

Кислицын А.А.

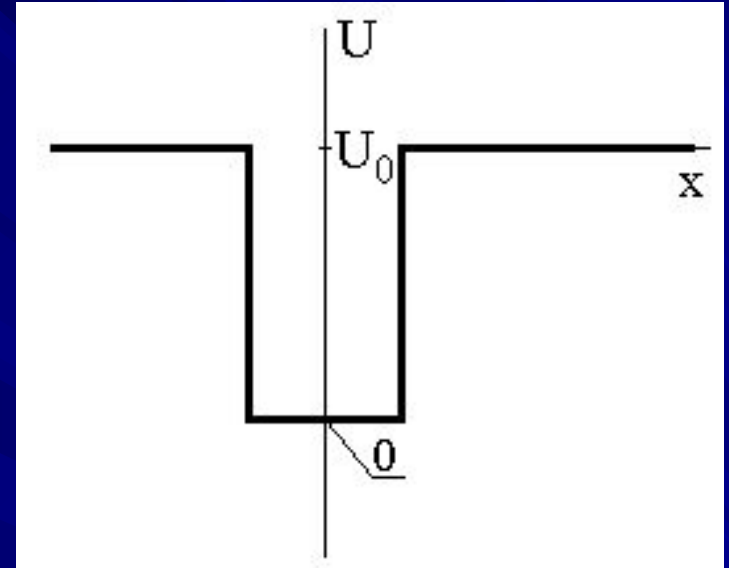
Физика атома, атомного ядра  
и элементарных частиц

10 (1). Простейшая задача квантовой  
механики:

частица в "потенциальной яме" ("ящике").  
Квантовые точки.

# Одномерная прямоугольная потенциальная яма ("ящик")

Так называется одномерная область, в которой потенциальная энергия имеет вид, изображенный на рисунке. Для этой области легко получить точное решение уравнения Шредингера и рассмотреть задачу о квантовании энергии.

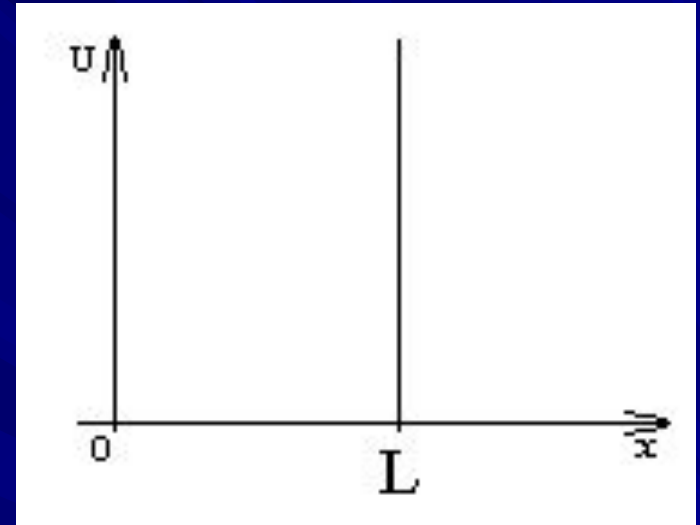


Потенциальная энергия равна нулю на дне ямы ("ящика"), и равна  $U_0$  вне стенок "ящика".

# Одномерная прямоугольная потенциальная яма (ящик) с бесконечно высокими стенками

Наиболее простым в математическом отношении является решение для потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. Иногда ее называют ямой с идеально отражающими стенками.

$$U = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ \infty, & x < 0, x > L \end{cases}$$



Ширина ямы (ящика) равна  $L$ , высота стенок бесконечно велика. На дне ямы потенциальная энергия равна нулю.

В этом случае внутри ямы частица движется свободно, но выйти за ее пределы не может, т.е. за пределами ямы волновая функция должна обратиться в нуль. Но волновая функция должна быть непрерывна, поэтому она должна быть равна нулю в точках  $x = 0$  и  $x = L$ :

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0 \quad (10.1)$$

- это граничные условия для волновой функции  $\Psi$ .

# Стационарное уравнение Шредингера (9.6)

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0$$

внутри ямы принимает вид (т.к.  $U = 0$ ):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \quad (10.2)$$

Общее решение этого уравнения хорошо  
известно:

$$\Psi(x) = A \sin \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} x + B \cos \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} x \quad (10.3)$$

Из условия (10.1)  $\Psi(0) = 0$  следует, что  $B = 0$ .

Из второго граничного условия  $\Psi(L) = 0$  следует, что

$$A \sin \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} L = 0$$

откуда

$$\frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} L = n\pi$$

или

$$\frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} = n \frac{\pi}{L} \quad (10.4)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$  - целое число

Таким образом, собственными функция-ми уравнения Шредингера в рассматриваемой задаче являются волновые функции вида

$$\Psi_n = A_n \sin n \frac{\pi x}{L} \quad (10.5)$$

Собственные значения энергии найдем из формулы (10.4):

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (10.6)$$

- дискретный спектр собственных значений энергии.

Коэффициент  $A_n$  определим и из условия нормировки (7.2):

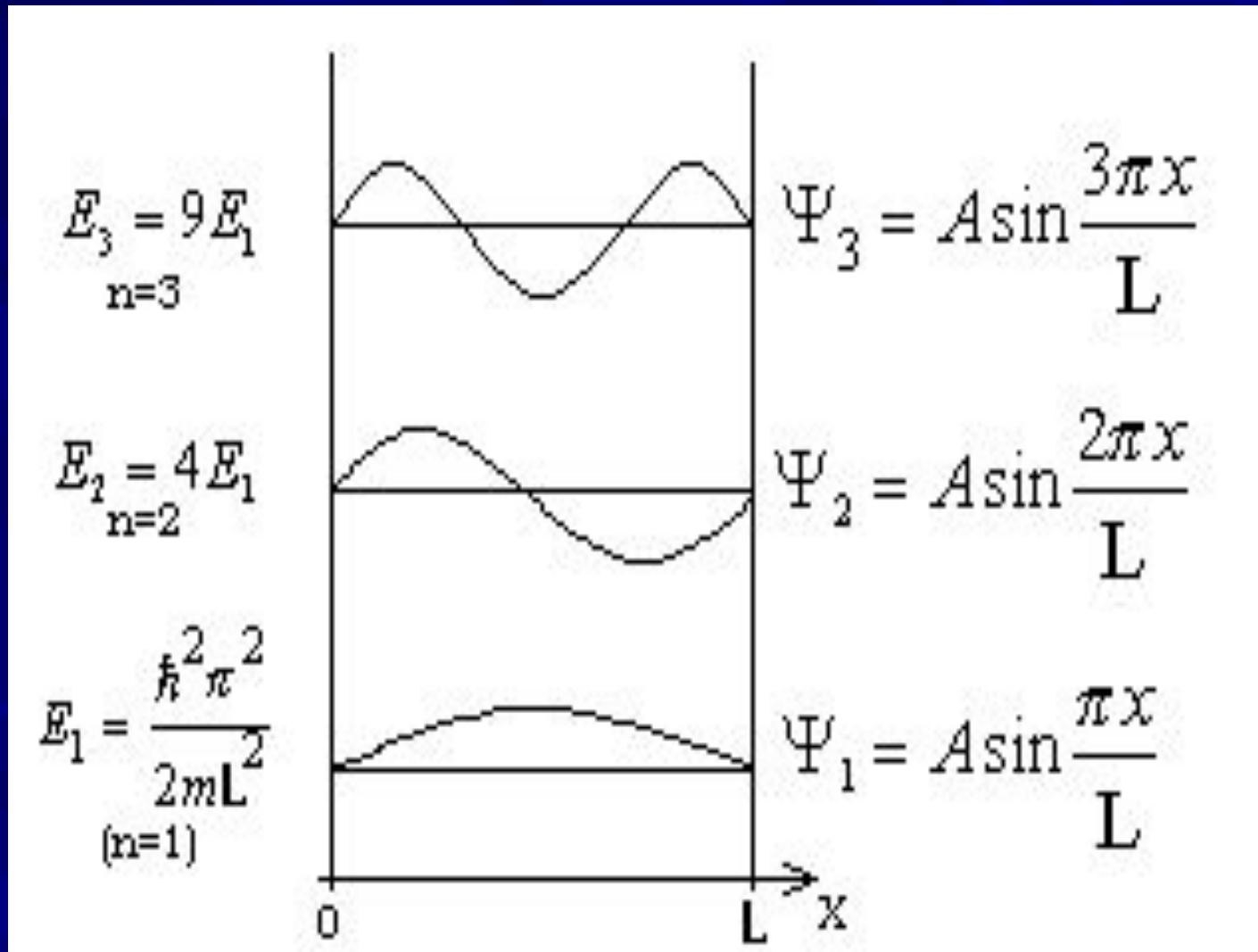
$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^2 dx = 1 &\rightarrow A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 \frac{\pi nx}{L} dx = \frac{1}{2} A_n^2 \int_0^l \left( 1 - \cos \frac{2\pi nx}{L} \right) dx = \\ &= \frac{1}{2} A_n^2 L = 1 \rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned}$$

т.е. нормирующий множитель у всех собственных функций одинаков. Поэтому

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi nx}{L} \quad (10.8)$$

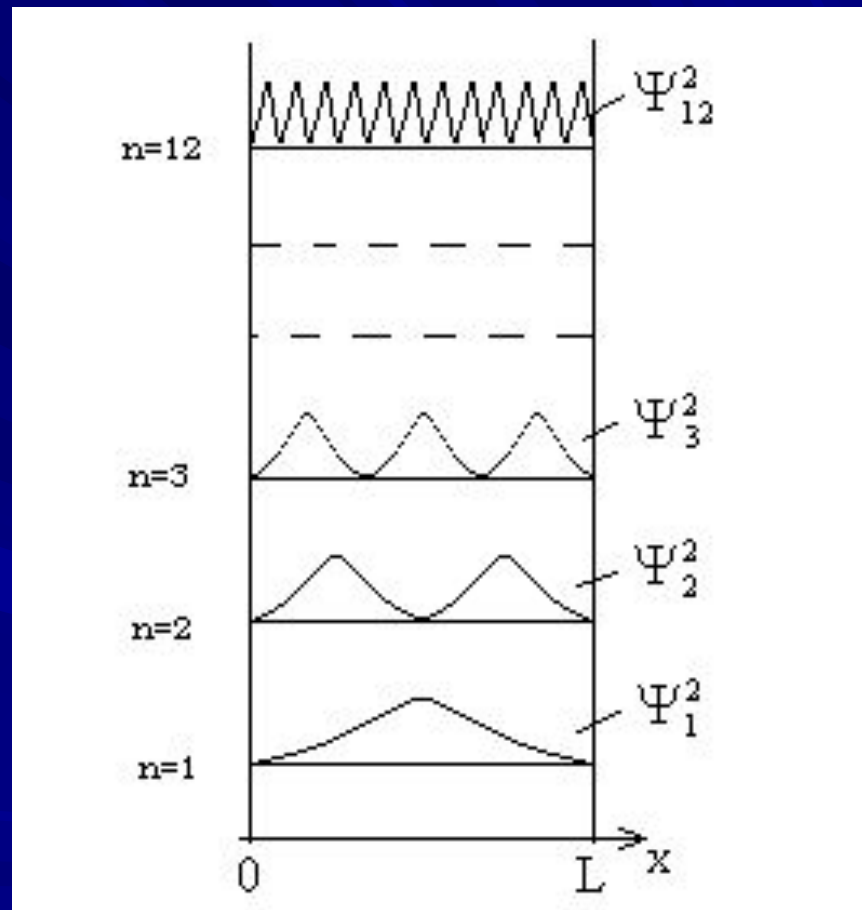


# Графики первых трех собственных функций



# Плотность вероятности распределения частиц

По физическому смыслу квадрат модуля собственной функции – это плотность вероятности распределения частиц по пространству. В низшем состоянии с наибольшей вероятностью можно найти частицу около середины ящика; вероятность найти ее у стенок равна нулю.



Этот результат резко отличается от классического: в классической механике нахождение частицы в ящике с зеркальными стенками равновероятно в любом месте ящика. Однако при больших  $n$  максимумы кривой  $\Psi_n^2$  располагаются все ближе друг к другу и к стенкам; при  $n \rightarrow \infty$   $\Psi_n^2$  близка к прямой, параллельной оси  $x$ , т.е. для больших  $n$  получается распределение, соответствующее классической частице.

# Практические применения

В 1970-е гг в физике полупроводников начались исследования гетероструктур - систем, в которых движение электрона ограничено нанометровыми размерами в 1-м, 2-х, или во всех 3-х направлениях. Такие системы получили соответствующие названия: "квантовые ямы", "квантовые нити" и "квантовые точки". Их особенность заключается в том, что когда движение электрона ограничено в области пространства, размер которой сравним с дебройлевской длиной волны, проявляются квантовые эффекты, такие как дискретность разрешенных уровней энергии, дискретность проекций механических и магнитных моментов, прохождение электронов сквозь потенциальный барьер и др.

# Квантовые ямы

Простейшая квантовая яма - это тонкий слой полупроводника с узкой запрещенной зоной, окруженный с обеих сторон слоями диэлектрика или полупроводника с широкой запрещенной зоной. Для изготовления таких структур разработано несколько технологий, но самой лучшей считается молекулярно-лучевая эпитаксия. Эта технология заключается в том, что пучок атомов или молекул (получаемый путем испарения вещества) направляют на тщательно очищенную подложку. Толщина слоя и его химический состав контролируются в процессе роста. Чтобы избежать загрязнения, процесс производят в глубоком вакууме.

Очень важно, чтобы периоды кристаллических решеток двух соседних слоев, имеющих различный химический состав, были почти одинаковыми. Тогда слои будут точно следовать друг за другом, и кристаллическая решетка выращенной структуры не будет содержать дефектов. С помощью метода молекулярно-лучевой эпитаксии можно получить очень четкую (с точностью до монослоя) границу между двумя соседними слоями, причем поверхность получается гладкой на атомном уровне. Данный метод позволяет выращивать монокристаллические слои всего в несколько периодов решетки (один период составляет ок. 2 нм).

# Материалы для квантовых структур

Квантовые гетероструктуры можно выращивать из различных материалов. В настоящее время чаще всего используется арсенид галлия GaAs и твердый раствор  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , в котором доля  $x$  атомов галлия замещена атомами алюминия. Величина  $x$  составляет от 0.15 до 0.35. Ширина запрещенной зоны в GaAs равна 1.5 эВ, а в соединении  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  растет с ростом  $x$ . При  $x = 1$ , т.е. в соединении AlAs, ширина запрещенной зоны равна 2.2 эВ. Чтобы вырастить квантовую яму, надо во время роста менять химический состав пучка атомов. Сначала надо вырастить слой полупроводника с широкой запрещенной зоной, т.е.  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , затем слой узкозонного материала GaAs, а после этого - снова слой  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

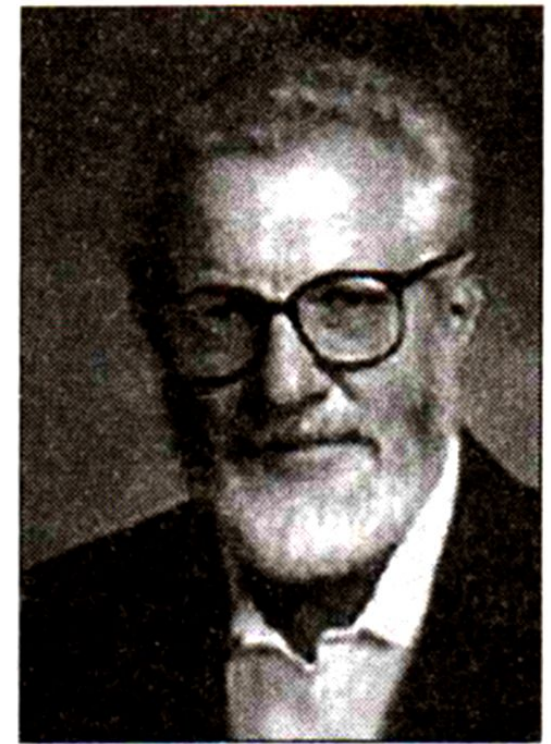
# Нобелевская премия 2000 года



*Жорес Иванович Алфёров.*



*Герберт Крёмер.*



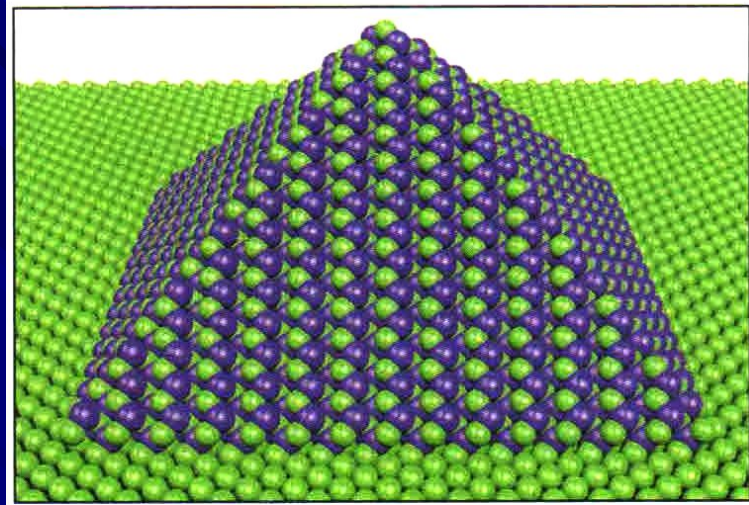
*Джек С. Килби.*

Ж.И.Алферову и Г.Кремеру: За развитие полупроводниковых гетероструктур для высокоскоростной электроники и оптоэлектроники.

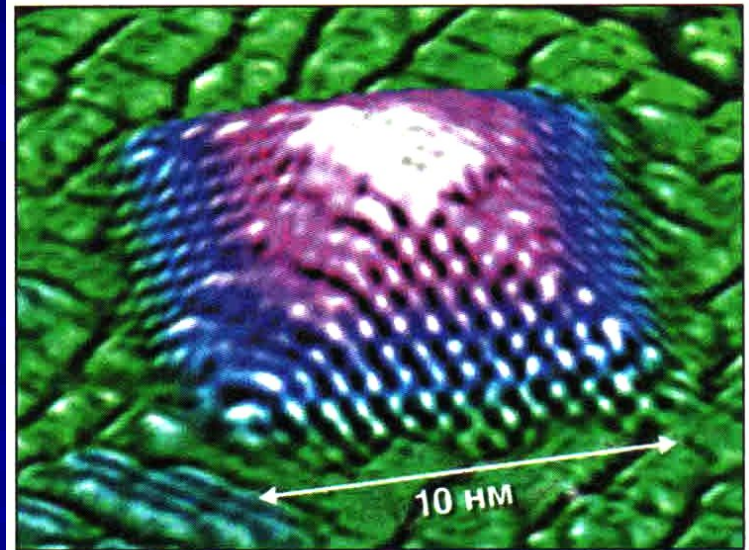
Д.С.Килби: За вклад в создание интегральных схем.



Квантовые точки аналогичны квантовым ямам, за исключением того, что движение электронов в них ограничено во всех направлениях: это трехмерные микроскопические ловушки для электронов. Размеры этих ловушек сопоставимы с длиной волны де-Бройля по всем трем координатам.

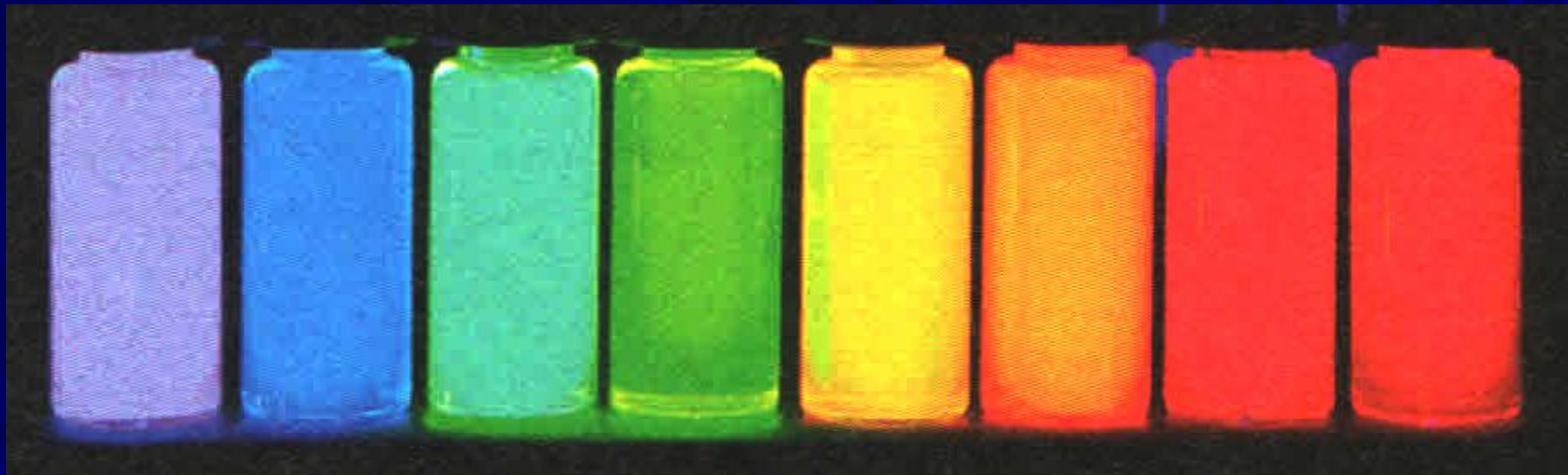


*Идеальная квантовая точка (вверху). Внизу — фотография германиевой квантовой точки на подложке из кремния, полученная при помощи электронного сканирующего микроскопа.*



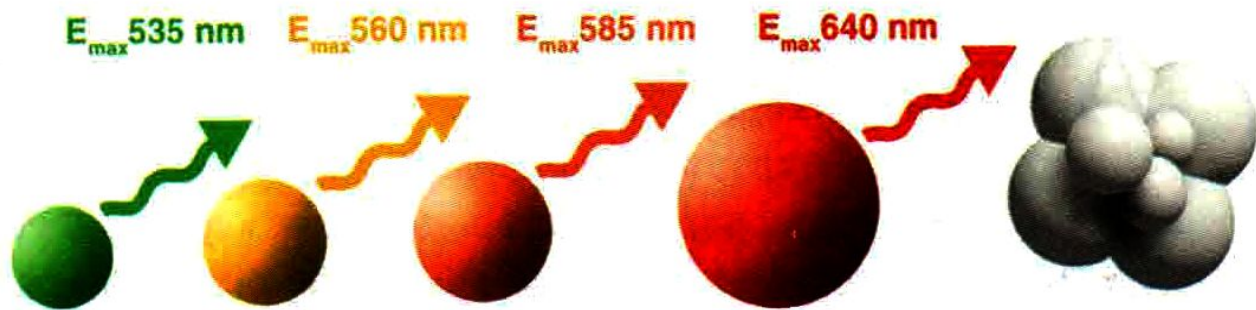
Типичный размер квантовых точек - от одного до нескольких десятков нанометров, что сравнимо с размером вируса. Количество атомов в квантовой точке - от 1000 до 100 000 (иногда может быть больше).

Дискретный спектр энергий делает поведение квантовой точки, состоящей из большого числа атомов, похожим на поведение одиночного атома. Возбуждая ее с помощью электрического поля или света, можно, так же, как и в атоме, перевести электрон в состояние с большей энергией. А при переходе электрона обратно в состояние с меньшей энергией излучается фотон. Поэтому квантовую точку иногда называют искусственным атомом без ядра.

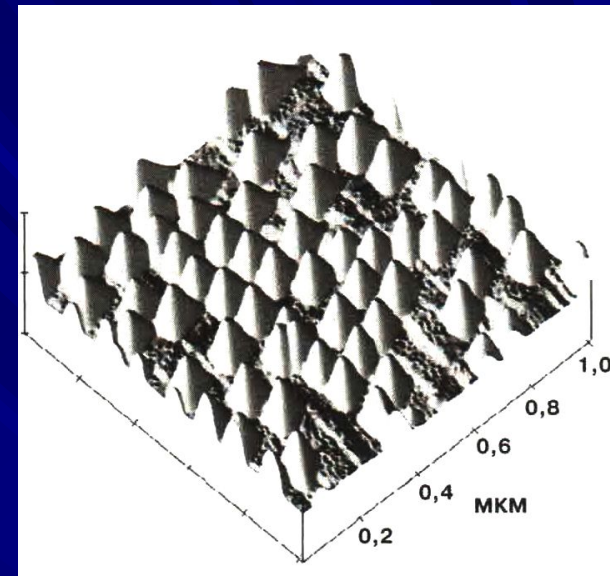


Важное свойство квантовых точек: они могут поглощать энергию в широком диапазоне спектра электромагнитных волн, а излучать яркое свечение в узком диапазоне от фиолетового до красного.

*Длина волны излучения зависит от размера квантовых точек селенида кадмия (CdSe). Справа — типичный размер молекулы белка (~ 6 нм).*



Квантовые точки могут иметь форму шаров, пирамид, капель и др. Конкретный вид зависит от технологических условий их получения. Для получения квантовых точек в форме пирамид используют упругие напряжения, которые возникают в подложке, когда на ней осаждаются атомы или молекулы другого вещества. Эти напряжения заставляют осаждаемое вещество собираться в островки, которые повторяют структуру подложки. Такое самопроизвольное возникновение упорядоченной структуры называется самоорганизацией.



Самоорганизованные квантовые точки ("пирамидки") селенида свинца  $PbSe$  на подложке из теллурида свинца  $PbTe$ . Изображение получено с помощью атомно-силового микроскопа.

# Коллоидный синтез квантовых точек

Коллоидными растворами называются суспензии частиц с размерами от нескольких нанометров до тысяч нм. К коллоидным растворам относятся гели и золи. Гели - это студенистые тела, обладающие некоторыми свойствами твердых тел (упругостью, способностью сохранять форму при не слишком сильном воздействии). Золи - это жидкие коллоидные системы. Различают гидрозолы (растворитель - вода), органозолы (растворитель - органическое вещество) и аэрозоли (твердые или жидкие частицы, распределенные в газовой среде).

Метод получения квантовых точек в форме шаров основан на коллоидном синтезе. Сначала выращивают нанокристаллы выбранного полупроводника, затем покрывают их слоем другого полупроводника с большей шириной запрещенной зоны. Затем производят формирование квантовой точки в жидком растворе нужного материала в специально подобранных растворителях. Данный метод позволяет получать квантовые точки с разбросом по размерам не более 2-3%.

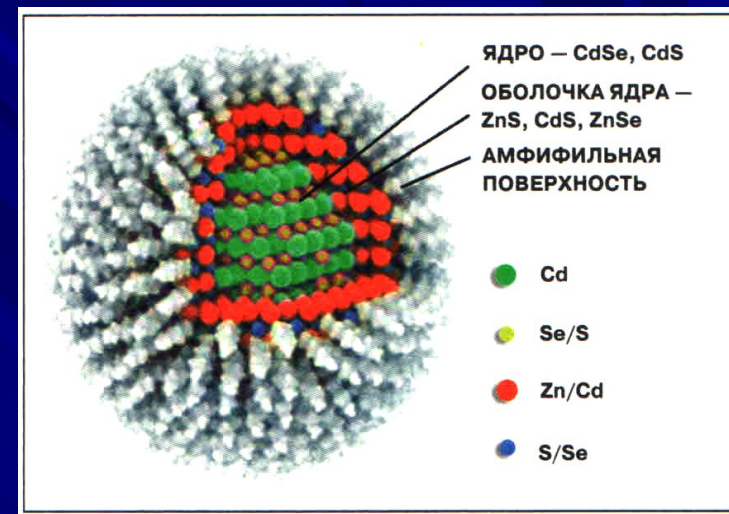


Схема коллоидной квантовой точки с амфифильной (т.е. обладающей сродством и к воде, и к органическим растворителям) поверхностно-активной оболочкой.

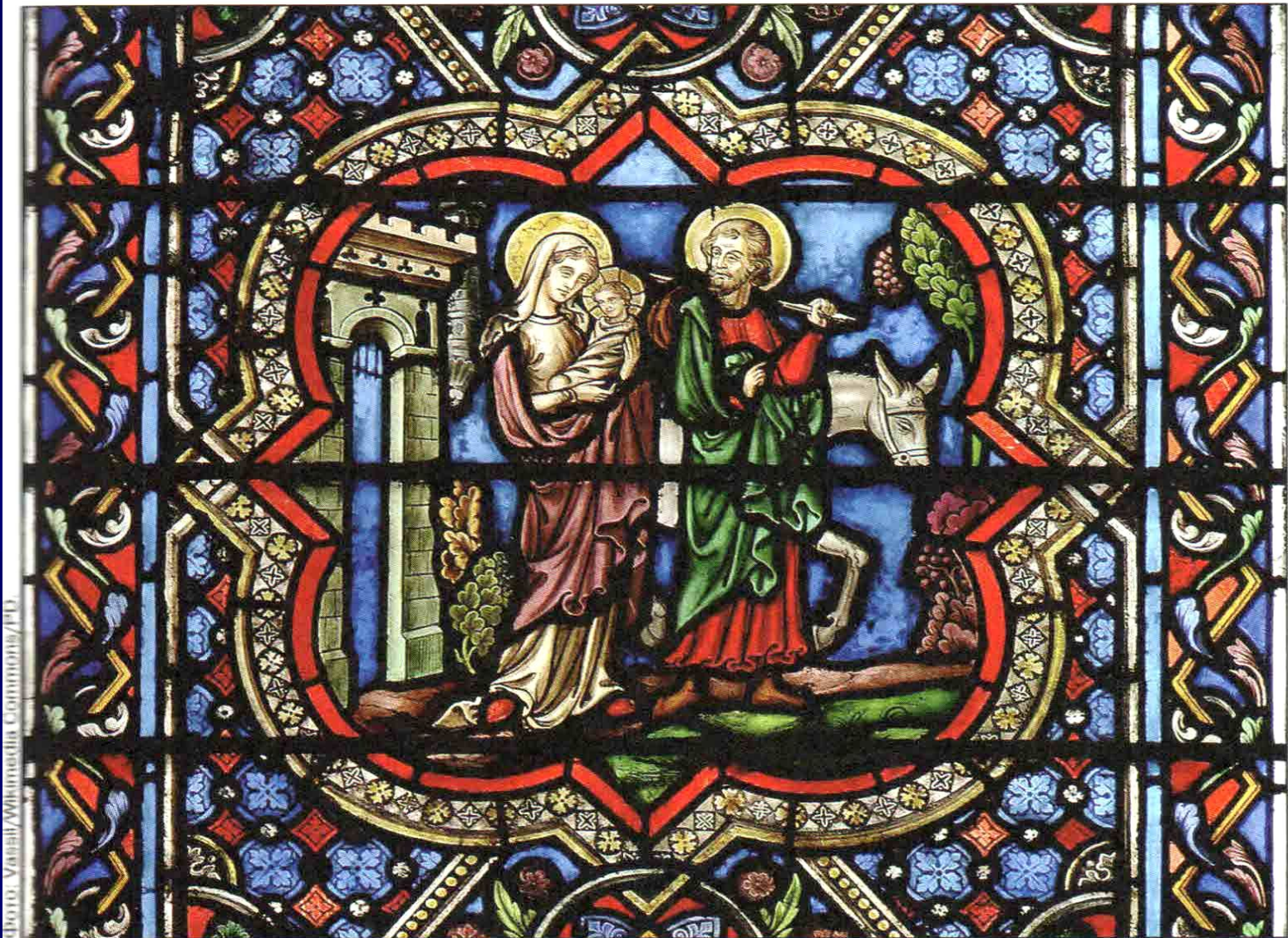
# История квантовых точек

Первые квантовые точки в 1981 году получили советские физики Алексей Екимов и Алексей Онущенко, наблюдавшие квантово-размерный эффект в микрокристаллах хлорида меди  $\text{CuCl}$ , выращенных в стеклянной матрице. В 1982 году братья Алексей и Александр Эфросы создали базовую теорию квантовых точек. Коллоидные точки в 1983 году впервые получил американский химик Луи Брус, работавший с растворами полупроводников, в частности, сульфида кадмия  $\text{CdS}$ . Сам термин "квантовые точки" придумал в 1988 году Марк Рид, который впервые получил их методом литографии.

Европейские мастера живописи средних веков умели изготавливать краски с наночастицами коллоидного золота и серебра. В настоящее время установлено, что яркие цвета этих красок объясняются резонансными световыми явлениями в этих наночастицах.

Еще раньше, древние Египтяне и Древние Греки умели изготавливать цветные стекла, добавляя в них наночастицы металлов. Эти стекла могут менять цвет в зависимости от освещения.





«Бегство в Египет» — витраж Собора Парижской Богоматери (XII—XIV вв.). Яркие цвета объясняются резонансными явлениями в микроскопических (диаметром около 70 нм) частицах коллоидного золота, серебра и других металлов, содержащихся в стекле. Это одно из проявлений квантово-размерного эффекта.



*Кубок Ликурга — стеклянный сосуд предположительно александрийской работы IV века н. э., способный менять цвет с зелёного на красный в зависимости от освещения снаружи (слева) и изнутри (справа). Этот эффект также объясняется наличием в стекле мельчайших частиц коллоидного золота и серебра, в которых проявляются квантово-размерные эффекты.*

# Современные применения квантовых точек

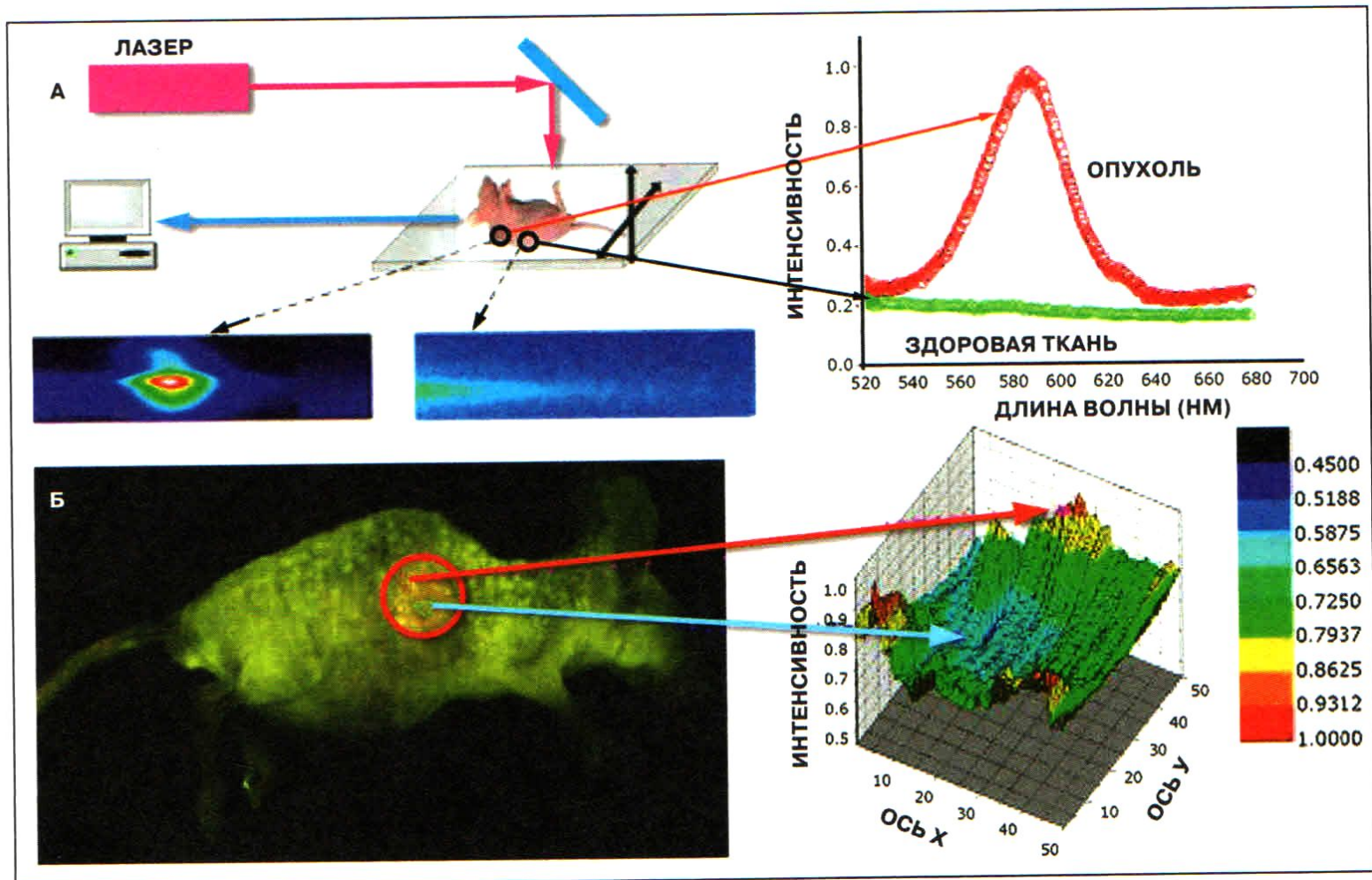
В 2006 году фирма QD Vision сообщила о создании первого в мире дисплея на квантовых точках. Запатентована соответствующая технология под названием Color IQ. В 2013 году появился первый телевизор Sony XBR серии X900A, использующий технологию квантовых точек. Фирмы LG, TCL и Samsung также начали выпуск подобных телевизоров. Samsung обещает к 2017 году наладить выпуск 14 моделей телевизоров семейства SUHD TV с технологией квантовых точек. В 2015 году был выпущен первый компьютерный монитор Philips, использующий технологию Color IQ. Использование квантовых точек должно решить проблему недостаточного качества цветопередачи современных ЖК телевизоров на светодиодах LED.

Полупроводниковые лазеры на квантовых точках теоретически должны обладать рядом преимуществ перед существующими: высоким коэффициентом усиления, низким энергопотреблением, большей стабильностью работы, более узким спектром излучения. Однако в настоящее время получаемые квантовые точки имеют разброс размеров и дефекты структуры, поэтому параметры реализованных на них лазеров пока не соответствуют теоретическим возможностям.

Способность квантовых точек излучать в узком спектральном диапазоне можно использовать для идентификации и защиты от подделок. Нанесенная на нужный объект, например, на ценную бумагу, метка из квантовых точек при облучении ультрафиолетовым или видимым светом выдаст излучение со строго заданной комбинацией спектральных линий, однозначно определяющей объект и позволяющей закодировать информацию о нем. Это излучение легко регистрируется дистанционно. Достоинством является возможность нанесения метки на любые материалы: бумагу, ткань, дерево, металл, керамику.

Использование квантовых точек в качестве маркерных красителей в медицине и биологии позволяет сделать видимыми органы, которые прозрачны для других видов диагностики. Например, можно ввести раствор, содержащий квантовые точки внутривенно, и тогда их свечение позволит изучить структуру кровеносной системы, движение крови и лекарственных средств, обнаружить повреждения.

К поверхностно-активной оболочке коллоидных квантовых точек можно прикрепить молекулы, обеспечивающие их накопление в раковой опухоли, что делает возможной ее наблюдение. Одновременно квантовые точки могут переносить лекарственные средства или антитела для опухолевых клеток.



Визуализации рака печени на основе квантовых точек, меченных зондовыми антителами. (А) Схема установки, результат обработки (внизу) и форма спектра излучения для здорового и поражённого участков (справа). (Б) Визуализация опухоли. Анализ спектра (справа) показывает, что рост опухоли не был однородным — её периферия более активна. Иллюстрация из статьи: Min Fang et al. Quantum Dots for Cancer Research: Current Status, Remaining Issues, and Future Perspectives. Cancer Biol Med. 2012 Sep; 9(3): 151—163/CC-BY-3.0.

Одно из перспективных применений квантовых точек - создание на их основе высокоэффективных солнечных батарей, светочувствительных элементов и портативных спектрометров. Эксперименты в Лос-Аламосской национальной лаборатории (США) показали, что квантовая точка может генерировать до трех электронов в ответ на принятый фотон, в то время как существующие солнечные батареи вырабатывают один электрон с одного фотона, а оставшаяся энергия рассеивается в виде тепла.

Обсуждается использование квантовых точек для реализации элементов памяти и квантовых нейронных сетей.



В мире существует около десятка компаний, занимающихся производством квантовых точек, в России пока ни одной (данные на 2017год). По оценке компании MarketsandMarkets, занимающейся анализом рынков, к 2022 году объем производства квантовых точек составит 7.5 миллиардов долларов США.