

Kvantno tuneliranje - koncepti i primjena

Krstulović, Filip

Undergraduate thesis / Završni rad

2021

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Split, University of Split, Faculty of science / Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:166:586682>

Rights / Prava: [Attribution 4.0 International](#)/[Imenovanje 4.0 međunarodna](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-28**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Science](#)



UNIVERSITY OF SPLIT



DIGITALNI AKADEMSKI ARHIVI I REPOZITORIJI

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet

KVANTNO TUNELIRANJE - KONCEPTI I PRIMJENA

Završni rad

Filip Krstulović

Split, rujan 2021.

Temeljna dokumentacijska kartica

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet
Odjel za fiziku
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Hrvatska

Završni rad

Kvantno tuneliranje – koncepti i primjena

Filip Krstulović

Sveučilišni preddiplomski studij Matematika i fizika

Sažetak:

Svijet kvantne mehanike obiluje pojavama neobičnim u našem, makroskopskom, svijetu, a jedna od neobičnijih je kvantno tuneliranje. Kvantno tuneliranje učinak je koji omogućava čestici da se nađe unutar klasično zabranjenog područja, a to je posljedica nemogućnosti određivanja položaja i količine gibanja čestice istovremeno s jednakom preciznošću, odnosno Heisenbergovog principa neodređenosti. Osim u fizici, kvantno tuneliranje nalazi svoju primjenu i u drugim prirodnim i tehničkim znanostima, elektronici, tehnici i medicini, a njegova je budućnost svakako i u brzom bežičnom slanju podataka.

- Ključne riječi:** Hilbertov prostor, Schrödingerova jednadžba, tunel diode
- Rad sadrži:** Broj strana 21, Broj slika 12, Broj tablica 0, Broj literaturturnih navoda 18. Izvornik je na hrvatskom jeziku
- Mentor:** doc. dr. sc. Ivana Weber
- Ocjenjivači:** doc. dr. sc. Ivana Weber
prof. dr. sc. Mile Dželalija
doc. dr. sc. Damir Kovačić
- Rad prihvaćen:** 27. rujna 2021.

Rad je pohranjen u knjižnici Prirodoslovno – matematičkog fakulteta, Sveučilišta u Splitu.

Basic documentation card

University of Split
Faculty of Science
Department of Physics
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Croatia

Bachelor thesis

Quantum Tunnelling – Concepts and Applications

Filip Krstulović

University undergraduate study programme Mathematics and Physics

Abstract:

The world of quantum mechanics has a lot of unusual effects in „our“ world, the macroscopic world, one of which is quantum tunnelling. Quantum tunnelling is an effect that allows particles to be found inside a classical forbidden region due to the impossibility to measure the position and the momentum at the same time with the same precision, i.e. that states the Heisenberg's uncertainty principle. Besides physics, quantum tunnelling finds its application in other natural and technical sciences, electronics, medicine and its future is for sure in super fast data transmissions.

Keywords: Hilbert's space, potential barrier, quantum tunnelling wave functions, Schrödinger's equation, tunnel diodes, alpha decay.

Thesis consists of: NUM 21, NUM 17, NUM 0, NUM 17. Original language: Croatian

Supervisor: doc. dr. sc. Ivana Weber

Reviewers: Assist. Prof. Dr. Ivana Weber
Prof. Dr. Mile Dželalija
Assist. Prof. Dr. Damir Kovačić

Thesis accepted: September 27, 2021

Thesis is deposited in the library of the Faculty of Science, University of Split.

Sadržaj

1 Uvod	1
2 Formalizam kvantne mehanike	3
2.1 Hilbertov prostor i valne funkcije	3
2.2.1 Kvadratno-integrabilne funkcije	3
2.2 Diracova notacija	4
2.2.1 Osnovni elementi Diracove notacije	4
2.3 Operatori	4
2.4 Schrödingerova jednačba	5
2 Kvantno tuneliranje – jednodimenzionalni problemi	7
3.1 Potencijalna stepenica $0 \leq x \leq +\infty$	7
3.2 Potencijalna barijera $0 \leq x \leq a$	9
3.3 Wentzel-Kramers-Brillouin aproksimativna metoda	12
3 Primjena kvantnog tuneliranja	13
4.1 Alfa Raspad	13
4.1.1 Kvantno mehanički model alfa raspada	13
4.2 Pretražni mikroskop s tuneliranjem (STM)	15
4.3 Kvantno tuneliranje u elektronici	16
4.1.2 Esaki ili tunel diode	17
4.4 Kvantno tuneliranje u biologiji	19
4 Zaključak	20
6 Literatura	21

1 Uvod

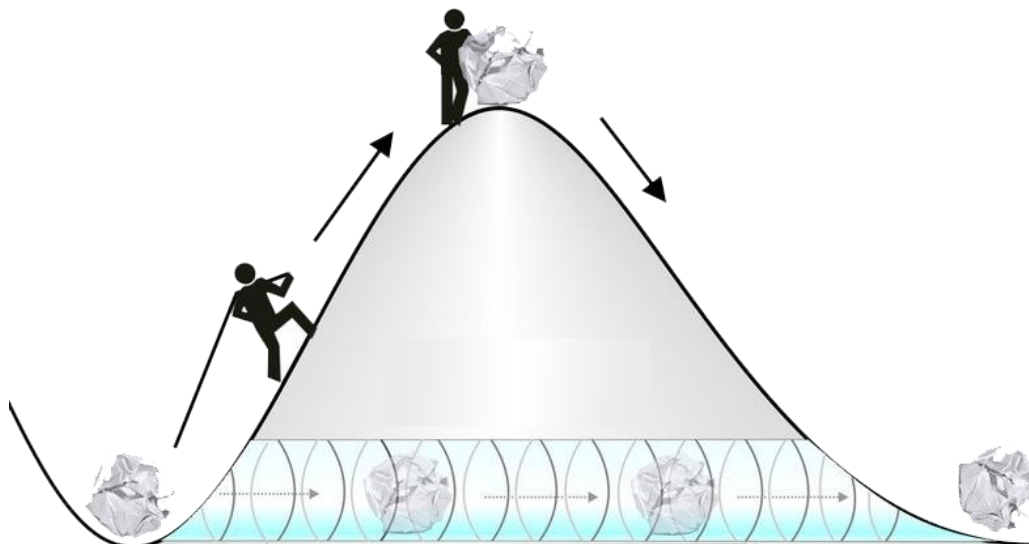
Kvantno tuneliranje tek je jedna od mnogih kvantnih pojava koje čestice dimenzija atoma (reda veličine od oko $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) imaju u mikroskopskom svijetu. Kvantno tuneliranje, kao i cijela kvantna mehanika omogućuje nam opisivanje česticavrolo malih dimenzija, onda kad naizgled dolazi do „urušavanja“ zakona klasične mehanike.

Kvantno tuneliranje jest kvantnomehanička pojava pri kojoj postoji vjerojatnost da elementarna čestica svlada potencijalnu barijeru i kada to zakoni klasične fizike ne dopuštaju. [1] U okviru klasične fizike, ako čestica naleti na barijeru čija je kinetička energija manja od potencijalne barijere, čestica će se odbiti o barijeru, dok u kvantnomehaničkom svijetu postoji vjerojatnost da čestica prođe kroz tu barijeru. Pokaže se da kvantna mehanika, pa tako i kvantno tuneliranje, ne „krše“ zakone klasične mehanike. No, postavlja se pitanje, zašto jednostavno ne koristiti kvantnu mehaniku i pri većim dimenzijama? Matematički, vrlo je komplicirano rješavanje problema u mikroskopskom svijetu pa kad je god moguće, nastoji se zaobići kvantnu mehaniku i njezin formalizam. Neki problemi čak se i ne mogu analitički riješiti. Problem kvantnog tuneliranja slikovito je prikazan na slici 1.

Kvantno tuneliranje moguće je zbog valnih svojstva čestica, tj. dualne prirode materije. Svaku česticu možemo promatrati kao val. Zbog toga, u kvantnoj mehanici, svaku česticu možemo opisati nekom valnom funkcijom. Tu valnu funkciju koristimo kako bismo opisali položaj čestice u danom vremenu, vjerojatnost da česticu nađemo u nekom dijelu prostora ili odredimo energije čestice koje možemo izmjeriti i s kojom vjerojatnošću.

Tuneliranje također može biti objašnjeno pomoću Heisenbergova principa, principa koji nam kaže da ne možemo istovremeno izmjeriti i položaj i količinu gibanja čestice s jednakom preciznošću. To omogućava da se čestica nađe iza barijere čija je visina i znanto veća od kinetičke energije čestice.

Kvantno tuneliranje dalo je velik doprinos, ne samo u kvantnoj fizici nego i razvoju znanosti i tehnologije. Efekt tuneliranja objašnjava pojmove u biologiji, nanotehnologiji, elektronici (tunelske diode, Zener diode) itd.



Slika 1. Čovjek koji gura predmet preko „barijere“ i predmet koji ide kroz barijeru, to jest efekt kvantnog tuneliranja. (Slike preuzeta iz <https://newatlas.com/> [2])

2 Formalizam kvantne mehanike

Da bismo uopće mogli proučavati kvantno tuneliranje, vrlo nam je bitno definirati osnovne pojmove koje ćemo koristiti u analizi, barem ukratko uvesti osnovne formalizma Hilbertovog prostora te objasniti pojam valne funkcije.

2.1 Hilbertov prostor i valne funkcije

Kažemo da je skup vektora $\{\Psi, \Phi, \chi, \dots\}$ i skup skalara $\{a, b, c, \dots\}$ Hilbertov prostor H ako su zadovoljena sljedeća četiri svojstva:

a) Prostor H je linearan prostor.

b) Na H je definiran skalarni produkt, koji treba biti pozitivan.

c) Prostor H je separabilan, to jest, postoji Cauchyjev niz $\Psi_n \in H$ takav da za svaki $\Psi \in H$ i $\varepsilon > 0$ postoji barem jedan Ψ_n u nizu za koje je $\|\Psi - \Psi_n\| < \varepsilon$.

d) Prostor H je kompletan, to jest, svaki Cauchyjev niz $\Psi_n \in H$ definira jedinstven niz $\Psi \in H$ takav da $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\Psi - \Psi_n\| = 0$. [3]

Skalarni produkt označavat ćemo sa (Φ, χ) , uz $\Phi \in H_d$ i $\chi \in H$. U principu skalarni produkt nije komutativan. Zaista, jer $(\Phi, \chi) = \Phi^* \chi$ i $(\chi, \Phi) = \chi^* \Phi$, pa jednakost očigledno ne vrijedi.

2.2.1 Kvadratno-integrabilne funkcije

Da bi imalo smisla uopće promatrati skalarni umnožak neke funkcije, htjeli bismo da postoji rješenje skalarnog produkta. Zbog toga ćemo definirati kvadratno integrabilne funkcije. Skalarni produkt funkcija $\Psi(x)$ i $\Phi(x)$ dan je sa:

$$(\Psi, \Phi) = \int \Psi^*(x) \Phi(x) dx, \quad (2.1)$$

Ako integral divergira, tada skalarni produkt ne postoji.

Za funkciju $\Psi(x)$ kažemo da je kvadratno integrabilna ako je skalarni produkt te funkcije sa samom sobom, tj. $(\Psi, \Psi) = \int |\Psi(x)|^2 dx$, konačan. Takve funkcije zadovoljavaju uvjete Hilbertovog prostora.

Dobar primjer kvadratno integrabilnih funkcija su valne funkcije u kvantnoj mehanici $\Psi(\vec{r}, t)$, za koje vrijedi:

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dz = 1, \quad (2.2)$$

odnosno, vjerojatnost da pronađemo česticu u cijelom prostoru je 1 (tj. izraženo u postocima to je 100 %). Svaka valna funkcija koja nije kvadratno integrabilna, u kvantnoj mehanici nema fizikalno značenje. [3]

2.2 Diracova notacija

Kako bismo što jednostavnije riješili neki problem u matematici ili fizici, biramo za to povoljne koordinatne sustave. Primjerice, zbog toga neke integrale radije rješavamo pomoću polarnih koordinata, a druge pomoću eliptičkih ili kartezijevih koordinata, i slično.

U kvantnoj mehanici, ovisno o vrsti problema, koristimo drugačije notacije. Bitno je za napomenuti da su sve notacije međusobno ekvivalentne.

2.2.1 Osnovni elementi Diracove notacije

Osnovni elementi Diracove notacije su:

- a) Ket** (oznaka: $|\Psi\rangle$). Pripada vektorskom prostoru H , to jest, ket-prostora.
- b) Bra** (oznaka: $\langle\Psi|$). Elementi su dualnog prostora H_d .
 - a.** Za svaki ket, postoji jedinstveni bra, i obrnuto.
- c) Skalarni produkt** (oznaka $(\Phi, \Psi) \rightarrow \langle\Phi|\Psi\rangle$ [3].

U valnoj mehanici probleme zapisujemo i rješavamo pomoću valnih funkcija $\Psi(\vec{r}, t)$, dok u općim problemima kvantne mehanike češće radimo s ketovima $|\Psi\rangle$. Jednako kao i valna funkcija $\Psi(\vec{r}, t)$ tako i $|\Psi\rangle$ potpuno opisuje stanje čestice. Ketovi su neovisni o reprezentacijama.

Skalarni produkt u koordinatnoj reprezentaciji dan je sa:

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \int \Phi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d^3r, \quad (2.3)$$

2.3 Operatori

Definicija operatora: Operator $\hat{A}$ je matematičko pravilo koje kad djeluje na ket $|\Psi\rangle$ tako da ga transformira u drugi ket $|\Psi'\rangle$ u istom prostoru, analogno vrijedi i za bra.

$$\hat{A}|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle, \quad \langle\Psi|\hat{A} = \langle\Psi'|$$

Djelovanje operatora analogno zapisujemo i u slučajevima djelovanja na valnu funkciju. [3, 6]

Kažemo da je operator $\hat{A}$ linearan operator ako za bilo koje vektore $|\Psi_1\rangle$ i $|\Psi_2\rangle$ i bilo koje kompleksne brojeve a, b vrijedi:

$$\hat{A}(a|\Psi_1\rangle + b|\Psi_2\rangle) = a\hat{A}|\Psi_1\rangle + b\hat{A}|\Psi_2\rangle, \quad (2.4)$$

$$(\langle\Psi_1|a + \langle\Psi_2|b)\hat{A} = a\langle\Psi_1|\hat{A} + b\langle\Psi_2|\hat{A}, \quad (2.5)$$

Kažemo da je operator $\hat{A}$ hermitski ako je:

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \text{ ili } \langle\Psi|\hat{A}|\Psi'\rangle = \langle\Psi'|\hat{A}|\Psi\rangle^*. \quad (2.6)$$

Jedan od postulata kvantne mehanike kaže nam da za svaku izmjerljivu fizikalnu veličinu A koja se naziva dinamička varijabla, postoji odgovarajući linearni hermitski operator $\hat{A}$ čiji svojstveni vektori tvore potpunu bazu. Za vektor stanja $|\Psi\rangle$ kažemo da je svojstveni vektor operatora $\hat{A}$ ako

$$\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle, \quad (2.7)$$

gdje je a kompleksni broj, svojstvena vrijednost operatora $\hat{A}$.

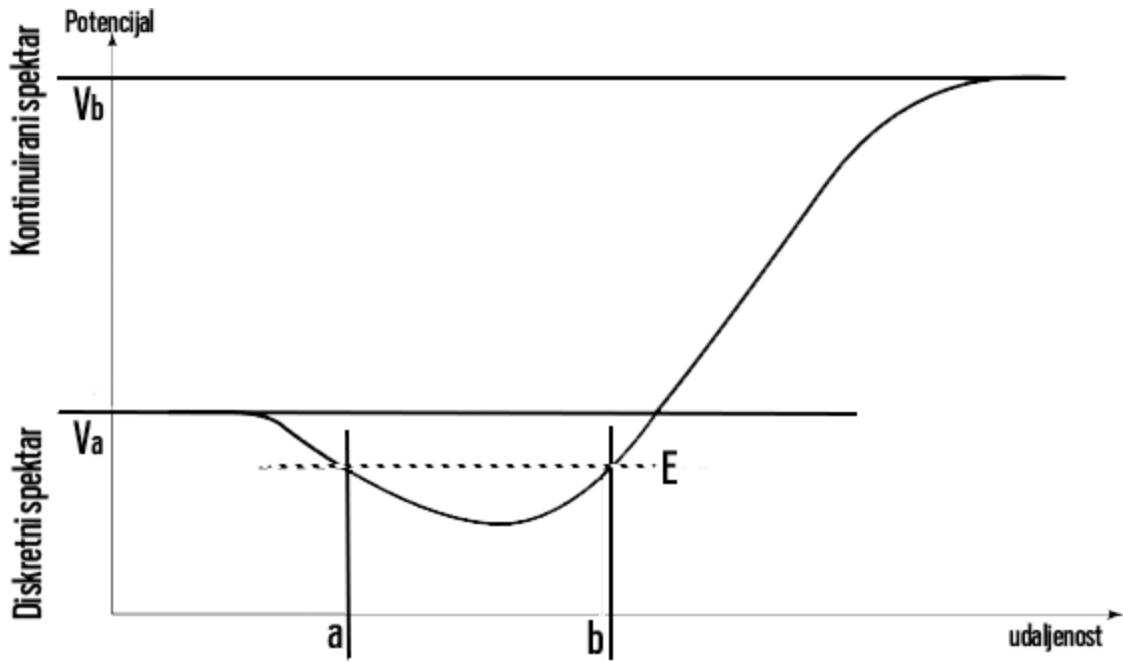
Mjerenje opservable $\hat{A}$ može se formalno prikazati djelovanjem operatora $\hat{A}$ na vektor stanja $|\Psi(t)\rangle$. Jedini mogući rezultat takvog mjerenja je jedna od svojstvenih vrijednosti a_n operatora $\hat{A}$. Ako je rezultat mjerenja $\hat{A}$ na stanje $|\Psi(t)\rangle$ svojstvena vrijednost a_n , stanje neposredno nakon mjerenja dano je projekcijom $|\Psi(t)\rangle$ na svojstveni vektor $|\Psi_n\rangle$ koji odgovara svojstvenoj vrijednosti a_n operatora $\hat{A}$.

2.4 Schrödingerova jednadžba

Schrödingerova jednadžba daje nam odgovor na dinamiku čestice mase m u n -dimenzionalnom potencijalu $V(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Ukoliko govorimo o jednodimenzionalnom problemu, i vremenski neovisnim funkcijama $\Psi(x)$ i $V(x)$, tada je Schrödingerova jednadžba oblika:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (2.8)$$

gdje je E ukupna energija čestice. [3]



Slika 2. Oblik potencijala ovisnosti o energiji E (slika preuzeta iz <https://www.dummies.com/education/science/quantum-physics/measuring-the-energy-of-bound-and-unbound-particles>)

Vremenska evolucija sustava dana je vremenskim ovisnom Schrödingerovom jednačbom:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle. \quad (2.9)$$

gdje je $\hat{H}$ operator hamiltonijana koja predstavlja energiju cijelog sustava.

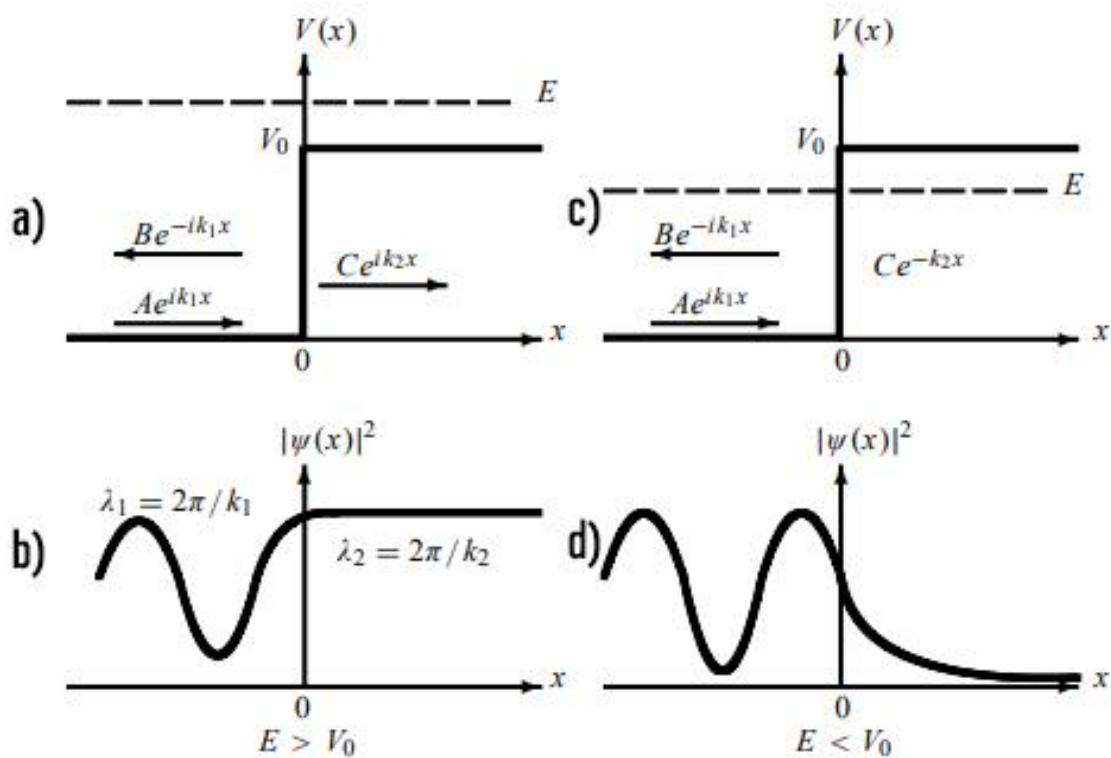
2 Kvantno tuneliranje – jednodimenzionalni problemi

Kao što smo već napomenuli u uvodu, kvantno tuneliranje jest efekt koji se pojavljuje svugdje ali neznatan je efekt sve dok ne „spustimo“ do čestica dimenzija atoma, to jest reda veličine $1 \text{ \AA}$. Kvantno tuneliranje pojava je koja dopušta da čestica, u nekoj vjerojatnosti, prođe barijeru, neovisno o tome slažu li se klasična fizika s time ili ne.

U niže opisanim primjerima analizirat ćemo dinamiku čestica jednakih masa m koje se jednakim brzinama gibaju s lijeva na desno.

3.1 Potencijalna stepenica $0 \leq x \leq +\infty$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases}$$



Slika 3. Prikaz potencijalne stepenice zajedno s orijentacijama upadnog, reflektiranog i transmitiranog vala (a, i c) te odgovarajuće gustoće vjerojatnosti (b i d) za slučajeve kada je $E > V_0$ odnosno $E < V_0$ (slika preuzeta iz

<https://bibliotecatrevijano.files.wordpress.com/2017/10/zettili.pdf>)

U ovom problemu kratko ćemo raspraviti faktor transmisije, to jest faktor koji nam kaže koja je vjerojatnost pronalaska čestice iza barijere.

Problem ćemo razdvojiti na dva slučaja, kad je $E > V_0$ i $E < V_0$ kako je prikazano na slici 3.

a) $E > V_0$

Schrödingerova jednačba koja opisuje dinamiku čestice problema su:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_1^2\right)\psi_1(x) = 0 \quad (x < 0), \quad (3.1)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_2^2\right)\psi_1(x) = 0 \quad (x < 0), \quad (3.2)$$

$$\text{Uz } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ i } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

A odgovarajuća rješenja su:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \text{ (valna funkcija prije barijere)}, \quad (3.3)$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} \text{ (valna funkcija unutar barijere)}, \quad (3.4)$$

Dobije se da je koeficijent transmisije $T = \left| \frac{J_{\text{transmisiranog}}}{J_{\text{incidencije}}} \right| = \left| \frac{Ce^{ik_2x}}{Ae^{ik_1x}} \right| = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{C}{A} \right|^2$ odnosno

$$T = \frac{4\mathbb{K}}{(1+\mathbb{K})^2}, \mathbb{K} = \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}.$$

Zanimljivo je ovdje reći da znamo da je $1 = R + T$, gdje je R koeficijent refleksije, i očigledno je $T \neq 1$, pa zaključujemo da postoji i reflektirani dio vala (što je razlika od zakona klasične fizike).

b) $E < V_0$

Za područje $x < 0$ vrijedi ista Schrödingerova jednačba (3.1) te pripadajuće rješenje dano jednačbom (3.3), dok je za područje $x > 0$ Schrödingerova jednačba je dana sa:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - k_2'^2\right)\psi_2(x) = 0 \quad (x \geq 0), \quad (3.5)$$

gdje je $k_2' = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$, čije je rješenje:

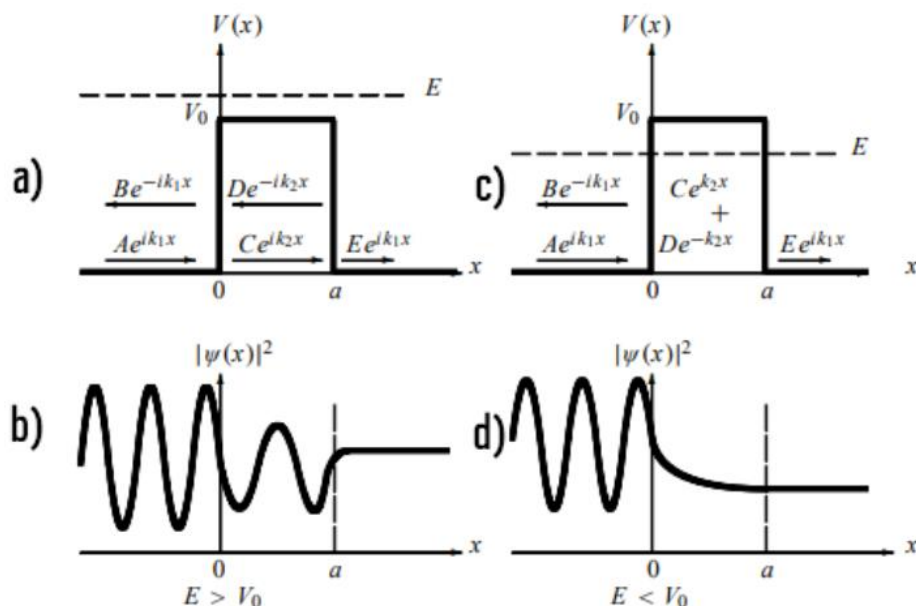
$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2'x} + De^{k_2'x} \quad (x \geq 0), \quad (3.6)$$

Imat ćemo da je $T = 0$, to jest, $R = 1$, što je očekivano.

No treba pripaziti da u kvantnoj mehanici postoji vjerojatnost različita od nule da valna funkcija prođe kroz zabranjeno područje.

3.2 Potencijalna barijera $0 \leq x \leq a$

Kao i u slučaju potencijalne stepenice, proučavamo jednodimenzionalni problem raspršenja, ali o potencijalnu barijeru. I ovdje ćemo problem razdvojiti na dva slučaja, kad je $E > V_0$ i $E < V_0$, kako je prikazano na slici 4.



Slika 4. Prikaz potencijalne stepenice zajedno s orijentacijama upadnog, reflektiranog i transmitiranog vala (a, i c) te odgovarajuće gustoće vjerojatnosti (b i d) za slučajeve kada je $E > V_0$ odnosno $E < V_0$ (slika preuzeta iz (Slika preuzeta iz <https://bibliotecatrevijano.files.wordpress.com/2017/10/zettili.pdf>))

a) $E > V_0$

Valne funkcije za područja definirana kao na slici 4 su:

$$\Psi = \begin{cases} \Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, x \leq 0 \text{ (valna funkcija prije barijere)} \\ \Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, 0 < x < a \text{ (valna funkcija unutar barijere).} \\ \Psi_3(x) = Ee^{ik_1x}, x > a \text{ (valna funkcija nakon barijere)} \end{cases}$$

Dobije se da je koeficijent transmisije $T = \left| \frac{Ee^{ik_1x}}{Ae^{ik_1x}} \right| = \left| \frac{E}{A} \right|^2$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4\varepsilon(\varepsilon - 1)} \sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon - 1}) \right]^{-1}, \text{ uz } \varepsilon = \frac{E}{V_0} \text{ i } \lambda = a \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

Zanimljivi su uvijek specijalni slučajevi, kad je $E \gg V_0$ odnosno $\varepsilon \gg 1$, tada je faktor transmisije približno 1.

b) $E < V_0$

$$\Psi = \begin{cases} \Psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, x \leq 0 \text{ (valna funkcija prije barijere)} \\ \Psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, 0 < x < a \text{ (valna funkcija unutar barijere)}, \\ \Psi_3(x) = Ee^{ik_1x}, x \geq a \text{ (valna funkcija nakon barijere)} \end{cases}$$

$$\text{uz } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ i } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}.$$

Želimo vidjeti koliko iznose koeficijenti refleksije i transmisije valova:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad (3.7)$$

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2}. \quad (3.8)$$

Konstante B, C, D i E mogu se dobiti kao u ovisnosti o A iz graničnih uvjeta. Valne funkcije $\Psi(x)$ i $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ moraju biti neprekidne u točkama $x = 0$ i $x = a$ redom:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \frac{d\Psi_1(0)}{dx} = \frac{d\Psi_2(0)}{dx}, \Psi_2(a) = \Psi_3(a), \frac{d\Psi_2(a)}{dx} = \frac{d\Psi_3(a)}{dx}.$$

Iz ovih jednadžbi dobije se:

$$A + B = C + D, \quad (3.9)$$

$$ik_1(A - B) = k_2(C - D), \quad (3.10)$$

$$Ce^{ik_2a} + De^{ik_2a} = Ee^{ik_1a}, \quad (3.11)$$

$$k_2(Ce^{-k_2a} - De^{-k_2a}) = ik_1Ee^{-ik_1a}. \quad (3.12)$$

Posljednje dvije jednadžbe daju izraze za C i D:

$$C = \frac{E}{2} \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} e^{i(k_1-k_2)a} \right), \quad D = \frac{E}{2} \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{i(k_1-k_2)a}.$$

Ubacujući ove dvije jednadžbe u (3.9) i (3.10), i pri tome kad sve podijelimo sa A, dobivamo:

$$1 + \frac{B}{A} = \frac{E}{A} e^{ik_1a} \left[\cosh(k_2a) - i \frac{k_1}{k_2} \sinh(k_2a) \right], \quad (3.13)$$

$$1 - \frac{B}{A} = \frac{E}{A} e^{ik_1a} \left[\cosh(k_2a) + i \frac{k_1}{k_2} \sinh(k_2a) \right], \quad (3.14)$$

Iz toga slijedi:

$$\frac{B}{A} = -i \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \left[2 \cosh(k_2 a) + i \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right]^{-1}, \quad (3.15)$$

$$\frac{E}{A} = 2e^{-ik_1 a} \left[2 \cosh(k_2 a) + i \frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right]^{-1}. \quad (3.16)$$

Pa su koeficijenti R i T :

$$R = \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \left[4 \cosh^2(k_2 a) + i \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1}, \quad (3.17)$$

$$T = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = 4 \left[4 \cosh^2(k_2 a) + i \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1}. \quad (3.18)$$

Možemo zapisati R kao funkciju o T :

$$R = \frac{1}{4} T \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \quad (3.19).$$

Kako vrijedi da je $\cosh^2(k_2 a) = 1 + \sinh^2(k_2 a)$, imamo:

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1}. \quad (3.20)$$

Bitno je napomenuti da je koeficijent transmisije T konačan, tj. mogućnost transmisije čestice za $x \geq a$ različita je od nule (dok bi kod klasične fizike, koeficijent transmisije bio jednak nula). To je zbog efekta kvantne mehanike, tj. da se čestice ponašaju kao valovi (imaju dualna svojstva).

Budući da vrijedi:

$$\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 = \left(\frac{V_0}{\sqrt{E(V_0 - E)}} \right)^2 = \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}, \quad (3.21)$$

iz prije dobivenih rezultata za R i T imamo:

$$R = \frac{1}{4} \frac{V_0^2 T}{E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right), \quad (3.22)$$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right) \right]^{-1}, \quad (3.23)$$

ili

$$R = \frac{T}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \sinh^2 \left(\lambda \sqrt{1-\varepsilon} \right), \quad (3.24)$$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \sinh^2 \left(\lambda \sqrt{1-\varepsilon} \right) \right]^{-1}, \quad (3.25)$$

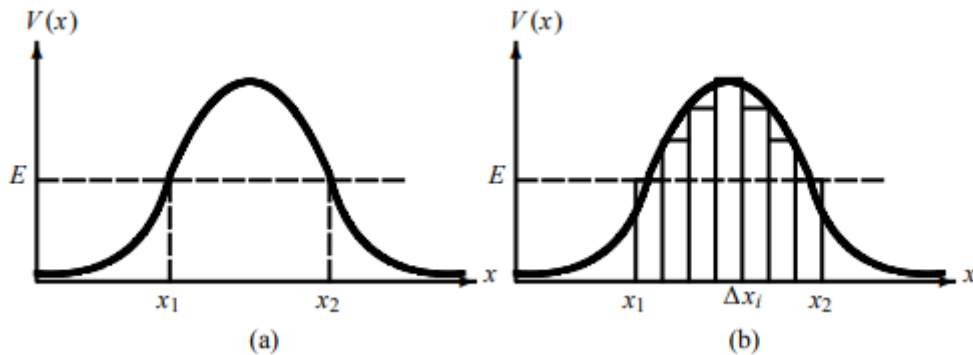
uz $\lambda = a \sqrt{2m \frac{V_0}{\hbar^2}}$ i $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$.

Za $E \ll V_0$ se pokaže da faktor transmisije je različit od 0, pa postoji konačno kvantno tuneliranje nakon barijere $x > a$.

Uzimajući klasičnu granicu kad $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar = 0$, koeficijent transmisije $T \rightarrow 0$, pa imamo očekivanu pojavu u klasičnoj mehanici gdje je koeficijent refleksije $R \rightarrow 1$. [3]

3.3 Wentzel-Kramers-Brillouin aproksimativna metoda

Efekt tuneliranja dešava se u klasičnom zabranjenom području, tj. kada je potencijalna energija manja od energije barijere $E < V(x)$. To je dio područja između x_1 do x_2 na slici 5. Točke $x_i, i = 1, 2$ nazivaju se prijelomne klasične točke.



Slika 5. a) tuneliranje kroz potencijalnu barijeru b) aproksimacija potencijala $V(x)$ pomoću infitezimalenih pravokutnika širine Δx_i (Slika preuzeta iz <https://bibliotecatrevijano.files.wordpress.com/2017/10/zettili.pdf>)

Dobije se da je koeficijent transmisije vala približno jednak: [3]

$$T \sim e^{-2\gamma} \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx. \quad (3.26)$$

3 Primjena kvantnog tuneliranja

U ovom poglavlju ukratko ćemo proći kroz dva bitna primjera primjene učinka kvantnog tuneliranja u fizici. Također, njegova primjena važna je i u drugim znanostima, tehnici i medicini te ćemo spomenuti nekoliko odabranih primjera.

4.1 Alfa Raspad

Kako su privlačne sile između nukleona kratkog dometa, ukupna energija vezanja u jezgri približno je proporcionalna masenom broju A , to jest broju nukleona u jezgri. S druge strane, odbojna sila među protonima u jezgri proporcionalna je sa Z^2 (Z je atomski broj). Jezgre koje imaju velik broj nukleona, otprilike 210 nukleona i više, nastoje postići svoju stabilnost smanjenjem svoje veličine, tj. emisijom alfa-čestice (jezgre ${}^4_2\text{He}$). Razlog zašto je više slučajeva u kojima se odvajaju alfa-čestice u odnosu na slučajeve pojedinačnog odvajanja nukleona jest u tome da je energija vezanja alfa-čestice jako velika.

Uobičajni zapis za alfa raspad je:

$$(A, Z) \rightarrow (A - 4, Z - 2) + {}^4_2\text{He}, \quad (4.1)$$

Energija oslobođena po alfa raspadu iznosi: $Q_\alpha = (m_i - m_f - m_\alpha)c^2$, gdje je:

m_i – masa početne jezgre

m_f – masa konačne jezgre

m_α – masa alfa – čestice .

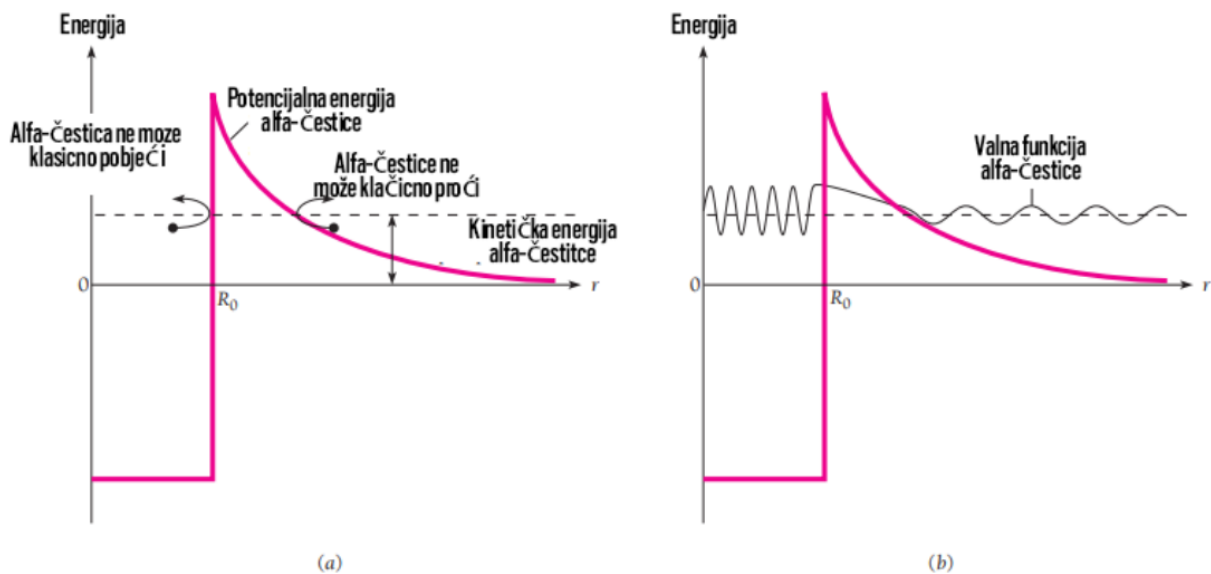
Kinetička energija alfa-čestice može se dobiti pomoću: $E_{k,\alpha} \approx \frac{A-4}{A} Q_\alpha$.

4.1.1 Kvantno mehanički model alfa raspada

Barijeru je najlakše predstaviti ako promatramo inverzan proces u kojem se alfa-čestica iz beskonačnosti približava jezgri naboja Ze . Izvan jezgre alfa-čestice osjećamo Coulombov odbojni potencijal:

$$V_c(r) = \frac{2Ze^2}{r} = \frac{2.88Z}{r[\text{fm}]} [\text{MeV}].$$

Mehanizam emisije alfa-čestice je tuneliranje kroz potencijalnu barijeru, jer su mjerene kinetičke energije alfa-čestice 4 do 6 puta manje od visine potencijalne barijere te se po klasičnoj fizici taj raspad ne bi mogao dogoditi. [14]



Slika 6. a) U klasičnoj fizici, alfa-čestica s manjom kinetičkom energijom od potencijalne energije barijere ne može proći niti izaći iz jezgre radijusa R_0 . b) U kvantnoj fizici, čestica će tunelirati kroz potencijalnu barijeru, i vjerojatnost da prođe kroz barijeru smanjuje se ovisno o visine (njene potencijalne energije) i širini barijere (Slika preuzeta iz šestog izdanja knjige „Concepts of Modern Physics“ autora Arthur Beisera)

Model koji je predložio George Gamowa jest da se raspad po jedinici vremena λ može dobiti iz:

$$\lambda = \nu T, \quad (4.2)$$

gdje je broj ν broj puta koliko čestica unutar nukleona udari potencijalnu barijeru u jednoj sekundi, a T je vjerojatnost da se čestica transmitira kroz barijeru, odnosno koeficijent transmisije. Broj ν se može dobiti iz sljedeće jednadžbe:

$$\nu = \frac{v'}{2R_0}, \quad (4.3)$$

v' je brzina alfa-čestica kad napusti jezgru, a R_0 je radijus jezgre.

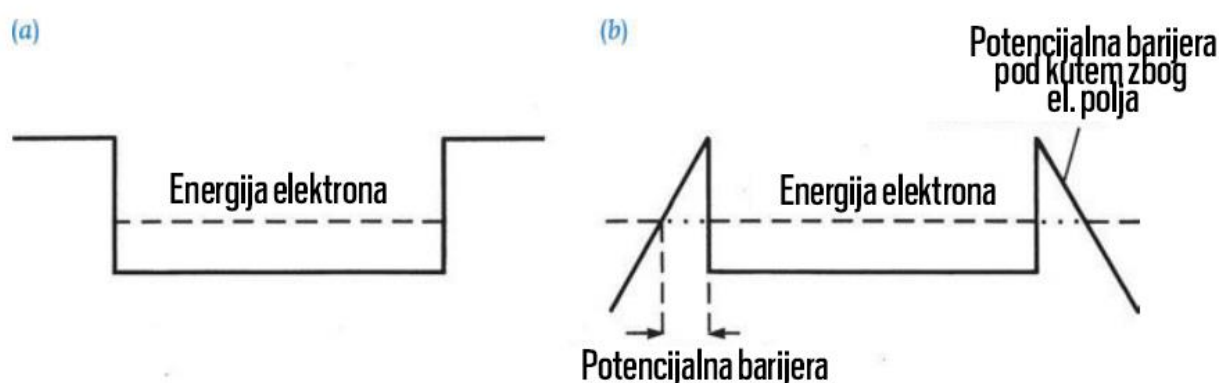
Iz tipičnih vrijednosti $R_0 = 10^{-14}m$ i $v' = 2 \cdot 10^7 m/s$ dobije se da je:

$$\nu = 10^{21} s^{-1}.$$

4.2 Pretražni mikroskop s tuneliranjem (STM)

Pretražni mikroskopi s tuneliranjem (engl. Scanning Tunnelling Microscope, skraćeno STM) mikroskopi su koji rade na načelu kvantnog tuneliranja. STM razvili su Gerd Binnig i Heinrich Rohrer. Kako tuneliranje elektrona kroz potencijalnu barijeru eksponencijalno pada ovisno o širini barijere, a STM u ovom radu koristi tu ovisnost o širini barijere. [11]

Jednostavni kvantni model metala možemo zamisliti na način da se elektroni blizu privlačne potencijalne barijere gibaju zbog rešetke pozitivnih iona metala. Kako je potrebna energija da izbacimo elektrone iz metala, treba postojati elektronički „otvorena kutija“ ili barijera da ih zadržava (slika 7 a)). Primijenimo li snažno pozitivno električno polje na metal, električni potencijal će izgledati kao na slici 7 b). Još uvijek postoji barijera koja ne dopušta da elektroni izlaze iz metala slobodno, ali je moguće da elektroni tuneliraju kroz barijeru. Ovaj proces tuneliranja je osnovni proces u radu STM-a. [12]



Slika 7. a) Pojednostavljena slika elektrona u potencijalnoj „otvorenoj kutiji“ metala. Izlomljena linija prikazuje energiju tipičnu za energiju koja stvara električnu struju. Energija je manja od barijere, elektroni ne mogu napustiti „otvorenu kutiju“. b) Slika prikazuje sliku a) modificiranu na način da smo dodali električno polje. No kako je sad barijera tanja, postoji mogućnost tuneliranja elektrona kroz otvorenu barijeru. (Slika preuzeta iz „The New Quantum Universe Patrick“ autori: Walters i Tony Hey)

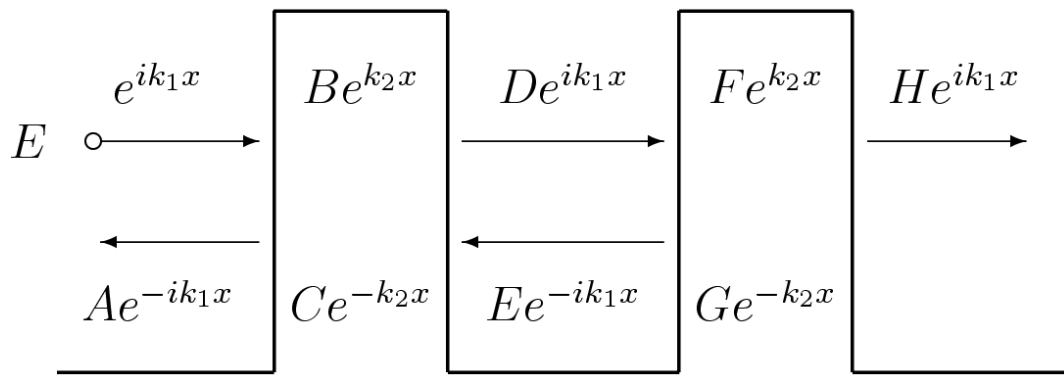
Također postoji i mikroskopi atomskih sila (engl. Atomic Force Microscope, skraćeno AFM), koji snimaju preciznu sliku pomicanja vrha nanometarske veličine po površini slike, dok STM radi na principu kvantnog tuneliranja. Još jedna razlika koja se može vidjeti je da vrh AFM-a lagano dodiruje površine koju snimamo, dok se vrh ST mikroskopa drži na maloj udaljenosti od površine. [15]

4.3 Kvantno tuneliranje u elektronici

Učinak kvantnog tuneliranja svoju značajnu primjenu našao je u elektronici. Na primjer, cijeli spektar tunelskih dioda baziran je na tuneliranju elektrona kroz barijeru.

Diode su poluvodiči koji dopuštaju protok struje u jednom smjeru mnogo više nego u drugom smjeru. Rezonantne tunelske diode (RTD) je dioda koja ima strukturu rezonantnog tuneliranja tako da elektroni mogu proći kroz neka rezonantna stanja na određenim energetske nivoima. Rezonantna tunelska diode ima rezonantni napon na kojem će dioda se ponašati kao normalna žica. Pomoću dva tanka sloja jedan pored drugoga dobivamo barijeru koja stvara diskretne energetske razine (slika 8). [2]

Rezonantna tunelska dioda može biti načinjena različitih materijala i različitih struktura rezonantnog tuneliranja pa tako razlikujemo Esaki diode, dvostruke ili trostruke barijere. [8]

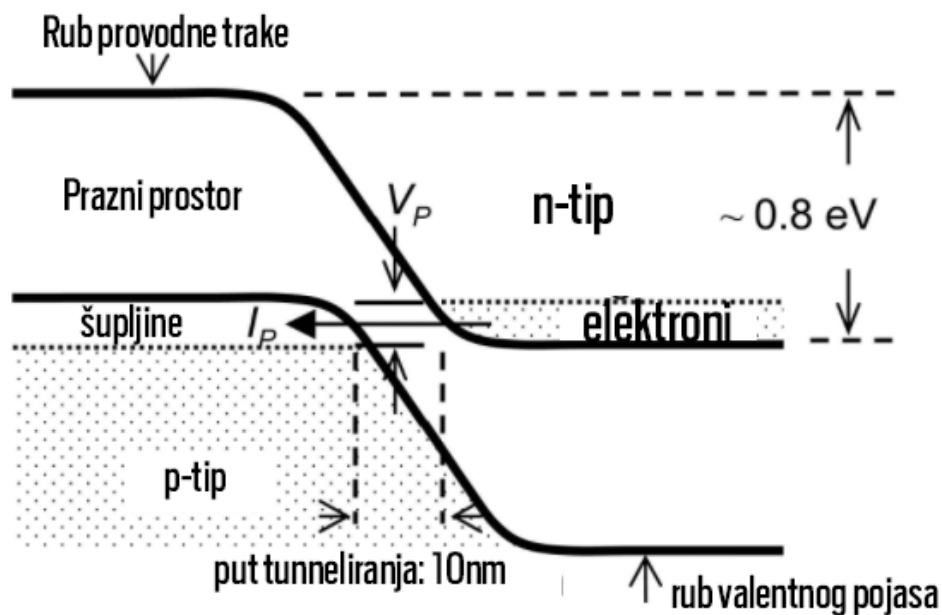


Slika 8. Profil dvostruke barijere s česticom manje energije nego energije visine barijere.

(Slika preuzeta iz https://en.wikipedia.org/wiki/Resonant-tunneling_diode#/media/File:Double_square_barrier_potential.png)

4.1.2 Esaki ili tunnel diode

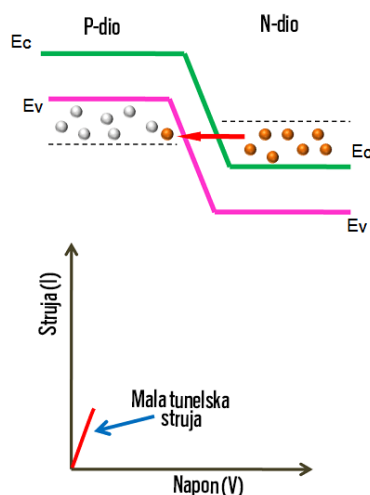
Esaki dioda je poluvodička dioda koja ima efektivno negativnog opiranja zbog kvantnog tuneliranja. Često se u literaturi spominje kao prvi kvantno mehanički uređaj.[8] Efekt negativnog otpora omogućava da rade kao oscilator ili kao amplifikator. [6] Oscilatori stvaraju periodičke električne signale, često kao sinusnog, pravokutnog ili pilastog oblika, [5] dok su amplifikatori uređaji koji mogu povećati jačinu signala. [7] Da bi Esaki dioda funkcionirala, nužno je da širina barijere ne bude veća od 10 nm.



Slika 9. Dijagram koji pokazuje efekt Esaki diode na naponu V_p koji inducira tuneliranje od n-n-tipa do p-tipa dijela (Slika preuzeta iz <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3417806/>)

Kako funkcioniraju tunnelske diode? U tunnelskoj diodi, provodljivi pojas materijala n-tipa preklapa se valentnim pojasom materijala p-tipa. Zbog ovog preklapanja, provodljivi pojas elektrona u n-dijelu i šupljine u valentnom pojasu u p-dijelu su na sličnim energetske nivoima. Kada temperatura naraste, neki elektroni tuneliraju iz n-dijela vodljivog pojasa to p-dijela valentnog pojasa. Slično, šupljine tuneliraju iz p-valentnog dijela do n-vodljivog dijela. No, ukupna električna struja bit će nula jer je jednak izmijenjeni broj slobodnih elektrona i šupljina.

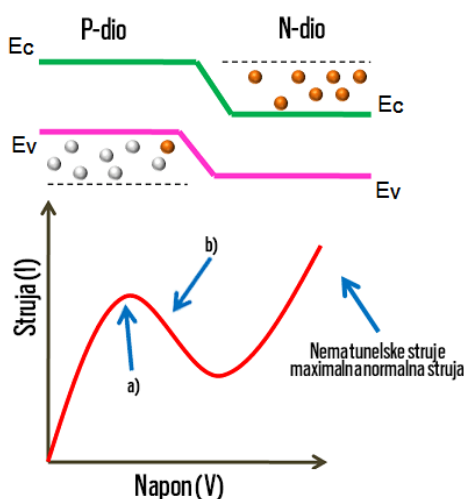
Kada dodamo niski napon u tunnel diodu, napon manji od napona tunnel diode, kroz spoj neće teći struja. No, mali broj elektrona vodljivog pojasa n-dijela tunelirat će prema šupljinama u valentnom p-dijelu. Zbog toga ćemo imati malu tunnelsku struju, koja je uzrokovana niskim naponom, kao što je prikazano na slici 11.



Slika 10. Vrlo mala tunelska struja uzrokovano naponom manjim od napona diode. (Slika preuzeta iz <https://www.physics-and-radio-electronics.com/electronic-devices-and-circuits/semiconductor-diodes/tunnel-diode-how-it-works.html>)

Kada malo povećamo napon na tunnel diodi, generira se veći broj slobodnih elektrona u n-dijelu i šupljina u p-dijelu. Zbog povećanja napona, preklapanje vodljivog i valentnog pojasa se povećava te poteče najveća tunelska struja. Nakon još većeg povećanja napona, dolazi do neusklađenja između vodljivog i valentnog pojasa. Zbog toga elektroni počinju tunelirati kroz vodljivi pojas n-dijela do valentnog pojasa p-dijela pa se tunelska struja smanjuje.

Ukoliko dodamo veliki napon, tunelski efekt dolazi do 0, i tunnel dioda se ponaša kao standardna P-N dioda i struja normalno teče.



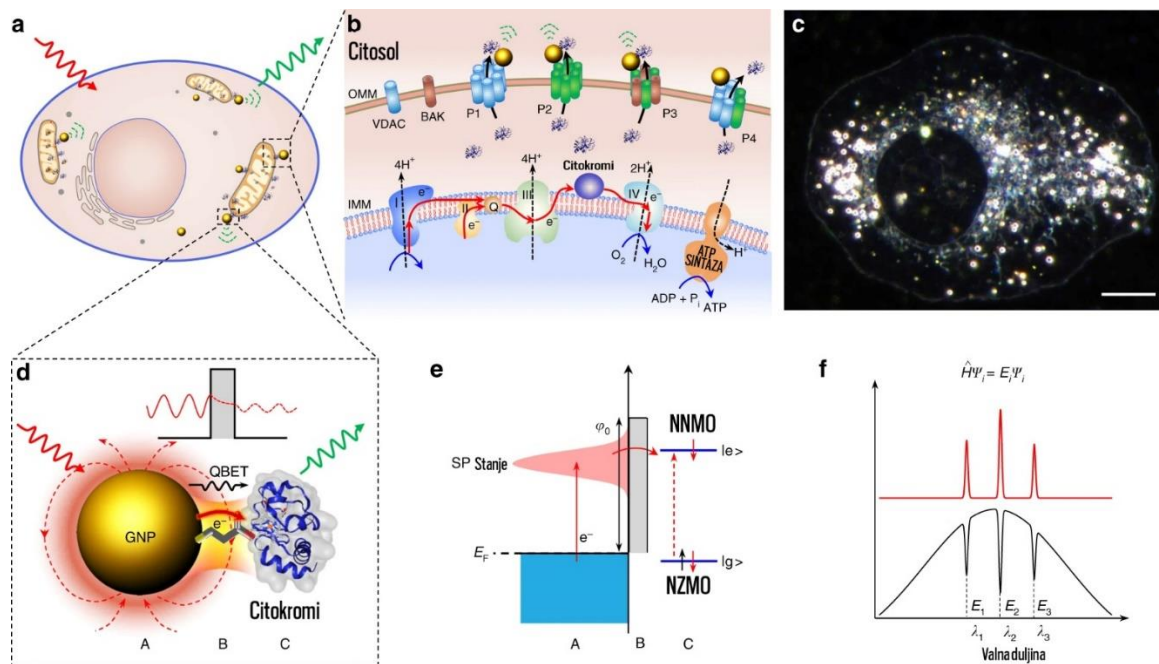
Slika 11. Cijeli proces funkcioniranja tunnel diode. U a) dijelu imamo maksimalnu tunelsku struju, te pri povećavanju napona ta struja pada (b) sve dok ne naglo povećamo napon gdje će biti nulta tunelska struja ali maksimalna struja koja teče kroz standardnu diodu. (Slika preuzeta iz <https://www.physics-and-radio-electronics.com/electronic-devices-and-circuits/semiconductor-diodes/tunnel-diode-how-it-works.html>)

Prednosti tunelskih dioda su što imaju veći životni vijek, odlične su za rad pri velikim brzinama, jer je efekt kvantnog tuneliranja kroz vrlo tanke slojeve brz proces, imaju relativno mali šum i malu potrošnju energije.

Nedostaci tunelskih dioda su to što ih se ne možemo proizvesti u velikom broju, te što im ulaz i izlaz nisu međusobno izolirani. [9]

4.4 Kvantno tuneliranje u biologiji

Kvantni efekti u biologiji imaju širok raspon primjena; od bioloških procesa kao fotosinteza, u staničnoj homeostazi, kad stanice popravljaju DNA, u staničnom disanju i smrti stanica. Iako se kvantna biologija dosta razvila zadnjih godina, efekt kvantnog tuneliranja unutar biologije još uvijek nije dovoljno istraženo.



Slika 12. a) Shematski prikaz zlatnih nanočestica (engl. gold nanoparticles, GNP) korištenih kao optičke antena za snimanje živih stanica. b) Šematski prikaz GNP-a za detekciju citokroma puštenih iz mitohondrija u citosol. c) Slika žive stanice u tamnom polju s GNP. d) Šematski prikaz QBET (kvantna biologija tuneliranja elektrona). e) Shematski prikaz tuneliranja elektrona kroz A/B/C spojeve. f) Spektar raspršivanja sa kvantiziranih padova pri QBT snimanju. (Slika preuzeta iz <https://www.nature.com/articles/s41467-019-11212-x/figures/1>)

Budući da biološka istraživanja nisu predmet ovog rada, ukratko je predstavljen jedan od brojnih primjera primjene učinka kvantnog tuneliranja u biologiji. Primjerice, na slici 12 e), dan je prikaz pobuđenog elektrona od fermijeve energije E_F do stanja površine plazmona (SP), te njegovo tuneliranje kroz molekulsku barijeru do citokroma.

4 Zaključak

Koncepti i alati klasične fizike dobro opisuju svijet koji svakodnevno opažamo, ali ako krenemo u proučavanje čestica dimenzija atoma, mogli bismo na prvu zaključiti kako se ponašaju protivno zdravom razumu. Zbog toga posežemo za konceptima i alatima kvantne fizike. Učinak kvantnog tuneliranja dozvoljava čestici da se nađe izvan barijere onda kad bi se klasična fizika tomu protivila.

U ovom radu dani su osnovni koncepti kvantnog tuneliranja te se na nekoliko jednodimenzionalnih problema raspravila vjerojatnost da se čestica nađe u klasično zabranjenom području. Također su se raspravili koeficijenti refleksije i transmisije valova koji opisuju česticu u svakom trenutku, u bilo kojem dijelu prostora.

Učinak kvantnog tuneliranja ima široku primjenu u fizici i drugim prirodnim znanostima, elektronici i tehnologiji. Kako bismo to potkrijepili, u ovom radu proučili smo primjere nuklearnog alfa raspada, principa rada pretražnog mikroskopa s tuneliranjem, tehnologiju tunelskih dioda te smo spomenuli i neke primjene u biologiji (plazmatične strukture). Tako su navedeni osnovni koncepti nuklearnog alfa raspada koji je zasnovan upravo na kvantnomehaničkom tuneliranju alfa-čestice kroz potencijalnu barijeru jezgre. Nadalje, ukratko je opisan princip rada pretražnog mikroskopa s tuneliranjem, te su navedene osnovne razlike u odnosu na mikroskop atomskih sila. U primjerima primjene koja nije direktno vezana uz fiziku vidjeli smo kako je bez poznavanja učinka kvantnog tuneliranja nemoguće objasniti procese u suvremenoj elektronici (tunelske diode) te mnoge biološke i kemijske procese.

Budućnost primjene kvantnog tuneliranja jest u mnogo bržem bežičnom slanju podataka. Naime, pomoću učinka kvantnog tuneliranja moguće je potpuno zaobići pojačavanje i moduliranje podataka da bismo ih mogli poslati i/ili dobiti. Stoga, na kraju možemo reći da je, bar što se razvoja i napretka tehnologije tiče, kvantno tuneliranje jedan od ključeva budućnosti.

6 Literatura

- [1] *Hrvatska enciklopedija, mrežno izdanje*, URL: <http://www.enciklopedija.hr/Natuknica.aspx?ID=62682> (28. 7. 2021.).
- [2] Knight, R. D., *Physics for Scientists and Engineers: With Modern Physics*, 2004.
- [3] Nouredine Zettili, *Quantum Mechanics Concepts and Applications*, URL: <https://bibliotecatrevisano.files.wordpress.com/2017/10/zettili.pdf>
- [4] Jonathan hui. URL: <https://jonathan-hui.medium.com/qc-quantum-mechanics-notations-a1be27753205> (1. 8. 2021)
- [5] Snelgrove Martin, *Oscillator*, 2011
- [6] Rostky George, *Tunnel diodes: the transistor killers*, 2009
- [7] David Gorham, *Electronics*, 2nd Ed, 2003
- [8] NCBI, URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3417806/> (18. 9. 2021.)
- [9] *Physics and radio electronics*, URL: <https://www.physics-and-radio-electronics.com/electronic-devices-and-circuits/semiconductor-diodes/tunnel-diode-how-it-works.html> (19. 9. 2021.)
- [10] *Nature*, URL: <https://www.nature.com/articles/s41467-019-11212-x#ref-CR22> (19. 9. 2021.)
- [11] *Britannica*, URL: <https://www.britannica.com/technology/scanning-tunneling-microscope> (19. 9. 2021.)
- [12] Patrick Walters i Tony Hey, *The New Quantum Universe*, 2003
- [13] *Difference Between*, URL <http://www.differencebetween.net/technology/difference-between-afm-and-stm/> (20. 9. 2021.) Knight, R. D., *Physics for Scientists and Engineers: With Modern Physics*, 2004.
- [14] Arthur Beiser, *Concepts of Modern Physics*, 2002