

## 5. Барьерные задачи и туннельный эффект

### 1. Поток частиц в квантовой механике

Уравнение Шредингера

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi = 0 \quad (*)$$

Комплексно сопряженное:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi^* = 0 \quad (**)$$

Умножим (\*) на  $\psi^*$ , (\*\*) – на  $\psi$  и вычтем (\*\*) из (\*):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right] - i\hbar \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right] = 0$$

Получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial y} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial z} \right) \right]$$

Вводим  $\vec{j}$ :

$$\vec{j} = \{j_x, j_y, j_z\}$$

$$j_x = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right),$$

$$j_y = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial y} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial y} \right),$$

$$j_z = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial z} \right)$$

Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) = \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = -\operatorname{div} \vec{j}$$

Интегрируем по объему и используем интегральную теорему о дивергенции:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 dV = \frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 dV = - \int_V \operatorname{div} \vec{j} dV = - \int_S j_n ds$$

Физический смысл вектора  $\vec{j}$ :

Если  $\int_V |\psi|^2 dV$  - определяет число частиц в объеме  $V \rightarrow$  то

$\frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 dV$  - изменение этой величины = полное число частиц,

пересекающих границу объема (поверхность  $S$ )  $\rightarrow$  полный поток,

следовательно  $\vec{j}$  - плотность потока - число частиц, проходящих через 1 ед. площади за 1 ед. времени.

Окончательно:

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

Плоская волна:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \vec{p}_i \vec{r} / \hbar) \rightarrow \vec{j} = \frac{\vec{p}_i}{Vm} = \frac{\sqrt{2mE}}{Vm} \rightarrow |\vec{j}| = j = \frac{p_i}{Vm} = \frac{\sqrt{2mE}}{Vm}$$

Стационарные состояния:

Докажите: для вещественных волновых функций стационарных состояний плотность потока обращается в нуль.

Проверка: простейший случай - волновые функции частиц в прямоугольной яме.

## 2. Прохождение частицы через потенциальный барьер

Потенциальный барьер: область пространства, в которой потенциальная энергия частицы больше, чем в окружающих областях. Простейший случай: 1D прямоугольный потенциальный барьер (рис.1).

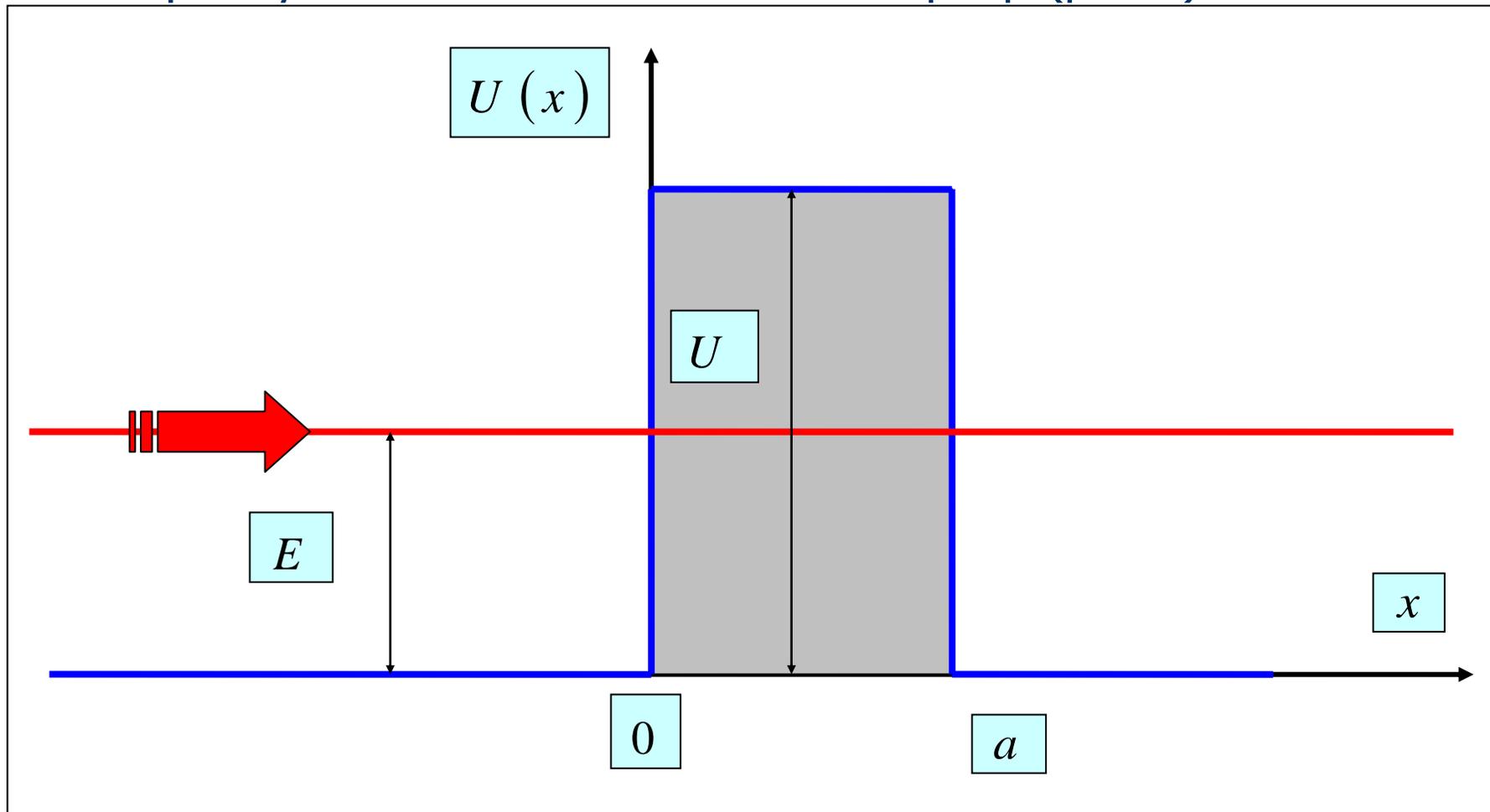


Рис. 1.

Потенциальная энергия частицы:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \rightarrow \text{область I} \\ U, & 0 \leq x \leq a \rightarrow \text{область II} \\ 0, & x > 0 \rightarrow \text{область III} \end{cases}$$

Будем считать, что частица приближается к барьеру со стороны отрицательных значений  $x$ , т.е. движется слева направо. Пусть энергия частицы меньше высоты потенциального барьера  $U$ , т.е.  $E < U$  (случай  $E > U$  рассмотрен в задаче 4.7).

Уравнение Шредингера в областях I, II и III имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \cdot \psi_1(x) &= 0 \\ \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2 \cdot \psi_2(x) &= 0 \\ \frac{d^2 \psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2 \cdot \psi_3(x) &= 0 \end{aligned}$$

(1), где

$$\begin{aligned} k_1 &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k_2 &= \sqrt{\frac{2m(U - E)}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Волновые функции - решения уравнений (1):

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x) \\ \psi_2(x) &= A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x) \\ \psi_3(x) &= A_3 \exp(ik_3 x) + B_3 \exp(-ik_3 x), k_3 = k_1\end{aligned}\quad (2)$$

Будем считать амплитуду падающей на барьер волны  $A_1 = 1$ , а также положим коэффициент  $B_3 = 0$ : при движении частицы слева направо в области III может распространяться только проходящая волна.

**Условия сшивки** волновых функций и их производных на границах барьера, т.е. при  $x = 0$  и  $x = a$ , приводят к системе уравнений

$$\begin{aligned}1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ ik_1 - ik_1 B_1 &= k_2 A_2 - k_2 B_2 \\ A_2 \exp(k_2 a) + B_2 \exp(-k_2 a) &= A_3 \exp(ik_1 a) \\ k_2 A_2 \exp(k_2 a) - k_2 B_2 \exp(-k_2 a) &= ik_1 A_3 \exp(ik_1 a)\end{aligned}\quad (3)$$

Система (3) - система 4-х уравнений с 4 неизвестными - коэффициентами  $B_1, A_2, B_2, A_3$  - имеет решение при любых значениях параметров  $k_1$  и  $k_2 =$  при любых значениях энергии частицы  энергетический спектр задачи является непрерывным.

Если есть ненулевое решение в области III – частица проходит через барьер, в отличие от классической механики. Решая систему (3), для амплитуды прошедшей через барьер волны получаем

$$A_3 = \frac{4ik_1k_2 \cdot \exp(ik_1a)}{(k_1 + ik_2)^2 \exp(k_2a) - (k_1 - ik_2)^2 \exp(-k_2a)} \quad (4)$$

Найдем модуль вектора плотности потока вероятности для падающей на барьер и прошедшей через него волны. С учетом определения (п.1),

$$\left| \vec{j}_i \right| = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \left| \vec{j}_t \right| = \frac{\hbar k_1}{m} \cdot |A_3|^2 ,$$

находим коэффициент (вероятность) прохождения  $D$  частицы через барьер:

$$D = \frac{|\vec{j}_t|}{|\vec{j}_i|} = |A_3|^2 = 1 / \left[ 1 + \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \right)^2 \cdot sh^2(k_2 a) \right] \quad (5)$$

В (5) - гиперболический синус:

$$sh(k_2 a) = \sinh(k_2 a) = \frac{\exp(k_2 a) - \exp(-k_2 a)}{2}$$

Если ширина барьера  $a$  такова, что  $k_2 a \gg 1$ , то

$$sh(k_2 a) \cong \frac{\exp(k_2 a)}{2} .$$

Формула (5) для  $D$  становится проще:

$$D \cong \left( \frac{4 k_1 k_2}{k_1^2 + k_2^2} \right)^2 \cdot \exp(-2 k_2 a) \quad (6)$$

Подставляем выражения для  $k_1$  и  $k_2$ :

$$D \cong D_0 \cdot \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}\right), \quad D_0 = 16 \frac{E}{U} \left(1 - \frac{E}{U}\right) \quad (7)$$

Коэффициент  $D_0$  - медленно изменяющаяся функция отношения  $E/U$ , и по порядку величины сравним с единицей. Поэтому в большинстве случаев при оценке коэффициента прохождения через потенциальный барьер полагают  $D_0 \approx 1$ , тогда

$$D \approx \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}\right) \quad (8)$$

Из (8) следует, что коэффициент прохождения испытывает сильную (экспоненциальную) зависимость от ширины барьера  $a$ , массы частицы  $m$  и разности энергий  $U - E$ .

## Обобщение на случай потенциального барьера произвольной формы

Представим потенциальный барьер в виде последовательности большого числа узких прямоугольных потенциальных барьеров, расположенных один за другим:

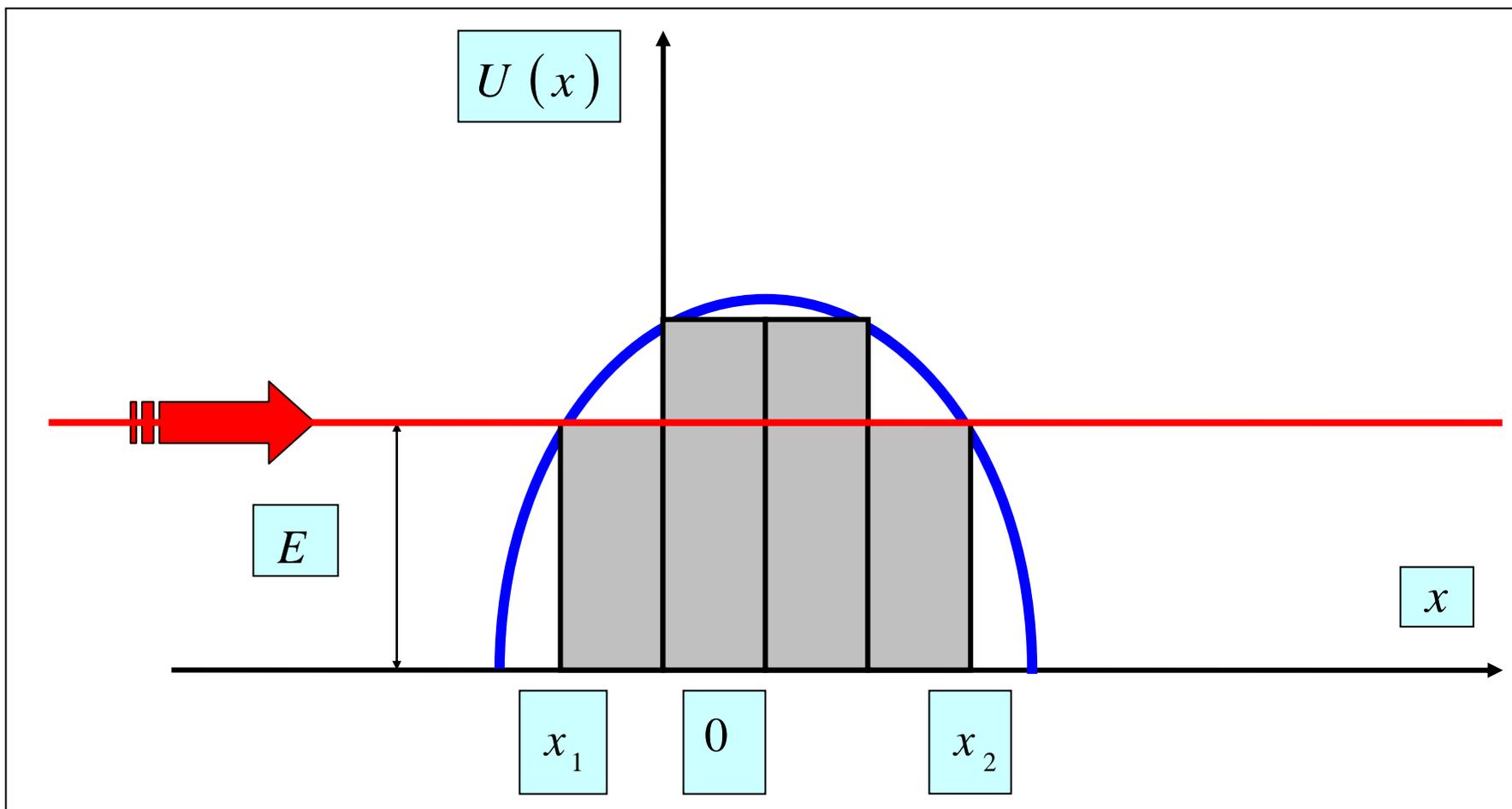


Рис.2

Будем считать, что барьер имеет плавную форму, т.е. его высота на расстоянии (по  $x$ ), сравнимом с длиной волны де Бройля, изменяется незначительно. В этом случае отражением волны на выступающих участках прямоугольных барьеров можно пренебречь.

Волна, прошедшая через  $n$ -й прямоугольный барьер – это волна, падающая на  $n + 1$ - барьер и т.д. Вероятность прохождения частицы через систему последовательно расположенных потенциальных барьеров равна произведению вероятностей прохождения  $D_n$  через каждый из барьеров  $\rightarrow$  коэффициент прохождения через барьер произвольной формы

$$D = \prod_n D_n \approx \prod_n \exp \left( - \frac{2 \Delta x_n}{\hbar} \sqrt{2 m (U (x_n) - E)} \right) = \exp \left( - \sum_n \frac{2 \Delta x_n}{\hbar} \sqrt{2 m (U (x_n) - E)} \right) \quad (9)$$

где  $\Delta x_n$  – ширина и  $U (x_n)$  – высота  $n$ -го барьера. Переходя в (9) от суммирования к интегрированию, получаем

$$D \approx \exp \left( - \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m(U(x) - E)} \right) \quad (10)$$

где  $x_1$  и  $x_2$  - значения координат, при которых  $U(x) = E$  (рис.2).

### 3. Туннельный эффект (ТЭ)

Прохождение частицы через потенциальный барьер, высота которого превышает энергию частицы, называется **туннельным эффектом – ТЭ** (частица, проходя под барьером, как бы движется в туннеле). **ТЭ - чисто квантовое явление.**

Классическая частица, отражается от барьера, высота которого больше ее полной энергии. Пройти через барьер, т.е. через область, в которой ее кинетическая энергия стала бы отрицательной, она не может.

Квантовая частица проходит через потенциальный барьер, причем вероятность прохождения сильно (экспоненциально) зависит от массы

частицы, а также от вида потенциального барьера . Подчеркнем, что при прохождении через барьер полная энергия частицы не меняется.

**ТЭ** объясняет ряд важных физических явлений:

- автоионизация атомов – вырывание электронов из атомов в сильных постоянных электрических полях
- холодная эмиссия электронов из металла
- радиоактивный альфа -распад ядер
- .....

**ТЭ** находит широкое применение в технических приложениях.

На основе **ТЭ** создан сканирующий туннельный микроскоп (СТМ), который произвел подлинную революцию в физике и технике поверхности и имеет широкие перспективы в связи с развитием нанотехнологий.

## Пример 1. Автоионизация атомов – вырывание электронов из атомов в сильных постоянных электрических полях

Сильные постоянные электрические поля:  $\varepsilon > 10^7 \text{ В / м}$   $\rightarrow$  автоионизация атомов – вырывание электронов из атомов.

Квантовая теория автоионизации: 1931г, К.Ланцош (1893-1974).

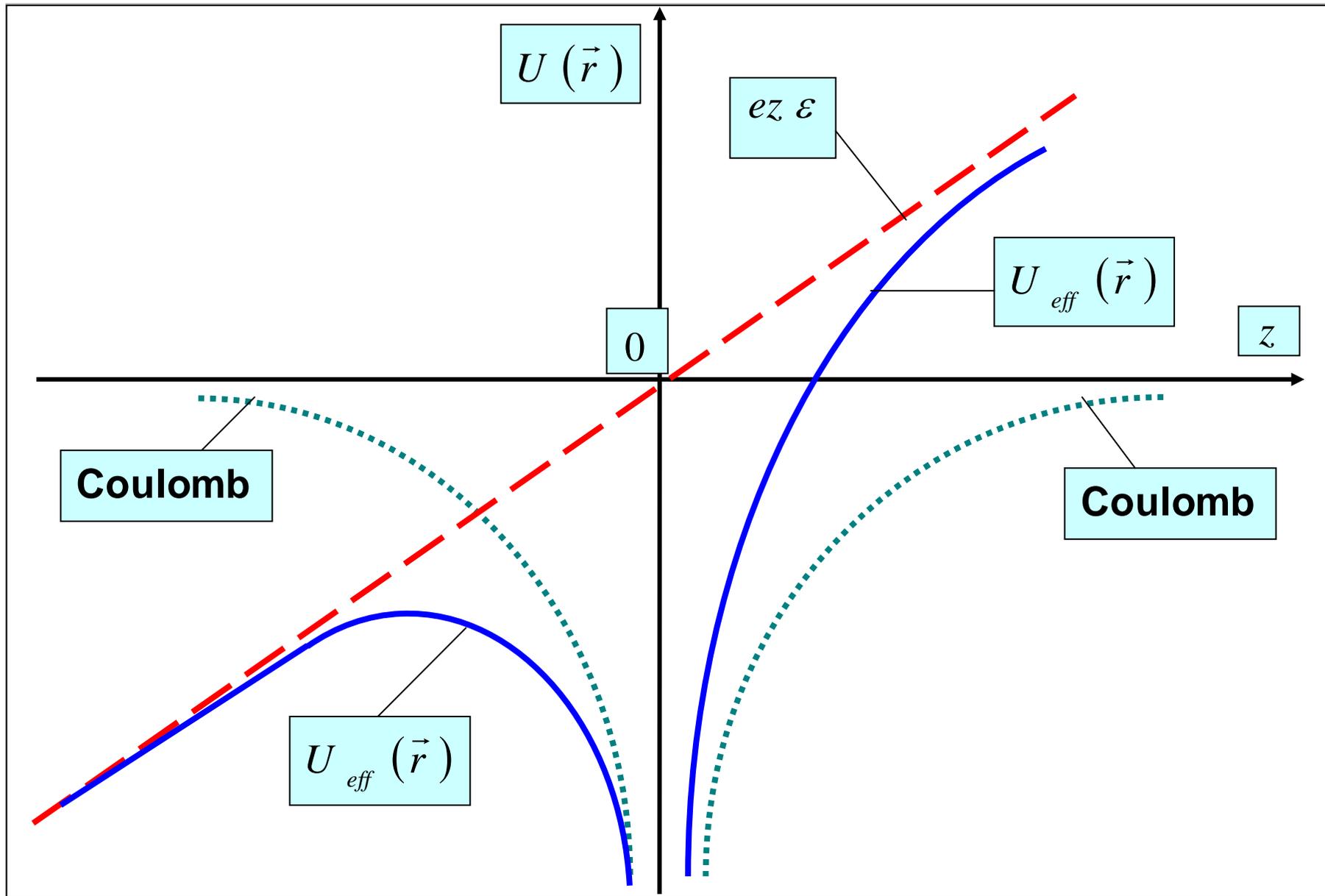
Выберем систему координат с началом в центре атома и осью  $OZ$ , направленной вдоль поля  $\vec{\varepsilon}$ . Электрон атома приобретает дополнительную энергию  $U_{\varepsilon} = e \cdot z \cdot \varepsilon$ , которую нужно ввести в гамильтониан уравнения Шредингера для одноэлектронного атома. В результате, возникает эффективная потенциальная энергия

$$U_{\text{eff}}(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + e \cdot z \cdot \varepsilon \quad (*)$$

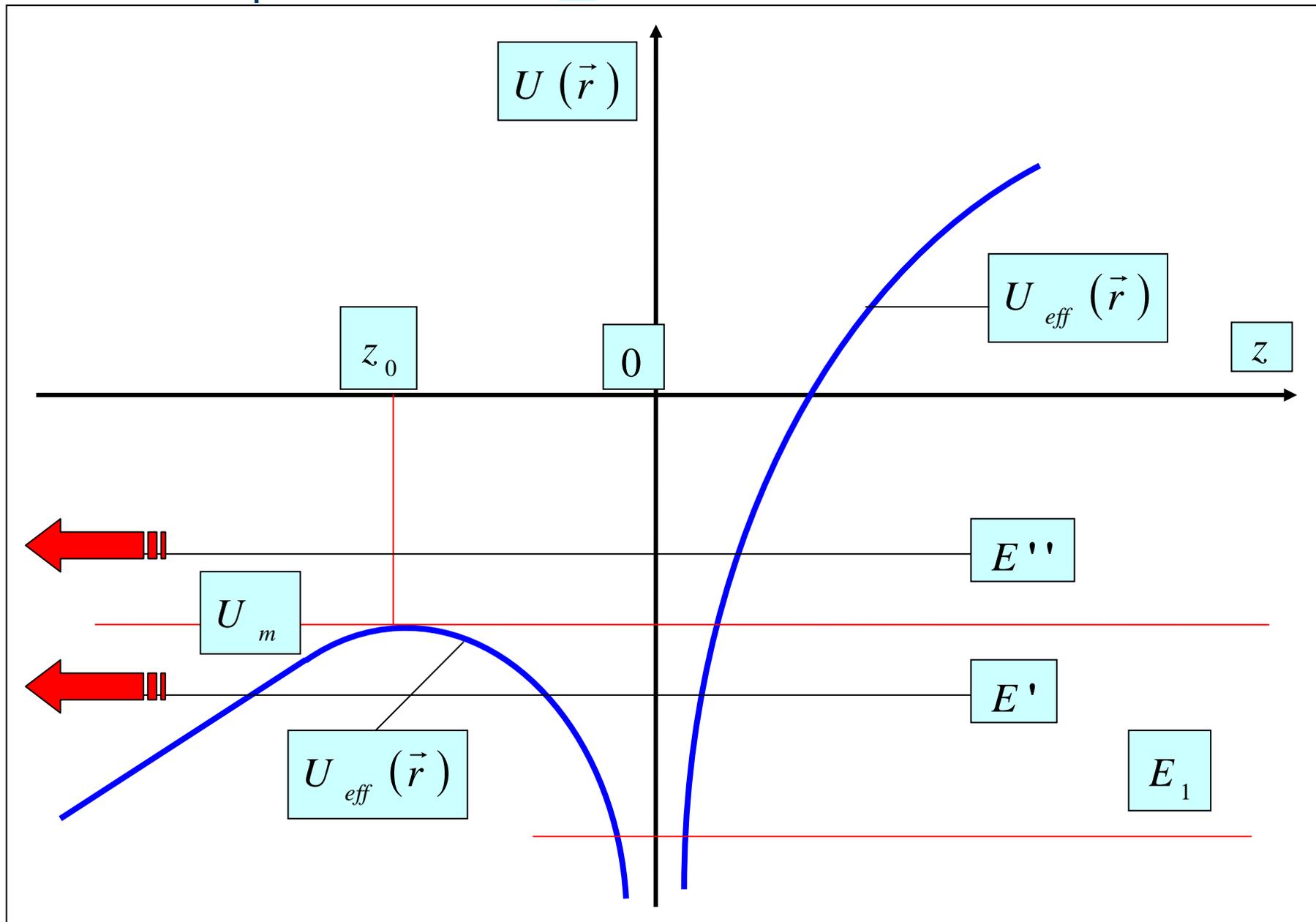
Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром (заряд  $Ze$ )

Дополнительная энергия в электрическом поле

Вид функции (\*) – разрез по направлению  $z$ :



Образование 1D потенциального барьера для электрона атома во внешнем постоянном электрическом поле  $\vec{\varepsilon}$ :



Новые состояния (новые возможности):

- Электрон с энергией  $E' < U_m$  находится в асимметричной потенциальной яме, но вследствие туннельного эффекта может ее покинуть
- Электрон с энергией  $E'' > U_m$  покидает атом
- Электрон с энергией основного состояния  $E_1 \ll U_m$  продолжает «жить» в деформированном электрическом поле атоме: для него вероятность туннельного эффекта через образовавшийся потенциальный барьер очень мала
- С увеличением  $|\vec{\varepsilon}|$  ширина барьера уменьшается и понижается высшая точка барьера  $U_m$ : туннельный эффект становится возможным для все более низко лежащих уровней.

В сильном внешнем электрическом поле происходит выход электронов из атомов → возникает автоионизация.

Автоионизация и спектры излучения атомов (подробнее – ЛК-15)

Если исследовать спектры излучения атомов, помещенных в электрическое поле и постепенно увеличивать  $|\vec{\varepsilon}|$ , сначала наблюдают расщепление спектральных линий, а затем уменьшение их интенсивности из-за превращения части атомов в ионы – эффект Штарка.

Эффект Штарка на спектральных линиях серии Бальмера: с ростом  $|\vec{\varepsilon}|$  вначале исчезают компоненты линий, образованных радиационными переходами из более высоко лежащих стационарных состояний. Причина: с ростом главного квантового числа  $n$  уменьшается (для этих электронов) ширина потенциального барьера  $\rightarrow$  возрастает вероятность ионизации. Конкурируют 2 процесса: переход на более низкий уровень с излучением и ионизация, и быстрее происходит ионизация.

На рис.: для электрона атома, первоначально находившегося в стационарном состоянии с энергией  $E'' > U_m$  вероятность автоионизации равна 1 (барьера нет)  $\rightarrow$  в сильном внешнем электрическом поле спектральные линии, образованные переходами из состояний с  $n \gg 1$  вообще не должны возникать (подтверждено экспериментами).

## Дальнейшее развитие теории, эксперимента, техники эксперимента

- Многоэлектронные атомы
- Неоднородное постоянное электрическое поле
- Автоэлектронная эмиссия с поверхности металлов
- Взрывная электронная эмиссия (выпускник ТПУ, академик Г.Месяц и премия «Глобальная энергия»)
- Силовой атомный микроскоп – самый современный прибор для исследования поверхностей твердых тел

## Задачи:

1. Пусть коэффициент прохождения через барьер определяется формулой (8) и для частицы с массой  $m_1$  равен  $D_1$ . Найти коэффициент прохождения  $D_2$  для частицы с массой  $m_2 = 4m_1$  (остальные параметры не меняются).
2. Используя (\*), получить формулы и найти  $z_0$  и  $U_m$  для  $|\vec{\varepsilon}| = 10^7 \text{ В / м}$  и  $|\vec{\varepsilon}| = 10^8 \text{ В / м}$ .