Квантовая механика наносистем. Квантоворазмерные эффекты в наносистемах.

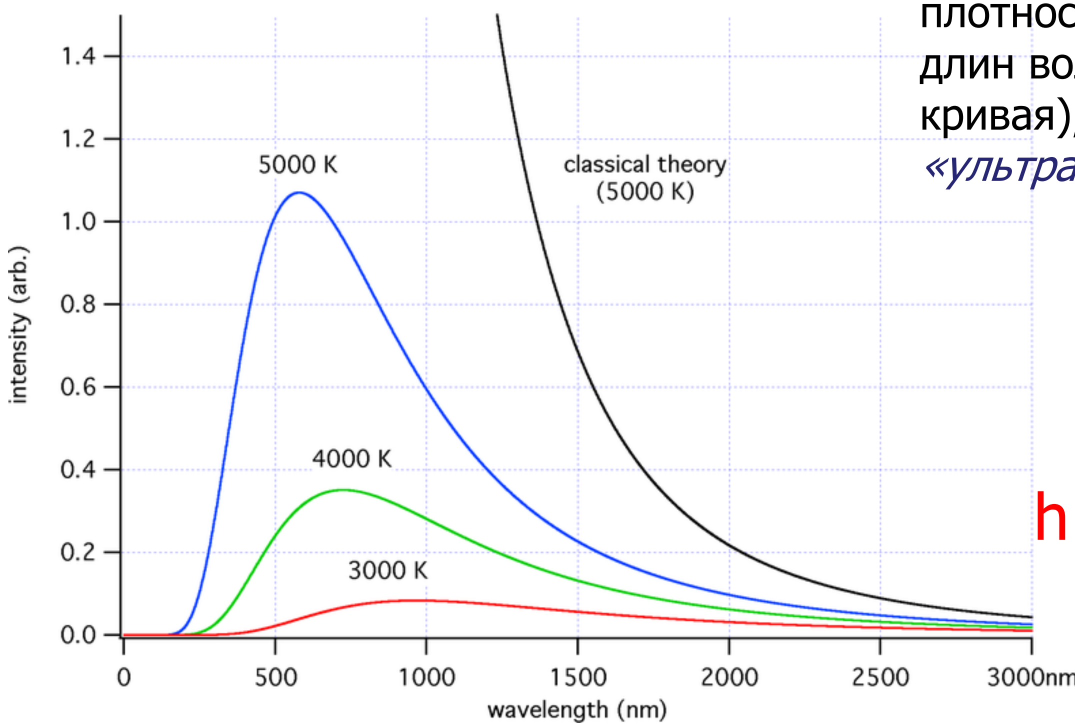
Д.Р. Хохлов,
В.Ю.Тимошенко

Физический факультет МГУ

Основные идеи и принципы квантовой механики

- Корпускулярно-волновой дуализм
- Соотношение неопределенностей Гейзенберга
- Волновая функция, уравнение Шредингера
- Спин частицы, принцип Паули

«Ультрафиолетовая катастрофа»



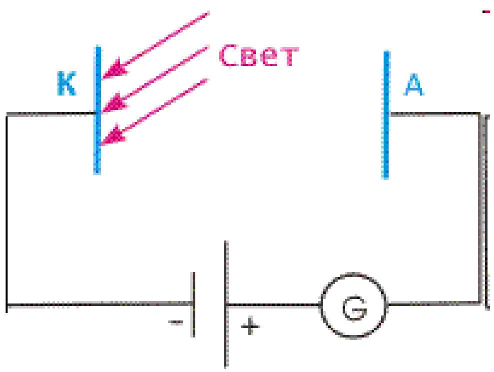
Для равновесного теплового излучения абсолютно черного тела классическая теория (E=kT) дает неограниченный рост плотности энергии в области коротких длин волн, т.е. высоких частот (черная кривая), что носит историческое название *«ультрафиолетовая катастрофа»*.

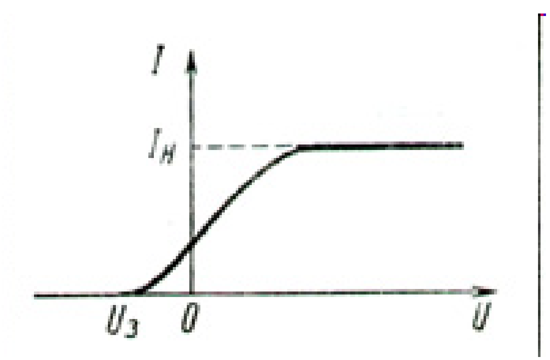
Решение проблемы: гипотеза Планка

$E = h\upsilon = \hbar\omega$

$h = 2\pi\hbar = 6.62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с

Законы фотоэффекта



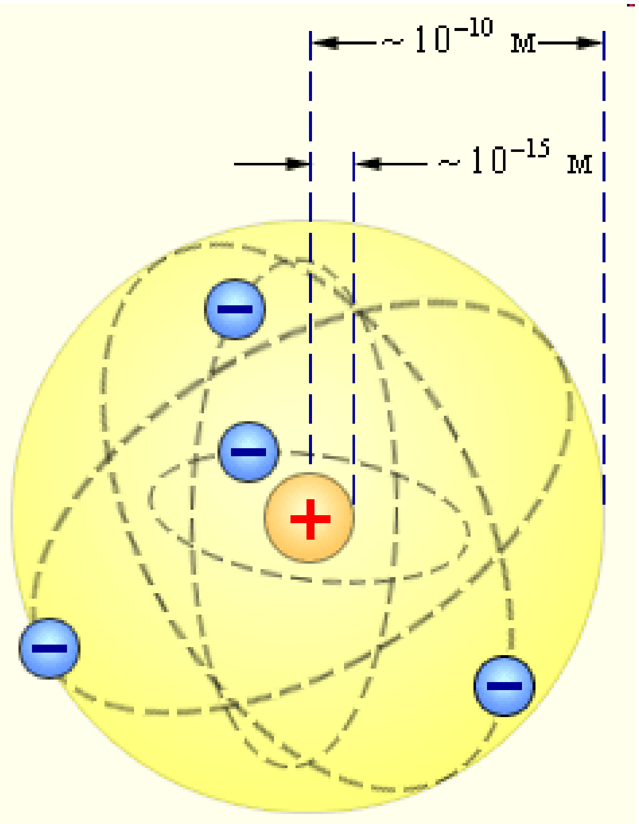


Фототок насыщения пропорционален световому потоку, падающему на металл $\mathbf{I_н \sim Ф}$

Кинетическая энергия фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света, а зависит от его частоты.

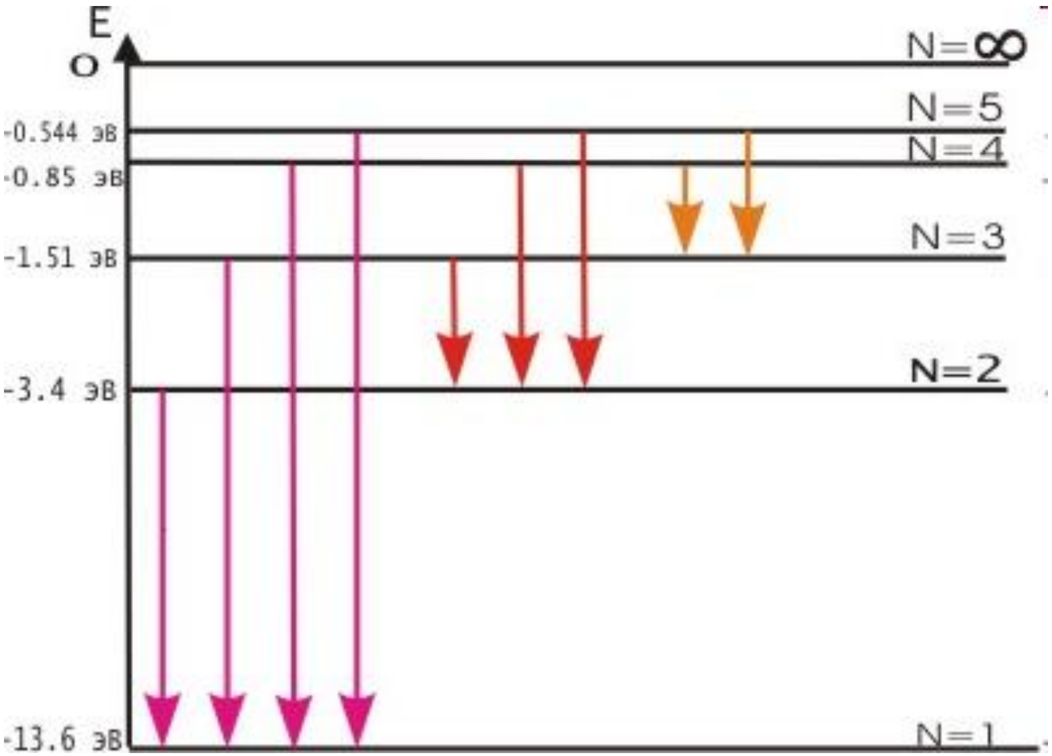
Для каждого вещества существует определенное значение частоты υ_0, называемое ***красной границей фотоэффекта***. Фотоэффект имеет место только при частотах $\upsilon > \upsilon_0$, Если же $\upsilon < \upsilon_0$, то фотоэффект не происходит при любой интенсивности света.

Планетарная модель атома



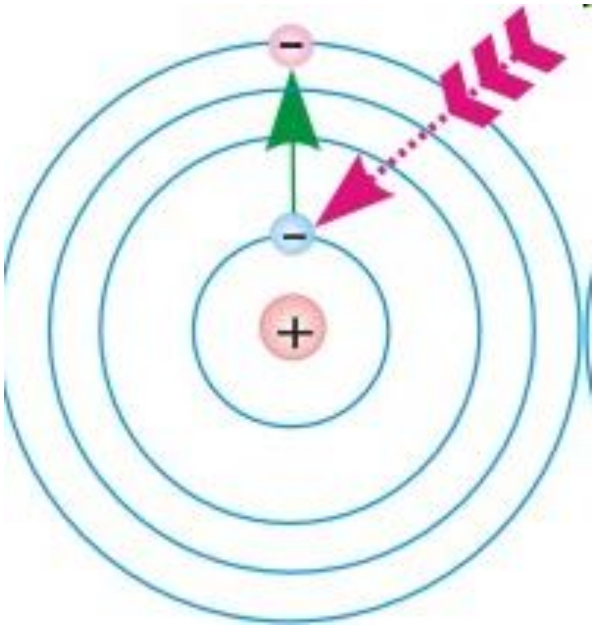
Проблема:
электрон движется с ускорением
следовательно, излучает,
следовательно, теряет энергию
следовательно, падает на ядро

Спектр излучения атома водорода



Указывает на «прерывистость» процессов в атоме

Постулаты Бора



Атомы имеют ряд стационарных состояний соответствующих определенным значениям энергий: E_1, E_2...E_n. Находясь в стационарном состоянии, атом энергии не излучает.

В стационарном состоянии атома электроны движутся по стационарным орбитам.

Излучение или поглощение энергии атомом происходит при переходе его из одного стационарного состояния в другое.

Гипотеза де Бройля

- С движущейся частицей связан волновой процесс
- Длина волны процесса $\lambda = h/p$

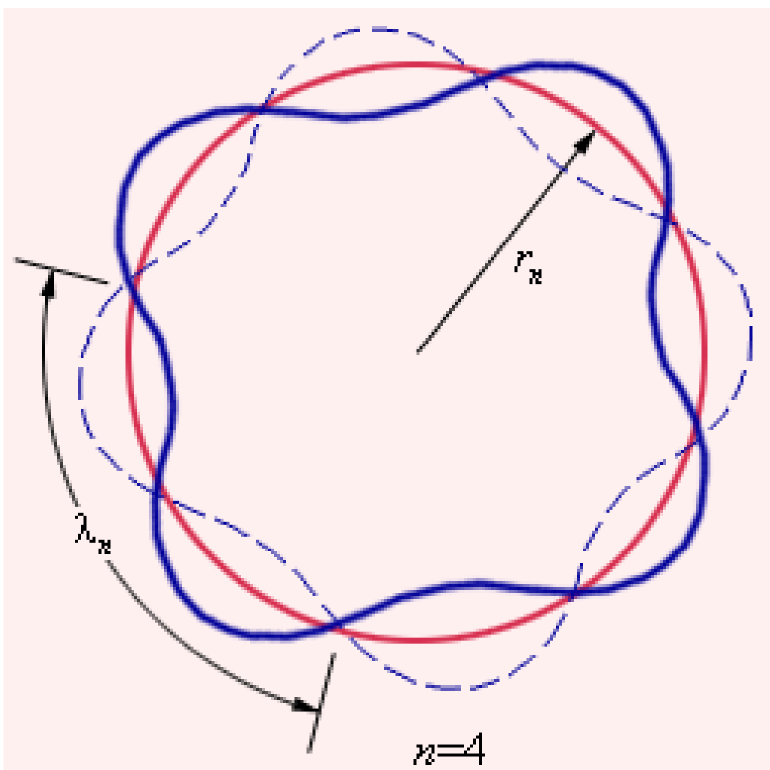
- Объясняет правила квантования в атоме Бора
- Ничего не говорит о природе этих волн

Характерные длины волн:

Свободный электрон при T=300K: $m = 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг, $\lambda = 3$ нм.

Микроб $m = 10^{-15}$ кг, $v = 1$ мкм/с; $\lambda = 0.001$ нм.

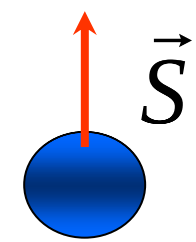
Гипотеза де Бройля и объяснение атомного спектра



Спин частицы
(собственный момент импульса)

Для **электрона** его значение равно: $S = \frac{1}{2}\hbar = \frac{h}{4\pi}$

или просто $s = 1\!/\!_2$, в единицах $\hbar$.



Проекция спина электрона на некоторую ось z принимает значения: $S_z = -1\!/\!_2 ; +1\!/\!_2$

Принцип Паули: в атоме в каждом состоянии с квантовыми числами (n,l,m) может находиться не более 2-х электронов с противоположными проекциями спина.

! Спину соответствует **собственный магнитный момент**, а значит появляется **добавочная энергия частицы в магнитном поле !**

! Принцип Паули позволяет объяснить внутреннюю структуру атомов и обосновать построение периодической системы элементов Д.И.Менделеева.

Корпускулярно-волновой дуализм, соотношение неопределенностей

- И кванты света, и частицы (электроны) проявляют как свойства частиц, так и свойства волн
- Волновой процесс не определяется в одной точке пространства и в определенный момент времени:

$$\Delta x \Delta p_x > h$$

$$\Delta E \Delta t > h$$

соотношение неопределенностей Гейзенберга

Природа волнового процесса?

- Состояние частицы описывается его волновой функцией $\Psi(x,y,z,t)$
- Волновая функция – комплексная величина $\Psi = Ae^{i\varphi}$, A – амплитуда, φ – фаза, $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$, $i^2 = -1$
- Вероятность Δw найти частицу в объеме ΔV есть $\Delta w = |\Psi|^2 \Delta V = A^2 \Delta V$
- Для стационарных состояний с определенным значением энергии зависимость волновой функции от времени есть $\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{i\omega t}$

Движение свободной частицы

Уравнение Шредингера

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

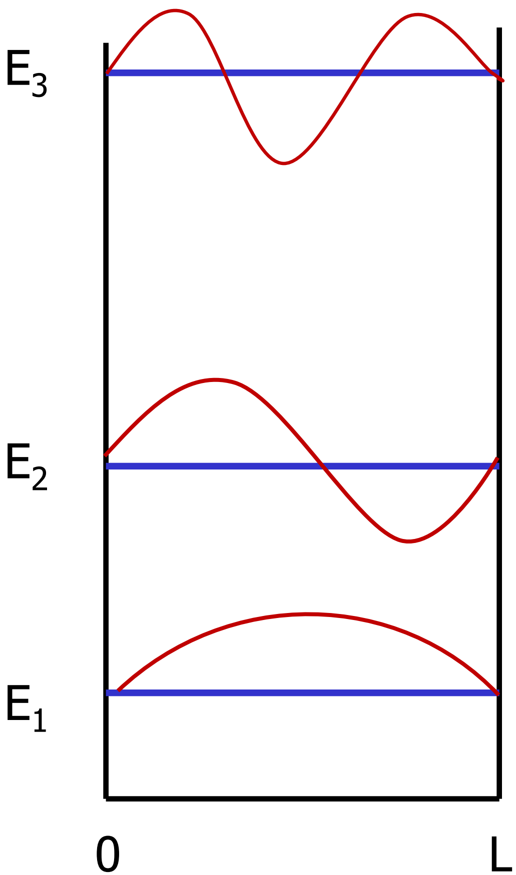
V = 0 (свободная частица)

Решение:

$$\Psi = A\cdot e^{i(kx-\omega t)}$$

бегущая волна

Частица в потенциальной яме (квантовый размерный эффект)



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

Учет граничных условий:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

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

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

n = 1,2,3…
квантовое число

Следствия

- Пространственное ограничение движения частицы приводит к **квантованию** ее энергетического спектра
- Чем меньше область, в которой частица может двигаться, тем больше расстояние между уровнями квантования энергии

Переход от атома к твердому телу

Пусть мы сближаем N атомов. Как трансформируются уровни энергии электронов?

- Наиболее подвержена изменению энергия внешних электронных оболочек
- По мере сближения атомов средняя энергия электронов сначала падает, затем резко растет
- Существует оптимальное расстояние между атомами, соответствующее минимуму энергии
- Атомные уровни внешних электронных оболочек размываются в энергетические зоны
- Полное число электронных состояний в зоне сохраняется

Трансляционная симметрия в кристаллах

- Важные свойства электрона, позволяющие построить теорию электронных состояний
  - Квантовые частицы неотличимы
  - Вероятностный характер нахождения электрона в том или ином месте кристалла
- Трансляционная инвариантность
  - При сдвиге на постоянную кристаллической решетки вероятность нахождения электрона не изменяется

Движение в периодическом потенциале

Теорема Блоха:

для V(**r**) = V(**r**+**a**)

решение уравнение Шредингера

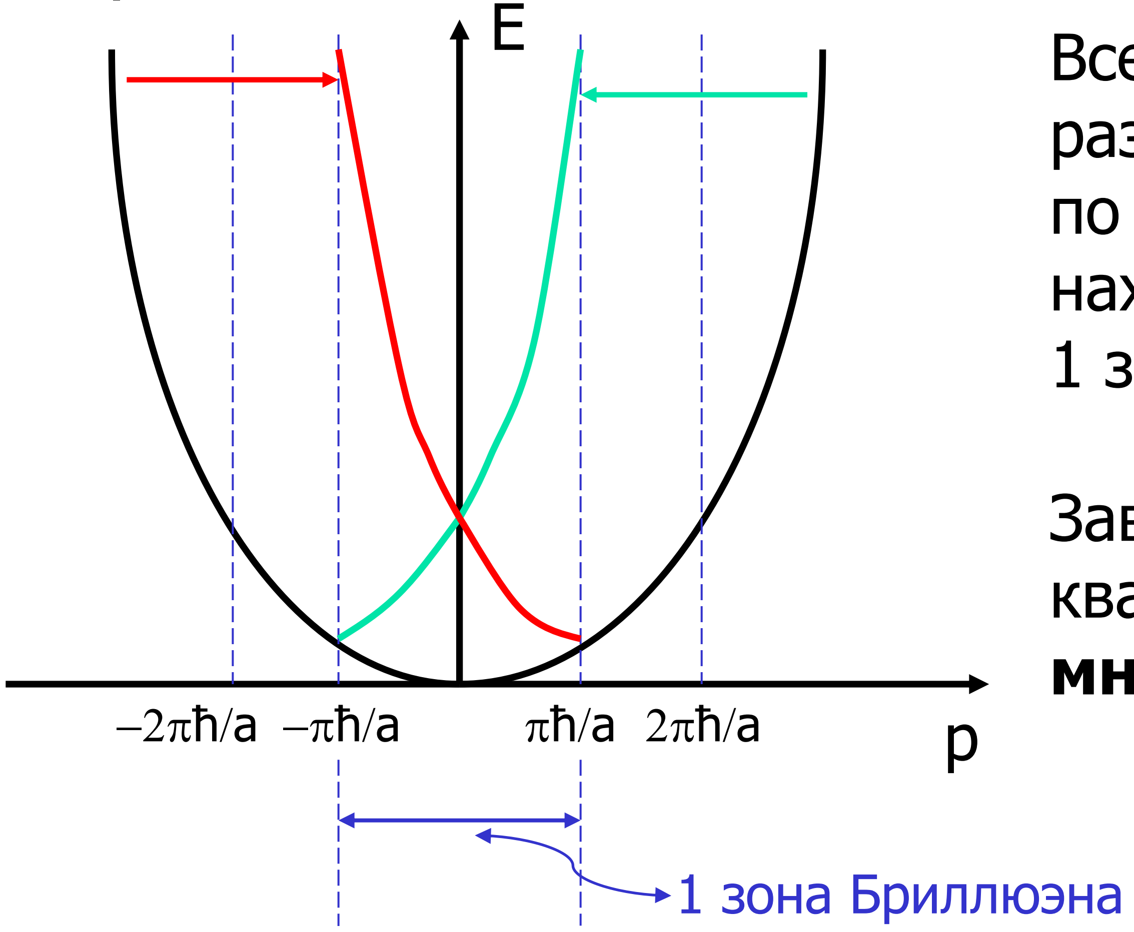
$$\psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{kr}}$$

Где u(**r**) – периодическая функция

с периодом **a**; **k** – квазиволновое число;

p=ħ**k** – квазиимпульс частицы

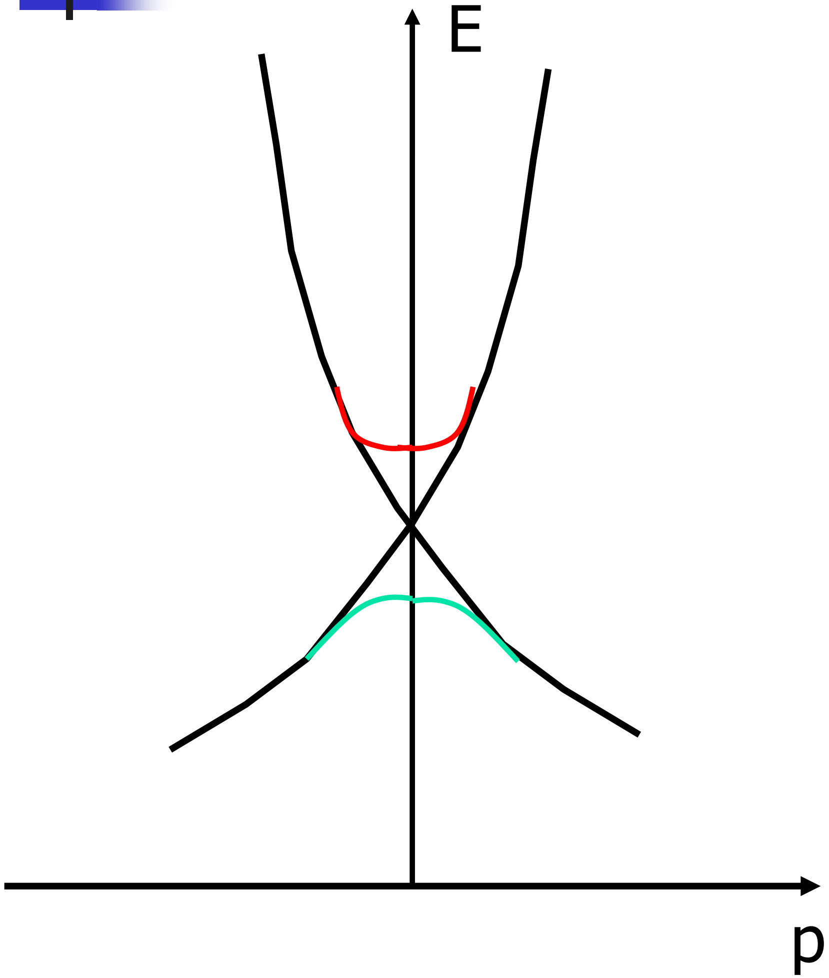
Зона Бриллюэна



Все физически различные состояния по квазиимпульсу находятся внутри 1 зоны Бриллюэна

Зависимость энергии от квазиимпульса становится **многозначной**

Следствие взаимодействия с решеткой для закона дисперсии



На границе
зоны Бриллюэна v=0,

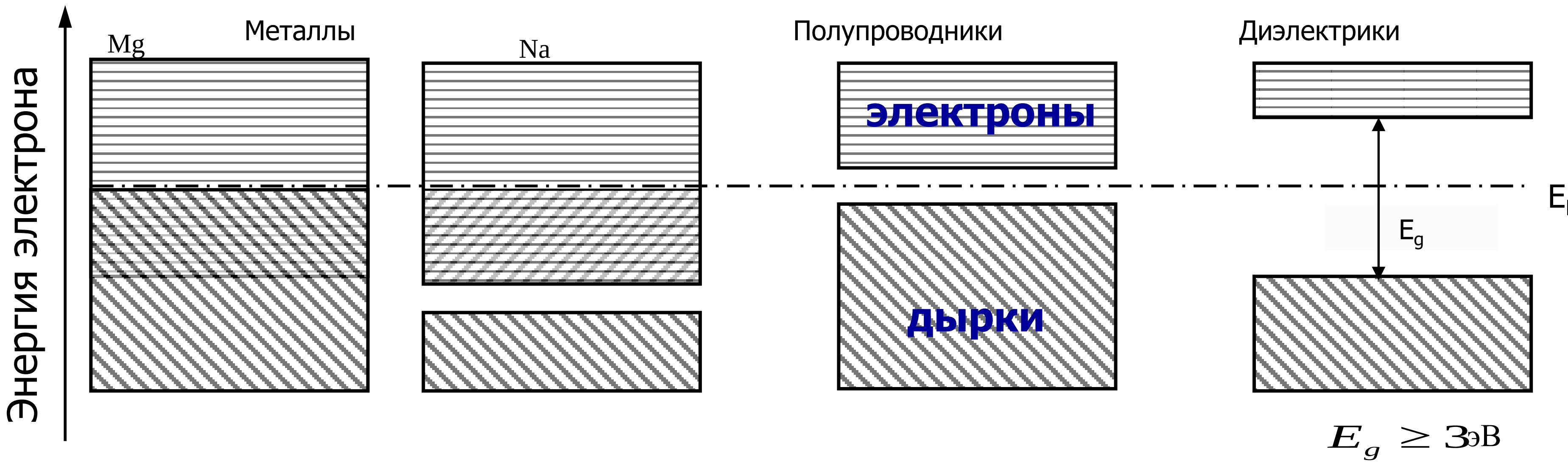
следовательно

$$\frac{\partial E}{\partial p} = 0$$

Появляется
запрещенная зона

Виды твердых тел и квазичастиц

упрощенная зонная диаграмма:



Вследствие взаимодействий с большим числом атомов в твердом теле существуют не изолированные свободные электроны, а квазичастицы: **электроны проводимости** (q_e=- e = -1.6·10^{-19} Кл) и незаполненные места в валентной зоне - **дырки** (q_h= e = 1.6·10^{-19} Кл).

Эффективные массы **электронов и дырок:** $m^* = (0.1-2)m_o$

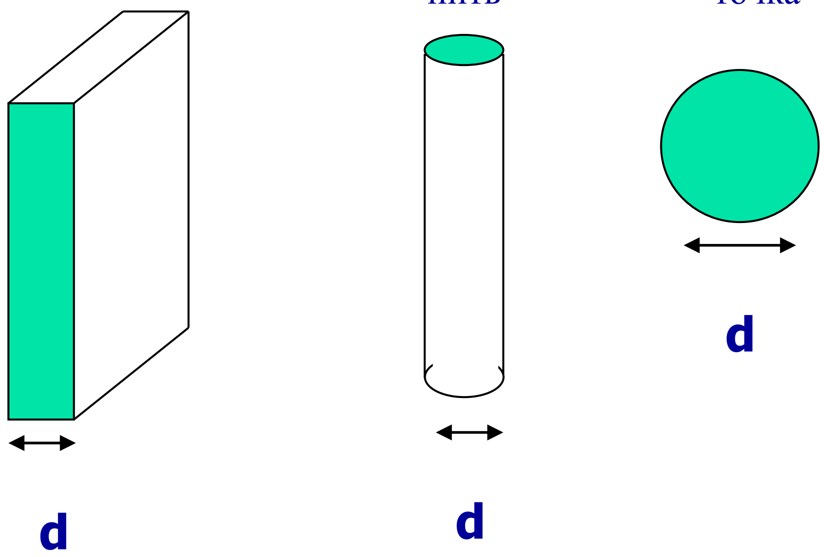
Колебаниям атомов в твердом теле соответствует квазичастицы – **фононы.**

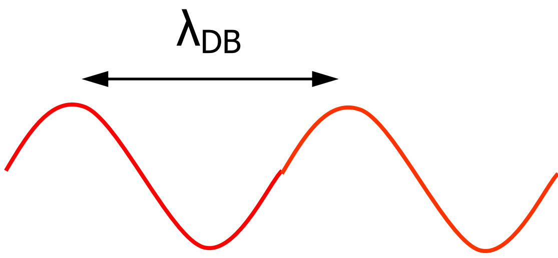
Основные типы идеальных твердотельных наноструктур

2D Квантовая яма

1D Квантовая нить

0D Квантовая точка





$$\mathbf{d} \sim \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{DB}} = h / p$$

p – квазиимпульс электрона или дырки в кристалле

Для электрона в полупроводнике с $m_e^* = (0.1\text{-}1)\, m_o$:   3 нм < λ_{DB} < 30 нм

В наноструктурах с минимальными размерами 1 -100 нм электроны, дырки и другие квазичастицы будут испытывать ограничения при движении, что приводит к **квантовому размерному эффекту**.

Основные выводы

- Ограничение размера кристалла существенно сказывается на его электрических, оптических и магнитных свойствах
- Электрические, оптические и магнитные свойства определяются не только собственно материалом, но и его размерами и формой