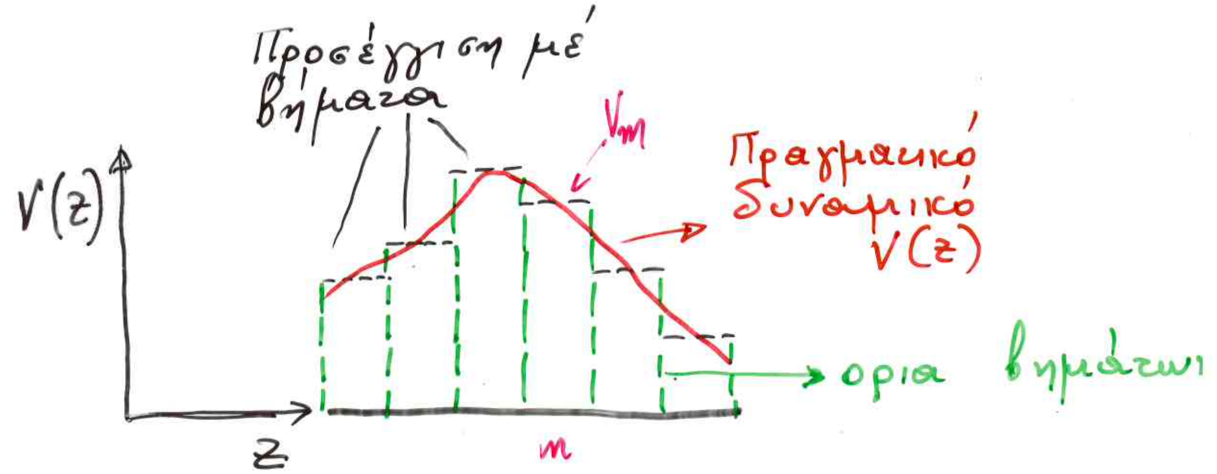
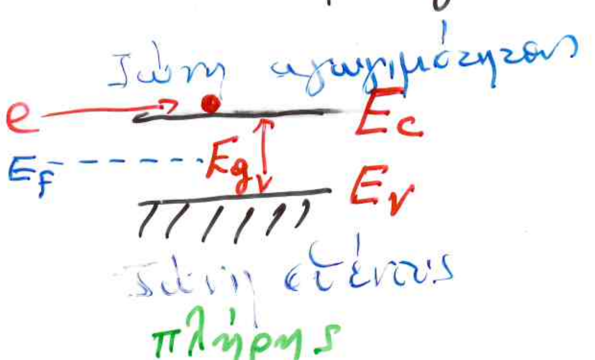
Προσέγγιση δυναμικού μέ βήματα

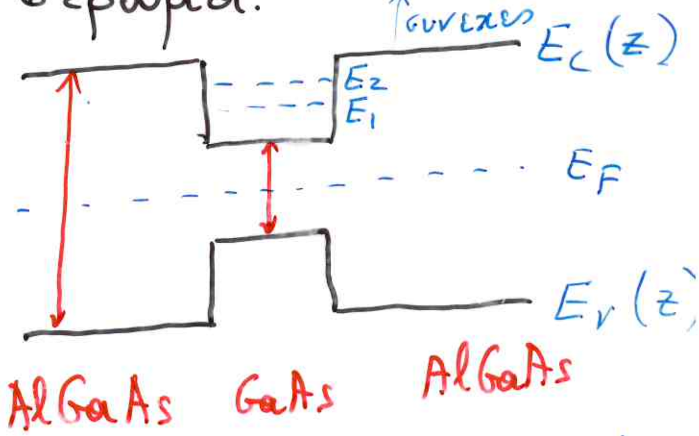


α) Λύνουμε χωριστά σέ κάθε βήμα μέ σταθερό δυναμικό (λύσεις εκθετικές ή ημιτονοειδείς ανάλογα μέ τό άν $E < V_m$ ή $E > V_m$).

β) Ενώνουμε τίς λύσεις μέ τίς οριακές συνθήκες στά άκρα τών βημάτων και καί στά εξωτερικά άκρα.

Πολλά προβλήματα σέ στρώματα ημιαγωγών. Τά e βλέπουν ζώνη αγωγιμότητας της οποίας τό κάτω άκρο μεταβάλλεται στό χώρο γιά κάθε στρώμα.

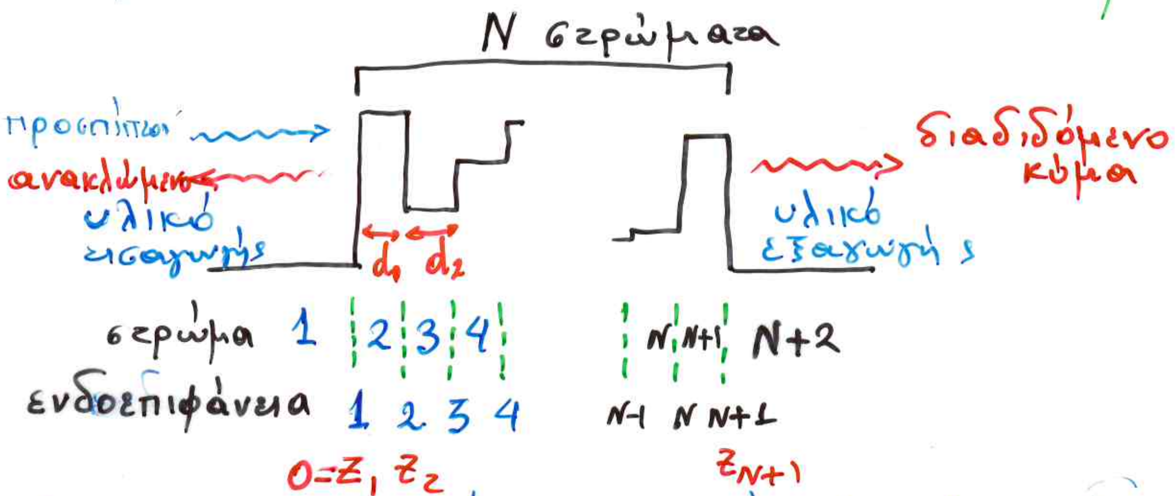




Ιδιες μέθοδοι μέ τήν διάδοση Η.Μ. κυμάτων σέ στρωματωμένα διηλεκτρικά υλικά. Εκεί κρίσιμη γωνία είναι τό όριο γιά ημιτονοειδές κύμα. Γιά $\theta > \theta_c \rightarrow$ εκθετικές λύσεις. $E_r(z) \rightarrow$ [illegible]

V_m - δυναμικό στο στρώμα m

m_m - μάζα " " " (προσέγγιση ενεργ
μάζα

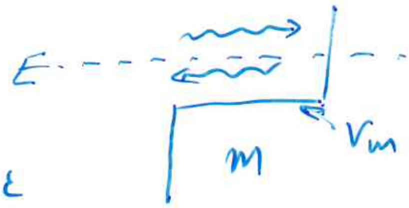


Η απόσταση μετριέται από την 1η ενδοεπιφ

($m \geq 2$ $\quad z_m = \sum_{\ell=2}^{m} d_{\ell-1}$

$d_{\ell-1}$ - πάχος του ℓ-στρώματος

$E > V_m$



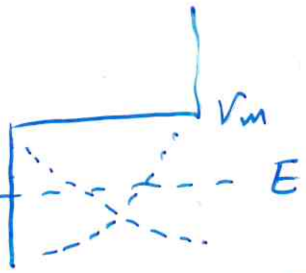
Στο στρώμα m έχουμε

$A_0 e^{ik_m(z-z_m)}$

$B_0 e^{-ik_m(z-z_m)}$

$$k_m = \sqrt{\frac{2m_m}{\hbar^2}(E-V_m)}$$

$k \to ik$



εκθετικές λύσεις

$E < V_m$ $\quad z_m < z < z_{m+1}$

$A_0 e^{-\kappa_m(z-z_m)}$

$B_0 e^{\kappa_m(z-z_m)}$

$$\kappa_m = \sqrt{\frac{2m_m}{\hbar^2}(V_m-E)}$$

$e^{ikx} \Rightarrow e^{-\kappa x}$

$k \to i\kappa$

$e^{-ikx} \Rightarrow e^{\kappa x}$

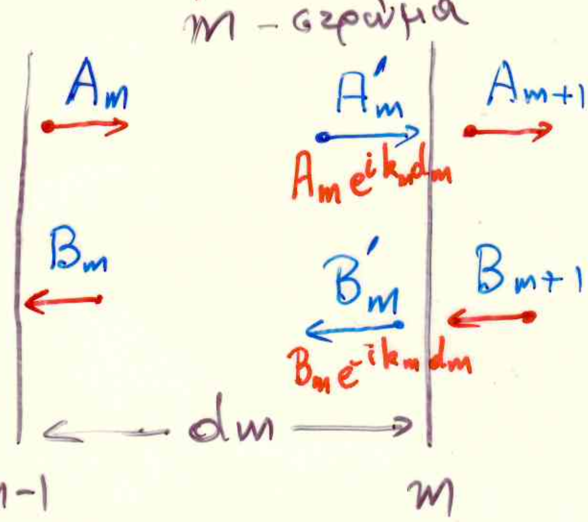
Περιλαμβάνονται και οι 2 περιπτώσεις

Σέ κάθε στρώμα m έχουμε

$$\psi_m(z) = A_m e^{ik_m(z-z_m)} + B_m e^{-ik_m(z-z_m)}$$

ισχύει καί γιά $E<V_m$ αν $k_m \to i k_m$

Ας πάμε τώρα στίς οριακές συνθή[κες] στίς ενδοεπιφάνειες.



A_m, B_m - στό αριστερό τού m-στρώματος
$A'_m\ B'_m$ " δεξιό " " "

Οριακές συνθήκες στήν m-ενδοεπιφάνει[α]

συνέχεια στό $z=z_m$

$$\psi \Rightarrow A'_m + B'_m = A_{m+1} + B_{m+1} \quad (1)$$

$$j \quad \frac{ik_m}{m_m}\left(A'_m - B'_m\right) = \frac{ik_{m+1}}{m_{m+1}}\left(A_{m+1} - B_{m+1}\right)$$

ή

$$A'_m - B'_m = \Delta_m\left(A_{m+1} - B_{m+1}\right) \quad (2)$$

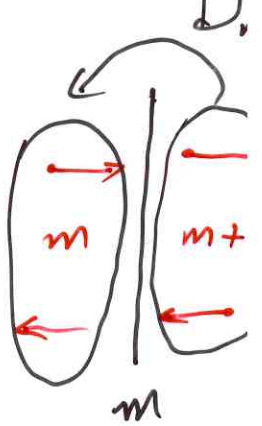
$$\Delta_m = \frac{k_{m+1}}{k_m}\,\frac{m_m}{m_{m+1}}$$

Λύνουμε γιά $A'_m, B'_m \longleftarrow A_{m+1}, B_{m+1}$

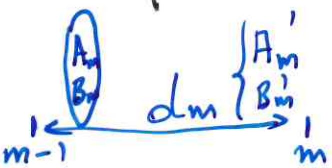
$$A'_m = A_{m+1}\left(\frac{1+\Delta_m}{2}\right) + B_{m+1}\left(\frac{1-\Delta_m}{2}\right)$$

$$B'_m = A_{m+1}\left(\frac{1-\Delta_m}{2}\right) + B_{m+1}\left(\frac{1+\Delta_m}{2}\right)$$

πού γράφεται σέ μορφή πίνακα



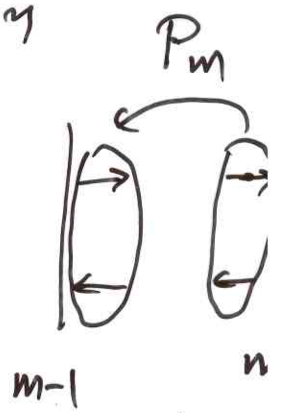
$$\begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_m}{2} & \frac{1-\Delta_m}{2} \\ \frac{1-\Delta_m}{2} & \frac{1+\Delta_m}{2} \end{pmatrix}}_{D_m} \begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix}$$



Πώς συνδέονται τά $A_m, B_m \leftarrow A'_m, B'_m$

$$\begin{aligned} A'_m &= A_m e^{ik_m d_m} \\ B'_m &= B_m e^{-ik_m d_m} \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} A_m &= A'_m e^{-ik_m d_m} \\ B_m &= B'_m e^{ik_m d_m} \end{aligned}$$

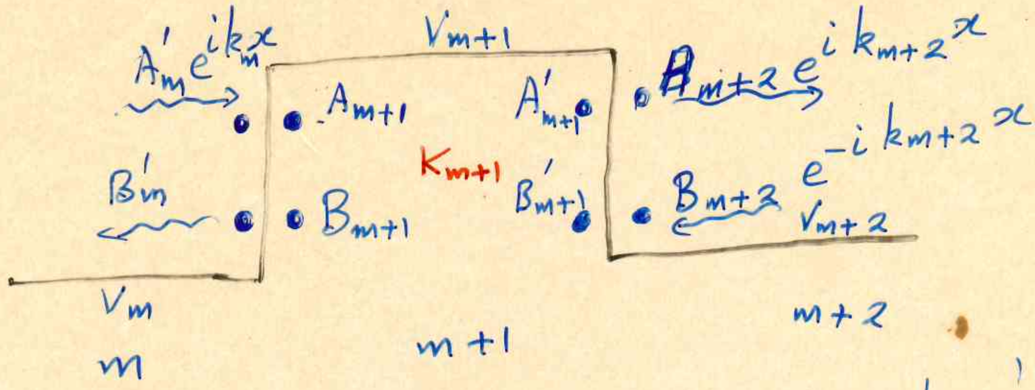
ή σέ διάνυσμα-πίνακα μορφή



$$\begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-ik_m d_m} & 0 \\ 0 & e^{ik_m d_m} \end{pmatrix}}_{P_m} \begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & P_m & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & D_m & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix}$$

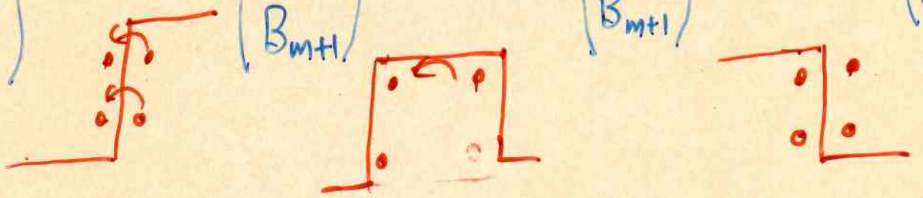
Μέθοδος Πίνακα Μεταφοράς



Νά βροῦμε τα $\begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix}$ από τά $\begin{pmatrix} A_{m+2} \\ B_{m+2} \end{pmatrix}$

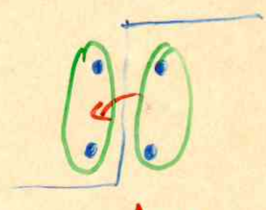
Μπορεί νά γίνει σέ τρία βήματα

$$\begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} A'_{m+1} \\ B'_{m+1} \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} A_{m+2} \\ B_{m+2} \end{pmatrix}$$



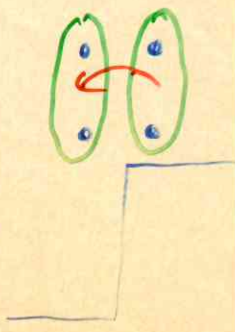
1ο βήμα Από τίς οριακές συνθήκες στ φράγμα.

$$\begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_4}{2} & \frac{1-\Delta_4}{2} \\ \frac{1-\Delta_4}{2} & \frac{1+\Delta_4}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{m+1} \\ B_{m+1} \end{pmatrix}$$

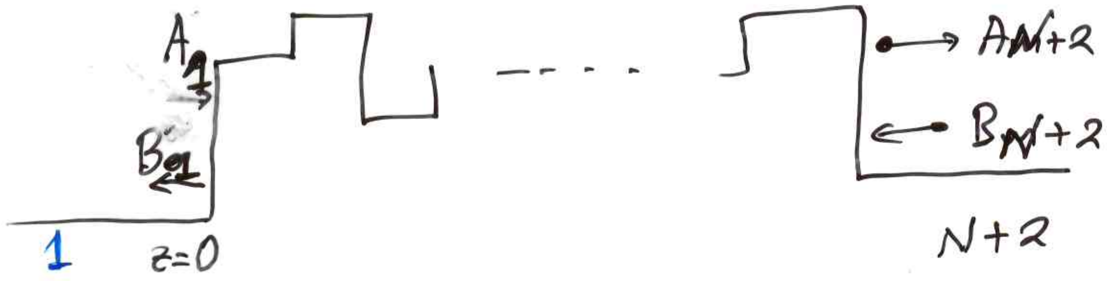


$$\Delta_4 = \frac{K_{m+1}}{-ik_m}\,\frac{m_m}{m_{m+1}} \qquad E < V_{m+1}$$

$$\Delta_1 = \frac{-ik_{m+1}}{-ik_m}\,\frac{m_m}{m_{m+1}} \qquad E > V_{m+1}$$



Γιά τά N-στρώματα (+ 2- είσοδος, έξο



$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \underbrace{T}_{\text{ολικός πίνακας μεταφορ}} \begin{pmatrix} A_{N+2} \\ B_{N+2} \end{pmatrix}$$

$$T = D_1 P_2 D_2 P_3 D_3 \cdots P_{N+1} D_{N+1}$$

Σύστημα 2×2.

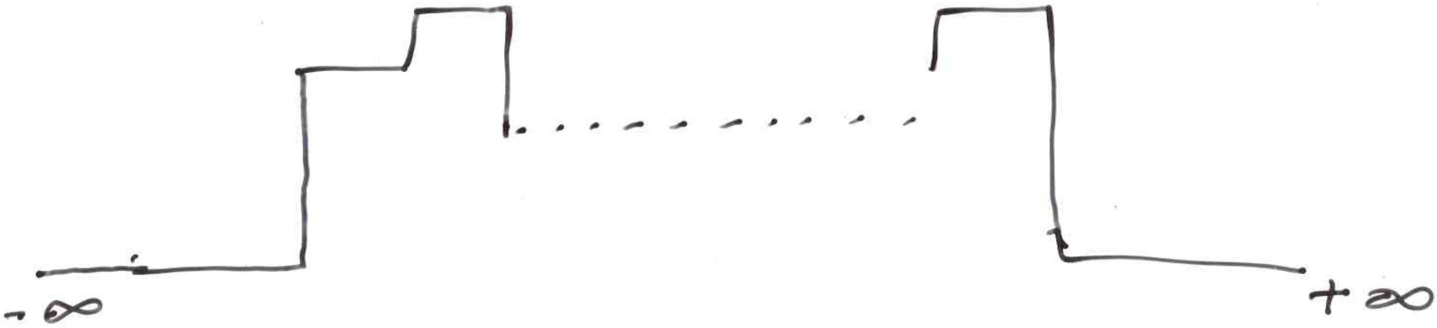
T- εξαρτάται από την ενέργεια

Αν A_{N+2}, B_{N+2} - γνωστά $\Rightarrow$ κυματοσυνάρτηση σέ κάθε m-στρώμ

$$\begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix} = P_m D_m \cdots P_N D_N P_{N+1} D_{N-1} \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix}$$

Χρειαζόμαστε καί άλλες δύο εξισώσεις πού θά προέλθουν από τ
οριακές συνθήκες στά δύο άκρα

Οριακές συνθήκες



α) Πρόβλημα σκέδασης

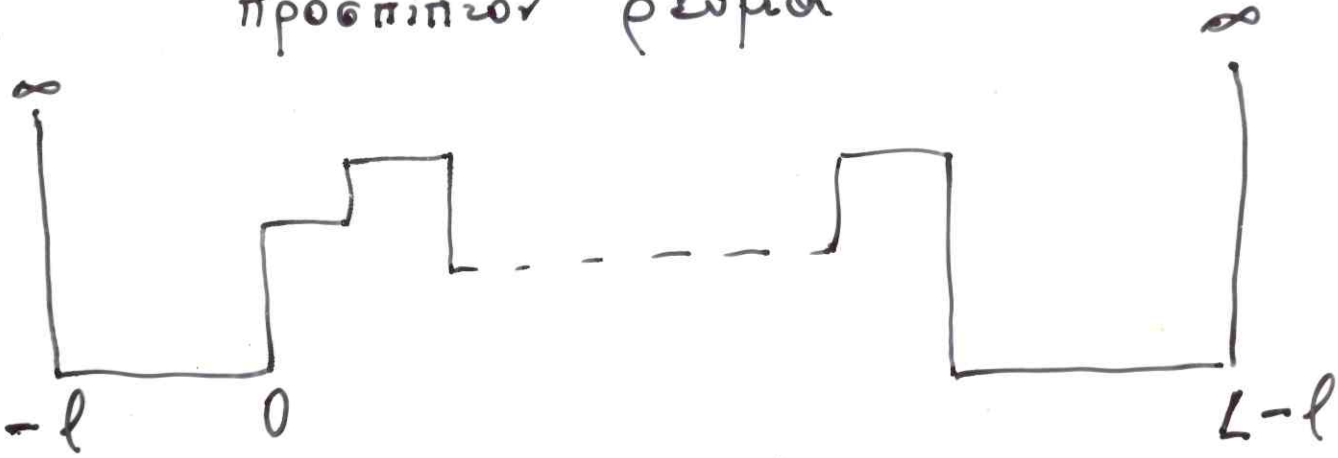
Προσπίπτον από αριστερά $(-\infty)$

Μόνο διερχόμενο στο $(+\infty) \Rightarrow B_{N+2}=0$

$\Rightarrow A'_1=1$ ή κανονικοποιούμε ως πρό-

προσπίπτον ρεύμα

β)



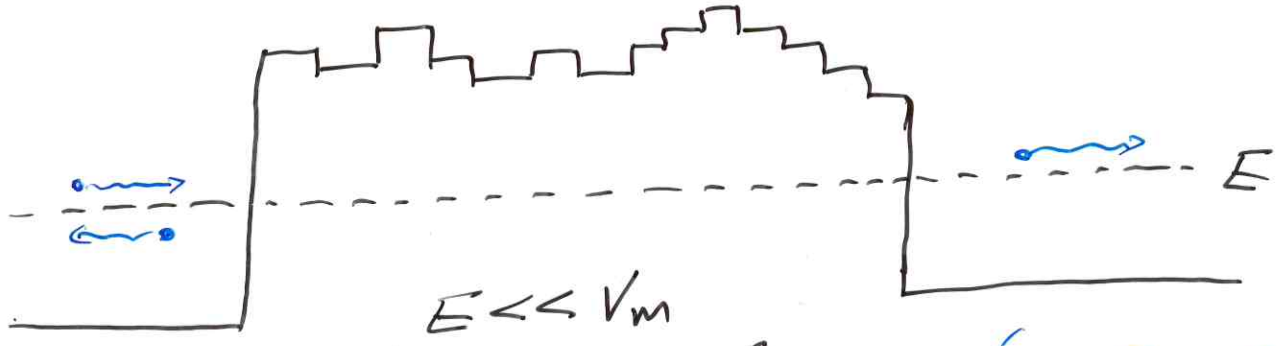
$\psi(-\ell)=0 \Rightarrow A'_1, B'_1$ σχέση

$\psi(L-\ell)=0 \Rightarrow A_{N+2}, B_{N+2}$ σχέση

γ) Περιοδικές οριακές συνθήκες

$$\left.\begin{array}{l}\psi(x+L)=\psi(x)\\ \psi'(x+L)=\psi'(x)\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l}A_{N+2}(A'_1,B'_1)\\ B_{N+2}(A'_1,B'_1)\end{array}$$

Συντελεστής διέλευσης μέσω ομαλού φράγματος.



αναλυτικό αποτέλεσμα (WKB προσέγγι

$V(z)$ μεταβάλλεται ομαλά στην κλίμακα

$\frac{1}{\kappa}$ - μήκος διείσδυσης

Πολύ λεπτά στρώματα $\Rightarrow k_m \simeq k_{m+1}$

$$D_m = \begin{pmatrix} \frac{1+\Delta_m}{2} & \frac{1-\Delta_m}{2} \\ \frac{1-\Delta_m}{2} & \frac{1+\Delta_m}{2} \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{ίδια μάζα}]{\Delta_m = \frac{k_{m+1}}{k_m}\frac{m_m}{m_{m+1}}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$T = D_1 P_2 P_3 \dots P_N P_{N+1} D_{N+1}$$

στα άκρα δυναμικό μεταβάλ

απότομα.

$$P_m = \begin{pmatrix} e^{-ik_m d_m} & 0 \\ 0 & e^{ik_m d_m} \end{pmatrix} \Rightarrow P_2 P_3 \dots P_N P_{N+1} \simeq \begin{pmatrix} \frac{1}{G} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$G = \prod_{\ell=2}^{N+1} e^{ik_\ell d_\ell} \xrightarrow{k_\ell \to i\kappa_\ell} \prod_{\ell=2}^{N+1} e^{-\kappa_\ell d_\ell} = e^{-\sum_{\ell=2}^{N+1} \kappa_\ell}$$

Γιά πολύ λεπτά στρώματα

$$\sum_{\ell=2}^{N+1} \kappa_\ell d_\ell \simeq \int_0^d \kappa(z)\,dz \quad , \kappa(z) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(V(z)\right.}$$

$$G \simeq e^{-\int_0^d \kappa(z)\,dz}.$$

$$T = D_1 \begin{pmatrix} \frac{1}{G} & 0 \\ 0 & G \end{pmatrix} D_{N+1} \rightarrow$$

$$T_{11} = \frac{1+\Delta_1}{2} \frac{1}{G} \frac{1+\Delta_{N+1}}{2}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \quad A = T_{11} F$$

$$\mathcal{T} = \frac{|F|^2}{|A|} = \frac{16|G|^2}{\left|(1+\Delta_1)(1+\Delta_{N+1})\right|^2}$$

ιδια μαζα κ

$$\boxed{\mathcal{T} \sim e^{-2\int_0^d \kappa(z)\,dz}} \quad , \kappa(z) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(V(z) - \right.}$$

Ρυθμός διαπέρασης (σήραγγας)

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{matrix} A = T_{11} F \\ B = T_{21} F \end{matrix} \quad \Rightarrow \quad \frac{B}{A} = \frac{T_{21}}{T_{11}}$$

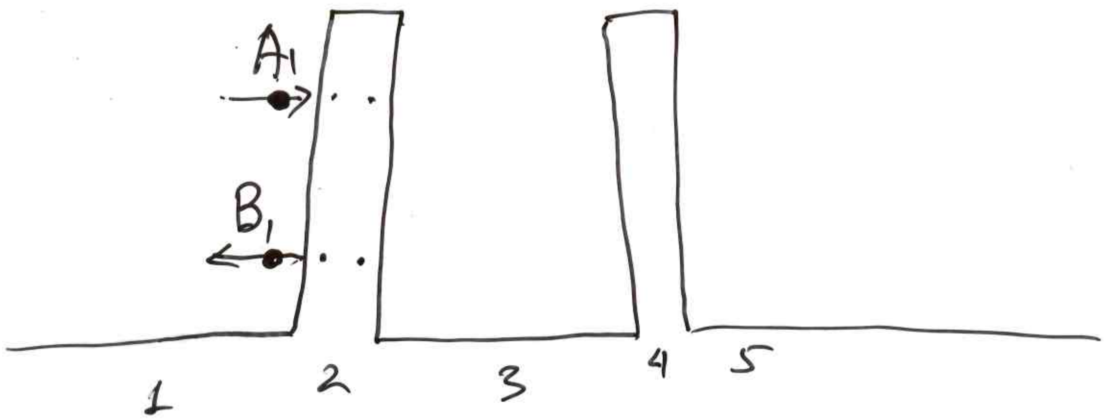
συντελεστής διέλευσης $\quad \mathcal{T} = \dfrac{J_T}{J_{in}} = \dfrac{\frac{\hbar k_f}{m_f} |F|^2}{\frac{\hbar k_{in}}{m_{in}} |A|^2}$

current conservation

$$J_T + J_R = J_{in} \Rightarrow \frac{\hbar k_f}{m_f} |F|^2 + \frac{\hbar k_{in}}{m_{in}} |B|^2 = \frac{\hbar k_{in}}{m_{in}} |A$$

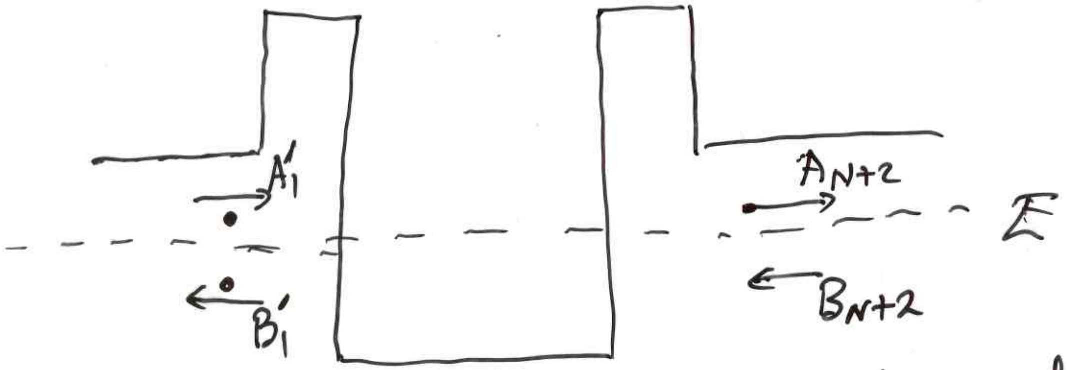
$$\mathcal{T} = 1 - \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 - \frac{\|T_{21}\|^2}{\|T_{11}\|^2}$$

Εφαρμογή: Διπλό φράγμα



Υπολογισμός δέσμιων καταστάσεων

$N=5$



αποσβεννόμενη λύ

$A_1' = 0$ μόνο

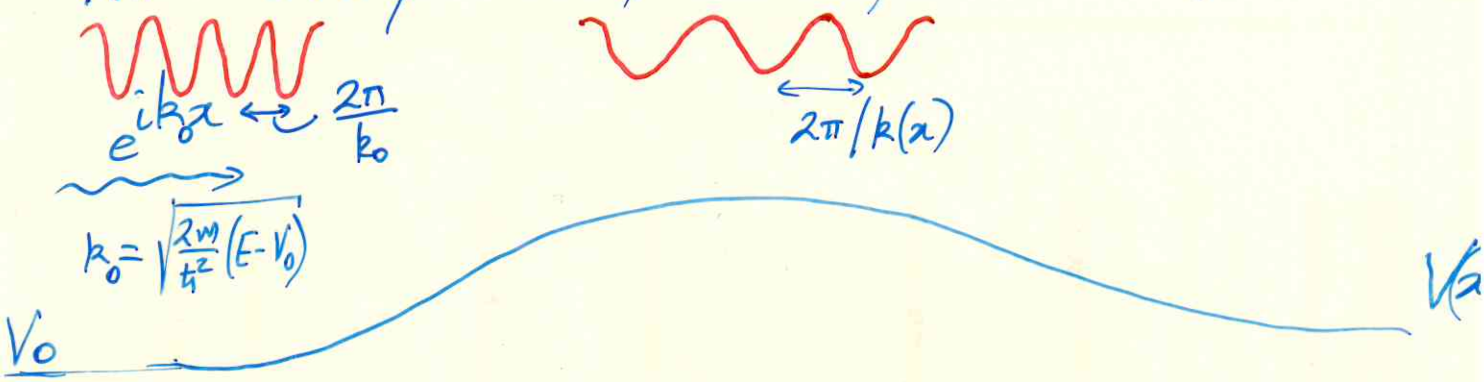
$B_{N+2} = 0$ μόνο

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B_1' \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A_{N+2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{N+2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{matrix} 0 = T_{11} A_{N+2} \\ B_1' = T_{21} A_{N+2} \end{matrix}\right\} \Rightarrow \boxed{T_{11} = 0} \Rightarrow \text{ιδιοενέργει}$$

WKB προσέγγιση

Αν έχουμε αργά μεταβαλλόμενο $V(x)$.



$$k(x)=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(x)\right)}$$

$$e^{\pm ikx} \longrightarrow (?)\ e^{\pm i\int dx\, k(x)}$$

$$\Delta\phi = kd \longrightarrow \Delta\phi=\int_0^d k(x)\,dx$$

Καί το πλάτος μεταβάλλεται μέ το x ώστε νά διατηρείται τό ρεύμα.

Πίνακας Σκέδασης

Σταθερό δυναμικό στο $\pm\infty$

Παραγωγές στο $\pm\infty$

Προσπίπτον κύμα από αριστερά

$$\psi_k(x)\Big|_{x\to-\infty} = e^{ikx} + S_{11}e^{-ikx}$$

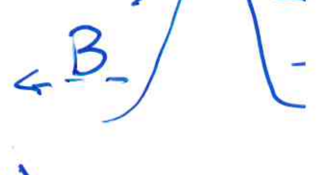
$$\underset{x\to+\infty}{=} S_{12}\sqrt{\frac{k}{k'}}\,e^{ik'x}$$

Προσπίπτον από δεξιά

$$\psi_{k'} \underset{x\to+\infty}{=} e^{-ik'x} + S_{22}e^{ik'x}$$

$$\underset{x\to-\infty}{=} S_{21}\sqrt{\frac{k'}{k}}\,e^{-ikx}$$

Πίνακας Σκέδασης $\quad S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$



$$\begin{pmatrix} B \\ A' \end{pmatrix}_{out} = \begin{pmatrix} \quad & \quad \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B' \end{pmatrix}_{in}$$

S - μοναδιακός πίνακας $S^+ = S^{-1}$

$S S^+ = S^+ S = \mathbb{1}$

$$\Rightarrow \left.\begin{array}{l} |S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 = 1 \\ |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 = 1 \end{array}\right\}$$ σύμφωνα με διατήρησης ρεύματος πυκνότητας.

Γι' αυτό ξεχωρίσαμε τον παράγοντα $\sqrt{\frac{k}{k'}}$.

$$j(x \to -\infty) = \frac{\hbar k}{m}\left(1 - |S_{11}|^2\right)$$

$$j(x \to +\infty) = \frac{\hbar k'}{m}|S_{12}|^2 \qquad \Rightarrow |S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 = 1$$

Ισοδύναμο με $\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$

γιά $\psi = \psi_k(x)\, e^{-iEt/\hbar} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial j}{\partial x} = 0$

χρειαζόμαστε επίσης

$$S_{11} \cdot S_{21}^* + S_{12} S_{22}^* = 0 \qquad \left(S_{21}^* \; S_{22}^*\right)\begin{pmatrix} S_{11} \\ S_{12} \end{pmatrix} = 0$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi_k^* \psi_{k'}\right)}_{=0} = \frac{\partial j_{kk'}}{\partial x}$$

$k' = -k$

$|k'| = |k|$

ίδια E

όπου

$$j_{kk'} = Re\left(\psi_k^* v \psi_{k'}\right)$$

χρησιμοποιόντας εξίσωση Schrodinger γιά

Πίνακας Μεταφοράς

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

2ης τάξης Δ.Ε. $\Rightarrow$ $\psi_1(x)$ & $\psi_2(x)$ γραμμικά ανεξάρτητ

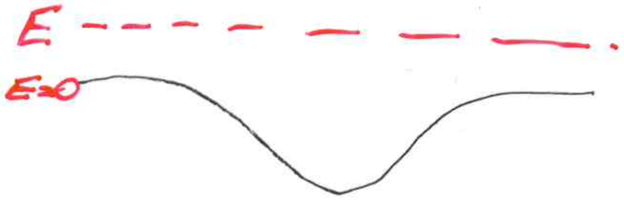
$\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$ γραμμική Δ.Ε.

Εντοπισμένη κυματοσυνάρτηση

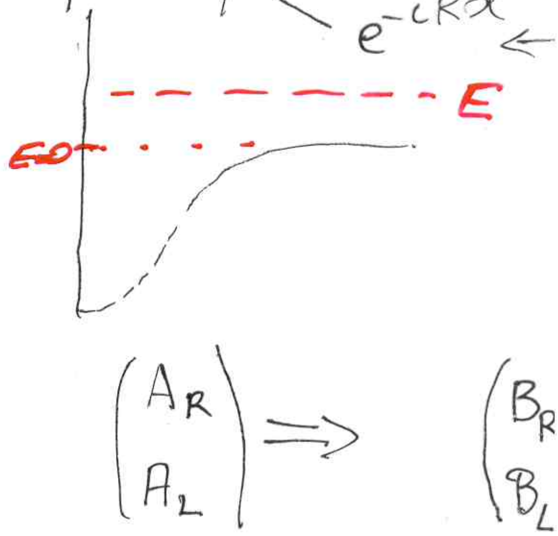
$\Rightarrow \psi(-\infty)=0$ & $\psi(+\infty)=0 \Rightarrow c_1, c_2, E$

+ κανονικοποίηση

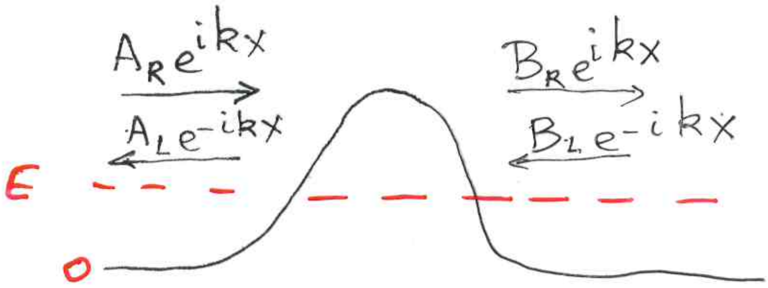
Πρόβλημα σκέδασης. διαφορετικές οριακ
συνθήκες. $V(x)$ εντοπισμένο. $\Rightarrow$
$|x|\to\infty$ σωματίδιο ελεύθερο. $\psi <$ e^{ikx}, e^{-ikx}



ή



ή



$$\begin{pmatrix} A_R \\ A_L \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} B_R \\ B_L \end{pmatrix}$$

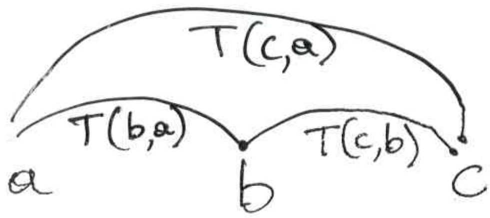
Πίνακας μεταφοράς

$\psi(x) \simeq A_R e^{ikx} + A_L e^{-ikx}$ $\quad x\to-\infty$

$\psi(x) \simeq B_R e^{-ikx} + B_L e^{-ikx}$ $\quad x\to\infty$

$$\begin{pmatrix} B_R \\ B_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{RR} & T_{RL} \\ T_{LR} & T_{LL} \end{pmatrix}$$

Ο πίνακας μεταφοράς εξαρτάται από την επιλογή των συναρτήσεων βάσης.
π.χ. συνδιασμούς αυτών



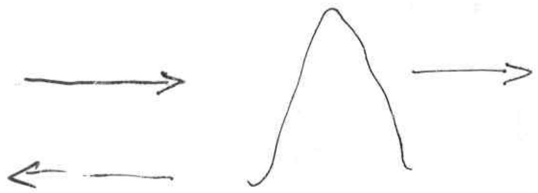
$\Rightarrow \boxed{T(c,a) = T_{cb} T_{ba}}$

Ισοδύναμα

$T' \neq T$

$$\begin{pmatrix} \psi(b) \\ \psi'(b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T'_{00} & T'_{01} \\ T'_{10} & T'_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(a) \\ \psi'(a) \end{pmatrix}$$

άν



$k_{-\infty} = k_{+\infty}$ $\quad t = \frac{1}{T_{LL}}$

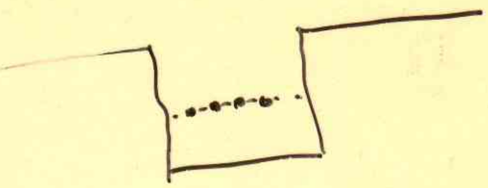
$$T = \frac{1}{|T_{LL}|^2}$$

Αν $k_{-\infty} \neq k_{+\infty}$ $\quad T = \frac{k_{-\infty}}{k_{+\infty}} \frac{1}{|T_{LL}|^2}$

Εύρεση Πίνακα μεταφοράς $\Rightarrow$ λύση Schröd

$$\det(T) = 1$$

Διάδοση (T) χωρίς ταλαντώσεις



Πηγάδι

α) Δέσμιες καταστάσεις

β) συντονισμούς

Γιά $E>0$ T έχει ταλαντώσεις

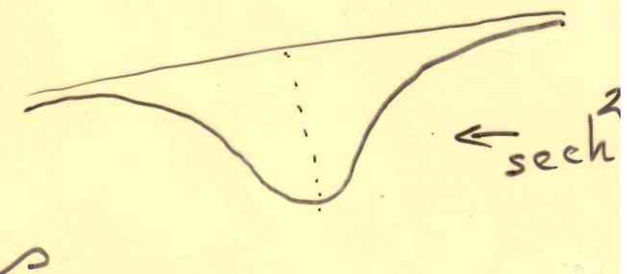
Αυτό συμβαίνει πάντα;

Συμβαίνει καί γιά φράγματα αλλά καί πιό ομαλά δυναμικά

Υπάρχουν καί εξαιρέσεις

Posch-Teller δυναμικό

$$V(x) = -\beta^2 \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2 \beta x}$$



Δέσμιες καταστάσεις $\quad n \leq \lambda - 1$

$$E_n = -\beta^2 (\lambda - 1 - n^2)$$

$$T = \frac{p^2}{1+p^2} \qquad p = \frac{\sinh(\pi k/\beta)}{\sin \pi\lambda}$$

λ-ακέραιος $\quad T = 1$

Poschl-Teller Δυναμικό

$$V(x) = -\frac{\lambda(\lambda-1)}{2}\,\mathrm{sech}\,k_0 x \left(\frac{\hbar^2 k_0^2}{m}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$k_0 x \to z$ $\qquad u = \tanh z \qquad \varepsilon \Leftarrow \dfrac{E}{\hbar^2 k_0^2/m}$

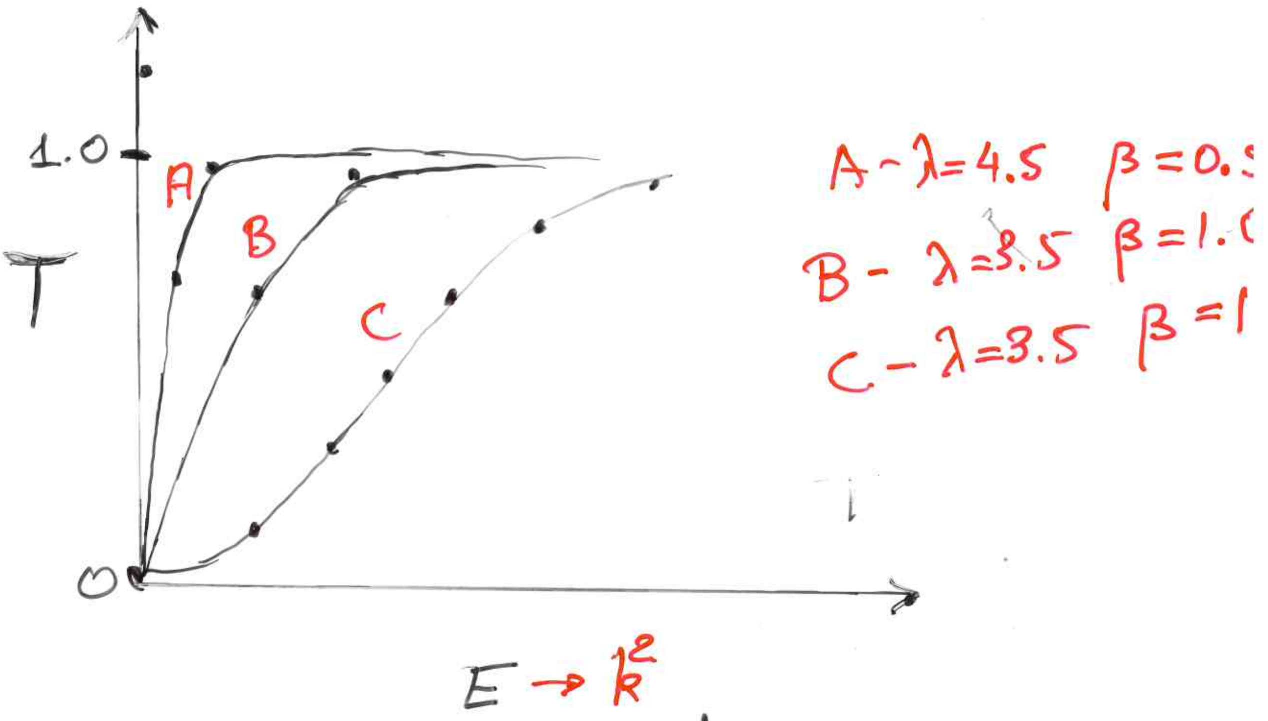
$$\left[(1-u^2)\psi'(u)\right]' + \lambda(\lambda-1)\psi(u) + \frac{2\varepsilon}{1-u^2}\psi(u) = 0$$

Λύσεις πολυώνυμα Legendre

$P_\lambda^\mu \qquad \varepsilon = -\dfrac{\mu^2}{2} \qquad \lambda = 1, 2, 3 \ldots$

$\mu = 1, \ldots, \lambda$

λ-ακέραιο $\to$ $R=0$ ανάκλαση



Δέν έχουμε ταλαντώσεις

⇒ δέν έχουμε συντονισμούς

φαίνεται καί αναλυτικά

2ο παράδειγμα

$$U(r) = -\frac{\gamma}{r} \quad \gamma > 0$$

απειρες δέσμιες

αλλά όχι συντονισμούς

Είναι χρήσιμο νά ξέρουμε αν υπάρχουν συντονισμοί
Ειδικά άν θέλουμε νά χρησιμοποιήσουμε τήν WKB μέθοδο, όπου παραλείπουμε ανακλάσεις
Αλλά δύσκολο πρόβλημα. Σχεδόν άλυτο.

Υπάρχουν μερικά χαρακτηριστικά τ[ων] δυναμικού πού οδηγούν σέ συντονισ[μούς]

α) Μή αναλυτικές συναρτήσεις

β) καμπυλότητα πάνω (φράγμα) ή κάτω (πηγάδι)

γ) υψηλός εντοπισμός

πηγάδια / φράγματα → συντονισμούς

Gaussian, Lorentzian, exponentia[l], parabolic κ.τ.λ. έχουν μικρότε[ρο] εντοπισμό. ⇒ δέν παρουσιάζουν πολλές ταλαντώσεις, WK.B ισχύει αρκετά καλά

$$V(x) = -V_0 x^{2n}$$

$$\pm V_0 e^{-x^{2n}}$$

$$\pm \frac{V_0}{1+x^{2n}} \quad n=2,3,4$$

R=0 γιά συγκεκριμένες ενέργειες.