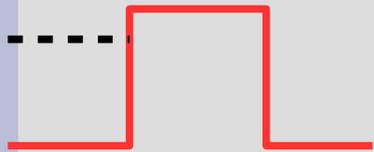


# Лекция 5. Потенциальные барьеры и потенциальные ямы

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

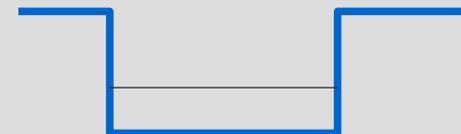


барьер



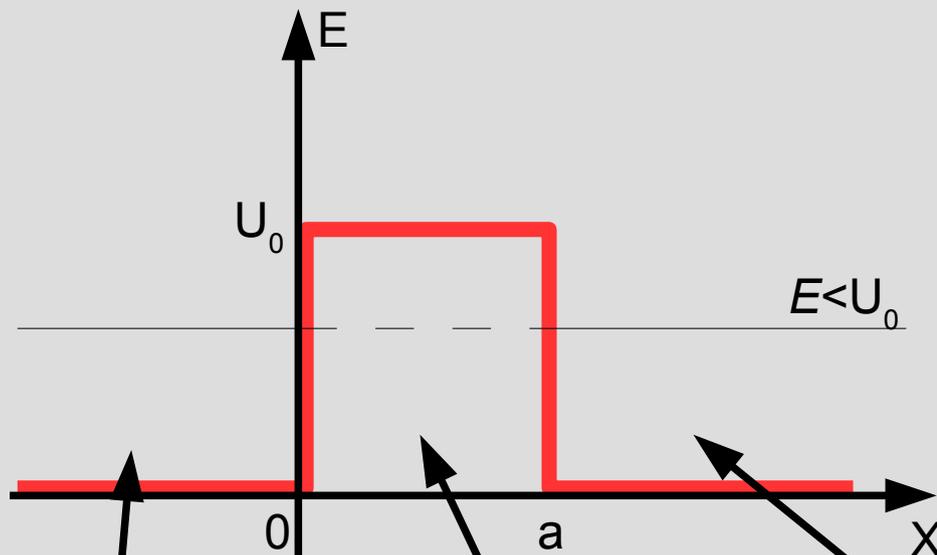
измерение прозрачности (коэффициента прохождения), нахождение энергии стационарных состояний в яме

потенциальная яма



# Часть 1. Туннельный эффект

## Задача 1: подбарьерное туннелирование



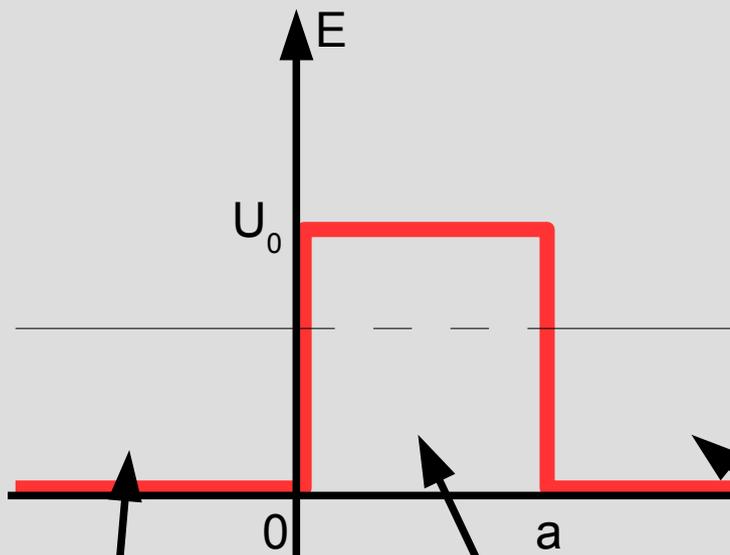
- частицы падают на барьер слева
- после барьера отраженной волны нет
- для строгого решения необходимо использовать условия непрерывности и гладкости волновой функции

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

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

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

# Задача 1: подб



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

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

$$\Psi_2 = B_1 e^{\kappa x}$$

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

точный ответ, с заменой  $k$  на  $ik_2$  верен и для надбарьерного прохождения

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

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

+ усидчивость...

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

коэффициент прохождения

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

# Асимптотика 1

$(\kappa a) \gg 1$  широкий и/или высокий барьер

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

если дополнительно  $k \ll \kappa$

$$D \approx 16 \frac{k^2}{\kappa^2} e^{-2\kappa a} \approx \frac{16E}{U_0} e^{-2\kappa a}$$

Оценка

$$D \approx e^{-2\kappa a}$$

$sh(\kappa a)$

коэффициент прохождения

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

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

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

точный ответ, с заменой  $\kappa$  на  $ik_2$  верен и для надбарьерного прохождения

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

## Асимптотика 2

( $\kappa a \ll 1$ )  
 $k \sim \kappa$  или  $k \gg \kappa$

узкий барьер и/или энергия частицы близка к высоте барьера

$$D \approx \frac{4k^2}{4k^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 a^2} \approx 1 - \frac{1}{4} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{U_0^2}{E} a^2$$

Не экспоненциальная зависимость!

коэффициент прохождения

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

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

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

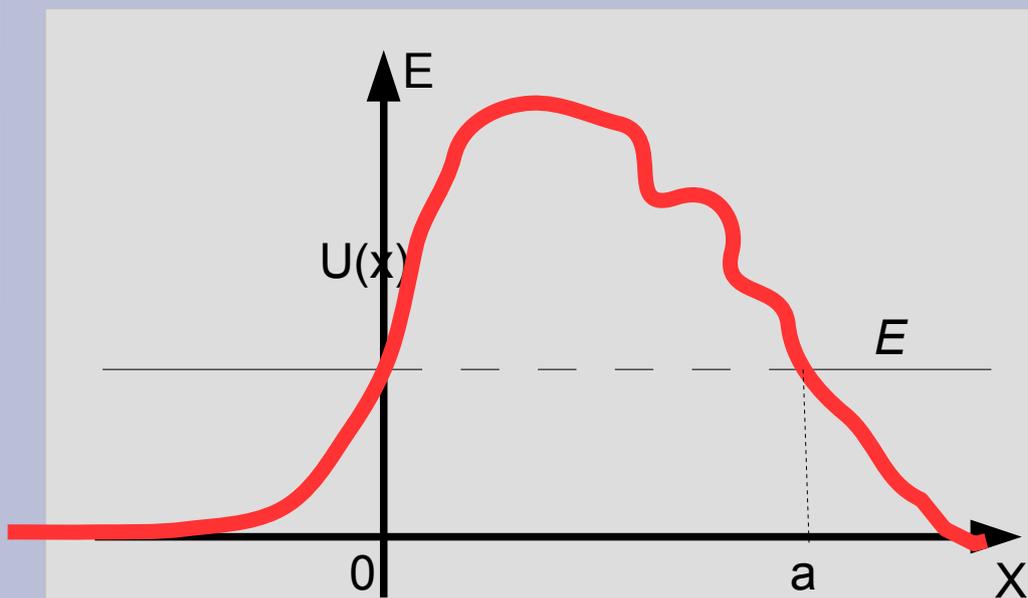
$$\Psi_2 = B_1 e^{\kappa x}$$

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

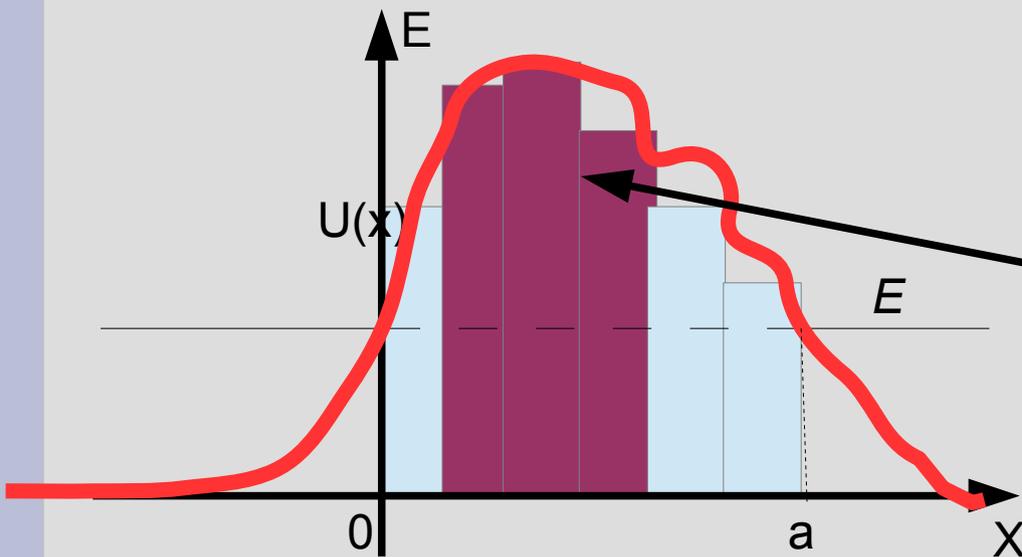
точный ответ, с заменой  $k$  на  $ik_2$  верен и для надбарьерного прохождения

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

# Приближенная формула для барьера произвольной формы



# Приближенная формула для барьера произвольной формы



Обычно применяется для «слабо прозрачных» барьеров, когда ослабление велико

Основной вклад в ограничение пропускания от «высоких» участков

Предэкспоненты отброшены с этой же точностью

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

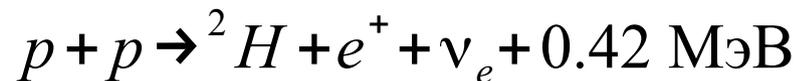
## Примеры эффекта подбарьерного туннелирования

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

При

## Пример 1

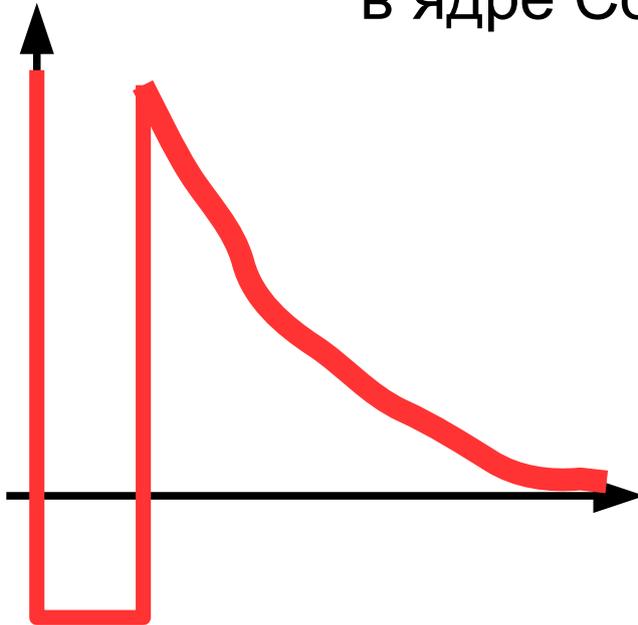
**протон-протонный цикл в звёздах**



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

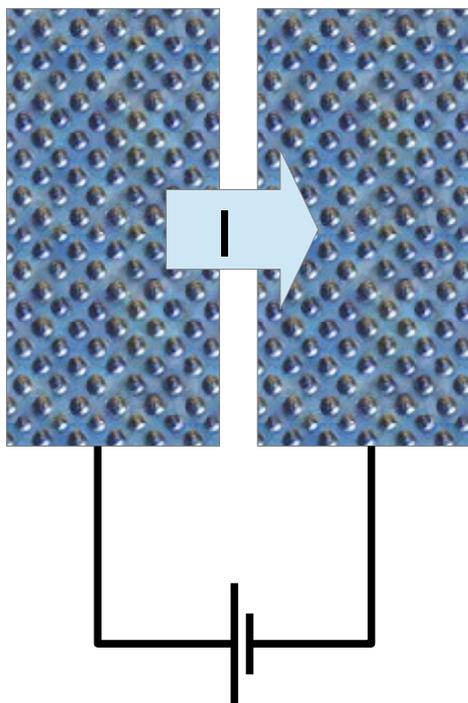


**альфа-распад плутония:**  
энергия альфа-частицы 5.6 МэВ  
высота барьера вблизи ядра  
( $Z_\alpha = 2$ ,  $Z' = 92$ )  $\sim 200$  МэВ

- 1) Реа
  - 2) Тун
  - 3) Оп
- МИК

При  
Пример 2

- 1) Реа
- 2) Тун  
микро
- 3) Опти



Высота барьера ~ работы  
выхода (2..4 эВ)

Туннельный ток ~  
вероятности перехода  
электрона =  $D$

Оценка:

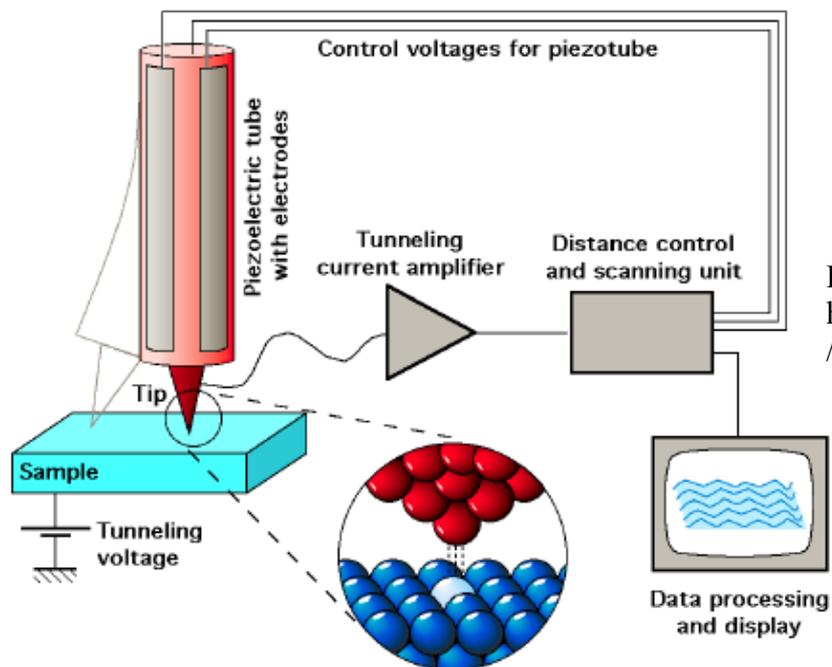
$$D \approx \exp(-2 \kappa d) \approx \exp\left(-2 \sqrt{\frac{2 m A_{\text{вых}}}{\hbar^2}} d\right)$$

характерный размер

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

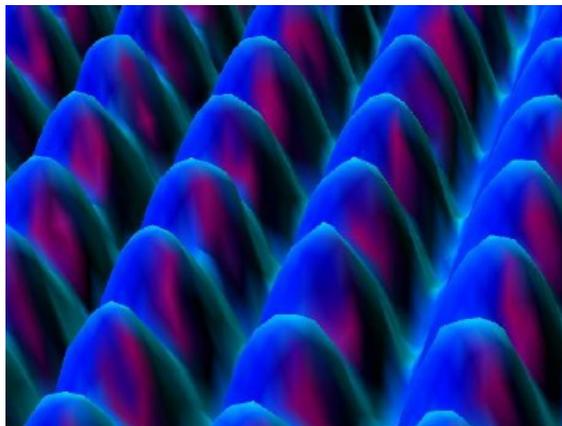
# Пример 2

- 1) Реа
- 2) Тун
- МИК
- 3) Оп

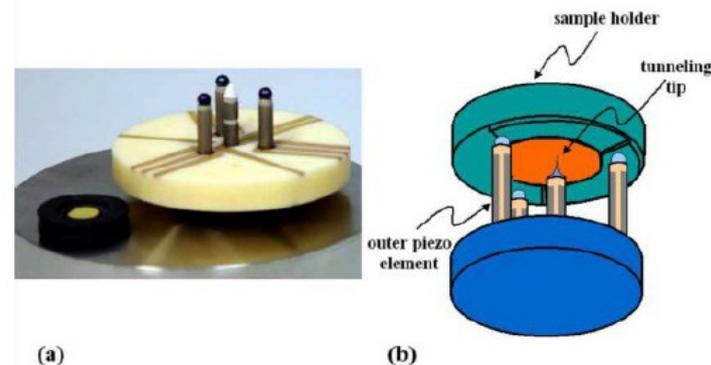


Википедия, Сканирующий туннельный микроскоп,  
[http://en.wikipedia.org/wiki/Scanning\\_tunneling\\_microscope](http://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_tunneling_microscope)

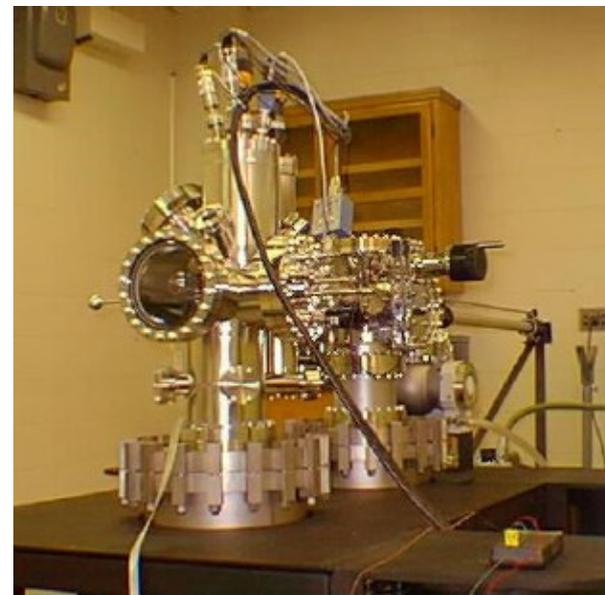
Ni



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](http://www.fz-juelich.de/ibn/Scanning_probe_microscopy)

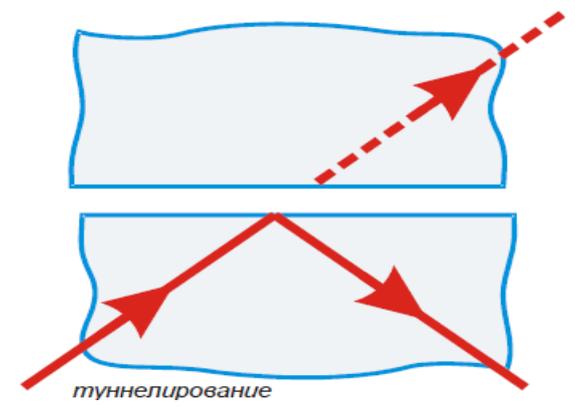
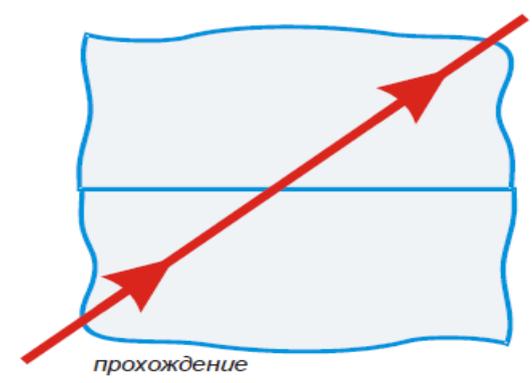
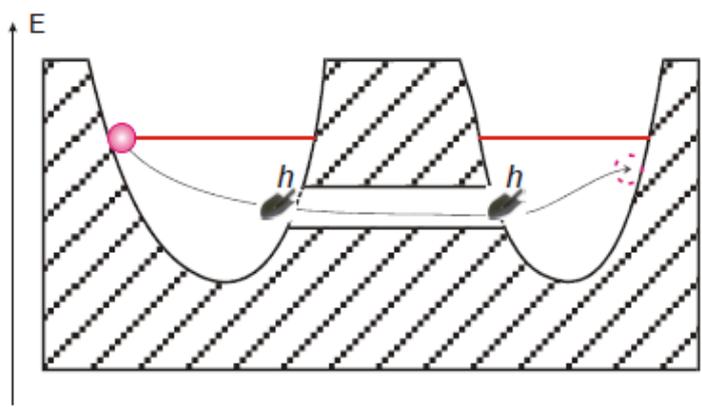
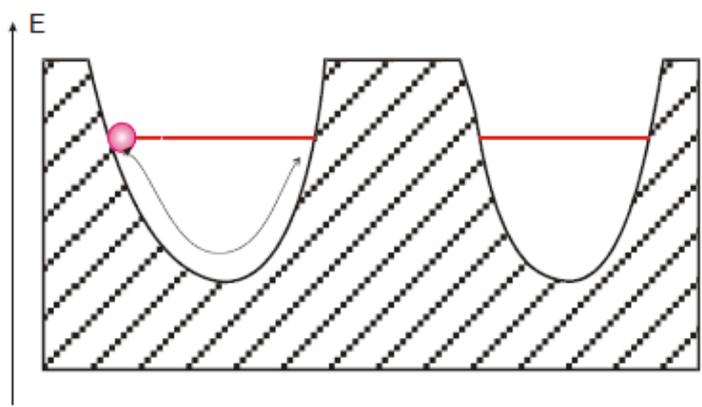


Wake Forest University, STM Group,  
<http://www.wfu.edu/nanotech/Microscopy%20Facility/STMInstructions.html>

При

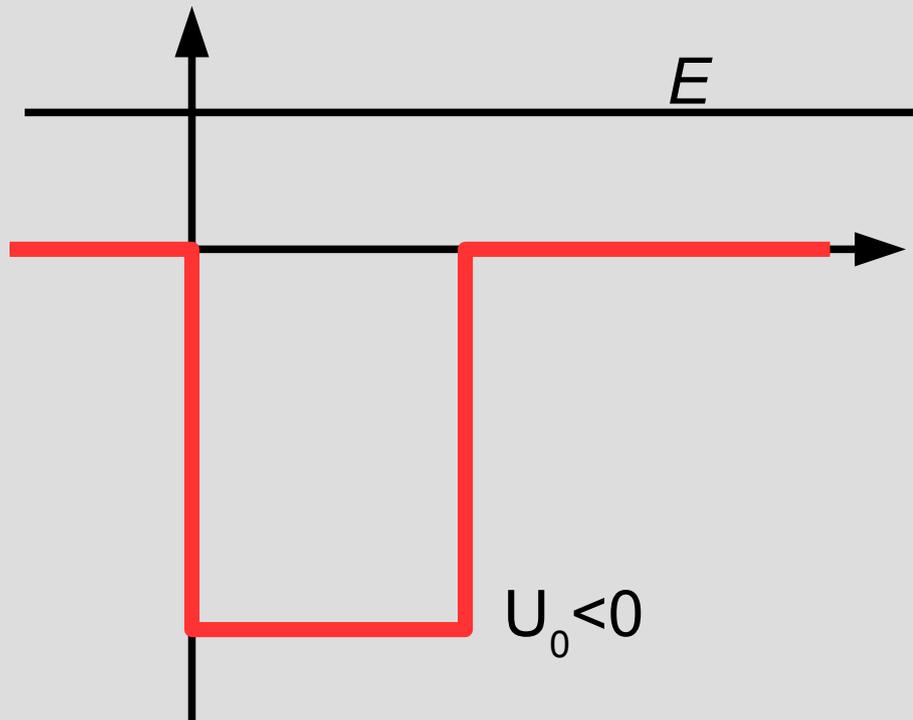
# Оптическая аналогия

- 1) Рефракция
- 2) Туннельный эффект
- 3) Оптический эффект



## Часть 2. Потенциальные ямы

## Прохождение над ямой (эффект Рамзауэра)



результат для подбарьерного туннелирования

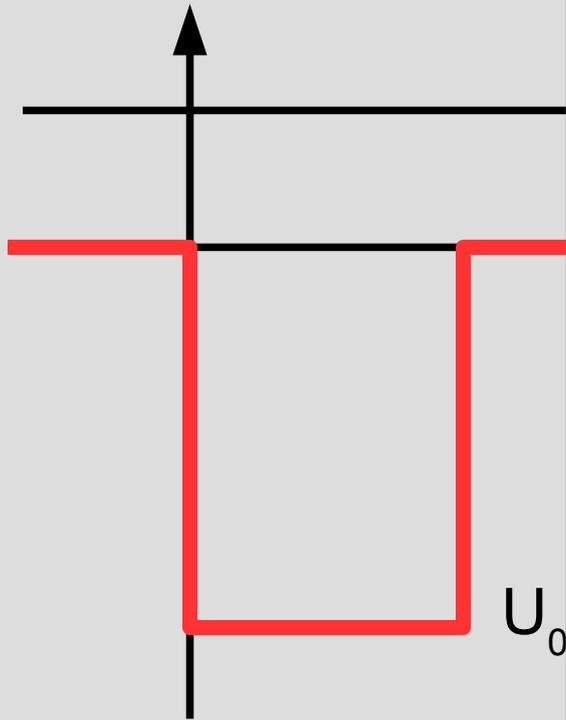
$$D = \frac{4k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2(\kappa a)}$$

замена

$$\kappa \leftarrow i k_2, \quad \operatorname{sh}(\kappa a) \leftarrow i \sin(k_2 a), \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E + |U_0|)}{\hbar^2}}$$

$$D = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

## Прохождение над ямой (эффект Рамзауэра)



«Просветление» ( $D=1$ )

- если на размере ямы укладывается половина длины волны

Оптическая аналогия:

- отраженная волна в противофазе, так как на одном из отражений происходит скачок фазы на  $\pi$

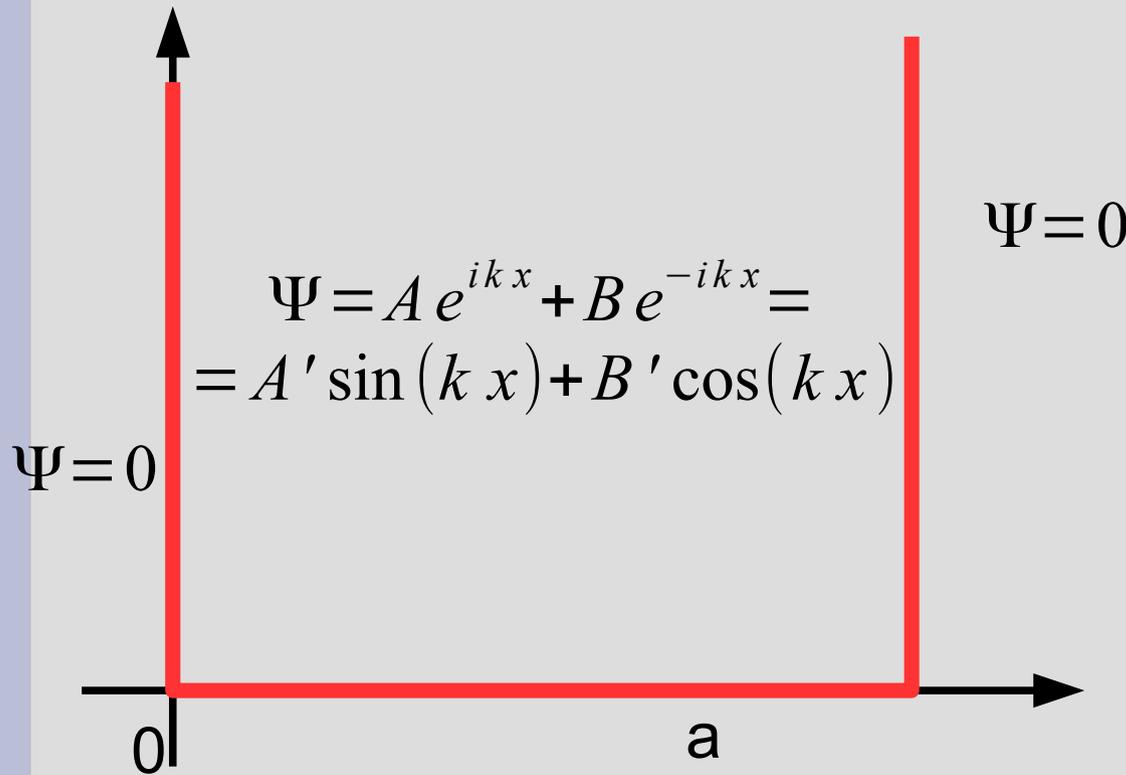
$$D = \frac{4 k_1^2 k_2^2}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

ьерного

— — —  
|  
(  $k a$  )  
|

o|)

## Одномерная яма с бесконечными стенками

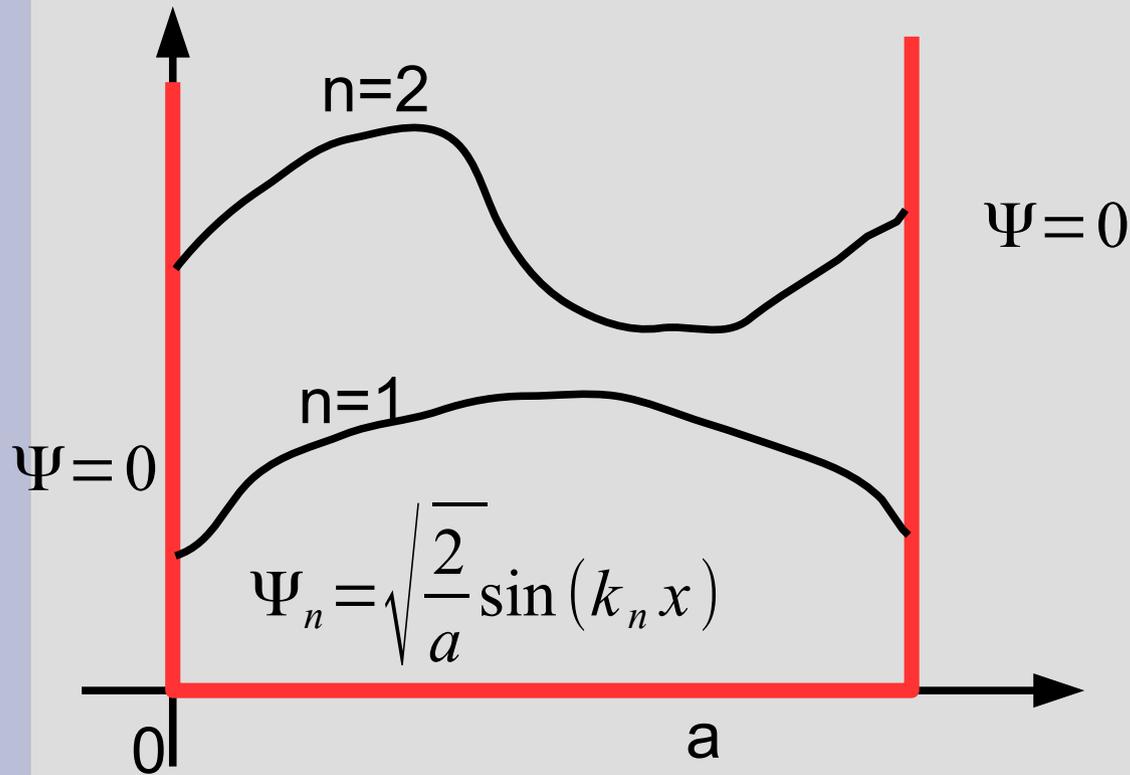


Бесконечный потенциал — нефизичен, остается только непрерывность волновой функции (гладкость не требуем)

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

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0$$

# Одномерная яма с бесконечными стенами



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

$$k_n a = \pi n$$

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

для  $m_e$  и атомного  
размера 1Å

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m a^2} \simeq 30 \text{ эВ}$$

для  $M_p$  и ядерного  
размера:  $\sim 100 \text{ МэВ}$

## Общие утверждения:

- дискретные уровни для локализованных состояний
- квантовые числа (пока одно), задающие состояние
- в одномерном случае номер уровня и количество нулей волновой функции связаны

для  $m_e$  и атомного  
размера  $1\text{Å}$

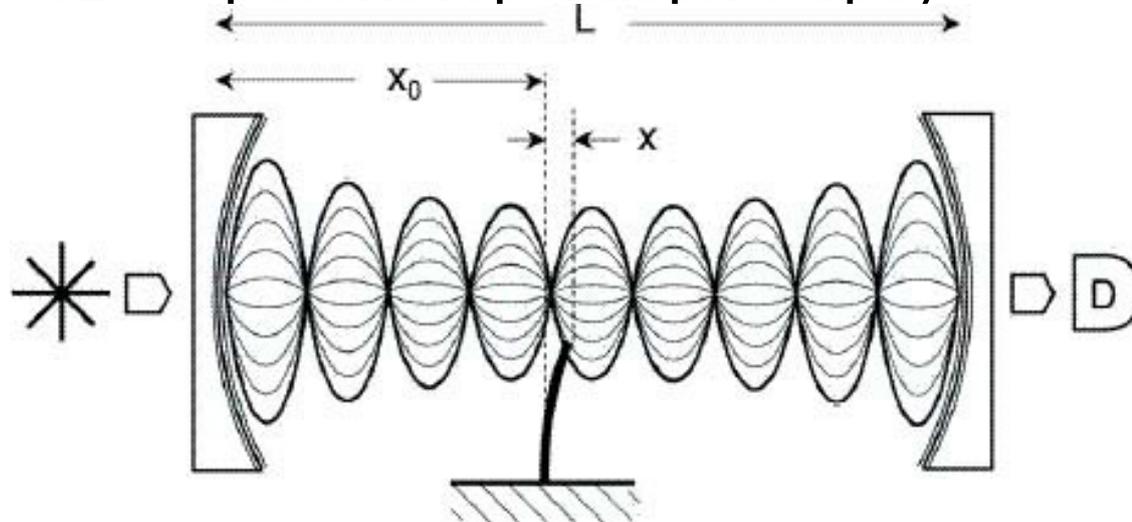
$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m_e a^2} \approx 30 \text{ эВ}$$

$M_p$  и ядерного  
радиуса:  $\sim 100 \text{ МэВ}$

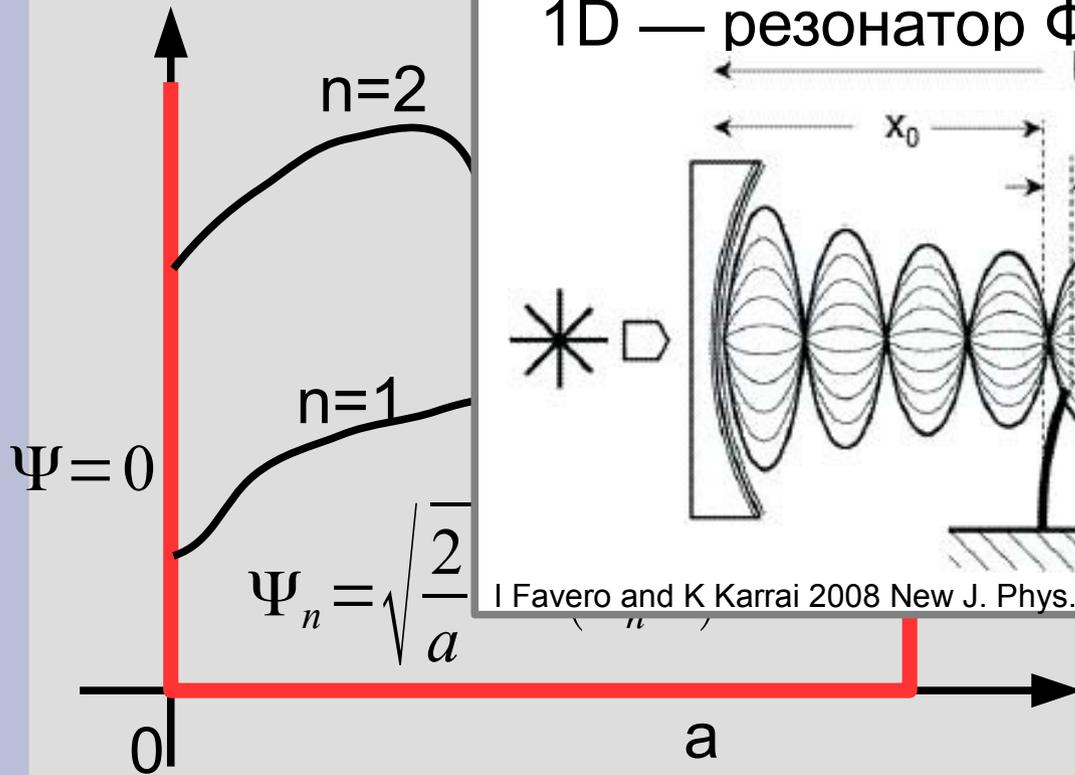
Одно

Оптическая аналогия:

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



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



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

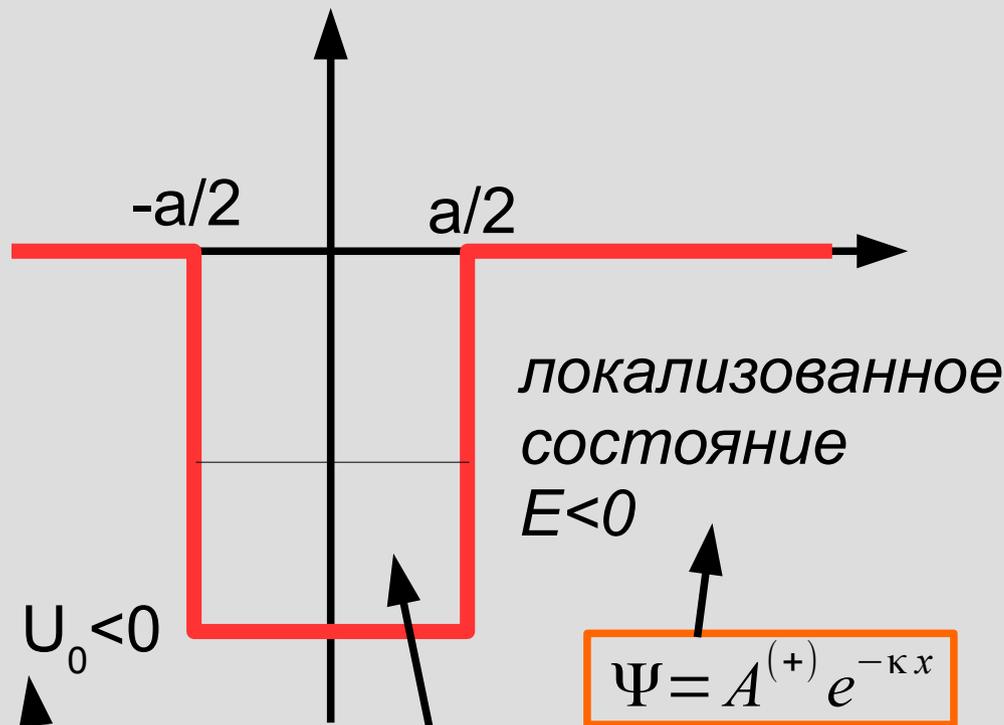
**ожидания:**  
уровни для  
одномерных

частицы (пока

одномерное, связанные  
состояние

- в одномерном случае  
номер уровня и  
количество нулей  
волновой функции  
связаны

## Симметричная одномерная яма конечной глубины



- 1) Для локализованного состояния можно выбрать **действительные** волновые функции
- 2) Потенциал симметричен, поэтому распределение вероятностей (наблюдаемая величина!) симметрично. Поэтому волновые функции **четные или нечетные**.

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

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

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

основное состояние — с косинусом  
(без «лишних» нулей)

Симметр

По симметрии — можно «сшивать» только на одной границе.  
Для анализа существования решений нормировка не важна,  
можно положить  $V=1$

типа COS

$$\begin{cases} \cos(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ -k \sin(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{cases}$$

$$\operatorname{tg}\left(\frac{k a}{2}\right) = \frac{\kappa}{k}$$

типа SIN

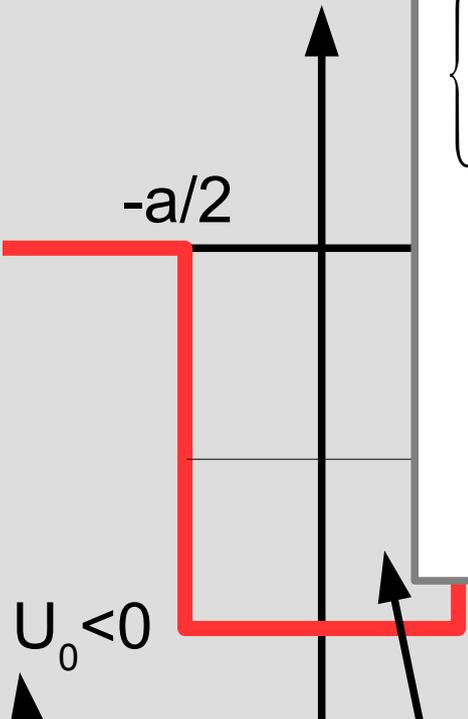
$$\begin{cases} \sin(k a/2) = A e^{-\kappa a/2} \\ k \cos(k a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2} \end{cases}$$

$$\operatorname{tg}\left(\frac{k a}{2}\right) = -\frac{k}{\kappa}$$

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

$$\frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{2 m U_0}{\hbar^2} \frac{1}{k^2} - 1}$$

симметрично. Поэтому  
волновые функции  
**четные или нечетные.**



$U_0 < 0$

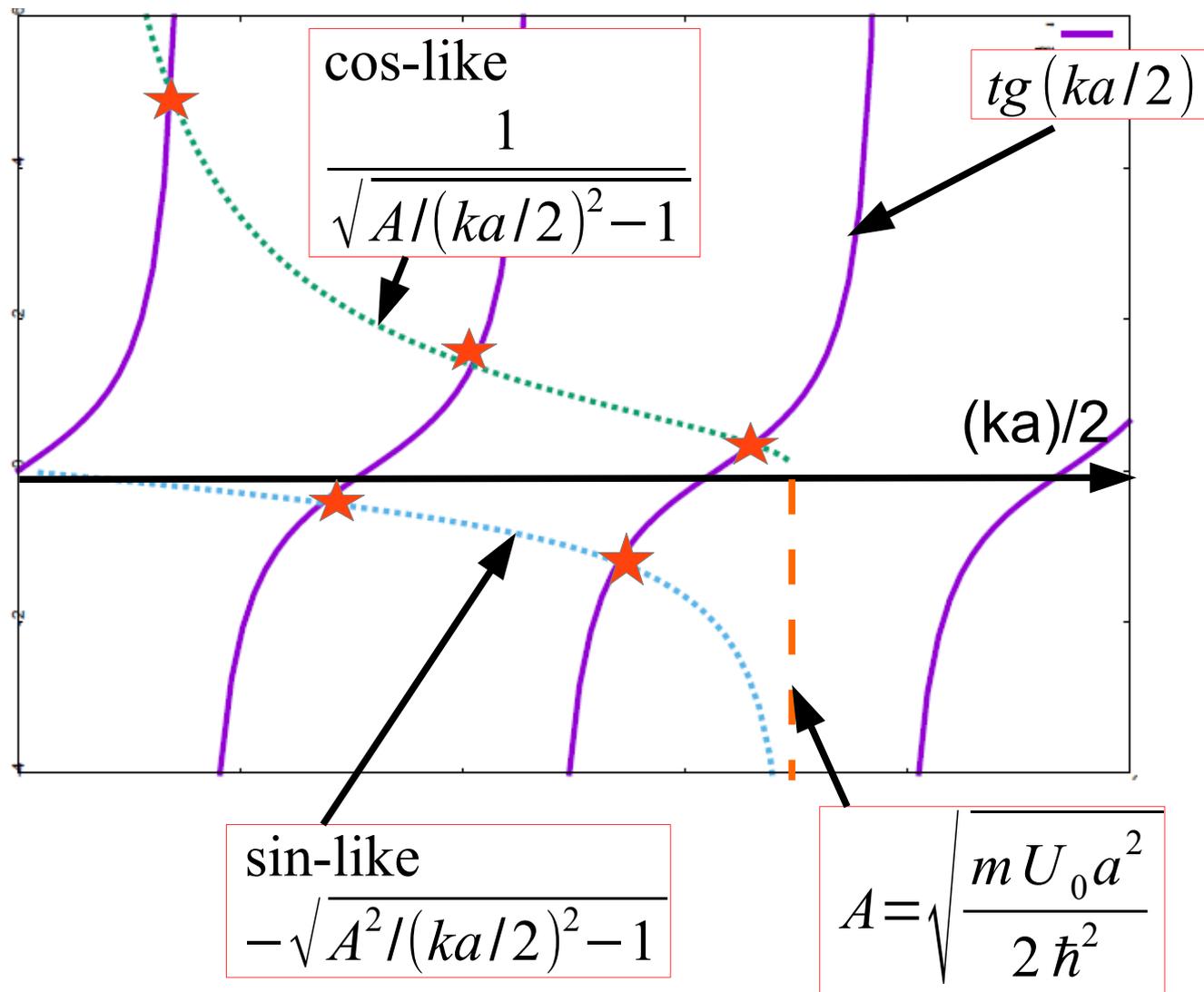
$-a/2$

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

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

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

основное состояние — с косинусом  
(без «лишних» нулей)



о на одной границе.  
 омировка не важна,

типа SIN

$$k a/2) = A e^{-\kappa a/2}$$

$$a/2) = -\kappa A e^{-\kappa a/2}$$

$$\left(\frac{k a}{2}\right) = -\frac{k}{\kappa}$$

$$= \sqrt{\frac{2 m U_0}{\hbar^2} \frac{1}{k^2} - 1}$$

ично. ПОЭТОМУ  
 е функции  
**или нечётные.**

Конечное число решений  
 Хотя бы одно (типа COS) есть всегда  
 Решения типа SIN есть только если

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

## Сферическая прямоугольная потенциальная яма: вопрос о существовании связанного состояния

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

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

если  $\Psi$  от углов не зависит,  
то в сферических координатах.  $\Delta \Psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)$

- 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

### Пример 1: Атом

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

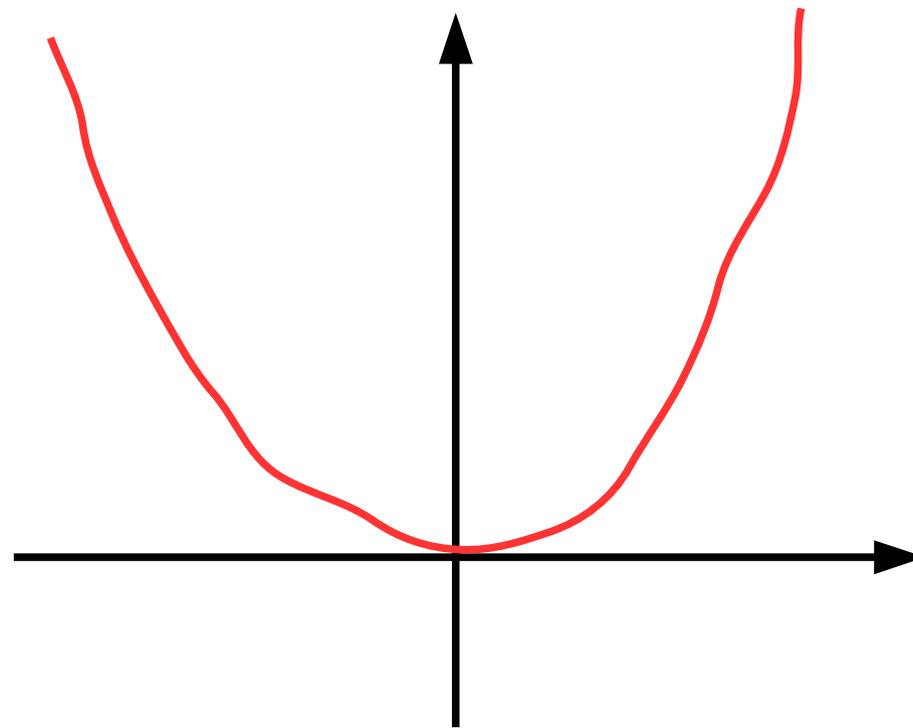


Кулоновское взаимодействие создает потенциальную яму для электрона вблизи ядра. Стационарные состояния электрона в такой яме и есть «орбиты» электрона.

## Примеры потенциальных ям

### Пример 2: Гармонический осциллятор

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



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

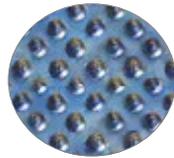
Задача решается точно (в полиномах Эрмита). В 1D эквидистантные невырожденные уровни

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

## Примеры потенциальных ям

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

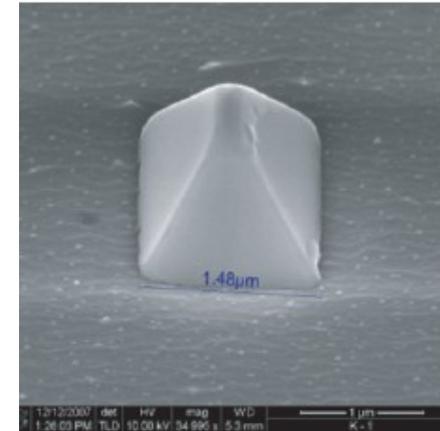
### Пример 3: Реализации в полупроводниках и наночастицах



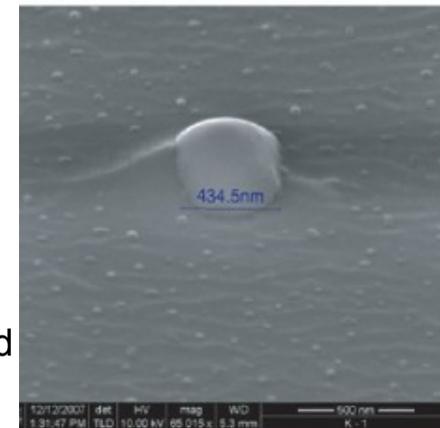
металлическая  
гранула размера  
~нм

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

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



(b)



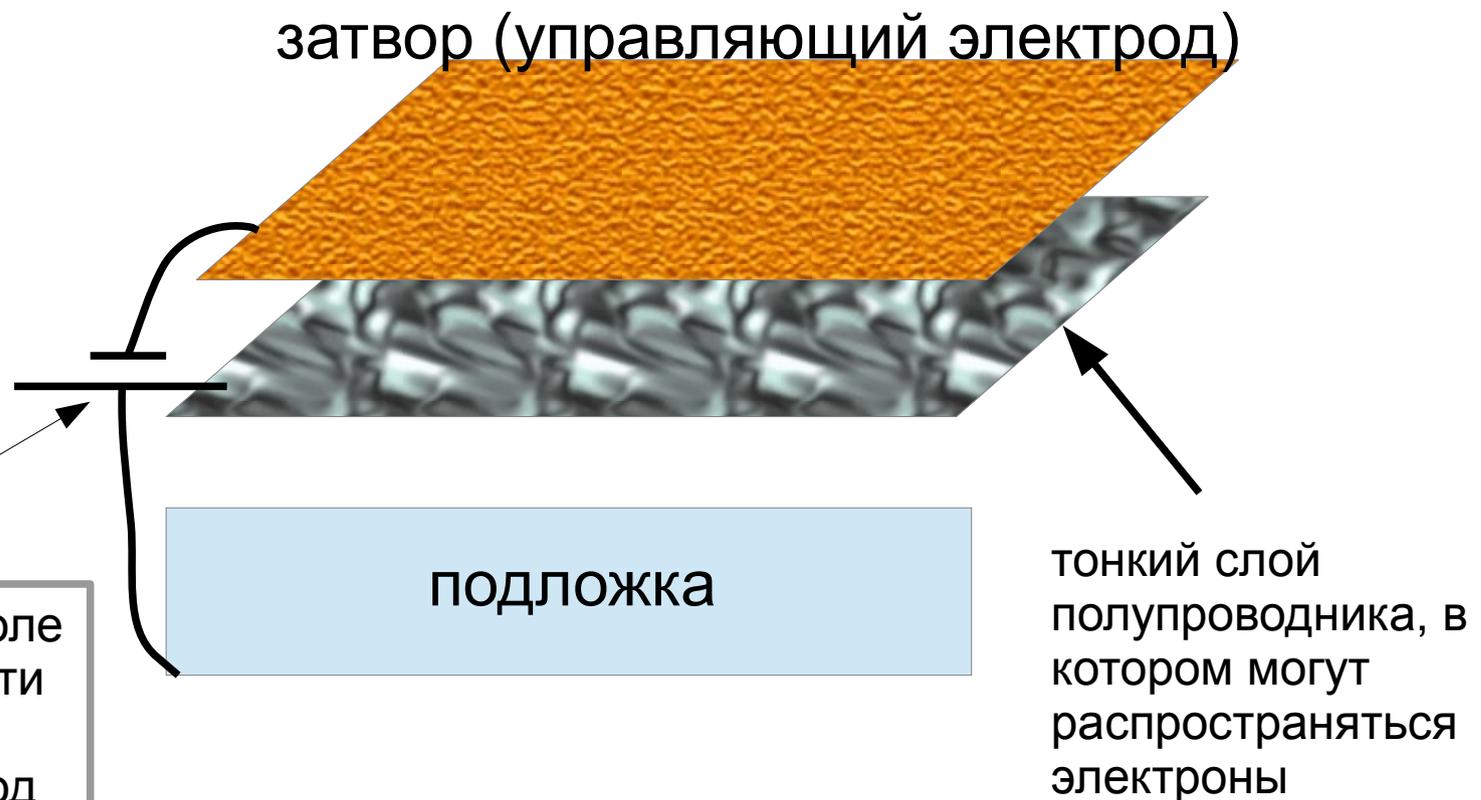
(e)

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

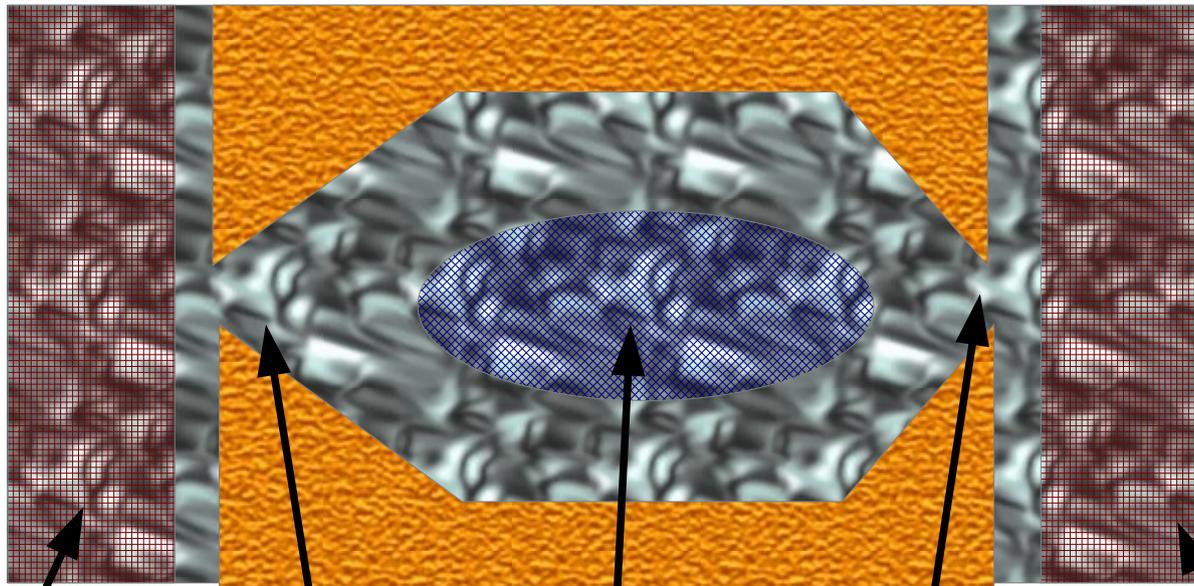


электрическое поле  
в этой полярности  
выталкивает  
электроны из-под  
затвора

## Примеры потенциальных ям

специальная форма затвора!

штриховка — разрешенные области для электронов



«квантовая точка»

берег 1  
(исток)

берег 2  
(сток)

туннельный промежуток

электри  
в этой  
выт  
электр

затвора

аивно)

а, в  
ься

## Часть 3. Дополнительные вопросы

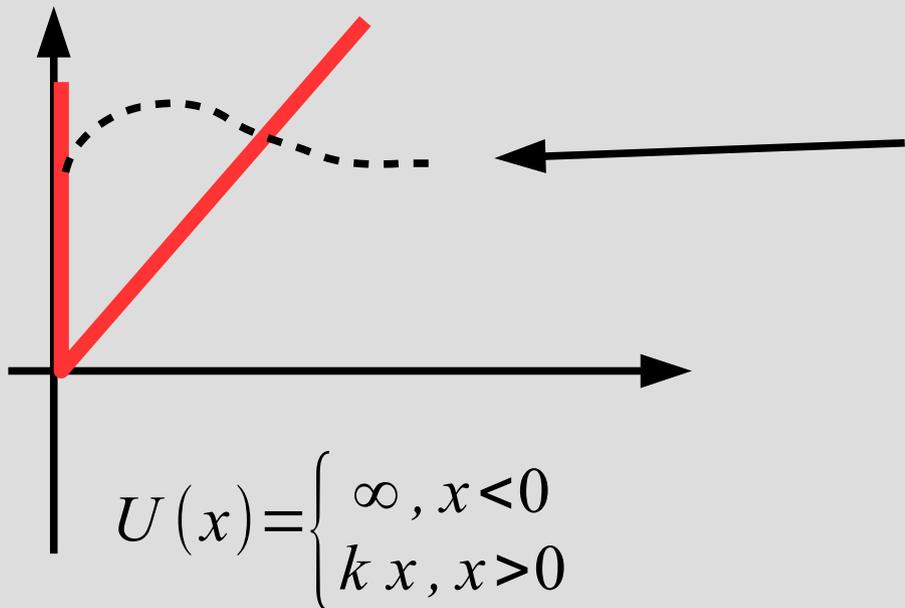
## Некоторые приближенные методы

### Приближение Бора-Зоммерфельда

$$\oint \vec{p} d\vec{l} = n h$$
$$\oint \vec{k} d\vec{l} = 2 \pi n$$

на «квазиклассической» траектории частицы укладывается целое число длин волн де Бройля

### «Угадывание» энергии основного состояния

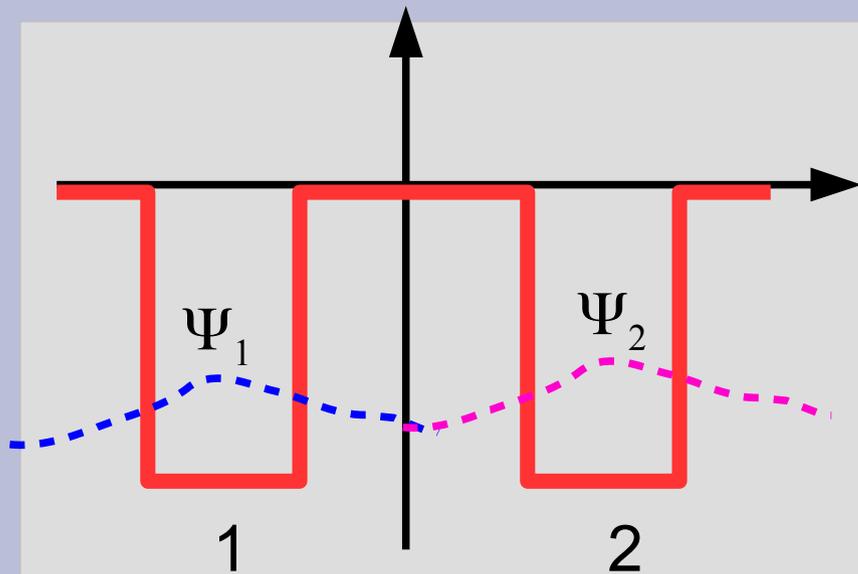


Точное решение в аналитических функциях невозможно (решается через функции Эйри), но волновая функция О.С. должна быть качественно такой. Пробная функция

$$\Psi = x e^{-ax}$$

заведомо не собственная, но удобная. Найти среднюю энергию и минимизировать по подстроечному параметру  $a$

## Связанные ямы



Две одинаковые ямы, достаточно далеко друг от друга (вероятность туннелирования есть, но мала)

Без учёта туннелирования

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

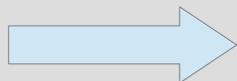
Модельный учёт туннелирования:  
оператор туннелирования

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

Задача на поиск собственных функций:  $(\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi = E \Psi$

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

туннельное расщепление  
уровня энергии



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

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

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

изначально частица локализована в левой яме (несобственное состояние!)

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

Вероятности обнаружить частицу в разных ямах осциллируют:

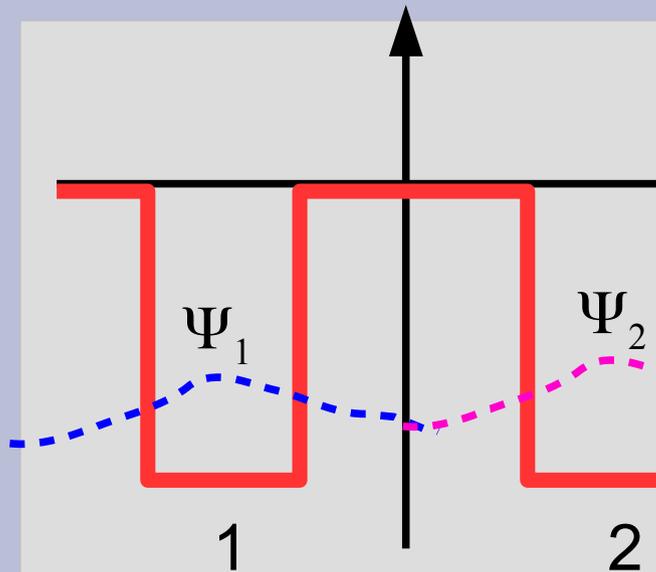
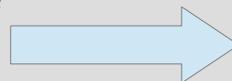
$$\begin{aligned} w_1 &= \cos^2(Tt) \\ w_2 &= \sin^2(Tt) \end{aligned}$$

Общее утверждение: если изначально система (частица) не в собственном состоянии, то наблюдаемое состояние осциллирует между «спутанными» состояниями

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

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

туннельное расщепление  
уровня энергии

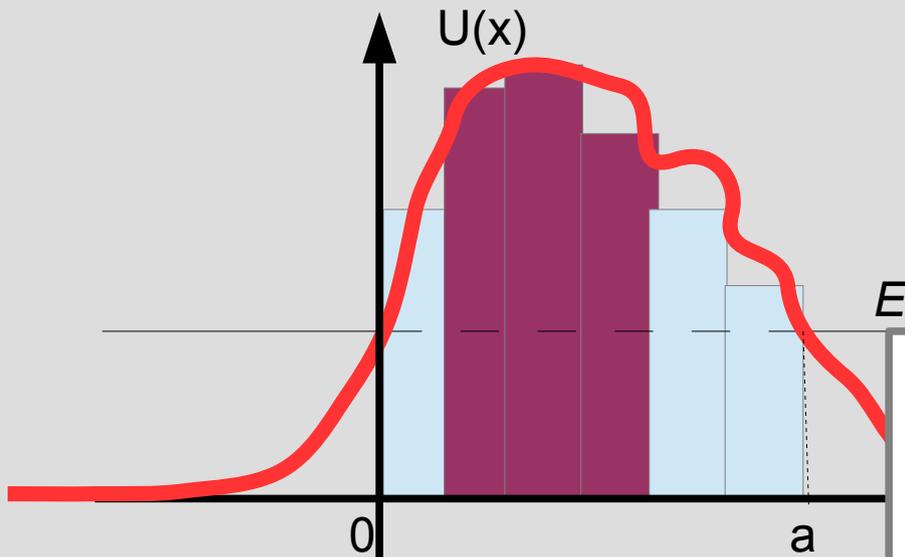


Задача на поиск собствен

# Главное на лекции

$$k_n a = \pi n$$

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



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

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

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

