# Квантовая механика наносистем. Квантоворазмерные эффекты в наносистемах.

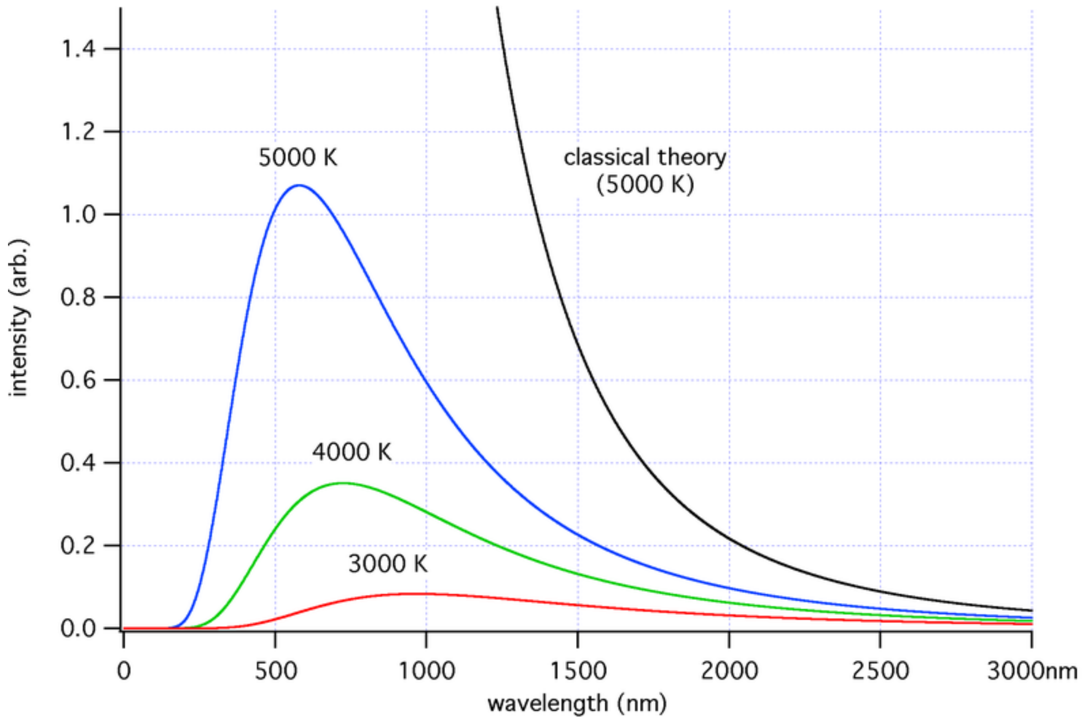
Д.Р. Хохлов

*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»

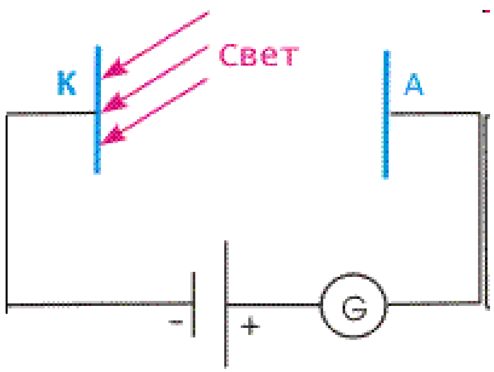


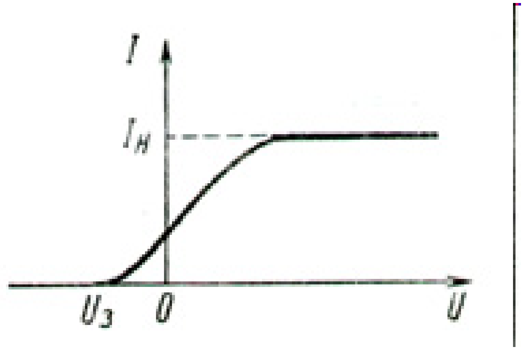

Решение проблемы:
гипотеза Планка

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

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

# Законы фотоэффекта



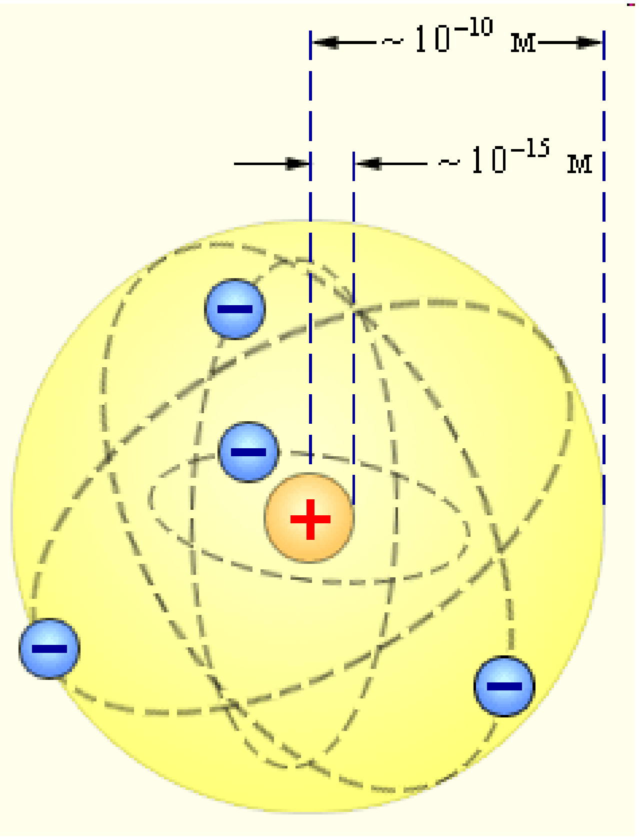




Фототок насыщения пропорционален световому потоку, падающему на металл $\mathbf{I_н \sim Ф}$

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

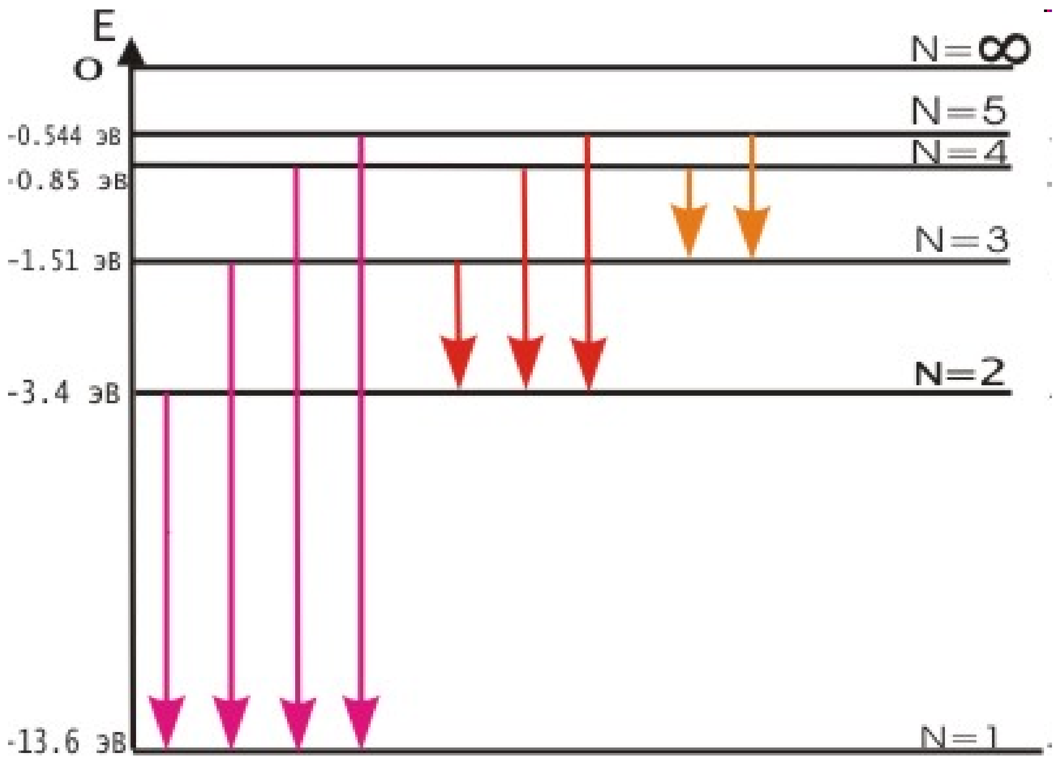
Для каждого вещества существует определенное значение частоты $\upsilon_0$, называемое ***красной границей фотоэффекта***. Фотоэффект имеет место только при частотах $\upsilon > \upsilon_0$,
Если же $\upsilon < \upsilon_0$, то фотоэффект не происходит при любой интенсивности света.

# Планетарная модель атома



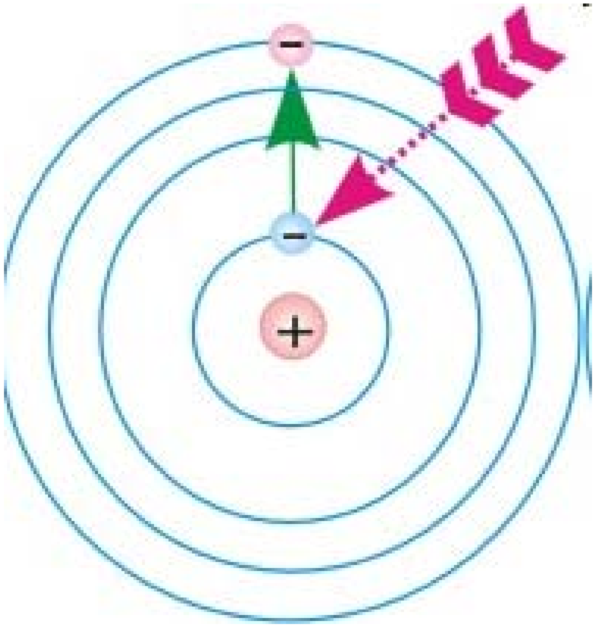

Проблема:
электрон движется с ускорением
следовательно, излучает,
следовательно, теряет энергию
следовательно, падает на ядро

# 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 $\lambda = h/p$

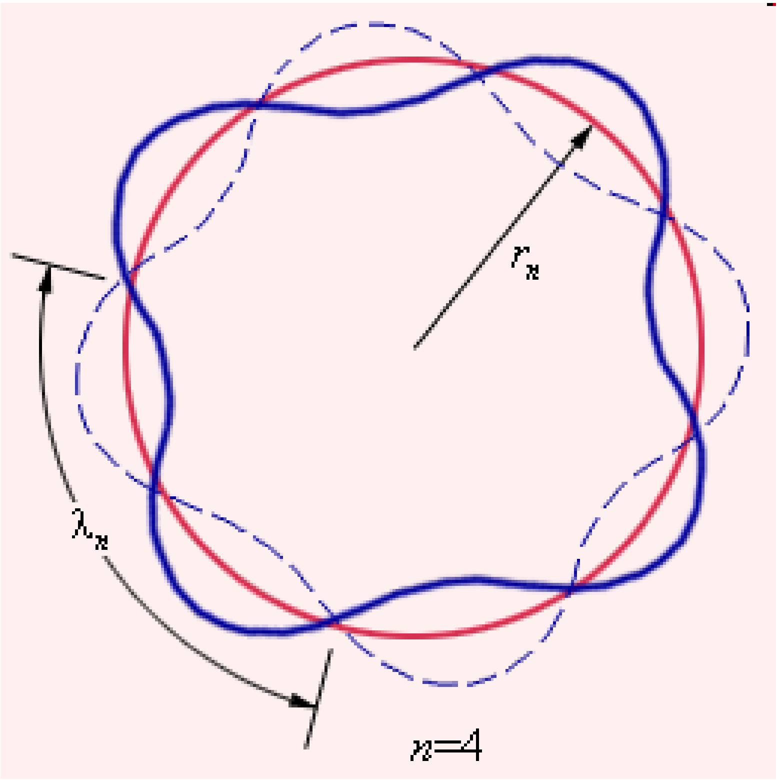
- Объясняет правила квантования в атоме Бора
- Ничего не говорит о природе этих волн

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



# 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, $\varphi$ – фаза, $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$, $i^2 = -1$
- Вероятность $\Delta w$ найти частицу в объеме $\Delta V$ 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

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

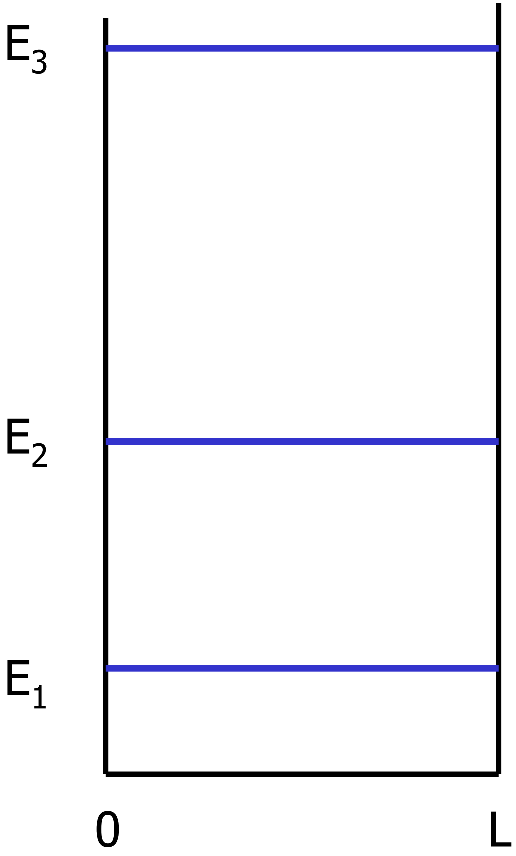
V = 0 (свободная частица)

Решение:

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

бегущая волна

# Частица в потенциальном ящике




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

Учет граничных условий:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

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

$n$ = 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

# Атом водорода

Трехмерность задачи – состояние описывается тремя квантовыми числами: $n$, $l$, $m_l$

$n$=1,2,3…

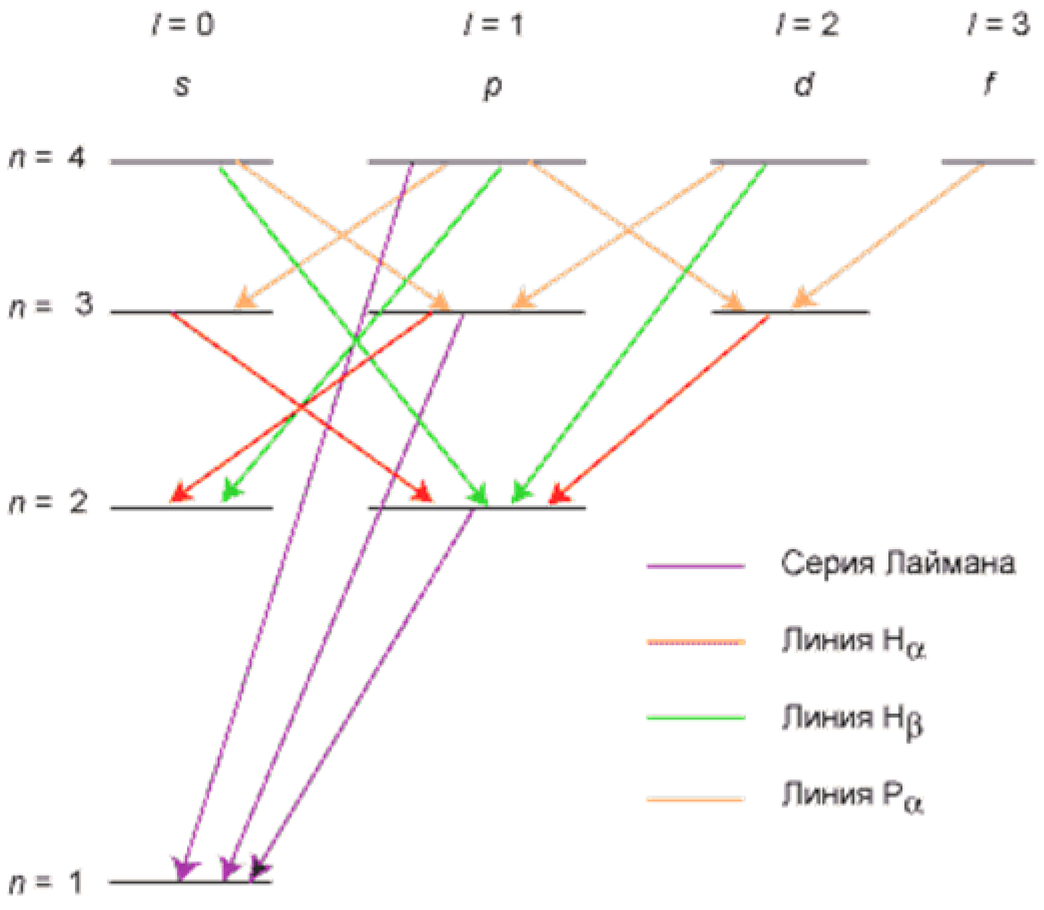
$l$=0,1,…($n$-1)

$m_l$=-$l$, -$l$+1,…0,…$l$-1, $l$

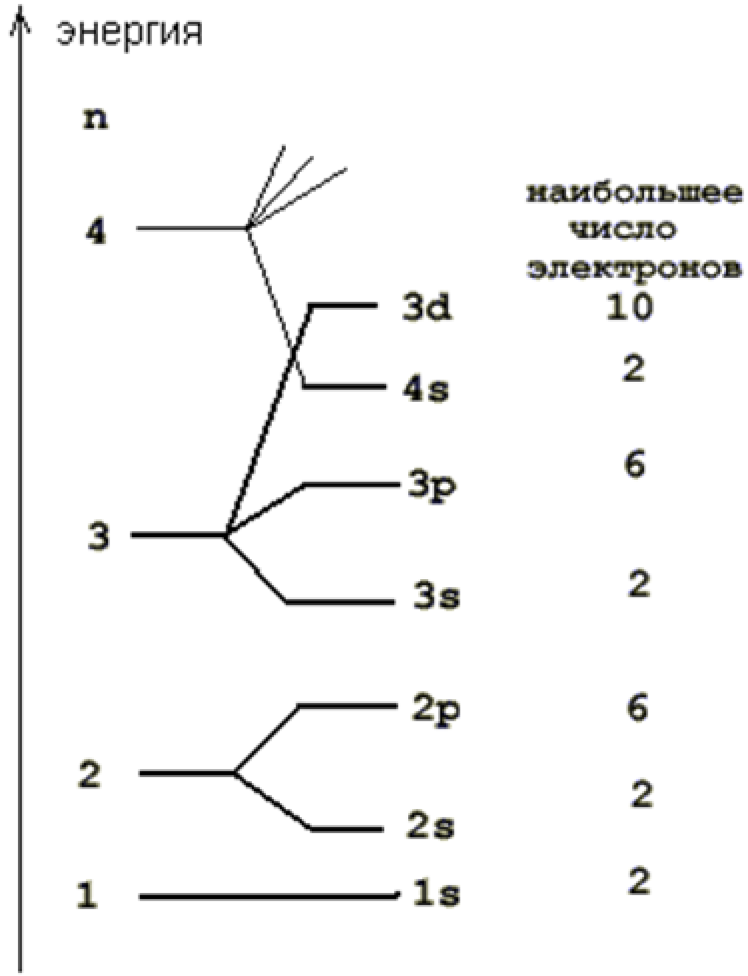
Спин частицы S - собственный момент количества движения. Для электрона S=ħ·1/2, а его проекция на некоторую ось z есть $S_z$=+1/2, -1/2 (·ħ)

Принцип Паули: для частицы с полуцелыми спином в каждом квантовом состоянии, (для атома водорода характеризуемом набором квантовых чисел $n$, $l$, $m_l$, $S_z$) может находиться не более одной частицы

# Атом водорода – квантовые состояния



# Схема уровней в многоэлектронных атомах



# Трансформация уровней в многоатомных системах

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

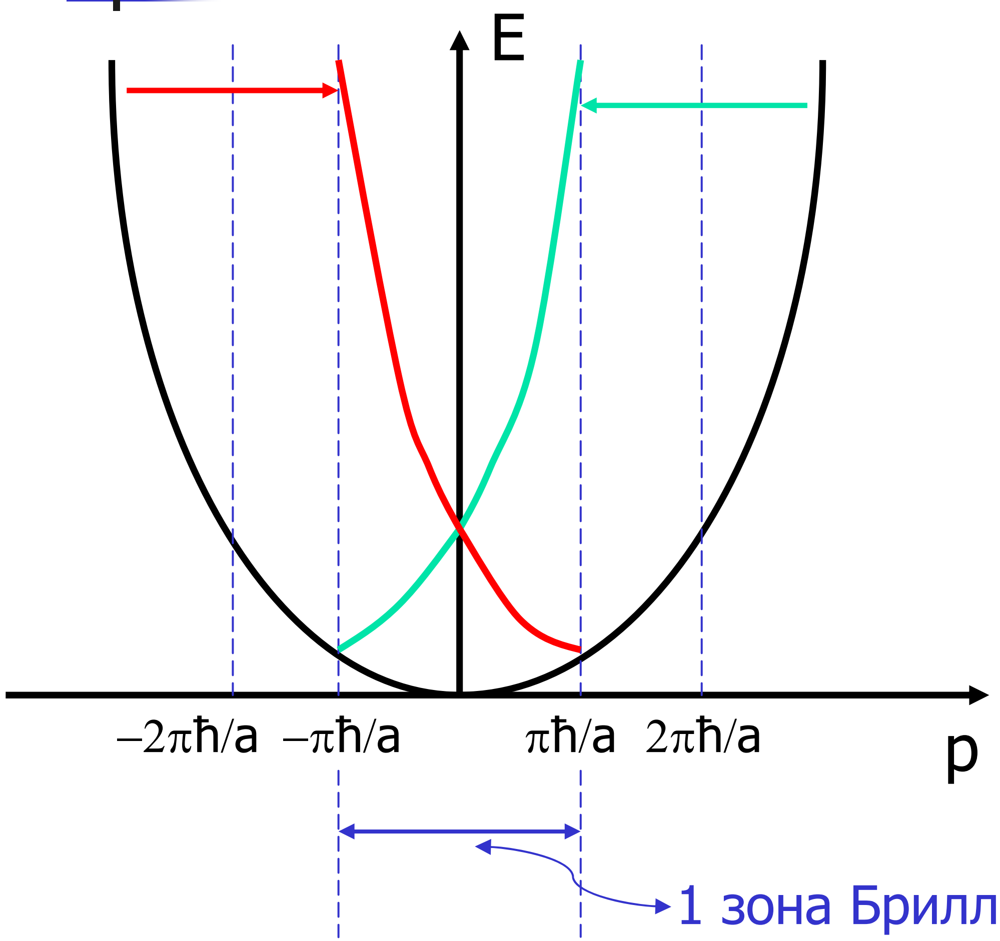
# Свойства квазиимпульса

- Квазиимпульс является «хорошим» квантовым числом
- Квазиимпульс изменяется дискретно

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L}$$

- Состояния, различающиеся по квазиимпульсу на $2\pi\hbar/a$ являются эквивалентными

# Зона Бриллюэна




Все физически различные состояния по квазиимпульсу находятся внутри 1 зоны Бриллюэна

Зависимость энергии от квазиимпульса становится **многозначной**

# Взаимодействие электрона с решеткой

- При малых p ($\lambda_B >> a$) разности фаз волн, отраженных от атомов, малы

- При $m\lambda_B = 2a$ (m – целое) разности фаз, отраженных от соседних атомов, равны $2\pi m$, **электрон останавливается**

  Но: $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$, условие отражения:

  $p = \pi m/a$ – **граница зоны Бриллюэна!**

# Что дает введение квазиимпульса?

Движение заряженной частицы в кристалле описывается уравнениями

$$m_0 \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_{ext} + \sum \mathbf{F}_{\text{int}}$$

то есть $\mathbf{p} \neq m_0 \mathbf{v}$ !

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \sum \mathbf{F}_{ext}$$

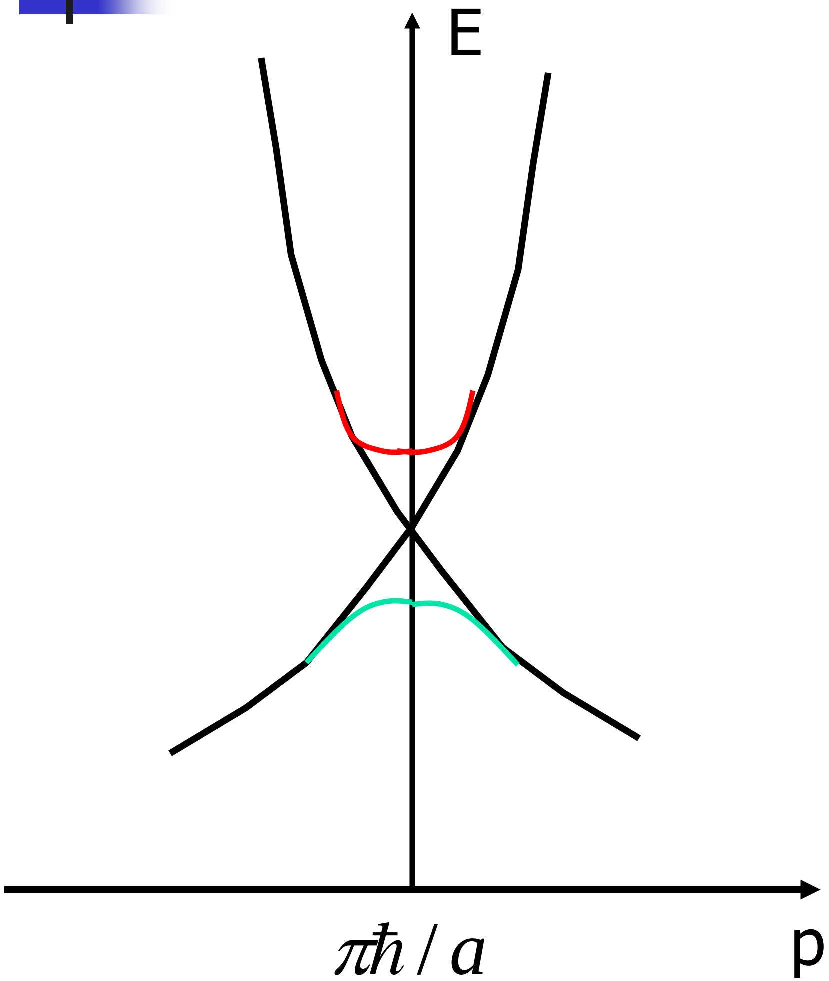
$$\mathbf{v} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}$$

Можно определить

$$\sum_{j=1}^{3} m_{ij} \frac{dv_j}{dt} = (F_{ext})_i$$

где $m_{ij} = \left( \dfrac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} \right)^{-1}$

# Следствие взаимодействия с решеткой для закона дисперсии



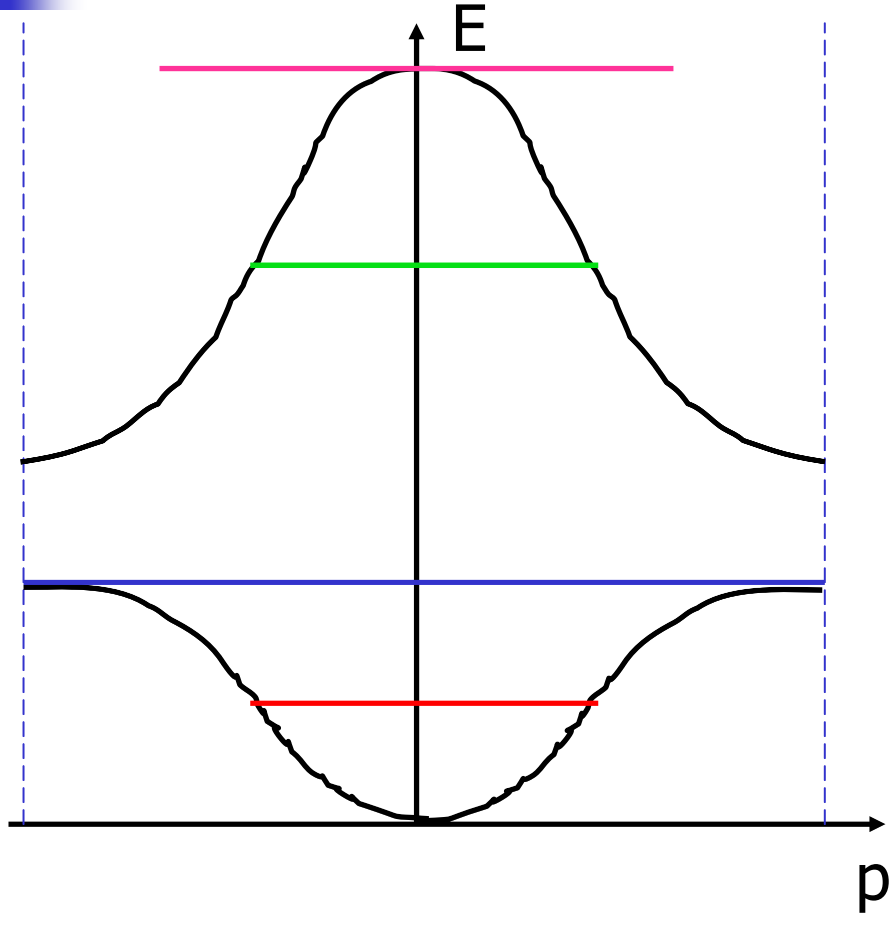

На границе зоны Бриллюэна v=0,

следовательно

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

Появляется **запрещенная зона**

# Заполнение зон




Число мест в зоне Бриллюэна

$$2 \cdot \frac{2\pi\hbar / a}{2\pi\hbar / L} = 2\frac{L}{a} = 2N$$

где $N$ – число атомов

n=1 эл-н/атом

n=2 эл-на/атом

n=3 эл-на/атом

n=4 эл-на/атом

# Основная идея

- 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