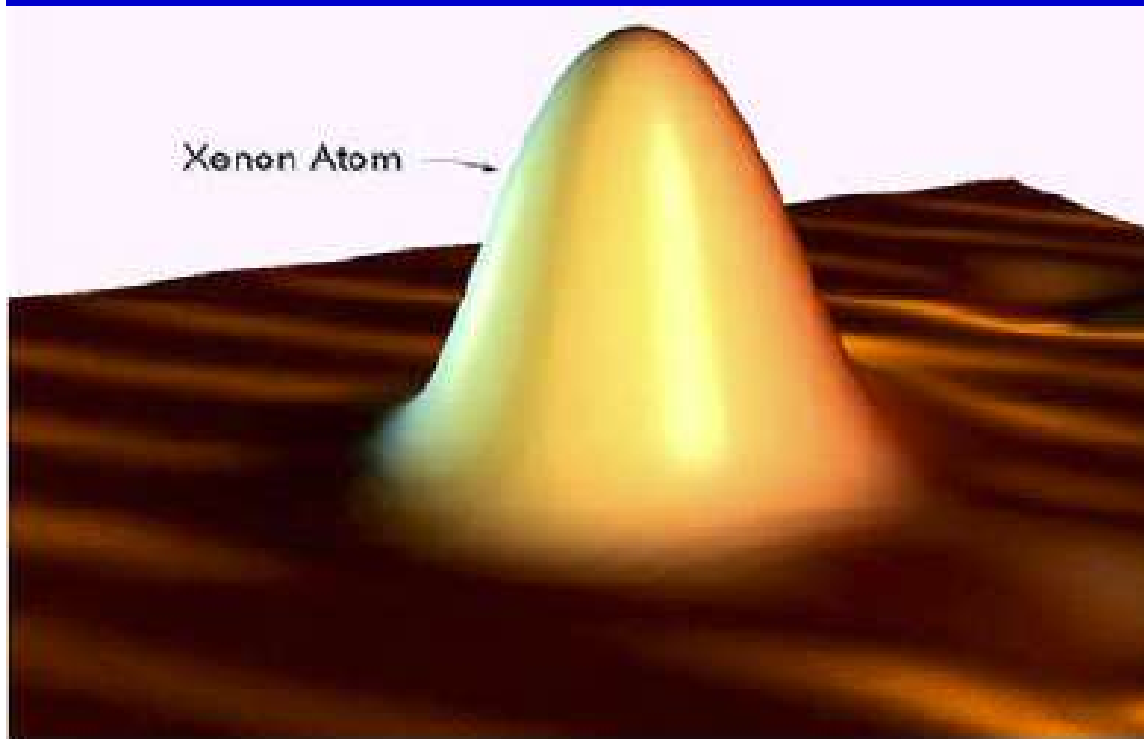
2) metoda stałego prądu – stała szerokość bariery potencjału

Metoda użyteczna przy badaniu powierzchni nieregularnych, w celu zachowania stałego prądu zmieniamy położenie igły, które to położenie informuje nas o badanej powierzchni



Uchwyt igły mikroskopu wykonany jest z materiałów piezoelektrycznych zmieniających kształt pod wpływem przyłożonego napięcia, co pozwala na precyzyjne ustalenie położenia igły .
W celu wykonania pomiarów niezbędne jest tłumienie drgań uchwytu wywołanych np. przez fale akustyczne czy drganie podłoża na którym stoi mikroskop.

STM – kształt powierzchni



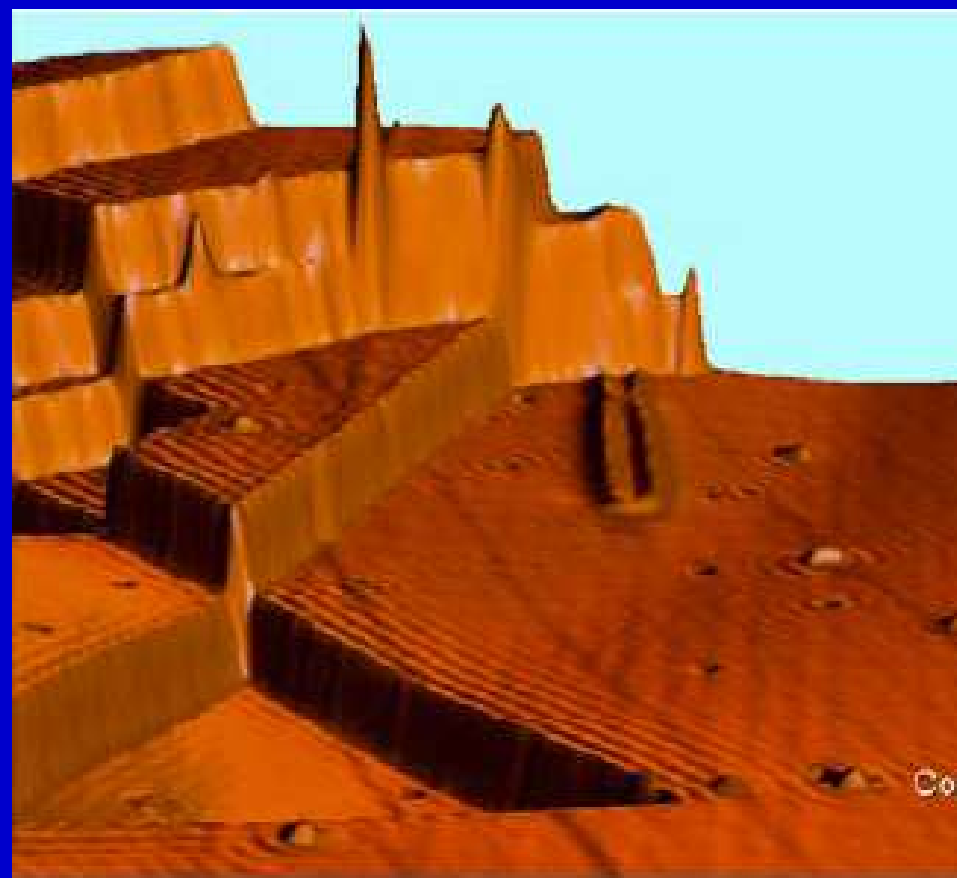
Atomy Fe na Cu

STM image of a Single-Wall Carbon Nanotube



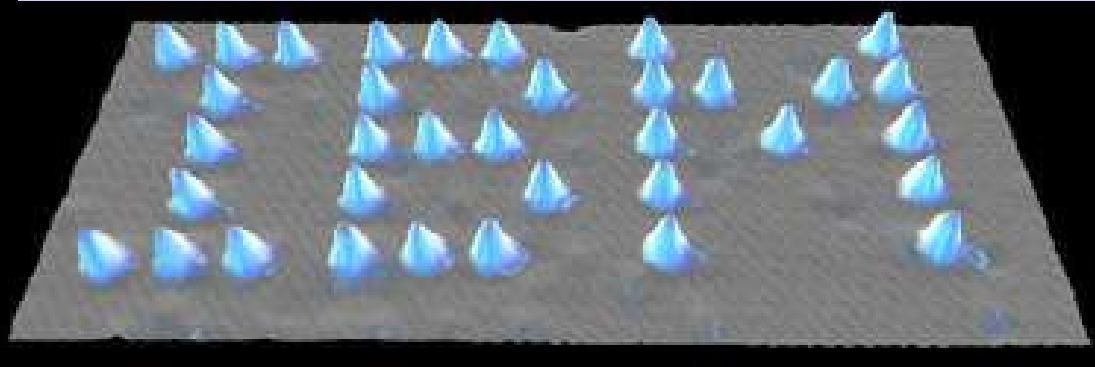
<http://ceesdekkerlab.tudelft.nl>

Nanorurka węglowa

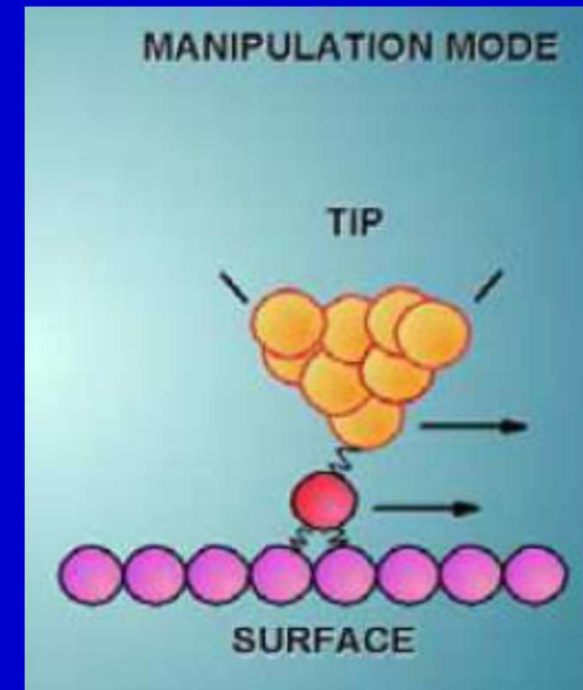
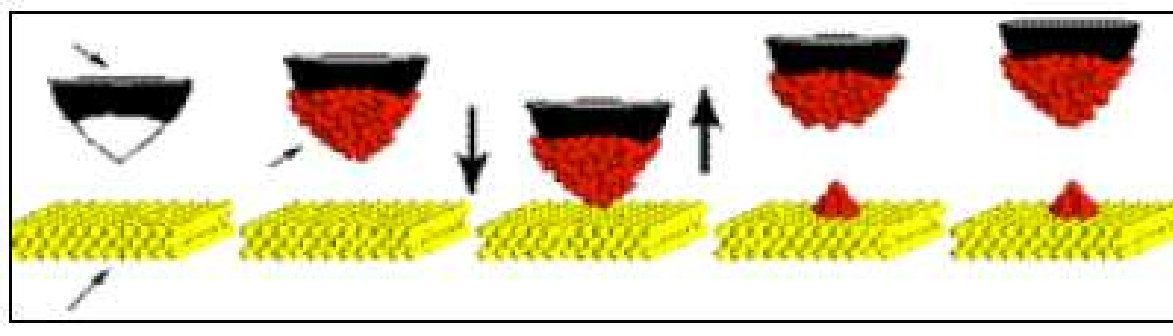


STM – manipulacja atomami

Przy zastosowaniu silnego (impulsowego) pola elektrycznego możliwy jest przeskok atomu z powierzchni do igły i odwrotnie co pozwala na zastosowanie do przenoszenia atomów.



Xe on Ni(110) at 4 K.
The first atom-by-atom manipulation
See Nature 344 (1990)
524-526

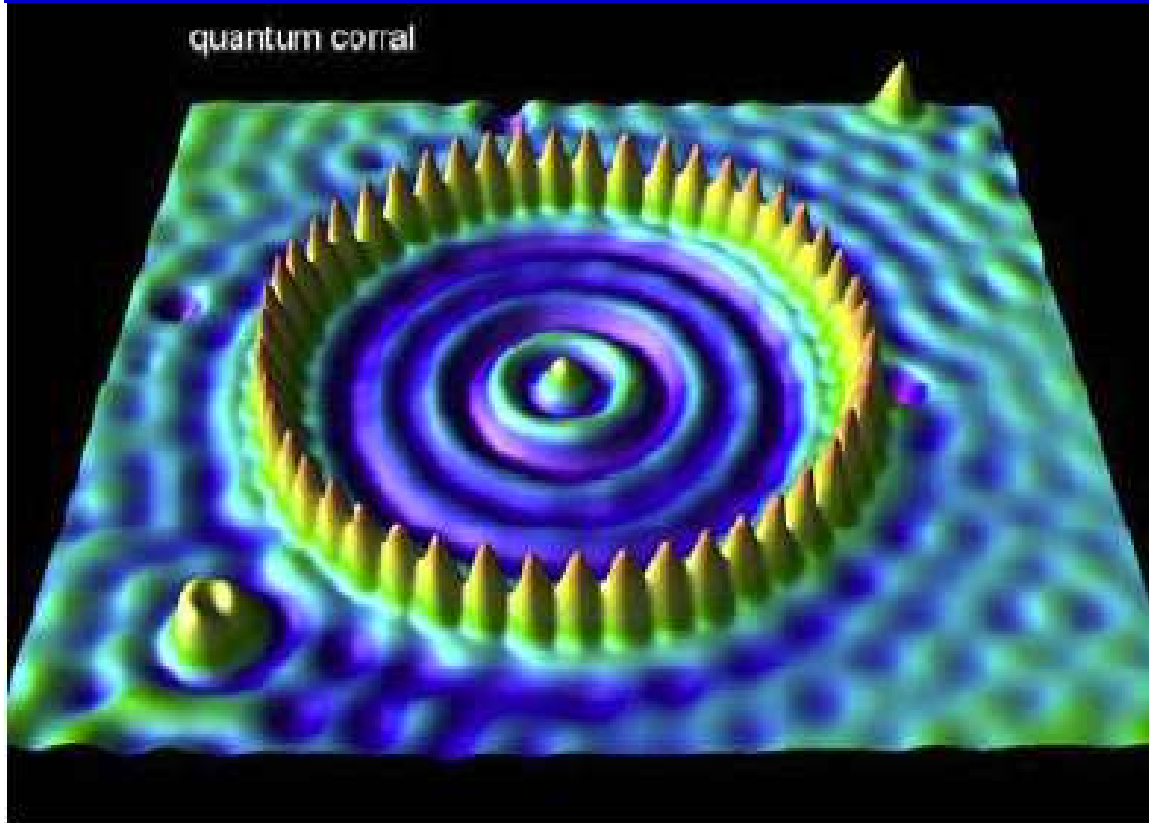


Nanolitografia

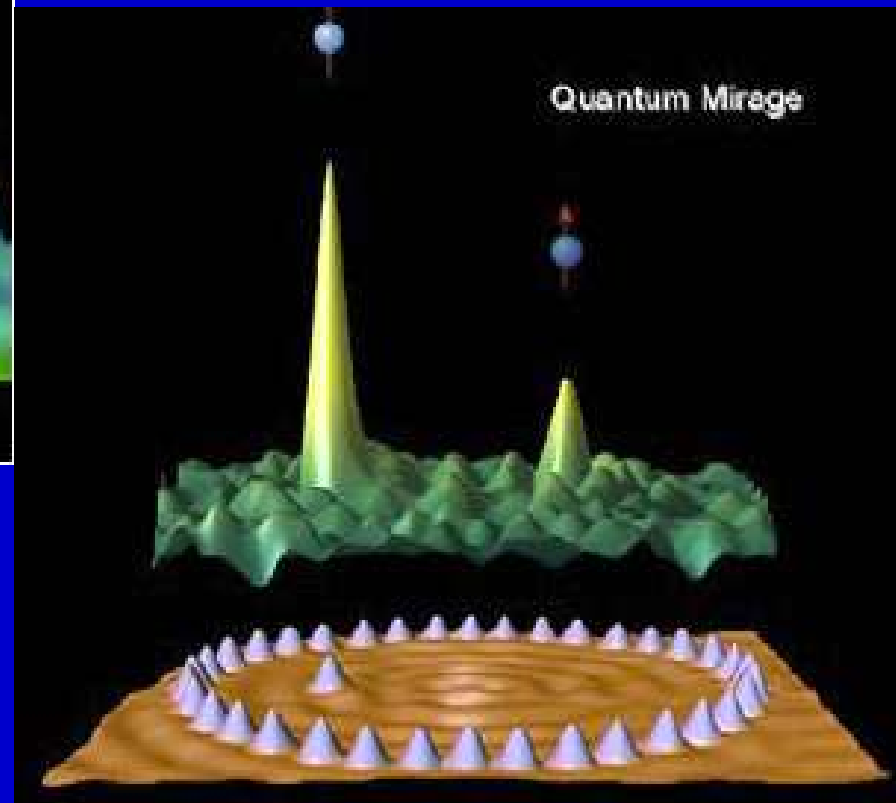
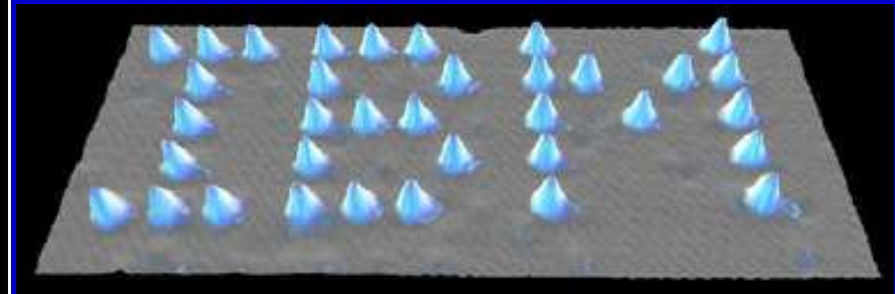
STM – manipulacja atomami

<http://physics.stackexchange.com>

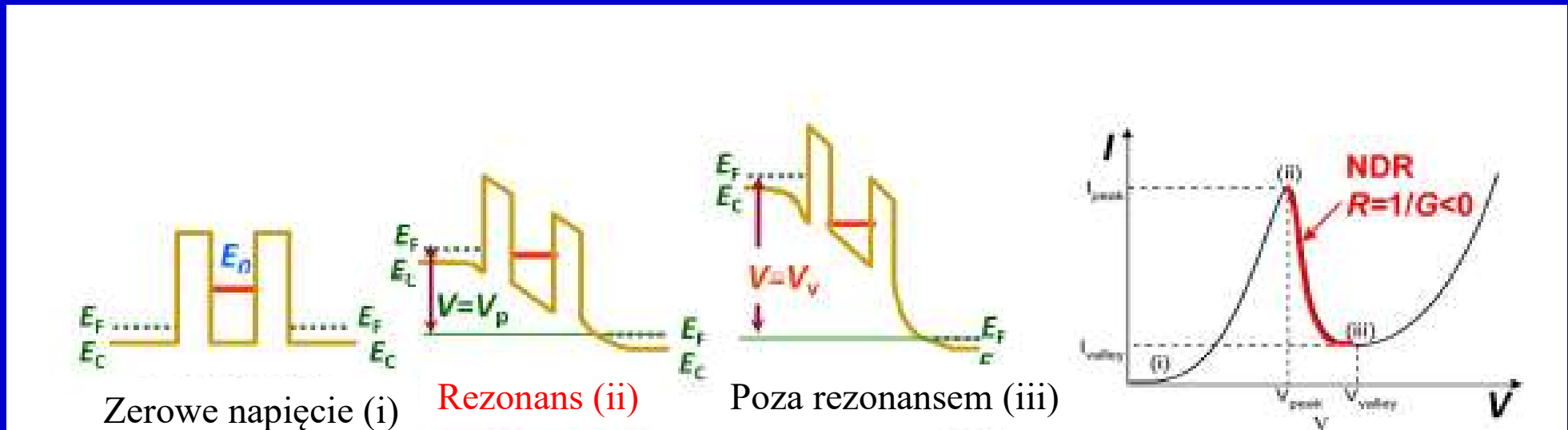
<http://researcher.watson.ibm.com>



Zagroda kwantowa utworzona w $T=4\text{K}$ z 48 atomów żelaza ustawionych na obwodzie koła o promieniu około 7nm na podłożu utworzonym z atomów miedzi



Tunelowa dioda rezonansowa oparta na podwójnej barierze potencjału



Przy wzroście napięcia można zaobserwować spadek natężenia prądu (ujemny opór różniczkowy) wynikający z obniżenia w skali energii położenia poziomu rezonansowego (energii dla której obserwuje się silne podwyższenie współczynnika transmisji elektronu). Maksymalny prąd płynie gdy poziom ten leży tuż poniżej poziomu Fermiego w lewej elektrodzie. Najsilniejszy spadek natężenia prądu występuje gdy poziom ten lokalizuje się poniżej dna pasma w lewej elektrodzie i przestaje być aktywny w tunelowaniu.

Diody tunelowe (które można konstruować także w oparciu o złącze p-n między półprzewodnikami domieszkowymi silnie na typ p i n) można wykorzystać np. do przeprowadzenia szybkich operacji logicznych, w układach przełączających, oscylatorach o częstościach rzędu nawet 10^{11}Hz

Przykładowe pytania opisowe

- 1) Omówić przewidywane przez mechanikę kwantową podstawowe własności cząstki poruszającej się w obszarze danym potencjałem

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{dla } x < 0 \\ 0 & \text{dla } 0 < x < L \\ V_0 & \text{dla } x > L \end{cases}$$

(jednowymiarowa studnia kwantowa o skończonej głębokości), jeżeli energia cząstki jest mniejsza od wysokości barier. Które z nich różnią się od własności poruszającej się w takim samym potencjale cząstki opisywanej w ramach mechaniki klasycznej? Rozważyć w szczególności co można powiedzieć na temat energii analizowanej cząstki i gęstości prawdopodobieństwa znalezienia jej w różnych obszarach przestrzeni. Jak możemy praktycznie wytworzyć studnie kwantową?

- 2) Na czym polega efekt tunelowy? Jak można go wyjaśnić wykorzystując pojęcie funkcji falowej związanej z cząstką kwantową? Jakie są podstawowe własności zjawiska tunelowego? W szczególności określić jak w przybliżeniu w złączach tunelowych z grubymi barierami można opisać zależność współczynnika transmisji od grubości bariery? W jakich złączach tunelowych i kiedy jest możliwe osiągnięcie przez współczynnik transmisji wartości równej 1. Omówić własności wybranych zjawisk fizycznych, które można wyjaśnić odwołując się do efektu tunelowego. Wymienić przykładowe urządzenia, których działanie jest oparte na efekcie tunelowym i omówić nieco bliżej jedno z nich(np. omówić działanie mikroskopu tunelowego).

Przykładowe pytania szczegółowe

Rozważyć cząstkę poruszającą się w obszarze nieskończenie głębokiej studni potencjału danej wzorem

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{dla } x < 0 \\ 0 & \text{dla } 0 < x < L \\ \infty & \text{dla } x > L \end{cases}$$

Które z poniższych stwierdzeń są prawdziwe?

- 1) Funkcja falowa wnika w obszar barier potencjału.
- 2) Nie jest możliwe znalezienie cząstki w obszarach barier potencjału.
- 3) Długość fali materii λ związanej z cząstką spełnia relację $L = n\lambda/2$ (n -liczba całkowita dodatnia).
- 4) Odstępy między dozwolonymi wartościami energii cząstki są jednakowe.
- 5) Odstępy pomiędzy dozwolonymi energiami cząstki maleją ze wzrostem szerokości studni kwantowej L
- 6) Najmniejsza energia cząstki maleje ze wzrostem szerokości studni kwantowej L
- 7) Najmniejsza energia cząstki jest równa zero.
- 8) Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w dowolnym punkcie w studni (czyli w obszarze o x z zakresu $0 < x < L$) jest jednakowa.
- 9) Istnieją stany o określonej energii w przypadku których w obszarze studni można wyróżnić punkty w których gęstość prawdopodobieństwa znalezienia tam cząstki osiąga wartość zero.

Czy poniższe twierdzenia dotyczące własności cząstki kwantowej o energii $E < V_0$ poruszającej się w potencjale danym wzorem:

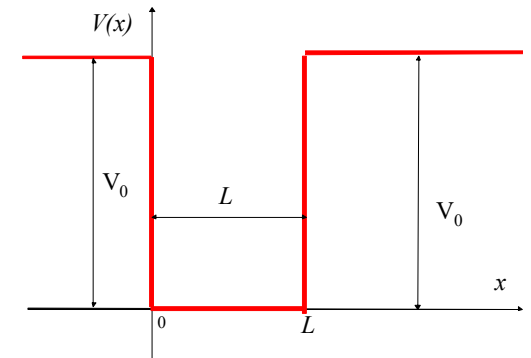
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{dla } x < 0 \\ 0 & \text{dla } 0 < x < L \\ V_0 & \text{dla } x > L \end{cases}$$

opisującym studnię kwantową o skończonej

głębokości są stwierdzeniami prawdziwymi?

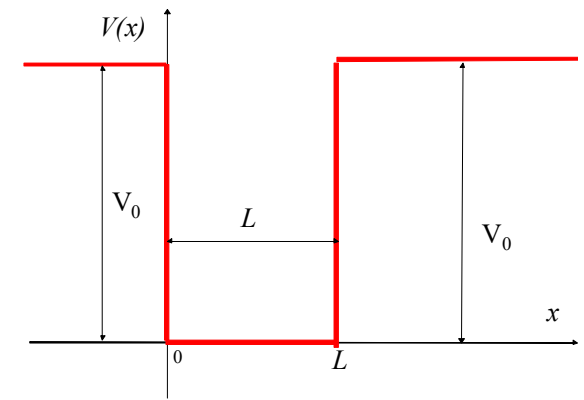
- a) Energia cząstki może przyjmować tylko wartości dyskretne.
- b) Energia cząstki nie może być równa zero.
- c) Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarach barier o $x > L$ oraz $x < 0$ jest równe zero.
- d) Istnieją stany o określonej energii w przypadku których gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w punkcie o $x = 2L$ jest większa niż w punkcie $x = L$.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.



Cząstka o masie m i energii E z zakresu $0 < E < V_0$ znajdująca się w stanie stacjonarnym porusza się obszarze skończonej jednowymiarowej studni potencjału opisanej potencjałem

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{dla } x < 0 \\ 0 & \text{dla } 0 < x < L \\ V_0 & \text{dla } x > L \end{cases}$$



Które z poniższych funkcji

1) $\psi(x) = A \exp(-\kappa x)$

2) $\psi(x) = B \exp(\kappa x)$

3) $\psi(x) = C \exp(\kappa x) + D \exp(-\kappa x)$ $(C \neq 0, D \neq 0)$

4) $\psi(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx)$

5) $\psi(x) = C \sin(kx)$

6) $\psi(x) = A \exp(kx) + B \exp(-kx)$

(gdzie $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$)

można wykorzystać do opisu funkcji falowej $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right)$ tej cząstki w obszarach

a) $x < 0$ (lewa bariera)

1, 2, 3, 4, 5, 6

b) $0 < x < L$ (studnia potencjału)

1, 2, 3, 4, 5, 6

c) $x > L$ (prawa bariera)

1, 2, 3, 4, 5, 6

Zaznaczyć poprawną odpowiedź dla każdego z rozważanych obszarów (a-c).

Zapisać warunki wiążące ze sobą stałe występujące w wybranych funkcjach (które trzeba nałożyć na te funkcje) aby funkcje te mogły rzeczywiście opisywać funkcję falową rozważanej cząstki.

Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?

- a) Prawdopodobieństwo tunelowania cząstki o energii mniejszej od wysokości bariery potencjału przez pojedynczą barierę potencjału może być równe 1.
- b) Prawdopodobieństwo transmisji cząstki o energii mniejszej od wysokości bariery potencjału przez pojedynczą niezbyt cienką barierę potencjału maleje wykładniczo ze wzrostem grubości bariery.
- c) Suma współczynników transmisji cząstki przez barierę potencjału T i odbicia cząstki od tej bariery potencjału R jest zawsze równa 1.
- d) Współczynnik transmisji cząstki przez podwójną barierę potencjału może być równy 1.
- e) Współczynnik transmisji cząstki przez podwójną barierę potencjału maleje monotonicznie ze wzrostem odległości między barierami potencjału tworzącymi podwójną barierę potencjału.

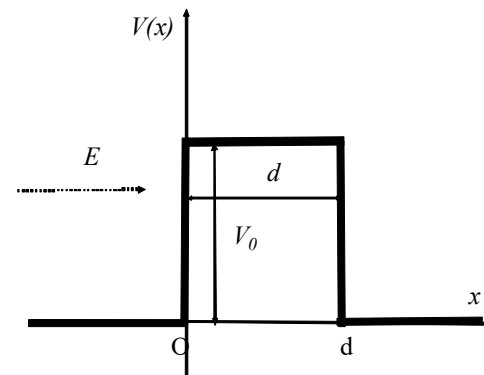
Z czym wiąże się wysoka rozdzielczość skaningowego mikroskopu tunelowego?

- a) z silną zależnością współczynnika transmisji przez barierę potencjału od grubości bariery przez którą zachodzi tunelowanie
- b) rezonansowym tunelowaniem elektronów przez podwójną barierę potencjału
- c) występowaniem ujemnego oporu różnicowego
- d) zjawiskiem Ramsauera

Zaznaczyć poprawną odpowiedź spośród podanych powyżej.

Cząstka o energii E mniejszej od wysokości bariery potencjału ($0 < E < V_0$) pada z lewej strony na barierę potencjału o szerokości d i wysokości V_0 pokazaną na rysunku opisaną potencjałem:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0 \\ V_0 & \text{dla } 0 < x < d \\ 0 & \text{dla } x > d \end{cases}$$



Które z poniższych funkcji można wykorzystać do wyznaczenia funkcji falowej cząstki:

- padającej z lewej strony na barierę potencjału poruszającej się w prawo w obszarze $x < 0$
- odbitej od tej bariery potencjału poruszającej się w lewo w obszarze $x < 0$
- przenikającej przez obszar bariery potencjału w obszarze $0 < x < d$
- poruszającej się w prawo w obszarze leżącym na prawo od bariery potencjału czyli dla $x > d$ która przeniknęła przez barierę

$$1) \psi(x) = A \exp(ikx) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$$

$$2) \psi(x) = B \exp(-ikx) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$$

$$3) \psi(x) = [C \exp(i\kappa x) + D \exp(-i\kappa x)] \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$$

$$4) \psi(x) = [C \exp(\kappa x) + D \exp(-\kappa x)] \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$$

$$5) \psi(x) = F \exp(ikx) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$$

$$6) \psi(x) = F \exp(\kappa x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$$

gdzie $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

Dla każdego obszaru wybrać jedną z podanych wyżej funkcji (niektóre funkcje mogą pasować do kilku obszarów).

Ad a) (1), (2), (3), (4), (5), (6)

Ad b) (1), (2), (3), (4), (5), (6)

Ad c) (1), (2), (3), (4), (5), (6)

Ad d) (1), (2), (3), (4), (5), (6)

Zapisać warunki wiążące ze sobą stałe występujące w wybranych funkcjach, które trzeba nałożyć na te funkcje, aby określić współczynnik transmisji cząstki padającej z lewej strony na tę barierę potencjału przez tę barierę potencjału?