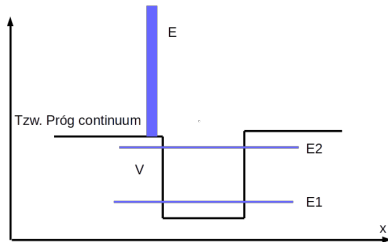


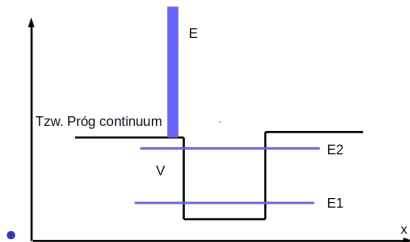
# Zdelokalizowane stany stacjonarne



- umiemy wyznaczać numerycznie energie i funkcje falowe stanów zlokalizowanych - tzw. dyskretna część widma, stany związane
- równie ważna jest część ciągła widma, powyżej progu continuum, gdzie są stany niosące prąd, stowarzyszone z ruchem - tam podstawowa informacja to prawdopodobieństwo przejścia, rozpraszania, jego rozkład kątowy (rozpraszanie Rutherforda) zależność od energii
- w kwantowej teorii transportu ładunku z rozpraszania na powierzchni Fermiego liczy się przewodność układu (więcej Landauer).

# Cząstka w próżni

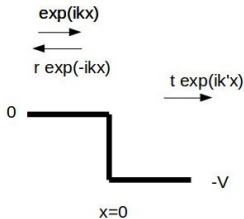
- daleko od obiektu rozpraszania stały potencjał, niech będzie  $V(x) = 0$
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E(x) = E\psi_E(x)$
- $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- $\psi_E(x) = C \exp(\pm ikx)$
- funkcje własne pędu,  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 
  - $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi_p(x) = p\phi_p(x)$
  - $\phi_p(x) = C \exp(\frac{ip}{\hbar} x)$ , wniosek  $p = \hbar k$
  - zwyczajowo (tr. Fouriera)  $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$



# prąd gęstości prawdopodobieństwa

- $\rho(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$
- $i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \Psi^*(x, t)H\Psi(x, t) - \Psi(x, t)H\Psi^*(x, t)$
- wyrażenie z potencjałem znika
- $i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Psi^*(x, t)\nabla^2\Psi(x, t) - \Psi(x, t)\nabla^2\Psi^*(x, t) \right)$
- równanie ciągłości  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$
- $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)$
- dla  $\Psi = \exp(ikx)$ :  $j_x = \frac{\hbar k}{m}$
- $\frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$  (odpowiednik prędkości)
- wniosek: jeśli funkcja rzeczywista, prąd nie płynie
- jakie poznałyśmy stany stacjonarne, w których funkcja była rzeczywista?

# problemy rozproszeniowe

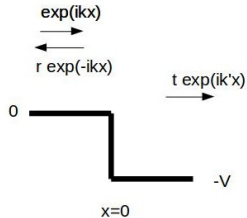


- problemy rozpraszania: rozwiązujemy równanie Schrödingera  $H\psi = E\psi$  dla danej energii (ogólnie 2 rozwiązania  $\hbar^2 k^2 / 2m, \pm k$ , ruch w prawo i w lewo).
- cząstka pada z lewej strony na skok potencjału

- $\psi_{x < 0} = \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$
- zakładamy amplitudę 1 fali padającej (rozwiązujemy równanie własne, wektory własne określone z dokładnością do stałej multiplikatywnej)
- $r$  - amplituda fali odbitej,  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$
- dla  $x > 0$  fala, która przeszła  $\psi_{x > 0} = t \exp(ik'x)$ ,  $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V = E$
- ciągłość prądu prawdopodobieństwa  $\psi_{x < 0}(x=0) = \psi_{x > 0}(x=0)$ , oraz  $\psi'_{x < 0}(x=0) = \psi'_{x > 0}(x=0)$
- $1 + r = t, k(1 - r) = tk'$
- $r = \frac{k-k'}{k'+k}, t = \frac{2k}{k'+k}$
- $V = 0, k' = k$ , nie ma odbicia (nie ma się od czego odbić)

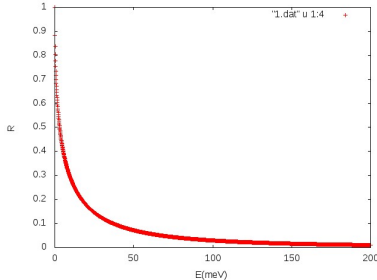
# problemy rozproszeniowe

- $\psi_{x<0} = \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$
- $\Psi_{x>0} = t \exp(ik'x), \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V = E$
- $r = \frac{k-k'}{k'+k}, t = \frac{2k}{k'+k}$
- $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$
- prąd gęstości pstwa fali padającej :  $j_i = \frac{\hbar k}{2m}$ ,  
odbitej  $j_r = |r|^2 \frac{\hbar k}{2m}, j_t = |t|^2 \frac{\hbar k'}{2m}$
- BTW: wiemy że  $j_i - j_r = j_t = j \neq f(x)$
- prawdopodobieństwo odbicia  $R = \frac{j_r}{j_i}$ ,  
transmisji  $T = \frac{j_t}{j_i}$  i  $T + R = 1$
- $R = \frac{|k-k'|^2}{|k'+k|^2}$
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V = E$

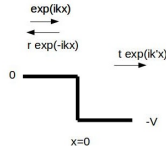


# problemy rozproszeniowe

- $R = \frac{|k' - k|^2}{|k' + k|^2}$
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V = E$



- odbicie - bardzo prawdopodobne, szczególnie dla niskich energii
- zjawisko bez odpowiednika w fizyce klasycznej



- 
- skok potencjału: w (nano)technologii półprzewodnikowej kontakt dwóch półprzewodników o inaczej położonych pasmach przewodnictwa
- zamiast masy elektronu w próżni tzw. masa efektywna  $m = 0.067 m_0$ , skok potencjału 100 meV

# rozwiązanie numeryczne



- z tego co jest wyżej wybrać np. barierę tunelową, a tutaj opisać cząstkę pada z lewej strony na przeszkodę - narysować ogólny przypadek
- $\psi_{x < 0} = p \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$
- $p, r$  - amplitudy fali padającej i odbitej,  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$
- dla  $x > 0$  fala która przeszła  $\psi_{x > 0} = t \exp(ik'x)$ ,  $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E - V$

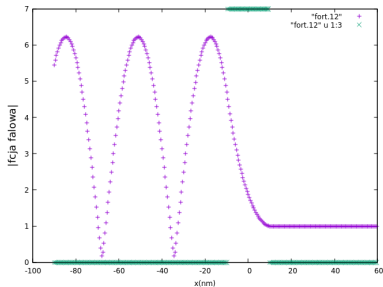
# rozwiązanie numeryczne



- z tego co jest wyżej wybrać np. barierę tunelową, a tutaj opisać cząstkę pada z lewej strony na przeszkodę - narysować ogólny przypadek
- $\psi_{x < 0} = p \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$
- $p, r$  - amplitudy fali padającej i odbitej,  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$
- dla  $x > 0$  fala która przeszła  $\psi_{x > 0} = t \exp(ik'x)$ ,  $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E + V$
- procedura numeryczna: w obszarze po prawej - 2 ostatnie punkty siatki różnicowej  $\psi_{x > 0}(x_{ost}) = 1$ ,  $\psi_{x > 0}(x_{ost} - \Delta x) = \exp(-ik' \Delta x)$
- zakładamy w ten sposób  $t = 1$  oraz narzucamy  $E$
- całkujemy równanie Schrodingera od prawej do lewej :
- $\psi(x - \Delta x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Delta x^2 \psi(x) - \psi(x + \Delta x) + 2\psi(x)$



# rozwiązanie numeryczne

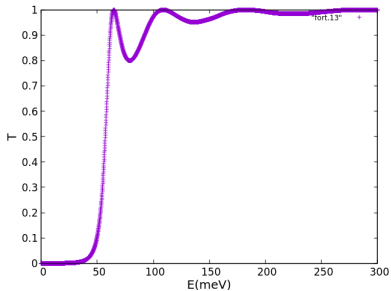


(bariera

potencjału,  $V = 10 \text{ meV}$ ,  $E = 5 \text{ meV}$ )

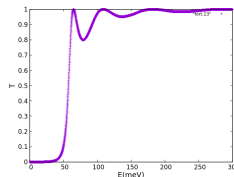
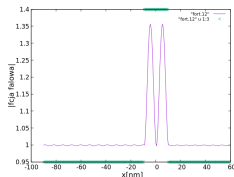
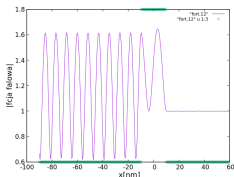
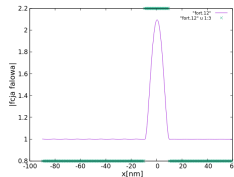
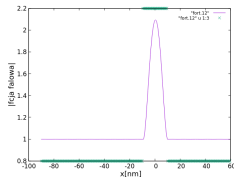
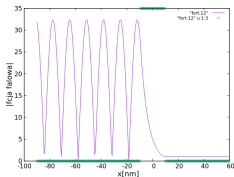
- $\Psi_{x < 0} = p \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$ ,  $\Psi(x > 0) = t \exp(ikx)$
- $\Psi_{x > 0}(x_{ost}) = 1$ ,  $\Psi_{x > 0}(x_{ost} - \Delta x) = \exp(-ik\Delta x)$
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$
- $\Psi(x - \Delta x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Delta x^2 \Psi(x) - \Psi(x + \Delta x) + 2\Psi(x)$
- $T$  i  $R$  znajdziemy po wyznaczeniu  $p$  i / lub  $r$ , URL:
- $\Psi_{x < 0}(x_1) = p \exp(ikx_1) + r \exp(-ikx_1)$
- $\Psi_{x < 0}(x_2) = p \exp(ikx_2) + r \exp(-ikx_2)$
- $R = \frac{|r|^2}{|p|^2}$ ,  $T = 1 - R = \frac{1}{|p|^2} \frac{k'}{k}$

# rozwiązanie numeryczne



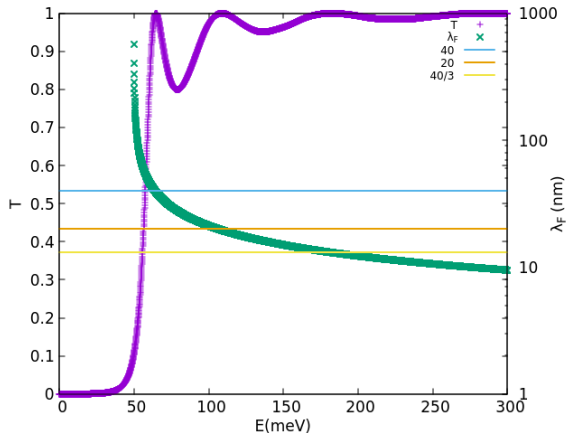
- 
- wynik dla bariery o wysokości  $V = 50$  meV i szerokości 20 nm.
- analiza rozwiązań poniżej 50 meV - efekt tunelowy - jak wyżej : długość fali dB

# rozwiązanie numeryczne



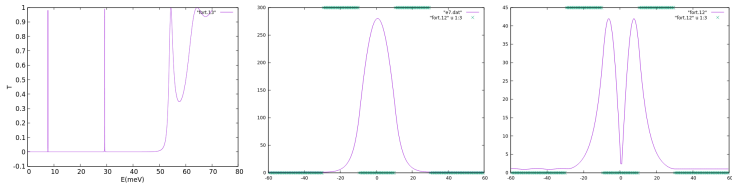
- wyniki dla (od lewej od góry) 32 meV, 64.75 meV, 64.78 meV, 79.03 meV, 108.96 meV

# rozwiązanie numeryczne



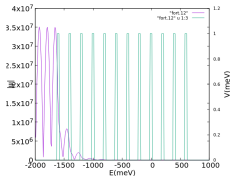
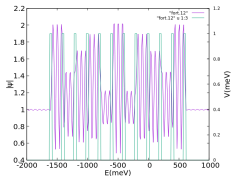
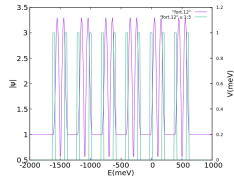
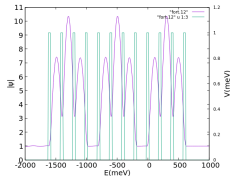
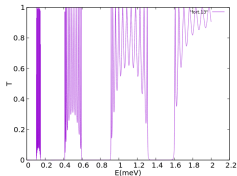
- 
- wektor Fermiego w barierze  $k_F = \sqrt{2m(E - V)/\hbar^2}$
- długość Fermiego  $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$
- warunek rezonansu  $\frac{n}{2}\lambda_F = W$ , gdzie  $W$  - szerokość bariery, tutaj 20 nm
- $\lambda_F = \frac{2W}{n}$

# podwójna bariera



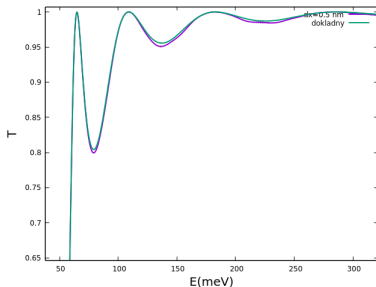
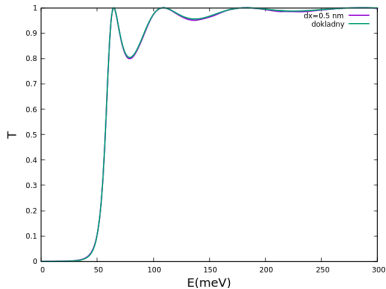
- pojawiają się rezonanse poniżej bariery - tym razem związane z falami stojącymi w studni - jest głęboka penetracja do bariery, więc efektywna szerokość studni jest większa niż nominalna
- ściśle zgodność z  $k_F = \sqrt{2m(E)/\hbar^2}$ ,  $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$ ,  $\lambda_F = \frac{2W}{n}$
- dostaniemy dla dużej wysokości bariery, przy niskich energiach

# supersieć



- energie w meV, .1095, .4896, 1.1325, 0.3 - od lewej od gory
- filtr na energie, w optyce podobny filtr - filtr Bragga

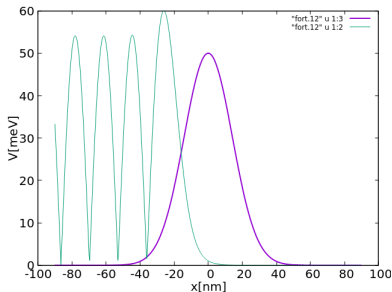
# dokładność



- bariera, wysokość 50 meV, szerokość 10nm, wynik numeryczny (fioletowy) vs analityczny

# dokładność

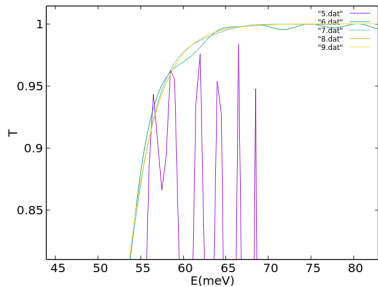
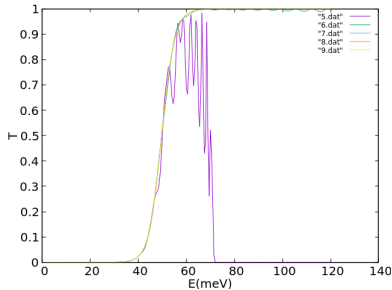
- Metoda różnic skończonych ma dawać dokładne wyniki w funkcji  $dx \rightarrow 0$ , gdy ilorazy różnicowe dążą do dokładnej pochodnej
- wygodniej dyskutować jej dokładność dla potencjału gładkiego, bo schodkowy efektywnie może zmieniać swoją szerokość ze zmianą  $dx$ .



- liczba oczek siatki  $N = 2^n$
- $dx = \frac{180}{N}$  nm

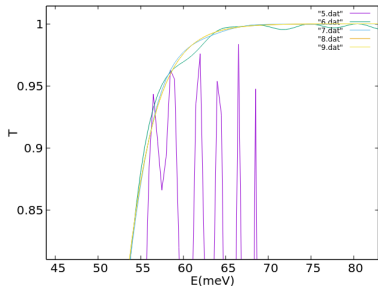
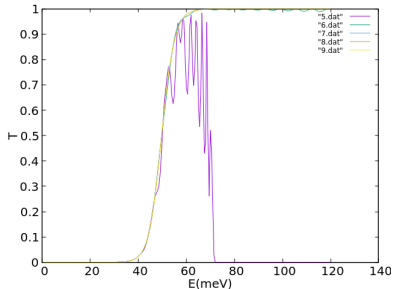


# dokładność



- liczba oczek siatki  $N = 2^n$
- $dx = \frac{180}{N}$  nm
- przy niskiej energii - szybka zbieżność w funkcji  $n$ , różnice przy wyższej z katastrofą dla  $n = 5$
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$ ,  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ , im wyższa energia, tym większa zmienność funkcji falowej, wymagająca gęstszej siatki
- o dokładności rachunku decyduje dokładność ilorazu różnicowego

# dokładność



- liczba oczek siatki  $N = 2^n$
- $dx = \frac{180}{N}$  nm
- przy niskiej energii - szybka zbieżność w funkcji  $n$ , różnice przy wyższej z katastrofą dla  $n = 5$
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$ ,  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ , im wyższa energia, tym większa zmienność funkcji falowej, wymagająca gęstszej siatki
- o dokładności rachunku decyduje dokładność ilorazu różnicowego

# dokładność ilorazu różnicowego

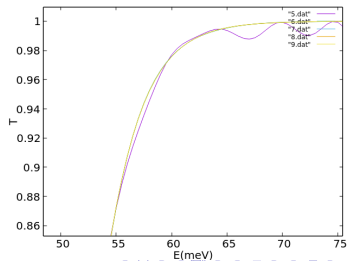
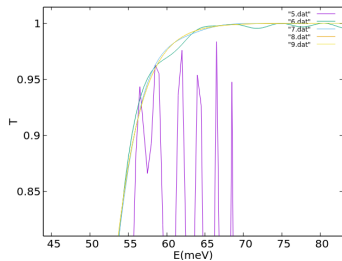
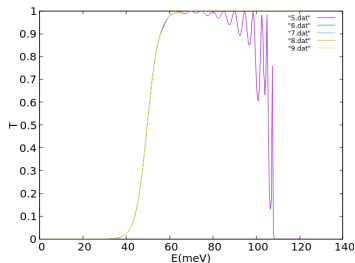
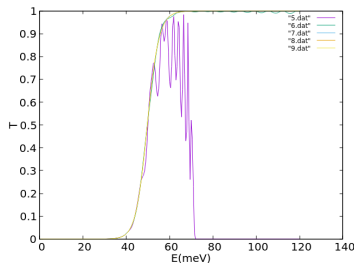
- funkcja falowa jest ciągła z pochodną, weźmy jednak gładszą funkcję  $f$  klasy  $C^\infty$
- szereg Taylora
- $f(x + dx) = f(x) + dx \frac{df}{dx} \Big|_x + \frac{dx^2}{2} \frac{d^2f}{dx^2} \Big|_x + \frac{dx^3}{3!} \frac{d^3f}{dx^3} \Big|_x + \frac{dx^4}{4!} \frac{d^4f}{dx^4} \Big|_x + \frac{dx^5}{5!} \frac{d^5f}{dx^5} \Big|_x + \frac{dx^6}{6!} \frac{d^6f}{dx^6} \Big|_\xi$
- gdzie  $\xi \in (x, x + dx)$ , Reszta Cauchy  $\frac{dx^6}{6!} \frac{d^6f}{dx^6} \Big|_\xi$ . Wiadomo że jest ona  $O(dx^6)$
- $f(x - dx) = f(x) - dx \frac{df}{dx} \Big|_x + \frac{dx^2}{2} \frac{d^2f}{dx^2} \Big|_x - \frac{dx^3}{3!} \frac{d^3f}{dx^3} \Big|_x + \frac{dx^4}{4!} \frac{d^4f}{dx^4} \Big|_x - \frac{dx^5}{5!} \frac{d^5f}{dx^5} \Big|_x + \frac{dx^6}{6!} \frac{d^6f}{dx^6} \Big|_\eta$
- czerwone + niebieskie stronami, z tego wyliczyć wyrażenie z drugą pochodną
- $dx^2 \frac{d^2f}{dx^2} \Big|_x = f(x + dx) + f(x - dx) - 2f(x) + \frac{dx^4}{12} \frac{d^4f}{dx^4} \Big|_x + O(dx^6)$
- $\frac{d^2f}{dx^2} \Big|_x = \frac{f(x+dx)+f(x-dx)-2f(x)}{dx^2} + \frac{dx^2}{12} \frac{d^4f}{dx^4} \Big|_x + O(dx^4)$
- my używaliśmy
- $\frac{d^2f}{dx^2} \Big|_x = \frac{f(x+dx)+f(x-dx)-2f(x)}{dx^2} + O(dx^2)$
- dla równania różniczkowego  $\frac{d^2f}{dx^2} = P(x) = S(x) - g(x)u(x)$  można jednak czwartą pochodną po  $f$  wyliczyć

# dokładność ilorazu różnicowego

- $\frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_x = \frac{f(x+dx)+f(x-dx)-2f(x)}{dx^2} + \frac{dx^2}{12} \frac{d^4 f}{dx^4} \Big|_x + O(dx^4)$
- my używaliśmy
- $\frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_x = \frac{f(x+dx)+f(x-dx)-2f(x)}{dx^2} + O(dx^2)$
- dla równania różniczkowego  $\frac{d^2 f}{dx^2} = P(x)$  można jednak czwartą pochodną po  $f$  wyliczyć
- $\frac{d^4 f}{dx^4} = \frac{d^2 P}{dx^2} = \frac{P(x+dx)+P(x-dx)-2P(x)}{dx^2} + O(dx^2)$
- po wstawieniu do niebieskiego błąd pozostanie  $O(dx^4)$
- $\frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_x = \frac{f(x+dx)+f(x-dx)-2f(x)}{dx^2} + \frac{1}{12} (P(x+dx) + P(x-dx) - 2P(x)) + O(dx^4)$
- **Metoda Numerowa (Numerov)**
- dla równania  $\frac{d^2 \Psi}{dx^2} \Big|_x = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Psi(x)$
- $\left[ 1 + \frac{dx^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x+dx)) \right] \Psi(x+dx) - 2 \left[ 1 - \frac{5dx^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x)) \right] \Psi(x) + \left[ 1 + \frac{dx^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x-dx)) \right] \Psi(x-dx) = O(dx^4) \simeq 0$
- dla porównania zwykła dyskretyzacja
- $[1] \Psi(x+dx) - 2 \left[ 1 - \frac{dx^2}{2} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x)) \right] \Psi(x) + [1] \Psi(x-dx) = O(dx^2) \simeq 0$

# dokładność, metoda Numerowa

- po prawej Numerow, po lewej wynik "zwykłej dyskretyzacji".
- dla Numerowa zbieżność (w skali rysunku) już  $n = 6$  zamiast  $n = 8$ .

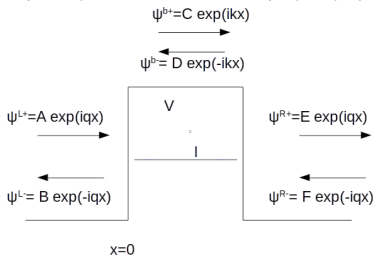


# dokładność, metoda Numerowa

- dla równania  $\frac{d^2\Psi}{dx^2} \Psi = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \Psi(x)$
- $\left[1 + \frac{dx^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x + dx))\right] \Psi(x + dx) - 2 \left[1 - \frac{5dx^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x))\right] \Psi(x) + \left[1 + \frac{dx^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x - dx))\right] \Psi(x - dx) = O(dx^4) \simeq 0$
- dla porównania zwykła dyskretyzacja
- $[1] \Psi(x + dx) - 2 \left[1 - \frac{dx^2}{2} \frac{2m}{\hbar^2} (E + V(x))\right] \Psi(x) + [1] \Psi(x - dx) = O(dx^2) \simeq 0$
- Numerow - dobry pomysł zawsze gdy potencjał gładki. Dla schodkowego - nie ma sensu go stosować, ponieważ metoda zakłada istnienie wysokich pochodnych funkcji falowej.

# macierz przejścia

- formalizm macierzy przejścia - efektywne narzędzie rachunkowe w 1D dla (1) potencjału odcinkowo stałego i/ lub (2) potencjału powtarzalnego.
- (1) bo można macierz analitycznie wyznaczyć. (2) bo potęgowanie macierzy jest tanie - nawet jeśli trzeba ją liczyć numerycznie.
- poza tym: można starać się przybliżyć potencjał przez funkcję odcinkami stałą.



$$q = \sqrt{2mE}/\hbar,$$

$$k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar \text{ dla } E > V$$

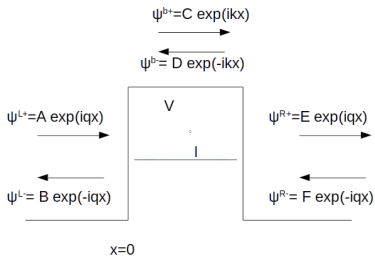
$$\text{lub } k = -i\sqrt{2m(V - E)}/\hbar \text{ dla } E < V$$

- istnieje związek liniowy 
$$\begin{pmatrix} \Psi^{R+}(x=l) \\ \Psi^{R-}(x=l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^{L+}(x=0) \\ \Psi^{L-}(x=0) \end{pmatrix}$$
- **M** - macierz przejścia





# macierz przejścia



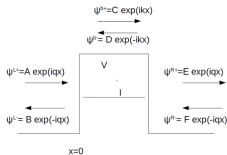
$$q = \sqrt{2mE}/\hbar,$$

$$k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar \text{ dla } E > V$$

$$\text{lub } k = -i\sqrt{2m(V - E)}/\hbar \text{ dla } E < V$$

- $\mathbf{M}_V$  dla skoku potencjału w  $x = 0$ . 
$$\begin{pmatrix} \psi^{b+}(x=0) \\ \psi^{b-}(x=0) \end{pmatrix} = M_V \begin{pmatrix} \psi^{L+}(x=0) \\ \psi^{L-}(x=0) \end{pmatrix}$$
- $$\begin{cases} A + B = C + D \\ q(A - B) = k(C - D) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} C = \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{k})A + \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{k})B \\ D = \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{k})A + \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{k})B \end{cases}$$
- $$\mathbf{M}_V = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{k}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{k}) \end{pmatrix}$$

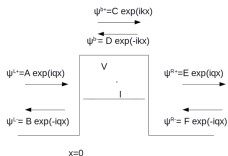
# macierz przejścia



$$q = \sqrt{2mE}/\hbar,$$
$$k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar \text{ dla } E > V$$
$$\text{lub } k = -i\sqrt{2m(V - E)}/\hbar \text{ dla } E < V$$

- $\mathbf{M}$  dla płaskiego fragmentu długości  $l$   $\begin{pmatrix} \Psi^{b+}(x=l) \\ \Psi^{b-}(x=l) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_l \begin{pmatrix} \Psi^{b+}(x=0) \\ \Psi^{b-}(x=0) \end{pmatrix}$
- $\Psi^b(x=l) = \Psi^{b+}(x=l) + \Psi^{b-}(x=l)$
- $\Psi^b(x=l) = C \exp(ikl) + D \exp(-ikl) = \exp(ikl)\Psi^{b+}(x=0) + \exp(-ikl)\Psi^{b-}(x=0)$
- $\mathbf{M}_l = \begin{pmatrix} \exp(ikl) & 0 \\ 0 & \exp(-ikl) \end{pmatrix}$

# macierz przejścia

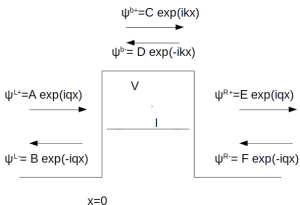


$$q = \sqrt{2mE}/\hbar, k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar \text{ dla } E > V \text{ lub } k = -i\sqrt{2m(V - E)}/\hbar \text{ dla } E < V$$

- było:  $\Psi_b = \mathbf{M}_v \Psi_L|_{x=a}$ ,  $\mathbf{M}_v = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{k}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{k}) \end{pmatrix}$
- było:  $\Psi_R = \mathbf{M}_{-v} \Psi_b|_{x=l}$
- $k$  i  $q$  zamienione miejscami:  $\mathbf{M}_{-v} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{k}{q}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{k}{q}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{k}{q}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{k}{q}) \end{pmatrix}$
- BTW:  $\mathbf{M}_{-v} = (\mathbf{M}_v)^{-1}$ ,  $\mathbf{M}_{-l} = (\mathbf{M}_l)^{-1}$
- ostatecznie  $\begin{pmatrix} \Psi^{R+}(x=l) \\ \Psi^{R-}(x=l) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{-v} \mathbf{M}_l \mathbf{M}_v \begin{pmatrix} \Psi^{L+}(x=0) \\ \Psi^{L-}(x=0) \end{pmatrix}$
- również  $\begin{pmatrix} \Psi^{L+}(x=0) \\ \Psi^{L-}(x=0) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{-v} \mathbf{M}_{-l} \mathbf{M}_v \begin{pmatrix} \Psi^{R+}(x=l) \\ \Psi^{R-}(x=l) \end{pmatrix}$



# macierz przejścia

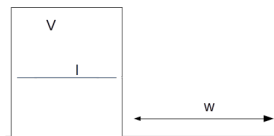


- $T = \frac{1}{|A|^2} = \frac{1}{|M_{11}|^2}, R = 1 - T$

- $\mathbf{M} = \mathbf{M}_{-v} \mathbf{M}_{-l} \mathbf{M}_v$

- $M_{11} = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{k}{q}\right) e^{-ikl} \left(1 + \frac{q}{k}\right) + \frac{1}{4} \left(1 - \frac{k}{q}\right) e^{ikl} \left(1 - \frac{q}{k}\right)$

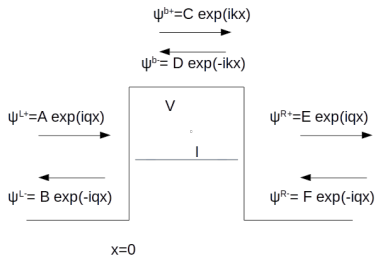
# macierz przejścia-wielokrotna studnia



- 
- $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_{-v} \mathbf{M}_{-l} \mathbf{M}_v \mathbf{M}_{-w}$
- $M_w = \begin{pmatrix} \exp(iqw) & 0 \\ 0 & \exp(-iqw) \end{pmatrix}$
- podwójna bariera  $\mathbf{M}_2 = \mathbf{M}^2$ , wielokrotna  $\mathbf{M} = \mathbf{M}^n$ ,  $T = \frac{1}{|A|^2} = \frac{1}{|M_{11}|^2}$
- bywają badania, w których  $n$  idzie w setkach, tysiącach, milionach
- mnożenie macierzy zamiast równania różniczkowego na bardzo długim pudle

# numeryczne wyznaczenie macierzy przejścia

- Dla potencjału innego niż odcinkami stałego - np. powtarzalnego układu gładkich barier - można również wyliczyć numerycznie macierz przejścia dla jednego segmentu.



- dla padającego z lewej strony:  $F = 0$ , możemy przyjąć  $E = \exp(-iq)$
- $$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
- numerycznie - z metody iteracyjnej, wyznaczymy  $A$  oraz  $B$ , potem  $M_{11} = A$ ,  $M_{21} = B$ ,
- dla padającej z prawej strony  $A = 0$ ,  $B$  przyjmujemy 1.
- $$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}$$
- numerycznie  $E$  oraz  $F$ , następnie  $M_{12}$  i  $M_{22}$

# macierz rozpraszania

- w poważniejszych (ponad 1D) zastosowaniach - macierz rozpraszania zamiast macierzy przejścia rozwiązanie w obszarze rozpraszania, zszycie

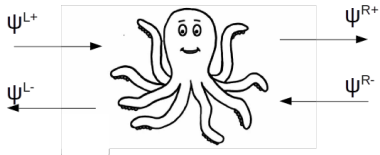


- $\psi^{L+} = A \exp(iqx)$ ,  $\psi^{L-} = B \exp(-iqx)$
- $\psi^{R+} = C \exp(iqx)$ ,  $\psi^{R-} = D \exp(-iqx)$

- w obszarze rozpraszania  $x \in (0, l)$  funkcja falowa  $\Phi$ ,  $H\Phi = E\Phi$
- ponadto dla wszystkich czterech funkcji  $\Psi$  mamy  $H\Psi = E\Psi$  przy tej samej energii
- na lewo  $\Psi_L = \psi^{L+} + \psi^{L-}$ , na prawo  $\Psi_R = \psi^{R+} + \psi^{R-}$
- warunki zszycia rozwiązań:  $\Psi_L(x = 0-) = \Phi(x = 0+)$ ,  $\Psi_R(x = 0+) = \Phi(x = l-)$ ,  
 $\frac{\partial \Psi_L}{\partial x} \Big|_{x=0-} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=0+}$  oraz  $\frac{\partial \Psi_R}{\partial x} \Big|_{x=0+} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=0-}$



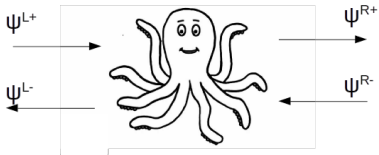
# macierz rozpraszania



- $\psi^{L+} = A \exp(iqx)$ ,  $\psi^{L-} = B \exp(-iqx)$
- $\psi^{R+} = C \exp(iqx)$ ,  $\psi^{R-} = D \exp(-iqx)$

- w obszarze rozpraszania  $x \in (0, l)$  funkcja falowa  $\Phi$ ,  $H\Phi = E\Phi$
- ponadto dla wszystkich czterech funkcji  $\Psi$  mamy  $H\Psi = E\Psi$  przy tej samej energii
- na lewo  $\Psi_L = \psi^{L+} + \psi^{L-}$ , na prawo  $\Psi_R = \psi^{R+} + \psi^{R-}$
- warunki zszycia rozwiązań:  $\Psi_L(x = 0-) = \Phi(x = 0+)$ ,  $\Psi_R(x = 0+) = \Phi(x = l-)$ ,  
 $\left. \frac{\partial \Psi_L}{\partial x} \right|_{x=0-} = \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_{x=0+}$  oraz  $\left. \frac{\partial \Psi_R}{\partial x} \right|_{x=0+} = \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_{x=0-}$
- $$\begin{pmatrix} \psi^{L-}(x=0) \\ \psi^{R+}(x=l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^{L+}(x=0) \\ \psi^{R-}(x=l) \end{pmatrix}$$
- **S** - macierz rozpraszania (scattering), związek między wchodzącymi a wychodzącymi falami

# macierz przejścia



- $\psi^{L+} = A \exp(iqx)$ ,  $\psi^{L-} = B \exp(-iqx)$
- $\psi^{R+} = C \exp(iqx)$ ,  $\psi^{R-} = D \exp(-iqx)$

- w obszarze rozpraszania  $x \in (0, l)$  funkcja falowa  $\Phi$ ,  $H\Phi = E\Phi$
- ponadto dla wszystkich czterech funkcji  $\psi$  mamy  $H\psi = E\psi$  przy tej samej energii
- na lewo  $\psi_L = \psi^{L+} + \psi^{L-}$ , na prawo  $\psi_R = \psi^{R+} + \psi^{R-}$
- warunki zszycia rozwiązań:  $\psi_L(x=0-) = \Phi(x=0+)$ ,  $\psi_R(x=0+) = \Phi(x=l-)$ ,  
 $\frac{\partial \psi_L}{\partial x} \Big|_{x=0-} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=0+}$  oraz  $\frac{\partial \psi_R}{\partial x} \Big|_{x=0+} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_{x=0-}$
- $$\begin{pmatrix} \psi^{R+}(x=l) \\ \psi^{R-}(x=l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^{L+}(x=0) \\ \psi^{L-}(x=0) \end{pmatrix}$$
- **M** - macierz przejścia, związek między funkcją falową po obydwu stronach obszaru rozpraszania

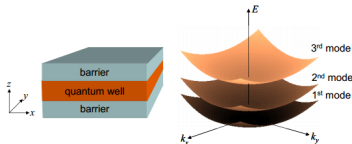
- $$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} -\frac{M_{21}}{M_{22}} & \frac{1}{M_{22}} \\ M_{11} - \frac{M_{21}M_{12}}{M_{22}} & \frac{M_{12}}{M_{22}} \end{pmatrix} \text{ oraz } \mathbf{M} = \begin{pmatrix} S_{21} - \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}} & \frac{S_{22}}{S_{12}} \\ -\frac{S_{11}}{S_{12}} & \frac{1}{S_{12}} \end{pmatrix}$$

# więcej niż 1 wymiar

- dotychczasowe rozważania: 1D, cząstka swobodna w 2D
- $H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) = H_x + H_y$
- separacja zmiennych - gdy potencjał w postaci sumy części zależnych od  $x, y$
- $\Psi = \Psi_x(x)\Psi_y(y)$  do równania własnego  $H\Psi = E\Psi$ , podzielić przez  $\Psi$
- $\frac{H_x\Psi_x(x)}{\Psi_x(x)} + \frac{H_y\Psi_y(y)}{\Psi_y(y)} = E \rightarrow \frac{H_x\Psi_x(x)}{\Psi_x(x)} = E_x, \frac{H_y\Psi_y(y)}{\Psi_y(y)} = E_y, E_x + E_y = E.$
- wniosek: jeśli Hamiltonian można podzielić na sumę operatorów zależnych od ortogonalnych współrzędnych, to funkcja falowa: iloczyn funkcji tych operatorów, a energia: suma
- $\Psi = \Psi_x(x)\Psi_y(y) = \frac{1}{2\pi} \exp(ik_x x + ik_y y),$   
 $E(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k}^2)$  - paraboliczna relacja dyspersji

# więcej niż 1 wymiar

- dotychczasowe rozważania: 1D, lecz przestrzeń 3D
- uwięzienie w jednym z kierunków  $V(\mathbf{r}) = V(z)$  - studnia kwantowa
- $H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(z) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) = H_{xy} + H_z$
- separacja zmiennych - gdy potencjał w postaci sumy części zależnych od  $x, y, z$
- $\Psi = \Psi(x, y)\Psi_z(z)$  do równania własnego  $H\Psi = E\Psi$ , podzielić przez  $\Psi$
- $\frac{H_{xy}\Psi(x, y)}{\Psi(x, y)} + \frac{H_z\Psi_z(z)}{\Psi_z(z)} = E \rightarrow \frac{H_{xy}\Psi(x, y)}{\Psi(x, y)} = E_{xy}$  oraz  $\frac{H_z\Psi_z}{\Psi_z} = E_z, E = E_{x,y} + E_z$
- jeśli  $V(z)$ : nieskończona studnia potencjału,  $E_z = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2$ ,  $\Psi_z^n = \cos\left(n\frac{\pi}{L}x\right)$  dla  $n = 2k + 1$ ,  $\Psi_z^n = \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)$  dla  $n = 2k$ .
- w naszym przypadku:  $\Psi(x, y, z) = \frac{1}{2\pi} \exp(ik_x x + ik_y y)\Psi_z^n(z)$ , oraz  $E = \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2$ .



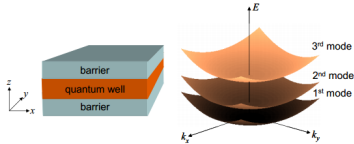
- 
- Relacja dyspersji: dla studni kwantowej

# studnia kwantowa

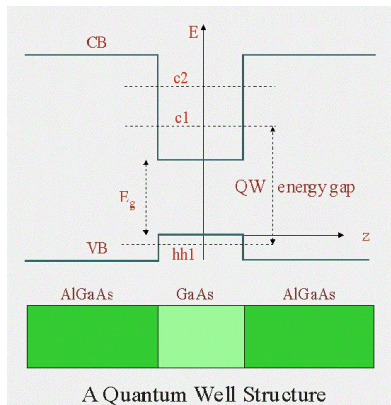
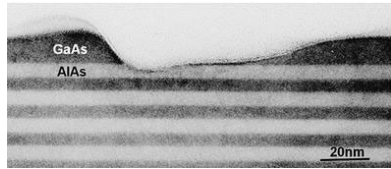
- w naszym przypadku:

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{2\pi} \exp(ik_x x + ik_y y) \Psi_z^n(z), \text{ oraz}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2.$$

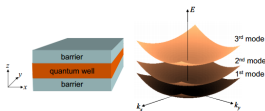


- Relacja dyspersji: dla studni kwantowej
- struktury produkowane z wykorzystaniem materiałów półprzewodnikowych o podobnej strukturze krystalicznej (gładki wzrost) i różnych przerwach energetycznych.
- Podstawowe problemy MQ, rozważane przed II WŚ - zastosowanie do układów produkowanych od lat 80 XXw.

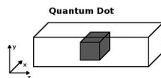
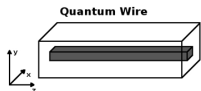
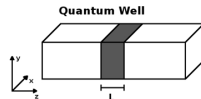


# nanostruktury półprzewodnikowe

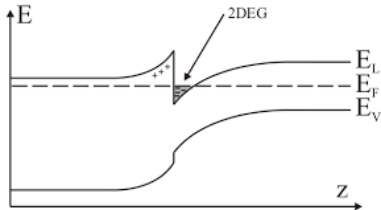
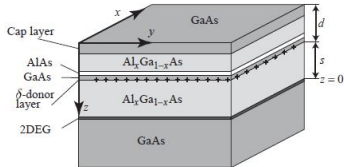
- jeśli  $V(z)$  : nieskończona studnia potencjału,  $E_z = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ ,  
 $\Psi_z = \cos(n\frac{\pi}{L}x)$  dla  $n = 2k + 1$ ,  $\Psi_z = \sin(n\frac{\pi}{L}x)$  dla  $n = 2k$ .
- w naszym przypadku:  $\Psi(x, y, z) = \frac{1}{2\pi} \exp(ik_x x + ik_y y) \Psi_z^n(z)$ , oraz  
 $E = \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ .



- dla energii poniżej drugiego modu ( $E(n = 2, k_x = 0, k_y = 0)$ ), wszystkie stany odpowiadają  $n = 1$  - układ efektywnie 2D
- druty kwantowe:  $E = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n_x \pi}{L_x}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n_y \pi}{L_y}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} k^2$
- kropki kwantowe  $E = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n_x \pi}{L_x}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n_y \pi}{L_y}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n_z \pi}{L_z}\right)^2$
- druty kwantowe: do badania jako przewodniki z prądem, lub jako elektrody dostarczające ładunek do części obszaru rozpraszania



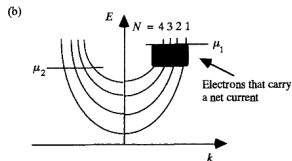
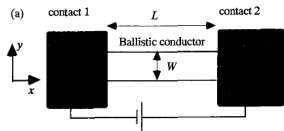
# dwuwymiarowy gaz elektronowy



- Dwuwymiarowy gaz elektronowy: domieszki usunięte z obszaru zajętego przez elektrony, b. silne uwięzienie w kierunku wzrostu, długa droga swobodna, długa droga koherencji,
- kwantowy efekt Halla i zjawiska transportu, którymi rządzi falowa natura nośników (koherentny transport kwantowy).
- transport jednoelektronowy - opis procesu transportu dla elektronu z powierzchni Fermiego (małe napięcie bias) lub okna transportu (między potencjałami elektrochemicznymi elektrod)

# prawdopodobieństwo przejścia a przewodności układu

- podejście Landauera – przewodność wyliczana na podstawie prawdopodobieństwo przejścia elektronu z tzw. okna transportu
- prąd niesiony przez stan  $k > 0$ : ( $f^+(E)$ -statystyka obsadzenia stanu (Fermiego Diraca), dla stanów z dodatnim pędem)
- prąd niesiony w prawo  $I^+$  w jednym pasmie
- $I^+ = \frac{2e}{L} \sum_k v_k f^+(E) = \frac{2e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E)$
- prędkość pasmowa  $v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$
- 2 za spin,  $L$  długość przewodnika

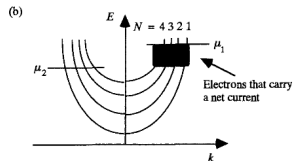
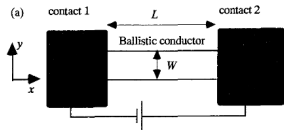


- mody poprzeczne: wynik uwięzienia poprzecznego w kanale
- przewodnik balistyczny: przeciwieństwo dyfuzyjnego. W skali nano w czystych układach (2DEG) - przewodnictwo dyfuzyjne.
- S. Datta, Electronic transport in mesoscopic systems



# prawdopodobieństwo przejścia a przewodności układu

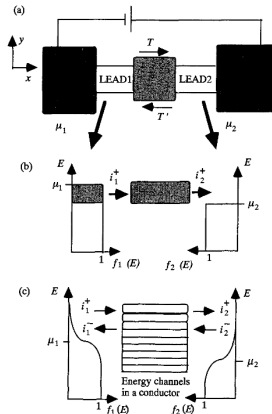
- $I^+ = \frac{2e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E)$
- dla gazu elektronowego przy okresowych warunkach brzegowych:  $\sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} dk$
- $\frac{2e}{L} \frac{L}{2\pi} \frac{1}{\hbar} \int \frac{\partial E}{\partial k} dk \rightarrow \frac{2e}{h} \int dE$
- dla jednego pasma  $I^+ = \frac{2e}{h} \int_{\epsilon}^{\infty} f^+(E) dE$  gdzie  $\epsilon$  to minimalna energia pasma.
- prąd dla wielu pasm: jeśli  $M(E)$  - liczba modów o danej energii
- $I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E) f^+(E) dE$



- 
- mody poprzeczne: wynik uwięzienia poprzecznego w kanale
- przewodnik balistyczny: przeciwieństwo dyfuzyjnego. W skali nano w czystych układach (2DEG) - przewodnictwo dyfuzyjne.
- S. Datta, Electronic transport in mesoscopic systems

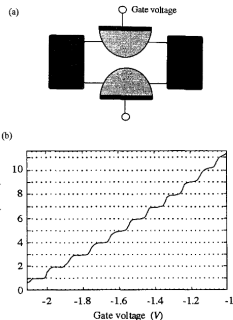
# prawdopodobieństwo przejścia a przewodność układu

- $I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E) f^+(E) dE$
- przewodnik podpięty do 2 elektrod - każda z nich potencjał chemiczny  $\mu_1$  oraz  $\mu_2$
- nieskompensowany prąd  $I = I^+ - I^-$  różny od zera w oknie transportu:  $E \in (\mu_2, \mu_1)$
- weźmy przeszkodę z prawdopodobieństwem przejścia  $T$  (uśrednionym po energii i pasmach)
- $I = \frac{2e}{h} MT(\mu_1 - \mu_2)$
- potencjał elektrostatyczny a potencjał chemiczny  $eV = \mu$
- $G = \frac{I}{V} = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} MT$
- formuła Landauera:  $G = \frac{2e^2}{h} MT = \frac{2e^2}{h} \bar{T}$



# kontakt punktowy i kwantyzacja przewodności

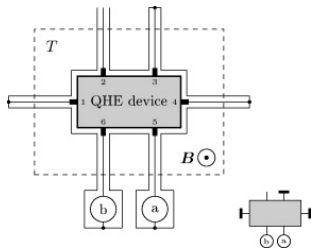
- $G = \frac{I}{V} = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} MT$
- formuła Landauera:  $G = \frac{2e^2}{h} MT = \frac{2e^2}{h} \bar{T}$



- QPC kwantowy kontakt punktowy
- kwantyzacja przewodności, bo  $T$  dla każdego modu dąży do 1.

# prawdopodobieństwo przejścia a przewodność układu

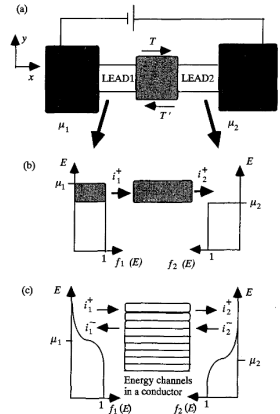
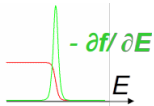
- formuła Landauera:  $G = \frac{2e^2}{h} MT = \frac{2e^2}{h} \bar{T}$



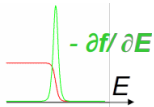
- formuła Büttikera: układ o wielu końcówkach. Prąd wpływający przez końcówkę  $p$
- $I_p = \frac{2e}{h} \sum_q [\bar{T}_{q \leftarrow p} \mu_p - \bar{T}_{p \leftarrow q} \mu_q]$
- w obecności pola magnetycznego: relacja Onsagera  $\bar{T}_{p \leftarrow q}(B) = \bar{T}_{q \leftarrow p}(-B)$
- $V = \mu/e$ ,  $G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{p \leftarrow q}$
- $I_p = \frac{2e}{h} \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q]$

# skończona temperatura

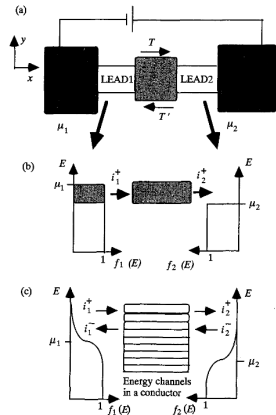
- w zerowej temperaturze obsadzenie poziomów zmienia się gładko z energią  $f(E) = \frac{1}{\exp((E-\mu)/kT)+1}$
- $I = \int \frac{2e}{h} \bar{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE$
- przy niskiej różnicy między  $\mu_1$  a  $\mu_2$  (rozwinięcie Taylora względem  $E$ ):  
 $[f_1(E) - f_2(E)] \simeq (\mu_1 - \mu_2) \frac{\partial f}{\partial \mu} = -(\mu_1 - \mu_2) \frac{\partial f}{\partial E}$
- $I = \frac{2e^2}{h} (V_1 - V_2) \int \left\{ -\bar{T}(E) \frac{\partial f}{\partial E} \right\} dE$



# niska temperatura



- $I = \frac{2e^2}{h} (V_1 - V_2) \int \left\{ -\bar{T}(E) \frac{\partial f}{\partial E} \right\} dE$
- przy niskiej różnicy między  $\mu_1$  a  $\mu_2$ :
- dla niskiej temperatury  $-\frac{\partial f}{\partial E} = \delta(\mu - E)$
- przy  $\mu_1 \simeq \mu_2$ ,  $\mu_1 = E_F$ ,  $\mu_2 = E_F - dE$ ,  $dE$  - małe a  $\mu = E_F$  - wtedy z całkowania po energii
- $I = \frac{2e^2}{h} (V_1 - V_2) \int \left\{ \bar{T}(E) \delta(E_F - E) \right\} dE$
- $I = \frac{2e^2}{h} (V_1 - V_2) \bar{T}(E_F)$
- $G = \frac{2e^2}{h} \bar{T}(E_F)$



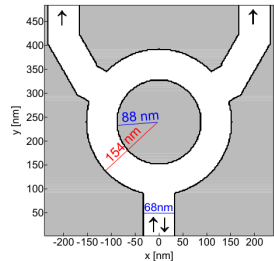
# rozwiązanie problemu rozproszeniowego 2D metodą różnic skończonych

- B. Szafran, M. Poniedziałek, Phys. Rev. B 82, 075320

- dynamika Hamiltona, w polu magnetycznym: pęd kinetyczny  $\mathbf{P} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$ ,  $T = P^2/2m$ .

$$H = (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 / 2m^* + V(x, y) \quad (1)$$

- $V(x, y)$  - potencjał uwięzienia
- $V(x, y) = 0$  w obszarze białym (rysunek)  $V(x, y) = 200$  meV na szarym. GaAs w otoczeniu  $\text{Al}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}$ ,  $m^* = 0.067m_0$  masa efektywna GaAs.
- kierunek  $z$  - zamrożony przez silne uwięzienie w 2DEG
- $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$
- $\mathbf{A} = (A_x, A_y, 0) = (0, Bx, 0)$  (cechowanie Lorentza)



# rozwiązanie problemu rozproszeniowego 2D metodą różnic skończonych

- wersja ciągła Hamiltonianu

$$H = (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 / 2m^* + V(x, y) \quad (2)$$

- $\mathbf{A} = (A_x, A_y, 0) = (0, Bx, 0)$ ,
- where  $\Psi_{\mu, \nu} = \Psi(x_\mu, y_\nu) = \Psi(\mu\Delta x, \nu\Delta x)$
- wersja siatkowa (metoda Wilsona wprowadzenia pola magnetycznego):
- $C_y = \exp\left[-i\frac{e}{\hbar}\Delta x A_y\right]$  (tzw. faza Peierlsa)

$$H\Psi_{\mu, \nu} = \frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2} \left( 4\Psi_{\mu, \nu} - C_y\Psi_{\mu, \nu-1} - C_y^*\Psi_{\mu, \nu+1} - \Psi_{\mu-1, \nu} - \Psi_{\mu+1, \nu} \right) + V_{\mu, \nu}\Psi_{\mu, \nu}.$$

- $(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 = -\hbar^2\nabla^2 + e^2\mathbf{A}^2 - 2i\hbar e\mathbf{A}\cdot\nabla - i\hbar e\nabla\cdot\mathbf{A} = -\hbar^2\nabla^2 + e^2x^2B^2 - 2i\hbar eBx\frac{\partial}{\partial y}$



# rozwiązanie problemu rozproszeniowego 2D metodą różnic skończonych

- wersja ciągła energii kinetycznej
- $(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 / 2m^* = \left( -\hbar^2\nabla^2 + e^2x^2B^2 - 2i\hbar eBx \frac{\partial}{\partial y} \right) / 2m^*$
- $C_y = \exp \left[ -i \frac{e}{\hbar} \Delta x A_y \right]$ ,  $A_y = xB$
- wersja siatkowa:

$$H\Psi_{\mu,\nu} = \frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2} \left( 4\Psi_{\mu,\nu} - C_y\Psi_{\mu,\nu-1} - C_y^*\Psi_{\mu,\nu+1} - \Psi_{\mu-1,\nu} - \Psi_{\mu+1,\nu} \right)$$

- $C_y = 1 - i \frac{e}{\hbar} \Delta x A_y - \frac{e^2}{2\hbar^2} (\Delta x)^2 A_y^2 + \dots$
- $C_y^* = 1 + i \frac{e}{\hbar} \Delta x A_y - \frac{e^2}{2\hbar^2} (\Delta x)^2 A_y^2 + \dots$

$$H\Psi_{\mu,\nu} \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2} \left( 4\Psi_{\mu,\nu} - \Psi_{\mu,\nu-1} - \Psi_{\mu,\nu+1} - \Psi_{\mu-1,\nu} - \Psi_{\mu+1,\nu} \right. \\ \left. + i \frac{e}{\hbar} \Delta x A_y \Psi_{\mu,\nu-1} - i \frac{e}{\hbar} \Delta x A_y \Psi_{\mu,\nu+1} + \frac{e^2 \Delta x^2}{2\hbar^2} A_y^2 (\Psi_{\mu,\nu-1} + \Psi_{\mu,\nu+1}) \right)$$

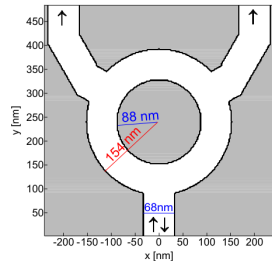
- uwaga: ostatni wyraz:  $A_y$  nie zależy od  $y$  zamiast funkcji w  $\mu\nu$  jest średnia arytmetyczna z sąsiadów.
- siatkowy operator energii kinetycznej jest **spójny** z wersją ciągłą (*spójny* znaczy dąży do operatora różniczkowego w granicy zerowego kroku przestrzennego)

# rozwiązanie problemu rozproszeniowego 2D metodą różnic skończonych

- Wewnątrz pudła: rozwiązujemy

$$\begin{aligned} H\psi_{\mu,\nu} &= \frac{\hbar^2}{2m^* \Delta x^2} \left( 4\psi_{\mu,\nu} - C_y \psi_{\mu,\nu-1} - C_y^* \psi_{\mu,\nu+1} \right. \\ &\quad \left. - \psi_{\mu-1,\nu} - \psi_{\mu+1,\nu} \right) + V_{\mu,\nu} \psi_{\mu,\nu} \\ &= E\psi_{\mu,\nu}. \end{aligned} \quad (3)$$

- na granicach pudła : musimy zadać warunki brzegowe
- następnie z rozwiązania równania Schrodingera musimy odzyskać prawdopodobieństwo przejścia



# rozwiązanie problemu rozproszeniowego 2D metodą różnic skończonych

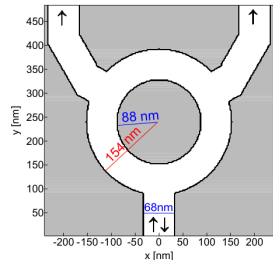
- warunki brzegowe: rozwiązanie równania Schroedingera w kanałach
- stan w kanale:  $\Psi_{\mu, \nu} = \exp(iky_{\nu})\psi_{\mu}^k = \exp(ik\Delta x(\nu - 1))\psi_{\mu}^k$   
Weźmy  $\nu = 1$  (najniższy rząd punktów)

$$\Psi_{\mu, \nu \pm 1} = \exp(\pm ik\Delta x)\psi_{\mu}^k \quad (4)$$

- wkładamy do równania różnicowego i

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m^* \Delta x^2} (2\psi_{\mu}^k - \psi_{\mu-1}^k - \psi_{\mu+1}^k) \\ & + \frac{\hbar^2}{m^* \Delta x^2} \left( 1 - \cos(k\Delta x + \frac{e}{\hbar} Bx\Delta x) \right) \psi_{\mu}^k \\ & + V_{\mu} \psi_{\mu}^k = E\psi_{\mu}^k. \end{aligned} \quad (5)$$

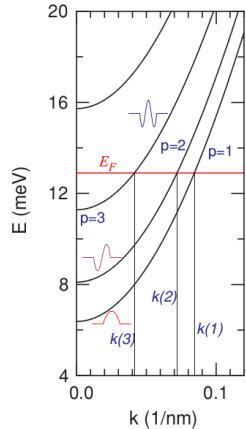
- musimy rozwiązać problem stanów własnych Hamiltonianu w kanale zanim dojdziemy do problemu rozpraszania



# rozwiązanie problemu rozproszeniowego 2D metodą różnic skończonych

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m^* \Delta x^2} (2\psi_\mu^k - \psi_{\mu-1}^k - \psi_{\mu+1}^k) \\ & + \frac{\hbar^2}{m^* \Delta x^2} \left( 1 - \cos(k\Delta x + \frac{e}{\hbar} Bx\Delta x) \right) \psi_\mu^k \\ & + V_\mu \psi_\mu^k = E \psi_\mu^k. \end{aligned} \quad (6)$$

- rozwiązujemy : jedną z metod który Państwo poznali na pierwszym wykładzie, problem jest 1D - w poprzek kanału.
- problem rozpraszania 2D stosunkowo prosty gdy energia Fermiego przypada na najniższy stan kwantyzacji poprzecznej ( $\rho = 1$ ), transport w najniższym podpasmie, brak rozpraszania międzypasmowego



# transport w najniższym podpasmie

- wewnątrz pudła - układ równań na funkcje falową w każdym punkcie siatki  $\Psi_{\mu,\nu}$  dla danej  $E$ , przy rozproszeniowych warunkach brzegowych

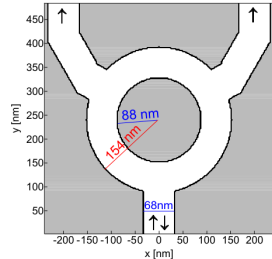
$$\begin{aligned} H\Psi_{\mu,\nu} &= \frac{\hbar^2}{2m^* \Delta x^2} \left( 4\Psi_{\mu,\nu} - C_y \Psi_{\mu,\nu-1} - C_y^* \Psi_{\mu,\nu+1} \right. \\ &\quad \left. - \Psi_{\mu-1,\nu} - \Psi_{\mu+1,\nu} \right) + V_{\mu,\nu} \Psi_{\mu,\nu} \\ &= E\Psi_{\mu,\nu}. \end{aligned} \quad (7)$$

- na "szarych końcach" pudła: WB na znikanie funkcji falowej
- w kanałach wyjściowych  $\Psi_{\mu,\nu} = \exp(iky_\nu) \psi_\mu^k$  - tylko fala, która przeszła, tj.  $k > 0$

$$\Psi_{\mu,\nu+1} = \Psi_{\mu,\nu} \exp(ik\Delta x), \quad (8)$$

- warunek w kanale wyjściowym: wpisany do równania na ostatni punkt wewnątrz pudła

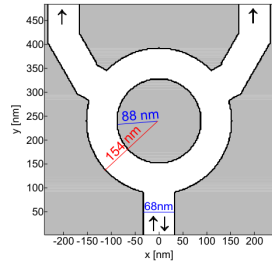
- w kanale wejściowym:  $\Psi_{\mu,\nu=1} = c_k \psi_\mu^k + c_{-k} \psi_\mu^{-k}$ ,
- warunek w kanale wejściowym: warunek typu Dirichleta na pierwszy rząd punktów na siatce:
- wiersze układu równań, które odpowiadają kanałowi wejściowemu: w macierzy układu równań 1 na diagonalu, 0 poza diagonalą, po prawej stronie wartość dana warunkiem Dirichleta
- ale, ale: skąd  $c_k$  i  $c_{-k}$  ??



# transport w najniższym podpasmie

$$\Psi_{\mu, \nu=1} = c_k \psi_{\mu}^k + c_{-k} \psi_{\mu}^{-k}, \quad (9)$$

- warunek w kanale wejściowym: warunek typu Dirichleta na pierwszy rząd punktów na siatce
- ale, ale: skąd  $c_k$  i  $c_{-k}$  ??
- np. z samouzgodnienia (iteracja)
  - zakładam  $E$ , rozwiązuję problemy w kanałach, zadaje  $c_k = 1, c_{-k} = 0$
  - zadaje warunek Dirichleta na punkty na dole pułta obliczeniowego
  - rozwiązuję URL na  $\Psi_{\mu, \nu}$
  - sprawdzam stan rozwiązania w kanale wejściowym: rozwiązuję układ równań na dwóch punktach siatki w kanale wejściowym jeszcze w ramach pułta:  
$$c_k \psi_{\mu}^k \exp(ik\Delta x \nu) + c_{-k} \exp(-ik\Delta x \nu) \psi_{\mu}^{-k} = \Psi_{\mu, \nu}$$
  - wracam do (2) i powtarzam aż się zbiegnie
  - jeśli się zbiegło to rozwiązałem problem rozproszeniowy



# transport w najniższym podpasmie

$$\Psi_{\mu,\nu=1} = c_k \psi_{\mu}^k + c_{-k} \psi_{\mu}^{-k}, \quad (10)$$

- ⊖ zakładam  $E$ , rozwiązuję problemy w kanałach, zadaje  $c_k = 1, c_{-k} = 0$
- ⊖ zadaje warunek Dirichleta na punkty na dole pudła obliczeniowego
- ⊖ rozwiązuję URL na  $\Psi_{\mu,\nu}$
- ⊖ sprawdzam stan rozwiązania w kanale wejściowym: rozwiązuję układ równań na dwóch punktach siatki w kanale wejściowym jeszcze w ramach pudła:  
 $c_k \psi_{\mu}^k \exp(ik\Delta x\nu) + c_{-k} \exp(-ik\Delta x\nu) \psi_{\mu}^{-k} = \Psi_{\mu,\nu}$
- ⊖ wracam do (2) i powtarzam aż się zbiegnie
- ⊖ jeśli się zbiegło to rozwiązałem problem rozproszeniowy

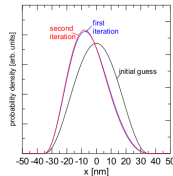
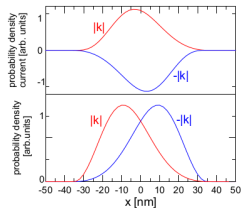


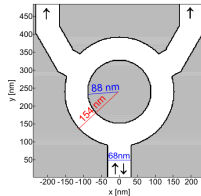
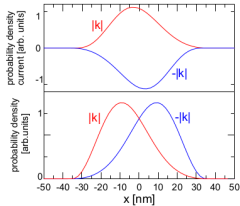
FIG. 3: The probability density in the incoming lead  $c_k \psi^k(x) + c_{-k} \psi^{-k}(x)$  in the initial guess  $c_k = c_{-k}$  and in the subsequent iterations of the self-consistent procedure (see text). Parameters are same as in Fig. 2.

- $B = 1 \text{ T}$

# transport w najniższym podpasmie

- przewodność z problemu rozproszeniowego w najniższym podpasmie.
- $\mathbf{j} = \frac{\hbar}{im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) + \frac{\hbar}{m^*} \mathbf{A} |\Psi|^2$
- składowa  $y$  prąd prawdopodobieństwa dla funkcji  $\exp(iky\Delta x)$  w kanale

$$j_y(x) = \frac{\hbar}{m^*} |\Psi(x, y)|^2 (k + eBx) \quad (11)$$



- 
- ponieważ strumienie prądu prawdopodobieństwa identyczne dla wejściowego  $k$  oraz  $-k$
- $R = \frac{|c_{-k}|^2}{|c_k|^2}$ ,  $R + T_l + T_r = 1$
- w kanale wyjściowym lewym:  $\Psi_l = t_l \exp(ik_l y) \phi^l(x)_{k_l}$ , prawym  $\Psi_r = t_r \exp(ik_r y) \phi^r(x)_{k_r}$
- $T_l = \frac{|t_l|^2}{|c_k|^2} \left| \frac{\phi^l_{k_l}}{\phi^l_k} \right|^2$ , gdzie  $\phi^l_{k_l}$  - strumień prądu przez lewe wyjście dla stanu własnego kanału i wektora falowego  $k_l$



# transport w najniższym podpasmie

- przykładowe wyniki

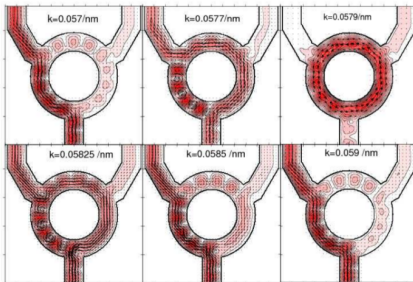
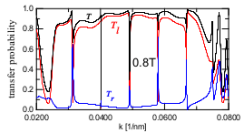
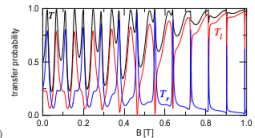


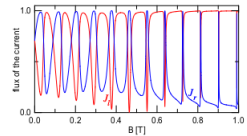
FIG. 6: The red contours show the absolute value of the wave function (the darker the shade of red - the larger  $|\Psi|$ ) and probability current field (arrows) for  $B = 0.8$  T and several values of  $k$  indicated at the top of the figure. For the transfer probabilities see Fig. 5.



b)



a)



b)

FIG. 7: (a) Transfer probabilities to the left  $T_l$  and right  $T_r$  output channels and their sum  $T$  as functions of  $B$  for  $k = 0.0683$   $\text{nm}^{-1}$ . (b) The flux of the current through the left and the right arms of the ring.

F  
u  
v  
p  
tl  
n  
tl

# rozpraszanie wielopasmowe

- $E_F$  w zakresie powyżej najniższego pasma
- Ogólna funkcja falowa w kanale

$$\begin{aligned} \Psi(x, y) &= \sum_{p=1}^P c_p \exp(ik(p)y) \psi_p^{k(p)}(x) \\ &+ \sum_{p=1}^P d_p \exp(-ik(p)y) \psi_p^{-k(p)}(x), \end{aligned} \quad (12)$$

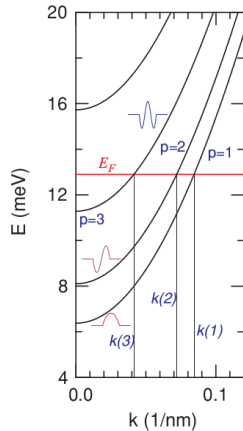
- Rozwiązujemy równanie Schroedingera dla jednego wejściowego modu :  $k(p')$

$$\begin{aligned} \Psi^{input}(x, y) &= c_{p'}^{in} \exp(ik(p')y) \psi_{p'}^{k(p')}(x) \\ &+ \sum_{p=1}^P d_p^{in} \exp(-ik(p)y) \psi_p^{-k(p)}(x). \end{aligned} \quad (13)$$

- w kanale wyjściowym brak fal idących do obszaru rozpraszania

$$\Psi^{output}(x, y) = \sum_{p=1}^P c_p^{out} \exp(ik(p)y) \psi_p^{k(p)}(x). \quad (14)$$

- chcemy znaleźć rozwiązanie  $H\Psi = E\Psi$  takie, aby forma funkcji w kanałach była dana przez (13) i (14).



# rozpraszanie wielopasmowe

- B. Szafran, Physical Review B, **84**, 075336 - narzucenie warunków brzegowych

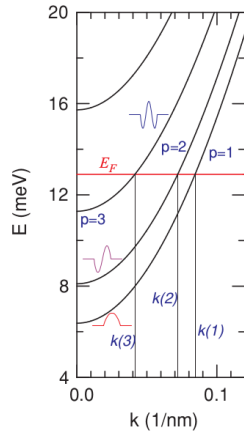
$$\Psi^{output}(x, y) = \sum_{p=1}^P c_p^{out} \exp(ik(p)y) \psi_p^{k(p)}(x). \quad (15)$$

$$\frac{\partial \Psi^{output}}{\partial y} - ik(p') \Psi^{output} =$$

$$\sum_{p \neq p'}^P c_p^{out} i(k(p) - k(p')) \exp(ik(p)y) \psi_p^{k(p)}(x), \quad (16)$$

- na ostatnim punkcie wewnątrz pudła obliczeniowego zamiast górnego sąsiada wstawiamy:

$$\Psi_{\mu, \nu+1} = \Psi_{\mu, \nu-1} + 2\Delta y \left[ ik(p') \Psi_{\mu, \nu} + \sum_{p \neq p'}^P c_p^{out} i(k(p) - k(p')) \exp(ik(p)y_\mu) \psi_p^{k(p)}(x_\nu) \right]. \quad (17)$$



- W kanałach amplitudy rozpraszania wyznaczone przez rozwiązanie układu równań jak w 1D i jak poprzednio.
- Zbieżność procedury iteracyjnej przedstawia tabela:

iter. no.	$ c_1^m ^2$	$ c_2^m ^2$	$ c_3^m ^2$	$ d_1^m ^2$	$ d_2^m ^2$	$ d_3^m ^2$	$ c_1^{out} ^2$	$ c_2^{out} ^2$	$ c_3^{out} ^2$	$ d_1^{out} ^2$	$ d_2^{out} ^2$	$ d_3^{out} ^2$
1	0.0002	0.0002	0.2880	0.0113	0.0270	0.1056	0.0347	0.0181	0.0251	0.0002	0.0003	0.0000
2	0.0000	0.0000	0.2999	0.0100	0.0252	0.1087	0.0352	0.0213	0.0319	0.0001	0.0000	0.0000
3	0.0000	0.0000	0.2963	0.0101	0.0256	0.1045	0.0365	0.0208	0.0300	0.0000	0.0000	0.0000
4	0.0000	0.0000	0.2967	0.0100	0.0253	0.1056	0.0364	0.0206	0.0303	0.0000	0.0000	0.0000
5	0.0000	0.0000	0.2966	0.0100	0.0254	0.1056	0.0364	0.0206	0.0303	0.0000	0.0000	0.0000

Rachunek ustawiony dla wejścia z 3 pasma,  $p' = 3$  przy  $B = 0.01$  T.

- zostaje wyliczyć  $G$
- pstwo przejścia z  $p'$  na wejściu do  $q$  na wyjściu

$$T_{p'q} = \left| \frac{C_q^{out}}{C_{p'}^{in}} \right|^2 \times \frac{j_q}{j_{p'}}, \quad (18)$$

$j_q$  and  $j_{p'}$  - strumienie prądów dla odpowiednich modów  $p'q$

- pstwo przejścia z  $p'$  na wejściu do  $q$  na wyjściu
- Pstwo przejścia wysumowane po wejściowych

$$T(E) = \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^P T_{pq}, \quad (19)$$

- Formuła Landauera

$$G = \frac{2e^2}{h} \int_{\epsilon}^{\infty} T(E) \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE, \quad (20)$$