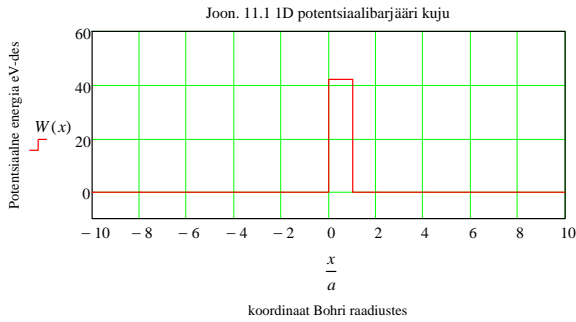


# 11. Tunnerefekt

Eelmisel töölehel leidsime, et vesinikusamas aatomis võib elektron liikuda isegi ebapiisava energia tõttu klassikalise mehaanika kohaselt keelatud piirkonda. Siin töölehel uurime lähemalt tunnerefekti -- kuidas elektron ületab potentsiaalbarjääri, st saab läbistada klassikaliselt keelatud piirkonna ja edasi liikuda teisel pool potentsiaalbarjääri.

Lihtsuse huvides käsitleme 1D mudelit, kus potentsiaal on järskude äärtega kasti kujuline, vt Joon. 11.1.

$$W(x) := \begin{cases} 0 & \text{if } x < 0 & \text{piirkond I} \\ U_0 & \text{if } 0 \leq x \leq l & \text{piirkond II} \\ 0 & \text{if } x > l & \text{piirkond III} \end{cases} \quad U_0 = 42 \text{ eV} \quad (11.1)$$



Liikugu osake vasakult barjääri suunas ja olgu tal energia  $E$ , mis on tervenisti kineetiline energia, sest seal piirkonnas on potentsiaalne energia 0. Kui  $E < W$ , siis barjääri piirkonnas II peaks klassikalise mehaanika järgi olema kineetiline energia negatiivne ja seega impuls imaginaarne, mis aga on võimatu ja seepärast ongi piirkond II sellise tingimuse korral keelatud piirkonnaks osakesele ning samuti ei pääse osake barjääri taha.

Kvantmehaanilises käsitluses on meil tegemist statsionaarse ülesandega ning tuleb seega lahendada ajast sõltumatu Schrödingeri võrrand ehk energia omaväärtusvõrrand hamiltoniaaniga

$$\mathbf{H} := \begin{cases} -\frac{\hbar_{rist}^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} & \text{if } x < 0 & \text{piirkonnas I} \\ -\frac{\hbar_{rist}^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + U_0 & \text{if } 0 \leq x \leq l & \text{piirkonnas II} \\ \frac{\hbar_{rist}^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} & \text{if } x > l & \text{piirkonnas III} \end{cases} \quad (11.2)$$

Arvnäideteks on vaja fundamentaalkonstante

$$\epsilon_0 := 1.60217653 \cdot 10^{-19} \cdot \text{coul}$$

$$q_{pr} := e \quad eV := e \cdot V$$

$$a \equiv 1 \text{ bohr} \quad a = 5.292 \times 10^{-11} \text{ m}$$

$$x := -10a, -9.98a..$$

$$\epsilon_0 := 8.854187817 \cdot 10^{-12} \frac{\text{farad}}{\text{m}}$$

$$eV = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$h := 6.6260693 \cdot 10^{-34} \text{ joule} \cdot \text{sec}$$

$$m_e := 9.1093826 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\hbar_{rist} := \frac{h}{2\pi}$$

Edasi järgime eestikeelset käsitlust [8], p. 2.8, mistõttu siin on põhivalemite selgitusi minimaalselt.

Sin mustad ristkükkused on muidugi MC pandud, kuid nad tulevad ka meelde, et operaator peab "mõjuma" funktsioonile endast paremal.

Toome valemite lihtsustamiseks sisse lainearvud

$$k_1 := \frac{\sqrt{2m_e \cdot E \cdot eV}}{h_{rist}} \quad \text{ja} \quad k_2 := \frac{\sqrt{2m_e \cdot (E - U_0) \cdot eV}}{h_{rist}} \quad . \quad (11.3)$$

Allpool etteantud energia  $E$  ja barjääri kõrguse  $U_0$  puhul on vastavad De Broglie lainepikkused

$$k_1 = 3.24 \times 10^{10} \cdot m^{-1} \quad , \quad k_2 = 7.245i \times 10^9 \cdot m^{-1}$$

ehk sama Bohri raadiustes

$$\frac{2\pi}{k_1} = 3.664 \cdot a \quad , \quad \frac{2\pi}{k_2} = -16.388i \cdot a \quad .$$

Kui teine lainearv või lainepikkus on imaginaarne, siis on  $E < U_0$  ja koordinaadi alguspunkti paremal on osakesele klassikaliselt keelatud piirkond.

Neis tähistustes energia omaväärtusvõrrand iga piirkonna jaoks eraldi välja kirjutatuna on

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1 + k_1^2 \cdot \psi_1 &= 0 && \text{piirkonnas I} \quad , \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_2 + k_2^2 \cdot \psi_2 &= 0 && \text{piirkonnas II} \quad , \quad (11.4) \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_3 + k_1^2 \cdot \psi_3 &= 0 && \text{piirkonnas III} \quad . \end{aligned}$$

Selle 2. järku hariliku lineaarse konstantsete koefitsientidega dif.võrrandi üldlahend avaldub lineaarselt sõltumatute eksponentfunktsioonide summana. Võime lahendi üldkuju ka kohe välja kirjutada, kasutades vaba osakese impulsi ja energia ühiseid omafunktsioone (2.1a) või (5.1). Seejuures piirkonnas III vasakule liikuv, st negatiivse impulsiga lainekomponent langeb ära, sest seal piirkonnas pole midagi, mis võiks osakesest ja järelkult ka leiulainet tagasi peegeldada. Seega

$$\begin{aligned} \psi_1 &= C_1 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot x) + C_2 \cdot \exp(-i \cdot k_1 \cdot x) && \text{piirkonnas I} \quad , \\ \psi_2 &= C_3 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot x) + C_4 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot x) && \text{piirkonnas II} \quad , \quad (11.5) \\ \psi_3 &= C_5 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot x) && \text{piirkonnas III} \quad . \end{aligned}$$

Konstandid saab määrata nagu ikka -- lainefunktsiooni ja tema tuletise ühesuse nõudest piirkondade liitepunktides.

Seega peab

$$C_1 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot 0) + C_2 \cdot \exp(-i \cdot k_1 \cdot 0) = C_3 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot 0) + C_4 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot 0)$$

$$C_1 \cdot k_1 \cdot e^{k_1 \cdot 0 \cdot i} - C_2 \cdot k_1 \cdot e^{-k_1 \cdot 0 \cdot i} = C_3 \cdot k_2 \cdot e^{k_2 \cdot 0 \cdot i} - C_4 \cdot k_2 \cdot e^{-k_2 \cdot 0 \cdot i}$$

$$C_3 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot l) + C_4 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot l) = C_5 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot l)$$

$$C_3 \cdot k_2 \cdot e^{k_2 \cdot l \cdot i} + C_4 \cdot k_2 \cdot e^{-k_2 \cdot l \cdot i} = C_5 \cdot k_1 \cdot e^{k_1 \cdot l \cdot i}$$

Muidugimõista  
 $\exp(0) = 1$

Kuna võrrandeid on 4 ja tundmatuid 5, siis tuleks lisada veel normeerimistingimus. Siiski me normeerimisega ei tegele, otstarbekas on suhestada kõiki tundmatuid pealelangeva amplituudiga, st loeme  $C_1 = 1$ , mis annabki puuduva viienda võrrandi. Seega, lugedes selle esimeseks võrrandiks, saame kirjutada võrrandisüsteemi maatriksi ja selle parema poole (ehk vabaliikme) vektori

$$M := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ a \cdot k_1 & -a \cdot k_1 & -(a \cdot k_2) & a \cdot k_2 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(i \cdot k_2 \cdot l) & \exp(-i \cdot k_2 \cdot l) & \exp(i \cdot k_1 \cdot l) \\ 0 & 0 & a \cdot k_2 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot l) & -(a \cdot k_2 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot l)) & a \cdot k_1 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot l) \end{bmatrix}, \quad V_{aba} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Siin 2. ja 4. võrrand on läbi korrutatud a- ga, et võrrandid oleks kõik ühtemoodi dimensioonitud.

Kuna lineaarne võrrandisüsteem avaldub maatrikskujuis kui  $M \cdot C = V_{aba}$ ,

siis seda vasakult pöördmaatriksiga läbi korrutades saame lahendi  $C_{\text{võn}} := M^{-1} \cdot V_{aba}$

ning seega lõplikult lainefunktsiooni jaoks avaldise juba väljaarvutatud konstantidega C:

$$\psi(x) := \begin{cases} C_1 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot x) + C_2 \cdot \exp(-i \cdot k_1 \cdot x) & \text{if } x < 0 \\ C_3 \cdot \exp(i \cdot k_2 \cdot x) + C_4 \cdot \exp(-i \cdot k_2 \cdot x) & \text{if } 0 \leq x \leq l \\ C_5 \cdot \exp(i \cdot k_1 \cdot x) & \text{if } x > l \end{cases} \quad (11.5a)$$

Kuna meie normeeringus  $C_1 = 1$ , siis barjääri läbimise tõenäosus D on praeguste parameetrite puhul

$$(|C_5|)^2 = 0.54 \text{ ja osakese peegeldumise tõenäosus } R \text{ on } (|C_2|)^2 = 0.46$$

Tõenäosuse jäävuse tõttu peab kehtima  $D + R = 1$  ja tõepoolest

$$(|C_2|)^2 + (|C_5|)^2 = 1$$

**Ülesanne 11.1** Muuda barjääri laiust  $l$ , kõrgust  $U_0$  ja osakese energiat  $E$  ning uuri kaasuvaid muutusi graafikus Joon. 11.2. Anna seletus nähtule.

(Miks tõenäosus enne barjääri ostsilleerub ruumiliselt? Miks mitte nullini? Kuidas ta käitub barjääri sees? Millest ja kuidas sõltub osakese leidmise tõenäosus barjääri taga, st läbimise tõenäosus? Kuidas (ja miks) käitub osakese leidmise tõenäosus barjääri sees, kui algenergia ületab tunduvalt barjääri kõrguse?)

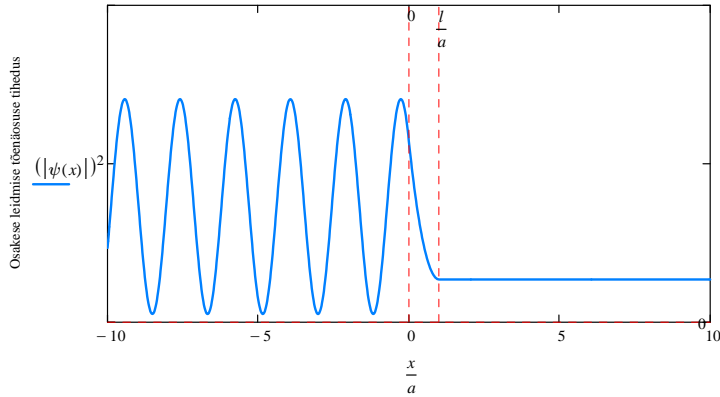
$U_0 \equiv 42$

$E \equiv 40$

$l \equiv 1a$

Korruga muuda ainult üht parameetrit ja mitte üle 50% sammuga.

Joon. 1.2 Vasakult paremale liikuva osakese leidmise tõenäosus barjääri ees, sees ja taga.



$$\frac{k_1 \cdot l}{2\pi} = 0.273$$

$$\frac{k_2 \cdot l}{2\pi} = 0.061i$$

Tähistades

$$n := \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \quad \text{ja} \quad k := -i \cdot k_2 \quad k \cdot l = 0.383$$

saame läbitavuse koefitsiendi  $D := \frac{|C_5|^2}{|C_1|^2}$  jaoks analüütilise avaldise ([8], lk. 46)

$$D := \frac{4n^2}{(n^2 - 1)^2 \cdot (\sinh(k \cdot l))^2 + 4n^2 \cdot (\cosh(k \cdot l))^2} \quad (11.6)$$

millega arvutades saame sama tulemuse, mis oli eespool saadud numbrilise arvutuse teel:  $D = 0.54$

**(Probleem)Ülesanne 11.2** Tuleta valem (11.6) (soovitatavalt – MC sümbolarvutuse vahenditega).

Põhjuseks, miks kvantmehaanikas on imaginaarne lainearv (ja seega ka impulss) võimalikud, on asjaolu, et kvantmehaanika tegeleb lainetega nagu ka optika. Optikas on eksponentsiaalselt kustuvat nn evanestsentsete lainete tungimine vabadele lainetele keelatud piirkonda tuntud nähtus, nt täieliku sisepeegelduse juures.

Aga ikkagi -- mida tähendab negatiivne kineetiline energia barjääri piirkonnas? Kineetilisele energiale vastab ju operaator, st ta on vaadeldav ja pealegi hamiltoniaanis sees? Jah, me saame leida selle operaatori **keskväärtuse** antud olekus, see aga tähendab antud juhul integreerimist üle kogu lõpmatu piirkonna, kus lainefunktsioon nullist erinev. Erinevalt klassikalisest mehaanikast pole kvantmehaanikas üldiselt energia jaotatav potentsiaalseks ja kineetiliseks osaks. Põhjus on selles, et potentsiaalne energia on koordinaadi funktsioon, aga kineetiline energia sõltub impulssist, kuid koordinaat ja impulss pole ühildatavad suurused.

Kokkuvõttes -- kvantmehaanikas pole mõtet küsida, milline on kineetiline energia mingis osakese koordinaatide vahemikus (v.a. juht, kui olek on impulsi omaolek, aga siis on ka osakese koordinaat täiesti määratatu). Kui teostada mõõtmise osakese leidmiseks potentsiaalbarjääri piirkonnas, siis tähendab see lainefunktsiooni kollapseeimist lokaliseerituks vähemasti barjääri laiusega lainepaketiks. On kerge veenduda, et sellega kaasneb impulsi sedavõrd määratatuks muutumine ja seetõttu osakesele sedavõrd suure kineetilise energia juurdeandmine, et tema koguenergia ületab barjääri kõrguse ning kogu probleem "negatiivsest energiast barjääri piires" kaob, st probleem jutumärkides on pseudoprobleem, tingitud katsest suruda peale kvantmaailmale makromaailma mõisteid ja arusaamu.

## • Rakendused

Tunnel efekti rakendustest nimetame kõigepealt tunnelidooži ja **tunnelmikroskoopi**. Tunnel efekti aitab kaasa ka tuumareaktsioonides, nt tuumade radioaktiivsel lagunemisel alfaosakeste tekkega (vt [8], p.6.2) ja tuumade ühinemisel Päikeses sisemuses ja vesinikupommis.

Vt [http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum\\_tunneling](http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_tunneling)

Siin aga uurime tunnel efekti kasutamist ülilühikeste (~ 1 femtosekund = 10<sup>-15</sup> s) röntgenikiirguse impulsside tekitamisel nn kõrgete harmoonikute genereerimisega (*High Harmonic Generation* -- HHG) aatomite poolt võimsa femtosekundlaseri valgusväljas. Teeme MC abil arvulised hinnangud.

Tuuma elektiväli

$$E(r) := \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{qpr}{r^2}$$

on Bohri raadiuse kaugusel tugevusega

$$E(a) = 5.142 \times 10^8 \cdot \frac{V}{mm}$$

Võrdluseks: makroskoopiliste seadmete puhul on kuiva õhu jaoks normaalrõhul läbilöögi-väljatugevus ~10<sup>3</sup> V/mm.

Vaakumis tasalaine elektriväljatugevus on seotud energiavoo tiheduse ehk intensiivsusega S (Pointingi vektor), mille võtame suure:

Vt <http://www.physic.ut.ee/instituudid/efti/loengumaterjalid/elmag/>

$$S_{\text{MW}} := 1 \cdot 10^{20} \frac{\text{watt}}{\text{m}^2} \quad (11.7)$$

st võimsus mikronilisele pinnale on  $S = 100 \cdot \frac{MW}{\mu\text{m}^2}$ , millest

$$E_{\text{laseri}} := \sqrt{\frac{S}{c \cdot \epsilon_0}} \quad , \quad E_{\text{laseri}} = 1.941 \times 10^8 \cdot \frac{V}{\text{mm}}$$

Näeme, et sellises tugevas maksimaalselt fookuseeritud laseriimpulsis on elektriväljatugevus sama suurusjärku, mis vesiniku aatomis Bohri raadiuse kaugusel tuumast, st seal, kus on aatomi põhiseisundis elektroni leidmise tõenäosus suurim. Seejuures mikronilisele pinnale fookuseeritud femtosekundilise impulsi energia on kõigest (sest impulss on väga lühike):

$$S \cdot \mu\text{m}^2 \cdot 10^{-15} \cdot \text{s} = 1 \times 10^{-7} \cdot \text{joule}$$

Teeme aatomi mastaabis graafiku tuuma ja elektrivälja potentsiaalide  $\Phi$  käitumise kohta tuuma lähival ja laseriimpulsi levisuunaga risti oleval teljel  $x$  (EM laine on teatavasti ristlaineline).

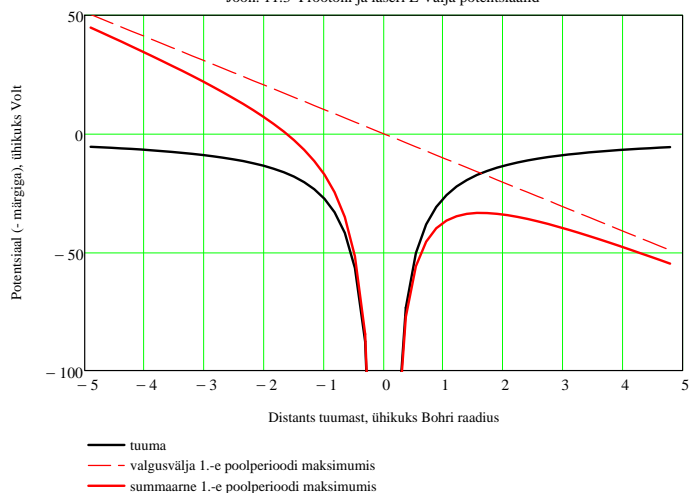
$$\phi_{pr}(x) := \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{q_{pr}}{|x|}$$

$$\phi_{\text{laseri}}(x) := E_{\text{laseri}} \cdot x \quad (11.8)$$

Potentsiaalne energia (mida Žargoonis nimetatakse lühiduse huvides samuti potentsiaaliks) on elektroni puhul potentsiaal korda elektroni laeng.

$$x := -4.9 \cdot a,$$

Joon. 11.3 Prootoni ja laseri E-välja potentsiaalid



HHG mehhanism läbi tunneleefekti on lühidalt järgmine. Laseri elektrivälja vönkeperioodi maksimumis aatomi asukohas surub laseri elektrivälja aatomi ühel küljel tuumapotsentiaali alla nii, et elektronil on selles suunas võimalik tunneleerida läbi potentsiaalibarjääri tuumast kaugemale eemale. Järgmisel poolperioodil -- pane miinusmärk  $E_{\text{laseri}}$  ette valemis (11.8) -- on aga eemaldunud elektroni nõ asukohas potentsiaal palju kõrgem kui tuuma potentsiaal sealsamas, mistõttu elektron lüüakse suure jõuga (kiirendusega) tagasi tuuma juurde. Sellega kaasneb röntgenikiirguse impulss.

Siinne kirjeldus on muidugi kaugel täpsest ja on segamini "klassikalise keelega".

**Ülesanne 11.3** Muutes laseri intensiivsust valemis (11.7) selgita graafiku abil välja ca 30% täpsusega see intensiivsust, millest alates Bohri raadiuse distantsil tuumast asuv elektron kaugeneb ka ilma tunneleefekti.

----- Töölehe lõpp -----