

תרגיל בית מספר 5: מכניקה קוונטית, מחסום פוטנציאל ומנהור

שאלה 1: בור פוטנציאל חצי אינסופי

בשאלה זו נמצא ביטוי עבור האנרגיות של המצבים הקשורים בבור פוטנציאל חצי אינסופי. נניח אלקטרון בעל מסה m_e הנע תחת השפעת בור פוטנציאל חצי אינסופי. אורך הבור הוא L כלומר הפוטנציאל במרחב הוא

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , x < 0 \\ 0 & , 0 \leq x \leq L \\ V_0 & , x \geq L \end{cases}$$

נניח כי אנרגיית החלקיק היא $E < V_0$.

- א. רשמו את משוואת שרדינגר בכל התחומים במרחב וקבלו ממנה ביטוי כללי לפונקציית הגל בכל המרחב. (שימו לב לתנאים על פונקציית הגל ב $x \rightarrow \pm\infty$)
- ב. מהם תנאי השפה?
- ג. באמצעות תנאי השפה, קבלו ביטוי סגור עבור אנרגיית החלקיק בבור E . לשם נוחות, דאגו שהביטוי יכלול רק את האנרגיה E , הפוטנציאל V_0 ועוד פרמטר α , שהוא פרמטר בעל יחידות של $\left[\frac{1}{\sqrt{E}}\right]$ שעליכם להגדיר מהפרמטרים בבעיה.
- ד. שרטטו באופן גרפי את הביטוי שקיבלתם בסעיף הקודם (בחרו ערך כלשהו עבור α כשאתם משרטטים). הניחו כי α הוא קבוע. מצאו תנאי על V_0 לכך שיהיה לפחות מצב קשור אחד (בטאו את התנאי באמצעות α). מהו התנאי לכך שיהיו שני מצבים קשורים? (רמז – שימו לב לנקודות החיתוך).
- ה. כעת מצאו באופן מפורש את האנרגיות כאשר $V_0 \rightarrow \infty$. האם אתם מופתעים מהתוצאה?

א. ב $x < 0$ פונקציית הגל מתאפסת. בתחום $0 \leq x \leq L$ מתקיים

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi$$

ומכאן

$$\psi = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ כאשר}$$

בתחום $x > L$ מתקיים

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = (E - V_0)\psi$$

וכיוון ש $E < V_0$ אז בתחום זה פונקציית הגל היא

$$\psi = Ce^{-qx} + De^{qx}$$

$$q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{כאשר}$$

מהתנאי $\psi \rightarrow 0$ באינסוף, נובע כי $D = 0$, כך שסך הכל

$$\psi = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ A\cos(kx) + B\sin(kx) & 0 \leq x \leq L \\ Ce^{-qx} & x > L \end{cases}$$

ב. תנאי השפה הם רציפות פונקציית הגל ורציפות הנגזרת

$$\psi(0^-) = \psi(0^+)$$

$$\psi(L^-) = \psi(L^+)$$

$$\psi'(L^-) = \psi'(L^+)$$

ג. תנאי השפה

$$\psi(0^-) = \psi(0^+)$$

גורר כי

$$0 = A$$

כלומר פונקציית הגל היא

$$\psi = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ B\sin(kx) & 0 \leq x \leq L \\ Ce^{-qx} & x > L \end{cases}$$

תנאי השפה $\psi(L^-) = \psi(L^+)$ ו $\psi'(L^-) = \psi'(L^+)$ גוררים

$$B\sin(kL) = Ce^{-qL}$$

$$-kB\cos(kL) = -qCe^{-qL}$$

נחלק את המשוואה השניה בראשונה ונקבל

$$\cot(kL) = -\frac{q}{k}$$

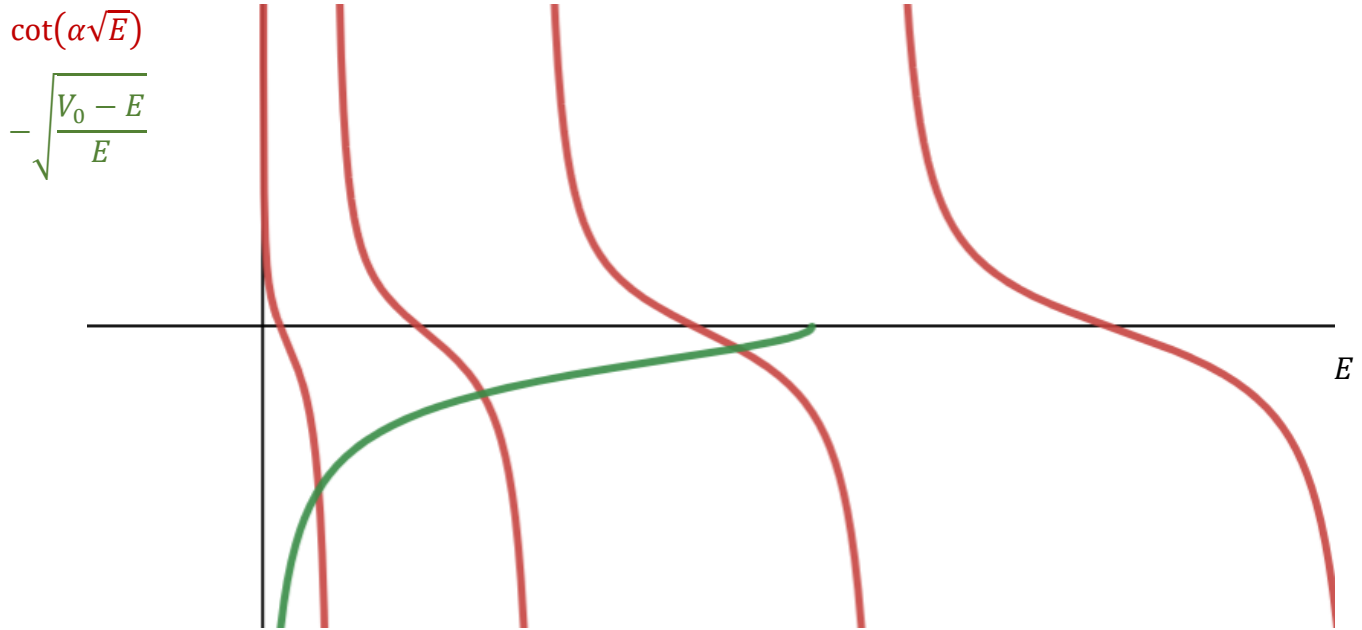
נציב את הקשרים בין q , k לאנרגיה ונקבל את המשוואה הסגורה הבאה עבור אנרגיות החלקיק

$$\cot\left(\sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}E}\right) = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

נשים לב כי ל $\sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}}$ יחידות של $\left[\frac{1}{\sqrt{E}}\right]$. נסמן אותו ב α ונקבל

$$\cot(\alpha\sqrt{E}) = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

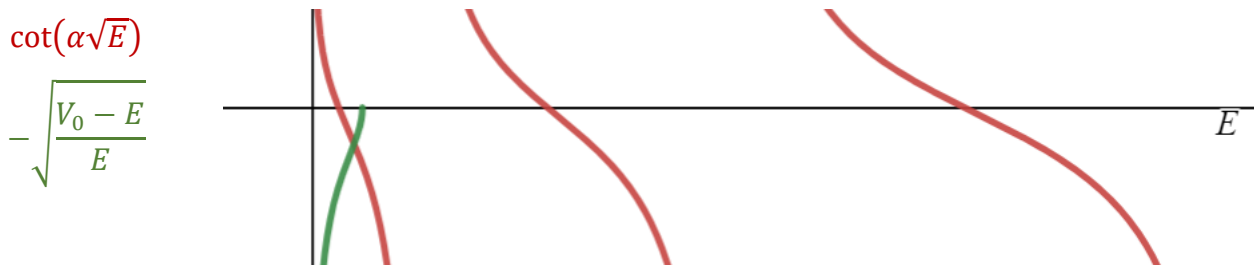
ד. נשרטט קשר זה



נקודות החיתוך בין הגרפים הם הפתרונות עבור אנרגיית החלקיק.

שימו לב כי מתקבל סט של אנרגיות בדידות, ככל שנקודת החיתוך בין הקו הירוק לציר האופקי תהיה רחוקה יותר מהראשית, כך יכולים להתקבל עוד פתרונות עבור האנרגיה של חלקיק במצב קשור, כלומר יהיו עוד מצבים קשורים בבור.

התנאי שיהיה לפחות מצב קשור אחד, הוא שנקודת החיתוך של הקו הירוק תהיה מימין לנקודת האפס הראשונה של הקו האדום. גרפית זה נראה כך :



נקודת האפס הראשונה של $\cot(\alpha\sqrt{E})$ מתקבלת כאשר

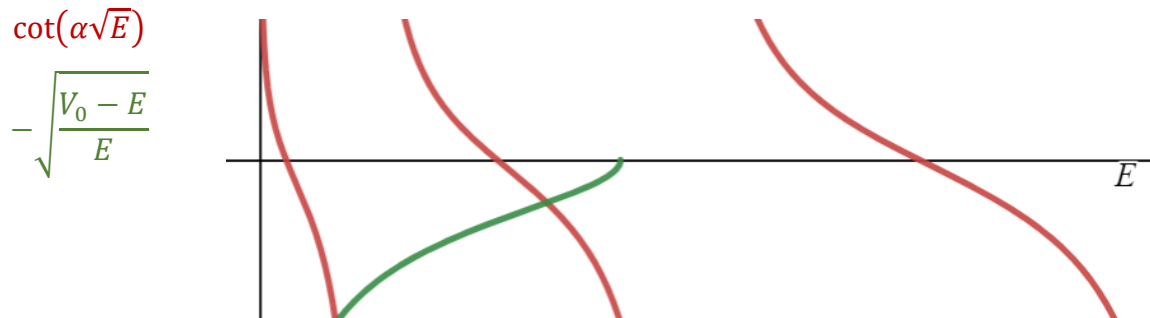
$$\alpha\sqrt{E} = \frac{\pi}{2}$$

$$E = \frac{\pi^2}{4\alpha^2}$$

נקודת האפס של $-\sqrt{\frac{V_0-E}{E}}$ מתקבלת ב $E = V_0$ כלומר התנאי למצב קשור אחד הוא

$$V_0 \geq \frac{\pi}{2\alpha}$$

כדי לקבל לפחות שני מצבים קשורים צריך שנקודת החיתוך של הקו הירוק עם הציר האופקי תהיה מימין לנקודת החיתוך השנייה של הקו האדום עם הציר האופקי. גרפית זה נראה כך :



נקודת האפס השנייה של $\cot(\alpha\sqrt{E})$ מתקבלת כאשר

$$\alpha\sqrt{E} = \frac{3\pi}{2}$$

$$E = \frac{3\pi}{2\alpha}$$

אז כדי שנקודת האפס של $-\sqrt{\frac{V_0-E}{E}}$ תהיה מימין לה צריך להתקיים

$$V_0 \geq \frac{3\pi}{2\alpha}$$

ה. כאשר $V_0 \rightarrow \infty$ מתקיים

$$\cot(\alpha\sqrt{E}) = -\sqrt{\frac{V_0-E}{E}} \rightarrow -\infty$$

זה קורה כאשר

$$\alpha\sqrt{E} = \pi n$$

כלומר

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

אלו רמות האנרגיה של בור פוטנציאל אינסופי, כפי שהיינו מצפים לקבל.

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 להוליד 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 מ-0.05 למעבר?

בתרגול ראינו שהביטוי להסתברות המעבר דרך מחסום פוטנציאלי 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

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

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

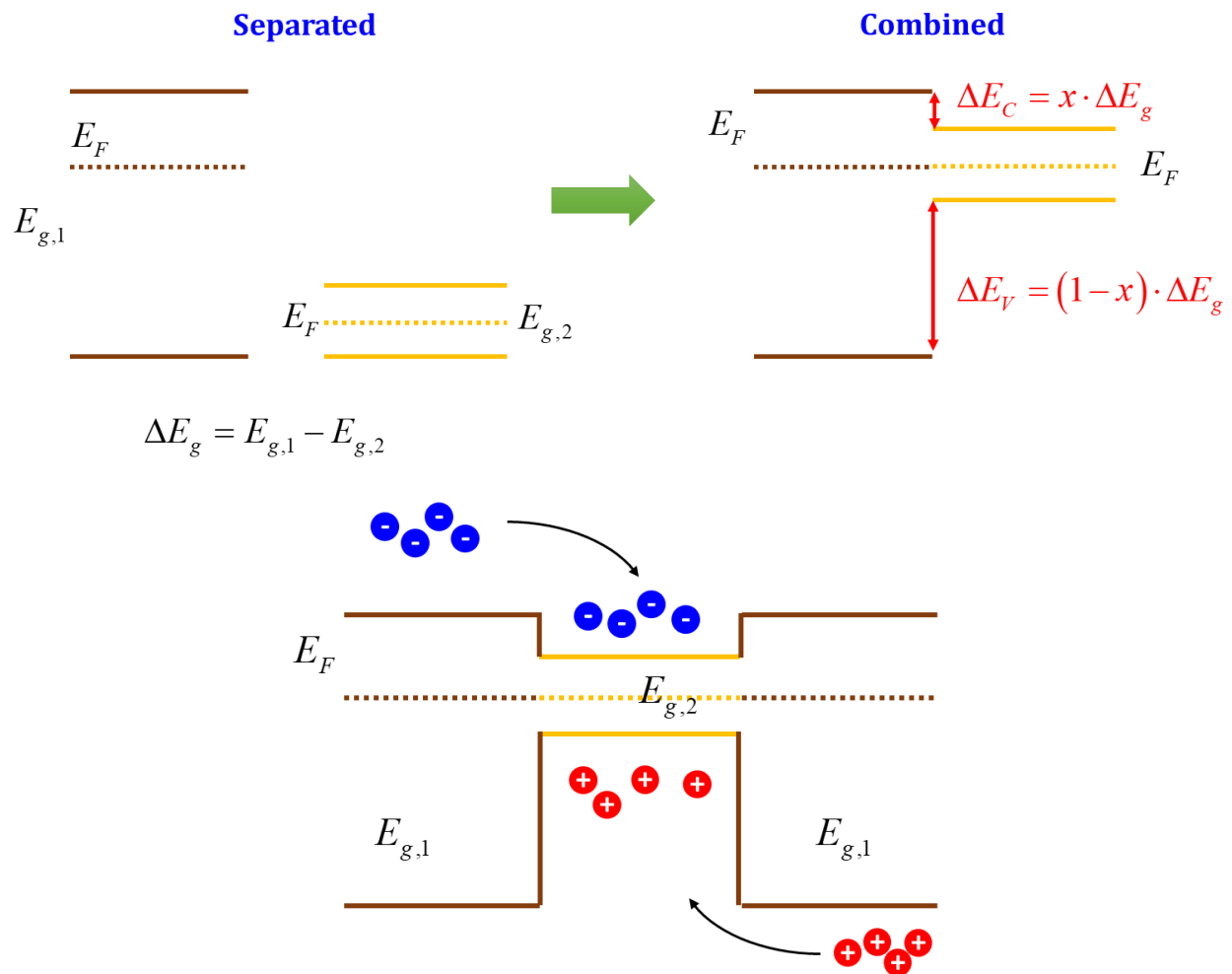
שאלה 3: בור קוונטי בממד אחד

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	$E_g = 1.673\text{eV}$
GaAs	$E_g = 1.424\text{eV}$

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:

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

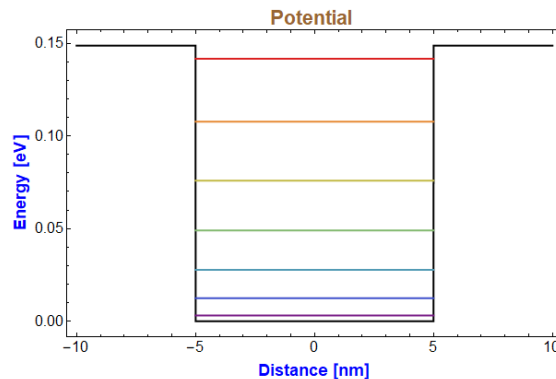
$$\text{Odd Modes: } \begin{cases} k_0 |\sin(kL/2)| = k \\ \tan kL/2 < 0 \end{cases}$$

כאשר

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

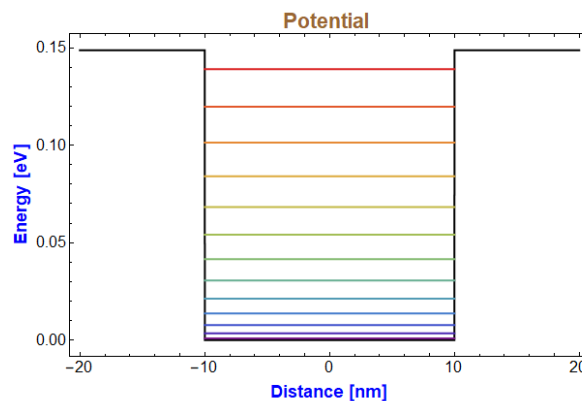
מהתרשים ונתוני הטבלה ניתן לראות ש- $V = 0.1448eV$ פתרון נומרי למערכת הנ"ל מניב 7 אנרגיות עצמיות כדלקמן

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



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:

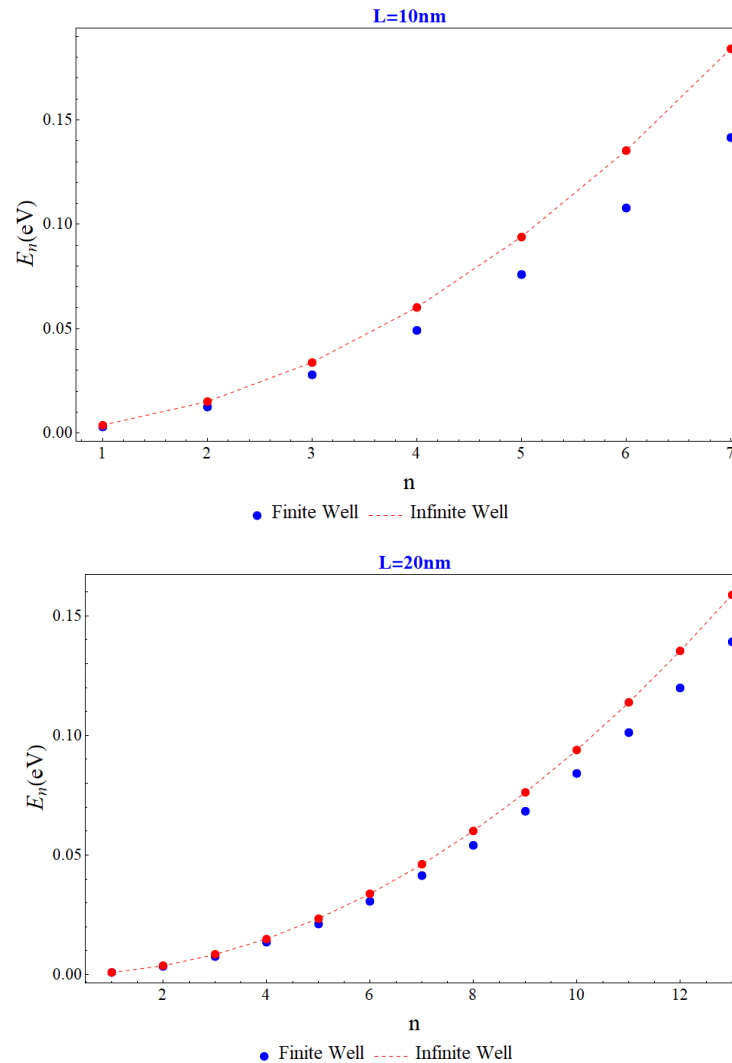
$$E_n = \{0.85, 3.4, 7.7, 13.6, 21.2, 30.6, 41.5, 54.1, 68.3, 84.1, 101.3, 119.8, 139.1\}meV$$



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

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



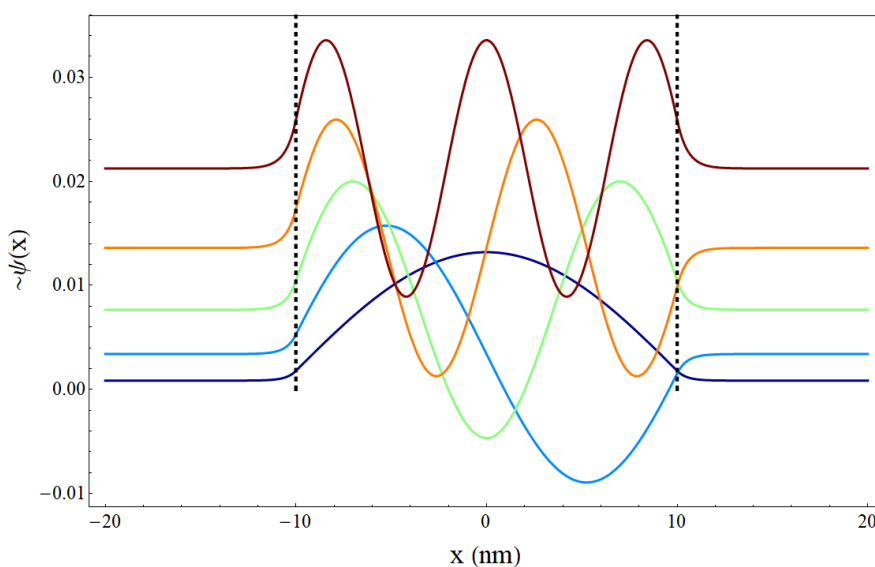
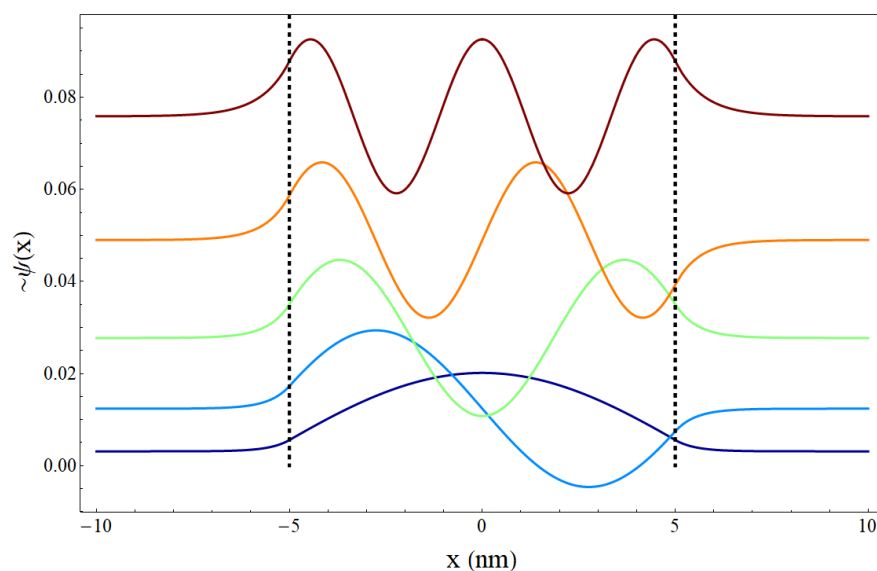
ד. עבור סעיף א' ציירו את הפונקציות העצמיות התואמות לאנרגיות שמצאתם? כדי לצייר פונקציות עצמיות עלינו למצוא קשר בין המקדמים השונים של פונקציית הגל המוגדרת למקוטעין

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

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.