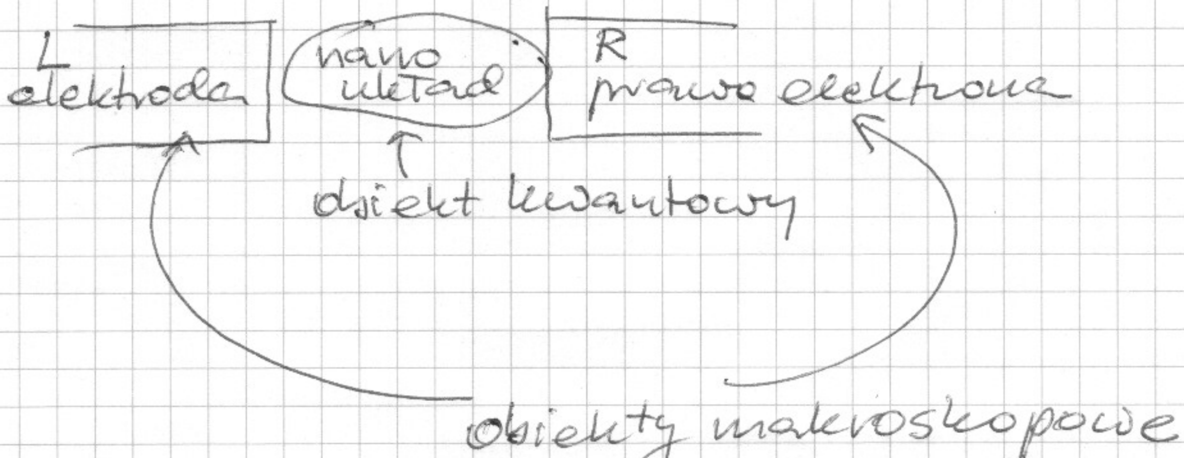
13.11.2012

WYKŁAD 7

TRANSMISJA PRZEZ REGIONY ROZPRASZANIA

Metoda macierzy R w problemach rozpraszania

Nanoukład pomiędzy dwoma elektrodami



μ_L, μ_R – potencjały elektrochemiczne lewej i prawej elektrody

w równowadze $\mu_L = \mu_R$ – nie płynie prąd

Przy przyłożonym napięciu zewnętrznym ϕ

$$\mu_L - \mu_R = \underbrace{e\phi}_{V} \quad \text{płynie prąd}$$

Elektrony z lewej elektrody są transformowane do prawej. Funkcja falowa elektronu zachowuje fazę $\Rightarrow$ transport coherentny

Nie ma rozpraszania – transport balistyczny

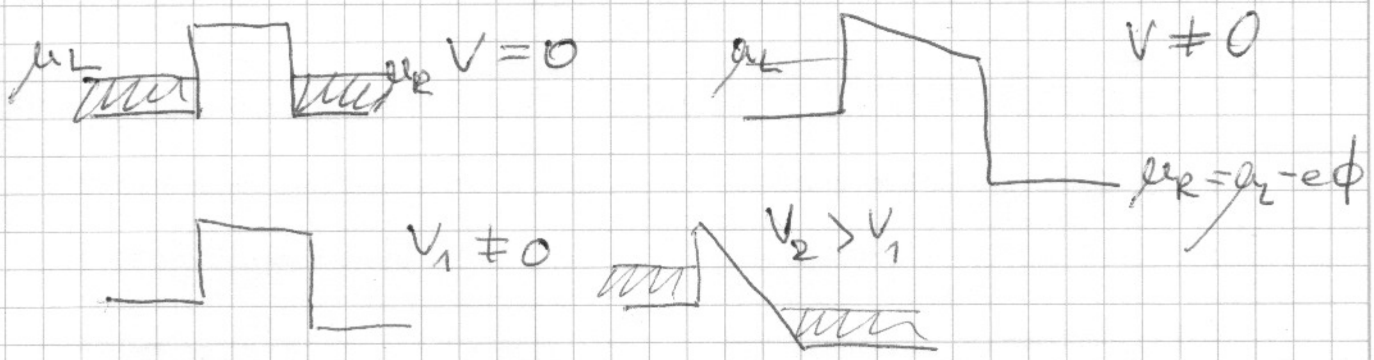
energia zostaje zachowana E

Współczynnik transmisji $T_{L\to R} = T_{R\to L} = T(E,V)$

$$I(V) \sim \int dE\, T(E,V)\big(f(E,\mu_L) - f(E,\mu_R)\big)$$

f – funkcja Fermiego-Diraca

np. Prąd tunelowania przez barierę



Współczynnik transmisji może zależeć od przyłożonego napięcia.

$T(E,V)$ musi zostać policzone dla całego zakresu energii i napięć

Co się dzieje gdy V małe?

$f(\mu_L)-$

$$\mu_R=\mu_L-V$$

$$f(E,\mu_L)-f(E,\mu_L-V)\cong\frac{\partial f}{\partial\mu}V\cong\frac{\partial f}{\partial E}V=$$

$$=\delta(E-\mu_L)V$$

$\mu_L=E_F$ – energia Fermiego w równowadze

$$I(V)\approx\int T(E,V)\,\delta(E-E_F)\,V\,dE=$$

Jeżeli V małe to można przyjąć, że $T(E,V)$ nie zależy od V

Wtedy mamy $I(V)\sim T(E_F)\,V$

Przewodność (Conductance)

$$G=\frac{I}{V}\sim T(E_F)$$

$$G=G_0\,T(E_F)$$

G_0 – kwant przewodności

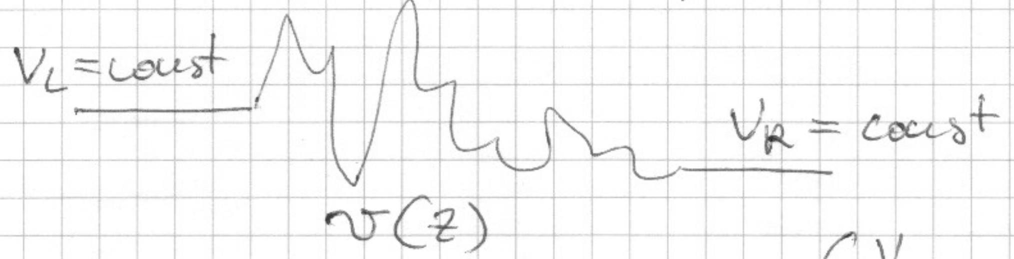
$$G_0=\frac{2e}{h}$$

stała Plancka

$$G_0^{-1}\approx 12.9\,k\Omega$$

Matematyczny formalizm do opisu ~~teo~~ trans kwantowego transportu (koherentnego)

Teoria rozpraszania w potencjale



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

Stan rozproszeniowy jest rozwiązaniem równania Schrödingera

$$\boxed{\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right)\psi(z) = E\psi(z)} \qquad (1)$$

Dwa liniowo niezależne rozwiązania: stany rozproszeniowe dla fali biegnącej z lewej strony i fali z prawej

$$\psi_E(z) = \begin{cases} e^{ik_L z} + r e^{-ik_L z} & z < a \\ \psi_c(z) & a \leq z \leq b \\ t e^{ik_R z} & z > b \end{cases}$$

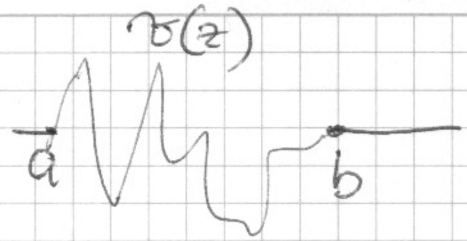
gdzie $k_L = \sqrt{\frac{2m^*(E-V_L)}{\hbar^2}}$ $\quad k_R = \sqrt{\frac{2m^*(E-V_R)}{\hbar^2}}$

Współczynnik transmisji można policzyć zakładając, że potencjał $v(z)$ da się przybliżyć szeregiem stopni.

Dzisiaj przedstawimy inną metodę:

Teoria macierzy-R Wignera

Pamiętamy, że rozpatrywaliśmy poprzednio problem znajdowania stanów związanych dla potencjału $v(z)$ zadanym na skończonym obszarze $[a,b]$



znajdujemy układ funkcji pomocniczych $\phi_i(z)$ będących rozwiązaniem równania Schrödingera na odcinku $[a,b]$ z warunkami brzegowymi: $\phi_i(a)=\phi_a$; $\phi_i(b)=\phi_b$

Uwaga: nie ograniczamy się do stanów związanych

$\phi_i'(a)=\phi_a'$; $\phi_i'(b)=\phi_b'$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m^*}\phi_i''(z)+v(z)\phi_i(z)=\epsilon_i\phi_i(z)} \quad (2)$$

WAŻNE – funkcje $\{\phi_i\}$ tworzą układ stanów zupełnych

Mnożymy równanie (1) przez ϕ_i i całkujemy $\int_a^b dz$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_a^b \phi_i(z)\psi''(z)\,dz+\int_a^b\phi_i(z)v(z)\psi(z)\,dz = E\int_a^b\phi_i(z)\psi(z)\,dz$$

Analogicznie równanie (2) mnożymy przez $\psi(z)$ i całkujemy $\int_a^b dz$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\int_a^b\psi(z)\phi_i''(z)+\int_a^b\psi(z)v(z)\phi_i(z)=\epsilon_i\int_a^b\psi(z)\phi_i(z)\,dz$$

Odejmując stronami równania dostajemy

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\int_a^b\left[\phi_i(z)\psi''(z)-\psi(z)\phi_i''(z)\right]dz=(E-\epsilon_i)\int_a^b\psi(z)\phi_i(z)\,dz$$

lewa strona może zostać wycałkowana przez części

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\phi_i(b)\psi'(b)-\phi_i(a)\psi'(a)-\phi_i'(b)\psi(b)+\phi_i'(a)\psi(a)\right]=$$
$$=(E-\epsilon_i)\int_a^b\psi(z)\phi_i(z)\,dz$$

Funkcję $\psi(z)$ w regionie (odcinku) $[a,b]$ możemy rozłożyć na funkcje $\phi_i(z)$

$$\psi(z) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \phi_i(z)$$

gdzie $c_i = \int_a^b \psi(z) \phi_i(z) dz$

$$\psi(z) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{E-\epsilon_i} [\phi_i(b)\psi'(b) - \phi_i(a)\psi'(a) - \phi_i'(b)\psi(b) + \phi_i'(a)\psi(a)] \phi_i(z) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_i \frac{\phi_i(b)\phi_i(z)}{E-\epsilon_i} \psi'(b) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) \sum_i \frac{\phi_i(a)\phi_i(z)}{E-\epsilon_i} \psi'(a)$$
$$+ \frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_i \frac{\phi_i'(b)\phi_i(z)}{E-\epsilon_i} \psi(b) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_i \frac{\phi_i'(a)\phi_i(z)}{E-\epsilon_i} \psi(a)$$

Zdefiniujemy macierz $R(x, x')$

$$R(x, x') = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_i \frac{\phi_i(x)\phi_i(x')}{E-\epsilon_i}$$

$$R'(x, x') = \frac{dR(x, x')}{dx} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_i \frac{\phi_i'(x)\phi_i(x')}{E-\epsilon_i}$$

$$\boxed{\psi(z) = R(b,z)\psi'(b) - R(a,z)\psi'(a) - R'(b,z)\psi(b) + R'(a,z)\psi(a)}$$

UWAGA: WARUNKI BRZEGOWE NAŁOŻONE NA FUNKCJE ϕ_i SĄ DOWOLNE

Możemy więc wziąć $\left.\begin{array}{l} \phi_i'(a) = 0 \\ \phi_i'(b) = 0 \end{array}\right\}$ nazywane są często warunkami von Neumanna

dygresja: warunki brzegowe $\phi_i(a) = \phi_a$ $\phi_i(b) = \phi_b$ warunkami Dirichleta

Nałożenie warunków von Neumanna ~~po~~ na funkcje ϕ_i powoduje, że

$R'(b,z) = R'(a,z) = 0$ i $\psi(z)$ przyjmuje prostą postać

$$\boxed{\psi(z) = R(b,z)\psi'(b) - R(a,z)\psi'(a)}$$

Jak dostać funkcje ϕ_i spełniające nałożone warunki brzegowe:

1) rozłożyć szukane funkcje $\phi_i(x)$ na funkcje bazy spełniające zadane warunki brzegowe

2) Metoda elementów skończonych

$$\overset{}{0}\ \overset{a}{1}\ \ldots\ \overset{b}{N}\ \ N+1$$

znajdujemy N współczynników $\phi(1) \ldots \phi(N)$

$$\phi'(a)=0 \rightarrow \phi(1)=\phi(0)$$

$$\phi'(b)=0 \rightarrow \phi(N)=\phi(N+1)$$

dla 3 punktowej reprezentacji drugiej pochodnej

$$\phi''(1) = \frac{\phi(0)+\phi(2)-2\phi(1)}{(\Delta z)^2} = \frac{\phi(2)-\phi(1)}{(\Delta z)^2}$$

$$\phi''(N) = \frac{\phi(N-1)+\phi(N+1)-2\phi(N)}{(\Delta z)^2} = \frac{\phi(N-1)-\phi(N)}{(\Delta z)^2}$$

Diagonalne elementy macierzy zmodyfikowane w stosunku do macierzy z warunkami Dirichleta $\phi(a)=0 \quad \phi(b)=0$.

Możemy znaleźć $R(x,x')$ dla każdej energii E z rozwiązań $\phi_i(x)$ dla $x\in[a,b]$, które liczymy tylko raz

Wiemy, że funkcja w obszarze $z<a$ ma postać $\psi(z) = e^{ik_L z} + r e^{-ik_L z}$

a w obszarze $z>b$ $\psi(z) = t e^{ik_R z}$

$$\psi(a) = e^{ik_L a} + r e^{-ik_L a}$$

$$\psi'(a) = ik_L e^{ik_L a} - ik_L r e^{-ik_L a}$$

$$\psi(b) = t e^{ik_R b}$$

$$\psi'(b) = ik_R t e^{ik_R b}$$

$$\psi(a) = R(a,a)\psi'(a) - R(b,a)\psi'(b)$$

$$\psi(b) = R(a,b)\psi'(a) - R(b,b)\psi'(b)$$

① $R(a,a)\left[ik_L e^{ik_L a} - ik_L r e^{-ik_L a}\right]$

$$- R(b,a)\, ik_R t e^{ik_R b} = e^{ik_L a} + r e^{-ik_L a}$$

$$R(a,b)\left[ik_L e^{ik_L a} - ik_L r e^{-ik_L a}\right] - R(b,b)\, ik_R t e^{ik_R b} = t e^{ik_R b}$$

układ równań liniowych 2×2 z dwoma niewiadomymi t & r

$\rightarrow |t^2|$ i $|r^2|$

Rozwiązanie zostawmy programowi Mathematica

$$T(E) = \frac{k_R}{k_L} |t|^2$$

gdzie tkwi zależność od E w k_R, k_L oraz $R(a,a)$, $R(b,b)$, $R(a,b) = R(b,a)$

- W obliczaniu $R(x,x')$ nie możemy wziąć nieskończonej liczby stanów własnych. Sumowanie $\sum_i$ musimy gdzieś urwać. To wpływa na numeryczną dokładność. pierwszy parametr decydujący o dokładności
- wielkość Δz, czyli liczba punktów, na które dzielimy odcinek $[a,b]$ w metodzie różnic skończonych
  drugi parametr decydujący o dokładności
- Formuła na obliczanie drugiej pochodnej
  tutaj 3-ciego rzędu
  można używać metodę różnic skończonych wyższego rzędu
  większa dokładność