

MECHANIKA Kwantowa II B Ćw. #12 8.01.2019

1) Tunelowanie do zlokalizowanego poziomu fermionowego (model Fano-Andersona)

Rozważmy zlokalizowany poziom fermionowy opisany przez operatory d i $d^\dagger$, które sprzęgają się do fermionowych (nieoddzielających) stanów w paśmie energetycznym opisanych za pomocą operatorów

pola $\hat{\psi}(x)$, $\hat{\psi}^\dagger(x)$, przy czym

hamiltonian układu ma postać

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k}_{\hat{H}_0 - \text{część swobodna}} + \Delta d^\dagger d + \underbrace{\gamma [d^\dagger \hat{\psi}(0) + \hat{\psi}^\dagger(0) d]}_{\hat{H}_T - \text{tunelowanie}},$$

gdzie $\hat{\psi}(x) = \sum_k e^{ikx} c_k$ (przyjmujemy $V=1$).

(a) Znajdź przybliżoną funkcję Greena dla swobodnych fermionów dla $x=0$ zdefiniowaną jako:

$G_0(x=0, t) = -i \langle \hat{T} \hat{\psi}(0, t) \hat{\psi}^\dagger(x=0, 0) \rangle$,
 gdzie $\hat{T}$ to operator uporządkowania
 chronologicznego. Zakładamy przy
 tym, że potencjał chemiczny wynosi
 $\mu=0$, temperatura jest równa zero,
 a lokalna gęstość stanów w $x=0$
 jest stała i wynosi ρ_0 .

Rozwiązanie:

Konstansujemy z tego, że $\psi(x=0, t) = \sum_k c_k(t)$,
 wtedy

$$\begin{aligned}
 G_0(x=0, t) &= -i \langle \hat{T} \hat{\psi}(0, t) \hat{\psi}^\dagger(0, 0) \rangle = \\
 &= -i \sum_{k, k'} \langle \hat{T} c_k(t) c_{k'}^\dagger \rangle = \\
 &= -i \sum_{k, k'} \left\{ \Theta(t) \langle c_k(t) c_{k'}^\dagger \rangle - \Theta(-t) \langle c_{k'}^\dagger(t) c_k \rangle \right\}
 \end{aligned}$$

Ewolucja operatora c_k jest dana
 równaniem (obraz Heisenberga):

$$c_k(t) = e^{it\hat{H}_0} c_k e^{-it\hat{H}_0} = c_k e^{-i\varepsilon_k t}$$

ponadto $n_k = f(\epsilon_k) = \langle c_k^\dagger c_k \rangle$.
 $\uparrow$ rozkład Fermiego-Diraca

Mamy więc

$$\langle c_k^\dagger(t) c_k \rangle = e^{-it\epsilon_k} n_k \delta_{kk'}$$

$$\langle c_k c_k^\dagger(t) \rangle = e^{-it\epsilon_k} (1 - n_k) \delta_{kk'}$$

Dostajemy zatem

$$G_0(x=0, t) = -i \sum_k e^{-it\epsilon_k} \{ \theta(t)(1 - n_k) - \theta(-t)n_k \}$$

Wykonujemy transformata Fouriera:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{it\omega} e^{-it\epsilon_k} \theta(t) = \left\{ \theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{-ixt}}{x + i0^+} \right\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i}{2\pi} dt e^{it(\omega - \epsilon_k - x)} \frac{1}{x + i0^+} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta(\omega - \epsilon_k - x)}{x + i0^+} dx =$$

$$= \frac{i}{\omega - \epsilon_k + i0^+} \frac{1}{2\pi}$$

Analogicznie dla drugiego wkładu:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{it\omega} \left[-e^{-it\epsilon_k} \theta(-t) \right] = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{i}{2\pi} e^{it(\omega - \epsilon_k + x)} \frac{1}{x + i0^+} =$$

$$= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\delta(\omega - \varepsilon_k + x)}{x + i0^+} = \frac{-i}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon_k - \omega + i0^+} =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{i}{\omega - \varepsilon_k - i0^+}$$

Dostajemy zatem

$$G_0(x=0, \omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_k \left\{ \frac{1-n_k}{\omega - \varepsilon_k + i0^+} + \frac{n_k}{\omega - \varepsilon_k - i0^+} \right\}$$

Dla $\mu=0$ mamy, że

$$n_k \xrightarrow{T \rightarrow 0} \theta(-\varepsilon_k), \text{ czyli } 1-n_k = \theta(\varepsilon_k),$$

zatem

$$G_0 = \frac{1}{2\pi} \sum_k \left\{ \frac{\theta(\varepsilon_k)}{\omega - \varepsilon_k + i0^+} + \frac{\theta(-\varepsilon_k)}{\omega - \varepsilon_k - i0^+} \right\} =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i0^+ \operatorname{sgn}(\varepsilon_k)}$$

Wyrażenie podcałkowe zależy od k tylko poprzez ε_k , możemy wykonać sumowanie wykorzystując gęstość stanów równą ρ_0 na mocy przyjętych założeń;

$$G_0(x=0, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_0 d\varepsilon}{\omega - \varepsilon + i0^+ \operatorname{sgn}(\varepsilon)} =$$

$$= \frac{f_0}{2\pi} \left\{ \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\omega - \varepsilon + i0^+} + \int_{-\infty}^0 \frac{d\varepsilon}{\omega - \varepsilon - i0^+} \right\} =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{konstanty z tożsamości Sokhotskiego} \\ \frac{1}{\omega - \varepsilon \pm i0^+} = P\left(\frac{1}{\omega - \varepsilon}\right) \mp i\pi \delta(\omega - \varepsilon), \\ \text{przy } \text{sym} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} P\left(\frac{1}{\omega - \varepsilon}\right) d\varepsilon = \lim_{\substack{\delta \rightarrow 0^+ \\ A \rightarrow \infty}} \left[\int_{-A}^{-\delta} \frac{1}{\omega - \varepsilon} d\varepsilon + \int_{\delta}^A \frac{1}{\omega - \varepsilon} d\varepsilon \right] = \\ = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[-\log|\omega - \varepsilon| \Big|_{-A}^{-\delta} - \log|\omega - \varepsilon| \Big|_{\delta}^A \right] = \\ = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[-\log|\omega + \delta| + \log|\omega + A| - \log|\omega - A| + \right. \\ \left. \log|\omega - \delta| \right] = \\ = \lim_{\substack{\delta \rightarrow 0^+ \\ A \rightarrow \infty}} \left[\log\left|\frac{\omega - \delta}{\omega + \delta}\right| + \log\left|\frac{\omega + A}{\omega - A}\right| \right] = 0 \end{array} \right\} =$$

$$= \frac{f_0}{2\pi} \left\{ \int_0^{\infty} d\varepsilon [-i\pi \delta(\omega - \varepsilon)] + \int_{-\infty}^0 d\varepsilon [i\pi \delta(\omega - \varepsilon)] \right\} =$$

$$= \frac{f_0}{2\pi} \left\{ -i\pi \theta(\omega) + i\pi \theta(-\omega) \right\} = -\frac{i}{2} f_0 \operatorname{sgn}(\omega)$$

(b) Następnie definiujemy przy pomocy funkcję Greena dla poziomu fermionowego

$$D(t) = -i \langle \hat{T} d(t) d^\dagger(0) \rangle$$

a także mieszając funkcję Greena:

$$G_{d\psi}(x,t) = -i \langle \hat{T} \psi(x,t) d^\dagger(0) \rangle.$$

Uwzględniając także oddziaływanie między poziomem fermionowym, a fermionami pesma wyprowadzić dla nich równania ruchu.

Rozwiązanie:

Wprowadzamy oznaczenia: $d(t) = d_t$, $d(0) = d_0$

Korzystając z równania Heisenberga

znajdujemy ewolucję operatora d_t :

$$\begin{aligned} \partial_t d_t &= -i [d_t, \hat{H}] = -i [e^{it\hat{H}} d e^{-it\hat{H}}, \hat{H}] = \\ &= -i e^{it\hat{H}} [d, \hat{H}] e^{-it\hat{H}}, \end{aligned}$$

przy czym

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \Delta d^\dagger d + \gamma [d^\dagger \hat{\psi}(x=0) + \hat{\psi}^\dagger(x=0) d]$$

Ponieważ $d^2 = 0$ mamy, że

$$[d, d^\dagger d] = \underbrace{d d^\dagger d}_{1-d^\dagger d} - \underbrace{d^\dagger d d}_0 = (1-d^\dagger d)d = d$$

oraz

$$[d, d^\dagger \hat{\psi} + \hat{\psi}^\dagger d] = d d^\dagger \hat{\psi} - d^\dagger \hat{\psi} d = \underbrace{(d d^\dagger + d^\dagger d)}_{1-d^\dagger d} \hat{\psi} = \hat{\psi}$$

dostajemy więc, że

$$[d, \hat{H}] = \Delta d + \gamma \hat{\psi}(x=0)$$

czyli ostatecznie

$$\partial_t d_t = -i e^{it\hat{H}} (\Delta d + \gamma \hat{\psi}(x=0)) e^{-it\hat{H}} = -i \Delta d_t - i \gamma \hat{\psi}(x=0_t)$$

Wykorzystamy ten wynik do policzenia
przyciag nowej funkcji Greena $D(t)$:

$$D(t) = -i \langle \hat{T} d_t d_0^\dagger \rangle = -i \theta(t) \langle d_t d_0^\dagger \rangle + i \theta(-t) \langle d_0^\dagger d_t \rangle$$

Szukamy równania ruchu dla $D(t)$:

$$\begin{aligned} \partial_t D(t) = & -i \delta(t) \langle d_t d_0^\dagger \rangle - i \theta(t) \langle \partial_t d_t d_0^\dagger \rangle + \\ & -i \delta(t) \langle d_0^\dagger d_t \rangle + i \theta(-t) \langle d_0^\dagger \partial_t d_t \rangle \end{aligned}$$

Korzystamy z faktu, że

$$-i \delta(t) \langle d_t d_0^\dagger + d_0^\dagger d_t \rangle = -i \delta(t) \langle \underbrace{\{d_0, d_0^\dagger\}}_1 \rangle = -i \delta(t)$$

ponadto pozostałe wyrazy możemy przepisać
jako:

$$\begin{aligned} -i\theta(t) \langle \partial_t d_t d_0^+ \rangle + i\theta(-t) \langle d_0^+ \partial_t d_t \rangle &= \\ &= -i\theta(t) \langle [-i\Delta d_t - i\gamma \hat{\psi}(0,t)] d_0^+ \rangle + \\ &\quad + i\theta(t) \langle d_0^+ [-i\Delta d_t - i\gamma \hat{\psi}(0,t)] \rangle = \\ &= -i\Delta D(t) - i\gamma G_{\psi d}(x=0,t), \end{aligned}$$

gdzie $G_{\psi d}(x=0,t) = -i \langle \hat{\psi}(0,t) d_0^+ \rangle$.

Dostaliśmy zatem pierwsze równanie
ruchu:

$$\partial_t D(t) = -i\delta(t) - i\Delta D(t) - i\gamma G_{\psi d}(0,t)$$

$$[\partial_t + i\Delta] D(t) = -i\delta(t) - i\gamma G_{\psi d}(0,t) \quad (*)$$

Teraz będziemy szukać równania ruchu
dla mieszanej funkcji Greena $G_{\psi d}$.

Najpierw szukamy

$$\partial_t \hat{\psi}(x,t) = -i e^{it\hat{H}} [\hat{\psi}(x), \hat{H}] e^{-it\hat{H}}$$

Aby policzyć ten komutator musimy
wyrazić swobodny hamiltonian fermionów

w paśmie za pomocą $\hat{\psi}$ i $\hat{\psi}^\dagger$.

Wykorzystujemy, że (pamiętamy, że $V=1$)

$$\hat{\psi}(x) = \sum_k e^{ikx} c_k \Leftrightarrow c_k = \int dx \hat{\psi}(x) e^{-ikx},$$

czyli używając tej relacji dostajemy, że

$$\sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k = \int dx \int dx' \hat{\psi}^\dagger(x) \tilde{E}(x-x') \hat{\psi}(x'),$$

gdzie jądro całkowe $\tilde{E}(x-x')$ jest

$$\text{postaci } \tilde{E}(x-x') = \sum_k \epsilon_k e^{-ik(x-x')}, \text{ wtedy}$$

$$[\hat{\psi}(x), \{ \gamma [d^\dagger \hat{\psi}(0) + \hat{\psi}^\dagger(0) d] + \int dx' \int dx'' \hat{\psi}^\dagger(x') \tilde{E}(x'-x'') \hat{\psi}(x'') \}] =$$

$$= \gamma \delta(x) d + \int dx' \tilde{E}(x-x') \hat{\psi}(x'),$$

czyli

$$\partial_t \hat{\psi}(x,t) = -i\gamma \delta(x) d_t - i \int dx' \tilde{E}(x-x') \hat{\psi}(x',t)$$

Wykonując analogiczny rachunek dla

albo $D(t)$ dostajemy, że

$$[\partial_t + iK] G_{\psi d}(x,t) = -i\gamma \delta(x) D(t), \quad (**)$$

$$\text{gdzie } (KG_{\psi d})(x,t) = \int dx' \tilde{E}(x-x') G_{\psi d}(x',t).$$

(c) Korzystając z tego, że $D_0(t)$ i $G_0(x,t)$ są propagatorami dla problemu nieoddziałującego (tj. $x=0$)

$$[\partial_t + i\Delta] D(t) = -i\delta(t)$$

$$[\partial_t + iK] G_0(x,t) = -i\delta(t)\delta(x)$$

wyprowadzić przy pomocy powyższych relacji równanie Dysona dla przybliżonej funkcji Greena poziomu fermionowego $D(\omega)$. Następnie je rozwiąż i znajdź $D(\omega)$ wykorzystując wynik z punktu (a).

Rozwiązanie:

Swobodne funkcje Greena $D_0(t) = -i\langle \hat{T} d_t d_0^\dagger \rangle$ oraz $G_0(x,t) = -i\langle \hat{T} \hat{\psi}(0,t) \hat{\psi}^\dagger(x,0) \rangle$ spełniają równania:

$$[\partial_t + i\Delta] D_0(t) = -i\delta(t) \quad (\square)$$

$$[\partial_t + iK] G_0(x,t) = -i\delta(t)\delta(x)$$

Wielkiny zatem, że funkcje $D_0(t)$ i $G_0(x,t)$

są funkcjami Greena w matematycznym sensie, tj. odpowiednio jako odwrotność op. różniczkowego $[\partial_t + i\Delta]$ oraz $[\partial_t + iK]$.

Równania (*) i (**) mogą być rozwiązywane jako odpowiednie sploty:

$$D(t) = \int dt' [\delta(t') + \gamma G_{rd}(0, t')] D_0(t-t')$$

$$G_{4d}(x, t) = \int dt' \gamma D(t') G_0(x, t-t')$$

wykonywując transformację Fouriera

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{it\omega} F(t)$$

dostajemy, że

$$D(\omega) = [1 + 2\pi\gamma G_{rd}(0, \omega)] D_0(\omega)$$

$$G_{4d}(x, \omega) = 2\pi\gamma D(\omega) G_0(x, \omega),$$

ponieważ skorzystaliśmy, że transformata Fouriera splotu to iloczyn transformat Fouriera:

$$F_\omega(u(t) * v(t)) = F_\omega(u(t)) \cdot F_\omega(v(t)).$$

Wstawiając drugie równanie do pierwszego dostajemy:

$$D(\omega) = [1 + (2\pi\gamma)^2 D(\omega) G_0(0, \omega)] D_0(\omega) =$$

$$= D_0(\omega) + (2\pi\gamma)^2 D(\omega) G_0(0, \omega) D_0(\omega)$$

Jest to równanie Dysona.

$$D_0(\omega) = D(\omega) [1 - (2\pi\gamma)^2 G_0(0, \omega) D_0(\omega)]$$

$$D(\omega) = \frac{D_0(\omega)}{1 - (2\pi\gamma)^2 G_0(0, \omega) D_0(\omega)} =$$

$$= \frac{1}{D_0^{-1}(\omega) - (2\pi\gamma)^2 G_0(0, \omega)}$$

Zgodnie z definicją $\Sigma'(\omega) = (2\pi\gamma)^2 G_0(0, \omega)$ jest selfenergią. Tak jak pokazaliśmy w punkcie (a) mamy, że

$$G_0(0, \omega) = -\frac{i}{2} \rho_0 \operatorname{sgn}(\omega)$$

Postać $D_0(\omega)$ dostajemy z równania ruchu:

$$[\partial_t + iD] D_0(\omega) = -i\delta(t)$$

wykazując obustronnie transformację Fouriera mamy:

$$[-i\omega + i\Delta] D_0(\omega) = -i \Rightarrow D_0(\omega) = \frac{1}{\omega - \Delta}$$

Ostatecznie dostajemy, że

$$D(\omega) = \frac{1}{\omega - \Delta + i\Gamma \operatorname{sgn}(\omega)}$$

gdzie $\Gamma = 2\pi^2 \gamma^2 \rho_0$.

(d) Wychodząc z przynajmniej jednej funkcji Greena znajdziemy retardowaną funkcję Greena dla zlokalizowanego poziomu fermionowego, a także odpowiadającą jej funkcję spektralną. Zinterpretuj uzyskany wynik.

Rozwiązanie:

Retardowana funkcja Greena z przynajmniej jedną funkcją Greena jest związana równaniem:

$$D^R(\omega) = \begin{cases} D(\omega) & , \omega > 0 \\ D^*(\omega) & , \omega < 0, \end{cases}$$

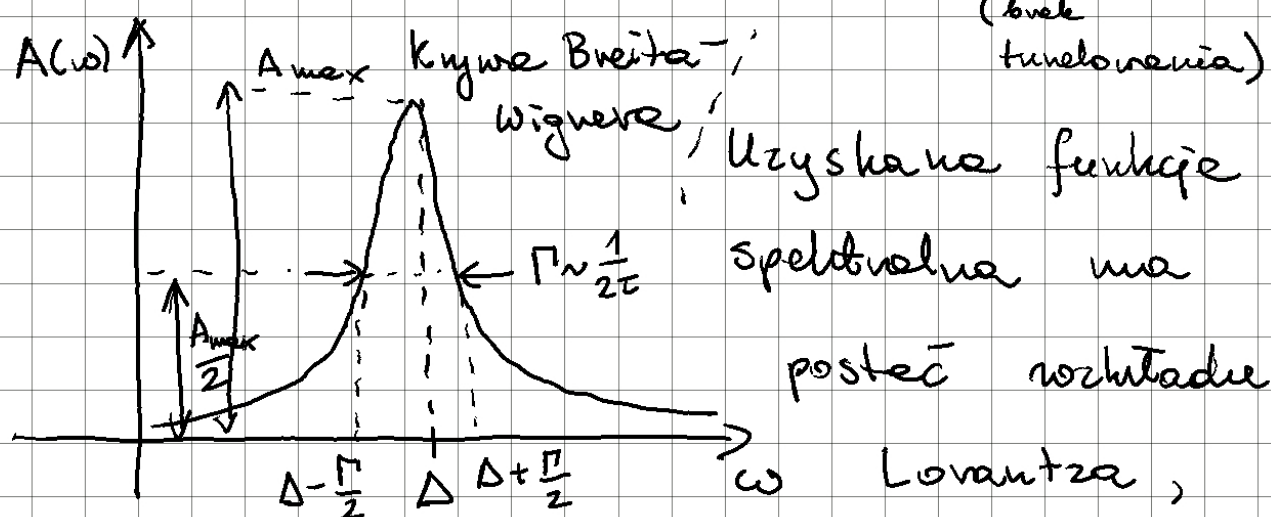
czyli konsekwentnie z tego, że

$D(\omega) = \frac{1}{\omega - \Delta + i\Gamma \operatorname{sgn}(\omega)}$, czyli dostajemy, że

$$D^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \Delta + i\Gamma}$$

Funkcja spektralna jest związana z rzeczywistą urojoną $D^R(\omega)$ relacją

$$A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} D^R(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \Delta)^2 + \Gamma^2} \xrightarrow[\text{(broski tunelowania)}]{\Gamma \rightarrow 0} \delta(\omega - \Delta)$$



który dla $\Gamma \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$), czyli braku tunelowania dąży do $\delta(\omega - \Delta)$.

Szerokość podstawowa uzyskanego pikie Γ , czyli też zwana atenuacją odpowiada odwrotności czasowi życia fermionu na poziomie zlokalizowanym.

Model ten może opisywać np. elektrony pasma przewodnictwa lokalizujące się na pojedynczej domieszce w półprzewodniku.

Zwróćmy uwagę, że część energii self-energii jest związana z czasem życia nośnika, a część wynika z wiązania się z przesunięciem położenia piku.