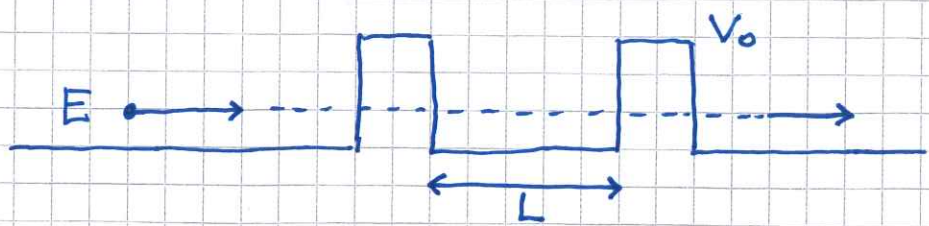
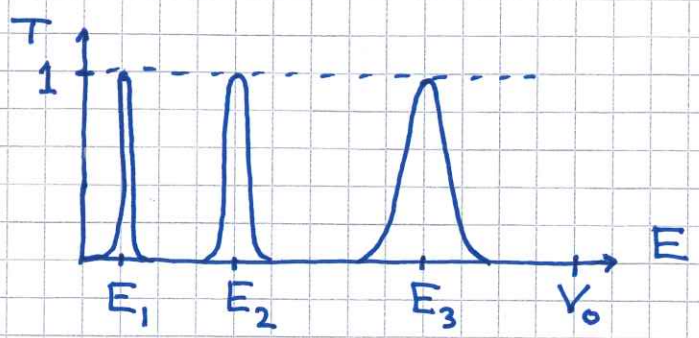


Resonant tunneling:



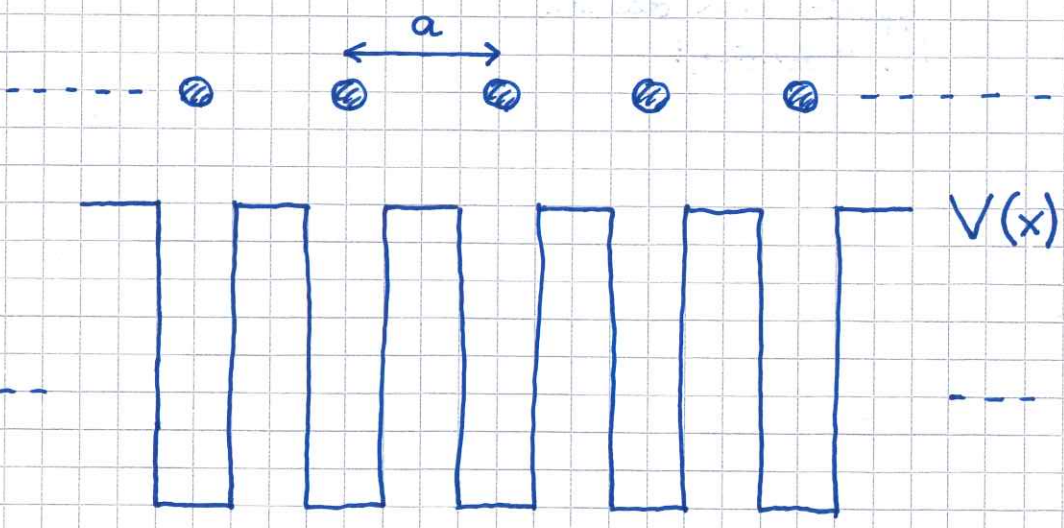
Konstruktiv interferens og $T = 1$ med bølglengder som gir stående bølger i brønnen mellom barrierene:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\lambda_n}\right)^2 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L^2} \quad (n=1,2,\dots)$$



Men: Hvordan realisere slike stykkevis konstante potensialer?

Elektroner i faste stoffer, enkel 1D modell:



Periodisk potensial: $V(x + j \cdot a) = V(x)$

a = gitterkonstanten

j = heltall

Da må også sanns. tettheten (og ladningstettheten) 83
være periodisk,

$$|\Psi(x + j \cdot a)|^2 = |\Psi(x)|^2$$

Og da må bølgefunksjonene være på formen

$$\Psi(x) = e^{ikx} u(x) \quad ; \quad u(x + j \cdot a) = u(x)$$

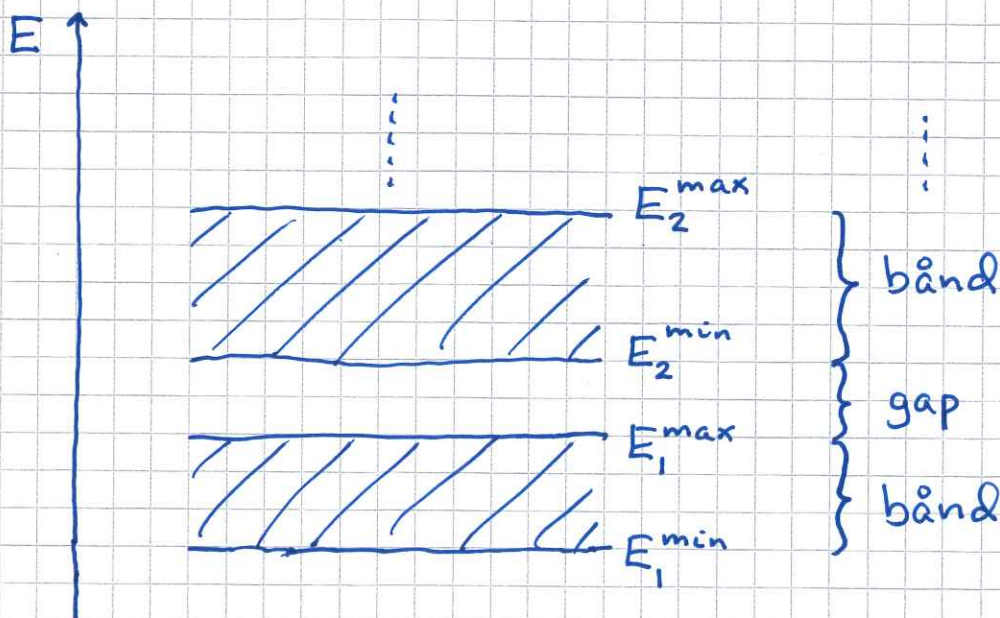
Dette er Blochs teorem.

Vi har nesten plane bølger og nesten frie elektroner.

Løsning av TUSL for en gitt verdi av k gir (som vanlig) energiegenverdier E_1, E_2, E_3, \dots .

Når k varieres, oppnås energibånd $E_1(k), E_2(k), E_3(k), \dots$.

Med N atomer i krystallen inneholder hvert energibånd N romlige tilstander (orbitaler). En makroskopisk krystall har " $N \approx \infty$ ". Da utgjør hvert energibånd $E_n(k)$ et kontinuum av tilstander mellom E_n^{\min} og E_n^{\max} :



Spinn : Elektroner (og andre elementærpartikler) har "en slags indre dreieimpuls", et spinn, \vec{S} . Elektronets spinn er kvantisert: $S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$; $s = 1/2$. Måles en komponent av \vec{S} , f.eks. z-komponenten (med et magnetfelt \vec{B} langs z-aksen; mer om dette senere), fås enten $S_z = -\hbar/2$ eller $S_z = +\hbar/2$. Med andre ord: Et elektron i en gitt romlig tilstand $\Psi(x)$ kan være i 2 spinn-tilstander, den ene med spinn "opp" ($S_z = \hbar/2$) og den andre med spinn "ned" ($S_z = -\hbar/2$).

Dermed : I alt 2N tilstander pr energibånd.

Pauliprinsippet : To elektroner kan ikke være i samme enpartikkeltilstand
(mer om også dette senere)

Anta atomnummer Z, dvs i alt Z·N elektroner.

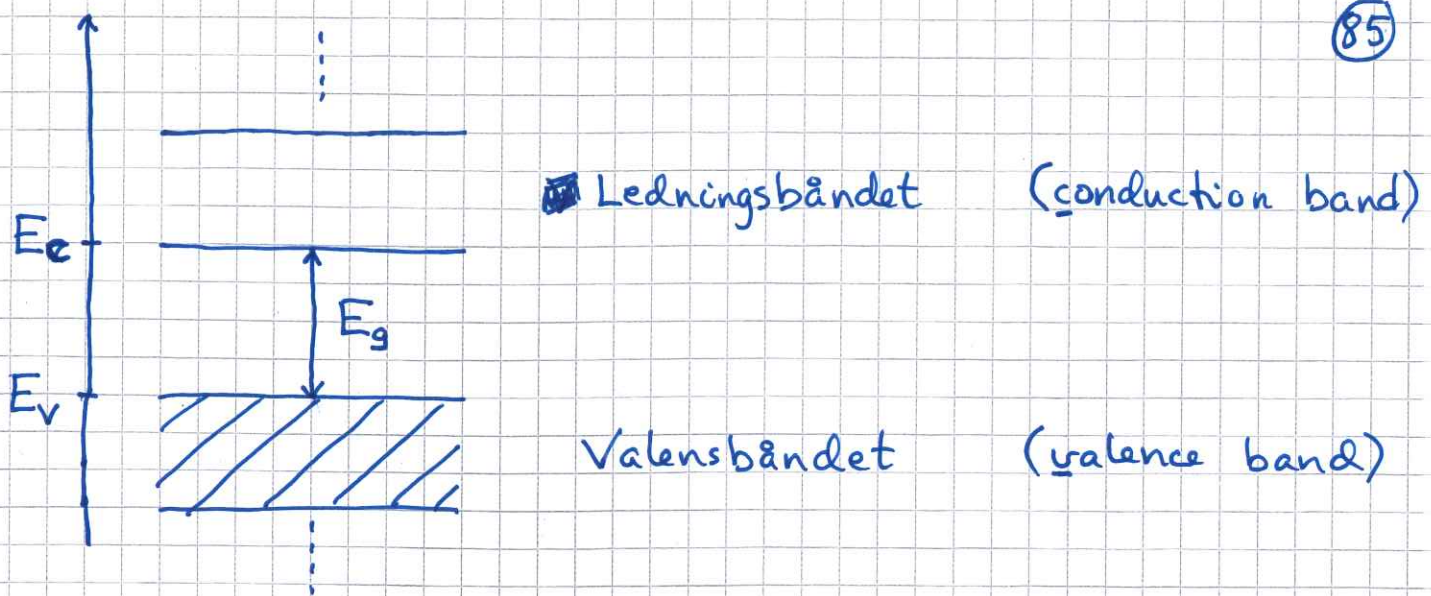
Z = partall \Rightarrow Z/2 bånd fylt med elektroner i grunntilstanden; resten tomme

Z = oddetall \Rightarrow (Z-1)/2 fylt, 1 halvfylt, resten tomme i grunntilstanden

Øverste bånd med elektroner : Valensbåndet

Laveste bånd uten elektroner : Ledningsbåndet

Anta Z = partall, evt. en enhetscelle med et partall elektroner i et virkelig materiale.

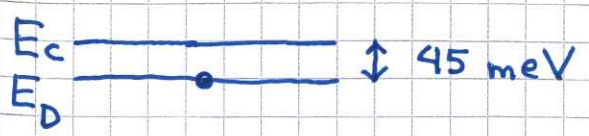


Materialets båndgap: $E_g = E_c - E_v$

Isolator: $E_g \approx 4 \text{ eV}$

Halvleder: $E_g \lesssim 4 \text{ eV}$; isolator ved $T=0$.
 Elektroner kan eksiteres termisk til ledige tilstander i ledningsbåndet, med $E \gtrsim E_c$, fra okkuperede tilstander i valensbåndet, med $E \lesssim E_v$, i økende grad med økende termisk energi $k_B T$.

Doping av halvledere: Anta f.eks. at "et og annet" Si-atom ($Z_{Si} = 14$) i en Si-kristall byttes ut med P-atomer ($Z_P = 15$). Det mest energinike elektronet i et P-atom har da en energi E_D bare litt lavere enn E_c for Si-kristallen:



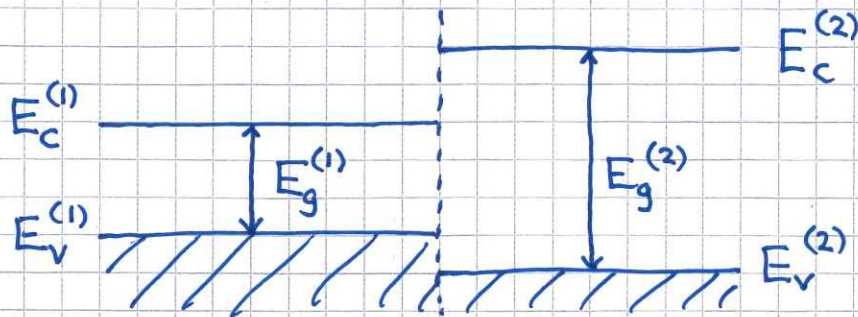
$E_g^{Si} \approx 1.1 \text{ eV}$

Med $k_B T \approx 25 \text{ meV}$ (romtemp.) vil dette elektronet lett eksiteres til ledige tilstander i ledningsbåndet, og dermed bli et "fritt elektron".



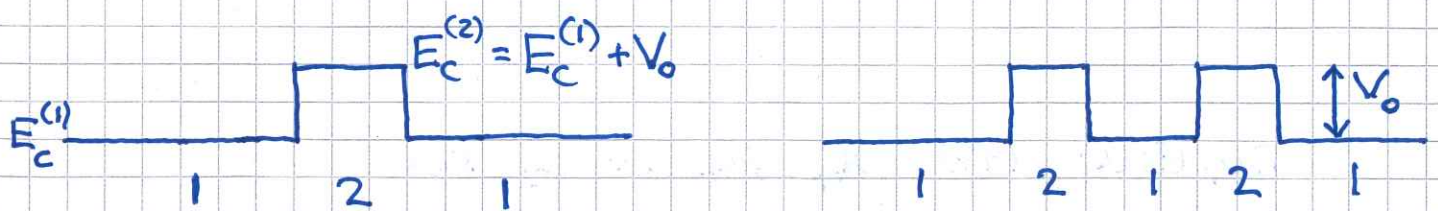
Bunnen av ledningsbåndet ($E = E_c$) angir nå et skille mellom tillatte ($E > E_c$) og forbudte ($E < E_c$) energiverdier i en gitt halvleder.

Hvis to ulike halvledere skjøtes sammen, vil dette skillet tilsvare ulike energier:



Differansen $E_c^{(2)} - E_c^{(1)}$ representerer dermed en potensialbarriere V_0 for et elektron i ledningsbåndet i halvleder 1, med energi $E \approx E_c^{(1)}$.

Med ett eller flere tynne lag av halvleder 2 kan vi dermed realisere en eller flere "firkantbarrierer":



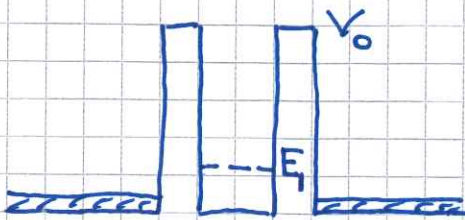
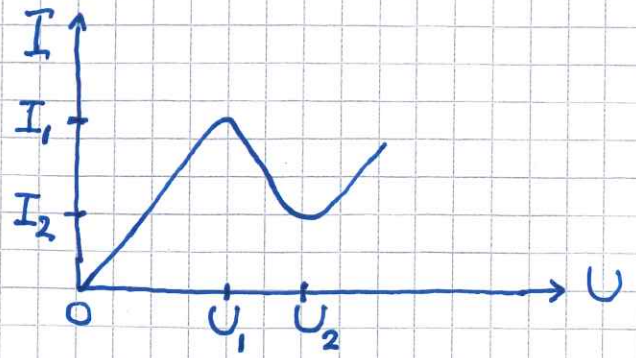
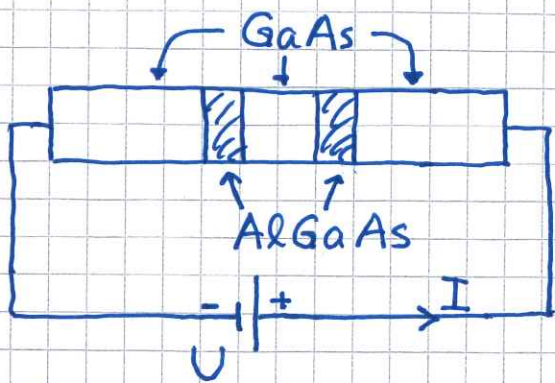
Eks: GaAs $E_g^{(1)} = 1.43 \text{ eV}$ (ved 300 K)

$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ $E_g^{(2)} = 1.84 \text{ eV}$

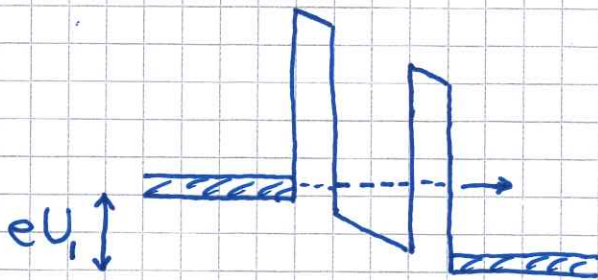
$$V_0 = E_c^{(2)} - E_c^{(1)} = 0.23 \text{ eV}$$

Tykkelsen på de ulike lagene kan kontrolleres med atomær nøyaktighet. (MBE: Molecular Beam Epitaxy)

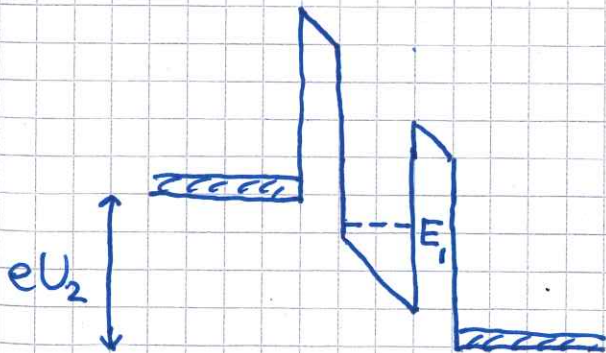
Da kan vi studere resonant tunnelling eksperimentelt:



$U=0$
 $I=0$



$U=U_1$
stor strøm I_1

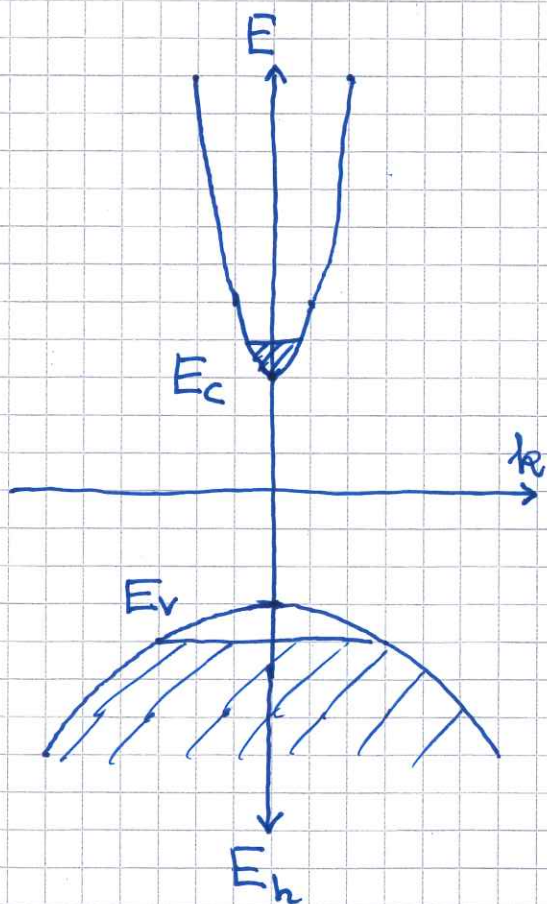


$U=U_2$
mindre strøm I_2

Effektiv masse og hull

Som regel er dispersjonsrelasjonen $E(k)$ kvadratisk i k nær $k=0$ for en halvleder. Dvs: Som for en fri partikkel, men med en effektiv masse m^* som typisk er en del forskjellig fra elektronets "egentlige" masse m_e . Dette er ikke så uventet: Elektronene befinner seg i et periodisk potensial, ikke et konstant potensial.

Eks: GaAs nær $k=0$ ved 300 K



Elektroner i tilstander nær bunnen av ledningsbåndet (eksitert fra valensbåndet, eller fra donornivåer E_D like under E_c):

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$$

$$m_e^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \approx 0.067 m_e$$

Hull, dvs ledige tilstander nær toppen av valensbåndet, oppfører seg som partikler med ladning $+e$:

$$E_h(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad (\text{økende nedover}); \quad m_h^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E_h}{dk^2} \right)^{-1} \approx 0.45 m_e$$

Eks 2: δ -barriere, δ -brønn

$V(x) = -\beta \delta(x)$; $\beta = V_0 L$; $V_0 = \pm \infty$ for barriere brønn

$x < 0$: $\psi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$ $\Rightarrow \psi'(x) = ik(e^{ikx} - r e^{-ikx})$

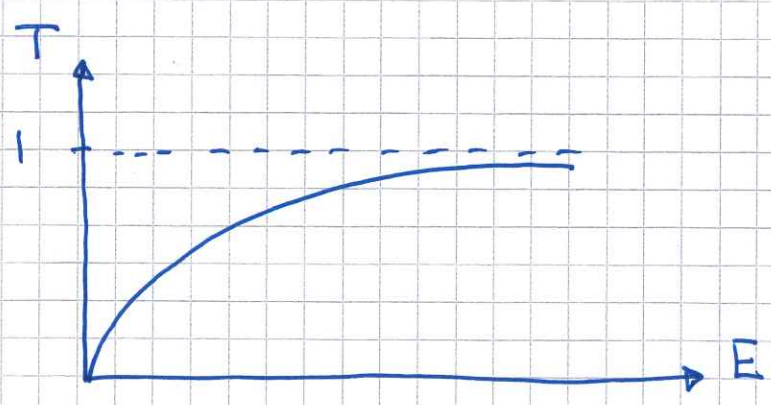
$x > 0$: $\psi(x) = t e^{ikx}$ $\Rightarrow \psi'(x) = ikt e^{ikx}$

$\psi(0^+) = \psi(0^-) \Rightarrow 1 + r = t$

$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \psi(0) \Rightarrow ikt - ik(1-r) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} t$
(s.b2)

$\Rightarrow t = \frac{2ik}{2ik + 2m\beta/\hbar^2} = \frac{1}{1 + m\beta/ikt^2}$

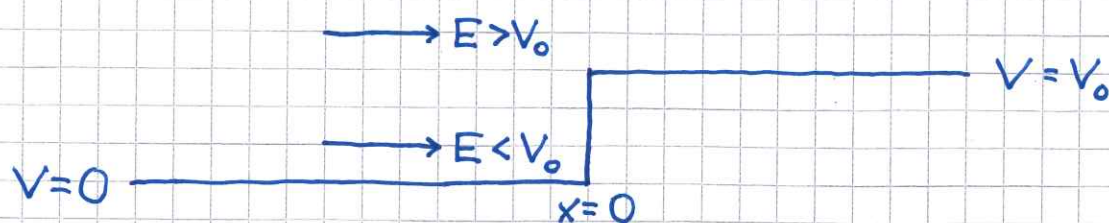
$\Rightarrow T = |t|^2 = \frac{1}{1 + (m\beta/kt^2)^2} = \frac{1}{1 + m\beta^2/2Et^2}$



Pussighet: $T(E)$ er lik for δ -barriere og δ -brønn!

Eks 3: Potentialsprang

(90)



$E > V_0$:

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & ; k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} & (x < 0) \\ t e^{iqx} & ; q^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} & (x > 0) \end{cases}$$

Ψ og Ψ' kontinuerlig i $x=0$

$$\Rightarrow 1+r = t \quad ; \quad ik(1-r) = iqt$$

$$\Rightarrow r = \frac{k-q}{k+q} \quad ; \quad t = \frac{2k}{k+q}$$

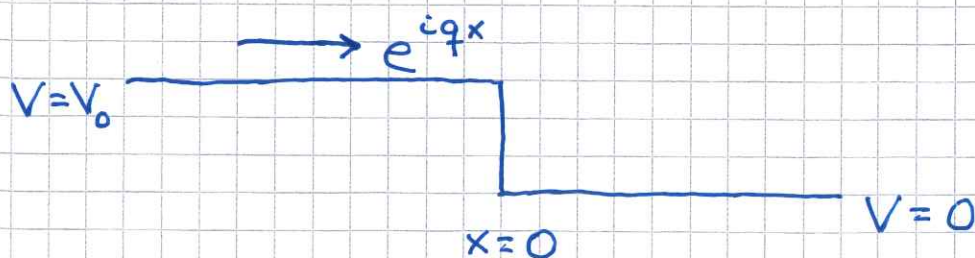
Sanns. strømmer : $j_i = \frac{\hbar k}{m}$; $j_r = -|r|^2 \frac{\hbar k}{m}$; $j_t = |t|^2 \frac{\hbar q}{m}$

$$\Rightarrow R = \frac{|j_r|}{j_i} = |r|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2$$

$$T = \frac{j_t}{j_i} = |t|^2 \frac{q}{k} = \frac{4kq}{(k+q)^2}$$

} Jf. bølge på streng med skjævt i $x=0$

Merk at R og T er uendret ved ombyttet $k \leftrightarrow q$. Det må bety at med $E > V_0$ har vi samme R og T for et potentialsprang ned :



$$E < V_0 :$$

Må nå ha $R = 1$. Partikkelen kan ikke trenge uendelig langt inn i et klassisk forbudt område.

For $x > 0$ er $\psi(x) = t e^{-\kappa x}$ med $\kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$ men nå er ikke transmissjonssanns. T gitt ved $|t|^2$.

For $x < 0$ er, som før, $\psi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$ og refleksjonssanns. $R = |r|^2$. Kont. ψ og ψ' i $x=0$ gir

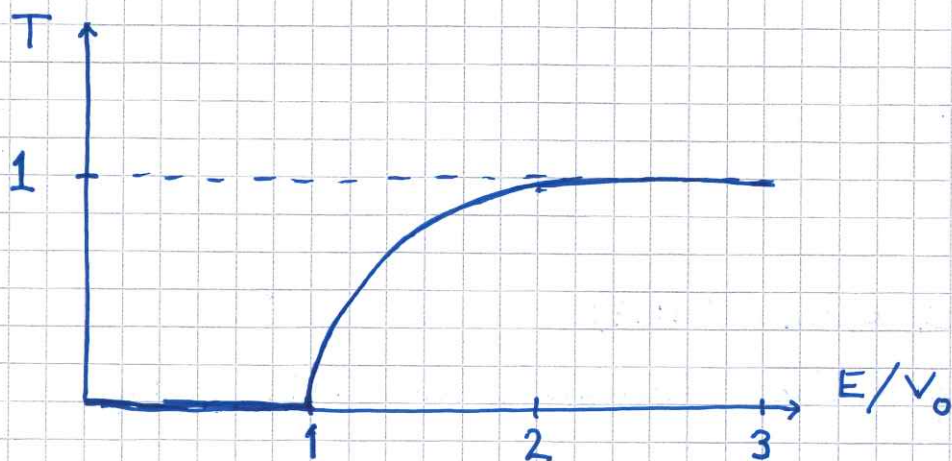
$$1 + r = t \quad \text{og} \quad ik(1 - r) = -\kappa t$$

$$\Rightarrow ik(1 - r) = -\kappa(1 + r)$$

$$\Rightarrow r(\kappa - ik) = -(\kappa + ik) = -(\kappa - ik)^*$$

$$\Rightarrow |r|^2 = 1, \quad \text{som ventet}$$

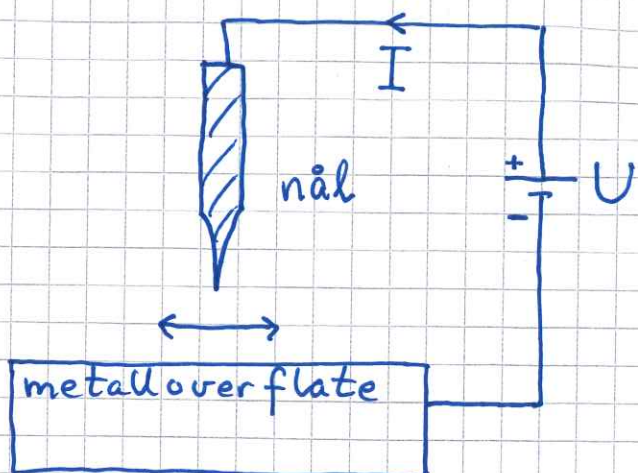
Og $t = \frac{2ik}{ik - \kappa}$, dvs $|t|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2}$, men dette er $|\psi(0)|^2$ og som sagt ikke T . Her er $T = 0$.



Tunneleringsmikroskop

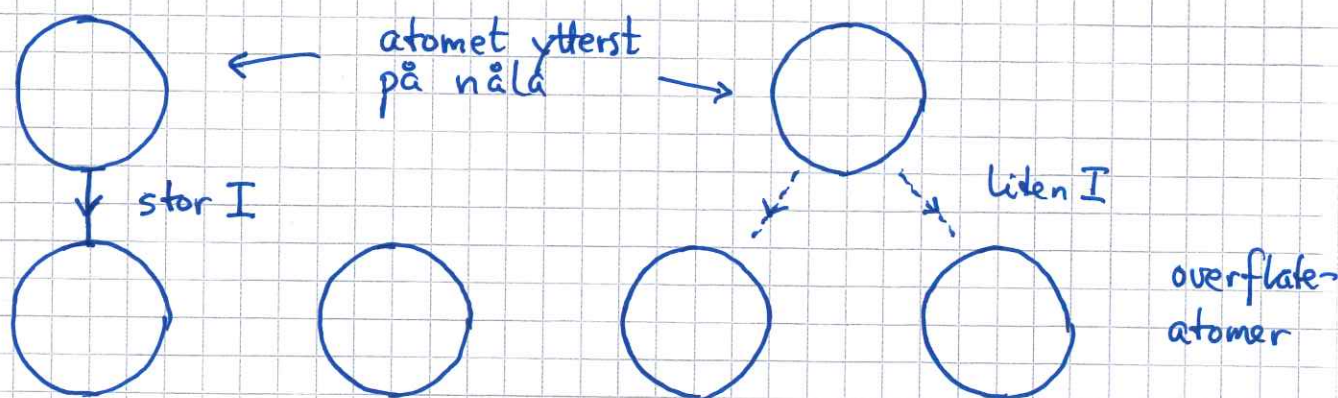
[PCH 3.6.4 ; IØ 3.6.h]

(92)



STM:
Scanning
Tunneling
Microscope

Med litt flaks har man ei nål med ett atom helt ytterst på spissen. På atomær skala:



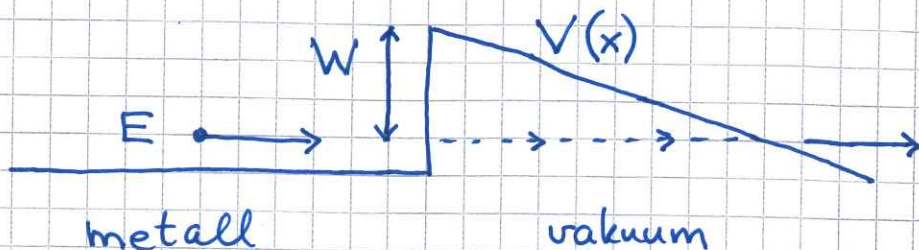
Tunneleringsstrømmen avhenger av transmisjonssannsynligheten T , som avtar eksponentielt med avstanden L mellom nåla og nærmeste overflateatom(er), $T \sim \exp(-2\kappa L)$. Med kontrollert scanning av nåla fram og tilbake og måling av $I(x,y)$ oppnås en avbildning av overflaten, med atomær oppløsning.

NP1986 : Binnig og Rohrer, IBM Zürich

Youtube : A boy and his atom

Andre eksempler som involverer tunnelering:

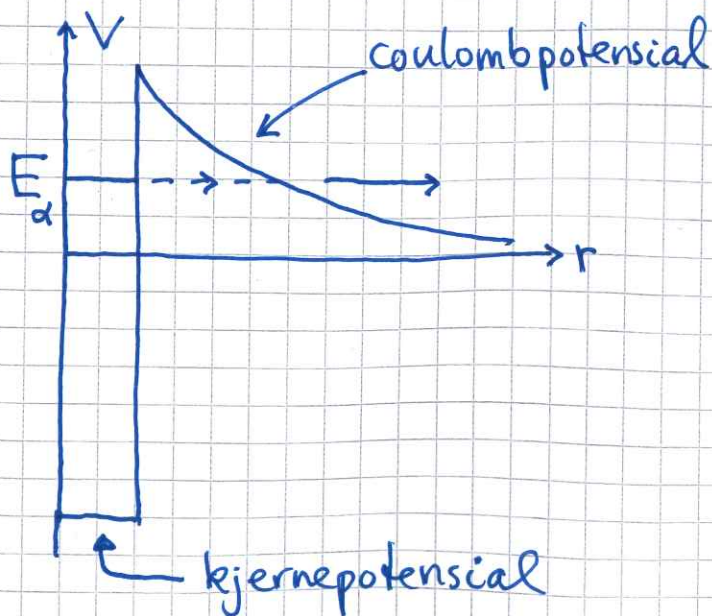
Feltemisjon: Elektrisk felt \vec{E} normalt på en metalloverflate gir potensialsprang og lineært avtagende potensial utenfor overflaten.



Elektroner kan nå tunnelere og unnsnippe metallet. Transmisjonssannsynligheten T øker raskt med økende feltstyrke $|\vec{E}| = dU/dx = (1/e) dV/dx$.

α -stråling: Tunge atomkjerner er ustabile og kan spontant sende ut en α -partikkel (dvs ${}^4_2\text{He}^{2+}$).

Modellpotensial: Kombinasjon av sterk tiltrekkende kjernekraft med kort rekkevidde og svakere frastøtende coulombkraft med lang rekkevidde. (Gamow 1928)



α -partikkelen kan tunnelere ut av kjernen fra en metastabil tilstand med energi E_α