Wykład 22: Studnie i bariery

Dr inż. Zbigniew Szklarski Katedra Elektroniki, paw. C-1, pok.321

szkla@agh.edu.pl

http://layer.uci.agh.edu.pl/Z.Szklarski/

26.05.2023

Wydział Informatyki, Elektroniki i Telekomunikacji - Elektronika

Równania Schrödingera dla jednego wymiaru

Ogólne równanie Schrödingera dla cząsteczki swobodnej o stałej energii kinetycznej (nie uwzględniamy energii spoczynkowej tzn. $E = E_k$).

Niezależne od czasu równanie Schrödingera dla cząsteczki swobodnej $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$

 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$

$$\psi(x) = Ae^{i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x} + Be^{-i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x}$$

Rozwiązaniem są funkcje falowe:

Ogólne równanie Schrödingera dla cząsteczki poruszającej się w potencjale V(x).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

Rozwiązaniem są funkcje falowe:

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-i\frac{E_nt}{\hbar}}$$

Równanie Schrödingera niezależne od czasu – energia potencjalna V(x) jest stała w czasie.

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

Nieskończona studnia potencjału

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



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

> Warunki brzegowe: $\psi(0) = \psi(L) = 0$

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

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

Potencjał wynosi zero wewnątrz i zmierza do nieskończoności na zewnątrz studni

26.05.2023

Wydział Informatyki, Elektroniki i Telekomunikacji - Elektronika

Х

Proponowane rozwiązanie – wygodniejsze w przypadku ruchu ograniczonego:

Stosując warunek brzegowy:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

dla x=0, ψ=0

 $A \cdot 0 + B \cdot \cos(0) = 0 \implies B = 0$

pozostaje

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

obliczamy pochodną:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -Ak^2\sin(kx)$$

po podstawieniu do równania $\psi(x)$ będzie rozwiązaniem gdy:

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

26.05.2023



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≠0.

Jest to wynikiem obowiązywania zasady nieoznaczoności Heisenberga:



26.05.2023

Nieskończona studnia potencjału c.d.

Rozwiązania równania Schrödingera $\psi_n(x) = A \sin(\frac{n\pi}{T}x)$

odpowiadają falom stojącym z różną liczbą n węzłów wewnątrz studni



Telekomunikacji - Elektronika

Przykłady:

Obliczyć na podstawie niezależnego od czasu równania Schrödingera energię elektronu swobodnego.

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-kx}$$
$$\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$$
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = i^2k^2Ae^{ikx} + i^2k^2Be^{-ikx} = i^2k^2\psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[-k^2\psi(x)] = E\psi(x)$$

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

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

bo elektron swobodny czyli $V=E_{pot}=0$

- Cząsteczka o masie i energii E znajduje się w jednowymiarowej studni potencjału –a/2< x <a/2 o nieskończenie wysokich ścianach.
- Zapisać równanie Schrödingera dla cząstki i podać jakie warunki musi spełniać funkcja falowa;
- Obliczyć wartości własne energii cząstki;
- Obliczyć i narysować funkcje gęstości prawdopodobieństwa dla dwóch pierwszych liczb kwantowych n;
- Obliczyć prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w przedziale a/6 < x < a/3 dla n = 3.</p>

Zastosowanie równania Schrödingera dla bariery potencjału

- Cząsteczka o masie *m* i energii *E* porusza się w kierunku dodatnim osi X, napotykając w x = 0 potencjał schodkowy o wysokości V₀ jak na rysunku.
 Przyjąć *E* < V₀.
- Z równań klasycznych wynika że:

energia cząsteczki

$$E = E_k + E_p$$
 $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

dla x <
$$0$$

$$\frac{p^2}{2m} \qquad \text{dla x > 0} \qquad E = \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x) = V_0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{p^2}{2m} < C(x) = C(x) = V_0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{p^2}{2m} < C(x)$$

cząsteczka nie może wejść w obszar x > 0 !!

E =

Wydział Informatyki, Elektroniki i Telekomunikacji - Elektronika

0

równanie Schrödingera dla obszaru I:

$$x \le 0$$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x)$ jak dla cząsteczki swobodnej

Rozwiązaniem ogólnym jest funkcja własna – fala bieżąca:

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

fala bieżąca fala odbita w w kierunku kierunku "-" "+" osi X osi X gdzie *k*₁ *obliczamy podstawiając rozwiązanie do równania dla obszaru I:*

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Funkcja falowa odpowiadająca funkcji własnej:

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik_1x}e^{-i\frac{Et}{\hbar}} + Be^{-ik_1x}e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = Ae^{i\left(k_1x - \frac{Et}{\hbar}\right)} + Be^{i\left(-k_1x - \frac{Et}{\hbar}\right)}$$

równanie Schrödingera dla obszaru II:

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

Rozwiązaniem jest podobna funkcja własna – fala bieżąca:

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$
 gdzie $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$
ale: gdy x $\rightarrow +\infty$ rozbieżne więc C = 0

$$\psi_{II}(x) = De^{-k_2 x}$$

Funkcja własna i jej pierwsza pochodna dla całego obszaru osi X musi być wszędzie skończona, ciągła i jednoznaczna, zatem:

dla x = 0 "zszycie" tzn.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \implies A + B = D$$
 oraz

$$\frac{d\psi_I(0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dx} \implies A - B = i\frac{k_2}{k_1}D$$

stąd

$$\psi(x) = \begin{cases} = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} & \text{dla } x \le 0 \\ = De^{-k_2 x} & \text{dla } x > 0 \end{cases}$$

 $\Psi^*\Psi = D^*De^{-2k_2x} > 0 !!$

D można obliczyć z warunku normalizacji

26.05.2023

Padająca na barierę cząsteczka
ma energię
$$E > V_0$$

klasycznie – przejdzie bez problemu,
z pędem $p_{II}^2 / _{2m} = E - V_0$
kwantowo – może się odbić.
Dla obszaru I: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x)$
 $\psi_I(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$
Dla obszaru II: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = (E - V_0) \psi(x)$

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

brak odbicia \rightarrow

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} \qquad k_2 = \frac{p_I}{\hbar}$$

Wydział Informatyki, Elektroniki i Telekomunikacji - Elektronika

dla x = 0 "zszycie" tzn.

Skończona bariera potencjału

Energia potencjalna elektronu ma postać:

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

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.

szerokość bariery 2a

26.05.2023

□ Klasycznie:

Jeżeli E>V₀, wtedy cząstka przechodzi przez barierę

$$p = \sqrt{2mE} \implies p' = \sqrt{2m(E - V_0)} \implies p = \sqrt{2mE}$$

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

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

W mechanice kwantowej :

Jeżeli E>V₀, to cząstka przechodzi ponad barierą lub odbija się od niej

Jeżeli E<V₀, wtedy istnieje niezerowe prawdopodobieństwo, że cząstka przejdzie przez barierę; jest to **tunelowanie**

W obszarze bariery mamy falę zanikającą (evanescent wave), ekspotencjalny zanik wraz z x, dlatego amplituda fali dla x>a jest zmniejszona

26.05.2023

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

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

□ W obszarach I i III, kiedy V(x)=0:

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

W obszarze II równanie Schrödingera :

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

W obszarach tych rozwiązania są w formie fal płaskich poruszających w prawo lub w lewo

 $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V_0 \right)$ $\psi(x) = Ae^{iqx} + B e^{-iqx}$ Obszar II

współczynniki A i B można określić formułując odpowiednie warunki fizyczne

26.05.2023

WydaiaalInfoomaayyki,Eleykkooikki i Teleykonvuikkaiji-Eleykkooikka

 $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V_0 \right)$ $\psi(x) = Ae^{iqx} + B e^{-iqx}$ Obszar II

współczynniki A i B można określić formułując odpowiednie warunki fizyczne

26.05.2023

Wydział Informatyki, Elektroniki i Telekomunikacji - Elektronika

Tunelowanie przez barierę potencjału

Rozwiązania dla E<V₀

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

Współczynnik transmisji T wykazuje zanik ekspotencjalny, zależny od szerokości bariery

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

26.05.2023

Wydział Informatyki, Elektroniki i Telekomunikacji - Elektronika

Przykład:

Jeżeli T=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 ekspotencjalnej, współczynnik transmisji jest bardzo czuły na niewielkie zmiany: szerokości bariery *a*, różnicy energii V₀-E. Współczynnik ten zależy również od masy cząstki.

26.	05	.20	23

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.

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.

W 1958 roku japoński fizyk pracujący w Stanach Zjednoczonych, Leo Esaki, zaobserwował je w silnie domieszkowanym złączu półprzewodnikowym typu p-n. Efekt ten wykorzystany został w działaniu diody tunelowej, pozwalającej w tym czasie konstruować oscylatory i wiele innych szeroko stosowanych układów elektronicznych.

26.05.2023

- W 1960r amerykański fizyk norweskiego pochodzenia, Ivar Giaever, zademonstrował tunelowanie elektronów między dwoma paskami metalicznymi rozdzielonymi cienką przekładką izolatora. Jako barierę tunelową wykorzystał w tym eksperymencie warstewkę tlenku aluminium o grubości około 2 nm. Doświadczenie to potwierdziło teorie nadprzewodnictwa
- 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 połowie stycznia 1979 Gerd Binnig i Heinrich Rohrer przedstawili pierwszy patent odsłaniający tajemnicę skaningowego mikroskopu tunelowego – nagroda Nobla w 1986r.
- W 1982 roku opublikowano pierwsze wyniki pomiarów pokazujących ułożenie atomów na powierzchni CaIrSn4, Au i Si(111).
- W 1986 nagrodę Nobla otrzymali Gerd Binning i Heinrich Rohrer za skanningowy mikroskop tunelowy.

Rozpad alfa

C C

Niestabilne jądro atomowe ulega przemianie w inne jądro z emisją cząstki α (jądro helu ⁴₂He)

A-ciężar atomowy

 ${}^{A}_{Z}Z \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Z + {}^{4}_{2}He$

Przykład:

$$^{226}_{88}Ra \rightarrow ^{222}_{86}Rn + \alpha + 4,87MeV$$

Separation of centers (fermis)

Bariera kulombowska dla cząstek alfa w jądrach o dużych liczbach masowych wynosi ok. 30 MeV. Z punktu widzenia klasycznego bariera ta nie może być więc pokonana przez cząstkę o energii kilku MeV.

26	.0	5.	20)2	3
		• •		_	-

Im energia przemiany $\boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{\alpha}}$ większa – tym bariera węższa

Sukcesem zastosowania teorii tunelowania do wyjaśnienia rozpadu alfa było wyznaczenie po raz pierwszy promienia R jądra $R \simeq 1.5 A^{1/3} fm$

Ten wynik pozwolił na wyjaśnienie dlaczego objętość jądra:

jest wprost proporcjonalna do jego masy atomowej A,

$$V \cong \frac{4\pi}{3} \left(1, 5 \cdot A^{1/3} \right)^3 \Longrightarrow \quad V \sim A$$

tak, że gęstość jądra jest praktycznie stała.

Ten rezultat pokazał również jak małe jest jądro atomowe.

26.	05.	20	23

Scanning tunneling microscope STM

Trzy kwarcowe beleczki są 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.

26.05.2023

Praktyczna realizacja idei mikroskopu tunelowego

- Ostrze i próbkę zbliżamy na odległość około 1 nm.
- Następnie przykładamy różnicę potencjałów U rzędu 1-3 V
- Przemieszczając teraz ostrze ponad badaną powierzchnią, system rejestruje zmiany prądu tunelowego w funkcji odległości ostrze-próbka

$$V \approx \frac{V_T}{d} \cdot e^{-A\sqrt{W \cdot d}}$$

Tryb stałej wysokości

W trybie stałej wysokości ostrze przemieszcza się w płaszczyźnie poziomej, na stałej wysokości. Prąd tunelowy zmienia się wraz z topografia badanej próbki i lokalnych własności elektronowych. Prąd tunelowy zmierzony w każdym punkcie nad powierzchnia próbki tworzy zbiór danych na podstawie których powstaje topograficzny obraz badanego materiału

26.05.2023

W trybie stałego prądu wykorzystuje się tu ujemne sprzężenie zwrotne

zapewniające stała wartość prądu tunelowego. Uzyskuje się to poprzez dopasowanie położenia skanera nad każdym punktem pomiarowym, np. kiedy system wykryje wzrost prądu tunelowego to zmienia napięcie doprowadzane do piezoelektrycznego skanera tak by zwiększyć jego odległość i przywrócić ustaloną wartość prądu . W tym przypadku to pionowe przemieszczenia skanera dostarczają

danych do tworzenia obrazu.

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

Najmniejszy człowiek świata. Postać zbudowana z cząsteczek tlenku węgla osadzonych na powierzchni platyny

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)

26.05.2023

Przykłady obrazów STM

Obraz powierzchni krzemu o wymiarach 50x50 nm.

Obraz (236nm x 192 nm) nici DNA poddanych liofilizacji i pokrytych przewodzącą warstwą Pt-Ir-C.

Nanokwiaty (9nm x 9nm) z siarczanu kobaltu na monokrysztale złota (111)

Mikroskop siła atomowych AFM

Oddziaływania międzyatomowe: siły van der Waalsa, magnetyczne, elekrostatyczne.

Nanorurka węglowa 7nm

Powierzchnia złota 10 x 10 nm

2012 – zdjęcie molekuły pentacenu ($C_{22}H_{14}$) pojedynczych atomów w molekule o długości 1,4 nm. Odległość atomów C to 0,14 nm. Zdjęcie wykonano w temp. -268°C, przy odległości ostrze-próbka tylko 0,5 nm !

26.05.2023

Mikroskop SPM	Badane oddziaływania	informacja
STM	Prąd tunelowania	3-D topografia: rozmiar, kształt, nierówność powierzchni. Struktura elektryczna powierzchni i możliwa elementarna identyfikacja(spektroskopia stm)
kontaktowy AFM tapping mode AFM	Międzyatomowe, międzycząsteczkowe oddziaływania	3-D topografia: rozmiar, kształt, nierówność powierzchni.
bezkontaktowy AFM	Międzyatomowe, międzycząsteczkowe oddziaływania	3-D topografia: rozmiar, kształt, nierówność powierzchni.
LFM	Siły tarcia	Róznice sił tarcia w różnych miejscach powierzchnii
MFM	Siły magnetyczne	Rozmiar i kształt magnetycznych obiektów. Siła i moment magnetyczny w różnych punktach powierzchni.
SThM	Przepływ ciepła	Przewodność cieplna w różnych miejscach próbki
EFM	Sily elektrostatyczne	Gradient pola elektrostatycznego próbki w funkcji stężenia domen elektrostycznych.
NSOM	Odbicie, absorpcja i fluorescencja Promieniowania elektromagnetycznego(światła)	Właściwości optyczne powierzchni

Laboratorium Badań Strukturalnych Instytutu Elektroniki WIEiT AGH

26.05.2023

