Лекция 1.
Предмет изучения – Электронные свойства наносистем (Мезоскопика, нанофизика, …)

Чем отличаются макроскопика, мезоскопика, микроскопика ?

Число частиц: $N >> 1$, $N^{-1/2} << 1$, $N > 1$, $N^{-1/2} \sim 1$, $N \sim 1$

Что такое квантовые эффекты ? $l_\phi \sim L$

Длина сбоя фазы электрона порядка размеров системы

Что такое квазиклассические эффекты ? h

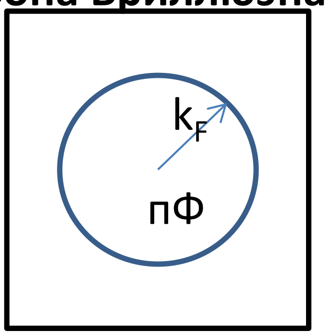
Примеры ?

Почему в фокусе лекций – двумерные и одномерные системы ?

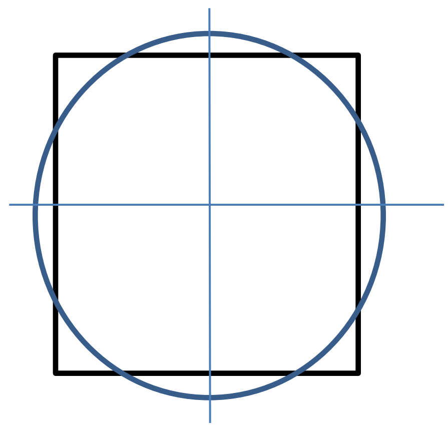
1) Их широчайшая распространенность: МОП транзисторы, ИС, компьютеры, мобильная связь, туннельные датчики, планарные сверхпроводящие детекторы излучения, и пр.
2) Электрон-электронные взаимодействия, как правило, не очень важны в 3D, но играют важнейшую роль в 2D, а в 1D системах – определяющую роль
3) Квантовые фазовые переходы. В их окрестности – перенормировка за счет взаимодействия приводит к аномалиям. Связанные состояния – основа Q-bit

Как связана эта область с традиционной физикой твердого тела ?

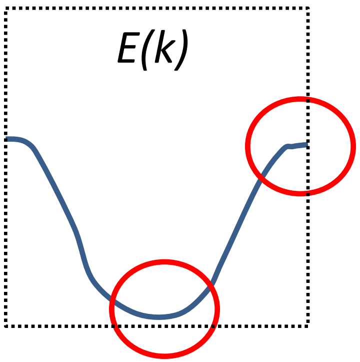
Зона Бриллюэна



Ферми газ,
1 электрон на зону Б



>1 электрона на зону Б

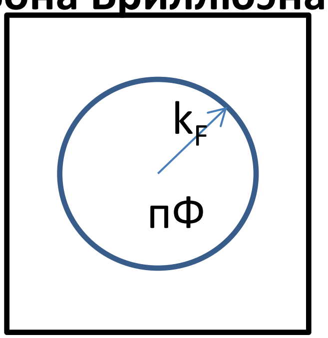


$-P^2/2m_{eff}$

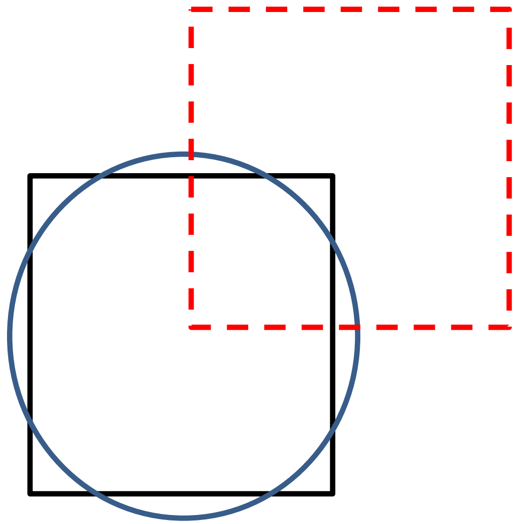
$P^2/2m_0$

Это - эффекты интерференции электронных волн на периодическом потенциале решетки. Имеются аналогии в оптике. Квантовые эффекты в квазиклассическом описании

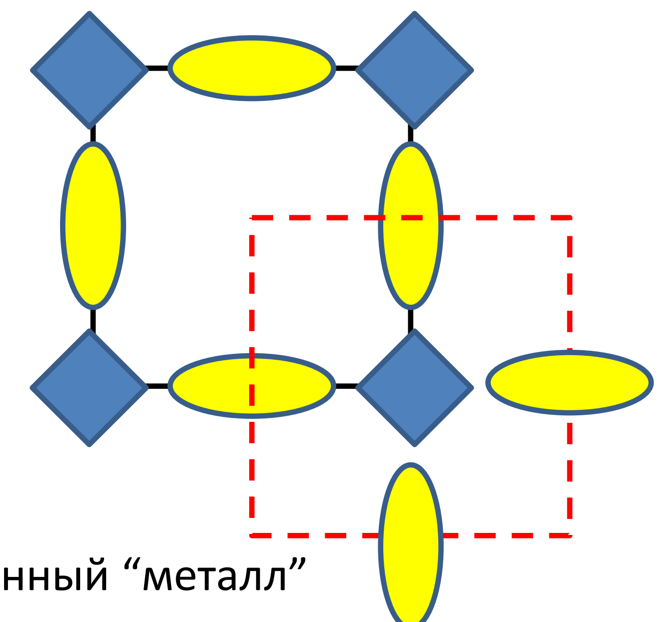
Зона Бриллюэна



Ферми газ,
1 электрон на зону Бриллюэна



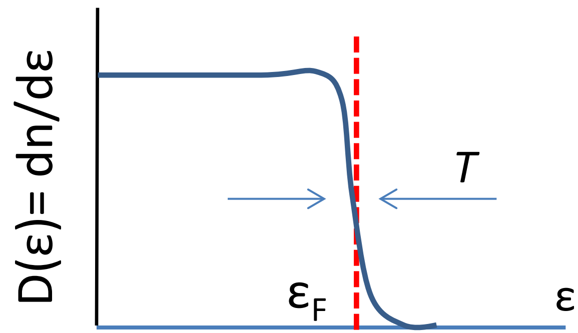
>1 электрона на зону Б



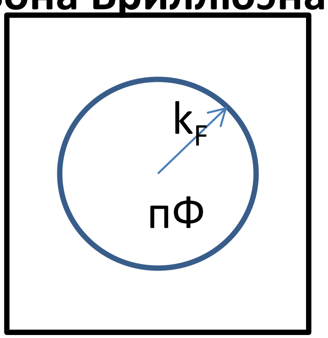
Двузонный “металл” или полуметалл

Как связана эта область с традиционной физикой твердого тела ?

Электроны – фермионы.
Функция распределения Ферми

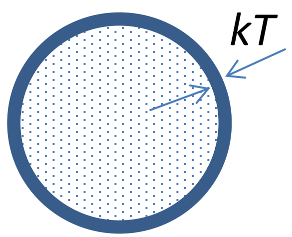


Зона Бриллюэна



Ферми газ

Основная идея Ферми-жидкости



Свойства Ферми-жидкости описываются с помощью Ферми-газа невзаимодейст-вующих **квазичастиц,** существующих в узкой полоске энергий вблизи пФ.

Квазичастицы (“электроны”) имеют параметры (спектр, сжимаемость, g-фактор, масса), перенормированные взаимодействием.

Не всегда при этом получаются такие простые **квазичастицы, похожие на обычные электроны, но с другими параметрами.**

- Иногда спиновые и зарядовые переменные разделяются. (спиноны и холоны)
- Иногда заряд – дробная часть ***e***.
- Иногда электроны образуют связанное состояние с фотонами (экситон), с фононами (полярон), с вихрями магнитного потока (композитные квазичастицы), и т.д.

Возникает интересный вопрос –
Q1: какова статистика этих новых квазичастиц: фермионная, бозонная или анионная ?

Лекция 1. Часть 2:
Напоминание - Волновая механика электрона и уравнение Шредингера.

<u>План</u>

- Введение
- Квантовая механика электрона. Свободная частица
- Частицы ограниченные в пространстве. Квантовая яма
- Частица в трехмерном потенциальном ящике
- Энергетическое состояние и вырождение

квантовые эффекты – характерные размеры системы L сравнимы с де-Бройлевской длиной волны

Важнейший размер – длина когерентности (сбоя фазы) l_φ

Микроскопика: число частиц в системе ~1

Макроскопика: число частиц $N \gg 1$, флуктуации $\delta N/N \propto N^{-1/2} \ll 1$

Мезоскопика: число частиц $N > 1$, флуктуации $\delta N/N \sim 1$.

Четность и целочисленность N становятся важны

Объекты изучения:

искусственные атомы (квантовые точки, QD),

искусственные одномерные цепочки (квантовые провода, QW) , и т.д.

Электроны несут заряд и между ими должны действовать силы кулоновского отталкивания. При малых межэлектронных расстояниях в решетке (порядка межатомных расстояний, 1-3˚A, эти силы должны были бы быть огромными.

Q2: Почему электроны не выпрыгивают из куска металла или полупроводника ?

Q3: Почему вообще работает одноэлектронное приближение, на котором основана вся квазиклассическая физика твердого тела и физика полупроводников?

Q4: Почему электронные свойства полупроводников, включая транзисторы и диоды описываются квазиклассическими одноэлектронными уравнениями ?

Q5: Значит ли это, что межэлектронные взаимодействия не нужно учитывать вообще?

Нам привычно одноэлектронное приближение (газ невзаимодействующих частиц).
В этом описании мы должны учесть изменение их параметров вследствие межчастичных взаимодействий.
Как следствие этого, для ансамбля из взаимодействующих электронов, перенормируются электронная спиновая восприимчивость, эффективная масса, спектр, эффективный g-фактор, спектр $\varepsilon(k)$, электронная сжимаемость.

Например, сжимаемость меняет знак!

Q5: Значит ли это, что межэлектронные взаимодействия не нужно учитывать вообще?

A: Нет. Между электронами действуют силы квантового происхождения, вследствие обменной энергии, связанные со спином, симметрией и статистикой квазичастиц.

Чем ниже размерность, тем важнее эти взаимодействия

Нам привычно одноэлектронное приближение (газ невзаимодействующих частиц).
В этом описании мы должны учесть изменение их параметров вследствие межчастичных взаимодействий.
Как следствие этого, для ансамбля из взаимодействующих электронов, перенормируются электронная спиновая восприимчивость, эффективная масса, спектр, эффективный g-фактор, спектр ε(k), электронная сжимаемость.

Например, сжимаемость меняет знак!

Вообще, чем ниже размерность системы, тем важнее взаимодействия.

Но, даже **в 3D** системах они бывают важны. Вспомним **Pd**.

В 2D и 1D системах эффекты взаимодействия являются даже основой работы устройств (одноэлектронный транзистор, квантовый насос заряда) и отнюдь не являются слабыми поправками к основному состоянию

Лекция 1.

Часть 3: Волновая механика электрона

Волновая функция $\Psi(x, t)$. Координата и импульс не даются прямо, но могут быть выведены из $\Psi(x, t)$. Вместо законов Ньютона мы имеем волновое уравнение, которое определяет эволюцию волновой функции $\Psi(x, t)$. Для одномерного случая волновое уравнение имеет форму

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t), \quad (1.1)$$

Q6: А где же силы ? Мы их потеряли ?

Лекция 1.

Часть 3: Волновая механика электрона

Волновая функция $\Psi(x, t)$. Координата и импульс не даются прямо, но могут быть выведены из $\Psi(x, t)$. Вместо законов Ньютона мы имеем волновое уравнение, которое определяет эволюцию волновой функции $\Psi(x, t)$. Для одномерного случая волновое уравнение имеет форму

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t), \quad (1.1)$$

А: Силы как то спрятаны и не входят явно.

Факторизуем $\Psi(x, t) = \psi(x)T(t)$ и разделив обе части на $\psi(x)T(t)$ получаем :

$$\frac{1}{T} i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{\psi}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right]. \qquad (1.2)$$

Слева – функция только от ***t***, справа – только от ***x.***

Значит, обе части= ***Const***

$$\frac{d\ln T}{dt} = \frac{-iE}{\hbar}, \qquad \text{или}$$

$$T(t) \propto \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \equiv \exp(-i\omega t), \qquad (1.3)$$

Гармонический осциллятор ***E=ħω***

Пространственная часть

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad (1.4)$$

В зависимости от конкретного вида *V*(*x*) получаются разные решения *ψ*(*x*). Т.о., решение нестационарного уравнения Шредингера имеет факторизованный вид:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \qquad (1.5)$$

E - собственное значение энергии, которому могут соответствовать несколько состояний

Простые решения

1.3.1 Свободная частица, $V(x)=0$

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

Это обычное диф. уравнение 2го порядка, т.е. волновое уравнение и его решения можно угадать из простых физ. соображений. Можно искать решение в виде комплексных экспоненциальных волн **ψ = exp(+*ikx*)** или **exp(−*ikx*).** Подставляя, видим, что все они являются решениями при условии

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \epsilon_0(k).$$

В классической механике кинетическая энергия $E = p^2/2m$, поэтому заключаем $\boldsymbol{p = \hbar k}$.

Вспомним

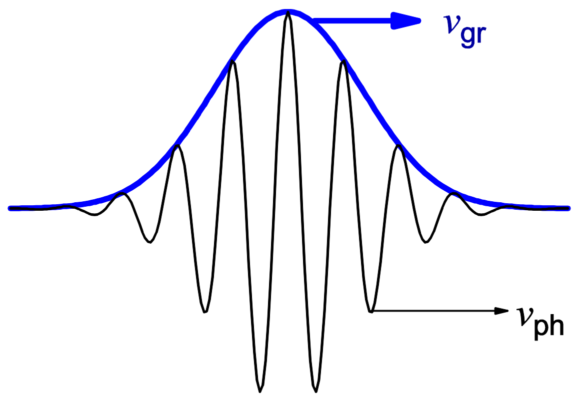
$$E = \hbar\omega = h\nu \qquad \text{(Эйнштейн)}$$
$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \qquad \text{(де Бройль)}$$

Разделив энергию на ħ получим дисперсионное соотношение между частотой *ω* и волновым числом *k*:

$$\omega = (\hbar/2m)k^2.$$

Оно нелинейно, поэтому скорость волновых частиц является функцией их частоты и со скоростью надо обращаться более аккуратно чем в классической механике. В частности,

$$\text{(фазовая скорость)} \qquad v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m}$$
$$\text{(групп. скорость)} \qquad v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \equiv \quad v_{\text{classic}}$$



Приятно, что групповая скорость совпадает с классической !

Замечания:

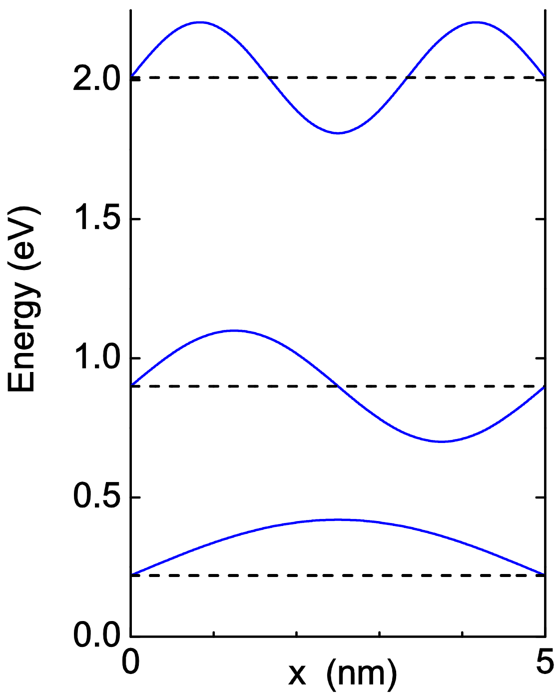
- Волновой пакет, представляющий частицу, размазан в пространстве (соотношение неопределенности Гейзенберга).
- Кин. энергия, $E = \hbar^2k^2/2m$ положительная величина, если k вещественно.
- Можно найти такие решения, которые расходятся при $x \to \pm\infty$, например $\psi(x) = \exp(kx)$, $\psi(x) = \exp(-kx)$, с $E = -\hbar^2k^2/2m$. Расходящаяся ψ *не*физична и эти решения могут иметь физ смысл только в ограниченной области пространства

1.3.2 Частицы ограниченные в пространстве. Квантовая яма

Бесконечно глубокая яма с прямоугольными стенками при *x=-a, +a*

<u>*Внутри ямы*</u> $V = 0$. Поэтому решения - такие же и могут быть записаны как
$\exp(+ikx)$, $\exp(-ikx)$,
с кин. энергией $E = \hbar^2 k^2/2m$.

Бесконечно высокий барьер ***V*** – это бесконечно высокая потенц. энергия снаружи ямы, $x < 0$, $x > a$.

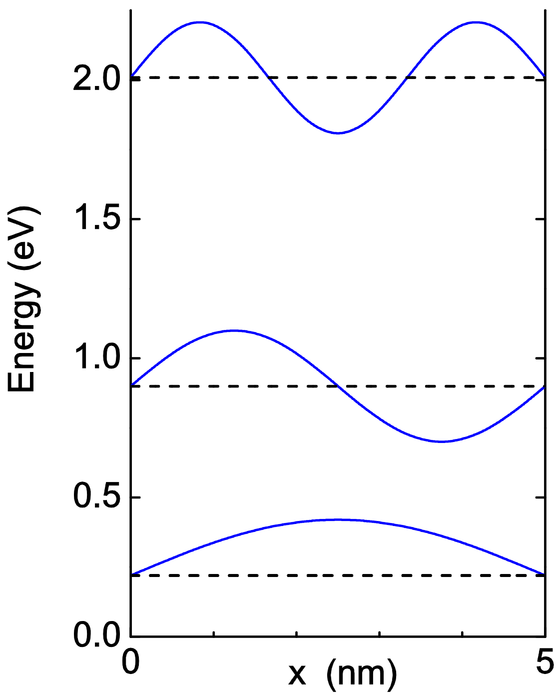


Какие гран условия нам нужно поставить ?

Q7: Чему должна быть равна $\psi(x)$, $\psi(x)^2$, $d\psi(x)/dx$ на границах ?

1.3.2 Частицы ограниченные в пространстве. Квантовая яма

Бесконечно глубокая яма с прямоугольными стенками при *x=-a, +a*



<u>*Внутри ямы*</u> $V = 0$. Поэтому решения - такие же и могут быть записаны как $\exp(+ikx)$, $\exp(-ikx)$, с кин. энергией $E = \hbar^2 k^2/2m$.

Бесконечно высокий барьер ***V*** – это бесконечно высокая потенц. энергия снаружи ямы, $x < 0$, $x > a$.

A (i) чтобы $V(x)\psi(x)$ оставалось конечным, нужно $\psi(x) = 0$ при $x < 0$, $x > a$.

A (ii) $\psi(x)$ не должно иметь разрыва на границе, поскольку $\psi(x)^2$ имеет физ. смысл. Из условия непрерывности на границе получаем $\psi(0) = 0$ и $\psi(a) = 0$.

А какой физ смыл имеют $d\psi/dx$, $d^2\psi/dx^2$?

Первому условию удовлетворяют функции $\psi(x) = \sin(kx)$ и $\psi(x) = \sinh(kx)$ для любого k.

Второму условию - только $\sin(kx)$. Решение должно обратиться в 0 при $x = a$, отсюда $k = n\pi/a$ и искомые решения имеют вид:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\frac{n\pi x}{a}, \qquad \varepsilon_n = \varepsilon_0(k_n) = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2} \tag{1.12}$$

$n = 1, 2, 3, \ldots$ квантовые числа

Q8: Откуда возникло квантование, т.е. дискретные значения энергии?

А: из граничных условий, которые ограничивают движение частицы. Частицы, которые могут свободно двигаться во всем пространстве, имеют непрерывный спектр. Если движение частиц ограничено в пространстве, то их энергия квантуется.

Замечание 1: Часто бывает, что в одном интервале энергий частицы могут двигаться свободно, а в другом интервале - ограничены в пространстве. Тогда возникает смесь дискретных и непрерывных уровней энергии

Замечание 2: В наинизшем состоянии энергия $\varepsilon_1 > 0$. Это контрастирует с классической механикой, в которой в наинизшем состоянии энергии частицы сидят неподвижно на дне потенциальной ямы, с нулевой кин энергией и имеют $E = 0$. В нашем упрощенном нестрогом решении это соответствует нулевой амплитуде волновой функции и значит отсутствию частицы вообще. В строгом решении $E = 0$ запрещено еще и принципом непределенности, поэтому даже в наинизшем по энергии состоянии имеется энергия нулевых колебаний.

Замечание 3: Волновые функции в прямоугольной яме имеют важное симметрийное свойство. Те, что соответствуют нечетным n являются четными функциями координаты $(x - a/2)$ и наоборот.

Q9 : Отчего эта симметрия возникает ?

Q10: Почему мы отбросили решения с разрывом на стенках ($\psi(0) \neq 0$, $\psi(a) \neq 0$?

Замечание 3: Волновые функции в прямоугольной яме имеют важное симметрийное свойство. Те, что соответствуют нечетным n являются четными функциями координаты $(x - a/2)$ и наоборот.

Q9 : Отчего эта симметрия возникает ?
A : Это следует просто из того, что нумерация уровней начинается с 1, а не с 0 или другого четного числа.

Q10: Почему мы отбросили решения с разрывом на стенках ($\psi(0) \neq 0$, $\psi(a) \neq 0$?

Замечание 3: Волновые функции в прямоугольной яме имеют важное симметрийное свойство. Те, что соответствуют нечетным n являются четными функциями координаты $(x - a/2)$ и наоборот.

Q9 : Отчего эта симметрия возникает ?
А : Это следует просто из того, что нумерация уровней начинается с 1, а не с 0 или другого четного числа.

Q10: Почему мы отбросили решения с разрывом на стенках ($\psi(0) \neq 0$, $\psi(a) \neq 0$?

А: Если $\psi(x)$ терпит разрыв, то скорость частицы и, следовательно, и кин. энергия становятся бесконечно большими. Поскольку мы предположили, что полная энергия частицы конечна, то такие решения противоречат нашему предположению и мы их отбрасываем.

Q11: Мы допустили что $d\psi/dx$ на стенках ямы претерпевает разрыв. Что означает разрывность производной, хорошо это или плохо ?

Q11: Мы допустили что $d\psi/dx$ на стенках ямы претерпевает разрыв. Что означает разрывность производной, хорошо это или плохо ?

A: В терминах классической физики это означает, что в точках x =0 и x =а ускорение частицу бесконечно; на частицу в точках x =0, $x = a$ со стороны стенки действует бесконечно большая сила. Ничего плохого в этом нет, для сохранения энергии (упругое столкновение со стенкой) время взаимодействия должно обращаться в 0.

Q12: Как проверить экспериментально вычисленный спектр ?

Q13: Как сделать квантовую яму?

Q12: Как это все проверить экспериментально ?
Например, из оптическая спектроскопия уровней энергии в квантовой яме.

Q: Как сделать квантовую яму?

Квантовая яма с бесконечными стенками - это довольно искусственная модель, которая хороша для лекций, но на практике почти не используется, если даже что-то подобное можно изготовить. Эта модель хороша просто потому, что ее решения просты и их надо помнить для понимания качественного характера решений в более реалистичных ситуациях. Все это мы рассмотрим, но позже.

1.3.3 Частица в трехмерном потенциальном ящике

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x,yz)\psi = E\psi \qquad (1.13)$$

Потенциал ящика (куб с ребром *L*):

$$V = 0 \quad \begin{cases} 0 < x < L \\ 0 < y < L \\ 0 < z < L \end{cases}$$

и $V = \infty$ во всем стальном пространстве.

Решения этих уравнений - экспоненциальные или синусоидальные, в зависимости от того, какими величинами являются *k* - действительными или комплексными.

Несколько уровней могут иметь одинаковую энергию (вырожденные уровни)