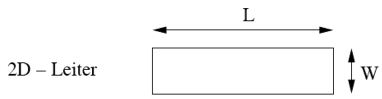
Theorie des mesoskopischen Elektronentransports

Prof. Dr. habil. Wolf Gero Schmidt

Inhaltsverzeichnis

0. Einführung



$$\boxed{\text{Leitwert} \qquad G = \sigma \frac{W}{L} \qquad (\text{Ohm}), \qquad \sigma = \text{Leitfähigkeit}}$$

Voraussetzungen an Größe von $W\&L$? $\rightarrow$ Experimente seit 80er Jahren

<u>Ohmsches Verhalten für</u>

$$\begin{aligned} W, L \quad &\gg \quad \lambda : \text{de-Broglie-Wellenlänge} \\ &\gg \quad L_m : \text{mittlere freie Weglänge} \\ &\qquad \text{(mittlere Weglänge bis Impulsänderung)} \\ &\gg \quad L_\varphi : \text{Phasenrelaxationslänge} \\ &\qquad \text{(mittlere Weglänge bis Phasenänderung)} \end{aligned}$$

stark material- und temperaturabhängig

<u>Größenordnungen</u>

0.1	-	1 mm	L_m im Quantum-Hall-Regime
10	-	100 μm	L_m/L_φ in HL für $T < 4K$
0.01	-	1 μm	HL-BE
10 nm	-	100 nm	λ in HL
			L_m in polykristallinen Metallen
1 Å	-	1 nm	λ in Metallen, atomare Abstände

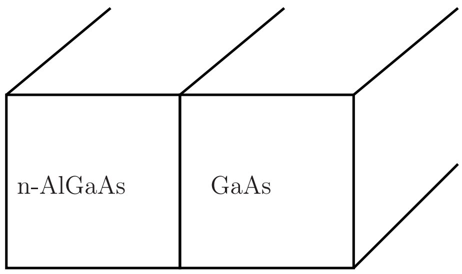
Mesoskopischer Leiter?

- groß bez. der Gitterkonstante $\sim$ Å
- zu klein für Ohmsches Verhalten

$\Rightarrow$ mesoskopischer Transport im Bereich $nm \ldots 100\mu m$

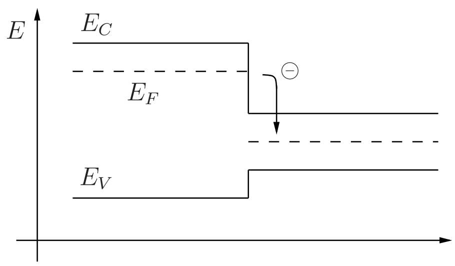
1. Grundbegriffe

1.1. 2-DEG



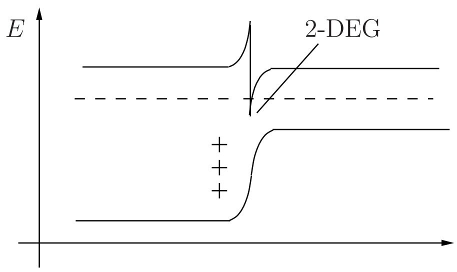
Bsp. für technische

Realisierung



Ausgleich der Fermi-Energien durch LT

$\Rightarrow$ Bandverbiegung



$\Rightarrow$ Peak der e^--Dichte nahe Grenzfläche

Warum GaAs? Sehr hohe Beweglichkeit!

betrachten e^- unter Einfluß eines externen Feldes $\bar{E}$
$\Rightarrow$ zusätzlich zur zufälligen Bewegung gibt es eine Driftgeschwindigkeit v_d

$$\text{Im GG:} \quad \left(\frac{d\bar{p}}{dt}\right)_{Streuung} = \left(\frac{d\bar{p}}{dt}\right)_{Feld}$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{m\bar{v}_d}{\tau_m} = e\bar{E} \qquad\qquad \tau_m \ldots \text{Stoßzeit(Impulsrelaxationszeit)}$$

$$\boxed{\text{Beweglichkeit } \mu \equiv \left|\frac{v_d}{E}\right| = \frac{|e|\tau_m}{m}}$$

1.2. Effektive-Massen-Approximation (EMA)

betrachten e^- im Leitungsband (E_C),
beschrieben durch

$$\left\{E_C + \frac{(i\hbar\nabla + e\bar{A})^2}{2m} + U(\bar{r})\right\}\psi(\bar{r}) = E\psi(\bar{r})$$

$U(\bar{r})$: Potential durch Raumladungen etc.
$\bar{A}$: Vektorpotential
m: effektive Masse
Banddiskontinuitäten in $E_C \rightarrow E_C = E_C(\bar{r})$

Wellenfunktionen aus der EMA-Gleichung sind nicht die wahren Wellenfunktionen, sondern "geglättete" Versionen ohne die rapiden Oszillationen im atomaren Bereich

Beispiele:

(i) homogener HL mit
$U(r) = 0, \quad \bar{A} = 0, \quad E_C = const.$
$\Rightarrow \psi(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\bar{r}}$
(anstelle von Blochwellen $\psi(\bar{r}) = u_k(\bar{r})e^{i\bar{k}\bar{r}}$)

(ii) 2-DEG
e^- frei in x-$y-$Ebene, beschränkt in z-Richtung durch Potential $U(z)$, sei $\bar{A} = 0$
$\Rightarrow \psi(\bar{r}) = \phi_n(z)e^{ik_x x}e^{ik_y y}$
$E = E_C + \varepsilon_n + \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$
n: Subbandindex für ϕ_n, ε_n,
i. all. $\varepsilon_2 \gg kT \Rightarrow$ betrachten nur ε_1

$\Rightarrow$ können z-Dimension völlig ignorieren

$\Rightarrow$ neue EMA-GL. $\boxed{\begin{array}{l} E_S + \dfrac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(x,y)\psi(x,y) = E\psi(x,y) \\ \text{mit } E_S = E_C + \varepsilon_1 \end{array}}$

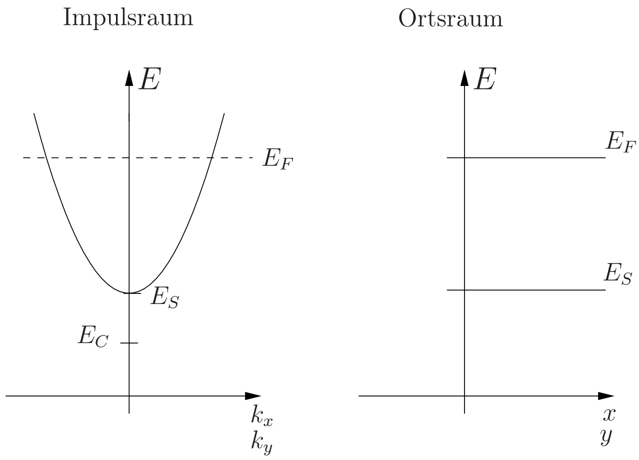
Speziell wieder $U = 0, \quad \bar{A} = 0$

$\Rightarrow \quad \psi(x,y) = \dfrac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_x x} e^{ik_y y}$

mit Eigenenergien

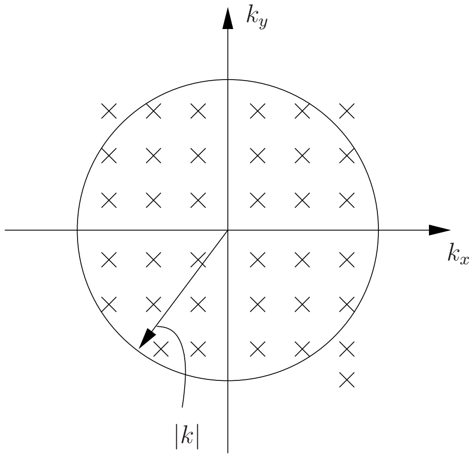
$$E = E_S + \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2).$$

Banddiagramm im



Wieviel Zustände mit Energie $\leq E$? $\quad (E > E_S)$

$$N_T(E) = \#k_x, k_y \quad \text{mit} \quad E_S + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq E$$



Annahme:

Leiter mit Dimensionen L_x, L_y, period. RB

$$|k| = \sqrt{\frac{(E - E_S)2m}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow k_{x/y} = \frac{n_{x/y}2\pi}{L_{x/y}}$$

mit $n_{x/y} \in \mathbb{Z}$.

$\Rightarrow$ "Größe" eines Zustands im $k_x - k_y-$Raum

$$\frac{2\pi}{L_x} \cdot \frac{2\pi}{L_y} = \frac{4\pi^2}{S} \qquad S : \text{Fläche des Leiters}$$

$$\Rightarrow N_T(E) = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \cdot \underbrace{\pi k^2}_{\substack{\text{erlaubter} \\ \text{k-Raum}}} \cdot \underbrace{\frac{S}{4\pi^2}}_{\substack{\text{Dichte im} \\ \text{k-Raum}}}$$

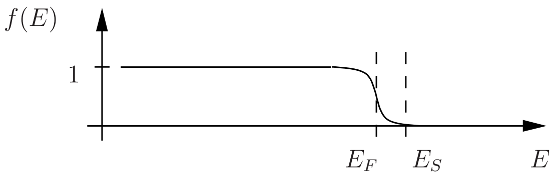
$$\boxed{N_T(E) = S\frac{k^2}{2\pi} = \frac{mS}{\pi\hbar^2}(E - E_S)}$$

Dichte der Zustände pro Fläche, pro Energieeinheit

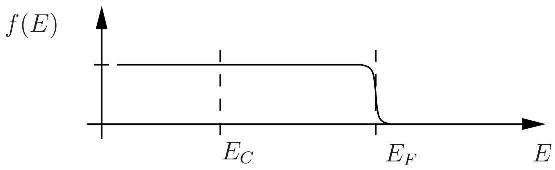
$$\boxed{N(E) = \frac{1}{S}\frac{d}{dE}N_T(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2}\theta(E - E_S)}$$

Besetzung der erlaubten Zustände

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} \qquad \text{mit } E_F : \text{ Fermi-Energie}$$



$\Rightarrow$ nicht entarteter Grenzfall;
$f(E') \approx e^{\frac{-(E-E_F)}{kT}}$
für $E > E_S$



$\Rightarrow$ entarteter Grenzfall;
$f(E') \approx \theta(E_F - E)$
für $E > E_S$

Elektronendichte

$n_S = \int N(E) f(E) dE$
im entarteten Grenzfall
$n_S = N_S \cdot (E_F - E_s)$ mit $N_s \equiv \dfrac{m}{\pi\hbar^2}$ (2D-Zustandsdichte)
für $kT \ll E$ Stromleitung durch e^- dicht an der Fermi-Kante, dort Fermi-Wellenvektor

$$E_F - E_S = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \Rightarrow \hbar k_F = \sqrt{2m(E_F - E_S)}$$
$$= \sqrt{2m \cdot \frac{\pi\hbar^2}{m} \cdot n_S}$$
$$\Rightarrow k_F = \sqrt{2\pi n_S}$$

Fermi-Geschwindigkeit $v_F = \dfrac{\hbar k_F}{m}$

1.3. Charakteristische Längen

Ohmsches Verhalten für $W,\ L \gg \lambda,\ L_m,\ L_\varphi$

- Wellenlänge, Strom getragen durch e^- an Fermi-Kante

$$\lambda_f = \frac{2\pi}{k_F} = \sqrt{\frac{2\pi}{n_S}}$$

$n_S = s \cdot 10^{11} cm^{-2} \longrightarrow \lambda_f \approx 35\ nm$ (typ. für HL)

- <u>mittlere freie Weglänge L_m</u>

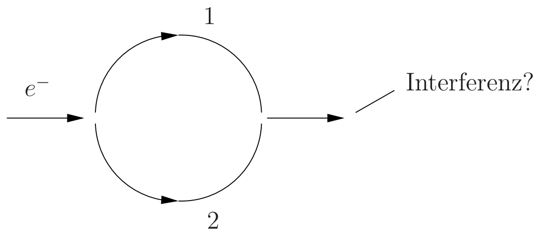
  Zusammenstöße mit Gitterdefekten, Phononen, anderen e^-
  $\longrightarrow$ Streuung des e^- im anderen Zustand
  Stoßzeit: τ_c
  Impulsrelaxationszeit: τ_m

$$\frac{1}{\tau_m} = \frac{1}{\tau_c}\alpha_m \qquad \alpha_m \text{ :Effektivität der Streuung,} \quad 0 \leq \alpha_m \leq 1$$

  $L_m = v_F \tau_m$
  $n_S = 5 \cdot 10^{11} cm^{-2} \longrightarrow L_m = 30\ \mu m$

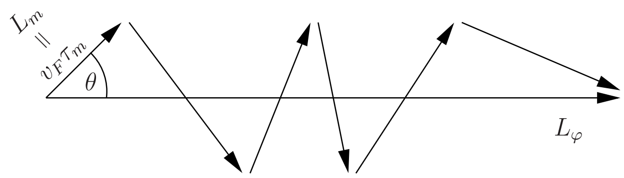
- <u>Phasenrelaxationslänge L_φ</u>

  Gedankenexperiment, Strahlaufspaltung



  - In jeden Arm statische Streuer (Defekte)
    $\longrightarrow$ zerstören nicht die Phasenbeziehung (nur Verschiebung um konstanten Betrag)
  - dynamische Streuer (Phononen)
    $\longrightarrow$ zerstören stationäre Interferenz

Insbesondere für polykristalline Materialien $\tau_\varphi \gg \tau_m$ für $t > \tau_m$ zufällige Geschwindigkeitsverteilung



(Brownsche Bewegung)

$$L_\varphi^2 = D\tau_\varphi \qquad \text{mit} \quad D = \frac{v_F^2 \tau_m}{2} \qquad \text{(später in 1.6)}$$

1.4. Magnetfelder

Im GG: $\left(\frac{d\bar{p}}{dt}\right)_{\text{Streuung}} = \left(\frac{d\bar{p}}{dt}\right)_{\text{Feld}}$

$$\frac{m\bar{v}_d}{\tau_m} = e[\bar{E} + \bar{v}_d \times \bar{B}]$$

$$\begin{pmatrix} \frac{m}{e\tau_m} & -B \\ B & \frac{m}{e\tau_m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$$

mit Stromdichte $\bar{I} = e\bar{v}_d n_S$ folgt

$$\begin{pmatrix} \frac{m}{e\tau_m} & -B \\ B & \frac{m}{e\tau_m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{I_x}{en_S} \\ \frac{I_y}{en_S} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$$

Vgl. mit Definition des Widerstandstensors

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varrho_{xx} & \varrho_{xy} \\ \varrho_{yx} & \varrho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_x \\ I_y \end{pmatrix}$$

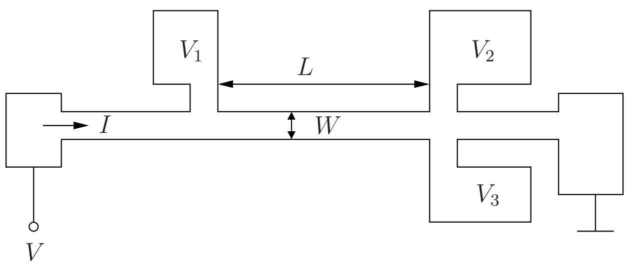
zeigt

$$\varrho_{xx} = \varrho_{yy} = \frac{m}{e^2 n_S \tau_m}$$

$$\varrho_{yx} = -\varrho_{xy} = \frac{B}{en_S}$$

Hall-Widerstand steigt mit B

<u>Exp.</u>



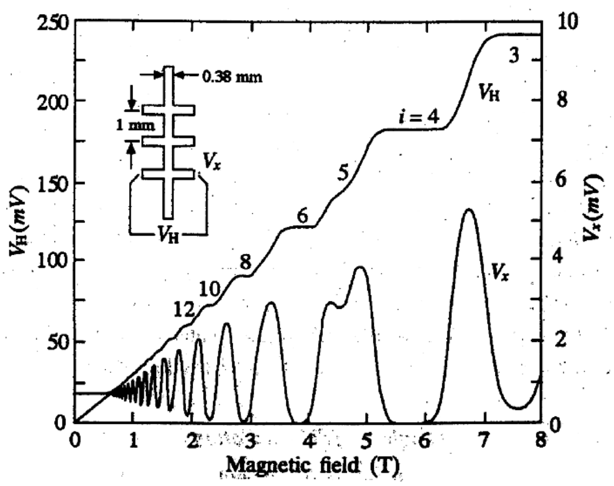
$$V_x = V_1 - V_2$$
$$V_H = V_2 - V_3$$

$I_y = 0 \quad \Rightarrow$

$$E_x = \varrho_{xx} I_x \quad \Rightarrow \quad \varrho_{xx} = \frac{E_x}{I_x} = \frac{\frac{V_x}{L}}{\frac{I}{W}} = \frac{V_x W}{IL}$$

$$E_y = \varrho_{yx} I_x \quad \Rightarrow \quad \varrho_{yx} = \frac{E_y}{I_x} = \frac{\frac{V_H}{L}}{\frac{I}{W}} = \frac{V_H}{I}$$

E. Cage, R.F. Dziuba & B.F. Field
IEEE Trans. Instrum. Meas. 34, 301 (1985)



$L = 1mm$
$W = 0.4mm$
$T = 1.2K$
$I = 25\mu A$

$\Rightarrow$ Drude-Modell funktioniert nur für hohe Temperatur, kleine B-Felder

Warum? (volkstümlich)

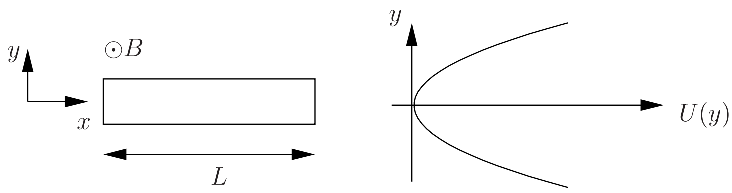
- B-Feld zwingt e^- auf Kreisbahn
- Umfang der Kreisbahn muß kommensurabel sein mit λ
  $\longrightarrow$ nicht alle λ, d.h. kinetische Energien erlaubt $\longrightarrow$ diskrete Niveaus

- wahrnehmbarer Effekte falls e^- mehrere Orbits durchlaufen kann bevor es gestreut wird

$$\tau_m \gg \frac{1}{w_c} \qquad w_c : \text{Zyklotronfrequenz}$$

$\longrightarrow$ hohe B- Felder, geringe Streuung

1.5. Quermoden



$$\text{EMA-GL}: \quad \left\{E_S + \frac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(y)\right\}\psi(x,y) = E\psi(x,y)$$

$$\bar{B} = rot\bar{A}, \quad \bar{A} = \begin{pmatrix} -By \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \bar{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$$

damit

$$\left\{E_S + \frac{(p_x + eBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + U(y)\right\}\psi(x,y) = E\psi(x,y)$$

mit

$$p_x \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$$

Ansatz: $\psi(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}\chi(y)$

$$\left\{E_S + \frac{(\hbar k + eB_y)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + U(y)\right\}\chi(y) = E\chi(y)$$

i. allg. keine analytische Lösung

$\longrightarrow$ untersuchen Spezialfälle

- $B = 0, \quad U(y) = \frac{1}{2} m\omega_0^2 y^2$

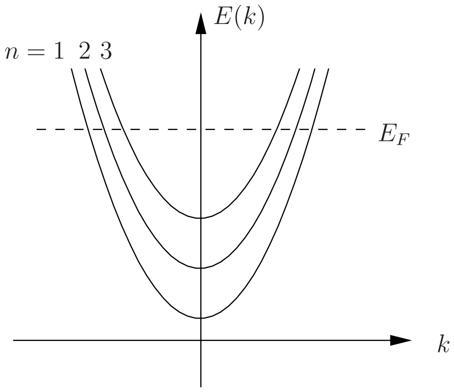
$$\left\{ E_S + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 y^2 \right\} \chi(y) = E\chi(y)$$

$\chi_{n,k}(y) = u_n(q) \quad$ mit $\quad q = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} y$

wobei $u_n(q) = e^{-\frac{q^2}{2}} \qquad H_n(q):$ Hermitesches Polynom

$$H_0(q) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}$$
$$H_1(q) = \frac{\sqrt{2} q}{\sqrt[4]{\pi}}$$
$$H_2(q) = \frac{2q^2 - 1}{\sqrt{2}\sqrt[4]{\pi}}$$

$$E(n,k) = E_S + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$



Gruppengeschwindigkeit

$$v(n,k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n,k)}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m}$$

Typisch: Confinement in z-Richtung $\sim 5 \ldots 10 nm$
$\longrightarrow$ diskrete Niveaus $\sim 100\, meV$ auseinander
$\longrightarrow$ nur unterstes Band besetzt
aber schwaches Confinement in y
$\longrightarrow$ mehrere transversale oder Quermoden besetzt

- $\underline{U = 0, \quad B \neq 0}$

$$\left\{ E_S + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{(eBy + \hbar k)^2}{2m} \right\} \chi(y) = E\chi(y)$$

mit $y_k \equiv \dfrac{\hbar k}{|e|B}$ und $\omega_c \equiv \dfrac{|e|B}{m}$ folgt

$$\left\{ E_S + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_c^2 (y + y_k)^2 \right\} \chi(y) = E\chi(y)$$

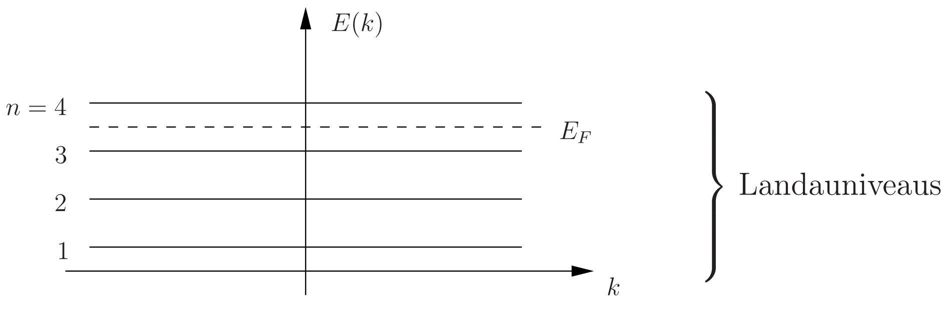
analog zu vorigem Fall, aber jetzt verschobene Parabel

$$\longrightarrow \qquad \chi_{n,k}(y) = u_n(q + q_k)$$

mit

$$q = \sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}} y$$
$$q_k = \sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}} y_k$$

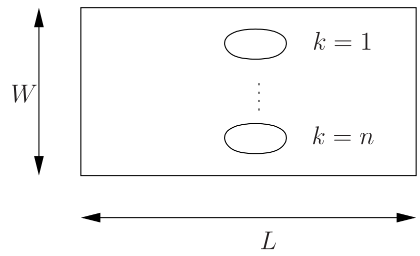
$$E(n,k) = E_S + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$



Gruppengeschwindigkeit:

$$v(n,k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n,k)}{\partial k} = 0! \qquad \text{großer Unterschied zum Fall } B = 0,\ U \neq 0$$

Ursache: e^- "bewegen" sich auf Kreisbahn
Wellenfunktionen verschieben sich entlang y mit wachsenden k:



Wieviel e^- auf einem Landau-Niveau?

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L} \quad \Rightarrow \quad \Delta y_k = \frac{\hbar \Delta k}{|e|B} = \frac{2\pi\hbar}{|e|B \cdot L}$$

$$N = \underbrace{2}_{Spin} \cdot \frac{W}{\Delta y_k} = \frac{|e|B \cdot L \cdot W}{\pi\hbar} = \frac{|e|B \cdot S}{\pi\hbar}$$

- $\underline{U \neq 0, \quad B \neq 0}$

$$\left\{ E_S + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{(eBy + \hbar k)^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 y^2 \right\} \chi(y) = E\chi(y)$$

$$\text{mit} \quad \omega_{c0}^2 \equiv \omega_c^2 + \omega_0^2, \qquad \omega_c \equiv \frac{|e|B}{m}$$

$$y_k \equiv \frac{\hbar k}{|e|B}$$

$$\left\{ E_S + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \frac{\omega_0^2 \omega_c^2}{\omega_{c0}^2} y_k^2 + \frac{1}{2} m\omega_{c0}^2 \left[y + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} y_k \right]^2 \right\} \chi(y) = E\chi(y)$$

$\longrightarrow$ wieder 1D-SG mit parabolischem Potential

$$\Rightarrow \chi_{n,k}(y) = u_n \left[q + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} q_k \right]$$

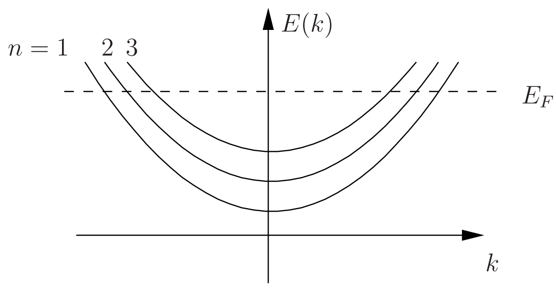
mit $q = \sqrt{\frac{m\omega_{c0}}{\hbar}} y, \quad q_k = \sqrt{\frac{m\omega_{c0}}{\hbar}} y_k$

$$E(n,k) = E_S + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{\omega_0^2}{\omega_{c0}^2}$$

$$v(n,k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n,k)}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} \frac{\omega_0^2}{\omega_{c0}^2}$$

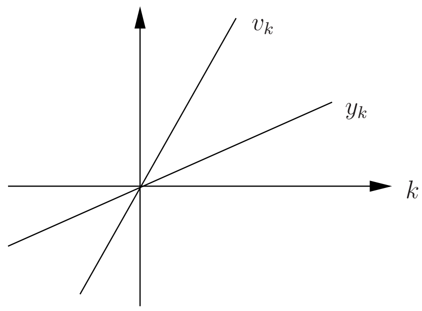
$\Rightarrow$ Vgl. mit $B = 0$: $m \to m\left(1 + \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2}\right)$

B-Feld vergrößert effektive Masse
$\longrightarrow$ Dispersion wird flacher



Wellenfunktionen zentriert um $y = -y_k$
mit

$$\begin{aligned} y_k &= \frac{\hbar k}{|e|B} \\ &= v(n,k)\frac{\omega_{c0}^2}{\omega_0^2} \cdot \frac{m}{|e|B} = v \cdot \frac{\omega_0^2 + \omega_c^2}{\omega_c \omega_0^2} \end{aligned}$$

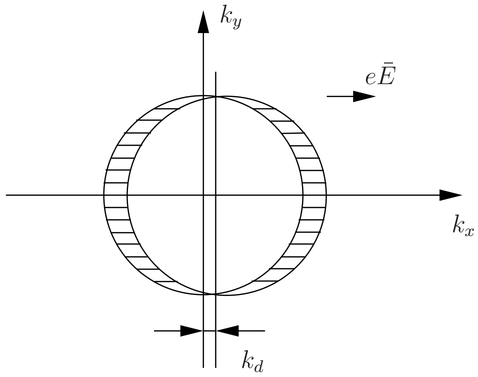


Transversale Position der WF proportional zur jeweiligen Geschwindigkeit
$\longrightarrow$ Zustände die Strom in $+x$ tragen separiert von Zuständen die Strom in $-x$-Richtung tragen
$\longrightarrow$ drastische Reduktion der $e^- - e^-$-Streuung
$\longrightarrow$ drastische Reduktion des Widerstands im QH-Regime!

1.6. Stromdichte

$$\bar{I} = en_s\bar{v}_d \qquad \begin{array}{l} \bar{v}_d : \text{Driftgeschwindigkeit} \\ n_s : e^{-}\text{-Dichte} \end{array}$$

einfaches Bild täuscht,
energieabhängige Messungen zeigen, daß nur e^- um die Fermi-Energie zum Nettostromfluß beitragen



$f(\bar{k})$: Wahrscheinlichkeit, daß $\bar{k}$ besetzt ist

$$T = 0 \quad \Rightarrow \quad f(k) = \begin{cases} 1 & |\bar{k}| < k_F \\ 0 & |\bar{k}| > k_F \end{cases}$$

E-Feld verschiebt die Verteilung so daß

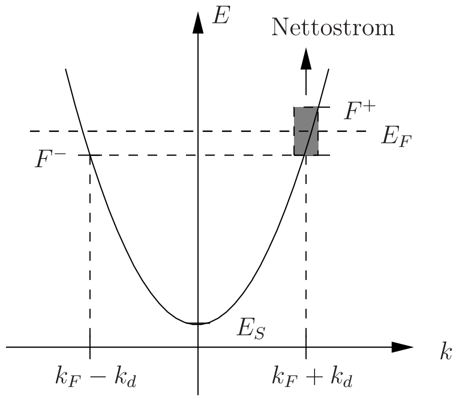
$$f(\bar{k})\Big|_{E\neq 0} = f(\bar{k} - \bar{k}_d)\Big|_{E=0}$$

mit

$$\frac{\hbar\bar{k}_d}{m} = \bar{v}_d \overset{(\text{früher},1.1)}{=} \frac{e\bar{E}\tau_m}{m} \quad \Rightarrow \quad \bar{k}_d = \frac{e\bar{E}\cdot\tau_m}{\hbar}$$

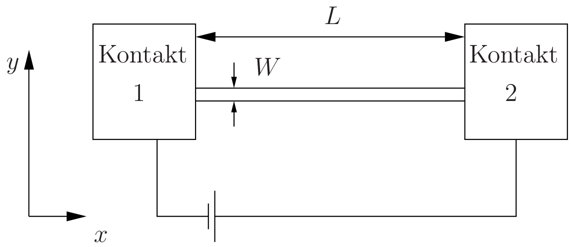
führen Quasi-Fermi-Niveaus F^- & F^+ ein;
F^+ für $e^- \uparrow\uparrow e\bar{E}$
F^- für $e^- \uparrow\downarrow e\bar{E}$

$$F^{\pm} \approx \frac{\hbar^2(k_F \pm k_d)^2}{2m}$$

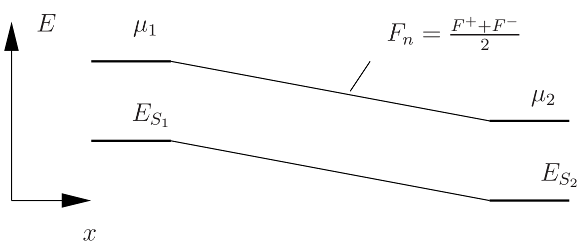


$$\Rightarrow \qquad F^+ - F^- \approx \frac{2\hbar^2 k_F k_d}{2m} = 2eE \underbrace{\tau_m \cdot v_F}_{L_m}$$
$$= 2eEL_m$$

$\Rightarrow$ Separation der Quasi-Fermi-Niveaus proportional zum Energiegewinn eines e^- entlang der mittleren freien Weglänge



Banddiagramm unter Spannung



- e^- mit Energien $< \mu_2$ tragen nicht zum Stromfluß bei

- $\underbrace{\#e^-}_{\text{(eigentlich Dichte!)}}$ mit $\mu_1 < E < \mu_2$: $\begin{cases} N_s(\mu_1 - \mu_2) & \text{in Kontakt 1} \\ 0 & \text{in Kontakt 2} \end{cases}$

  $\left(N_s = \dfrac{m}{\pi\hbar^2}, \quad \text{2D-Zustandsdichte, vgl. 1.2} \right)$

$\Rightarrow$ Konzentrationsgradient stromrelevanter e^- von Kontakt 1 zu Kontakt 2
$\Rightarrow$ Diffusionsstromdichte

$$I = eD\nabla n = eD\underbrace{\frac{\mu_1 - \mu_2}{L}}_{Ee} N_S = e^2 DN_S E$$

Vgl. mit Definition der Leitfähigkeit

$$I = \sigma E \quad \Rightarrow \quad \boxed{\sigma = e^2 N_S D \qquad \text{Einstein-Beziehung für entartete Leiter}}$$

früher (1.4) im Drude-Bild

$$I = \frac{e^2 \tau_m n_s}{m} E = en_s \mu \cdot E \quad \text{mit Beweglichkeit } \mu = \frac{e\tau_m}{m}$$

$\Rightarrow \quad \sigma = en_s\mu$

Konsistenz erfordert

$$en_s\mu = e^2 N_s D \quad \Rightarrow \quad D = \frac{n_s \mu}{eN_S}$$

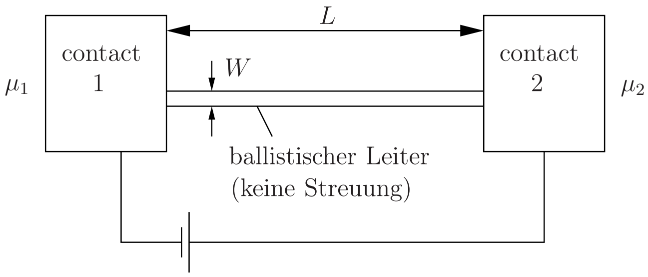
mit $n_s = N_S \cdot \underbrace{(E_F - E_S)}_{\frac{m}{2}v_f^2}$: Elektronendichte

folgt

$$\begin{aligned} D &= \frac{m}{2} v_F^2 \cdot \frac{\mu}{e} \qquad \text{(jetzt } \mu \text{ von oben)} \\ &= \frac{v_F^2}{2} \frac{m}{e} \cdot \frac{e\tau_m}{m} \\ \Rightarrow \quad & \boxed{D = \frac{1}{2} v_F^2 \tau_m} \end{aligned}$$

2. Landauer-Büttiker Formalismus

2.1. Widerstand eines ballistischen Leiters



Ohmsches Verhalten: $G = \sigma \dfrac{W}{L}$
reduzieren $L \quad \Rightarrow \quad G \to G_c = G(L \ll L_m)$
Woher kommt G_c?
Kontaktwiderstand G_c^{-1} infolge der Umverteilung des Stroms, in den Kontakten ∞ viele Moden, im Leiter nur wenige Moden

Kontaktwiderstand beseitigen durch Kontakte welche identisch zum Leiter sind?

Ja! Aber dann macht Messung keinen Sinn! Wollen das Spannung über Leiter abfällt, deshalb müssen die Kontakte ”leitfähiger” sein als der Leiter

Annahme: ”reflexionsfreie” Kontakte, d.h. e^- gehen vom Leiter in den Kontakt ohne Reflexionen (gilt nicht umgekehrt!)

numerische Rechnungen rechtfertigen diese Annahme
(Szater & Stone, Phys. Rev. Lett. 62, 300 (1989))
$\Rightarrow$ einfache Situation:

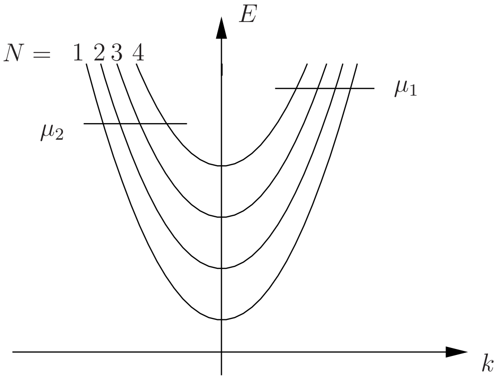
$+k$-Zustände besetzt mit e^- aus linkem Kontakt

$-k$-Zustände besetzt mit e^- aus rechtem Kontakt

$\Rightarrow$ Quasi-Ferminiveau

$$F^+(+k) = \mu_1$$
$$F^-(-k) = \mu_2$$

(keine kausale Beziehung zwischen rechtem Kontakt und $+k$-Zuständen bzw. linkem Kontakt und $-k$-Zuständen)



$\Rightarrow$ Für $T = 0$ wird der Strom von $+k$-Zustände zwischen μ_1 und μ_2 getragen

Jede Mode hat Dispersionsrelaxation $E(N,k)$ mit minimaler Energie $\varepsilon_N = (N, k = 0)$ unterhalb der sie sich nicht ausbreiten kann

Moden mit Energie E

$$M(E) = \sum_N \theta(E - \varepsilon_N)$$

Strom getragen von einer Mode?

betrachten einzelne Mode, $+k$-Zustände besetzt entsprechend Verteilungsfunktion $f^+(E)$

Strom $\qquad I = env \qquad n : \#e^-/$Längeneinheit

einzelner Zustand im Leiter der Länge L

$$\longrightarrow n = \frac{1}{L}, \text{ summieren über } k\text{-Zustände}$$

$$\Rightarrow I^+ = \frac{e}{L} \sum_k v f^+(E) = \frac{e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E)$$

$$\sum_k \to 2 \cdot \frac{L}{2\pi} \int dk$$

$$
\begin{aligned}
I^+ =& \frac{e}{L} \cdot 2 \frac{L}{2\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E) dk \\
=& \frac{2e}{h} \int_\varepsilon^\infty f^+(E) dE
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \quad \boxed{\begin{array}{cl} \text{Strom} & \text{pro Mode pro Energieeinheit} \\ \text{ist} & \frac{2e}{h} \approx 80 nA/meV \end{array}}
$$

Verallgemeinerung auf viele Moden

$$
\boxed{I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} f^+(E) M(E) dE; \quad M(E) = \sum_N \theta(E - \varepsilon_N)}
$$

Annahme: $M(E) = M$ für $\mu_2 < E < \mu_1$

$$
\Rightarrow I = \frac{2e}{h} \cdot M \cdot (\mu_1 - \mu_2) = \underbrace{\frac{2e^2}{h} M}_{G_c} \cdot \underbrace{\frac{\mu_1 - \mu_2}{e}}_{V}
$$

$$
\boxed{\begin{array}{l} \text{Kontaktwiderstand} \\ G_c^{-1} \equiv \frac{\mu_1 - \mu_2}{e \cdot I} = \frac{h}{2e^2 M} \approx \frac{12.9\ k\Omega}{M} \end{array}}
$$

$M(E)$ hängt von ε_N, d.h. $U(y)$ ab

breiter Leiter, d.h. $W \gg \frac{1}{k_F}$, Details unwichtig

$\longrightarrow$ Annahme: periodischer RB $\Rightarrow$ $\Delta k_y = \frac{2\pi}{W}$, jedes k_y entspricht erlaubter Mode

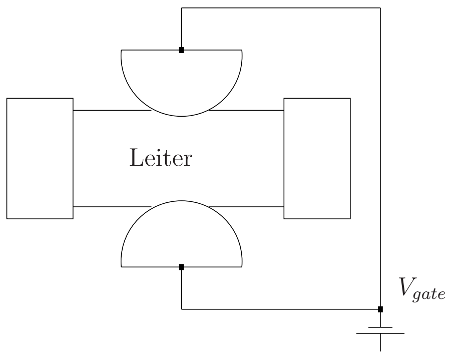
Stromtragende k_y gilt: $-k_F < k_y < k_F$

$$
\begin{aligned}
\longrightarrow \quad M =& Int\left(\frac{2k_F}{2\pi/W}\right) = Int\left(\frac{W \cdot k_F}{\pi}\right) \\
=& Int\left(\frac{W \cdot 2}{\lambda_F}\right)
\end{aligned}
$$

Bsp.: (FET)

$$
\begin{array}{l} \lambda_F \approx 30\ nm \text{ (typ. für HL)} \\ W \approx 15 \mu m \end{array} \quad \Rightarrow \quad M \approx 1000, \quad G_c^{-1} \approx 12.5\ \Omega
$$

Exp.: Vgl. Wees et al., PRL 60, 848 (1988)



⇒ Kontinuierliche Verengung des Leiters durch V_{gate}

⇒ diskrete Abnahme der Leitfähigkeit

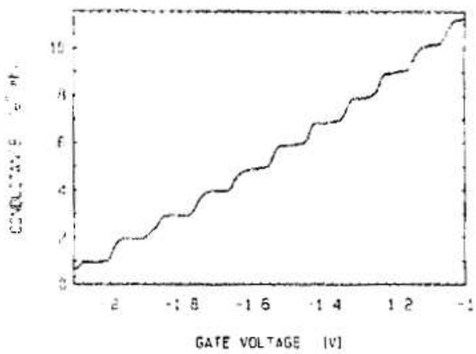


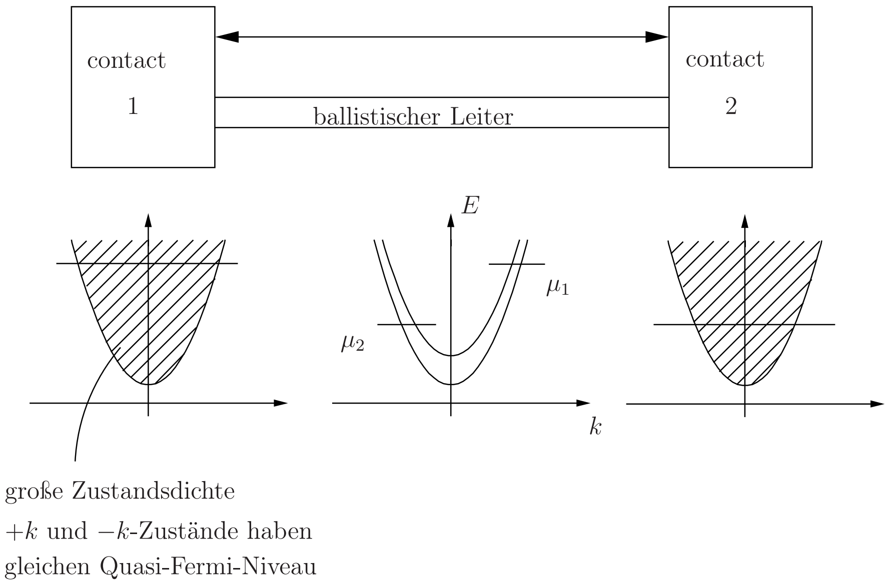
Abbildung: Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988)

Bem.: 2 wesentliche Unterschiede zu Ohm

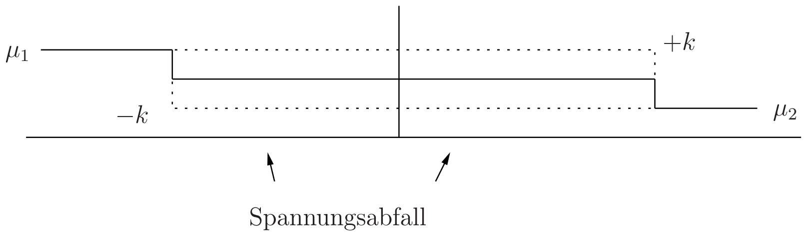
- längenunabhängiger Widerstand
- diskrete Abhängigkeit von Breite

Wo fällt die Spannung ab?

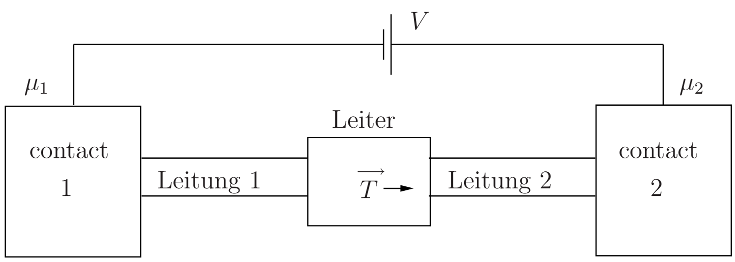
Kontaktwiderstand ist Eigenschaft des Leiters, trotzdem fällt die Spannung an der Grenzfläche zum Kontakt ab:



mitteln chemisches Potential von $+k$ und $-k$-Zustände



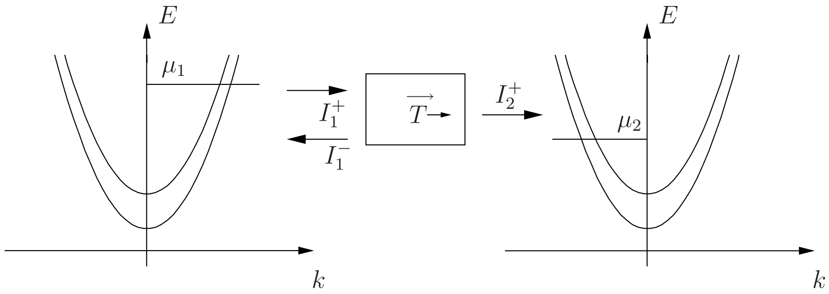
2.2. Landauer-Gleichung



Leitung 1/2: ballistische Leiter, M transversale Moden

T: Transmissionskoeffizient: Wahrscheinlichkeit das ein e^- aus Leitung 1 nach Leitung 2 transmittiert

reflexionsfreie Kontakte $\Rightarrow$ $+k$-Zustände in Leitung 1 kommen von Kontakt 1, haben chem Pot. μ_1
$-k$-Zustände in Leitung 2 kommen von Kontakt 2, haben chem Potential μ_2



$$T = 0 \quad \Rightarrow \quad I_1^+ = \left(\frac{2e}{h}\right) M(\mu_1 - \mu_2)$$ ((2.1) Strom durch ballistischen Leiter)

Zustrom von e^- von Leitung 1 in Leiter

Abfluß durch Leitung 2

$$I_2^+ = \left(\frac{2e}{h}\right) M(\mu_1 - \mu_2) \cdot T$$

Rest wird reflektiert in Kontakt 1

$$I_1^- = \left(\frac{2e}{h}\right) M(\mu_1 - \mu_2)(1 - T)$$

Nettostrom

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \left(\frac{2e}{h}\right) MT(\mu_1 - \mu_2)$$

damit

$$\boxed{G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} MT \qquad \text{Landauer-Gleichung}}$$

Bemerkung:

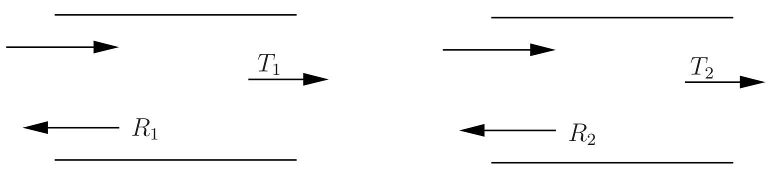
- $T = 1 \longrightarrow$ Widerstand eines ballistischen Leiters
- früher (1.6) Einstein-Beziehung für entartete Leiter

$$\sigma = e^2 N_S D$$

$$\left.\begin{array}{l}\text{DOS } N_s \to M \\ \text{Diff. Konst. } D \to T\end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad \sigma \to G$$

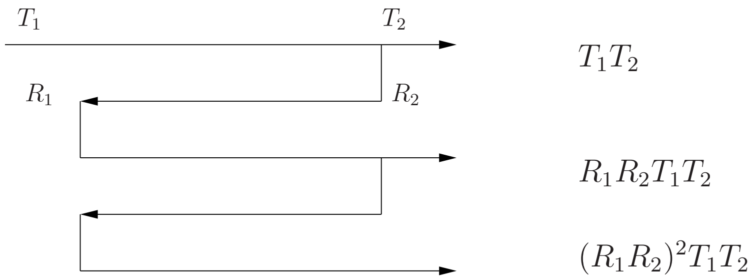
- Ohmsches Verhalten im Grenzwert?

  2 Leiter in Reihe:



Gesamttransmission? $\qquad T_{12} = T_1 \cdot T_2$? (naiv)

multiple Reflexionen (vernachlässigen Phase)



$$\begin{aligned}\Rightarrow \quad T_{12} &= T_1T_2 + T_1T_2R_1R_2 + T_1T_2R_1^2R_2^2 + \cdots \\ &= \frac{T_1T_2}{1 - R_1R_2}\end{aligned}$$

mit $T = 1 - R$ folgt

$$\frac{1 - T_{12}}{T_{12}} = \frac{1 - T_1}{T_1} + \frac{1 - T_2}{T_2}$$

$\Rightarrow \dfrac{(1 - T)}{T}$ ist additiv

$\Rightarrow$ für N Streuer in Reihe gilt:

$$\begin{aligned}\frac{1 - T(N)}{T(N)} =& N\frac{1 - T}{T} \\ T(N) =& \frac{T}{N(1 - T) + T}\end{aligned}$$

$N = \nu L \quad$ mit ν : lin. Dichte der Streuer
$\qquad\qquad\qquad\quad L$: Länge des Leiters

$\Rightarrow T(L) = \dfrac{L_0}{L + L_0}$
mit

$$L_0 \equiv \frac{T}{\nu(1-T)}$$

$$\left.\begin{array}{l} L_m : \text{mittlere freie Weglänge bevor } e^- \text{gestreut wird} \\ 1 - T : \text{Streuwahrscheinlichkeit an einem Streuer} \end{array}\right\}$$

$$\longrightarrow \underbrace{(1-T)\nu}_{\substack{\text{effektive Dichte} \\ \text{der Streuer}}} L_m \approx 1 \quad \Rightarrow \quad L_m \approx \frac{1}{\nu(1-T)} \underset{\substack{\uparrow \\ T \approx 1}}{\approx} L_0$$

Jetzt Landauer-Gl.

$$G = \frac{2e^2}{h} M T$$

für breiten Leiter $M = \#k = \dfrac{2k_F}{\Delta k} = \dfrac{k_F \cdot W}{\pi} \quad \left(\Delta k = \dfrac{2\pi}{W} \text{ früher (1.2)} \right)$

damit $G = \dfrac{2e^2}{h} \dfrac{k_F \cdot W}{\pi} T$

mit $\hbar k_F = m v_F, \quad N_s = \dfrac{m}{\pi \hbar^2}$ (früher (1.2)), $\quad h = 2\pi\hbar$

folgt $G = e^2 W N_s \left(\dfrac{v_F \cdot T}{\pi} \right)$

mit $T = \dfrac{L_0}{L + L_0} \qquad$ (gerade abgeleitet, $L_0 \approx L_m$)

$$\Rightarrow \quad G = \frac{W}{L + L_0} \underbrace{e^2 N_s \left(\underbrace{\frac{v_F L_0}{\pi}}_{D} \right)}_{\sigma}$$

$$\text{(früher, (1.6))} \begin{cases} \text{Diffusionskonst.} \quad D = \dfrac{1}{2} v_F^2 \tau_m \approx \dfrac{v_F L_0}{\pi} \\ \text{Einstein-Bez.} \quad \sigma = e^2 N_s D \end{cases}$$

$$\longrightarrow G = \frac{\sigma W}{L + L_0}$$

$$\boxed{G^{-1} = \frac{L + L_0}{\sigma W} = \underbrace{\frac{L}{\sigma W}}_{\text{ohmscher Widerstand}} + \underbrace{\frac{L_0}{\sigma W}}_{\text{Kontakt-widerstand}}}$$

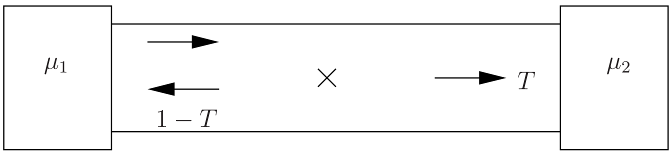
allgemein gilt:

$$G^{-1} = \frac{h}{2e^2 M}\frac{1}{T} = \frac{h}{2e^2 M} \cdot \frac{1-T}{T} + \frac{h}{2e^2 M}$$

2.3. Ursprung des Widerstands

$$G = \left(\frac{2e^2}{h}\right) MT$$

Streuer geben Anlaß zu Widerstand durch Reduzierung der Transmission
Betrachten Leiter mit M Moden, 1 Streuer mit T



$$G^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} + \underbrace{\frac{h}{2e^2 M}\frac{1-T}{T}}_{\text{Streuwiderstand } G_s^{-1}}$$

- Wo fällt die Spannung am Streuwiderstand ab?
- Energiedissipation I^2/G_s (falls Streuer elastisch)?

⇒ Untersuchen Energieverteilung der e^- (vernachlässigen Phaseneffekte, reflexionsfreie Kontakte)

$+k$-Zustände, links von Streuer

$$f^+(E) = \theta(\mu_1 - E)$$

$-k$-Zustände, rechts von Streuer

$$f^-(E) = \theta(\mu_2 - E)$$

$+k$-Zustände, direkt rechts von Streuer

$$f^+(E) = T \quad \underset{\substack{\downarrow \\ \text{von links} \\ \text{durchgelassen}}}{\theta(\mu_1 - E)} \quad + (1-T)\, \underset{\substack{\downarrow \\ \text{von rechts} \\ \text{reflektiert}}}{\theta(\mu_2 - E)} \tag{*}$$

$-k$-Zustände, direkt links von Streuer

$$f^-(E) = (1-T)\, \underset{\substack{\downarrow \\ \text{von links} \\ \text{reflektiert}}}{\theta(\mu_1 - E)} + T \quad \underset{\substack{\downarrow \\ \text{von rechts} \\ \text{durchgelassen}}}{\theta(\mu_2 - E)} \tag{**}$$

Nichtgleichgewichtsverteilungsfunktionen, nur gültig direkt am Streuer, im Abstand mehrerer Energierelaxationslängen stellt sich GG-Verteilung ein:

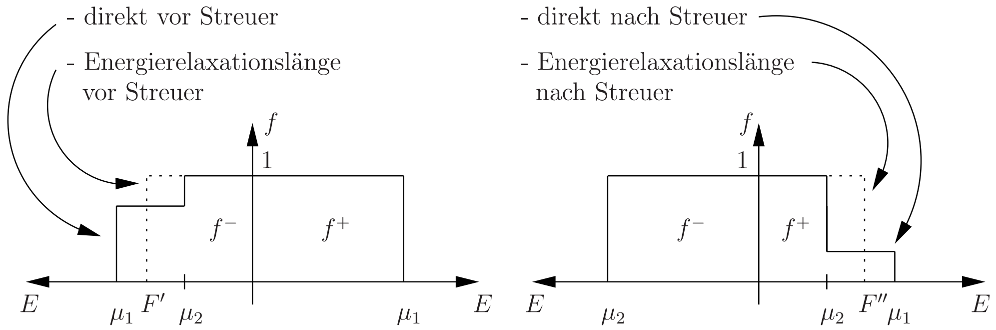
$+k$, weit rechts: $f^+(E) = \theta(F'' - E)$

$-k$, weit rechts: $f^-(E) = \theta(F' - E)$

mit elektrochem. Pot. F' und F'' bestimmt durch die Teilchenzahlerhaltung:

$$F'' \overset{*}{=} T\mu_1 + (1-T)\mu_2$$
$$F' \overset{**}{=} (1-T)\mu_1 + T\mu_2$$

(Annahme: nur Energierelaxation zwischen $+k$ und $-k$-Zuständen, keine e^--Transfer zwischen $+k$ und $-k$, sonst zusätzlicher Widerstand!)



normieren elektrochem. Potential

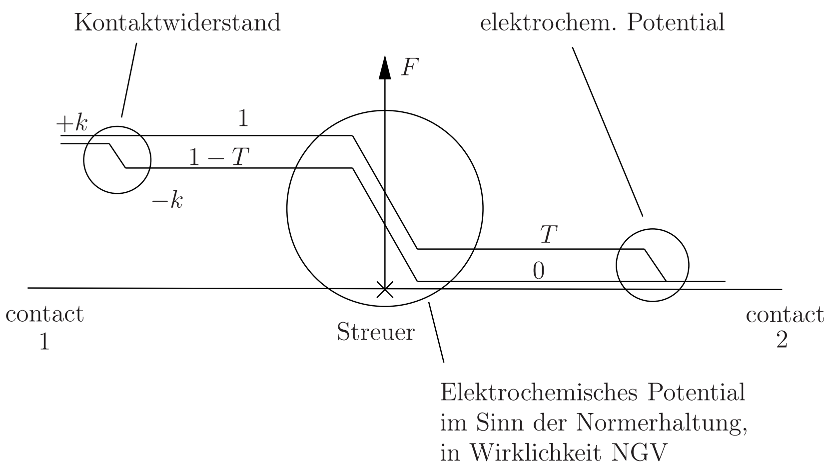
$\mu_1 \to 1, \quad \mu_2 \to 0$

$+k$-Zustände

$$F^+ = \begin{cases} \mu_1 & \text{vor} & \longrightarrow & 1 \\ F'' = T\mu_1 + (1-T)\mu_2 & \text{nach Streuer} & \longrightarrow & T \end{cases}$$

$-k$-Zustände

$$F^- = \begin{cases} F' = (1-T)\mu_1 + T\mu_2 & \text{vor} & \longrightarrow & 1-T \\ \mu_2 & \text{nach Streuer} & \longrightarrow & 0 \end{cases}$$



Potentialabfall am Streuer (normiert)

$$1 - T$$

$\longrightarrow$ tatsächlicher Abfall $eV_S = (1-T)(\mu_1 - \mu_2)$
Rest $(T(\mu_1 - \mu_2))$ fällt an Kontakten ab

$\Rightarrow$ Strom $I = \left(\frac{2e}{h}\right) MT(\mu_1 - \mu_2)$ fließt durch Reihenschaltung von Streu- und Kontaktwiderstand:

$$G_s^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} \cdot \frac{1-T}{T}, \quad G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} \cdot \frac{T}{T}.$$

Wo fällt Joulsche Wärme I^2/G_s ab?

Falls Streuer elastisch $\longrightarrow$ Energiedissipation durch inelastische Prozesse (Phononenemission) auf Längenskala der Energierelaxationslänge

Energiedissipation $P_D \equiv \frac{d}{dx} I_U$ mit

Energiestrom $I_U = \frac{1}{e}\int Ei(E)dE$ mit

Stromverteilungsfunktion $i(E)$ des elektrischen Stroms I

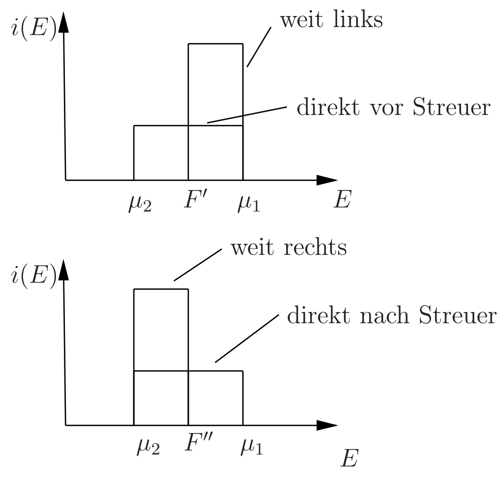
$$I = \int i(E)dE; \quad i(E) = \frac{2eM}{h}(f^+(E) - f^-(E)) \qquad (*)$$

mittlere Energie des Stroms

$$U = \frac{\int Ei(E)dE}{\int i(E)dE} = \frac{eI_U}{I}$$

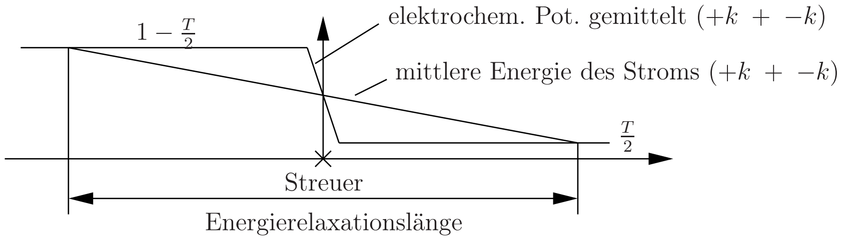
I ändert sich nicht entlang x

$$\Rightarrow \quad P_D = \frac{I}{e}\frac{dU}{dx}$$



um U zu bestimmen, müssen wir über $+k$- und $-k$-Zustände mitteln

$$\Rightarrow \quad U \stackrel{*}{=} \begin{cases} (F' + \mu_1)/2 & \text{weit links} \\ (\mu_1 + \mu_2)/2 & \text{am Streuer} \\ (F'' + \mu_2)/2 & \text{weit rechts} \end{cases}$$



$\Rightarrow$ lokalisierter Abfall des elektrochemischen Potentials, aber Joulsche Wärme über weiten Bereich

Ursache: Aufheizen des e^--Stroms hinter dem Streuer, bevor Energie ans Gitter übertragen wird

<u>Elektronendichte</u>

Scharfer Abfall der Quasi-Ferminiveaus am Streuer

Leitungsbandminimun folgt mit kontinuierlicher Abfall (weil Feldstärke endlich bleiben muß)

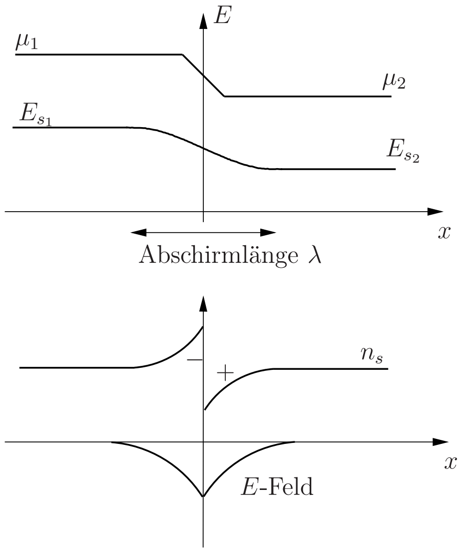
$\Rightarrow$ Variation der Elektronendichte

$$n_s = \underbrace{N_s}_{\text{(früher, 1.2)}}(F - E_s) \quad \rightarrow \quad \delta_{n_s} = N_s(\delta F - \delta E_s)$$

Elektronenstau vor, -defizit hinter Streuer

$\Rightarrow$ mesoskopischer Dipol

$\Rightarrow$ zusätzliches E-Feld



$$\lambda = \sqrt{\frac{\varepsilon d}{e^2 N_S}}$$

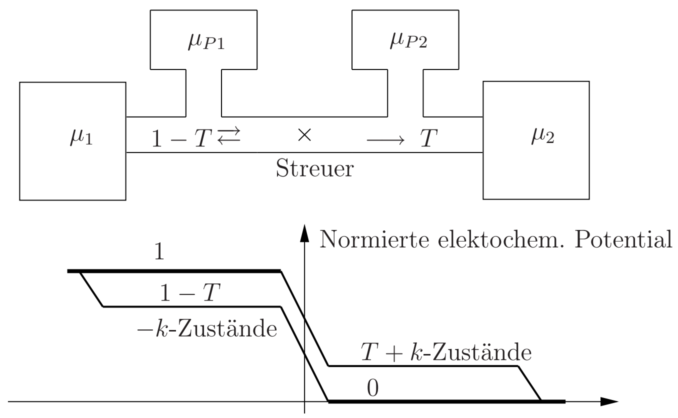
ε : DK

d : z-Dimension des 2DEG

typ. $\approx$ $5nm$

$GaAs$

2.4. Spannungsmessung



(Vgl. 2.3)

Meßproben P1 & P2 messen lokales elektrochem. Potential von $+k, -k$-Zuständen oder feste Kombination beider (Idealfall!)

$$\Rightarrow \quad \mu_{P1} - \mu_{P2} = (1-T)\Delta\mu \qquad \text{mit} \quad \Delta\mu = \mu_1 - \mu_2$$

früher (2.3) $I = \left(\dfrac{2e}{h}\right) MT\Delta\mu$

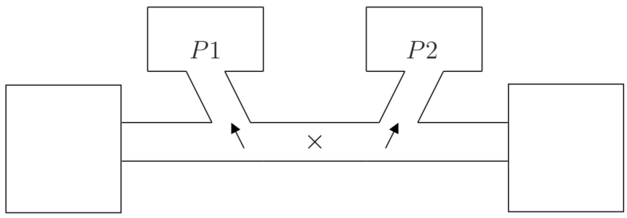
$$\Rightarrow \quad R = \frac{(\mu_{P1} - \mu_{P2})/e}{I} = \frac{h}{2eM}\frac{1-T}{T}$$

gemessener Widerstand

<u>Probleme:</u>

- Proben sind <u>invasiv</u>, streuen selbst
  $\longrightarrow$ Streben nach minimaler Kopplung
- nicht identische Proben <u>koppeln unterschiedlich</u> an $+k$ und $-k$-Zustände

Bsp:



P2 koppelt besser an $+k$-Zustände
$\longrightarrow \quad \mu_{P2} \approx T\Delta\mu$ (Potential der $+k$ Zustand)

P1 koppelt an $-k$-Zustände
$\longrightarrow \quad \mu_{P1} \approx (1-T)\Delta\mu$

$$\Rightarrow \quad R = \frac{(\mu_{P1} - \mu_{P2})e}{I} = \frac{h}{2eM}\frac{1-2T}{T} \quad \text{gemessener Widerstand}$$

$R < 0$ für $T > 0.5$! (für großer Transmission ist $\mu_{P2} > \mu_{P1}$)

anderes Extrem:

P2 koppelt an $-k \quad \Rightarrow \quad \mu_{P2} \approx 0$

P1 koppelt an $+k \quad \Rightarrow \quad \mu_{P1} \approx \Delta\mu$

$$\Rightarrow \quad R = \frac{h}{2e^2M}\frac{1}{T}$$

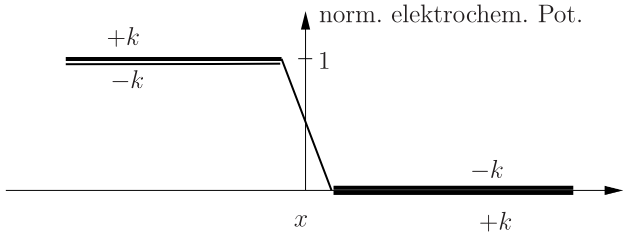
$$\Rightarrow \boxed{\frac{1-2T}{T}\frac{h}{2e^2M} < R < \frac{1}{T}\frac{h}{2e^2M}}$$

Kein Problem für makroskopische Leiter:
früher (2.2) $T = \dfrac{L_m}{L+L_m} \ll 1$ für $L \gg L_m$

$\Rightarrow$ R konvergiert für $L \gg L_m$, aber schlecht meßbar für $L \approx L_m$!

- Interferenzeffekte! bisher vernachlässigt

  sei $T \ll 1$, starke Streuung



μ (vor Streuer) $\approx \mu_1$

(Interferenz stehende Wellen) $\Rightarrow$ jeder Wert zwischen $0 \ldots 1$ möglich, abhängig von Abstand zum Streuer!

$\Rightarrow$ Widerstandsmessung nur möglich für

- kurze Phasenrelaxationslänge $L_\varphi \ll L$
  oder
- Mittelwertbildung über λ
  oder
- direktionale Koppler (koppeln an $+k, -k$ separat)

<u>Büttiker (1988)</u>

verallgemeinert 2-Terminal-Beziehung (2.3)

$$I = \frac{2e}{h}\bar{T}(\mu_1 - \mu_2) \qquad \text{mit} \quad \bar{T} = TM: \ \text{Transmissionsfunktion}$$

für viele Terminale (indiziert bei p, q)

$$\boxed{I_p = \frac{2e}{h}\sum_q \left\{\bar{T}_{q\leftarrow p}\mu_P - \bar{T}_{p\leftarrow q}\mu_q\right\}}$$

mit $G_{pq} \equiv \dfrac{2e^2}{h}\bar{T}_{p\leftarrow q}$, $\quad V = \dfrac{\mu}{e}$ folgt

$$\boxed{I_p = \sum_q G_{qp}V_p - G_{pq}V_q}$$

Annahme: $V_p = V_q \quad \forall p, q \overset{!}{\Longrightarrow} \quad I = 0$

$\overset{!}{\Longrightarrow}$ Summenregel $\displaystyle\sum_q G_{qp} = \sum_q G_{pq}$

damit

$$\boxed{I_P = \sum_q G_{pq}(V_p - V_q)}$$

Ohne Beweis: $(G_{pq})_{+B} = (G_{qp})_{-B}$

mit B : mag. Feld (Beweis für Spezialfall später in (3.1))
(exp. bisher immer bestätigt, kein allgemein gültiger Grund)

<u>Bemerkungen:</u>

- $I_p = 0$

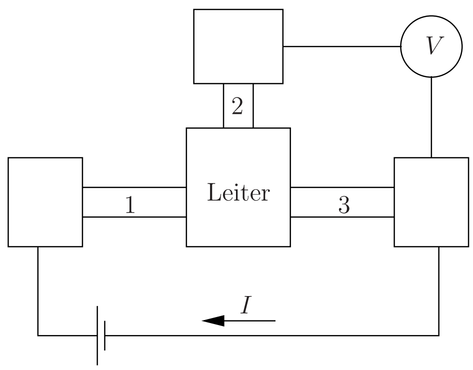
  $$\Rightarrow \quad V_p = \frac{\sum\limits_{q \neq p} G_{pq} V_q}{\sum\limits_{q \neq p} G_{pq}}$$

  gewichteter Durchschnitt aller Terminale

- $B = 0 \quad \Rightarrow \quad G_{pq} = G_{qp}$

  d.h. Büttiker $\triangleq$ Kirchhoff

<u>3-Terminal-Messung:</u>



$$R_{3t} = \frac{V}{I}?$$

starten von $I_p = \sum_q G_{pq}(V_p - V_q)$

$$\begin{aligned}
I_1 &= G_{12}(V_1 - V_2) + G_{13}(V_1 - V_3) \\
I_2 &= G_{21}(V_2 - V_1) + G_{23}(V_2 - V_3) \\
I_3 &= G_{31}(V_3 - V_1) + G_{32}(V_3 - V_2)
\end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12}+G_{13} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21}+G_{13} & G_{21}+G_{23} & -G_{23} \\ -G_{31}+G_{13} & -G_{32} & G_{31}+G_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}$$

Nur Spannungsdifferenzen relevant $\rightarrow$ o.B.d.A. $V_3 = 0$

$$\Rightarrow \quad \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12}+G_{13} & -G_{12} \\ -G_{21} & G_{21}+G_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix}$$

$$\Longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \end{pmatrix}$$

mit

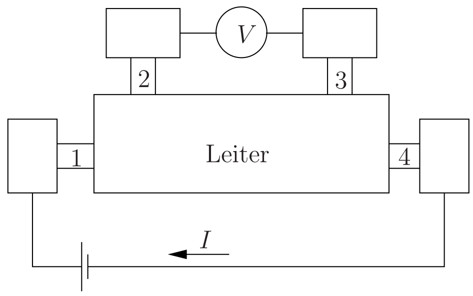
$$[R] = \begin{pmatrix} G_{12}+G_{13} & -G_{12} \\ -G_{21} & G_{21}+G_{23} \end{pmatrix}^{-1}$$

damit

$$R_{3t} = \frac{V}{I} = \left(\frac{V_2}{I_1}\right)_{I_2=0} = R_{21}$$

$$= \frac{G_{12}}{G_{13}G_{21}+G_{12}G_{23}+G_{13}G_{23}}$$

<u>4-Terminal-Messung</u>



$$R_{4t} = \frac{V}{I}?$$

o.B.d.A. $V_4 = 0$

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12}+G_{13}+G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21}+G_{13} & G_{21}+G_{23}+G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31}+G_{13} & -G_{32} & G_{31}+G_{32}+G_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}$$

invertieren

$$\begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix}$$

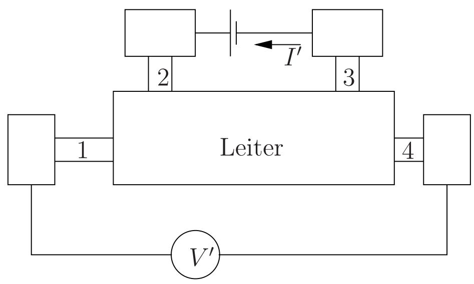
mit

$$[R] = [G]^{-1}$$

damit

$$R_{4t} = \left(\frac{V_2 - V_3}{I_1} \right)_{I_2 = I_3 = 0} = R_{21} - R_{31}$$

andere Meßanordnung



$$R'_{4t} = \frac{V'}{I'} = \left(\frac{V_1}{I_2} \right)_{I_1 = 0, I_2 = -I_3} = R_{12} - R_{13}$$

jetzt mit $\bar{B} - Feld$:
früher $(G_{qp})_{+B} = (G_{pq})_{-B}$

$$\Rightarrow \quad [R^{-1}]_{+B} = [R^{-1}]^T_{-B}$$

mit $[R^{-1}]^T = [R^T]^{-1}$ folgt

$$[R]_{+B} = [R]^T_{-B}$$

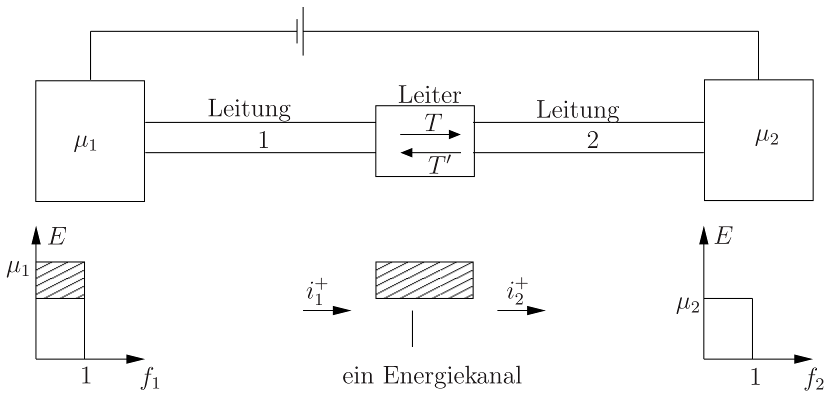
$$\Rightarrow \quad R_{4t}(+B) = R_{21} - R_{31}\Big|_{+B} = R_{12} - R_{13}\Big|_{-B} = R'_{4t}(-B)$$

exp. bestätigt von Benoit el. al. PRL 57, 1765 (1986); siehe auch Webb & Washburn, Physics Today, **41**, 52 (1988)

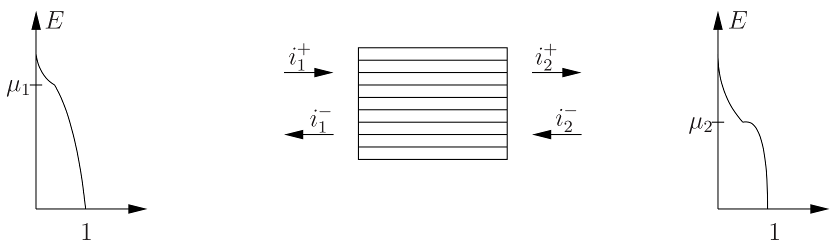
2.5. Endliche Temperaturen und Spannungen

bisher $T = 0$, Strom getragen von einem einzelnen Energiekanal am Fermi-Niveau

$$\Rightarrow \qquad I = \frac{2e}{h}\bar{T}(\mu_1 - \mu_2) \text{ mit}$$
$$\bar{T} = M \cdot T = const. \text{ für } \mu_2 < E < \mu_1$$



realistischer: Transport durch viele Kanäle:



Ein- und Ausfluß in Leiter durch Zuleitungen;
$i(E)$: Stromverteilungsfunktion (vgl. (2.3))

$$\left.\begin{aligned} i_1^+(E) &= \frac{2e}{h} M f_1(E) \qquad M : \# \quad \text{Moden in 1} \\ i_2^-(E) &= \frac{2e}{h} M' f_2(E) \qquad M' : \# \quad \text{Moden in 2} \end{aligned}\right\} **$$

$$i_2^+(E) = T i_1^+(E) + (1 - T') i_2^-(E)$$
$$i_1^-(E) = (1 - T) i_1^+(E) + T' i_2^-(E) \qquad *$$

Nettostrom $i(E) = i_1^+ - i_1^- = i_2^+ - i_2^-$

$$\stackrel{*}{=} T i_1^+ - T' i_2^-$$

$$\stackrel{**}{=} \frac{2e}{h}[M(E)T(E)f_1(E) - M'(E)T'(E)f_2(E)]$$

mit Transmissionsfunktion $\bar{T}(E) = M(E)T(E)$ folgt

$$i(E) = \frac{2e}{h}[\bar{T}(E)f_1(E) - \bar{T}' f_2(E)]$$

Gesamtstrom:
$I = \int i(E)dE$

Annahme: $\bar{T}(E) = \bar{T}'(E)$ (sinnvoll damit $i(E) = 0$ für $f_1(E) = f_2(E)$)

$$\Rightarrow \boxed{I = \frac{2e}{h}\int \bar{T}(E)[f_1(E) - f_2(E)]dE}$$

Variation

$$\delta I = \frac{2e}{h}\int \bar{T}(E)\delta[f_1 - f_2]dE$$

für kleinere Spannungen

$$\delta[f_1 - f_2] \approx \left.\frac{\partial f}{\partial \mu}\right|_{\mu=E_F}(\mu_1 - \mu_2) \quad = \quad -\frac{\partial f_0}{\partial E}(\mu_1 - \mu_2)$$

$$f_0 = \left.\frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}\right|_{\mu=E_F}$$

$$\Rightarrow \boxed{G = \frac{\delta I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h}\int \bar{T}(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)dE = const.}$$

linearer Response für kleine Spannungen

$$T \to 0 \quad \Rightarrow \quad f_0(E) \to \theta(E_F - E)$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial f_0}{\partial E} \to \delta(E_F - E)$$

$$\Rightarrow \boxed{G \to \frac{2e^2}{h}\bar{T}(E_F)}$$

Voraussetzung für linearen Response für $T \neq 0$:

- $\bar{T}(E) \approx const.$ für transportrelevanten Energiebereich

$$\mu_1 + kT \gtrsim E \gtrsim \mu_2 - kT$$

gilt i.allg. für $\mu_1 - \mu_2 \ll kT$
(hinreichend, aber nicht notwendig, weil sonst kein lin. Response für $T = 0$)

Sei $\bar{T}(E) = \bar{T}(E_F)$

$$\Rightarrow \qquad I = \frac{2e}{h}\bar{T}(E_F)\int [f_1(E) - f_2(E)]dE$$

$$\boxed{I = \frac{2e}{h}\bar{T}(E_F)[\mu_1 - \mu_2]}$$

d.h. $T = 0$ Response für $T > 0$

Verallgemeinerung auf viele Terminale

$I_p = \int i_p(E)dE$ mit

$$i_p(E) = \frac{2e}{h}\sum_q \{\bar{T}_{qp}(E)f_p(E) - \bar{T}_{pq}(E)\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Fermifunktion von Terminal } q}}{f_q(E)}\}$$

$\downarrow$ ($\bar{T}_{pq}$):
Gesamttransmission von Terminal q zu Terminal p bei Energie E

$i_p \stackrel{!}{=} 0$ für $f_p(E) = f_q(E) \quad \Rightarrow \quad \sum_q \bar{T}_{qp}(E) = \sum_q \bar{T}_{pq}(E)$

(gilt nur falls keine inelast. Streuung zwischen Energiekanälen erfolgt)

$$\Rightarrow \quad i_p(E) = \frac{2e}{h}\sum_q \bar{T}_{pq}\{f_p(E) - f_q(E)\}$$

mit $G_{pq} = \frac{2e^2}{h}\int \bar{T}_{pq}(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)dE \xrightarrow{T\to 0} \frac{2e^2}{h}\bar{T}_{pq}(E_F)$

$$\boxed{I_p = \sum_q G_{pq}[V_p - V_q]}$$

2.6. Pauli-Prinzip

Problem: Was ist richtig

$$i_p(E) = \frac{2e}{h}\sum_q \{\bar{T}_{qp}(E)f_p(E) - \bar{T}_{pq}(E)f_q(E)\}$$

oder

$$\begin{aligned} i_p(E) &= \frac{2e}{h}\sum_q \{\bar{T}_{qp}(E)f_p(1-f_q) - \bar{T}_{pq}(E)f_q(1-f_p)\} \\ &= \frac{2e}{h}\sum_q \left\{ [\bar{T}_{qp}f_p - \bar{T}_{pq}f_q] - \underbrace{[\bar{T}_{qp} - \bar{T}_{pq}]f_p f_q}_{\substack{\text{Extraterm berücksichtigt} \\ \text{Pauli-Prinzip}}} \right\} ? \end{aligned}$$

2-Terminalmessung, keine inelastische Streuung
$\Rightarrow \quad \bar{T}_{12} = \bar{T}_{21} \quad \Rightarrow \quad$ Extraterm fällt weg

Annahmen, die Pauli-Extraterm rechtfertigen würden:

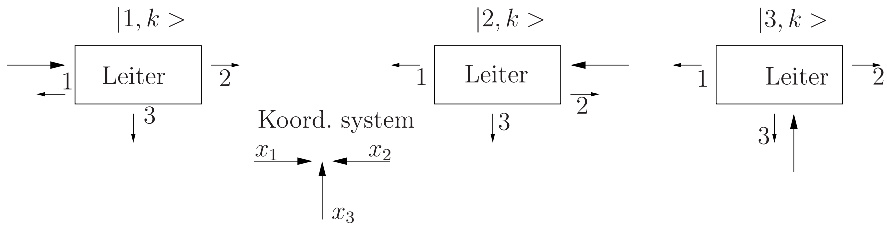
- Strom entsteht durch Übergänge von einem elektr. Zustand in Zuleitung p in elektr. Zustand in Zuleitung q

$$|p, k> \longrightarrow |q, k'>$$

- Übergänge blockiert, wenn finaler Zustand bereits besetzt ist

Bild nur korrekt für schwache Kopplung zwischen Zuleitungen und Leiter!

Starke Kopplung gibt Anlaß zu Streuzuständen, bestehend aus einfallender Welle in Zuleitung q und gestreuten Welle in allen anderen Zuleitungen p:



o.B.d.A. nur eine transversale Mode pro Zuleitung
Streuzustand $|q, k>$ gibt Anlaß zu

$\longrightarrow$ Wellenfunktion in Zuleitung p

$$\psi_p(q) = \underset{\substack{\downarrow \\ \text{einfallende} \\ \text{Welle}}}{\delta_{pq}\chi_p^+(y_p)e^{ik^+x_p}} + \underset{\substack{\downarrow \\ \text{gestreute} \\ \text{Welle}}}{s'_{pq}\chi_p^-(y_p)e^{ik^-x_p}}$$

kein B-Feld: $\chi_p^+ = \chi_p^-, \qquad k^- = -k^+$

Wenn Wellenfunktion besetzt ist, gibt sie Anlaß zur Stromverteilungsfunktion

$$i_p(q) = \frac{2e}{h}(\underset{\substack{\downarrow \\ \text{einfallende} \\ \text{Welle}}}{\delta_{pq}} - \underset{\substack{\downarrow \\ \text{gestreute} \\ \text{Welle}}}{T_{pq}}) \qquad *$$

$|q,k>$ ist besetzt entsprechend der Fermiverteilung in Kontakt q

$$\Rightarrow \quad I_p = \int \sum_q f_q(E) i_p(q) dE$$

$$\downarrow *$$

$$I_p = \frac{2e}{h} \int \left[f_p - \sum_q T_{pq} f_q \right] dE$$

für kohärenten Transport gilt

$$\sum_q T_{pq} = \sum_q T_{qp} = 1$$

(Beweis: später, 3.1)

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad I_p &= \frac{2e}{h} \int \left[\sum_q T_{pq}(f_p - f_q) \right] dE \\ &= \frac{2e}{h} \int \left[\sum_q T_{qp} f_p - T_{pq} f_q \right] dE \end{aligned}$$

Verallgemeinerung auf mehrere Moden in jeder Zuleitung: Summieren über Übergangswahrscheinlichkeiten
Mode m in $p - T_{mn}$ $\longrightarrow$ Mode n in q,

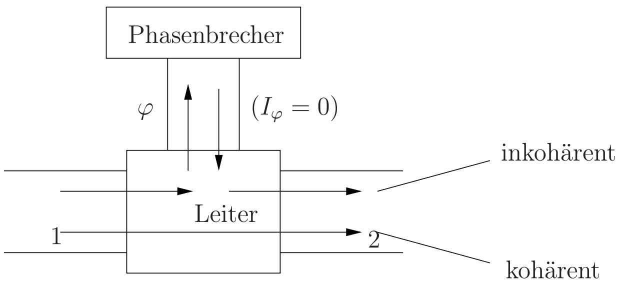
$$\text{d.h.} \quad \bar{T}_{pq} = \sum_{m \in p} \sum_{n \in q} T_{mn}$$

$$\Rightarrow \qquad I_p = \frac{2e}{h} \int dE \sum_q \left\{ \bar{T}_{qp}(E) f_p(E) - \bar{T}_{pq}(E) f_q(E) \right\}$$

$\Rightarrow$ Für kohärenten Transport kein Extraterm für Pauli-Prinzip!

<u>Nichtkohärenter Transport</u>

bauen Phasenbrecher ein:



Strom besteht aus kohärenten und inkohärenten Anteil

$$i_p(E) = \underbrace{\frac{2e}{h} \sum_q \bar{T}_{pq}(E)[f_p(E) - f_q(E)]}_{\text{kohärent}} + \underbrace{\frac{2e}{h} \bar{T}_{p\varphi}(E)[f_p(E) - f_\varphi(E)]}_{\text{inkohärent}}$$

$\downarrow$ Im Zweiterminalausdruck fällt Extraterm weg

Strom am Phasenbrecher

$$i_\varphi(E) = \frac{2e}{h} \sum_q \bar{T}_{\varphi q}(E)[f_\varphi(E) - f_q(E)]$$

$$\Rightarrow \qquad f_\varphi = \frac{1}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}} \left\{ i_\varphi + \sum_q \bar{T}_{\varphi q} f_q \right\}$$

$$i_p = \frac{2e}{h}\sum_q \bar{T}_{pq}[f_p - f_q] + \frac{2e}{h}\bar{T}_{p\varphi}\left[f_p - \frac{i_\varphi + \sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q} f_q}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}}\right]$$

$$i_p = \frac{2e}{h}\sum_q \left\{\bar{T}_{pq} + \frac{\bar{T}_{p\varphi}\bar{T}_{\varphi q}}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}}\right\} f_p \qquad \left(\text{mit } \frac{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}} \text{ erweitert}\right)$$

$$- \frac{2e}{h}\sum_q \left\{\bar{T}_{pq} + \frac{\bar{T}_{p\varphi}\bar{T}_{\varphi q}}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}}\right\} f_q - \frac{2e}{h}\frac{\bar{T}_{p\varphi}}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}} \cdot i_\varphi$$

mit $\left\{\bar{T}_{pq} + \frac{\bar{T}_{p\varphi}\bar{T}_{\varphi q}}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}}\right\} \equiv \tilde{T}_{pq}$ folgt

$$i_p = \frac{2e}{h}\sum_q \tilde{T}_{pq}[f_p - f_q] - \frac{2e}{h}\frac{\bar{T}_{p\varphi}}{\sum\limits_q \bar{T}_{\varphi q}} \cdot i_\varphi$$

d.h. für $i_\varphi(E) = 0 \quad \Rightarrow \quad$ kein Extra-Pauliterm

Problem:

$$I_\varphi = \int i_\varphi(E) dE = 0 \qquad \not\Rightarrow \qquad i_\varphi(e) = 0$$

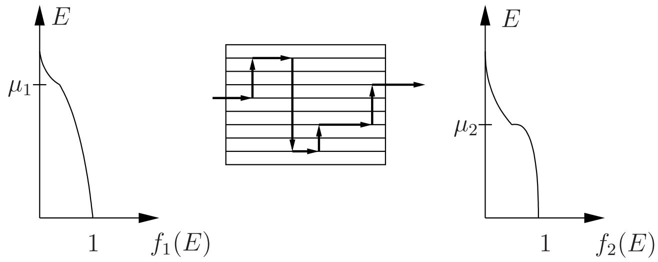
Streuung führt i.a. zur Umverteilung von Elektronen zwischen Energiekanälen, d.h. "vertikalen Fluß"

$i_\varphi(E)$ bestimmt durch mikroskopische Theorie (später), einfaches Einsetzen von Fermi-Blockierungsfaktoren sowieso nicht ausreichend

$\longrightarrow$ Im folgenden vernachlässigen wir vertikale Ströme, d.h. $i_\varphi(E) = 0$

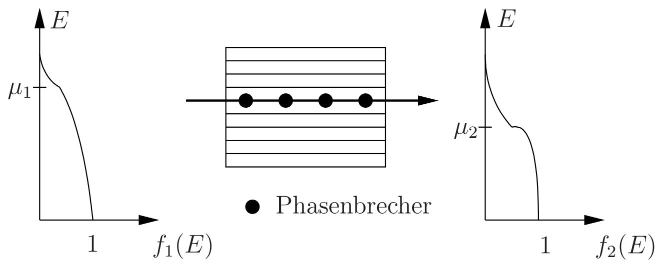
$\longrightarrow$ Nichtkohärenter, elastischer Transport

typischer Transport durch Leiter mit $L \gg L_\varphi$



⇒ zahlreiche Fermi-Blockierungsfaktoren spielen eine Rolle, keine einfache Berechnung möglich

⇒ vereinfachende Annahme: keine Netto-Beitrag zum vertikalen Strom, $\forall e^- : E_1 \rightarrow E_2 \exists e^- : E_2 \rightarrow E_1$
"nichtkohärenter, elastischer Transport"



oft sehr gute Approximation, früher (2.3): können Widerstand mittels elast. Streuung verstehen

Wie gut ist die Approximation? Beispiele.

- Annahme: $\bar{T}(E) = const.$ für transportrelevanten Bereich, d.h. für $\mu_1 + k_B T > E > \mu_2 - k_B T$
  ⇒ alle Kanäle leiten gleich gut
  ⇒ vertikale Ströme haben keinen Einfluß auf Nettostrom:

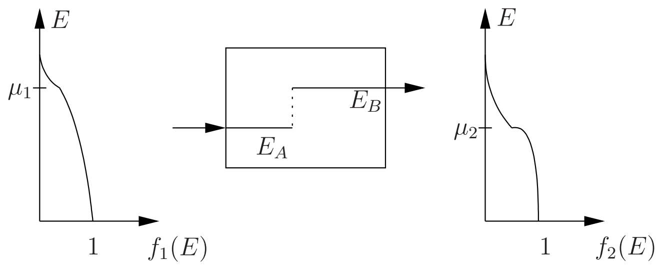
$$\frac{2e}{h} \int \frac{\bar{T}_{p\varphi}(E)}{\sum_q \bar{T}_{\varphi q}(E)} i_\varphi(E) dE \qquad \text{Extra-Pauliterm}$$

$$\downarrow$$

$$\frac{2e}{h} \frac{\bar{T}_{p\varphi}}{\sum_q \bar{T}_{\varphi q}} \underbrace{\int i_\varphi(E) dE}_{=0} = 0$$

Achtung $\not\Rightarrow \int Ei_\varphi(E)dE = 0$, d.h. Einfluß auf Energiedissipation durch vertikale Ströme

- Annahme: zwei energetisch und räumlich getrennte Energiekanäle im Leiter



$\Rightarrow$ Stromfluß nur unter Hinzunahme inelast. Streuung (z.B. Phononen)!

- letzteres Beispiel ist <u>nicht</u> akademisch, siehe Glühemission, dort ist der gemessen Strom größer als man von der Austrittsbarriere erwarten sollte (Lake, Datta PRB **46** 4757 (1992))
- Abkühlung der linken Seite des Leiters
$\longrightarrow$ analog zum makroskop. Peltier-Effekt

$\Rightarrow$ vertikale Ströme oft aber nicht immer vernachlässigbar

<u>Zusammenfassung Landauer-Büttiker-Formalismus</u>

$I_p = \int i_p(E)dE$ mit Stromverteilungsfunktion (Strom zu Terminal p)

$i_p(E) = \dfrac{2e}{h}\sum_q \bar{T}_{pq}(E)[f_p(E) - f_q(E)]$ mit

$f_p = \left(e^{\frac{E-\mu_p}{kT}} + 1\right)^{-1}$: Fermifunktion für Terminal p

darin steckt
Summenregel $\sum_q \bar{T}_{qp}(E) = \sum_q \bar{T}_{pq}(E)$
(Beweis in (3.1)) (aus Kirchoffschen Regel)

für kleine Spannungen, d.h.

$\mu_1 - \mu_2 = \Delta\mu \ll \varepsilon_c + kT$ mit ε_c : Energiebereich konst. Transmission

gilt $I_p = \sum_q G_{pq}[V_p - V_q]$

mit $V_p = \frac{\mu_p}{e}$ und

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE$$

für $kT \ll \varepsilon_c$

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}(E_F)$$

gültig für

- kohärenten Transport
- nichtkohärenten, elast. Transport

approximativ für vertikale Ströme (inelast. Transport)

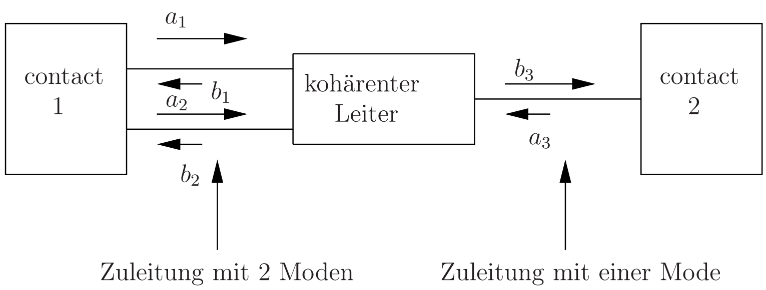
3. Berechnung der Transmissionsfunktion

3.1. S-Matrix (für kohärenten Transport)

Landauer-Büttiker: Strom zu Terminal p (2.5)

$$I_p = \int i_p(E)dE \quad \text{mit} \quad i_p(E) = \frac{2e}{h}\sum_q \bar{T}_{pq}(E)[f_p(E) - f_q(E)]$$

betrachten kohärenten Leiter



a, b: ein-, auslaufende Wellenamplituden

Streumatrix definiert durch

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

Gesamtzahl der propagierenden Moden mit Energie E $\qquad M_T(E) = \sum_p M_p(E)$

mit M_p: Anzahl von Moden mit E in Terminal p

rang$(S) = M_T(E)$
S berechnet aus EMA-Gleichung (1.2)

$$\left\{E_s + \frac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(x,y)\right\}\psi(x,y) = E\psi(x,y)$$

(Beispiele später), damit Transmission zwischen zwei Moden

$T_{m\leftarrow n} = |S_{m\leftarrow n}|^2, \qquad$ dann Summation über alle Moden in Terminals q, p

$$\bar{T}_{p\leftarrow q} = \sum_{m\in q}\sum_{n\in p} T_{n\leftarrow m}$$

Stromerhaltung fordert (d.h. kann nicht mehr Strom raus als rein)

$$\begin{array}{lll} \sum\limits_m |a_m|^2 = & \sum\limits_m |b_m|^2, & \text{d.h.} \\ <a|a>= & <b|b> & \text{mit } |b>=S|a> \\ <a|a>= & <a|S^+S|a> & (S^+: \text{ konjugiert transponiert}) \end{array}$$

$$\Rightarrow \quad S^+S = I \qquad \Rightarrow \quad S^+ = S^{-1}$$

S unitäre Matrix

$$\Rightarrow \sum_{m=1}^{M_T} |S_{mn}|^2 = \sum_{m=1}^{M_T} |S_{nm}|^2 = 1$$

(klar, e^- was in n eingeht, muß nirgendwo wieder rauskommen)

daraus <u>Summenregeln für Transmission</u>

$$\sum_q \bar{T}_{qp} = \sum_{n\in p}\sum_{m=1}^{M_T} T_{mn} = \sum_{n\in p}\sum_{m=1}^{M_T} |S_{mn}|^2 = \sum_{n\in p} 1 = M_p$$

(Transmission von p in alle q	$\uparrow$ $\forall$ einfallende Amplituden in Terminal p	$\nwarrow$ $\forall$ insgesamt ausfallenden Amplituden (p einschließlich)	$\uparrow$ Moden in p

(Umsortieren der Summe)
$\longrightarrow$ für kohärenten Transport: $\sum\limits_q \bar{T}_{pq} = \sum\limits_q \bar{T}_{qp}$ (früher, in (2.5) benutzt)

$$\longrightarrow \qquad \sum_q \bar{T}_{pq}(E) = \sum_q \bar{T}_{qp}(E) = M_p(E)$$

<u>Bsp.</u>:

- 3-Terminal-Anordnung:

$$\bar{T}_{pq}(E) \rightarrow 3\times 3 - \text{Matrix}$$

$\bar{T}_{pq}(E)$:

	$q=1$	2	3		
$p=1$	x	x	x	$\sum =$	M_1
2	x	x	x		M_2
3	x	x	x		M_3
$\sum =$	M_1	M_2	M_3		

M_1 : # Moden in Terminal 1

- 2-Terminale:

$$\bar{T}_{11} + \bar{T}_{12} = M_1 = \bar{T}_{11} + \bar{T}_{21}$$
$$\Rightarrow \qquad \bar{T}_{12} = \bar{T}_{21}$$

d.h. für 2-Terminal-Anordnung symmetrische Transmission, unabhängig von B-Feld

früher (2.5) $G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE$

$$\downarrow T \to 0$$

$$\frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}(E_f)$$

$\Rightarrow$ damit Summenregel für Leitwertmatrix

$$\sum_q G_{pq} = \sum_q G_{qp} = \frac{2e^2}{h} M_p(E_f)$$

<u>Einfluß des B-Feldes auf S-Matrix?</u>

Sei EMA-Gl.:

$$\left\{ E_S + \frac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(x,y) \right\} \psi(x,y) = E\psi(x,y)$$

gelöst, betrachten konj. komplexe Gleichung

$$\left\{ E_S + \frac{(-i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(x,y) \right\} \psi^*(x,y) = E\psi^*(x,y)$$

invertieren B-Feld: $B \to -B \quad \Rightarrow \quad A \to -A$

$$\left\{ E_S + \frac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(x,y) \right\} \psi^*(x,y) = E\psi^*(x,y)$$

$\Rightarrow \qquad \psi^*(x,y)|_{-B} = \psi(x,y)|_B$

betrachten Streumatrix S:

$$|b>= S(B)|a> \Longleftrightarrow |b^*>= S^*(B)|a^*>$$

$B \to -B: \ |a>, |b> \to |a^*>, |b^*>$ Konjugation bedeutet für Wellenfunktion, daß die Ausbreitungsrichtung sich umkehrt, aus einlaufenden Wellen werden auslaufende

$$|a^*>= S(-B)|b^*> \Longleftrightarrow |b^*>= S^{-1}(-B)|a^*>$$

Vgl. liefert: $S^*(B) = S^{-1}(-B)$

$$\parallel \ (S \text{ unitär, früher})$$

$$S^+(-B)$$

$$\Rightarrow \ S^*(B) = \underset{\text{konj. transp.}}{\underset{\downarrow}{S^+}}(-B) \quad \Rightarrow \quad S(B) = \underset{\text{transp.}}{\underset{\downarrow}{S^T}}(-B)$$

$\Rightarrow$

$$\sum_{m\in p, n\in q} |S_{mn}|^2_{+B} = \sum_{m\in p, n\in q} |S_{nm}|^2_{-B}$$
$$\sum_{m\in p, n\in q} T_{mn}|_{+B} = \sum_{m\in p, n\in q} |T_{nm}|_{-B}$$
$$\bar{T}_{pq}|_{+B} = \bar{T}_{qp}|_{-B}$$

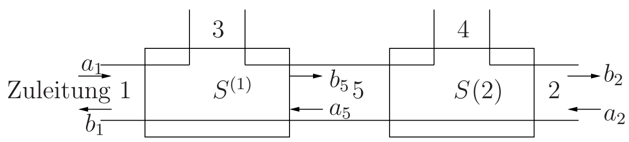
$$\text{mit } G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \text{ folgt}$$

$$\boxed{[G_{pq}]_{+B} = [G_{qp}]_{-B}}$$

Bemerkung: "Beweis" gilt nur für kleine Feldstärken, für starke Felder oder Spannungen ändert sich $U(x, y)$ bei Feldumkehr wegen Hall-Spannung

komplexe Strukturen $\to$ Kombination von S-Matrizen

Bsp.: 4-Terminal-Anordnung $\to 2 \times 3$ Terminale



$S^{(1)}$ bestimmt durch

$$\begin{pmatrix} b_{13} \\ b_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^{(1)} & t'^{(1)} \\ t^{(1)} & r'^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{13} \\ a_5 \end{pmatrix}$$

mit a_{13}/b_{13} Vektoren mit ein-/auslaufenden Wellenamplituden aller Moden in der Terminals 1 und 3
r, r': Reflexionsamplituden
t, t': Transmissionsamplituden

analog:

$$\begin{pmatrix} a_5 \\ b_{24} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^{(2)} & t'^{(2)} \\ t^{(2)} & r'^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_5 \\ a_{24} \end{pmatrix} \qquad \text{für} \quad S^{(2)}$$

(Rolle von a_5, b_5 vertauscht bez. $S^{(1)}$)

eliminieren $a_5, b_5 \quad \Rightarrow \quad$ S-Matrix für 4-Terminals

$$\begin{pmatrix} b_{13} \\ b_{24} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{24} \end{pmatrix}$$

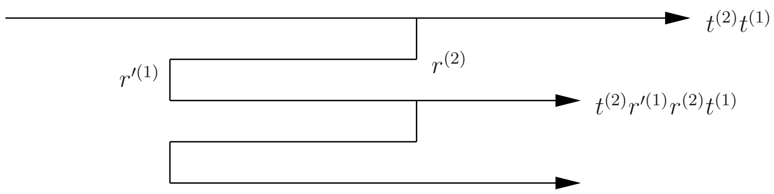
mit

$$\begin{aligned} t &= t^{(2)}[I - r'^{(1)}r^{(2)}]^{-1}t^{(1)} \\ r &= r^{(1)} + t'^{(1)}r^{(2)}[I - r'^{(1)}r^{(2)}]^{-1}t^{(1)} \\ t' &= t'^{(1)}[I - r^{(2)}r'^{(1)}]^{-1}t'^{(2)} \\ r' &= r'^{(2)} + t^{(2)}[I - r'^{(1)}r^{(2)}]^{-1}r'^{(1)}t'^{(2)} \end{aligned}$$

Interpretation? Reihenentwicklung $\left(\dfrac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots \right)$

$$\begin{aligned} t &= t^{(2)}[I - r'^{(1)}r^{(2)}]^{-1}t^{(1)} \\ &= t^{(2)}t^{(1)} + t^{(2)}[r'^{(1)}r^{(2)}]t^{(1)} + t^{(2)}[r'^{(1)}r^{(2)}]^2 t^{(1)} + \dots \end{aligned}$$

(Erinnerung: 2.2 Landauer-Gleichung)



Multiple Reflexionen

obige Betrachtung korrekt für kohärenten Transport
wenn einzelne Sektionen deutlich größer als Phasenrelaxationslänge ($L \gg L_\varphi$)
$\longrightarrow$ inkohärenter Transport

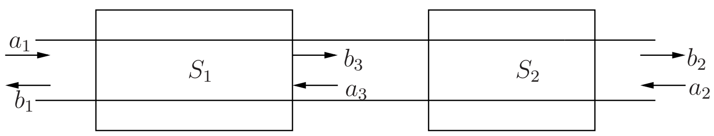
- $\Rightarrow$ kombinieren ein-und ausfallende Wahrscheinlichkeiten anstelle der Amplituden
- $\Rightarrow$ betrachten Wahrscheinlichkeiten anstelle von S-Matrizen

$$\bar{S}_{mn} = |S_{mn}|^2$$

$\bar{S}_{mn}$ ↗ Wahrscheinlichkeitsmatrix $\qquad$ $|S_{mn}|^2$ ↖ Strommatrix

<u>Beispiel:</u> 2 Streuer in einmodigem Leiter

$$S_1 = \begin{pmatrix} r_1 & t'_1 \\ t_1 & r'_1 \end{pmatrix} \qquad S_2 = \begin{pmatrix} r_2 & t'_2 \\ t_2 & r'_2 \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 & t'_1 \\ t_1 & r'_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix} \Rightarrow \qquad b_3 = t_1 a_1 + r'_1 a_3$$

$$\begin{pmatrix} a_3 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_2 & t'_2 \\ t_2 & r'_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_3 \\ a_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \qquad a_3 = r_2 b_3 + t'_2 a_2$$

$$b_3(1 - r'_1 r_2) = t_1 a_1 + r'_1 t'_2 a_2$$

$$\Rightarrow \quad b_2 = t_2 b_3 + r_2' a_2$$

$$b_2 = \frac{t_1 t_2 a_1 + r_1' t_2 t_2' a_2}{1 - r_1' r_2} + r_2' a_2$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{t = \frac{b_2}{a_1} = \frac{t_1 t_2}{1 - r_1' r_2}} \text{ analog andere Elemente für S-Matrix}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} T = |t|^2 = \dfrac{T_1 T_2}{1 - 2\sqrt{R_1 R_2}\cos\Theta + R_1 R_2} \\ \text{Kohärenter Transport, } \Theta = \Theta(r_1) + \Theta(r_2) \end{array}}$$

(einfach übertragen!)

analoge Rechnung für

$$\left.\begin{array}{l} \bar{S}_1 = \begin{pmatrix} R_1 & T_1 \\ T_1 & R_1 \end{pmatrix} \\ \bar{S}_2 = \begin{pmatrix} R_2 & T_2 \\ T_2 & R_2 \end{pmatrix} \end{array}\right\} \boxed{T = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2} \quad \begin{array}{c}\text{inkohärenter} \\ \text{Transport}\end{array}}$$

3.2. Greensche Funktionen

allgemein: $DR = S$ $\quad S$: Anregung
R : Response
D : Differentialoperator

$\Rightarrow \quad R = D^{-1} S$
$D^{-1} \equiv G$: Greensche Funktion

Bsp.: 1-D Draht, $U = U_0, \quad \bar{A} = 0$

$$G = [E - H]^{-1} = \left[E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]^{-1}$$

$\Longleftrightarrow$

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) G(x, x') = \delta(x - x')$$

abgesehen vom Quellterm $\delta(x - x')$ sehr ähnlich zu normaler SG

$\Rightarrow$ Ansatz: Wellen die vom Punkt der Erregung weglaufen;

$$G(x,x') = \begin{cases} A^+ e^{ik(x-x')} & x > x' \\ A^- e^{-ik(x-x')} & x < x' \end{cases}$$

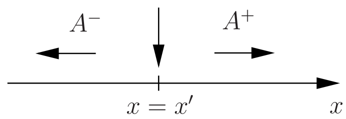
einsetzen für $x \neq x'$ $\quad \Rightarrow \quad k = \sqrt{\dfrac{2m(E-U)}{\hbar^2}}$

Stetigkeit an $x = x'$ $\quad \Rightarrow \quad A^+ = A^- = A$

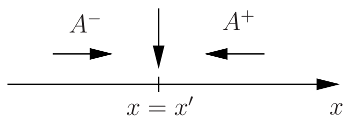
Integration über $x = x'$ $\quad \Rightarrow \quad \left.\dfrac{\partial G}{\partial x}\right|_{x=x'+} - \left.\dfrac{\partial G}{\partial x}\right|_{x=x'-} = \dfrac{2m}{\hbar^2}$

$$\Rightarrow \quad A = -\frac{i}{\hbar v} \qquad \text{mit} \quad v = \frac{\hbar k}{m}$$

$$\Rightarrow \boxed{G^R(x,x') = -\frac{i}{\hbar v} e^{ik|x-x'|} \quad \text{retardierte GF}}$$



Es existiert noch eine weitere Lösung, einlaufende Wellen:



$$\boxed{G^A(x,x') = -\frac{i}{\hbar v} e^{-ik|x-x'|} \quad \text{avancierte GF}}$$

Um Polstellen in der Spektraldarstellung zu vermindern wird i.all. kleiner Imaginärteil addiert:

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + i\eta\right) G^R(x,x') = \delta(x,x')$$

$$\Rightarrow k' = \sqrt{\frac{2m(E + i\eta - U_0)}{\hbar^2}} \approx k + i\delta$$

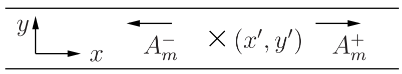
$$\text{mit} \quad \delta = \frac{\eta}{2(E-U_0)}$$

$\Rightarrow$ G^A wächst exp. für $\eta > 0$ $\quad\Rightarrow\quad$ keine Lösung
Umgekehrt für $\eta < 0$

allgemeine Definitionen

$$\boxed{\begin{array}{ll} G^R = [E - H + i\eta]^{-1} & \eta \to 0^+ \\ G^A = [E - H - i\eta]^{-1} & \end{array}}$$

<u>Multimoden-Draht, undendlich ausgedehnt, $B = 0$</u>



$G^R(x, y; x', y') \stackrel{\wedge}{=} WF$ bei (x, y) infolge Anregung bei (x', y')

<u>Ansatz:</u> $\quad G^R = \sum_m A_m^\pm \chi_m(y) e^{ik_m|x-x'|}$

mit transversalen WF $\chi_m(y)$ (vgl. 1.5)

für die gilt $\quad \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + U(y)\right\}\chi_m(y) = \varepsilon_m \chi_m(y);$

$$\int \chi_n(y)\chi_m(y)dy = \delta_{nm} \qquad \text{(seien reell)}$$

analoges Vorgehen zum 1-D-Draht

Stetigkeit: $\quad G^R(x = x'^+) \stackrel{!}{=} G^R(x = x'^-)$

$$\Rightarrow \quad \sum_m A_m^+ \chi_m(y) = \sum_m A_m^- \chi_m(y)$$

$$\left|\int \chi_n(y)dy \quad \Rightarrow \quad A_n^+ = A_n^- \quad \forall n\right.$$

Integration $\quad \Rightarrow \quad \left.\frac{\partial G}{\partial x}\right|_{x=x'^+} - \left.\frac{\partial G}{\partial x}\right|_{x=x'^-} = \frac{2m}{\hbar^2}\delta(y - y')$

$$\sum_m ik_m[A_m^+ + A_m^-]\chi_m(y) = \frac{2m}{\hbar^2}\delta(y - y')$$

$$\left|\int \chi_n(y)dy \quad \Rightarrow \quad ik_n[A_n^+ + A_n^-] = \frac{2m}{\hbar^2}\chi_n(y')\right.$$

damit

$$\boxed{\begin{aligned} G^R(x,y;x',y') &= \sum_m -\frac{i}{\hbar v_m}\chi_m(y)\chi_m(y')e^{ik_m|x-x'|} \\ \text{mit } k_m &= \sqrt{\frac{2m(E-\varepsilon_m)}{\hbar^2}} \text{ und } \nu_m = \frac{\hbar k_m}{m} \end{aligned}}$$

Spektraldarstellung:

Sei $H\psi_\alpha(\bar{r}) = \varepsilon_\alpha\psi_\alpha(\bar{r})$; $\quad (E - H + i\eta)G^R(\bar{r}-\bar{r}')$
entwickeln $G^R(\bar{r}-\bar{r}') = \sum_\alpha c_\alpha(\bar{r}')\psi_\alpha(\bar{r})$

$$\Rightarrow \quad \sum_\alpha (E - \varepsilon_\alpha + i\eta)c_\alpha\psi_\alpha(\bar{r}) = \delta(\bar{r}-\bar{r}')$$

$$\Big| \int \psi_\alpha^*(\bar{r})d^3\bar{r} \quad \Rightarrow \quad c_\alpha = \frac{\psi_\alpha^*(\bar{r})}{E-\varepsilon_\alpha+i\eta}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{G^R(\bar{r},\bar{r}') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\bar{r})\psi_\alpha^*(\bar{r}')}{E-\varepsilon_\alpha+i\eta}}$$

analog: $\boxed{G^A(r,r') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(r)\psi_\alpha^*(r')}{E-\varepsilon_\alpha-i\eta}}$

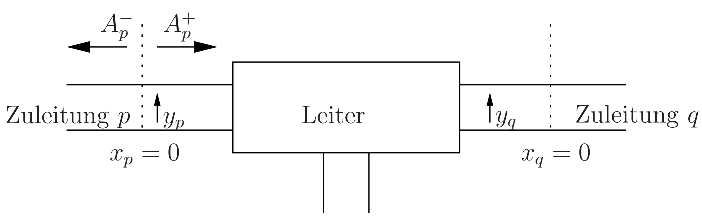
$\Rightarrow \qquad G^A(r,r') = [G^R(r',r)]^*$

oder in Matrix form

$$G^A = [G^R]^+$$

S-Matrix und Greensche Funktionen

betrachten Leiter mit Zuleitungen



$G^R_{qp}(y_q;y_p) \equiv \quad G^R(x_q=0,y_q;x_p=0,y_p)$
Propagator zwischen $x_p=0$ und $x_q=0$ Ebene
vernachlässigen zunächst y-Dimension;

Anregung bei $x_p=0$ gibt Anlaß zu zwei Wellen mit A^-_p, A^+_p
A^+_p ist gestreut am Leiter

definieren Amplituden-Streumatrix S' durch $S'_{qp} = \sqrt{\frac{\nu_p}{\nu_q}} S_{qp}$ im Bezug auf "normale" Streumatrix, die sich auf Strom bezieht ($I \sim |\psi|^2 \cdot \nu$, $\quad \nu$: Geschwindigkeit)
damit:

$$G^R_{qp} = \delta_{qp}A^-_p + S'_{qp}A^+_p$$

vorhin $A^+_p = A^-_p = -\frac{i}{\hbar\nu_p}$, damit

$$G^R_{qp} = \delta_{qp}\left(-\frac{i}{\hbar\nu_p}\right) + S_{qp}\sqrt{\frac{\nu_p}{\nu_q}}\left(-\frac{i}{\hbar\upsilon_p}\right)$$

$$i\hbar\nu_p G^R_{qp} = \delta_{qp} + S_{qp}\sqrt{\frac{\nu_p}{\nu_q}}$$

$$\Rightarrow \boxed{S_{qp} = -\delta_{qp} + i\hbar\sqrt{\nu_p\nu_q}G^R_{qp}}$$

$\left(\text{wegen } \delta_{qp}\sqrt{\frac{\nu_q}{\nu_p}} = \delta_{qp}\right)$

$\Rightarrow$ Streumatrix aus Greenscher Funktion

verallgemeinern auf Multimodendrähte; $m \in p,\ n \in q$

$$\Rightarrow \qquad \boxed{S_{nm} = -\delta_{nm} + i\hbar\sqrt{\nu_n\nu_m}\int\int \chi_n(y_q)G^R_{qp}(y_q,y_p)\chi_m(y_p)d_{y_q}d_{y_p}}$$

Fischer-Lee-Beziehung (PRB **23**, 6851 (1981))

3.3. Tight-Binding-Approximation

Praktische Berechnung der Greenschen Funktion bzw. der Streumatrix
Früher (3.2) $[E - H(\bar{r}) + i\eta]G^R(\bar{r}, \bar{r}') = \delta(\bar{r}, \bar{r}')$ mit

$$H(\bar{r}) = \frac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(\bar{r})$$

diskretisieren Ortskoordinate, damit

$$G^R(\bar{r}, \bar{r}') \rightarrow G^R(i, j)$$

mit Gitterpunkten i, j; DGL $\rightarrow$ Matrixgleichung

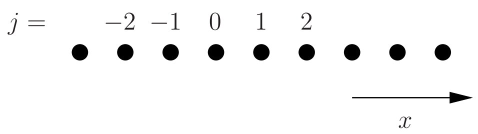
$$[(E + i\eta)I - H]G^R = I$$

damit $G^R = [(E + i\eta)I - H]^{-1}$
brauchen Gitterdarstellung von H!

<u>Beispiel:</u> 1-D, $\bar{A} = 0$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

diskretes Gitter $x = ja, \quad j \in \mathbb{Z}$



für beliebige Funktion $F(x)$ gilt

$$HF\Big|_{x=ja} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2F}{dx^2}\Big|_{x=ja} + U_jF_j$$

mit $F_j \rightarrow F(x = ja); \quad U_j \rightarrow U(x = ja)$
diskretisieren Ableitung

$$\frac{dF}{dx}\Big|_{x=\left(j+\frac{1}{2}\right)a} \rightarrow \frac{1}{a}(F_{j+1} - F_j)$$

$$\frac{d^2F}{dx^2}\Big|_{x=ja} \rightarrow \frac{1}{a}\left\{\frac{dF}{dx}\Big|_{x=\left(j+\frac{1}{2}\right)a} - \frac{dF}{dx}\Big|_{x=\left(j-\frac{1}{2}\right)a}\right\}$$

$$\rightarrow \frac{1}{a^2}\left\{F_{j+1} - 2F_j + F_{j-1}\right\}$$

damit

$$HF\Big|_{x=ja} = (U_j + 2t)F_j - tF_{j-1} - tF_{j+1}$$

mit

$$t \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

umschreiben als

$$HF\Big|_{x=ja} = \sum_i H(j,i)F_i \qquad \text{mit}$$

$$H(j,i) = \begin{cases} U_i + 2t & i = j \\ -t & |i-j| = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

damit Matrixdarstellung für H

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & U_{-1}+2t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & U_0+2t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & U_1+2t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \ddots \end{pmatrix}$$

abgeleitet aus Finite-Differenzen-Diskretisierung, aber Analogie zu Tight-Bindung:

$$\begin{aligned} U_j + 2t \rightarrow &\quad \text{Orbitalenergie} \\ t \rightarrow &\quad \text{Überlappintegral zum n.N.} \end{aligned}$$

Dispersionsrelation

$U(x) = U_0 \quad \Rightarrow \quad$ Ansatz $\psi_j = e^{ikx_j}$ mit $x_j = ja$
einsetzen in $E\psi_j = (U_0 + 2t)\psi_j - t\psi_{j-1} - t\psi_{j+1}$

$$\Rightarrow \qquad E = U_0 + 2t(1 - \cos(ka))$$

Gruppengeschwindigkeit $\hbar\nu = \dfrac{\partial E}{\partial k} = 2at\sin(k \cdot a)$

Verallgemeinerung auf mehr Dimensionen, $\bar{A} \neq 0$

$$[H]_{ij} = \begin{cases} U(\bar{r}_i) + 2t & i = j \\ -\tilde{t}_{ij} & i, j \;\text{ n.N.} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $z = \#$ n.N. (2 für 1D, 4 für quadratischen Gitter)

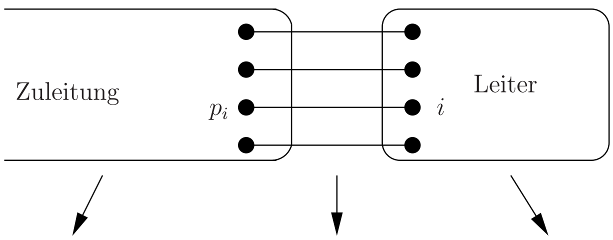
$$\tilde{t}_{ij} = t e^{ie\bar{A}(\bar{r}_i - \bar{r}_j)/\hbar}, \qquad \bar{A}\left(\frac{r_i + r_j}{2}\right)$$

Jetzt Matrixdarstellung für H, damit Invertierung im Prinzip möglich um

$$G^R = [(E + i\eta)I - H]^{-1}$$

zu bestimmen. Problem: Matrix ∞
Ursache: Zuleitungen gehen nach $\pm\infty$!
willkürliches Abschneiden der Matrix ist keine Lösung, weil das ein geschlossenes System beschreibt

$\Rightarrow$ Partitionieren unser System



H_p	τ_p	H_c
isolierte Zuleitung	Kopplungsmatrix	isolierter Matrix

$$\tau_p(p_i, i) = \begin{cases} t & \text{für} \quad i, p_i \; n.N. \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

p_i: Stützstelle in Zuleitung
i: Stützstelle im Leiter

$\longrightarrow$ Partitionierung der Greenschen Funktion

$$\begin{bmatrix} G_p & G_{pC} \\ G_{Cp} & G_C \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} (E + i\eta)I - H_p & \tau_p \\ \tau_p^+ & EI - H_C \end{bmatrix}^{-1}$$

(später: Imaginärteil in G_C automatisch)

$$\Rightarrow [(E+i\eta)I - H_p]G_{pC} + [\tau_p]G_C = 0 \qquad [\,][\,] = I \qquad (*)$$

$$[\tau_p^+]G_{pC} + [EI - H_C]G_C = I \qquad (**)$$

schreiben * um:

$$G_{pC} = -g_p^R \tau_p G_C \qquad \text{mit}$$

$g_p^R = [(E+i\eta)I - H_p]^{-1}$: Greensche Funktion der Zuleitung

damit in **

$$-\tau_p^+ g_p^R \tau_p G_C + [EI - H_C]G_C = I$$

$$\Rightarrow \qquad \boxed{G_C = [EI - H_C - \tau_p^+ g_p^R \tau_p]^{-1}}$$

G_C endlich-dimensionale Matrix
(rang $G_C = \#$ Stützstellen im Leiter)

um G_C zu erhalten, müssen wir scheinbar eine ∞-dim. Matrix invertiern (um g_p^R zu bestimmen), aber das ist praktisch i.a. nicht nötig, da analytische Lsg. möglich ist für Zuleitung (siehe demnächst)

$$\text{mit } \tau_p(p_i, i) = \begin{cases} t & \text{für} \quad i, p_i \quad \text{n.N.} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

folgt

$$[\tau_p^+ g_p^R \tau_p]_{ij} = t^2 g_p^R(p_i, p_j)$$

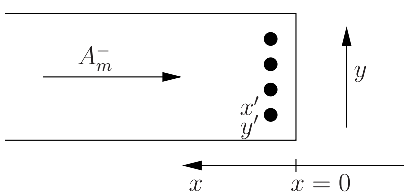
Annahme: Zuleitungen voneinander unabhängig, Einfluß auf Leiter, additiv

$$\Rightarrow \boxed{G^R = [EI - H_C - \Sigma^R]^{-1}}$$

wobei $\Sigma^R = \sum\limits_p \Sigma_p^R$: Selbstenergie mit
$\Sigma_p^R(i,j) = s^2 g_p^R(p_i, p_j)$

für praktische Rechnung brauchen wir

Greensche Funktion für halbunendliche Zuleitung



$U(x<0) \to \infty$
$\Rightarrow \psi(x) \to 0$
$x < 0$

$$\text{Eigenfunktionen} \quad \psi_{m\beta}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\chi_m(y)\sin\beta x$$
$$\varepsilon_{m\beta} = \varepsilon_m + \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}$$

in Spektraldarstellung der GF:

$$\underbrace{G^R(x,y;x,y')}_{\substack{\downarrow\ \downarrow \\ \text{(brauchen nur GF} \\ \text{an ident. } x\text{-Koord.)}}} = \frac{2}{L}\sum_m \sum_{\beta>0} \underbrace{\frac{\chi_m(y)\chi_m(y')\sin^2(\beta x)}{E-\varepsilon_m-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}+i\eta}}_{\substack{\downarrow \\ \text{retardierte GF}}}$$

$$\sum_\beta \rightarrow \frac{L}{\pi}\int d\beta$$

$$G^R(x,y;x,y') = \frac{2}{\pi}\sum_m \chi_m(y)\chi_m(y')\int_0^\infty \frac{\sin^2(\beta x)}{E-\varepsilon_m-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}+i\eta}d\beta$$

Ausintegration (über Residuensatz, Umformung in Konturintegral) ergibt

$$G^R(x,y;x,y') = -\sum_m \frac{2\sin k_m x}{\hbar v_m}\chi_m(y)e^{ik_m x}\chi_m(y')$$
$$\text{mit} \quad k_m \equiv \sqrt{\frac{2m(E-\varepsilon_m)}{\hbar^2}}$$
$$\nu_m \equiv \frac{\hbar k_m}{m}$$

jetzt Übergang zum diskreten Gitter, d.h.

$$\hbar v_m = 2at\sin k_m \cdot a \qquad \text{(vorhin)}$$

$$\Rightarrow \qquad g^R(p_i,p_j) = G^R(x,y;x,y') \mid_{\substack{x=a \\ y=p_i \\ y'=p_j}}$$
$$= -\sum \frac{1}{at}\chi_m(p_i)e^{ik_m a}\chi_m(p_j)$$

damit Selbstenergie

$$\sum_p^R = -\frac{t}{a}\sum_{m\in p}\chi_m(p_i)e^{ik_m a}\chi_m(p_j)$$

Aus der Greenschen Funktion können wir die S-Matrix berechnen über Fischer-Lee-Relation, daraus die Transmissionsfunktion:
früher (3.2)

$$s_{nm} = -\delta_{nm} + i\hbar\sqrt{v_n v_m}\int\int \chi_n(y_q)[G^R_{qp}(y_q, y_p)]\chi_m(y_p)d_{y_p}d_{y_q}$$

für $n \neq m$, nutzen $G^A(y, y') = G^{R^*}(y', y)$,
diskrete Darstellung

$$|s_{nm}|^2 = \underbrace{\frac{\hbar^2\nu_n\nu_m}{C^2}}_{\substack{\text{Normierungskonstante}\\ \text{wegen } \int \to \sum}} \sum_{i,j,i',j'} \chi_n(q_j)G^R(j,i)\chi_m(p_i)\chi_n(qj')G^A(i',j')\chi_m(p_i)$$

früher (3.1)

$$\bar{T}_{qp} = \sum_{n\in q}\sum_{m\in p}|s_{nm}|^2$$

$$\bar{T}_{qp} = \sum_{\substack{i,j\\ i',j'}} \Gamma_q(j',j)G^R(j,i)\Gamma_p(i,i')G^A(i',j')$$

$$\boxed{\bar{T}_{qp} = Sp[\Gamma_q G^R \Gamma_p G^A]} \qquad (*)$$

mit $\Gamma_p(i,j) \equiv \sum_{m\in p}\chi_m(p_i)\frac{\hbar\nu_m}{c}\chi_m(p_i')$
(Kopplungsmatrix) mit

$$\left(\Sigma^R_p\right)_{ij} = -\frac{t}{a}\sum_{m\in p}\chi_m(p_i)e^{ik_m a}\chi_m(p_j)$$

$$\left(\Sigma^A_p\right)_{ij} = \left(\Sigma^R_p\right)^*_{ji}$$

und $\hbar\nu_m = 2at\sin(k_m a)$
(Dispersionsrelation für diskretes Gitter)
folgt $\boxed{\Gamma_p = i\left[\Sigma^R_p - \Sigma^A_p\right]}$ (**)

(1)

Mit * und ** kompakter Ausdruck für Transmissionsfunktion. GF G^R beschreibt die Dynamik der e^- im Leiter, dabei ist der Einfluß der Zuleitungen durch Selbstenergie Σ^R enthalten. Kopplungsmatrix Γ beschreibt die Zuleitungen.

Summenregel

früher (3.1) $\sum_q \bar{T}_{pq} = \sum_q \bar{T}_{qp} = M_p :$ # Moden in p

Suchen Analogie für Greensche Funktion

$\sum_q \bar{T}_{pq} = Sp[\Gamma_p G^R \Gamma G^A]$ mit

$$\Gamma \equiv \sum_q \Gamma_q = \sum_q i\left[\Sigma_q^R - \Sigma_q^A\right] = i\left[\Sigma^R - \Sigma^A\right]$$

mit $A \equiv G^R \Gamma G^A$: Spektralfunktion

folgt $\sum_q \bar{T}_{pq} = Sp[\Gamma_p A]$

analog $\sum_q \bar{T}_{qp} = Sp[\Gamma_p \tilde{A}]$

mit $\tilde{A} = G^A \Gamma G^R$

$A = \tilde{A}$?

vorhin: $G^R = [EI - H_c - \Sigma^R]^{-1}$

$\Rightarrow [G^R]^{-1} - [G^A]^{-1} = \Sigma^A - \Sigma^R = i\Gamma$

(G^R von links, G^A von rechts)

$\Longleftrightarrow G^A - G^R = iG^R \Gamma G^A = iA$

(G^A von links, G^R von rechts)

$\Longleftrightarrow G^A - G^R = iG^A \Gamma G^R = i\tilde{A}$

$$\Rightarrow \quad A = \tilde{A}$$

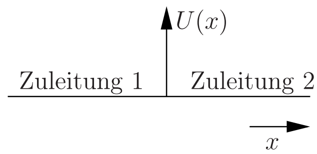
$$\Rightarrow \quad \boxed{\sum_q \bar{T}_{pq} = \sum_q \bar{T}_{qp} = S_p[\Gamma_p A]}$$

Spektralfunktion $A \mathrel{\hat{=}}$ verallgemeinerte Zustandsdichte im Leiter unter Einfluß der Zuleitungen

<u>Bemerkung:</u> Was haben wir erreicht?
Elimination der halbunendlichen Zuleitungen! Transmissionsfunktion gegeben durch Funktionen die *innerhalb* des endlichen Leiters definiert sind. Gilt auch für $\Sigma_p^R(i,j)$ die wir an den Stellen i und j *innerhalb* des Leiters benötigen

$\Rightarrow$ Diskretisierung des Leiters mit N Stützstellen
$\longrightarrow$ $N \times N$ Matrixproblem

<u>Beispiel:</u> Draht mit einer Mode, Streupotential $U(x) = U_0 \delta(x)$



a) <u>S-Matrix aus SG:</u> $E\psi + \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = U_0 \psi \delta(x)$

$$\text{Ansatz: } \psi(x) = \begin{cases} e^{ik_x} + S_{11} e^{-ik_x} & x < 0 \\ S_{21} e^{ik_x} & x > 0 \end{cases}$$

ψ stetig bei $x = 0 \quad \Rightarrow \quad S_{21} = 1 + S_{11} \quad (*)$

ψ' springt bei $x = 0: \quad \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \psi(0)$

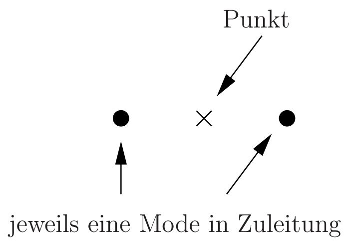
$$\Rightarrow ikS_{21} = ik(1 - S_{11}) + \frac{2mU_0}{\hbar^2} S_{21}$$

$$\Rightarrow \quad \left(1 - \frac{2U_0}{i\hbar v}\right) = 1 - S_{11}$$

mit $\nu = \frac{\hbar k}{m} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

mit (*) folgt
$$S_{11} = \frac{U_0}{i\hbar v - U_0} \qquad (= S_{22})$$
$$S_{21} = \frac{i\hbar v}{i\hbar v - U_0} \qquad (= S_{12})$$
$\uparrow$
Symmetrie des Problems

b) <u>S-Matrix aus Fischer-Lee:</u>
diskretes Gitter mit 1 Punkt repräsentiert Leiter $\Rightarrow$ 1×1 Matrizen



vorhin: $H_{i,j} = \begin{cases} U_i + 2t & t = i = j \\ -t & |i-j| = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

$\longrightarrow \quad EI - H_c \quad \longrightarrow \quad E - U_0 - 2t$

vorhin

$$\Sigma_1^R = \Sigma_2^R = -t \sum_m \chi_m e^{ik_m a} \chi_m$$

$$\downarrow \quad \text{(nur 1 Mode)}$$

$$-te^{ika}$$

damit

$$G^R = [EI - H_C - \Sigma^R]^{-1} \qquad \text{mit} \quad \Sigma^R = \sum_p \Sigma_p^R$$

$\longrightarrow \quad [E - U_0 - 2t + 2te^{ika}]^{-1}$
mit Dispersionsrelation für diskretes Gitter:

$$E = 2t(1 - \cos(ka)) \quad \text{(vorhin)}$$

folgt

$$G^R = [-U_0 + \underbrace{2ti\sin(ka)}_{\substack{i\hbar\nu:\ \text{Gruppengeschwindigkeit} \\ \text{für diskretes Gitter}}}]^{-1}$$

$$G^R = \frac{1}{i\hbar\nu - U_0}$$

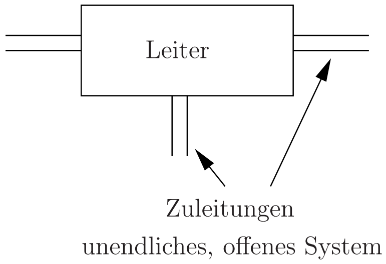
früher (3.2) $S_{pq} = -\delta_{pq} + i\hbar\sqrt{\nu_q \nu_p} G_{qp}^R$
(Fischer-Lee für 1D-Zuleitungen)
damit

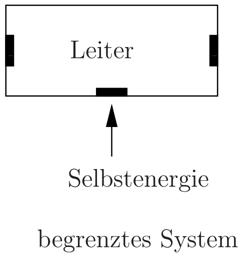
$$[S] = \frac{1}{i\hbar\nu - U_0} \begin{bmatrix} U_0 & i\hbar\nu \\ i\hbar\nu & U_0 \end{bmatrix}$$

analog zur Lsg. mittels Schrödingergleichung

3.4. Selbstenergie

ersetzen	$\longrightarrow$	durch
$G^R = [E - H + i\eta]^{-1}$		$G^R = [E - H_c - \Sigma^R]^{-1}$





Lebensdauer

QM für geschlossenes System:

$$H_c \psi_\alpha^0 = \varepsilon_\alpha^0 \psi_\alpha^0$$

jetzt offenes System mit Kopplung an Zuleitungen
$\longrightarrow$ effektiver Hamiltonian

$$[H_c + \Sigma^R]\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha$$

Σ i. allg. nicht hermitisch $\rightarrow$ komplexe EW

$$\varepsilon_\alpha = \underset{\substack{\uparrow \\ H_c}}{\varepsilon_\alpha^0} - \Delta_\alpha - i\frac{\gamma_\alpha}{2}$$

Zeitabhängigkeit einer Zustands ψ_α

$$e^{-i\varepsilon_\alpha \frac{t}{\hbar}} \rightarrow e^{-i(\varepsilon_\alpha^0 - \Delta_\alpha)\frac{t}{\hbar}} e^{-\frac{\gamma_\alpha t}{2\hbar}}$$

D.h. Δ_α: Energieverschiebung der Niveaus durch WW mit Zuleitungen
γ_α: Folge der Tatsache das ein e^- im Leiter irgendwann durch eine Zuleitung verschwindet

$$|\psi_\alpha|^2 \sim e^{-\frac{\gamma_\alpha t}{\hbar}}, \qquad \text{d.h.} \quad \frac{\hbar}{\gamma_\alpha}: \text{ Lebensdauer}$$

falls Selbstenergie hermitisch, d.h.

$$\Gamma = i[\Sigma^R - \Sigma^A] = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{unendl. Lebensdauer der Zustände}$$

Spektraldarstellung

naiv: $G^R(r,r') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(r)\psi^*_\alpha(r')}{E-\varepsilon_\alpha}$ (falsch!)

Problem: $H_c + \Sigma^R$ nicht hermitisch, ψ_α formen kein orthogonales Funktionssystem, brauchen auch EF des adjungierter Op.

$$[H_c + \Sigma^A]\phi_\alpha = \varepsilon^*_\alpha \phi_\alpha$$
$$[H_c + \Sigma^R]\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha$$

$\psi_\alpha,\ \phi_\alpha$ formen bi-orthonormales Funktionensystem:

$$\int \phi_\alpha(r)\psi^*_\beta(r)dr = \delta_{\alpha\beta}$$

damit ergibt sich die Greensche Funktion zu

$$G^R(r,r') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(r)\phi^*_\alpha(r')}{E-\varepsilon_\alpha}$$

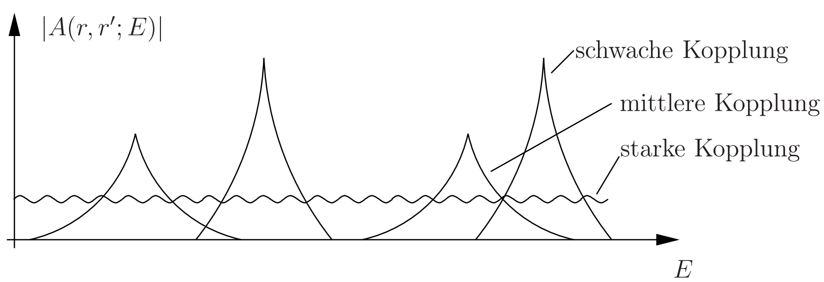
(siehe z.B. van Haeringen, Farid, Lenstra, Physica Scripta, T19, **282** (1987))

Spektralfunktion

$$A \equiv i[G^R - G^A] \qquad \left(\text{mit} \quad G^{\frac{R}{A}} = [E - H \pm i\eta]^{-1}\right)$$

$$A(r,r') = \sum_\alpha \psi_\alpha(r)\phi^*_\alpha(r') \quad \underbrace{\frac{\gamma_\alpha}{(E-\varepsilon^0_\alpha + \Delta_\alpha)^2 + \left(\frac{\gamma_\alpha}{2}\right)^2}}$$

$\longrightarrow$ Peak shift um Δ_α
Peakverbreitung um γ_α



$$
\begin{aligned}
Sp[A] &= \int A(r,r)dr \\
&= \sum_\alpha \frac{\int \gamma_\alpha \overbrace{\phi_\alpha(r)\psi^*_\alpha(r)dr}^{\delta_{\alpha\alpha}=1 \quad \text{(vorhin)}}}{(E-\varepsilon^0_\alpha+\Delta_\alpha)^2+\left(\frac{\gamma_\alpha}{2}\right)^2} \\
&= \sum_\alpha \underbrace{\frac{\gamma_\alpha}{(E-\varepsilon^0_\alpha+\Delta_\alpha)^2+\left(\frac{\gamma_\alpha}{2}\right)^2}} \\
&\qquad\qquad \downarrow \gamma_\alpha \to 0 \\
&\underbrace{2\pi\delta(E-\varepsilon^0_\alpha+\Delta_\alpha)} \\
&2\pi N(E): \text{ Zustandsdichte}
\end{aligned}
$$

gilt allgemein $\boxed{N(E) = \frac{1}{2\pi} Sp[A(E)]}$

$$\boxed{\begin{array}{l} \varrho(r,E) = \frac{1}{2\pi} A(r,r;E) = -\frac{1}{\pi} Im\left[G^R(r,r;E)\right] \\ \text{lokale Zustandsdichte} \end{array}}$$

3.5. Veranschaulichung: Feynmanpfade

$G^R = [EI - H_c - \Sigma^R]^{-1}$
zerlegen $[G^R]^{-1}$ in ungestörtes System G_0^{-1} und Störung α:

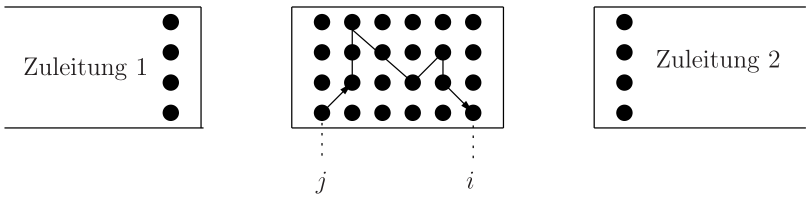
$$
\begin{aligned}
[G^R]^{-1} &= [G_0]^{-1} - \alpha \\
G^R &= [G_0^{-1} - \alpha]^{-1} \\
&= [G_0^{-1}[I - G_0\alpha]]^{-1} \\
&= [I - G_0\alpha]^{-1} G_0 \qquad \text{mit} \quad \frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots \\
&= G_0 + G_0\alpha G_0 + G_0\alpha G_0\alpha G_0 + \dots
\end{aligned}
$$

D.h. Summe über Segmente ungestörter Propagation (G_0) die sich mit Übergängen induziert durch die Störung α abwechseln.

Anschauliche Interpretation durch Summe über alle Pfade (gewichtet mit Amplitude A) die den relevanten Anfangs- und Endpunkt haben:

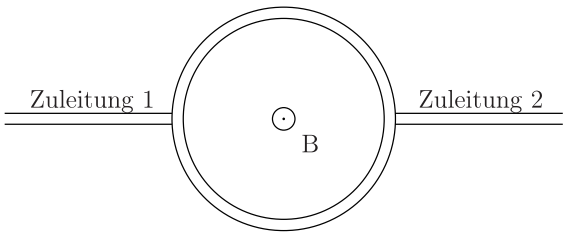
$$G^R(i,j) = \sum_p A_p(i,j)$$

$p \in \forall$ Pfade von j nach i



<u>Beispiel:</u> <u>Aharanov-Bohm-(A-B) Effekt</u>

Leitfähigkeit durch mesoskopischen Ring ($\varnothing \approx 1\mu m$):



Experiment: $G = G_0 + G' \cos\left(\frac{|e|BS}{\hbar} + \varphi_0\right)$
S: Fläche im Ring

Oszillationen durch Interferenz

Transmission von Mode m in Zuleitung 1 zu Mode n in Zuleitung 2
$T(n \leftarrow m) = |t_1 + t_2|^2$

$t_1 = \sum\limits_{\substack{p\in\text{oberer}\\ \text{Arm}}} A_p; \qquad t_2 = \sum\limits_{\substack{p\in\text{unterer}\\ \text{Arm}}} A_p$

(früher, 3.3) Hopping-Amplitude zwischen zwei Gitterplätzen i,j bei B-Feld:
$\alpha_{ij} = te^{\frac{ie\bar{A}(\bar{r}_i - \bar{r}_j)}{\hbar}}$

$\Rightarrow$ A-Potential führt zu Phasenverschiebung für jeden Pfad

$$t_1(B) = t_1(0)e^{i\varphi_1} \quad \varphi_1 = \frac{e}{\hbar}\int\limits_{oberer\ Arm} \bar{A}\cdot d\bar{l}$$

$$t_2(B) = t_2(0)e^{i\varphi_2} \quad \varphi_1 = \frac{e}{\hbar}\int\limits_{unterer\ Arm} \bar{A}\cdot d\bar{l}$$

$$\begin{aligned}\varphi_1 - \varphi_2 =& \frac{|e|}{\hbar}\oint \bar{A}d\bar{l}\\ =& \frac{|e|}{\hbar}\int \bar{B}d\bar{s}\\ =& \frac{|e|BS}{\hbar}\end{aligned}$$

damit

$$T(n \leftarrow m) = |t_1 + t_2|^2 = T_1 + T_2 + 2\sqrt{T_1T_2}\cos\left(\frac{|e|BS}{\hbar} + \varphi_0\right)$$

mit $T_1 = |t_1|^2, \quad T_2 = |t_2|^2$

(Theoretisch vorhergesagt in Phys. Rev. 115, **485** (1959))

3.6. Zusammenfassung und Einordnung

Abschnitt 3.1 Transmissionsfunktion aus Streumatrix

Abschnitt 3.2 Greensche Funktionen, S-Matrix, durch Fischer-Lee-Beziehung

$$\begin{aligned}S_{nm} = \quad & -\delta_{nm} + i\hbar\sqrt{\nu_n\nu_m}\int\int d_{y_q}d_{y_p}\chi_n(y_q)\\ & \times[G^R_{qp}(y_q, y_p)]\chi_m(y_p)\\ & (m \in p, n \in q)\end{aligned}$$

Abschnitt 3.3 Tight-Binding-Approximation

$\longrightarrow$ Berechnung von G^R, Einbezug der Zuleitungen durch Renormalisierung über Selbstenergien

$$G^R = [EI - \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Hamiltonian für}\\ \text{abgeschlossenen Leiter}}}{H_C} - \Sigma^R]^{-1}$$

$\Sigma^R = \sum_p \Sigma_p^R$ wobei Σ_p^R nur verschieden von Null für Punkte im Leiter gegenüber Zuleitungen

$\Sigma_p^R(i,j) = t^2 g_p^R(p_i, p_j)$ mit
g_p^R: Greensche Funktion für isolierte Zuleitungen p

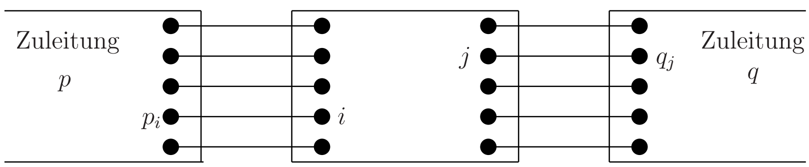
$$g_p^R(p_i, p_j) = -\frac{1}{t} \sum_m \chi_m(p_i) e^{ik_m a} \chi_m(p_j)$$

mit $\bar{T}_{qp} = \sum_{n \in q} \sum_{m \in p} |S_{nm}|^2$ und Fischer-Lee folgt kompakter Ausdruck

$$\boxed{\bar{T}_{qp} = Sp[\Gamma_q G^R \Gamma_p G^A]}$$

wobei
$$\begin{aligned} \Gamma_p(i,j) &= i\left(\Sigma_p^R(i,j) - \Sigma_p^A(i,j)\right) \\ \text{(Kopplungsmatrix)} &= \sum_m \chi_m(p_i) \frac{\hbar v_m}{a} \chi_m(p_j) \end{aligned}$$

Wichtig: Alle Ausdrücke definiert für Punkte i, j im Leiter



Kubo-Formalismus (aus stat. Mechanik)

$$\sigma = \frac{2e^2}{h} \frac{\hbar^2}{L^d} \sum_{\bar{k}, \bar{k}'} \nu_x(\bar{k}') \nu_x(\bar{k}) |G^R(\bar{k}', \bar{k})|^2$$

d : # Dimensionen
(Lee, Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1989))

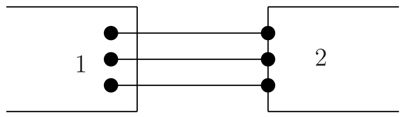
ähnlich Landauer-Büttiker für

$$\frac{h\nu_x}{L} \to \Gamma!$$

Plausibel: Kopplungsmatrix Γ_p gibt uns Rate für Zerfall eines elektronischen Zustands durch Abfluß in Zuleitung $p \sim$ Geschwindigkeit ν_x

Transfer-Hamilton-Formalismus

oft verwandt bei schwacher Kopplung, z.B. STM



$$I = \frac{4\pi e}{\hbar}\int [f_1(E) - f_2(E)]|M(E)|^2 \varrho_1(E)\varrho_2(E)dE$$

ϱ_1, ϱ_2 : Zustandsdichte in 1,2
M : Matrixelemente zwischen 1 und 2
(siehe Chen, Introduction to Scanning Tunneling Microscopy, Oxford University Press, 1993)

$$kT \ll \Delta\mu \rightarrow f_2(E) \approx \theta(\mu_2 - E)$$
$$\frac{\partial f}{\partial E} \rightarrow \delta(\mu_2 - E)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial I}{\partial \mu_2} \rightarrow \frac{4\pi e}{\hbar}|M(E)|^2\varrho_1(E)\varrho_2(E)\Big|_{E=\mu_2}$$

oft benutzt zur Abschätzung von Zustandsdichten aus STS-Messungen

Strom aus Landauer-Büttiker (vgl. 2.5)

$$I = \frac{2e}{h}\int \bar{T}(E)[f_1(E) - f_2(E)]$$

Konsistenz mit Transfer-Hamiltonian-Formalismus fordert

$$\begin{array}{cccc} \bar{T} \overset{!}{=} 4\pi^2 & |M|^2 & \varrho_1\varrho_2 \\ & \downarrow & \downarrow \\ & T & \#\ \text{Moden} \\ & \text{Trans-} & \\ & \text{mission} & \end{array}$$

plausibel!

THF abgerüstete Version des Streuformalismus (LBF) für schwache Kopplung

4. Beispiele

4.1. Quantenhalleffekt

Erinnerung 1.5: $\bar{B}$-Feld separiert Transportkanäle, räumliche Trennung von $+k$ & $-k$-Zuständen reduziert
e^--Streuung $\Rightarrow$ Verringerung des Widerstands

jetzt quantitativ: EMA

$$\left\{E_s + \frac{(i\hbar\nabla + e\bar{A})^2}{2m} + U(y)\right\}\psi(x,y) = E\psi(x,y)$$

früher 1.5 $U = 0, \quad B \neq 0$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad & \psi_{nk}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x} u_n(q+q_k) = |n,k> \\
& E(n,k) = E_s + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c \qquad n = 0,1,2,\ldots \\
& \text{mit } u_n(q) = e^{-\frac{q^2}{2}} H_n(q) \leftarrow \text{Hermitesche Polynome} \\
& \text{wobei} \quad q = \sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}} y \quad q_k = \sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}} y_k \\
& \qquad\qquad y_k \equiv \frac{\hbar k}{eB}, \qquad \omega_c \equiv \frac{|e|B}{m}
\end{aligned}$$

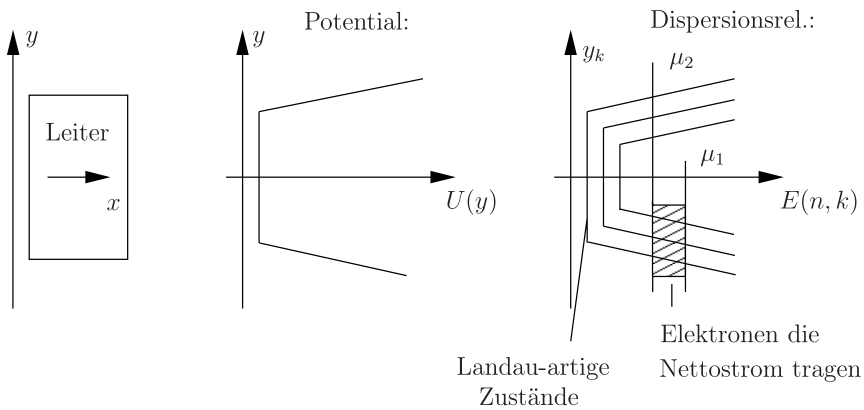
jetzt Einsetzung der Begrenzung unseres 2D-Leiters durch Störungsrechnung für Potential $U(y)$

$$E(n,k) \approx E_s + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + < n,k|U(y)|n,k >$$

jeder Zustand $< n,k >$ zentriert um $y = y_k$ mit räumlicher Ausdehnung $\Delta y \sim \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}}$

wenn Variation von $U(y)$ klein auf Längenskale Δy

$$\Rightarrow \qquad E(n,k) = E_s \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + U(y_k)$$



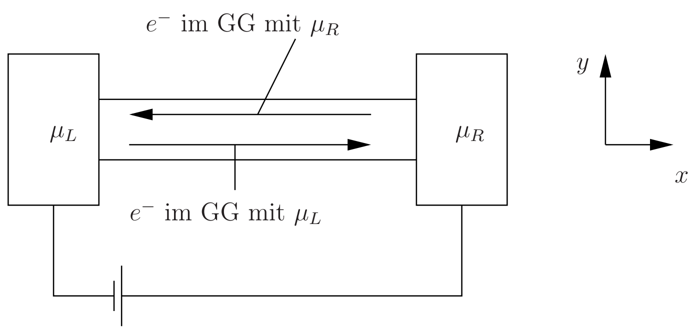
Offensichtlich Strom nur getragen von Zuständen an der Kante des Leiters:

$$\begin{aligned} v(n,k) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(n,k)}{\partial k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial U(y_k)}{\partial k} &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial U(y)}{\partial y}\frac{\partial y_k}{\partial k} \\ &= \frac{1}{eB}\frac{\partial U(y)}{\partial y} \end{aligned}$$

früher (2.3) Widerstand bestimmt durch Impulsrelaxation der Stromtragenden Zustände

jetzt praktisch kein Impulstransfer von $+k$ zu $-k$-Zuständen möglich:

- Überlapp exp. klein
- keine Zustände im Inneren des Leiters mit $\mu_2 < E < \mu_1$



$$\left.\begin{array}{l}\mu_1 = \mu_L \\ \mu_2 = \mu_R\end{array}\right\}\forall x \quad \Rightarrow$$ kein Spannungsabfall zwischen zwei Stellen auf derselben Seite der Probe (longitudinal) $V_L = 0$

konstanter Spannungsabfall zwischen 2 Punkten auf verschiedenen Seiten der Probe

$$eV_H = \mu_L - \mu_R \qquad \text{(Hallspannung)}$$

Wichtig: Stimmt nur, wenn das elektrochemische Potential zwischen zwei Landau-Niveaus liegt! Wenn das Potential auf Landau-Niveau liegt, können e^- von links nach rechts streuen durch das Innere der Probe $\Rightarrow$ Maximum des Widerstands

Strom? Situation wie bei ballistischen Leiter (2.1)

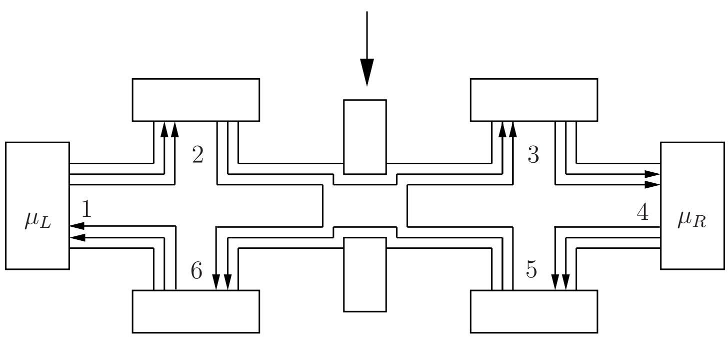
$$I = \frac{2e}{h} M(\mu_l - \mu_R)$$

M : # Zustände an Kante bei E_F
$\hat{=}$ # Landau-Niveaus (besetzt) im Volumen

damit $\boxed{R_L = \frac{V_L}{I} = 0}$

$$\boxed{R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{h}{2e^2 M} = \frac{25.8128 k\Omega}{2M}}$$

bis jetzt Streuung völlig vernachlässigt, jetzt Einbau eines Rückstreuers:



Nur $N < M$ Kantenzustände propagieren durch die Einschränkung
$\Rightarrow$ Nettostrom von links nach rechts

$$I_1 = \frac{2e}{h} N(\mu_L - \mu_R) \underset{\substack{\uparrow \\ \mu_L = eV_1 \\ \mu_R = 0}}{=} \frac{2e^2}{h} N V_1$$

mit $p \equiv \dfrac{M-N}{M} = \dfrac{\#\text{reflektierte Kanäle}}{\#\text{Kanäle insgesamt}}$ folgt

$$I_1 = \frac{2e^2}{h} M \cdot V_1 \cdot (1-p) \qquad (*)$$

Kontakt 2 sieht nur e^- von links $\mu_2 = eV_1$
Kontakt 5 sieht nur e^- von rechts $\mu_5 = 0$
Kontakt 6 sieht $M - N$ Kanäle von links und
N Kanäle von rechts

$$\longrightarrow \quad \mu_6 = \frac{(M-N)\mu_L + \overbrace{N\mu_R}^{=0}}{M} = eV_1 p$$

Kontakt 3 analog

$$\longrightarrow \quad \mu_3 = \frac{N\mu_L + (M-N)\mu_R}{M} = eV_1(1-p)$$

damit longitudinale Widerstand zwischen 2 & 3 (oder 5 & 6)

$$\begin{aligned} R_L = \frac{\mu_2 - \mu_3}{eI_1} = \frac{V_1 p}{I_1} &\overset{*}{=} \frac{V_1 p \cdot h}{2e^2 M V_1 (1-p)} \\ &= \frac{h}{2e^2 M} \left[\frac{p}{1-p}\right] \\ &= \frac{h}{2e^2 M} \left[\frac{1}{N} - \frac{1}{M}\right] \end{aligned}$$

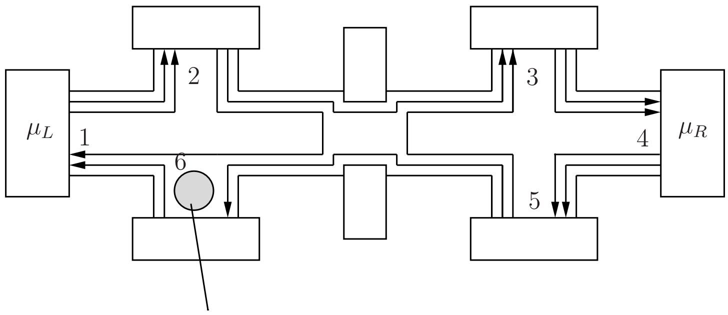
"Fraktionale Quantisierung", exp. beobachtet

Hallwiderstand zwischen 2 & 6 (oder 3 & 5)

$$R_H = \frac{\mu_2 - \mu_6}{eI_1} = \frac{V_1(1-p)}{I_1} \overset{*}{=} \frac{h}{2e^2 M}$$

$\longrightarrow$ kein Einfluß der Barriere

Manchmal exp. dort ein Einfluß der Barriere beobachtet! Warum? Nichtideale Kontakte:



Störung, verhindert Detektion eines Kanals

Kontakt 6 sieht jetzt ausschließlich e^- von rechts

$$\Rightarrow \quad \mu_6 = 0$$

$$\Rightarrow \quad R_H = \frac{V_2 - V_6}{I_1} = \frac{V_1}{I_1} \stackrel{*}{=} \frac{h}{2e^2 M(1-p)}$$

$$\left(\text{anstelle von } \frac{h}{2e^2 M}\right)$$

gilt nur, wenn die Kantenzustände untereinander nicht kommunizieren und kein gemeinsames Potential einstellen

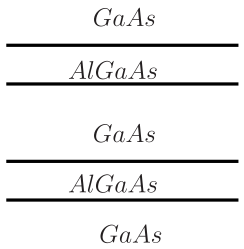
Exp.: R_L zeigt kein Ohmsches Verhalten auch wenn Fermienergie auf einem Landau-Niveau liegt
(siehe z.B. Hang, von Klitzing, Europhys. Lett **10**, 489 (1989))

Ursache: Nur die innere Kantenzustände streuen von links nach rechts und umgekehrt, d.h. nicht alle Zustände spüren e^--e^--Streuung

$\Rightarrow$ QHE erlaubt Beobachtung mesoskopischer Transportphänomene über Längenskalen von mm!

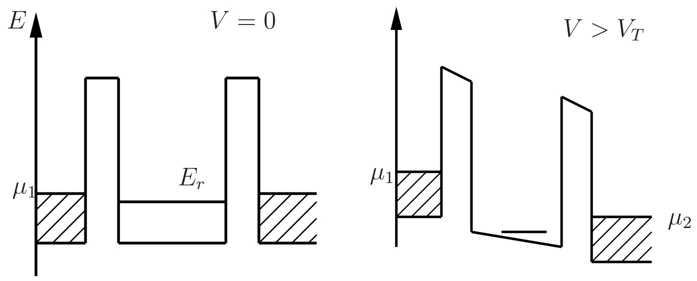
4.2. Doppelbarriere

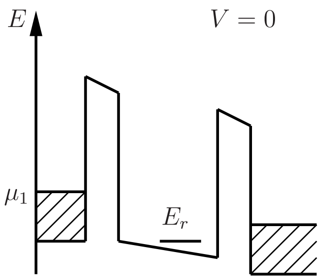
Bsp.: kohärentes, resonantes Tunneln



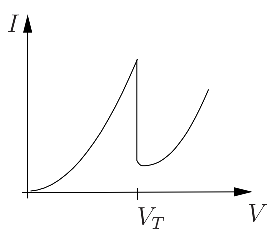
$\Big\} nm \lesssim \lambda$ $\quad\Rightarrow$ Quantisierung der erlaubten Zustände

Annahme: Box so klein, daß nur ein erlaubter Zustand im relevanten Energiebereich





Doppelbarriere wirkt als Filter, läßt nur e^- mit E_r durch
$\Rightarrow$ neg. diff. Widerstand für $V > V_T$



quantitative Berechnung (vgl. 2.5)

$$I = \frac{2e}{h} \int \bar{T}(E)[f_1(E) - f_2(E)]dE$$

$f_{1/2}$: Fermifunktionen der Kontakte mit $\bar{T}(E) = \sum_m \sum_n T_{nm}(E)$

tiefe Temperaturen: $f_{1/2}(E) = \theta(\mu_{1/2} - E)$

$$\Rightarrow \qquad I = \frac{2e}{h} \int_{\mu_2}^{\mu_1} \bar{T}(E) dE$$

vernachlässigen inelastische Streuung, Transmission von EMA

$$\left[E_C + \frac{(i\hbar\nabla + e\bar{A})^2}{2m} + U(\bar{r}) \right] \psi(\bar{r}) = E\psi(\bar{r})$$

$\bar{A} = 0$
$E_C = 0$
$U(\bar{r}) = U_T(x,y) + U_L(z)$ (separabel)

$\Rightarrow$ können SG separieren

Quermoden aus

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U_T(x,y) \right\} \phi_m(x,y) = \varepsilon_m \phi_m$$

Streuung aus

$$\left\{ E_L + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial z^2} - U_L(z) \right\} \phi_m(z) = 0$$

mit $E_L = E - \varepsilon_m$

D.h. wenn $U_L(z)$ bekannt, erhalten wir aus obiger Gleichung die Transmissionswahrscheinlichkeit für ein Elektron mit $E_L = E - \varepsilon_m$

$U_T(x,y)$ hängt nicht von z ab

$\Rightarrow$ keine Streuung zwischen der Quermoden

$\Rightarrow$ $T_{nm}(E) = T_L(E - \varepsilon_m)\delta_{nm}$

$\Rightarrow$ $\bar{T}(E) = \sum_m \sum_n T_{nm}(E) = \sum_m T_L(E - \varepsilon_m)$

früher (3.1) zwei Streuer in Reihenschaltung

$$T_L(E_L) = \frac{T_1 T_2}{1 - 2\sqrt{R_1 R_2}\cos\theta(E_L) + R_1 R_2}$$

$T_{1/2}$: Transmission von Barriere 1 und 2
$R_{1/2}$: Reflektion von 1 und 2
θ : Phasenverschiebung bei einem Umlauf zwischen 1 und 2

$$
\begin{aligned}
T_L(E_L) &= \frac{T_1T_2}{[1-\sqrt{R_1R_2}]^2 + 2\sqrt{R_1R_2}(1-\cos\theta(E_L))} \\
&\approx \frac{T_1T_2}{\left[\frac{T_1+T_2}{2}\right]^2 + 2(1-\cos\theta(E_L))} \\
&\left(R_{1/2} \approx 1 \quad \text{(typ.)}, \qquad \sqrt{1-x} \approx 1 - \frac{x}{2}\right)
\end{aligned}
$$

scharfe Resonanzen für $\cos\theta(E_L)\Big|_{E_L=E_r} = 1$

(wegen kleiner Transmission $T_{1,2}$ wird Nenner sehr klein)

entwickeln Kosinus um Resonanz $E_L = E_r$

$$
\begin{aligned}
1-\cos\theta(E_L) &\approx \frac{1}{2}(\theta(E_L) - 2n\pi)^2 \\
&\approx \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\theta}{dE_L}\right)^2 (E_L - E_r)^2
\end{aligned}
$$

damit

$$
T_L(E_L) \approx \frac{T_1T_2}{\left[\frac{T_1+T_2}{2}\right]^2 + \left(\frac{d\theta}{dE_L}\right)^2 (E_L-E_r)^2}
$$

$$
\Longleftrightarrow \quad \boxed{T_L(E_L) \approx \frac{\Gamma_1\Gamma_2}{(E_L+E_r)^2 + \left(\frac{\Gamma_1+\Gamma_2}{2}\right)^2} \qquad \begin{aligned} \Gamma_1 &\equiv \frac{dE_L}{d\theta}T_1 \\ \Gamma_2 &\equiv \frac{dE_L}{d\theta}T_2 \end{aligned}}
$$

gute Approximation in der Nähe de Resonanz
erweitern mit $\Gamma \equiv \Gamma_1 + \Gamma_2$

$$
\begin{aligned}
T_L(E_L) &\approx \frac{\Gamma_1\Gamma_2}{\Gamma_1+\Gamma_2} \underbrace{\frac{\Gamma_1+\Gamma_2}{(E_L-E_r)^1 + \left(\frac{\Gamma_1+\Gamma_2}{2}\right)^2}}_{\substack{\text{Lorentz-Kurve} \\ A(\varepsilon) = \frac{\Gamma}{\varepsilon^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}}} \\
T_L(E_L) &\approx \frac{\Gamma_1\Gamma_2}{\Gamma_1+\Gamma_2} A(E_L - E_r)
\end{aligned}
$$

damit Gesamttransmission

$$\boxed{\begin{array}{l}\bar{T}(E) = \sum_m T_L(E-\varepsilon_m) = \dfrac{\Gamma_1\Gamma_2}{\Gamma_1+\Gamma_2}\sum_m A(E-E_m) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \text{mit } E_m \equiv E_r + \varepsilon_m\end{array}}$$

intuitiv klar:
- Peaks in Transmission für

$$\begin{array}{ccc} E = E_r & + & \varepsilon_m \\ \downarrow & & \downarrow \\ \text{Longitudinale} & & \text{Energie der} \\ \text{Resonanz} & & \text{Quermode}\end{array}$$

- Höhe der Peaks: $\Gamma_1\Gamma_2$
- Weite der Peaks: $\Gamma_1 + \Gamma_2$

<u>Interpretation von $\Gamma_{1/2}$?</u>

$\Gamma \equiv \dfrac{dE_L}{\theta}T$

Phasenverschiebung bei Umlauf

$$\theta = 2kw \qquad w: \quad \text{effektive Breite zwischen Barrieren}$$

damit $\dfrac{dE_L}{d\theta} = \dfrac{1}{2w}\dfrac{dE_L}{dk} = \dfrac{1}{2w}\hbar\nu$

ν : Gruppengeschwindigkeit mit der e^- zwischen Barrieren umläuft

$f = \dfrac{v}{2w}$: "Anschlagfrequenz" (wie oft prallt e^- an Barriere)

damit

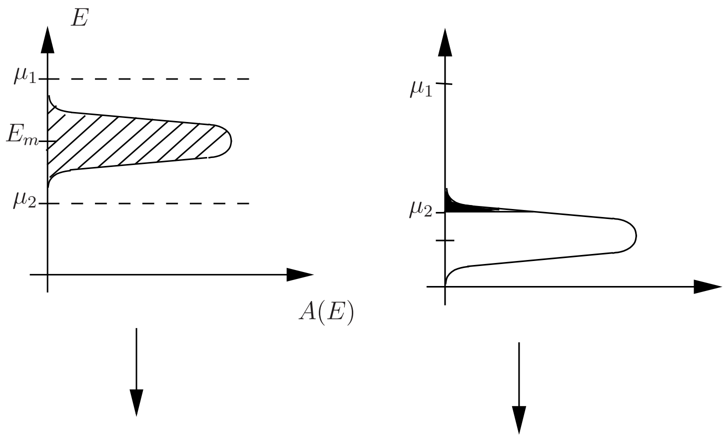
$$\frac{\Gamma_{1,2}}{\hbar} = fT_{1,2}: \qquad \text{Verlustrate der } e^- \text{ durch Barriere 1 und 2}$$

<u>Strom</u>

$$I = \frac{2e}{h}\int_{\mu_2}^{\mu_1}\bar{T}(E)dE$$

$$I = \sum_m I_m \text{ mit } I_m = \frac{2e}{h}\frac{\Gamma_1\Gamma_2}{\Gamma_1+\Gamma_2}\int_{\varepsilon_m}^{\mu_1} A(E-E_m)dE$$

resonante Bed. | nicht-resonante Bed.



wenn $A(E - E_m)$ innerhalb des Energiefensters liegt
$\int A(E)dE = 2\pi$
$\downarrow$

Peak-Strom der Mode

$$\boxed{I_p = \frac{2e}{\hbar}\frac{\Gamma_1\Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2}}$$

außerhalb
$\int A(E)dE \rightarrow 0$

$\Rightarrow$ Gesamtstrom durch Aufsummation aller Moden im Energiefenster

$\Rightarrow$ Anstieg des Stromes mit $\Delta\mu$, ungefähr linear, dann steiler Abfall weil keine Niveaus mehr im Energiefenster

Einfluß der Streuung?

Annahme bis jetzt: kohärentes Tunneln, beschrieben durch SG. Korrekt falls die Aufenthaltszeit des Elektrons im resonanten Zustand (Lebensdauer) $\ll$ τ_φ: Streuzeit

Falls Lebensdauer größer als Streuzeit

$\longrightarrow$ sequentielles Tunneln, e^- verliert Phaseninformation durch Streuung

vorhin $\dfrac{\Gamma_{1/2}}{\hbar}$: Verlustrate der e^- durch Barriere

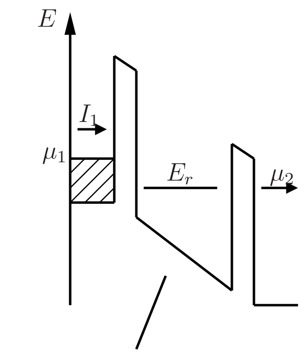
Kohärentes Tunneln adäquat für dünne Barrieren:

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 \gg \Gamma_\varphi \qquad \text{mit} \quad \Gamma_\varphi \equiv \frac{\hbar}{\tau_\varphi} : \ \text{Streurate}$$

Sequentielles Tunneln adäquat für dicke Barrieren:

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 \leq \Gamma_\varphi$$

$\Rightarrow$ stellen Ratengleichung für unser System auf



Modell mit nur einer Mode

$$I_1 = 2e\frac{\Gamma_1}{\hbar}[f_1(1-f_r) - f_r(1-f_1)]$$

f_1 : Fermifunktion für Zuleitung 1
f_r : Wahrscheinlichkeit das E_r besetzt ist

analog

$$I_2 = \frac{2e\Gamma_2}{\hbar}[f_2(1-f_r) - f_r(1-f_2)]$$

$kT \ll \Delta\mu$

$\Rightarrow \quad f_1 = 1, \quad f_2 = 0$

$$\Rightarrow \quad I_1 = 2e\frac{\Gamma_1}{\hbar}(1-t_r)$$

$$I_2 = -2e\frac{\Gamma_2}{\hbar}(1-t_r)$$

Stromerhaltung: $I_1 + I_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \Gamma_1(1-t_r) = \Gamma f$

$$\Rightarrow \quad f = \frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 + \Gamma_2}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{I_1 = -I_2 = \frac{2e}{\hbar}\frac{\Gamma_1\Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2}}$$

Äquivalent zu kohärenten Tunneln!!
D.h. vollständig kohärentes und vollständig inkohärentes Tunneln führen auf

den gleichen Strom. Gilt auch für partiell kohärentes Tunneln.

Gilt nicht für nichtresonantes Tunneln!

Nichtresonantes Tunneln wesentlich durch Streuprozesse bestimmt (vertikale Ströme!)

Was passiert wenn wir die Doppelbarriere lateral einschnüren (bzw. Tunneln durch Quantenpunkt)?
e^--e^--WW auf Niveaus beeinflußt Strom (Einzelelektronentunneln)

$$\underbrace{G(E_f)}_{\substack{\text{linearer Response}\\ \text{für kleine Spannungen}\\ \text{und tiefe Temp.}}} = \sum_m \frac{e^2}{h} \downarrow \frac{\Gamma_1^m \Gamma_2^m}{\Gamma_1^m + \Gamma_2^m} \quad \underbrace{L(E_f - E_m)}_{\substack{\downarrow\\ \text{.... verbreiterte}\\ \text{Spektralfunktion}}}$$

$$\sum_m \frac{e^2}{h} \frac{\Gamma_1^m \Gamma_2^m}{\Gamma_1^m + \Gamma_2^m} \sum_N P_{N,m}(E_f) L(E_f - E_m - (N + 0.5)U_0)$$

(Meir el al. PRL **66**, 3048 (1991));
(Beenakker PRB **44**, 1646 (1991))

mit $P_{N,m}$: Wahrscheinlichkeit daß N e^- im Quantenpunkt sind (abzügl. e^- auf E_m)

$U_0 = \frac{e^2}{C}$: WW der e^- im QP mit Kapazität C

betrachten

$$\begin{aligned} E(N+1, 1_m) & - E(N, 0_m) \\ & = \left[E_m + \frac{(N+1)^2 e^2}{2C}\right] - \frac{N^2 e^2}{2C} \qquad \left(\text{Energie des geladene Kond.:} W = \frac{1}{2}\frac{Q^2}{C}\right) \\ & = E_m + \frac{(2N+1)e^2}{2C} = E_m + (N + 0.5)U_0 \end{aligned}$$

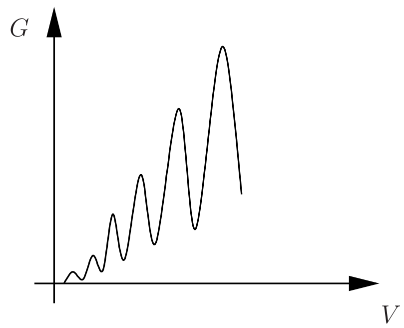
$\Rightarrow$ Maxima im Leitwert für

$$E_f = E(N+1, 1_m) - E(N, 0_m)$$

physikalische Interpretation: Leitung durch Einzelelektronenhopping

$$(N, 0_m) \to (N+1, 1_m) \to (N, 0_m)$$

Nachweis der quantifizierten Ladung durch Leitwertmessung



vgl. Fig. 8 in

Kastner, Rev. Mod. Phys. **64**, 849 (1992)