

## Nanostruktury – druty i kropki kwantowe



RTD/1 Resonant tunneling structures.pdf  
SET/BenzeneSET.pdf

## Struktury niskowymiarowe

Pełen Hamiltonian w naszym wszechświecie ma 3 wymiary przestrzenne  $(x, y, z, t) = (\vec{R}, t)$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

Dla  $V(\vec{R}) = V(z)$  mamy:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

Wzdłuż kierunków  $x$  i  $y$  mamy ruch swobodny:

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u(z)$$

Można pokazać (przy tablicy!), że ostatecznie energie własne potencjału  $V(z)$  są w postaci:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] u(z) = \varepsilon u(z) \qquad \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$$

131  
2013-02-27 2

## Potencjał harmoniczny

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 z^2 \right] \psi(z) = E\psi(z) \qquad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega_0} \qquad \xi = \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z$$

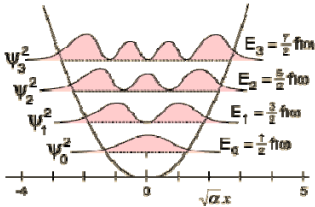
$$\left( \frac{d}{d\xi} - \xi \right) \left( \frac{d}{d\xi} + \xi \right) A e^{\frac{\xi^2}{2}} = (-2\varepsilon_0 + 1) A e^{\frac{\xi^2}{2}} = 0 \quad \Rightarrow -2\varepsilon_0 + 1 = 0 \Rightarrow \varepsilon_0 = \frac{1}{2}$$

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$$

$E_n = \hbar \omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right)$

$$\psi_n(z) = A_n H_n \left( \sqrt{\frac{m \omega_0}{\hbar}} z \right) \exp \left( -\frac{m \omega_0}{2\hbar} z^2 \right)$$

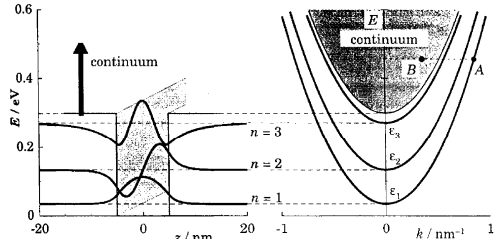
$H_n$  - wielomiany Hermite'a

$$A_n = \left( 2^n n! \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m \omega_0}} \right)^{-1/2}$$


2013-02-27 3

## Struktury niskowymiarowe

$$\psi_{k_x, k_y, n}(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u_n(z) = \psi_{k, n}(r, z) = \exp(ik \cdot r) u_n(z)$$

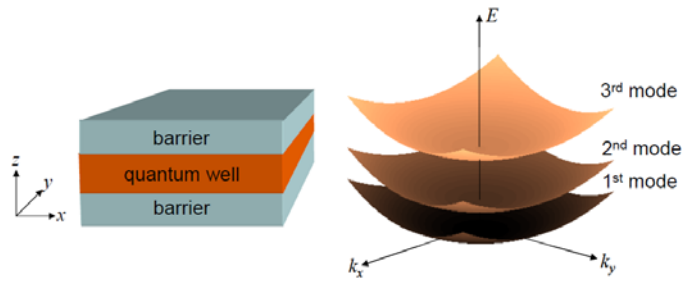
$$E_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \qquad E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$


Cząstki A i B mają tę samą energię!

FIGURE 4.9. Quasi-two-dimensional system in a potential well of finite depth. Electrons with the same total energy can be bound in the well (A) or free (B).

2013-02-27 4

## Studnie 2D i 3D

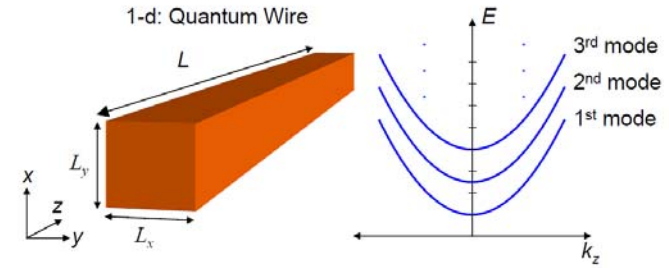


Marc Baldo MIT OpenCourseWare Publication May 2011

2013-02-27

5

## Druty kwantowe

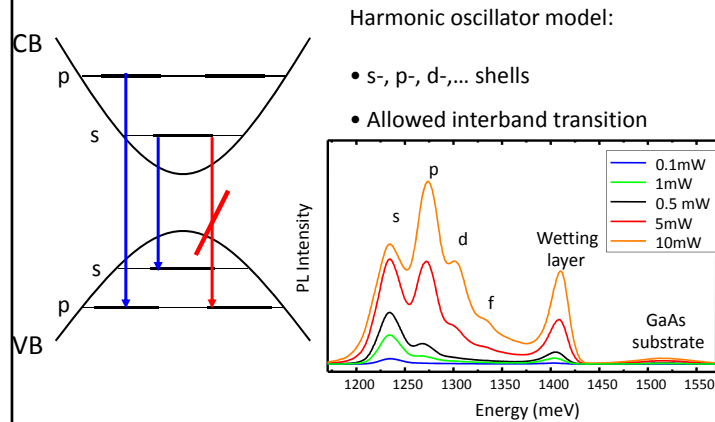


Marc Baldo MIT OpenCourseWare Publication May 2011

2013-02-27

6

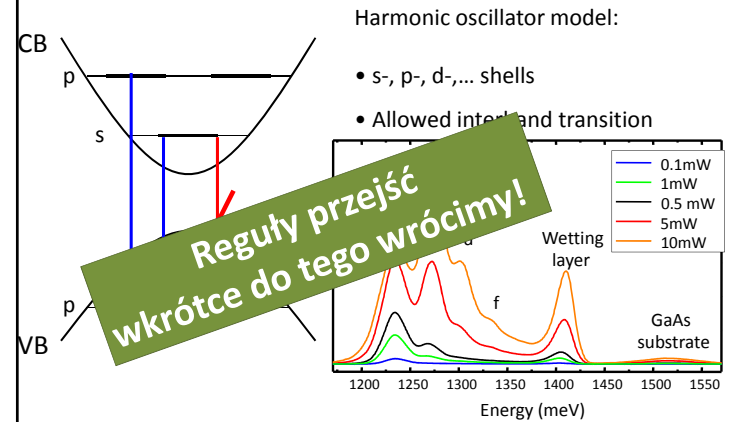
## Potencjał harmoniczny 2D



2013-02-27

7

## Potencjał harmoniczny 2D



2013-02-27

8

## Rachunek zaburzeń z czasem

Szczególne rozwiązania równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

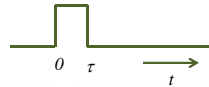
Potencjał niezależny od czasu

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad \psi(x, t) = A\varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Potencjał niezależny od czasu  $H = H_0 + V(t)$

Najprostszy przypadek:

$$V(t) = \begin{cases} W(t) & \text{dla } 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \text{dla } t < 0 \text{ i } t > \tau \end{cases}$$



2013-02-27

9

## Rachunek zaburzeń z czasem

Równanie Schrödingera z czasem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_0 + V(t)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n(t) \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

analogicznie ↑

Potencjał niezależny od czasu

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad \psi(x, t) = A\varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Potencjał niezależny od czasu  $H = H_0 + V(t)$

Najprostszy przypadek:

$$V(t) = \begin{cases} W(t) & \text{dla } 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \text{dla } t < 0 \text{ i } t > \tau \end{cases}$$



2013-02-27

10

## Rachunek zaburzeń z czasem

Równanie Schrödingera z czasem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_0 + V(t)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n(t) \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Dla  $t < 0$  układ był w stanie początkowym  $m$   $\psi(x, t < 0) = \varphi_m(x) e^{-iE_m t/\hbar}$

Dla  $t > \tau$  układ będzie w jakimś innym stanie  $\psi(x, t > \tau) = \sum_n A_{nm}(\tau) \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

przy czym prawdopodobieństwo tego, że układ będzie w stanie stacjonarnym o energii  $E_n$  dane jest przez prawdopodobieństwo przejścia układu w czasie  $\tau$  ze stanu początkowego  $m$  do stanu  $n$ .

$$w_{nm} = |A_{nm}(\tau)|^2$$

$$H_0 \varphi_n(x) = E_n^0 \varphi_n(x)$$

Wiemy, że funkcje  $\varphi_n(x)$  są funkcjami własnymi hamiltonianu, czyli:  $H_0 \varphi_n(x) = E_n^0 \varphi_n(x)$   
 $H_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle$

Liczmy:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$

2013-02-27

11

## Rachunek zaburzeń z czasem

Równanie Schrödingera z czasem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_0 + V(t)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n(t) \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Dla  $t < 0$  układ był w stanie początkowym  $m$   $\psi(x, t < 0) = \varphi_m(x) e^{-iE_m t/\hbar}$

Dla  $t > \tau$  układ będzie w jakimś innym stanie  $\psi(x, t > \tau) = \sum_n A_{nm}(\tau) \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

przy czym prawdopodobieństwo tego, że układ będzie w stanie stacjonarnym o energii  $E_n$  dane jest przez prawdopodobieństwo przejścia układu w czasie  $\tau$  ze stanu początkowego  $m$  do stanu  $n$ .

$$w_{nm} = |A_{nm}(\tau)|^2$$

$$H_0 \varphi_n(x) = E_n^0 \varphi_n(x)$$

Wiemy, że funkcje  $\varphi_n(x)$  są funkcjami własnymi hamiltonianu, czyli:  $H_0 \varphi_n(x) = E_n^0 \varphi_n(x)$   
 $H_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle$

Liczmy:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$

**Przy tablicy!**

2013-02-27

12

## Rachunek zaburzeń z czasem

Równanie Schrödingera z czasem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_0 + V(t) \quad \psi(x, t) = \sum_n A_n(t) \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Dla  $t < 0$  układ był w stanie początkowym  $m$   $\psi(x, t < 0) = \varphi_m(x) e^{-iE_m t/\hbar}$

Dla  $t > \tau$  układ będzie w jakimś innym stanie  $\psi(x, t > \tau) = \sum_n A_{nm}(\tau) \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

przy czym prawdopodobieństwo tego, że układ będzie w stanie stacjonarnym o energii  $E_n$  dane jest przez prawdopodobieństwo przejścia układu w czasie  $\tau$  ze stanu początkowego  $m$  do stanu  $n$ .

$$w_{nm} = |A_{nm}(\tau)|^2$$

Szukamy współczynników  $A_{nm}$ .

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_n(t) = \sum_l \langle n|W(t)|l \rangle e^{+i\omega_{nl}t}$$

$$\langle n|W(t)|l \rangle = \int \varphi_n^* W(t) \varphi_l dx$$

$$\hbar\omega_{nl} = E_n - E_l$$

2013-02-27

13

## Rachunek zaburzeń z czasem

Podstawiamy do równania, bierzemy pod uwagę warunek początkowy (patrz *Mechanika kwantowa* S.A Dawydov)

$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle m|W(t)|n \rangle e^{+i\omega_{nl}t} dt \right|^2$$

Dla przypadku gdy  $W(t) = const = W$  dla  $0 \leq t \leq \tau$  łatwo jest policzyć:

$$\int_0^\tau \langle n|W(t)|l \rangle e^{i\omega_{nl}t} dt = \frac{e^{i\omega_{nl}\tau} - 1}{i\omega_{nl}} \langle n|W|l \rangle$$

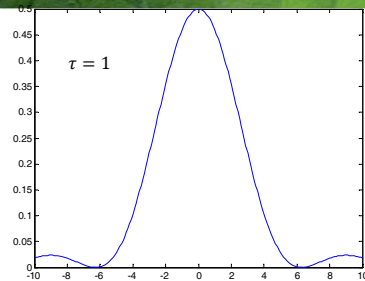
Wtedy prawdopodobieństwo przejścia w czasie działania zaburzenia jest dane przez

$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} |\langle m|W|n \rangle|^2 \frac{1 - \cos \left[ (E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[ (E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$

2013-02-27

14

## Rachunek zaburzeń z czasem

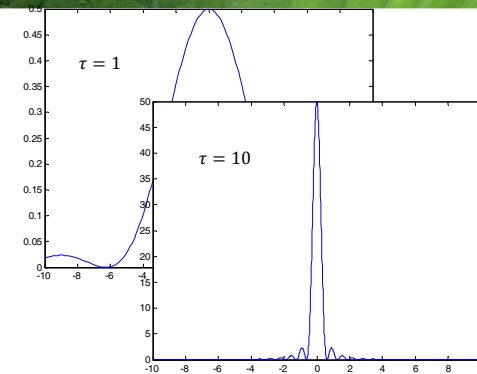


$$\frac{1 - \cos \left[ (E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[ (E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$

2013-02-27

15

## Rachunek zaburzeń z czasem

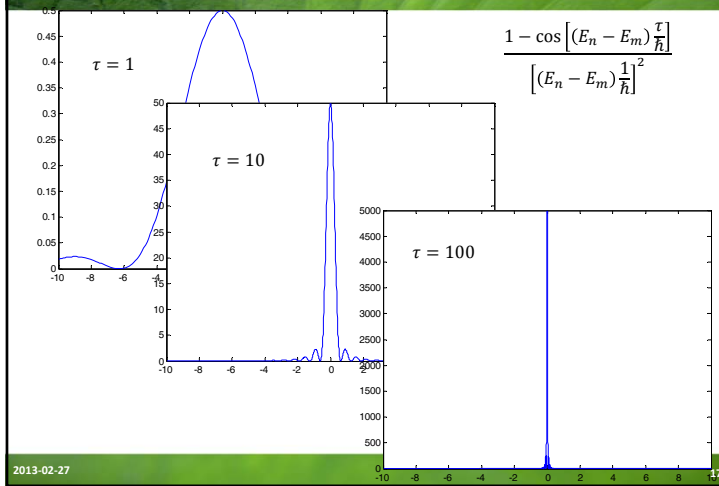


$$\frac{1 - \cos \left[ (E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[ (E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$

2013-02-27

16

### Rachunek zaburzeń z czasem



### Rachunek zaburzeń z czasem

Podstawiamy do równania, bierzemy pod uwagę warunek początkowy (patrz *Mechanika kwantowa* S.A Dawydov)

$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle m|W(t)|n \rangle e^{+i\omega_{mn}t} dt \right|^2$$

Dla przypadku gdy  $W(t) = const = W$  dla  $0 \leq t \leq \tau$  łatwo jest policzyć:

$$\int_0^\tau \langle m|W(t)|n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt = \frac{e^{i\omega_{mn}\tau} - 1}{i\omega_{mn}} \langle m|W|n \rangle$$

Wtedy prawdopodobieństwo przejścia w czasie działania zaburzenia jest dane przez

$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} |\langle m|W|n \rangle|^2 \frac{1 - \cos \left[ (E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[ (E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$

$$\text{Dla } \tau \gg \frac{\hbar}{E_n - E_m} \quad \frac{1 - \cos \left[ (E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[ (E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2} \approx \tau \pi \hbar \delta(E_n - E_m)$$

2013-02-27

18

### Rachunek zaburzeń z czasem

Ostatecznie prawdopodobieństwo przejścia

$$w_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|W|n \rangle|^2 \tau \delta(E_m - E_n)$$

Prawdopodobieństwo przejścia jest proporcjonalne do czasu działania zaburzenia, więc prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu dane jest przez:

$$P_{mn} = \frac{w_{mn}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|W|n \rangle|^2 \delta(E_m - E_n)$$

2013-02-27

19

### Rachunek zaburzeń z czasem

W przypadku gdy zaburzeniem jest fala periodyczna wracamy do ogólnego wzoru:

$$w_{nm} = |A_{nm}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle n|W(t)|m \rangle e^{+i\omega_{nm}t} dt \right|^2$$

dla przypadku gdy  $W(t) = w^\pm e^{\pm i\omega t}$  dla  $0 \leq t \leq \tau$  łatwo jest policzyć:

$$\int_0^\tau \langle n|w^\pm|l \rangle e^{i(\omega_{nl} \pm \omega)t} dt = \frac{e^{i(\omega_{nl} \pm \omega)\tau} - 1}{i(\omega_{nl} \pm \omega)} \langle n|w^\pm|l \rangle$$

Prawdopodobieństwo przejścia:

$$w_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|w^\pm|m \rangle|^2 \tau \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu dane jest przez:

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|w^\pm|m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

2013-02-27

20

## Rachunek zaburzeń z czasem

Wnioski:

$$W(t) = w^\pm e^{\pm i\omega t}$$

$$0 \leq t \leq \tau$$

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} | \langle n | w^\pm | m \rangle |^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Przejścia są możliwe tylko do stanów  $E_m = E_n \pm \hbar\omega$

Układ albo może energię zyskać (zaabsorbować) albo stracić (wyemitować)

2013-02-27

21

## Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} | \langle n | w^\pm | m \rangle |^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Ogólna postać hamiltonianu w polu elektromagnetycznym dana jest przez potencjał wektorowy  $A$  i skalarny  $\varphi$ :

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 - e\varphi + V$$

Przyjmując odpowiednie cechowanie  $\varphi=0$ ,  $\text{div}A=0$  oraz zaniebując wyrazy z  $A^2$  (słabe promieniowanie)

$$H \approx \frac{e}{m} \vec{A} \vec{p}$$

Potencjał wektorowy dla fali elektromagnetycznej można wprowadzić w postaci:

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \{ e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} + e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \}$$

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \vec{E} = 2\omega \vec{A}_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r})$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad \vec{B} = 2(\vec{k} \times \vec{A}_0) \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r})$$

2013-02-27

22

## Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$H \approx \frac{e}{m} \vec{A} \vec{p}$$

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} | \langle n | w^\pm | m \rangle |^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \{ e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} + e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \}$$

rozwijając w szereg  $\vec{p} e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \approx \vec{p} \left[ 1 + (-i\vec{k}\vec{r}) + \frac{(-i\vec{k}\vec{r})^2}{2!} + \dots \right]$

Korzystamy z reguł komutacji  $[\vec{r}, H_0] = \vec{r}H_0 - H_0\vec{r} = \frac{i\hbar}{m} \vec{p}$

dostajemy  $\langle n | \vec{p} | m \rangle = im\omega_{nm} \langle n | \vec{r} | m \rangle$

Kolejne czony w rozwinięciu dają przejścia dipolowe magnetyczne, kwadrupolowe elektryczne itd.

2013-02-27

23

## Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$H \approx \frac{e}{m} \vec{A} \vec{p}$$

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} | \langle n | w^\pm | m \rangle |^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \{ e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} + e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \}$$

rozwijając w szereg  $\vec{p} e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \approx \vec{p} \left[ 1 + (-i\vec{k}\vec{r}) + \frac{(-i\vec{k}\vec{r})^2}{2!} + \dots \right]$

po żmudnych obliczeniach dostajemy prawdopodobieństwo emisji promieniowania elektromagnetycznego **dipolowego** (opisanego operatorem  $e\vec{r}$ )

$$A_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{\omega_{nm}^3 e^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} | \langle n | \vec{r} | m \rangle |^2 = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} | \langle n | \vec{r} | m \rangle |^2 \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Jest to jeden ze współczynników Einsteina (lasery itp. – za tydzień!) dla stanów niezdegenerowanych

2013-02-27

24



## Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$A_{nm} = \frac{\omega_{nm}^3 e^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle m|\vec{r}|n\rangle|^2 = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} |\langle m|\vec{r}|n\rangle|^2$$

W przypadku degeneracji stanów wprowadza się „siłę linii”

$$A_{nm} = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} \frac{S_{mn}}{g_m} \quad S_{nm} = \sum_i \sum_j |\langle n_i|\vec{r}|m_j\rangle|^2$$

degeneracja poziomu wyjściowego

W przypadku stanów atomu wodoru wygodnie jest przedstawić operator  $\vec{r}$  w postaci kołowej:

$$|\langle n_i|\vec{r}|m_j\rangle|^2 = |\langle n_i|z|m_j\rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle n_i|x+iy|m_j\rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle n_i|x-iy|m_j\rangle|^2$$

łatwo jest wtedy całkować harmoniki sferyczne, bo:

$$z = r \cos \vartheta$$

$$x \pm iy = r e^{\pm i\varphi} \sin \vartheta$$

**Sprawdzić!**

2013-02-27

25

## Fala elektromagnetyczna

Kilka uwag

$$A_{nm} = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} \frac{S_{mn}}{g_m} \quad S_{nm} = \sum_i \sum_j |\langle n_i|\vec{r}|m_j\rangle|^2$$

Obliczając współczynnika Einsteina dla np. atomu wodoru możemy dostać tzw. *reguły wyboru przejść optycznych*

$\Delta l = \pm 1$  zas. zach. pędu – foton ma spin całkowity

$\Delta m = \pm 1$  przejścia w polaryzacji kołowej  $\sigma$

$\Delta m = 0$  przejścia w polaryzacji liniowej  $\pi$

Przejścia optyczne są możliwe tylko między poziomami o różnej symetrii, gdyż operator  $\vec{r}$  jest antysymetryczny

**Na ćwiczeniach!**

2013-02-27

26

## Fala elektromagnetyczna

Kilka uwag

$$A_{nm} = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} \frac{S_{mn}}{g_m} \quad S_{nm} = \sum_i \sum_j |\langle n_i|\vec{r}|m_j\rangle|^2$$

Wprowadza się pojęcie czasu życia ze względu na zanik radiacyjny:

$$\tau_{nm} = \frac{1}{A_{nm}}$$

W przypadku przejść optycznych dipolowych czas życia jest rzędu nanosekund.

Moc przejścia optycznego  $P_{nm} = A_{nm} \hbar \omega_{nm}$

2013-02-27

27

## PODSUMOWANIE – złota reguła Fermiego

Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu:

$$W(t) = W \quad 0 \leq t \leq \tau \quad P_{mn} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|W|n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n)$$

Przejścia są możliwe tylko do stanów  $E_m = E_n$

$$W(t) = w^{\pm} e^{\pm i\omega t} \quad 0 \leq t \leq \tau \quad P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|w^{\pm}|m\rangle|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Przejścia są możliwe tylko do stanów  $E_m = E_n \pm \hbar\omega$

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$A_{nm} = \frac{\omega_{nm}^3 e^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle m|\vec{r}|n\rangle|^2 = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} |\langle m|\vec{r}|n\rangle|^2$$

$$P_{nm} = A_{nm} \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

2013-02-27

28

## PODSUMOWANIE – złota reguła Fermiego

Szybkość zmian – czyli prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu – ze stanu początkowego  $|i\rangle$  do końcowego  $|f\rangle$  dane jest wzorem:

$$P_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|W|i\rangle|^2 \rho(E_f)$$

↑
↑

W - oddziaływanie z polem
 $\rho(E_f)$  - gęstość stanów końcowych

Zaburzenie  $W$  nie musi być w postaci fali elektromagnetycznej.

Wkrótce do tego wrócimy

2013-02-27

29

## Przejścia międzypasmowe

**Szkie dowodu**

Funkcja Blocha nośnika w kryształach:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n,k} c_{n,k} u_{n,k}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Dla elektronu:

$$\Psi_c(\vec{r}) \approx \sum_k c_{1,k} u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) F_e(\vec{r})$$

Dla dziury:

$$\Psi_v(\vec{r}) \approx \sum_{J_z = \pm 3/2, \pm 1/2, k} c_{J_z, k} u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{J_z = \pm 3/2, \pm 1/2, k} u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) F_J(\vec{r})$$

Dipolowe przejścia optyczne międzypasmowe:

$$\langle \Psi_c(\vec{r}) | \vec{p} | \Psi_{v, J_z}(\vec{r}) \rangle = \langle u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) | u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) \rangle \langle F_e(\vec{r}) | \vec{p} | F_J(\vec{r}) \rangle + \langle u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) | \vec{p} | u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) \rangle \langle F_e(\vec{r}) | F_J(\vec{r}) \rangle$$

$= 0$

2013-02-27

30

## Potencjał harmoniczny 2D

**Szkie dowodu**

Funkcja Blocha nośnika w kryształach:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n,k} c_{n,k} u_{n,k}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Dla elektronu:

$$\Psi_c(\vec{r}) \approx \sum_k c_{1,k} u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) F_e(\vec{r})$$

Dla dziury:

$$\Psi_v(\vec{r}) \approx \sum_{J_z = \pm 3/2, \pm 1/2, k} c_{J_z, k} u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{J_z = \pm 3/2, \pm 1/2, k} u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) F_J(\vec{r})$$

Dipolowe przejścia optyczne międzypasmowe:

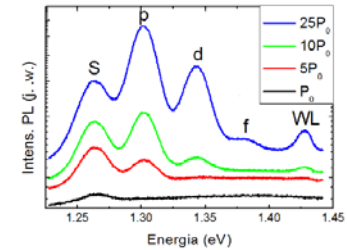
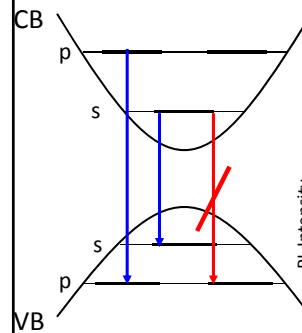
$$\langle \Psi_c(\vec{r}) | \vec{p} | \Psi_{v, J_z}(\vec{r}) \rangle = \langle u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) | u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) \rangle \langle F_e(\vec{r}) | \vec{p} | F_J(\vec{r}) \rangle + \langle u_{\Gamma_{6,0}}(\vec{r}) | \vec{p} | u_{\Gamma_{8, J_z}}(\vec{r}) \rangle \langle F_e(\vec{r}) | F_J(\vec{r}) \rangle$$

$= 0$

2013-02-27

31

## Potencjał harmoniczny 2D



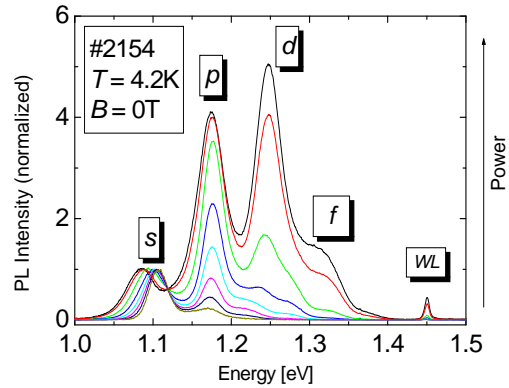
Zależność od mocy pobudzenia widm fotoluminescencji otrzymanych w temperaturze bliskiej temperatury ciekłego helu (ok. 5 K) dla licznych (wielomilionowego) zbioru kropek kwantowych InAs/GaAs.

2013-02-27

32



## Potencjał harmoniczny 2D

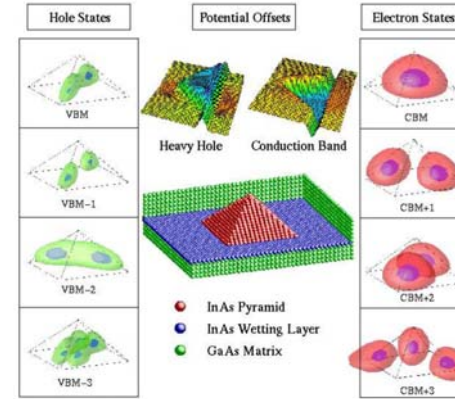


Adam Babiński

2013-02-27

33

## Potencjał harmoniczny 2D



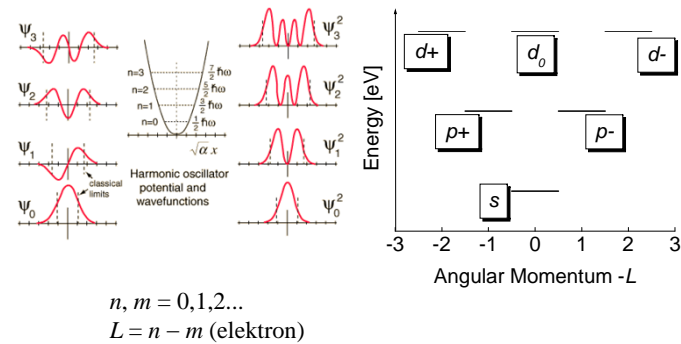
The electronic structure of a strained InAs (110) pyramidal quantum dot embedded within GaAs. The strain-modified band offsets are shown above the atomic structure. They exhibit a well for both heavy holes and electrons. Isosurface plots of the four highest hole states and four lowest electron states, as obtained from pseudopotential calculations, appear on the left and right. CBM means conduction band minimum and VBM valence band minimum

MRS Bulletin Vol. 23 No. 2, p. 35 (1998).

2013-02-27

34

## Potencjał harmoniczny 2D

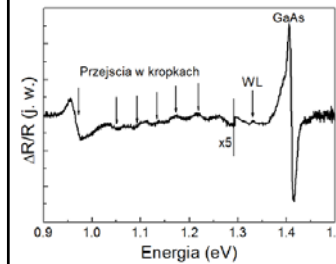


Adam Babiński

2013-02-27

35

## Potencjał harmoniczny 2D



Widmo fotoodcienia z temperatury pokojowej dla struktury z kropkami kwantowymi In-As/GaAs [W. Rudno-Rudziński, et al. Solid State Commun. 135, 232 (2005)]

2013-02-27

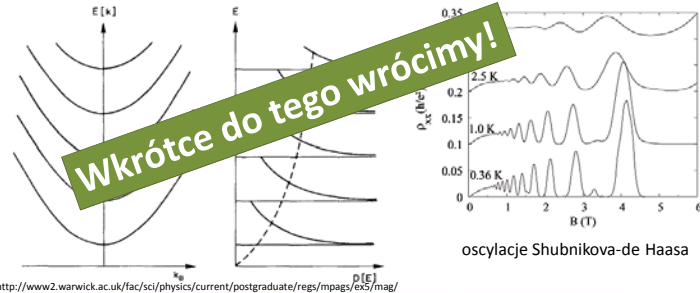
36

## Potencjał harmoniczny 2D

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\omega_0 = \omega_c = \frac{eB}{m^*}$$

Ważny przykład – cząstka w polu magnetycznym. Częstość cyklotronowa  $\omega_c$



<http://www2.warwick.ac.uk/fac/sci/physics/current/postgraduate/regs/mpags/ocs/mag/>

2013-02-27

37

## Potencjał harmoniczny 3D

$$E_n^x = \hbar \omega_0 \left( n_x + \frac{1}{2} \right) \text{ w kierunku } x, y \text{ i } z$$

$$E_N = E_n^x + E_n^y + E_n^z = \hbar \omega_0 \left( N + \frac{3}{2} \right)$$

Degeneracja?  $N = n_x + n_y + n_z$

$$g_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

N	( $n_x, n_y, n_z$ )
0	(0,0,0)
1	(1,0,0) (0,1,0) (0,0,1)
2	(2,0,0) (0,2,0) (0,0,2) (1,1,0) (1,0,1) (0,1,1)
3	3x(3,0,0) 1x(1,1,1) 6x(2,0,1)

2013-02-27

38

## Sferyczne kropki kwantowe

Przerwa energetyczna w sferycznych kropkach kwantowych [Brus, L. E. J. Phys. Chem. 1986, **90**, 2555, Brus, L. E. J. Chem. Phys. 1984, **80**, 4403]

$$E_g^*(R) = E_g^{bulk} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2 m_0} \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right) - \frac{1.8e^2}{4\pi \epsilon \epsilon_0 R} \quad R - \text{średnica}$$

Lokalizacja kwantowa (quantum localization): mniejsza cząstka – więcej wektorów  $k$  potrzebnych do opisu stanu nośnika. Czyli cząstka w studni! ZWIĘKSZA energię przerwy

Część kulombowska oddz.  $e-h$  z uwzględnieniem polaryzacji (sfera) OBNIŻA energię. Potencjał obliczony dla funkcji w postaci  $\Psi_n(r)$  ( $n=1$ ):

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}$$

$$\Psi_n(r) = \frac{C_n}{r} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right)$$



2013-02-27

39

## Sferyczne kropki kwantowe

Przerwa energetyczna w sferycznych kropkach kwantowych [Brus, L. E. J. Phys. Chem. 1986, **90**, 2555, Brus, L. E. J. Chem. Phys. 1984, **80**, 4403]

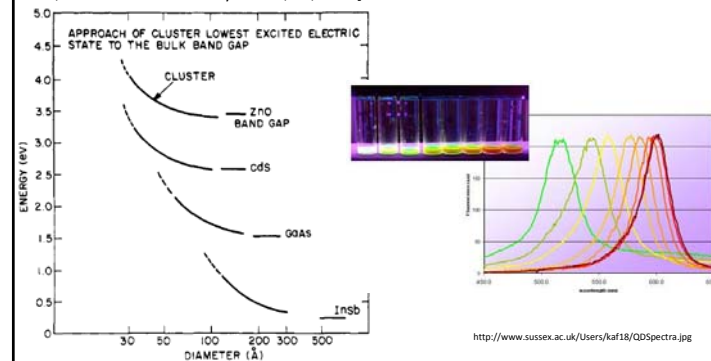


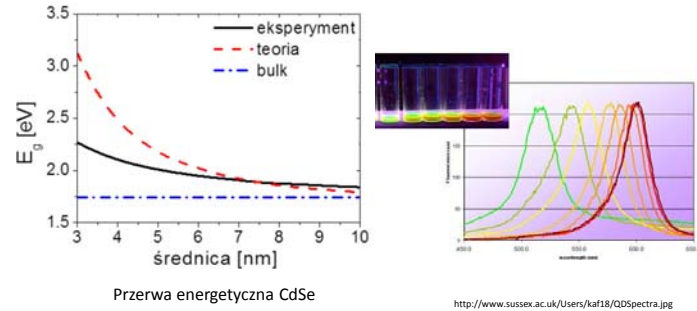
Figure 5. Calculated energy of the cluster lowest excited electronic state in relation to the bulk band gap. Adapted from ref 31.

2013-02-27

40

## Sferyczne kropki kwantowe

Przerwa energetyczna w sferycznych kropkach kwantowych [Brus, L. E. J. Phys. Chem. 1986, **90**, 2555, Brus. L. E. J. Chem. Phys. 1984, **80**, 4403]



2013-02-27

41

## Sferyczne kropki kwantowe

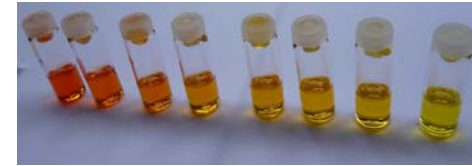
Przerwa energetyczna w sferycznych kropkach kwantowych [Brus, L. E. J. Phys. Chem. 1986, **90**, 2555, Brus. L. E. J. Chem. Phys. 1984, **80**, 4403]

$$E_g^s(R) = E_g^{bulk} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2 m_0} \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right) - \frac{1.8e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R} \quad R - \text{średnica}$$

Lokalizacja kwantowa (quantum localization): mniejsza cząstka – więcej wektorów  $k$  potrzebnych do opisu stanu nośnika. Czyli cząstka w studni ZWIĘKSZA energię przerwy

Część kulombowska oddz.  $e - h$  z uwzględnieniem polaryzacji (sfera) OBNIŻA energię. Potencjał obliczony dla funkcji w postaci  $\Psi_n(r)$  ( $n = 1$ ):

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \Psi_n(r) = \frac{C_n}{r} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right)$$



2013-02-27

42

## Sferyczne kropki kwantowe



2013-02-27

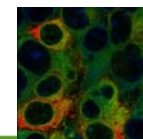
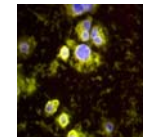
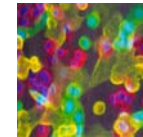
43

## Sferyczne kropki kwantowe

<http://www.medicine.tcd.ie/molecular-medicine/gallery/pictures/scientific-pictures.php>

### Synthesis Techniques

- Vapor phase (molecular beams, flame synthesis etc...)
- Solution phase synthesis
  - Aqueous Solution
  - Nonaqueous Solution
- Typically the rapid reduction of organometallic precursors in hot organics with surfactants



### Semiconductor Nanoparticles

- II-VI: CdS, CdSe, PbS, ZnS
- III-V: InP, InAs
- MO: TiO<sub>2</sub>, ZnO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, PbO, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

2013-02-27

44

# Sferyczne kropki kwantowe

<http://www.medicine.tcd.ie/molecular-medicine/gallery/pictures/scientific-pictures.php>

The screenshot shows a web browser displaying the 'Molecular Medicine' website. The main content area is titled 'Scientific Pictures' and features a grid of 24 small thumbnail images of cells with various fluorescent markers. A larger, detailed image of a cell with multiple colored spots is shown to the right of the grid. The website header includes the Trinity College Dublin logo and navigation links like 'Home', 'History', and 'Undergraduate'.

45

# Sferyczne kropki kwantowe

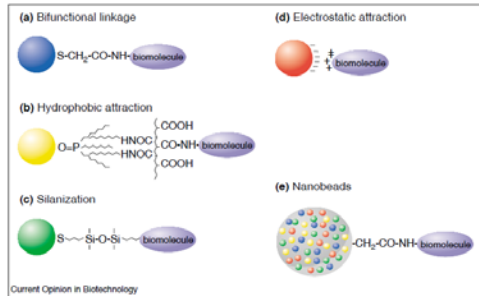
<http://www.microscopyu.com/articles/fluorescence/index.html>

The screenshot shows the Nikon MicroscopyU website. The main content area is titled 'Concepts in Fluorescence Microscopy' and includes a 'Review Articles' section with links to various topics like 'Introduction to Fluorescence Microscopy', 'Confocal Microscopy', and 'Fluorescence Resonance Energy Transfer'. There are also several thumbnail images of cells with fluorescent markers. The website header includes the Nikon MicroscopyU logo and navigation links like 'Home', 'Tutorials', and 'Galleries'.

46

# Sferyczne kropki kwantowe

Schematic illustration of bioconjugation methods. (a) Use of a bifunctional ligand such as mercaptoacetic acid for linking QDs to biomolecules [8\*\*]. (b) TOPO-capped QDs bound to a modified acrylic acid polymer by hydrophobic forces. (c) QD solubilization and bioconjugation using a mercaptosilane compound [7\*\*]. (d) Positively charged biomolecules are linked to negatively charged QDs by electrostatic attraction [9]. (e) Incorporation of QDs in microbeads and nanobeads [20\*\*].



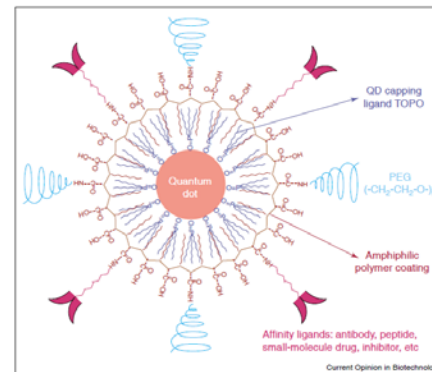
**Luminescent quantum dots for multiplexed biological detection and imaging**  
W. Chan et al. Current Opinion in Biotechnology 2002, 13:40-46

2013-02-27

47

# Sferyczne kropki kwantowe

*In vivo molecular and cellular imaging with quantum dots* Xiaohu Gao Current Opinion in Biotechnology 2005, 16:63-72



The structure of a multifunctional QD probe. Schematic illustration showing the capping ligand TOPO, an encapsulating copolymer layer, tumor-targeting ligands (such as peptides, antibodies or small-molecule inhibitors), and polyethylene glycol (PEG).

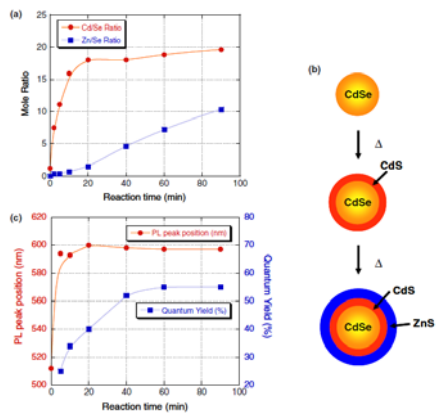
2013-02-27

48



# Sferyczne kropki kwantowe

Synthesis of multi-shell nanocrystals by a single step coating process, Nanotechnology 2006



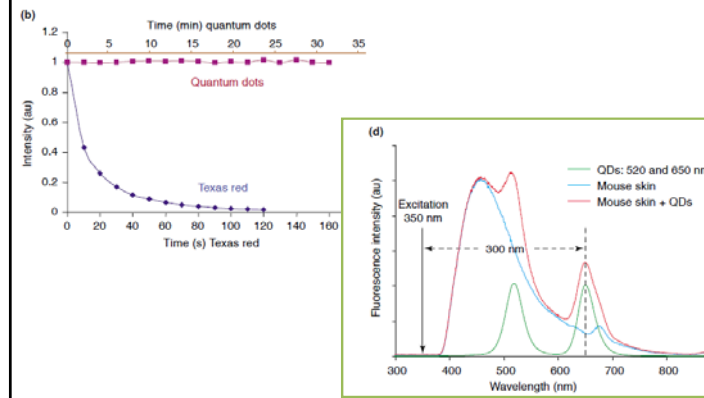
Quantum Yield = wydajność kwantowa

Wydajność kwantową fluorescencji definiuje się jako stosunek liczby wyemitowanych fotonów do liczby fotonów promieniowania wzbudzającego, pochłoniętych przez substancję w tym samym czasie i tej samej objętości.

Figure 1. (a) Elemental ratios of Cd to Se and Zn to Se (measured by ICP), (b) a conceptual drawing of the CdSe core → CdSe/CdS core/shell → CdSe/CdS/ZnS core/multi-shell structure, and (c) PL peak positions, and QYs of CdSe/CdS/ZnS nanocrystals taken at different time intervals during the reaction.

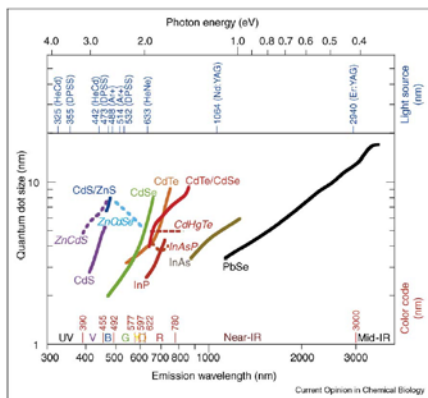
# Sferyczne kropki kwantowe

In vivo molecular and cellular imaging with quantum dots Xiaohu Gao Current Opinion in Biotechnology 2005, 16:63-72



# Sferyczne kropki kwantowe

Current Opinion in Chemical Biology 2006, 10:423-429 Nanoscale controlled self-assembled monolayers and quantum dots



# Sferyczne kropki kwantowe

