

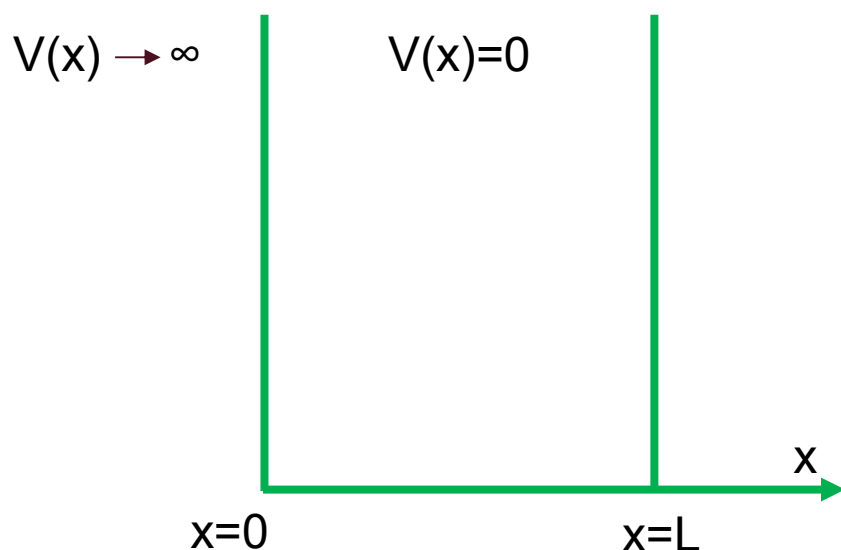


AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA  
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

# Studnie i bariery

# Nieskończona studnia potencjału

Nieskończenie duży potencjał na krawędziach studni nie pozwala elektronom opuścić obszaru  $0 < x < L$ ; w tym obszarze elektron jest swobodny.



**Potencjał wynosi zero wewnątrz i zmierza do nieskończoności na zewnątrz studni**

$\varphi(x)=0$  na zewnątrz studni, gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu wynosi zero

W obszarze wewnątrz studni, tj. dla  $0 < x < L$ , niezależne od czasu równanie Schrödingera ma postać:

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

Warunki brzegowe:

$$\varphi(0) = \varphi(L) = 0$$

# Nieskończona studnia potencjału

Proponowane rozwiązanie:

$$\varphi_E(x) = A \sin(kx)$$

A jest stałą

Jest to rozwiązanie o ile:

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

Stosując warunki brzegowe: dla  $x=L$ ,  $\varphi_E=0$

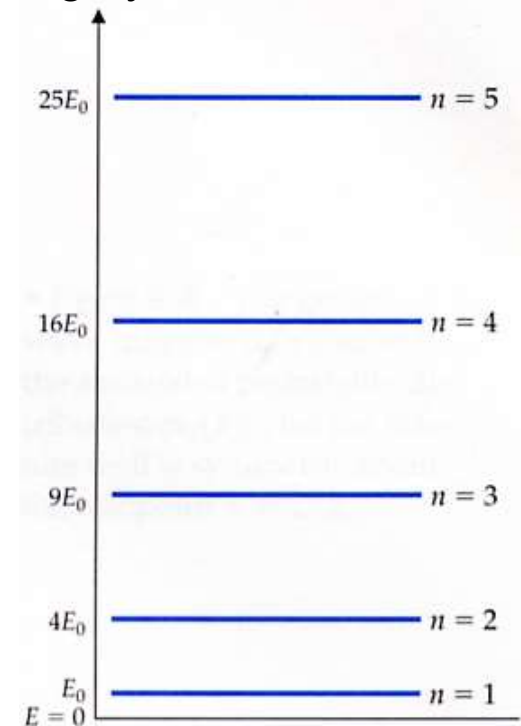
Stąd:  $\sin(kL) = 0 \implies kL = n\pi$  dla  $n=1,2,\dots$

Energia elektronu przyjmuje tylko wartości dyskretne

**Energia jest skwantowana**

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi n}{L} \right)^2$$

dyskretne poziomy energetyczne



# Relacja dyspersji

Zależność pomiędzy energią  $E$  a liczbą falową  $k$  nazywamy relacją dyspersji,  $E(k)$ .

Relacja dyspersji dla cząstki swobodnej jest (kwadratowa) paraboliczna

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

Energia elektronu przyjmuje tylko wartości dyskretne w studni nieskończonej i relacja dyspersji ma postać:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi n}{L} \right)^2$$

Najniższa wartość energii  $E_1$  (stan podstawowy dla  $n=1$ ), energia drgań zerowych

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

## Relacja dyspersji

Energia drgań zerowych jest to najniższa energia całkowita jaką może mieć cząstka ograniczona w swoim ruchu do obszaru:  $0 < x < L$   
Cząstka ta nie może mieć energii równej zero,  $E \neq 0$ .

Jest to wynikiem obowiązywania zasady nieoznaczoności Heisenberga:

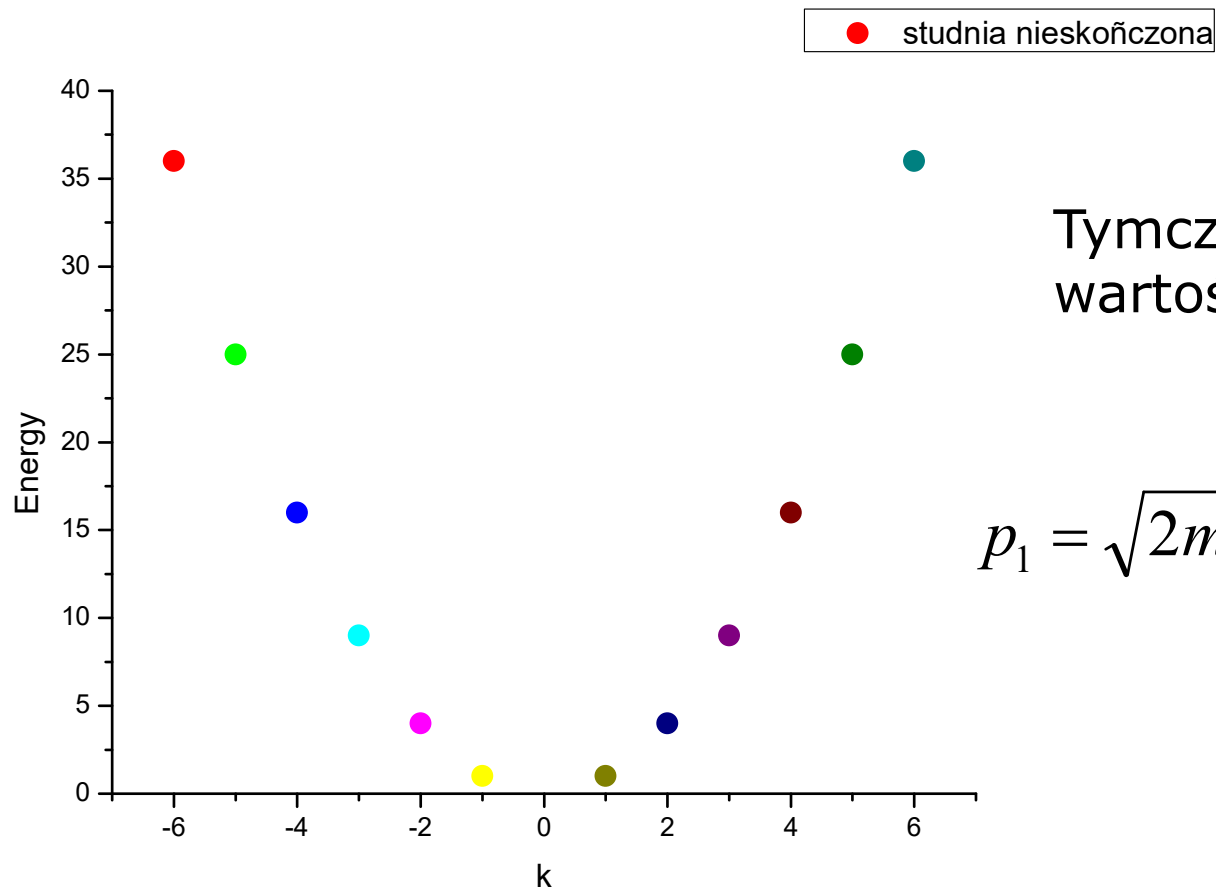
Dla  $\Delta x \approx L$  zgodnie z zasadą Heisenberga otrzymujemy

$$\Delta p_x \approx \frac{\hbar}{2L}$$

Cząstka związana w studni nieskończonej nie może mieć  $E=0$  bo oznaczałoby to  $p=0$  a zatem

$$\Delta p = 0$$

# Relacja dyspersji



Tymczasem, najmniejsza wartość pędu dla  $n=1$  wynosi

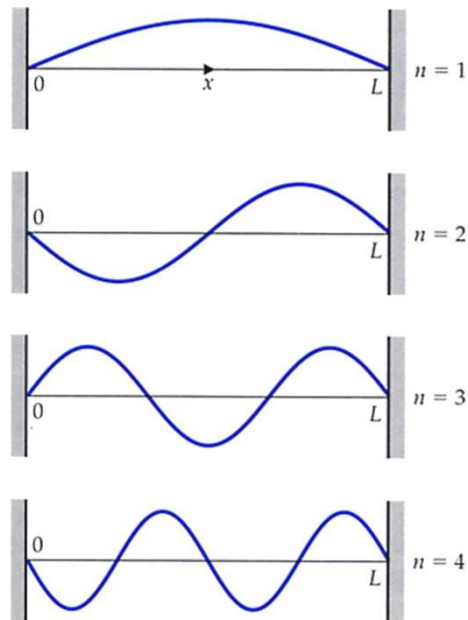
$$p_1 = \sqrt{2mE_1} = \sqrt{\frac{2m\hbar^2\pi^2}{2mL^2}} = \frac{\hbar\pi}{L}$$

# Nieskończona studnia potencjału

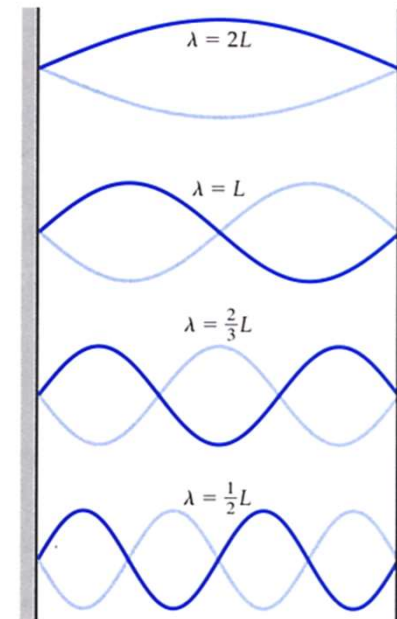
Rozwiązania

$$u_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

odpowiadają falom stojącym z różną liczbą  $n$  węzłów wewnątrz studni



Funkcje własne  $\varphi_n(x)$  dla nieskończonej studni



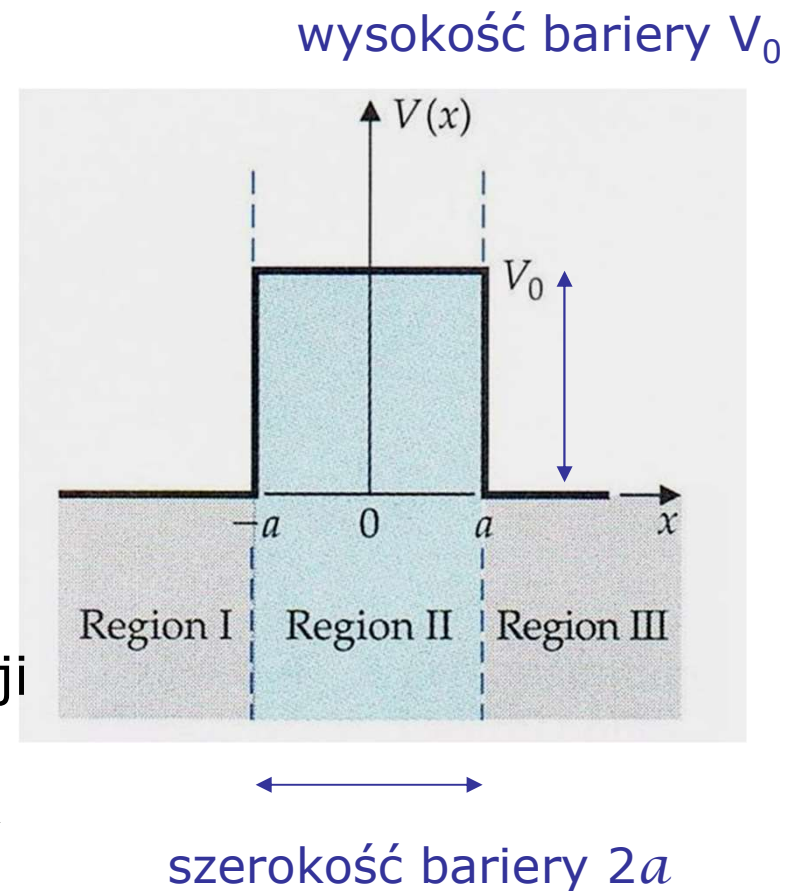
Dozwolone mody drgań dla klasycznej struny z węzłami na końcach

## Skończona bariera potencjału

Energia potencjalna elektronu ma postać:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < -a \text{ (region I)} \\ V_0 & \text{dla } -a < x < a \text{ (region II)} \\ 0 & \text{dla } x > +a \end{cases}$$

Kiedy cząstka mająca określony pęd i energię zbliża się do bariery potencjału może zostać rozproszona. Wynik, który otrzymujemy w fizyce klasycznej (transmisja lub odbicie) zależy od relacji pomiędzy energią cząstki i wysokością bariery. W mechanice kwantowej wynik jest inny i nieoczekiwany.



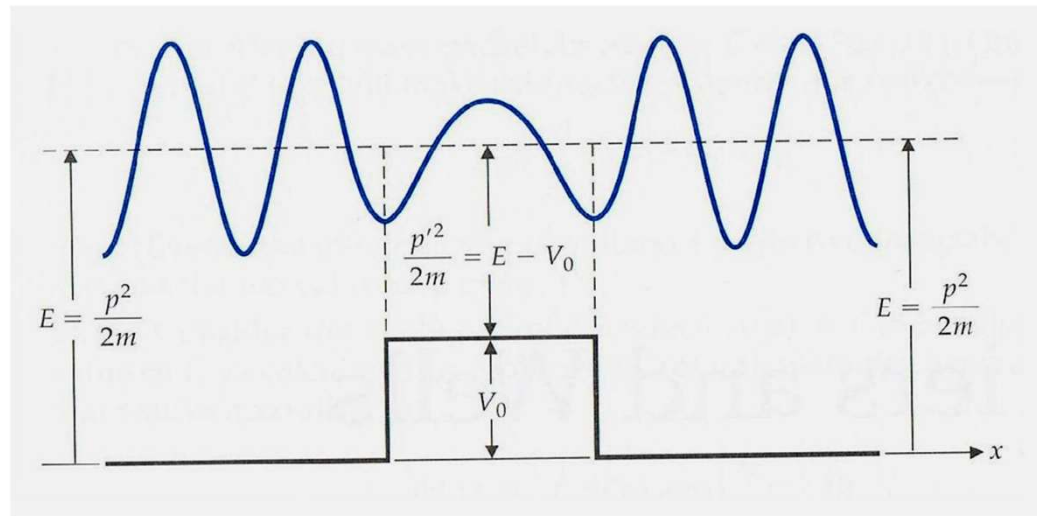


## Skończona bariera potencjału

Klasycznie:

Jeżeli  $E > V_0$ , wtedy cząstka przechodzi przez barierę

Jeżeli  $E < V_0$ , wtedy cząstka odbija się od bariery



$$p = \sqrt{2mE} \quad \Rightarrow \quad p = \sqrt{2m(E - V_0)} \quad \Rightarrow \quad p = \sqrt{2mE}$$

pęd zmienia się kiedy cząstka jest ponad barierą i wraca do wartości początkowej dla  $x=a$

## Skończona bariera potencjału

W mechanice kwantowej :

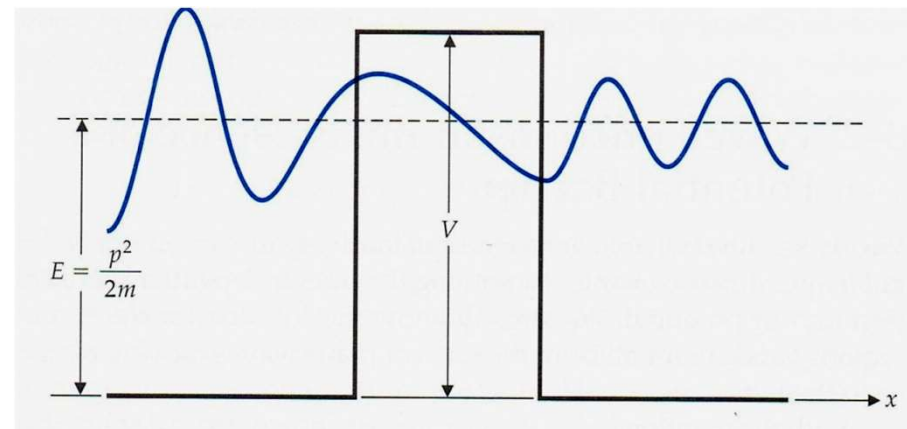
Jeżeli  $E > V_0$ , to cząstka przechodzi ponad barierą lub odbija się od niej

Jeżeli  $E < V_0$ , wtedy istnieje niezerowe prawdopodobieństwo, że cząstka przejdzie przez barierę; jest to **tunelowanie**

Długość fali de Broglie;  $\lambda$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}$$

jest rzeczywista i taka sama dla  $x > a$  i  $x < -a$



Dla  $-a < x < a$ ,  $\lambda$  jest urojona

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

Klasycznie mamy falę zanikającą (evanescent wave), eksponencjalny zanik z  $x$ , dlatego amplituda fali dla  $x > a$  jest zmniejszona

## Funkcje falowe w zagadnieniu skończonej studni potencjału

- Funkcje falowe można otrzymać jako rozwiązania równania Schrödingera niezależnego od czasu

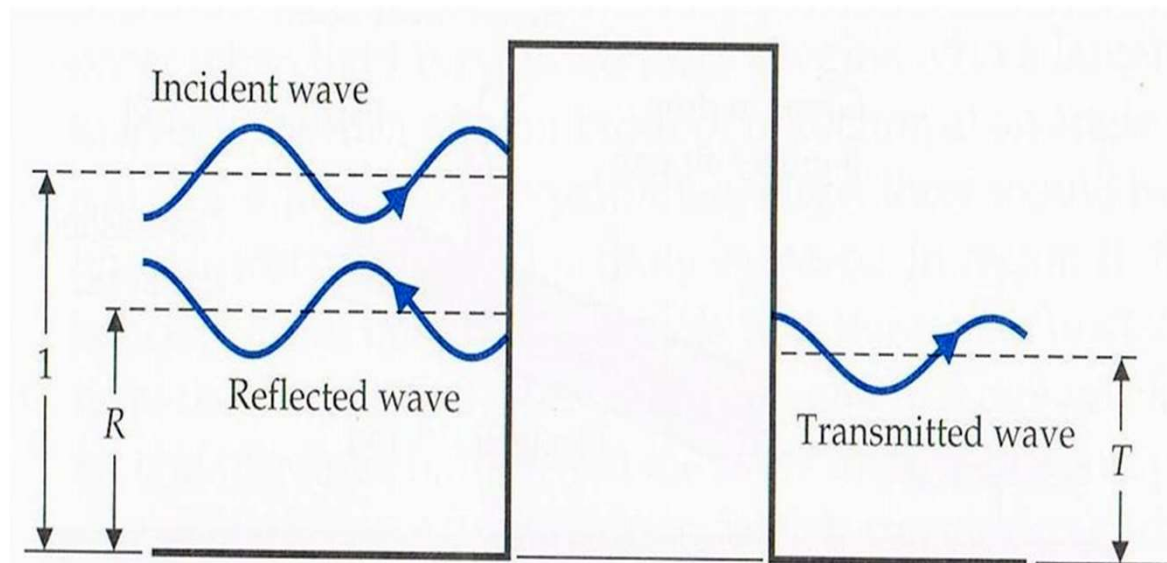
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$$

- W obszarach I i III, kiedy  $V(x)=0$ , rozwiązania są w formie fal płaskich poruszających w prawo lub w lewo

# Funkcje falowe w zagadnieniu skończonej studni potencjału

- Obszar I  $u(x) = \underbrace{\exp(ikx)}_{\text{fala padająca}} + R \underbrace{\exp(-ikx)}_{\text{fala odbita}}$   $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
- Obszar II  $u(x) = A \exp(iqx) + B \exp(-iqx)$   $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$   
 współczynniki A i B można określić formułując odpowiednie warunki fizyczne

- Obszar III  
 $u(x) = T \exp(ikx)$   
 $\underbrace{\hspace{10em}}$   
 tylko fala przechodząca



## Funkcje falowe w zagadnieniu skończonej studni potencjału

- **Warunki ciągłości**

Skoro gęstość prawdopodobieństwa musi być funkcją ciągłą a rzeczywisty potencjał nigdy nie jest nieskończony,

*funkcja falowa i jej pierwsza pochodna muszą być ciągłe w każdym punkcie*

Po zastosowaniu warunków ciągłości w  $x=-a$  i  $x=a$  (zadanie domowe) otrzymujemy:

$$R = \frac{i(q^2 - k^2) \sin(2qa)}{2kq \cos(2qa) - i(k^2 + q^2) \sin(2qa)} \exp(-2ika)$$

R jest miarą odbicia

$$T = \frac{2qk}{2kq \cos(2qa) - i(k^2 + q^2) \sin(2qa)} \exp(-2ika)$$

T jest miarą transmisji

## Własności rozwiązania dla $E > V_0$

Przyjęto:

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

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

1. Jeżeli  $E > V_0$ ,  $q$  jest rzeczywiste i  $V_0 \neq 0$ ,  $q \neq k$  stąd  $R \neq 0$

$$R = \frac{i(q^2 - k^2) \sin(2qa)}{2kq \cos(2qa) - i(k^2 + q^2) \sin(2qa)} \exp(-2ika)$$

W zakresie energii, w którym klasycznie cząstka nie będzie odbijana od bariery, w mechanice kwantowej będzie istniało skończone prawdopodobieństwo, że cząstka zostanie odbita.

## Własności rozwiązania dla $E > V_0$

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

$$R = \frac{i(q^2 - k^2) \sin(2qa)}{2kq \cos(2qa) - i(k^2 + q^2) \sin(2qa)} \exp(-2ika)$$

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad T = \frac{2qk}{2kq \cos(2qa) - i(k^2 + q^2) \sin(2qa)} \exp(-2ika)$$

2. Kiedy  $E \gg V_0$ , wtedy  $q \approx k$ , i  $R \cong \frac{V_0}{E}$

oraz  $T \rightarrow 1$

3. Zawsze  $|T|^2 + |R|^2 = 1$  i  $|R|^2 \leq 1$

## Rozwiązania dla $E < V_0$

Klasycznie, cząstka będzie odbijała się od bariery. W mechanice kwantowej cząstka może tunelować przez barierę, zwłaszcza gdy bariera jest cienka.

W takim przypadku:  $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) < 0$

$q$  jest urojone i współczynnik transmisji  $T$  wykazuje zanik eksponencjalny

$$|T|^2 = \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} \exp(-4\kappa a)$$

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \quad a \text{ jest szerokością bariery}$$



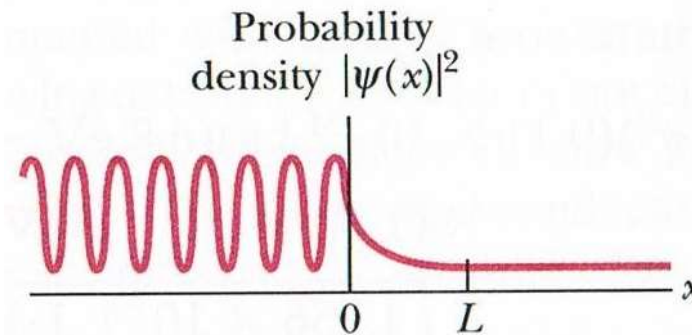
## Tunelowanie przez barierę potencjału

Współczynnik transmisji  $|T|^2$  określa prawdopodobieństwo, z którym cząstka przechodzi przez barierę, czyli prawdopodobieństwo tunelowania.

**Przykład:** Jeżeli  $|T|^2 = 0.020$  to oznacza, że z 1000 cząstek (elektronów) zbliżających się do bariery, średnio 20 będzie tunelowało przez nią a 980 ulegnie odbiciu.

$$|T|^2 \cong \exp(-4\kappa a)$$

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



*Z powodu zależności eksponencjalnej współczynnik transmisji jest bardzo czuły na niewielkie zmiany: szerokości bariery  $a$ , różnicy energii  $V_0 - E$ . Współczynnik ten zależy również od masy cząstki*



## Przykłady tunelowania: rozpad alfa, synteza jądrowa, skanningowy mikroskop tunelowy (scanning tunneling microscope STM)

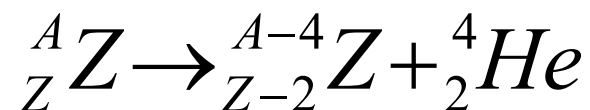
Tunelowanie przez bariery ma wiele zastosowań (zwłaszcza w elektronice), np. **dioda tunelowa**, w której prąd elektronowy jest kontrolowany przez wysokość bariery.

- W 1973 nagrodę Nobla w fizyce otrzymali Leo Esaki (za tunelowanie w półprzewodnikach), Ivar Giaever (za tunelowanie w nadprzewodnikach) i Brian Josephson (złącze Josephsona, szybkie urządzenie przełączające działające w oparciu o kwantowe tunelowanie)
- W 1986 nagrodę Nobla otrzymali Gerd Binnig i Heinrich Rohrer za skanningowy mikroskop tunelowy STM
- Najwcześniejsze zastosowania tunelowania (lata 20-te XX w.) pojawiły się w fizyce jądrowej: rozpad alfa (George Gamow, Ronald Gurney, Edward U. Condon) i synteza jądrowa.

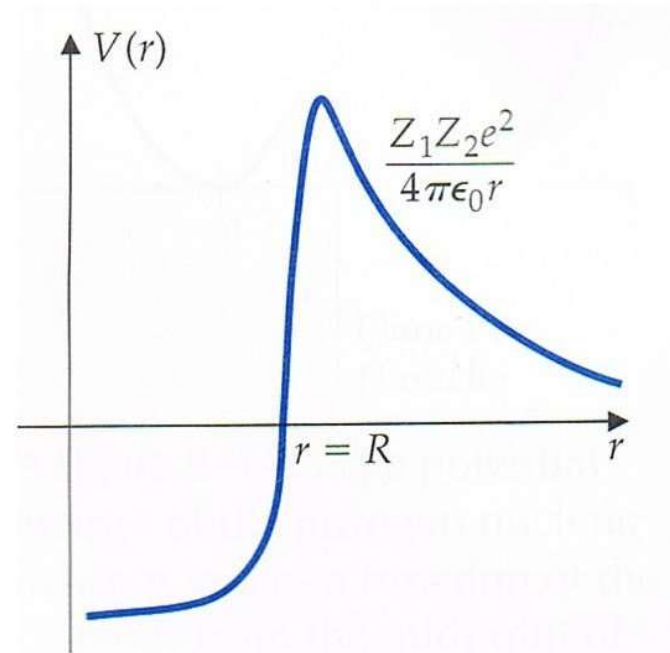
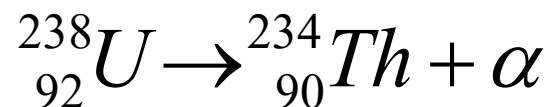
## Rozpad alfa

Niestabilne jądro atomowe ulega przemianie w inne jądro z emisją cząstki  $\alpha$  jądro helu,  ${}^4_2\text{He}$

A-ciężar atomowy



Przykład:



Rozpad alfa może być wytłumaczony tunelowaniem cząstki  $\alpha$  przez barierę) utworzoną z energii kulombowskiej i jądrowej.

## Rozpad alfa

Sukcesem zastosowania teorii tunelowania do wyjaśnienia rozpadu alfa było wyznaczenie po raz pierwszy promienia  $R$  jądra

$$R \cong 1.5 A^{1/3} \text{ fm}$$

Ten wynik pozwolił na wyjaśnienie dlaczego objętość jądra:

$$V = \frac{4\pi}{3} R^3$$

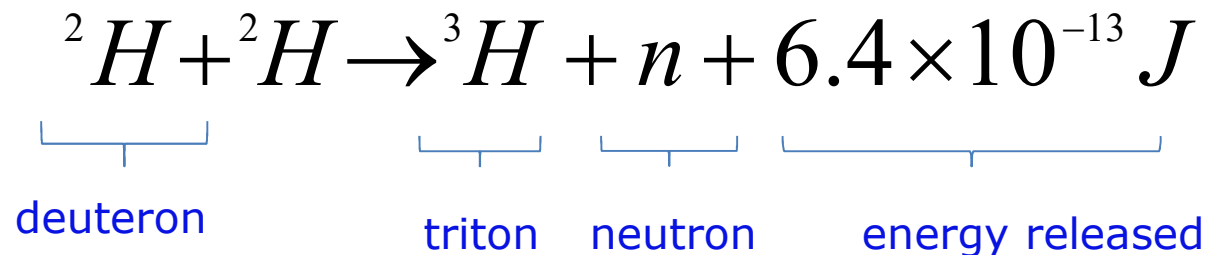
jest wprost proporcjonalna do jego masy atomowej  $A$ , tak, że gęstość jądra jest praktycznie stała

Ten rezultat pokazał również jak małe jest jądro atomowe.

## Synteza jądrowa

Synteza jądrowa ma ważne zastosowania w produkcji **czystej energii jądrowej**.

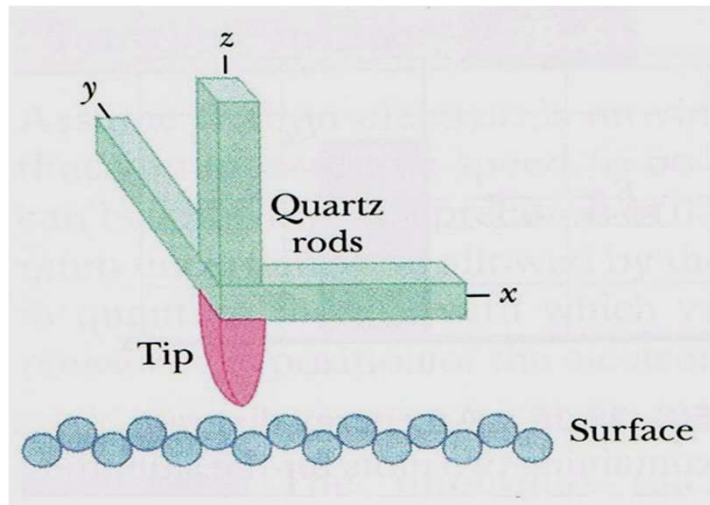
Reakcja pokazuje syntezę dwóch jąder deuteru, w wyniku której tworzy się jądro trytu i neutron oraz wydzielą się duża ilość energii.



Odpychanie kulombowskie pomiędzy deuteronami nie pozwala na zajście takiej reakcji. Jest to możliwe jedynie dzięki **tunelowaniu** przez barierę potencjału. Jednakże, konieczna jest wysoka temperatura rzędu  $10^4\text{K}$  aby utrzymać odpowiednią szybkość reakcji.

# Scanning tunneling microscope STM

Trzy kwarcowe beleczki sterują ruchem przewodzącego ostrza (tip) po powierzchni.



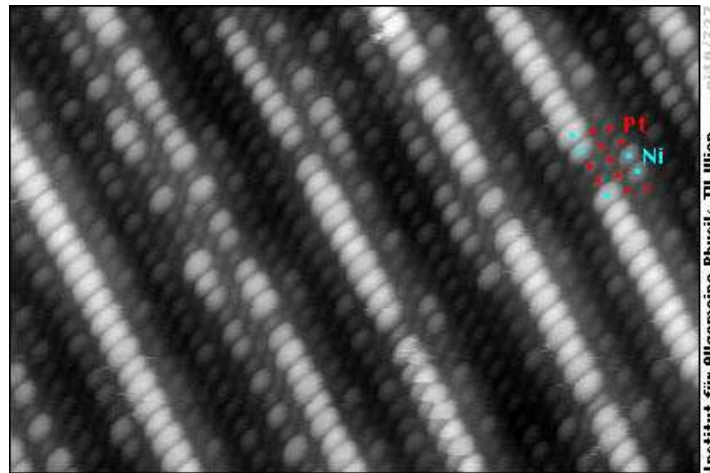
## Zasada działania

Podaje się na ostrze słaby potencjał dodatni. Gdy odległość pomiędzy ostrzem i metaliczną powierzchnią jest mała, ma miejsce tunelowanie. Ilość elektronów, które przepływają pomiędzy powierzchnią a ostrzem w jednostce czasu (prąd elektryczny) jest bardzo silnie zależna od odległości ostrze-powierzchnia.

Kwarcowe beleczki tworzą uchwyt piezoelektryczny o właściwościach sprężystych zależnych od przyłożonego pola elektrycznego. Prąd tunelowy jest mierzony i utrzymywany na takim poziomie aby odległość pomiędzy ostrzem i powierzchnią była stała. Tworzy się obraz powierzchni.

# Scanning tunneling microscope STM

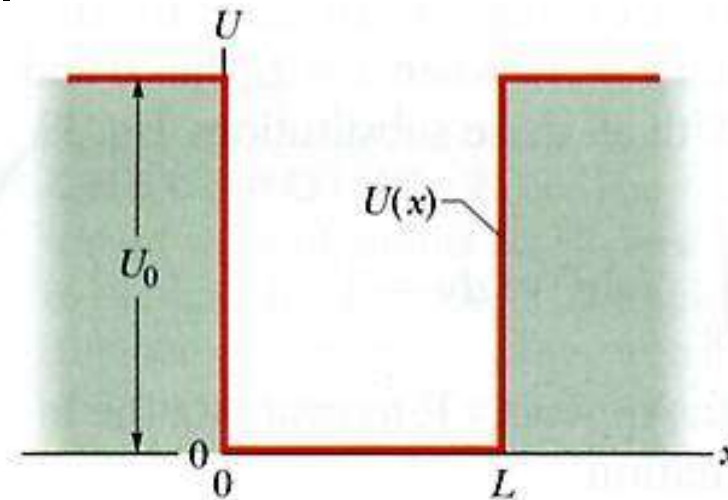
Rozdzielczość obrazu zależy od rozmiarów ostrza. Poprzez podwyższenie temperatury lub zastosowanie silnego pola elektrycznego można „wyciągać” atomy wolframu warstwa po warstwie tak aby pozostał pojedynczy atom rozmiarów rzędu 0.1 nm.



Innym ważnym zastosowaniem STM jest **nanotechnologia**. Ostrze może podnosić pojedyncze atomy z powierzchni metalicznej i tworzyć nowe struktury w nano-skali (np. powstawanie sztucznych molekuł)

## Stany związane

Studnia potencjału o **nieskończoności głąbokości** jest idealizacją. W praktyce realizowalna jest **skończona studnia**, w której energia potencjału poza studnią ma skończoną wartość dodatnią  $U_0$ .



Funkcje falowe opisujące stany kwantowe elektronu w studni można znaleźć rozwiązując równanie Schrödingera z warunkami ciągłości na jej granicach ( $x=0$  and  $x=L$ ).



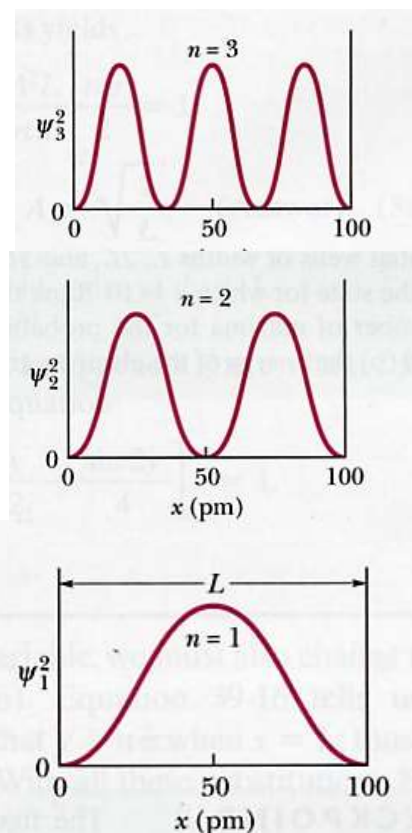
## Stany związane

### Gęstość prawdopodobieństwa dla elektronu ograniczonego do obszaru studni.

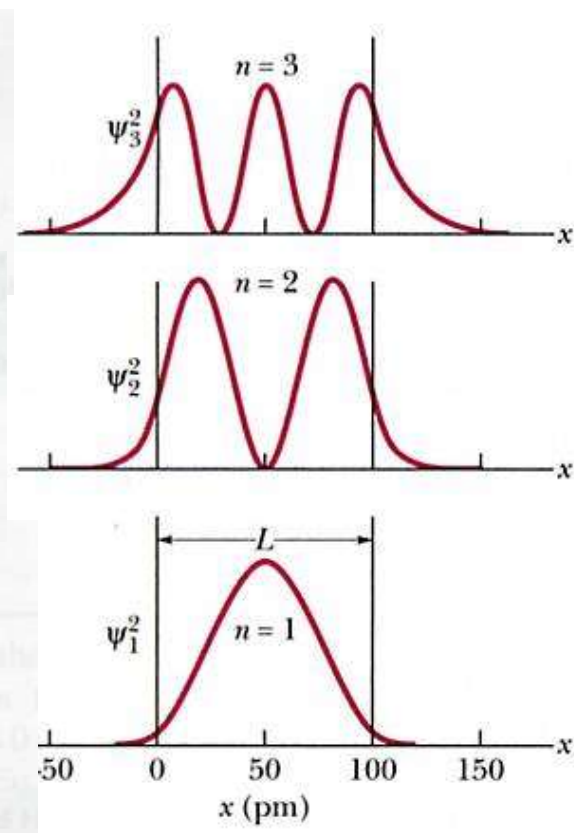
Podstawową różnicą pomiędzy studnią skończoną a nieskończoną jest to, że w studni skończonej fale materii penetrują ściany studni. Mechanika klasyczna na to nie pozwala.

Ze względu na to, że *funkcja falowa* nie zanika gwałtownie na granicach studni, długość fali  $\lambda$  dla dowolnego stanu kwantowego jest większa niż w studni nieskończonej.

nieskończona

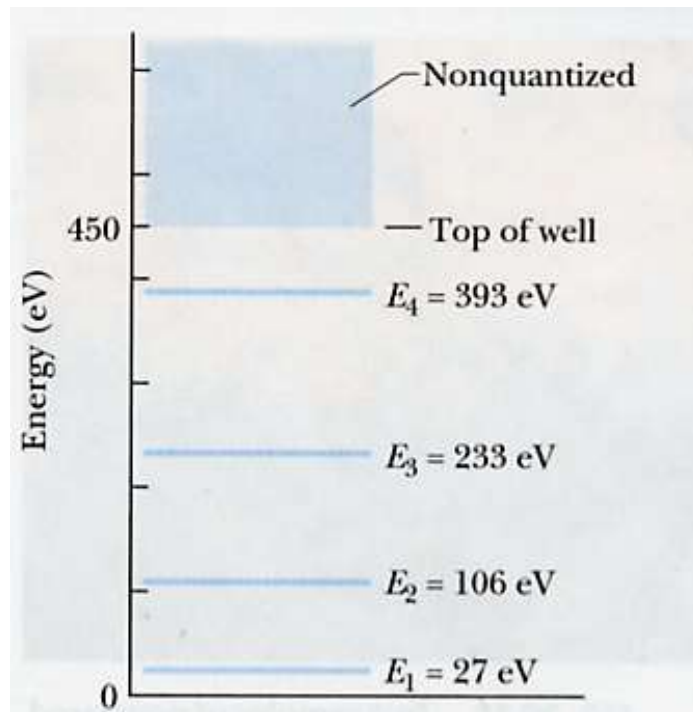


skończona



## Stany związane

### Diagram poziomów energetycznych dla studni o skończonym potencjale



Na podstawie: 
$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$$

widzimy, że energia  $E$  elektronu w dowolnym stanie jest mniejsza niż w studni nieskończonego potencjału.

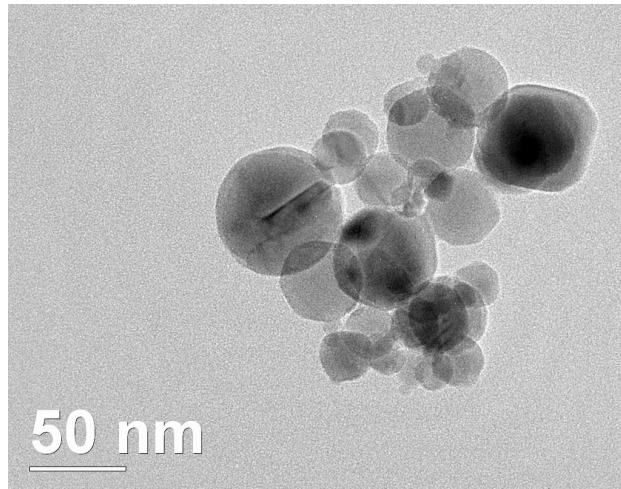
Elektron o energii większej od  $U_0$  (450 eV w tym przykładzie) ma zbyt dużą energię, żeby zostać **związanym**. W rezultacie, jego energia nie jest **skwantowana**.

Dla danej studni (np.  $U_0=450$  eV i  $L=100$  pm) może istnieć tylko ograniczona liczba stanów (w tym przypadku  $n=1,2,3,4$ ), dla których elektron będzie **związany (pułapkowany)**.

## Przykłady pułapek elektronowych

### Nanokrystality

Proszki, których ziarna są małe – w zakresie nanometrycznym – mają inny kolor niż proszki o większym ziarnie.



Każdy **nanokrystalit** stanowi studnię potencjału dla elektronu zamkniętego w jego wnętrzu.

Dla nieskończonej studni kwantowej pokazaliśmy, że energia elektronu  $E$  wynosi:

$$E = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

Ze zmniejszeniem rozmiaru  $L$  krystalitu, energia elektronu rośnie. Elektron absorbuje światło o większej energii, krótszej fali.

# Przykłady pułapek elektronowych

## Nanokryształy

Dany nanokryształ absorbuje fotony o energii powyżej pewnej wartości progowej  $E_t (=hf_t)$ . Długość fali absorbowanego promieniowania jest mniejsza od progowej wartości:

$$\lambda_f = \frac{c}{f_t} = \frac{ch}{E_t}$$

Fale o długości większej od  $\lambda_f$  będą rozpraszane

Jeżeli rozmiar kryształitu się zmniejsza, to kolor zmienia się (np. od czerwonego do żółtego).

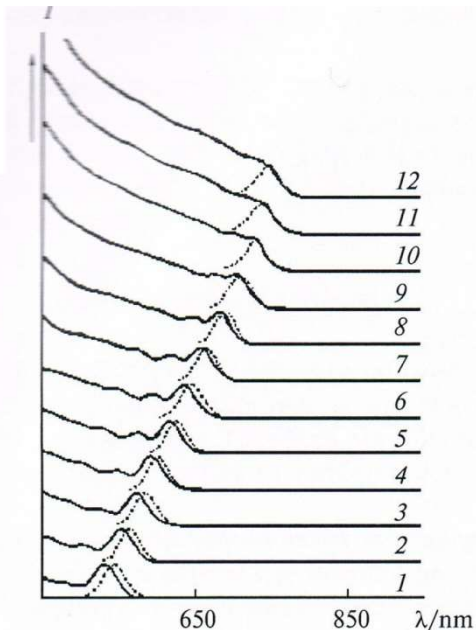
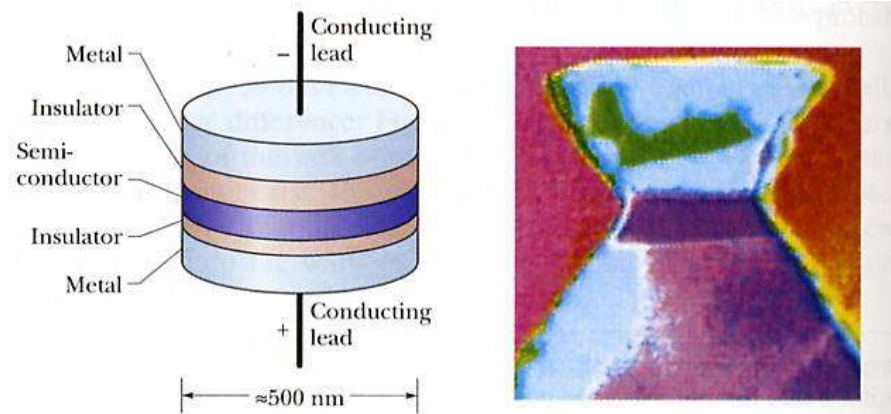


Fig. 2. Shift of absorption bands (solid curves) and photoluminescence bands (dashed lines) with an increase in the size of CdTe nanoparticles<sup>14</sup>:  $d = 3.2$  (1), 3.3 (2), 3.5 (3), 3.6 (4), 3.8 (5), 4.2 (6), 4.6 (7), 5.3 (8), 6.2 (9), 7.7 (10), 8.4 (11), and 9.1 nm (12).

## Przykłady pułapek elektronowych

### Kropki kwantowe (quantum dots) – sztuczne atomy



Warstwa półprzewodnika (semiconductor) jest naniesiona pomiędzy dwiema nieprzewodzącymi warstwami tworząc studnię potencjału, w której elektrony są uwięzione. Cieńsza warstwa izolatora pod warstwą półprzewodnika pozwala elektronom tunelować przez nią jeżeli podana zostanie odpowiednia różnica potencjału pomiędzy metalicznymi kontaktami. W ten sposób liczba elektronów wewnątrz studni jest kontrolowana.

Kropki kwantowe w postaci dwuwymiarowych matryc mają obiecujące zastosowania w komputerach o dużej szybkości i pojemności.

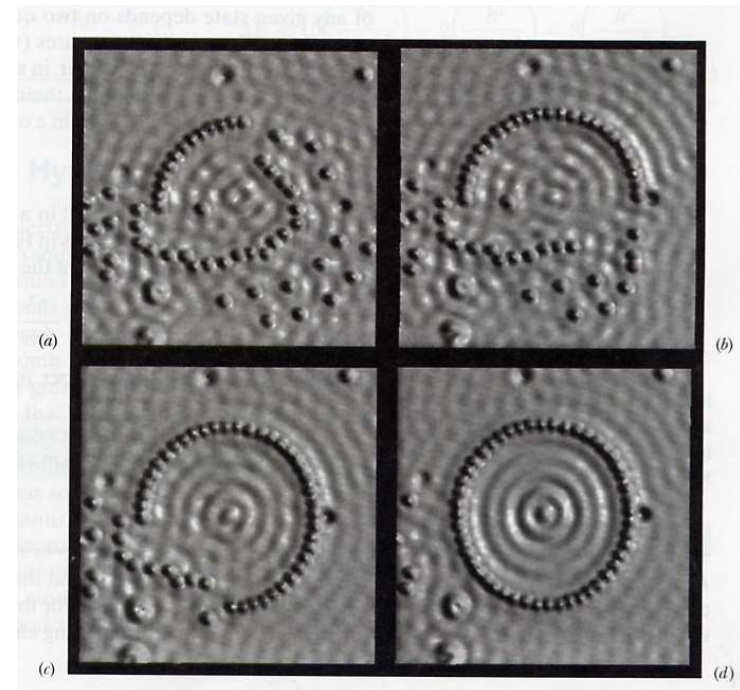


## Przykłady pułapek elektronowych

Za pomocą mikroskopu STM, naukowcy z IBM Almaden Research Center, uporządkowali atomy Fe na powierzchni Cu w niskiej temperaturze 4K. Atomy tworzące okrąg nazwano **kwantową zagrodą (quantum corral)**.

Ta struktura i „zmarszczki” wewnątrz są bezpośrednią demonstracją istnienia fal materii.

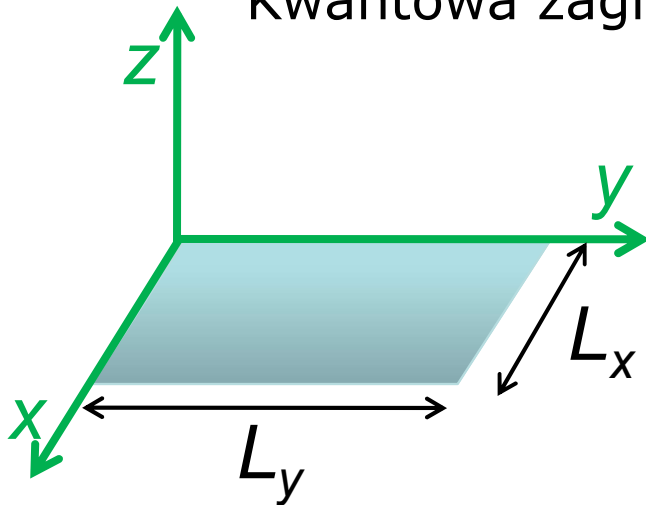
### Quantum corral



Cztery etapy tworzenia struktury. Zbliżając się do zamknięcia struktury obserwuje się „zmarszczki” (ripples) związane z uwięzionymi elektronami

## Poziomy energetyczne w dwuwymiarowej nieskończonej studni potencjału

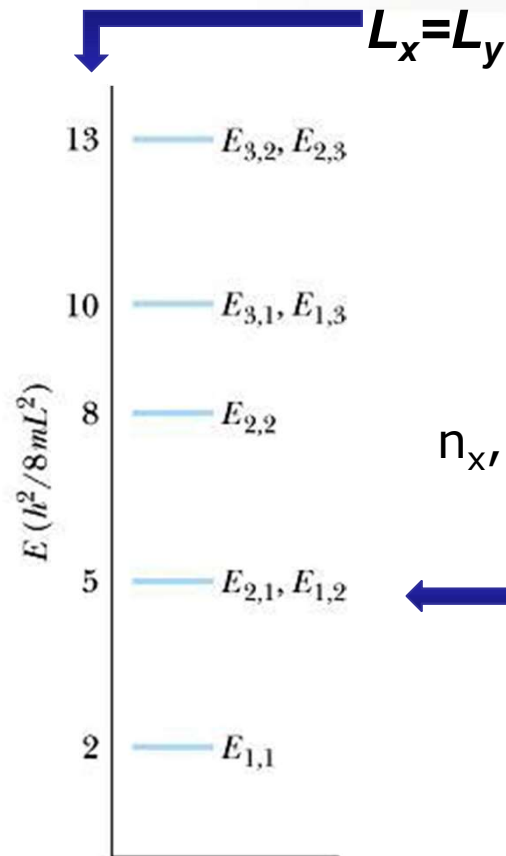
Kwantowa zagroda prostokątna (ang. rectangular corral)



Elektron jest pułapkowany w zagrodzie o rozmiarach  $L_x$  i  $L_y$  na powierzchni. Elektron nie może poruszać się równoległe do osi  $z$  a zatem nie może opuścić powierzchni.

Rozwiązanie równania Schrödingera dla zagrody prostokątnej pokazuje, że pułapkowanie elektronu jest równoważne dopasowaniu funkcji falowej elektronu do obu wymiarów niezależnie. Oznacza to, że kwantyzacja zachodzi niezależnie w  $L_x$  i  $L_y$ .

# Poziomy energetyczne w dwuwymiarowej nieskończonej studni potencjału



$L_x=L_y$  Energia elektronu zależy od dwóch liczb kwantowych i jest sumą energii elektronu wzdłuż osi OX i OY.

$$E_{n_x, n_y} = \left( \frac{h^2}{8mL_x^2} \right) n_x^2 + \left( \frac{h^2}{8mL_y^2} \right) n_y^2$$

$n_x, n_y$  – liczby kwantowe, dodatnie i całkowite

Różne stany o tej samej energii są **zdegenerowane**

## Przykład stanów zdegenerowanych :

dla  $L_x=L_y$  stan o  $n_x=2; n_y=1$  i stan o  $n_x=1; n_y=2$  mają tę samą energię  $E_{21}=E_{12}$

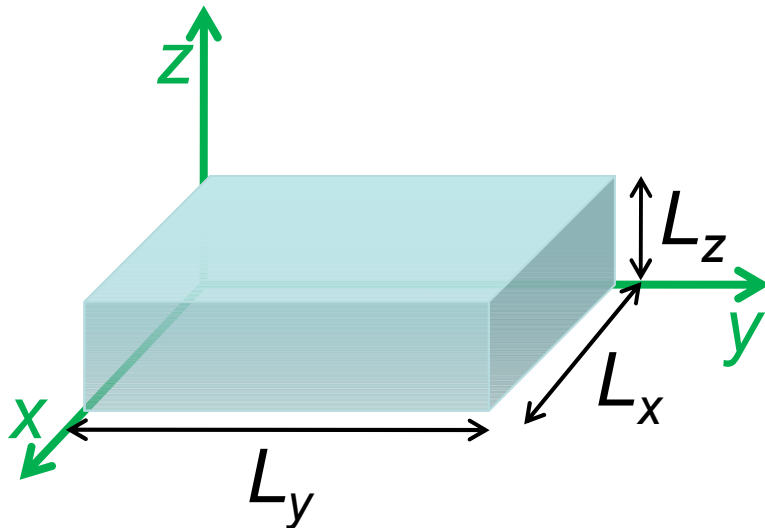
Diagram poziomów energetycznych elektronu pułapowanego w zagrodzie o  $L_x=L_y$

Stany zdegenerowane nie mogą występować w studni jednowymiarowej.



## Poziomy energetyczne w trójwymiarowej nieskończonej studni potencjału

Prostokątne pudło  
Studnia nieskończonego  
potencjału w 3D



Energia elektronu pułapowanego w prostokątnym pudle o rozmiarach  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$ :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

W przestrzeni 3D podajemy trzy liczby kwantowe aby określić stan energetyczny elektronu. W modelu studni o nieskończone wysokich ścianach (prostokątne pudło) te liczby kwantowe to:  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$ . Rzeczywisty potencjał atomu jest bardziej złożony ale nadal mamy 3 liczby kwantowe.