

Введение в физику туннельных явлений

Алексей Юрьевич Аладышкин

доктор физико-математических наук

ведущий научный сотрудник Института физики микроструктур РАН – филиала Федерального исследовательского центра «Институт прикладной физики РАН», Нижний Новгород

ведущий научный сотрудник Центра перспективных методов мезофизики и нанотехнологии, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный

профессор межфакультетской базовой кафедры «Физика наноструктур и наноэлектроника» Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского (национальный исследовательский университет), Нижний Новгород

Электронная почта: aladyshkin@ipmras.ru, aladyshkin.au@mipt.ru

Лекция 1

Кристаллография трёхмерных и двумерных структур

Поверхностная релаксация и реконструкция

Структура поверхностей некоторых кристаллов

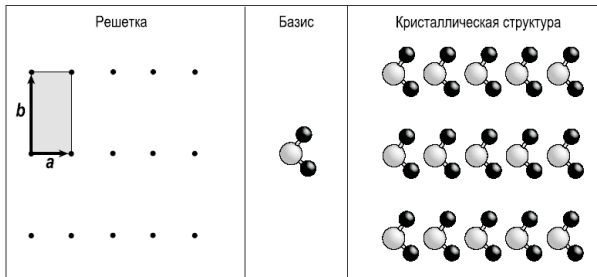
Решётка, базис и кристаллическая структура

Для трёхмерного кристалла кристаллическая решётка определяется через три некопланарных вектора основных (или примитивных) трансляций \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 , таких что расположение атомов из произвольной точки кристалла \mathbf{r} выглядит совершенно так же, как при рассмотрении из точки $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, где

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3,$$

где n_1 , n_2 и n_3 – целочисленные индексы. Таким образом, кристаллическая решётка является математической идеализацией и может быть определена как совокупность точек. Кристаллическая структура является физическим объектом и образуется только тогда, когда с каждой точкой решётки связан базис – какой-либо объект (атом или группа атомов, молекул и проч.)

кристаллическая решетка + базис = кристаллическая структура



Индексы плоскостей и направлений

Уравнение плоскости в отрезках

$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1,$$

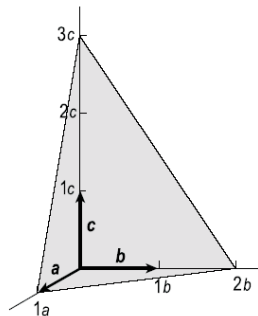
где a , b и c – длина отрезков, отсекаемых плоскостью на осях координат. Для описания семейства атомных плоскостей используются так называемые индексы Миллера – набор целочисленных индексов, пропорциональных обратным отрезкам

$$(n : m : k) = \left(\frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c} \right),$$

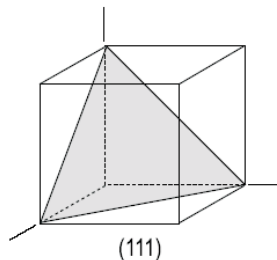
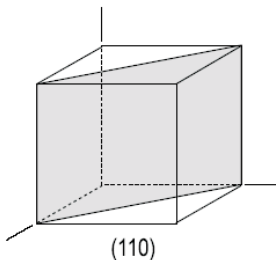
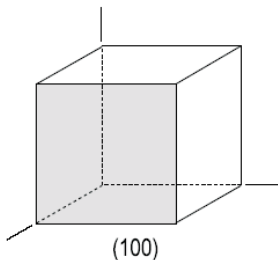
Набор плоскостей, эквивалентных с точки зрения симметрии, заключается в фигурные скобки, например, (100) , (010) , $(001) \equiv \{100\}$.

Нормированные индексы Миллера $(nmk)/\sqrt{n^2 + m^2 + k^2}$ представляют собой направляющие косинусы для вектора нормали для соответствующих атомных плоскостей. Для указания направлений в кристаллах указываются три индекса, соответствующие значениям направляющих косинусов. Эти индексы заключаются в квадратные скобки, например, $[111]$. Нетрудно показать, что в кубических кристаллах направление $[nmk]$ перпендикулярно плоскостям (nmk) .

плоскость (632)



Примеры низкоиндексных плоскостей для кубических кристаллов

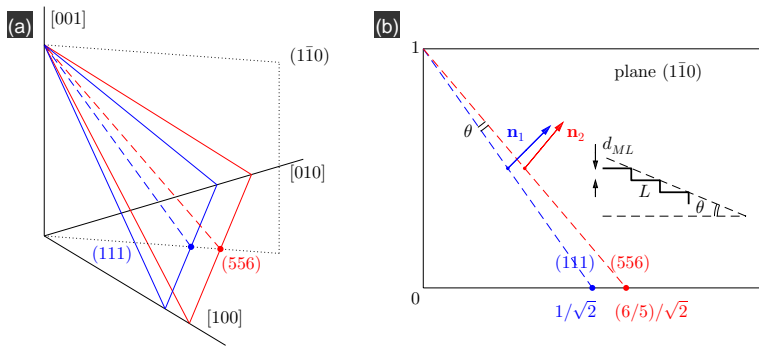


Терминология:

низкоиндексные или сингулярные поверхности – плоскости с малыми индексами Миллера (например, (100) или (111))

высокоиндексные или вицинальные поверхности – плоскости с большими индексами Миллера (например, (557) или (7710))

Ширина атомарно-гладких террас



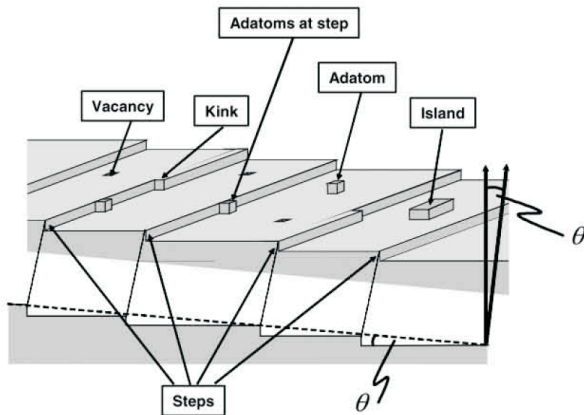
Угол между плоскостями с индексами Миллера (n_1, m_1, k_1) и (n_2, m_2, k_2) может быть вычислен по теореме косинусов

$$\theta = \arccos \left(\frac{n_1 n_2 + m_1 m_2 + k_1 k_2}{\sqrt{n_1^2 + m_1^2 + k_1^2} \sqrt{n_2^2 + m_2^2 + k_2^2}} \right).$$

Связь угла разориентации θ , высоты монослоя d_{ML} и равновесной ширины террас L

$$L = \frac{d_{ML}}{\operatorname{tg} \theta}.$$

Дефекты на поверхности твёрдого тела

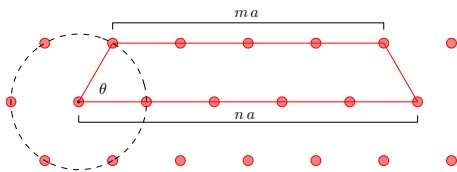


Контрольный вопрос: поверхность кристалла кремния отполирована с точностью до 0.5° по отношению к сингулярной плоскости (111). Чему равна средняя ширина террас?

Двумерные решётки Бравэ (Bravais)

Определение трансляционной симметрии: $R = n_1 a_1 + n_2 a_2$.

Пример: квадратная решётка Бравэ



Уравнение для углов поворота:

$$na = ma + 2a \cos \theta, \quad n, m \in \mathbb{Z}.$$

Допустимые решения:

$$\cos \theta = 0, \quad \pm 1/2 \quad \text{и} \quad \pm 1.$$

В кристаллах, обладающих трансляционной симметрией, могут существовать поворотные оси 1, 2, 3, 4 и 6 порядков, соответствующих допустимым углам поворота 60° , 90° , 120° , 180° и 360° .

Всё многообразие поверхностных структур может быть описано пятью типами решёток Бравэ:

Тип решётки				Пример
косугольная	oblique	$ a_1 \neq a_2 $	$\gamma \neq 90^\circ$	г.ц.к. (210)
прямоугольная	rectangular	$ a_1 \neq a_2 $	$\gamma = 90^\circ$	г.ц.к. (110)
прямоугольная центрированная	centered rectangular	$ a_1 \neq a_2 $	$\gamma = 90^\circ$	о.ц.к. (110)
квадратная	square	$ a_1 = a_2 $	$\gamma = 90^\circ$	г.ц.к. (100)
гексагональная	hexagonal	$ a_1 = a_2 $	$\gamma = 120^\circ$	г.ц.к. (111)

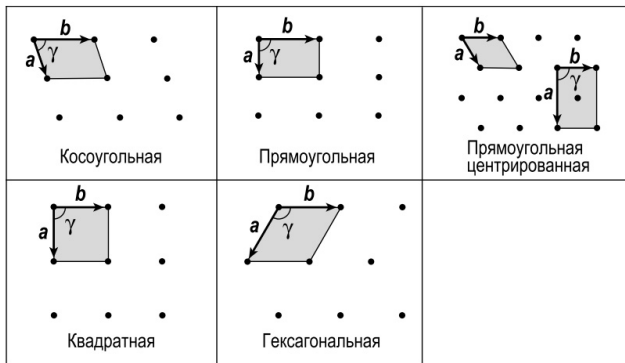


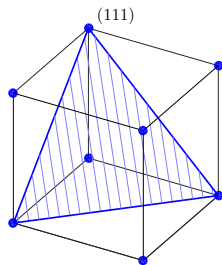
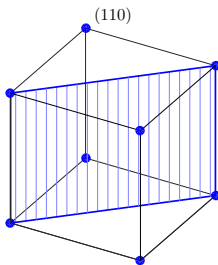
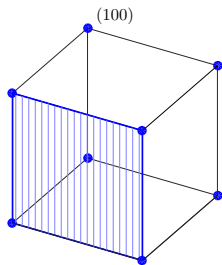
Рис. 1.3. Пять двумерных решеток Браве. Векторы a и b – векторы основных трансляций. Элементарные ячейки закрашены

Простая кубическая решётка

Примеры: N ($a = 0.566$ нм).

Для кристалла с постоянной решётки a прямая решётка может быть записана тривиальным образом

$$\mathbf{R} = a (n_1 \mathbf{e}_x + n_2 \mathbf{e}_y + n_3 \mathbf{e}_z),$$



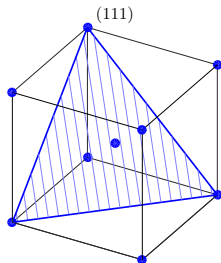
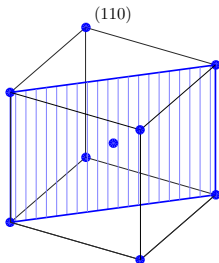
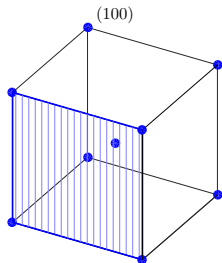
Объёмноцентрированная кубическая решётка

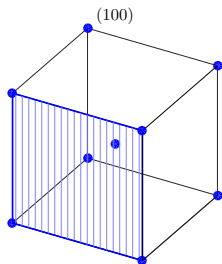
Объёмноцентрированная кубическая (оцк), body-centered cubic (bcc)

Примеры: Li ($a = 0.349$ нм), Na ($a = 0.428$ нм), Fe ($a = 0.287$ нм), W ($a = 0.316$ нм), Ta ($a = 0.331$ нм).

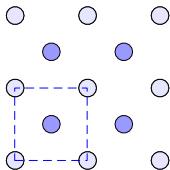
Условная элементарная ячейка о.ц.к.-решётки содержит два узла и у каждого узла имеется восемь ближайших соседей, находящихся на расстоянии $\sqrt{3}a/2$. Для кристалла с постоянной решётки a прямая решётка может быть записана следующим образом

$$\mathbf{R} = a \left\{ n_1 \left(\frac{-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z}{2} \right) + n_2 \left(\frac{\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z}{2} \right) + n_3 \left(\frac{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z}{2} \right) \right\}.$$

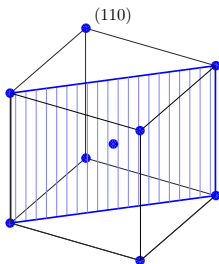




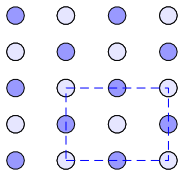
top view for (100)



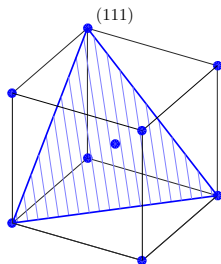
unit cell = $a \times a$



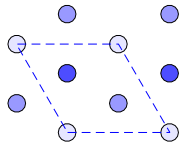
top view for (110)



unit cell = $\sqrt{2}a \times a$



top view for (111)



unit cell = $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$

Высота монослоя: $d_{ML} = a/2$

$d_{ML} = \sqrt{2}a/2$

$d_{ML} = \sqrt{3}a/6$

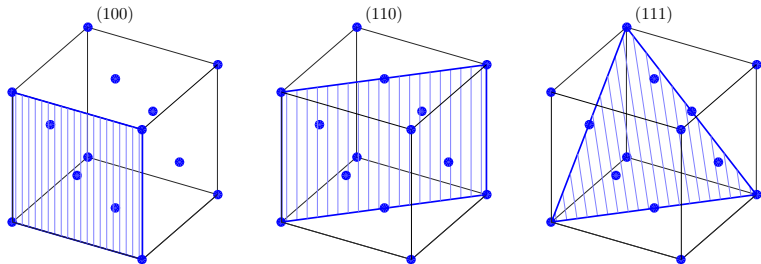
Гранецентрированная кубическая решётка

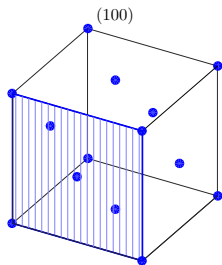
Гранецентрированная кубическая (гцк), face-centered cubic (fcc)

Примеры: Cu ($a = 0.361$ нм), Au ($a = 0.408$ нм), Ag ($a = 0.407$ нм), Ni ($a = 0.354$ нм), Al ($a = 0.405$ нм), Pb ($a = 0.495$ нм).

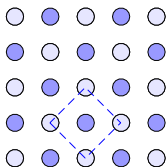
Условная элементарная ячейка гцк-решётки содержит четыре узла и у каждого узла имеется восемь ближайших соседей, находящихся на расстоянии $a/\sqrt{2}$. Для кристалла с постоянной решётки a прямая решётка может быть записана следующим образом

$$\mathbf{R} = a \left\{ n_1 \left(\frac{\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z}{2} \right) + n_2 \left(\frac{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z}{2} \right) + n_3 \left(\frac{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y}{2} \right) \right\}.$$



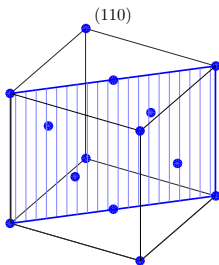


top view for (100)

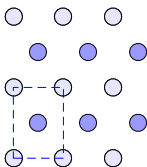


$$\text{unit cell} = a/\sqrt{2} \times a/\sqrt{2}$$

$$\text{Высота монослоя: } d_{ML} = a/2$$

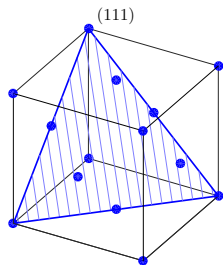


top view for (110)

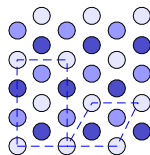


$$\text{unit cell} = a/\sqrt{2} \times a$$

$$d_{ML} = \sqrt{2}a/4$$



top view for (111)



$$\text{unit cell} = a/\sqrt{2} \times a/\sqrt{2}$$

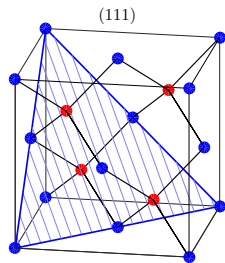
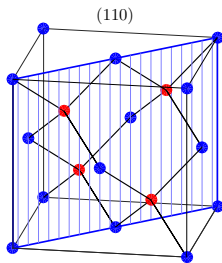
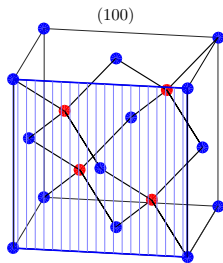
$$d_{ML} = \sqrt{3}a/3$$

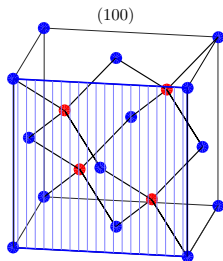
Решётка типа алмаза

Примеры: Si ($a = 0.543$ нм), Ge ($a = 0.566$ нм).

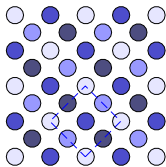
Название отражает от обстоятельство, что данная структура соответствует упорядочению атомов углерода в алмазе (англ. diamond). Прямая решётка состоит из двух гцк-подрешёток, смещённых на четверть главной диагонали условной элементарной ячейки

$$\mathbf{R}_a = a \left\{ n_1 \left(\frac{\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z}{2} \right) + n_2 \left(\frac{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z}{2} \right) + n_3 \left(\frac{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y}{2} \right) \right\}, \quad \mathbf{R}_b = \mathbf{R}_a + \frac{a}{4} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z).$$



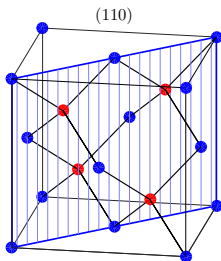


top view for (100)

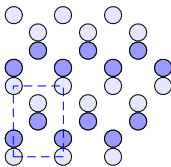


$$\text{unit cell} = a/\sqrt{2} \times a/\sqrt{2}$$

Высота монослоя: $d_{ML} = a/2$

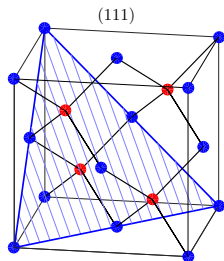


top view for (110)

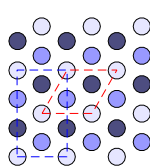


$$\text{unit cell} = a/\sqrt{2} \times a$$

$d_{ML} = a/2\sqrt{2}$



top view for (111)



$$\text{unit cell} = a/\sqrt{2} \times a/\sqrt{2}$$

$d_{ML} = a/\sqrt{3}$

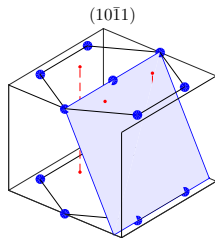
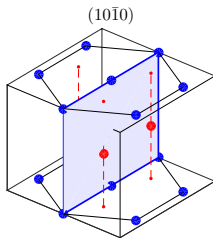
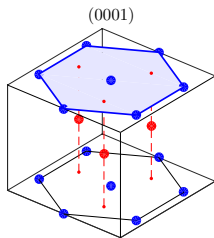
Гексагональная плотноупакованная решётка

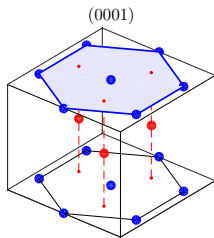
Гексагональная плотноупакованная (гпу), hexagon closed-packed (hcp)

Примеры: Mg ($a = 0.320$ нм, $c = 0.520$ нм), Se ($a = 0.436$ нм, $c = 0.496$ нм)

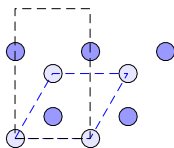
Данная структура может быть получена при плотной упаковке «жёстких сфер», например, пушечных ядер. Если нижний слой ядер уложен в виде двумерной гексагональной решётки, то следующий слой можно представить как слой ядер, уложенных в треугольные ямки, образованные нижележащим слоем и т. д. Для случая «жёстких сфер» соотношение между постоянными решётки равно $c/a = \sqrt{8/3} \simeq 1.633$. Для реальных кристаллических структур соотношение c/a может быть произвольным.

$$\mathbf{R}_a = a \left\{ n_1 \mathbf{e}_x + n_2 \left(\frac{\mathbf{e}_x}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_y \right) \right\} + c n_3 \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{R}_b = \mathbf{R}_a + \frac{a}{3} \mathbf{e}_x + \frac{a}{3} \left(\frac{\mathbf{e}_x}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_y \right) + c \frac{\mathbf{e}_z}{2}.$$

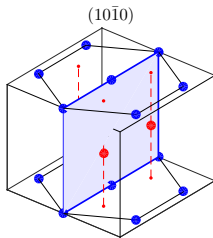




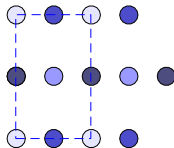
top view for (0001)



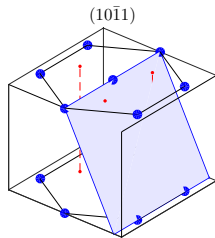
unit cell = $\sqrt{3}a \times a$



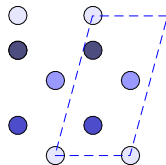
top view for (10 $\bar{1}$ 0)



unit cell = $a \times c$



top view for (10 $\bar{1}$ 1)



unit cell $\simeq a \times c$

Обратная решётка: трёхмерный случай

Хорошо известно, что произвольную функцию $A(\mathbf{r})$, имеющую периодичность кристаллической решётки, можно разложить в ряд Фурье соответствующей размерности

$$A(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} A_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}.$$

Условие

$$e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = 1$$

определяет значения волнового вектора \mathbf{K} , для которых Фурье-компоненты $A_{\mathbf{K}}$ могут быть отличны от нуля. Это условие определяет так называемую обратную решётку (англ. reciprocal lattice) той же размерности, что и кристаллическая решётка в прямом пространстве.

Для трёхмерной кристаллической решётки имеем

$$\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3,$$

где

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}.$$

Прямая и обратная решётки для трёхмерных структур могут относиться к разным классам решёток Бравэ (например, гцк и оцк).

Обратная решётка: двумерный случай

Для двумерной кристаллической решётки имеем $\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2$, где

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}])}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}])}.$$

Легко показать, что вектора обратной решётки обладают следующими свойствами:

1. Вектора \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 лежат в той же плоскости, что и вектора прямой решётки \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 .
2. Вектор \mathbf{b}_1 ортогонален вектору \mathbf{a}_2 и вектор \mathbf{b}_2 ортогонален вектору \mathbf{a}_1 .
3. Длины векторов обратной решётки равны

$$|\mathbf{b}_1| = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}_1|} \frac{1}{\sin \angle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)}, \quad |\mathbf{b}_2| = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}_2|} \frac{1}{\sin \angle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)}$$

4. Вектора обратной решётки имеют размерность обратной длины.
5. Каждая пара, включающая прямую и обратную решётку, принадлежит к одному и тому же классу двумерных решёток Браве (в отличие от трёхмерного случая).
6. Углы подчиняются свойству $\angle(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2) = 180^\circ - \angle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$.

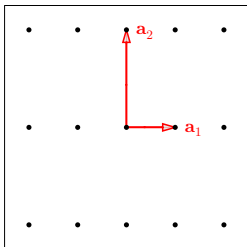
Квадратная решётка

Для кристалла с постоянной решётки a обратной решёткой является квадратная решётка Бравэ с постоянной $2\pi/a$: $\mathbf{K} = (2\pi/a) (m_1 \mathbf{e}_x + m_2 \mathbf{e}_y)$.

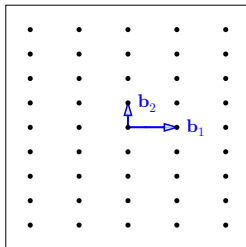
Прямоугольная решётка

Для кристалла с постоянными решётки a и b обратной решёткой является прямоугольная решётка Бравэ с постоянными $2\pi/a$ и $2\pi/b$: $\mathbf{K} = (2\pi/a) m_1 \mathbf{e}_x + (2\pi/b) m_2 \mathbf{e}_y$.

прямая решетка



обратная решётка



Прямоугольная центрированная решётка

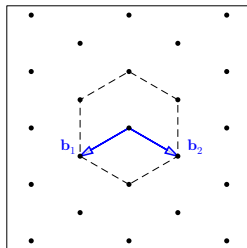
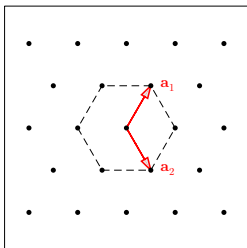
Для кристалла с постоянными решётки a и b обратной решёткой является прямоугольная центрированная решётка с постоянными $4\pi/a$ и $4\pi/b$

$$\mathbf{K} = m_1 \left(\frac{2\pi}{a} \mathbf{e}_x + \frac{2\pi}{b} \mathbf{e}_y \right) + m_2 \left(-\frac{2\pi}{a} \mathbf{e}_x + \frac{2\pi}{b} \mathbf{e}_y \right).$$

Гексагональная решётка

Для кристалла с постоянной решётки a обратной решёткой является гексагональная решётка с постоянной $4\pi/(\sqrt{3}a)$ и $4\pi/(\sqrt{3}a)$:

$$\mathbf{K} = m_1 \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_x - \frac{1}{2} \mathbf{e}_y \right) + m_2 \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_x - \frac{1}{2} \mathbf{e}_y \right)$$

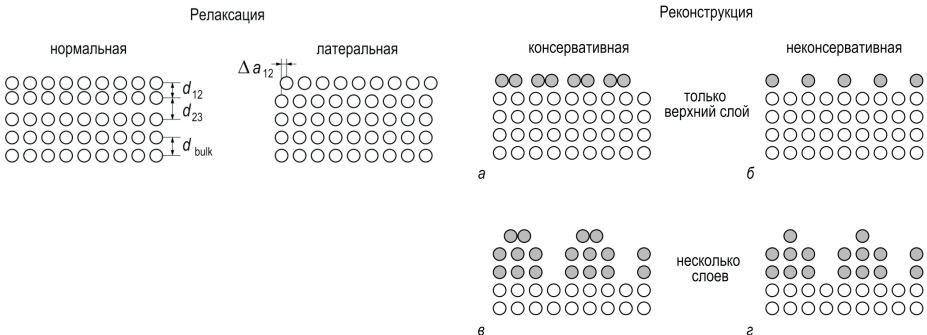


Модификация поверхности: релаксация и реконструкция

Терминология:

релаксация – модификация поверхности **без изменения** симметрии и векторов основных трансляций атомных плоскостей,

реконструкция – модификация поверхности **с изменением** симметрии и/или векторов основных трансляций атомных плоскостей.



Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А., Зотов А. В., Катаяма М. *Введение в физику поверхности*. – М.: Наука. 2006. – 490 с.

Поверхностные суперструктуры

После реконструкции верхнего слоя кристалла или адсорбции структура поверхностного слоя может сильно отличаться от структуры нижележащих слоёв кристалла. Для описания специфической структуры верхнего слоя используется термин суперструктура. Запись для описания суперструктуры связывает её двумерную решётку с идеальной решёткой подложки.

Матричная форма

Пусть \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 есть вектора основных трансляций кристалла или подложки, $\mathbf{a}_1^{(s)}$ и $\mathbf{a}_2^{(s)}$ есть вектора основных трансляций поверхностной суперструктуры. В общем случае связь между векторами может быть записана в виде матричного соотношения

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^{(s)} \\ \mathbf{a}_2^{(s)} \end{pmatrix} = \hat{G} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix}.$$

или

$$\mathbf{a}_1^{(s)} = G_{11} \mathbf{a}_1 + G_{12} \mathbf{a}_2 \quad \text{и} \quad \mathbf{a}_2^{(s)} = G_{21} \mathbf{a}_1 + G_{22} \mathbf{a}_2.$$

Элементы матрицы \hat{G} показывают, является ли суперструктура соразмерной или несоразмерной. Соразмерность означает, что соотношения между векторами \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и $\mathbf{a}_1^{(s)}$, $\mathbf{a}_2^{(s)}$ могут быть выражены рациональными числами. Если же отношения выражаются иррациональными числами, то такая суперструктура является несоразмерной.

Запись Вуда

В записи Вуда (Wood's notation) указывается соотношение между векторами трансляций для суперструктуры и, если необходимо, угол поворота. Таким образом, если на подложке $X(hkl)$ с векторами примитивных трансляций \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 образована суперструктура с векторами

$$|\mathbf{a}_1^{(s)}| = n|\mathbf{a}_1| \quad \text{и} \quad |\mathbf{a}_2^{(s)}| = m|\mathbf{a}_2|$$

и углом поворота φ , то такая сверхструктура может быть записана как

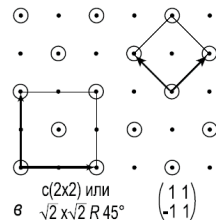
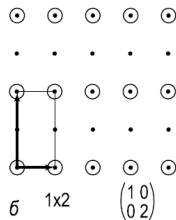
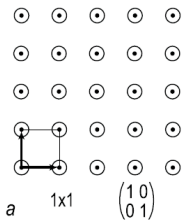
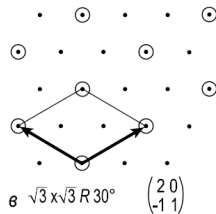
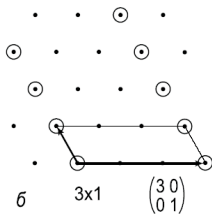
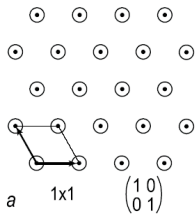
$$X(hkl) n \times m - R\varphi^\circ.$$

Если угол разориентации равен нулю, то его обычно не указывают, например, $\text{Si}(111)7 \times 7$.

Для указания на центрированную ячейку используют символ *c* (англ. centered), например, $\text{Si}(100)_c(4 \times 2)$.

Если суперструктура вызвана адсорбцией какого-либо вещества, то его указывают в конце записи, например, $\text{Si}(111)4 \times 1\text{-In}$.

Запись Вуда как *правило* используется для тех случаев, когда углы между векторами трансляций одинаковы, т. е. когда подложка и сверхструктура принадлежат к одному классу двумерных решёток Бравэ.



Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А., Зотов А. В., Катаяма М. *Введение в физику поверхности.* – М.: Наука. 2006. – 490 с.

Примеры релаксированных поверхностей металлов: поверхности Al(110) и Fe(211)

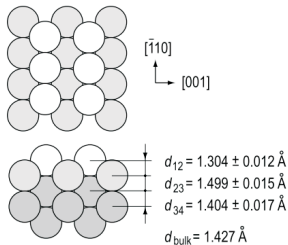
Нормальная релаксация:

Структура решётки Al: гцк

Постоянная решётки: $a = 0.405$ нм

Расстояние между пл. (110): $a/(2\sqrt{2}) = 1.427$ Å

Релаксированная поверхность Al(110)



Нормальная и латеральная релаксация:

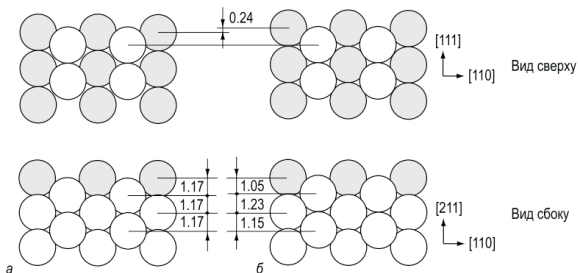
Структура решётки Al: оцк

Постоянная решётки: $a = 0.288$ нм

Расстояние между пл. (110): $a/\sqrt{6} = 1.176$ Å

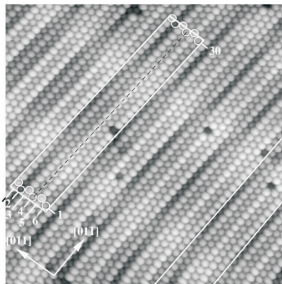
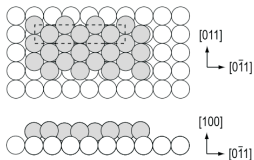
Fe(211) идеальная

Fe(211) релаксированная

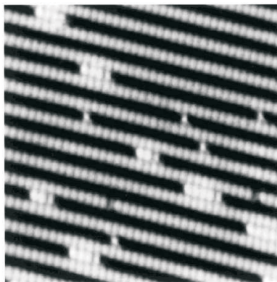
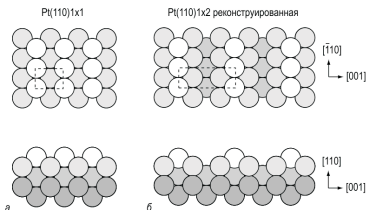


Примеры *реконструированных* поверхностей металлов: поверхности Pt(100) и Pt(110)

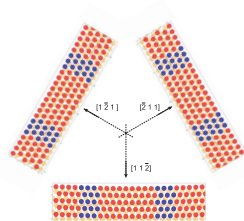
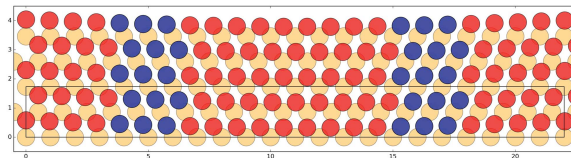
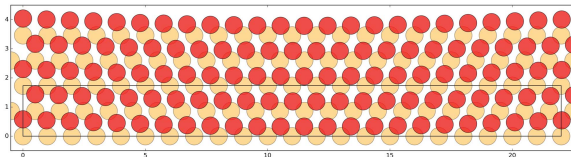
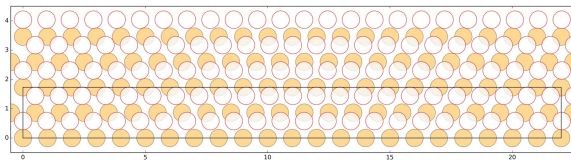
Пример квазигексагональной реконструкции
Pt(100) 5×1 (теор.) и Pt(100) 29×5 (эксп.)



Пример реконструкции типа missing rows
Pt(110) 1×2

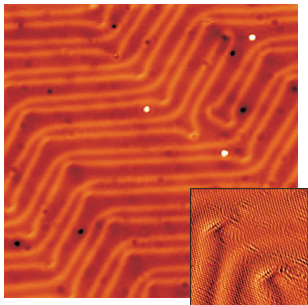


Примеры *реконструированных* поверхностей металлов: реконструкция Au(111) $22 \times \sqrt{3}$ (herring bone)

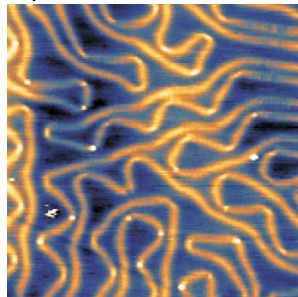
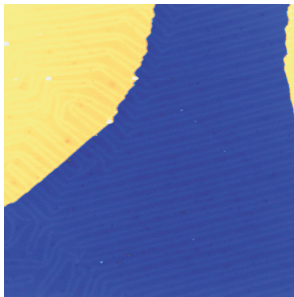


Элементарная ячейка суперструктуры: длина $22 \cdot a/\sqrt{2} = 6.34$ нм, ширина $\sqrt{3} \cdot a/\sqrt{2} = 0.49$ нм

Чистая поверхность Au(111)



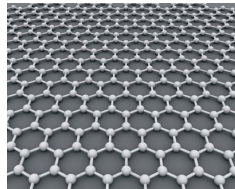
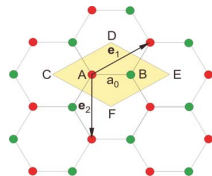
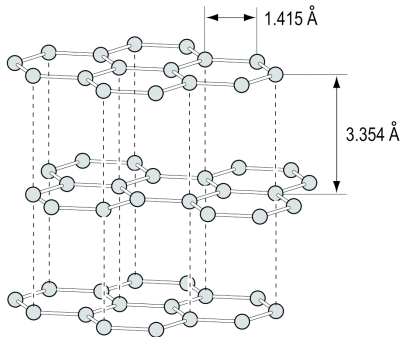
Поверхность после напыления
субмонослойного слоя Ge



Реконструкция $22 \times \sqrt{3}$ присуща только для монокристаллов Au(111) и свидетельствует о химической чистоте поверхности

Примеры релаксированных поверхностей полупроводников: поверхности графита и графена

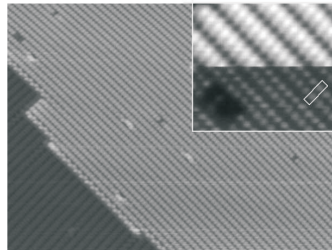
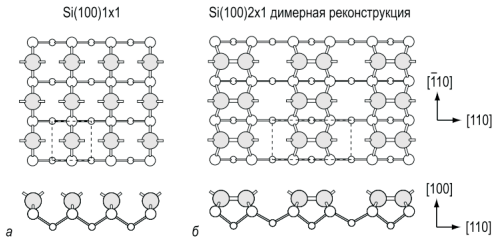
Решётка для атомных слоёв является решёткой типа «пчелиных сот» (гексагональная решётка с двухточечным базисом) с постоянной $a = 0.245$ нм. Внешняя поверхность C(001) нереконструированная, первое межплоскостное расстояние (3.330 \AA) на 1.5% меньше равновесного объёмного значения ($c = 3.354 \text{ \AA}$).



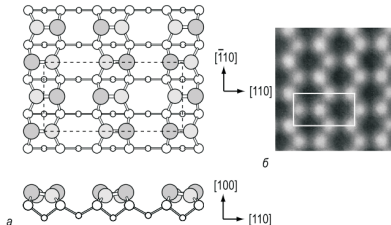
$$\text{Постоянная решётки } a = \sqrt{2a_0^2 - 2a_0^2 \cdot \cos(2\pi/3)} \simeq \sqrt{3}a_0$$

Примеры *реконструированных* поверхностей полупроводников: поверхности Si(100) и Ge(100)

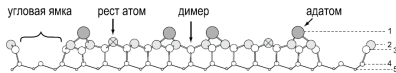
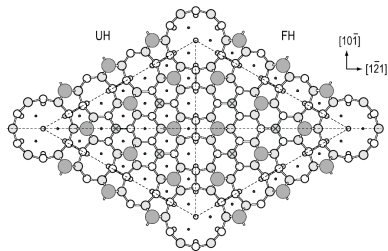
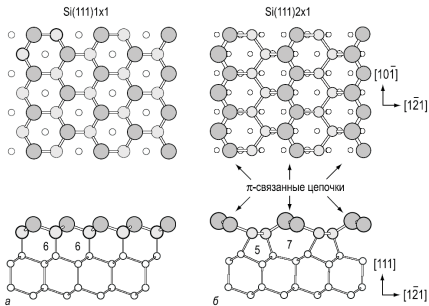
Пример димеризованной поверхности Si(100) 2×1



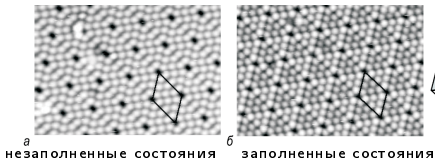
Пример поверхности $c(4 \times 2)$ с коррелированным наклоном соседних димеров



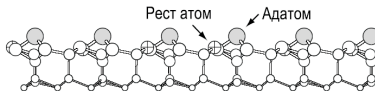
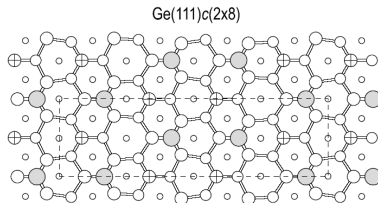
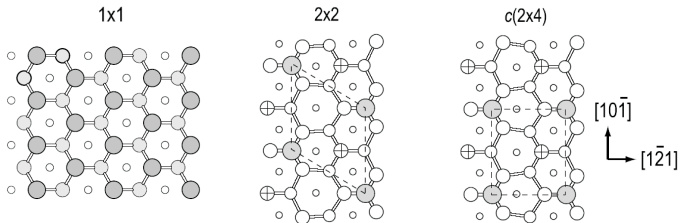
Примеры *реконструированных* поверхностей полупроводников: поверхность Si(111)



Реконструкция 7×7 – реконструкция, которая присуща только для Si(111) и свидетельствует о химической чистоте поверхности



Примеры *реконструированных* поверхностей полупроводников: поверхность Ge(111)



Лекции 2 и 3

Зонный спектр кристалла и теорема Блоха

Поверхностные электронные состояния Тамма-Шокли:
модели слабой и сильной связи

Поверхностные электронные состояния
в потенциале изображения

Зонный спектр кристалла: общие соображения

Теорема Блоха: решениями стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

для электрона в периодическом потенциале $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ являются модулированные плоские бегущие волны вида

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

где $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ – произвольная периодическая функция.

Здесь введены следующие обозначения:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

есть радиус-вектор, описывающий узлы кристаллической решётки; \mathbf{k} – волновой вектор (квазиимпульс), определённый с точностью до произвольного вектора обратной решётки \mathbf{K} ; n – целочисленный индекс.

Доказательство: функции $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ являются решениями стационарного уравнения Шрёдингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r} + \mathbf{R})\right)\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = E\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}).$$

Следовательно, для невырожденного и вырожденного состояний можем записать

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = C\psi(\mathbf{r}) \quad \text{или} \quad \psi_{\mu}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \sum_{\nu} C_{\mu\nu}\psi_{\nu}(\mathbf{r}), \quad \text{где} \quad |C|^2 = 1.$$

Таким образом,

$$C(\mathbf{R}) = e^{i\varphi(\mathbf{R})},$$

где $\varphi(\mathbf{R})$ – вещественная функция смещения \mathbf{R} . Рассматривая два произвольных последовательных смещения на \mathbf{R}_1 и \mathbf{R}_2 , заключаем, что

$$C(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) = C(\mathbf{R}_1) C(\mathbf{R}_2),$$

поэтому функция $\varphi(\mathbf{R})$ должна быть линейной функцией смещения

$$C(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}.$$

Коэффициент преобразования $C(\mathbf{R})$ определен неоднозначно, поскольку коэффициент сохраняет своё значение при замене $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{K}$

$$e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad \text{при условии} \quad \mathbf{K}\cdot\mathbf{R} = 2\pi m.$$

Вектора \mathbf{K} называются векторами обратной решётки

$$\mathbf{K} = m_1\mathbf{K}_1 + m_2\mathbf{K}_2 + m_3\mathbf{K}_3, \quad \text{где}$$

$$\mathbf{K}_1 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}, \quad \mathbf{K}_2 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])} \quad \text{и} \quad \mathbf{K}_3 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}.$$

Общий вид волновой функции частицы в периодическом потенциале

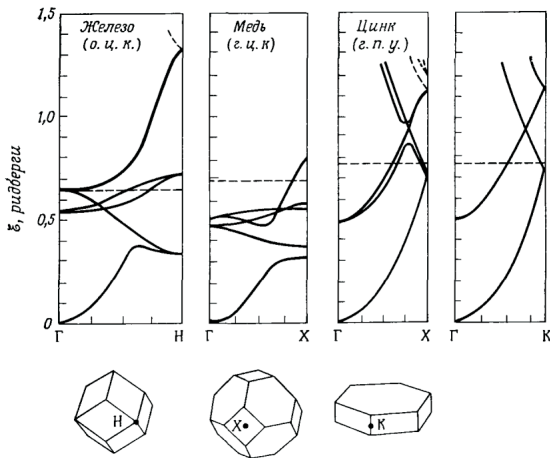
$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}) \quad \text{или} \quad \psi(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

где $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ – произвольная периодическая функция.

Поскольку электронные состояния с волновыми векторами \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ физически неразличимы, то собственная энергия блоховских волн зависит от \mathbf{k} периодическим образом

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}},$$

где n – целочисленный индекс. Совокупность всех электронных уровней, описываемых функцией $E_{n,\mathbf{k}}$ для фиксированного n , называется n -ой разрешённой энергетической зоной.



Промежуточный вывод: наличие поверхности очевидным образом нарушает периодичность потенциала, что должно привести к качественной перестройке энергетического спектра.

Терминология

1. Модель сильной связи (tight-binding approximation)

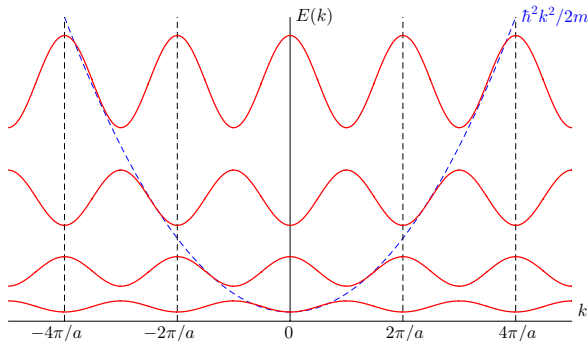
Используется для расчета положений глубоких уровней, для которых потенциальная энергия частицы в периодическом потенциале существенно превышает кинетическую энергию.

Состояния Тамма

2. Модель слабой связи (approximation of nearly-free electrons)

Используется для расчета положений высших (практически делокализованных) уровней, для которых кинетическая энергия частицы в периодическом потенциале существенно превышает потенциальную энергию.

Состояния Шокли



Зонный спектр и поверхностные электронные состояния в приближении сильной связи: постановка задачи

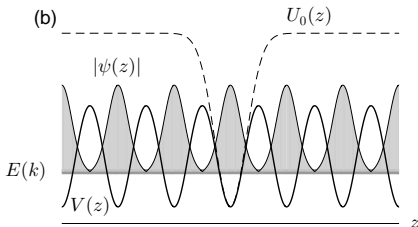
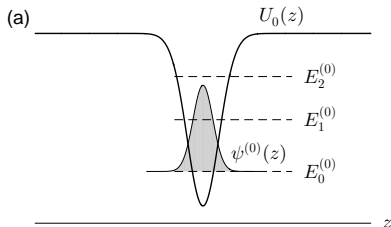
Пусть $U_0(z)$ – потенциальная энергия электрона в поле изолированного ядра. Собственные функции $\psi_n^{(0)}(z)$ и собственные энергии $E_n^{(0)}$ электрона в таком потенциале являются решениями одномерного уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(z) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(z),$$

где $\hat{H}_0 = -(\hbar^2/2m^*) d^2/dz^2 + U_0(z)$ – оператор Гамильтона, n – номер уровня размерного квантования. Потенциал, представляющий собой сумму потенциалов одиночных ям

$$V(z) = \sum_m U_0(z + ma),$$

является периодической функцией, где a – постоянная решётки. Очевидно, что вблизи каждого ядра потенциал $V(z)$ будет отличаться от потенциала изолированной ямы $U_0(z)$.



Волновая функция электрона $\psi(z)$ в периодическом потенциале $V(z)$ должна быть решением стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{H} \psi(z) = E \psi(z),$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H} &= - \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \pm U_0(z) = \left\{ - \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \frac{d^2}{dz^2} + U_0(z) \right\} + V(z) - U_0(z) = \\ &= \hat{H}_0 + V(z) - U_0(z). \end{aligned}$$

Отметим, что всегда $V(z) - U_0(z) < 0$.

Ограничимся простейшим случаем формирования s -зоны ($n = 0$). Будем считать, что перекрытие волновых функций электронов в соседних ямах пренебрежимо мало. Это позволяет искать решение в виде суперпозиции невозмущённых волновых функций, локализованных вблизи m -го атома

$$\psi(z) = \sum_m b_m \psi^{(0)}(z + ma).$$

Для нахождения коэффициентов b_m мы воспользуемся вариационным принципом квантовой механики.

Вариационный принцип квантовой механики

Запишем уравнение Шрёдингера $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ и умножим левую и правую части на $\psi^*(\mathbf{r})$

$$\psi^*(\mathbf{r})\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}).$$

Проинтегрируем по доступному объёму V и получим точное выражение

$$E = \frac{\int \psi^*(\mathbf{r})\hat{H}\psi(\mathbf{r}) dV}{\int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) dV}.$$

Вместо точного решения можно подставить приближенное (approximate) решение $\psi_{app}(\mathbf{r})$ и получить *оценку* собственной энергии

$$E_{app} = \frac{\int \psi_{app}^*(\mathbf{r})\hat{H}\psi_{app}(\mathbf{r}) dV}{\int \psi_{app}^*(\mathbf{r})\psi_{app}(\mathbf{r}) dV}.$$

Вывод: чем точнее приближенное решение $\psi_{app}(\mathbf{r})$ описывает собственную волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$, тем ближе оценка энергии E_{app} к истинной собственной энергии E

$$E = \min E_{app} = \min \frac{\int \psi_{app}^*(\mathbf{r})\hat{H}\psi_{app}(\mathbf{r}) dV}{\int \psi_{app}^*(\mathbf{r})\psi_{app}(\mathbf{r}) dV}.$$

Альтернативная формулировка: поиск минимального нулевого значения вспомогательного функционала

$$F \equiv \int \psi_{app}^*(\mathbf{r})(\hat{H} - E_{app})\psi_{app}(\mathbf{r}) dV \rightarrow \min.$$

Система уравнений для коэффициентов разложения

Запишем приближенное решение в виде разложения по невозмущенным локализованным состояниям

$$\psi_{app}(z) = \sum_m b_m \psi^{(0)}(z + ma).$$

Будем считать, что коэффициенты разложения b_m выбраны таким образом, что функция $\psi_{app}(z)$ является нормированной на объём

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{app}^*(z) \psi_{app}(z) dz = 1.$$

Подставим решение $\psi_{app}(z)$ в функционал для оценки собственной энергии

$$\begin{aligned} F &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{app}^*(z) (\hat{H} - E_{app}) \psi_{app}(z) dz = \\ &= \sum_{m'} \sum_m b_{m'}^* b_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{m'}^*(z) \left((\hat{H}_0 - E_{app}) + (V(z) - U_0(z)) \right) \psi_m(z) dz. \end{aligned}$$

где для удобства введены обозначения $\psi_m(z) = \psi^{(0)}(z + ma)$ и $\psi_{m'}(z) = \psi^{(0)}(z + m'a)$.

Далее для краткости будем опускать индекс *app*.

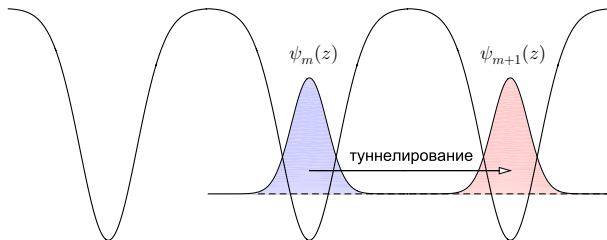
Учитывая $\hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(z) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(z)$, получаем

$$\begin{aligned} F &= \sum_{m'} \sum_m b_{m'}^* b_m \int \psi_{m'}^*(z) \left((\hat{H}^{(0)} - E) + (V(z) - U_0(z)) \right) \psi_m(z) dz = \\ &= \sum_{m'} \sum_m b_{m'}^* b_m \int \psi_{m'}^*(z) \left((E^{(0)} - E) + (V(z) - U_0(z)) \right) \psi_m(z) dz = \\ &= \sum_{m'} \sum_m b_{m'}^* b_m \left[(E^{(0)} - E) S_{m',m} + P_{m',m} \right], \end{aligned}$$

где

$$S_{m',m} = \int \psi_{m'}^*(z) \psi_m(z) dz > 0 \quad \text{и} \quad P_{m',m} = \int \psi_{m'}^*(z) (V(z) - U_0(z)) \psi_m(z) dz < 0$$

есть интегралы перекрытия волновых функций, локализованных на разных ядрах.



Используем условие экстремальности $dF/db_{m'}^* = 0$ и получим бесконечную систему линейных алгебраических уравнения для коэффициентов b_m

$$\sum_m b_m \left[(E^{(0)} - E) S_{m',m} + P_{m',m} \right] = 0.$$

1. Если волновые функции электронов, локализованных в соседних ямах, не перекрываются и вероятность переходов электронов между ямами пренебрежимо мала, то можно считать

$$S_{m',m} = \delta_{m',m} \quad \text{и} \quad P_{m',m} = \alpha \delta_{m',m},$$

где $\delta_{m',m}$ – символ Кронекера. В этом случае система алгебраических уравнений принимает вид

$$\sum_m b_m \left[(E^{(0)} - E) \delta_{m',m} + \alpha \delta_{m',m} \right] = 0 \quad \text{или} \quad E = E^{(0)} + \alpha$$

для всех m . Следовательно, параметр $\alpha < 0$ характеризует изменение энергии электрона в периодическом потенциале по сравнению с потенциалом изолированной ямы из-за влияния потенциалов соседних ям.

2. Для того, чтобы учесть вероятность перехода электрона из ямы с номером m в соседние ямы $m - 1$ и $m + 1$, следует рассмотреть более сложное модельное выражение

$$S_{m',m} = \delta_{m',m} \quad \text{и} \quad P_{m',m} = \alpha \delta_{m',m} + \beta (\delta_{m',m-1} + \delta_{m',m+1}),$$

где параметр $\beta < 0$ характеризует вероятность туннелирования.

Подставим выражения для $S_{m',m}$ и $P_{m',m}$ в систему уравнений и получим

$$b_m \left(E^{(0)} - E \right) + b_m \alpha + \beta \left(b_{m-1} + b_{m+1} \right) = 0.$$

Зонный спектр в неограниченном кристалле в приближении сильной связи

Решение системы уравнений для электрона в периодическом потенциале

$$b_m \left(E^{(0)} - E + \alpha \right) + \beta \left(b_{m-1} + b_{m+1} \right) = 0$$

будем искать в виде бловховской волны

$$b_m = B e^{ikam},$$

где B – постоянная, не зависящая от m ; k – действительная величина, играющая роль квазиимпульса; a – постоянная решётки.

После подстановки b_m в исходное уравнение получаем

$$e^{ikam} \left(E^{(0)} - E + \alpha \right) + \beta \left(e^{ika(m-1)} + e^{ika(m+1)} \right) = 0,$$

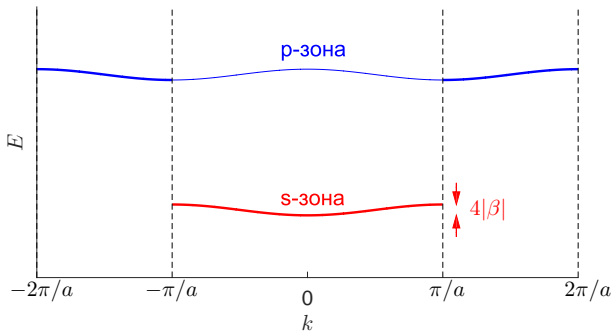
откуда следует зонный спектр

$$E(k) = E^{(0)} + \alpha + 2\beta \cos ka = E^{(0)} - |\alpha| - 2|\beta| \cos ka.$$

Зонный спектр

$$E(k) = E^{(0)} + \alpha + 2\beta \cos ka = E^{(0)} - |\alpha| - 2|\beta| \cos ka.$$

Легко видеть, что дискретный энергетический уровень для электрона в изолированной яме при наличии периодического потенциала «размывается» в зону шириной 4β . Отметим, что минимальное значение собственной энергии для s -состояния равно $E_{min} = E^{(0)} - |\alpha| - 2|\beta|$ и достигается в центре зоны Бриллюэна (при $k = 0$); максимальное значение собственной энергии для s -состояния равно $E_{max} = E^{(0)} - |\alpha| + 2|\beta|$ и достигается на границе зоны Бриллюэна (при $k = \pm\pi/a$).

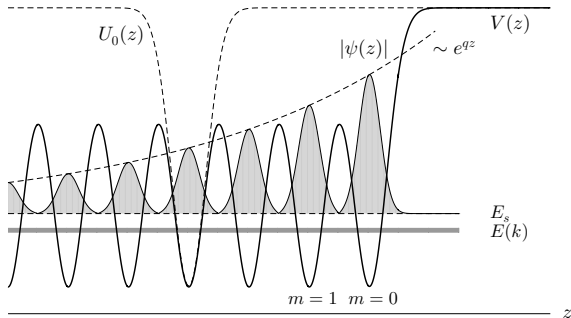


Спектр электрона в полуграниченном кристалле в приближении сильной связи

Наличие границы нарушает периодичность потенциала и приводит к нарушению теоремы Блоха. Пусть индекс $m = 0$ соответствует крайней потенциальной яме. Будем считать, что переход электрона из этой ямы в вакуум невозможен. Поскольку атомный потенциал на поверхности должен быть ближе к потенциалу изолированной ямы, то для крайней ямы следует ввести модифицированную величину $\tilde{\alpha}$, которая удовлетворяет условию $\alpha < \tilde{\alpha} < 0$. Уравнения для коэффициентов b_m будут иметь различный вид в зависимости от индекса:

$$b_0 (E^{(0)} - E + \tilde{\alpha}) + \beta (0 + b_1) = 0 \quad \text{для } m = 0$$

$$b_m (E^{(0)} - E + \alpha) + \beta (b_{m-1} + b_{m+1}) = 0 \quad \text{для } m \neq 0.$$



Будем искать решение системы в виде $b_m = C e^{ikam}$, тогда квазиимпульс k и энергия E_s такого состояния должны удовлетворять уравнениям

$$(E^{(0)} - E_s + \tilde{\alpha}) + \beta e^{ika} = 0 \quad \text{и} \quad (E_0^{(0)} - E_s + \alpha) + \beta (e^{ika} + e^{-ika}) = 0.$$

Вычитая первое уравнение из второго уравнения, находим, что разрешённые значения квазиимпульса являются решениями

$$e^{ika} = \frac{\beta}{\tilde{\alpha} - \alpha} < 0.$$

Решение имеет вид $k = k_0 - iq$, где q – декремент затухания волновой функции

$$e^{ik_0 a + q a} = -\frac{|\beta|}{\tilde{\alpha} - \alpha} \quad \text{или} \quad e^{q a} \cdot (\cos k_0 a + i \sin k_0 a) = -\frac{|\beta|}{\tilde{\alpha} - \alpha}.$$

Поскольку правая часть полученного уравнения не имеет мнимой части, то следует положить $\sin k_0 a = 0$, тогда $\cos k_0 a = -1$; следовательно

$$k_0 = \frac{\pi}{a} \quad \text{и} \quad e^{q a} = \frac{|\beta|}{\tilde{\alpha} - \alpha} > 0.$$

Условие $k_0 = \pi/a$ есть условие брэгговского резонанса, соответствующее невозможности распространения бегущих от границы электронных волн вглубь кристалла.

Вычислим энергию поверхностного электронного состояния, подставляя $e^{ika} = \beta/(\tilde{\alpha} - \alpha)$ в уравнение

$$(E^{(0)} - E_s + \tilde{\alpha}) + \beta e^{ika} = 0.$$

Отсюда следует, что

$$E_s = E^{(0)} + \tilde{\alpha} + \frac{\beta^2}{\tilde{\alpha} - \alpha}.$$

Легко убедиться в том, что энергия этого состояния лежит выше потолка разрешённой зоны

$$\begin{aligned} E_s - E_{max} &= E^{(0)} + \tilde{\alpha} + \frac{|\beta|^2}{(\tilde{\alpha} - \alpha)} - (E_0 + \alpha + 2|\beta|) = \\ &= (\tilde{\alpha} - \alpha) + \frac{|\beta|^2}{(\tilde{\alpha} - \alpha)} - 2|\beta| = \frac{1}{(\tilde{\alpha} - \alpha)} \left(|\beta| - (\tilde{\alpha} - \alpha) \right)^2 > 0. \end{aligned}$$

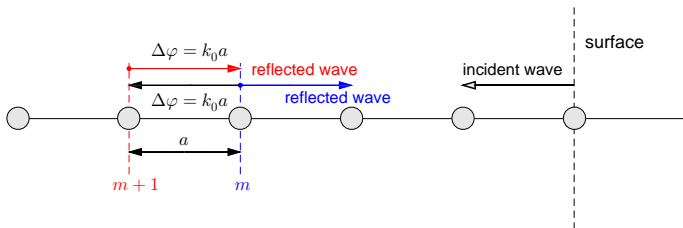
Таким образом, мы показали, что вблизи края одномерной периодической цепочки атомов может возникать локализованное электронное состояние, которое отсутствует в неограниченной цепочке. Физическая причина локализации электрона вблизи поверхности заключается в существовании брэгговского отражения электронных волн от периодического потенциала, которое препятствует потоку вероятности вглубь кристалла.

Поверхностные состояния и условие дифракции Брэгга-Вульфа

Условие $k_0 = \pi/a$ соответствует брэгговскому резонансу на периодической структуре.

Условие когерентного рассеяния назад атомами с индексами m и $m + 1$

$$\Delta\varphi_{total} = 2 \cdot k_0 a = 2\pi n \quad \text{or} \quad k_0 = \frac{\pi n}{a}.$$



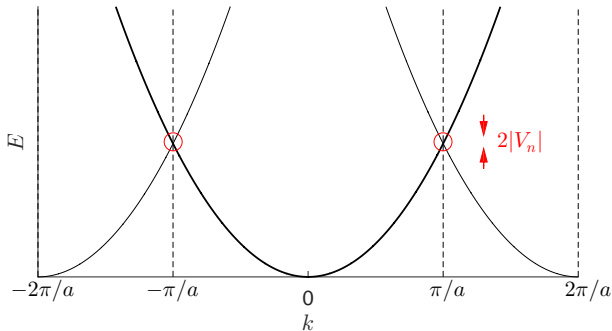
Важный вывод: если реальная часть волнового вектора падающей волны k_0 удовлетворяет условию Брэгга-Вульфа ($k_0 = \pi n/a$), то такая волна не может пройти через периодическую структуру.

Зонный спектр и поверхностные электронные состояния в приближении слабой связи

Спектр свободного электрона $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^*$

Спектр свободного электрона с учётом периодического потенциала

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{K})^2}{2m^*}.$$



Расщепление уровней вблизи точек вырождения $k = nK/2 = \pi n/a$ определяется n -ой фурье-компонентой периодического потенциала.

Общий вид решения внутри кристалла

Рассмотрим кристалл с плоской границей при $z = 0$ и предположим, что потенциальная энергия электрона может быть представлена в виде

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } z > 0, \\ V(z+a) & \text{при } z < 0, \end{cases}$$

где a – период структуры. Пусть внутрикристаллический потенциал имеет вид

$$V(z) = V_0 + 2V_n \cos\left(\frac{2\pi n}{a} z\right) = V_0 + V_n e^{i2\pi n z/a} + V_n e^{-i2\pi n z/a},$$

где V_0 – постоянная составляющая, $2V_n$ – амплитуда n -ой фурье-гармоники потенциала, $k_{Br} = K/2 = \pi n/a$ – граница n -ой зоны Бриллюэна, $K = 2\pi n/a$ – вектор обратной решетки.

В приближении почти свободного электронного газа решение уравнения Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi(z) + V(z) \psi(z) = E \psi(z),$$

можно искать в виде суперпозиции двух плоских бегущих волн

$$\psi(z) = A e^{ik_0 z + qz} + B e^{ik_0 z - i2\pi n z/a + qz},$$

где $q > 0$ – декремент затухания волновой функции внутри кристалла. Такое представление является разумным, если вектор k_0 лежит вблизи одной из брэгговских плоскостей: $k_0 \simeq K/2 = \pi n/a$.

Секулярное уравнение

Подставим предполагаемый вид решения в уравнение Шрёдингера

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} (ik_0 + q)^2 A e^{(ik_0+q)z} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(ik_0 - \frac{i2\pi n}{a} + q \right)^2 B e^{(ik_0 - i2\pi n/a + q)z} + \\ + \left(V_0 + V_n e^{i2\pi n z/a} + V_n e^{-i2\pi n z/a} \right) \left(A e^{(ik_0+q)z} + B e^{(ik_0 - i2\pi n/a + q)z} \right) = \\ = E \left(A e^{(ik_0+q)z} + B e^{(ik_0 - i2\pi n/a + q)z} \right). \end{aligned}$$

Поскольку бегущие волны вида e^{ikz} и $e^{ik'z}$ с разными волновыми векторами являются линейно независимыми решениями, то полученное равенство должно выполняться покомпонентно. Это приводит нас к системе секулярных уравнений для определения амплитуд волн A и B

$$\begin{aligned} A \left(V_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} (ik_0 + q)^2 - E \right) + B V_n &= 0, \\ A V_n + B \left(V_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(ik_0 - i \frac{2\pi n}{a} + q \right)^2 - E \right) &= 0. \end{aligned}$$

Условием существования нетривиальных решений однородной системы уравнений является равенство нулю детерминанта соответствующей матрицы

$$\left(V_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} (ik_0 + q)^2 - E \right) \left(V_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(ik_0 - i \frac{2\pi n}{a} + q \right)^2 - E \right) - V_n^2 = 0.$$

Энергия электронных волн в полуграниченном периодическом потенциале

Энергия неоднородных электронных волн

$$E = V_0 + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ k_0^2 + \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 - 2q^2 - 2iq \left(2k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right) \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left\{ k_0^2 - \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 - 2iq \frac{2\pi n}{a} \right\}^2 + 4V_n^2}.$$

Отметим, что зависимость E от k_0 и q в общем виде содержит мнимую часть. Это свидетельствует о том, что неоднородные плоские волны с произвольными значениями k_0 и q не могут быть стационарными решениями уравнения Шрёдингера.

В самом деле, состояние с $Im E \neq 0$ является распадающимся состоянием

$$\Psi(x, t) = A \exp(ikx - i\omega t) \quad \text{и} \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad \text{и} \quad E = Re E - i Re E \implies$$
$$\Psi(x, t) = A \exp\left(ikx - i \frac{Re E \cdot t}{\hbar}\right) \cdot \exp\left(-\frac{Im E \cdot t}{\hbar}\right).$$

Есть два частных случая, соответствующих возможным стационарным решениям с $Im E = 0$.

Зонный спектр

Энергия неоднородных электронных волн

$$E = V_0 + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ k_0^2 + \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 - 2q^2 - 2iq \left(2k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right) \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left\{ k_0^2 - \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 - 2iq \frac{2\pi n}{a} \right\}^2 + 4V_n^2}.$$

Во-первых, собственная энергия E является вещественной величиной при $q = 0$ и произвольном k_0 :

$$E(k_0) = V_0 + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ k_0^2 + \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left\{ k_0^2 - \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 \right\}^2 + 4V_n^2}.$$

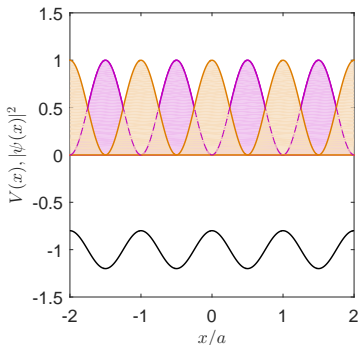
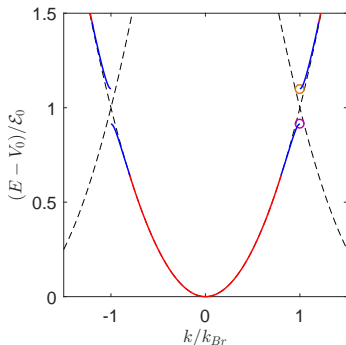
Следовательно, электронные волны постоянной амплитуды являются стационарными решениями уравнения Шрёдингера в пределах n -разрешённой зоны объёмного кристалла. Границы n -ой запрещённой зоны определяются условием

$$V_0 + \hbar^2 k_0^2 / 2m^* - |V_n| < E < V_0 + \hbar^2 k_0^2 / 2m^* + |V_n|$$

Структура волновой функции на границе зоны Бриллюэна

Поставляя $E = V_0 + \hbar^2 k_0^2 / (2m^*) - |V_n|$ и $q = 0$ (нижняя граница n -ой запрещенной зоны) в секулярное уравнение, получаем $|V_n|A + V_n B = 0$; следовательно, волновая функция $\psi(z) = A e^{i\pi n z/a} - A \cdot \text{sign} V_n \cdot e^{-i\pi n z/a}$ представляет собой стоячую электронную волну с пучностями в областях минимума потенциала.

Поставляя $E = V_0 + \hbar^2 k_0^2 / (2m^*) + |V_n|$ и $q = 0$ (верхняя граница n -ой запрещенной зоны) в секулярное уравнение, получаем $-|V_n|A + V_n B = 0$; следовательно, волновая функция $\psi(z) = A e^{i\pi n z/a} + A \cdot \text{sign} V_n \cdot e^{-i\pi n z/a}$ представляет собой стоячую волну с пучностями в областях максимума потенциала.



Энергия поверхностных состояний Тамма-Шокли

Энергия неоднородных электронных волн

$$E = V_0 + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ k_0^2 + \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 - 2q^2 - 2iq \left(2k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right) \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left\{ k_0^2 - \left(k_0 - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 - 2iq \frac{2\pi n}{a} \right\}^2 + 4V_n^2}.$$

Во-вторых, собственная энергия E является вещественной величиной при $k_0 = \pi n/a$ и $q < 2m^*a|V_n|/(2\pi n\hbar^2)$:

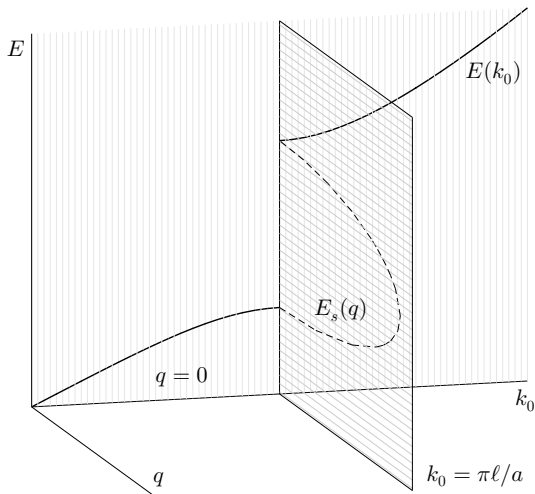
$$E_s = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_0^2 - q^2) \pm \sqrt{V_n^2 - q^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left(\frac{2\pi n}{a} \right)^2}.$$

Поскольку границы n -ой запрещённой зоны определяются условием

$$V_0 + \hbar^2 k_0^2 / 2m^* - |V_n| < E < V_0 + \hbar^2 k_0^2 / 2m^* + |V_n|,$$

мы заключаем, что энергия неоднородного состояния лежит в n -ой запрещенной зоне.

Спектр неоднородных электронных волн (3)



Полное решение задачи в модели слабой связи

Для того, чтобы определить параметры волновой функции и энергию поверхностного состояния, необходимо решить задачу согласования волновой функции внутри кристалла

$$\psi_{in}(z) = A e^{i\pi n z/a + qz} + B e^{-i\pi n z/a + qz} \quad \text{при } z < 0$$

и волновой функции вне кристалла

$$\psi_{out}(z) = C e^{-pz} \quad \text{при } z > 0$$

вместе с первыми производными, $q > 0$ и $p > 0$ – декременты затухания волновой функции.

Решение: see Goodwin, Proc. Camb. Phil. Soc. (1939)

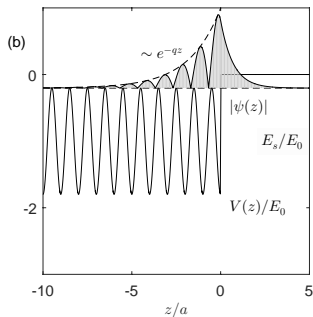
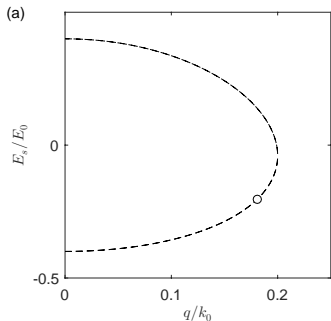
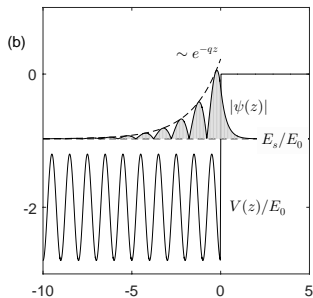
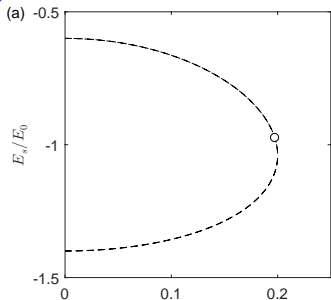
$$A = e^{i\delta} \quad \text{при} \quad B = e^{-i\delta}$$

$$q = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\pi n}{a} \cdot \frac{V_n}{\mathcal{E}_0} \sin 2\delta \quad \text{при} \quad p + q = \frac{\pi n}{a} \tan \delta$$

$$\cos^2 \delta = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 \cdot \frac{1}{(-V_0 - V_n)}$$

$$E_s = -\frac{\hbar^2 p^2}{2m^*} = V_0 + \frac{(-V_0)^2}{(-V_0 - V_n)^2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 + \frac{(-V_0)(-V_n)}{(-V_0 - V_n)}$$

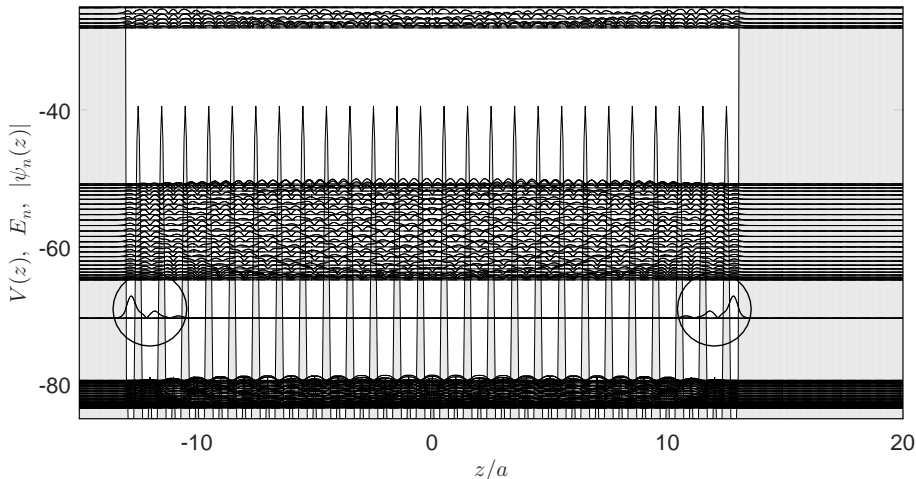
Структура волновой функции в модели слабой связи



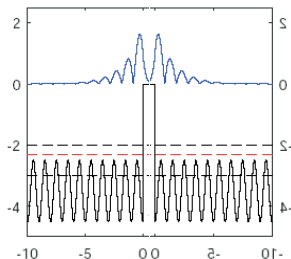
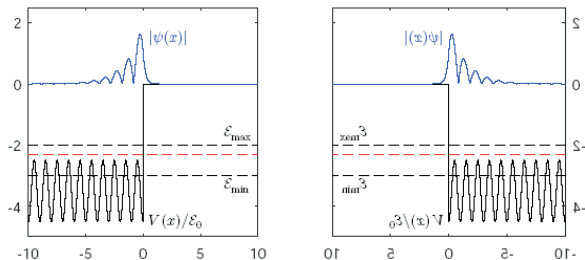
Поверхностные электронные состояния: численное моделирование

Численное решение уравнения Шрёдингера для потенциала вида

$$V(z) = V_0 + 2V_1 \cos\left(\frac{2\pi z}{a}\right) + 2V_2 \cos\left(\frac{4\pi z}{a}\right)$$



Поверхностные состояния как частный случай локализованных состояний на дефектах структуры



Обобщение на трёхмерный случай

Мы показали, что при определённых условиях на краю одномерного кристалла могут возникать локализованные электронные состояния $\psi_n(z)$, энергия которых лежит в запрещённой зоне объёмного кристалла. Полученные решения можно обобщить на трёхмерный случай. В модели почти свободного электронного газа волновая функция электрона имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = A e^{ik_x x + ik_y y} \psi_n(z)$$

и соответствует почти свободному двумерному электрону. Здесь x и y – латеральные координаты, k_x и k_y – компоненты волнового вектора вдоль поверхности.

Энергетический спектр почти свободных электронов определяется соотношением

$$E_{n,k_{\parallel}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + E_n,$$

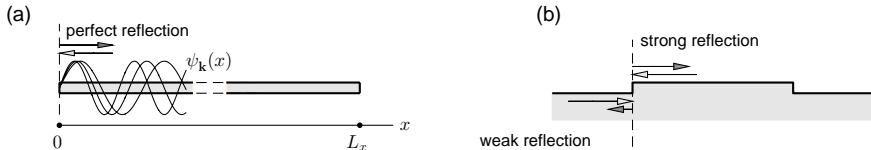
при условии $|k_x| \ll k_{SB}$ и $|k_y| \ll k_{SB}$, где k_{SB} – граничное значение для поверхностной зоны Бриллюэна.

В трёхмерном кристалле поверхностный уровень превращается в зону поверхностных состояний, число состояний в которой порядка 10^{15} , т. е. порядка числа атомов поверхности на 1 см^2 .

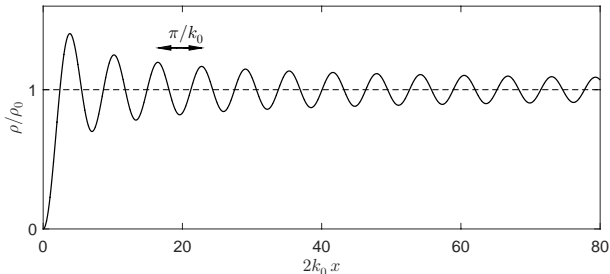
Интерференция поверхностных электронных волн вблизи дефектов на поверхности

англ. quasiparticle interference (QPI), Friedel oscillations

Формирование интерференционных структур из-за рассеяния электронных волн на дефектах



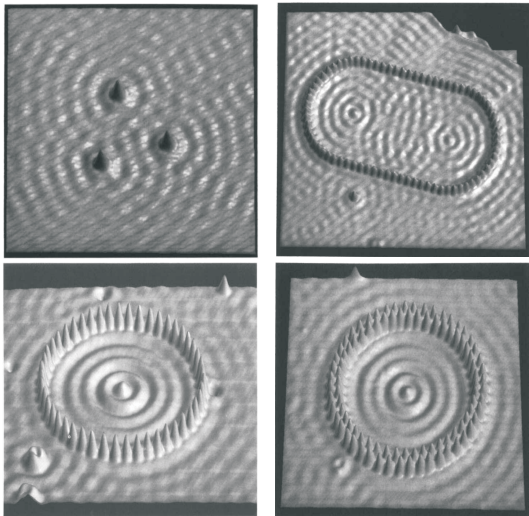
Локальная плотность состояний $\rho = 2 \sum_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}(x, y)|^2 \delta(E - E_{\mathbf{k}})$ вблизи дефекта



Квазичастичная интерференция и квантовые «бассейны»

англ. quantum corrals, quantum pools

Атомы Fe на поверхности Cu(111)

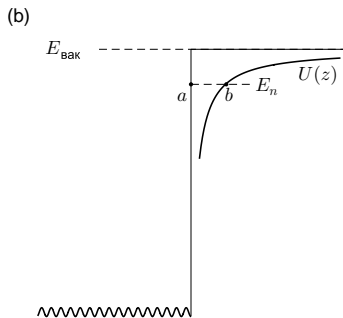
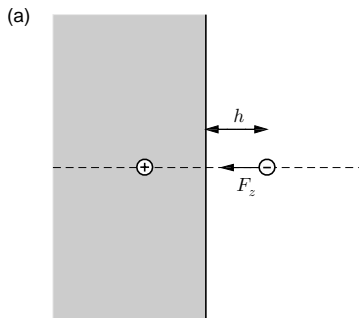


Crommie, Lutz, Eigler, Heller, Surf. Rev. Lett., vol. 2, 127-137 (1995)

Поверхностные электронные состояния в потенциале изображения

Известно, что любая заряженная частица индуцирует на поверхности проводника избыточный заряд противоположного знака. Сила взаимодействия между точечными зарядами e и $-e$ на расстоянии $2h$ и потенциал взаимодействия согласно закону Кулона равны

$$F_z(h) = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{e^2}{(2h)^2} \quad \text{и} \quad U(z) = E_{\text{вак}} - \int_z^{+\infty} F_z(h') dh' = E_{\text{вак}} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{e^2}{4h}.$$



Поверхностные электронные состояния в потенциале изображения и особенности фотоэмиссионных свойств

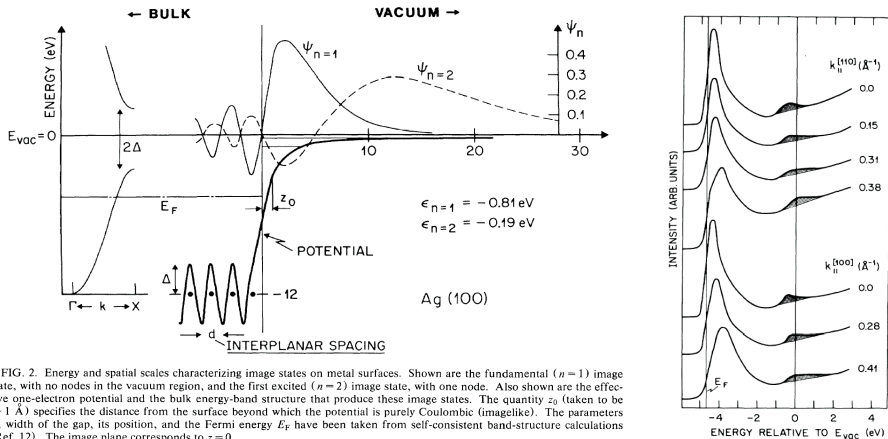


FIG. 2. Energy and spatial scales characterizing image states on metal surfaces. Shown are the fundamental ($n=1$) image state, with no nodes in the vacuum region, and the first excited ($n=2$) image state, with one node. Also shown are the effective one-electron potential and the bulk energy-band structure that produce these image states. The quantity z_0 (taken to be $\sim 1 \text{ \AA}$) specifies the distance from the surface beyond which the potential is purely Coulombic (imagelike). The parameters Δ , width of the gap, its position, and the Fermi energy E_F have been taken from self-consistent band-structure calculations (Ref. 12). The image plane corresponds to $z=0$.

Garcia, Reihl, Frank, and Williams, Phys. Rev. Lett., vol. 55, 991-994 (1985)

Энергия поверхностных состояний в потенциале изображения: квазиклассическое приближение

Будем считать, что $E_{\text{вак}} = 0$. Предположим, что энергия уровней, соответствующих поверхностным электронным состояниям, окажется в запрещённой зоне объёмного кристалла. Эффективный потенциал может быть записан в виде

$$U(z) = \begin{cases} \infty & \text{при } z < 0, \\ -e^2/4z & \text{при } z > 0, \end{cases}$$

где z – расстояние от поверхности, $a = 0$ и $b = e^2/4|E_n|$ – классические точки поворота для частицы с энергией $E_n = -|E_n|$. Полный набег фазы при распространении электронной волны по замкнутому контуру от точки a до точки b и обратно равен

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(z) dz + \varphi_b + \frac{1}{\hbar} \int_b^a (-p(z)) dz + \varphi_a = 2\pi n,$$

где φ_a и φ_b есть фазы амплитуд отражения в точках a и b , соответственно; $n = 0, 1, \dots$ – номер уровня размерного квантования. Перегруппируя слагаемые, получаем

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(z) dz = n + \gamma, \quad \text{где } \gamma = -\frac{\varphi_a}{2\pi} - \frac{\varphi_b}{2\pi}.$$

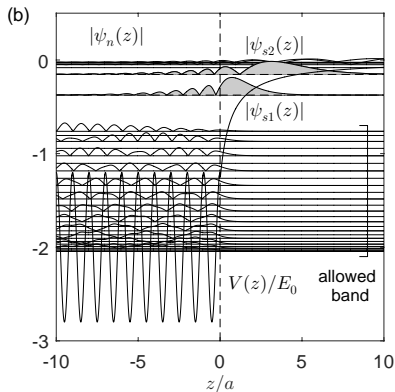
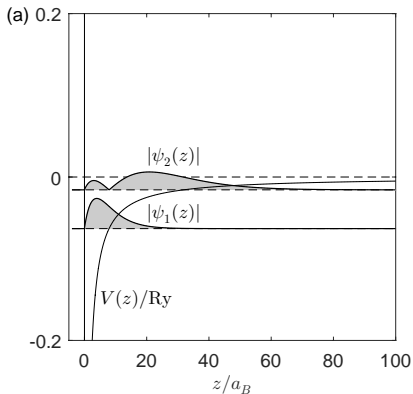
Подставим $p(z) = \sqrt{2m_0(E - U(z))}$ в формулу Бора-Зоммерфельда и получим

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(z) dz = \frac{1}{\pi\hbar} \int_0^b \sqrt{2m_0(E_n - U(z))} dz = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m_0}{|E_n|}} \frac{\pi}{8} = n + \gamma.$$

Спектр локализованных состояний (image-potential states) определяется соотношением

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{32\hbar^2} \cdot \frac{1}{(n + \gamma)^2} = -\frac{1}{16} \frac{Ry}{(n + \gamma)^2},$$

где Ry (ридберг) $\equiv me^4/(2\hbar^2) = 13.6$ эВ – энергия ионизации атома водорода.



Поверхностные электронные состояния в линейно растущем потенциале

Сдвиг уровней размерного квантования в постоянном электрическом поле (т. е. в линейно растущем потенциале) является аналогом эффекта Штарка для атомных уровней водородо-подобного атома.

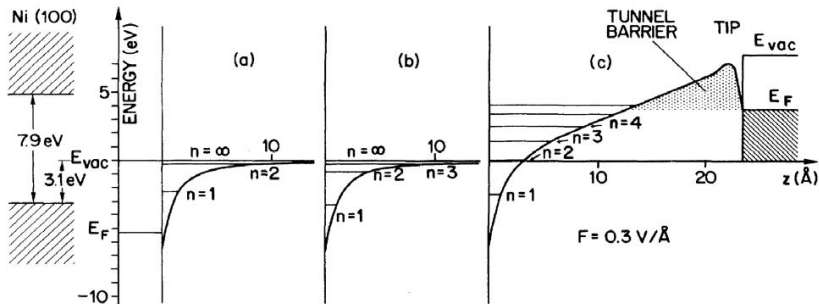


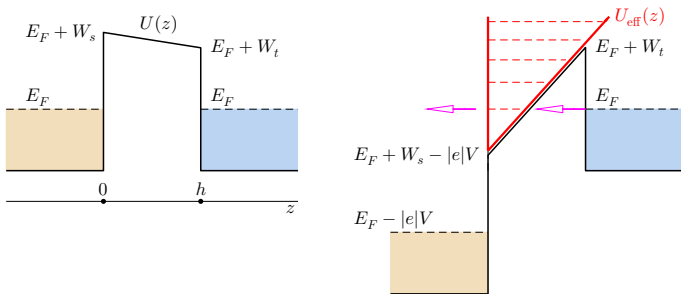
FIG. 1. Energy diagram for the electrostatic potential (including image) at a metal surface. On the left, the projected bulk structure of the Ni(100) surface is shown shaded. Note the 7.1-eV band gap straddling the vacuum level $E_{vac} = 0$. (a) For simplicity, only the $n = 1$ and $n = 2$ hydrogenic (quantum defect) energy levels are shown. (b) The surface corrugation affects the electronic x, y movement pulling the levels down, as seen by inverse photoemission. (c) Expansion and shift of the image-state spectrum by an applied field, F . The heavy solid line is the crystal potential plus the field potential.

Поверхностные электронные состояния в линейно растущем потенциале: квазиклассическое приближение

В ряде случаев в задачах туннельной спектроскопии для оценки положения высших уровней размерного квантования, находящихся в запрещённой зоне объёмного кристалла, можно пренебречь потенциалом изображения и рассмотреть эффективную треугольную потенциальную яму

$$V(z) = \begin{cases} \infty & \text{при } z < 0, \\ U^* + F^* \cdot z & \text{при } z \geq 0; \end{cases}$$

с непроницаемой стенкой при $z = 0$. Здесь U – разность потенциалов, $U^* = E_F + W_s - |e|U$ – энергия дна треугольной ямы с учётом электростатической энергии, F^* – эффективное электрическое поле.

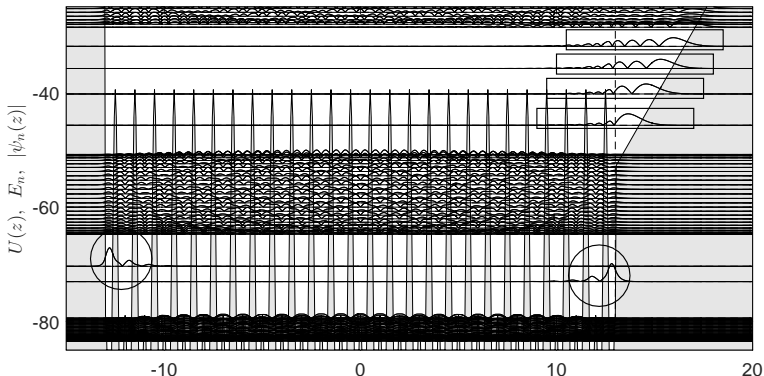


Подставим $p(z) = \sqrt{2m_0 (E_n - V(z))}$ в правило квантования Бора-Зоммерфельда

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b p(z) dz = n - 1 + \gamma, \quad n = 1, 2, \dots$$

где $a = 0$ и $b = (E - U^*)/F^*$ есть классические точки поворота, m_0 – масса свободного электрона, n – порядковый номер размерного квантования, $\gamma \simeq 3/4$. После интегрирования получаем спектр уровней размерного квантования в треугольной яме

$$E_n = U^* + \left\{ \frac{3}{2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_0}} F_n^* \cdot \left(n - \frac{1}{4} \right) \right\}^{2/3} = E_F + W_s - |e|U + \left\{ \frac{3}{2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_0}} F_n^* \cdot \left(n - \frac{1}{4} \right) \right\}^{2/3}.$$



Лекция 4

Исследование поверхности твёрдых тел методом электронной дифракции

Дифракция быстрых и медленных электронов

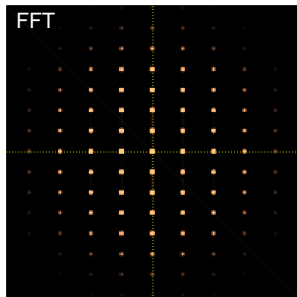
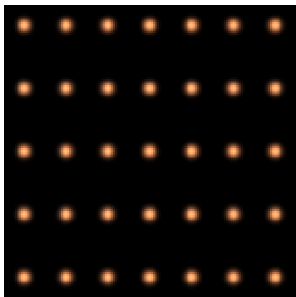
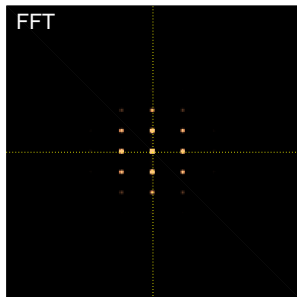
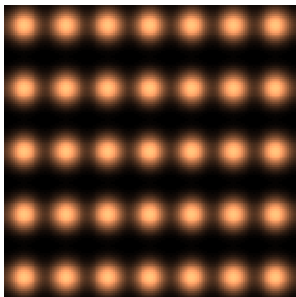
Рекомендуемая литература

Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А., Зотов А. В., Катаяма М. *Введение в физику поверхности*. Москва: Наука, 2006. — гл. 3.

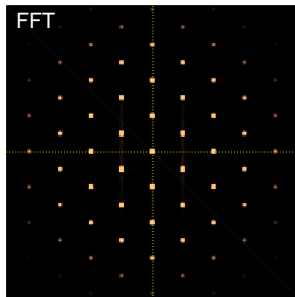
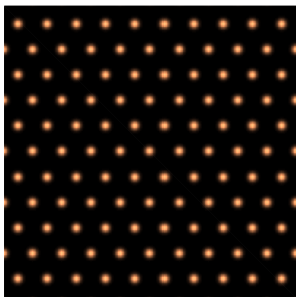
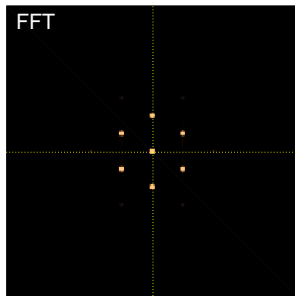
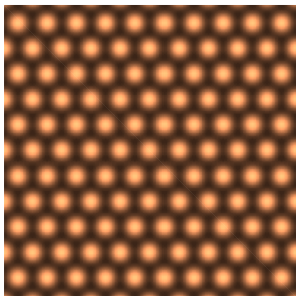
Ашкрофт Н., Мермин Н. *Физика твёрдого тела*. — М.: Наука. т. 1, 1979. — гл. 6.

Ichimiya A., Cohen P. I. *Reflection high energy electron diffraction*. Cambridge University Press, 2004. — гл. 9.

Прямое и обратное пространство: прямоугольная решётка



Прямое и обратное пространство: гексагональная решётка

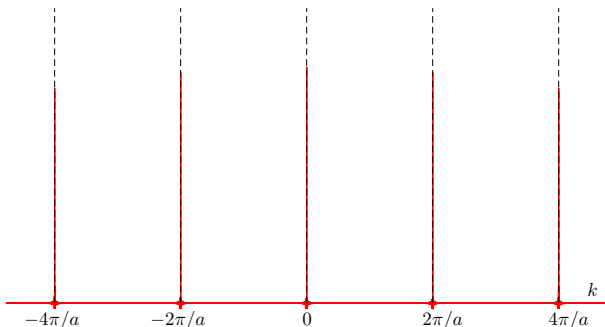


Прямое и обратное пространство: одномерный случай

Рассмотрим периодическую последовательность дельта-функций $f(x) = \sum \delta(x - na)$

Представим модельную функцию в интеграла Фурье и вычислим коэффициенты разложения

$$\begin{aligned} f_k &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - na) e^{ikx} dx \right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi} e^{ikna} \right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \left(\frac{1}{2\pi} e^{ikna} \right) \rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{N}{\pi} \delta_{ka, 2\pi m} \rightarrow \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta \left(k - \frac{2\pi}{a} m \right) \end{aligned}$$



Прямое и обратное пространство: трёхмерный случай

Определение кристаллической решётки:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3,$$

где \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 – три некопланарных вектора.

Определение обратной решётки:

$$\mathbf{K} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3, \quad \text{где}$$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])} \quad \text{и} \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}.$$

Вычислим компоненты скалярного произведения $\mathbf{R} \cdot \mathbf{K}$

$$\begin{aligned} n_1 \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{K} &= 2\pi n_1 \mathbf{a}_1 \cdot \left(m_1 \frac{[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])} + m_2 \frac{[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])} + m_3 \frac{[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])} \right) = \\ &= 2\pi n_1 m_1 \frac{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])}{(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])} = 2\pi n_1 m_1, \end{aligned}$$

$$n_2 \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{K} = 2\pi n_2 m_2, \quad \text{и} \quad n_3 \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{K} = 2\pi n_3 m_3.$$

Следовательно, $e^{i\mathbf{R} \cdot \mathbf{K}} = e^{i2\pi N} = 1$.

Постановка задачи рассеяния электронных волн на неоднородном электрическом потенциале

Обсудим особенности *когерентного* рассеяния электронных волн в системе с неоднородным распределением электрического потенциала $\varphi(\mathbf{r})$. Используя уравнение $\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 4\pi\rho(\mathbf{r})$ и определение электрического потенциала $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\varphi(\mathbf{r})$, находим, что распределение электрического потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ является решением уравнения Пуассона

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}),$$

где $\rho(\mathbf{r}) = \rho_{ion}(\mathbf{r}) - \rho_{el}(\mathbf{r})$ – микроскопическая плотность заряда, соответствующая положительно заряженным ионным остовам и отрицательно заряженным электронам. Будем считать распределение электрического потенциала известным.

Предположим, что источники неоднородного потенциала (атомы или молекулы) локализованы в ограниченной области пространства. Исследуем асимптотические решения стационарного уравнения Шрёдингера $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ с потенциалом $U(\mathbf{r}) = e\varphi(\mathbf{r})$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + e\varphi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}).$$

Вдали от неоднородностей потенциала решениями уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

являются плоские бегущие волны постоянной амплитуды $\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}$ с волновым вектором \mathbf{k}_0 , где $k_0 \equiv |\mathbf{k}_0| = \sqrt{2mE}/\hbar$.

Представим решение задачи рассеяния как суперпозицию падающей волны $\psi_0(\mathbf{r})$ и рассеянной волны $\Phi(\mathbf{r})$. После подстановки предполагаемого решения

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \Phi(\mathbf{r})$$

в уравнение Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(\mathbf{r}) + e\varphi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi_0(\mathbf{r}) + E \Phi(\mathbf{r}).$$

получаем неоднородное уравнение Гельмгольца для функции $\Phi(\mathbf{r})$

$$(\Delta + k_0^2) \Phi(\mathbf{r}) = \frac{2me}{\hbar^2} \varphi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}).$$

Решение уравнения Гельмгольца для вспомогательной функции $\Phi(\mathbf{r})$ можно представить в виде свёртки трёхмерной функции Грина

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{\pm ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

и функции источников:

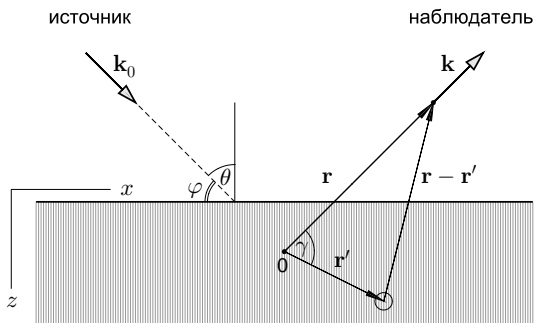
$$\Phi(\mathbf{r}) = -\iiint \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cdot \frac{2me}{\hbar^2} \varphi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

где \mathbf{r} – координата точки наблюдения, \mathbf{r}' – текущая координата внутри рассеивающего объёма, по которому производится интегрирование.

Для волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ мы получаем интегральное уравнение

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{me}{2\pi\hbar^2} \iiint \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{ik_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'.$$

Мы получили математическую формулировку принципа Гюйгенса-Френеля: поле рассеянной волны является суперпозицией полей вторичных источников в виде сферических волн.



Приближение однократного (борновского) рассеяния

Предположим, что амплитуда и фаза вторичных источников определяются только полем падающей волны. Это приближение соответствует так называемой кинематической теории дифракции электронных волн. В этом случае под интегралом неизвестную функцию $\psi(\mathbf{r})$ можно заменить на $\psi_0(\mathbf{r})$ и получить решение задачи рассеяния

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} - \frac{me}{2\pi\hbar^2} \iiint \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}'} \varphi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'.$$

Далее мы будем интересоваться структурой поля в дальней волновой зоне, расположенной от рассеивающего объекта на расстояниях много больших, чем длина волны излучения и характерные размеры рассеивателя. Для простоты выберем начало координат внутри образца, тогда выражение $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ на больших расстояниях от образца ($r \gg r'$) по теореме косинусов можно представить в виде

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \gamma} \simeq r - r' \cos \gamma = r - \mathbf{r}' \cdot \mathbf{n},$$

где γ – угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}' , $\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ – единичный вектор в направлении рассеянной волны. Поскольку мы рассматриваем упругое рассеяние без изменения длины волны, то $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$. Кроме этого, в дальней зоне амплитуды вторичных волн, испущенных всеми неоднородностями потенциала, можно считать равными и обратно пропорциональными расстоянию r от образца до точки наблюдения, что позволяет заменить $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r$ в знаменателе.

Волновую функцию на больших расстояниях от образца можно представить в виде суперпозиции падающей плоской волны и рассеянной сферической волны

$$\begin{aligned}
 \psi(\mathbf{r}) &\simeq e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} - \frac{me}{2\pi\hbar^2} \iiint \frac{1}{|\mathbf{r}|} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}'} \varphi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \simeq \\
 &\simeq e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} - \frac{me}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}}{r} \iiint e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}'} \varphi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \simeq \\
 &\simeq e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} - \frac{me}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} \iiint e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \varphi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \simeq e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} - \frac{me}{2\pi\hbar^2} \cdot A(\mathbf{q}) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r},
 \end{aligned}$$

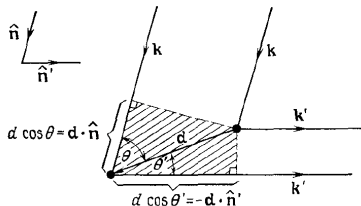
где

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$$

есть изменение волнового вектора при рассеянии; амплитуда рассеянной волны представляет собой фурье-образ электрического потенциала

$$A(\mathbf{q}) = \iiint e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \varphi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'.$$

Условие интерференции Лауэ: качественные соображения



Фиг. 6.4. Построение, показывающее, что разность хода лучей, рассеянных на двух точках, находящихся на расстоянии \mathbf{d} друг от друга, определяется выражением (6.3)

Пусть на кристалл падает плоская электронная волна с волновым вектором \mathbf{k}_0 , а рассеивается в виде локально плоской волны с волновым вектором \mathbf{k} .

Будем считать, что выполняется закон сохранения энергии: $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = k_0 = \sqrt{2mE}/\hbar$.

Пусть $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}_0/k_0$ и $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k_0$ – единичные векторы вдоль распространяющихся волн.

рисунок не соответствует обозначениями

Разность хода двух лучей равна $d \cos \theta + d \cos \theta' = \mathbf{d} \cdot (\mathbf{n}_0 - \mathbf{n})$ должна быть равна целому числу длин волн $m\lambda$, следовательно

$$\mathbf{d} \cdot \left(\frac{\mathbf{k}_0}{k_0} - \frac{\mathbf{k}}{k_0} \right) = m\lambda \quad \text{или} \quad \mathbf{d} \cdot (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) = 2\pi m.$$

Полученное соотношение должны выполняться для произвольного расстояния между двумя узлами поэтому $\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) = 2\pi m$, где \mathbf{R} – вектор кристаллической решетки. Это соотношение можно переписать в виде $e^{\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})} = 1$, следовательно, вектор $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ должен совпадать одним из векторов обратной решетки: $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{K}$.

Условие интерференции Лауэ: трёхмерный случай

Электрический потенциал может быть разложен в трёхмерный ряд Фурье

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \varphi_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}},$$

где $\mathbf{K} = \{K_x, K_y, K_z\}$ — вектора обратной решётки и $\varphi_{\mathbf{K}}$ — фурье-компоненты электрического потенциала. Для амплитуды рассеянной волны получаем

$$\begin{aligned} A(\mathbf{q}) &= \iiint e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{K}} \varphi_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' = \\ &= \sum_{\mathbf{K}} \varphi_{\mathbf{K}} \iiint e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}' = (2\pi)^3 \sum_{\mathbf{K}} \varphi_{\mathbf{K}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{K}). \end{aligned}$$

Легко видеть, что наибольший вклад будут давать такие волны, для которых $\mathbf{q} = \mathbf{K}$ или

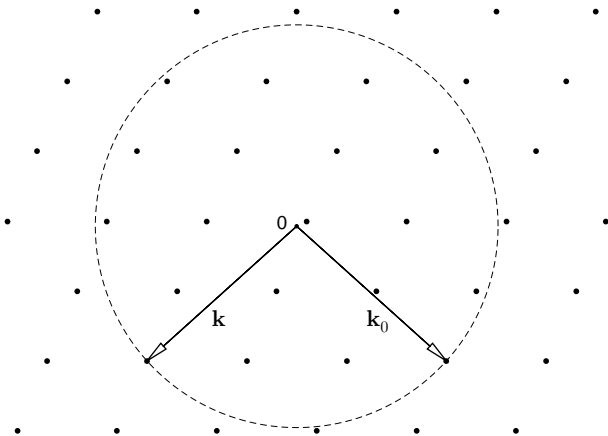
$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{K} \quad \text{при условии} \quad |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Мы получили так называемое условие конструктивной интерференции Лауэ (von Laue), физический смысл которого заключается в выполнении закона сохранения импульса с точностью до произвольного вектора обратной решетки.

Условие Лауэ эквивалентно четырём скалярным уравнениям для определения трёх неизвестных компонент волнового вектора рассеянной волны $\mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\}$, что делает систему уравнений переопределённой. Вывод: для резонансного рассеяния на трёхмерной кристаллической структуре необходимо подбирать энергию падающей волны или угол падения.

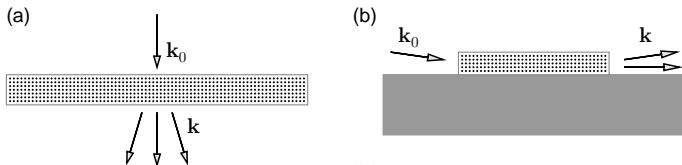
Построение Эвальда: трёхмерный случай

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{K} \quad \text{при условии} \quad |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

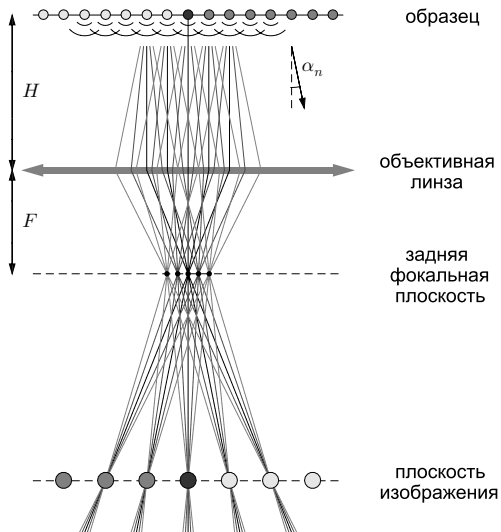


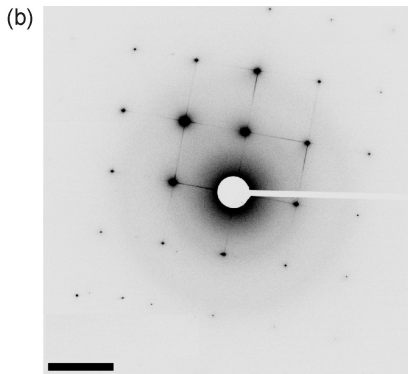
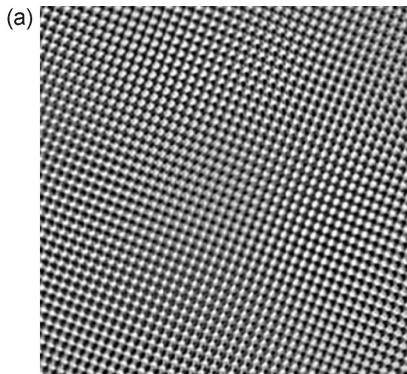
Просвечивающая электронная/рентгеновская микроскопия и дифрактометрия

Средняя длина пробега электронов без существенной потери энергии зависит от энергии зондирующих электронов и изменяется от нескольких нм для низкоэнергетичных электронов ($E < 100$ эВ) и до величин порядка 100 нм для высокоэнергетичных электронов ($E > 50$ кэВ). Следовательно, режим когерентной электронной дифракции на просвет может быть реализован только для высокоэнергетичных электронов и для достаточно тонких образцов с толщиной менее 100 нм.



Таким условиям удовлетворяют системы просвечивающей электронной микроскопии (transmission electron microscopy, TEM) или дифракции быстрых электронов (RHEED), в которых электронная пушка и экран (CCD камера или флуоресцентный экран) находятся по разные стороны от образца. В зависимости от расстояния между изображающей линзой и экраном формирующееся изображение может соответствовать либо электронно-микроскопическому изображению кристаллической решётке, либо картине дифракции на трёхмерной решётке.





Микрофотография кристаллической гцк-решётки кристалла MgO , полученная методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, постоянная решётки $a = 0.421$ нм, межплоскостное расстояние 0.211 нм). (b) – инвертированная картина электронной дифракции, самые интенсивные пики соответствуют плоскостям (200) и (020). Рисунки любезно предоставлены Д. А. Татарским (ИФМ РАН, Нижний Новгород).

Условие интерференции Лауэ: двумерный случай

Электрический потенциал, индуцированный двумерными периодическими реконструкциями на поверхности объёмного кристалла, может быть разложен в двумерный ряд Фурье

$$\varphi(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \sum_{K_x, K_y} \varphi_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \cdot D \delta(z),$$

где $\mathbf{r}_{\parallel} = \{x, y\}$ – радиус-вектор, соответствующий латеральными координатами x и y , $\mathbf{K} = \{K_x, K_y\}$ – вектора двумерной обратной решётки, $\varphi_{\mathbf{K}}$ – фурье-компоненты электрического потенциала, D – толщина слоя. Для амплитуды рассеянной волны получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\mathbf{q}) &= \iiint e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{K}} \varphi_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'_{\parallel}} \cdot D \delta(z') d\mathbf{r}' dz' = \\ &= \int e^{-iq_z z'} D \delta(z') dz' \cdot \sum_{\mathbf{K}} \varphi_{\mathbf{K}} \iint e^{-i(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} d\mathbf{r}_{\parallel} = (2\pi)^2 D \cdot \sum_{\mathbf{K}} \varphi_{\mathbf{K}} \delta(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{K}). \end{aligned}$$

Следовательно, условие Лауэ для рассеяния на двумерной структуре сводится к утверждению

$$\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}_{0,\parallel} = \mathbf{K} \quad \text{при условии} \quad |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

При рассеянии частиц на двумерном потенциале не выполняется закон сохранения нормальной составляющей импульса в силу нарушения трансляционной инвариантности системы, поэтому условие $\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}_{0,\parallel} = \mathbf{K}$ может быть выполнено для произвольного k_z . Это делает систему уравнений определённой и имеющей решения для любых параметров падающего пучка.

Построение Эвальда: двумерный случай

Условие Лауэ

$$k_{\parallel} - k_{0,\parallel} = K \quad \text{при условии} \quad |k| = |k_0| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

В отличие от узлов трёхмерной обратной решётки, мы теперь имеем дело со стержнями обратной решётки, которые проведены параллельно оси z через каждую точку двумерной обратной решётки. Факт существования стержней обратной решётки легко понять, анализируя условие Лауэ, применимое для произвольного вектора k_z по нормали к поверхности.

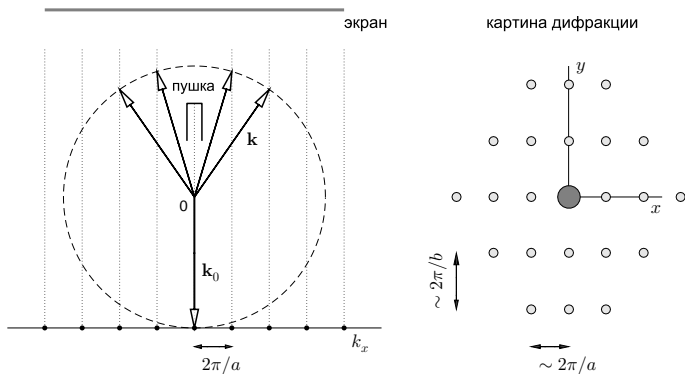
Возможен и другой способ рассуждений: двумерную кристаллическую решётку можно представить как сильно разнесённые атомные плоскости трёхмерной решётки, поэтому длина одного из векторов основных трансляций $|\mathbf{a}_3| \rightarrow \infty$. Как следствие, длина соответствующего вектора обратной решётки $|\mathbf{b}_3| \sim 1/|\mathbf{a}_3| \rightarrow 0$, поэтому узлы такой решетки будут располагаться на бесконечно малом расстоянии друг от друга, формируя стержни обратной решётки. Точки пересечения стержней обратной решётки и сферы Эвальда дают параметры рассеянной волны.

Отметим, что при рассеянии волн на двумерной структуре всегда возникает зеркальное отражение, удовлетворяющее условию Лауэ, для любых энергий и углов падения.

Дифракция медленных электронов

Дифракция медленных электронов (ДМЭ), low energy electron diffraction (LEED)

В таких экспериментах образец ориентируется по отношению к электронному лучу таким образом, чтобы налетающие на образец низкоэнергетичные электроны (с энергиями от 30 до 200 эВ) были ориентированы по нормали к поверхности исследуемого образца. Возникающие отражённые волны попадают на флуоресцентный экран и вызывают свечение.



Если типичная величина периода двумерной реконструкции $a \simeq 0.3 \text{ нм}$, то период обратной решётки будет по порядку величины равен $2\pi/a \simeq 20 \text{ нм}^{-1}$. Радиус сферы Эвальда можно оценить по формуле $k_0 = \sqrt{2mE}/\hbar \simeq 5.1 \sqrt{E[\text{эВ}]} \text{ нм}^{-1}$, поэтому $k_0 \simeq 28 \text{ нм}^{-1}$ для электронов с энергией 30 эВ и $k_0 \simeq 72 \text{ нм}^{-1}$ для электронов с энергией 200 эВ. Следовательно, можно ожидать появления серии дифракционных пиков (рефлексов) первого и второго порядка на флуоресцентном экране в зависимости от энергии электронов.

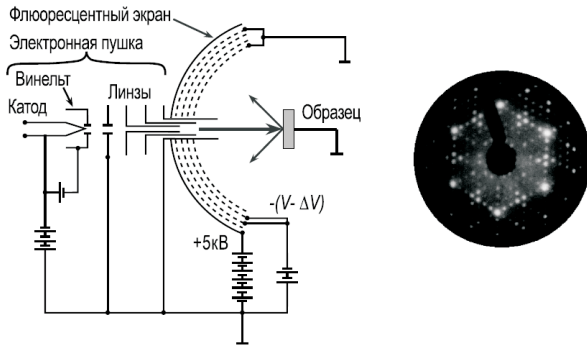
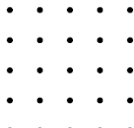


Рис. 3.3. Схема стандартной четырех-сеточной установки ДМЭ и вид картины ДМЭ от поверхности $\text{Si}(111)7 \times 7$ на экране установки ДМЭ с обратной точкой наблюдения

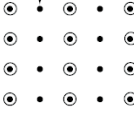
Решетка в
реальном пространстве



1x1

a

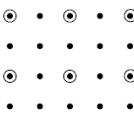
узел решетки



2x1

б

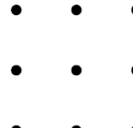
узел супер-решетки



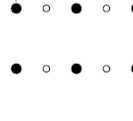
2x2

в

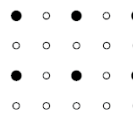
Картина ДМЭ
(обратная решетка)



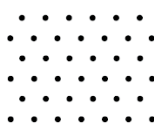
основной рефлекс



супер-рефлекс

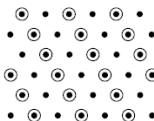


Решетка в
реальном пространстве

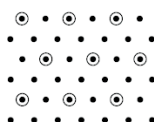


1x1

a

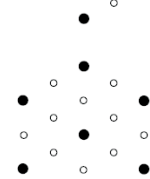
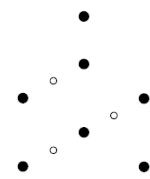
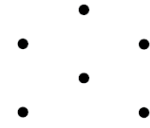


б



в

Картина ДМЭ
(обратная решетка)



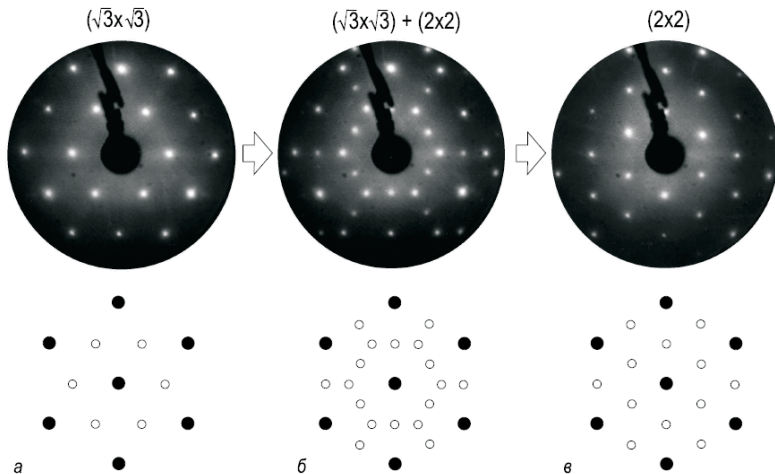
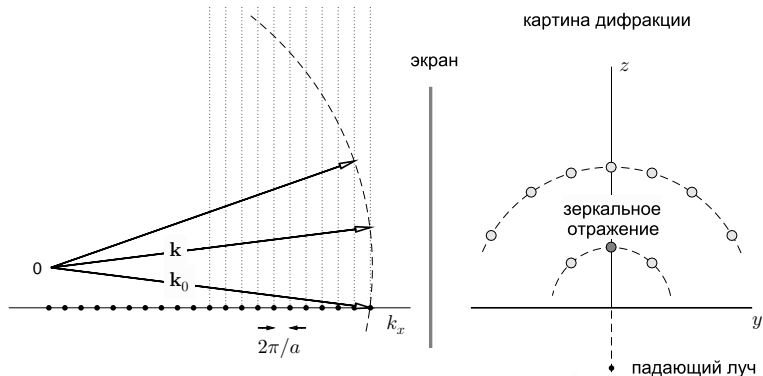


Рис. 3.8. При осаждении In на поверхность $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-}R30^\circ\text{-In}$ при комнатной температуре исходная структура $\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-}R30^\circ$,

Дифракция быстрых электронов

Дифракция быстрых электронов (ДБЭ), reflected high energy electron diffraction (RHEED)

В таких экспериментах высокоэнергетичные электроны с энергиями от 5 до 30 кэВ попадают на образец под малыми скользящими углами ($\psi \simeq 1 - 5^\circ$). Отражённые волны попадают на флуоресцентный экран и вызывают свечение. Чувствительность метода к структуре поверхности связана с тем, что при малоугловом рассеянии первичные и вторичные электронные волны в основном распространяются в тонком приповерхностном слое, толщину которого по порядку величины можно оценить как $l \sin \psi \sim 4$ нм для угла скольжения $\psi = 2^\circ$ и длины неупругого рассеяния $l \sim 100$ нм в диапазоне энергий 50-100 кэВ.

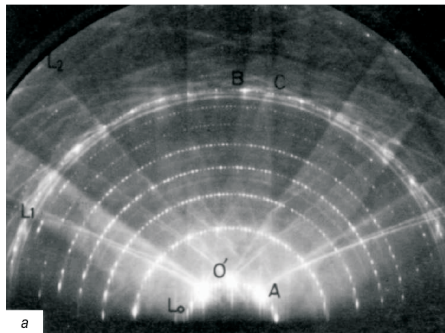
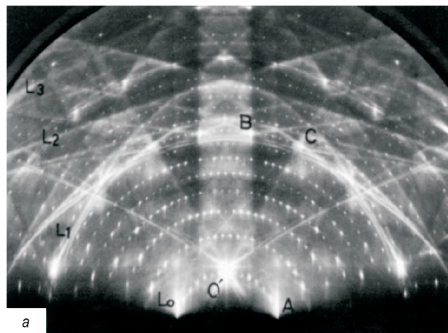


Радиус сферы Эвальда для электронов с типичными энергиями 20 кэВ равен $k_0 \simeq 700 \text{ nm}^{-1}$, следовательно, сфера Эвальда пересекает несколько сотен стержней обратной решётки. Если ограничиться регистрацией электронных волн, отражённых под малыми углами, что следует ожидать появления нескольких десятков дифракционных пиков на флуоресцентном экране.

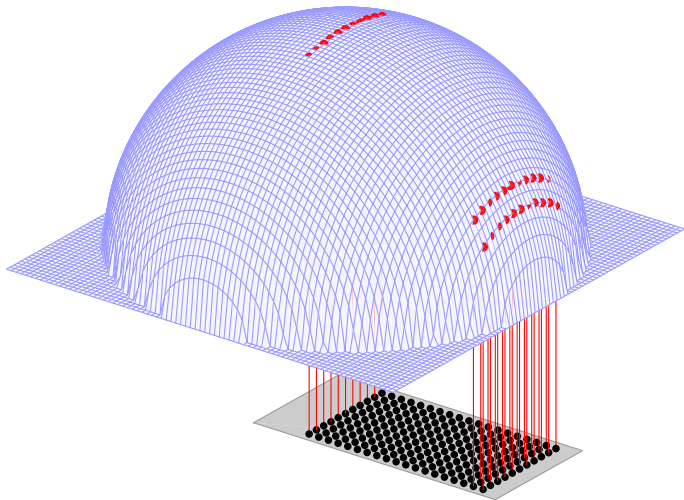


Рис. 3.12. Схема аппаратуры ДБЭ

Картини ДБЭ для реконструкции Si(111)7 × 7 (энергия 20 кВ)

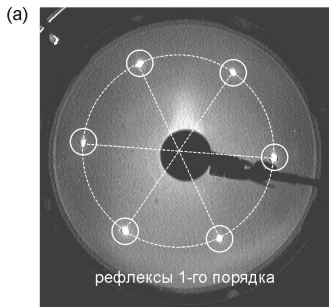
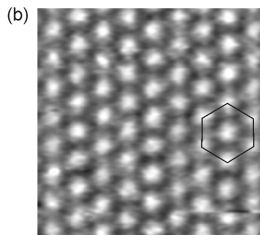
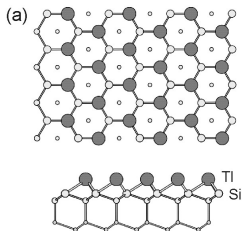


Точки пересечения сферы Эвальда и стержней обратной решётки в ДМЭ и ДБЭ экспериментах



Аппаратные искажения минимальны для стержней обратной решётки, перескающих сферу Эвальда вблизи полюса, что реализуется в ДМЭ-экспериментах.

Сравнение картин ДМЭ и ДБЭ для $\text{Si}(111)1 \times 1\text{-Ti}$



Карта дифракции медленных электронов (энергия 52 эВ) и быстрых электронов (20 кэВ) для поверхности $\text{Si}(111)1 \times 1\text{-Ti}$. Рисунки предоставлены Д. В. Грузневым (ИАПУ ДВО РАН, Владивосток).

Осцилляции интенсивности дифракционных пиков в зависимости от времени осаждения

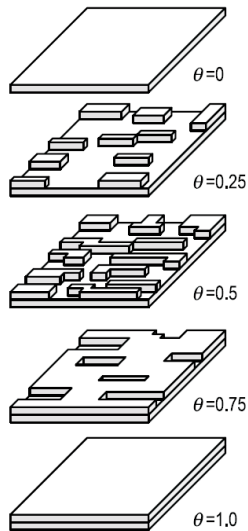
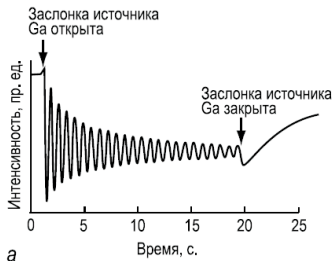


Рис. 3.16. Контроль МЛЭ роста GaAs(100) с помощью ДБЭ,

а — осцилляции интенсивности зеркального рефлекса картины ДБЭ в ходе роста. Период осцилляций точно соответствует времени наращивания одного атомного слоя GaAs; *б* — Схематическая диаграмма, иллюстрирующая формирование одного атомного слоя при полслойном механизме роста [3.6]

Лекция 5-6

Туннелирование в квантовой механике и физике твёрдого тела

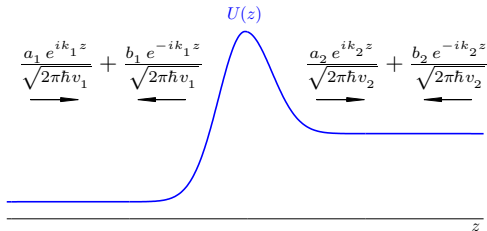
Состояния рассеяния в одномерных задачах квантовой механики

Рассмотрим одномерное движение частицы с полной энергией E_{\parallel} в системе, в которой потенциальная энергия частицы зависит от одной координаты: $U = U(z)$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(z, t) = \hat{H} \Psi(z, t)$$

$$\Psi(z, t) = \psi(z) \cdot e^{-iE_{\parallel} t / \hbar}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right\} \psi(z) = E_{\parallel} \psi(z).$$



Если области, располагающиеся на значительном удалении от неоднородностей потенциала, являются классически разрешёнными, то состояния непрерывного спектра будут двукратно вырождены (волны могут бежать слева направо и справа налево).

Частным случаем таких состояний непрерывного спектра являются плоские бегущие волны $e^{ik_0 z}$ и $e^{-ik_0 z}$, распространяющиеся в области постоянного потенциала $U(z) = U_0$ с волновым вектором $k_0 = \sqrt{2m^*(E_{\parallel} - U_0)}/\hbar$.

Если потенциал $U(z)$ локализован в ограниченной области и стремится к постоянным значениям вдали от барьера ($U(z) = U_{1,2}$ при $z \rightarrow \pm\infty$), то при $E_{\parallel} > \max\{U_1, U_2\}$ волновая функция вдали от рассеивателей может быть представлена в виде линейной комбинации плоских бегущих волн

$$\psi(z) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 z} + A_2 e^{-ik_1 z} & \text{при } z \rightarrow -\infty, \\ B_1 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-ik_2 z} & \text{при } z \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

где

$$k_1 = \sqrt{2m^* (E_{\parallel} - U_1)/\hbar} \quad \text{и} \quad k_2 = \sqrt{2m^* (E_{\parallel} - U_2)/\hbar}$$

есть волновые вектора слева и справа от неоднородности потенциала, соответственно. Задачу определения *размерных* постоянных A_1, A_2, B_1, B_2 для заданных источников и фиксированной формы потенциальной барьера будем называть задачей рассеяния (scattering problem).

Отметим, что наше решение постулирует существование одного типа бегущих волн слева от барьера (при $z \rightarrow -\infty$) и одного типа бегущих волн справа от барьера (при $z \rightarrow +\infty$), поэтому рассматриваемую задачу можно называть задачей одномодового (single-mode) или одноканального (single-channel) рассеяния.

Обобщение на многомодовый случай: формализм Ландауэра (Landauer).

Нормировка состояний в квантовой механике

Рассмотрим состояние свободной частицы, которое описывается волновой функцией

$$\psi_k(z) = Ce^{ikz}$$

и соответствует плоской бегущей волны.

1. Если частица локализована в одномерном кристалле длины L , то условие нормировки $\langle \psi_k | \psi_k \rangle = 1$ приводит к

$$\langle \psi_k | \psi_k \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_k^*(z) \psi_k(z) dz = |C|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dz = |C|^2 L = 1 \quad \text{или} \quad |C| = \frac{1}{\sqrt{L}}.$$

2. Для частицы с определённым импульсом k можно выбрать нормировку $\langle \psi_{k'} | \psi_k \rangle = \delta(k - k')$, тогда

$$\langle \psi_{k'} | \psi_k \rangle = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')z} dz = 2\pi |C|^2 \delta(k - k') = \delta(k - k') \quad \text{или} \quad |C| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Здесь k и k' – проекции волновых векторов на ось z .

3. Для частицы с определённой энергией E_{\parallel} можно использовать $\langle \psi_{E'} | \psi_E \rangle = \delta(E_{\parallel} - E'_{\parallel})$.

Используем правило преобразования дельта-функций

$$\begin{aligned} \delta(E_{\parallel} - E'_{\parallel}) &= \delta\left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k'_{\parallel}{}^2}{2m^*}\right) = \frac{2m^*}{\hbar^2} \delta(k_{\parallel}^2 - k'_{\parallel}{}^2) = \\ &= \frac{m^*}{\hbar^2 k_{\parallel}} \delta(k_{\parallel} - k'_{\parallel}) + \frac{m^*}{\hbar^2 k_{\parallel}} \delta(k_{\parallel} + k'_{\parallel}). \end{aligned}$$

Если волны распространяются в одну сторону (например, $k_{\parallel} > 0$ и $k'_{\parallel} > 0$), то

$$\delta(E_{\parallel} - E'_{\parallel}) = \frac{1}{\hbar v} \delta(k_{\parallel} - k'_{\parallel}), \quad \text{где } v = \frac{\hbar k_{\parallel}}{m^*} \text{ — групповая скорость.}$$

Используя результат из п. 2, получаем

$$\langle \psi_{E'} | \psi_E \rangle = 2\pi |C|^2 \delta(k - k') = 2\pi |C|^2 \cdot \hbar v \delta(E_{\parallel} - E'_{\parallel}) = \delta(E_{\parallel} - E'_{\parallel}) \quad \text{или} \quad |C| = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar v}}$$

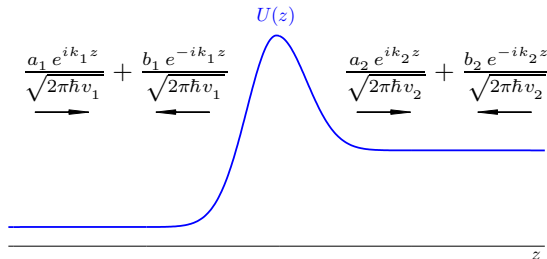
Следовательно, для локализованного потенциала

$$U(z) = \begin{cases} U_1 & \text{при } z \rightarrow -\infty; \\ U_2 & \text{при } z \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

волновую функцию электронной волны вдали от рассеивателей можно записать в виде линейной комбинации нормированных волн (a_1, a_2, b_1, b_2 – **безразмерные** коэффициенты)

$$\psi_E(z) = \begin{cases} a_1 e^{ik_1 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_1} + b_1 e^{-ik_1 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_1} & \text{при } z \rightarrow -\infty; \\ a_2 e^{ik_2 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_2} + b_2 e^{-ik_2 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_2} & \text{при } z \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

где $k_1 = \sqrt{2m^*(E_{\parallel} - U_1)}/\hbar$ и $v_1 = \hbar k_1/m^*$, $k_2 = \sqrt{2m^*(E_{\parallel} - U_2)}/\hbar$ и $v_2 = \hbar k_2/m^*$.



Поток вероятности для нормированных волновых функций*

Пользуясь стандартным квантовомеханическим выражением, вычислим плотность потока вероятности $\Pi(E)$ для частицы с нормированной волновой функцией $\psi_E(z)$ и энергией E_{\parallel}

$$\Pi(E) = \frac{i\hbar}{2m^*} \left\{ \psi_E \frac{d\psi_E^*}{dz} - \psi_E^* \frac{d\psi_E}{dz} \right\} = -\frac{\hbar}{m^*} \operatorname{Im} \left\{ \psi_E \cdot \frac{d\psi_E^*}{dz} \right\}.$$

Учитывая, что $\psi_E(z) = a e^{ikz}/\sqrt{2\pi\hbar v}$ и $v = p/m^* = \hbar k/m^*$, получаем

$$\begin{aligned} \Pi(E) &= -\frac{\hbar}{m^*} \operatorname{Im} \left\{ \frac{a}{\sqrt{2\pi\hbar v}} e^{ikz} \cdot \frac{d}{dz} \left(\frac{a^*}{\sqrt{2\pi\hbar v}} e^{-ikz} \right) \right\} = \\ &= -\frac{\hbar}{m^*} \frac{|a|^2}{2\pi\hbar v} \operatorname{Im} \left\{ e^{ikz} \cdot (-ik) e^{-ikz} \right\} = |a|^2 \cdot \frac{\hbar}{m^*} \cdot \frac{k}{2\pi\hbar(\hbar k/m^*)} = \frac{|a|^2}{2\pi\hbar}. \end{aligned}$$

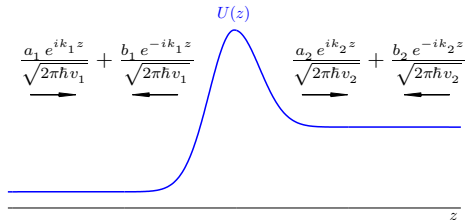
Принимая во внимание закон сохранения потока вероятности, находим универсальное соотношение между амплитудами нормированных волн в одномерной задаче рассеяния:

$$\Pi(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} (|a_1|^2 - |b_1|^2) = \frac{1}{2\pi\hbar} (|a_2|^2 - |b_2|^2).$$

Можно показать, что условие $|a_1|^2 + |b_2|^2 = |a_2|^2 + |b_1|^2$ обеспечивают унитарность матрицы рассеяния.

Матрица рассеяния и трансфер-матрица

Линейная связь между амплитудами нормированных рассеянных волн a_1 , a_2 , b_1 , b_2 для задачи одноканального рассеяния может быть выражена в виде матричных соотношений:



– связь между амплитудами волн, исходящих (outcoming) из области неоднородностей потенциала, и амплитудами налетающих (incoming) волн можно записать с помощью матрицы рассеяния \hat{S} (scattering matrix): $|out\rangle = \hat{S}|in\rangle$

$$|out\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \text{ и } |in\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix} : \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix};$$

– связь между амплитудами волн слева и справа от неоднородностей потенциала можно записать с помощью матрицы распространения \hat{T} (transfer-matrix): $|left\rangle = \hat{T}|right\rangle$

$$|left\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \text{ и } |right\rangle = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} : \quad \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

Соотношения между компонентами матриц \hat{S} и \hat{T}

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

или

$$b_1 = S_{11}a_1 + S_{12}b_2$$

$$a_1 = T_{11}a_2 + T_{12}b_2$$

$$a_2 = S_{21}a_1 + S_{22}b_2$$

$$b_1 = T_{21}a_2 + T_{22}b_2$$

Коэффициенты матрицы рассеяния и трансфер-матрицы очевидным образом могут быть выражены друг через друга

$$T_{11} = \frac{1}{S_{21}}, \quad T_{12} = -\frac{S_{22}}{S_{21}}, \quad T_{21} = \frac{S_{11}}{S_{21}}, \quad T_{22} = S_{12} - \frac{S_{11}S_{22}}{S_{21}};$$

$$S_{11} = \frac{T_{21}}{T_{11}}, \quad S_{12} = T_{22} - \frac{T_{21}T_{12}}{T_{11}}, \quad S_{21} = \frac{1}{T_{11}}, \quad S_{22} = -\frac{T_{12}}{T_{11}}.$$

Физический смысл коэффициентов матрицы рассеяния

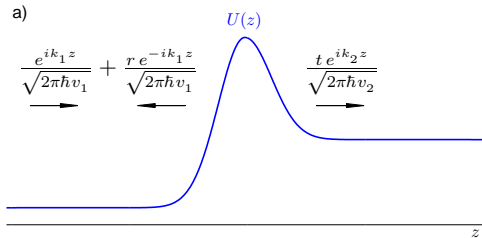
Если частица налетает на одномерный потенциальный барьер слева, то асимптотические выражения для падающей, отражённой и прошедшей волн для «левой» задачи рассеяния определяются следующими соотношениями

$$\psi_{L,E}(z) = \begin{cases} e^{ik_1 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_1} + r e^{-ik_1 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_1} & \text{при } z \rightarrow -\infty; \\ t e^{ik_2 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_2} & \text{при } z \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

По определению, амплитуда отражения r определяет амплитуду отражённой от барьера волны при условии, что волна с единичной амплитудой налетает на барьер слева; амплитуда прохождения t определяет амплитуду прошедшей волны при тех же условиях.

$$\begin{pmatrix} r \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

или $S_{11} = r$ и $S_{21} = t$.



Если частица налетает на одномерный потенциальный барьер справа, то асимптотические выражения для падающей, отражённой и прошедшей волн для «правой» задачи рассеяния определяются следующими соотношениями

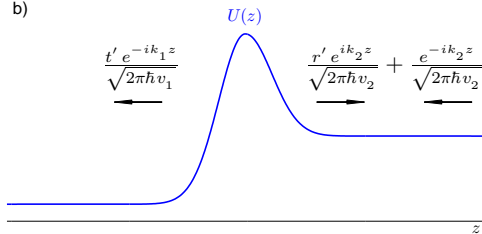
$$\psi_{R,E}(z) = \begin{cases} t' e^{-ik_1 z} \sqrt{2\pi\hbar v_1} & \text{при } z \rightarrow -\infty; \\ r' e^{ik_2 z} \sqrt{2\pi\hbar v_2} + e^{-ik_2 z} / \sqrt{2\pi\hbar v_2} & \text{при } z \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

По определению, амплитуды отражения r' и прохождения t' определяют амплитуды отражённой и прошедшей волн при условии, что волна с единичной амплитудой налетает на барьер справа.

$$\begin{pmatrix} t' \\ r' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

или $S_{12} = t'$ и $S_{22} = r'$.

b)



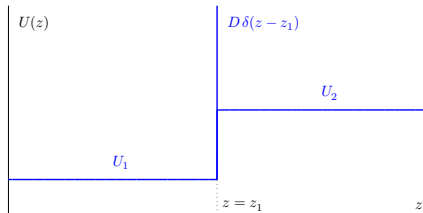
В случае одноканального рассеяния матрицы \hat{S} и \hat{T} параметризуются следующим образом

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} 1/t & -r'/t \\ r/t & t' - r r'/t \end{pmatrix}$$

Пример: рассеяние на скачке потенциала

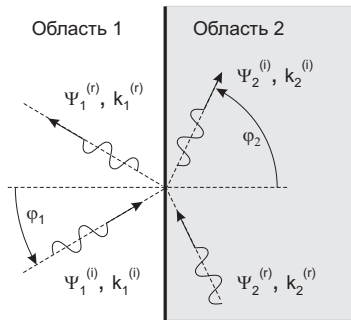
Рассмотрим задачу о рассеянии частицы на одномерном потенциале вида

$$U_\delta(z) = D \delta(z - z_1) + \begin{cases} U_1 & \text{при } z < z_1, \\ U_2 & \text{при } z > z_1. \end{cases}$$



Без ограничения общности можно считать, что плоскость падения электрона совпадает с плоскостью (x, z) , что позволяет перейти к двумерной задаче

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, z) + U_\delta(z) \psi(x, z) = E \psi(x, z).$$



Уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, z) + U_\delta(z) \psi(x, z) = E \psi(x, z)$$

допускает разделение переменных

$$\psi(x, z) = \psi^{(x)}(x) \cdot \psi^{(z)}(z),$$

поэтому движение частицы в направлениях x и z можно рассматривать независимо

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \psi^{(x)}(x) &= E_\perp \psi^{(x)}(x), \quad \text{где } E_\perp = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi^{(z)}(z) + U_\delta(z) \psi^{(z)}(z) &= E_\parallel \psi^{(z)}(z), \quad \text{где } E_\parallel = E - E_\perp. \end{aligned}$$

○ Решение для «поперечной» задачи: $\psi^{(x)}(x) = e^{ik_1 x}$ и $\psi^{(x)}(x) = e^{ik_2 x}$,
где $k_1 = \sqrt{2m^*(E - U_1)}/\hbar$ и $k_2 = \sqrt{2m^*(E - U_2)}/\hbar$ – модули волнового вектора в областях
1 и 2.

Граничные условия для «поперечной» задачи ($\varepsilon \rightarrow 0$):

$$\psi^{(x)}(z_1 + \varepsilon) = \psi^{(x)}(z_1 - \varepsilon) \quad \text{и} \quad \left(\frac{d\psi_E^{(x)}}{dx} \right)_{z=z_1+\varepsilon} = \left(\frac{d\psi_E^{(x)}}{dx} \right)_{z=z_1-\varepsilon}.$$

Следствие граничных условий: $k_{1,x} = k_{2,x}$ или $k_1 \sin \varphi_1 = k_2 \sin \varphi_2$.

○ Граничные условия для «продольной» задачи ($\varepsilon \rightarrow 0$):

$$\psi^{(z)}(z_1 + \varepsilon) = \psi^{(z)}(z_1 - \varepsilon) \quad \text{и} \quad \left(\frac{d\psi_E^{(z)}}{dz} \right)_{z=z_1+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi_E^{(z)}}{dz} \right)_{z=z_1-\varepsilon} = \frac{2m^*D}{\hbar^2} \psi_E^{(z)}(z_1).$$

Общий вид решения для «левой» задачи рассеяния

$$\psi_L(z) = \begin{cases} e^{ik_{1,z}z} / \sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}} + r e^{-ik_{1,z}z} / \sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}} & \text{при } z < z_1; \\ t e^{ik_{2,z}z} / \sqrt{2\pi\hbar v_{2,z}} & \text{при } z > z_1. \end{cases}$$

Граничные условия

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}}} \left\{ e^{ik_{1,z}z_1} + r e^{-ik_{1,z}z_1} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{2,z}}} t e^{ik_{2,z}z_1}.$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{2,z}}} ik_2 t e^{ik_{2,z}z_1} - \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}}} \left\{ ik_{1,z} e^{ik_{1,z}z_1} - ik_{1,z} r e^{-ik_{1,z}z_1} \right\} = \frac{2m^*D}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{2,z}}} t e^{ik_{2,z}z_1}.$$

Амплитуды отражения и прохождения

$$r = \frac{[k_{1,z} - k_{2,z} - i2m^*D/\hbar^2]}{[k_{1,z} + k_{2,z} + i2m^*D/\hbar^2]} e^{2ik_{1,z}z_1} \quad \text{и} \quad t = \frac{2\sqrt{k_{1,z}k_{2,z}}}{[k_{1,z} + k_{2,z} + i2m^*D/\hbar^2]} e^{i(k_{1,z} - k_{2,z})z_1}$$

Общий вид решения для «правой» задачи рассеяния

$$\psi_R(z) = \begin{cases} t' e^{-ik_{1,z}z} / \sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}} & \text{при } z < z_1; \\ r' e^{ik_{2,z}z} / \sqrt{2\pi\hbar v_{2,z}} + e^{-ik_{2,z}z} / \sqrt{2\pi\hbar v_{2,z}} & \text{при } z > z_1. \end{cases}$$

Граничные условия

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} \left\{ e^{-ik_{2,z}z_1} + r' e^{ik_{2,z}z_1} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}}} t' e^{-ik_{1,z}z_1}.$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{2,z}}} \left\{ -ik_{2,z} e^{-ik_{2,z}z_1} + ik_{2,z} r' e^{ik_{2,z}z_1} \right\} - \frac{(-ik_{1,z})}{\sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}}} t' e^{-ik_{1,z}z_1} = \frac{2m^*D}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v_{1,z}}} t' e^{-ik_{1,z}z_1}$$

Амплитуды отражения и прохождения

$$r' = \frac{[k_{2,z} - k_{1,z} - i2m^*D/\hbar^2]}{[(k_{1,z} + k_{2,z}) + i2m^*D/\hbar^2]} e^{-2ik_{2,z}z_1} \quad \text{и} \quad t' = \frac{2\sqrt{k_{1,z}k_{2,z}}}{[k_{1,z} + k_{2,z} + i2m^*D/\hbar^2]} e^{i(k_{1,z} - k_{2,z})z_1}.$$

Общий вид матрицы рассеяния для скачка потенциала (индекс z опущен для краткости)

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} = \frac{1}{[k_1 + k_2 + i2m^*D/\hbar^2]} \cdot \begin{pmatrix} [k_1 - k_2 - i2m^*D/\hbar^2] e^{2ik_1z_1} & 2\sqrt{k_1k_2} e^{i(k_1 - k_2)z_1} \\ 2\sqrt{k_1k_2} e^{i(k_1 - k_2)z_1} & [k_2 - k_1 - i2m^*D/\hbar^2] e^{-2ik_2z_1} \end{pmatrix}.$$

Коэффициенты отражения и прохождения: определение и примеры

Коэффициент *отражения* для частицы, налетающей на барьер *слева*: $\mathcal{R} = |r|^2$.

Коэффициент *прохождения* для частицы, налетающей на барьер *слева*: $\mathcal{T} = |t|^2$.

Коэффициент *отражения* для частицы, налетающей на барьер *справа*: $\mathcal{R}' = |r'|^2$.

Коэффициент *прохождения* для частицы, налетающей на барьер *справа*: $\mathcal{T}' = |t'|^2$.

Коэффициенты прохождения \mathcal{T} и \mathcal{T}' равны отношению потоков вероятности прошедшей и падающей волн и имеют смысл при $Im k_1 = 0$ и $Im k_2 = 0$.

Пример 1: коэффициенты отражения и прохождения через дельта-барьер при нормальном падении ($k_1 = k_2 = k$, $D \neq 0$)

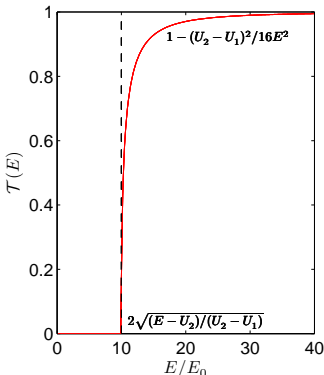
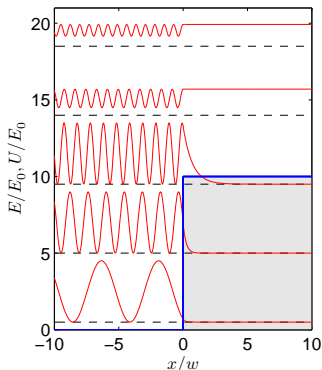
$$\mathcal{R} = \left| \frac{-i 2m^* D/\hbar^2}{[2k + i 2m^* D/\hbar^2]} e^{2ik_1 z_1} \right|^2 = \frac{(m^* D/\hbar^2)^2}{k^2 + (m^* D/\hbar^2)^2} = \frac{m^* D^2/(2\hbar^2)}{E_{\parallel} + m^* D^2/(2\hbar^2)}.$$

$$\mathcal{T} = \left| \frac{2\sqrt{k^2}}{[2k + i 2m^* D/\hbar^2]} e^{i(k_1 - k_2)z_1} \right|^2 = \frac{k^2}{k^2 + (m^* D/\hbar^2)^2} = \frac{E_{\parallel}}{E_{\parallel} + m^* D^2/(2\hbar^2)}.$$

Пример 2: коэффициенты отражения и прохождения от скачка потенциала при нормальном падении ($k_1 \neq k_2$, $D = 0$)

$$\mathcal{R} = \left| \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) e^{2ik_1 z_1} \right|^2 = \begin{cases} 1, & \text{если } \text{Im } k_2 \neq 0, \\ (k_1 - k_2)^2 / (k_1 + k_2)^2, & \text{если } \text{Im } k_2 = 0. \end{cases}$$

$$\mathcal{T} = \left| \frac{2\sqrt{k_1 k_2}}{k_1 + k_2} e^{i(k_1 - k_2)z_1} \right|^2 = \begin{cases} 0, & \text{если } \text{Im } k_2 \neq 0, \\ 4k_1 k_2 / (k_1 + k_2)^2, & \text{если } \text{Im } k_2 = 0. \end{cases}$$

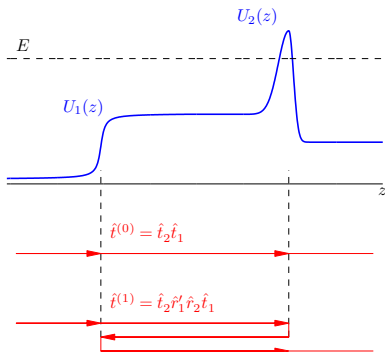


Осцилляции $|\psi(z)|$ перед барьером связаны с интерференцией падающей и отражённой волн.

Рассеяние на потенциале с двумя локализованными неоднородностями

Рассмотрим «сложный» потенциал $U(z)$, который можно представить в виде суперпозиции двух локализованных неоднородностей потенциала $U_1(z)$ и $U_2(z)$, для которых известны все амплитуды отражения и прохождения.

Как вычислить амплитуду прохождения через двухбарьерную структуру?



Способ 1: формальная теория возмущений (считаем коэффициенты отражения от неоднородностей потенциала близкими к нулю, а коэффициенты прохождения — к единице)

нулевой порядок: $t^{(0)} = t_2 t_1$

первый порядок: $t^{(1)} = t_2 r_1' r_2 t_1$

n -ый порядок: $t^{(n)} = t_2 (r_1' r_2)^n t_1$

$$t = \sum_{n=0}^{\infty} t^{(n)} = \sum_{n=0}^{\infty} t_2 (r_1' r_2)^n t_1 = \frac{t_2 t_1}{(1 - r_1' r_2)},$$

если $1 - r_1' r_2 \neq 0$

Способ 2: формальный алгебраический

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \hat{S}_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 & t'_1 \\ t_1 & r'_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_2 & t'_2 \\ t_2 & r'_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_3 \end{pmatrix}.$$

Два матричных соотношения эквивалентны четырем алгебраическим уравнениям

$$b_1 = r_1 a_1 + t'_1 b_2, \quad a_2 = t_1 a_1 + r'_1 b_2, \quad b_2 = r_2 a_2 + t'_2 b_3, \quad a_3 = t_2 a_2 + r'_2 b_3.$$

Выражаем амплитуды исходящих волн через амплитуды падающих волн

$$b_1 = \left\{ r_1 + t'_1 r_2 (1 - r'_1 r_2)^{-1} t_1 \right\} \cdot a_1 + \left\{ t'_1 r_2 (1 - r'_1 r_2)^{-1} r'_1 t'_2 + t'_1 t'_2 \right\} \cdot b_3$$
$$a_3 = t_2 (1 - r'_1 r_2)^{-1} t_1 \cdot a_1 + \left\{ t_2 (1 - r'_1 r_2)^{-1} r'_1 t'_2 + r'_2 \right\} \cdot b_3$$

Способ 3: с помощью трансфер-матрицы

$$|left_1\rangle = \hat{T}_1 |right_1\rangle \quad \text{и} \quad |right_1\rangle = |left_2\rangle \quad \text{и} \quad |left_2\rangle = \hat{T}_2 |right_2\rangle \quad \implies \quad |left_1\rangle = \hat{T}_1 \hat{T}_2 |right_2\rangle$$

$$\hat{T} = \hat{T}_1 \hat{T}_2 = \begin{pmatrix} t_1^{-1} & -t_1^{-1} r'_1 \\ r_1 t_1^{-1} & t'_1 - r_1 t_1^{-1} r'_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_2^{-1} & -t_2^{-1} r'_2 \\ r_2 t_2^{-1} & t'_2 - r_2 t_2^{-1} r'_2 \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} t_1^{-1} t_2^{-1} - t_1^{-1} r'_1 r_2 t_2^{-1} & -t_1^{-1} t_2^{-1} r'_2 - t_1^{-1} r'_1 (t'_2 - r_2 t_2^{-1} r'_2) \\ (t'_1 - r_1 t_1^{-1} r'_1) r_2 t_2^{-1} & -r_1 t_1^{-1} t_2^{-1} r'_2 + (t'_1 - r_1 t_1^{-1} r'_1) (t'_2 - r_2 t_2^{-1} r'_2) \end{pmatrix}$$

Коэффициент $T_{11} = t_1^{-1} t_2^{-1} (1 - r'_1 r_2)$ результирующей трансфер-матрицы равен t^{-1} , поэтому $t = t_1 t_2 / (1 - r'_1 r_2)$.

Рассеяние на прямоугольном потенциальном барьере

Рассмотрим задачу о прохождении частицы через одномерный потенциальный барьер

$$U(z) = \begin{cases} U_1 & \text{при } z < z_1, \\ U_2 & \text{при } z_1 < z < z_2, \\ U_3 & \text{при } z > z_2 \end{cases}$$

который можно рассматривать как комбинацию двух скачков потенциала.

Амплитуда прохождения через «сложный» барьер: $t = t_1 t_2 / (1 - r_1' r_2)$.

Общий вид матрицы рассеяния для скачка потенциала без дельта-функции

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} = \frac{1}{(k_1 + k_2)} \cdot \begin{pmatrix} (k_1 - k_2) e^{2ik_1 z_1} & 2\sqrt{k_1 k_2} e^{i(k_1 - k_2)z_1} \\ 2\sqrt{k_1 k_2} e^{i(k_1 - k_2)z_1} & (k_2 - k_1) e^{-2ik_2 z_1} \end{pmatrix}.$$

Амплитуда прохождения

$$t = t' = \frac{4\sqrt{k_1 k_2} \sqrt{k_2 k_3} e^{i(k_1 - k_3)z_2} e^{-ik_2(z_2 - z_1)}}{(k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{-ik_2(z_2 - z_1)} + (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{ik_2(z_2 - z_1)}}.$$

Коэффициент прохождения ($w_2 = z_2 - z_1$ - ширина барьера)

$$\mathcal{T} = |t|^2 = \frac{16 k_1 |k_2|^2 k_3}{\left| (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{-ik_2 w_2} + (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{ik_2 w_2} \right|^2} \quad \text{при условии} \quad \text{Im } k_{1,3} = 0$$

Рассеяние на прямоугольном потенциальном барьере: частные случаи

1. Надбарьерное прохождение ($E_{\parallel} > U_2$ и все k – действительные):

$$\mathcal{T} = \frac{16 k_1 k_2^2 k_3}{4k_2^2(k_1 + k_3)^2 + 4(k_2^2 - k_1^2)(k_2^2 - k_3^2) \sin^2 k_2 w_2}.$$

2. Подбарьерное прохождение ($E_{\parallel} < U_2$, k_1 и k_3 – действительные, $k_2 = i\chi_2$ – мнимый):

$$\mathcal{T} = \frac{16 k_1 \chi_2^2 k_3}{4\chi_2^2(k_1 + k_3)^2 + 4(\chi_2^2 + k_1^2)(\chi_2^2 + k_3^2) \sinh^2 \chi_2 w_2}.$$

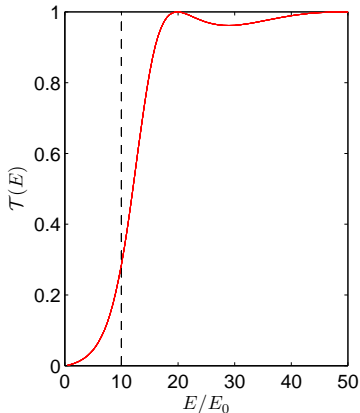
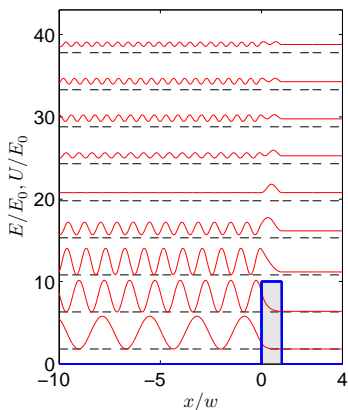
3. Подбарьерное прохождение через симметричный «тонкий» барьер (k_1 и k_2 – действительные):

$$\mathcal{T} \simeq \frac{16k^2\chi_2^2}{16\chi_2^2k^2 + 4\chi_2^6w_2^2} \simeq \frac{k^2}{k^2 + \chi_2^4w_2^2/4} \simeq \frac{E_{\parallel}}{E_{\parallel} + m^*(U_2w_2)^2/2\hbar^2}$$

Мы учли, что $w_2 \rightarrow 0$ и $\chi_2^2 w_2 = \text{const}$. Сравните с прозрачностью дельта-барьера.

4. Подбарьерное прохождение через малопрозрачный барьер ($e^{w_2\chi_2} \gg e^{-w_2\chi_2}$):

$$\mathcal{T} \simeq \frac{16 k_1 \chi_2^2 k_3}{(k_1^2 + \chi_2^2)(\chi_2^2 + k_3^2)} e^{-2\chi_2 w_2}.$$

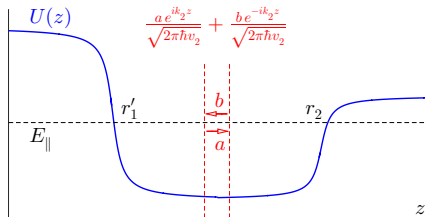


Осцилляции $|\psi(z)|$ в области перед барьером связаны с интерференцией падающей и отражённой волн.

Осцилляции $T(E_{\parallel})$ при $E_{\parallel} > U_2$ с интерференцией волн, отражённых от передней и задней стенок барьера.

Частица в потенциальной яме. Размерное квантование

Рассмотрим одномерную потенциальную яму произвольного вида $U(z)$ и получим уравнение на спектр стационарных состояний частицы, локализованной в такой яме.



Способ 1:

Допустим, что внутри ямы есть область с постоянным потенциалом и внутри этой области существуют плоские волны: волна с амплитудой a , бегущая направо, и волна с амплитудой b , бегущая налево. Пусть левая стенка потенциальной ямы характеризуется амплитудой отражения r'_1 , правая стенка — амплитудой r_2 . Отражение частицы на левой и правой стенках соответствует уравнениями $a = r'_1 b$ и $b = r_2 a$:

$$a = r'_1 b = r'_1 r_2 a \quad \text{или} \quad (1 - r'_1 r_2) a = 0.$$

Нетривиальные решения однородного уравнения ($a \neq 0$) существуют при условии

$$1 - r'_1 r_2 = 0.$$

Поскольку $r'_1 = |r'_1| e^{i \arg r'_1}$, $r_2 = |r_2| e^{i \arg r_2}$ и $|r'_1| = |r_2| = 1$, то условие $r'_1 r_2 = 1$ можно записать как

$$\arg r'_1 + \arg r_2 = 2\pi n, \quad \text{где} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Способ 2: с помощью аппарата матрицы рассеяния

В самом деле, при $z \rightarrow \pm\infty$ волновые вектора в берегах являются мнимыми: $k_1 = i\chi_1$ и $k_2 = i\chi_2$. Если предположить отсутствие источников частиц при $z \rightarrow \pm\infty$, то следует положить амплитуды a_1 и b_3 , соответствующие падающим волнам и решениям, нарастающим на бесконечности, равными нулю. В этом случае нетривиальные решения матричного уравнения

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

существуют при условии, что для коэффициенты матрицы рассеяния имеют расходимости или не определены. Иными словами, разрешённые значения энергии частицы, локализованной в неоднородном потенциале и описываемой стационарной волновой функцией, могут быть найдены как положения полюсов коэффициентов матрицы рассеяния и, в частности, как положение полюса t или нуля $1/t$.

Способ 3: с помощью аппарата трансфер-матрицы

При условии $a_1 = 0$ и $b_3 = 0$ нетривиальные решения матричного уравнения

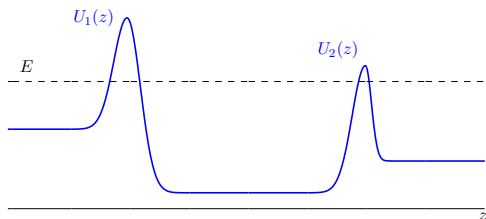
$$\begin{pmatrix} 0 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

существуют при условии $T_{11} = 0$. Поскольку для одноканального рассеяния $T_{11} = t^{-1}$, то полученные условия $T_{11} = 0$ и $t^{-1} = 0$ являются эквивалентными.

Резонансное туннелирование

Амплитуда прохождения через двойной барьер:

$$t = \frac{t_1 t_2}{(1 - r_1' r_2)}$$



Коэффициент прохождения через двойной барьер

$$\mathcal{T} = |t|^2 = \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{|1 - \sqrt{\mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2} e^{i(\arg r_1' + \arg r_2)}|^2} = \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{1 + \mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2 - 2\sqrt{\mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2} \cos(\arg r_1' + \arg r_2)},$$

где $\mathcal{R}_{1,2}$ и $\mathcal{T}_{1,2}$ – коэффициенты отражения и прохождения для левого и правого барьеров, соответственно.

Максимальное и минимальное значение коэффициента прохождения

$$\mathcal{T}_{\max} \simeq \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{(1 - \sqrt{\mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2})^2} \simeq \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{(1 - \sqrt{(1 - \mathcal{T}_1)(1 - \mathcal{T}_2)})^2} \quad \text{при} \quad \arg r_1' + \arg r_2 \simeq 2\pi n$$

$$\mathcal{T}_{\min} \simeq \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{(1 + \sqrt{\mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2})^2} \simeq \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{(1 + \sqrt{(1 - \mathcal{T}_1)(1 - \mathcal{T}_2)})^2} \quad \text{при} \quad \arg r_1' + \arg r_2 \simeq \pi + 2\pi n.$$

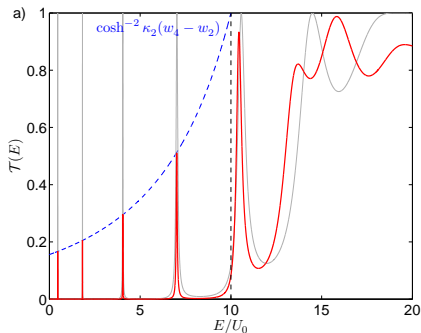
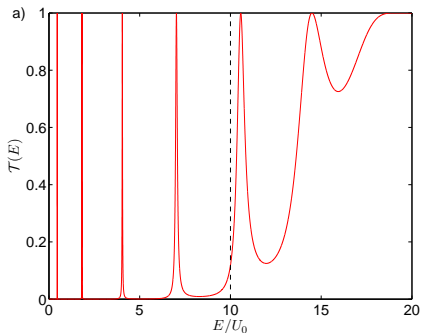
Прохождение через малопрозрачные барьеры ($\mathcal{T}_1 \ll 1$ и $\mathcal{T}_2 \ll 1$)

$$\mathcal{T}_{max} \simeq \frac{4 \mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{(\mathcal{T}_1 + \mathcal{T}_2)^2} \quad \text{и} \quad \mathcal{T}_{min} \simeq \frac{\mathcal{T}_1 \mathcal{T}_2}{4}.$$

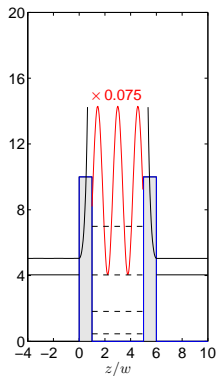
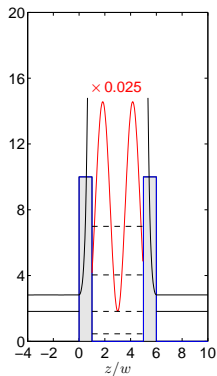
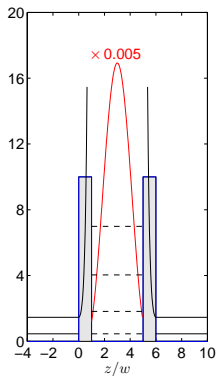
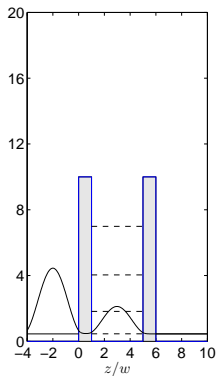
Коэффициент прохождения через два малопрозрачных барьера с одинаковыми коэффициентами прохождения может достигать единицы!

Аналогии: резонанс Фабри-Перо, просветление оптики, стоячие волны в волноводах

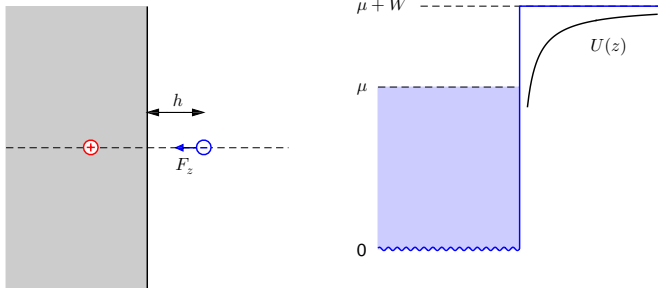
Энергетическая зависимость коэффициента прохождения через два прямоугольных барьера



Интерференция электронных волн в двухбарьерной структуре



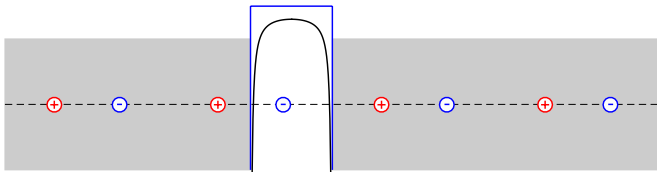
Форма туннельного барьера и потенциал изображения*



Для вычисления силы взаимодействия между точечным зарядом и массивным металлом можно использовать хорошо известный метод электрических изображений. Если электрон расположен вблизи уединённой металлической поверхности в точке $z = h$, то изображение этого заряда расположено в точке $z = -h$, и сила взаимодействия между точечными зарядами e и $-e$ на расстоянии $2h$ согласно закону Кулона равна

$$F_z(h) = -\frac{1}{\epsilon} \frac{e^2}{(2h)^2} \quad \Rightarrow \quad U(z) = E_{\text{вак}} - \int_z^{+\infty} F_z(h') dh' = E_{\text{вак}} - \frac{1}{\epsilon} \cdot \frac{e^2}{4z}.$$

Поверхность металла как двумерный аналог атома водорода



Если электрон расположен в пространстве между двумя массивными металлическими поверхностями, то он поляризует оба электрода и необходимо строить более сложную систему изображений. Если h и $w - h$ есть расстояния между электроном и левой или правой поверхностью, соответственно, то сила взаимодействия между затравочным электроном и системой изображений равна

$$F_z(h) = -\frac{1}{\epsilon} \frac{e^2}{(2h)^2} + \frac{1}{\epsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{e^2}{4(nw - h)^2} - \frac{e^2}{4(nw + h)^2} \right\}.$$

Интегрируя, получаем потенциал сил изображения

$$U(z) = E_{\text{вак}} - \int_z^{+\infty} F_z(h') dh' = E_{\text{вак}} - \frac{1}{\epsilon} \frac{e^2}{4z} - \frac{e^2}{2\epsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{nw}{n^2 w^2 - z^2} - \frac{1}{nw} \right\}.$$

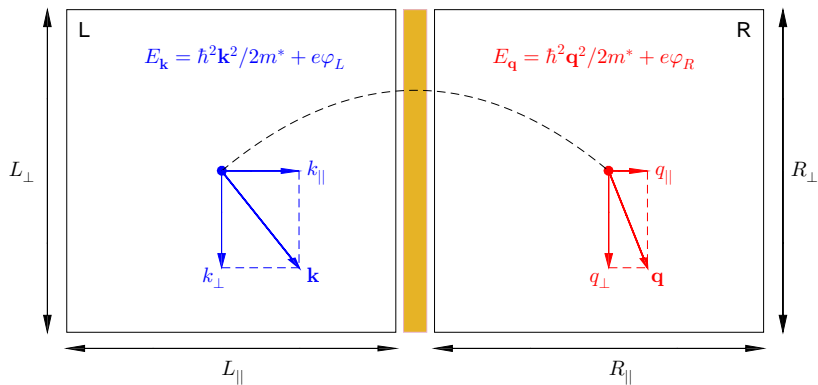
Для практических расчетов можно использовать приближенное выражение

$$U(z) \simeq E_{\text{вак}} - \frac{0.2}{\epsilon} \frac{we^2}{z(w-z)}.$$

Simmons, Journ. Appl. Phys., v. 34, 1793 (1963).

Постановка задачи туннелирования в системе многих частиц

Рассмотрим два металлических электрода: левый (L) и правый (R). Для краткости импульс электрона в левом электроде будет обозначать \mathbf{k} , в правом электроде – \mathbf{q} . Далее мы будем использовать обозначения, принятые в теории квантового транспорта: знак « \parallel » соответствует направлению туннельного тока, знак « \perp » соответствует направлению вдоль барьера.



Туннельный ток, соответствующий одному электрону

Каждый из свободных электронов в L -металле можно описать квазиклассической волновой функцией, нормированной на объём кристалла:

$$\psi_L(x, y, z, t) = a_L \cdot e^{ik_{\perp} r_{\perp}} \cdot e^{ik_{\parallel} z} \cdot e^{-iE_k t/\hbar},$$

где $|a_L| = \Omega_L^{-1/2}$ – нормирующий коэффициент, $\Omega_L = L_{\perp}^2 L_{\parallel}$ – объём L -резервуара, $E_k = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m^* + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^* + e\varphi_L$ – полная энергия частицы с волновым вектором \mathbf{k} с учётом электростатической энергии, m^* – эффективная масса.

При туннелировании продольная (по отношению к направлению тока) и перпендикулярная (по отношению к барьеру) составляющая потока вероятности при рассеянии на барьере в плоскостной системе преобразуется следующим образом

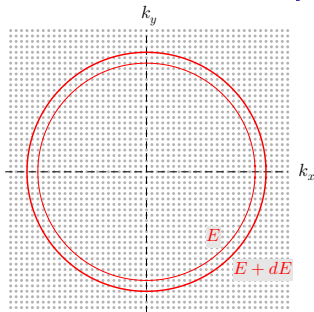
$$\Pi_L = \frac{\hbar k_{\parallel}}{m^*} |a_L|^2 \quad \Longrightarrow \quad \Pi_R = \Pi_L \cdot \mathcal{T}_{L \rightarrow R} = \frac{\hbar k_{\parallel}}{m^*} \cdot \frac{1}{\Omega_L} \cdot \mathcal{T}_{L \rightarrow R} = \frac{v_{L,\parallel}}{\Omega_L} \cdot \mathcal{T}_{L \rightarrow R},$$

где \mathcal{T} – коэффициент прохождения, который зависит только от продольной компоненты импульса частицы E_{\parallel} и параметров потенциального барьера.

Каждый из свободных электронов L -резервуара может создать электрический ток внутри R -металла, равный $e(v_{L,\parallel} / \Omega_L) \mathcal{T}_{L \rightarrow R}$.

Каждый из свободных электронов R -резервуара может создать электрический ток внутри L -металла, равный $e(v_{R,\parallel} / \Omega_R) \mathcal{T}_{R \rightarrow L}$.

Электронные состояния в кристалле



Periodic boundary conditions:

$$k_x L_x = 2\pi n_x \rightarrow \Delta k_x = 2\pi/L_x$$

$$k_y L_y = 2\pi n_y \rightarrow \Delta k_y = 2\pi/L_y$$

$$k_z L_z = 2\pi n_z \rightarrow \Delta k_z = 2\pi/L_z$$

3D случай: $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ или $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$. Вычислим объём шарового слоя между сферами с радиусами k и $k + dk$

$$dV = 4\pi k^2 dk = 4\pi \frac{2m^*E}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2m^*}}{\sqrt{E}} \frac{dE}{\hbar} = \frac{4\sqrt{2}\pi}{\hbar^3} (m^*)^{3/2} \sqrt{E} dE.$$

Поскольку на одно состояние в k -пространстве приходится фазовый объём $(2\pi)^3/\Omega$, то число состояний внутри шарового слоя равно $dN = \Omega dV / (2\pi)^3$, где Ω – объём кристалла. С учётом спинового вырождения получаем нормированную на объём плотность состояний

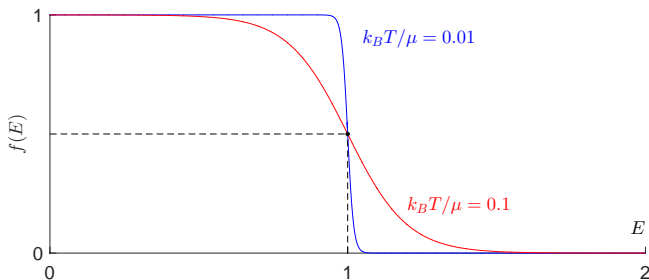
$$\rho(E) = 2 \cdot \frac{1}{\Omega} \frac{dN}{dE} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} (m^*)^{3/2} \sqrt{E}.$$

Принцип запрета Паули и заполнение электронных состояний в условиях термодинамического равновесия

Функция распределения Ферми-Дирака

$$f(E) = \left(1 + e^{(E-\mu)/k_B\Theta}\right)^{-1},$$

где μ – химический потенциал (иногда энергия Ферми), $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана, Θ – абсолютная температура.



Для больших энергий квантовое распределение Ферми-Дирака сводится к классическому распределению Больцмана: $f(E) \rightarrow e^{-(E-\mu)/k_B\Theta}$ при $E - \mu \gg k_B\Theta$.

Полный ток, соответствующий всем туннелирующим электронам

Необходимым условием для возникновения туннельного тока является то, что квантовое состояние с данным импульсом в эмиттере должно быть заполнено, а квантовое состояние коллекторе должно быть свободно. Следовательно, плотность туннельного тока с учётом **спинового вырождения** и **факторов заполнения** равна

$$j_{L \rightarrow R} = 2 \cdot \sum_k e \frac{v_{L,\parallel}}{\Omega_L} \cdot \mathcal{T}_{L \rightarrow R} \cdot f_L(E_k) \{1 - f_R(E_k)\} \quad \text{при условии } v_{L,\parallel} > 0,$$

$$j_{R \rightarrow L} = 2 \cdot \sum_q e \frac{v_{R,\parallel}}{\Omega_R} \cdot \mathcal{T}_{R \rightarrow L} \cdot f_R(E_q) \{1 - f_L(E_q)\} \quad \text{при условии } v_{R,\parallel} < 0.$$

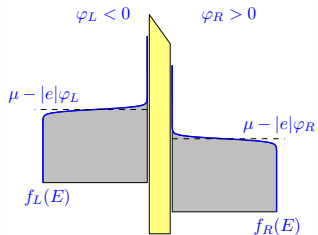
Будем считать, что распределение электронов по энергиям близко к равновесному распределению Ферми-Дирака (где k_B – постоянная Больцмана, Θ – абсолютная температура)

$$f_L(E) = \left(1 + e^{(E - (\mu_L + e\varphi_L)) / k_B \Theta}\right)^{-1} \quad \text{и} \quad f_R(E) = \left(1 + e^{(E - (\mu_R + e\varphi_R)) / k_B \Theta}\right)^{-1},$$

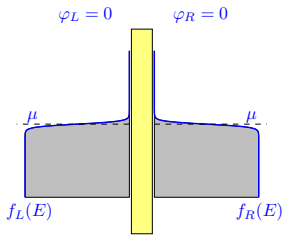
где φ_L и φ_R – электрические потенциалы левого и правого электродов, соответственно;
 $\tilde{\mu}_L = \mu_L + e\varphi_L$ и $\tilde{\mu}_R = \mu_R + e\varphi_R$ – электрохимические потенциалы левого и правого электродов.

Зонная диаграмма туннельного перехода

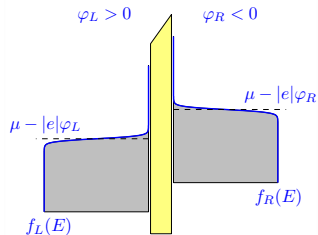
$I < 0$



$I = 0$



$I > 0$



Здесь и далее считаем, что $e = -|e|$.

Электрохимический потенциал

$$\tilde{\mu} = \mu + e\varphi = \mu - |e|\varphi$$

определяет максимальную энергию заполненных состояний при низких температурах с учётом электростатической энергии.

Упрощающие соображения

Бурштейн и Лундквист, *Туннельные явления в твёрдых телах*. Москва: Мир (1973)

1. Закон сохранения энергии $E_k = E_q$ (упругое туннелирование).
2. Одинаковые температуры и химические потенциалы электродов ($\mu_L = \mu_R = \mu$)

$$f_L(E) = \left(1 + e^{(E - (\mu + e\varphi_L))/k_B\Theta}\right)^{-1} = \left(1 + e^{((E - e\varphi_L) - \mu)/k_B\Theta}\right)^{-1} \equiv f_0(E - e\varphi_L),$$

$$f_R(E) = \left(1 + e^{(E - (\mu + e\varphi_R))/k_B\Theta}\right)^{-1} = \left(1 + e^{((E - e\varphi_R) - \mu)/k_B\Theta}\right)^{-1} \equiv f_0(E - e\varphi_R).$$

3. Для оценки числа электронных состояний в массивных металлических электродах в пределе пренебрежимо малой прозрачности можно формально рассмотреть периодические граничные условия $\psi(z) = \psi(z + L_{\parallel})$, которые приводят к эквидистантному спектру разрешённых значений импульса

$$k_{\parallel} = \frac{2\pi}{L_{\parallel}} n_{\parallel} \quad \text{и} \quad \Delta k_{\parallel} = k_{\parallel} \Big|_n - k_{\parallel} \Big|_{n-1} = \frac{2\pi}{L_{\parallel}},$$

где L_{\parallel} – длина левого электрода в направлении, перпендикулярном плоскости туннельного барьера, n_{\parallel} – целочисленный индекс.

4. Переход от суммирования к интегрированию вдоль \parallel -направления

$$\sum_{k_{\parallel}} \dots = \frac{1}{\Delta k_{\parallel}} \sum_{k_{\parallel}} \Delta k_{\parallel} \dots \simeq \frac{L_{\parallel}}{2\pi} \int dk_{\parallel} \dots, \quad \sum_{q_{\parallel}} \dots = \frac{1}{\Delta q_{\parallel}} \sum_{q_{\parallel}} \Delta q_{\parallel} \dots \simeq \frac{R_{\parallel}}{2\pi} \int dq_{\parallel} \dots$$

Промежуточный результат: переходим от суммирования к интегрированию для \parallel -компоненты

$$j = \frac{2eL_{\parallel}}{2\pi} \int dk_{\parallel} \sum_{k_{\perp}} \frac{v_{L,\parallel}}{L_{\perp}^2 L_{\parallel}} f_0(E_k - e\varphi_L) \{1 - f_0(E_k - e\varphi_R)\} \mathcal{T}_{L \rightarrow R} + \\ + \frac{2eR_{\parallel}}{2\pi} \int dq_{\parallel} \sum_{q_{\perp}} \frac{v_{R,\parallel}}{R_{\perp}^2 R_{\parallel}} f_0(E_q - e\varphi_R) \{1 - f_0(E_q - e\varphi_L)\} \mathcal{T}_{R \rightarrow L}.$$

Для \perp -компонент можно сделать аналогично, но переход от суммирования к интегрированию пока отложим.

5. Для структуры, однородной и неограниченной в плоскости туннельного барьера, при условии зеркального отражения частиц от барьера сохраняются параллельные поверхности раздела компоненты импульса частицы ($\mathbf{k}_{\perp} = \mathbf{q}_{\perp}$) и энергия движения в плоскости интерфейса ($E_{\mathbf{k}_{\perp}} = E_{\mathbf{q}_{\perp}} = E_{\perp}$). Как следствие, сохраняется и энергия поступательного движения в направлении, перпендикулярном плоскости структуры: $E_{\mathbf{k}_{\parallel}} = E_{\mathbf{q}_{\parallel}} = E_{\parallel}$. Иными словами,

$$\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + e\varphi_L = \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m^*} + e\varphi_R.$$

6. Для немагнитных систем прозрачность туннельного барьера не зависит от направления, в котором происходит туннелирование: $\mathcal{T}_{L \rightarrow R} = \mathcal{T}_{R \rightarrow L} = \mathcal{T}$, при этом прозрачность барьера \mathcal{T} зависит только от энергии E_{\parallel} , соответствующей поступательному движению по нормали к плоскости раздела, и от напряжения смещения $U = \varphi_L - \varphi_R$.

7. Очевидно, что

$$\begin{aligned} f_0(E - e\varphi_L) \{1 - f_0(E - e\varphi_R)\} - f_0(E - e\varphi_R) \{1 - f_0(E - e\varphi_L)\} = \\ = f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R). \end{aligned}$$

8. Поскольку $v_{\parallel} = \hbar^{-1} \partial E / \partial k_{\parallel} = \hbar^{-1} dE_{\parallel} / dk_{\parallel}$, то $v_{L,\parallel} dk_{\parallel} = dE_{\parallel} / \hbar$ и $v_{R,\parallel} dq_{\parallel} = -dE_{\parallel} / \hbar$.

9. Очевидно, что для плоскостной структуры поперечные размеры левого и правого электродов должны быть одинаковыми: $L_{\perp} = R_{\perp}$.

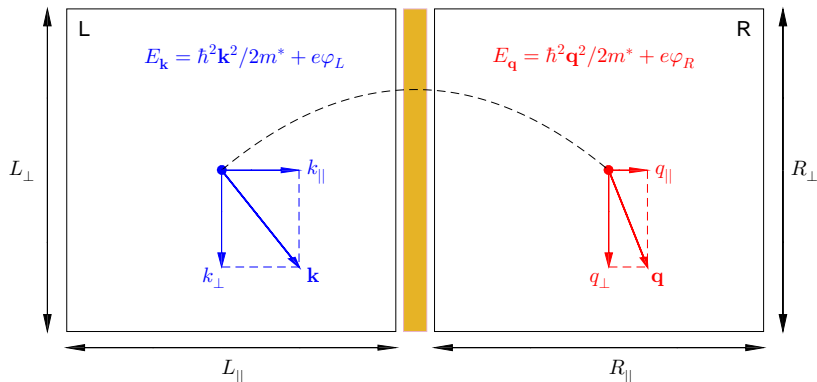
Промежуточный результат

$$j = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int dE_{\parallel} \sum_{k_{\perp}} \frac{\mathcal{T}(E_{\parallel})}{L_{\perp}^2} \{f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R)\},$$

Лекция 7

Туннелирование в металлических наноструктурах Квантово-размерные эффекты

Туннельный ток в плоскостойкой структуре



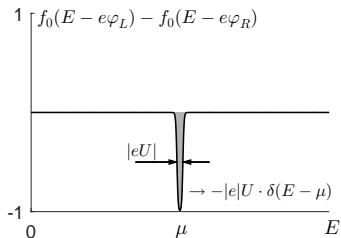
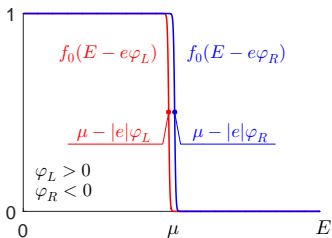
Промежуточный результат (см. предыдущую лекцию)

$$\begin{aligned}
 j_{\parallel} &= \sum_{\mathbf{k}, k_{\parallel} > 0} 2e \frac{v_{L,\parallel}}{\Omega_L} \cdot \mathcal{T}_{L \rightarrow R} \cdot f_L(E_{\mathbf{k}}) \{1 - f_R(E_{\mathbf{q}})\} + \sum_{\mathbf{q}, q_{\parallel} < 0} 2e \frac{v_{R,\parallel}}{\Omega_R} \cdot \mathcal{T}_{R \rightarrow L} \cdot f_R(E_{\mathbf{q}}) \{1 - f_L(E_{\mathbf{k}})\} = \\
 &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int dE_{\parallel} \sum_{\mathbf{k}_{\perp}} \frac{\mathcal{T}(E_{\parallel})}{L_{\perp}^2} \{f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R)\}.
 \end{aligned}$$

Проводимость туннельного контакта с учётом квантования поперечных мод: формула Ландауэра

Для малых напряжений $U = \varphi_L - \varphi_R \rightarrow 0$ разность фермиевских функций можно записать

$$f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R) \simeq e(\varphi_L - \varphi_R) \delta(E - \mu).$$



В этом случае после интегрирования по E_{\parallel} получаем

$$j = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int dE_{\parallel} \sum_{k_{\perp}} \frac{\mathcal{T}(E_{\parallel})}{L_{\perp}^2} \left\{ f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R) \right\} \simeq$$

$$\simeq \frac{2e}{h} \int dE_{\parallel} \sum_{k_{\perp}} \frac{\mathcal{T}(E_{\parallel})}{L_{\perp}^2} e(\varphi_L - \varphi_R) \delta(E_{\parallel} + E_{\perp} - \mu) \simeq \frac{2e}{h} \frac{e(\varphi_L - \varphi_R)}{L_{\perp}^2} \cdot \sum_{k_{\perp}} \mathcal{T}(\mu - E_{\perp}).$$

Запишем выражение для плотности туннельного тока в следующем виде

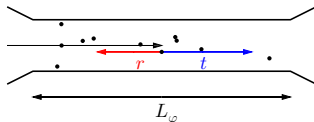
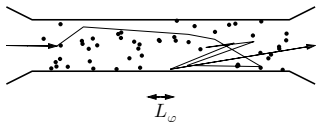
$$j = \frac{2e}{h} \frac{eU}{L_{\perp}^2} \cdot \sum_{k_{\perp}} \mathcal{T}(\mu - E_{\perp}).$$

Определим полную проводимость перехода или кондактанс (conductance) G как отношение полного тока $I = j \times L_{\perp}^2$ через переход к приложенному напряжению (Landauer, 1957)

$$G = \frac{I}{U} = \frac{2e^2}{h} \sum_{k_{\perp}} \mathcal{T}_{k_{\perp}} \quad \text{или} \quad G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T_{n,m}$$

Вывод: проводимость квантового контакта определяется суммой коэффициентов прохождения для каждой распространяющейся моды и в баллистическом режиме не зависит от длины канала!

Сравните со стандартными формулами для сопротивления и проводимости одномерного проводника в диффузионном приближении: $R = \rho \cdot L/S$ и $G = \sigma \cdot S/L$.



Nazarov and Blanter, *Quantum transport. Introduction to nanoscience*, Cambridge University Press (2009)
 Лесовик и Садовский, *Успехи физических наук*, т. 181, 1041-1096 (2011)

Проводимость туннельного контакта без учёта квантования поперечных мод

Если квантование поперечных мод несущественно ($L_{\perp}^2 \gg \lambda^2$), то можно перейти от суммирования по \perp –компонентам импульса

$$j = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int dE_{\parallel} \sum_{k_{\perp}} \frac{\mathcal{T}(E_{\parallel})}{L_{\perp}^2} \left\{ f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R) \right\}$$

к интегрированию и получить

$$\begin{aligned} j &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int dE_{\parallel} \iint \mathcal{T}(E_{\parallel}) \left\{ f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R) \right\} \frac{d^2 k_{\perp}}{(2\pi)^2} = \\ &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int \mathcal{T}(E_{\parallel}) dE_{\parallel} \iint \left\{ f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R) \right\} \frac{d^2 k_{\perp}}{(2\pi)^2}. \end{aligned}$$

Запишем выражение для туннельного тока в приближении свободных электронов в следующем виде

$$j = \frac{2e}{h} \int \mathcal{T}(E_{\parallel}) \cdot \mathcal{N}(E_{\parallel}) \cdot dE_{\parallel},$$

где число мод, принимающих участие в туннелировании (англ. supply function), равно

$$\mathcal{N}(E_{\parallel}) = \iint \left\{ f_0(E - e\varphi_L) - f_0(E - e\varphi_R) \right\} \frac{d^2 k_{\perp}}{(2\pi)^2}.$$

Используем модель свободного электронного газа

$$E_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} \implies dE_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}}{m^*} dk_{\perp}.$$

и упростим выражение для числа мод, принимающих участие в туннелировании.

Учитывая, что $E = E_{\parallel} + E_{\perp}$, запишем полученное выражение в цилиндрической системе координат

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(E_{\parallel}) &= \iint \left\{ f_0(E_{\parallel} + E_{\perp} - e\varphi_L) - f_0(E_{\parallel} + E_{\perp} - e\varphi_R) \right\} \frac{d^2 k_{\perp}}{(2\pi)^2} = \\ &= \iint \left\{ f_0(E_{\parallel} + E_{\perp} - e\varphi_L) - f_0(E_{\parallel} + E_{\perp} - e\varphi_R) \right\} \frac{2\pi k_{\perp} dk_{\perp}}{4\pi^2} = \\ &= \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{E_{\parallel}}^{\infty} \left\{ f_0(E' - e\varphi_L) - f_0(E' - e\varphi_R) \right\} dE'. \end{aligned}$$

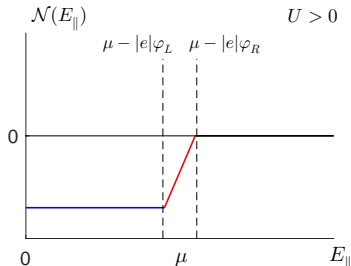
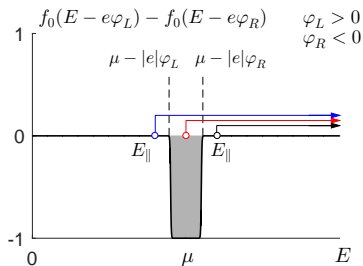
Оценка числа мод, участвующих в туннелировании

Для предельно низких температур распределение Ферми-Дирака близко к ступенчатой функции, поэтому число мод, принимающих участие в туннелировании, равно

$$\mathcal{N}(E_{\parallel}) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{E_{\parallel}}^{\infty} \{f_0(E' - e\varphi_L) - f_0(E' - e\varphi_R)\} dE' \simeq$$

$$\simeq -\frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \cdot \begin{cases} 0 & \text{при } E_{\parallel} > \mu - |e|\varphi_R; \\ \text{sgn}(\varphi_L - \varphi_R) \cdot (\mu - |e|\varphi_R - E_{\parallel}) & \text{при } \mu - |e|\varphi_L < E_{\parallel} < \mu - |e|\varphi_R; \\ |e|(\varphi_L - \varphi_R) & \text{при } E_{\parallel} < \mu - |e|\varphi_L. \end{cases}$$

Зависимость $\mathcal{N}(E_{\parallel})$ имеет вид кусочно-линейной функции:

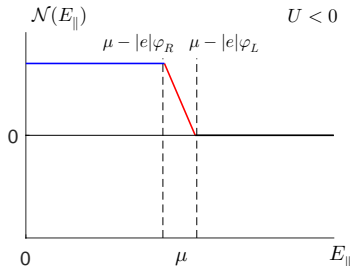
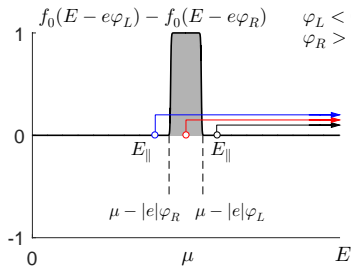


Для предельно низких температур распределение Ферми-Дирака близко к ступенчатой функции, поэтому число мод, принимающих участие в туннелировании, равно

$$\mathcal{N}(E_{\parallel}) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{E_{\parallel}}^{\infty} \{f_0(E' - e\varphi_L) - f_0(E' - e\varphi_R)\} dE' \simeq$$

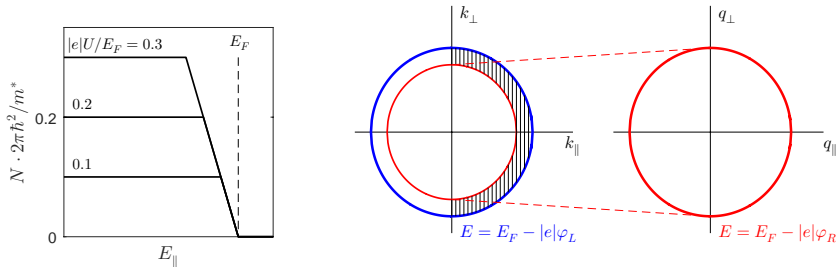
$$\simeq + \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \cdot \begin{cases} 0 & \text{при } E_{\parallel} > \mu - |e|\varphi_L; \\ \text{sgn}(\varphi_L - \varphi_R) \cdot (\mu - |e|\varphi_L - E_{\parallel}) & \text{при } \mu - |e|\varphi_R < E_{\parallel} < \mu - |e|\varphi_L; \\ |e|(\varphi_L - \varphi_R) & \text{при } E_{\parallel} < \mu - |e|\varphi_R. \end{cases}$$

Зависимость $\mathcal{N}(E_{\parallel})$ имеет вид кусочно-линейной функции:



Наглядная интерпретация: сечение сферы Ферми*

Электронные состояния, участвующие в туннелировании, для случая $U = \varphi_L - \varphi_R < 0$



Площадь сечения бóльшей сферы Ферми (при условии $0 \leq k_{\parallel} \leq k_F$)

$$S_1 = \pi (k_F^2 - k_{\parallel}^2) = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \right) = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2} (E_F + e\varphi_L - E_{\parallel}).$$

Площадь сечения мéньшей сферы Ферми (при условии $0 \leq k_{\parallel} \leq k'_F$)

$$S_2 = \pi (k_F'^2 - k_{\parallel}^2) = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2} \left(E_F - e\varphi_L + e\varphi_R - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \right) = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2} (E_F + e\varphi_R - E_{\parallel}).$$

Площадь кольца $S_1 - S_2$ для заданного E_{\parallel} совпадает с функцией $\mathcal{N}(E_{\parallel})$ с точностью до численного коэффициента $1/(2\pi)^2$!

Наглядная интерпретация: сечение сферы Ферми*



Формальный подход и соотношение Тцу-Есаки

Подставим явный вид функций распределения Ферми-Дирака и перепишем выражение для числа туннелирующих мод

$$\begin{aligned}\mathcal{N}(E_{\parallel}) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{E_{\parallel}}^{\infty} \left\{ f_0(E' - e\varphi_L) - f_0(E' - e\varphi_R) \right\} dE' = \\ &= \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{E_{\parallel}}^{\infty} \left\{ \frac{1}{1 + \exp[(E' - \mu - e\varphi_L)/k_B\Theta]} - \frac{1}{1 + \exp[(E' - \mu - e\varphi_R)/k_B\Theta]} \right\} dE' = \\ &= \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \cdot k_B\Theta \cdot \left\{ \ln \left(1 + e^{-(E_{\parallel} - \mu - e\varphi_L)/k_B\Theta} \right) - \ln \left(1 + e^{-(E_{\parallel} - \mu - e\varphi_R)/k_B\Theta} \right) \right\} = \\ &= \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \cdot k_B\Theta \cdot \ln \left(\frac{1 + e^{-(E_{\parallel} - \mu - e\varphi_L)/k_B\Theta}}{1 + e^{-(E_{\parallel} - \mu - e\varphi_R)/k_B\Theta}} \right).\end{aligned}$$

Подставляя выражение для $\mathcal{N}(E_{\parallel})$ в общую формулу для туннельного тока, приходим к формуле Тцу-Есаки (Tsu-Esaki), которая справедлива при любых температурах

$$j = \frac{2e}{h} \int \mathcal{T}(E_{\parallel}) \cdot \mathcal{N}(E_{\parallel}) \cdot dE_{\parallel} = \frac{2em^*}{(2\pi)^2\hbar^3} \cdot k_B\Theta \cdot \int_0^{\infty} \mathcal{T}(E_{\parallel}) \ln \left(\frac{1 + e^{-(E_{\parallel} - \mu - e\varphi_L)/k_B\Theta}}{1 + e^{-(E_{\parallel} - \mu - e\varphi_R)/k_B\Theta}} \right) dE_{\parallel}.$$

Проводимость туннельного перехода при низких температурах и малых напряжениях

Если $\varphi_L > \varphi_R$, то зонная структура левого электрода смещается *вниз* относительно зонной диаграммы правого электрода, поэтому результирующий поток электронов является отрицательным и происходит из правого электрода в левый электрод, что соответствует *положительной* плотности туннельного тока ($e = -|e|$). Для оценки плотности тока необходимо рассмотреть три энергетических интервала

$$j \simeq -\frac{2|e|}{2\pi\hbar} \int \mathcal{T}(E_{\parallel}) \cdot \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \cdot \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{при } E_{\parallel} > \mu - |e|\varphi_R \\ -(\mu + e\varphi_R - E_{\parallel}) & \text{при } \mu - |e|\varphi_L < E_{\parallel} < \mu - |e|\varphi_R \\ -|e|(\varphi_L - \varphi_R) & \text{при } E_{\parallel} < \mu - |e|\varphi_L \end{array} \right\} dE_{\parallel}.$$

Положим для определённости $\varphi_L = U$ и $\varphi_R = 0$, тогда

$$j \simeq \frac{2|e|}{2\pi\hbar} \cdot \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} |e|U \int_0^{\max\{\mu - |e|U, 0\}} \mathcal{T}(E_{\parallel}) dE_{\parallel} + \frac{2|e|}{2\pi\hbar} \cdot \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \int_{\max\{\mu - |e|U, 0\}}^{\mu} \mathcal{T}(E_{\parallel}) \cdot (\mu - E_{\parallel}) dE_{\parallel}.$$

Если $\varphi_L < \varphi_R$, то зонная структура левого электрода смещается *вверх* относительно зонной диаграммы правого электрода, поэтому результирующий поток электронов является *положительным* и происходит из левого электрода в правый электрод, что соответствует *отрицательной* плотности туннельного тока. Анализ можно провести аналогично.

Можно получить выражение для плотности туннельного тока, справедливое для смещения любого знака

$$j \simeq \text{sign } U \times \left\{ \frac{|e|^2 m^*}{2\pi^2 \hbar^3} |U| \int_0^{\max\{\mu - |eU|, 0\}} \mathcal{T}(E_{\parallel}) dE_{\parallel} + \frac{|e| m^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{\max\{\mu - |eU|, 0\}}^{\mu} \mathcal{T}(E_{\parallel}) \cdot (\mu - E_{\parallel}) dE_{\parallel} \right\}.$$

При $|U| \rightarrow 0$ второе слагаемое является величиной более высокого порядка малости.

При $|eU| \ll \mu$ мы получаем линейную вольт-амперную характеристику $I = j \cdot S \simeq G \cdot U$ (где S – площадь поперечного сечения перехода), при этом проводимость туннельного перехода равна

$$G \equiv \frac{I}{U} \simeq S \cdot \frac{|e|^2 m^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\mu} \mathcal{T}(E_{\parallel}) dE_{\parallel},$$

Воспользуемся выражением для прозрачности прямоугольного потенциального барьера и получим

$$\mathcal{T}(E_{\parallel}) = \frac{16 k_1 \varkappa^2 k_3}{(k_1^2 + \varkappa^2)(\varkappa^2 + k_3^2)} e^{-2\varkappa w} \implies G \simeq S \cdot \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar} \mathcal{T}(\mu) \frac{\varkappa(\mu)}{w},$$

Холодная полевая эмиссия

Холодная электронная эмиссия (cold electron emission), автоэлектронная эмиссия (autoelectronic emission) или полевая эмиссия (field emission) есть процесс эмиссии равновесных электронов из твёрдого тела под действием электрического поля, в отличие от термоэлектронной эмиссии, протекающей при повышенной температуре. Режим холодной полевой эмиссии является по сути туннелированием электронов в достаточно сильном электрическом поле.

Пусть для определенности $\varphi_L = U > 0$ и $\varphi_R = 0$.

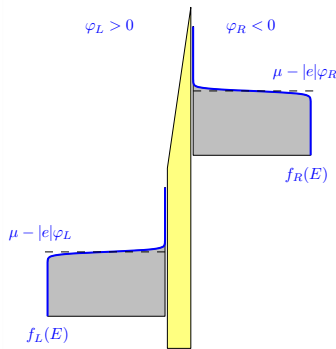
Трапецевидный потенциальный барьер

$V(z) = -|e|U + \mu + W_0 + |e|Uz/w$ для $0 \leq z \leq w$.

При условии $|eU| > \mu + W_0$ барьер можно рассматривать как линейный.

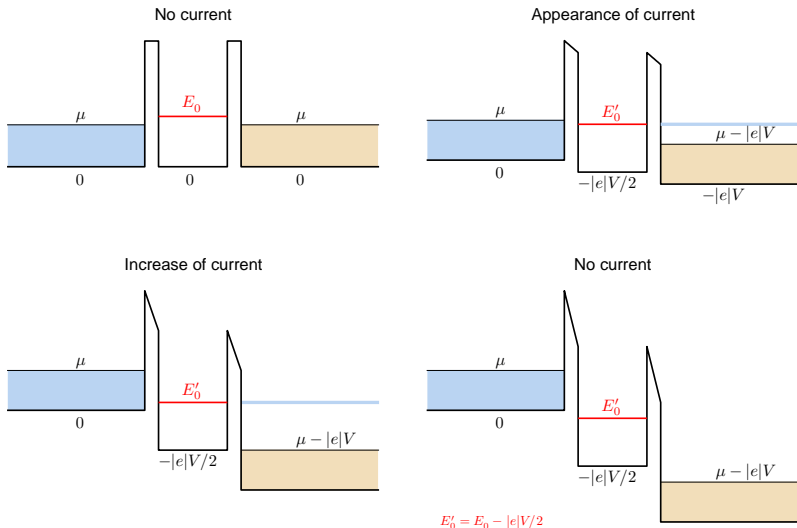
Выражение для туннельного тока при больших напряжениях (формула Фаулера-Нордхейма)

$$j \simeq \text{sign } U \times \frac{|e|m^*}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\mu \mathcal{T}(E_{\parallel})(\mu - E_{\parallel}) dE_{\parallel} \simeq$$
$$\text{sign } U \times \frac{|e|}{16\pi^2\hbar W_0} \frac{|eU|^2}{w^2} \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*} w}{\hbar|eU|} W_0^{3/2}\right).$$



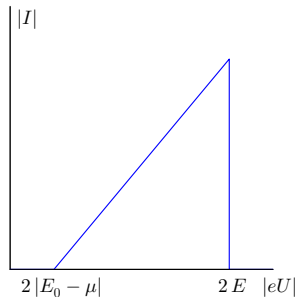
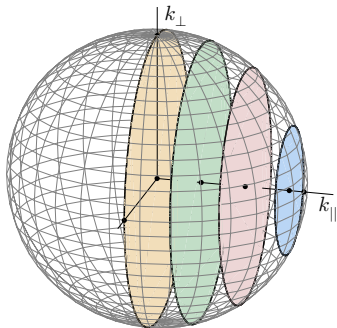
Резонансно-туннельный диод: $E_0 > \mu$

Рассмотрим двухбарьерную структуру с одним квазистационарным уровнем с энергией E_0 :



Условия появления и исчезновения тока: $E_0 - |e|U/2 < \mu$ и $E_0 - |e|U/2 < 0$.

Вольт-амперная характеристика: качественные соображения



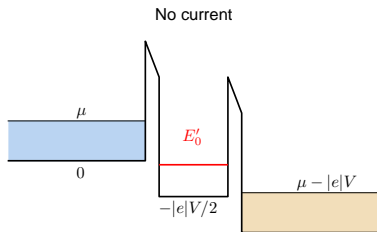
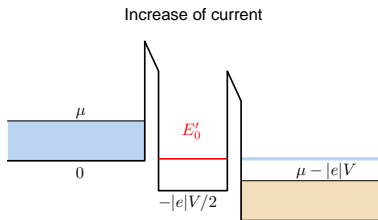
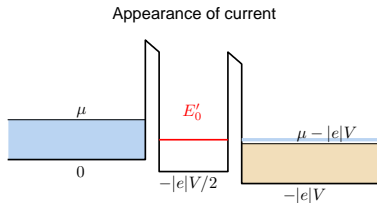
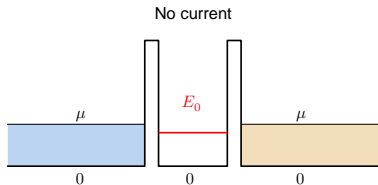
Условие резонансного туннелирования

$$E_{\parallel} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} = E_0 - \frac{|e|U}{2} \quad \Rightarrow \quad k_{\parallel} = \frac{\sqrt{2m^*(E_0 - |e|U/2)}}{\hbar}$$

Площадь сечения радиуса $k = \sqrt{k_F^2 - k_{\parallel}^2}$ определяет число резонансных электронов

$$S = \pi k^2 = \pi \frac{2m^*}{\hbar} \left(\mu - E_0 + \frac{|e|U}{2} \right)$$

Резонансно-туннельный диод: $E_0 < \mu$



Условия появления и исчезновения тока: $E_0 - |e|U/2 > \mu - |e|U$ и $E_0 - |e|U/2 < 0$.

Вольт-амперная характеристика

Спектр разрешённых состояний двумерного электронного газа $E = \hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2 / 2m^* + E_n$, где \mathbf{k}_\perp – волновой вектор частицы в плоскости слоя, E_n – энергия уровней размерного квантования. Допустим, что в системе есть лишь один уровень с энергией E_0 .

Туннельный ток в такой системе может быть вычислен по формуле Тцу–Есаки

$$j \simeq \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\max\{e(\varphi_R - \varphi_L), 0\}}^{\infty} \mathcal{T}(E_\parallel) \cdot \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \cdot k_B \Theta \cdot \ln \left\{ \frac{1 + e^{-(E_\parallel - \mu - e\varphi_L)/k_B \Theta}}{1 + e^{-(E_\parallel - \mu - e\varphi_R)/k_B \Theta}} \right\} dE_\parallel =$$
$$= \frac{em^*}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\mu \mathcal{T}(E_\parallel) \cdot (\mu - E_\parallel) dE_\parallel.$$

Для определенности предположим $\varphi_L = 0$ и $\varphi_R = U$. Прозрачность квантовой системы из двух потенциальных барьеров равна

$$\mathcal{T}(E_\parallel) \simeq T_{max} \cdot \frac{\Gamma^2}{\left[E_\parallel - (E_0 + e(\varphi_L + \varphi_R)/2) \right]^2 + \Gamma^2} = T_{max} \cdot \frac{\Gamma^2}{\left[E_\parallel - (E_0 - |e|U/2) \right]^2 + \Gamma^2},$$

где $\Gamma = \hbar/\tau$ – ширина линии резонансного прохождения, τ – время жизни квазистационарного состояния.

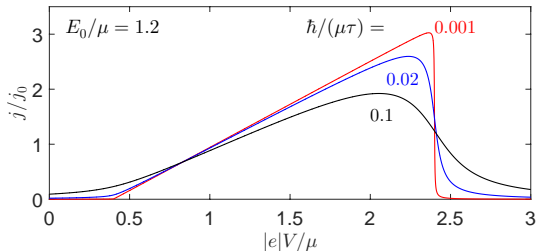
Если $\hbar/\tau \rightarrow 0$ и $T_{max} \rightarrow 1$, то лоренцевый контур можно заменить эквивалентным прямоугольником единичной высоты и ширины $2\hbar/\tau$ и оценить интеграл в формуле Тцу–Есаки по теореме о среднем.

Вольт-амперная характеристика для двух одинаковых барьеров предельно малой прозрачности ($\Gamma \rightarrow 0$)

$$j \simeq \frac{2em^*}{(2\pi)^2\hbar^3} \frac{2\hbar}{\tau} \left\{ \mu - \left(E_0 - \frac{|e|U}{2} \right) \right\} \simeq -\frac{e^2m^*}{2\pi^2\hbar^2\tau_0} \left\{ U - \frac{2(E_0 - \mu)}{|e|} \right\}.$$

В общем случае получаем

$$j = \frac{em^*}{2\pi^2\hbar^2\tau} \left\{ \left(\mu - E_0 - \frac{eU}{2} \right) \left(\arctg \frac{(\mu - E_0 - eU/2)}{\hbar/\tau} + \arctg \frac{(E_0 + eU/2)}{\hbar/\tau_0} \right) - \frac{\hbar}{2\tau} \ln \frac{(\mu - E_0 - eU/2)^2 + \hbar^2/\tau^2}{(E_0 + eU/2)^2 + \hbar^2/\tau^2} \right\}.$$



Демиховский, Вугальтер, *Физика квантовых низкоразмерных структур*, Москва, Логос (2000).

Эксперимент: резонансное туннелирование в полупроводниковых гетероструктурах

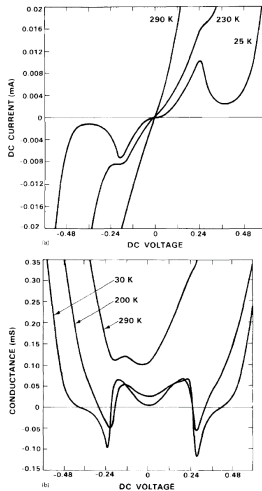
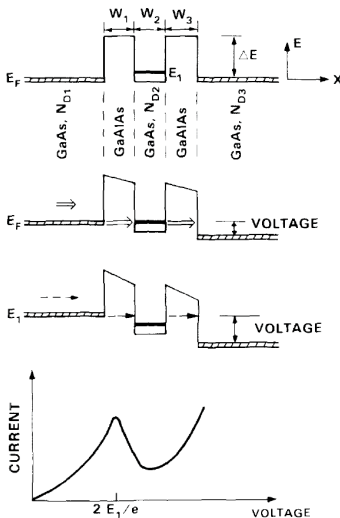
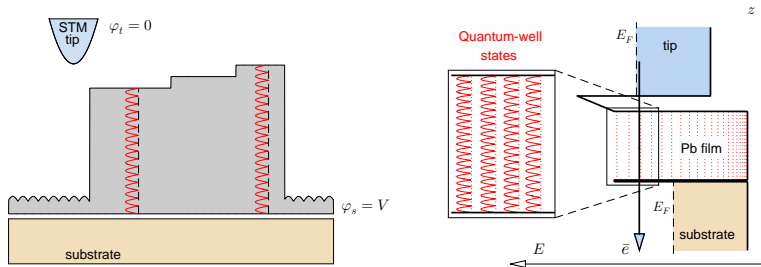


FIG. 2. (a) Current-voltage and (b) conductance (dI/dV)-voltage curves at three temperatures. Notice that resonant tunneling features can be seen even at room temperature.

Sollner, Goodhue, Tannenwald, Parker and Peck, Appl. Phys. Lett., vol. 43, 588-590 (1983)

Туннельная интерферометрия для тонких металлических плёнок Pb(111)

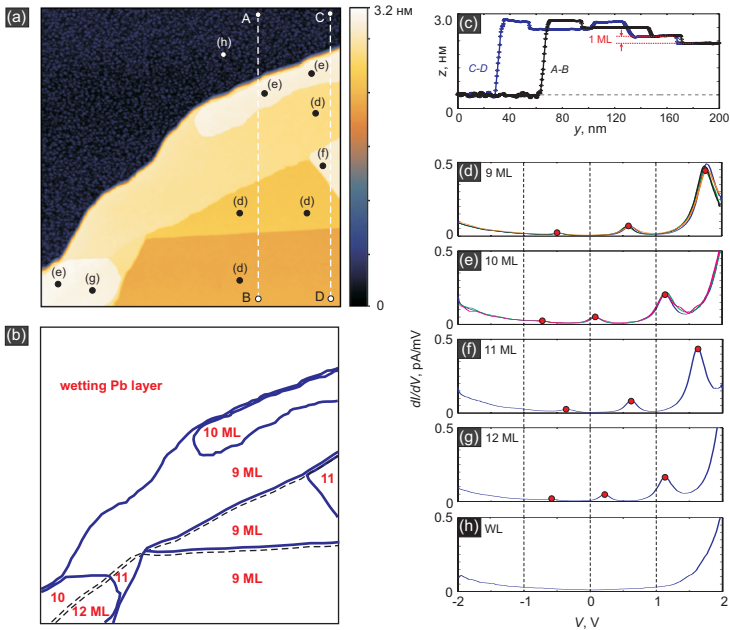


Спектр уровней размерного квантования $E_n \simeq E_0 + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} \simeq E_F + \hbar v_F \cdot \left(\frac{\pi n}{D} - k_F \right)$.

Для террас с толщинами $D_1 = N d_{ML}$ и $D_2 = (N + 2) d_{ML}$ имеем

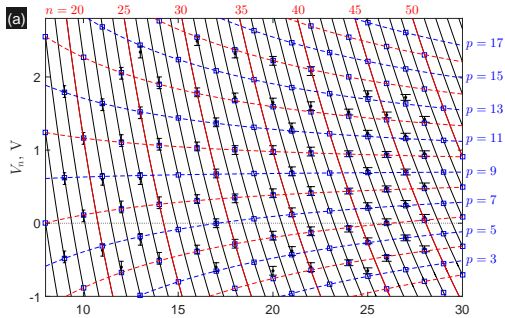
$$E_n^{(N)} \simeq E_F + \frac{\pi \hbar v_F}{N d_{ML}} \cdot \left(n - 2N \frac{d_{ML}}{\lambda_F} \right), \quad E_{n+3}^{(N+2)} \simeq E_F + \frac{\pi \hbar v_F}{(N + 2) d_{ML}} \cdot \left((n + 3) - 2(N + 2) \frac{d_{ML}}{\lambda_F} \right)$$

Если $\lambda_F : d_{ML} = 4 : 3$ и $N \gg 1$, то $E_n^{(N)} \simeq E_{n+3}^{(N+2)}$.



Уставщиков, Путилов, Аладышкин, Письма в ЖЭТФ, т. 106, 476-482 (2017).

Квантово-размерные состояния для плёнок Rb(111)*



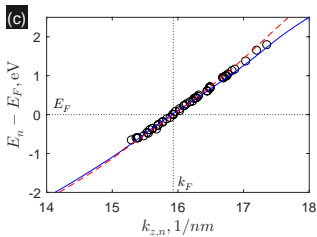
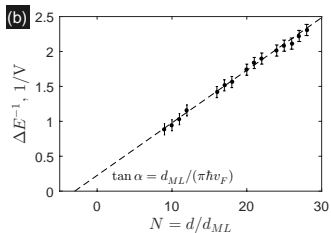
Линии заданного n

$$E_n \simeq E_F + \hbar v_F \cdot \left(\frac{\pi n}{d_{WL} + N d_{ML}} - k_F \right),$$

Линии заданного $p = 2n - 3N$

$$E_p \simeq E_F + \hbar v_F \times$$

$$\left(\frac{3\pi}{2d_{WL}} \cdot \frac{(N + p/3)}{N + 3} - k_F \right).$$



Уставщиков, Путилов, Аладышкин, Письма в ЖЭТФ, т. 106, 476-482 (2017).

Локализованные состояния в потенциале изображения и в линейно растущем потенциале

Image-potential states. Stark-shifted image-potential states

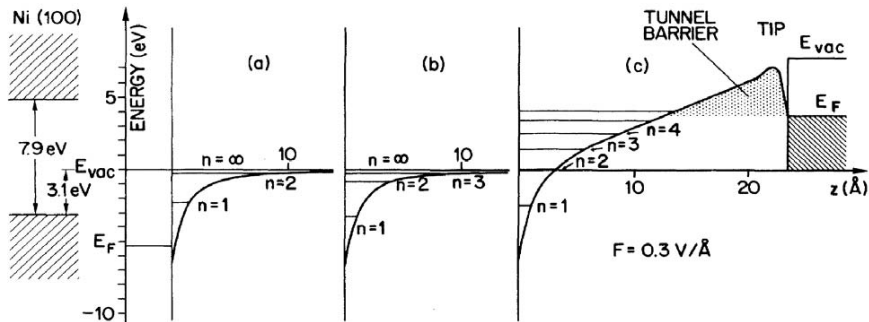
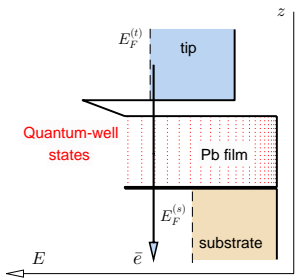


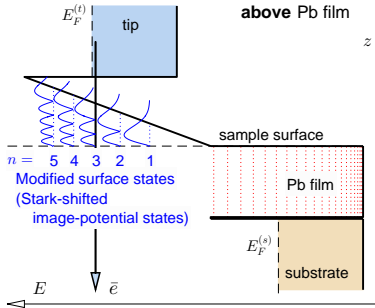
FIG. 1. Energy diagram for the electrostatic potential (including image) at a metal surface. On the left, the projected bulk structure of the Ni(100) surface is shown shaded. Note the 7.1-eV band gap straddling the vacuum level $E_{vac} = 0$. (a) For simplicity, only the $n = 1$ and $n = 2$ hydrogenic (quantum defect) energy levels are shown. (b) The surface corrugation affects the electronic x, y movement pulling the levels down, as seen by inverse photoemission. (c) Expansion and shift of the image-state spectrum by an applied field, F . The heavy solid line is the crystal potential plus the field potential.

Binnig, Frank, Fuchs, Garcia, Reihl, Rohrer, Salvan, and Williams, Phys. Rev. Lett., vol. 55, 991-994 (1985).

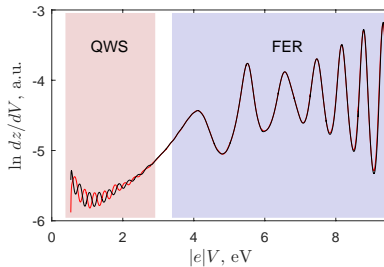
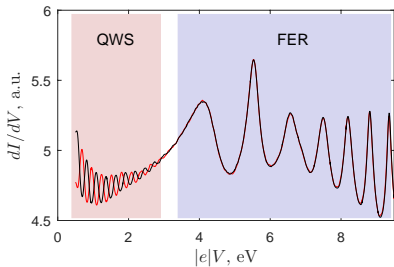
(a) Tunneling via quantum-confined states **inside** Pb film



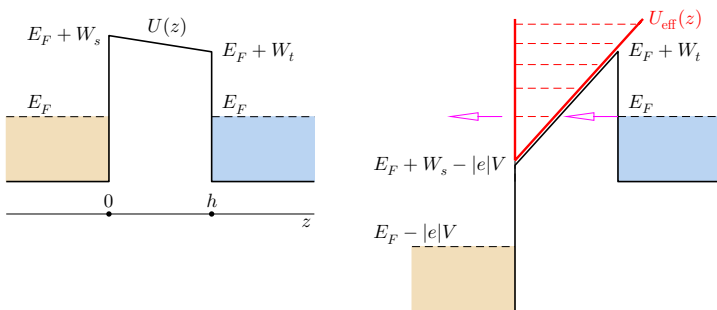
(b) Tunneling via quantum-confined states **above** Pb film



QWS = quantum-well states, FER = field-emission resonances



Уровни размерного квантования для электрона в треугольной потенциальной яме



Треугольная потенциальная яма с малопрозрачной стенкой при $z = 0$

$$U_{\text{eff}}(z) = \begin{cases} \infty & \text{for } z < 0, \\ U^* + F^* \cdot z & \text{for } z \geq 0; \end{cases}$$

где E_F – химические потенциалы электродов с учётом контактной разности потенциалов, $U^* = E_F + W_s - |e|V$ – положение дна ямы, $F^* = (|e|V + W_t - W_s)/h$ – градиент потенциальной энергии.

Подставим выражение для импульса $p(z) = \sqrt{2m_0(E - U_{eff}(z))}$ в формулу квантования Бора–Зоммерфельда

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b p(z) dz = m + \gamma, \quad \text{где } m = 0, 1, \dots \quad \text{и } \gamma = \frac{3}{4},$$

$a = 0$ и $b = (E - U^*)/F^*$ – классические точки поворота, m_0 – масса свободного электрона.

Спектр состояний в треугольной потенциальной яме

$$E_m = E_F + W_s - |e|V + \left\{ \frac{3}{2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_0}} F_n^* \cdot \left(m + \frac{3}{4} \right) \right\}^{2/3}, \quad m = 0, 1, \dots$$

Процесс резонансного туннелирования начинается при условии $E_m \simeq E_F$, тогда

$$|e|V_n \simeq W_s + \left(\frac{3}{2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_0}} \right)^{2/3} F_n^{*2/3} \left(n - \frac{1}{4} \right)^{2/3}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Оценка положений высших эмиссионных резонансов ($n \gg 1$)

$$|e|V_n \simeq W_s + \left(\frac{3}{2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_0}} \right)^{2/3} F_n^{*2/3} n^{2/3}.$$

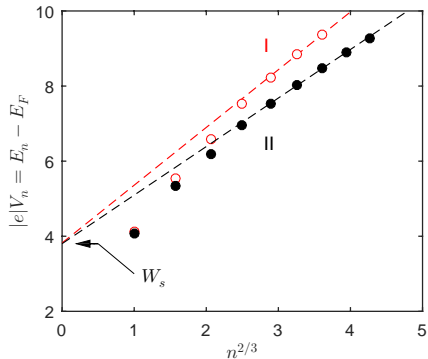
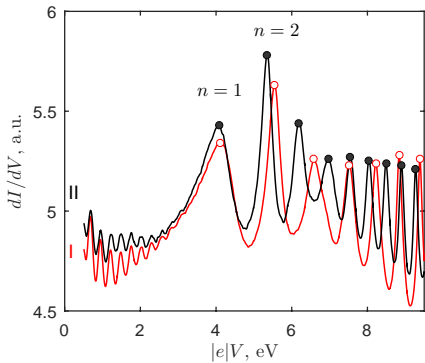
Kolesnychenko, Kolesnichenko, Shklyarevskii, van Kempen, *Physica B*, v. 291, 246-255 (2000).

Aladyshkin, *Journ. Physics: Condens. Matter*, v. 32, 435001 (2020).

Оценка локальной работы выхода для плёнок Рb(111)

Оценка положений высших эмиссионных резонансов ($n \gg 1$)

$$|e|V_n \simeq W_s + \left(\frac{3}{2} \frac{\pi \hbar}{\sqrt{2m_0}} \right)^{2/3} F_n^{*2/3} n^{2/3}.$$



Aldyshkin, Journ. Physics: Condens. Matter, v. 32, 435001 (2020).

Лекция 8

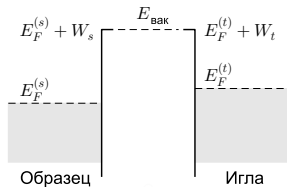
Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия

Туннелирование и метод Бардина.
Задача Терсоффа и Хаманна

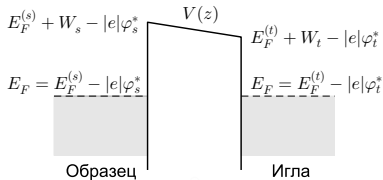
Туннельный эффект в физике твёрдого тела

Зонная структура двух металлов и контактная разность потенциалов

(a)



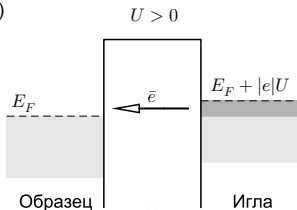
(b)



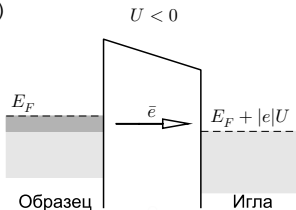
Зонная структура и возникновение туннельного тока:

$$I = const \cdot U \cdot \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(z)| dz\right)$$

(a)



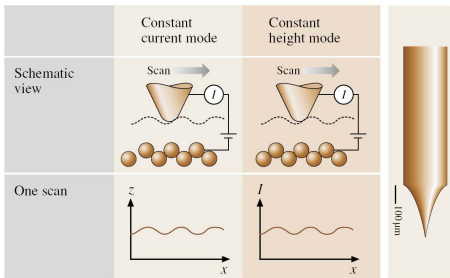
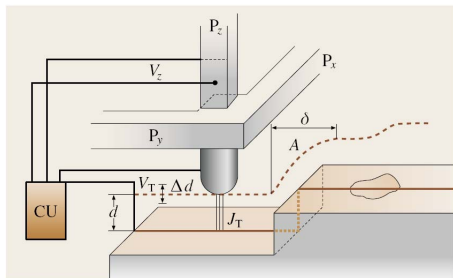
(b)



Сканирующая туннельная микроскопия: общая схема

Scanning tunneling microscopy (STM)

Изобретение: Binnig & Rohrer (1981), Нобелевская премия по физике (1986)



Рисунки взяты из монографии *Springer Handbook of Nanotechnology* (Ed. B. Bhushan), part C (2010)

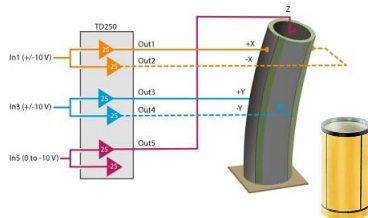
Основные режимы работы:

Сканирующая туннельная микроскопия @ $h = const$

Сканирующая туннельная микроскопия @ $I = const$

Туннельная спектроскопия в заданной точке

Сканирующая туннельная спектроскопия

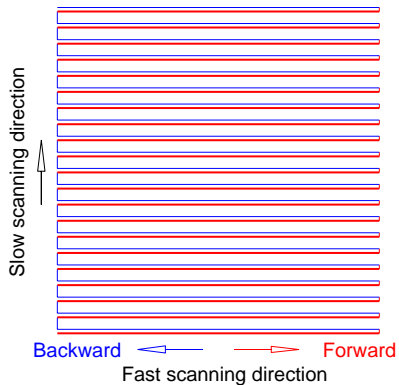


Взаимодействие через барьер?

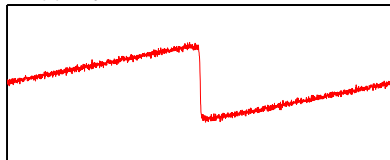


«Сотворение Адама» (итал. *La creazione di Adamo*) – фреска Микеланджело, написанная около 1511 года (Сикстинская капелла, Ватикан).

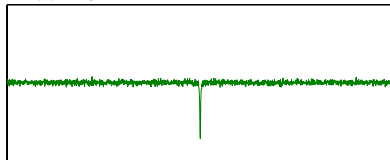
Сканирующая туннельная микроскопия в режиме заданного тока



$z=f(x) @ y=\text{const}, V=\text{const}$



$I=f(x) @ y=\text{const}, V=\text{const}$



Первый успех: расшифровка реконструкции Si(111)7×7

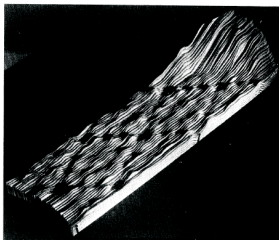
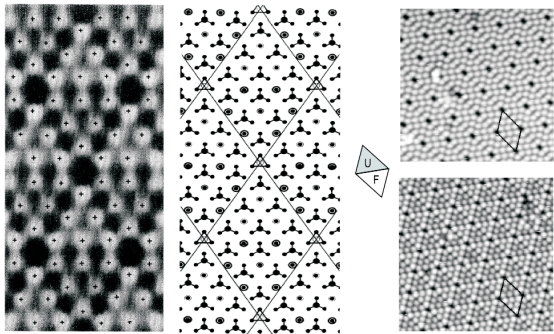
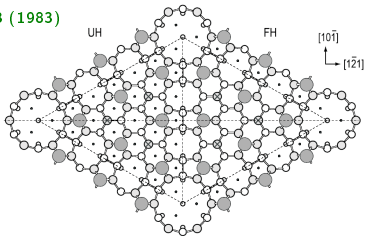


FIG. 1. Relief of two complete 7×7 unit cells, with nine minima and twelve maxima each, taken at 300°C . Heights are enhanced by 55%; the hill at the right grows to a maximal height of 15 Å. The $[111]$ direction points from right to left, along the long diagonal.



Binnig, Rohrer, Gerber, Weibel, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, 120–123 (1983)

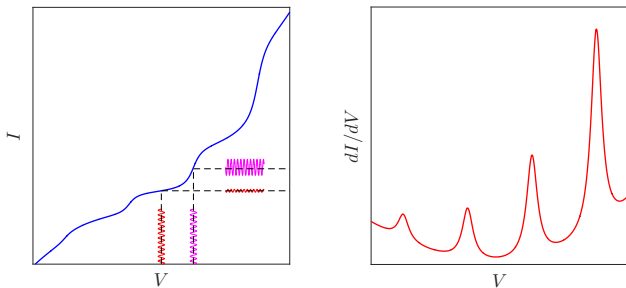
Оура, Лифшиц, Саранин, Зотов, Катаяма,
Введение в физику поверхности. Москва: Наука (2005)



Точечная туннельная спектроскопия

Single-point tunneling spectroscopy

Как правило, измерения статической локальной вольт-амперной ($I - V$) характеристики проводятся при фиксированном положении иглы относительно поверхности образца.



Модуляционная методика: $V(t) = V_0 + V_1 \cdot \cos \omega t \implies I(t) = I_0 + I_1 \cdot \cos(\omega t + \gamma)$

$$I_1 \simeq V_1 \cdot \left(\frac{dI}{dV} \right)_{V_0}$$

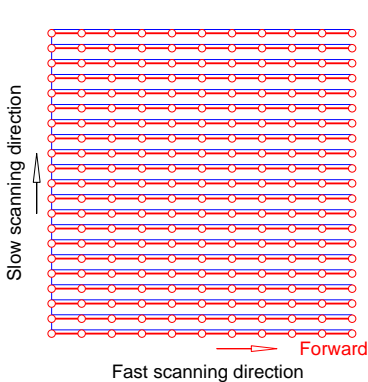
Зависимость амплитуды осцилляций туннельного тока от среднего напряжения может быть исследована параллельно с измерением вольт-амперной характеристики с помощью синхронного детектора (lock-in amplifier) на частотах от 100 Гц до 10 кГц.

Сканирующая туннельная спектроскопия (на сетке)

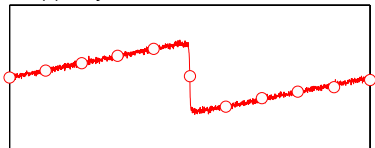
Scanning tunneling spectroscopy (grid spectroscopy)

Как правило, измерения заключаются в записи серии статических локальных вольт-амперных ($I - V$) характеристик при переменном положении иглы в точках x_i, y_j и номинально неизменной высоте иглы над поверхностью.

Результат измерений: массивы $I = f(V, x_n, y_m)$ и/или $dI/dV = f(V, x_n, y_m)$.

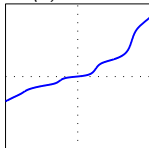


$z=f(x) @ y=\text{const}, V=\text{const}$

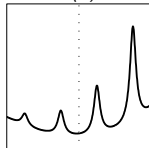


For all points of the grid @ $x, y, z=\text{const}$

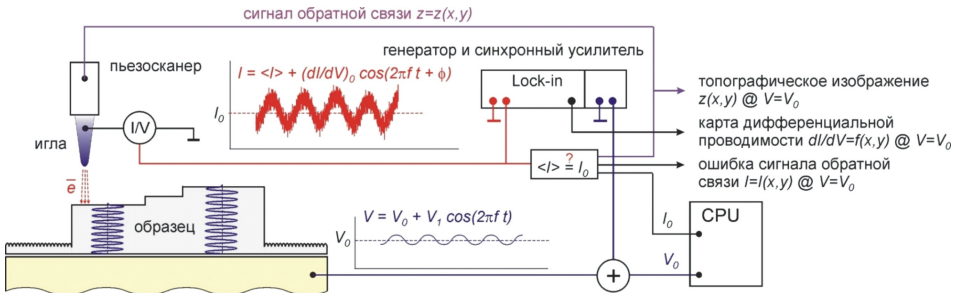
$I=f(V)$



$dI/dV=f(V)$



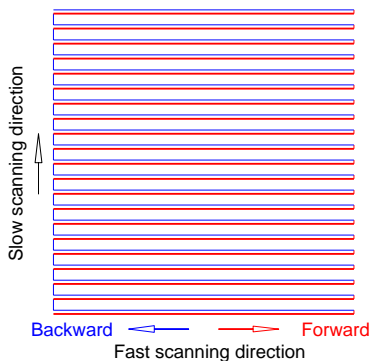
Сканирующая туннельная спектроскопия в модуляционном режиме



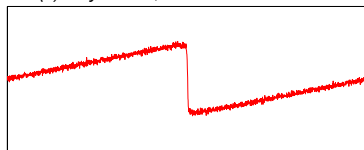
Сканирующая туннельная спектроскопия в модуляционном режиме

Как правило, измерения заключаются в записи реализаций $z = f(x)$ и $dI/dV = f(x)$ при движении иглы вдоль направления быстрого сканирования при заданном напряжении и среднем токе.

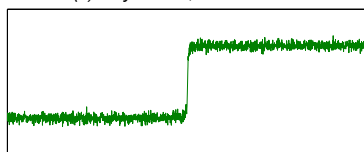
Результат измерений: массивы $z = f(x, y, V_0)$ и $dI/dV = f(x, y, V_0)$.



$z=f(x) @ y=\text{const}, V=\text{const}$

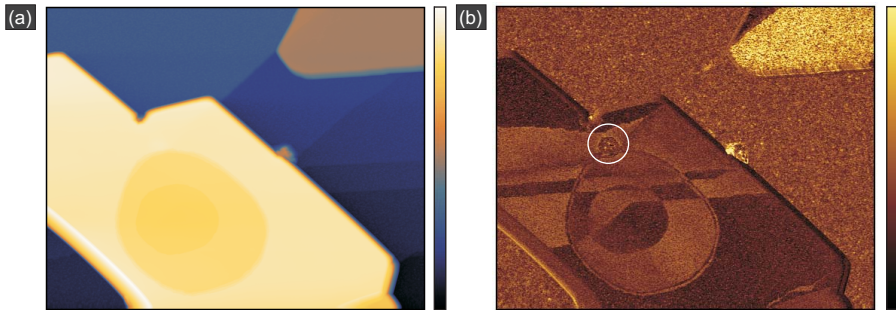


$dI/dV=f(x) @ y=\text{const}, V=\text{const}$



Сканирующая туннельная спектроскопия в модуляционном режиме

Метод позволяет визуализировать скрытые ступени монокристаллической высоты в подложке, инородные включения и участки поверхности с механическими напряжениями и неквантованным изменением высоты



Уставщиков, Путилов, Аладышкин, Письма в ЖЭТФ, т. 106, 476-482 (2017).
Путилов, Уставщиков, Аладышкин, Письма в ЖЭТФ, т. 109, 789-796 (2019).
Aladyshkin *et al.*, J. Phys. Chem. C, v. 125, 26814-26822 (2021).

Проблема интерпретация экспериментальных данных, полученных методом туннельной спектроскопии

Проблема 1:

Простейшая теория рассматривает туннелирование через одномерный барьер. Реальные системы всегда являются многомерными и обладают сложной геометрией. Как обобщить теоретические результаты на случай, максимально близкий к реальной геометрии?

Проблема 2:

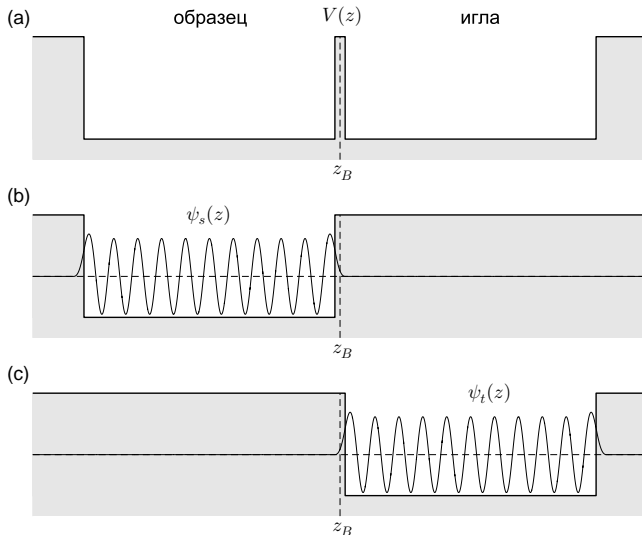
Эксперимент: $I(V, x, y)$ или $dI/dV(V, x, y)$

Теория: электронный спектр: $E(k)$ и локальная плотность состояний: $\rho(E) = dN/dE$

Как связать эти характеристики?

Задача Бардина о прохождении частицы через туннельный барьер малой прозрачности

Bardeen, Phys. Rev. Lett., vol. 6, 57 (1961).



«Золотое» правило Ферми и скорость квантовых переходов

Скорость квантовых переходов (шт/сек) между состояниями дискретного спектра в единичном интервале энергий

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{i \rightarrow f}|^2 \delta(E_i - E_f),$$

где $i = \text{initial}$, $f = \text{final}$.

Скорость квантовых переходов в состояния непрерывного спектра в единичном интервале энергий

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{i \rightarrow f}|^2 \rho(E_f),$$

Матричный элемент перехода оператора \hat{T} между стационарными состояниями по определению

$$T_{n,m} = \int \Psi_n^*(r, t) \hat{T} \Psi_m(r, t) dr = e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \cdot \int \psi_m^*(r) \hat{T} \psi_n(r) dr.$$

Вопрос: как определить оператор туннельного перехода или матричный элемент такого оператора, чтобы можно было вычислять туннельный ток

$$I = e \sum_{i,f} \Gamma_{i \rightarrow f}$$

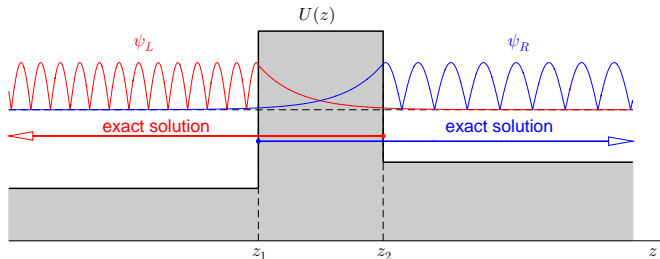
с помощью «золотого» правила Ферми?

https://ru.wikipedia.org/wiki/Золотое_правило_Ферми

Задача Бардина: решение

Bardeen, Phys. Rev. Lett., vol. 6, 57 (1961).

Разделим систему на две слабо взаимодействующие подсистемы для левого и правого электронных резервуаров. В нулевом порядке теории возмущений по прозрачности барьера волновые функции $\psi_{L,n}(r)$ и $\psi_{R,m}(r)$ не перекрываются и образуют полный ортонормированный базис, который описывает локализацию электрона в левом и правом электродах.



Пусть \hat{H} – точный гамильтониан задачи. Введем приближенные волновые функции

$$\psi_{L,n} = \begin{cases} \hat{H}\psi_{L,n} = E_{L,n}\psi_{L,n} & \text{при } z \leq z_2; \\ \text{const} \cdot e^{-\kappa_2 z} & \text{при } z > z_2, \end{cases} \quad \text{и} \quad \psi_{R,n} = \begin{cases} \text{const} \cdot e^{+\kappa_2 z} & \text{при } z \leq z_1; \\ \hat{H}\psi_{R,n} = E_{R,n}\psi_{R,n} & \text{при } z > z_1. \end{cases}$$

Пусть электрон в начальный момент времени находится в левом электроде в состоянии, соответствующем одной из нормированных стационарных волновых функций $\psi_{L,n}(z)$. Вычислим вероятность перехода электрона в другое состояние, описываемое одной из нормированных волновых функций функцией $\psi_{R,m}(z)$ с близкой собственной энергией. Будем искать решение в виде линейной комбинации невозмущённых волновых функций

$$\Psi(z, t) = c_n(t) \psi_{L,n}(z) e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_{m'} d_{m'}(t) \psi_{R,m'}(z) e^{-iE_{m'} t/\hbar},$$

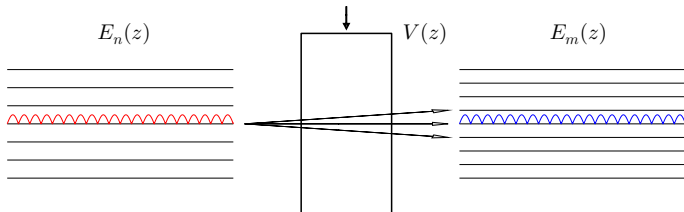
где E_n и E_m – энергии начального и конечного состояний.

Подставим $\Psi(z, t)$ в нестационарное уравнение Шрёдингера $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$ и получим

$$i\hbar \dot{c}_n(t) \psi_{L,n}(z) e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_{m'} i\hbar \dot{d}_{m'}(t) \psi_{R,m'}(z) e^{-iE_{m'} t/\hbar} =$$

$$= c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} (\hat{H} - E_n) \psi_{L,n}(z) + \sum_{m'} d_{m'}(t) e^{-iE_{m'} t/\hbar} (\hat{H} - E_{m'}) \psi_{R,m'}(z) \quad (*),$$

где $\dot{c}_n(t) \equiv dc_n/dt$.



Умножим уравнение (*) на $\psi_{R,m}^*(z)$ слева, проинтегрируем и получим

$$i\hbar \dot{c}_n(t) \langle \psi_{R,m}^*(z) | \psi_{L,n}(z) \rangle e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_{m'} i\hbar \dot{d}_{m'}(t) \langle \psi_{R,m}^*(z) | \psi_{R,m'}(z) \rangle e^{-iE_{m'} t/\hbar} =$$

$$c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \langle \psi_{R,m}^*(z) | (\hat{H} - E_n) \psi_{L,n}(z) \rangle + \sum_{m'} d_{m'}(t) e^{-iE_{m'} t/\hbar} \langle \psi_{R,m}^*(z) | (\hat{H} - E_{m'}) \psi_{R,m'}(z) \rangle.$$

Выражение

$$T_{L \rightarrow R} = \langle \psi_{R,m}^*(z) | (\hat{H} - E_n) \psi_{L,n}(z) \rangle$$

следует интерпретировать как матричный элемент перехода из стационарного состояния $\psi_{L,n}(z)$ и соответствующего частице в левом резервуаре, в стационарное состояние, описываемое функцией $\psi_{R,m}(z)$ и соответствующего частице в правом резервуаре.

Второе слагаемое в правой части описывает переходы между различными электронными состояниями в правом резервуаре и является величиной более высокого порядка малости по сравнению с первым слагаемым и может быть опущено без ограничения общности.

Для ортонормированных волновых функций имеем

$$i\hbar \dot{c}_n(t) \langle \psi_{R,m}^*(z) | \psi_{L,n}(z) \rangle e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_{m'} i\hbar \dot{d}_{m'}(t) \delta_{m,m'} e^{-iE_{m'} t/\hbar} \simeq c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} T_{L \rightarrow R}$$

или

$$i\hbar \dot{c}_n(t) \langle \psi_{R,m}^*(z) | \psi_{L,n}(z) \rangle e^{-iE_n t/\hbar} + i\hbar \dot{d}_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} \simeq c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} T_{L \rightarrow R}.$$

Будем рассматривать начальный этап распада состояния, для которого в момент $t = 0$ электрон был локализован в левом электроде, поэтому $c_n(0) = 1$ и $d_{m'}(0) = 0$.

Из условия нормировки $d|\Psi(z, t)|^2/dt = 0$ следует, что

$$c_n^*(t) \frac{d}{dt} c_n(t) + c_n(t) \frac{d}{dt} c_n^*(t) + \sum_{m'} \left\{ d_{m'}^*(t) \frac{d}{dt} d_{m'}(t) + d_{m'}(t) \frac{d}{dt} d_{m'}^*(t) \right\} = 0$$

и тогда $\dot{c}_n(0) \simeq 0$.

Таким образом, получили приближенное дифференциальное уравнение для описания эволюции квантовой системы на начальном этапе

$$i\hbar \dot{d}_m \simeq e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar} \cdot T_{L \rightarrow R}.$$

Сравните с формулами нестационарной теории возмущений:

Ландау, Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. Москва: Физматлит (2008)

Симметризация выражения для матричного элемента

Матричный элемент туннельного перехода в задаче Бардина

$$T_{L \rightarrow R} = \langle \psi_{R,m}^*(z) | (\hat{H} - E_n) \psi_{L,n}(z) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{R,m}^*(z) (\hat{H} - E_n) \psi_{L,n}(z) dz.$$

Поскольку функция $\psi_{L,n}(z)$ является точным решением уравнения $\hat{H}\psi_{L,n}(z) = E_{L,n}\psi_{L,n}(z)$ при $z \leq z_2$, подынтегральное выражение в отличие от нуля для $z > z_2$ и равно нулю для $z \leq z_2$. Это позволяет нам ограничить пределы интегрирования произвольным значением z_B внутри барьера ($z_1 \leq z_B \leq z_2$)

$$T_{L \rightarrow R}(t) = \int_{z_B}^{\infty} \psi_{R,m}^*(z) (\hat{H} - E_n) \psi_{L,n}(z) dz$$

Добавим к этому выражению величину, равную нулю при $z > z_B$, например

$$\int_{z_B}^{\infty} \psi_{L,n}(z) (\hat{H} - E_m) \psi_{R,m}^*(z) dz = 0.$$

Это позволяет нам симметризовать выражение для матричного элемента

$$T_{L \rightarrow R} = \int_{z_B}^{\infty} \left\{ \psi_{R,m}^*(z) (\hat{H} - E_n) \psi_{L,n}(z) - \psi_{L,n}(z) (\hat{H} - E_m) \psi_{R,m}^*(z) \right\} dz.$$

Для упрощения используем явный вид гамильтониана $\hat{H} = -\hbar^2/2m^* d^2/dz^2 + U(z)$, тогда

$$T_{L \rightarrow R} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \int_{z_B}^{\infty} \left\{ \psi_{R,m}^* \frac{d^2}{dz^2} \psi_{L,n} - \psi_{L,n} \frac{d^2}{dz^2} \psi_{R,m}^* \right\} dz + \int_{z_B}^{\infty} \left\{ \psi_{R,m}^* (U(z) - E_n) \psi_{L,n} - \psi_{L,n} (U(z) - E_m) \psi_{R,m}^* \right\} dz.$$

Если выполняется закон сохранения энергии ($E_n = E_m$), то второе слагаемое становится равным нулю.

Интегрируя первое слагаемое по частям, получаем

$$T_{L \rightarrow R} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \psi_{R,m}^* \frac{d}{dz} \psi_{L,n} \Big|_{z_B}^{\infty} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \int_{z_B}^{\infty} \frac{d\psi_{R,m}^*}{dz} \frac{d\psi_{L,n}}{dz} dz + \frac{\hbar^2}{2m^*} \psi_{L,n} \frac{d}{dz} \psi_{R,m}^* \Big|_{z_B}^{\infty} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \int_{z_B}^{\infty} \frac{d\psi_{L,n}}{dz} \frac{d\psi_{R,m}^*}{dz} dz = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \psi_{L,n} \frac{d}{dz} \psi_{R,m}^* - \psi_{R,m}^* \frac{d}{dz} \psi_{L,n} \right\}_{z=z_B}.$$

Промежуточный результат:

Матричные элементы для прямого и обратного потоков вероятности через туннельный барьер

$$T_{L \rightarrow R} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \psi_{L,n} \frac{d}{dz} \psi_{R,m}^* - \psi_{R,m}^* \frac{d}{dz} \psi_{L,n} \right\}_{z=z_B}$$

$$T_{R \rightarrow L} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \psi_{R,m} \frac{d}{dz} \psi_{L,n}^* - \psi_{L,n}^* \frac{d}{dz} \psi_{R,m} \right\}_{z=z_B},$$

где z_B – произвольная точка внутри барьера.

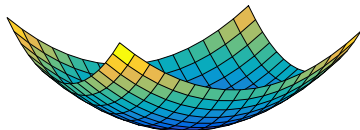
Полученные выражения напоминают выражения для потока вероятности в квантовой механике (с точностью до коэффициента)

$$\Pi = \frac{i\hbar}{2m^*} \left\{ \psi \frac{d\psi^*}{dz} - \psi^* \frac{d\psi}{dz} \right\}.$$

Обобщение на многомерный случай:

$$T_{L \rightarrow R} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \iint_S \left\{ \psi_{L,n} \nabla \psi_{R,m}^* - \psi_{R,m}^* \nabla \psi_{L,n} \right\}_n \cdot d\mathbf{S},$$

где S – произвольная поверхность внутри барьера, \mathbf{n} – вектор нормали.

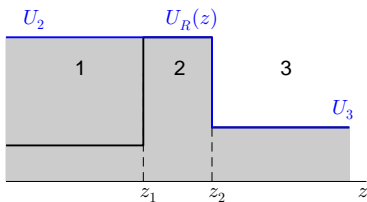
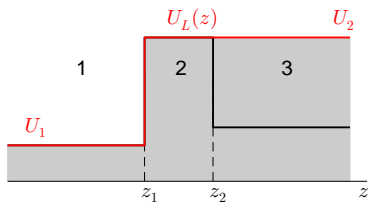


Пример: коэффициент прохождения для прямоугольного малопрозрачного барьера*

Рассмотрим задачу о прохождении частицы через одномерный потенциальный барьер

$$U(z) = \begin{cases} U_1 & \text{при } z < z_1, \\ U_2 & \text{при } z_1 < z < z_2, \\ U_3 & \text{при } z > z_2 \end{cases}$$

Предположим, что туннелирование происходит из одномерного кристалла размера L_{\parallel} в одномерный кристалл размера R_{\parallel} , поскольку параллельные компоненты импульса сохраняются и в туннелировании фактически не участвуют.



Рассмотрим вспомогательную задачу о нормированных волновых функциях частиц в левом электроде, для этого введем вспомогательный потенциальный барьер для электронов

$$U_L(z) = \begin{cases} U_1 & \text{при } z < z_1, \\ U_2 & \text{при } z > z_1, \end{cases}$$

В таком потенциале нормированные на объём состояния ($|a_1|^2 = L_{\parallel}^{-1}$) рассеяния имеют следующий вид

$$\psi_{L,E}(z) = \begin{cases} a_1 e^{ik_1 z} + b_1 e^{-ik_1 z} & \text{при } z < z_1, \\ a_2 e^{-\kappa_2 z} & \text{при } z > z_1, \end{cases}$$

поэтому амплитуда прошедшей волны равна

$$a_2 = a_1 \frac{2k_1}{(k_1 + i\kappa_2)} e^{ik_1 z_1 + \kappa_2 z_1},$$

где $k_1 = \sqrt{2m^*(E_{\parallel} - U_1)}/\hbar$, $k_2 = i\kappa_2$, $\kappa_2 = \sqrt{2m^*(U_2 - E_{\parallel})}/\hbar$. Таким образом, падение волны с амплитудой a_1 на скачок потенциала порождает в забарьерной области ($z > z_1$) неоднородную плоскую волну вида

$$\psi_{2L}(z) = a_1 \frac{2k_1}{(k_1 + i\kappa_2)} e^{ik_1 z_1 + \kappa_2 z_1} e^{-\kappa_2 z}.$$

Аналогичным образом рассмотрим задачу рассеянии частицы из правого электрода на вспомогательном потенциале вида

$$U_R(z) = \begin{cases} U_2 & \text{при } z < z_2, \\ U_3 & \text{при } z > z_2, \end{cases}$$

В таком потенциале нормированные на объём состояния рассеяния ($|b_1|^2 = R_{\parallel}^{-1}$) имеют вид

$$\psi_R(z) = \begin{cases} b_2 e^{\kappa_2 z} & \text{при } z < z_2, \\ b_3 e^{-ik_3 z} + a_3 e^{ik_3 z} & \text{при } z > z_2, \end{cases}$$

поэтому амплитуда прошедшей волны равна

$$b_2 = b_3 \frac{2k_3}{(i\kappa_2 + k_3)} e^{-ik_3 z_2 - \kappa_2 z_2}.$$

где $k_3 = \sqrt{2m^*(E_{\parallel} - U_3)}/\hbar$. Иными словами, падение частицы на скачок потенциала справа порождает в забарьерной области ($z < z_2$) неоднородную плоскую волну вида

$$\psi_{2R} = b_3 \frac{2k_3}{(i\kappa_2 + k_3)} e^{-ik_3 z_2 - \kappa_2 z_2} e^{\kappa_2 z}.$$

Зная нормированные волновые функции $\psi_{2L}(z)$ и $\psi_{2R}(z)$ внутри барьера, мы можем найти матричный элемент перехода

$$\begin{aligned}
 T_{L \rightarrow R} &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \psi_{2L} \frac{d}{dz} \psi_{2R}^* - \psi_{2R}^* \frac{d}{dz} \psi_{2L} \right\}_{z=z_B} = \\
 &= -\frac{\hbar^2}{m^*} a_1 b_3^* \frac{4k_1 \kappa_2 k_3}{(k_1 + i\kappa_2)(-i\kappa_2 + k_3)} e^{ik_1 z_1 + ik_3 z_2 - \kappa_2(z_2 - z_1)}
 \end{aligned}$$

или квадрат модуля матричного элемента

$$\begin{aligned}
 |T_{L \rightarrow R}|^2 &= \left(\frac{\hbar^2}{m^*} \right)^2 |a_1|^2 |b_3|^2 k_1 k_3 \cdot \frac{16k_1 \kappa_2^2 k_3}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} e^{-2\kappa_2(z_2 - z_1)} \simeq \\
 &\simeq \hbar^2 \left(\frac{\hbar k_1}{m^*} |a_1|^2 \right) \left(\frac{\hbar k_3}{m^*} |b_3|^2 \right) \cdot \mathcal{T}(E_{\parallel}),
 \end{aligned}$$

где $\mathcal{T}(E_{\parallel})$ есть коэффициент прохождения одиночного прямоугольного малопрозрачного барьера.

Скорость квантовых переходов Γ из данного состояния в левом электроде в ряд состояний в правом электроде с энергией E_{\parallel} , распределённых с плотностью $\rho(E_{\parallel})$, может быть вычислена по формуле

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{L \rightarrow R}|^2 \rho(E_{\parallel}).$$

Оценим число разрешенных состояний в одномерном кристалле **без учёта спинового вырождения**

$$N = \frac{2k_{max}}{2\pi/R_{\parallel}} = 2 \frac{\sqrt{2m^*(E_{\parallel} - U_3)}}{2\pi\hbar} R_{\parallel},$$

поэтому плотность состояний **без нормировки на длину кристалла** равна

$$\rho(E_{\parallel}) = \frac{dN}{dE_{\parallel}} R_{\parallel} \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{E_{\parallel} - U_3}} = R_{\parallel} \cdot \frac{m^*}{\pi\hbar} \frac{1}{\hbar k_3}.$$

Учтём, что в туннелировании участвуют электроны, для которых $k_z > 0$, а таких частиц вдвое меньше, чем полное число частиц с заданной энергией, следовательно, скорость переходов с учетом нормировки $|b_3|^2 = R_{\parallel}^{-1}$ равна

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = \frac{1}{2} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} |T_{L \rightarrow R}|^2 \rho(E_{\parallel}) = \frac{1}{2} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \hbar^2 \left(\frac{\hbar k_1}{m^*} |a_1|^2 \right) \left(\frac{\hbar k_3}{m^*} |b_3|^2 \right) \mathcal{T}(E_{\parallel}) \cdot \frac{m^*}{\pi\hbar} \frac{R_{\parallel}}{\hbar k_3}$$

или

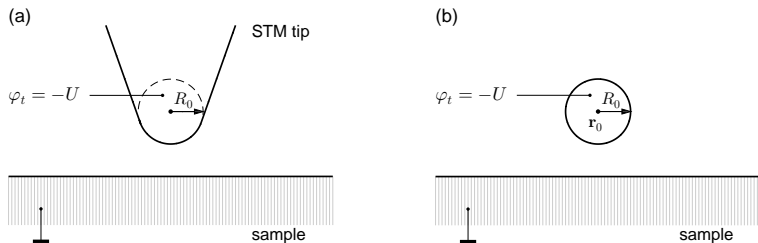
$$\frac{\Gamma_{L \rightarrow R}}{(\hbar k_1 |a_1|^2 / m^*)} \simeq \mathcal{T}(E_{\parallel}) = \frac{16k_1 \kappa_2^2 k_3}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} e^{-2\kappa_2(z_2 - z_1)} \quad \text{q. e. d.}$$

Таким образом мы получили, что скорость переходов $\Gamma_{L \rightarrow R}$, нормированная на плотность поток налетающих частиц $\hbar k_1 |a_1|^2 / m^* = v_1 |a_1|^2$, должна совпадать с коэффициентом прохождения через барьер и она в самом деле равна $\mathcal{T}(E_{\parallel})$ с точностью до коэффициентов.

Задача Терсоффа–Хаманна

Tersoff and Hamann, Phys. Rev. Lett. vol. 50, 1998 (1983)

Обсудим особенности туннельной проводимости контакта, образованного металлическим полупространством ($z < 0$) и металлической иглой, форма острия которой может быть приближенно описана полусферой радиуса R .



Далее для простоты будем предполагать равенство работ выхода и химических потенциалов для электронов образца (sample) и иглы (tip): $E_F^{(s)} = E_F^{(t)} = E_F$ и $W_s = W_t = W$.

Пусть $T_{s \rightarrow t}$ есть матричный элемент перехода электрона из состояния, описываемого волновой функцией ψ_s и энергией E_s в образце, в состояние ψ_t и энергией E_t в игле.

Туннельный ток: предел низких температур ($k\Theta \ll E_F$)

Скорость переходов между дискретными уровнями можно оценить по формуле

$$\Gamma_{s \rightarrow t} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{s \rightarrow t}|^2 \delta(E_s - E_t).$$

Туннельный ток, обусловленный квантовыми переходами между всеми возможными состояниями электронов образца и иглы с учётом вероятностей заполнения состояний, определяется соотношением

$$\begin{aligned} I &= \sum_s \sum_t e \Gamma_{s \rightarrow t} \left\{ f_0(E_s - e\varphi_s) - f_0(E_t - e\varphi_t) \right\} = \\ &= -\frac{2\pi|e|}{\hbar} \sum_s \sum_t |T_{s \rightarrow t}|^2 \left\{ f_0(E_s) - f_0(E_t - |e|U) \right\} \delta(E_s - E_t), \end{aligned}$$

где $\varphi_s = 0$ и $\varphi_t = -U$ – электрические потенциалы образца и иглы, соответственно;

$$f_0(E) = \left(1 + e^{(E-E_F)/k_B\Theta} \right)^{-1}$$

есть равновесное распределение Ферми-Дирака.

При $U < 0$ основной поток электронов связан с переходами из «заполненных» состояний образца (filled states) в незаполненные состояния иглы выше уровня Ферми.

При $U > 0$ основной поток электронов связан с переходами из заполненных состояний иглы в «незаполненные» состояния образца (empty states) в выше уровня Ферми.

Дифференциальная проводимость туннельного перехода: предел низких температур ($k_B\Theta \ll E_F$)

При анализе электронных свойств поверхности методом сканирующей туннельной спектроскопии часто вводят дифференциальную проводимость туннельного перехода dI/dU

$$\frac{dI}{dU} = -\frac{2\pi|e|}{\hbar} \sum_s \sum_t |T_{s \rightarrow t}|^2 \left(-\frac{d}{dU} f_0(E_t - |e|U) \right) \delta(E_s - E_t).$$

Очевидно, что

$$\frac{d}{dU} f_0(E_t - |e|U) = \frac{|e|}{k_B\Theta} \frac{e^{(E_t - |e|U - E_F)/k_B\Theta}}{\left(1 + e^{(E_t - |e|U - E_F)/k_B\Theta}\right)^2} = \frac{|e|}{4k_B\Theta} \operatorname{ch}^{-2} \left(\frac{E_t - |e|U - E_F}{2k_B\Theta} \right).$$

При низких температурах $k_B\Theta \ll E_F$ функция обратного гиперболического косинуса имеет узкий пик при $E_t = E_F + |e|U$, поэтому можно приближенно считать (см. аналогичные рассуждения в лекции 3)

$$\frac{d}{dU} f_0(E_t - |e|U) = |e| \delta(E_t - (E_F + |e|U)).$$

Таким образом, дифференциальная проводимость туннельного перехода равна

$$\frac{dI}{dU} = \frac{2\pi|e|^2}{\hbar} \sum_s \sum_t |T_{s \rightarrow t}|^2 \delta(E_s - (E_F + |e|U)) \delta(E_t - (E_F + |e|U)).$$

Далее для упрощения выражения необходимо использовать явный вид матричного элемента перехода, для чего необходимо знать волновые функции электронов образца и иглы.

Волновые функции электронов иглы: разложение по сферическим гармоникам

Волновые функции электронов образца $\psi_s(\mathbf{r})$ и электронов иглы $\psi_t(\mathbf{r})$ должны быть решениями стационарного трёхмерного уравнения Шрёдингера

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

и в общем случае неизвестны. Будем считать, что электроны образца и иглы характеризуются одинаковыми эффективными массами и равными работами выхода ($W = W_s = W_t$).

Поскольку при низких температурах основной вклад в туннельный ток вносят электроны с максимальными энергиями $E_t \simeq E_F$ и $E_s \simeq E_F$, для которых прозрачность туннельного барьера будет наибольшей, запишем уравнения Шрёдингера в следующем виде

$$\Delta\psi_s(\mathbf{r}) - \varkappa^2 \psi_s(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{и} \quad \Delta\psi_t(\mathbf{r}) - \varkappa^2 \psi_t(\mathbf{r}) = 0,$$

где $\varkappa = \sqrt{2m_0 W}/\hbar$ – масштаб локализации волновых функций электронов вблизи поверхности с энергиями, близкими к энергии Ферми.

Для СТМ-иглы с остриём сферической формы волновые функции электронов $\psi_t(\mathbf{r})$ вне иглы ($\rho > R_0$) должны удовлетворять уравнению

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial \psi_t}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi_t}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_t}{\partial \varphi^2} \right] - \varkappa^2 \psi_t = 0$$

и потому могут быть разложены по шаровым гармоникам, подобно волновым функциям водородоподобного атома, здесь (ρ, θ, φ) – сферическая система координат.

Для случая сферического острия задачу можно свести к задаче о движении в центрально-симметричном поле и разложить волновую функцию по сферическим гармоникам

$$\psi_t(\rho, \theta, \varphi) = \sum_{\ell, m} C_{\ell, m} R_{\ell}(\varkappa\rho) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi),$$

где коэффициенты $C_{\ell m}$ должны быть выбраны таким образом, чтобы обеспечить нормировку функции $\psi_t(\mathbf{r})$; \mathbf{r}_0 – радиус-вектор точки, соответствующий центру кривизны иглы; $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$ есть расстояние от центра иглы до рассматриваемой точки; θ и φ есть угловая часть сферических координат; ℓ – орбитальное квантовое число, характеризующее величину углового момента и m – магнитное квантовое число, характеризующее проекцию углового момента на ось z , $\varkappa = \sqrt{2m^* W}/\hbar$ есть параметр, который определяет масштаб локализации волновой функции

Для радиальной части волновой функции, описывающей электроны вблизи уровня Ферми ($E_t \simeq E_F$), получаем уравнение

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d}{d\rho} R_{\ell}(\varkappa\rho) \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} R_{\ell}(\varkappa\rho) - \varkappa^2 R_{\ell}(\varkappa\rho) = 0.$$

Например, для аксиально-симметричного состояния с $\ell = 0$ получаем простое уравнение

$$R_0''(\varkappa\rho) + \frac{2}{\rho} R_0'(\varkappa\rho) - \varkappa^2 R_0(\varkappa\rho) = 0 \quad \Longrightarrow \quad R_0(\varkappa\rho) = \frac{e^{-\varkappa\rho}}{\varkappa\rho}.$$

Вклад s -орбиталей волновых функций иглы

Если ограничиться первым членом ряда с $\ell = 0$, то

$$\psi_t^{s\text{-wave}}(x, y, z) = C \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|},$$

где \mathbf{r}_0 – радиус-вектор центра кривизны острия иглы. Будем считать, что постоянная C , зависящая от радиуса кривизны, автоматически учитывает нормировку волновой функции.

Отметим, что волновая функция s -состояния может быть записана как

$$\psi_t^{s\text{-wave}}(x, y, z) = \frac{4\pi C}{\varkappa} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0),$$

где функция Грина $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ есть сингулярное решение трёхмерного уравнения Шрёдингера с δ -функциональным источником

$$-\nabla^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \varkappa^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad \text{где} \quad G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}.$$

Напомним вторую теорему Грина, которую будем использовать для вычисления интегралов

$$\oint_S \left\{ u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right\} dS = \int_V \left\{ u \nabla^2 v - v \nabla^2 u \right\} dV,$$

где $\partial/\partial n$ – производная по нормали.

В качестве поверхностей интегрирования выберем плоскость S_0 и полусферическая поверхность S_∞ , внутри которой располагается острие иглы. Поскольку функции ψ_s и ψ_t затухают экспоненциально при удалении от поверхности образца, то интеграл по поверхности S_∞ будет равен нулю, тогда

$$T_{s \rightarrow t}^{s-wave} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \int_{S_0 + S_\infty} \left\{ \psi_t^{s-wave} \frac{\partial \psi_s}{\partial n} - \psi_s \frac{\partial \psi_t^{s-wave}}{\partial n} \right\} dS =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \iiint_{z>0} \left\{ \psi_{t,s-wave} \nabla^2 \psi_s - \psi_s \nabla^2 \psi_{t,s-wave} \right\} dV.$$

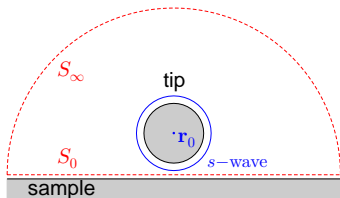
Учитывая, что $\nabla^2 \psi_s = \varkappa^2 \psi_s$ и $\psi_t^{s-wave} = (4\pi C / \varkappa) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ и $\psi_t^{s-wave*} = \psi_t^{s-wave}$, получаем

$$T_{s \rightarrow t}^{s-wave} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \iiint_{z>0} \left\{ \psi_t^{s-wave} \varkappa^2 \psi_s - \psi_s \varkappa^2 \psi_t^{s-wave} + \psi_s \frac{4\pi C}{\varkappa} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \right\} dV$$

или

$$T_{s \rightarrow t}^{s-wave} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{4\pi C}{\varkappa} \psi_s(\mathbf{r}_0)$$

Вывод: матричный элемент перехода определяется волновой функцией электронов образца в центре иглы



Интегральная и локальная плотности состояний

Квадрат модуля матричного элемента перехода в рассматриваемом приближении определяется вероятностью обнаружения электрона образца в данном квантовом состоянии в центре иглы

$$\left| T_{s \rightarrow t}^{s-wave} \right|^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left(\frac{4\pi}{\varkappa} \right)^2 |C|^2 \cdot |\psi_s(\mathbf{r}_0)|^2.$$

Суммируя по всем возможным состояниям электронов образца и иглы получаем дифференциальную туннельную проводимость контакта

$$\begin{aligned} \left(\frac{dI}{dU} \right)^{s-wave} &= \frac{2\pi e^2}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left(\frac{4\pi}{\varkappa} \right)^2 |C|^2 \times \\ &\times \left(\sum_s |\psi_s(\mathbf{r}_0)|^2 \delta(E_s - (E_F + |e|U)) \right) \cdot \left(\sum_t (E_t - (E_F + |e|U)) \right). \end{aligned}$$

Интегральная плотность электронных состояний иглы без учёта спинового вырождения определяется соотношением

$$\rho_t(E) = \sum_t 1 \cdot \delta(E_t - E).$$

Определим локальную плотность электронных состояний (local density of states, LDOS) электронов образца для заданной энергии E без учёта спинового вырождения как сумму вероятностей обнаружения всех электронных состояний в центре иглы

$$\rho_s(\mathbf{r}_0, E) = \sum_s |\psi_s(\mathbf{r}_0)|^2 \delta(E_s - E).$$

Локальная плотность состояний двумерного электронного газа (2DEG)*

Рассмотрим нормированные волновые функции для кристалла размерами L_x и L_y :

$$\psi_k(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} e^{ik_x x + ik_y y} \quad \text{и} \quad |\psi_k(x, y)|^2 = \frac{1}{L_x L_y}.$$

Локальная плотность состояний

$$\begin{aligned} \rho(E, x, y) &= 2 \times \sum_{k_x} \sum_{k_y} |\psi_k(x, y)|^2 \cdot \delta(E_k - E) = 2 \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \iint |\psi_k(x, y)|^2 \cdot \delta(E_k - E) \cdot dk_x dk_y = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \iint \delta(E_k - E) \cdot dk_x dk_y. \end{aligned}$$

Энергетический спектр для двумерных электронов с одной подзоной размерного квантования

$$E_k = E_0 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^*} = E_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*};$$

величина $k_0 = \sqrt{2m^*(E - E_0)}/\hbar$ определяет максимальное значение модуля волнового вектора для заданной энергии E .

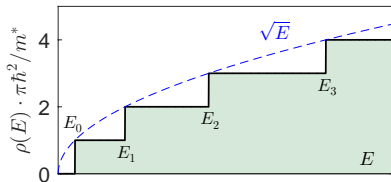
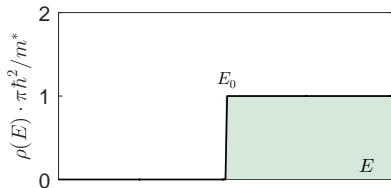
Дельта-функция от сложного аргумента: $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$ и $\delta[f(x)] = \sum_{x_0} |f'(x_0)|^{-1} \cdot \delta(x - x_0)$.

Преобразование дельта-функции $\delta[E_k - E]$

$$\begin{aligned} \delta[E_k - E] &= \delta\left[\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} - \left(E - E_0 - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}\right)\right] = \frac{2m^*}{\hbar^2} \delta\left[k_y^2 - (k_0^2 - k_x^2)\right] = \\ &= \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{k_0^2 - k_x^2}} \delta\left[k_y - \sqrt{k_0^2 - k_x^2}\right] + \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{k_0^2 - k_x^2}} \delta\left[k_y + \sqrt{k_0^2 - k_x^2}\right]. \end{aligned}$$

Подставим выражение для дельта-функции в соотношение для локальной плотности состояний и для случая $E > E_0$ получим

$$\rho(E, x, y) = \frac{1}{2\pi^2} \int dk_x \int \delta(E_k - E) \cdot dk_y = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{-k_0}^{k_0} \frac{dk_x}{\sqrt{k_0^2 - k_x^2}} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}.$$



Дифференциальная туннельная проводимость: вклад s -орбиталей электронов иглы

Таким образом, дифференциальная проводимость контакта пропорциональна локальной плотности электронных состояний образца в центре иглы для энергий $E = E_F + |e|U$

$$\left(\frac{dI}{dU}\right)^{s\text{-wave}} \simeq \text{const} \cdot \rho_s(\mathbf{r}_0, E_F + |e|U) \cdot \rho_t(E_F) \quad (*)$$

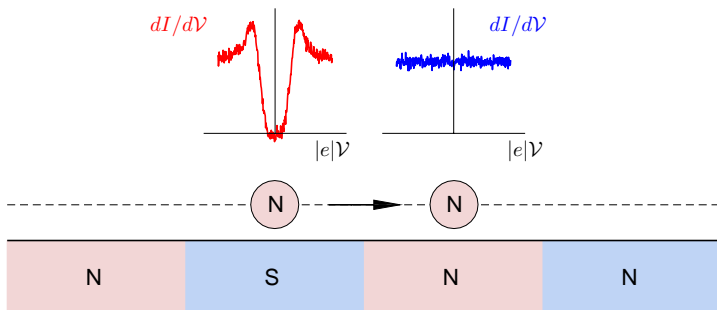
Мы учли, что плотность состояний для иглы обычно слабо зависит от энергии и потому можно заменить на плотность состояний на уровне Ферми.

Промежуточные выводы:

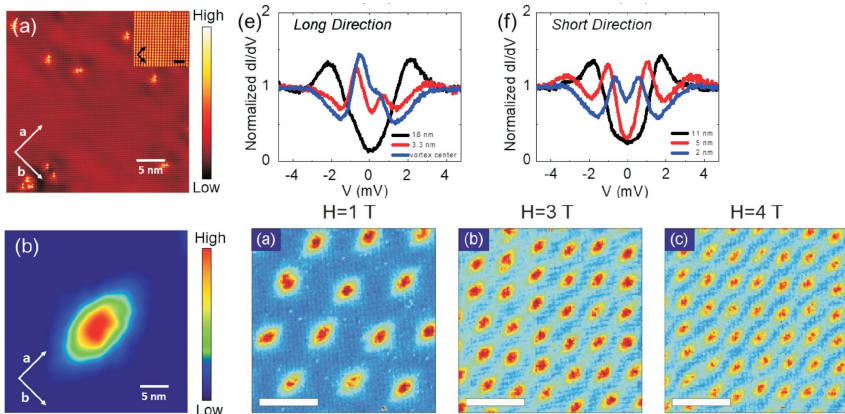
1. Дифференциальная проводимость dI/dU туннельного перехода «образец–игла» при условии доминирующего вклада s -орбиталей электронов *иглы* определяется локальной плотностью состояний электронов *образца* в центре иглы для энергий $E_F + |e|U$, где U – средний потенциал образца относительно иглы.
2. Соотношение (*) является основой для интерпретации результатов по сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии и численного моделирования изображения поверхности кристаллов.

Сканирующая туннельная спектроскопия и физика сверхпроводников

Сканирующая туннельная микроскопия позволяет обнаруживать несверхпроводящие включения и квантованные вихри Абрикосова или Пирла

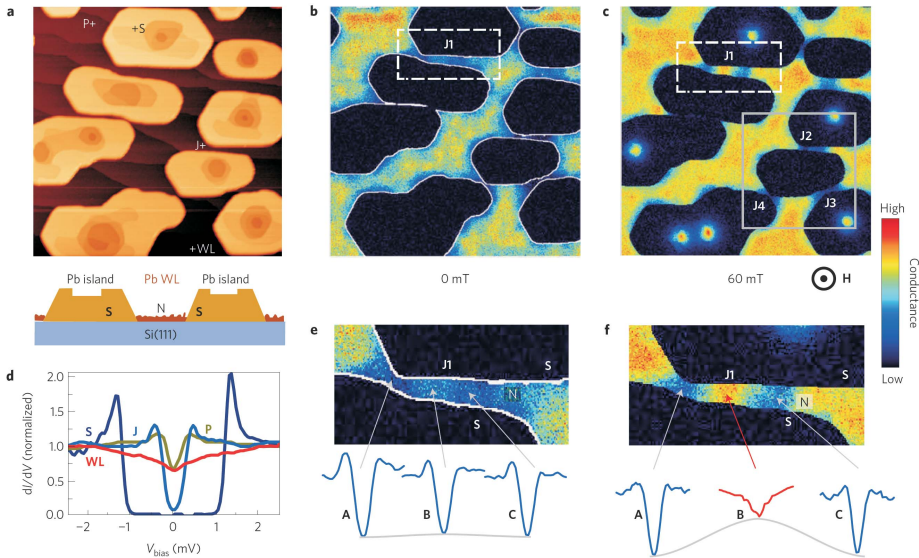


Lattice of Abrikosov vortices in superconducting FeSe single crystals



Putilov, Di Giorgio, Vadimov, Trainer, ... Aladyshkin, Mel'nikov, Iavarone. Phys. Rev. B, vol. 99, 144514 (2019)

Individual Abrikosov vortices in superconducting Pb(111) micron-sized islands



Roditchev, Brun, Serrier-Garcia, Cuevas, ..., Stolyarov, Nature Physics, vol. 11, 322-337 (2015)

Моделирование структуры поверхности

Tersoff and Hamann, Phys. Rev. Lett. vol. 50, 1998 (1983);

Tersoff and Hamann, Phys. Rev. B, vol. 31, 810 (1985).

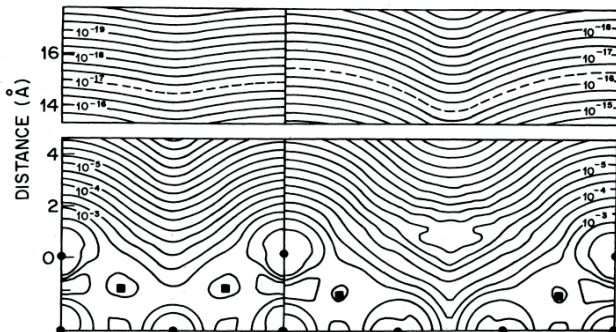


FIG. 2. Calculated $\rho(\vec{r}, E_F)$ for Au(110) (2×1) (left) and (3×1) (right) surfaces. Figure shows ($1\bar{1}0$) plane through outermost atoms. Positions of nuclei are indicated by solid circles (in plane) and squares (out of plane). Contours of constant $\rho(\vec{r}, E_F)$ are labeled in units of $\text{a.u.}^{-3} \text{eV}^{-1}$. Note break in distance scale. Peculiar structure around contour 10^{-5} of (3×1) is due to limitations of the plane-wave part of the basis in describing the exponential decay inside the deep troughs. Center of curvature of probe tip follows dashed line.

Tupchaya, Bondarenko, Yakovlev, Vekovshinin, Mihalyuk, Gruznev, Denisov, Matetskiy, Aladyskin, Zotov, Saranin, Applied Surface Science, vol. 589, 152951 (2022).

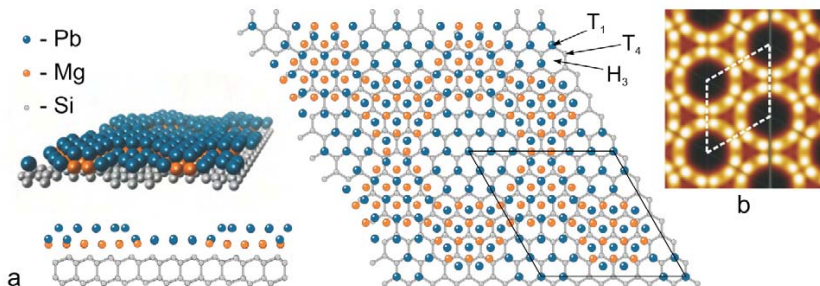


Fig. 4. (a) Ball-and-stick (top and side views) and isometric view of the structural model for the 6×6 -(Mg, Pb) surface. (b) Simulated empty state STM image (+0.5 V).

Вклад p -орбиталей волновых функций иглы

Нетрудно показать, что решения уравнения Шрёдингера, соответствующие состояниям с $\ell = 1$ и $m = -1, 0$ и 1 , могут быть представлены в виде вещественных функций

$$\psi_t^{p_x\text{-wave}}(\mathbf{r}) = C \left(\frac{1}{\kappa\rho} + \frac{1}{(\kappa\rho)^2} \right) e^{-\kappa\rho} \sin\theta \cos\varphi,$$

$$\psi_t^{p_y\text{-wave}}(\mathbf{r}) = C \left(\frac{1}{\kappa\rho} + \frac{1}{(\kappa\rho)^2} \right) e^{-\kappa\rho} \sin\theta \sin\varphi,$$

$$\text{и} \quad \psi_t^{p_z\text{-wave}}(\mathbf{r}) = C \left(\frac{1}{\kappa\rho} + \frac{1}{(\kappa\rho)^2} \right) e^{-\kappa\rho} \cos\theta,$$

где (ρ, θ, φ) – сферическая система координат.

Используя очевидное соотношение

$$\frac{1}{\kappa} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{e^{-\kappa\rho}}{\kappa\rho} \right) = - \left(\frac{1}{\kappa\rho} + \frac{1}{\kappa^2\rho^2} \right) e^{-\kappa\rho},$$

получаем

$$\left(\frac{1}{\kappa\rho} + \frac{1}{\kappa^2\rho^2} \right) e^{-\kappa\rho} = -\frac{4\pi}{\kappa^2} \frac{d}{d\rho} G(\rho),$$

где $G = e^{-\kappa\rho}/(4\pi|\rho|)$ – функция Грина уравнения Гельмгольца.

Умножим обе части соотношения

$$\left(\frac{1}{\varkappa\rho} + \frac{1}{\varkappa^2\rho^2} \right) e^{-\varkappa\rho} = -\frac{4\pi}{\varkappa^2} \frac{d}{d\rho} G(\rho)$$

на $\cos\theta$ и нормировочную константу C и получим

$$\psi_t^{p_z\text{-wave}} \equiv C \left(\frac{1}{\varkappa\rho} + \frac{1}{\varkappa^2\rho^2} \right) e^{-\varkappa\rho} \cos\theta = -C \cos\theta \frac{4\pi}{\varkappa^2} \frac{d}{d\rho} G(\rho).$$

Следовательно, волновая функция, соответствующая p_z -орбитали может быть выражена через производную функции Грина уравнения Шрёдингера

$$\psi_t^{p_z\text{-wave}}(x, y, z) = \frac{4\pi C}{\varkappa^2} \frac{\partial}{\partial z_0} G(r - r_0).$$

Аналогично можно получить

$$\psi_t^{p_x\text{-wave}}(x, y, z) = \frac{4\pi C}{\varkappa^2} \frac{\partial}{\partial x_0} G(r - r_0) \quad \text{и} \quad \psi_t^{p_y\text{-wave}}(x, y, z) = \frac{4\pi C}{\varkappa^2} \frac{\partial}{\partial y_0} G(r - r_0).$$

При вычислении матричного элемента перехода используем интегральное свойство дельта-функций

$$\int f(x) \delta'(x - x_0) dx = -f'(x_0).$$

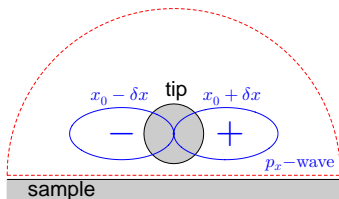
Несложно получить матричные элементы туннельного перехода

$$T_{s \rightarrow t}^{p_x\text{-wave}} \propto \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi_s(\mathbf{r}) \right)_{r=r_0} ; \quad T_{s \rightarrow t}^{p_y\text{-wave}} \propto \left(\frac{\partial}{\partial y} \psi_s(\mathbf{r}) \right)_{r=r_0} \quad \text{и} \quad T_{s \rightarrow t}^{p_z\text{-wave}} \propto \left(\frac{\partial}{\partial z} \psi_s(\mathbf{r}) \right)_{r=r_0} .$$

Наглядная иллюстрация:

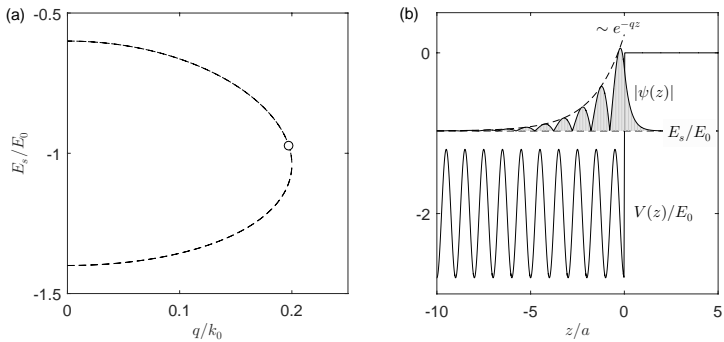
p_x -орбиталь имеет гантелеобразную форму с двумя лепестками и разным знаком волновой функции. Каждый из лепестков будет давать вклад, аналогичный s -орбитали, поэтому

$$I \propto \left| \psi_s(x_0 + \delta x) - \psi_s(x_0 - \delta x) \right|^2 \propto \left| \frac{\partial}{\partial x} \psi_s(x_0) \right|^2 .$$



Вывод: дифференциальная туннельная проводимость перехода при условии доминирующего вклада p -орбиталей электронов иглы определяется суммой $|\partial\psi_s/dx|^2$, $|\partial\psi_s/dy|^2$ и $|\partial\psi_s/dz|^2$, что существенно затрудняет количественную интерпретацию экспериментальных результатов.

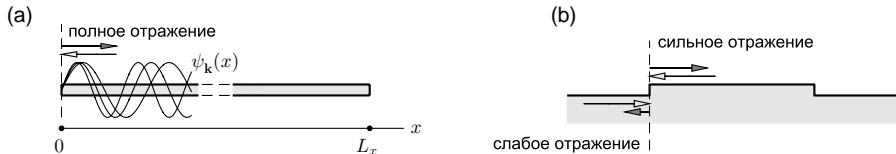
Поверхностные электронные состояния Тамма–Шокли



Обобщение на трёхмерный случай (для состояний с импульсами вдали от границы поверхностной зоны Бриллюэна, $k_{\parallel} \ll \pi/a$):

$$E(\mathbf{k}_{\parallel}, n) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m_0} + E_n(q).$$

Интерференция поверхностных квазичастиц вблизи дефектов (quasiparticle interference, QPI)



Рассмотрим двумерный электронный газ с плоским краем при $x = 0$ или газ поверхностных электронных волн на поверхности кристалла с прямолинейной монотонной ступенькой при $x = 0$. Нормированные волновые функции, имеющие узлы на стенке, можно представить в виде

$$\Psi_k(x, y) = \sqrt{\frac{2}{L_x L_y}} \cdot \sin k_x x \cdot e^{i k_y y} \quad \text{и} \quad |\Psi_k(x, y)|^2 = \frac{2}{L_x L_y} \cdot \sin^2 k_x x.$$

Локальная плотность состояний с учётом спинового вырождения равна

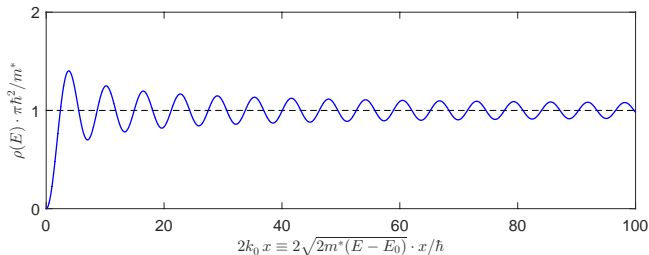
$$\begin{aligned} \rho(E, x, y) &= 2 \cdot \sum_k |\psi_s(\mathbf{r}_0)|^2 \cdot \delta(E_k - E) = \frac{4}{L_x L_y} \cdot \sum_k \sin^2 k_x x \cdot \delta(E_k - E) = \\ &= \frac{4}{L_x L_y} \cdot \frac{L_x}{2\pi} \frac{L_y}{2\pi} \cdot \iint \sin^2 k_x x \cdot \delta(E_k - E) \cdot dk_x dk_y. \end{aligned}$$

Используем представление для дельта-функции $\delta(E_k - E)$ и получим

$$\begin{aligned} \rho(E, x, y) &= \frac{1}{\pi^2} \int \sin^2 k_x x dk_x \int \delta(E_k - E) \cdot dk_y = \frac{2m^*}{\pi^2 \hbar^2} \int_{-k_0}^{k_0} \frac{\sin^2 k_x x}{\sqrt{k_0^2 - k_x^2}} dk_x = \\ &= \frac{2m^*}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{+k_0} \left\{ \frac{1}{\sqrt{k_0^2 - k_x^2}} - \frac{\cos 2k_x x}{\sqrt{k_0^2 - k_x^2}} \right\} dk_x. \end{aligned}$$

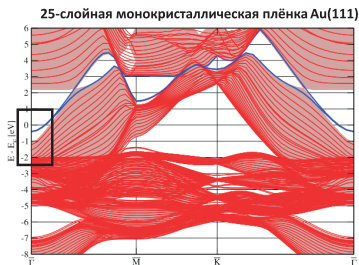
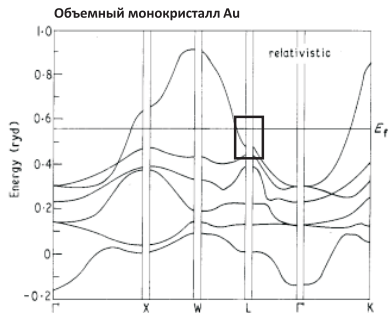
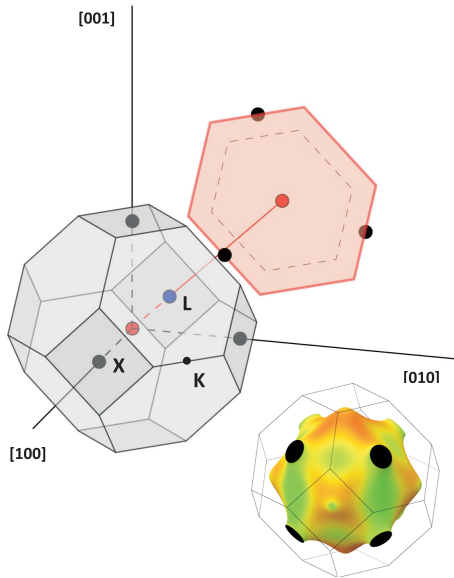
Используя стандартные интегралы и определение функции Бесселя, получаем

$$\rho(E, x) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left\{ 1 - J_0(2k_0 x) \right\} \simeq \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left\{ 1 - \sqrt{\frac{1}{\pi k_0 x}} \cos \left(2k_0 x - \frac{\pi}{4} \right) \right\} \quad \text{при } k_0 x \gg 1.$$



Crommie et al., Nature, vol. 363, 524-527 (1993)

Зонный спектр для благородных металлов (Au, Ag, Cu) *



Квазичастичная интерференция для благородных металлов Au(111), Ag(111) и Cu(111)

Crommie, Lutz, Eigler, Nature, vol. 363, 524-527 (1993)

Crommie, Lutz, Eigler, Heller, Surf. Rev. Lett., vol. 2, 127-137 (1995)

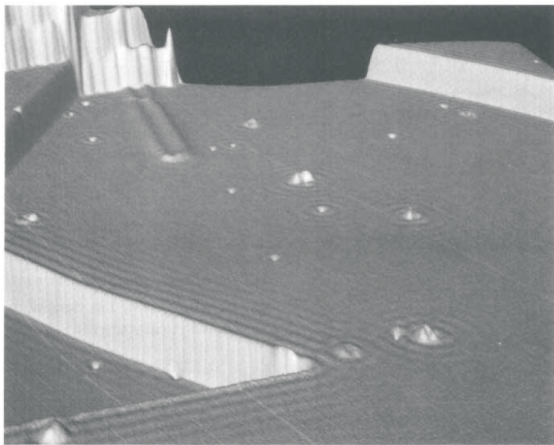
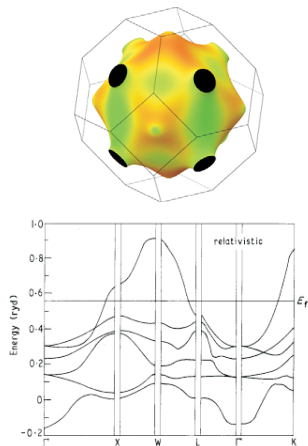


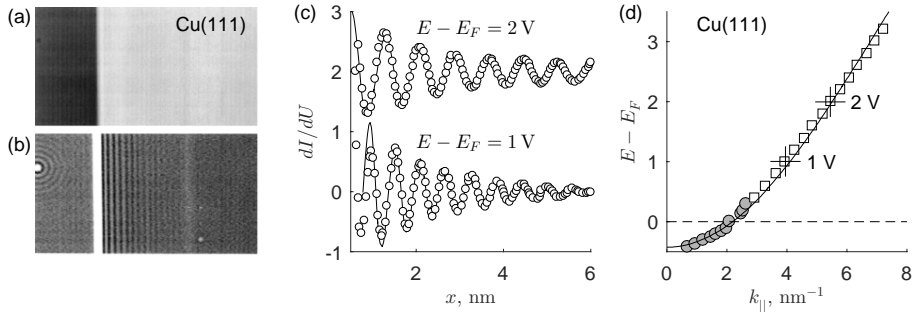
Fig. 1. Constant current STM image of the Cu(111) surface ($V = 0.1$ V, $I = 1.0$ nA). Spatial oscillations with a periodicity of 15 Å are clearly evident emanating from monatomic step edges and point defects. The vertical scale has been exaggerated to display the spatial oscillations more clearly.

Восстановление спектра поверхностных состояний

Квазичастичная интерференция с учётом процессов сбоя фазы ($L_\varphi \neq \infty$)

$$\rho(E, x) = \rho_{bulk} + \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left\{ 1 - r(k_0) e^{-2x/L_\varphi} J_0(2k_0 x) \right\}$$
$$\implies k_0 = k_0(E_F + |e|U) \implies E - E_F = E_{||}(k_0).$$

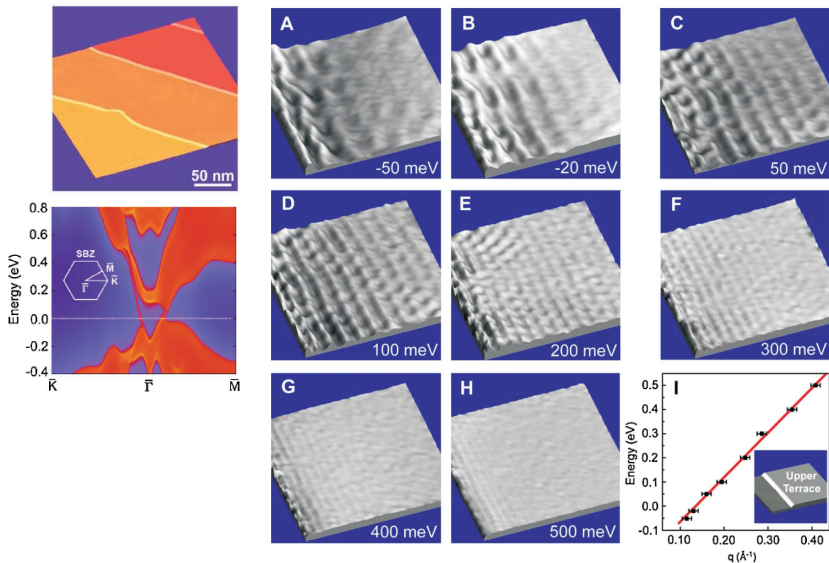
Пример: квазипараболический спектр поверхностных состояний в благородных металлах



Crommie, Lutz, Eigler, Nature, vol. 363, 524-527 (1993)

Bürgi, Jeandupeux, Brune, Kern, Phys. Rev. Lett., vol. 82, 4516-4519 (1999)

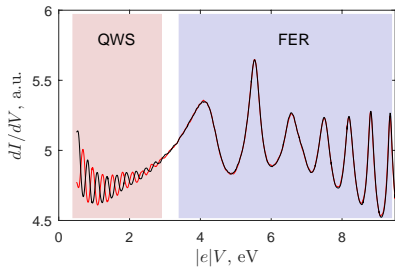
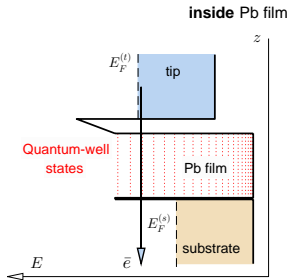
Поверхность топологического изолятора Bi_2Te_3



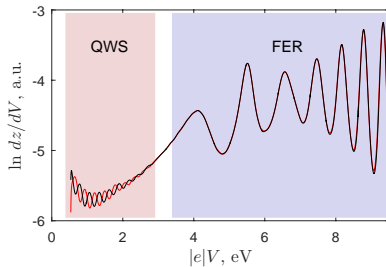
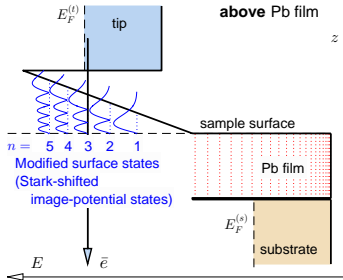
Zhang et al., Phys. Rev. Lett., vol. 103, 266803 (2009)

Резонансное туннелирование через квантово-размерные и поверхностные электронные состояния

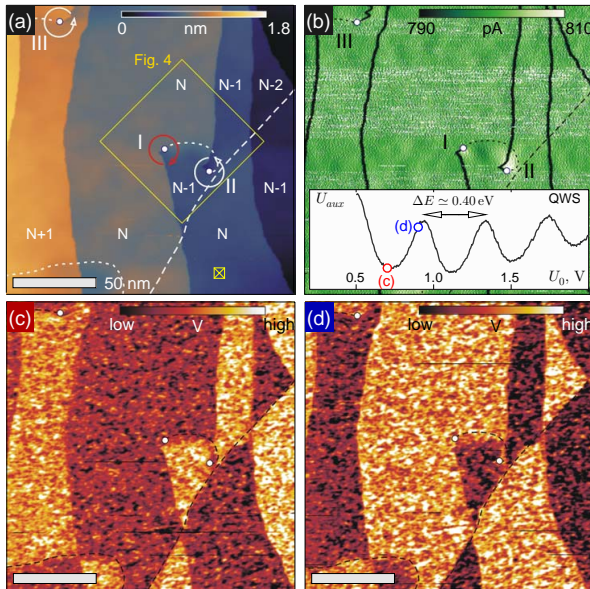
(a) Tunneling via quantum-confined states



(b) Tunneling via quantum-confined states



Визуализация скрытых дефектов в плёнках Pb(111)



$174 \times 174 \text{ nm}^2$, $V_0 = 700$ и 900 mV , $I = 800 \text{ pA}$

Лекция 9

Кулоновская блокада туннелирования. Одноэлектроника

Критерии важности зарядовых эффектов

Естественный масштаб электростатической (кулоновской) энергии есть $E_C = e^2/2C$. Для металлического островка сферической формы и радиуса r в среде с диэлектрической проницаемостью ϵ имеем $C \simeq \epsilon r$, поэтому кулоновская энергия равна

$$E_C \simeq \frac{e^2}{2\epsilon r}.$$

Необходимым условием наблюдения эффектов дискретности заряда является $E_C \gg k_B \Theta$, иначе особенности транспортных свойств, обусловленные зарядовыми эффектами, будут размыты температурными флуктуациями (Θ – абсолютная температура). Учитывая, что в металлах $\mu \sim e^2/a$, где a – межатомное расстояние, получаем

$$\frac{E_C}{k_B \Theta} \sim \frac{e^2}{\epsilon r} \cdot \frac{1}{k_B \Theta} \sim \frac{e^2}{a} \cdot \frac{a}{\epsilon r} \cdot \frac{1}{k_B \Theta} \sim \frac{\mu}{k_B \Theta} \cdot \frac{a}{\epsilon r} \gg 1, \quad \text{если} \quad \frac{r}{a} \ll \frac{1}{\epsilon} \frac{\mu}{k_B \Theta} \quad (*).$$

По мере уменьшения размеров островка зарядовые эффекты могут проявиться раньше эффектов размерного квантования энергетического спектра. Энергетический интервал δE между уровнями размерного квантования можно оценить как отношение химического потенциала μ к числу электронов N в островке. Поскольку число электронов $N \sim (r/a)^3$ зависит от отношения между объёмом островка r^3 и размером элементарной ячейки a^3 , то

$$\frac{E_C}{\delta E} \sim \frac{e^2}{\epsilon r} \cdot \frac{1}{\mu} \left(\frac{r}{a}\right)^3 \sim \frac{e^2}{a\mu} \cdot \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \sim \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \gg 1, \quad \text{если} \quad \frac{r}{a} \gg \sqrt{\epsilon} \quad (**).$$

Объединяя полученные условия (*) и (**), мы можем сформулировать критерий обнаружения одноэлектронных эффектов в туннельных контактах с металлическим островком мезоскопического размера

$$\sqrt{\epsilon} \ll \frac{r}{a} \ll \frac{1}{\epsilon} \frac{\mu}{k_B \Theta}.$$

Удивительно, что при таких размерах гранулы (до 100 нм) могут содержать колоссальное число электронов (порядка 10^8), то тем не менее можно регистрировать процесс переходов отдельных электронов.

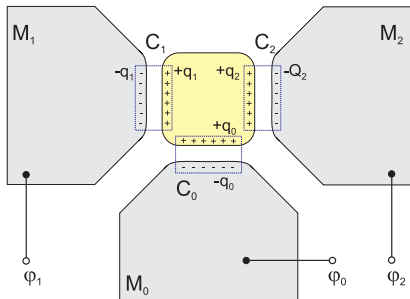
Для наблюдения эффектов дискретности заряда необходимо ограничить туннельную проводимость системы и подавить токи утечки. При наличии емкостной и резистивной связи между одним из электродов и островком (RC -цепочка) избыточный заряд на островке может утекать за характерное время $\Delta t \sim RC$. Следовательно, в соответствии с принципом неопределенности, избыточная кулоновская энергия определена с точностью до величины

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t} \sim \frac{\hbar}{RC}.$$

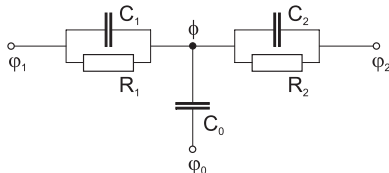
Следовательно, эффекты дискретности заряда не будут маскироваться квантовыми флуктуациям, если

$$\frac{E_C}{\Delta E} \sim \frac{e^2}{C} \cdot \frac{RC}{\hbar} \gg 1, \quad \text{если} \quad R \gg \frac{\hbar}{e^2} = 25.8 \cdot 10^3 \, \Omega.$$

Одноэлектронный транзистор: эквивалентная схема



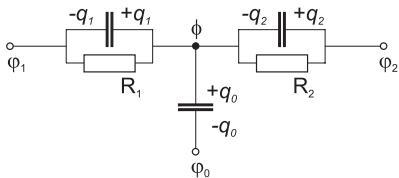
Single electron transistor (SET)



Пусть φ_1 и φ_2 есть электрические потенциалы металлических электродов 1 и 2, потенциал управляющего электрода (gate) есть φ_0 . Туннельные промежутки $M_1 - G$, $M_2 - G$ и $M_0 - G$ характеризуются емкостями C_1 , C_2 и C_0 , соответственно. Отметим, что туннельная проводимость перехода между островком и затвором обычно пренебрежимо мала за счёт большей ширины туннельного зазора.

При ненулевой разности потенциалов между электродами и островком на обкладках эквивалентных конденсаторов будут возникать заряды: $-q_1$ и $+q_1$ на конденсаторе C_1 , $-q_2$ и $+q_2$ на конденсаторе C_2 , $-q_0$ и $+q_0$ на конденсаторе C_0 (см. рисунок).

Заряды и потенциалы



Пусть ϕ есть электрический потенциал островка, тогда

$$\phi = \varphi_1 + \frac{q_1}{C_1} = \varphi_2 + \frac{q_2}{C_2} = \varphi_0 + \frac{q_0}{C_0}.$$

Пусть $Q = q_1 + q_2 + q_0 = ne$ есть избыточный заряд островка; n – число избыточных электронов на островке, которое может быть как положительным, так и отрицательным.

Выразим потенциал гранулы ϕ и индуцированные заряды q_1 , q_2 и q_0 через известные потенциалы электродов и полный заряд островка

$$\phi = \frac{ne}{C} + \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right),$$

$$q_i = \frac{C_i}{C} ne + C_i \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right) - C_i \varphi_i, \quad i = \{0, 1, 2\},$$

где $C = C_0 + C_1 + C_2$ – полная ёмкость системы.

Электростатическая («внутренняя») энергия одноэлектронного транзистора

Пренебрегая взаимной ёмкостью металлических электродов, мы можем записать кулоновскую энергию системы с n избыточными электронами на острове как сумму энергий трёх локализованных «конденсаторов»

$$E(n) = \frac{C_0}{2} (\varphi_0 - \phi)^2 + \frac{C_1}{2} (\varphi_1 - \phi)^2 + \frac{C_2}{2} (\varphi_2 - \phi)^2.$$

Поставим в это выражение потенциал острова

$$\phi = \frac{ne}{C} + \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right)$$

и после преобразований получим кулоновскую энергию системы

$$E(n) = \frac{n^2 e^2}{2C} + E_0,$$

где

$$E_0 = \frac{1}{2C} \left\{ C_0 C_1 (\varphi_0 - \varphi_1)^2 + C_1 C_2 (\varphi_1 - \varphi_2)^2 + C_0 C_2 (\varphi_0 - \varphi_2)^2 \right\}$$

есть часть кулоновской энергии системы, которая не зависит от числа избыточных электронов, и, следовательно, для заданной системы электродов и потенциалов является постоянной величиной.

Работа внешних источников

Следует учесть, что кулоновская энергия $E(n)$ включает работу A^{bat} , выполняемую «внешними» источниками напряжения (battery), которые поддерживают неизменными потенциалы электродов при изменении зарядов на обкладках «конденсаторов». Вычислим работу внешних источников по перемещению одного дополнительного электрона на островок. Из выражения для зарядов следует, что добавление лишнего электрона ($n \rightarrow n + 1$) увеличивает заряд на обкладках каждого конденсатора на величину

$$\delta q_i \equiv q_i \Big|_{n+1} - q_i \Big|_n = \frac{C_i}{C} e, \quad i = \{0, 1, 2\}.$$

Следовательно, для того, чтобы заряд внешних обкладок конденсаторов, соединённых с соответствующими источниками напряжения изменился на $-eC_i/C$, каждый источник должен совершить работу равную $-e\varphi_i C_i/C$. Если дополнительный электрон, который потом перейдет на островок, поставляется k -ым источником напряжения, то работа этого источника по переносу дополнительного электрона на внешнюю обкладку конденсатора равна $e\varphi_k$. Полная работа всех внешних источников напряжения для процесса по перемещению одного дополнительного электрона на островок через k -ый туннельный переход равна

$$A_k^{bat} = e\varphi_k - e\varphi_k \frac{C_k}{C} + \sum_{i \neq k} (-e)\varphi_i \frac{C_i}{C} = e\varphi_k - e \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right).$$

Это соотношение также можно переписать в симметризованном виде

$$A_k^{bat} = \sum_i e \frac{C_i}{C} (\varphi_k - \varphi_i).$$

«Свободная» энергия одноэлектронного транзистора

Щелкачев, Фоминов, *Электрический ток в мезоскопических системах: кулоновская блокада и квантовые точечные контакты* (учебное пособие МФТИ, 2010).

Под свободной энергией системы, имеющей n избыточных электронов на островке, будем понимать разность кулоновской энергии $E(n)$ и работы сторонних источников напряжения по перемещению n электронов через k -ый электрод

$$F_k(n) = E(n) - nA_k^{bat} = \frac{n^2 e^2}{2C} - ne\varphi_k + ne \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right) + E_0,$$

Целесообразность введения свободной энергии связана со следующим обстоятельством. Если бы мы анализировали свойства изолированной системы, то параметры основного и метастабильных состояний можно было бы определить из условия минимума внутренней энергии системы E . Однако для системы с источниками энергии, состояния равновесия должны соответствовать экстремуму другого термодинамического потенциала $E - A^{bat}$.

Для самостоятельного размышления*: Если «внутренняя» энергия заряженного конденсатора равна $E = q^2/2C$, то «свободная» энергия конденсатора для заданной разности потенциалов U равна

$$F = E - A^{bat} = \frac{q^2}{2C} - q \cdot U = \frac{1}{2C} (q - CU)^2 - \frac{CU^2}{2}.$$

Минимуму «внутренней» энергии соответствует разряженное состояние ($q = 0$), минимуму «свободной» энергии соответствует состояние с зарядом $q = CU$.

Иллюстрация: энергия и работа для конденсатора*

Задача (Иродов 2.149): имеется плоский воздушный конденсатор ($\varepsilon = 1$), площадь пластин которого равна S . Какую работу против электрических сил надо совершить, чтобы изменить расстояние между обкладками от w_1 до w_2 ?

Напоминание: ёмкость плоского конденсатора в системе СГС равна $C = S/(4\pi w)$, где w – ширина зазора.

Случай 1: пусть задан заряд q на обкладках конденсатора.

Электрическое поле внутри плоского конденсатора однородно и не зависит от ширины зазора: $E = 4\pi\sigma$, где $\sigma = q/S$ – плотность заряда, которая не зависит от w .

Плотность силы, действующая на обкладку конденсатора: $\mathbf{f} = -\mathbf{n} E^2/8\pi = -\mathbf{e}_x 2\pi\sigma^2$. Полная сила равна $F_x = f_x \cdot S = -2\pi\sigma^2 \cdot S = -2\pi q^2/S$ не зависит от w .

Работа внешних сил против электростатической силы равна

$$A = - \int_{w_1}^{w_2} F_x dw = \frac{2\pi q^2}{S} \int_{w_1}^{w_2} dw = \frac{2\pi q^2}{S} \cdot (w_2 - w_1).$$

Работа внешних сил в точности равна изменению электростатической энергии поля внутри конденсатора

$$\Delta E = \frac{q^2}{2C_2} - \frac{q^2}{2C_1} = \frac{2\pi q^2}{S} w_2 - \frac{2\pi q^2}{S} w_1 = \frac{2\pi q^2}{S} (w_2 - w_1).$$

Случай 2: пусть задана разность потенциалов U между обкладками конденсатора.

Плотность заряда и электрическое поле внутри конденсатора зависят от ширины зазора: $\sigma(w) = q/S = C(w)U/S$ и $E(w) = 4\pi\sigma(w)$, где $C(w) = S/(4\pi w)$ – ёмкость. Плотность силы, действующая на обкладку конденсатора: $\mathbf{f} = -\mathbf{n}E^2(w)/8\pi = -\mathbf{e}_x 2\pi\sigma^2(w)$. Полная сила равна $F_x = f_x \dot{S} = -2\pi\sigma^2(w) \cdot S = -U^2/(8\pi w^2) \cdot S$.

Работа внешних сил против электростатической силы равна

$$A = \int_{w_1}^{w_2} \frac{SU^2}{8\pi} \frac{dw}{w^2} = \frac{SU^2}{8\pi} \cdot \left(\frac{1}{w_1} - \frac{1}{w_2} \right) = \frac{SU^2}{8\pi} \cdot \frac{(w_2 - w_1)}{w_1 w_2}.$$

Вычислим изменение электростатической энергии поля внутри конденсатора

$$\Delta E = \frac{C_2 U^2}{2} - \frac{C_1 U^2}{2} = \frac{SU^2}{8\pi w_2} - \frac{SU^2}{8\pi w_1} = -\frac{SU^2}{8\pi} \cdot \frac{(w_2 - w_1)}{w_1 w_2} \implies \Delta E \neq A!$$

Вычислим работу внешней батареи по перемещению избыточного заряда

$$A^{bat} = (q_2 - q_1) \cdot U = (C_2 - C_1) \cdot U^2 = \frac{SU^2}{4\pi w_2} - \frac{SU^2}{4\pi w_1} = -\frac{SU^2}{4\pi} \cdot \frac{(w_2 - w_1)}{w_1 w_2}.$$

Энергетический баланс для заданного U записывается в виде: $A + A^{bat} = \Delta E$.

Можно показать, что работа внешних сил равна изменению «свободной» энергии

$$\Delta F = \left(\frac{C_2 U^2}{2} - q_2 \cdot U \right) - \left(\frac{C_1 U^2}{2} - q_1 \cdot U \right) = \left(\frac{C_2 U^2}{2} - \frac{C_1 U^2}{2} \right) - (q_2 - q_1) \cdot U = A.$$

Одноэлектронный транзистор в состоянии равновесия

Рассмотрим одноэлектронный транзистор в состоянии термодинамического равновесия.

Если $\varphi_1 = \varphi_2$, то электрический ток отсутствует. Для удобства определим потенциалы электродов следующим образом: $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$, $\varphi_0 = \mathcal{V}_0$, тогда

$$\begin{aligned} F_k(n) &= \left\{ \frac{n^2 e^2}{2C} - ne\varphi_k + ne \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right) \right\}_{\varphi_1=0, \varphi_2=0, \varphi_0=\mathcal{V}_0} = \\ &= \frac{n^2 e^2}{2C} + \frac{C_0 \mathcal{V}_0^2}{2C} (C_1 + C_2) + ne \frac{C_0}{C} \mathcal{V}_0. \end{aligned}$$

Отметим, что в этом случае работа всех внешних источников не зависит от того, через какой туннельный контакты электрон перешел на островок: $F(n) = F_k(n)$. После выделения полного квадрата получаем

$$F(n) = E_C \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right)^2 + F_0,$$

где $E_C = e^2/(2C)$ есть характерная кулоновская энергия заряженного островка, а не зависящая от n величина

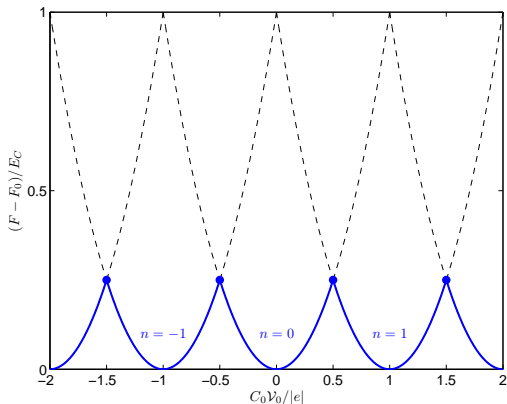
$$F_0 = \frac{C_0 \mathcal{V}_0^2}{2} \left(1 - 2 \frac{C_0}{C} \right)$$

может быть опущена без ограничений общности.

Свободная энергия транзистора в состоянии равновесия

$$F(n) = E_C \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right)^2.$$

Для каждого n свободная энергия является параболической функцией потенциала затвора \mathcal{V}_0 , при этом вершина параболы находится в точке $\mathcal{V}_{0,n} = -ne/C_0 = n|e|/C_0$. Для произвольного \mathcal{V}_0 всегда можно найти такое значение n , для которого свободная энергия достигает минимума; следовательно, именно такое состояние и будет возникать в состоянии равновесия при низких температурах ($E_C \gg k_B \Theta$).



Состояние с n избыточными электронами будет основным состоянием системы при условии

$$-n - \frac{1}{2} \leq \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \leq n + \frac{1}{2}.$$

Заполнение состояний определяется распределением Гиббса

$$w_n \sim \exp \left(-\frac{F(n)}{k_B \Theta} \right)$$

Изменение свободной энергии при туннельных переходах

При низких температурах ($k_B \Theta \ll E_C$) электрический ток, соответствующий переходу электронов из истока в сток через мезоскопический островок, будет возникать, если соответствующее такому процессу изменение свободной энергии будет отрицательным.

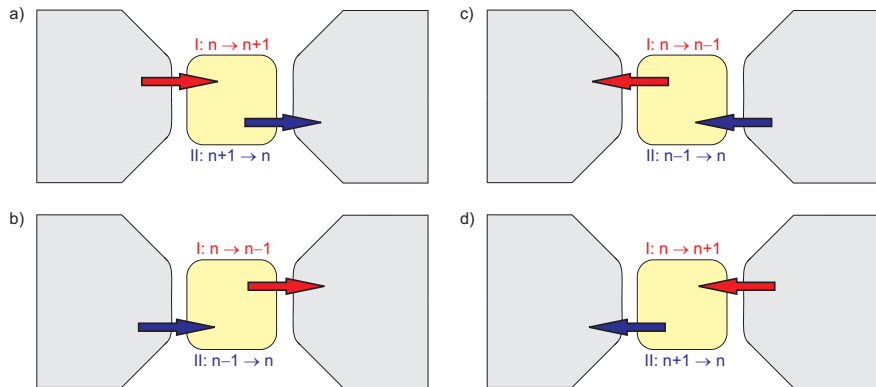
Вычислим изменение свободной энергии системы $\Delta F_k^\pm(n) \equiv F_k(n \pm 1) - F_k(n)$ при переходе одного дополнительного электрона на островок или уходе электрона с островка через k -ый электрод. Используя общее выражение для свободной энергии $F_k(n)$, получаем

$$\Delta F_k^\pm(n) = \left\{ \frac{(n \pm 1)^2 e^2}{2C} - (n \pm 1) e \varphi_k + (n \pm 1) e \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right) \right\} - \left\{ \frac{n^2 e^2}{2C} - n e \varphi_k + n e \left(\frac{C_0}{C} \varphi_0 + \frac{C_1}{C} \varphi_1 + \frac{C_2}{C} \varphi_2 \right) \right\}.$$

Воспользуемся свободой выбора способа отсчета потенциалов, выбирая потенциалы резервуаров 1 и 2 антисимметричным образом ($\varphi_1 = -\mathcal{V}/2$, $\varphi_2 = \mathcal{V}/2$) при этом $\varphi_0 = \mathcal{V}_0$. После несложных алгебраических преобразований переходим к более простой форме

$$\Delta F_1^\pm(n) = \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} \pm \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) \pm \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \mathcal{V} \right\},$$
$$\Delta F_2^\pm(n) = \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} \pm \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) \mp \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} \right\}.$$

Типы возможных туннельных переходов в одноэлектронном транзисторе



Процессы (c) и (d) являются обращёнными во времени версиями процессов (a) и (b).

Процесс типа А

Процесс будет протекать, если полное изменение свободной энергии системы в ходе указанного двухстадийного перехода

$$\begin{aligned}\Delta F_1^+(n) + \Delta F_2^-(n+1) &= \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} + \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \mathcal{V} \right\} + \\ &+ \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} - \left(n + 1 + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} \right\} = \frac{e^2}{C} \frac{(C_0 + 2C_2 + C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} = e\mathcal{V}\end{aligned}$$

будет отрицательным. Следовательно, необходимым условием энергетической выгодности такого процесса является условие $\mathcal{V} > 0$.

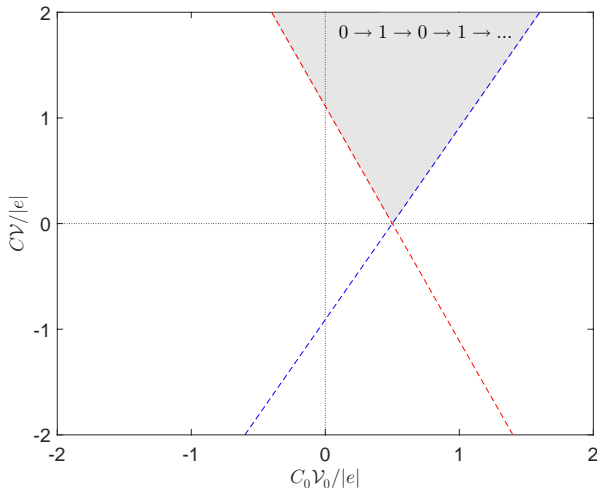
Кроме этого, для каждой стадии процесса $\Delta F_1^+(n) < 0$ и $\Delta F_2^-(n+1) < 0$:

$$\begin{aligned}\Delta F_1^+(n) = \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} + \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \mathcal{V} \right\} < 0 \implies \\ \mathcal{V} > \frac{2|e|}{(C_0 + 2C_2)} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{2C_0}{(C_0 + 2C_2)} \mathcal{V}_0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta F_2^-(n+1) = \frac{e^2}{C} \left\{ -\frac{1}{2} - \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} \right\} < 0 \implies \\ \mathcal{V} > -\frac{2|e|}{(C_0 + 2C_1)} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{2C_0}{(C_0 + 2C_1)} \mathcal{V}_0.\end{aligned}$$

Условие совместности для нормированных параметров

$$\frac{C\nu}{|e|} > \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(n + \frac{1}{2} - \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right) \quad \text{и} \quad \frac{C\nu}{|e|} > \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(-n - \frac{1}{2} + \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right).$$



Процесс типа В

Процесс будет протекать, если полное изменение свободной энергии системы в ходе указанного двухстадийного перехода

$$\begin{aligned}\Delta F_2^-(n) + \Delta F_1^+(n-1) &= \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} + \left(n-1 + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \mathcal{V} \right\} + \\ &+ \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} - \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} \right\} = \frac{e^2}{C} \frac{(C_0 + 2C_2 + C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} = e\mathcal{V}\end{aligned}$$

будет отрицательным. Следовательно, необходимым условием энергетической выгоды такого процесса является условие $\mathcal{V} > 0$.

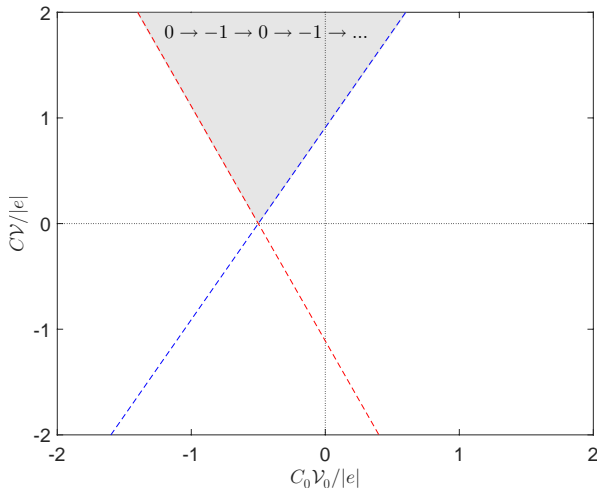
Кроме этого, для каждой стадии процесса $\Delta F_1^+(n-1) < 0$ и $\Delta F_2^-(n) < 0$:

$$\begin{aligned}\Delta F_1^+(n-1) &= \frac{e^2}{C} \left\{ -\frac{1}{2} + \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \mathcal{V} \right\} < 0 \implies \\ &\mathcal{V} > \frac{2|e|}{(C_0 + 2C_2)} \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{2C_0}{(C_0 + 2C_2)} \mathcal{V}_0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta F_2^-(n) &= \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} - \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) + \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} \right\} < 0 \implies \\ &\mathcal{V} > -\frac{2|e|}{(C_0 + 2C_1)} \left(n - \frac{1}{2} \right) + \frac{2C_0}{(C_0 + 2C_1)} \mathcal{V}_0.\end{aligned}$$

Условие совместности для нормированных параметров

$$\frac{C\nu}{|e|} > \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(n - \frac{1}{2} - \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right) \quad \text{и} \quad \frac{C\nu}{|e|} > \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(-n + \frac{1}{2} + \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right).$$



Процесс типа С

Процесс будет протекать, если полное изменение свободной энергии системы в ходе указанного двухстадийного перехода

$$\begin{aligned} \Delta F_1^-(n) + \Delta F_2^+(n-1) &= \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} - \left(n + \frac{C_0 \nu_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \nu \right\} + \\ &+ \frac{e^2}{C} \left\{ -\frac{1}{2} + \left(n + \frac{C_0 \nu_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \nu \right\} = -\frac{e^2}{C} \frac{(C_0 + 2C_2 + C_0 + 2C_1)}{2e} \nu = -e\nu \end{aligned}$$

будет отрицательным. Следовательно, необходимым условием энергетической выгодности такого процесса является условие $\nu < 0$.

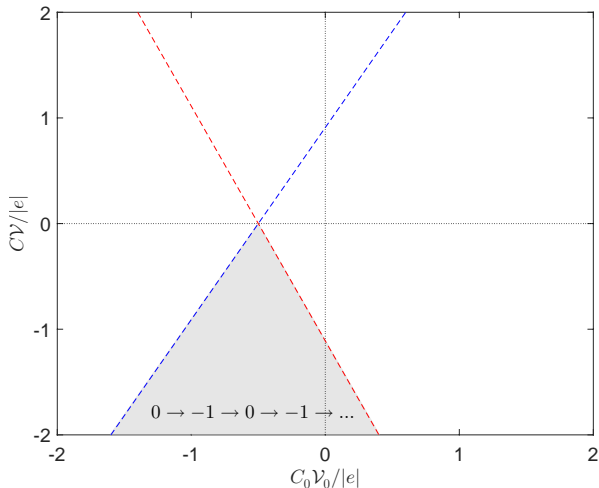
Кроме этого, для каждой стадии процесса $\Delta F_1^-(n) < 0$ и $\Delta F_2^+(n-1) < 0$:

$$\begin{aligned} \Delta F_1^-(n) = \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} - \left(n + \frac{C_0 \nu_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \nu \right\} < 0 \quad \Rightarrow \\ \nu < \frac{2|e|}{(C_0 + 2C_2)} \left(n - \frac{1}{2} \right) - \frac{2C_0}{(C_0 + 2C_2)} \nu_0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta F_2^+(n-1) = \frac{e^2}{C} \left\{ -\frac{1}{2} + \left(n + \frac{C_0 \nu_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \nu \right\} < 0 \quad \Rightarrow \\ \nu < -\frac{2|e|}{(C_0 + 2C_1)} \left(n - \frac{1}{2} \right) + \frac{2C_0}{(C_0 + 2C_1)} \nu_0. \end{aligned}$$

Условие совместности для нормированных параметров

$$\frac{C\nu}{|e|} < \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(n - \frac{1}{2} - \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right) \quad \text{и} \quad \frac{C\nu}{|e|} < \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(-n + \frac{1}{2} + \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right).$$



Процесс типа D

Процесс будет протекать, если полное изменение свободной энергии системы в ходе указанного двухстадийного перехода

$$\begin{aligned} \Delta F_1^-(n-1) + \Delta F_2^+(n) &= \frac{e^2}{C} \left\{ -\frac{1}{2} - \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \mathcal{V} \right\} + \\ &+ \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} + \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} \right\} = -\frac{e^2}{C} \frac{(C_0 + 2C_2 + C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} = -e\mathcal{V} \end{aligned}$$

будет отрицательным. Следовательно, необходимым условием энергетической выгоды такого процесса является условие $\mathcal{V} < 0$.

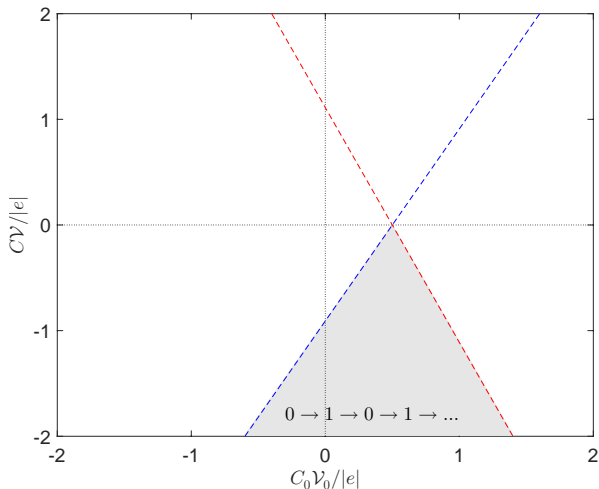
Кроме этого, для каждой стадии процесса $\Delta F_1^-(n-1) < 0$ и $\Delta F_2^+(n) < 0$:

$$\begin{aligned} \Delta F_1^-(n-1) &= \frac{e^2}{C} \left\{ -\frac{1}{2} - \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_2)}{2e} \mathcal{V} \right\} < 0 \implies \\ &\mathcal{V} < \frac{2|e|}{(C_0 + 2C_2)} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \mathcal{V}_0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta F_2^+(n) &= \frac{e^2}{C} \left\{ \frac{1}{2} + \left(n + \frac{C_0 \mathcal{V}_0}{e} \right) - \frac{(C_0 + 2C_1)}{2e} \mathcal{V} \right\} < 0 \implies \\ &\mathcal{V} < -\frac{2|e|}{(C_0 + 2C_1)} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{2C}{(C_0 + 2C_1)} \mathcal{V}_0. \end{aligned}$$

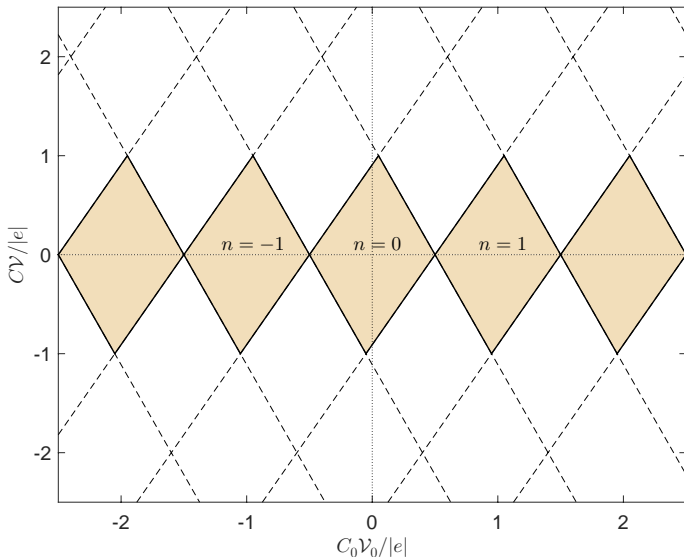
Условие совместности для нормированных параметров

$$\frac{C\nu}{|e|} < \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(n + \frac{1}{2} - \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right) \quad \text{и} \quad \frac{C\nu}{|e|} < \frac{2C}{(C_0 + 2C_2)} \left(-n - \frac{1}{2} + \frac{C_0\nu_0}{|e|} \right).$$



Фазовая диаграмма $\mathcal{V} - \mathcal{V}_0$: Coulomb diamonds

В заштрихованных областях ток при низких температурах отсутствует – кулоновская блокада тунnelирования



Расчёт проводимости одноэлектронного транзистора: основные идеи*

Скорости переходов электронов через первый и второй туннельные переходы:

$$\Gamma_{n \rightarrow n \pm 1}^{(1)} = \frac{1}{e^2 R_1} \cdot \frac{-\Delta F_1^\pm(n)}{1 - \exp(\Delta F_1^\pm(n)/k_B \Theta)} \quad \text{и} \quad \Gamma_{n \rightarrow n \pm 1}^{(2)} = \frac{1}{e^2 R_2} \cdot \frac{-\Delta F_2^\pm(n)}{1 - \exp(\Delta F_2^\pm(n)/k_B \Theta)}.$$

Кинетическое уравнение для функции распределения w_n числа избыточных электронов:

$$\frac{d}{dt} w_n = w_{n+1} \Gamma_{n+1 \rightarrow n} + w_{n-1} \Gamma_{n-1 \rightarrow n} - w_n \Gamma_{n \rightarrow n+1} - w_n \Gamma_{n \rightarrow n-1}.$$

Туннельный ток между истоком и стоком

$$I = e \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n \left\{ \Gamma_{n \rightarrow n-1}^{(1)} - \Gamma_{n \rightarrow n+1}^{(1)} \right\} = e \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n \left\{ \Gamma_{n \rightarrow n+1}^{(2)} - \Gamma_{n \rightarrow n-1}^{(2)} \right\},$$

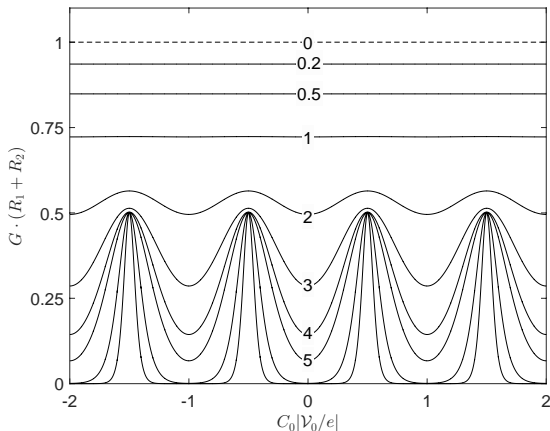
Кондактанс одноэлектронного транзистора

$$G \simeq \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n^{(0)} \left(\frac{1}{R_1 + R_2} \right) \frac{\Delta F_0(n)/2k_B \Theta}{\sinh(\Delta F_0(n)/2k_B \Theta)} \exp[-\Delta F_0(n)/2k_B \Theta].$$

Осцилляции проводимости в зависимости от \mathcal{V}_0

Безразмерные параметры: $\lambda = e^2/2Ck_B\Theta$ и $\xi = C_0\mathcal{V}_0/e$

$$\frac{I}{\mathcal{V}} \simeq \left(\frac{1}{R_1 + R_2} \right) e^{-\lambda/4} \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\lambda(m+\xi)^2} \right)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\lambda(n+\xi+1/2)^2} \frac{\lambda(n+\xi+1/2)}{\sinh \lambda(n+\xi+1/2)}.$$



Демиховский, Вугальтер, *Физика квантовых низкоразмерных структур*, Москва, Логос (2000).

Моделирование SET с реалистичными параметрами

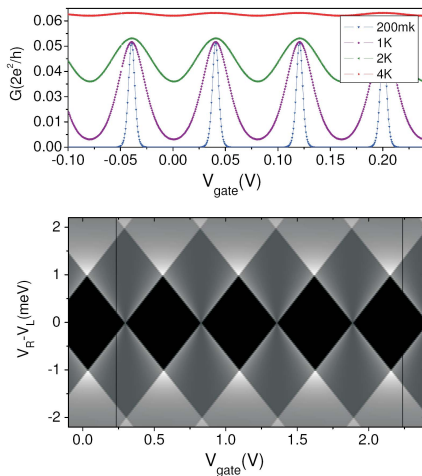


Figure 1.6: (a) Linear conductance as function of gate voltage and temperature. For a metallic island the Coulomb peaks are equally spaced and are directly related to the gate capacitance. (b) Stability diagram obtained within the model described in the text. The gray scale represents the differential conductance dI/dV . The Junction parameter for both graph are similar to that observed in the experiments: $R_L = R_R = 60 \text{ k}\Omega$, $C_L = C_R = 50 \text{ aF}$, $C_G = 2 \text{ aF}$.

Моделирование SET с реалистичными параметрами: кулоновская блокада + размерные эффекты

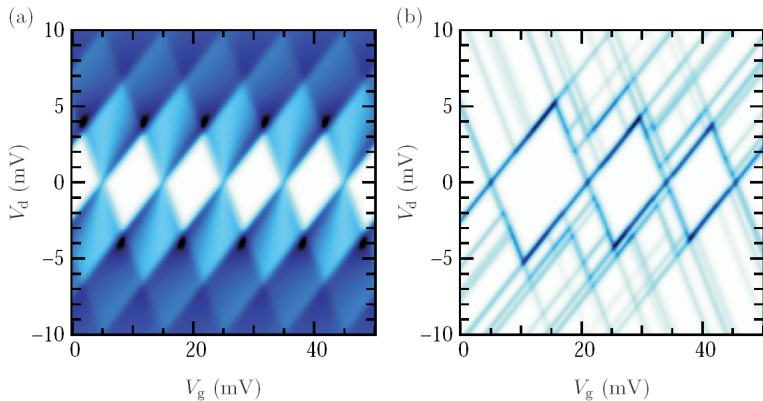


Figure 2.2: Numerically calculated nonlinear conductance. White is zero differential conductance, dark blue is maximum differential conductance. (a) Metallic limit, negligible single particle level spacing $\Delta_1 \ll k_B T$. (b) 4 resolved single particle states ($\Delta_1 \gg k_B T$). The single particle level spacings are from bottom to top 2 meV, 1 meV and 0.5 meV. The temperature $T = 1$ K and the capacitances $C_g = C_s = C_d = 100 \frac{e^2}{k_B}$ are the same in (a) and (b).

Hofheinz, PhD thesis (Grenoble, 2006)

Эксперимент: кулоновская блокада в нанопроволоке

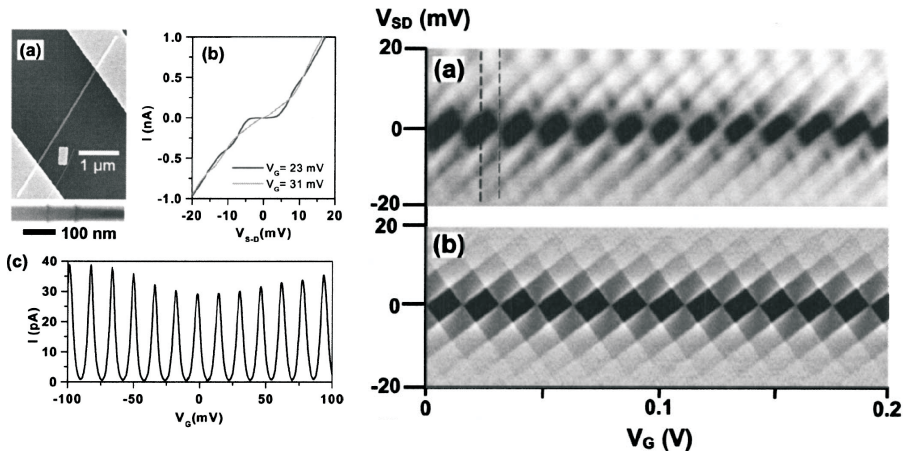


FIG. 3. dI/dV_{SD} plotted as a function of V_G and V_{SD} . Bright areas correspond to a higher value of dI/dV_{SD} . (a) Measurement at $T = 4.2$ K for a 55 nm diameter device. The two vertical lines indicate the origin of the I - V curves shown in Fig. 2(b). (b) Theoretical fit at $T = 0$ K.

Thelander, Martensson, Bjork, Ohlsson, Larsson, Wallenberg, and Samuelson, *Appl. Phys. Lett.* vol. 83, 2052 (2003).

Эксперимент: кулоновская блокада в полупроводниковых наноструктурах

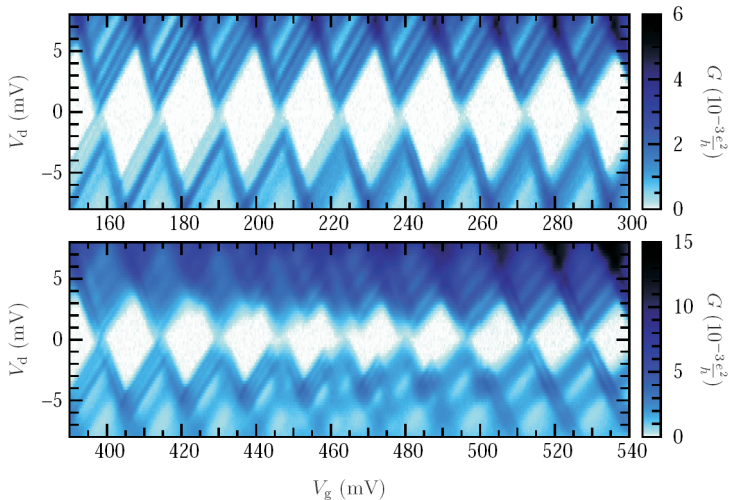


Figure 5.2: 2D-plots of the measured drain-source conductance versus gate and drain voltages. Upper panel: in an unperturbed, very periodic gate voltage range. Lower panel: in an anomalous region where a charge trap is observed. White areas correspond to Coulomb blocked regions (no detectable current).

Hofheinz, PhD thesis (Grenoble, 2006)

Кулоновская блокада и квантовый дизайн одежды :-)



Лекция 10

Туннельный ток в структуре с ферромагнитными берегами. Спиновый вентиль

Спин-поляризованная туннельная микроскопия

Обменное взаимодействие в квантовой механике*

Обменное взаимодействие – квантово-механический эффект, описывающий взаимодействие тождественных частиц и приводящий к зависимости энергии системы частиц от её спина.

Преобразование волновой функции при перестановке тождественных частиц:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_2, s_2) = \alpha \Psi(\mathbf{r}_2, s_2; \mathbf{r}_1, s_1) = \alpha^2 \Psi(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_2, s_2) \implies \alpha^2 = 1 \implies \alpha = \pm 1$$

Электроны – это фермионы, поэтому полная волновая функция должна быть антисимметричной по отношению к перестановке: $\Psi(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_2, s_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, s_2; \mathbf{r}_1, s_1)$. Антисимметричность волновой функции может быть получена двумя способами: пространственная часть волновой функции может быть симметрична, а спиновая – антисимметрична, или наоборот.

Пример: атом гелия $\hat{H} = \mathbf{p}_1^2/2m_0 + \mathbf{p}_2^2/2m_0 - 2e^2/|\mathbf{r}_1| - 2e^2/|\mathbf{r}_2| + e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$.

Собственные функции и собственные энергии задачи имеют вид

Парагелий : $\Psi^{(p)}(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_2, s_2) = \phi_{sym}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \sigma_{asym}(s_1, s_2)$ и $E^{(p)} = E_0 + K + J$

Ортогелий : $\Psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_2, s_2) = \phi_{asym}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \sigma_{sym}(s_1, s_2)$ и $E^{(o)} = E_0 + K - J$

$$K = \iint |\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi_{100}^*(\mathbf{r}_1)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 > 0 \quad \text{и}$$

$$J = \iint \phi_{100}^{(1)}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}^{(2)}(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{100}^{(2)*}(\mathbf{r}_2) \phi_{100}^{(1)*}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 > 0.$$

$s - d$ модель обменного взаимодействия в ферромагнитных металлах

Последовательное описание электронов в магнитном материале является очень сложной задачей в силу сильных спиновых корреляций, которые имеют обменную природу. Одним из простых и эффективных методов решения проблемы является так называемая $s - d$ модель, предложенная Шубиным, Вонсовским и Зинером и сводящая сложную многоэлектронную задачу к эффективному одноэлектронному гамильтониану.

Предполагается, что спины локализованных d -электронов упорядочиваются ферромагнитным образом, формируя среднюю намагниченность образца $\mathbf{M}(\mathbf{r})$. Свободные s -электроны высших оболочек, обеспечивающие металлическую проводимость, взаимодействуют с локализованными d -электронами посредством локального обменного взаимодействия. Эффективный гамильтониан в $s - d$ модели имеет вид зеемановского слагаемого

$$\hat{H}_{s-d} = -J \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -J m_x(\mathbf{r}) \cdot \hat{\sigma}_x - J m_y(\mathbf{r}) \cdot \hat{\sigma}_y - J m_z(\mathbf{r}) \cdot \hat{\sigma}_z,$$

где J – обменная константа, которая имеет размерность энергии; $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r})/M_s$ – единичный вектор в направлении локальной намагниченности, где M_s – намагниченность насыщения; $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ – оператор спина электрона (вектор матриц Паули)

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Оценка параметров $s - d$ модели*

Оценим константу обменного взаимодействия по порядку величины. Очевидно, что константа обменного взаимодействия J связана с температурой Кюри T_C соотношением вида

$$J \sim k_B T_C,$$

где $k_B = 8.6 \cdot 10^{-5}$ эВ/К – постоянная Больцмана. Для сильных ферромагнетиков с температурой Кюри порядка 10^3 К (например, Fe, Co) константа обменного взаимодействия и, соответственно, типичная обменная энергия для электронов может достигать величин порядка 0.1 эВ.

Вместо обменной константы J и вектора $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ часто вводят обменное поле или молекулярное поле Вейсса

$$\mathbf{h}(\mathbf{r}) \equiv J \mathbf{m}(\mathbf{r}),$$

тогда гамильтониан взаимодействия имеет вид зеемановского слагаемого

$$\hat{H}_{s-d} = -\mathbf{h}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\sigma}.$$

Сравним типичную обменную энергию с зеемановской энергией для электрона в магнитном поле $\mu_B B$, где $\mu_B \simeq 5.8 \cdot 10^{-5}$ эВ/Тл – магнетон Бора и B – индукция магнитного поля. Зеемановская энергия порядка 0.1 эВ соответствует сверхсильным магнитным полям порядка 10^3 Тл.

Электронные волны в однородно намагниченном ферромагнетике

Запишем нестационарное уравнение Паули для двухкомпонентной волновой функции

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}) - J \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\sigma},$$

где \hat{H} – эффективный одноэлектронный гамильтониан. Первое и второе слагаемые в \hat{H} соответствуют кинетической и потенциальной энергиям электрона; третье слагаемое $-J \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\sigma}$ есть обменная энергия электрона в ферромагнетике в $s - d$ приближении.

Рассмотрим стационарное состояние, которое описывается двухкомпонентной волновой функцией вида с энергией E_{\parallel}

$$\begin{pmatrix} \Psi^{(1)}(\mathbf{r}, t) \\ \Psi^{(2)}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) \\ \psi^{(2)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \cdot e^{-iE_{\parallel} t/\hbar}$$

и перейдём к стационарному матричному уравнению Паули

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) \\ \psi^{(2)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_{\parallel} \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) \\ \psi^{(2)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

Рассмотрим одномерную задачу рассеяния и введём ось ξ вдоль направления движения электрона, тогда

$$\hat{H}_\xi = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{d\xi^2} + U_0 - J \mathbf{m} \cdot \hat{\sigma}.$$

Введем систему координат, в которой ось z направлена вдоль вектора намагниченности \mathbf{m} . Выберем ось z в качестве оси квантования спина, тогда матрица $-J \mathbf{m} \cdot \hat{\sigma}$ приводится к виду диагональной матрицы

$$-J \mathbf{m} \cdot \hat{\sigma} = -J m_z \hat{\sigma} = \begin{pmatrix} -J & 0 \\ 0 & +J \end{pmatrix}.$$

В этом случае в качестве компонент спинора могут быть выбраны волновые функции: $\psi^{(1)} = \psi_\uparrow(\xi)$ и $\psi^{(2)} = \psi_\downarrow(\xi)$ для частицы со спином параллельно (антипараллельно) локальному полю.

Внутри однородной среды с потенциалом U_0 уравнения Паули сводятся к независимым дифференциальным уравнениям второго порядка с постоянными коэффициентами

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2 \psi_\uparrow}{d\xi^2} + U_0 \psi_\uparrow - J \psi_\uparrow = E_\parallel \psi_\uparrow \quad \text{и} \quad -\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2 \psi_\downarrow}{d\xi^2} + U_0 \psi_\downarrow + J \psi_\downarrow = E_\parallel \psi_\downarrow.$$

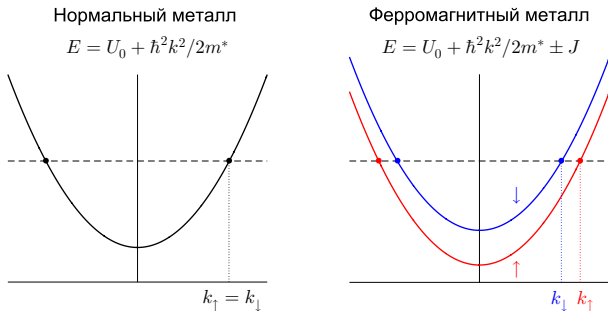
Решения уравнений Паули внутри однородной среды являются плоские бегущие волны постоянной амплитуды

$$\psi_\uparrow = e^{\pm i k_\uparrow \xi} \quad \text{и} \quad \psi_\downarrow = e^{\pm i k_\downarrow \xi}.$$

Волновые вектора для однородных плоских волн определяются соотношениями

$$k_{\uparrow} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E_{\parallel} - U_0 + J)} \quad \text{и} \quad k_{\downarrow} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E_{\parallel} - U_0 - J)}.$$

Таким образом, в ферромагнитном металле для каждого значения E_{\parallel} существуют две пары различных значения волнового вектора $\pm k_{\uparrow}$ или $\pm k_{\downarrow}$ (две спиновые подзоны):



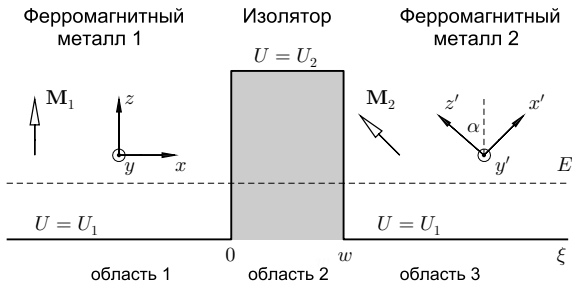
Общее решение в ферромагнитном металле с однородной намагниченностью имеет вид

$$\psi_{\uparrow} = A_{\uparrow} e^{ik_{\uparrow}\xi} + B_{\uparrow} e^{-ik_{\uparrow}\xi} \quad \text{и} \quad \psi_{\downarrow} = A_{\downarrow} e^{ik_{\downarrow}\xi} + B_{\downarrow} e^{-ik_{\downarrow}\xi}.$$

Постановка задачи тунnelирования: общий случай

Slonczewski, Phys. Rev. B, vol. 39, 6995-7002 (1989).

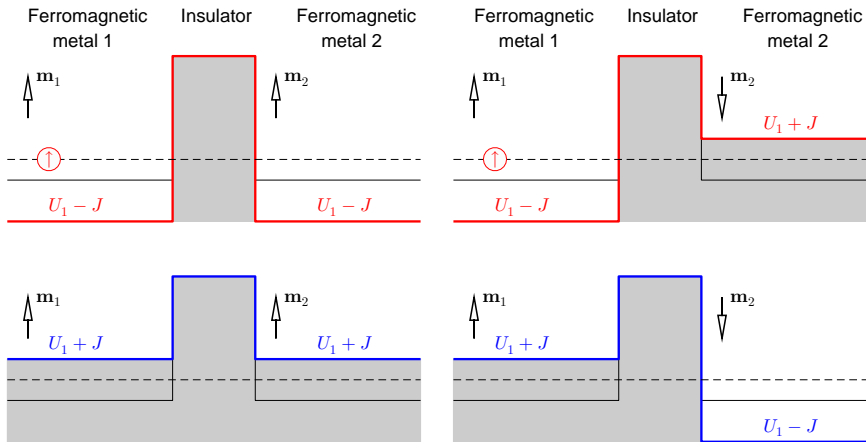
Рассмотрим структуру, состоящую из двух ферромагнитных металлов с однородным распределением намагниченности и слоя изолятора толщины w между ферромагнетиками. Ось ξ ориентирована вдоль тока и перпендикулярно границам раздела. Ориентация векторов \mathbf{M}_1 и \mathbf{M}_2 относительно поверхностей раздела значения не имеет.



Уравнение Паули (т.е. стационарное уравнение Шрёдингера с учётом обменного взаимодействия), описывающее одномерную задачу упругого рассеяния, можно записать в виде

$$\hat{H}_\xi \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix} = E_\parallel \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \hat{H}_\xi = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{d\xi^2} + U(\xi) - J \mathbf{m} \cdot \hat{\sigma}.$$

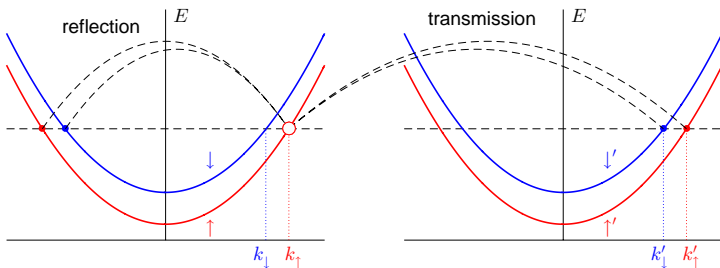
Качественное объяснение



Для выбранных параметров (E_{\parallel} и J) в металле 1 не существует бегущих волн постоянной амплитуды со спином против поля M_1 .

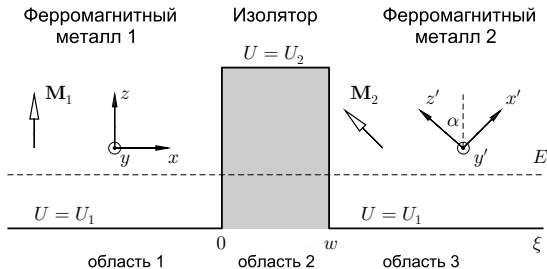
Рассеяние \uparrow – частицы на прямоугольном барьере

Рассмотрим падение спин-поляризованной частицы из нижней спиновой подзоны ферромагнитного металла 1 (спин вверх по отношению к системе (x, y, z)) на изолирующий барьер по нормали и туннелирование этой частицы в ферромагнитный металл 2. Будем считать, что поля \mathbf{M}_1 и \mathbf{M}_2 одинаковы по величине ($|\mathbf{M}_1| = |\mathbf{M}_2| = M_s$) и в общем случае непараллельны.



Внутри однородно намагниченного металла 1 общее решение представляет собой суперпозицию плоских волн, описывающих падающую волну и отражённые волны с сохранением и перевертотом спина

$$\psi_{1\uparrow} = A_{1\uparrow} e^{ik_{\uparrow}\xi} + B_{1\uparrow} e^{-ik_{\uparrow}\xi} \quad \text{и} \quad \psi_{1\downarrow} = B_{1\downarrow} e^{-ik_{\downarrow}\xi}.$$



В области 2 в качестве оси квантования спина можно выбрать ось z , параллельную полю M_1 в металле 1. Внутри изолирующего немагнитного барьера высотой U_2 при условии $E_{\parallel} < U_2$ общее решение имеет вид линейной комбинации четырех нераспространяющихся волн с мнимым волновым вектором $k = i\kappa$, где $\kappa = \sqrt{2m^*(U_2 - E_{\parallel})}/\hbar$ – декремент затухания, независимый от спина частицы

$$\psi_{2\uparrow} = A_{2\uparrow} e^{-\kappa\xi} + B_{2\uparrow} e^{\kappa\xi} \quad \text{и} \quad \psi_{2\downarrow} = A_{2\downarrow} e^{-\kappa\xi} + B_{2\downarrow} e^{\kappa\xi}.$$

В области 3 в качестве оси квантования спина можно выбрать ось z' , параллельную полю M_2 в металле 2, и в соответствии с принципом причинности искать решение в виде плоских волн, бегущих в положительном направлении оси ξ

$$\psi'_{3\uparrow} = A_{3\uparrow} e^{ik_{\uparrow}(\xi-w)} \quad \text{и} \quad \psi'_{3\downarrow} = A_{3\downarrow} e^{ik_{\downarrow}(\xi-w)}.$$

Поворот оси квантования спина

Для записи условий согласования волновых функций необходимо использовать одну и ту же ось квантования (например, z), поэтому компоненты волновой функции нужно модифицировать по стандартным формулам преобразований спиноров.

Напоминаем, что связь между компонентами спинора при повороте оси квантования спина вокруг осей x , y и z даётся следующим матричным соотношением

$$\begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} \psi^{(1),\prime} \\ \psi^{(2),\prime} \end{pmatrix},$$

где

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} \cos \varphi/2 & i \sin \varphi/2 \\ i \sin \varphi/2 & \cos \varphi/2 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \begin{pmatrix} \cos \varphi/2 & \sin \varphi/2 \\ -\sin \varphi/2 & \cos \varphi/2 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

В нашем случае система координат (x', y', z') повернута на угол α вокруг оси y относительно системы (x, y, z) , поэтому для определения компонент волновой функции в осях (x, y, z) в металле 2 следует использовать матрицу перехода \hat{S}_y :

$$\psi_{3\uparrow} = \psi'_{3\uparrow} \cos \frac{\alpha}{2} + \psi'_{3\downarrow} \sin \frac{\alpha}{2} = A_{3\uparrow} e^{ik_{\uparrow}(\xi-w)} \cos \frac{\alpha}{2} + A_{3\downarrow} e^{ik_{\downarrow}(\xi-w)} \sin \frac{\alpha}{2},$$

$$\psi_{3\downarrow} = -\psi'_{3\uparrow} \sin \frac{\alpha}{2} + \psi'_{3\downarrow} \cos \frac{\alpha}{2} = -A_{3\uparrow} e^{ik_{\uparrow}(\xi-w)} \sin \frac{\alpha}{2} + A_{3\downarrow} e^{ik_{\downarrow}(\xi-w)} \cos \frac{\alpha}{2}.$$

Ландау, Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. Москва: Физматлит (2001).

Нормальные электронные волны в ферромагнетике с произвольной осью квантования спина*

Можно предложить альтернативный способ записи общего решения в ферромагнетике без использования матрицы поворота. Запишем уравнение Паули для спинора, используя систему координат (x, y, z)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix} + U_0 \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix} - J m_x \hat{\sigma}_x \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix} - J m_z \hat{\sigma}_z \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix} = E_{\parallel} \begin{pmatrix} \psi^{(1)} \\ \psi^{(2)} \end{pmatrix}.$$

Система уравнений для компонент спинора имеет вид

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi^{(1)} + (U_0 - J m_z) \psi^{(1)} - J m_x \psi^{(2)} &= E_{\parallel} \psi^{(1)}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi^{(2)} - J m_x \psi^{(1)} + (U_0 + J m_z) \psi^{(2)} &= E_{\parallel} \psi^{(2)}. \end{aligned}$$

Поскольку $m_x = -\sin \alpha$ и $m_z = \cos \alpha$ – компоненты единичного вектора намагниченности (см. рисунок на слайдах 7 и 12), то

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi^{(1)} + (U_0 - J \cos \alpha) \psi^{(1)} + J \sin \alpha \psi^{(2)} &= E_{\parallel} \psi^{(1)}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi^{(2)} + J \sin \alpha \psi^{(1)} + (U_0 + J \cos \alpha) \psi^{(2)} &= E_{\parallel} \psi^{(2)}. \end{aligned}$$

Будем искать общее решение системы уравнений для компонент спинора в виде

$$\psi^{(1)} = u \cdot e^{ik\xi} \quad \text{и} \quad \psi^{(2)} = v \cdot e^{ik\xi},$$

тогда для амплитуд волн u и v получаем систему линейных уравнений

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + U_0 - J \cos \alpha - E_{\parallel} \right) \cdot u + J \sin \alpha \cdot v = 0, \quad (*)$$

$$J \sin \alpha \cdot u + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + U_0 + J \cos \alpha - E_{\parallel} \right) \cdot v = 0. \quad (**)$$

Используя условие равенства нулю определителя системы уравнений, получаем спектр разрешённых состояний

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + U_0 - E_{\parallel} + J \cos \alpha \right) \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + U_0 - E_{\parallel} - J \cos \alpha \right) - J^2 \sin^2 \alpha = 0$$

$$\text{или} \quad \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + U_0 - E_{\parallel} \right)^2 - J^2 \cos^2 \alpha - J^2 \sin^2 \alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad E_{\parallel} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - U_0 \mp J.$$

Попутно показали, что волновые вектора спин-поляризованных электронных волн определяются соотношениями

$$k_{\uparrow} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E_{\parallel} - U_0 + J)} \quad \text{и} \quad k_{\downarrow} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E_{\parallel} - U_0 - J)}.$$

1. Подставляя $k = k_{\uparrow}$ в уравнение (*), находим

$$(1 - \cos \alpha) \cdot u + \sin \alpha \cdot v = 0 \quad \text{или} \quad 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} \cdot u + 2 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \cdot v = 0,$$

откуда следует $u = \cos \alpha/2$ и $v = -\sin \alpha/2$. Следовательно, первое линейно-независимое нормированное решение имеет вид

$$\hat{\psi}_{\uparrow} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} e^{ik_{\uparrow} \xi} = \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 \\ -\sin \alpha/2 \end{pmatrix} e^{ik_{\uparrow} \xi}.$$

2. Подставляя $k = k_{\downarrow}$ в уравнение (*), находим

$$(-1 - \cos \alpha) \cdot u + \sin \alpha \cdot v = 0 \quad \text{или} \quad -2 \cos^2 \frac{\alpha}{2} \cdot u + 2 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \cdot v = 0,$$

откуда следует $u = \sin \alpha/2$ и $v = \cos \alpha/2$. Следовательно, второе линейно-независимое нормированное решение имеет вид

$$\hat{\psi}_{\downarrow} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} e^{ik_{\downarrow} \xi} = \begin{pmatrix} \sin \alpha/2 \\ \cos \alpha/2 \end{pmatrix} e^{ik_{\downarrow} \xi}.$$

Таким образом, общее решение является линейной комбинацией базисных состояний:

$$\hat{\psi} = A \hat{\psi}_{\uparrow} + B \hat{\psi}_{\downarrow} = \begin{pmatrix} A \cos \alpha/2 \cdot e^{ik_{\uparrow} \xi} + B \sin \alpha/2 \cdot e^{ik_{\downarrow} \xi} \\ -A \sin \alpha/2 \cdot e^{ik_{\uparrow} \xi} + B \cos \alpha/2 \cdot e^{ik_{\downarrow} \xi} \end{pmatrix}.$$

Сравните с полученным общим решением в области 3 (см. слайд 13).

Рассеяние \uparrow – частицы на прямоугольном барьере: продолжение

Запишем граничные условия – условия непрерывности компонент спиноров и первых производных левой и правой границах барьера:

$$\xi = 0 : \quad A_{1\uparrow} + B_{1\uparrow} = A_{2\uparrow} + B_{2\uparrow}, \quad ik_{\uparrow} A_{1\uparrow} - ik_{\uparrow} B_{1\uparrow} = -\varkappa A_{2\uparrow} + \varkappa B_{2\uparrow}, \\ B_{1\downarrow} = A_{2\downarrow} + B_{2\downarrow}, \quad -ik_{\downarrow} B_{1\downarrow} = -\varkappa A_{2\downarrow} + \varkappa B_{2\downarrow}$$

$$\xi = w : \quad A_{2\uparrow} e^{-\varkappa w} + B_{2\uparrow} e^{\varkappa w} = A_{3\uparrow} \cos \frac{\alpha}{2} + A_{3\downarrow} \sin \frac{\alpha}{2}, \\ -\varkappa A_{2\uparrow} e^{-\varkappa w} + \varkappa B_{2\uparrow} e^{\varkappa w} = ik_{\uparrow} A_{3\uparrow} \cos \frac{\alpha}{2} + ik_{\downarrow} A_{3\downarrow} \sin \frac{\alpha}{2}, \\ A_{2\downarrow} e^{-\varkappa w} + B_{2\downarrow} e^{\varkappa w} = -A_{3\uparrow} \sin \frac{\alpha}{2} + A_{3\downarrow} \cos \frac{\alpha}{2}, \\ -\varkappa A_{2\downarrow} e^{-\varkappa w} + \varkappa B_{2\downarrow} e^{\varkappa w} = -ik_{\uparrow} A_{3\uparrow} \sin \frac{\alpha}{2} + ik_{\downarrow} A_{3\downarrow} \cos \frac{\alpha}{2}.$$

Получаем систему 8 линейных уравнений с 8 неизвестными ($B_{1\uparrow}$, $B_{1\downarrow}$, $A_{2\uparrow}$, $A_{2\downarrow}$, $B_{2\uparrow}$, $B_{2\downarrow}$, $A_{3\uparrow}$ и $A_{3\downarrow}$) для заданной амплитуды падающей волны $A_{1\uparrow}$.

Коэффициенты $B_{1\uparrow}$, $B_{1\downarrow}$, $A_{2\uparrow}$ и $A_{2\downarrow}$ можно выразить через амплитуду падающей волны $A_{1\uparrow}$ и коэффициенты $B_{2\uparrow}$, $B_{2\downarrow}$

$$B_{1\uparrow} = A_{2\uparrow} + B_{2\uparrow} - A_{1\uparrow}, \quad B_{1\downarrow} = A_{2\downarrow} + B_{2\downarrow},$$

$$A_{2\uparrow} = -\frac{2ik_{\uparrow}}{(\kappa - ik_{\uparrow})} a_{1\uparrow} + \frac{(\varkappa + ik_{\uparrow})}{(\varkappa - ik_{\uparrow})} B_{2\uparrow}, \quad A_{2\downarrow} = \frac{(\varkappa + ik_{\downarrow})}{(\varkappa - ik_{\downarrow})} B_{2\downarrow}$$

Для малопрозрачного барьера ($e^{\varkappa w} \gg e^{-\varkappa w}$) получаем окончательные ответы для амплитуд волновых функций внутри барьера

$$B_{2\uparrow} \simeq -\frac{2ik_{\uparrow} e^{-2\varkappa w} [\varkappa^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow} + i\varkappa(k_{\uparrow} - k_{\downarrow}) \cos \alpha]}{(\varkappa - ik_{\uparrow})^2(\varkappa - ik_{\downarrow})} A_{1\uparrow},$$

$$B_{2\downarrow} \simeq \frac{2\varkappa k_{\uparrow} e^{-2\varkappa w} (k_{\downarrow} - k_{\uparrow}) \sin \alpha}{(\varkappa - ik_{\uparrow})^2(\varkappa - ik_{\downarrow})} A_{1\uparrow},$$

и за барьером

$$A_{3\uparrow} \simeq -\frac{4ik_{\uparrow}\varkappa e^{-\varkappa w}}{(\varkappa - ik_{\uparrow})^2} \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\uparrow} \quad \text{и} \quad A_{3\downarrow} \simeq -\frac{4ik_{\uparrow}\varkappa e^{-\varkappa w}}{(\varkappa - ik_{\uparrow})(\varkappa - ik_{\downarrow})} \cdot \sin \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\uparrow},$$

где $A_{1\uparrow}$ – амплитуда падающей волны.

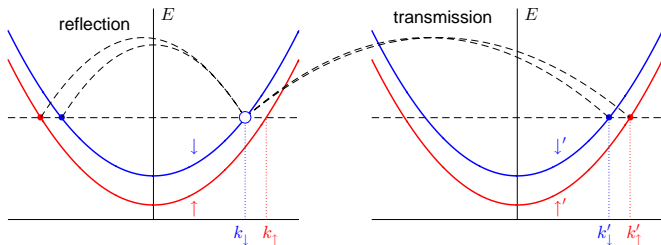
Рассеяние \downarrow – частицы на прямоугольном барьере

Теперь рассмотрим рассеяние частицы со спином вниз в аналогичной системе. Общее решение во всех трёх областях должно иметь следующий вид

$$\psi_{1\uparrow} = B_{1\uparrow} e^{-ik_{\uparrow}\xi}, \quad \psi_{1\downarrow} = A_{1\downarrow} e^{ik_{\downarrow}\xi} + B_{1\downarrow} e^{-ik_{\downarrow}\xi}.$$

$$\psi_{2\uparrow} = A_{2\uparrow} e^{-\kappa\xi} + B_{2\uparrow} e^{\kappa\xi}, \quad \psi_{2\downarrow} = A_{2\downarrow} e^{-\kappa\xi} + B_{2\downarrow} e^{\kappa\xi}.$$

$$\psi'_{3\uparrow} = A_{3\uparrow} e^{ik'_{\uparrow}(\xi-w)}, \quad \psi'_{3\downarrow} = A_{3\downarrow} e^{ik'_{\downarrow}(\xi-w)}.$$



Запишем граничные условия – условия непрерывности компонент спиноров и первых производных левой и правой границах барьера:

$$\xi = 0 : \quad B_{1\uparrow} = A_{2\uparrow} + B_{2\uparrow}, \quad -ik_{\uparrow} B_{1\uparrow} = -\varkappa A_{2\uparrow} + \varkappa B_{2\uparrow},$$

$$A_{1\downarrow} + B_{1\downarrow} = A_{2\downarrow} + B_{2\downarrow}, \quad ik_{\downarrow} A_{1\downarrow} - ik_{\downarrow} B_{1\downarrow} = -\varkappa A_{2\downarrow} + \varkappa B_{2\downarrow},$$

$$\xi = w : \quad A_{2\uparrow} e^{-\varkappa w} + B_{2\uparrow} e^{\varkappa w} = A_{3\uparrow} \cos \frac{\alpha}{2} + A_{3\downarrow} \sin \frac{\alpha}{2},$$

$$-\varkappa A_{2\uparrow} e^{-\varkappa w} + \varkappa B_{2\uparrow} e^{\varkappa w} = ik_{\uparrow} A_{3\uparrow} \cos \frac{\alpha}{2} + ik_{\downarrow} A_{3\downarrow} \sin \frac{\alpha}{2},$$

$$A_{2\downarrow} e^{-\varkappa w} + B_{2\downarrow} e^{\varkappa w} = -A_{3\uparrow} \sin \frac{\alpha}{2} + A_{3\downarrow} \cos \frac{\alpha}{2},$$

$$-\varkappa A_{2\downarrow} e^{-\varkappa w} + \varkappa B_{2\downarrow} e^{\varkappa w} = -ik_{\uparrow} A_{3\uparrow} \sin \frac{\alpha}{2} + ik_{\downarrow} A_{3\downarrow} \cos \frac{\alpha}{2}.$$

Для малопрозрачного барьера ($e^{\varkappa w} \gg e^{-\varkappa w}$) запишем выражения для амплитуд волн в области за барьером

$$A_{3\uparrow} \simeq \frac{4i\varkappa k_{\downarrow} e^{-\varkappa w}}{(\varkappa - ik_{\downarrow})(\varkappa - ik_{\uparrow})} \cdot \sin \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\downarrow} \quad \text{и} \quad A_{3\downarrow} \simeq -\frac{4i\varkappa k_{\downarrow} e^{-\varkappa w}}{(\varkappa - ik_{\downarrow})^2} \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\downarrow}.$$

Плотность туннельного тока в ферромагнетике

Пусть $e = -|e|$ есть элементарный заряд электрона с учётом знака, тогда локальный электрический заряд равен

$$Q = e \sum_{\sigma} \psi_{\sigma} \psi_{\sigma}^* = e \psi_{\uparrow} \psi_{\uparrow}^* + e \psi_{\downarrow} \psi_{\downarrow}^*.$$

Используем исходные нестационарные уравнения Паули (слайд 5) и вычислим скорость изменения электрического заряда

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial t} &= e \frac{\psi_{\uparrow}^*}{i\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial \psi_{\uparrow}}{\partial t} \right) + e \frac{\psi_{\uparrow}}{i\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial \psi_{\uparrow}^*}{\partial t} \right) + e \frac{\psi_{\downarrow}^*}{i\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial \psi_{\downarrow}}{\partial t} \right) + e \frac{\psi_{\downarrow}}{i\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial \psi_{\downarrow}^*}{\partial t} \right) = \\ &= \frac{e}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \left\{ \psi_{\uparrow}^* \nabla^2 \psi_{\uparrow} - \psi_{\uparrow} \nabla^2 \psi_{\uparrow}^* + \psi_{\downarrow}^* \nabla^2 \psi_{\downarrow} - \psi_{\downarrow} \nabla^2 \psi_{\downarrow}^* \right\}. \end{aligned}$$

Это соотношение можно привести к виду (учитываем, что $z - z^* = (a + ib) - (a - ib) = 2i \operatorname{Im} z$)

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \text{где} \quad \mathbf{j} = \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right) \left\{ \operatorname{Im}(\psi_{\uparrow}^* \nabla \psi_{\uparrow}) + \operatorname{Im}(\psi_{\downarrow}^* \nabla \psi_{\downarrow}) \right\}.$$

Для плоскостной системы F-I-F плотность тока не зависит от координаты ξ . Для вычисления плотности туннельного тока будем рассматривать область 3 за барьером, поскольку там для каждой проекции спина существуют только два типа электронных волн, а не четыре (как в областях 1 и 2).

Плотность туннельного тока в области за барьером

Мы показали, что при рассеянии спин-поляризованных частиц в правом ферромагнитном металле ($\xi > w$) возникает следующее распределение электронной плотности

$$\psi'_\uparrow = A_{3\uparrow} e^{ik_\uparrow(\xi-w)}, \quad \psi'_\downarrow = A_{3\downarrow} e^{ik_\downarrow(\xi-w)}.$$

Это соответствует ξ -компоненте плотности туннельного тока

$$j = \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right) \left\{ \text{Im} \left(A_{3\uparrow}^* (ik_\uparrow) A_{3\uparrow} \right) + \text{Im} \left(A_{3\downarrow}^* (ik_\downarrow) A_{3\downarrow} \right) \right\} = \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right) \left\{ k_\uparrow |A_{3\uparrow}|^2 + (\text{Re } k_\downarrow) |A_{3\downarrow}|^2 \right\}.$$

1. При рассеянии \uparrow — частицы амплитуды волн в области за барьером определяются соотношениями

$$A_{3\uparrow} \simeq -\frac{4ik_\uparrow \varkappa e^{-\varkappa w}}{(\varkappa - ik_\uparrow)^2} \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\uparrow} \quad \text{и} \quad A_{3\downarrow} \simeq -\frac{4ik_\uparrow \varkappa e^{-\varkappa w}}{(\varkappa - ik_\uparrow)(\varkappa - ik_\downarrow)} \cdot \sin \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\uparrow}.$$

Это соответствует плотности электрического тока, равной

$$\begin{aligned} j_\uparrow &= \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right) \left\{ k_\uparrow |A_{3\uparrow}|^2 + (\text{Re } k_\downarrow) |A_{3\downarrow}|^2 \right\} \simeq \\ &\simeq e \left(\frac{\hbar k_\uparrow}{m^*} |A_{1\uparrow}|^2 \right) \cdot \frac{16 k_\uparrow \varkappa^2 k_\uparrow e^{-2\varkappa w}}{(\varkappa^2 + k_\uparrow^2)(\varkappa^2 + k_\downarrow^2)} \cdot \left\{ \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right)^2 + \frac{(\text{Re } k_\downarrow)}{k_\uparrow} \frac{(\varkappa^2 + k_\uparrow^2)}{(\varkappa^2 + k_\downarrow^2)} \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right)^2 \right\}. \end{aligned}$$

2. При рассеянии \downarrow – частицы амплитуды волн в области за барьером определяются соотношениями

$$A_{3\uparrow} \simeq + \frac{4i\chi k_{\downarrow} e^{-\kappa w}}{(\chi - ik_{\downarrow})(\chi - ik_{\uparrow})} \cdot \sin \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\downarrow} \quad \text{и} \quad A_{3\downarrow} \simeq - \frac{4i\chi k_{\downarrow} e^{-\chi w}}{(\chi - ik_{\downarrow})^2} \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \cdot A_{1\downarrow}.$$

Это соответствует плотности электрического тока, равной

$$j_{\downarrow} = \left(\frac{e\hbar}{m^*} \right) \left\{ k_{\uparrow} |A_{3\uparrow}|^2 + k_{\downarrow} |A_{3\downarrow}|^2 \right\} \simeq e \left(\frac{\hbar k_{\downarrow}}{m^*} |A_{1\downarrow}|^2 \right) \cdot \frac{16 k_{\downarrow} \chi^2 k_{\downarrow} e^{-2\chi w}}{(\chi^2 + k_{\downarrow}^2)(\chi^2 + k_{\downarrow}^2)} \cdot \left\{ \frac{k_{\uparrow}}{k_{\downarrow}} \frac{(\chi^2 + k_{\downarrow}^2)}{(\chi^2 + k_{\uparrow}^2)} \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right)^2 + \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right)^2 \right\}.$$

3. Определим коэффициенты прохождения как отношение плотности тока к потоку вероятности налетающей частицы (сравните с прозрачностью барьера в немагнитной системе)

$$\mathcal{T}_{\uparrow} = \frac{16 k_{\uparrow} \chi^2 k_{\uparrow} e^{-2\chi w}}{(\chi^2 + k_{\uparrow}^2)(\chi^2 + k_{\uparrow}^2)} \cdot \left\{ \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right)^2 + \frac{(\text{Re } k_{\downarrow})}{k_{\uparrow}} \frac{(\chi^2 + k_{\uparrow}^2)}{(\chi^2 + k_{\downarrow}^2)} \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right)^2 \right\},$$

$$\mathcal{T}_{\downarrow} = \frac{16 k_{\downarrow} \chi^2 k_{\downarrow} e^{-2\chi w}}{(\chi^2 + k_{\downarrow}^2)(\chi^2 + k_{\downarrow}^2)} \cdot \left\{ \frac{k_{\uparrow}}{k_{\downarrow}} \frac{(\chi^2 + k_{\downarrow}^2)}{(\chi^2 + k_{\uparrow}^2)} \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right)^2 + \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right)^2 \right\}.$$

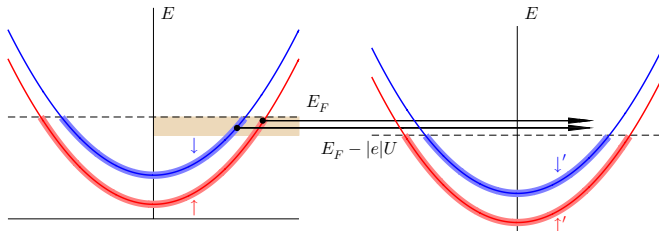
Оценка проводимости туннельного перехода при низких температурах и малых напряжениях

Для простоты будем считать ферромагнитные металлы являются одинаковыми с равными эффективными массами, энергиями Ферми, работой выхода и намагниченностью. Рассмотрим электроны, находящиеся в ферромагнитном металле 1 (эмиттере) в узкой полосе энергий от $\mu - \delta E$ до μ (где $\delta E = |e \delta U|$) и налетающие на барьер слева. Такие электроны будут туннелировать практически с одинаковой вероятностью и, следовательно, создавать зарядовый поток в ферромагнитном металле 2 (коллекторе) равный

$$\delta I = \text{const} \cdot \left\{ T_{\uparrow} + T_{\downarrow} \right\}_{E=\mu} \cdot \delta U \implies G = \left(\frac{\delta I}{\delta U} \right)_{U \rightarrow 0} = \text{const} \cdot \left\{ T_{\uparrow} + T_{\downarrow} \right\}_{E=\mu}$$

где коэффициент учитывает вклад геометрических факторов и формы барьеров вблизи энергии Ферми μ .

Туннелирование в двухподзонном случае



Проводимость перехода в двухподзонном случае

В общем случае в равновесном состоянии могут заполнены обе спиновые подзоны и, следовательно, следует учитывать вклады налетающих частиц с спином вверх и спином вниз:

$$G = \text{const} \cdot \left\{ T_{\uparrow} + T_{\downarrow} \right\}_{E=E_F} = \\ = \text{const} \cdot 16\chi^2 e^{-2\chi w} \frac{(\chi^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow})^2 (k_{\uparrow} + k_{\downarrow})^2}{(\chi^2 + k_{\uparrow}^2)^2 (\chi^2 + k_{\downarrow}^2)^2} \cdot \left\{ 1 + \frac{(\chi^2 - k_{\uparrow}k_{\downarrow})^2 (k_{\uparrow} - k_{\downarrow})^2}{(\chi^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow})^2 (k_{\uparrow} + k_{\downarrow})^2} \cos \alpha \right\}.$$

Введем эффективную спиновую поляризацию

$$P = \frac{(k_{\uparrow} - k_{\downarrow})(\chi^2 - k_{\uparrow}k_{\downarrow})}{(k_{\uparrow} + k_{\downarrow})(\chi^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow})} \quad \text{и} \quad P^2 < 1.$$

Легко видеть, что и в случае неполной спиновой поляризации туннельный ток также зависит от взаимной ориентации векторов намагниченности $G \propto (1 + P^2 \cos \alpha)$, при этом

$$\min G \propto 1 - P^2 \quad \text{и} \quad \max G \propto 1 + P^2.$$

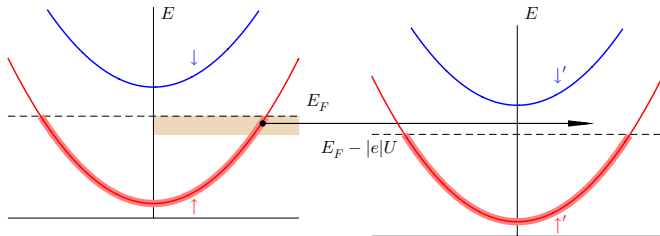
Проводимость перехода в одноподзонаном случае

Если молекулярное поле очень велико, то верхняя спиновая подзона может быть незаполнена, тогда

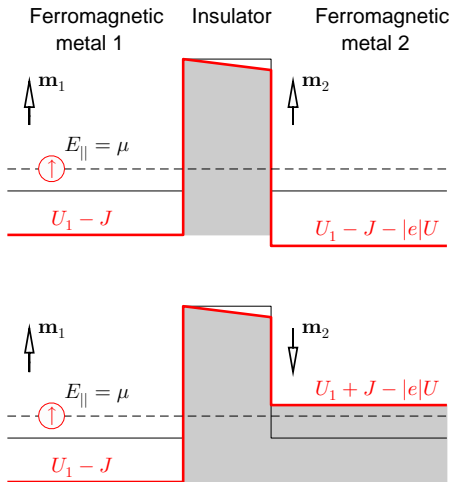
$$G = \text{const} \cdot \left\{ T_{\uparrow} + 0 \right\}_{E=E_F} = \text{const} \cdot \frac{16 k_{\uparrow} \varkappa^2 k_{\uparrow} e^{-2\varkappa w}}{(\varkappa^2 + k_{\uparrow}^2)(\varkappa^2 + k_{\uparrow}^2)} \cdot \frac{1}{2} \cdot (1 + \cos \alpha),$$

В этом выражении все волновые вектора k_{\uparrow} и \varkappa взяты для $E = E_F$.

Вывод: проводимость контакта зависит от угла между M_1 и M_2 и достигает максимума для параллельной конфигурации ($\alpha = 0$) и нуля при антипараллельной конфигурации ($\alpha = \pi$). Туннельный F-I-F переход — идеальный спиновый вентиль.



Форма туннельного барьера перехода в одноподзонном случае при конечном напряжении



Проводимость перехода в одно- и двухподзонном случае с учётом числа распространяющихся мод

Slonczewski, Phys. Rev. B, vol. 39, 6995-7002 (1989).

Если последовательно учесть все множители, появляющиеся из-за суммирования всех распространяющихся мод для плоскостойких структур (см. лекцию 3), то проводимость перехода равна

– в одноподзонном случае:

$$G = \frac{e^2}{8\pi^2\hbar} \frac{\varkappa}{w} \frac{8\varkappa^2 k_{\uparrow}^2 e^{-2\varkappa w}}{(\varkappa^2 + k_{\uparrow}^2)^2} \cdot (1 + \cos \alpha) = \frac{\varkappa}{\hbar w} \left[\frac{|e|}{\pi} \frac{\varkappa k_{\uparrow} e^{-\varkappa w}}{(\varkappa^2 + k_{\uparrow}^2)} \right]_{E=E_F}^2 \cdot (1 + \cos \alpha);$$

– в двухподзонном случае:

$$G = \frac{\varkappa}{\hbar w} \left[\frac{|e|\varkappa}{\pi} \frac{(\varkappa^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow})(k_{\uparrow} + k_{\downarrow}) e^{-\varkappa w}}{(\varkappa^2 + k_{\downarrow}^2)(\varkappa^2 + k_{\uparrow}^2)} \right]_{E=E_F}^2 \cdot (1 + P^2 \cos \alpha),$$

$$\text{где } P = \frac{(k_{\uparrow} - k_{\downarrow})(\varkappa^2 - k_{\uparrow}k_{\downarrow})}{(k_{\uparrow} + k_{\downarrow})(\varkappa^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow})}.$$

Эксперимент: первые свидетельства спин-зависящего туннелирования

Spin-dependent tunneling and tunneling magnetoresistance (TMR): $\Delta G/G_0 \simeq 14\%$

TUNNELING BETWEEN FERROMAGNETIC FILMS

M. JULLIERE

Institut National des Sciences Appliquées, 35031 Rennes Cedex, France

Received 25 June 1975

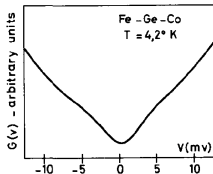


Fig. 1. Conductance versus voltage of Fe-Ge-Co junctions at 4.2K. Ge layer width is about 100 Å.

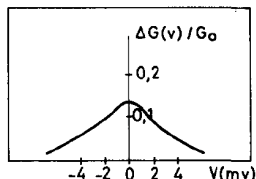
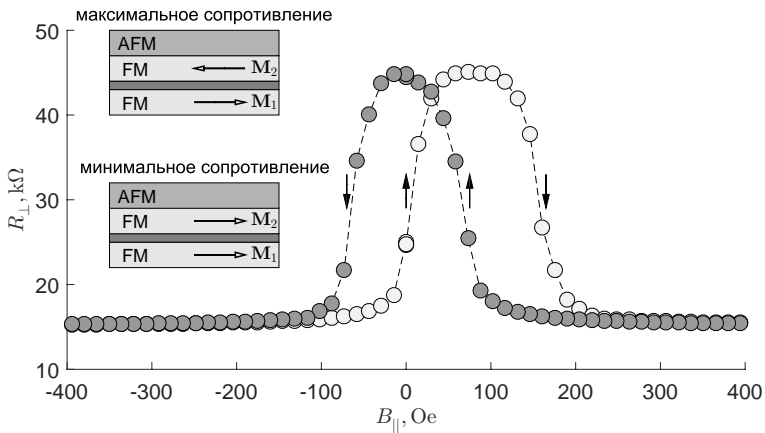


Fig. 2. Relative conductance $(\Delta G/G)_{V=0}$ of Fe-Ge-Co junctions at 4.2K. ΔG is the difference between the two conductance values corresponding to parallel and antiparallel magnetizations of the two ferromagnetic films.

Julliere, Phys. Lett. A, vol. 54, 225-226 (1975).

Эксперимент: туннельный магниторезистивный элемент

Пашенькин, Сапожников, Гусев, Рогов, Татарский, Фраерман,... Письма в ЖЭТФ, т. 111, с. 815-818 (2020).

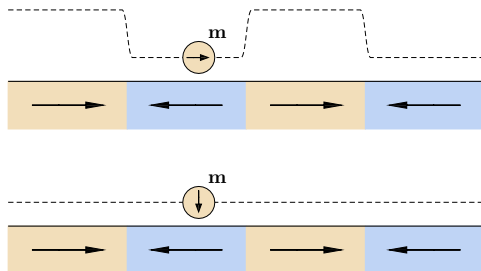


Спин-поляризованная сканирующая туннельная микроскопия

Spin-polarized scanning tunneling microscopy (SP-STM)

Режимы работы:

1. Микроскопия в режиме заданной высоты или заданного тока: $z(x, y) \rightarrow M(x, y)$
2. Сканирующая туннельная спектроскопия: $z(x, y)$ и $dI/dV(x, y) \rightarrow M(x, y)$
3. Модуляционная методика: $z(x, y) + m(t) \rightarrow M(x, y)$



Спин-поляризованная сканирующая туннельная микроскопия: первые результаты

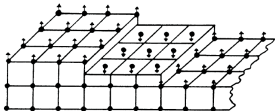


FIG. 1. Topological antiferromagnetic order of the Cr(001) surface with terraces separated by monatomic steps. Different terraces are magnetized in opposite directions. Only surface spins are indicated. (Figure taken from Ref. 7.)

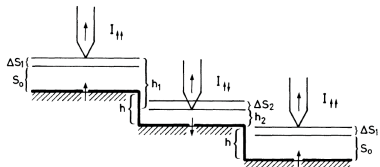
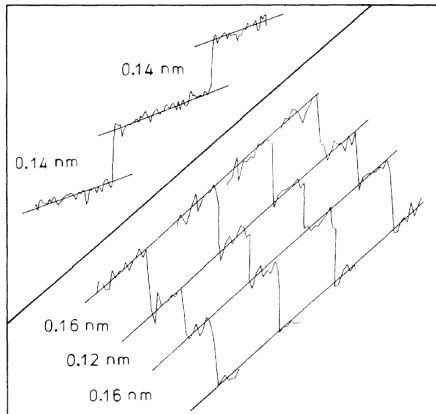


FIG. 4. Schematic drawing of a ferromagnetic tip scanning over alternately magnetized terraces separated by monatomic steps of height h . An additional contribution from SP tunneling leads to alternating step heights $h_1 = h + \Delta S_1 + \Delta S_2$ and $h_2 = h - \Delta S_1 - \Delta S_2$.



Wiesendanger, Güntherodt, Güntherodt, Gambino, Ruf. Phys. Rev. Lett., vol. 111, 247-250 (1990)

Спин-поляризованная сканирующая туннельная микроскопия: исследование магнитных доменов

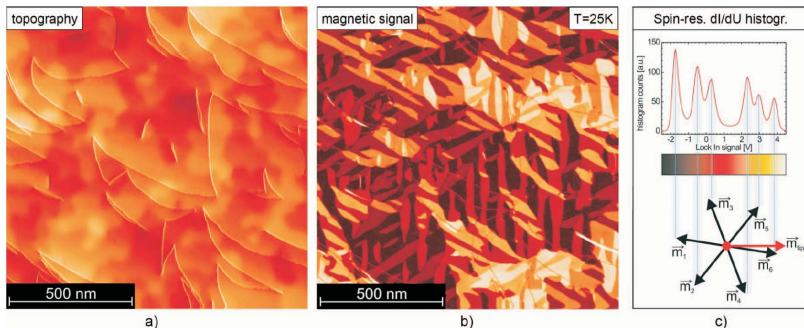


FIG. 17. (Color) Application of SP-STs for magnetic domain imaging with subnanoscale spatial resolution: a thin Dy(0001) film (90 ML) grown epitaxially on a W(110) substrate (a) exhibits a domain structure (b) with six different in-plane orientations of the local magnetization. (c) The six different contrast values in the SP-STM image result from the six different projections of the local sample magnetization onto the local magnetization direction (quantization axis) of the Dy probe tip. From Krause *et al.*, 2006.

Krause, Berbil-Bautista, Hänke, Vonau, Bode, Wiesendanger. *Europhys. Lett.* vol. 76, 637–643 (2006)

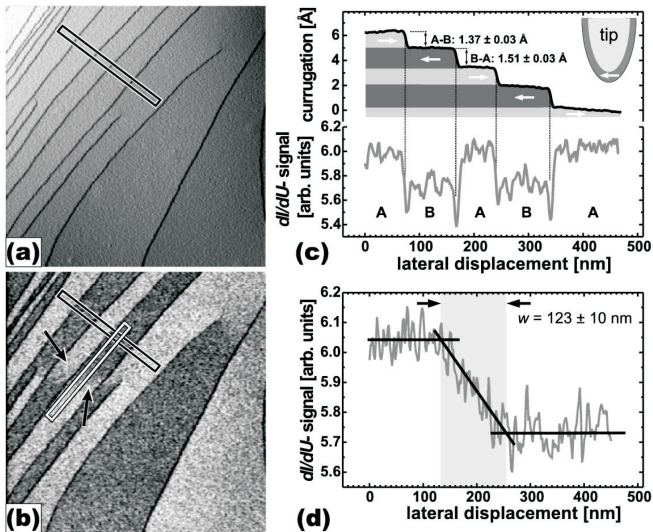


FIG. 2. (a) Large scale constant-current STM image ($1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$) of the Cr (001) surface showing many terraces separated by monatomic steps. Three screw dislocations are visible. The data were again obtained with a Fe-coated probe tip using a tunneling current $I = 0.18$ nA and a sample bias $U = -60$ mV. (b) Spin-polarized spectroscopic image of the same surface region as shown in (a). Again, the measured dI/dU signal at the surface state peak position changes between two levels whenever a monatomic step of the Cr(001) surface is crossed. However, an additional change can now be observed within (001) terraces in the surroundings of screw dislocations (see arrows). This is caused by spin frustration effects in the vicinity of such screw dislocations. (c) The top part

Спин-поляризованная сканирующая туннельная микроскопия: магнитное состояние наночастиц

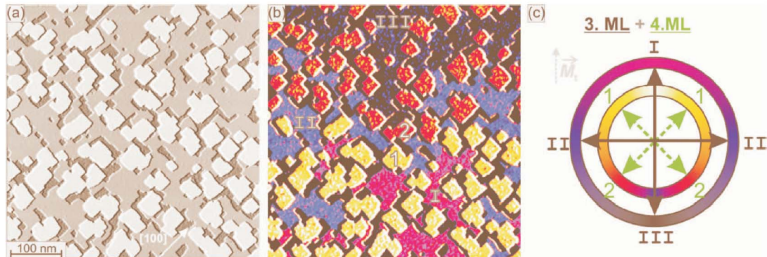


FIG. 20. (Color) Thin film of 3.2 ML Fe on W(001) grown at a temperature $T \sim 525$ K. (a) Constant-current STM topograph showing that patches of 2, 3, and 4 ML Fe on W(001) are exposed at the surface. (b) Simultaneously measured spin-resolved dI/dU map showing three magnetic contrast levels (I–III) on the third monolayer and two magnetic contrast levels (1, 2) on the fourth monolayer. The derived magnetization axes for the third and fourth monolayers are sketched in (c). From von Bergmann, Bode, and Wiesendanger, 2004.

von Bergmann, Bode, and Wiesendanger, J. Magn. Magn. Mater. vol. 305, 279 (2006)

Спин-поляризованная сканирующая туннельная микроскопия: магнитное состояние отдельных атомов

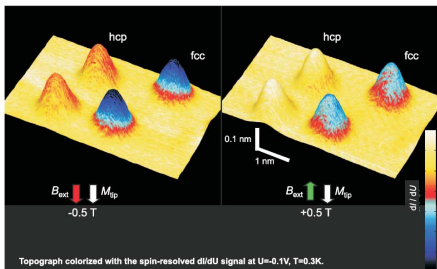


FIG. 54. (Color) SP-STM images of four Co adatoms on Pt(111) obtained with a parallel (left) or antiparallel (right) alignment of the magnetic moments of tip apex atom and Co adatoms. In this case, a sample bias voltage of -0.1 V was chosen for which the electronic contrast, arising from the two inequivalent Co adsorption sites (fcc and hcp), is much stronger than the magnetic contrast arising from the different orientation of the Co moments in the left and in the right image. From Meier *et al.*, 2008.

Meier, Zhou, Wiebe, Wiesendanger, Science, vol. 320, 82–86 (2008)

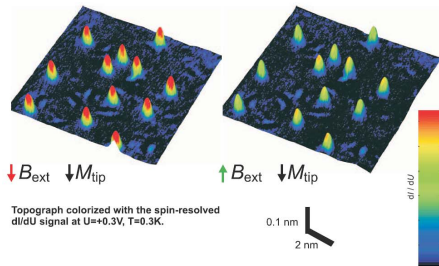


FIG. 55. (Color) Set of two SP-STM images showing several Co adatoms on Pt(111) with their spins aligned either parallel (left) or antiparallel (right) with respect to the spin orientation of the tip apex atom. In this case, a sample bias voltage of $+0.3 \text{ V}$ was chosen for which the observed contrast difference between the left and the right image is primarily dominated by the different magnetic states of the Co adatoms, while the inequivalent Co adsorption sites cannot be distinguished. From Meier *et al.*, 2008.

Лекции 3-4

Квазиклассическое приближение для задач
туннелирования.

Методы Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна и Миллера-Гуда.

Квазистационарные состояния в задачах
квантовой механики

Цель лекции

- Задача рассеяния в неоднородном потенциале произвольного вида не имеет аналитического решения
- Точные аналитические решения для кусочно-постоянного потенциала мало пригодны для описания реальных систем, например, для систем с током всегда есть линейно-растущая компонента электрического потенциала (см. закон Ома $\mathbf{j} = -\sigma \nabla \varphi$). Это обстоятельство препятствует разделению сложного потенциала на сумму локализованных неоднородностей
- Переход от плавных потенциалов к кусочно-постоянной функции позволяет решать задачи рассеяния численно с помощью матриц распространения. Есть проблема – дискретизация может приводить к нефизичным осцилляциям коэффициента отражения и прохождения в зависимости от энергии
- **Что делать?**



Ответ: нужно переходить к квазиклассическому описанию туннелирования

Квазиклассическое приближение.

Модель Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ)

В стационарном одномерном уравнении Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U(z)\psi = E_{\parallel}\psi,$$

которое является дифференциальным уравнением второго порядка с переменными коэффициентами, сделаем замену $\psi(z) = \exp(iS(z)/\hbar)$ и получим уравнение для фазы волновой функции $S(z)$ (т. н. эйконала в теории геометрической оптики)

$$\frac{1}{2m^*} \left(\frac{dS}{dz} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m^*} \left(\frac{d^2S}{dz^2} \right) = E_{\parallel} - U(z).$$

Полагая, что рассматриваемая система по своим свойствам близка к классической, будем искать решение в виде ряда по степеням \hbar , формально рассматривая \hbar как малый параметр:

$$S(z) = S_0(z) + \frac{\hbar}{i} S_1(z) + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 S_2(z) + \dots$$

В нулевом порядке теории возмущений получаем

$$\frac{1}{2m^*} \left(\frac{dS_0}{dz} \right)^2 = E_{\parallel} - U(z) \quad \text{или} \quad \frac{dS_0}{dz} = \pm p(z),$$

которое элементарно интегрируется $S_0(z) = \pm \int p(z) dz$, где $p(z) = \sqrt{2m^*(E_{\parallel} - U(z))}$ есть классический импульс частицы.

В первом порядке теории возмущений получаем

$$\frac{dS_0}{dz} \frac{dS_1}{dz} + \frac{1}{2} \frac{d^2 S_0}{dz^2} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{dS_1}{dz} = -\frac{1}{2} \frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2} \frac{p'(z)}{p(z)}.$$

Интегрируя и опуская постоянную интегрирования, находим

$$S_1(z) = -\frac{1}{2} \ln p(z) = -\ln \sqrt{p(z)}.$$

Подставляя полученное выражение для эйконала $S(z) \simeq \pm \int p(z) dz + i\hbar \ln \sqrt{p(z)}$ в соотношение $\psi(z) = \exp(iS(z)/\hbar)$, получаем два линейно-независимых решения $\psi_+(z)$ и $\psi_-(z)$

$$\psi_{\pm}(z) = \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(z) dz + \frac{i}{\hbar} \cdot i\hbar \ln \sqrt{p(z)}\right) = \frac{1}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(z) dz\right).$$

В первом порядке теории возмущений общее решение для классически-разрешённых областей может быть записано в виде линейной комбинации $\psi^{(+)}(z)$ и $\psi^{(-)}(z)$

$$\psi(z) = \frac{C_1}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(z) dz\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p(z) dz\right) \quad \text{при} \quad E_{\parallel} > U(z).$$

В классически недоступных областях пространства импульс частицы становится чисто мнимым, поэтому общее решение имеет вид

$$\psi(z) = \frac{C'_1}{\sqrt{|p(z)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int |p(z)| dz\right) + \frac{C'_2}{\sqrt{|p(z)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int |p(z)| dz\right) \quad \text{при} \quad E_{\parallel} < U(z).$$

Область применимости квазиклассических выражений

Нулевой порядок:

$$\psi(z) = \text{const} \cdot \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(z) dz\right).$$

Нулевой + первый порядок:

$$\psi(z) = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(z)}} \cdot \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(z) dz\right).$$

Нулевой + первый + второй порядок:

$$\psi(z) = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(z)}} \cdot \left\{ 1 - \frac{i\hbar m^*}{4} \frac{F(z)}{p^3(z)} - \frac{i\hbar m^{*2}}{8} \int \frac{F^2(z)}{p^5(z)} dz \right\} \cdot \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p(z) dz\right),$$

где $F(z) = -dU/dz$ есть классическая сила, действующая на частицу.

Критерий применимости: учёт высших членов разложения для эйконала является избыточным, если

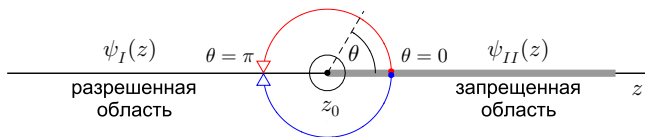
$$\left| m^* \hbar \frac{F(z)}{p^3(z)} \right| \ll 1 \quad \text{или} \quad \left| \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dz} \right| \ll 1.$$

Квазиклассическое описание заведомо неприменимо вблизи классических точек поворота, в которых $E_{\parallel} = U(z)$ и, соответственно, импульс частицы $p(z)$ близок к нулю.

Согласование квазиклассических выражений вблизи точек поворота: метод Цвана (Zwaan)*

Ландау, Лифшиц, т. III, §47

Метод основан на обходе точки поворота по контуру $z = z_0 + \rho e^{i\theta}$ и использовании аналитических свойств функций комплексного аргумента вблизи точки ветвления

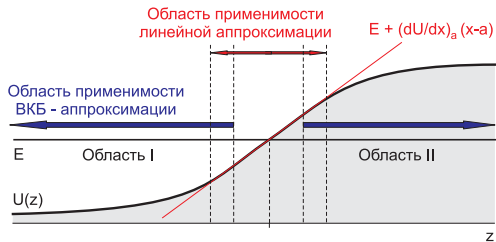


Квазиклассическая волновая функция в запрещенной области

$$\begin{aligned}\psi_{II}(z) &= \frac{A}{(z - z_0)^{1/4}} \cdot \exp\left(-\alpha \int_{z_0}^z \sqrt{z - z_0} dz\right) = A \rho^{-1/4} e^{-i\theta/4} \cdot \exp\left(-\frac{2}{3} \alpha \cdot (z - z_0)^{3/2}\right) \\ \Rightarrow \quad \psi_{II}(\rho, \theta) &= A \rho^{-1/4} e^{-i\theta/4} \cdot \exp\left(-\frac{2}{3} \alpha \rho^{3/2} \cdot \left(\cos \frac{3\theta}{2} + i \sin \frac{3\theta}{2}\right)\right).\end{aligned}$$

Согласование квазиклассических выражений вблизи точек поворота: метод Лангера (Langer)

Метод основан на сравнении приближенного квазиклассического решения и точного решения уравнения Шрёдингера вблизи точки поворота



Вблизи точки поворота потенциал $U(z)$ можно аппроксимировать линейной зависимостью

$$U(z) \simeq E_{\parallel} + \left(\frac{dU}{dz} \right)_{z_0} (z - z_0)$$

и привести одномерное уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_{\parallel} - U(z)) \psi = 0$$

к модельному уравнению Эйри

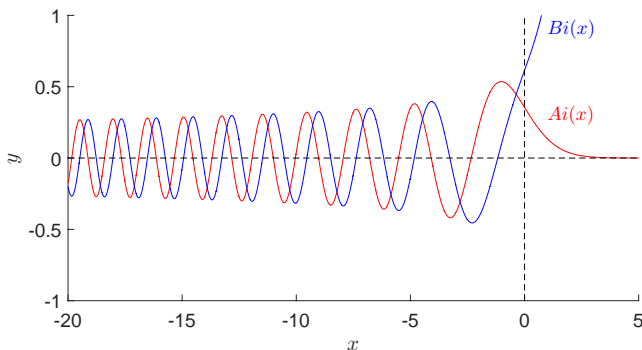
$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} - \xi \cdot \psi = 0, \quad \text{где} \quad \xi = (z - z_0) \sqrt[3]{\frac{2m^*}{\hbar^2} \left| \frac{dU}{dz} \right|_{z_0}}$$

Уравнение Эйри $\psi'' - \xi \cdot \psi = 0$ имеет два линейно независимых решения $Ai(\xi)$ и $Bi(\xi)$, которые имеют следующие асимптотики

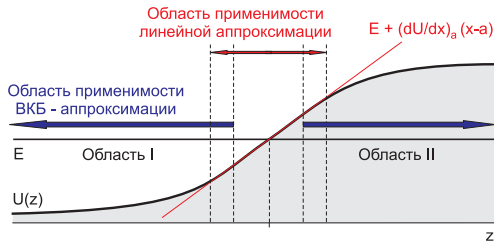
$$Ai(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) du = \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \times \begin{cases} \exp(-2\xi^{3/2}/3) / 2 & \text{при } \xi \rightarrow +\infty, \\ \sin(-2\xi^{3/2}/3 + \pi/4) & \text{при } \xi \rightarrow -\infty; \end{cases}$$

$$Bi(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left\{ \exp\left(-\frac{u^3}{3} + u\xi\right) + \sin\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) \right\} du =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \times \begin{cases} \exp(2\xi^{3/2}/3) & \text{при } \xi \rightarrow +\infty, \\ \cos(-2\xi^{3/2}/3 + \pi/4) & \text{при } \xi \rightarrow -\infty. \end{cases}$$



Для определенности рассмотрим случай, когда запрещенная область находится справа от точки поворота, а разрешенная область - слева:



В этом случае решение в области линейной аппроксимации должно описываться функцией $Ai(x)$.

Правило соответствия для асимптотик функции Эйри $Ai(x)$

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow +\infty \quad \Rightarrow$$

$$1 \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \sin\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow -\infty.$$

Квазиклассическое решение справа от точки поворота в классически запрещённой области в области применимости линейной аппроксимации

$$\psi_{II}(z) = \frac{C'_2}{\sqrt{|p(z)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{z_0}^z |p(z)| dz\right) = \left(2m^* \hbar \left(\frac{dU}{dz}\right)_{z_0}\right)^{-1/6} \frac{C'_2}{\xi^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} \xi^{3/2}\right).$$

Квазиклассическое решение слева от точки поворота в классически разрешённой области в области применимости линейной аппроксимации

$$\begin{aligned} \psi_I(z) &= \frac{C_1}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z) dz\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(x) dx\right) = \\ &= \left(2m^* \hbar \left(\frac{dU}{dz}\right)_{z_0}\right)^{-1/6} \left\{ \frac{C_1}{|\xi|^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} i |\xi|^{3/2}\right) + \frac{C_2}{|\xi|^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} i |\xi|^{3/2}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Для того, чтобы выражение для $\psi_I(z)$ имело вид стоячей волны $\sin(-2\xi^{3/2}/3 + \pi/4)$ и, тем самым, совпадало с асимптотическим выражением для $Ai(\xi)$ при $\xi \rightarrow -\infty$, необходимо потребовать, чтобы $C_1 = -C_0 e^{-i\pi/4}/(2i)$ и $C_2 = C_0 e^{i\pi/4}/(2i)$

$$\psi_I(z) = \left(2m^* \hbar \left(\frac{dU}{dz}\right)_{z_0}\right)^{-1/6} \frac{C_0}{|\xi|^{1/4}} \sin\left(-\frac{2}{3} \xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right).$$

Формула связи 1

Связь экспоненциально затухающего решения в запрещённой области и *стоячей* волны в разрешённой области

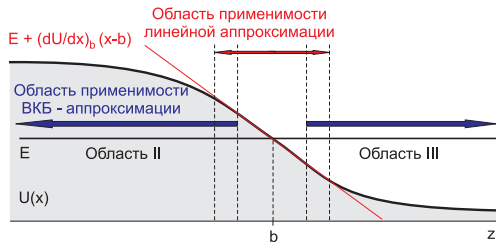
$$\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(z)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{z_0}^z |p(z)| dz \right\} \quad \text{при} \quad E_{\parallel} < U(z) \quad \Rightarrow$$
$$\frac{1}{\sqrt{p(z)}} \sin \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z) dz + \frac{\pi}{4} \right\} = \frac{1}{\sqrt{p(z)}} \cos \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z) dz - \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при} \quad E_{\parallel} > U(z).$$

Правило соответствия можно записать в универсальном виде, не зависящем от того, с какой стороны от точки поворота находится классически недоступная область

$$\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(z)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left| \int_{z_0}^z p(z) dz \right| \right\} \quad \text{при} \quad E_{\parallel} < U(z) \quad \Rightarrow$$
$$\frac{1}{\sqrt{p(z)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_{z_0}^z p(z) dz \right| - \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при} \quad E_{\parallel} > U(z).$$

Формула связи 2

Связь *бегущей* волны в разрешённой области и экспоненциально затухающего решения в запрещённой области



Предположим, что справа от барьера в классически разрешённой области существует решение в виде неоднородной волны, бегущей слева направо. Такое решение соответствует линейной комбинации функций Эйри $Ai(-\xi)$ и $Bi(-\xi)$

$$i Ai(-\xi) + Bi(-\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \times \begin{cases} \exp(-2\xi^{3/2}/3) & \text{при } \xi \rightarrow -\infty, \\ \exp(2i\xi^{3/2}/3 + i\pi/4) & \text{при } \xi \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

Правило соответствия для асимптотик функции Эйри

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \exp\left(i\frac{2}{3}\xi^{3/2} + i\frac{\pi}{4}\right) \quad \text{при } \xi \rightarrow +\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) \quad \text{при } \xi \rightarrow -\infty.$$

Квазиклассическое решение в разрешённой области имеет вид

$$\psi_I(z) = \frac{C'_2}{\sqrt{|p(z)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{z_0}^z |p(x)| dx\right) \simeq \left(2m^* \hbar \left(\frac{dU}{dz}\right)_{z_0}\right)^{-1/6} \frac{C'_2}{|\xi|^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} \xi^{3/2}\right).$$

Квазиклассическое решение в запрещённой области имеет вид

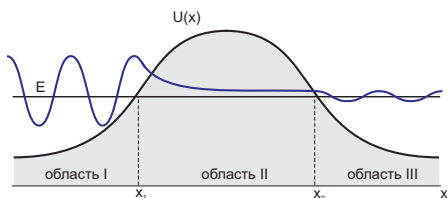
$$\begin{aligned} \psi_{II}(z) &= \frac{C_1}{\sqrt{\rho(z)}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z) dz + i\frac{\pi}{4}\right\} = \\ &= \left(2m^* \hbar \left(\frac{dU}{dz}\right)_{z_0}\right)^{-1/6} \frac{C_1}{\xi^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} i \xi^{3/2} + i\frac{\pi}{4}\right), \end{aligned}$$

где фаза $\pi/4$ выбрана из соображений удобства.

Формула связи бегущей волны в разрешённой области и экспоненциально затухающего решения в запрещённой области в универсальном виде

$$\frac{1}{\sqrt{\rho(z)}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z) dz + i\frac{\pi}{4}\right\} \quad \text{при } E > U(z) \quad \Rightarrow$$
$$\frac{1}{\sqrt{|p(z)|}} \exp\left\{\frac{1}{\hbar} \left|\int_{z_0}^z p(z) dz\right|\right\} \quad \text{при } E_{\parallel} < U(z).$$

Прозрачность квазиклассического барьера



Если частица налетает на барьер слева, то в области III за барьером ($z > z_2$) будет лишь уходящая волна

$$\psi_{III}(z) = \frac{C}{\sqrt{p(z)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{z_2}^z p(z) dz + i \frac{\pi}{4} \right\}.$$

Волновая функция в области II внутри барьера ($z_1 < z < z_2$) может быть найдена по формуле связи 2

$$\psi_{II}(z) = \frac{C}{\sqrt{|p(z)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_{z_2}^z p(x) dx \right| \right\}.$$

Если $z < z_2$, то $\left| \int_{z_2}^z p(z) dx \right| = \int_z^{z_2} |p(z)| dz = \int_{z_1}^{z_2} |p(x)| dz - \int_{z_1}^z |p(z)| dz.$

$$\psi_{II}(z) = \frac{C}{\sqrt{|p(z)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z |p(z)| dx \right\}.$$

Используя формулу связи 1, получаем решение в области I перед барьером ($z < z_1$)

$$\begin{aligned} \psi_I(z) &= \frac{2C}{\sqrt{p(z)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right\} \cdot \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_z^{z_1} p(z) dz - \frac{\pi}{4} \right\} = \\ &= \frac{2C}{\sqrt{p(z)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dx \right\} \cdot \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz + \frac{\pi}{4} \right\}. \end{aligned}$$

Учитывая, что $\cos \alpha = (e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})/2$, получаем решение в виде двух бегущих волн

$$\begin{aligned} \psi_I(z) &= \frac{C}{\sqrt{p(z)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz + i\frac{\pi}{4} \right\} + \\ &+ \frac{C}{\sqrt{p(z)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz - i\frac{\pi}{4} \right\}. \end{aligned}$$

Амплитуды отражения и прохождения

$$r \simeq \exp(-i\pi/2) \text{ и } t = \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right\}$$

Коэффициенты отражения и прохождения

$$\mathcal{R} \simeq 1 \text{ и } \mathcal{T} = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right\}$$

Правило квантования Бора-Зоммерфельда



Выведем условия, определяющие дискретные уровни энергии частицы в одномерной потенциальной яме в квазиклассическом приближении и соответствующие финитному движению при $z_1 \leq z \leq z_2$, где z_1 и z_2 — классические точки поворота.

Согласно формуле связи 1, затухающее решение справа от точки $z = z_2$ приводит к осциллирующему решению в классически разрешённой области вида

$$\psi_{II}(z) = \frac{C}{\sqrt{p(z)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_z^{z_2} p(z) dz - \frac{\pi}{4} \right\}.$$

Применим это же правило к точке $z = z_1$ и получим другое выражение для волновой функции

$$\psi_{II}(z) = \frac{C'}{\sqrt{p(z)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz - \frac{\pi}{4} \right\} = \frac{C'}{\sqrt{p(z)}} \cos \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz + \frac{\pi}{4} \right\}.$$

Для того, чтобы эти два выражения совпадали во всей области, разность аргументов косинусов в этих формулах должна быть кратна π (при условии $C = (-1)^n C'$, где n – целое)

$$\left(\frac{1}{\hbar} \int_z^{z_2} p(z) dz - \frac{\pi}{4} \right) - \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz - \frac{\pi}{2} = \pi n, \quad n = 1, 2, \dots$$

Это приводит нас к формуле Бора-Зоммерфельда

$$\frac{1}{\pi \hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Такая формула позволяет получить точное выражение для спектра частицы в параболической потенциальной яме: Пусть $U(z) = m^* \omega^2 z^2 / 2$ есть потенциальная энергия частицы и $z_{1,2} = \pm \sqrt{2E_n / (m^* \omega^2)}$ есть классические точки поворота для частицы с энергией E_n . Применим условие квантования Бора-Зоммерфельда и получим

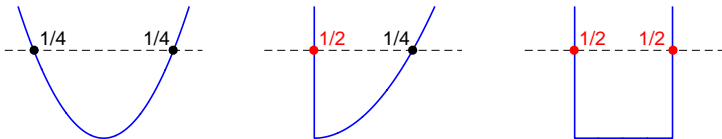
$$\frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\sqrt{2E_n / (m^* \omega^2)}}^{\sqrt{2E_n / (m^* \omega^2)}} p(z) dz = \frac{2m^* \omega}{\pi \hbar} \int_0^{\sqrt{2E_n / (m^* \omega^2)}} \sqrt{\frac{2E_n}{m^* \omega^2} - z^2} dz = \frac{2}{\pi} \frac{E_n}{\hbar \omega} \arcsin 1 = n + \frac{1}{2}.$$

Учитывая, что $\arcsin 1 = \pi/2$, получаем $E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Модифицированная формула Бора-Зоммерфельда, учитывающая граничные условия для волновой функции при отражении от скачка потенциала

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = n + \gamma \quad \text{или} \quad \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(z) dz = n + \gamma, \quad n = 1, 2, \dots$$

где $\gamma = 1/2$ для ямы с двумя стенками конечного наклона, $\gamma = 3/4$ для ямы с стенкой конечного наклона и вертикальной стенкой и $\gamma = 1$ для ямы с вертикальными стенками.



Еще одна модифицированная формула Бора-Зоммерфельда

$$\arg r'_1 + \arg r_2 = 2\pi n \quad \Rightarrow \quad \arg r'_1 + \arg r_2 = \frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz - \pi = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Оценка расщепления уровней для частицы в симметричных связанных потенциальных ямах*

Запишем общее соотношение для уровней размерного квантования в туннельно-связанных потенциальных ямах

$$E_n \simeq E_n^{(0)} \pm \delta E_n, \quad \text{где} \quad \delta E_n = \sqrt{\mathcal{T}_0} \Big|_{E=E_n^{(0)}} \cdot \left\{ \frac{d}{dE} \left(\arg r'_1 + \arg r_2 \right) \Big|_{E=E_n^{(0)}} \right\}^{-1}.$$

Здесь r'_1 есть амплитуда отражения от правой стенки разделяющего барьера (при $z = z_1$) и r_2 есть амплитуда отражения от правой стенки потенциальной ямы (при $z = z_2$) для частиц с энергией, равной n -му стационарному энергетическому уровню в невзаимодействующих ямах.

Из формулы Кембла получить оценку прозрачности для разделяющего потенциальные ямы туннельного барьера

$$\sqrt{\mathcal{T}_0} \Big|_{E=E_n^{(0)}} = \exp \left\{ \begin{array}{c} z_1(E_n^{(0)}) \\ -\frac{1}{\hbar} \int_{-z_1(E_n^{(0)})}^{z_1(E_n^{(0)})} |p(z)| dz \\ -z_1(E_n^{(0)}) \end{array} \right\}.$$

Запишем формулу квантования Бора-Зоммерфельда в виде

$$\mathcal{A} = \arg r'_1 + \arg r_2 = \frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz - \pi = 2\pi n.$$

Невозмущенное значение суммы фаз

$$\mathcal{A}(E_n^{(0)}) = \arg r^{(0)} + \arg r_0^{(0)} = \frac{2}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)})} p(z) dz - \pi = \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)})} \sqrt{E_n^{(0)} - U(z)} dz - \pi.$$

Приращение для суммы разности фаз запишем в виде суммы трёх интегралов

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(E_n^{(0)} + \delta E_n) &= \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)} + \delta E_n)}^{z_2(E_n^{(0)} + \delta E_n)} \sqrt{E_n^{(0)} + \delta E_n - U(z)} dz - \pi = \\ &= \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)} + \delta E_n)}^{z_1(E_n^{(0)})} \sqrt{E_0 + \delta E_n - U(z)} dz + \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)})} \sqrt{E_0 + \delta E_n - U(z)} dz + \\ &\quad + \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_2(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)} + \delta E_n)} \sqrt{E_0 + \delta E_n - U(z)} dz - \pi. \end{aligned}$$

Используя теорему о среднем для оценки вклада первого и третьего слагаемых, легко убедиться, что они пропорциональны δE_n^2 и потому представляют члены более высокого порядка малости, которые при вычислении линейного отклика могут быть опущены.

Линейный по δE вклад в приращение для суммы разности фаз

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}(E_n^{(0)} + \delta E_n) &\simeq \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)})} \sqrt{E_n^{(0)} + \delta E_n - U(z)} dz - \pi \simeq \\
 &\simeq \frac{2\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)})} \sqrt{E_n^{(0)} - U(z)} dz + \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} \int_{z_1(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)})} \frac{\delta E_n}{\sqrt{E_n^{(0)} - U(z)}} dz - \pi \simeq \\
 &\simeq \mathcal{A}(E_n^{(0)}) + \frac{2}{\hbar} \delta E_n \int_{z_1(E_n^{(0)})}^{z_2(E_n^{(0)})} \frac{dz}{v_n(z)},
 \end{aligned}$$

где $v_n(z) = p(z)/m^*$ – квазиклассическая скорость частицы на n -ом уровне. Следовательно,

$$\frac{d}{dE} \left(\arg r^{(0)} + \arg r_0^{(0)} \right)_{E=E_n^{(0)}} = \lim_{\delta E_n \rightarrow 0} \frac{\mathcal{A}(E_n^{(0)} + \delta E_n) - \mathcal{A}(E_n^{(0)})}{\delta E_n} \simeq \frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{v_n(z)},$$

где мы используем обозначения $z_1 \equiv z_1(E_n^{(0)})$ и $z_2 \equiv z_2(E_n^{(0)})$ для краткости.

Таким образом,

$$\frac{d}{dE} \left(\arg r^{(0)} + \arg r_0^{(0)} \right)_{E=E_n^{(0)}} \simeq \frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{v_n(z)}$$

Интеграл представляет собой половину периода колебаний частицы в потенциальной яме на n -ом невозмущенном энергетическом уровне, поэтому

$$\frac{d}{dE} \left(\arg r^{(0)} + \arg r_0^{(0)} \right)_{E=E_n^{(0)}} \simeq \frac{2\pi}{\hbar\omega_n^{(0)}}.$$

Наконец, мы получаем оценку расщепления уровней размерного квантования в квазиклассическом приближении

$$E_n \simeq E_n^{(0)} \pm \delta E_n, \quad \text{где} \quad \delta E_n = \frac{\hbar\omega_n^{(0)}}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-z_1}^{z_1} |p(z)| dz \right\}.$$

Метод Миллера и Гуда решения задач квазиклассики (1)

Интересующая нас задача

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{p^2(z)}{\hbar^2} \psi(z) = 0, \quad p(z) = \sqrt{2m^*(E_{||} - U(z))}.$$

Модельная задача

$$\frac{d^2\varphi(S)}{dS^2} + P^2(S)\varphi(S) = 0.$$

Можно ли найти масштабное преобразование и выразить $\psi(z)$ через $\varphi(S)$?

Предположим, что решение искомой задачи может быть записано как $\psi(z) = T(z)\varphi[S(z)]$.
Вычислим вторую производную по правилу дифференцирования сложной функции

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = & T''(z)\varphi[S(z)] + 2T'(z)\frac{d\varphi[S(z)]}{dS}\frac{dS}{dz} + T(z)\frac{d^2\varphi[S(z)]}{dS^2}\left(\frac{dS}{dz}\right)^2 + \\ & + T(z)\frac{d\varphi[S(z)]}{dS}\frac{d^2S}{dz^2} \end{aligned}$$

и подставим в исходное уравнение

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{p^2(z)}{\hbar^2}\psi(z) = & \frac{1}{\hbar^2}\left(\hbar^2\frac{T''(z)}{T(z)} - \hbar^2 P^2[S(z)]\left(\frac{dS}{dz}\right)^2 + p^2(z)\right)T(z)\varphi[S(z)] + \\ & + \left(2T'(z)\frac{dS}{dz} + T(z)\frac{d^2S}{dz^2}\right)\frac{d\varphi[S(z)]}{dS} = 0. \end{aligned}$$

Последнее слагаемое равно нулю, если $T(z) = 1/\sqrt{S'(z)}$.

Метод Миллера и Гуда решения задач квазиклассики (2)

Для того, чтобы функция $\psi(z)$ была решением исходного «точного» уравнения, необходимо потребовать выполнение условия

$$\hbar^2 \frac{T''(z)}{T(z)} - \hbar^2 P^2[S(z)] \left(\frac{dS}{dz} \right)^2 + p^2(z) = 0.$$

Если потенциал $U(z)$ медленно изменяется в пространстве и $|\hbar^2 T''(z)/T(z)| \ll p^2(z)$, мы можем пренебречь первым слагаемым в уравнении и получить условие отображения в дифференциальной и интегральной формах

$$P(S) \frac{dS}{dz} = \frac{p(z)}{\hbar} \quad \text{и} \quad \int_{S(z_0)}^{S(z)} P(S) dS = \int_{z_0}^z \frac{p(z)}{\hbar} dz.$$

Приближенное (англ. approximate) решение искомой задачи можно выразить через известное решение модельной задачи по следующему правилу

$$\psi_{app}(z) = \frac{1}{\sqrt{S'(z)}} \varphi[S(z)].$$

Сохранение потока вероятности при масштабном преобразовании

Запишем плотность потока вероятности для приближенного решения

$$\Pi(z) = \frac{i\hbar}{2m^*} \left\{ \psi_{app}(z) \frac{d\psi_{app}^*(z)}{dz} - \psi_{app}^*(z) \frac{d\psi_{app}(z)}{dz} \right\}.$$

Вычислим градиент плотности потока вероятности, предполагая, что $S(z)$ всегда может быть выбрана в виде вещественной функции, тогда

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \Pi(z) &= \frac{i\hbar}{2m^*} \left\{ \psi_{app}(z) \frac{d^2\psi_{app}^*(z)}{dz^2} - \psi_{app}^*(z) \frac{d^2\psi_{app}(z)}{dz^2} \right\} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m^*} S' \frac{d}{dS} \left\{ \varphi[S] \frac{d\varphi^*(S)}{dS} - \varphi^*(S) \frac{d\varphi(S)}{dS} \right\}. \end{aligned}$$

Таким образом, если для точного (или приближенного) решения модельной задачи $\varphi(S)$ выполняется закон сохранения потока вероятности, то автоматически это будет справедливо и для приближенного решения $\psi_{app}(z)$.

Точность приближенного решения*

Вычислим $d^2\psi_{app}(z)/dz^2$

$$\frac{d^2\psi_{app}(z)}{dz^2} = \left\{ \frac{3}{4} \frac{S''^2(z)}{S'^2(z)} - \frac{1}{2} \frac{S'''(z)}{S'(z)} \right\} \frac{1}{\sqrt{S'(z)}} \varphi[S(z)] + \frac{S'^2(z)}{\sqrt{S'(z)}} \frac{d^2\varphi[S(z)]}{dS^2}.$$

Добавим к обеим частям этого соотношения $p^2(z)\psi_{app}(z)/\hbar^2$, тогда

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_{app}(z)}{dz^2} + \frac{p^2(z)}{\hbar^2} \psi_{app}(z) &= \left\{ \frac{3}{4} \frac{S''^2(z)}{S'^2(z)} - \frac{1}{2} \frac{S'''(z)}{S'(z)} \right\} \frac{1}{\sqrt{S'(z)}} \varphi[S(z)] = \\ &= \left\{ \frac{3}{4} \frac{S''^2(z)}{S'^2(z)} - \frac{1}{2} \frac{S'''(z)}{S'(z)} \right\} \psi_{app}(z). \end{aligned}$$

Следовательно, приближенное решение $\psi_{app}(z)$ будет тем лучше описывать истинное решение исходного уравнения, чем меньше правая часть полученного уравнения.

Модельная задача 1а: плоские электронные волны в среде с постоянным потенциалом

Если функция $p^2(z)$ не имеет нулей и $p^2(z) > 0$ (разрешённая область), то в качестве модельной задачи можно взять задачу о волновых функциях в постоянном потенциале

$$\frac{d^2\varphi(S)}{dS^2} + P^2(S)\varphi(S) = 0, \quad \text{где} \quad P^2(S) = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - U_0) = k_0^2.$$

Частным решением такого уравнения в области постоянного потенциала являются плоские бегущие волны вида $\varphi_1(S) = e^{ik_0S}$ и $\varphi_2(S) = e^{-ik_0S}$.

Условие отображения может быть записано в следующем виде $k_0(dS/dz) = p(z)/\hbar$ или

$$S(z) = \frac{1}{\hbar k_0} \int_{z_0}^z p(z) dz, \quad \text{где } z_0 - \text{произвольная точка.}$$

Решение исходной задачи может быть представлено в виде модулированных волн

$$\psi_{app}(z) = \frac{1}{\sqrt{S'(z)}} \varphi_{1,2}[S(z)] = \frac{\sqrt{\hbar k_0}}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(\pm \frac{ik_0}{\hbar k_0} \int_{z_0}^z p(z) dz\right) = \frac{const}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z) dz\right)$$

Мы получили стандартное квазиклассическое решение в разрешённой области!

Модельная задача 1b: плоские электронные волны в среде с постоянным потенциалом

Если функция $p^2(z)$ не имеет нулей и $p^2(z) < 0$ (запрещённой области), то в качестве модельной задачи можно взять задачу о волновых функциях в постоянном потенциале

$$\frac{d^2\varphi(S)}{dS^2} + P^2(S)\varphi(S) = 0, \quad \text{где } P^2(S) = \frac{2m^*}{\hbar^2}(E - U_0) = -\kappa_0^2.$$

Частным решением такого уравнения в области постоянного потенциала являются плоские бегущие волны вида $\varphi_1(S) = e^{\kappa_0 S}$ и $\varphi_2(S) = e^{-\kappa_0 S}$.

Условие отображения может быть записано в следующем виде $i\kappa_0(dS/dz) = i|p(z)|/\hbar$ или

$$S(z) = \frac{1}{\hbar\kappa_0} \int_{z_0}^z |p(z)| dz, \quad \text{где } z_0 \text{ - произвольная точка.}$$

Решение исходной задачи может быть представлено в виде модулированных волн

$$\psi_{app}(z) = \frac{1}{\sqrt{S'(z)}} \varphi_{1,2}[S(z)] = \frac{\sqrt{\hbar\kappa_0}}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(\pm \frac{\kappa_0}{\hbar\kappa_0} \int_{z_0}^z |p(z)| dz\right) = \frac{const}{\sqrt{p(z)}} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_{z_0}^z |p(z)| dz\right)$$

Мы получили стандартное квазиклассическое решение в запрещённой области!

Модельная задача 2: плоские электронные волны в линейно растущем потенциале

Предположим, что функция $p^2(z)$ имеет один нуль кратности единица в точке $z = z_0$ и классически разрешённая область находится справа от точки поворота, тогда

$$\frac{d^2\varphi(S)}{dS^2} + P^2(S)\varphi(S) = 0, \quad \text{где } P^2(S) = S.$$

Если ограничиться решением, экспоненциально затухающим слева от точки z_0 и осциллирующим справа от точки z_0 , то частное решение описывается функцией Эйри: $\varphi(S) = Ai(-S)$.

Условие отображения может быть записано в виде $\sqrt{S} dS/dz = (\sqrt{a}/\hbar) \sqrt{z - z_0}$,

$$S(z) = \left(\frac{a}{\hbar^2}\right)^{1/3} (z - z_0), \quad \text{где } z_0 \text{ - точка поворота.}$$

Решение исходной задачи может быть представлено в виде стоячей волны

$$\begin{aligned} \psi_{app}(z) &= \frac{1}{\sqrt{S'(z)}} \varphi[S(z)] = \left(\frac{\hbar^2}{a}\right)^{1/6} Ai\left[\left(\frac{a}{\hbar^2}\right)^{1/3} (z_0 - z)\right] = \\ &= const \cdot \left(\frac{\hbar^2}{2m^* |(dU/dz)_{z=z_0}|}\right)^{1/6} Ai\left[\left(\frac{2m^* |(dU/dz)_{z=z_0}|}{\hbar^2}\right)^{1/3} (z_0 - z)\right] \end{aligned}$$

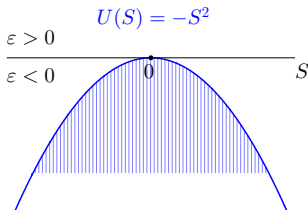
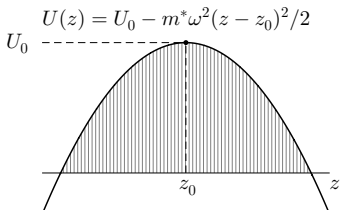
Модельная задача 3: параболический потенциальный барьер

В качестве модельной задачи, которая нам понадобится для исследования коэффициента прохождения через потенциальный барьер произвольной формы, можно взять задачу рассеяния на параболическом потенциальном барьере (Ландау, Лифшиц, т. III, §50)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2\varphi}{dz^2} + U(z)\varphi = E\varphi, \quad \text{где} \quad U(z) = U_0 - \frac{m^*\omega^2(z - z_0)^2}{2},$$

U_0 – высота барьера, z_0 – координата вершины барьера. Введем для удобства безразмерные переменные $S = (z - z_0) \sqrt{m^*\omega/\hbar}$ и $\varepsilon = 2(E - U_0)/\hbar\omega$, тогда уравнение Шрёдингера в безразмерном виде для параболического потенциала можно записать как

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{m^*\omega}{\hbar} \cdot \frac{d^2\varphi}{dS^2} + \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{2(E - U_0)}{\hbar\omega} + S^2 \right) \varphi = 0 \quad \text{или} \quad \frac{d^2\varphi}{dS^2} + (\varepsilon + S^2)\varphi = 0.$$



Для параболического барьера Кемблом (1935) было получено квазиклассическое решение и, в частности, определена связь между амплитудами отражения и прохождения $r = -it e^{-\pi\varepsilon/2}$. Принимая во внимание закон сохранения потока вероятности $|r|^2 + |t|^2 = 1$, находим коэффициенты прохождения и отражения через параболический потенциальный барьер

$$\mathcal{T} = |t|^2 = \frac{1}{1 + e^{-\pi\varepsilon}} \quad \text{и} \quad \mathcal{R} = 1 - \mathcal{T} = \frac{e^{-\pi\varepsilon}}{1 + e^{-\pi\varepsilon}} = \frac{1}{1 + e^{\pi\varepsilon}}.$$

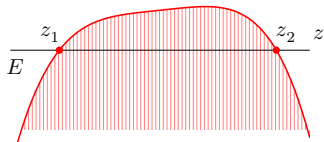
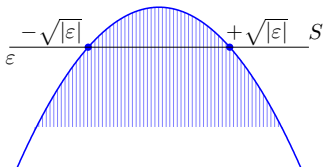
1. При подбарьерном рассеянии $\varepsilon < 0$ и $P(S) = \sqrt{-|\varepsilon| + S^2} = i\sqrt{|\varepsilon| - S^2}$.

Условие отображения нуля импульса $S_1 = -\sqrt{|\varepsilon|}$ (левой стенки) в точку $z = z_1$ требует, чтобы

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz = \int_{-\sqrt{|\varepsilon|}}^S i\sqrt{|\varepsilon| - s^2} ds.$$

Условие отображения нуля импульса $S_2 = +\sqrt{|\varepsilon|}$ (правой стенки) в точку $z = z_2$ требует, чтобы

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_2}^z p(z) dz = \int_{\sqrt{|\varepsilon|}}^S i\sqrt{|\varepsilon| - s^2} ds.$$



Сложим полученные уравнения почленно

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz = \int_{-\sqrt{|\varepsilon|}}^S i\sqrt{|\varepsilon| - s^2} ds \quad \text{и} \quad \frac{1}{\hbar} \int_{z_2}^z p(z) dz = \int_{\sqrt{|\varepsilon|}}^S i\sqrt{|\varepsilon| - s^2} ds.$$

и получим условие их совместности для произвольных S и z

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz - \frac{1}{\hbar} \int_{z_2}^z p(z) dz = \int_{-\sqrt{|\varepsilon|}}^S i\sqrt{|\varepsilon| - s^2} ds - \int_{\sqrt{|\varepsilon|}}^S i\sqrt{|\varepsilon| - s^2} ds.$$

или

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = i \int_{-\sqrt{|\varepsilon|}}^{\sqrt{|\varepsilon|}} \sqrt{|\varepsilon| - s^2} ds = i|\varepsilon| \arcsin 1 = \frac{\pi i}{2} |\varepsilon|.$$

Учитывая, что для подбарьерного прохождения $\varepsilon = -|\varepsilon|$, это условие можно переписать в виде

$$\varepsilon = -\frac{2}{\pi i} \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz \quad \text{для} \quad \varepsilon < 0.$$

2. При надбарьерном рассеянии $\varepsilon > 0$ и $P(S) = \sqrt{\varepsilon + S^2}$. Как следствие, функции $P(S)$ являются мнимыми: $S_1 = i\sqrt{\varepsilon}$ и $S_2 = -i\sqrt{\varepsilon}$.

Способом, аналогичным предыдущему, можно получить условие отображения для произвольных S и z

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = \int_{+i\sqrt{\varepsilon}}^{-i\sqrt{\varepsilon}} \sqrt{\varepsilon + s^2} ds = [s = is'] = \int_{+\sqrt{\varepsilon}}^{-\sqrt{\varepsilon}} i\sqrt{\varepsilon - s'^2} ds'.$$

Такой интеграл был вычислен выше (только с другим порядком пределов интегрирования), поэтому получаем

$$\varepsilon = -\frac{2}{\pi i} \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz \quad \text{для } \varepsilon > 0,$$

где z_1 и z_2 – нули функции $p^2(z)$ с положительной и отрицательной мнимой частями, соответственно.

Иными словами, для $\varepsilon < 0$ и $\varepsilon > 0$ мы получили идентичные условия отображения

$$\varepsilon = -\frac{2}{\pi i} \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz.$$

3. Формула Кембла для одномерного потенциального барьера произвольной формы

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + e^{-\pi\varepsilon}} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{T} = \frac{1}{1 + e^{-\pi\varepsilon}} = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{2}{i\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz \right) \right\}^{-1}$$

Если энергия частицы меньше высоты барьера, то классические точки поворота (пределы интегрирования) могут быть найдены из условия $U(z_{1,2}) = E_{\parallel}$. Поскольку в интервале $z_1 < z < z_2$ кинетическая энергия является отрицательной, то $p(z) = i|p(z)|$ и

$$\mathcal{T} = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right) \right\}^{-1}, \quad E_{\parallel} < \max U(z).$$

Если высота барьера существенно превышает энергию частицы, то можно перейти к более простой формуле

$$\mathcal{T} = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right), \quad E_{\parallel} \ll \max U(z),$$

которая верна для барьеров с малой прозрачностью ($\mathcal{T} \ll 1$).

A WKB-Type Approximation to the Schrödinger Equation

S. C. MILLER, JR., AND R. H. GOOD, JR.

Department of Physics, University of California, Berkeley, California

(Received February 9, 1953)

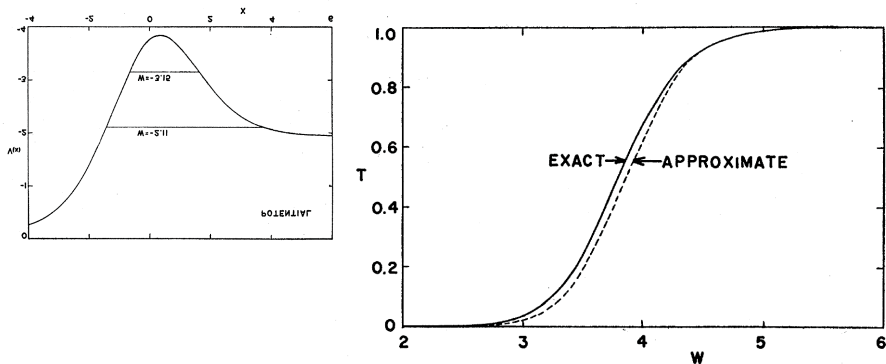


FIG. 3. Transmission coefficient for the potential, $V(x) = 1.922e^x(1+e^x)^{-1} + 11.20e^x(1+e^x)^{-2}$. (This is the negative of the potential shown in Fig. 2.)

Miller, Good, *Phys. Rev.* v. 51, 174-179 (1953).

Модельная задача 4: параболическая потенциальная яма

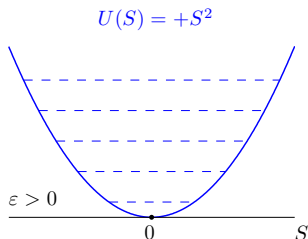
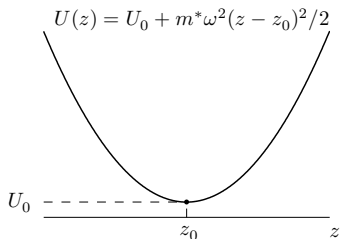
Рассмотрим задачу о частице в параболической потенциальной яме

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2\varphi}{dz^2} + U(z)\varphi = E\varphi, \quad \text{где} \quad U(z) = U_0 + \frac{m^*\omega^2(z - z_0)^2}{2},$$

U_0 – высота барьера, z_0 – координата вершины барьера. Перейдем к безразмерному виду

$$\frac{d^2\varphi(S)}{dS^2} + P^2(S)\varphi(S) = 0, \quad \text{где} \quad P(S) = \sqrt{\varepsilon - S^2},$$

где $S = (z - z_0)\sqrt{m^*\omega/\hbar}$ есть безразмерная координата и $\varepsilon = 2(E - U_0)/(\hbar\omega)$ есть безразмерная энергия. Поскольку для частицы в параболической яме спектр энергий известен $E_n = U_0 + \hbar\omega(n + 1/2)$, то $\varepsilon_n = 2n + 1$.



Условие отображения нуля импульса $S_1 = -\sqrt{\epsilon}$ (левой стенки) в точку $z = z_1$ требует, чтобы

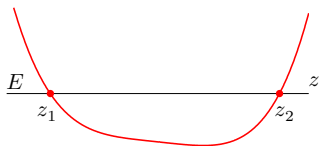
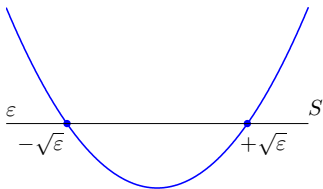
$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^z p(z) dz = \int_{-\sqrt{\epsilon}}^S \sqrt{\epsilon - s^2} ds.$$

Условие отображения нуля импульса $S_2 = +\sqrt{\epsilon}$ (правой стенки) в точку $z = z_2$ требует, чтобы

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_2}^z p(z) dz = \int_{\sqrt{\epsilon}}^S \sqrt{\epsilon - s^2} ds.$$

Сложим эти уравнения и получим условие их совместности для произвольных S и z

$$\frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = \int_{-\sqrt{\epsilon}}^{\sqrt{\epsilon}} \sqrt{\epsilon - s^2} ds = \epsilon \arcsin 1 = \frac{\pi}{2} \epsilon.$$



Формула Бора-Зоммерфельда для определения уровней размерного квантования в одномерной потенциальной яме произвольной формы

$$\varepsilon_n = 2n + 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{2}{\pi} \frac{1}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = 2n + 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\pi \hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = n + \frac{1}{2}.$$

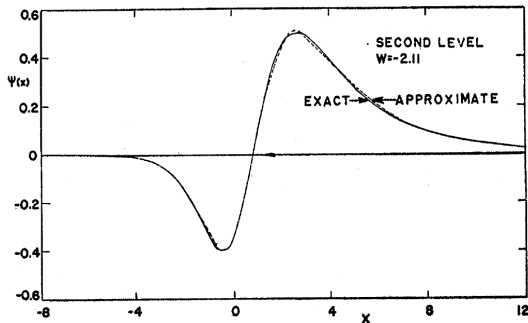
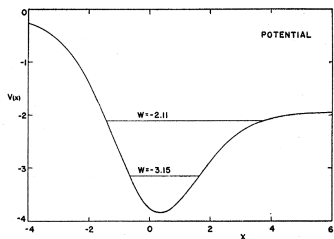


FIG. 2. The potential, $V(x) = -1.922e^x(1+e^x)^{-1} - 11.20e^x \times (1+e^x)^{-2}$, and the wave functions of the two bound states. Each wave function separately has been normalized so that the integral-square is 1.

Стационарные и квазистационарные состояния

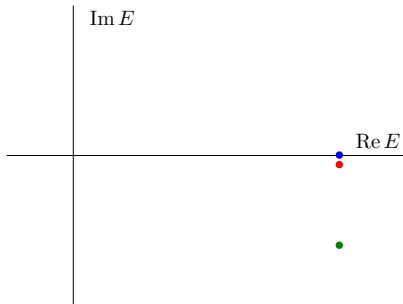
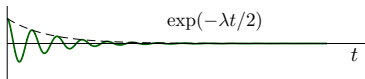
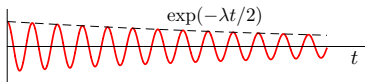
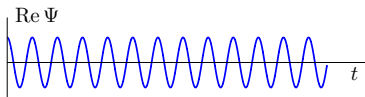
Запишем нестационарное уравнение Шрёдингера $i\hbar \partial \Psi / \partial t = \hat{H} \Psi$.

Если $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \cdot e^{-iEt/\hbar}$, то $\hat{H} \psi = E \psi$.

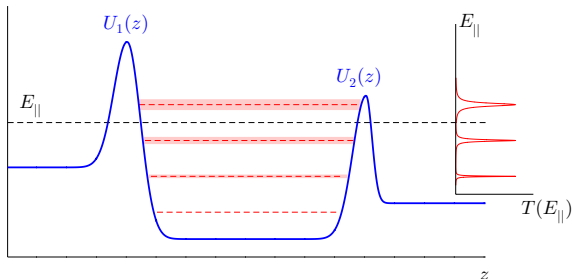
Если $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \cdot e^{-\lambda t/2} \cdot e^{-iEt/\hbar}$, то $\hat{H} \psi = (E - i \cdot \lambda \hbar/2) \psi$.

Если $E = Re E + i Im E$ и $|Im E| \ll Re E$, то такие «распадающиеся» состояния называются квазистационарными. Мнимая часть энергии определяет скорость распада квантового состояния:

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 \cdot e^{-\lambda t}, \quad \text{где } \lambda \equiv -\frac{2}{\hbar} Im E \text{ есть постоянная распада.}$$



Скорость распада в потенциале с двумя барьерами



Мы показали (см. лекцию 2), что форма линии резонансного прохождения для структуры с одинаковыми барьерами описывается выражением

$$\mathcal{T}(E_{\parallel}) \simeq \frac{\Gamma_n^2}{\Gamma_n^2 + (E_{\parallel} - E_n^{(0)})^2}, \quad \text{где } \Gamma_n = \left| \frac{d}{dE} (\arg r_1' + \arg r_2) \right|_{E_{\parallel} = E_n^{(0)}}^{-1} \frac{(1 - \mathcal{R})}{\sqrt{\mathcal{R}}},$$

где $E_n^{(0)}$ – уровень энергии размерного квантования в области между непрозрачными барьерами, Γ_n – ширина линии для n -го резонансного уровня.

Квазистационарные состояния соответствуют полюсам (сингулярностям) амплитуды прохождения t или коэффициента прохождения $\mathcal{T} = |t|^2$. Очевидно, что полюс функции $\mathcal{T}(E_{\parallel})$ соответствует комплексным энергиям

$$E_{\parallel} = E_n^{(0)} - i\Gamma_n.$$

Напомним формулу Бора-Зоммерфельда для определения уровней размерного квантования в одномерной потенциальной яме произвольной формы (см. лекцию 3)

$$\arg r'_1 + \arg r_2 = \frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz - \pi = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Можно показать, что для частицы в потенциальной яме

$$\begin{aligned} \frac{d}{dE} (\arg r'_1 + \arg r_2) \Big|_{E_{\parallel} = E_n^{(0)}} &\simeq \frac{d}{dE} \left(\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz \right) \Big|_{E_{\parallel} = E_n^{(0)}} \simeq \\ &\simeq \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m^*} \int_{z_1}^{z_2} \frac{d}{dE} \sqrt{E - U(z)} dz \simeq \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^*} \int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{\sqrt{E_{\parallel} - U(z)}} \simeq \frac{1}{\hbar} \oint \frac{dz}{v_n(z)} \simeq \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{1}{f_n}, \end{aligned}$$

где $f_n = v_n/2L$ – частота колебаний частицы в яме между барьерами шириной L и v_n – квазиклассическая скорость на n -ом уровне размерного квантования. Таким образом, мы получаем оценку ширины линии резонансного прохождения

$$\Gamma_n = \left| \frac{d}{dE} (\arg r'_1 + \arg r_2) \Big|_{E = E_n^{(0)}} \right|^{-1} \frac{(1 - \mathcal{R}_n)}{\sqrt{\mathcal{R}_n}} \simeq \left| \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{1}{f_n} \right|^{-1} \frac{\mathcal{T}_n}{\sqrt{1 - \mathcal{T}_n}} \simeq \hbar \cdot f_n \cdot \mathcal{T}_n \quad \text{при } \mathcal{T}_n \ll 1$$

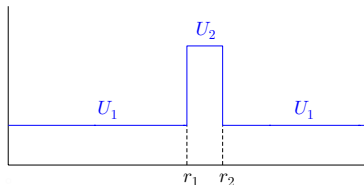
и константу распада, равную произведению частоты соударений частицы с барьерами v_n/L на коэффициент прохождения \mathcal{T}_n через потенциальный барьер для n -го уровня

$$\lambda = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} E \simeq \frac{2}{\hbar} \Gamma_n \simeq \frac{2}{\hbar} \cdot \hbar \cdot f_n \cdot \mathcal{T}_n \quad \text{или} \quad \lambda \simeq \frac{f_n}{2} \cdot \mathcal{T}_n \simeq \frac{v_n}{L} \cdot \mathcal{T}_n.$$

Скорость распада s -состояния в сферической яме*

Рассчитаем спектр локализованных состояний частицы в сферически-симметричной яме

$$U(r) = \begin{cases} U_1 & \text{при } r < r_1 \\ U_2 & \text{при } r_1 < r < r_2 \\ U_1 & \text{при } r > r_2 \end{cases}$$



Для сферически симметричной s -функции $\psi(x, y, z) = \psi(r)$ получаем уравнение Шрёдингера с переменными коэффициентами

$$\frac{d^2}{dr^2} \psi(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \psi(r) + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi(r) = 0$$

После замены $\psi(r) = \chi(r)/r$ получаем обыкновенное дифференциальное уравнение ($r \rightarrow x$)

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi(r) + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - U(r)) \chi(r) = 0.$$

Для решения «одномерного» уравнения необходимо наложить дополнительное граничное условие $\chi = 0$ при $r = 0$ для предотвращения расходимости волновой функции $\psi(r)$ при $r = 0$.

В кусочно-постоянном потенциале $U(r)$ для функций χ_n получаем решения следующего вида

$$\text{Область 1 } (r < r_1) : \quad \chi_1(r) = a_1 e^{ik_1 r} - a_1 e^{-ik_1 r}$$

$$\text{Область 2 } (r_1 < r < r_2) : \quad \chi_2(r) = a_2 e^{ik_2 r} + b_2 e^{-ik_2 r}$$

$$\text{Область 3 } (r > r_2) : \quad \chi_3(r) = a_3 e^{ik_3 r} + 0 e^{-ik_3 r}.$$

Уравнение для определения локализованных состояний в матричном виде для эффективной трансфер-матрицы $\hat{M} = \hat{M}^{(1)} \hat{M}^{(2)}$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ -a \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} a_3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad M_{11} = -M_{21}.$$

Легко получить спектр локализованных состояний в общем случае ($k_2 = i\kappa_2$)

$$\begin{aligned} & \left\{ (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{i(-k_1 + k_2)r_1} e^{i(-k_2 + k_3)r_2} + (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{i(-k_1 - k_2)r_1} e^{i(k_2 - k_3)r_2} \right\} \\ & = - \left\{ (k_1 - k_2)(k_2 + k_3) e^{i(k_1 + k_2)r_1} e^{i(-k_2 + k_3)r_2} + (k_1 + k_2)(k_2 - k_3) e^{i(k_1 - k_2)r_1} e^{i(k_2 - k_3)r_2} \right\}. \end{aligned}$$

Упрощение для симметричного барьера $k = k_{1,3} = \sqrt{2m^*(E - U_1)}/\hbar$ и $\kappa = \sqrt{2m^*(U_2 - E)}/\hbar$

$$\left(\frac{\kappa}{k} \operatorname{tg} \kappa r_1 + 1 \right) = -e^{-2\kappa w} \left(\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right) \cdot \left(\frac{\kappa}{k} \operatorname{tg} \kappa r_1 - 1 \right),$$

где $w = r_2 - r_1$ - ширина барьера и $\varphi = \operatorname{arctg}(\kappa/k)$ - сдвиг фазы отражённой волны.

1. Для идеального непрозрачного барьера ($e^{-2\chi w} \lll 1$) получаем спектр стационарных состояний в сферической потенциальной яме: $(\chi/k_n) \operatorname{tg} k_n r_1 + 1 = 0$.

2. Для малопрозрачного барьера ($e^{-2\chi w} \lll 1$) можно получить спектр состояний по теории возмущений, вводя отстройку от $\Delta k = k - k_n$:

$$\left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} k r_1 + 1\right) = -e^{-2\chi w} \left(\frac{k - i\chi}{k + i\chi}\right) \cdot \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} k r_1 - 1\right), \quad (*)$$

где k_n – невозмущенное значение волнового числа.

В правую часть уравнения (*) подставим невозмущенные значения

$$\text{Правая часть:} \quad -e^{-2\chi w} \left(\frac{k_n - i\chi_n}{k_n + i\chi_n}\right) \cdot \left(\frac{\chi_n}{k_n} \tan k_n r_1 - 1\right) \simeq 2 e^{-2\chi_n w} \frac{(k_n - i\chi_n)^2}{k_n^2 + \chi_n^2}.$$

В левой части уравнения (*) делаем разложение по Δk и учитываем, что $(d\chi/dk)_n = -k_n/\chi_n$, $\operatorname{tg} k_n r_1 = -k_n/\chi_n$ и $\cos^{-2} k_n r_1 = (k_n^2 + \chi_n^2)/\chi_n^2$, тогда

$$\text{Левая часть:} \quad \left(\frac{\chi}{k} \tan k r_1 + 1\right) \simeq \frac{(k_n^2 + \chi_n^2)}{k_n \chi_n^2} (1 + \chi_n r_1) \Delta k$$

Получаем выражение для отстройки Δk в следующем виде

$$\Delta k_n = \frac{2k_n \chi_n^2}{(1 + \chi_n r_1)} \frac{(k_n - i\chi_n)^2}{(k_n^2 + \chi_n^2)^2} e^{-2\chi_n w} = \operatorname{Re} \Delta k + i \operatorname{Im} \Delta k.$$

Запишем мнимую часть отстройки

$$\text{Im } \Delta k_n = \frac{2k_n \varkappa_n^2}{(1 + \varkappa_n r_1)} \frac{-2k_n \varkappa_n}{(k_n^2 + \varkappa_n^2)^2} e^{-2\varkappa_n w} < 0.$$

Подставим $k = k_n + (\text{Re } \Delta k + i \text{Im } \Delta k) \simeq k_n + i \text{Im } \Delta k$ в выражение для энергии

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_n + i \text{Im } \Delta k)^2, \quad \text{Im } E = \frac{\hbar^2}{m^*} k_n \text{Im } \Delta k < 0.$$

Оценим константу распада

$$\lambda = -\frac{2}{\hbar} \text{Im } E \simeq \frac{8\hbar k_n}{m^*} \frac{k_n^2 \varkappa_n^3}{(k_n^2 + \varkappa_n^2)^2} \frac{e^{-2\varkappa_n w}}{(1 + \varkappa_n r_1)}.$$

Если барьер высокий ($\varkappa_n r_1 \gg 1$), то

$$\lambda \simeq \frac{\hbar k_n}{m^*} \cdot \frac{1}{2r_1} \cdot \frac{16k_n \varkappa_n^2 k_n}{(k_n^2 + \varkappa_n^2)^2} e^{-2\varkappa_n w} \simeq \frac{v_n}{2r_1} \cdot \mathcal{T}_n.$$

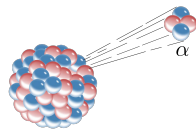
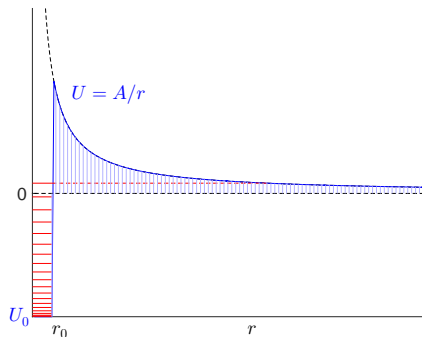
Константа распада равна произведению частоты соударений частицы с барьерами $v_n/2r_1$ на коэффициент прохождения \mathcal{T}_n через потенциальный барьер для n -го уровня размерного квантования!

Альфа-распад как процесс туннелирования через кулоновский барьер

Для оценки скорости распада тяжёлых ядер вычислим коэффициент прохождения через потенциальный барьер вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } r < r_0 \\ A/r & \text{при } r > r_0, \end{cases} \quad \text{где } A = (Z - 2)e \cdot 2e,$$

где r_0 – радиус действия атомных сил за счёт сильного взаимодействия, Z – атомный номер ядра до распада, $\alpha = {}^4_2\text{He}$ – ядро атома гелия (или альфа-частица).



Формула Гамова для скорости альфа-распада

Рассмотрим кулоновский барьер как квазиклассический и оценим прозрачность такого барьера для альфа-частицы с энергией E по формуле

$$\mathcal{T} = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(r)| dr \right),$$

где $a = r_0$ и $b = A/E$ – классические точки поворота, $|p(r)| = \sqrt{2m^* \sqrt{U(r) - E}}$.

Неопределённый интеграл легко может быть вычислен с помощью замены $x = b \cos^2 u$

$$\int \sqrt{\frac{b}{x} - 1} \cdot dx = -b \arccos \sqrt{\frac{r}{b}} + b \sqrt{\frac{r}{b} - \frac{r^2}{b^2}}.$$

Вычислим прозрачность одномерного кулоновского барьера

$$\mathcal{T} \simeq \exp \left\{ -\frac{2A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E}} \left(\arccos \sqrt{\frac{Er_0}{A}} - \sqrt{\frac{Er_0}{A} \left(1 - \frac{Er_0}{A} \right)} \right) \right\},$$

Для низкоэнергетичных альфа-частиц ($Er_0/A \ll 1$) имеем $\arccos \sqrt{Er_0/A} \rightarrow \pi/2$, поэтому

$$\mathcal{T} \simeq \exp \left(-\frac{2A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E}} \cdot \frac{\pi}{2} \right).$$

Оценим константу распада

$$\lambda = \frac{v_n}{2r_0} \cdot \mathcal{T} = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{\pi A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E}}\right).$$

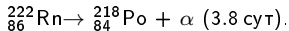
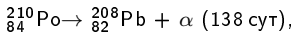
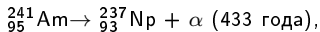
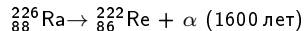
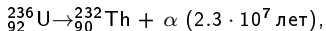
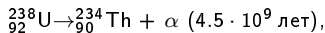
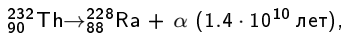
и время полураспада (half-life) $T_{1/2} \equiv \ln 2/\lambda$ для тяжёлых ядер (Гамов, 1928)

$$\ln T_{1/2} \simeq -\ln \text{const} + \frac{\pi(Z-2)2e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E}}.$$

Формула Гамова качественно и количественно объясняет полученную ранее эмпирическую зависимость времени полураспада от атомного номера (Geiger and Nuttal, 1911)

$$\ln T_{1/2} \simeq -\text{const}_1 + \text{const}_2 \cdot \frac{Z}{\sqrt{E}}.$$

Примеры альфа-распада:



Основные результаты

1. Коэффициент прохождения через квазиклассический одномерный потенциальный барьер (формула Кембла)

$$\mathcal{T} = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{2}{i\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz \right) \right\}^{-1}.$$

2. Коэффициент прохождения через квазиклассический малопрзрачный барьер

$$\mathcal{T} = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right) \quad \text{при} \quad E \ll \max U(z).$$

3. Спектр уровней размерного квантования в одиночной потенциальной яме (правило квантования Бора-Зоммерфельда)

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz = n + \gamma, \quad \text{где} \quad \frac{1}{2} \leq \gamma \leq 1.$$

4. Связь константы распада квазистационарных состояний и прозрачности туннельного барьера

$$\lambda = -\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} E \quad \text{и} \quad \lambda \simeq \frac{v_n}{L} \cdot \mathcal{T}_n$$