תרגיל בית מספר 5: מכניקה קוונטית, מחסום פוטנציאל ומנהור

שאלה 1: מחסום פוטנציאל מסוג דלתא

בכיתה עסקנו במחסום פוטנציאלים ריבועי בעל עובי סופי כלשהוא. כעת נניח שהמחסום דק מספיק כך שניתן לקרבו לפונקציית דלתא: $V(x)=H\delta(x)$ (שימו לב של- H יחידות של אנרגיה כפול מרחק עקב הגדרת הפונקציה).

בשאלה זו נרצה לראות כיצד פוטנציאל הדלתא משפיע על פונקציית הגל שלנו.

א. מצאו את הקשר בין נגזרות פונקציית הגל משני צידי הדלתא (כלומר את הקשר בין $\frac{d\psi}{dx}|_{0^+}, \frac{d\psi}{dx}|_{0^-}$).

כיצד הוא תלוי ב- H?

הדרכה: כתבו את משוואת שרדינגר עם הפוטנציאל הנתון ובצעו אינטגרציה על כולה בתחום $\pm\varepsilon$. מכיוון ש- ε יכול להיות קטן כרצוננו (כך אמר אביב צנזור), השאיפו את התוצאה שקיבלתם ל-0. אם ישנם איברים שאמורים להתאפס, הסבירו למה (ואמורים להיות אם זה כתוב בהדרכה ☺).

משוואת שרדינגר החד מימדית מקיימת:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+H\delta(x)\psi=E\psi$$

כדי להתמודד עם הדלתא, נבצע אינטגרציה בתחום $\pm\varepsilon$ ונשאיפו ל-0. נקבל:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx+\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}H\delta(x)\psi dx=\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}E\psi dx\Rightarrow$$

$$\Rightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d\psi}{dx}|_{x=\varepsilon}-\frac{d\psi}{dx}|_{x=-\varepsilon}\right]+H\psi(0)=\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}E\psi dx$$

כעת נוכל להשאיף את ε לאפס כאשר נשים לב שמטעמי רציפות פונקציית הגל, צד ימין מתאפס. נישאר רק עם צד שמאל:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d\psi}{dx}|_{x=0^+}-\frac{d\psi}{dx}|_{x=0^-}\right]+H\psi(0)=0\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\frac{d\psi}{dx}|_{x=0^+}-\frac{d\psi}{dx}|_{x=0^-}=\frac{2mH\psi(0)}{\hbar^2}$$

שימו לב שכעת הנגזרת של פונקציית הגל אינה רציפה!

ב. פתרו באופן מלא (כולל ציור) את בעיית הפיזור עבור $H=1[eV\cdot nm]$ באותו אופן שראינו בכיתה (השתמשו בתוצאה של הסעיף הקודם והניחו שמדובר במסת האלקטרון). מהן הסתברויות ההחזרה והמעבר T,R? כיצד אופיין המעבר T משתנה לעומת אופיין המעבר עבור מחסום בעובי סופי? מדוע?

כעת עלינו לפתור את הבעיה רק עבור 2 תחומים ולא 3. זהו אחד היתרונות של השימוש בפונקציות דלתא. נגדיר את פונקציית הגל בבעיה:

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ikx}+re^{-ikx}, x<0 \\ te^{ikx}, x\geq 0 \end{cases}, k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

נדרוש את 2 תנאי השפה על פונקציית הגל ונגזרתה בנקודת התפר:

$$\begin{cases} 1+r=t \\ ik-ikr+\frac{2mHt}{\hbar^2}=ikt \end{cases} \Rightarrow ik-ik(t-1)+\frac{2mHt}{\hbar^2}=ikt \Rightarrow 2ik=2ikt-\frac{2mHt}{\hbar^2} \Rightarrow$$

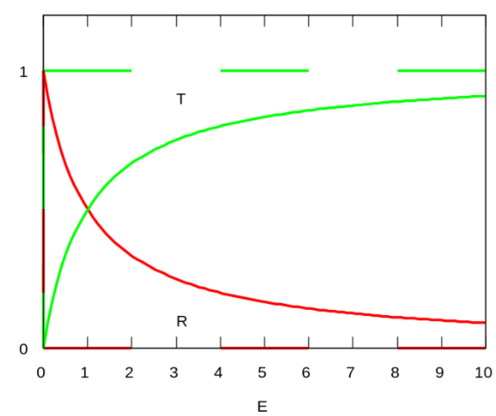
$$\Rightarrow 2ik=t(2ik-\frac{2mH}{\hbar^2}) \Rightarrow t=\frac{2ik}{2ik-\frac{2mH}{\hbar^2}}=\frac{1}{1+\frac{imH}{k\hbar^2}}=\frac{1}{1+\frac{imH}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\hbar^2}}=\frac{1}{1+\frac{i\sqrt{m}H}{\sqrt{2E}\hbar}}$$

ניקח את הביטוי בערכו המוחלט בריבוע על מנת לחלץ את מקדם המנהור:

$$T=|t|^2=\frac{1}{1+\frac{i\sqrt{m}H}{\sqrt{2E}\hbar}}\cdot\frac{1}{1-\frac{i\sqrt{m}H}{\sqrt{2E}\hbar}}=\frac{1}{1+\frac{mH^2}{2E\hbar^2}}$$

עבור ערכים נמוכים של האנרגיה, מקדם ההעברה שואף ל-0 בעוד שעבור ערכים גדולים של האנרגיה, הוא שואף ל-1. תוצאה זו מהווה בדיקת שפיות ואנו מצפים לה.

הגרף של מקדם ההעברה יראה כך (עד כדי האנרגיות הטיפוסיות שהתבקשתם להציב ☺):



ג. כעת מוסיפים לבעיה שבסעיף הקודם מחסום דלתא נוסף במרחק של $10[nm]$ מהמחסום הראשון (כלומר שישנם 2 מחסומי דלתא). פתרו שוב את בעיית הפיזור עבור אותם הנתונים וציירו את אופיין המעבר T. כיצד השתנה אופיין המעבר הנוכחי לעומת האופיין מהסעיף הקודם? מדוע?

כעת החישוב הופך ליותר מורכב מכיוון שישנו אזור שלישי בבעיה. שימו לב שעדיין נוח לפתור 3 אזורים במקום 5 (אם המחסומים היו בעלי גודל סופי כלשהוא). פונקציית הגל הכללית תקיים:

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ikx}+re^{-ikx}, x<0 \\ Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, 0\leq x<L \\ te^{ikx}, x\geq L \end{cases}, k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

שוב נציב את תנאי השפה (כעת יש 4 תנאים, 2 לכל נקודת תפר):

$$\begin{cases} 1+r=A+B \\ ik-ikr+\dfrac{2mH(A+B)}{\hbar^2}=ikA-ikB \\ Ae^{ikL}+Be^{-ikL}=te^{ikL} \\ ikAe^{ikL}-ikBe^{-ikL}+\dfrac{2mHte^{ikL}}{\hbar^2}=ikte^{ikL} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1+r=A+B \\ 1-r+\dfrac{2mH(A+B)}{ik\hbar^2}=A-B \\ Ae^{ikL}+Be^{-ikL}=te^{ikL} \\ Ae^{ikL}-Be^{-ikL}=te^{ikL}(1-\dfrac{2mH}{ik\hbar^2}) \end{cases}$$

נחלץ את הקשר בין A, B מהסט התחתון של המשוואות:

$$\begin{cases} Ae^{ikL}+Be^{-ikL}=te^{ikL} \\ Ae^{ikL}-Be^{-ikL}=te^{ikL}(1-\dfrac{2mH}{ik\hbar^2}) \end{cases} \Rightarrow \frac{Ae^{ikL}-Be^{-ikL}}{Ae^{ikL}+Be^{-ikL}}=1-\frac{2mH}{ik\hbar^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow Ae^{ikL}-Be^{-ikL}=(1-\frac{2mH}{ik\hbar^2})(Ae^{ikL}+Be^{-ikL}) \Rightarrow Ae^{ikL}\frac{2mH}{ik\hbar^2}=Be^{-ikL}(2-\frac{2mH}{ik\hbar^2}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A=Be^{-2ikL}(\frac{ik\hbar^2}{mH}-1)$$

נוכל להציב את הקשר הנ"ל בתוך המשוואה העליונה בסט הנ"ל:

$$Ae^{ikL}+Be^{-ikL}=te^{ikL} \Rightarrow Be^{-ikL}(\frac{ik\hbar^2}{mH}-1)+Be^{-ikL}=te^{ikL} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow B=t\frac{mH}{ik\hbar^2}e^{2ikL}$$

כעת נוכל להציב את הקשרים בצמד הראשון של המשוואות ולמצוא את מקדם ההעברה:

$$\begin{cases} 1+r=A+B \\ 1-r+\dfrac{2mH(A+B)}{ik\hbar^2}=A-B \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1+r=A+B \\ 1-r=A-B-\dfrac{2mH(A+B)}{ik\hbar^2} \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 1=A-\frac{mH(A+B)}{ik\hbar^2} \Rightarrow A(1-\frac{mH}{ik\hbar^2})=1+B\frac{mH}{ik\hbar^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow Be^{-2ikL}(\frac{ik\hbar^2}{mH}-1)(1-\frac{mH}{ik\hbar^2})=1+B\frac{mH}{ik\hbar^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow t\frac{mH}{ik\hbar^2}e^{2ikL}e^{-2ikL}(\frac{ik\hbar^2}{mH}-1)(1-\frac{mH}{ik\hbar^2})=1+t\frac{mH}{ik\hbar^2}e^{2ikL}\frac{mH}{ik\hbar^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow t(1-\frac{mH}{ik\hbar^2})^2=1+te^{2ikL}\left(\frac{mH}{ik\hbar^2}\right)^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow t[(1-\frac{mH}{ik\hbar^2})^2-e^{2ikL}\left(\frac{mH}{ik\hbar^2}\right)^2]=1 \Rightarrow$$

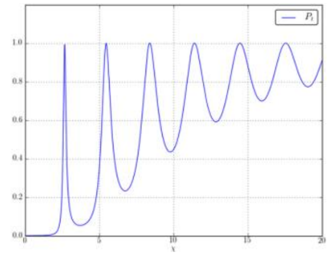
$$t=\frac{1}{(1-\frac{mH}{ik\hbar^2})^2-e^{2ikL}\left(\frac{mH}{ik\hbar^2}\right)^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T=|t|^2=\frac{1}{\left|(1-\frac{mH}{ik\hbar^2})^2-e^{2ikL}\left(\frac{mH}{ik\hbar^2}\right)^2\right|^2}=\frac{1}{\left|(1-\frac{mH}{i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\hbar^2})^2-e^{2i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L}\left(\frac{mH}{i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\hbar^2}\right)^2\right|^2}=$$

$$=\frac{1}{\left|(1-\frac{\sqrt{m}H}{i\sqrt{2E}\hbar})^2-e^{2i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L}\left(\frac{\sqrt{m}H}{i\sqrt{2E}\hbar}\right)^2\right|^2}=\frac{1}{\left|(1-\frac{\sqrt{m}H}{i\sqrt{2E}\hbar})^2+e^{2i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L}\left(\frac{\sqrt{m}H}{\sqrt{2E}\hbar}\right)^2\right|^2}$$

נשים לב שכאשר האנרגיה שואפת ל-0, ביטוי זה שואף ל-0 וכאשר האנרגיה שואפת לאינסוף, ביטוי זה שואף ל-1, ואכן כך אנו מצפים. אולם שתי נקודות קיצון אלו התנהגות מקדם ההעברה משתנה ומקבלת אופי גלי. אופי זה נובע מהתאבכויות בונות והורסות של פונקציית הגל בין שני המחסומים. כפי שנראה בהמשך הקורס, נראה כיצד מהתנהגות זו נובעים פסי האנרגיה בחומרים מסודרים ומחזוריים. ניתן לראות את האופי הגלי הנ"ל בביטוי השני במכנה, שכן יש תלות של האקספוננט המרוכב באנרגיה. מכך שנצפה להתנהגות מחזורית כלשהיא.

דוגמא להתנהגות עקום ההעברה:



שאלה 2: זרם זליגה בשער של טרנזיסטור

נניח כי אתם מהנדסי מחשבים, ועליכם לתכנן מחשב שבו הטרנזיסטורים הם קטנים ככל האפשר.

חלק חשוב בטרנזיסטור הינו שכבת תחמוצת מבודדת אשר מפרידה בין השער של הטרנזיסטור לבין המוליך למחצה שמתחתיו.

לרוע מזלכם, למדתם מכניקת קוונטים ולצערכם גיליתם כי ככל שהטרנזיסטור קטן יותר (שכבה מבודדת דקה יותר), כך לאלקטרונים יש סיכוי לזלוג דרכו אפילו במצב בוא הוא לא אמור להוליך זרם.

נחשוב על שכבת התחמוצת המבודדת כמחסום פוטנציאל בעובי a עם פוטנציאל בגובה $4\ [eV]$. מה העובי של השכבה המבודדת בה תוכלו להשתמש כך שלאלקטרונים עם אנרגיה $2[eV]$ תהיה הסתברות הקטנה מ0.05 למעבר?

בתרגול ראינו שהביטוי להסתברות המעבר דרך מחסום פוטנציאלים הינו:

$$T(E)=\frac{1}{1+\frac{V^2\sinh^2(qL)}{4E(V-E)}},\ q=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}$$

נציב את הערכים הנתונים ונדרוש כי הסתברות המעבר תהיה קטנה מ 0.05:

$$T=\frac{1}{1+\frac{V^2\sinh^2(qL)}{4E(V-E)}}=\frac{1}{1+\frac{V^2\sinh^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}L\right)}{4E(V-E)}}\leq 0.05$$

מכאן צריך להתקיים כי

$$\frac{1}{0.05}\leq 1+\frac{V^2\sinh^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}L\right)}{4E(V-E)}$$

$$19\cdot\frac{4E(V-E)}{V^2}\leq\sinh^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}L\right)$$

לאחר הצבת מספרים נקבל

$$\sqrt{19}\leq\sinh\left(\sqrt{\frac{2\times 9.1\times 10^{-31}[kg](4-2)\times 1.6\times 10^{-19}[joule]}{(1.05\times 10^{-34}[joule])^2}}L\right)$$

$$L\geq\frac{\operatorname{arcsinh}(\sqrt{19})}{\sqrt{\frac{2\times 9.1\times 10^{-31}[kg](4-2)\times 1.6\times 10^{-19}[joule]}{(1.05\times 10^{-34}[joule])^2}}}=0.3[nm]$$

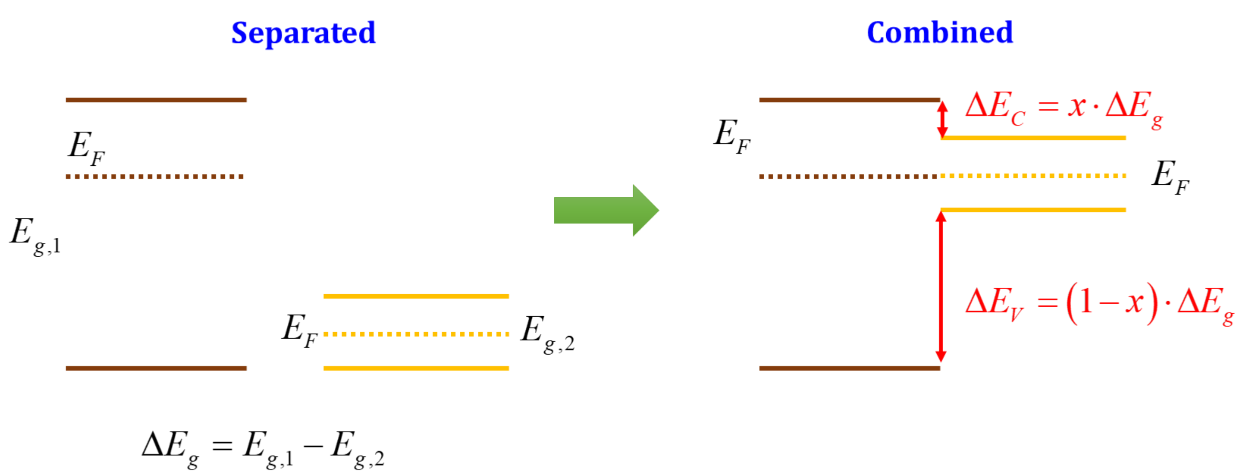
<u>שאלה 3: בור קוונטי בממד אחד</u>

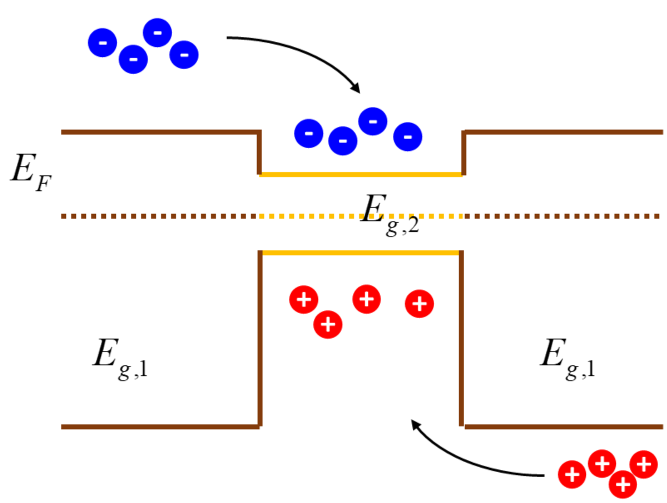
בתחום של ננו ואופטו-אלקטרוניקה לבור קוונטי יש חשיבות רבה בבניית התקנים יעילים לפליטת אור – לייזרים ו-LED. הבור נבנה ע״י הכנסה של מוליך למחצה עם פער אנרגיה E_{g2} בין שני מוליכים למחצה עם פער אנרגיה זהה E_{g1}. הבור מהווה מלכודת לנושאי מטען כך שקשה יותר לנושאי מטען לברוח מהבור וזה משפר את יעילות הפליטה של האור.

בתרגיל זה אנו נתרכז במשפחת החומרים AlGaAs-GaAs-AlGaAs שבאמצעותה ניתן לבנות לייזרים ודיודות הפולטים בתחום אורכי גל בין 600 ל-820 ננומטר. אנחנו נתרכז באלקטרונים החיים בפס הולכה. מהספרות ניתן לקבל הערכים הבאים

AlGaAs	$E_g = 1.673eV$
GaAs	$E_g = 1.424eV$

בנוסף נניח ש- $x = 0.6$





א. נניח שאורך הבור הינו $L = 10nm$. מצאו בעזרת מחשב את האנרגיות הבדידות בהן יכול להימצא האלקטרון. מהו מספר האנרגיות שמצאתם?

כפי שראינו בתרגול עלינו לפתור את מערכת המשוואות הבאה :

$$\textbf{\textit{Even Modes}}: \begin{cases} k_0|\cos(kL/2)| = k \\ \tan kL/2 > 0 \end{cases}$$

$$\textbf{\textit{Odd Modes}}: \begin{cases} k_0|\sin(kL/2)| = k \\ \tan kL/2 < 0 \end{cases}$$

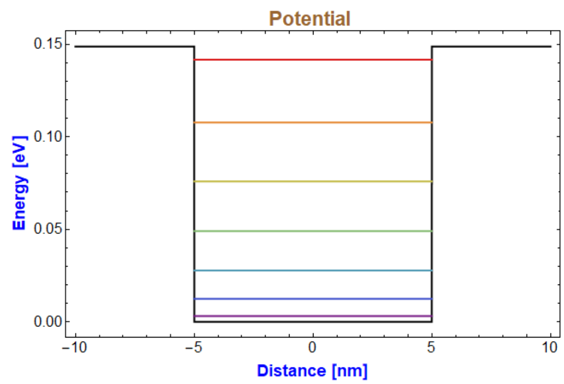
כאשר

$$k_0 = \sqrt{k^2 + \rho^2} = \sqrt{2m/\hbar^2 V}$$

מהתרשים ונתוני הטבלה ניתן לראות ש- $V = 0.1448eV$

פתרון נומרי למערכת הנ"ל מניב 7 אנרגיות עצמיות כדלקמן

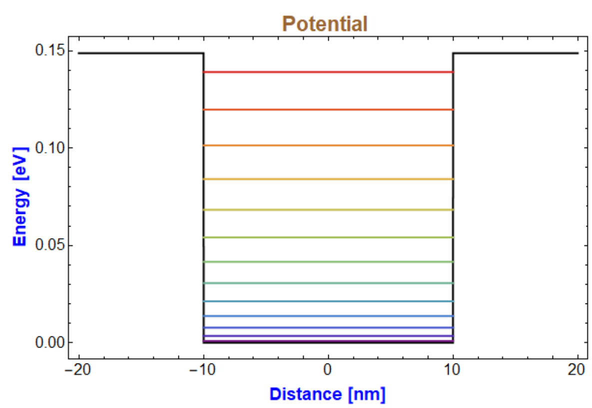
$$E_n = \{3.1, 12.4, 27.7, 49.0, 75.9, 107.7, 141.8\}meV$$



ב. כעת מגדילים את אורך הבור פי שניים $L = 20nm$ מצאו את האנרגיות העצמיות כעת. מהו מספר האנרגיות שמצאתם?

כשחוזרים על החישוב מסעיף א' עבור רוחב הבור הכפול, נקבל 13 (כמעט פי שניים ממה שמצאנו בסעיף הקודם) אנרגיות עצמיות כדלקמן :

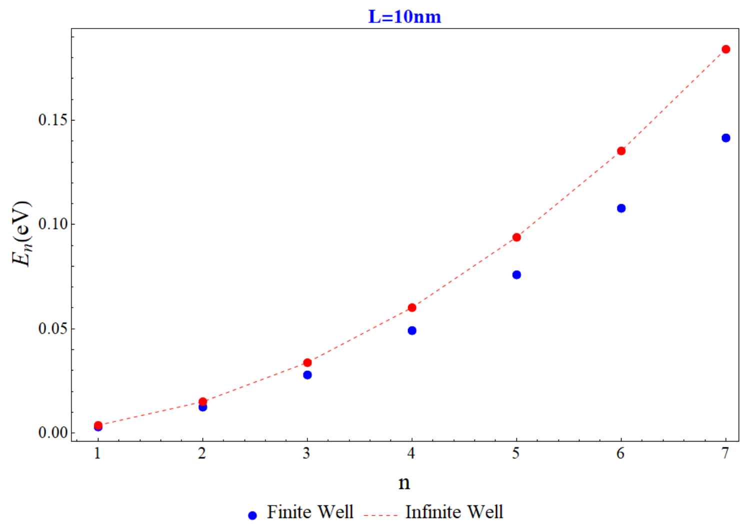
$$E_n = \{0.85, 3.4, 7.7, 13.6, 21.2, 30.6, 41.5, 54.1, 68.3, 84.1, 101.3, 119.8, 139.1\}meV$$

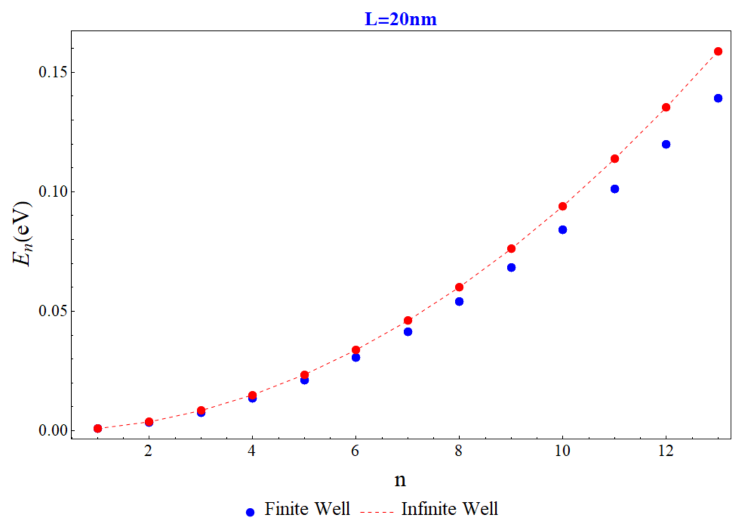


ג. כעת נניח שהבור הינו אינסופי בציר האנרגיה. חזרו על סעיפים א' וב' וציינו מהי הסטייה באנרגיה בין הערכים בבור הסופי לבין ערך האנרגיה לבור אינסופי.

כעת נשתמש בנוסחה עבור בור פוטנציאל אינסופי

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





ד. עבור סעיף א' ציירו את הפונקציות העצמיות התואמות לאנרגיות שמצתם?

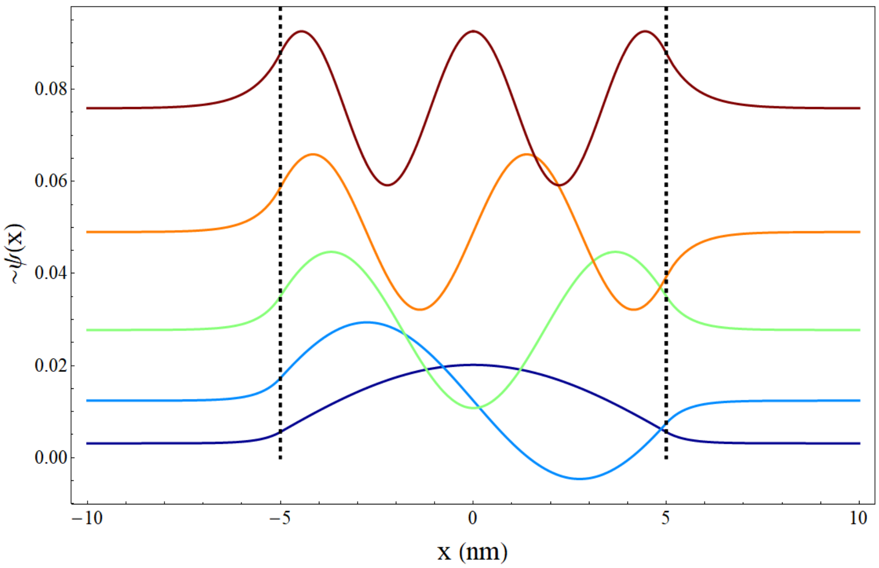
כדי לצייר פונקציות עצמיות עלינו למצוא קשר בין המקדמים השונים של פונקציית הגל המוגדרת למקוטעין

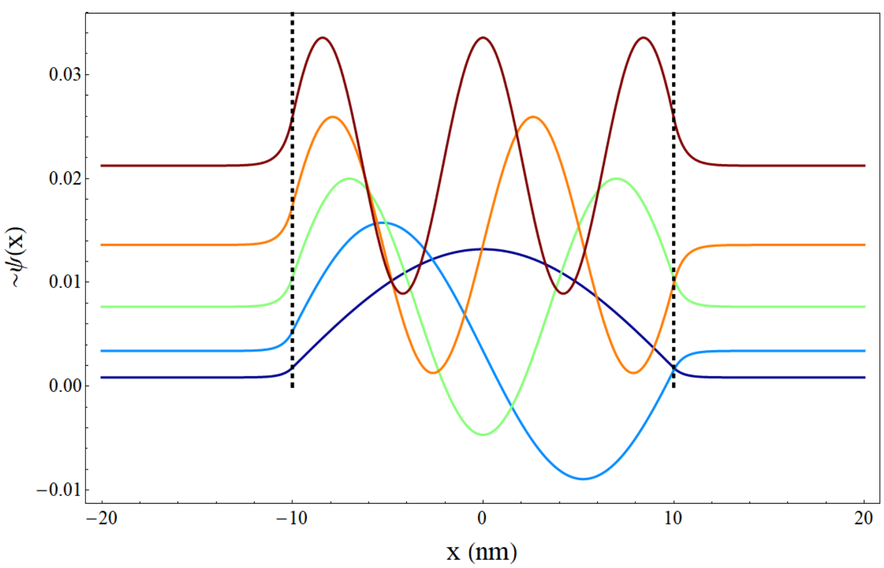
$$\begin{cases} Ae^{-\rho L/2} = Be^{-ikL/2} + Ce^{ikL/2} \\ \rho Ae^{-\rho L/2} = ikBe^{-ikL/2} - ikCe^{ikL/2} \\ De^{-\rho L/2} = Be^{ikL/2} + Ce^{-ikL/2} \\ -\rho De^{-\rho L/2} = ikBe^{ikL/2} - ikCe^{-ikL/2} \end{cases}$$

בחרנו לבטא את המקדמים באמצעות A.

$$\begin{cases} B = \frac{\rho + ik}{2ik} e^{(-\rho + ik)L/2} A \\ C = -\frac{\rho - ik}{2ik} e^{-(\rho + ik)L/2} A \\ D = \frac{\rho^2 + k^2}{2k\rho} \sin(kL) A \end{cases}$$

נצייר מספר פונקציות גל לדוגמא





ניתן לראות שפונקציות הגל זולגות פחות מהבור עבור רוחב בור גדול יותר.

ה. הסבירו איכותית מהי המשמעות של פרמטר x

הפרמטר הזה קובע את עומק הבור עבור אלקטרונים ועומק הבור עבור חורים.