WYKŁAD 6 6.11.2012

TRANSMISJA PRZEZ REGIONY ROZPRASZANIA

W nanotechnologii często mamy do czynienia z problemami przepływu prądu przez pewne obszary

n.p. elektroda 

$V_L \neq V_R$ płynie prąd

Tutaj ograniczymy się do problemów jednowymiarowych
W ogólności problem sprowadza się do rozwiązania równania Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z)$$

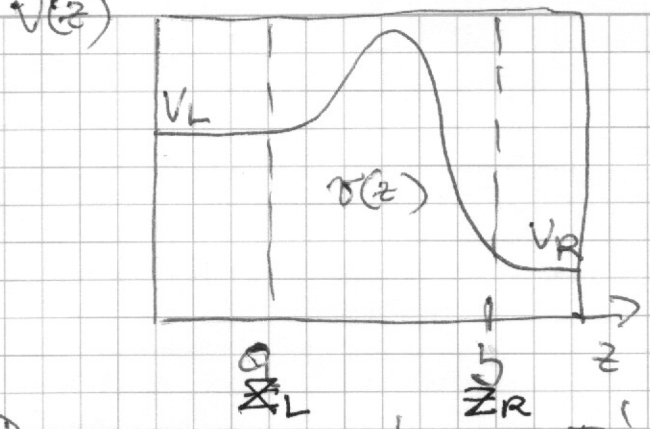
dla stanów rozproszeniowych o energii E, gdzie $E \in \mathbb{R}^+$ może przyjmować wartości ciągłe.

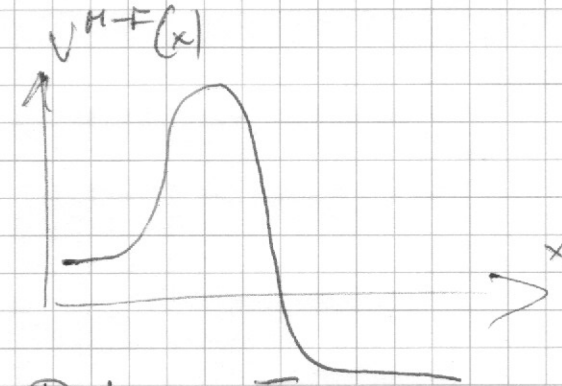
Trudny problem rozproszeniowy gdy
$$V(z) \neq 0 \quad \text{dla} \quad z \in \mathbb{R}$$

Problem upraszcza się gdy $V(z)$ w pewnych obszarach, powiedzmy dla $z \in [a,b]$ jest zmienny a poza tym obszarem przyjmuje wartość stałą czyli.

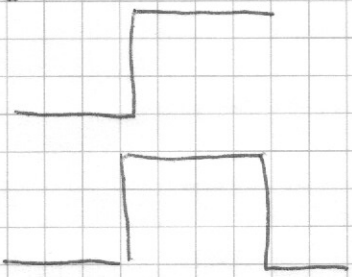
$$V(z) = \begin{cases} V_L & z < a \\ v(z) & z \in [a,b] \\ V_R & z > b \end{cases}$$

$v(z)$ nazywamy potencjałem rozpraszającym





Przykłady potencjałów



znamy rozwiązania analityczne

Potencjał Morse-Feshbacha

$$V^{M-F}(x) = -V_0 \frac{\sinh^2\left(\frac{x-x_0}{d}\right)}{\cosh^2\left(\frac{x-x_0}{d} - \mu\right)}$$

μ - stała bezwymiarowa

W obszarach o stałym potencjale znamy rozwiązanie

Zdefiniujmy wektory falowe

$$k_L = \sqrt{\frac{2m^*(E-V_L)}{\hbar^2}} \qquad k_R = \sqrt{\frac{2m^*(E-V_R)}{\hbar^2}}$$

Dla $z<a$ mamy $\psi(z) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{fala biegnąca}}}{A_L(E)} e^{ik_L z} + B_L(E) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{fala odbita}}}{e^{-ik_L z}}$

$z>b$ mamy $\psi(z) = A_R(E) e^{ik_R z} + B_R(E) e^{-ik_R z}$

Oprócz energii jest zachowany prąd cząstek

$$j := \frac{i\hbar}{2m^*}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dz} - \psi \frac{d\psi^*}{dz}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{k_L |A_L(E)|^2 + k_R |B_R(E)|^2 = k_R |A_R(E)|^2 + k_L |B_L(E)|^2} \quad (*)$$

$\operatorname{div} j = 0 \qquad \frac{d}{dz} j(z) = 0 \Rightarrow j(z) = \text{const}$

$j(a) = j(b)$

S-macierz i T-macierz

macierz rozpraszania

$$\begin{pmatrix} B_L \\ A_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L \\ B_R \end{pmatrix}$$

macierz przejścia

$$\begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_R \\ B_R \end{pmatrix}$$

Szczególne sytuacje

fala padająca z lewej strony $A_L = 1$; $B_R = 0$

$$z < a \qquad \psi(z) = e^{ik_L z} + r_L e^{-ik_L z}$$

fala padająca   fala odbita

$$z > b \qquad \psi(z) = t_R e^{ik_R z}$$

$$j_{in} = \frac{\hbar k_L}{m^*} = v_L \qquad j_{out} = \frac{\hbar k_R}{m^*} |t_R|^2 = v_R |t_R|^2$$

$$j_{refl} = \frac{\hbar k_L}{m^*} |r_L|^2 = v_L |r_L|^2$$

Współczynnik transmisji przez obszar potencjału

$$T_{L\to R} := \frac{j_{out}}{j_{in}} = \frac{k_R}{k_L} |t_R|^2 = \frac{v_R}{v_L} |t_R|^2$$

Współczynnik odbicia

$$R_{L\to R} := \frac{j_{ref}}{j_{in}} = |r_L|^2$$

z równania (*) $\Longrightarrow$ $k_L = k_R |t_R|^2 + k_L |r_L|^2$

$$1 = \frac{k_R}{k_L} |t_R|^2 + |r_L|^2$$

$$\boxed{1 = T(E) + R(E)}$$

Oczywiście można rozważyć fale padającą z lewej strony

wtedy mamy $B_R = 1$; $A_R = r_R$

$A_L = 0 \qquad B_L = t_L$

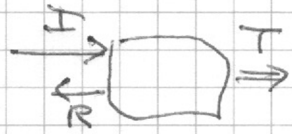
Macierz rozpraszania wyrażona przez amplitudy transmisji i odbicia

$$S(E) = \begin{pmatrix} r_L(E) & \sqrt{\frac{k_R}{k_L}}\, t_R(E) \\ \sqrt{\frac{k_L}{k_R}}\, t_L(E) & r_R(E) \end{pmatrix}$$

Jeżeli E jest rzeczywiste oraz oddziaływanie jest niezmiennicze względem odwrócenia czasu to mamy relacje $k_R t_L(E) = k_L t_R(E)$

$$\Rightarrow T_{R\to L} = T_{L\to R}$$

$$\psi^+ = \begin{cases} e^{ik_L z} + r_L e^{-ik_L z} & z < a \equiv z_L \\ t_R e^{ik_R z} & z > b \equiv z_R \end{cases}$$



$$\psi^- = \begin{cases} e^{-ik_R z} + r_R e^{ik_R z} & z > b \equiv z_R \\ t_L e^{-ik_L z} & z < a \equiv z_L \end{cases}$$

Dwa liniowo niezależne rozwiązania równania Schrödingera dla energii E

$(\psi^+)^*$ i $(\psi^-)^*$ też są rozwiązaniami równania Schrödingera

Równ. Schrödingera jest równ. różniczkowym drugiego rzędu. Ma więc tylko **dwa** liniowo niezależne rozwiązania.

$\Rightarrow$ $(\psi^+)^*$ i $(\psi^-)^*$ można wyrazić jako liniowe kombinacje ψ^+ i ψ^-

$\Rightarrow$ dodatkowe relacje pomiędzy współczynnikami r_L, r_R, t_L, t_R

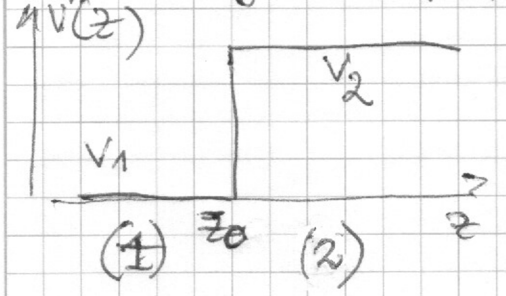
$$1 = r_L r_L^* + t_R^* t_L \; ; \quad r_L^* t_R + t_R^* r_R = 0$$

$$1 = r_R r_R^* + t_R t_L^* \quad\quad r_L t_L^* + t_L r_R^* = 0$$

Jak znaleźć metodę rozwiązania problemu dla dowolnego potencjału $V(z)$.

Popatrzmy na rozwiązania dla znanych problemów

najprostszy: próg potencjału



$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1^*} = E - V_1 \qquad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2^*} = E - V_2$$

$E - V > 0 \Rightarrow$ k rzecz.

$E - V < 0 \Rightarrow$ k urojony

$$\psi(z) = A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z} \qquad z < z_0$$

$$\psi(z) = A_2 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-ik_2 z} \qquad z > z_0$$

Warunki brzegowe

$$\left.\begin{aligned} &\psi(z_0^-) = \psi(z_0^+) \\ &\frac{1}{m_1^*}\frac{d\psi}{dz}\Big|_{z_0^-} = \frac{1}{m_2^*}\frac{d\psi}{dz}\Big|_{z_0^+} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}$$

M – Macierz przejścia

transfer matrix

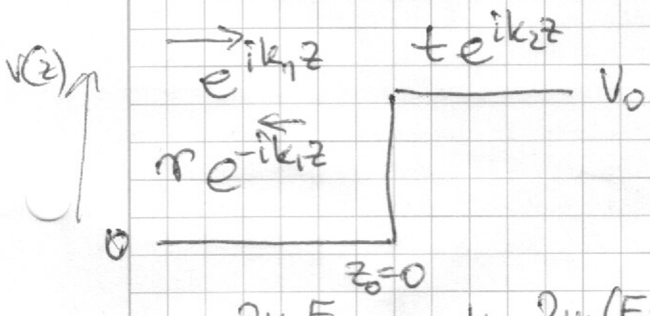
$M \equiv T$

$$C := k_1 m_2^* + k_2 m_1^*$$

$$D := k_1 m_2^* - k_2 m_1^*$$

$$M = \frac{1}{2k_1 m_2^*}\begin{bmatrix} C\exp[i(k_2-k_1)z_0] & D\exp[-i(k_2+k_1)z_0] \\ D\exp[i(k_2+k_1)z_0] & C\exp[-i(k_2-k_1)z_0] \end{bmatrix}$$

Sprawdźmy dla znanego przypadku z kursu mechaniki kwantowej $m_1^* = m_2^* = m$



$$k_1 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad k_2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

$$M = \frac{1}{2k_1}\begin{bmatrix} k_1+k_2 & k_1-k_2 \\ k_1-k_2 & k_1+k_2 \end{bmatrix}$$

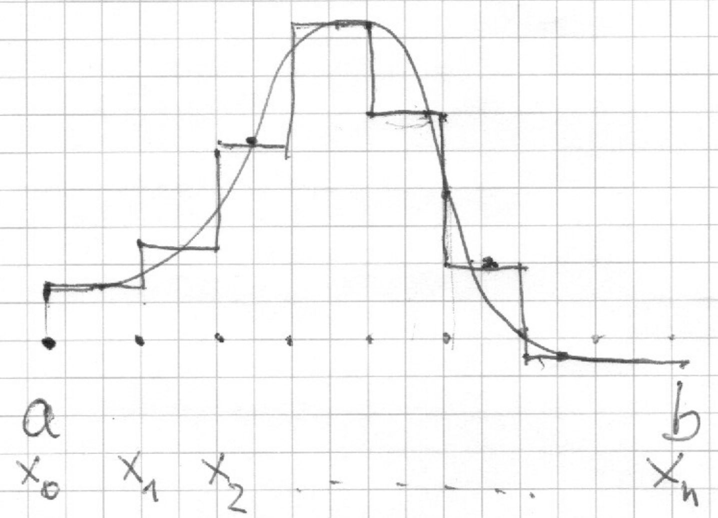
$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow 1 = \frac{k_1+k_2}{2k_1}\, t \Rightarrow t = \frac{2k_1}{k_1+k_2}$$

$$r = \frac{1}{2k_1}(k_1-k_2)t \cdot r = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}|t|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \qquad R = |r|^2 = \frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$(R+T=1)$$

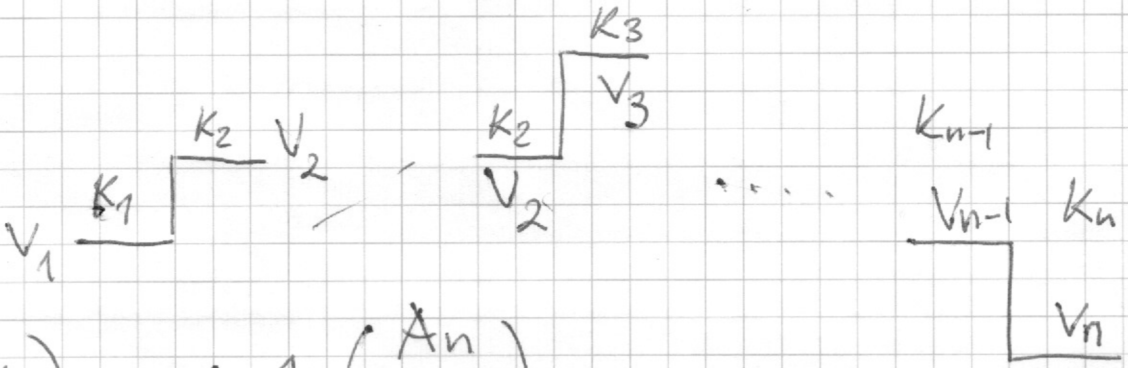
Jak wykorzystać macierz przejścia dla dowolnego potencjału?



$h \equiv \Delta z$

$x_j = a + jh$

$$V_j = V\left(\tfrac{1}{2}(x_j - x_{j-1})\right)$$



$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_{12}\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_{23}\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} = M_{n-1,n}\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

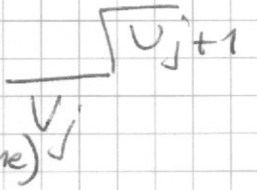
$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_{12} \cdot M_{23} \cdot \ldots \cdot M_{n-1,n} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

$$M = M_{12} M_{23} \quad M_{n-1,n}$$

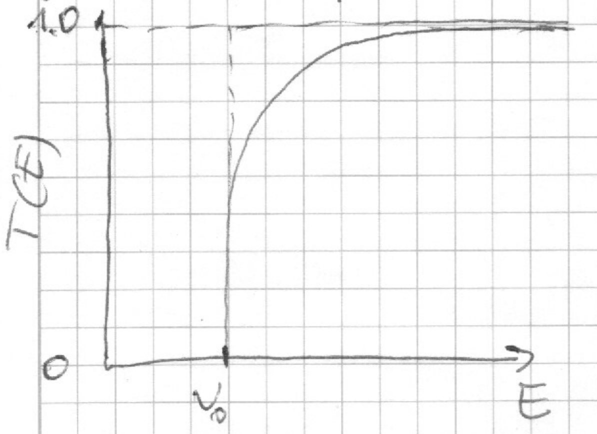
$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}$$

dla fali padającej z lewej strony

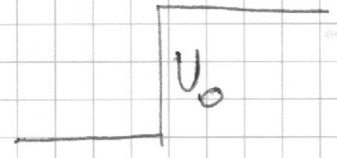
Każda Macierz $M_{j,j+1}$ jest macierzą przejścia dla stopnia

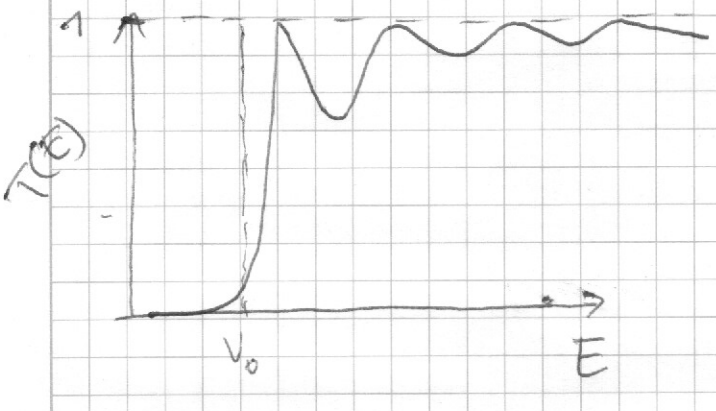


Uwaga: nie może być 'za dużo' mnożeń macierzy (numerycznie niestabilne)

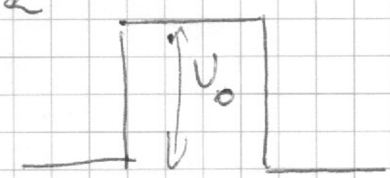


Współczynnik transmisji dla stopnia





T(E) dla bariery



Rezonansowe Tunelowanie