Лекция 11. Туннельный эффект

1 Прохождение электрона над прямоугольным барьером

Рассмотрим электрон в поле потенциальной энергии, которая описывается одномерной ступенькой – скачком потенциала. График потенциальной энергии приведен на рис. 1.

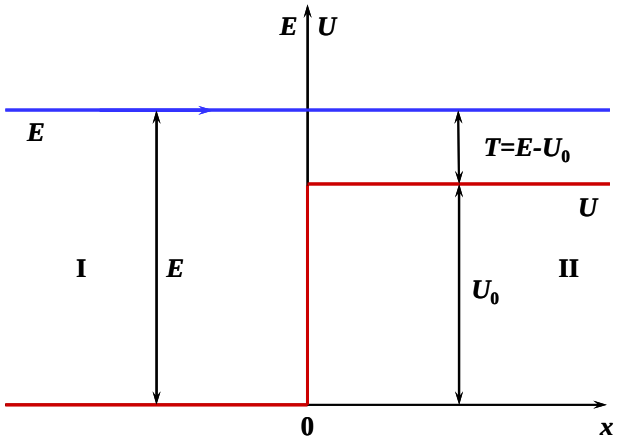

Рис. 1 Профиль потенциальной энергии для барьера в форме одномерной ступеньки. В области I $U = 0$. В области II $U = U_0$. Полная энергия электрона больше скачка потенциала.

Пусть полная энергия электрона больше скачка потенциала $E > U_0$. Тогда в области I кинетическая энергия электрона равна E, а в области II кинетическая энергия электрона $T = E - U_0$ (рис. 1). Согласно классической механике, электрон при прохождении такого барьера только замедляет свою скорость, сохраняя направление движения. Рассмотрим, так ли это в квантовой механике.

Применим алгоритм Шредингера нахождения термов и орбиталей стационарных состояний к этой системе:

1) Выберем систему отсчета, так чтобы скачок потенциала приходился на начало координат (рис. 1).

2) Определим вид оператора потенциальной энергии в выбранной системе отсчета:

$$\hat{U} = \begin{cases} 0, & x \le 0; \\ U_0, & x > 0. \end{cases} \tag{1}$$

3) Определим вид гамильтониана:

$$\hat{H} = \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}, & x \le 0; \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} + U_0, & x > 0. \end{cases} \tag{2}$$

4,5) Обозначим ψ_I и ψ_{II} – орбитали в областях I и II соответственно, тогда стационарное уравнение Шредингера в этих областях запишется следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I, \tag{3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + U_0\psi_{II} = E\psi_{II}. \tag{4}$$

Общее решение уравнения Шредингера в области I (3) в этом случае удобно выбрать в виде:

$$\psi_I = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \tag{5}$$

где волновое число дается выражением:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{6}$$

Выбор такой формы решения обоснован следующим. Рассмотрим волновую функцию, соответствующую состоянию с орбиталью ψ_I:

$$\Psi_I = \psi_I e^{-i\omega t} = A_1 e^{-i(\omega t - k_1 x)} + B_1 e^{-i(\omega t + k_1 x)}, \tag{7}$$

где $\omega = E/\hbar$. Первое слагаемое (7) (с константой A_1) представляет собой плоскую волну де Бройля, которая распространяется в положительном направлении оси x и соответствует исходной частице, движущейся к барьеру. Второе слагаемое (7) (с константой B_2) представляет собой волну, которая распространяется в отрицательном направлении и соответствует частице, отраженной от барьера. Таким образом, волновая функция (7), которая описывает стационарное состояние электрона, является суперпозицией двух плоских волн де Бройля, распространяющихся в противоположных направлениях.

Аналогично, общее решение уравнения Шредингера в области II (4) можно выбрать в виде:

$$\psi_{II} = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \tag{8}$$

где волновое число дается выражением:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}. \tag{9}$$

При этом слагаемое $A_2 e^{ik_2 x}$ соответствует прошедшей через барьер волне де Бройля электрона, движущейся в положительном направлении. Так как частица исходно движется в положительном направлении и барьер – один, то в области II не может существовать волна, распространяющаяся в обратном (отрицательном) направлении. Следовательно, слагаемое $B_2 e^{-ik_2 x}$ должно равняться нулю, откуда имеем $B_2 = 0$. Тогда орбиталь в области II:

$$\psi_{II} = A_2 e^{ik_2 x}. \tag{10}$$

Наложим на орбиталь условия непрерывности самой функции и ее производной:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), \\ \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0). \end{cases} \tag{11}$$

Подставляя (5) и (10), получим систему уравнений, связывающую константы A_1, B_2, A_2:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2, \\ k_1(A_1 - B_1) = k_2 A_2. \end{cases} \tag{12}$$

Условия конечности и однозначности орбитали выполняются. Нормировка функции необязательна.

2 Коэффициенты отражения и прохождения через барьер

Найдем вероятности отражения P_{refl} от потенциального барьера и прохождения P_{tran} через потенциальный барьер. Их сумма, очевидно, равна 1:

$$P_{refl} + P_{tran} = 1. \tag{13}$$

Вероятность отражения P_{refl} равна отношению плотности потока отраженных частиц j_{refl} и плотности потока падающих частиц j_{inc}:

$$P_{refl} = j_{refl} / j_{inc} . \tag{14}$$

Аналогично, вероятность прохождения:

$$P_{tran} = j_{tran} / j_{inc} , \tag{15}$$

где j_{tran} – плотность потока прошедших частиц.

Плотность потока квантовых частиц. Запишем уравнение Шредингера для некоторой волновой функции Ψ и ее комплексно-сопряженной Ψ^*:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - U\Psi = 0, \tag{16}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* - U\Psi^* = 0, \tag{17}$$

где учтено, что оператор потенциальной энергии является оператором умножения на вещественную функцию. Домножим (16) на Ψ^*, (17) на Ψ и вычтем уравнения почленно друг из друга:

$$i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* \right) = 0 . \tag{18}$$

Учтем, что

$$\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^* \Psi \right),$$

$$\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* = \Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* = \nabla \left(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* \right),$$

и введем обозначения:

$$\rho = \Psi^* \Psi , \tag{19}$$

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi \right). \tag{20}$$

Тогда уравнение (18) можно переписать следующим образом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0 . \tag{21}$$

Это уравнение выражает закон сохранения числа частиц и называется уравнением непрерывности. Величина ρ выражает концентрацию частиц, величина **j** – плотность потока частиц.

Для плоской волны де Бройля

$$\Psi = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

плотность потока частиц можно выразить следующим образом:

$$j=\frac{i\hbar}{2m}\left(Ae^{-i(\omega t-kx)}\frac{d}{dx}A^{*}e^{i(\omega t-kx)}-A^{*}e^{i(\omega t-kx)}\frac{d}{dx}Ae^{-i(\omega t-kx)}\right)=\frac{i\hbar\,A^{*}A}{2m}\left((-ik)\cdot 1-ik\cdot 1\right)=\frac{\hbar k|A|^{2}}{m}, \quad (22)$$

где плотность потока направлена вдоль оси x.

Возвращаясь к задаче о прохождении электроном потенциального барьера, получаем следующие выражения для плотности потоков падающих и отраженных частиц:

$$j_{inc}=\frac{\hbar k_1|A_1|^{2}}{m}, \quad (23)$$

$$j_{refl}=\frac{\hbar k_1|B_1|^{2}}{m}. \quad (24)$$

Тогда вероятность отражения:

$$P_{refl}=\frac{j_{refl}}{j_{inc}}=\frac{\frac{\hbar k_1}{m}B_1^{2}}{\frac{\hbar k_1}{m}A_1^{2}}=\frac{B_1^{2}}{A_1^{2}}=\left(\frac{B_1}{A_2}\right)^{2}. \quad (25)$$

Подставим в системе (12) A_2 из первого уравнения во второе:

$$k_1(A_1-B_1)=k_2(A_1+B_1).$$

Разделим правую и левую часть на B_1:

$$k_1\left(\frac{A_1}{B_1}-1\right)=k_2\left(\frac{A_1}{B_1}+1\right).$$

Выразим отсюда отношение (A_1/B_1):

$$\frac{A_1}{B_1}=\frac{k_1+k_2}{k_1-k_2}. \quad (26)$$

Подставив (26) в (25), получим окончательное выражение для вероятности отражения:

$$P_{refl}\equiv R=\left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^{2}=\left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^{2}, \quad (27)$$

где $R\equiv P_{refl}$ – коэффициент отражения, а параметр η определяется равенством:

$$\eta=\frac{k_2}{k_1}=\sqrt{\frac{E-U_0}{E}}. \quad (28)$$

Найдем вероятность прохождения:

$$P_{tran}\equiv D=1-R=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^{2}}=\frac{4\eta}{(1+\eta)^{2}}, \quad (29)$$

где $D\equiv P_{tran}$ – коэффициент прохождения.

В случае, если полная энергия электрона равна скачку потенциала $E=U_0$ имеем следующее

$$\eta = \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{\frac{0}{E}} = 0\,. \tag{30}$$

Следовательно, коэффициенты отражения и прохождения в этом случае:

$$R = 1,\;\; D = 0\,. \tag{31}$$

То есть частица отражается с вероятностью равной 1.

3 Проникновение электрона под потенциальный барьер

Рассмотрим задачу о прохождении электроном ступенчатого потенциального барьера в случае, если полная энергия электрона меньше скачка потенциала (рис. 2).

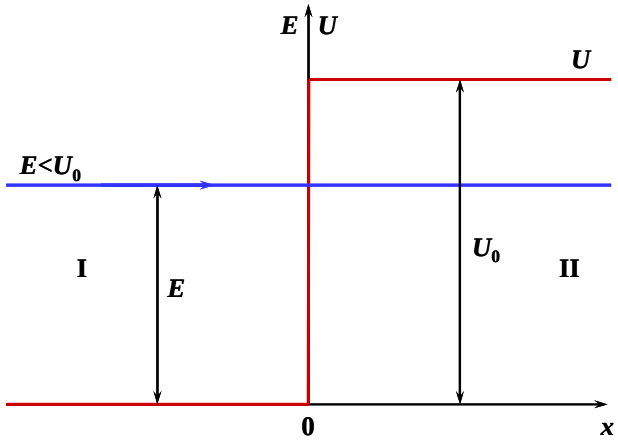

Рис. 2 Профиль потенциальной энергии для барьера в форме одномерной ступеньки. Полная энергия электрона меньше скачка потенциала.

В классической физике такая частица отразится в точке $x = 0$ и пойдет в противоположном направлении. Область $x > 0$ для нее недостижима.

Аналогично предыдущей задаче, применим алгоритм Шредингера. Пункты 1), 2), 3) идентичны предыдущей задаче.

4,5) Запишем стационарное уравнение Шредингера в областях I и II:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I\,, \tag{32}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + U_0\psi_{II} = E\psi_{II}\,, \tag{33}$$

где ψ_I и ψ_{II} – орбитали в областях I и II. Общее решение уравнения Шредингера в области I дается как и в предыдущей задаче выражением (5):

$$\psi_I = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}\,.$$

Перепишем уравнение в области II в виде:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \kappa^2\psi_{II} = 0\,, \tag{34}$$

где параметр κ дается выражением:

$$\kappa = -ik_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}\,. \tag{35}$$

Общее решение уравнения (34) – суперпозиция экспоненциальных функций:

$$\psi_{II} = A_2 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}\,. \tag{36}$$

Орбиталь (36) однозначна, чтобы она была конечна при $x \to +\infty$ необходимо положить $B_2 = 0$. Тогда окончательно, орбиталь в области II:

$$\psi_{II} = A_2 e^{-\kappa x}. \tag{37}$$

Отметим, что выражение (37) идентично (10), если сделать замену $i\kappa = k_2$. Тогда напишем по аналогии выражение для коэффициента отражения:

$$R = \left|\frac{k_1 - i\kappa}{k_1 + i\kappa}\right|^2 = \frac{k_1^2 + \kappa^2}{k_1^2 + \kappa^2} = 1. \tag{38}$$

То есть коэффициент отражения, как и в классическом случае, равен 1. Тем не менее, орбиталь в области II не равна нулю, следовательно есть вероятность обнаружить частицу *под барьером* – в запрещенной для классической частицы области. Найдем относительную вероятность обнаружить частицу в точке *x*:

$$\frac{P(x)}{P(0)} = \frac{|\psi_{II}(x)|^2}{|\psi_{II}(0)|^2} = e^{-2\kappa x} = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}x}. \tag{39}$$

где было учтено выражение (35). Эта вероятность в конкретных условиях бывает заметной величиной. Так для разности энергий $U_0 - E = 1$ эВ, вероятность обнаружить электрон на расстоянии $x = 1\,\overset{0}{\text{A}}$, составляет около 30%.

4 Потенциальный барьер конечной ширины

Рассмотрим прохождение электрона через потенциальный барьер конечной ширины *l*. График потенциальной энергии приведен на рис. 1.

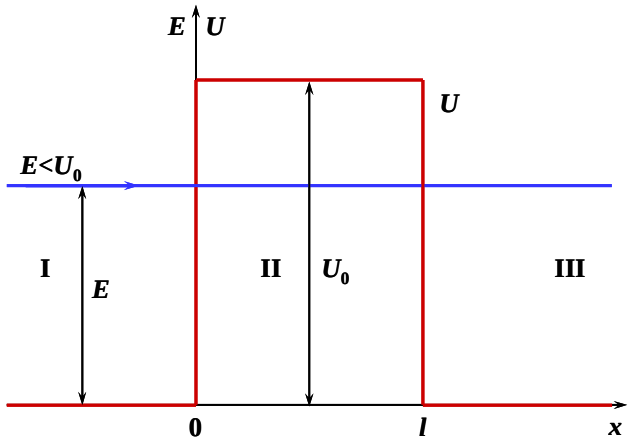

Рис. 3 Профиль потенциальной энергии для барьера конечной ширины. В областях I и III $U = 0$. В области II $U = U_0$. Полная энергия электрона меньше скачка потенциала.

Полная энергия электрона меньше скачка потенциала $E < U_0$. Применим алгоритм Шредингера к этой задаче.

1) Выберем систему отсчета, так чтобы начало барьера приходилось на начало координат (рис. 3).

2) Определим вид оператора потенциальной энергии в выбранной системе отсчета:

$$\hat{U} = \begin{cases} 0, \; x \le 0, \; x \ge l \\ U_0, \; 0 < x < l. \end{cases} \tag{40}$$

3) Определим вид гамильтониана:

$$\hat{H} = \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}, & x \le 0,\ x \ge l; \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} + U_0,\ 0 < x < l. \end{cases} \tag{41}$$

4,5) Обозначим ψ_I, ψ_{II}, ψ_{III} – орбитали в областях I, II и III соответственно, тогда стационарное уравнение Шредингера в этих областях запишется следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{I,III}}{dx^2} = E\psi_{I,III}, \tag{42}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + U_0\psi_{II} = E\psi_{II}. \tag{43}$$

Запишем общее решение уравнения Шредингера в областях I, II, III аналогично предыдущим задачам:

$$\psi_I = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \tag{44}$$

$$\psi_{II} = A_2 e^{-\kappa_2 x} + B_2 e^{\kappa_2 x}, \tag{45}$$

$$\psi_{III} = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}, \tag{46}$$

где:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \kappa_2 = -ik_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}. \tag{47}$$

Так как частица исходно движется в положительном направлении и барьер – один, тогда $B_3 = 0$. Наложим условия непрерывности орбитали и ее производной на границах областей I, II, III и получим систему уравнений для постоянных:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ ik_1(A_1 - B_1) = \kappa_2(-A_2 + B_2), \\ A_2 e^{-\kappa_2 l} + B_2 e^{\kappa_2 l} = A_3 e^{ik_1 l}, \\ \kappa_2\left(-A_2 e^{-\kappa_2 l} + B_2 e^{\kappa_2 l}\right) = ik_1 A_3 e^{ik_1 l}. \end{cases} \tag{48}$$

Решение двух последних уравнений системы дает:

$$A_2 = \frac{1}{2}(1 - i\eta)e^{\kappa_2 l} A_3,$$

$$B_2 = \frac{1}{2}(1 + i\eta)e^{-\kappa_2 l} A_3,$$

где

$$\eta = \frac{k_1}{\kappa_2} = \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}. \tag{49}$$

Так как $|1 - i\eta| = |1 + i\eta|$, то из последних двух уравнений следует, что $|A_2| >> |B_2|$. Поэтому для достаточно широкого барьера можно положить $B_2 \approx 0$. Решая систему (48), находим:

$$A_1 = (1 - i\eta)(i + \eta)e^{\kappa_2 l} A_3/(2\eta), \tag{50}$$

$$B_1 = (1 - i\eta)(\eta - i)e^{\kappa_2 l} A_3 / (4\eta), \tag{51}$$

Откуда получаем выражение для коэффициента прохождения:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{16\eta^2}{(1+\eta^2)^2} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}l} = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}l}. \tag{52}$$

Явление прохождения сквозь потенциальный барьер при полной энергии меньшей, чем скачок потенциала, называется *туннельным эффектом*.

Для потенциального барьера произвольной формы (рис. 4) выражение (52) можно обобщить следующим образом:

$$D == D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right), \tag{53}$$

где x_1, x_2 – решения уравнения $U(x_{1,2}) = E$.

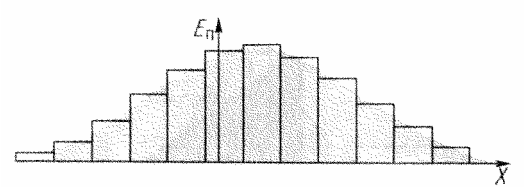

Рис. 4 Потенциальный барьер произвольной формы

5 Автоэлектронная эмиссия электронов из металла

Прохождение электронов через потенциальный барьер приводит к холодной эмиссии электронов из металла, называемой также автоэлектронной. Электроны в металле удерживаются силами притяжения, так что для удаления электрона из металла необходимо затратить определенную работу. Это означает, что потенциальная энергия электрона вне металла больше, чем внутри него, причем на границе металл-вакуум потенциальная энергия терпит резкий скачок (рис. 5). При наличии сильного электрического поля профиль потенциальной энергии изменяется и на поверхности образуется потенциальный барьер конечной ширины.

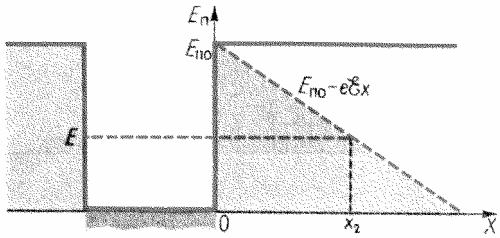

Рис. 5 Профиль потенциальной энергии в на границе металл-вакуум при отсутствии и наличии электрического поля

У электронов появляется вероятность покинуть металл, протуннелировав сквозь барьер. Это явление называется *холодной (автоэлектронной) эмиссией*. В рамках классической механики оно необъяснимо, так как электрическое поле в металл не проникает и не может придать электронам достаточно энергии, чтобы преодолеть барьер.

С точки зрения квантовой теории холодная эмиссия объясняется туннельным эффектом. Вычисление коэффициента прохождения сводится в вычислению интеграла:

$$I = \frac{2}{\hbar}\int_0^{x_2}\sqrt{2m\left(U(x)-E\right)}dx = \frac{2}{\hbar}\int_0^{x_2}\sqrt{2m\left(U_0 - eFx - E\right)}dx\,, \tag{54}$$

где F – напряженность электрического поля, $U(x_2) = E$. Это интеграл равен:

$$I = \frac{4\sqrt{2m}}{3eF\hbar}\left(U_0 - E\right)^{3/2} = \frac{F_0}{F}\,, \tag{55}$$

где

$$F_0 = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar}\left(U_0 - E\right)^{3/2} \approx 10^8 \text{ В/м}\,. \tag{56}$$

Ток эмиссии пропорционален коэффициенту прохождения барьера, тогда

$$j = j_0 e^{-F_0/F}\,. \tag{57}$$

Такая зависимость хорошо согласуется с экспериментом.