

Rendezett-rendezetlen átmenet szennyezett, diszkrét
nanodrótok vezetőképességében

Koltai János

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Témavezetők: Dr. Cserti József, Dr. Vattay Gábor

Diplomamunka

1999

Köszönetnyilvánítás

II

Ezúton szeretném kifejezni hálámat témavezetőimnek, akik megismertettek ezzel a témával, türelmesen segítettek munkámat, elláttak tanácsokkal mind elméleti, mind gyakorlati téren, és átsegítették a csüggedés pillanataiban a nehézségeken. Külön köszönet Palla Gergőnek a Fortran és a \LaTeX rejtélyeinek felderítésében nyújtott támogatásban, és a tanszék minden munkatársának, akik elősegítették munkájjukkal szellemi fejlődésemet.

Végül köszönettel tartozom családomnak, akik elviseltek, ha morcosabb voltam néha a kelleténél.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Egydimenziós cső vezetőképessége	9
2.1. Egydimenziós, üres cső Green-függvénye	10
2.1.1. A cső Schrödinger-egyenletének megoldása rácson	10
2.1.2. A hullámfüggvény normálása	11
2.1.3. A Green-függvény egyenlete	11
2.1.4. A retardált Green-függvény kiszámítása	12
2.2. Pontszennyezők esete	14
2.2.1. A Green-függvény kiszámítása egy szennyező esetében	14
2.2.2. Több szennyező esete	15
2.3. Egydimenziós Landauer-formula	15
3. Kétdimenziós cső vezetőképessége	17
3.1. Kétdimenziós, üres cső Green-függvénye	18
3.1.1. A cső Schrödinger-egyenlete rácson	18
3.1.2. A hullámfüggvény normálása	19
3.1.3. A Green-függvény egyenlete és megoldása	19
3.2. Kétdimenziós cső Green-függvénye pontszennyező esetén	20
3.2.1. A Green-függvény kiszámítása egy pontszennyezőre	20
3.2.2. Több szennyező esete	21
3.3. A Landauer-formula kétdimenziós esetben	21
3.3.1. Üres cső vezetőképessége	22
3.3.2. Egy észrevétel	24

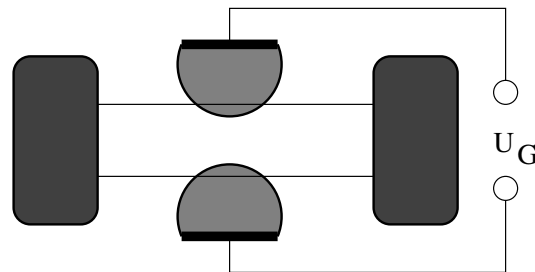
4. Egyszerű mintázatok vizsgálata	27
4.1. Egy pontszennyező esete	28
4.2. Keskenyebb cső	31
5. Periódikusan szennyezett egydimenziós cső	33
6. Rendezett-rendezetlen átmenet	39
6.1. Rendezett rendszer	40
6.2. Rendezetlen rendszer	43
7. Összefoglalás	47

1. fejezet

Bevezetés

Kvantumos vezetési jelenségek kényelmesen vizsgálhatóak kétdimenziós elektron-gázokban (2DEG), mert nagy bennük a Fermi-hullámhossz (tipikusan 40nm) és a szabad úthossz a fémekbeli értékekhez képest (elérheti a $10\mu\text{m}$). Azokat a rendszereket, amelyekben mikroszkópikus objektum kvantummechanikai fáziskoherenciahossza - alacsony hőmérsékleten ($T < 1\text{K}$) - makroszkópikus (néhány mikron) lehet, nevezték el mezoszkópikus rendszereknek. A mezoszkópikus rendszerek vezetőképességéről kitűnő összefoglalót találunk S. Datta [1] könyvében valamint C. W. Beenakker és H. van Houten könyvében [2].

A '60-as évek végén fémek pontkontaktusának ellenállását mérte egy szovjet kutató csoport [3]. Fémeken nehezen hajtható végre ilyen mérés, mert a Fermi-hullámhossz rövid, amiből következik, hogy nagy a módusok száma, és így kicsi az ellenállás. A '80-as évek végétől a félvezetőipar fejlődése nyomán lehetővé vált félvezető nanoszerkezetek előállítása és kísérleti vizsgálata. Ehhez nagyon nagy tisztaságú és tökéletes kristályszerkezetű eszközök előállíthatóságára volt szükség. Ennek a fejlődésnek nyomán lettek a félvezető nanoszerkezetek a kvantumos vezetési jelenségek tipikus kísérleti objektumai. A területen bekövetkezett fejlődést foglalja össze C. W. Beenakker és H. van Houten könyve [2]. Az első félvezetőn végzett kísérleti eredményekről 1988-ban B. J. Wees és társai [4] illetve D. Wharam és csoportja [5] számoltak be. Az (1.1) ábrán látható kísérleti elrendezéssel dolgoztak. Amikor a minta szélességét a kapu feszültség változtatásával csökkentették, akkor lépcsősen változó vezetőképességet kaptak, ahol a lépcsőfokok magassága $1/12.9k\Omega$ volt. Azóta sokféle nanoszerkezeten



1.1. ábra. Az első félvezető kísérlet vázlatos elrendezése

vizsgáltak kvantumos vezetési jelenségeket, például pontkontaktusokon, repedéseken, atomi érintkezéseknél, vékony drótokon (csöveken).

A nanotechnológia fejlődése nyomán, ma már egyszerűen létrehozható olyan eszköz, amelyben az elektronok gyakorlatilag két dimenzióban mozoghatnak. GaAs és

AlGaAs félvezető síkokat rétegezve egymásra a határfelületre merőlegesen kialakuló potenciál völgy a határsíkra korlátozza az elektronok mozgását. A síkban viszont az elektronok kicsi effektív tömege ($0.067m_e$) miatt nagy lesz a mozgékonyáguk, szabad elektronoknak tekinthetők. A GaAs/AlGaAs heteroszerkezetben kialakul egy tartomány, amely kétdimenziós szabad elektrongáznak tekinthető. Mérések szerint tiszta GaAs/AlGaAs heteroszerkezetben a Fermi-energia $E_F = 14eV$, a Fermi-hullámhossz $\lambda_F = 40nm$, a szabadúthossz pedig $l = 100 - 10000nm$. A határfelület fölé helyezett negatívan töltött kapuelektrodákkal a síkban tetszőleges alakú tartományt kijelölhetünk, például egy keskeny csíkot, amelyet ezentúl csőnek fogunk nevezni. Az ilyen cső szélessége $100nm$ nagyságrendűre lecsökkenthető. Jelölje W a cső szélességét, L a cső hosszúságát. Ekkor az elektron mozgására jellemző karakterisztikus hosszak viszonya szerint három különböző tartomány létezik:

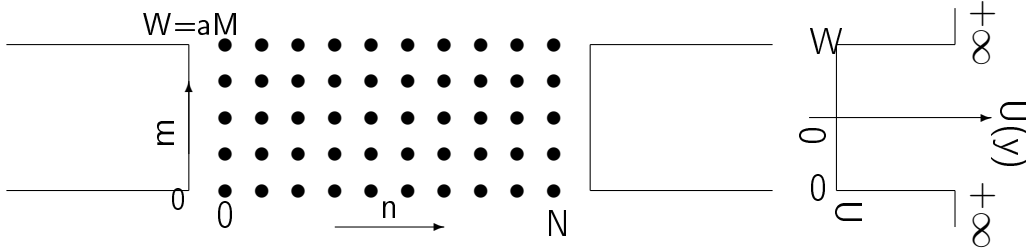
1. diffúziós: $l < W, L$
2. kvázi-ballisztikus: $W < l < L$
3. ballisztikus: $W < L \ll l$

Erősen szennyezett anyagban a szabadúthossz lecsökken, a mozgás diffúzív lesz. Tiszta esetben ballisztikusnak tekinthető, ilyenkor a vezetőképességet a falak tulajdonságai alakítják. Ebben a dolgozatban főként ballisztikus illetve kvázi-ballisztikus tartománybeli elektronok vezetőképességét vizsgáltuk, és a vezetőképesség viselkedését szennyezések hatására.

Természetesen a kísérletekkel párhuzamosan megnövekedett az elméleti munkák száma is. Először Landauer [6] adott formulát a vezetőképességre egyetlen bemenő illetve kimenő módus esetén: $g = \frac{2e^2}{h}T/R$, ahol e az elektron töltése, h a Planck-állandó, T a transzmisszió valószínűsége, R pedig a reflexióé. Levezetésében feltételezte, hogy a rendszer ideális vezetőkkel inkoherens rezervoirokhoz van kapcsolva, továbbá, hogy a hőmérséklet nulla, tehát csak az adott E_F Fermi energiájú elektronok mozoghatnak. Ha az egész rendszerre V feszültséget kapcsolunk, akkor megindul az elektronok áramlása. Mivel az ideális koherens vezetőkben az elektronok sajátállapotban vannak, a vezetőképességet a rendszeren való átjutás kvantummechanikai valószínűsége határozza meg. A formulabeli kettes faktor az elektron spinjének következménye. A $\frac{2e^2}{h}$ faktor éppen a kísérletekből megismert lépcsők $1/12.9k\Omega$ magasságával egyezik meg. Az '80-as években

élénk vita alakult ki, ugyanis más csoportok (pl.: [7, 8, 9]) azt állították, hogy Landauer formulája helyesen: $g = \frac{2e^2}{h}T$. Az eltérés onnan adódott, hogy ideális ballisztikus vezető esetén is fellép egy kontakt ellenállás $g_c^{-1} = \frac{h}{2e^2}$, ami miatt a teljes ellenállás $g^{-1} = g_c^{-1} + \frac{h}{2e^2}R/T = \frac{h}{2e^2}1/T$ lesz. Valójában mérésekben mindig lesz kontakt ellenállás, tehát ez utóbbit tudjuk mérni. Ezt a formulát általánosította M. Büttiker több rezervoír (terminál) esetére és több be- illetve kimenő módust tartalmazó rezervoírra [10]. Itt feltételezték, hogy a rezervoírok egyenletesen töltik fel a módusokat az E_F Fermi-szintig. A többcsatornás Landauer-formula a következő alakú: $g = \frac{2e^2}{h} \sum_{pq} T_{pq}$, ahol az összegzés az adott Fermi-energián nyílt módusokra történik, T_{pq} pedig annak a valószínűsége, hogy a p -edik módusban beérkező elektron a q -edik módusba szóródik. Meg kell említeni még H. U. Baranger és A. D. Stone nevét, akik Kubo-formalizmusból kiindulva tisztázták a fenti kérdéseket és a lineáris válaszelmélet alapján kiterjesztették az elméletet mágneses tér jelenlétére is [11].

Mi a következő rendszert vizsgáltuk, elméleti úton: legyen egy W szélességű két-dimenziós tartományunk, amelyet oldalról végtelen potenciállal (merev fallal) zárunk le. A két végéhez félvégtelen csődarabokat illesztettünk. Gondolatban két rezervoírt kapcsoltunk a rendszerhez, ahonnan adott E_F Fermi-energiájú elektronok jutnak a félvégtelen csődarabon keresztül a rendszerbe (zérus hőmérsékletű számolás). Mivel az atomi szennyezők mérete a rendszer méretéhez képest kicsi, így ezeket Dirac-deltával vesszük figyelembe. Ez a közelítés jelentősen egyszerűsíti az elméleti számolásokat, és a kísérleti eredményekkel összevetve jogosnak mondható. Az ilyen rendszerre teljesülnek



1.2. ábra. Az általunk vizsgált rendszer vázlatja

a Landauer-formula levezetésében tett feltevések, ezért ezzel számoltuk a vezetőképességet. A transzmissziót sokféleképpen meg lehet határozni, mi a Green-függvényekből a Fisher-Lee relációval [1, 12] dolgoztunk.

Ismert, hogy erősen szennyezett, teljesen véletlen eloszlású szennyezés esetén az

Ohm-törvény írja le a vezetőképességet, azaz $g \sim 1/L$. Ismert továbbá, hogy az egyetlen pontszerű szennyezőt tartalmazó blokk kaocitása szabályozható a szennyező erősségével [13, 14]. Véges sok egyetlen pontszennyezőt tartalmazó blokkra a vezetőképesség a blokkok számának (azaz a rendszer hosszának növelésével) egy exponenciálisan csökkenő szakasz után konstans értékre állt be, ami nagy szennyező esetén (kaotikus tartományban) a Random Mátrix Elméletből [15] megjósolt $N/2 - 1/4$ érték volt, azaz a módusok kb. fele nyílt maradt a rendszer hosszának növelésével [16]. A hiányzó vezetőképességet az ún. lokalizációval lehet magyarázni. Egy sajátállapotot akkor nevezünk lokalizátnak, ha a hullámfüggvényének amplitúdója egy véges tartományon kívül (többnyire exponenciálisan) lecsökken. Az ilyen állapotok a gyorsan lecsengő jellegük miatt nem adnak a vezetőképességbe járulékot. Mi azt vizsgáltuk meg, hogy mi történik akkor, ha a kvázi-periodicitást elrontjuk az egyetlen nagy pontszennyezőt tartalmazó blokkokból álló rendszerben. Azt vizsgáltuk, hogy mikor kezd eltérni a rendszer a kvázi-periodikustól, illetve milyen összefüggést lehet találni a rendszer hossza és vezetőképessége között.

A numerikus számítások megkönnyebbítése érdekében a rendszerünket egy fiktív rácsra tettük. Emiatt véges kereszt hullámfüggvény-rendszert kaptunk, a képleteinkben véges összegzéseket. Többször ellenőriztük, hogy a folytonos határesetben ($a \rightarrow 0$) egyezik-e eredményünk a folytonos számítások eredményével. Először a 2. fejezetben kiszámoljuk az egydimenziós lánc Green-függvényét, megadjuk a Dyson-egyenletet a pontszennyezőkre, és végül felírjuk a Landauer-formula egy csatornás alakját. A 3.3.2. fejezetben ugyanezt megcsináljuk kétdimenziós rácsra. A 4. fejezetben az előző fejezet képlete alapján megírt programról, és teszteléséről lesz szó egyszerű, ismert rendszerek vizsgálatán keresztül. A 5. fejezetben a periodikusan szennyezett véges lánc vezetőképességére adunk analitikus megoldást, amit összevetve a programmal számolt vezetőképességgel, kitűnő egyezést kapunk. A 6. fejezetben vizsgáljuk véges periodikus illetve véges rendezetlen kétdimenziós rendszerek vezetőképességét, és adunk egy „tapasztalati” összefüggést a vezetőképesség és a rendszerbeli blokkok száma között. Ez az eredmény rendezetlen esetben nagy mértékben eltér az RMT által jósolttól.

A dolgozat egészében $\hbar^2 = 2m = 1$ és $2e^2/h$ egységekben dolgozunk.

2. fejezet

Egydimenziós cső vezetőképessége

Ebben a fejezetben először felírjuk az egydimenziós rácson (láncon), szabadelektron közelítésben a Schrödinger-egyenletet. Ezt megoldva kiszámoljuk a sajátértékek és sajátfüggvények ismeretében az üres cső Green-függvényét. A Dyson-egyenlet diszkrét alakját használva megadjuk egy pontszennyezőre a Green-függvényt. Több szennyező esetén a Dyson-egyenlet egymás utáni alkalmazásával kapott eredmény felírható két determináns hányadosaként. A Fisher-Lee és a Landauer-formula segítségével megadjuk a vezetőképességet egydimenziós csövekre (láncokra).

2.1. Egydimenziós, üres cső Green-függvénye

2.1.1. A cső Schrödinger-egyenletének megoldása rácson

Szabadelektron közelítésben a rendszer Hamilton-operátora a mi egységeinkben a Laplace-operátor, ennek diszkretizálásával megkapjuk a $-\frac{d^2}{dx^2}\Psi + U\Psi = E\Psi$ Schrödinger-egyenlet diszkrét alakját:

$$-\frac{\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} - 2\Psi_n}{a^2} + U\Psi_n = E\Psi_n, \quad (2.1)$$

ahol Ψ_n a hullámfüggvényt jelöli az $x = na$ helyen, a a rácsállandó, U egy tetszőleges konstans potenciál. Átrendezve:

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} + [(E - U)a^2 - 2]\Psi_n = 0. \quad (2.2)$$

Keressünk síkhullámmegoldást!

$$\Psi_n = Ae^{i\alpha n}. \quad (2.3)$$

Behelyettesítve (2.3)-t a (2.2).egyenletbe:

$$Ae^{i\alpha(n+1)} + Ae^{i\alpha(n-1)} + [(E - U)a^2 - 2]Ae^{i\alpha n} = 0, \quad (2.4)$$

egyszerűsítések után:

$$\begin{aligned} e^{i\alpha a} + e^{-i\alpha a} + [(E - U)a^2 - 2] &= 0 \\ 2\cos(\alpha a) + (E - U)a^2 - 2 &= 0 \\ 2(\cos(\alpha a) - 1) + (E - U)a^2 &= 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Felhasználva félszögekre vonatkozó trigonometrikus azonosságokat, kapjuk a következő ún. diszperziós relációt:

$$E = U + \frac{4}{a^2} \sin^2 \frac{\alpha a}{2}. \quad (2.6)$$

2.1.2. A hullámfüggvény normálása

Egy a rácsállandójú rendszerben a rácsállandónál kisebb hullámhosszú hullám kifejtethető nagyobb hullámszámú hullámok lineárkombinációjaként, ezért $|\alpha| \leq \frac{\pi}{a}$ esetén a Ψ_n függvények $\alpha \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ teljes rendszert alkotnak. Normáljuk a hullámfüggvényeket úgy, hogy a $\delta(x - x') = \sum_k \Psi^k(x)\Psi^k(x')$ teljességi feltétel teljesüljön. Diszkrét rendszerben $\delta(x - x')$ szerepét $\frac{1}{a}\delta_{nj}$ tölti be. A \sum_k összegzést a szokásos $\int \frac{ad\alpha}{2\pi}$ integrállal közelítjük. Így:

$$\begin{aligned} \frac{\delta_{nj}}{a} &= \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{ad\alpha}{2\pi} A^2 e^{i\alpha a(n-j)} = \frac{A^2 a}{2\pi} \frac{e^{i\alpha a(n-j)}}{ia(n-j)} \Big|_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} = \frac{A^2}{2i\pi} \frac{e^{i\pi(n-j)} - e^{-i\pi(n-j)}}{n-j} = \\ &= A^2 \frac{\sin(\pi(n-j))}{\pi(n-j)} = \begin{cases} 0 & n \neq j, \\ A^2 & n = j \end{cases} \Rightarrow A^2 = \frac{1}{a} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{a}}, \end{aligned}$$

így a normált sajátfüggvényrendszer:

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i\alpha a n}. \quad (2.7)$$

2.1.3. A Green-függvény egyenlete

Egy rendszer Green-függvényének egyenletét a zérusra rendezett Schrödinger-egyenletből kaphatjuk meg oly módon, hogy a zérus helyére a Dirac-deltát írjuk a koordinátákkal. Diszkrét esetben a Dirac-delta helyett a Kronecker-deltát kell írunk: $\delta(x - x') \leftarrow \frac{\delta_{nn'}}$. Felhasználva a Schrödinger-egyenlet (2.1) alakját a Green-függvény egyenlete rendezés után:

$$G_{n+1j} + G_{n-1j} + [(E - U)a^2 - 2] G_{nj} = a\delta_{nj}, \quad (2.8)$$

ahol $G_{nj} = G(x, x')$ az $x = na$ és $x' = ja$ helyeken és $G(x, x')$ a szokásos Green-függvény. Mivel Ψ_n teljes függvényrendszer fejtjük ki a (2.8) egyenletet:

$$\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{ad\alpha}{2\pi} \frac{1}{a} f(\alpha) e^{i\alpha a(n-j)} (e^{i\alpha a} + e^{-i\alpha a} + [(E - U)a^2 - 2]) = a^2 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{ad\alpha}{2\pi} \frac{1}{a} e^{i\alpha a(n-j)}, \quad (2.9)$$

ahol

$$G_{nj} = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{ad\alpha}{2\pi} \frac{1}{a} f(\alpha) e^{i\alpha a(n-j)}. \quad (2.10)$$

Megoldásként $f(\alpha) = a^2 \{e^{ia\alpha} + e^{-ia\alpha} + [(E - U)a^2 - 2]\}^{-1}$ -t kapunk, ami éppen a (2.5) diszperziós reláció inverze. Ezt felhasználva a Green-függvény a következő alakú lesz:

$$G_{nj}^+(E) = a^2 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{ad\alpha}{2\pi} \frac{1}{a} \frac{e^{ia\alpha(n-j)}}{2 \cos(\alpha a) + (E - U)a^2 - 2 + i\varepsilon}, \quad (2.11)$$

ahol E a vizsgált Fermi-energiát jelöli, + index pedig a retardált Green-függvényt, és ehhez az integrált az infinitezimális $i\varepsilon$ hozzáadásával kell kiszámolni.

2.1.4. A retardált Green-függvény kiszámítása

Először tegyük fel, hogy $n - j > 0$.

Hajtsuk végre a $z = e^{ia\alpha}$ változócsert a (2.11) alakban: $ia d\alpha e^{ia\alpha} = dz$, azaz $d\alpha = \frac{dz}{iaz}$, és Γ integrálási tartomány az egység sugarú kör:

$$\begin{aligned} G_{nj}^+(E) &= a \int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} \frac{z^{n-j}}{z z + \frac{1}{z} + [(E - U)a^2 - 2 + i\varepsilon]} = \\ &= a \int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} \frac{z^{n-j}}{z^2 + [(E - U)a^2 - 2 + i\varepsilon] z + 1} = a \frac{z_1^{n-j}}{z_1 - z_2}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

ahol z_1, z_2 az integrandus nevezőjének zérushelyei:

$$z_{1,2} = \frac{2 - (E - U)a^2 \pm \sqrt{[(E - U)a^2 - 2]^2 - 4}}{2} \quad (2.13)$$

és mindig z_1 jelöli a két gyök közül azt, amelyik az egységkörön belül van. Két valós gyök van, ha $D \geq 0$ és ekkor szorzatuk egy, tehát egymás reciprokai:

$$[(E - U)a^2 - 2]^2 \geq 4 \begin{cases} (E - U)a^2 - 2 \geq 2 & \rightarrow (E - U)a^2 \geq 4 \\ (E - U)a^2 - 2 \leq -2 & \rightarrow (E - U)a^2 \leq 0. \end{cases}$$

Az $(E - U)a^2 \geq 4$ esetben "+"-os gyök esik az egységkörbe, míg a $(E - U)a^2 \leq 0$ esetben a "-"-os.

Két komplex gyök van, ha $D < 0$. Így $z_{1,2} = \frac{2 - (E - U)a^2 \pm i\sqrt{4 - [(E - U)a^2 - 2]^2}}{2}$.

Legyen $b = (E - U)a^2 - 2$, ekkor:

$$|z_{1,2}| = \left| \frac{-b \pm i\sqrt{4 - b^2}}{2} \right| = \sqrt{\frac{b^2}{4} + \frac{4 - b^2}{4}} = 1.$$

De valójában (2.12) nevezőjében nem a $z^2 + bz + 1$ kifejezés zérushelyeit kell megkeresnünk, hanem a $z^2 + (b + i\varepsilon)z + 1$ -ét az $\varepsilon \rightarrow 0$ haráresetben. A $z_{1,2}^\varepsilon = \frac{-(b+i\varepsilon) \pm i\sqrt{4 - (b+i\varepsilon)^2}}{2}$

gyökök abszolútértékére

$$|z_{1,2}^\varepsilon|^2 = 1 \mp \frac{2\varepsilon}{\sqrt{4-b^2}}$$

teljesül, amiből látszik, hogy a "+"-os gyök van ez egységkörben ($\varepsilon > 0$). Az energiától függően három tartományt különböztethetünk meg, amelyekben a Green-függvény a következő alakú:

I. $(E - U)a^2 \leq 0$

Vezessük be az $U - E = \frac{4}{a^2} \sinh^2 \frac{\beta a}{2}$ paraméterezést. Felhasználva a $\cosh^2 \frac{\beta a}{2} + \sinh^2 \frac{\beta a}{2} = \cosh \beta a$ és $\cosh^2 \frac{\beta a}{2} - \sinh^2 \frac{\beta a}{2} = 1$ azonosságokat:

$$z_{+/-} = \frac{2 + 4 \sinh^2 \frac{\beta a}{2} \pm \sqrt{[-4 \sinh^2 \frac{\beta a}{2} - 2]^2 - 4}}{2} = \begin{cases} e^{\beta a} \\ e^{-\beta a} \end{cases} \quad (2.14)$$

Behelyettesítve ezt (2.12) alakba $z_1 = z_-$ és $z_2 = z_+$ figyelembe vételével:

$$G_{nj}^+(E) = -\frac{a e^{-\beta a(n-j)}}{2 \sinh \beta a} \quad (2.15)$$

II. $(E - U)a^2 \geq 4$

Vezessük be az $E - U = \frac{4}{a^2} \cosh^2 \frac{\beta a}{2}$ paraméterezést.

$$z_{+/-} = \frac{2 - 4 \cosh^2 \frac{\beta a}{2} \pm \sqrt{[2 - 4 \cosh^2 \frac{\beta a}{2}]^2 - 4}}{2} = \begin{cases} -e^{-\beta a} \\ -e^{\beta a} \end{cases} \quad (2.16)$$

Behelyettesítve ezt (2.12) alakba $z_1 = z_+$ és $z_2 = z_-$ figyelembe vételével:

$$G_{nj}^+(E) = \frac{a (-e^{-\beta a})^{n-j}}{2 \sinh \beta a} \quad (2.17)$$

III. $0 \leq (E - U)a^2 \leq 4$

Vezessük be az $E - U = \frac{4}{a^2} \sin^2 \frac{\beta a}{2}$ paraméterezést.

$$z_{+/-} = \frac{2 - 4 \sin^2 \frac{\beta a}{2} \pm \sqrt{[2 - 4 \sin^2 \frac{\beta a}{2}]^2 - 4}}{2} = \begin{cases} e^{i\beta a} \\ e^{-i\beta a} \end{cases} \quad (2.18)$$

Behelyettesítve ezt (2.12) alakba $z_1 = z_+$ és $z_2 = z_-$ figyelembe vételével:

$$G_{nj}^+(E) = a \frac{e^{i\beta a(n-j)}}{e^{i\beta a} - e^{-i\beta a}} = \frac{a e^{i\beta a(n-j)}}{2i \sin \beta a} \quad (2.19)$$

Ha most $n < j$, akkor a $z = e^{-ia\alpha}$ helyettesítéssel ugyanezt az eredményt kapjuk, csak $n - j$ helyére $j - n$ kerül.

Összefoglalva az eddigieket, Green-függvény a következő alakú:

$$G_{nj}^+(E) = \begin{cases} -\frac{ae^{-\beta^{(I)}a|n-j|}}{2 \sinh \beta^{(I)}a} & (E-U)a^2 \leq 0, \\ \frac{ae^{i\beta^{(III)}a|n-j|}}{2i \sin \beta^{(III)}a} & 0 \leq (E-U)a^2 \leq 4, \\ \frac{a(-e^{-\beta^{(II)}a})^{|n-j|}}{2 \sinh \beta^{(II)}a} & (E-U)a^2 \geq 4, \end{cases} \quad (2.20)$$

ahol $\beta^{(I)}$, $\beta^{(II)}$ és $\beta^{(III)}$ rendre az I., II. illetve III. tartományban definiált paraméterezésnek felel meg:

$$\begin{aligned} \frac{4}{a^2} \sinh^2 \frac{\beta^{(I)}a}{2} &= U - E, \\ \frac{4}{a^2} \cosh^2 \frac{\beta^{(II)}a}{2} &= E - U, \\ \frac{4}{a^2} \sin^2 \frac{\beta^{(III)}a}{2} &= E - U. \end{aligned} \quad (2.21)$$

2.2. Egydimenziós cső Green-függvénye pontszennyező esetén

2.2.1. A Green-függvény kiszámítása egy szennyező esetében

Legyen most a k -adik helyen a potenciál $U + U'$. A Green-függvény eredeti (2.8) egyenlete ebben az esetben a következőképpen néz ki:

$$\begin{aligned} i \neq k &: G_{i+1j} + G_{i-1j} + [(E-U)a^2 - 2] G_{kj} = a^2 \frac{\delta_{ij}}{a} = a\delta_{ij} \\ i = k &: G_{k+1j} + G_{k-1j} + [(E-U-U')a^2 - 2] G_{kj} = a\delta_{kj} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Keressük az módosított Green-függvényt a $G_{ij} = G_{ij}^0 + G'_{ij}$ alakban, ahol G_{ij}^0 jelöli az üres cső Green-függvényét. Ekkor:

$$\begin{aligned} i \neq k &: G'_{i+1j} + G'_{i-1j} + [(E-U)a^2 - 2] G'_{kj} = 0 \\ i = k &: G'_{k+1j} + G'_{k-1j} + [(E-U)a^2 - 2] G'_{kj} = U'a^2 G_{kj}. \end{aligned}$$

Ellenőrizhető, hogy $G'_{ij} = U'aG_{ik}^0 G_{kj}$ teljesül, ugyanis:

$$\begin{aligned} i \neq k &: U'aG_{kj} \left\{ G_{i+1k}^0 + G_{i-1k}^0 + [(E-U)a^2 - 2] G_{kk}^0 \right\} = 0 \\ i = k &: U'aG_{kj} \left\{ G_{k+1k}^0 + G_{k-1k}^0 + [(E-U)a^2 - 2] G_{kk}^0 \right\} = U'aG_{kj}a\delta_{kk}. \end{aligned}$$

Ezt felhasználva $G_{ij} = G_{ij}^0 + U'aG_{ik}^0 G_{kj}$ eredmény kapható. Ezt lehet a Dyson-egyenlet diszkrét alakjának tekinteni, a folytonos esethez való hasonlósága alapján. Ha

ebbe $i = k$ -t helyettesítünk, akkor $G_{k j}$ meghatározható, majd $G_{k j}$ ismeretében $G_{i j}$ kiszámolható:

$$G_{i j}(E) = G_{i j}^0(E) + \frac{G_{i k}^0(E) G_{k j}^0(E)}{\frac{1}{U^a} - G_{k k}^0(E)}. \quad (2.23)$$

2.2.2. Több szennyező esete

Ha f szennyezőt helyezünk a rendszerbe, akkor az üres cső Green-függvényéből kiindulva egyenként kell a szennyezőket a rendszerben elhelyezni. Ekkor alkalmazható minden lépésben a (2.23) alak, csak $G_{i j}^0(E)$ helyett az előzőleg meghatározott $G_{i j}(E)$ -t kell beírni. Az így kapott eredmény átírható két determináns hányadosává [18, 19], ami teljes indukcióval belátható.

$$G_{i j} = \frac{\begin{vmatrix} G_{i j}^0 & G_{i k_1}^0 & G_{i k_2}^0 & \cdots & G_{i k_f}^0 \\ G_{k_1 j}^0 & G_{k_1 k_1}^0 - \frac{1}{au_{k_1}} & G_{k_1 k_2}^0 & \cdots & G_{k_1 k_f}^0 \\ G_{k_2 j}^0 & G_{k_2 k_1}^0 & G_{k_2 k_2}^0 - \frac{1}{au_{k_2}} & \cdots & G_{k_2 k_f}^0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{k_f j}^0 & G_{k_f k_1}^0 & G_{k_f k_2}^0 & \cdots & G_{k_f k_f}^0 - \frac{1}{au_{k_f}} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} G_{k_1 k_1}^0 - \frac{1}{au_{k_1}} & G_{k_1 k_2}^0 & \cdots & G_{k_1 k_f}^0 \\ G_{k_1 k_2}^0 & G_{k_2 k_2}^0 - \frac{1}{au_{k_2}} & \cdots & G_{k_2 k_f}^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{k_f k_1}^0 & G_{k_f k_2}^0 & \cdots & G_{k_f k_f}^0 - \frac{1}{au_{k_f}} \end{vmatrix}}, \quad (2.24)$$

ahol $G_{i j}^0$ jelöli az üres cső Green-függvényét, k_1, \dots, k_f a szennyezések helyeit, u_{k_1}, \dots, u_{k_f} a szennyezések nagyságait.

2.3. Egydimenziós Landauer-formula

Ha az adott energián az egyetlen csatorna nyílt, akkor a bevezetőben már említett egy csatornás Landauer-formula szerint a vezetőképességet

$$g(E) = |t(E)|^2 \quad (2.25)$$

alak adja, ahol $t(E)$ a transzmissziós függvény. A Green-függvény és a transzmissziós függvény kapcsolata S.Datta könyvében [1] megfelelő általánosságban van tárgyalva. Ez a kapcsolat a Fisher-Lee reláció, melyet először D. S. Fisher és P. A. Lee közöltek [12]:

$$t(E) = ivG_{0N}^+(E), \quad (2.26)$$

ahol 0 és N helyek között tekintjük a transzmissziót, és $v = \frac{\partial E}{\partial \beta}$ az elektron sebessége. Ebből a (2.6) diszperziós reláció felhasználásával a transzmisszióra:

$$t(E) = \frac{2i}{a} \sin(\alpha a) G_{0N}^0(E) \quad (2.27)$$

nyerhető. Legegyszerűbb alkalmazásként nézzük meg az üres cső vezetőképességét! Behelyettesítve (2.27)-be (2.20)-t a transzmisszióra $t = e^{i\alpha a N}$ -t kapunk, ha $0 \leq (E - U)a^2 \leq 4$ teljesül. A Landauer-formula (2.25) alakja szerint a vezetőképesség:

$$g(E) = |t(E)|^2 = \begin{cases} 1 & , \quad 0 \leq (E - U)a^2 \leq 4 \\ 0 & , \quad \text{egyébként.} \end{cases} \quad (2.28)$$

Ez az energiabeli korlátozás onnan jön, hogy a két végén félvégtelen csövek csatlakoznak az elrendezéshez, és ezeken csak a $0 \leq (E - U)a^2 \leq 4$ feltételnek megfelelő elektronok jutnak a rendszerbe. Ez a lezárás egy energia felett a diszkrét rendszer sajátossága, láthatóan folytonos határesetben ($a \rightarrow 0$) ez eltűnik.

3. fejezet

Kétdimenziós cső vezetőképessége

Ebben a fejezetben visszavezetjük a kétdimenziós üres cső Green-függvényének kiszámítását az előző fejezetben kiszámolt egydimenziós Green-függvényre. Ezután egy pontszerű szennyezőre a Dyson-egyenlet diszkrét megfelelőjét használva módosítjuk a Green-függvényt. Több szennyező esetén a Dyson-egyenlet egymás utáni alkalmazásával az előző fejezethez hasonlóan a rendszer Green-függvénye determinánsok hányadosaként írható fel. A Fisher-Lee reláció és a Landauer-formula alkalmazásaként egy meglepően egyszerű alakot kapunk.

3.1. Kétdimenziós, üres cső Green-függvénye

3.1.1. A cső Schrödinger-egyenlete rácson

Legyen most egy olyan kétdimenziós rendszerünk, ahol a potenciál a következő:

$$U(y) = \begin{cases} U & 0 \leq y \leq W \\ +\infty & \text{egyébként,} \end{cases}$$

ahol $W = Ma$ a cső szélessége. Az ilyen potenciált merevfal határfeltétellel vehetjük figyelembe, azaz a csövön kívül a hullámfüggvény zérus, a csőben pedig a Schrödinger-egyenlet megoldása. Szabadelektron közelítésben a Schrödinger-egyenlet a következő:

$$-\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + U\Psi = E\Psi. \quad (3.1)$$

Rácson a Schrödinger-egyenlet diszkrétizált alakját kell használnunk, ami szokásosan a következő alakú lesz:

$$\Psi_{n+1m} + \Psi_{n-1m} + \Psi_{nm+1} + \Psi_{nm-1} + [(E - U)a^2 - 4] \Psi_{nm} = 0, \quad (3.2)$$

ahol $x = na$, $y = ma$ és a a rácsállandó. Keressünk síkhullámmegoldást! Keresztirányban a merevfal határfeltétel figyelembe vételével: $\Psi_{nm}^{\alpha,k} = Ae^{ia\alpha n} \sin \frac{m\pi ak}{W}$ megoldással próbálkozzunk:

$$\begin{aligned} \Psi_{n+1m}^{\alpha,k} + \Psi_{n-1m}^{\alpha,k} &= Ae^{ia\alpha(n+1)} \sin \frac{m\pi ak}{W} + Ae^{ia\alpha(n-1)} \sin \frac{m\pi ak}{W} = 2 \cos a\alpha \Psi_{nm}^{\alpha,k}, \\ \Psi_{nm+1}^{\alpha,k} + \Psi_{nm-1}^{\alpha,k} &= Ae^{ia\alpha n} \left[\sin \frac{(m+1)\pi ak}{W} + \sin \frac{(m-1)\pi ak}{W} \right] = 2 \cos \frac{\pi ak}{W} \Psi_{nm}^{\alpha,k}. \end{aligned}$$

Az utolsó egyenlőségénél felhasználtuk a $\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y$ trigonometrikus azonosságot. Ezeket figyelembe véve, egyszerűsítések után a (3.2) egyenlet a következő alakot ölti:

$$E = U + \frac{4}{a^2} - \frac{2}{a^2} \cos a\alpha - \frac{2}{a^2} \cos \frac{\pi ak}{W} = U + \frac{4}{a^2} \sin^2 \frac{a\alpha}{2} + \frac{4}{a^2} \sin^2 \frac{\pi ak}{2W}. \quad (3.3)$$

Ezt az egyenletet az egydimenziós esethez hasonlóan most is diszperziós relációnak nevezzük.

3.1.2. A hullámfüggvény normálása

Az egydimenziós esethez hasonlóan most is teljesülnie kell, hogy $|\alpha| \leq \frac{\pi}{a}$, a kereszt-hullámfüggvényekre pedig $1 \leq k \leq M - 1$. Ugyanis: $M + 1$ pontból kettőt rögzített a határfeltétel, így a teljes rendszer legfeljebb $M - 1$ tagú lehet. Másként fogalmazva keresztirányban kötött megoldás csomópontjait jelöli a k kvantumszám, és a rácspontok számánál több csomópontnak nincsen értelme. A teljességi feltétel így a következő:

$$\frac{\delta_{nn'}}{a} \frac{\delta_{mm'}}{a} = \sum_k \sum_\alpha A^2 e^{ia\alpha(n-n')} \sin \frac{m\pi ak}{W} \sin \frac{m'\pi ak}{W}.$$

Az α -függő részt integrállá alakítva az egydimenziós esetnek megfelelően kell eljárni.

A k -szerinti összegzés:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{k=1}^{M-1} \sin \frac{m\pi ak}{W} \sin \frac{m'\pi ak}{W} = \sum_{k=1}^{M-1} \left(\frac{e^{i\frac{m\pi ak}{W}} - e^{-i\frac{m\pi ak}{W}}}{2i} \right) \left(\frac{e^{i\frac{m'\pi ak}{W}} - e^{-i\frac{m'\pi ak}{W}}}{2i} \right) = \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M-1} \left(z_{m+m'}^k + z_{m+m'}^{-k} - z_{m-m'}^k - z_{m-m'}^{-k} \right), \end{aligned}$$

ahol $z_p = e^{i\frac{pa\pi}{aM}}$. Ha $p \neq 0$, akkor mértani sorok összegét kell kiszámolni, eredményül $\sum_{k=1}^{M-1} (z_p^k + z_p^{-k}) = -1 - (-1)^p$ -t kapunk. Ha $p = 0$, akkor $\sum_{k=1}^{M-1} 1 = M - 1$ az összeg. Ezek szerint, ha $m = m'$, akkor $S = -\frac{1}{4} \left(-1 - (-1)^{2m} - 2(M - 1) \right) = \frac{M}{2}$, ha pedig $m \neq m'$, akkor $S = -\frac{1}{4} \left(-1 - (-1)^{m+m'} + 1 + (-1)^{m-m'} \right) = 0$. Összevonva a két esetet: $S = \delta_{mm'} \frac{M}{2}$, ahonnan a normált kereszt-hullámfüggvény:

$$\chi_m^k = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin \frac{m\pi ak}{W}, \quad (3.4)$$

a teljes hullámfüggvény pedig:

$$\Psi_{nm}^{\alpha,k} = \frac{1}{\sqrt{a}} \sqrt{\frac{2}{W}} e^{ia\alpha n} \sin \frac{m\pi ak}{W} = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{ia\alpha n} \chi_m^k. \quad (3.5)$$

3.1.3. A Green-függvény egyenlete és megoldása

Egy rendszer Green-függvényének egyenletét a zérusra rendezett Schrödinger-egyenletből kaphatjuk meg oly módon, hogy a zérus helyére a Dirac-deltát írjuk a koordinátákkal. Diszkrét esetben a Dirac-delta helyett a Kronecker-deltát kell írunk:

$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \leftarrow \frac{\delta_{nn'}\delta_{mm'}}{a^2}$. Felhasználva a Schrödinger-egyenlet (3.2) alakját a Green-függvény egyenlete rendezés után:

$$G_{n+1m n'm'} + G_{n-1m n'm'} + G_{nm+1 n'm'} + G_{nm-1 n'm'} + [(E - U)a^2 - 4] G_{nm n'm'} = \delta_{nn'}\delta_{mm'}, \quad (3.6)$$

ahol $G_{nm n'm'} = G(x, y, x', y')$ az $x = na, y = ma, x' = n'a$ és $y' = m'a$ helyeken és $G(x, y, x', y')$ a szokásos Green-függvény. A sajátfüggvények ismeretében ennek az egyenletnek megoldása a következő alak:

$$G_{nm n'm'} = \sum_k \sum_\alpha \frac{\Psi_{n'm'}^{*k,\alpha} \Psi_{nm}^{k,\alpha}}{E - E^{k,\alpha}}$$

ahol $E^{k,\alpha}$ -ák a rendszer energia sajátállapotai, konkrét alakjukat a (3.3) diszperziós relációból vesszük:

$$\begin{aligned} G_{nm n'm'}^+(E) &= a^2 \sum_{k=1}^{M-1} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{ad\alpha}{2\pi} \frac{1}{a} \frac{e^{ia\alpha(n-n')} \chi_{m'}^k \chi_m^k}{2 \cos a\alpha + 2 \cos \frac{\pi ak}{W} + (E - U) a^2 - 4 + i\varepsilon} = \\ &= \sum_{k=1}^{M-1} \left[a^2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{ad\alpha}{2\pi} \frac{1}{a} \frac{e^{ia\alpha(n-n')}}{2 \cos a\alpha + (E_k - U) a^2 - 4 + i\varepsilon} \right] \chi_{m'}^k \chi_m^k = \sum_{k=1}^{M-1} G_{nn'}^+(E_k) \chi_{m'}^k \chi_m^k. \end{aligned} \quad (3.7)$$

3.2. Kétdimenziós cső Green-függvénye pontszennyező esetén

3.2.1. A Green-függvény kiszámítása egy pontszennyezőre

Helyezzünk el a csőben az i, j koordinátájú helyen egy $U + U'$ nagyságú szennyezőt. A Green-függvény egyenlete, ekkor annyiban változik meg, hogy az $(n = i)$ és $(m = j)$ helyen $U \leftarrow U + U'$ áll. Keressük az új Green-függvényt $G_{nm n'm'}^+ = G_{nm n'm'}^0 + G'_{nm n'm'}$ alakban. Némi rendezés után $G'_{nm n'm'}$ -re az alábbi egyenletek nyerhetők:

$$\begin{aligned} G'_{n+1m n'm'} + G'_{n-1m n'm'} + G'_{nm+1 n'm'} + G'_{nm-1 n'm'} + [(E - U)a^2 - 4] G'_{nm n'm'} &= 0 \\ G'_{i+1j n'm'} + G'_{i-1j n'm'} + G'_{ij+1 n'm'} + G'_{ij-1 n'm'} + [(E - U)a^2 - 4] G'_{ij n'm'} &= G_{ij m'n'}^+ U' a^2 \end{aligned}$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy $G'_{nm n'm'} = U' a^2 G_{nm ij}^0 G_{ij m'n'}^+$ a fenti két egyenlet megoldása. Végül a rendszer Green-függvénye:

$$G_{nm n'm'}^+ = G_{nm n'm'}^0 + U' a^2 G_{nm ij}^0 G_{ij m'n'}^+. \quad (3.8)$$

Ha ebbe ($n = i$) és ($m = j$) értékeket helyettesítünk, akkor $G_{ij m'n'}^+$ -t kifejeztük az üres cső Green-függvényével. Ebből már felírhatjuk $G_{nm m'n'}^+$ -t is:

$$G_{nm m'n'}^+(E) = G_{nm m'n'}^0(E) + \frac{G_{nm ij}^0(E)G_{ij m'n'}^0(E)}{\frac{1}{U'a^2} - G_{ij ij}^0(E)}. \quad (3.9)$$

A folytonos esethez való hasonlóság okán (3.8) egyenletet Dyson-egyenletnek nevezhetjük.

3.2.2. Több szennyező esete

Ha most van f darab szennyező U_i erősségekkel, az $n_i m_i$ koordinátákkal ($i = 1..f$), akkor alkalmazható a (3.9) képlet úgy, hogy kiindulunk az üres cső Green-függvényéből, és utána minden szennyezőre:

$$G_{nm m'n'}^{s+1}(E) = G_{nm m'n'}^s(E) + \frac{G_{nm ij}^s(E)G_{ij m'n'}^s(E)}{\frac{1}{U_s a^2} - G_{ij ij}^s(E)} \quad /s = 0..f - 1/. \quad (3.10)$$

Az f lépésben kapott eredmény felírható két determináns hányadosaként, a következőképpen [19]:

$$G_{nmn'm'} = \frac{\begin{vmatrix} G_{nm n'm'}^0 & G_{nm n_1 m_1}^0 & G_{nm n_2 m_2}^0 & \cdots & G_{nm n_f m_f}^0 \\ G_{n_1 m_1 n'm'}^0 & G_{n_1 m_1 n_1 m_1}^0 - \frac{1}{a^2 U_1} & G_{n_1 m_1 n_2 m_2}^0 & \cdots & G_{n_1 m_1 n_f m_f}^0 \\ G_{n_2 m_2 n'm'}^0 & G_{n_2 m_2 n_1 m_1}^0 & G_{n_2 m_2 n_2 m_2}^0 - \frac{1}{a^2 U_2} & \cdots & G_{n_2 m_2 n_f m_f}^0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n_f m_f n'm'}^0 & G_{n_f m_f n_1 m_1}^0 & G_{n_f m_f n_2 m_2}^0 & \cdots & G_{n_f m_f n_f m_f}^0 - \frac{1}{a^2 U_f} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} G_{n_1 m_1 n_1 m_1}^0 - \frac{1}{a^2 U_1} & G_{n_1 m_1 n_2 m_2}^0 & \cdots & G_{n_1 m_1 n_f m_f}^0 \\ G_{n_2 m_2 n_1 m_1}^0 & G_{n_2 m_2 n_2 m_2}^0 - \frac{1}{a^2 U_2} & \cdots & G_{n_2 m_2 n_f m_f}^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n_f m_f n_1 m_1}^0 & G_{n_f m_f n_2 m_2}^0 & \cdots & G_{n_f m_f n_f m_f}^0 - \frac{1}{a^2 U_f} \end{vmatrix}}. \quad (3.11)$$

3.3. A Landauer-formula kétdimenziós esetben

Amint már a bevezetőben említettük a Landauer-formula kétdimenziós esetben a következő alakot ölti:

$$g(E) = \sum_{pq} |t_{pq}(E)|^2, \quad (3.12)$$

ahol az összegzés a nyílt csatornákra történik, t_{pq} -k a transzmissziós együtthatók, amelyek azt a kvantummechanikai amplitudót adják meg, hogy a baloldalon p -edik sajátállapotban lévő elektron a jobboldali q -adik sajátállapotba szóródik. A kapcsolatot

a Green-függvény és a transzmissziós együtthatók között most is a Fisher-Lee reláció adja [1, 12]:

$$t_{pq}(E) = i\hbar\sqrt{v_p v_q} \int \int \chi_p^*(y_1) G^+(y_1; y_2, E) \chi_q(y_2), \quad (3.13)$$

ahol $G^+(y_1; y_2, E)$ a rendszer Green-függvénye a rendszerhez csatolt félvégtelen csövek kezdetén fekvő y_1 illetve y_2 keresztkoordinátájú pontok között. A képletbeli keresztkoordináta szerinti integrálás helyett itt a $\sum_{m=1}^{M-1}$ összegzés lesz:

$$t_{pq}(E) = ia^2 \sqrt{v_p v_q} \sum_{mm'} \chi_{m'}^{*q} G_{0mNm'}^+(E) \chi_m^p, \quad (3.14)$$

ahol v_p a p -edik módusbeli elektron sebessége, amit a diszperziós relációból határozhatunk meg:

$$v_p = \frac{\partial E_p}{\partial \alpha_p} = \frac{2}{a} \sin \alpha_p a. \quad (3.15)$$

Ezeket felhasználva a vezetőképességet a Green-függvényből az alábbi egyenlet adja meg:

$$g(E) = 4a^2 \sum_{pq} \sin \alpha_p a \sin \alpha_q a \sum_{mm'} \left| \chi_{m'}^{*q} G_{0mNm'}^+(E) \chi_m^p \right|^2. \quad (3.16)$$

3.3.1. Üres cső vezetőképessége

Legegyszerűbb alkalmazásként számítsuk ki az üres cső vezetőképességét! Behelyettesítve (3.16)-be az üres cső Green-függvényét, (3.7)-et az adódik, hogy:

$$g(E) = 4a^2 \sum_{pq} \sin \alpha_p a \sin \alpha_q a \sum_{mm'} \sum_{k=1}^{M-1} \chi_{m'}^{*q} \chi_{m'}^k G_{0N}^+(E_k) \chi_m^k \chi_m^p.$$

Elvégezve az m és m' szerinti összegzéseket kihasználva a kereszt-hullámfüggvények normáltságát kapjuk, hogy:

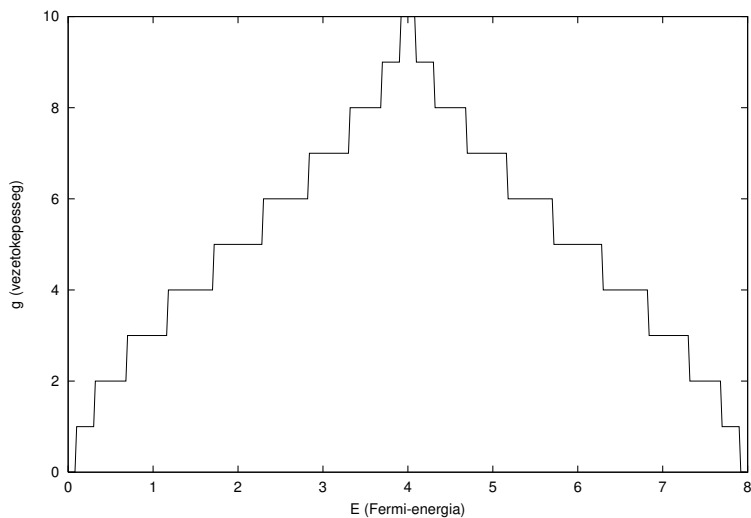
$$g(E) = 4 \sum_{pq} \sin \alpha_p a \sin \alpha_q a \sum_{k=1}^{M-1} \delta_{pk} \delta_{kq} G_{0N}^+(E_k)$$

Most már a k szerinti összegzés is elvégezhető:

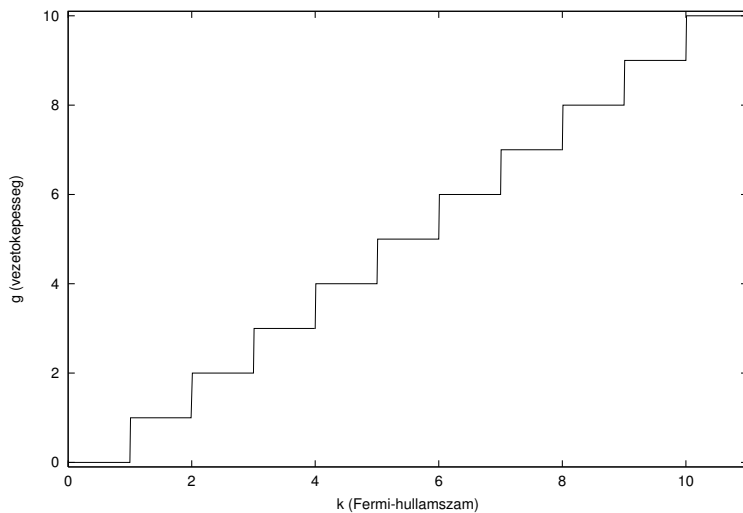
$$g(E) = 4 \sum_{pq} \sin \alpha_p a \sin \alpha_q a \delta_{pq} G_{0N}^+(E_p) \quad (3.17)$$

Kihasználva az egydimenziós Green-függvény (2.20) alakját végeredményül

$$g(E) = \sum_{pq} \delta_{pq} \quad (3.18)$$



3.1. ábra. Az üres cső vezetőképessége a Fermi-energiában 10 módusú rendszerben. (Minden más Fermi-energián nulla.) Az energiában lezáródó módusok a diszkrét rendszer sajátossága, folytonos határesetben ($a \rightarrow 0$) eltűnik.



3.2. ábra. Az üres cső vezetőképessége az $E_F = \frac{2}{a^2} - \frac{2}{a^2} \cos \frac{\pi a k_F}{W}$ egyenlettel definiált Fermi hullámszám esetén, 10 módusú rendszerre.

kifejezés adódik, ami éppen az adott energián nyitott módusok száma. Ez magyarázza azokat a kísérleteket, amelyek a Fermi-energiában lépcsősen változó vezetőképességet adtak. Ettől kezdve csak azt a tartományt vizsgáltuk, ahol a csatornák nyílnak, azaz amikor a Fermi-energia a $[0, \frac{4}{a^2}]$ tartományba esett. Ebben a tartományban az $E_F = \frac{2}{a^2} - \frac{2}{a^2} \cos \frac{\pi a k_F}{W}$ egyenlet által definiált hullámszámot használtuk. Ennek az az előnye, hogy a nyitási pontokban éppen egész, és a hullámszám egészrésze éppen a nyitott módusok számával egyenlő. Ez a képlet is megfelel folytonos határesetben ($a \rightarrow 0$) a Fermi-hullámszám szokásos definíciójának ($E_F = 2k_F^2$, az általunk használt egységekben).

3.3.2. Egy észrevétel több szennyezős rendszerek vezetőképességéhez

Nézzük meg most egy kicsit alaposabban azt az esetet, amikor f darab szennyező adott. Jelölje az i -edik szennyező nagyságát U_i , koordinátáit n_i és m_i . Behelyettesítve (3.14)-be (3.11) alakot észre lehet venni, hogy az m szerinti összegzés csak a számlálóbéli determináns első sorára, az m' szerinti összegzés pedig az első oszlopára hat. A determináns olyan szorzatok összege, amely minden tagjában minden sorból és minden oszlopból pontosan egy szerepel. Emiatt felcserélhető a determináns kiszámítása és az összegzés:

$$t_{pq} \sim \frac{\begin{vmatrix} a^2 \sum_{m,m'} G_{nm n'm'}^0 \chi_m^p \chi_{m'}^{*q} & a \sum_m G_{nm n_1 m_1}^0 \chi_m^p & \cdots & a \sum_m G_{nm n_f m_f}^0 \chi_m^p \\ a \sum_{m'} G_{n_1 m_1 n' m'}^0 \chi_{m'}^{*q} & G_{n_1 m_1 n_1 m_1}^0 - \frac{1}{a^2 U_1} & \cdots & G_{n_1 m_1 n_f m_f}^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a \sum_{m'} G_{n_f m_f n' m'}^0 \chi_{m'}^{*q} & G_{n_f m_f n_1 m_1}^0 & \cdots & G_{n_f m_f n_f m_f}^0 - \frac{1}{a^2 U_f} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} G_{n_1 m_1 n_1 m_1}^0 - \frac{1}{a^2 U_1} & G_{n_1 m_1 n_2 m_2}^0 & \cdots & G_{n_1 m_1 n_f m_f}^0 \\ G_{n_2 m_2 n_1 m_1}^0 & G_{n_2 m_2 n_2 m_2}^0 - \frac{1}{a^2 U_2} & \cdots & G_{n_2 m_2 n_f m_f}^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n_f m_f n_1 m_1}^0 & G_{n_f m_f n_2 m_2}^0 & \cdots & G_{n_f m_f n_f m_f}^0 - \frac{1}{a^2 U_f} \end{vmatrix}}. \quad (3.19)$$

Felhasználva (3.7) egyenlőséget elvégezhetőek az m illetve m' szerinti összegzések, például:

$$a \sum_m G_{nm n_i m_i}^0 \chi_m^p = \sum_m \sum_{k=1}^{M-1} G_{n n_i}^0(E_k) \chi_{m_i}^k \chi_m^k \chi_m^p = \sum_{k=1}^{M-1} G_{n n_i}^0(E_k) \chi_{m_i}^k \delta_{kp} = G_{n n_i}^0(E_p) \chi_{m_i}^p.$$

Felhasználva $G_{n n_i}^0(E_p)$ (2.20)-ben megismert alakját az összes faktor figyelembe vételével a következő eredményt kapjuk (a nevezőbeli determinánst jelölje A_f , ez sem a

nevezőben, sem a számlálóbeli determináns megfelelő részében az átalakítás során nem változott meg):

$$t_{pq} = \frac{a}{2i\sqrt{\sin a\alpha_p \sin a\alpha_q}} \left| \begin{array}{c|ccc} \delta_{pq} \frac{2i}{a} \sin a\alpha_p e^{ia\alpha_p N} & \chi_{m_1}^p e^{ia\alpha_p n_1} & \dots & \chi_{m_f}^p e^{ia\alpha_p n_f} \\ \hline \chi_{m_1}^{*q} e^{ia\alpha_q(N-n_1)} & & & \\ \vdots & & & \\ \chi_{m_f}^{*q} e^{ia\alpha_q(N-n_f)} & & A_f & \end{array} \right| / |A_f|. \quad (3.20)$$

4. fejezet

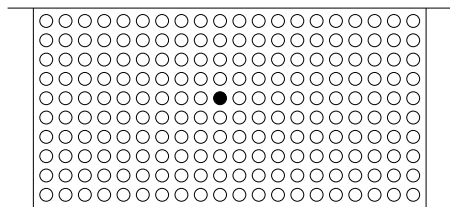
Egyszerű mintázatok vizsgálata

Az előző képletek alapján kétféle programot írtunk a vezetőképesség kiszámítására. Mindkét program bemenete a szennyezők egy elrendezése az adott méretű rácson, kimenete a megadott Fermi-energia tartományban kiszámolt vezetőképesség. Az első program kiszámolja adott energián az üres cső Green-függvényét minden rácsponton, majd veszi sorjában a szennyezőket, és a (3.9) egyenlet alapján módosítja a Green-függvényt. Amikor az összes szennyező figyelembe vételével megkaptuk a szennyezett rendszer Green-függvényét, akkor a (3.16) alakbeli összegek kiszámolásával meghatározzuk a vezetőképességet. A másik program az előző fejezet (3.20) képlete alapján számol. Szintén végigfut a megadott Fermi-energiákon, és minden pontban kiszámolja a (3.20) képletbeli mátrix elemek értékét, majd egy a GAMS-libraryből [20] vett rutinnal kiszámolja a determinánsokat. Ez az eljárás két részből áll, az első része előállítja a mátrix L-U felbontását, a második kiszámolja az L-U felbontásból a determinánst. A két program között, akkor van jelentős memóriefoglalási illetve futási időbeli különbség, ha a rácspontok nagy része szennyezetlen, ilyenkor a második program gyorsabb és kevesebb memóriát foglal.

A programok helyes futását ellenőrizni kellett tesztmintákkal, ezenkívül arra is kíváncsiak voltunk, vajon a rácsra helyezett modellünk eredményei hasonlítanak-e a folytonos modellekkel számolt eredményekhez. A legelső teszt az üres cső volt, amit az előző fejezetben már megmutattam. A programmal számolt vezetőképesség egyezett a kézzel kiszámolttal. A következő legegyszerűbb rendszer az egyetlen pontszennyezőt tartalmazó rendszer volt.

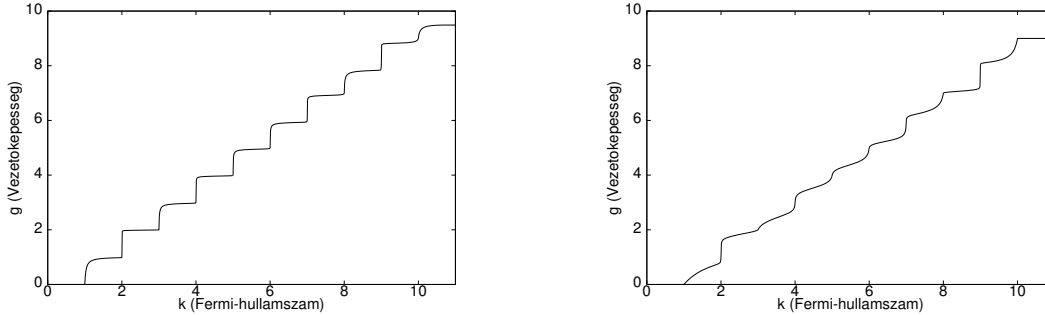
4.1. Egy pontszennyező esete

A következőkben egy 10 módusú, $N = 20$ ráczállandójú csövet tekintettünk, amelybe egyetlen pontszennyezőt tettünk az $m = 5$, $n = 10$ rácspontra (lásd a 4.1 ábrán).



4.1. ábra. Az üres körök jelentik a szennyezetlen rácspontokat, a fekete körök a szennyezettet.

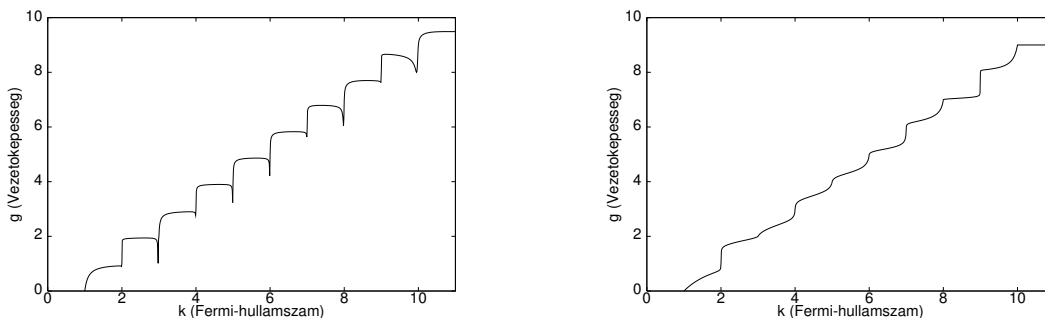
A 4.2 ábrán taszító (pozitív) potenciál esetén ábrázoljuk a vezetőképességet. Folyto-



4.2. ábra. Az egyetlen pontszennyezőt tartalmazó rendszer vezetőképessége a Fermi-hullámszám függvényében. A potenciál értéke $U_0 = 1.0$ illetve $U_0 = 100.0$ volt.

nos esetben a taszító potenciál hatása abban mutatkozik, hogy a lépcsők lekopnak, nagyobb potenciál hatására pedig mintha ki lenne harapva egy darab a lépcsőből. A nyitási pontok előtti szakaszokon sem szögletes a vezetőképesség, itt kváziklasszikus megfontolásokból Lorentz-görbe alakú lesz [17, 18]. Láthatóan a mi rácsra tett modellünk is produkálta ezeket az effektusokat, a görbéink alakja hasonló lett a folytonos modell görbéihez.

Ezután megnéztem a vonzó potenciál esetét is. A 4.3 ábra mutatja az eltérést a taszító potenciál esetétől. Kis vonzó potenciál esetén szembeötlő a nyitási pontok



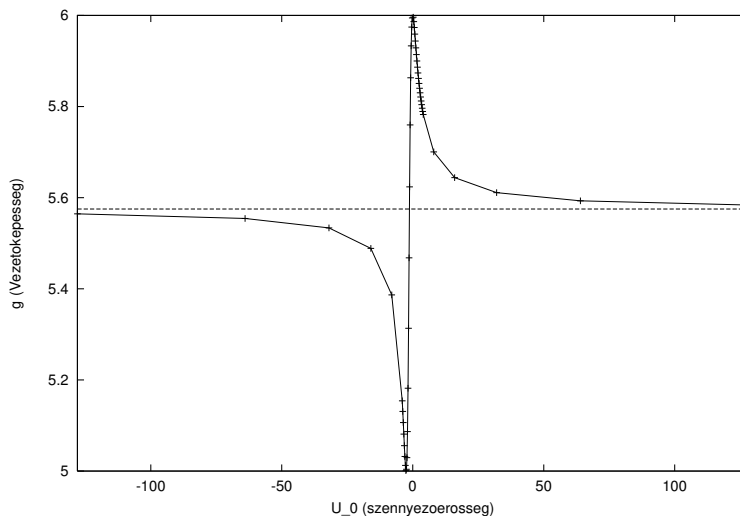
4.3. ábra. Az egyetlen pontszennyezőt tartalmazó rendszer vezetőképessége a Fermi-hullámszám függvényében. A potenciál értéke $U_0 = -1.0$ illetve $U_0 = -100.0$ volt.

előtti leugrás. Itt arról van szó, hogy a negatív potenciál hatására egy módusban itt majdnem kötött állapot (rezonancia) jön létre az adott Fermi-energián. Nagy vonzó potenciál esetén láthatóan nincsen eltérés a nagy taszító potenciáltól, ami el is várható

a (3.9) egyenlet alapján. Ebből ugyanis $U \rightarrow \pm\infty$ határesetben egyaránt

$$G_{nm m' n'}^+(E) = G_{nm m' n'}^0(E) - \frac{G_{nm ij}^0(E) G_{ij m' n'}^0(E)}{G_{ij ij}^0(E)} \quad (4.1)$$

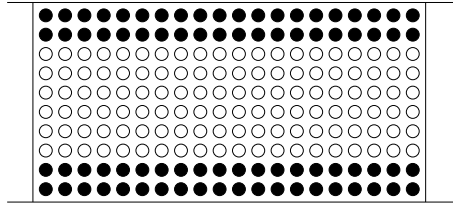
adódik a Green-függvény módosítására. Végül 4.4 ábrán ábrázoltam egy nyitási pont-hoz közeli Fermi-energián a vezetőképességet a potenciál függvényében. Középen a szennyezetlen esetnek megfelelően a vezetőképesség 6, mert a Fermi-hullámszám 6 és 7 közé esik. A két végén ugyanahhoz az egyeneshez tart a vezetőképesség a (4.1) egyenletnek megfelelően. A kis negatív potenciál értékeknél egységnyit esik a vezetőképesség. Ezt azzal lehet magyarázni, hogy ilyenkor az egyik módus rezonancia állapot hatására gyakorlatilag lezáródik.



4.4. ábra. Az egyetlen pontszennyezőt tartalmazó rendszer vezetőképessége a szennyező potenciál nagyságának függvényében ($k_F = 6.97$).

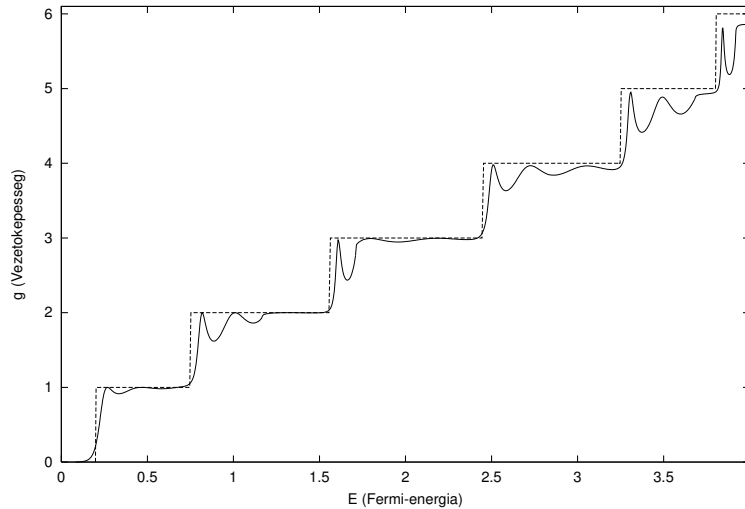
4.2. Keskenyebb cső

Ezek után azt a rendszert vizsgáltuk (4.5 ábra), amelyben a 10 módusú rendszert egy véges szakaszon 6 szélességűre szűkítettünk. Várakozásunknak megfelelően azt az ered-



4.5. ábra. Az üres körök a szennyezetlen, a fekete körök az $U_0 = 100.0$ nagyságú potenciállal szennyezett rácspontokat jelölik.

ményt kaptuk, hogy a vezetőképesség a 6 módusú rendszer vezetőképességéhez hasonló. A nyitási pontok már egészen rövid szűkület esetén egybeestek, a vezetőképességben kialakult a 6 módusú rendszer energiáinak megfelelő lépcsős szerkezet. A hossz növelésével a felfutás egyre meredekebb lett, egyre jobban megközelítette a lépcsős felugrást. A lépcsők elején lévő fluktuációk oka a leszűkített rendszer véges mérete, illetve a különböző szélességű csövek összeillesztésénél létrejövő kontaktellenállás lehet.

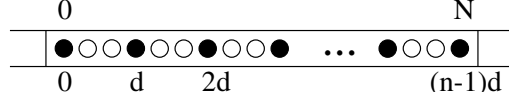


4.6. ábra. A leszűkített cső és a 6 módusú cső vezetőképessége a Fermi-energia függvényében. Az ábrán egy 20 ráczállandó hosszúságú szűkület esetén kiszámított vezetőképesség látható.

5. fejezet

Periódikusan szennyezett egydimenziós cső

Tekintsük most a következő egydimenziós rendszert: n darab U_0 nagyságú pontszennyezőt helyezünk el, egyenlő d távolságokra egymástól, lásd (5.1) ábrát. Másképpen: olyan blokkokat helyezünk el egymás mellé, amelyekben egy-egy szennyező van.



5.1. ábra. A fekete körök jelentik a szennyezett, az üres körök a tiszta rácspontokat. A két végéhez most is félvégtelen vezetődarabok csatlakoznak.

A (2) fejezet szerint az ilyen rendszer Green-függvényét a (2.24) kifejezéssel lehet kiszámolni. Másrészt a vezetőképesség meghatározásához a (2.3) alpontban tárgyaltak miatt elegendő a Green-függvényt a nyílt energiákon ($0 \leq (E - U)a^2 \leq 4$) és a $(0, N)$ pontok között kiszámolni. Felhasználva az egydimenziós Green-függvény (2.20) alakját ($G_{nn'}^0 = \frac{a}{2i} \frac{e^{i\beta a|n-n'|}}{\sin \beta a}$) a módosított Green-függvény az alábbi formájú lesz:

$$G_{0N}^+ = \frac{\left(\frac{a}{2i \sin \beta a}\right)^{n+1}}{\left(\frac{a}{2i \sin \beta a}\right)^n} \frac{\begin{vmatrix} z^{n-1} & 1 & z & z^2 & \dots & z^{n-1} \\ z^{n-1} & t & z & z^2 & \dots & z^{n-1} \\ z^{n-2} & z & t & z & \dots & z^{n-2} \\ z^{n-3} & z^2 & z & t & \dots & z^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z^{n-1} & z^{n-2} & z^{n-3} & \dots & t \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} t & z & z^2 & \dots & z^{n-1} \\ z & t & z & \dots & z^{n-2} \\ z^2 & z & t & \dots & z^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z^{n-1} & z^{n-2} & z^{n-3} & \dots & t \end{vmatrix}}, \quad (5.1)$$

ahol mindkét determinánsban minden sorból kiemeltünk $\left(\frac{a}{2i \sin \beta a}\right)$ -t, és bevezettük a $z = e^{i\beta a d}$ illetve $t = 1 - \frac{2i \sin \beta a}{U_0 a^2}$ jelöléseket. Jelöljük a továbbiakban a számlálóbéli mátrixot B_n -nel, amely egy $(n+1) \times (n+1)$ -es mátrix lesz, és a nevezőbelit A_n -nel, amely $n \times n$ -es lesz. A vezetőképesség (2.25)-ből és (2.27)-ből a következő lesz:

$$g = \left| \frac{2i}{a} \sin \beta a \frac{a}{2i \sin \beta a} \frac{\det(B_n)}{\det(A_n)} \right|^2 = \left| \frac{\det(B_n)}{\det(A_n)} \right|^2. \quad (5.2)$$

Számoljuk ki először B_n determinánsát! Az első sorból a másodikat kivonva, majd az első sor szerint kifejtve a következő formulát kapjuk:

$$|B_n| = \begin{vmatrix} 0 & 1-t & 0 & 0 & \dots & 0 \\ z^{n-1} & t & z & z^2 & \dots & z^{n-1} \\ z^{n-2} & z & t & z & \dots & z^{n-2} \\ z^{n-3} & z^2 & z & t & \dots & z^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z^{n-1} & z^{n-2} & z^{n-3} & \dots & t \end{vmatrix} = (t-1) \begin{vmatrix} z^{n-1} & z & z^2 & \dots & z^{n-1} \\ z^{n-2} & t & z & \dots & z^{n-2} \\ z^{n-3} & z & t & \dots & z^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z^{n-2} & z^{n-3} & \dots & t \end{vmatrix}. \quad (5.3)$$

Ha ez utóbbi első sorából kiemelünk z -t, akkor láthatóan a B_{n-1} determinánsát kapjuk, azaz az alábbi rekurziós egyenletet nyerjük B_n -re:

$$|B_n| = (t-1)z|B_{n-1}|. \quad (5.4)$$

Ez könnyedén megoldható $|B_1| = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & t \end{vmatrix} = 1-t$ figyelembe vételével:

$$|B_n| = (t-1)^n z^{n-1} \quad (5.5)$$

Ezen a szép és egyszerű eredményen felbuzdulva essünk neki $|A_n|$ kiszámításának! Végezzük el $|A_n|$ -en a következő átalakítást:

$$\begin{aligned} |A_n| &= \left| (t-1)\underline{I} + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & z & z^2 & \dots & z^{n-1} \\ z & 1 & z & \dots & z^{n-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z^{n-1} & z^{n-2} & z^{n-3} & \dots & 1 \end{pmatrix}}_{M_n} \right| = \left| (t-1)\underline{I} + M_n \right| = \\ &= \left| M_n \left((t-1) M_n^{-1} \right) \right| = \left| M_n \right| \left| (t-1) M_n^{-1} + \underline{I} \right| = \frac{|(t-1) M_n^{-1} + \underline{I}|}{|M_n^{-1}|}. \quad (5.6) \end{aligned}$$

Ezen az alakon még nem látszik azonnal, hogy mi az előnye, de lineáris algebrából ismert, hogy M_n egy Toeplitz-mátrix, és inverze a következő egyszerű alakra hozható (lásd pl.: [21]):

$$M_n^{-1} = \begin{pmatrix} u & v & & & 0 \\ v & w & v & & \\ & v & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & v \\ 0 & & & v & w & v \\ & & & & v & u \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Elvégezve a $M_n M_n^{-1} = \underline{I}$ szorzást u, v és w között a következő négy típusú egyenletet kapjuk:

$$\begin{aligned} u + zv &= 1, \\ 2vz + w &= 1, \\ z^{n-2}v + z^{n-1}u &= 0, \\ v + zw + z^2v &= 0. \end{aligned}$$

Ebből a rendszerből három adja a megoldást, a negyedikkel ellenőrizni lehet, hogy jó-e az. Eredményül:

$$u = \frac{1}{1-z^2} \quad v = \frac{-z}{1-z^2} \quad w = \frac{1+z^2}{1-z^2} \quad (5.8)$$

adódik. Ezt behelyettesítve az (5.6) egyenletbe $|A_n|$ -et sikerült két tridiagonális mátrix determinánsaként felírunk:

$$|A_n| = \frac{\begin{vmatrix} (t-1)u+1 & (t-1)v & & & & & & & 0 \\ (t-1)v & (t-1)w+1 & (t-1)v & & & & & & \\ & (t-1)v & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & (t-1)v & & & & \\ & & & (t-1)v & (t-1)w+1 & (t-1)v & & & \\ 0 & & & & (t-1)v & (t-1)u+1 & & & \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} u & v & & & & & & & 0 \\ v & w & v & & & & & & \\ & v & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & v & & & & \\ & & & v & w & v & & & \\ 0 & & & & v & u & & & \end{vmatrix}}. \quad (5.9)$$

A nevezőbeli determináns minden sorából emeljünk ki $-v(t-1)$ -et, a számlálóból pedig $-v$ -t. Így a következő formulára jutunk:

$$|A_n| = (t-1)^n \frac{\begin{vmatrix} y_1 & -1 & & & & & & & 0 \\ -1 & x_1 & -1 & & & & & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & & & & \\ & & & -1 & x_1 & -1 & & & \\ 0 & & & & -1 & y_1 & & & \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} y_2 & -1 & & & & & & & 0 \\ -1 & x_2 & -1 & & & & & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & & & & \\ & & & -1 & x_2 & -1 & & & \\ 0 & & & & -1 & y_2 & & & \end{vmatrix}}, \quad (5.10)$$

ahol $x_1 = -\frac{(t-1)w+1}{(t-1)v} = 2 \cos \beta ad + \frac{U_0 a^2 \sin \beta ad}{\sin \beta a}$, $y_1 = x_1 - e^{i\beta ad}$, $x_2 = 2 \cos \beta ad$ és $y_2 = x_2 - e^{i\beta ad}$ felhasználva t és z eredeti alakját. A determinánsok kifejtési tételének

néhány alkalmazásával kapható, hogy:

$$\begin{vmatrix} y & -1 & & & 0 \\ -1 & x & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & & -1 & x & -1 \\ & & & & -1 & y \end{vmatrix}_n = y^2 U_{n-2} \left(\frac{x}{2} \right) - 2y U_{n-3} \left(\frac{x}{2} \right) + U_{n-4} \left(\frac{x}{2} \right), \quad (5.11)$$

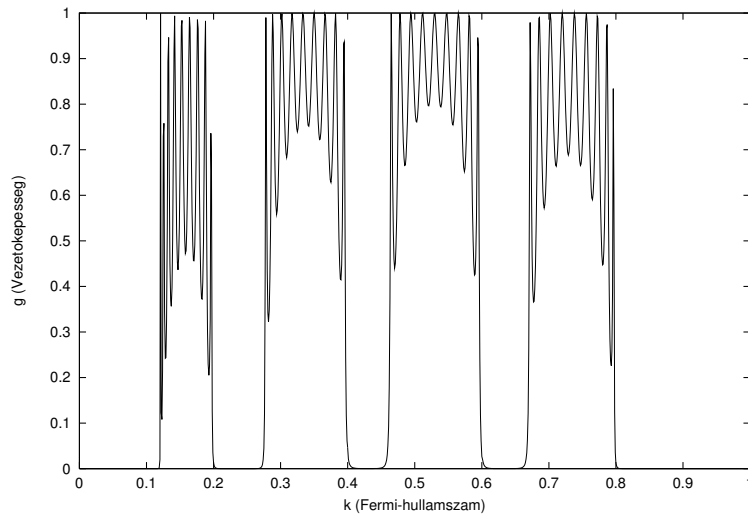
ahol $U_i \left(\frac{x}{2} \right)$ az i -edik 2-es Csebisev-polinómot jelöli, amely igazolható, hogy éppen egyenlő annak az U_i $i \times i$ -s mátrixnak a determinánsával, melynek főátlójában csupa x áll, és mellette a két első mellékátlóban csupa -1 . Ezt a legyegeyszerűbb úgy belátni, ha felírjuk mind a Csebisev-polinómok rekurziós egyenletét, mind az U_i egyenletét, és kiszámoljuk az első két tagot mindegyikben. Az egyezés ekkor látszódni fog. Ezzel meg is van $|A_n|$ analitikus alakja:

$$|A_n| = (t-1)^n \frac{y_1^2 U_{n-2} \left(\frac{x_1}{2} \right) - 2y_1 U_{n-3} \left(\frac{x_1}{2} \right) + U_{n-4} \left(\frac{x_1}{2} \right)}{y_2^2 U_{n-2} \left(\frac{x_2}{2} \right) - 2y_2 U_{n-3} \left(\frac{x_2}{2} \right) + U_{n-4} \left(\frac{x_2}{2} \right)} \quad (5.12)$$

Ezt behelyettesítve a vezetőképességre kapott (5.2) egyenletbe megvan a periodikusan szennyezett cső vezetőképességének analitikus végeredménye:

$$g = \left| \frac{\det(B_n)}{\det(A_n)} \right|^2 = \left| \frac{y_2^2 U_{n-2} \left(\frac{x_2}{2} \right) - 2y_2 U_{n-3} \left(\frac{x_2}{2} \right) + U_{n-4} \left(\frac{x_2}{2} \right)}{y_1^2 U_{n-2} \left(\frac{x_1}{2} \right) - 2y_1 U_{n-3} \left(\frac{x_1}{2} \right) + U_{n-4} \left(\frac{x_1}{2} \right)} \right|^2 \quad (5.13)$$

Ezt a Csebisev-polinómok rekurzív kiszámítása után összevetettük a programmal számolt vezetőképességgel. A két görbét kivonva egymásból az eltérés 10^{-20} nagyságrendű volt. Ezt is a program egyfajta ellenőrzésének tekintettük. Az 5.2 ábrán 5 rácsállandó hosszúságú blokkokból felépített 10 blokk hosszúságú kvázi-periodikusan szennyezett lánc vezetőképessége látható. A szennyezők nagyságát $U = 1.0$ -ra választottuk. Az ábrán jól láthatóan már ilyen rövid rendszernél is létrejönnek a végtelen periodikusan szennyezett láncot jellemző gapek. A gapeken végtelen rendszernél olyan energiatartományokat érünk, amelyben egyetlen Bloch-állapot sincsen. Az ilyen E_F Fermi-energián a rendszerben nem lesz vezetés. Ha a rendszerünk f darab pontszennyezőt tartalmazott, akkor két gap között mindig $f - 1$ -szer lesz a vezetőképesség éppen egységnyi. A mienkhez hasonló eredményeket ismertetnek a [22, 23] cikkek a transzfermátrixra tett megfontolások alapján. Egy kis eltérést okoz a két eredmény között az, hogy az utolsó blokk nálunk eltér a többitől, emiatt ezt külön figyelembe kell venni az eredmények egyeztetésekor.

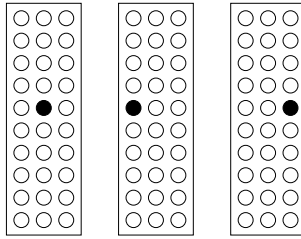


5.2. ábra. A kvázi-periodikusan szennyezett lánc vezetőképessége a Fermi-hullámszám függvényében. ($f = 10$, $d = 5$, $U_0 = 1.0$)

6. fejezet

Rendezett-rendezetlen átmenet kétdimenzióban

Ebben a fejezetben olyan rendszer vezetőképességét vizsgáltuk, amelyet egyetlen pontszennyezőt tartalmazó blokkokból építettünk fel. A rendezett esetben minden blokkban azonos helyen voltak a szennyezők, és nagyságukat azonosra ($U_0 = 100.0$) választottuk. A rendezetlen esetben is azonos nagyságú szennyezőt helyeztünk el az egyes blokkokban, de a blokk hossza mentén véletlenszerűen. A vezetőképességet a 4. fejezetben ismertetett programmal számoltuk ki. Vizsgálataink során 10 csatornás rendszert vizsgáltunk, a blokkok hossza $d = 3$ volt. Rendezett esetben a szennyezőket az $(5, 2)$ rácsponton helyeztük el a blokkokban, rendezetlen esetben egyenlő valószínűséggel az $(5, 1), (5, 3)$ illetve $(5, 2)$ rácspontokon. A blokkok számának változtatása mellett vizsgáltuk a vezetőképességet a Fermi-hullámszám függvényében. Programunkkal a 400 blokkot tartalmazó rendszer volt az elérhető leghosszabb, ekkor a futási idő kezdett akadályt jelenteni. Rendezetlen esetben egy-egy realizációt úgy építettünk, hogy az



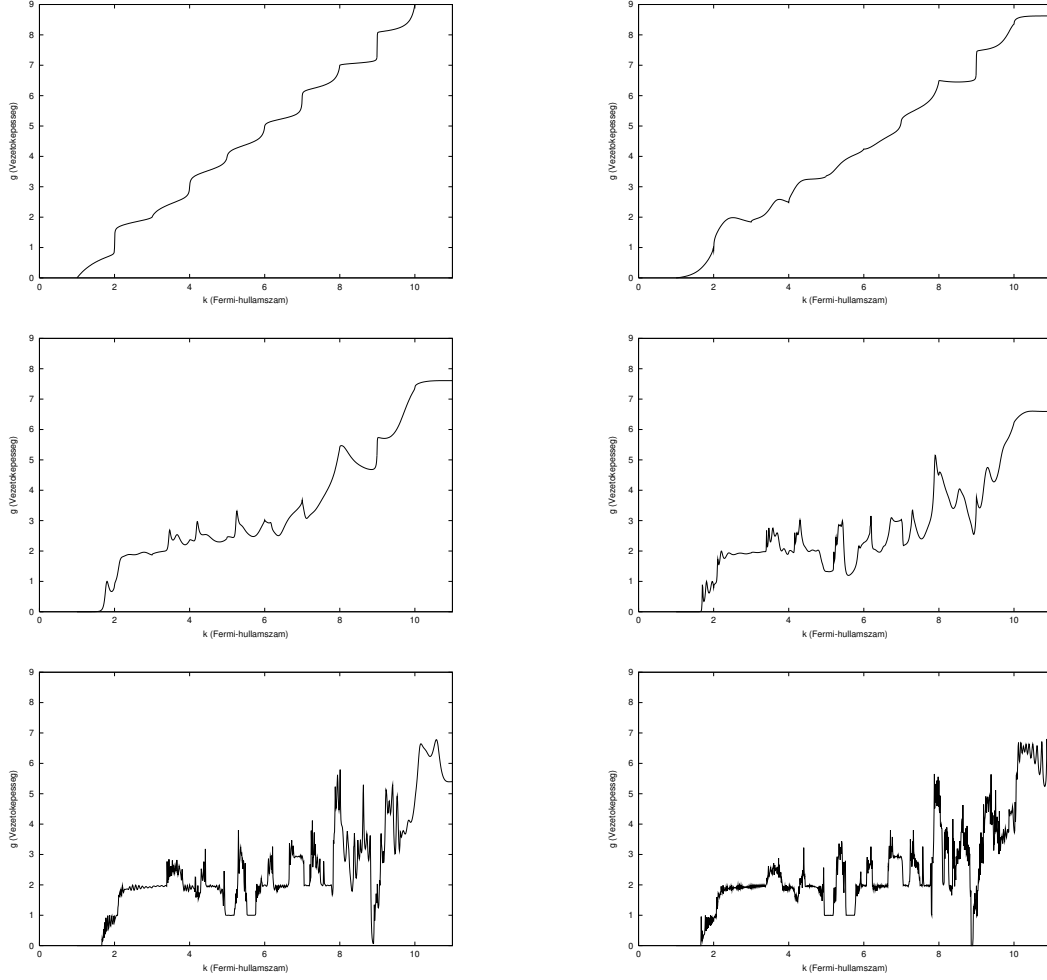
6.1. ábra. Ilyen blokkokból építettük fel a rendszert. Rendezettet csak a bal oldaliból, a rendezetlenben egyenlő valószínűséggel mindháromból. Az üres körök a szennyezetlen, a fekete körök az $U_0 = 100.0$ nagyságú potenciállal szennyezett rácspontokat jelölik. A két végéhez most is félvégtelen vezetőket kapcsoltunk.

addig meglévő részhez ragasztottunk hozzá újabb blokkokat, amikor növeltük a méretet.

6.1. Rendezett rendszer

Először azt az esetet vizsgáltuk, amikor egyformák voltak a blokkjaink. A 6.2 ábrán látható, hogy a blokkok számának növelésével a kezdeti lépcsős szerkezet helyett egy új szerkezet alakul ki. Elsősorban az egészekhez való kiülések fogyelhetőek meg ezen az ábrán, de vannak felugrások is, amelyek egészhez közeli értéket mutatnak. Arról van itt szó, hogy ha végtelen sok azonos blokkot helyeznénk el egymás mellé, akkor a hullámfüggvényeink Bloch-állapotok volnának, és meghatározhatnánk a sáv szerkezetet.

A sávszerkezetből pedig adott E Fermi-energián a vezetőképességet az adja, hogy hány E energiájú állapot van. Ez egy lépcsős szerkezetet adna, ehhez hasonlít a mi véges periodikus rendszerünk vezetőképessége [18, 24].



6.2. ábra. A blokkok számának növelésével kialakul egy új szerkezet. A blokkok száma az ábrán rendre $L = 1, 2, 5, 10, 30, 100$.

A vezetőképesség átlaga olyan energiákra, amikor rögzített számú (N) csatorna van nyitva olyan mennyiség, amely mentes már az ábrákon látható fluktuációktól, és elméleti jóslatok is vannak rá [15]. Ezért a következő módon definiáltuk az átlagos vezetőképességet:

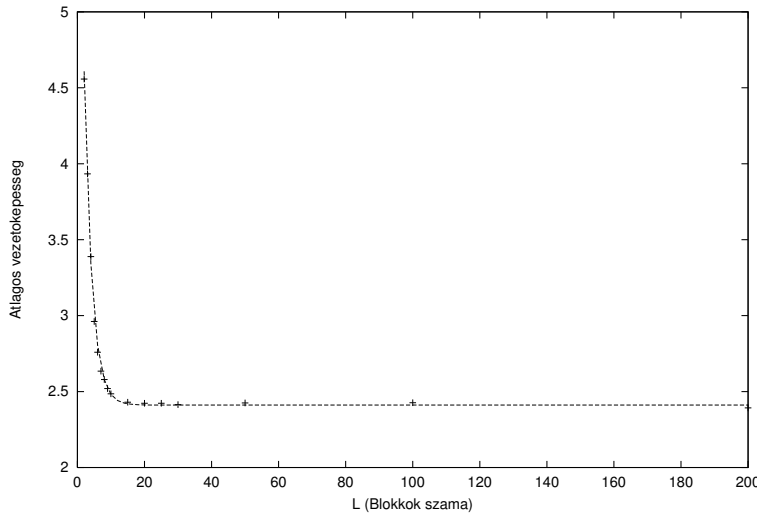
$$g_N(k_F) = \int_N^{N+1} g(k_F) dk_F \quad (6.1)$$

Ezt a mennyiséget vizsgáltuk numerikusan a rendszerbeli blokkok számában. A 6.3 ábrán láthatóan egy kezdeti, exponenciális csökkenés után állandó vezetőképességet

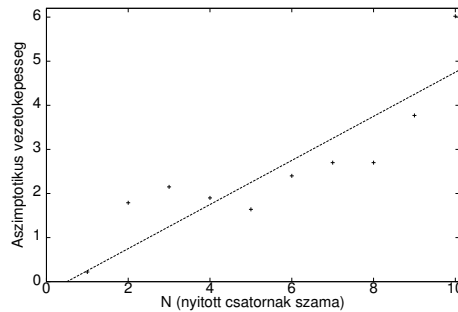
kaptunk. Ezért a következő illesztéssel próbálkoztunk:

$$g_N(L) = (N - g_N^\infty)e^{-L/\xi_N} + g_N^\infty \quad (6.2)$$

A ξ jelentése, hasonló a rendezetlen rendszerekbeli lokalizációs hossz jelentéséhez, azt mondja meg, hogy milyen gyorsan közelíti meg a vezetőképesség az aszimptotikus értéket (g_N^∞).



6.3. ábra. Egy 10 csatornás rendszer 6. lépcsőjére átlagolt vezetőképesség és illesztése a blokkok számának függvényében. Láthatóan egy konstans érték elérése után már nem csökken a vezetőképesség a hossz növelésével ($g_6 = 2.4$ és $\xi_6 = 3.1$ voltak az illesztés paramétere).



6.4. ábra. Az illesztett aszimptotikus vezetőképesség értékek, és az RMT-COE [15] elmélettel kapott egyenes a nyílt módusok függvényében.

Teljesen kaotikus (erős szennyezéseket tartalmazó) rendszer esetén a Random

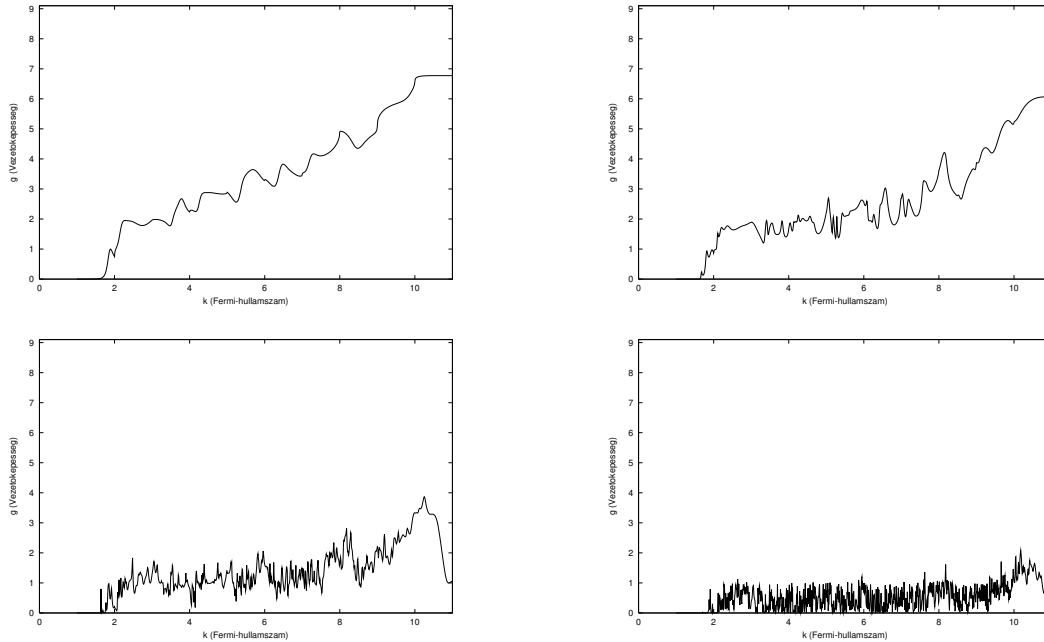
Mátrix Elmélet (RMT-COE) az aszimptotikus vezetőképességre a

$$g_N^\infty \approx N/2 - 1/4 \quad (6.3)$$

jóslatot adja [15]. A 6.4 ábrán az illesztések eredményeképpen kapott aszimptotikus vezetőképességeket rajzoltam ki a nyitott módusok függvényében. Az ábrán látható, hogy viszonylag jól egyeznek ezek az értékek a jóslattal. Az eltérést az okozza, hogy nem elég nagy az energia, így kevés csatorna van nyitva, ami miatt nem elég nagy a csatornák keveredése.

6.2. Rendezetlen rendszer

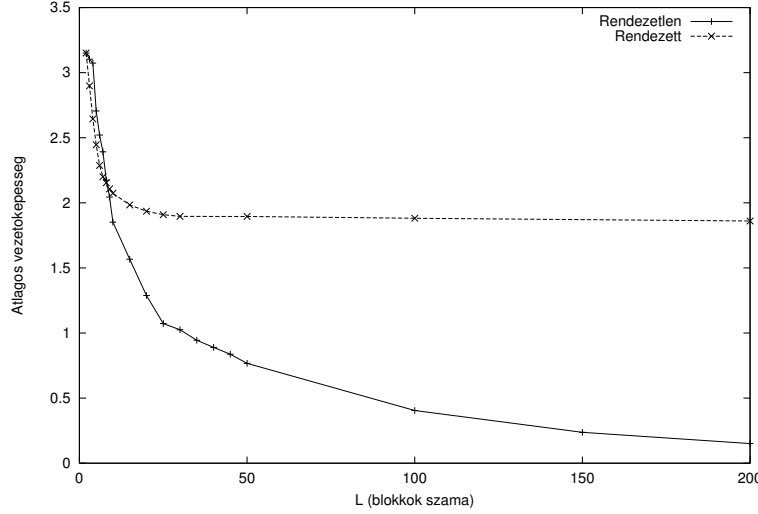
Először nézzük meg most is a blokkok számának növelésével a vezetőképesség alakját a Fermi-energia függvényében. A szennyezetlen rendszer lépcsős szerkezete már kevés (5 – 10) blokk esetén eltűnik, ám nem jelenik meg helyette a rendezett rendszernél látott új szerkezet több (30 – 100) blokk esetén sem.



6.5. ábra. A blokkok számának növelésével nem alakul ki semmilyen szerkezet, csak egy átlagérték körüli erős flutuációk láthatóak. A blokkok száma az ábrán rendre $L = 5, 10, 30, 100$.

A rendezett esethez hasonlóan most is tekintsük az N . lépcsőre (N a nyitott módusok száma) átlagolt vezetőképességet. A 6.6 ábrán egy realizációra látható, hogy a ren-

dezzel ellentétben a vezetőképesség csökkenése itt nem áll be egy konstans értékre, hanem folytatódik, egészen nulláig. Több realizációt megnézve azt lehetett mondani,



6.6. ábra. Az átlagos vezetőképesség a 4.lépcsőn egy realizáció esetén, illetve a rendezett esetben.

hogy a kevés (2 – 20) blokkból álló rendszer vezetőképessége erősen függött a blokkok tényleges sorrendjétől, míg nagyobb blokkszám esetén (50 – 400) már egy önátlagolás lépett fel, nem volt az egyes realizációk között jelentős eltérés. Ezért kis blokkszámoknál több realizációra (12 – 16) átlagoltuk a vezetőképességet.

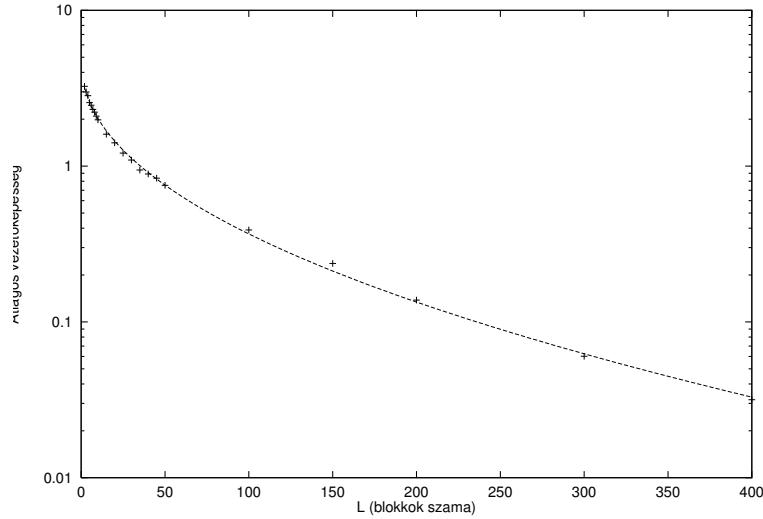
Lognormális skálán nézve az átlagos vezetőképesség-blokkok száma parabolikusnak tűnt, ezért a következő illesztést alkalmaztuk:

$$\ln g_N(L) = -b_N * L^{\gamma_N} + \ln(a_N),$$

amiből a vezetőképességre „stretched exponential” összefüggést kapunk:

$$g_N(L) = a_N e^{-b_N * L^{\gamma_N}}. \quad (6.4)$$

Megcsináltuk ezt az illesztést mind a 10 módusunkra, az illesztett paraméterek hibája 5 – 10% volt. A 6.7 ábrán látható, hogy mennyire jól egyezik az illesztett görbe a számolási eredményekhez. A 6.8 ábrán a lépcsőszám függvényében ábrázoltuk a γ_N paraméter értékét. Ebből a görbéből az $N = 1$ értékre van jóslatunk. A rendszer ilyenkor kvázi egydimenziósnek tekinthető. Ebben az esetben ugyanis nem lép fel az úgynevezett. „bypass”, ami azt jelenti, hogy az elektron nem tudja a szennyezőt



6.7. ábra. Az átlagos vezetőképésre illesztett „stretched exponential” (6.4) a 4.lépcsőn. Az illesztés paramétereit $a_4 = 4.67$, $b_4 = 0.28$ illetve $\gamma_4 = 0.48$ voltak. Az itteni átlagos vezetőképesség értékek már ki vannak a realizációkra is átlagolva.

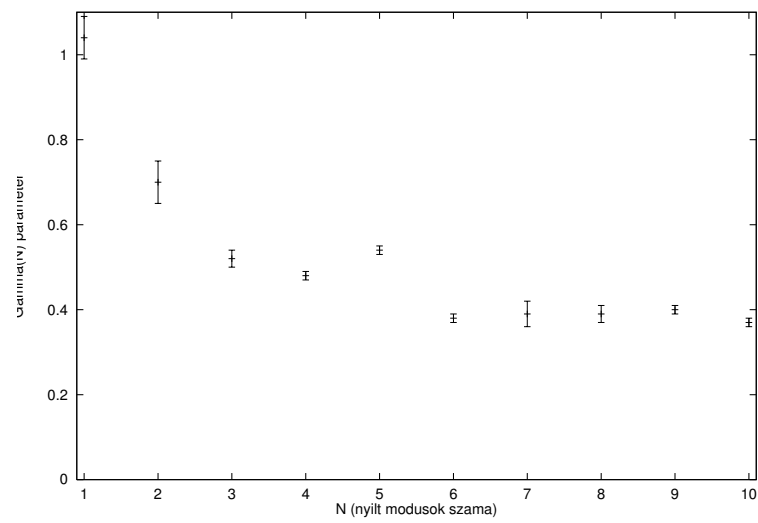
egy másik (nyílt) csatornán keresztül megkerülni. Egydimenzióban pedig ismert, hogy minden rendezetlen rendszerben fellép lokalizáció. Egy sajátállapotot lokalizálnak nevezünk, amikor egy véges tartományon kívül a hullámfüggvény amplitúdója (többnyire exponenciálisan) nullához tart. Transzfermátrix technikával és a Fürstenberg elmélettel belátható a következő alak [25]:

$$\frac{1}{L} \langle \ln |t|^2 \rangle = -\frac{2}{\lambda}, \quad (6.5)$$

ahol L a rendezetlen rendszer hossza, t a transzmissziós függvény, λ pedig a levezetésben kapott állandó, amely a vezetőképesség L -függésében nem játszik szerepet. Figyelembe véve a Landauer-formulát, valamint azt, hogy a rendszerünk hossza arányos a blokkok számával a vezetőképességre exponenciális összefüggést kapunk:

$$g(L) \sim g(0)e^{-b*L/l_0} \quad (6.6)$$

Ez azt jelenti, hogy $\gamma_1 = 1$ ez alapján az elmélet alapján, és mi azt kaptuk, hogy $\gamma_1 = 1.04 \pm 0.05$, ami hibán belül egyezik az elmélet jóslatával. A 6.8 ábrán jól látható, hogy a csatornaszám növelésével a γ_N jelentősen eltér 1-től, lecsökken egy $\gamma_N \approx 0.4$ értékre. Tudomásunk szerint az 1-től eltérő γ_N exponens elméleti értelmezése még hiányzik.



6.8. ábra. A γ_N paraméter függése a lépcsőszámtól (N).

7. fejezet

Összefoglalás

Mezoszkópikus félvezető cső vezetőképességét vizsgáltuk, mágneses tér jelenléte nélkül. Ha a rendszerben kis számú atomi szennyezés van, akkor ezek a kis méretük miatt pontszennyezőnek tekinthetők. A numerikus számolások egyszerűsítése érdekében rácsra helyeztük a problémát, a szennyezőket a rácsponton elhelyezkedő, a Dirac-delta potenciálnak megfelelő Kronecker-deltákkal vettük figyelembe. A rendszer vezetőképességének kiszámítása tisztán kvantummechanikai módszerrel történt, a transzmissziós mátrixelemekből a Landauer-formula adta meg a vezetőképességet. A transzmissziós mátrixelemeket a Green-függvényből a Fisher-Lee relációval határoztuk meg. A dolgozat első részében a rácsra helyezett rendszer vezetőképességére adunk formulát, pontszennyezők tetszőleges eloszlása esetén. Az itt kapott kifejezések segítségével numerikusan meg tudtuk határozni a vezetőképességet 1 – 400 darab pontszennyezőt tartalmazó rendszerekre.

Ezután megvizsgáltuk, hogy a rács modellben számolt vezetőképesség mennyiben ad a már ismert folytonos eredményekhez hasonlót. Azt találtuk, hogy van egy effektus (a csatornák lezáródása bizonyos energia felett), amely a folytonos rendszerekben nem lépett fel, egyébként a folytonos esetből ismert jelenségeket reprodukálta. Ez az egy különbség is eltűnt a folytonos határesetben.

Végül kvázi-periodikus láncokat kezdtünk vizsgálni. Egydimenzióban analitikus megoldást adtunk a vezetőképességre, tetszőlegesen sok periodikusan elhelyezett, egyforma nagyságú szennyező esetén. Ezen a megoldáson látszott, hogy már kevés azonos blokkot elhelyezve megjelenik a végtelen sok blokkot tartalmazó rendszer vezetőképességét jellemző gapes szerkezet. A gapeken olyan energiatartományokat értettünk, ahol nem volt vezetés. Kétdimenzióban véges, periodikus rendszer esetén láttuk, hogy a rendszer hosszának növelésével a szennyezőtlen rendszer vezetőképességére jellemző lépcsős szerkezet átalakul a végtelen periodikus rendszerre jellemző szerkezetűvé. Azt is meg lehetett figyelni, hogy az egy lépcsőre átlagolt vezetőképesség egy állandó értékhez tart a rendszerbe helyezett blokkok számának növelésével. A kapott eredmények jól egyeztek a Random Mátrix Elméletből [15] kapottakkal. Amikor a kvázi periódicitást elrontottuk azzal, hogy az egyes blokkokban a szennyező helye véletlenszerűen változott, akkor azt találtuk, hogy a vezetőképesség nullához tartott a hosszúsággal. A vezetőképesség L -függésére egy „stretched exponential” összefüggést (6.4) kaptunk. Itt a γ_N exponensre $N > 1$ csatorna esetén az elméletileg jóslott $\gamma_N = 1$ értéktől jelentős eltérést kaptunk.

Irodalomjegyzék

- [1] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge Univ. Press, 1997).
- [2] C. W. Beenakker, H. van Houten in *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull (Academic, New York, 1991), Vol. 44, pp. 1-228.
- [3] Yu. V. Sharvin, N. I. Bogatina, Sov. Phys. JETP., **29**, 419 (1969).
- [4] B. J. van Wees *et al.*, Phys. Rev. Lett., **60**, 848 (1988).
- [5] D. Wharam *et al.*, J. Phys. C **21**, L209 (1988).
- [6] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957); Phys. Mag. **21**, 863 (1970).
- [7] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).
- [8] D. C. Langreth and E. Abrahams, Phys. Rev. B **24**, 2978 (1981).
- [9] P. W. Anderson, Phys. Rev. B **23**, 4828 (1981).
- [10] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986); M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer and S. Pinhas, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- [11] H. U. Baranger and A. D. Stone, Phys. Rev. B **40**, 8169 (1989).
- [12] D. S. Fisher and P. A. Lee Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981) .
- [13] A. Shudo, Y. Shimizu, P. Šeba, J. Stein, H-J. Stöckmann and K. Życzkowski, Phys. Rev. E **49**, 3748 (1994).
- [14] P. Šeba, Phys. Rev. Lett. **64**, 1855 (1990).

- [15] H. Baranger and P. Mello, *Europ. Lett.* **33**, 465 (1996).
- [16] J. Cserti, G. Szálka and G. Vattay, *Phys. Rev. B* **57**, R15 092 (1998).
- [17] G. Vattay, J. Cserti, G. Palla and G. Szálka, *Chaos, Solitons & Fractals* **8**, 1031 (1997).
- [18] Szálka Gergely diplomamunka (ELTE, 1998).
- [19] C. Grosche, *Ann. Physik* **2**, 557-589 (1993).
- [20] www.netlib.org
- [21] Rózsa Pál: *Lineáris algebra és alkalmazásai* (Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976).
- [22] D. W. L. Sprung, Hua Wu and J. Martorell, *Am. J. Phys.* **61**, 1118 (1993).
- [23] D. J. Griffiths and N. F. Taussig, *Am. J. Phys.* **60**, 883, (1992).
- [24] J. Cserti, G. Szálka and G. Vattay, *Proceedings of the ICSP*, Wien (1997).
- [25] E. N. Economou in *Springer Series in Solid-State Sciences*, edited by Peter Fulde, (Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York Tokyo, 1983) Vol. 7. pp. 164-172.