

# Inhaltsverzeichnis

<b>5</b>	<b>Leitwert als Streuproblem, Landauer Theorie</b>	<b>2</b>
5.1	Allgemeine Vorbemerkungen . . . . .	2
5.1.1	Typische Längen- und Energieskalen . . . . .	2
5.1.2	Systeme und Technologie . . . . .	5
5.1.3	Zweidimensionales Elektronengas . . . . .	6
5.1.4	Zustandsdichte . . . . .	7
5.1.5	Leitfähigkeit . . . . .	8
5.2	Boltzmann Transporttheorie . . . . .	9
5.2.1	Boltzmann-Gleichung . . . . .	9
5.2.2	Boltzmann-Leitfähigkeit . . . . .	11
5.2.3	Diffusiver Transport . . . . .	12
5.2.4	Sharvin-Leitwert eines Punktkontaktes . . . . .	13
5.3	Leitwert eines 1-dimensionalen Leiters . . . . .	14
5.3.1	Leitwertquantisierung . . . . .	14
5.3.2	Barrieren im Leiter . . . . .	15
5.3.3	Die Formel von Landauer, 2-Punkt- gegen 4-Punkt-Messung . . . . .	16
5.4	Multikanalproblem . . . . .	17
5.5	Adiabatische Einschnürung . . . . .	18
5.6	Multi-Kontakt-Systeme . . . . .	20
5.7	S-Matrix für Streuung . . . . .	22
5.7.1	Reihenschaltung . . . . .	26
5.7.2	Reihenschaltung für viele Kanäle . . . . .	28
5.8	Resonantes Tunneln . . . . .	29
5.9	Übergang von kohärentem nach klassischem Verhalten . . . . .	31
5.10	Anderson Lokalisierung . . . . .	33

# Kapitel 5

## Leitwert als Streuproblem, Landauer Theorie

### 5.1 Allgemeine Vorbemerkungen

#### 5.1.1 Typische Längen- und Energieskalen

Wir wollen uns in diesem einführenden Kapitel zuerst mit den interessanten Längen- und Energieskalen beschäftigen, um den Bereich der mesoskopischen Systeme eingrenzen zu können. Wir werden Metalle und Halbleiter betrachten und uns die Herstellung von Heterostrukturen näher ansehen. Wir werden Konzepte wie die Zustandsdichte einführen und in verschiedenen Dimensionen vergleichen.

Wir beschäftigen uns in dieser Vorlesung vorwiegend mit *metallischen* oder *halbleitenden* Festkörpern. Die kleinste für uns relevante Längenskala ist der Abstand zweier Atome im Festkörper, der eine *atomare Längenskala* definiert. Diese liegt zwischen 1-3 Å. Die Leitungselektronen im Metall oder im dotierten Halbleiter besetzen auf Grund des Pauli Prinzips Zustände bis zur Fermienergie, die (im nahezu freien Elektronenmodell) mit dem Fermiimpuls verknüpft ist  $E_F = p_F^2/2m$ . Das Inverse des Fermiimpulses ist die Fermiwellenlänge  $\lambda_F = h/p_F$ . Diese liegt im Bereich von 1-100 nm. Der Transport von Leitungselektronen wird durch Verunreinigungen (Fremdatome, Fehlstellen, ...) oder Phononen gestört. Die Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den Verunreinigungen ist i.A. *elastisch*, die mit Phononen dagegen *inelastisch*. Eine wichtige Größe zur Charakterisierung des Transports ist die **mittlere freie Weglänge**,  $l_{\text{imp}}$ , auf der im Mittel kein Stoß stattfindet.

In mesoskopischen Systemen spielt die Systemgröße  $L$ , z.B. die Ausdehnung einer Metallinsel oder die Länge eines Drahts zwischen zwei Kontakten, eine qualitativ wesentliche Rolle. Z.B ist sie zu vergleichen mit der mittleren freien Weglänge. Ist die mittlere freie Weglänge viel größer als  $L$ , so ist der Transport *ballistisch*, im umgekehrten Fall ist der Transport *diffusiv*.

Elastische Stöße führen zu zufälligen aber, da die Störstellen statisch sind, bei wiederholten Experimenten reproduzierbaren Änderungen der Elektronenzustände und Trans-

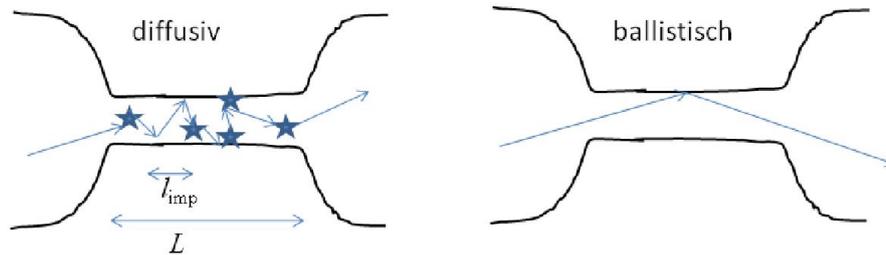


Abbildung 5.1: Vergleich zwischen diffusivem und ballistischem Transport zwischen zwei Reservoiren.

porteeigenschaften. Sie hängen von der Konfiguration der Störstellen ab und sind daher spezifisch für die Probe (Fingerabdrücke). Inelastische Streuungen führen aber im Allgemeinen zu unkontrollierbaren Phasenverschiebungen der Elektronenwellenfunktion, man sagt, die Phasenkohärenz wird zerstört. Die typische Längenskala, auf der die Phasenkohärenz zerstört wird, heißt **Phasenkohärenzlänge**  $L_\phi$ . Die Phasenkohärenzlänge ist eine wichtige mesoskopische Längenskala. Systeme von sehr kleinen, mesoskopischen Ausdehnungen, wo die Quantennatur und Phasenkohärenz beobachtbar sind, nennt man daher Quantenfallen, Quantentöpfe, Quantenpunkte, Quantendrähte usw.

In *makroskopischen* Systemen spielen phasenkohärente Effekte keine Rolle. Sie sind charakterisiert durch lokale Gleichgewichte. Solche Systeme spielen im Folgenden eine wichtige Rolle als thermodynamische *Reservoirs* für mesoskopische Systeme.

Im folgenden eine Tabelle mit wichtigen mesoskopischen Längenskalen:

1 Å=0.1 nm	Abstand zwischen Atomen
1 nm	Fermiwellenlänge in Metallen
1nm-10nm	mittlere freie Weglänge in diffusiven Metallen
10nm	mittlere freie Weglänge in polykristallinen Metallfilmen
10 nm-100 nm	Fermiwellenlänge in Halbleitern
20 nm-1 μm	kommerzielle Halbleiterbauelemente
10 μm	Phasenkohärenzlänge in sauberen Metallfilmen
100 μm	mittlere freie Weglänge und Phasenkohärenzlänge in Halbleitern mit hohen Mobilitäten, bei $T < 4$ K
1mm	mittlere freie Weglänge in Quanten-Hall-Systemen

### Typische Energieskalen

Im Allgemeinen kann man sagen, dass physikalische Abläufe in mesoskopischen Systemen durch um so größere Energieskalen charakterisiert sind, je kleiner die damit assoziierte Längenskala ist. Die typische mikroskopische Energieskala ist die atomare Energieskala von 1-10eV. Sie gibt z.B. den Abstand atomarer Energieniveaus voneinander in verschiedenen Schalen an. Die Fermienergie in Metallen,  $E_F$ , ist typischerweise von der Größenordnung 0.5-5 eV.

Eine wichtige Energieskala in mesoskopischen Systemen ist die **Ladungsenergie**,  $E_c = e^2/2C$ , die durch die Kapazität  $C$  der metallischen Probe bestimmt wird. Mit sinkender Kapazität wird die Ladungsenergie größer, und im mesoskopischen Bereich kann sie zur sogenannten Coulomb-Blockade des Transports führen.

Eine weitere Energieskala, die mit der Ausdehnung des Systems in Verbindung steht, ist die sogenannte **Thouless-Energie**,  $E_0$ . Sie steht mit einer Zeitskala  $t_0 = \hbar/E_0$  in Verbindung, die angibt, wie lange ein Leitungselektron typischerweise braucht, um die Länge  $L$  zu durchqueren. In ballistischen Systemen ist  $E_0 = \hbar v_F/L$ , wobei die Geschwindigkeit der Leitungselektronen durch die Fermigeschwindigkeit  $v_F$  gegeben ist. In diffusiven Systemen gilt  $E_0 = \hbar D/L^2$ , wobei die Diffusionskonstante  $D = v_F l_{imp}/\tau$  (für  $\tau$  Dimensionen) den Transport charakterisiert.

In atomaren Systemen spielt der **Abstand zweier Energieniveaus**  $\delta$  eine wichtige Rolle. In makroskopischen Systemen ist diese Aufspaltung nicht auflösbar, in mesoskopischen Systemen kann sie jedoch vergleichbar werden mit anderen Größen.

Inelastische Prozesse und weitere, die die Phasenkohärenz zerstören, führen zu einer **Verbreiterung** eines Energieniveaus, charakterisiert durch den Parameter  $\gamma$ . Damit Phasenkohärenz vorliegen kann, muss  $\delta$  größer sein als  $\gamma$ .

Makroskopisch	Mesoskopisch	Mikroskopisch
Festkörper, Flüssigkeiten, Gase	Nanostrukturen (i.A. künstlich hergestellt)	Atome, Moleküle
$N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty$ $n = N/V = \text{konstant}$	$L \sim 10\text{-}100 \text{ nm}$ $N \gg 1$	$N \sim 1$ $L \sim 1 \text{ \AA}$
lokales Gleichgewicht z.B. Spannungsabfall im Leiter $\vec{j} = \sigma \vec{E}; \vec{E} = -\vec{\nabla}U$ materialspezifische Leitfähigkeit $\sigma$ $I = G U; G \equiv 1/R = A\sigma/L$	Gleichgewicht nur in Reservoiren $I = G U$ Leitwert $G$  $G$ hängt von ganzer Probe ab	Quantenmechanik
Ensemble-Mittelung Selbstmittelung rel. Flukt. $\delta N/N \sim 1/\sqrt{N} \rightarrow 0$	Probenspezifische Schwankungen (Fingerprint) z.B: Magnetowiderstand $R(B)$	keine statistischen Schwankungen
Keine Phasenkohärenz: $L_\phi \ll L$	partiell phasenkohärent $L_\phi \lesssim L$	qm. phasenkohärent $L_\phi > L$
mittl. Niveauabstand: $\delta \rightarrow 0$	$\gamma \lesssim \delta \ll E_F$	$\delta \gg \gamma$
Thouless-Energie: $E_0 \rightarrow 0$	$E_0 > \delta$	keine sinnvolle Größe

## 5.1.2 Systeme und Technologie

### Metalle und Halbleiter

Für Metalle ist die Elektronendichte  $n \approx 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , und die Fermi-Wellenlänge  $\lambda_F \sim 3 \text{ \AA}$ . Die Fermienergie  $E_F$  liegt innerhalb eines Bandes.

Für Halbleiter gilt  $n \approx 10^{15} - 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  und  $\lambda_F \simeq 100 \text{ nm}$ .  $E_F$  liegt in der Bandlücke, kann aber durch Dotieren an die Kante des Leitungsbandes (n-leitend) oder des Valenzbandes (p-leitend) verschoben werden. Die Krümmung des Bandes an der Kante definiert die effektive Masse der Ladungsträger. Wenn das Maximum des Valenzbandes im  $\vec{k}$ -Raum unter dem Minimum des Valenzbandes liegt, spricht man von einer direkten Lücke. Bei Si sind sie verschoben, und man spricht von einer indirekten Lücke. Typische Parameterwerte sind in der Tabelle angegeben.

	GaAs	Si
$m^*/m_e$	0.067	0.19
$\lambda_F$	40 nm	100 nm
$l_{\text{imp}}$	$10^2 - 10^4 \text{ nm}$	$\sim 100 \text{ nm}$
$L_\phi$	200 nm $\sqrt{k_B/T}$ direkte Lücke	40 – 400 nm $\sqrt{k_B/T}$ indirekte Lücke

## Herstellung von Heterostrukturen

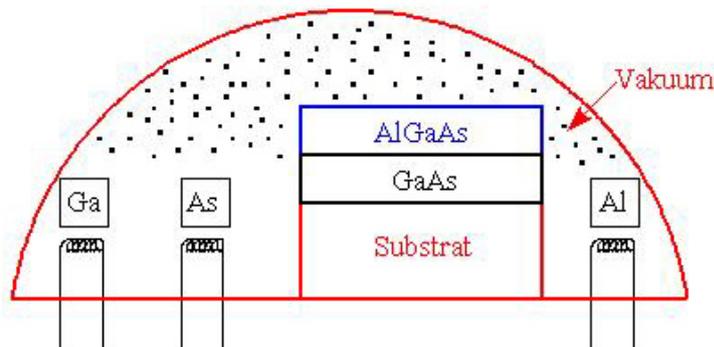


Abbildung 5.2: Bei Molekularstrahlepitaxie werden Materialien auf das Substrat aufgedampft.

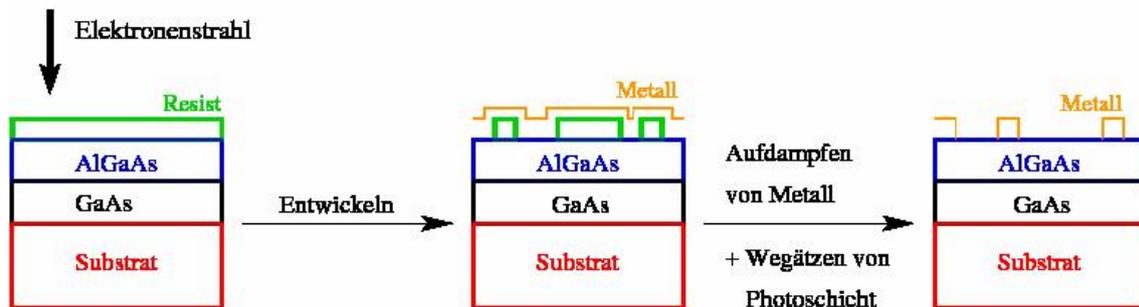


Abbildung 5.3: Mit Hilfe der Elektronenstrahl-Lithographie wird eine laterale Strukturierung erzeugt.

Bei der Elektronenstrahl-Lithographie wird zunächst ein elektronensensitiver Film eines “Resist”-Materials, z.B. das Polymer PMMA, auf ein Trägermaterial aufgebracht (Abb. 5.2). Danach wird ein fokussierter Elektronenstrahl über die Probe bewegt, um selektiv das geplante Muster der Nanostruktur auf den Film zu schreiben.

Der Film wird daraufhin entwickelt, die bestrahlten Bereiche verschwinden und legen das Trägermaterial frei. Beim Metall-lift-off-Verfahren (Abbn. 5.3 und 5.4) wird daraufhin die Probe mit Metall bedampft und schließlich der restliche Resist in einem Lösungsmittel aufgelöst. Das darüberliegende Metall kann dann durch den Lift-off-Schritt entfernt werden, und nur die metallische Nanostruktur bleibt zurück. Eine Alternative ist, erst eine Metallschicht aufzudampfen, dann den Resist, und nach Bestrahlung mit Elektronen und Entwickeln die freigelegten Metallbereiche mit z.B. Chlor-Ionen wegzuzüßen (Abb. 5.4).

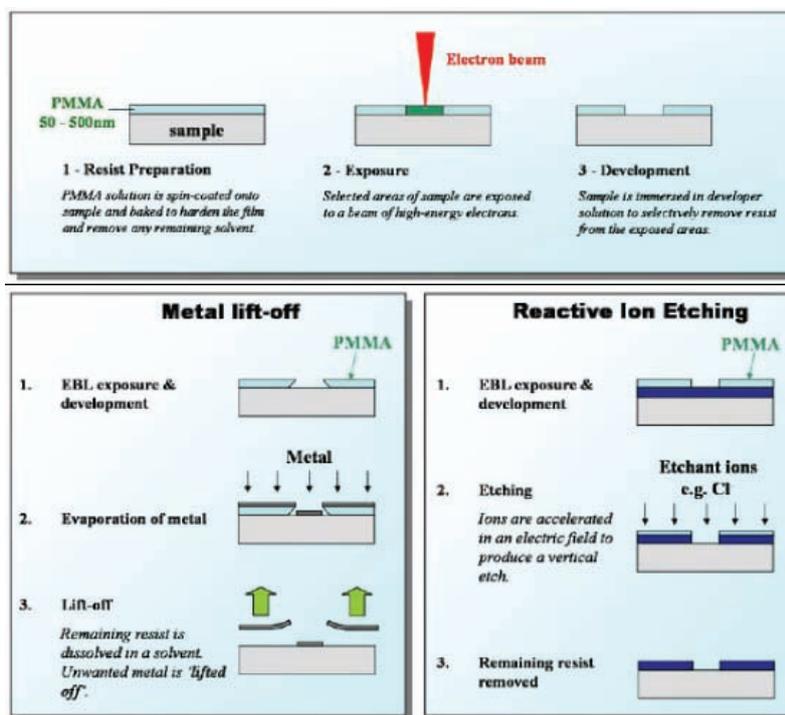


Abbildung 5.4: Der Prozess der Elektronenstrahl-Lithographie. (Quelle: <http://www.shef.ac.uk/eee/research/ebel/principles.html>)

### 5.1.3 Zweidimensionales Elektronengas

An der AlGaAs/GaAs Grenzschicht kann es zur Ausbildung eines zweidimensionalen Elektronengases (2DEG) kommen. An der Grenze im GaAs variiert die Unterkante des Valenzbandes ungefähr linear mit dem Abstand, den wir mit  $z$  bezeichnen. D.h. es bildet sich approximativ ein Dreieckspotenzial  $V(z) = a + bz$  für  $z \geq 0$  und  $V(z) = \infty$  für  $z < 0$  aus. Dagegen hängt das Potenzial nicht von  $x$  und  $y$  ab. In diesem Potenzial sind die quantenmechanische Zustände lokalisiert in  $z$ -Richtung und ebene Wellen in der  $x - y$ -Ebene,

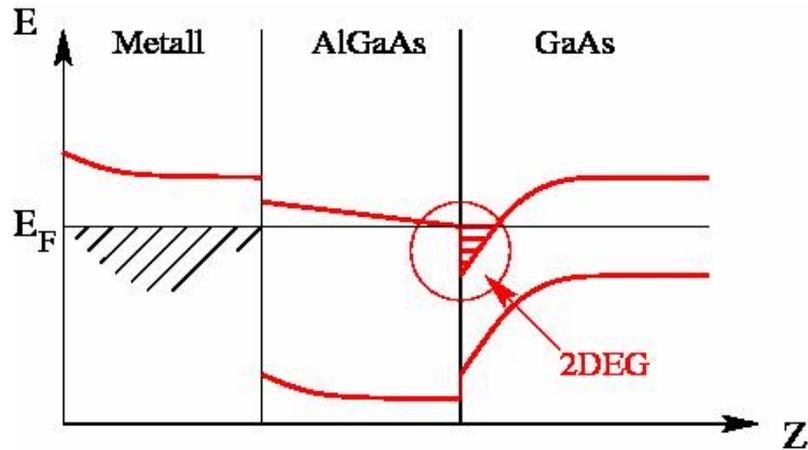


Abbildung 5.5: Beispiel einer Heterostruktur, die ein zweidimensionales Elektronengas (2DEG) ergibt.

d.h.

$$\psi(\vec{r}) = e^{i(k_x x + k_y y)} \varphi_n(z) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

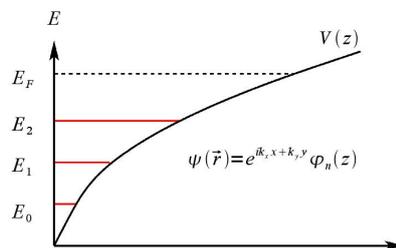


Abbildung 5.6: Energien der Eigenzustände im Dreieckspotenzial  $V(z)$ .

Bei genügend niedriger Fermienergie gibt es nur einen in  $z$ -Richtung gebundenen Zustand mit  $n = 0$ . Dann ist das System zweidimensional. Mit wachsender Fermienergie gibt es mehr gebundene Zustände, und das System wird quasi-zweidimensional und schließlich dreidimensional.

Durch die laterale Strukturierung z.B. mit Hilfe der Elektronenstrahlolithographie lassen sich im 2DEG weitere Strukturen definieren. Z.B. wird das 2DEG unter negativ geladenen Metallstrukturen auf der Oberfläche weggedrängt, und es lassen sich quasi-eindimensionale Leiter herstellen. Bei geringer Breite und Fermienergie gibt es nur einen in  $x$ -Richtung am Rande verschwindenden Zustand  $\chi_0(x)$ .

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikx} \chi_0(x) \varphi_0(z)$$

Mit zunehmender Breite oder Energie nimmt die Zahl der Zustände zu ( $\lambda = l, \infty, \epsilon, \dots$ ), und man geht zu einer quasi-eindimensionalen und schließlich zweidimensionalen Situation über.

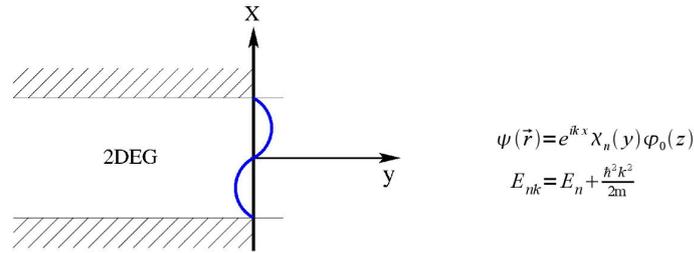


Abbildung 5.7: Durch laterale Strukturierung lassen sich auch eindimensionale oder quasi-eindimensionalen Strukturen erzeugen.

### 5.1.4 Zustandsdichte

In einem n-dimensionalen Elektronengas können sich die Elektronen in allen n Dimensionen frei bewegen. Im 3-dimensionalen Fall spricht man auch von einem "Bulk", im 2-dimensionalen von einem "Quantenwell" und im 1-dimensionalen von einem Quantendraht. Der 0-dimensionale Fall wird als Quantenpunkt bezeichnet.

Die physikalische Größe der *Zustandsdichte*  $N(E)$  gibt an, wie viele Zustände sich pro Spin in einem Energieintervall  $[E, E + dE]$  im Volumen  $V$  (Fläche  $A$ , Länge  $L$ ) befinden. Sie genügt, wenn eine Funktion  $g(E)$ , die nur von der Energie abhängt, über alle Wellenvektoren summiert werden soll. (Beispiele sind  $g(E) = 1$ , um die Anzahl der Zustände zu berechnen oder  $g(E) = E$ , um die innere Energie zu bestimmen.)

#### 3-dimensional:

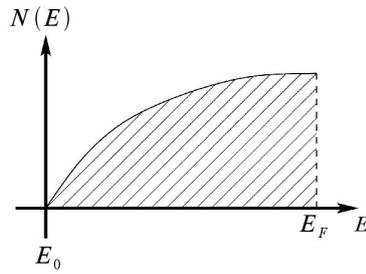
Ausgehend von  $E_p = \frac{p^2}{2m} + E_0$ ;  $E_0 \geq 0$ ;  $dE = \frac{p}{m} dp$  berechnen wir die folgende Summe einer Größe, die nur von der Energie abhängt:

$$\begin{aligned} \sum_p g(E_p) &= V \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} g(E_p) = \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \int_0^{\infty} p^2 dp g(E_p) \\ &= \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \int_{E_0}^{\infty} dE m \sqrt{2m(E - E_0)} g(E) \\ &= V \int_{E_0}^{\infty} dE N^{3d}(E) g(E) \end{aligned}$$

Durch Vergleich finden wir die Zustandsdichte (pro Volumen)

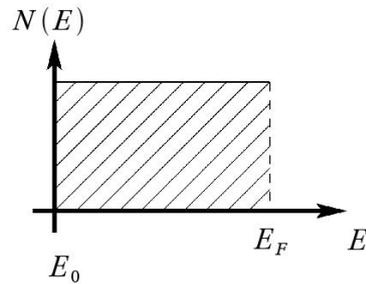
$$N^{3d}(E) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{2m(E - E_0)} \Theta(E - E_0)$$

#### 2-dimensional:



$$\begin{aligned} \sum_p g(E_p) &= A \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} g(E_p) \\ &= \frac{2\pi A}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \int_0^{\infty} p \, dp \, g(E_p) = \frac{A \, m}{2\pi\hbar^2} \cdot \int_{E_0}^{\infty} dE \, g(E) \\ &= A \cdot \int_0^{\infty} dE N^{2d}(E) g(E) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow N^{2d}(E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot \Theta(E - E_0)$$



**1-dimensional:**

$$\sum_p g(E_p) = L \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} g(E_p) = L \cdot \int_0^{\infty} dE \, N^{1d}(E) g(E)$$

$$\Rightarrow N^{1d}(E) = \frac{m}{\pi\hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{2m(E-E_0)}} \cdot \Theta(E - E_0)$$

**quasi-2-dimensional:**

Beim Übergang vom 2DEG zu drei Dimensionen spielen mehrere Zustände in  $z$ -Richtung eine Rolle. Die entsprechenden Zustandsdichten addieren sich auf. Asymptotisch ergibt sich die 3-dimensionale Zustandsdichte.

**quasi-1-dimensional:**

Analog gibt es bei Leitern endlicher Breite einen Übergang von 1 zu 2 Dimensionen.

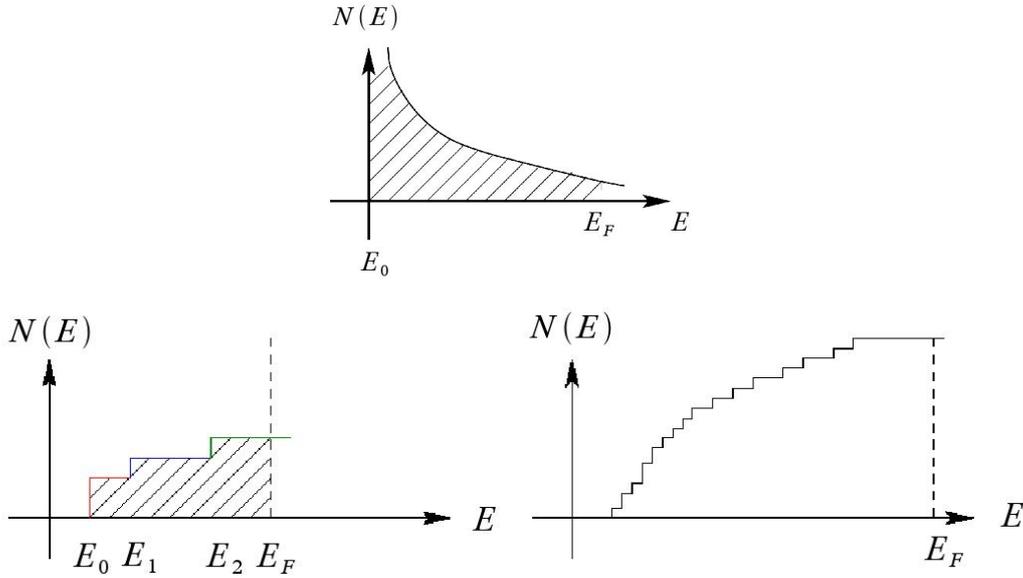


Abbildung 5.8: Energien und Zustandsdichte eines quasi-2-dimensionalen Systems

Allgemein gilt in  $d$  Dimensionen

$$N^d(E) = \sum_n \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \delta(E - E_n(\vec{k}))$$

### 5.1.5 Leitfähigkeit

Die elektrische Leitfähigkeit  $\sigma$  gibt die Fähigkeit der Leitung elektrischen Stromes an. Sie ist im klassischen Sinn des Ohmschen Gesetzes als Proportionalitätskonstante zwischen der Stromdichte  $\vec{j}$  und dem elektrischen Feld  $\vec{E}$  definiert. Für räumlich und zeitlich konstantes Feld gilt  $\vec{j} = \hat{\sigma} \vec{E}$ . Bei einem orts- und zeitabhängigen Feld wird dies nach Fouriertransformation zu  $\vec{j}(\vec{q}, \omega) = \hat{\sigma}(\vec{q}, \omega) \cdot \vec{E}(\vec{q}, \omega)$ . I.a. ist dabei die Leitfähigkeit  $\hat{\sigma}(\vec{q}, \omega)$  bei anisotropen Materialien ein Tensor. Oft reicht aber zur Beschreibung ein Skalar.

#### Drude-Leitfähigkeit

Das Drude-Modell beschreibt klassisch den Ladungstransport in Metallen. Es geht dabei von einem idealen Elektronengas aus, das sich in einem Kristall bewegen kann und verantwortlich für die Stromleitung ist. Wird ein äußeres elektrisches Feld angelegt, so werden die Elektronen beschleunigt, bis sie durch einen Streuprozess nach der Zeit  $\tau$  wieder abgebremst werden.

$$\vec{j} = n \cdot e \cdot \vec{v}$$

$$\dot{\vec{p}} = m\dot{\vec{v}} = e\vec{E} - \frac{m}{\tau}\vec{v}$$

Hier ist  $n$  die Elektronendichte und  $v$  die Elektronengeschwindigkeit. Die innerhalb der Zeit  $\tau$  zurückgelegte Wegstrecke bezeichnet man als mittlere freie Weglänge,  $l = v \cdot \tau$ .

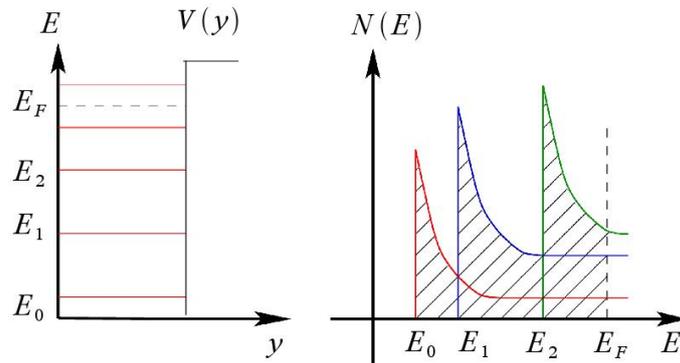


Abbildung 5.9: Zustände und Zustandsdichte eines quasi-1-dimensionalen Systems

Somit lässt sich die Drude-Leitfähigkeit für Gleich- und Wechselstrom berechnen.

**Gleichstrom:**  $\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E} = \sigma\vec{E} \quad \Rightarrow \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$

**Wechselfelder:**  $\vec{j}(\omega) = \frac{ne^2}{m(\frac{1}{\tau} + i\omega)}\vec{E}(\omega) \quad \Rightarrow \quad \sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m(1 + i\omega\tau)}$

## 5.2 Boltzmann Transporttheorie

Der folgende Abschnitt stellt eine kurze Wiederholung der Boltzmann Transporttheorie von Kapitel III dar mit einigen Ergänzungen zum diffusiven Verhalten. In der Vorlesung wurde dies nicht wiederholt.

### 5.2.1 Boltzmann-Gleichung

Die Boltzmann-Gleichung beschreibt die statistische Verteilung von Teilchen in einem Medium. Die zentrale Größe ist  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ , die Verteilungsdichte von Elektronen am Ort  $\vec{r}$  mit Impuls  $\vec{p}$  zur Zeit  $t$ . Im Gleichgewicht wird sie durch die Fermiverteilung

$$f^0(E_p) = \frac{1}{e^{\frac{E_p - \mu}{k_B T}} + 1}$$

beschrieben. Die Dichte und Stromdichte berechnen sich aus  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  durch Summation über alle Impulse zu

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \sigma} f(\vec{r}, \vec{p}, t)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \sigma} \frac{e}{m} \vec{p} f(\vec{r}, \vec{p}, t),$$

wobei  $e = -|e|$  die Elektronenladung ist, und die Gruppengeschwindigkeit durch  $\vec{v}_p = \vec{\nabla}_p E_p$  definiert ist.

Wenn sich die Elektronen unter dem Einfluss eines äußeren Feldes  $\vec{E}$  bewegen, ändert sich die Verteilungsfunktion im Phasenraum gemäß

$$\left( \partial_t + \frac{\vec{p}}{m} \nabla_{\vec{r}} + e \vec{E} \nabla_{\vec{p}} \right) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (5.1)$$

Das Stoßintegral auf der rechten Seite beschreibt die Änderung der Verteilungsfunktion durch Stöße. Gründe können elastische Streuung an Störstellen, inelastische Streuung an Phononen oder anderen Elektronen sein

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \left[ \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{imp}} \right]_{\text{elastisch}} + \left[ \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{el-ph}} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{el-el}} \right]_{\text{inelastisch}}$$

Die Berechnung des entsprechenden Stoßintegrals erfolgt in der Regel im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie. Details sind in der Literatur beschrieben. Hier geben wir als Beispiel das Ergebnis für Störstellenstreuung an Störstellen mit Dichte  $n_{\text{imp}}$  und Wirkungsquerschnitt  $\sigma(\vartheta_{\vec{p}, \vec{p}'})$  für Streuung von der Richtung  $\vec{p}$  im Impulsraum in die Richtung  $\vec{p}'$  an

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{imp}} &= -n_{\text{imp}} v_F \int d\Omega_{\vec{p}'} \sigma(\vartheta_{\vec{p}, \vec{p}'}) [f(\vec{p}) - f(\vec{p}')] \\ &= -\frac{1}{\tau_{\text{imp}}} f(\vec{p}) + n_{\text{imp}} v_F \int d\Omega_{\vec{p}'} \sigma(\vartheta_{\vec{p}, \vec{p}'}) f(\vec{p}') \Big|_{\epsilon_{\vec{p}'} = \epsilon_{\vec{p}}} \end{aligned} \quad (5.2)$$

mit

$$\tau_{\text{imp}}^{-1}(\vec{p}) = n_{\text{imp}} v_F \int d\Omega_{\vec{p}'} \sigma(\vartheta_{\vec{p}, \vec{p}'})$$

Bei der s-Wellenstreuung wird diese konstant (isotrop) angenommen. Dann reduziert sich das Stoßintegral auf

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{imp}} = -\frac{1}{\tau_{\text{imp}}} [f(\vec{p}) - \langle f(\vec{p}') \rangle] \quad (5.3)$$

wobei

$$\langle \dots \rangle = \int \frac{d\Omega_{p'}}{4\pi} \dots$$

Man erkennt, dass Störstellenstreuung dazu führt, dass eine beliebige Verteilungsfunktion zu einer isotropen Verteilung relaxiert. Analog kann man zeigen, dass Elektron-Phonon-Streuprozesse die Verteilungsfunktion auf eine thermische Verteilung, d.h. die Fermi-Funktion, reduzieren, wobei die Temperatur die der Phononen ist. Allgemein gilt, dass die Stoßintegrale verschwinden, wenn die Verteilungsfunktion eine lokale thermische Verteilung ist. Dies erlaubt z.B., dass das elektrische Potential einen räumlich variierenden Wert hat, wie wir es für eine klassische Situation erwarten.

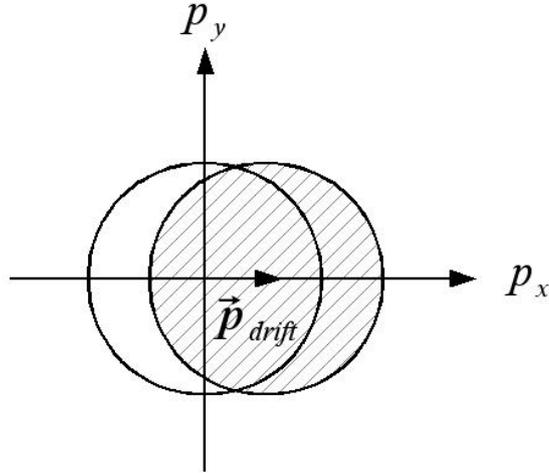


Abbildung 5.10: Verschobene Fermikugel im Impulsraum

Häufig genügt es, für das Stoßintegral einen Relaxationsansatz zu machen

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} \approx -\frac{1}{\tau}\delta f$$

wobei  $\delta f$  die Abweichung vom Gleichgewichtswert bezeichnet, die durch die Stöße zerfällt. Je nach Fragestellung können in dieser einfachen Näherung Erhaltungssätze wie die Teilchenzahlerhaltung verletzt werden, was natürlich ausgeschlossen werden muss. In solchen Fällen muss das Stoßintegral sorgfältiger ausgewertet werden.

### 5.2.2 Boltzmann-Leitfähigkeit

Aus der Boltzmann-Gleichung lässt sich nun die Leitfähigkeit berechnen. Wir betrachten dazu eine stationäre (zeitunabhängige) und räumlich homogene Situation. Ein homogenes angelegtes elektrisches Feld wird die Verteilungsfunktion im Impulsraum verschieben (Abb. 5.10), dagegen wird die Störstellenstreuung die Verschiebung rückgängig machen und die Verteilung relaxieren. Entsprechend machen wir den Ansatz

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) \approx f\left(\epsilon - \frac{1}{m}\vec{p} \cdot \vec{p}_{\text{drift}}\right) \approx f_0 + \delta f$$

wobei  $\vec{p}_{\text{drift}}$  bzw.  $\delta f$  zu bestimmen sind.

Einsetzen des Ansatzes  $f = f_0 + \delta f$  in die Gleichung (5.1) mit dem Stoßintegral (5.3) liefert in erster Ordnung in  $\vec{E}$

$$e\vec{E} \cdot \nabla_p f_0 = -\frac{1}{\tau_{\text{imp}}}\delta f$$

und

$$\delta f = -\tau_{\text{imp}} e \vec{E} \cdot \vec{v}_p \frac{\partial f_0}{\partial E}$$

Damit erhalten wir für die Stromdichte

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= e \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \sigma} \vec{v}_{\vec{p}} [f^0(E_p) + \delta f] \\
&= \tau_{\text{imp}} 2e2 \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{v}_p (\vec{v}_p \cdot \vec{E}) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial E} \right) \\
&= \tau_{\text{imp}} 2e2 \int N(E) dE \left( -\frac{\partial f^0}{\partial E} \right) \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \vec{v}_p (\vec{v}_p \cdot \vec{E})
\end{aligned}$$

Da die Ableitung der Fermifunktion  $-\partial f^0/\partial E$  für tiefe Temperaturen an der Fermikante einen scharfen Peak aufweist und weg davon verschwindet, kann die Energieintegration leicht durchgeführt werden mit dem Ergebnis, dass alle Energien und Geschwindigkeiten die Werte an der Fermiekante annehmen. Die Winkelintegration läßt sich ebenfalls leicht durchführen und liefert einen Faktor  $1/3$ . Für Stromdichte und Leitfähigkeit folgt damit

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= 2e^2 N(E_F) \frac{v_F^2}{3} \tau_{\text{imp}} \vec{E} = \sigma \vec{E}, \\
\sigma &= 2e^2 N(E_F) D.
\end{aligned}$$

Hier ist  $D = \frac{v_F^2}{3} \tau_{\text{imp}}$  die Diffusionskonstante. Setzen wir noch die bekannten Ausdrücke für Zustandsdichte und Ladungsdichte ein, erhalten wir das bekannte Ergebnis  $\sigma = ne^2 \tau_{\text{imp}}$ .

### 5.2.3 Diffusiver Transport

Wir betrachten eine Situation, für die die Störstellenstreurate  $\tau_{\text{imp}}^{-1}$  sehr groß ist. Dadurch wird eine im Impulsraum anisotrope Verteilungsfunktion schnell relaxieren, allerdings ändert sich die Energie dabei nicht. Wir führen nun neue Variablen ein, die Energie  $E = E_p + U(\vec{r})$  und die Richtung des Impulses  $\hat{p}$ , die dies berücksichtigen. Für diese Funktion  $\tilde{f}(\vec{r}, E = E_p + U(\vec{r}), \hat{p}, t) = f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  gilt

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \nabla_r + \dot{\vec{p}} \nabla_p \right) \tilde{f}(\vec{r}, E, \hat{p}, t) &= \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \nabla_r + \frac{\vec{p}}{m} (\nabla_r U) \frac{\partial}{\partial E} + (-\nabla_r U) \left[ \frac{\partial E_p}{\partial \vec{p}} \frac{\partial}{\partial E} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \vec{e}_{\theta_p} \frac{1}{p} \frac{\partial}{\partial \theta_p} + \vec{e}_{\phi_p} \frac{1}{p \sin(\theta_p)} \frac{\partial}{\partial \phi_p} \right] \right) \tilde{f}(\vec{r}, E, \hat{p}, t) \\
&= \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \nabla_r \right. \\
&\quad \left. + (-\nabla_r U) \left[ \vec{e}_{\theta_p} \frac{1}{p} \frac{\partial}{\partial \theta_p} + \vec{e}_{\phi_p} \frac{1}{p \sin(\theta_p)} \frac{\partial}{\partial \phi_p} \right] \right) \tilde{f}(\vec{r}, E, \hat{p}, t) \\
&= \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{1}{\tau_{\text{imp}}} [\tilde{f} - \langle \tilde{f} \rangle] + \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \right)_{\text{inel}}
\end{aligned}$$

Was die Störstellenstreuung betrifft, haben wir wieder  $s$ -Wellen-Streuung angenommen. Da die Verteilungsfunktion  $\tilde{f}(\vec{r}, E, \hat{p}, t)$  für starke Störstellenstreuung annähernd isotrop ist, entwickeln wir sie nach  $s$ - und  $p$ -Wellen,  $\tilde{f}(\vec{r}, E, \hat{p}, t) = f_0(\vec{r}, E, t) + \hat{p} \cdot \vec{f}_1(\vec{r}, E, t)$ , und führen die folgenden Schritte durch:

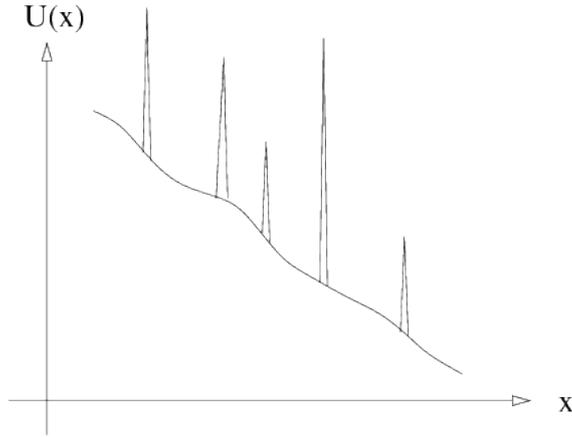


Abbildung 5.11: Möglicher Verlauf des Potentials  $U(\vec{r})$  in einer Dimension. Peaks stellen Störstellen dar.

1. Mittelung der Boltzmann-Gleichung über  $\hat{p}$  mit  $\langle \tilde{f} \rangle = f_0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_0 + \underbrace{\left\langle \frac{\vec{p}}{m} \cdot \nabla_r \tilde{f} \right\rangle}_{=\frac{1}{3} \frac{p_F}{m} \nabla_r \cdot \vec{f}_1} - \underbrace{\left\langle \nabla_r U \left[ \vec{e}_{\theta_p} \frac{1}{p} \frac{\partial}{\partial \theta_p} + \vec{e}_{\phi_p} \frac{1}{p \sin(\theta_p)} \frac{\partial}{\partial \phi_p} \right] \tilde{f} \right\rangle}_{=\frac{2}{3p_F} \vec{f}_1 \cdot \nabla U \quad \text{klein, da } O(E^2)} &= \left\langle \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \right)_{inel} \right\rangle \\ &\approx \left( \frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_{inel} \end{aligned}$$

2. Multiplikation der Boltzmann-Gleichung mit  $\hat{p}$  und anschließende Mittelung

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \left\langle \hat{p} \left( \hat{p} \cdot \vec{f}_1 \right) \right\rangle}_{=\frac{1}{3} \frac{\partial \vec{f}_1}{\partial t} \quad \text{klein, da } \tau_{imp}^{-1} \text{ groß}} + \underbrace{\left\langle \hat{p} \left( \frac{\vec{p}}{m} \cdot \nabla_r f_0 \right) \right\rangle}_{=\frac{1}{3} \frac{p_F}{m} \nabla f_0} &= \underbrace{-\frac{1}{\tau_{imp}} \left\langle \hat{p} \left( \hat{p} \cdot \vec{f}_1 \right) \right\rangle}_{=-\frac{1}{3\tau_{imp}} \vec{f}_1} + \underbrace{\left\langle \hat{p} \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \right)_{inel} \right\rangle}_{\text{klein}} \end{aligned}$$

Diese Gleichung läßt sich näherungsweise nach dem anisotropen Anteil lösen

$$\vec{f}_1 \approx -\tau_{imp} \frac{p_F}{m} \nabla_r f_0.$$

Auf diese Weise erhält man eine geschlossene Gleichung für den isotropen Anteil, die man als Diffusionsgleichung mit dem Diffusionskoeffizienten  $D = \frac{1}{3} v_F^2 \tau_{imp}$  auffassen kann

$$\frac{\partial}{\partial t} f_0 - D \nabla_r^2 f_0 = \left( \frac{\partial f_0}{\partial t} \right)_{inel}.$$

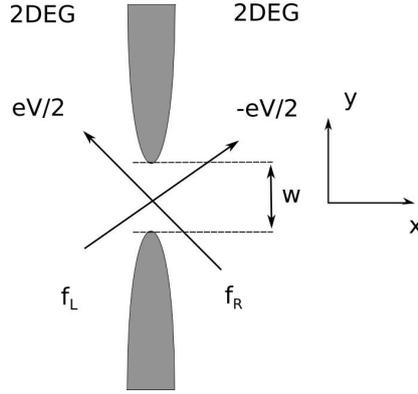


Abbildung 5.12: Ein Punktkontakt in einem 2-dimensionalen Elektronengas

### 5.2.4 Sharvin-Leitwert eines Punktkontaktes

Wir betrachten einen "Punktkontakt" in 2 (oder 3) Dimensionen mit geringer Breite  $W$  (oder Querschnitt  $A$ ). Er verbindet zwei Halbräume (L für  $x < 0$  und R für  $x > 0$ ), an die verschiedene elektrische Potenziale  $\pm eV/2$  angelegt sind. In diesen Reservoiren sind die Verteilungsfunktionen Fermifunktionen mit den entsprechenden elektrochemischen Potenzialen. Elektronen, die durch den Punktkontakt propagieren haben die entsprechende Verteilung. Der Strom für den 2-dimensionalen Fall ist daher

$$\begin{aligned} \vec{j} &= 2e \left[ \int_{p_x > 0} \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \vec{v}_p f_L(E_p) + \int_{p_x < 0} \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \vec{v}_p f_R(E_p) \right] \\ &= 2e \int_{p_x > 0} \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \vec{v}_p [f^0(E_p - eV/2) - f^0(E_p + eV/2)] \end{aligned}$$

Damit wird der Gesamtstrom durch den Punktkontakt

$$I = 2e W \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \cos \varphi \int dE N^{2d}(E) v [f^0(E_p - eV/2) - f^0(E_p + eV/2)]$$

Die Winkelintegration liefert einen Faktor 2, die Energieintegration ist beschränkt auf die Nähe der Fermikante und liefert einen Faktor  $v_F N^{2d}(E_F) eV$ . Somit gilt

$$I = 2e W \frac{2}{2\pi} v_F N^{2d}(E_F) eV = G^{2d} V$$

mit

$$\begin{aligned} G^{2d} &= 2e^2 W \frac{2}{2\pi} v_F N^{2d}(E_F) = 2e^2 W \frac{2}{2\pi} v_F \frac{m}{2\pi\hbar^2} = \frac{W k_F}{\pi} \frac{2e^2}{h} \\ &= \frac{W k_F}{\pi} \frac{2}{R_K} \end{aligned} \tag{5.4}$$

Der erste Term vergleicht die Breite des Kontaktes mit der Fermiwellenlänge. Der zweite Term führt einen "Quantenwiderstand" ein

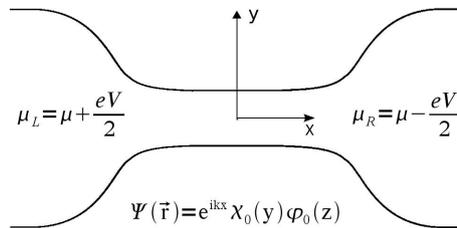
$$R_K = \frac{h}{e^2} = 25,8 \dots k\Omega, \quad (5.5)$$

der auch bei dem von K. von Klitzing gefundenen Quanten-Hall-Effekt eine Rolle spielt.

Für 3 Dimensionen findet man analog  $G^{3d} \sim A k_F^2 2/R_K$ .

## 5.3 Leitwert eines 1-dimensionalen Leiters

### 5.3.1 Leitwertquantisierung



Wir betrachten nun einen eindimensionalen Leiter (im Sinne, dass in die 2 anderen Raumrichtungen die Elektronenwellenfunktionen im Grundzustand sind) zwischen 2 Reservoiren auf den Potenzialen  $\pm eV/2$ . Der Strom ist nun

$$\begin{aligned} I &= 2e \left[ \int_{p_x > 0} \frac{dp}{2\pi\hbar} v_p f_L(E_p) + \int_{p_x < 0} \frac{dp}{2\pi\hbar} v_p f_R(E_p) \right] \\ &= \frac{2e}{2} \int dE N^{1d}(E) v [f^0(E_p - eV/2) - f^0(E_p + eV/2)] \\ &= \frac{2e}{2} \int dE \frac{2}{2\pi\hbar} \frac{1}{dE/dp} \frac{dE}{dp} [f^0(E_p - eV/2) - f^0(E_p + eV/2)] \end{aligned}$$

In der letzten Zeile haben wir die 1-dimensionale Zustandsdichte und die Gruppengeschwindigkeit jeweils durch Ableitungen der Energie nach dem Impuls ausgedrückt. Bemerkenswerterweise kürzen sich die Ausdrücke weitgehend gegeneinander, so dass alle Materialeigenschaften herausfallen wie z. B. die effektive Elektronenmasse. Das verbleibende Integral liefert nur einen Faktor proportional zu  $eV$ , und wir erhalten

$$I = 2 \frac{e^2}{h} V.$$

D. h. der Leitwert eines 1-dimensionalen Leiters ist gegeben durch den Quantenwiderstand

$$G = 2 \frac{e^2}{h} = \frac{2}{R_K}. \quad (5.6)$$

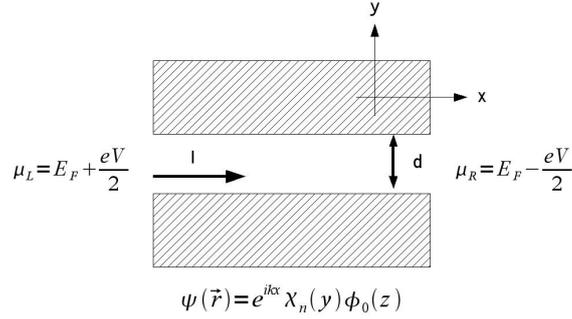


Abbildung 5.13: Die Wellenfunktion in einem eindimensionalen Leiter

Ein einfaches Beispiel bildet das Konzept eines eindimensionalen Leiters, der sich zwischen zwei Reservoiren befindet. Die Reservoiren unterscheiden sich durch unterschiedliche elektrochemische Potentiale  $\mu_1$  und  $\mu_2$ . Der Leiter hat eine Ausdehnung in  $y$ -Richtung von  $d$ , wie in Abb. 5.13 dargestellt. Die Wellenfunktion des Elektrons wird dann durch folgende Gleichung beschrieben

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = \exp(ikx)\chi_n(y)\varphi_0(z).$$

Dabei gilt für die Bewegung in  $y$ -Richtung und deren Energie

$$\chi_n(y) = \sin \frac{\pi y}{d} n, \quad E_n^{(y)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi n}{d} \right)^2.$$

Die Gesamtenergie des jeweiligen Zustands berechnet sich dann zu

$$E_{nk} = E_0 + E_n^{(y)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Betrachten wir zunächst nur  $n=1$ , also den Grundzustand in  $y$ -Richtung.

$$\begin{aligned} I &= 2e \frac{1}{V} \left( \sum_{p>0} v_p f_L(p) + \sum_{p<0} v_p f_R(p) \right) \\ &= 2e \frac{1}{2} \int dE N^{1d}(E) v_p \left[ f^0 \left( E + \frac{eV}{2} \right) - f^0 \left( E - \frac{eV}{2} \right) \right] \end{aligned}$$

Bei der Berechnung des Stromes  $I$  muss der Faktor 2 für den Spin und die Elektronenladung  $e$  berücksichtigt werden. Die Differenz der Summen erhalten wir aus der Wahl der  $x$ -Richtung, da nur Elektronen im Leiter zum Strom beitragen, die entweder von links mit positivem Impuls  $p > 0$  oder von rechts mit negativem Impuls  $p < 0$  kommen.

Wir berücksichtigen, dass die Gruppengeschwindigkeit  $v_p = \frac{\partial E_p}{\partial p}$  ist, und sich in 1 Dimension die Zustandsdichte schreiben lässt wie

$$N^{1d}(E) = \frac{2}{2\pi\hbar} \frac{1}{\partial E / \partial p}.$$

D.h. das Produkt aus Gruppengeschwindigkeit und Zustandsdichte ist nur eine einfache Konstante. Damit lässt sich das Problem weiter vereinfachen

$$\begin{aligned}
 I &= e \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE \frac{1}{\partial E / \partial p} \partial E / \partial p \left[ f^0 \left( E + \frac{eV}{2} \right) - f^0 \left( E - \frac{eV}{2} \right) \right] \\
 &= \frac{2eeV}{h} = 2 \frac{e^2}{h} V = GV.
 \end{aligned}$$

Für eine eindimensionalen Leiter hat er Leitwert einen universellen Wert  $G = 2e^2/h = 1/R_K$ , der unabhängig vom Material ist. Derselbe quantisierte Leitwert tritt auch beim Quanten-Hall-Effekt auf, der von von Klitzing entdeckt wurde. Der Wert des entsprechenden Widerstands ist

$$R_K = \frac{h}{e^2} = 25,8 \dots k\Omega.$$

**Quasi-eindimensionaler Leiter** Gehen wir nun von der Betrachtung von  $n = 1$ , also ei-

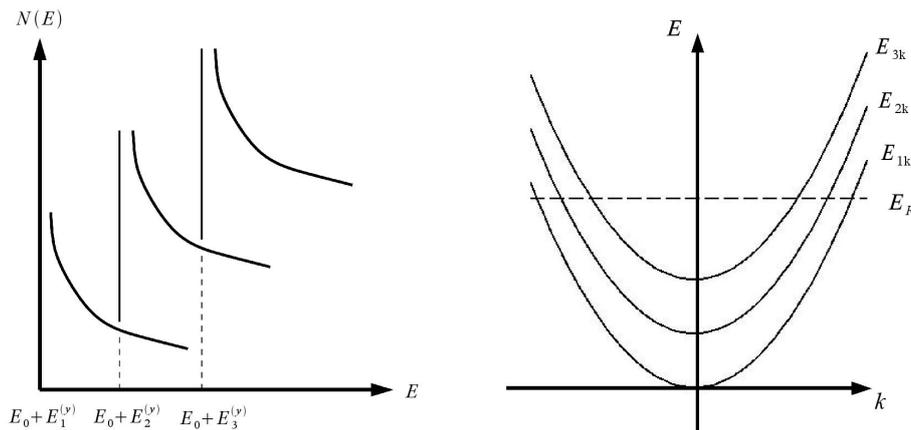


Abbildung 5.14: Zustandsdichte und Energien eines quasi-1d Leiters

nem "Kanal", über zu einer Betrachtung mehrerer Kanäle  $n_F$  in einem quasi-eindimensionalen Leiter. Jeder Kanal  $1 \leq n \leq n_F$  habe die Eigenschaft

$$E_0 + E_n^{(y)} < E_F.$$

Weil für jeden Kanal das Produkt aus Zustandsdichte und Gruppengeschwindigkeit konstant ist, folgt daraus, dass jeder Kanal gleich viel zum Gesamtleitwert von

$$G = \frac{2e^2}{h} n_F$$

beiträgt.

### 5.3.2 Barrieren im Leiter

Als nächstes wollen wir uns mit dem Problem auseinandersetzen, was der Leitwert ist, wenn im Leiter Barrieren auftreten. Diese können beispielsweise durch gezielte Strukturierung im 2DEG oder durch Störstellen entstehen.

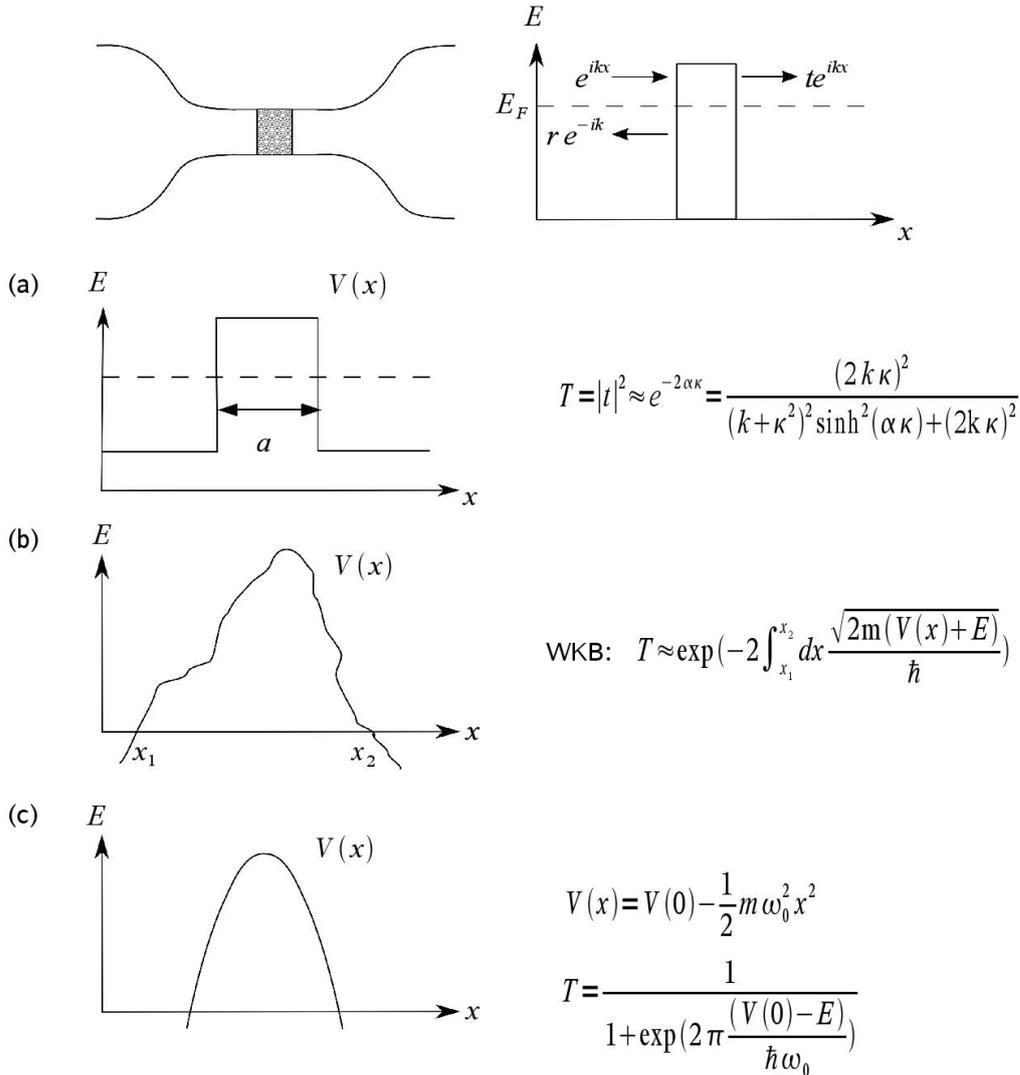


Abbildung 5.15: Beispiele für Barrieren und die Transmissionswahrscheinlichkeiten.

Wie wir anhand der Beispiele sehen, lässt sich ein Transmissionskoeffizient (Reflektionskoeffizient) finden, der angibt wie viele Elektronen die Barriere überwinden (an ihr reflektiert werden).

Für einen Kanal gilt dann

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_F).$$

Der Transmissionskoeffizient hängt von der Energie ab. Betrachten wir mehrere Kanäle, so

lässt sich dies wie folgt verallgemeinern

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_i T_i(E_F).$$

Jeder Kanal trägt also mit dem jeweiligen Energie-abhängigen Transmissionskoeffizient als Gewichtungsfaktor zum Leitwert bei.

Die Formeln zeigen, dass  $G$  und  $R = \frac{1}{G}$  auch für  $T = 1$  endlich sind. Das wäre dadurch erklärbar, dass man sagt, der Punktkontakt trenne die beiden Reservoirs ab. Eine weitere Frage, die sich daraus ergibt, ist die nach dem Ort der auftretenden Dissipation aufgrund des nichtverschwindenden Widerstandes. Diese findet in den Reservoirs statt.

Wie wir im nächsten Abschnitt jedoch sehen werden, postulierte Landauer, dass der Leitwert gegeben ist durch

$$G_{2P} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R}, \quad R = 1 - T.$$

Das bedeutet, dass der Leitwert  $G$  bei einer idealen Transmission von  $T = 1$  unendlich wird, während für den Widerstand  $R = G^{-1} = 0$  gilt.

### 5.3.3 Die Formel von Landauer, 2-Punkt- gegen 4-Punkt-Messung

Wir betrachten einen Zweipunktkontakt, jedoch erweitern wir ihn um zwei Spannungsmesskontakte mit den chemischen Potentials  $\mu_L$  und  $\mu_R$ , wie in Abb. 5.16 gezeigt. Wir betrachten einen Kanal, für den Landauer  $G_{4P} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R}$  postuliert. Der Vorteil dieses Postulats ist, dass für  $T = 1$ , also ideale Transmission,  $G_{4P} = \infty$  ist.

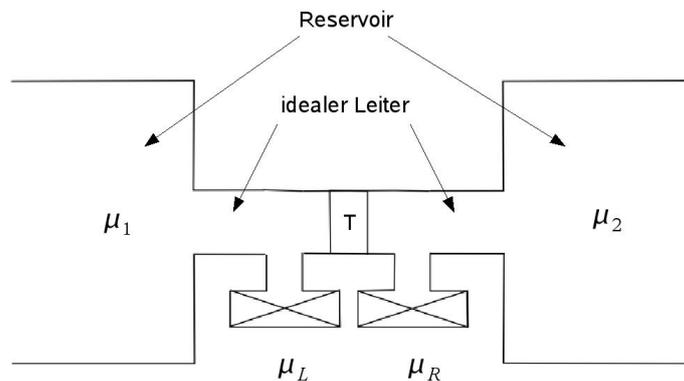


Abbildung 5.16: Der Leitwert eines Zweipunktkontaktes ohne zusätzliche Spannungsmesskontakte ist definiert durch  $G_{2P} = eI/(\mu_1 - \mu_2)$ . Führt man wie dargestellt zusätzliche Spannungsmesskontakte ein, so erhalten wir ein 4-Kontakt-System mit einem durch  $G_{4P} = eI/(\mu_L - \mu_R)$  definierten 4-Punkt-Leitwert.

Im Weiteren stellen wir nun die Verteilungsfunktionen  $f^L(E)$  für links und  $f^R(E)$  für rechts der Barriere auf (Abb. 5.16). Jede der Verteilungsfunktionen hat dabei einen nach

rechts  $\rightarrow$  und nach links  $\leftarrow$  laufenden Anteil.

$$\begin{aligned}
f^L(E) &= \frac{1}{2}(f^{L\rightarrow}(E) + f^{L\leftarrow}(E)) \\
f^{L\rightarrow}(E) &= f^0(E - \mu_1) \\
f^{L\leftarrow}(E) &= Rf^0(E - \mu_1) + Tf^0(E - \mu_2) \\
f^R(E) &= \frac{1}{2}(f^{R\rightarrow}(E) + f^{R\leftarrow}(E)) \\
f^{R\rightarrow}(E) &= Tf^0(E - \mu_1) + Rf^0(E - \mu_2) \\
f^{R\leftarrow}(E) &= f^0(E - \mu_2)
\end{aligned}$$

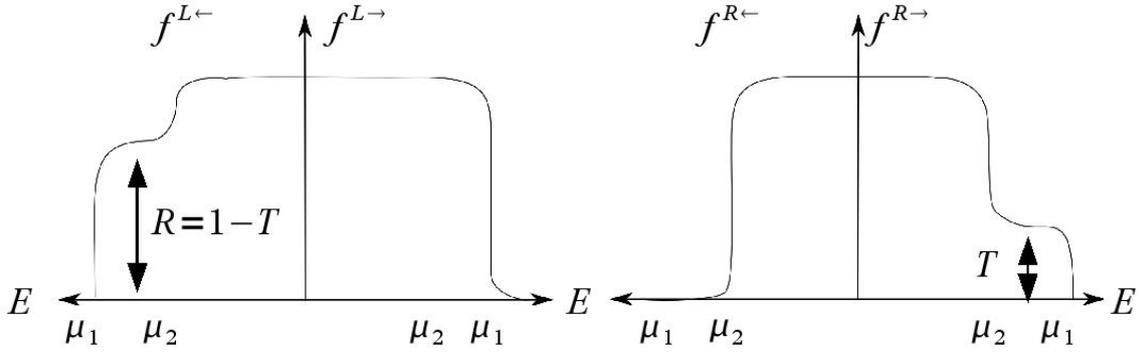


Abbildung 5.17: Die Verteilungsfunktionen links und rechts der Barriere für jeweils Vorwärts- und Rückwärtspropagation.

Die chemischen Potentiale der Spannungsmesskontakte werden so eingestellt, dass kein Nettostrom fließt. Hierzu muss das Potential bei einer beliebigen Verteilungsfunktion  $f(E)$  gewählt werden als  $\bar{\mu} = \int_0^\infty dE f(E)$ .

Um dies zu beweisen, beobachten wir zunächst, dass für  $f^0(E) = \{\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right) + 1\}^{-1}$  offenbar  $\bar{\mu} = \mu$ . Beim Spannungskontakt  $L$  in Abb. 5.16 fordern wir, dass  $I = \frac{2e}{h} \int dE [f(E) - f^0(E - \mu_L)] = \frac{2e}{h} [\int dE f(E) - \mu_L]$  verschwindet. Somit muss  $\mu_L = \bar{\mu} = \int dE f(E)$  gewählt werden. Analoge Schlüsse gelten für andere Spannungskontakte.

Nun können wir  $\mu_L$  und  $\mu_R$  sowie deren Differenz berechnen.

$$\begin{aligned}
\mu_L &= \frac{1}{2} \int dE (f^{L\rightarrow}(E) + f^{L\leftarrow}(E)) \\
\mu_L &= \frac{1}{2}(\mu_1 + R\mu_1 + T\mu_2) = \frac{1}{2}[\mu_1(1 + R) + \mu_2(1 - R)] \\
\mu_R &= \frac{1}{2}(T\mu_1 + R\mu_2 + \mu_2) = \frac{1}{2}[\mu_2(1 + R) + \mu_1(1 - R)] \\
\mu_L - \mu_R &= \frac{1}{2}(\mu_1 - \mu_2)[(1 + R) - (1 - R)] = R(\mu_1 - \mu_2)
\end{aligned}$$

Ausgegangen waren wir von  $G_{2P} = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} T$  für einen Zweipunktkontakt. Das Ergebnis für einen 4-Punkt-Kontakt, bei dem zusätzlich zwei Spannungsmesskontakte links und rechts des Streuers eingebaut werden, lautet

$$G_{4P} = \frac{I}{(\mu_L - \mu_R)/e} = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} \frac{1}{R} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R}$$

und bestätigt das Postulat von Landauer.

## 5.4 Multikanalproblem

Wir wollen nun das 1-Kanal-Problem auf ein Multi-Kanal-Problem erweitern. Im Allgemeinen gilt nämlich, dass eine einlaufende Welle im Kanal  $n$  in anderen Kanälen  $m$  transmittiert werden kann bzw. in andere Kanäle  $n'$  reflektiert werden kann. Um dies zu illustrieren betrachten wir das System aus Abb. 5.18 und stellen die Wellenfunktionen der Elektronen für die Bereiche "weit 1", "eng" und "weit 2" auf. In der Nähe der Grenzen gibt es auch zerfallende Wellen mit imaginärem Wellenvektor.

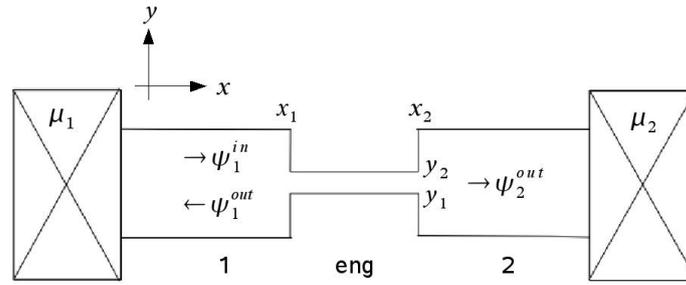


Abbildung 5.18: Weite Zuleitungen in Bereichen 1 und 2 sind durch einen engen Leiter miteinander verbunden.

**weit 1:**

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(x, y) &= \psi_{in}^{(1)}(x, y) + \psi_{out}^{(1)}(x, y) + \psi_{decay}^{(1)}(x, y) \\ \psi_{in}^{(1)}(x, y) &= \chi_n^{(1)}(y) e^{ik_n x}, \quad E_F = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \\ \psi_{out}^{(1)}(x, y) &= \sum_{n'} r_{n'n} \chi_{n'}^{(1)}(y) e^{-ik_{n'} x}, \quad E_F = \varepsilon_{n'} + \frac{\hbar^2 k_{n'}^2}{2m} \\ \psi_{decay}^{(1)}(x, y) &= \sum_{n''} c_{n''n} \chi_{n''}^{(1)}(y) e^{\kappa_{n''} x}, \quad E_F = \varepsilon_{n''} - \frac{\hbar^2 \kappa_{n''}^2}{2m} \end{aligned}$$

**eng:**

$$\begin{aligned} \psi^{(eng)}(x, y) &= \sum_p \chi_p^{(eng)}(y) [\alpha_p e^{ik_p x} + \beta_p e^{-ik_p x}] \\ &\quad + \sum_p \chi_{p'}^{(eng)}(y) [\alpha_{p'} e^{\kappa_{p'} x} + \beta_{p'} e^{-\kappa_{p'} x}] \end{aligned}$$

mit  $E_F = \varepsilon_p + \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m} = \varepsilon_{p'} - \frac{\hbar^2 \kappa_{p'}^2}{2m}$

**weit 2:**

$$\begin{aligned}\psi^{(2)}(x, y) &= \psi_{out}^{(2)}(x, y) + \psi_{decay}^{(2)}(x, y) \\ \psi_{out}^{(2)}(x, y) &= \sum_m t_{mn} \chi_m^{(2)}(y) e^{ik_m x}, \quad E_F = \varepsilon_m + \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} \\ \psi_{decay}^{(2)}(x, y) &= \sum_{m'} c_{m'n} \chi_{m'}^{(2)}(y) e^{-\kappa_{m'} x}, \quad E_F = \varepsilon_{m'} - \frac{\hbar^2 \kappa_{m'}^2}{2m}\end{aligned}$$

Die Randbedingungen bei  $x_1$  folgen aus der Stetigkeit der Amplituden und deren Ableitungen,

$$\psi^{(1)}(x_1 - 0, y) = 0 \text{ f\"ur } y \geq y_2 \text{ oder } y \leq y_1$$

$$\psi^{(1)}(x_1 - 0, y) = \psi^{(eng)}(x_1 + 0, y) \text{ und } \psi'^{(1)}(x_1 - 0, y) = \psi'^{(eng)}(x_1 + 0, y) \text{ bei } y \in (y_1, y_2)$$

und analog bei  $x_2$ .

Dieser Satz von Gleichungen f\"ur die Koeffizienten ist numerisch l\"osbar. Damit l\"asst sich dann der Leitwert berechnen,

$$G_{2P} = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(\varepsilon_F) = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} |t_{mn}|^2 = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}\{t^\dagger t\}$$

mit  $T_n = \sum_m |t_{mn}|^2$ . Ein einlaufender Kanal  $n$  tr\"agt also zur Amplitude der auslaufenden Kan\"ale  $m$  bei.

## 5.5 Adiabatische Einschn\"urung

In diesem Abschnitt betrachten wir einen Leiter mit einer langsamen Variation des Durchmessers und untersuchen die Konsequenzen f\"ur den Leitwert.

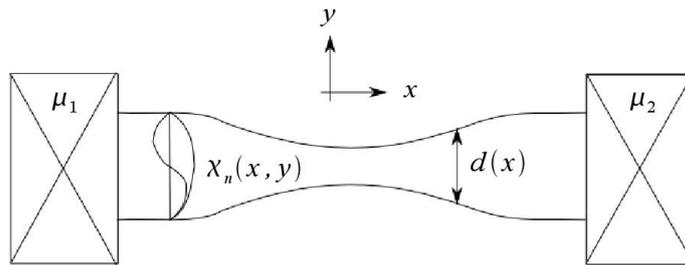


Abbildung 5.19: Eine adiabatische Einschn\"urung in einem Leiter.

Wir nehmen an, dass das Potenzial in  $y$ -Richtung steile W\"ande hat,

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & |y| \leq d(x)/2 \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases}$$

aber die Breite  $d(x)$  langsam, d.h. adiabatisch, von  $x$  abhängt. Konkret nehmen wir an, dass die Krümmung  $\rho$  der Variation groß ist im Vergleich zu  $d$ .

Das System wird durch folgende Gleichung beschrieben

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x^2 + \partial_y^2) + U(x, y) \right] \psi_E(x, y) = E \psi_E(x, y).$$

Wir machen den Ansatz

$$\psi_E(x, y) = \sum \psi_{nE}(x) \chi_n(y; x)$$

Dabei hängt  $\chi_n(y; x)$  nur parametrisch von  $x$  ab. Aufgrund des Kastenpotenzials in  $y$ -Richtung ergibt sich folgende Näherungslösung

$$\chi_n(y; x) = \sin \left( n\pi \frac{y + \frac{d(x)}{2}}{d(x)} \right) \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots$$

Dabei löst  $\chi_n(y; x)$  folgende Eigenwertgleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 + U(x, y) \right] \chi_n(y; x) = U_n(x) \chi_n(y; x)$$

mit  $U_n(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{d(x)} \right)^2$ . Wir werden sehen, dass  $U_n(x)$  ein effektives Potenzial für ein verbleibendes 1-dimensionales Problem darstellt.

Setzen wir unseren Ansatz in die Schrödingergleichung ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x^2 + \partial_y^2) + U(x, y) \right] \sum_n \psi_{nE}(x) \chi_n(y; x) &= E \sum_n \psi_{nE}(x) \chi_n(y; x) \\ &= \sum_n \chi_n(y; x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + U_n(x, y) \right] \psi_{nE}(x) + \sum_n \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left[ 2 \left( \frac{\partial}{\partial x} \psi_{nE}(x) \right) \left( \frac{\partial}{\partial x} \chi_n(y; x) \right) \right. \\ &\quad \left. + \psi_{nE}(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \chi_n(y; x) \right] \end{aligned}$$

Multiplikation mit  $\chi_{n'}^*(y; x)$  und Integration über  $y$  liefert

$$\sum_n \delta_{n'n} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + U_n(x) \right] \psi_{nE}(x) = E \sum_n \delta_{n'n} \psi_{nE}(x) + \sum_n \lambda_{n'n} \psi_{nE}(x)$$

mit

$$\sum_n \lambda_{n'n} \psi_{nE}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} dy \chi_{n'}^*(y; x) \left[ 2 \left( \frac{\partial}{\partial x} \chi_n(y; x) \right) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \chi_n(y; x) \right] \psi_{nE}(x).$$

$\lambda_{n'n}$  beschreibt hierbei die Übergänge  $n \leftrightarrow n'$ . Für die adiabatische Einschnürung  $d/\rho \ll 1$  ist  $\lambda_{n'n}$  klein (vgl. Born-Oppenheimer Näherung) und wird vernachlässigt. Das verbleibende Problem,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + U_n(x) \right] \psi_{nE}(x) = E \psi_{nE}(x)$$

ist eindimensional in dem effektiven Potential  $U_n(x)$ . Für dieses effektive 1-dimensionale Potenzial können wir nun wieder die Transmissionskoeffizienten bestimmen

In Abb. 5.20 ist die Situation für  $T_1 \approx T_2 \approx 1$  und  $0 \leq T_3 \leq 1$  skizziert. Die Kanäle öffnen sich für einen breiter werdenden Kontakt nacheinander (Abb. ??).

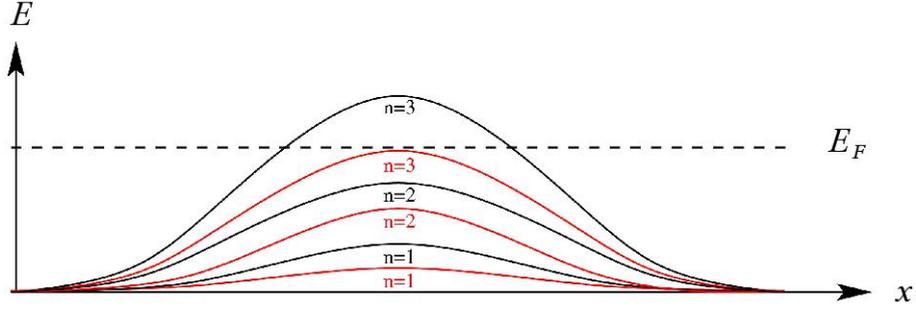


Abbildung 5.20: Verlauf des effektiven Potentials  $U_n(x)$  für zwei verschieden breite Einschnürungen.

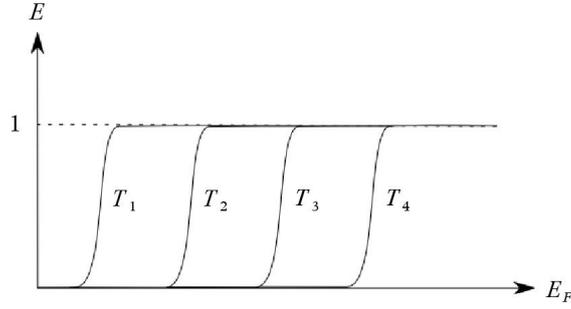


Abbildung 5.21: Sukzessives Öffnen der Transmissionskanäle.

## 5.6 Multi-Kontakt-Systeme

Wir diskutieren nun Multi-Kontakt-Systeme, wie das 6-Kontakt-System in Abb. 5.22. Für die Beschreibung eines solchen Systems benötigen wir die Transmissions- und Reflexionsamplituden für Übergänge von Kontakt  $\alpha$  nach Kontakt  $\beta$  aus Kanal  $n$  nach Kanal  $m$ ,

$$t_{m \leftarrow n}^{\beta \leftarrow \alpha} = t_{mn}^{\beta \alpha}; \quad r_{mn}^{\alpha} = t_{mn}^{\alpha \alpha}.$$

Für den Leitwert benötigen wir die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T_{\beta\alpha}(E)$  von  $\alpha$  nach  $\beta$ ,

$$T_{\beta\alpha}(E) = \sum_{m=1}^{N_\beta} \sum_{n=1}^{N_\alpha} |t_{mn}^{\beta\alpha}(E)|^2; \quad R_\alpha(E) = \sum_{m=1}^{N_\alpha} \sum_{n=1}^{N_\alpha} |r_{mn}^{\alpha}(E)|^2 = T_{\alpha\alpha}(E)$$

Den gesamten Strom  $I_\alpha$  berechnen wir über die energieaufgelösten Teilströme  $i_\alpha(E)$ ,

$$i_\alpha(E) = \frac{2e}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} [T_{\beta\alpha}(E) f_\alpha(E) - T_{\alpha\beta}(E) f_\beta(E)]$$

$$I_\alpha = \int dE \quad i_\alpha(E)$$

Wir berechnen den linearen Leitwert, d.h. wir nehmen an, dass die Potentialdifferenzen

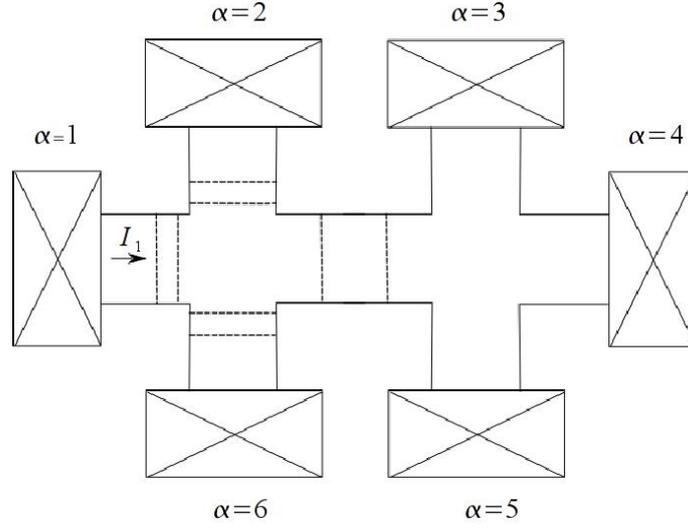


Abbildung 5.22: Leiter mit 6 Kontakten.

klein sind,  $\mu_\alpha \approx E_F$ . Darum gilt

$$f_\alpha(E) = f^0(E - E_F) - (\mu_\alpha - E_F) \left. \frac{\partial f^0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=E-E_F}.$$

Im Gleichgewicht gilt für alle  $\alpha$ , dass  $\mu_\alpha = \varepsilon_F$  also  $f_\alpha = f_\beta$ . Aus

$$i_\alpha(E) = \frac{2e}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} [T_{\beta\alpha}(E) - T_{\alpha\beta}(E)] f^0(E - E_F) = 0$$

folgt

$$\sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta\alpha}(E) = \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta}(E)$$

und somit

$$i_\alpha(E) = \frac{2e}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta}(E) [f_\alpha(E) - f_\beta(E)].$$

Für den Strom im Kontakt  $\alpha$  erhalten wir daraus

$$\begin{aligned} I_\alpha &= \int dE \frac{2e}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta}(E) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial E} \right) (\mu_\alpha - \mu_\beta) \\ &= \frac{2e^2}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta}(E_F) \frac{\mu_\alpha - \mu_\beta}{e} \\ &= \sum_{\beta \neq \alpha} G_{\alpha\beta} \frac{\mu_\alpha - \mu_\beta}{e} \end{aligned}$$

mit  $G_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} T_{\alpha\beta}(E_F)$ . Wenn wir insgesamt  $N_\alpha$  einlaufende Kanäle haben, gilt  $N_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta\alpha} + R_\alpha$ . Damit läßt sich der Strom noch weiter umformen zu

$$\begin{aligned} I_\alpha &= \frac{2e^2}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta}(E_F) (\mu_\alpha - \mu_\beta) / e \\ &= \frac{2e^2}{h} (N_\alpha - R_\alpha) \frac{\mu_\alpha}{e} - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta}(E_F) \frac{\mu_\beta}{e} \end{aligned}$$

Als Konsistenztest prüfen wir die Stromerhaltung  $\sum_\alpha I_\alpha = 0$ .

$$\begin{aligned} \sum_\alpha I_\alpha &= \frac{2e}{h} \left[ \sum_\alpha (N_\alpha - R_\alpha) \mu_\alpha - \underbrace{\sum_\alpha \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} \mu_\beta}_{\sum_\alpha \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta\alpha} \mu_\alpha} \right] \\ &= \frac{2e}{h} \sum_\alpha \left[ N_\alpha - R_\alpha - \sum_{\alpha \neq \beta} T_{\beta\alpha} \right] \mu_\alpha = 0. \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck zeigt auch, dass eine konstante Verschiebung aller  $\mu_\alpha$  den Strom nicht ändert, so dass man eines der  $\mu_\alpha = E_F$  setzen kann.

Wir wollen nun zwei Beispiele diskutieren, um Anwendungen des Formalismus kennenzulernen.

**2-Kontakt-System** Wir betrachten das in der Abbildung dargestellte System. Es gelten die Relationen  $I_1 = -I_2 = I$ ,  $T_{12} = T_{21} = T$ ,  $N_1 = N_2 = N = 1$ ,  $R_1 = R_2 = R = N - T$ .

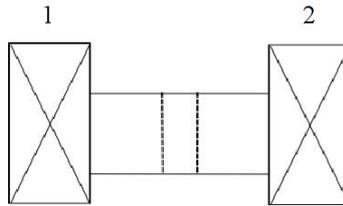


Abbildung 5.23: 2-Punkt-Geometrie

$$\begin{aligned} \frac{h}{2e} I &= (N - R) \mu_1 - T \mu_2 \\ -\frac{h}{2e} I &= (N - R) \mu_2 - T \mu_1 \end{aligned}$$

Die Differenz der beiden Gleichungen liefert

$$\begin{aligned} 2 \frac{h}{2e} I &= (N - R) (\mu_1 - \mu_2) + T (\mu_1 - \mu_2) \\ &= (N - R + T) (\mu_1 - \mu_2) = 2T (\mu_1 - \mu_2), \end{aligned}$$

und somit

$$\frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h}T = G.$$

Die Addition liefert dagegen die triviale Beziehung

$$0 = \underbrace{(N - R)}_T(\mu_1 + \mu_2) - T(\mu_1 + \mu_2)$$

**4-Kontakt-System** Wir betrachten nun ein System mit jeweils zwei Strom- und Spannungskontakten. Die Spannungskontakte sind nur schwach angekoppelt (die Messung der Spannungen soll die Situation maglichst wenig verandern) und wir nehmen an, dass sie symmetrisch angekoppelt sind, d.h.  $\tau = T_3 = T_4 \ll 1$  (also auch  $R_3 = R_4$ ). Wir mochten  $G_{4P} = eI/(\mu_3 - \mu_4)$  bestimmen.

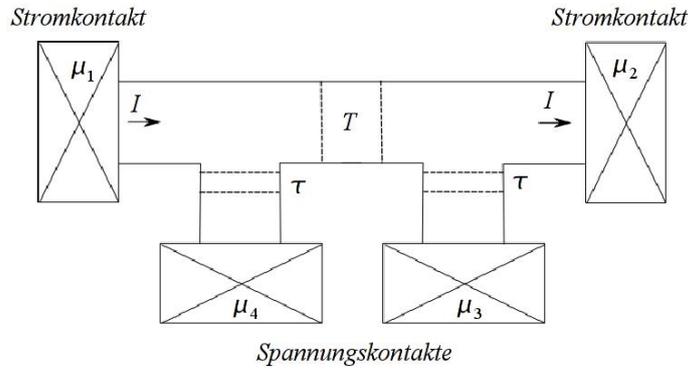


Abbildung 5.24: 4-Punkt-Geometrie

$$\begin{aligned} \frac{h}{2e}I &= (1 - R_1)\mu_1 - T_{12}\mu_2 - T_{13}\mu_3 - T_{14}\mu_4 \\ -\frac{h}{2e}I &= (1 - R_2)\mu_2 - T_{21}\mu_1 - T_{23}\mu_3 - T_{24}\mu_4 \\ 0 &= (1 - R_3)\mu_3 - T_{31}\mu_1 - T_{32}\mu_2 - T_{34}\mu_4 \\ 0 &= (1 - R_4)\mu_4 - T_{41}\mu_1 - T_{42}\mu_2 - T_{43}\mu_3 \end{aligned}$$

Wir schatzen die Transmissionen ab:

$$\begin{aligned} T_{12} &= T_{21} = T + O(\tau^2) \\ T_{13} &= \tau T = T_{31} = T_{24} = T_{42} \\ T_{14} &= \tau + R\tau = T_{41} = T_{23} = T_{32} \\ T_{34} &= \tau^2 T = T_{43} = O(\tau^2) \ll 1. \end{aligned}$$

Unter Vernachlassigung der Terme  $O(\tau)$  ergibt sich aus der der Differenz der ersten beiden Gleichungen (5.7) und (5.7)

$$\begin{aligned} \frac{2h}{2e}I &= (1 - R_1)(\mu_1 - \mu_2) - T_{12}(\mu_2 - \mu_1) + O(\tau) \\ &= (1 - R + T)(\mu_1 - \mu_2) = 2T(\mu_1 - \mu_2). \end{aligned}$$

Die Differenz der letzten beiden Gleichungen (5.7) und (5.7) liefert

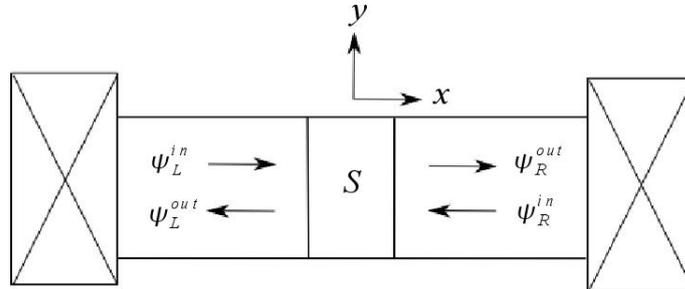
$$\begin{aligned}
 0 &= (1 - R_3)(\mu_3 - \mu_4) - T_{31}(\mu_1 - \mu_2) - T_{32}(\mu_2 - \mu_1) \\
 0 &= (T_{13} + T_{23} + \underbrace{T_{43}}_{\approx 0})(\mu_3 - \mu_4) - (T_{32} - T_{31})(\mu_2 - \mu_1) \\
 \mu_3 - \mu_4 &= \frac{T_{32} - T_{31}}{T_{32} + T_{31}}(\mu_2 - \mu_1) = R(\mu_2 - \mu_1).
 \end{aligned}$$

Somit gilt

$$\begin{aligned}
 G_{2P} &= \frac{eI}{\mu_1 - \mu_2} = \frac{2e^2}{h} T, \\
 G_{4P} &= \frac{eI}{\mu_4 - \mu_3} = \frac{eI}{R(\mu_1 - \mu_2)} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R}.
 \end{aligned}$$

## 5.7 S-Matrix für Streuung

Wie können wir den Transport in Systemen beschreiben, die sich z.B. als Reihenschaltung vieler Streuer auffassen lassen? Hierbei stellt sich das Konzept der Streumatrix, kurz S-Matrix, als nützlich heraus, das die Amplituden einlaufender Wellen mit denen der auslaufenden verknüpft. So lassen sich Subsysteme durch S-Matrizen charakterisieren und die Transporteigenschaften des gesamten Systems ergeben sich aus einer geeigneten "Matrixmultiplikation" der S-Matrizen. Im Folgenden wollen wir die Eigenschaften der S-Matrizen genauer untersuchen.



Die von links und rechts einlaufenden Wellen seien

$$\psi_L^{in} = \sum_{n=1}^{N_L} a_n e^{ik_n x} \chi_n(y), \quad \psi_R^{in} = \sum_{n=1}^{N_R} a'_n e^{-ik'_n x} \chi'_n(y)$$

$\chi_n(y)$  und  $\chi'_n(y)$  beschreiben die Komponenten der Wellenfunktion senkrecht zur Transportrichtung. Die auslaufenden Komponenten sind

$$\psi_L^{out} = \sum_{n=1}^{N_L} b_n e^{-ik_n x} \chi_n(y), \quad \psi_R^{out} = \sum_{n=1}^{N_R} b'_n e^{-ik'_n x} \chi'_n(y)$$

Die Anzahl der einfallenden und der auslaufenden Komponenten kann gleich angenommen werden. (Wenn erforderlich können zusätzliche Amplituden ein- oder auslaufender Wellen als verschwindend angenommen werden.) Wir erhalten die S-Matrix

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_{N_L} \\ b'_1 \\ \vdots \\ b'_{N_R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & \cdots & S_{1,N_L} & S_{1,N_L+1} & \cdots & S_{1,N_L+N_R} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{N_L,1} & \cdots & S_{N_L,N_L} & S_{N_L,N_L+1} & \cdots & S_{N_L,N_L+N_R} \\ S_{N_L+1,1} & \cdots & S_{N_L+1,N_L} & S_{N_L+1,N_L+1} & \cdots & S_{N_L+1,N_L+N_R} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{N_L+N_R,1} & \cdots & S_{N_L+N_R,N_L} & S_{N_L+N_R,N_L+1} & \cdots & S_{N_L+N_R,N_L+N_R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{N_L} \\ a'_1 \\ \vdots \\ a'_{N_R} \end{pmatrix}$$

In kompakter Form lässt sich dies schreiben als  $\vec{b} = S\vec{a}$  mit  $a_{N_L+i} = a'_i$  und  $b_{N_L+i} = b'_i$  bzw.

$$\begin{pmatrix} b_L \\ b_R \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_L \\ a_R \end{pmatrix}$$

mit  $a_{L,i} = a_i$  und  $a_{R,i} = a'_i$  und ähnlichen Relationen für  $b_L$  und  $b_R$ . Die Elemente der S-Matrix lassen sich gemäß der Verknüpfung der ein- und auslaufenden Komponenten als Reflexions- oder Transmissionsamplituden interpretieren.

$$S = \begin{pmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1,N_L} & t'_{11} & \cdots & t'_{1,N_R} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{N_L,1} & \cdots & r_{N_L,N_L} & t'_{N_L,1} & \cdots & t'_{N_L,N_R} \\ t_{11} & \cdots & t_{1,N_L} & r'_{11} & \cdots & r'_{1,N_R} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{N_R,1} & \cdots & t_{N_R,N_L} & r'_{N_R,1} & \cdots & r'_{N_R,N_R} \end{pmatrix}$$

Für mehrere Kontakte lässt sich dies verallgemeinern, indem ein zusätzlicher Index eingeführt wird für den jeweiligen Kontakt  $S_{ij} = S_{\alpha\beta, mn}$ , wobei in dieser Schreibweise  $\alpha, \beta$  die Indizes für den Kontakt ("lead index") und  $m, n$  für die transversale Mode bzw. den Kanal ("channel index") sind.

**Stromerhaltung:** Nun zeigen nun, dass die Unitarität der (geeignet normierten) S-Matrix aus der Stromerhaltung folgt. Wir gehen aus vom Ausdruck für die (Wahrscheinlichkeits-)Stromdichte

$$\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Re} \left[ \psi^* (-i\hbar \vec{\nabla}) \psi \right].$$

Jede einlaufende (auslaufende) Mode trägt somit einen Strom  $|a_n|^2 \cdot \frac{\hbar k_n}{m}$  (bzw.  $|b_n|^2 \cdot \frac{\hbar k_n}{m}$ ). Es interessieren uns die Moden, deren Energie bei der Fermienergie liegt. Wir müssen also noch die Zustandsdichte (pro Spin und Volumen)  $N^{\text{1d}} = 2m/(\pi\hbar^2 k)$  berücksichtigen. Die Summe der einlaufenden Ströme (bei vorgegebener Energie) muss aufgrund der Teilchenzahlerhaltung gleich der Summe der auslaufenden Ströme sein

$$\sum_{n=1}^{\sum_{\alpha} N_{\alpha}} |a_n|^2 \cdot \frac{\hbar k_n}{m} \cdot \frac{2m}{\pi\hbar^2 k} = \sum_{n=1}^{\sum_{\alpha} N_{\alpha}} |b_n|^2 \cdot \frac{\hbar k_n}{m} \cdot \frac{2m}{\pi\hbar^2 k}$$

Dies können wir kompakt umschreiben wie

$$\vec{b}^\dagger \cdot \vec{b} = \vec{a}^\dagger S^\dagger S \vec{a} \stackrel{!}{=} \vec{a}^\dagger \cdot \vec{a}$$

Wir erkennen, dass die Unitarität der S-Matrix,  $S^\dagger S = 1 = SS^\dagger$ , die Stromerhaltung garantiert.

**Zeitumkehrsymmetrie** Die Zeitumkehr wird realisiert durch die Konjugation der Wellenfunktion (s. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Kap. 3.1) bei gleichzeitiger Umkehr evtl. vorhandener externer magnetischer Felder. Aus  $\vec{b} = S_{\vec{B}} \vec{a}$  folgt

$$\vec{a}^* = S_{-\vec{B}} \vec{b}^* = S_{-\vec{B}} S_{\vec{B}}^* \vec{a}^*,$$

weil sich die Rollen von ein- und auslaufenden Wellen vertauschen. Somit ist

$$S_{\vec{B}} = \left( S_{-\vec{B}}^* \right)^{-1} = S_{-\vec{B}}^T$$

wegen der Unitarität der S-Matrizen. Für  $\vec{B} = 0$  folgt daraus, dass  $S = S^T$  symmetrisch ist. Für den Leitwert ergibt sich wegen  $S_{\vec{B}} = S_{-\vec{B}}^T$  auch  $t_{\alpha\beta;mn}(\vec{B}) = t_{\beta\alpha;nm}(-\vec{B})$  und somit  $G_{\alpha\beta}(\vec{B}) = G_{\beta\alpha}(-\vec{B})$ .

Wir wollen nun zwei Beispiele diskutieren. Zunächst soll die allgemeine Form der Streumatrix für einen Kanal hergeleitet werden. Danach motivieren wir an einem Beispiel ein weiteres Mal, wieso die Wellenzahlen  $k$  bei der Normierung der unitären S-Matrix wichtig sind.

**Streumatrix für einen Kanal** Wir schreiben die S-Matrix als

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix},$$

wobei  $t = |t|e^{i\tau}$ ,  $t' = |t'|e^{i\tau'}$ ,  $r = |r|e^{i\varrho}$  und  $r' = |r'|e^{i\varrho'}$ .

Aus der Unitarität von  $S$  ergeben sich Beziehungen zwischen den Matrixelementen

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} r^* & t^* \\ t'^* & r'^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |r|^2 + |t|^2 & r^* t' + t^* r' \\ t'^* r + r'^* t & |t'|^2 + |r'|^2 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Somit gelten  $|r|^2 + |t|^2 = 1 = |t'|^2 + |r'|^2$  und  $r^* t' + t^* r' = 0$ . Die letztere Beziehung liefert  $|r||t'| = |t||r'|$  und  $-\varrho + \tau' = -\tau + \varrho' + \pi(2n + 1)$  mit  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Weiterhin liefert

$$SS^\dagger = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r^* & t^* \\ t'^* & r'^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |r|^2 + |t'|^2 & r t^* + t' r'^* \\ t r^* + r' t'^* & |r'|^2 + |t|^2 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

also  $|r|^2 + |t'|^2 = 1$  und  $r t^* + t' r'^* = 0$ . Daraus folgt mit den aus vorherigen Beziehungen, dass  $|r|^2 = |r'|^2$ ,  $|t|^2 = |t'|^2$  und  $\varrho - \tau = \tau' - \varrho' + \pi(2n + 1)$ .

Somit sind nur  $\tau$ ,  $\varrho$ ,  $\varrho'$  sowie  $|t| = \sqrt{1 - |r|^2}$  freie Parameter. Die S-Matrix lässt sich als umschreiben

$$S = \begin{pmatrix} |r|e^{i\varrho} & -|t|e^{i(\varrho+\varrho')-i\tau} \\ |t|e^{i\tau} & |r|e^{i\varrho'} \end{pmatrix} = e^{i\frac{\varrho+\varrho'}{2}} \begin{pmatrix} |r|e^{i\frac{\varrho-\varrho'}{2}} & -t^*e^{i\frac{\varrho+\varrho'}{2}} \\ te^{-i\frac{\varrho+\varrho'}{2}} & |r|e^{-i\frac{\varrho-\varrho'}{2}} \end{pmatrix}.$$

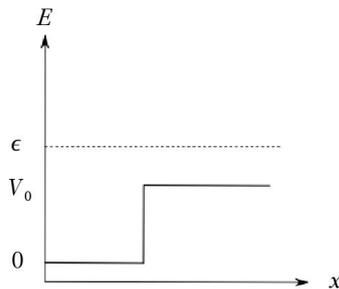
Die Streumatrix im 1-Kanal-Fall kann also immer in folgender Form darstellt werden

$$S = e^{i\varphi} \begin{pmatrix} r & -t^* \\ t & r^* \end{pmatrix}.$$

Der Leitwert ergibt sich als

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(t^\dagger t).$$

**S-Matrix bei Wellenvektor-”Mismatch”** Wir wollen hier diskutieren, wie die Streumatrix für ein Problem aussieht, bei dem sich die Wellenvektoren der propagierenden Moden in der linken und rechten Elektrode unterscheiden. Zur Vereinfachung konzentrieren wir uns auf eine Mode und betrachten die in der Abbildung dargestellte Situation, bei der das Potential beim Durchgang von links nach rechts einen Sprung um  $V_0$  aufweist.



Die Wellenfunktionen auf der linken und rechten Seite müssen jeweils folgenden Gleichungen genügen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\right)\psi_L = E\psi_L, \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_0\right)\psi_R = E\psi_R.$$

Wie üblich bietet sich der Ansatz an

$$\psi_L(x) = e^{ikx} + r'e^{-ikx}, \quad \psi_R(x) = t'e^{ik'x}.$$

Die Anschlussbedingungen für  $x = 0$ , der Stelle des Potentialsprungs, lauten

$$\psi_L(x \rightarrow 0^-) = \psi_R(x \rightarrow 0^+), \quad \psi'_L(x \rightarrow 0^-) = \psi'_R(x \rightarrow 0^+).$$

Setzen wir den Ansatz ein, erhalten wir hieraus folgende Relationen für die Parameter  $r$  und  $t$

$$1 + r = t, \quad ik(1 - r') = ik't'.$$

Auflösen liefert dann

$$t' = \frac{2k}{k+k'}, \quad r' = \frac{k-k'}{k+k'}.$$

Wir stellen fest, dass

$$|r'|^2 + |t'|^2 = \frac{(k-k')^2 + 4k^2}{(k+k')^2} \neq 1.$$

Definieren wir dagegen

$$r = r', \quad t = t' \sqrt{\frac{k'}{k}}$$

so gilt

$$|r|^2 + |t|^2 = |r'|^2 + \frac{k'}{k} |t'|^2 = \frac{(k-k')^2 + 4k'k}{(k+k')^2} = 1,$$

wir wir es aufgrund der Erhaltung der Teilchenzahl erwarten.

### 5.7.1 Reihenschaltung

Wenn wir komplexere Systeme untersuchen möchten, ist es sinnvoll diese Systeme in Untersysteme aufzuteilen, deren S-Matrizen wir einfach aufstellen können. Die S-Matrix des Hauptsystems lässt sich über eine geeignete Verknüpfung der S-Matrizen der Untersysteme erhalten. Wir betrachten die Reihenschaltung und suchen die Streumatrix  $S_{12}$  für das System aus Abb. ??.

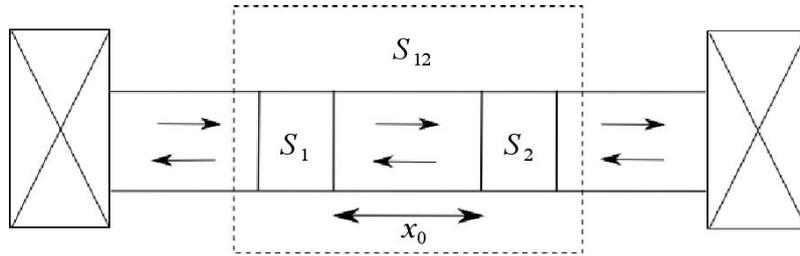


Abbildung 5.25: Leiter, der sich als Reihenschaltung von von Streuern mit jeweiligen S-Matrizen beschreiben lässt.

Für einen einzelnen Streuer gilt  $\vec{b} = S\vec{a}$  bzw.

$$\begin{pmatrix} a_L^{out} \\ a_R^{out} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_L^{in} \\ a_R^{in} \end{pmatrix}$$

Wir definieren nun die Matrix  $M$ , die die Amplituden der Wellenfunktionen der linken und rechten Seite verknüpft  $a_R = Ma_L$  (statt denen ein- und auslaufender Wellen bei  $S$ ) bzw. genauer

$$\begin{pmatrix} a_R^{out} \\ a_R^{in} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_L^{in} \\ a_L^{out} \end{pmatrix}.$$

Aus den Relationen für die S-Matrix

$$\begin{aligned} a_L^{out} &= r a_L^{in} + t' a_R^{in} \\ a_R^{out} &= t a_L^{in} + r' a_R^{in} \end{aligned}$$

folgt für die Komponenten der Wellenfunktion auf der rechten Seite

$$\begin{aligned} a_R^{out} &= \frac{tt' - rr'}{t'} a_L^{in} + \frac{r'}{t'} a_L^{out} \\ a_R^{in} &= -\frac{r}{t'} a_L^{in} + \frac{1}{t'} a_L^{out}. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für  $M$

$$\begin{pmatrix} a_R^{out} \\ a_R^{in} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{tt' - rr'}{t'} & \frac{r'}{t'} \\ -\frac{r}{t'} & \frac{1}{t'} \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} a_L^{in} \\ a_L^{out} \end{pmatrix}.$$

Die M-Matrix des gesamten Systems ist die Multiplikation der einzelnen Matrizen.

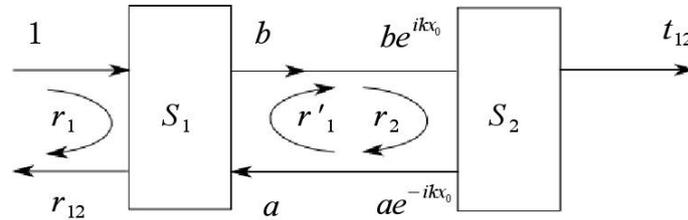
$$M_{12} = M_2 M_{prop} M_1,$$

wobei die Propagation um  $x_0$  durch

$$M_{prop} = \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix}$$

beschrieben wird. Ausmultiplizieren liefert also  $M_{12}$ , woraus  $S_{12}$  durch geeignete Kombination der Matrixelemente erhalten werden kann.

Für das hier diskutierte System kann man die Transmissions- und Reflexionsamplituden schneller auf direktem Wege erhalten.



Wir erhalten bei diesem Vorgehen

$$\begin{aligned} r_{12} &= r_1 + t'_1 a \\ t_{12} &= t_2 b e^{ikx_0} \\ b &= t_1 + r'_1 a \\ a e^{-ikx_0} &= r_2 b e^{ikx_0} \end{aligned}$$

Aus den Beziehungen folgt

$$\begin{aligned} a &= r_2 b e^{2ikx_0} \\ b \left( 1 - r'_1 r_2 e^{2ikx_0} \right) &= t_1 \end{aligned}$$

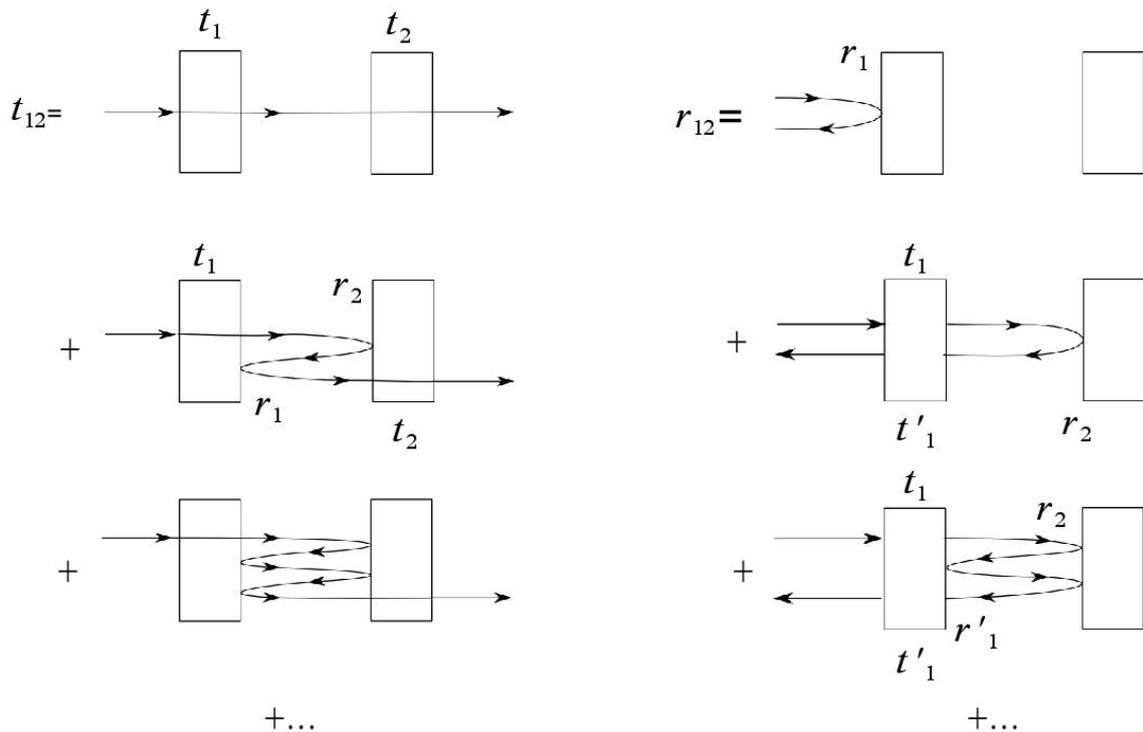
und schließlich

$$\begin{aligned}
 b &= \frac{t_1}{1 - r'_1 r_2 e^{2ikx_0}} \\
 a &= \frac{t_1 r_2 e^{2ikx_0}}{1 - r'_1 r_2 e^{2ikx_0}} \\
 t_{12} &= \frac{t_1 t_2 e^{ikx_0}}{1 - r'_1 r_2 e^{2ikx_0}} \\
 r_{12} &= r_1 + \frac{t_1 t'_1 r_2 e^{2ikx_0}}{1 - r'_1 r_2 e^{2ikx_0}}
 \end{aligned}$$

Das Ergebnis läßt sich physikalisch interpretieren, über folgenden Zusammenhang

$$\frac{1}{1 - r'_1 r_2 e^{2ikx_0}} = \sum_{n=0}^{\infty} (r'_1 r_2 e^{2ikx_0})^n .$$

Wir erkennen, dass sich die Transmissions- und Reflexionsamplituden  $t_{12}$  und  $r_{12}$  jeweils als Summe aller transmittierten bzw. reflektierten Wege auffassen lassen.



Für die Transmissionswahrscheinlichkeit erhalten wir

$$T_{12} = |t_{12}|^2 = \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}$$

mit  $\vartheta = 2ikx_0 + \underbrace{\arg(r_1' r_2)}_{\rho_1 + \rho_2}$ . Die Reflexionswahrscheinlichkeit ist dagegen  $R_{12} = |r_{12}|^2 = 1 - T_{12}$  und der Quotient liefert

$$\frac{T_{12}}{R_{12}} = \frac{T_1 T_2}{1 - T_1 T_2 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta} = \frac{T_1 T_2}{R_1 + R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}.$$

Somit beträgt der 4-Punkt-Leitwert

$$G_{12,4P} = \frac{2e^2}{h} \cdot \frac{T_{12}}{R_{12}}$$

$$G_{12,4P}^{-1} = \frac{h}{2e^2} \cdot \frac{R_1 + R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}{T_1 T_2}$$

und der 2-Punkt-Leitwert

$$G_{12,2P}^{-1} = \frac{h}{2e^2} \cdot \frac{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}{T_1 T_2}.$$

Im Gegensatz dazu liefert die klassische Addition von Widerständen der zwei Streuer

$$G_{12,cl,4P}^{-1} = \frac{h}{2e^2} \left( \frac{R_1}{T_1} + \frac{R_2}{T_2} \right) = \frac{h}{2e^2} \frac{R_1 + R_2 - 2R_1 R_2}{T_1 T_2} = \frac{h}{2e^2} \frac{R_{12,cl}}{T_{12,cl}}.$$

mit  $T_{12,cl} = T_1 T_2 / (1 - R_1 R_2)$  und  $R_{12,cl} = 1 - T_{12,cl} = R_1 + R_2 - 2R_1 R_2 / (1 - R_1 R_2)$ . Man erkennt, dass die klassische Addition nicht zum demselben Ergebnis führt wie die mesoskopische Addition.

## 5.7.2 Reihenschaltung für viele Kanäle

Wir wollen die Reihenschaltung von Streuern für den Fall mehrerer Kanäle erweitern, wie es in Abb. 5.26 angedeutet ist. Die beiden Streuer seien durch folgende S-Matrizen

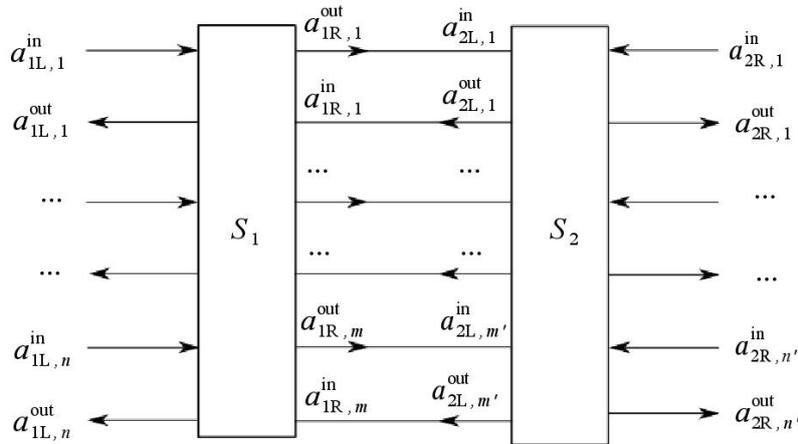


Abbildung 5.26: Reihenschaltung zweier Streuer im Fall mehrerer Kanäle.

beschrieben

$$\begin{pmatrix} a_{1R,1}^{out} \\ \vdots \\ a_{1R,n}^{out} \\ a_{1L,1}^{out} \\ \vdots \\ a_{1L,m}^{out} \end{pmatrix} = S_1 \cdot \begin{pmatrix} a_{1L,1}^{in} \\ \vdots \\ a_{1L,n}^{in} \\ a_{1R,1}^{in} \\ \vdots \\ a_{1R,m}^{in} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{2R,1}^{out} \\ \vdots \\ a_{2R,n'}^{out} \\ a_{2L,1}^{out} \\ \vdots \\ b_{2L,m'}^{out} \end{pmatrix} = S_2 \cdot \begin{pmatrix} a_{2R,1}^{in} \\ \vdots \\ a_{2R,n'}^{in} \\ a_{2L,1}^{in} \\ \vdots \\ a_{2R,m'}^{in} \end{pmatrix}$$

Für die Amplituden gilt  $a_{2L,i}^{in} = e^{i\phi} a_{1R,i}^{out}$ ,  $a_{1R,i}^{in} = e^{i\phi} a_{2L,i}^{out}$  mit  $i = 1, \dots, m$  und  $m = m'$ . Wir schreiben dies kompakter als  $a_{2L}^{in} = P a_{1R}^{out}$  und  $a_{1R}^{in} = P' a_{2L}^{out}$  mit den  $m \times m$ -Matrizen  $P$  und  $P'$ , die die Propagation von links nach rechts und umgekehrt beschreiben.

Um die Transmissions- und Reflexionsamplituden von  $S_{12}$  zu erhalten, müssen folgende Koeffizienten eliminiert werden:  $a_{1R}^{out}$ ,  $a_{1R}^{in}$ ,  $a_{2L}^{out}$ ,  $a_{2L}^{in}$ . Mit der  $n \times m$ -Matrix  $S_1$  und der  $m \times n'$ -Matrix  $S_2$

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

erhalten wir schliesslich

$$\begin{aligned} t_{12} &= t_2 [1 - r'_1 P' r_2 P]^{-1} t_1 \\ r_{12} &= r_1 + t'_1 P' r_2 P [1 - r'_1 P' r_2 P]^{-1} t_1. \end{aligned}$$

## 5.8 Resonantes Tunneln

In mesoskopischen Systemen mit einer Doppelbarriere treten Effekte wie resonantes Tunneln auf. Eine mögliche praktische Realisierung wären z.B. in einem dünnen, dreilagigen GaAs/AlGaAs/GaAs-Sichtsystem. Wären der Abstand zwischen den Barrieren nicht im Bereich von mesoskopischen Längen, wäre nach dem Ohmschen Gesetz der Strom proportional zur Spannung. Es zeigt sich im mesoskopischen Bereich jedoch, dass Abmessungen der Schichten von Bruchteilen der deBroglie-Wellenlänge zu anderen Strom-Spannungscharakteristiken führen. Resonantes Tunneln wird durch den Wellencharakter der Elektronen hervorgerufen, welcher zu einer Energieequantisierung in beschränkten Systemen führt.

In Abschn. 5.7.1 haben wir die Transmission für zwei Streuer hergeleitet und können dieses Resultat nun direkt übernehmen,

$$T_{12} = \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}$$

mit  $\vartheta = \vartheta(E) = 2kx_0 + \rho'_1 + \rho_2$ ,  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  und  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ . Offensichtlich wird  $T_{12}$  maximal für  $\cos \vartheta = 1$ .

Der Einfachheit halber nehmen wir hier an, dass

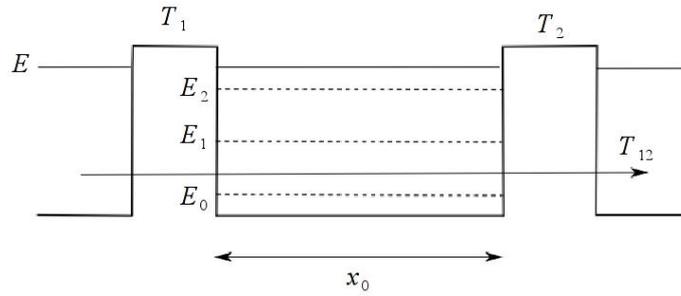


Abbildung 5.27: Leiter mit zwei Barrieren mit Transmissionswahrscheinlichkeiten  $T_1$  und  $T_2$ . An solchen Systemen kann resonantes Tunneln beobachtet werden. Typischerweise gilt  $T_1, T_2 \ll 1$ .

1.  $\rho'_1 = \rho_2 = 0$ ,
2.  $T_1, T_2$  unabhängig von  $E$  (große Höhe der Barriere).

Es existieren Energien  $E = E_n$ , bei denen  $\cos \vartheta(E_n) = 1$ . Die Bedingung für diese “quasi-gebundenen Zustände” bzw. Resonanzen lautet

$$\frac{2x_0\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = n \cdot 2\pi \quad \Leftrightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{x_0},$$

also die bekannte Teilchen-im-Kasten-Relation. Wir entwickeln  $\vartheta(E) = 2x_0\sqrt{2mE}/\hbar$  der Nähe von  $E_n$

$$\sqrt{E} = \sqrt{E_n} + \frac{1}{2} \frac{E - E_n}{\sqrt{E_n}} + \dots$$

Für  $\cos \vartheta(E)$  folgt

$$\begin{aligned} \cos \vartheta(E) &= 1 - \frac{1}{2} [\vartheta(E) - \vartheta(E_n)]^2 \\ &= 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{x_0}{\hbar} \sqrt{2m} \frac{E - E_n}{\sqrt{E_n}} \right)^2 \\ &= 1 - \frac{mx_0^2 (E - E_n)^2}{\hbar^2 E_n} \end{aligned}$$

Weiterhin entwickeln wir den Nenner der Transmission unter der Annahme, dass  $T_1, T_2 \ll 1$  bis in zweiter Ordnung.

$$\begin{aligned} 1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} &= 1 + (1 - T_1)(1 - T_2) - 2\sqrt{(1 - T_1)(1 - T_2)} \\ &= 1 + 1 - T_1 - T_2 + T_1 T_2 - 2 \left( 1 - \frac{T_1}{2} - \frac{T_1^2}{8} \dots \right) \left( 1 - \frac{T_2}{2} - \frac{T_2^2}{8} \dots \right) \\ &\approx 2 - T_1 - T_2 + T_1 T_2 - 2 + T_1 + T_2 + \frac{T_1^2}{4} + \frac{T_2^2}{4} - \frac{T_1 T_2}{2} \\ &= \frac{(T_1 + T_2)^2}{4} \end{aligned}$$

Für die Transmission ergibt sich somit

$$T_{12}(E) = \frac{T_1 T_2}{\frac{(T_1 + T_2)^2}{4} + \frac{2x_0^2 m}{\hbar^2} \cdot \frac{(E - E_n^2)^2}{E_n}}$$

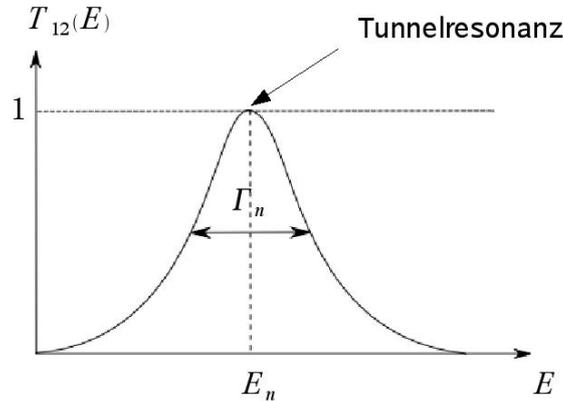


Abbildung 5.28: Transmission in der Nähe einer Resonanz. Die Transmission besitzt dann die Form einer Lorentz-Kurve. Für den Fall symmetrischer Barrieren  $T_1 = T_2$  ist die Transmission im Maximum  $T_{12}(E) = 4T_1 T_2 / (T_1 + T_2)^2 = 1$ , obwohl  $T_1, T_2 \ll 1$ . Resonantes Tunneln ist beim Elektronentransport durch Quantenpunkte beobachtbar.

Durch Umschreiben erhalten wir

$$T_{12}(E) = \frac{4T_1 T_2}{(T_1 + T_2)^2} \frac{\frac{1}{4}\Gamma_n^2}{\frac{1}{4}\Gamma_n^2 + (E - E_n)^2}$$

Offensichtlich ist die Transmission in der Nähe der Resonanzen also eine Breit-Wigner-Funktion mit

$$\begin{aligned} \Gamma_n^2 &= \frac{(T_1 + T_2)^2 E_n \hbar^2}{2x_0^2 m} \\ \Gamma_n &= \Gamma_1 + \Gamma_2 \\ \Gamma_i &= T_i \frac{\hbar}{2x_0} \sqrt{\frac{2E_N}{m}} = T_i \frac{\hbar v_n}{2x_0} \end{aligned}$$

Hierbei entspricht  $\Gamma_i/\hbar$  der Rate für das Überwinden der Barriere  $i = 1, 2$

$$\frac{\Gamma_i}{\hbar} = \underbrace{T_i}_{\text{“escape”-Wahrscheinlichkeit}} \underbrace{\frac{\hbar v_n}{2x_0}}_{\text{“attempt”-Rate}}$$

## 5.9 Übergang von kohärentem nach klassischem Verhalten

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit dem Verlust der Phasenkohärenz und dem Übergang zum klassischen Verhalten. Wir können dies im Rahmen eines 'toy-Modells' (Büttiker,

1988) beschreiben. Dazu gehen wir von folgendem Bild aus (siehe Abb. 5.29): In Reservoiren wird die Phasenkohärenz zerstört. Die Idee bei dem hier betrachteten System ist es, einen Teil der Elektronen zum Reservoir  $p$  propagieren zu lassen, vom dem die Elektronen inkohärent wieder eingespeist werden. Hierbei fließe kein Nettostrom zur Probe  $I_p = 0$ . Durch den Parameter  $\varepsilon$  läßt sich der Anteil der so raus- und reingestreuten Elektronen kontrollieren. Für die S-Matrix  $S_\square$  dieser Weiche zum Reservoir  $p$  gilt (Büttiker, 1988)

$$\begin{pmatrix} c_1^{out} \\ c_2^{out} \\ c_3^{out} \\ c_4^{out} \end{pmatrix} = S_\square \begin{pmatrix} c_1^{in} \\ c_2^{in} \\ c_3^{in} \\ c_4^{in} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1-\varepsilon} & 0 & -\sqrt{\varepsilon} \\ \sqrt{1-\varepsilon} & 0 & -\sqrt{\varepsilon} & 0 \\ \sqrt{\varepsilon} & 0 & \sqrt{1-\varepsilon} & 0 \\ 0 & \sqrt{\varepsilon} & 0 & \sqrt{1-\varepsilon} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{in} \\ c_2^{in} \\ c_3^{in} \\ c_4^{in} \end{pmatrix}$$

Wieder ist  $S_\square$  unitär, also  $S_\square S_\square^\dagger = 1$ .

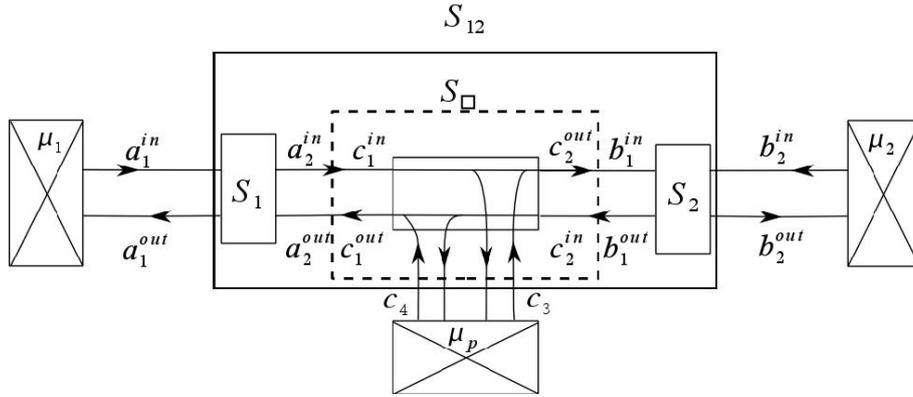


Abbildung 5.29: Zur Simulation von Dekohärenz nehmen wir an, dass ein Teil der Wellen in ein zusätzliches Reservoir mit Potenzial  $\mu_p$  propagiert und gleichzeitig ein Teil aus dem Reservoir phasen-inkohärent zurückfließt, so dass der Nettostrom zu diesem Reservoir gleich 0 ist.

Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass die Phasen, die bei Propagation von Streuer 1 oder 2 zu  $\square$  aufgesammelt werden, gerade  $\varphi/2 = kx_0$  sind. Damit erhält man

$$\begin{aligned} t_{12} &= \frac{t_2 e^{i\frac{\varphi}{2}} \sqrt{1-\varepsilon} e^{i\frac{\varphi}{2}} t_1}{1 - e^{i\frac{\varphi}{2}} \sqrt{1-\varepsilon} e^{i\frac{\varphi}{2}} r'_1 e^{i\frac{\varphi}{2}} \sqrt{1-\varepsilon} e^{i\frac{\varphi}{2}} r_2} \\ &= \frac{e^{i\varphi} \sqrt{1-\varepsilon} t_1 t_2}{1 - e^{2i\varphi} (1-\varepsilon) r'_1 r_2} \\ t_{13} &= \frac{e^{i\varphi/2} \sqrt{\varepsilon} t_1}{1 - e^{2i\varphi} (1-\varepsilon) r'_1 r_2} \\ t_{14} &= \frac{\sqrt{\varepsilon} e^{i\varphi/2} r_2 e^{i\varphi/2} \sqrt{1-\varepsilon} e^{i\varphi/2} t_1}{1 - e^{2i\varphi} (1-\varepsilon) r'_1 r_2} \\ t_{23} &= \frac{\sqrt{\varepsilon} e^{i\varphi/2} r_1 e^{i\varphi/2} \sqrt{1-\varepsilon} e^{i\varphi/2} t'_2}{1 - e^{2i\varphi} (1-\varepsilon) r'_1 r_2} \\ t_{24} &= \frac{e^{i\varphi/2} \sqrt{\varepsilon} t'_2}{1 - e^{2i\varphi} (1-\varepsilon) r'_1 r_2} \end{aligned}$$

Für die Transmissionen, Ströme und Spannungen erhält man folgende Ausdrücke

$$\begin{aligned}
T_{12} &= \frac{T_1 T_2 (1 - \varepsilon)}{|Z|^2} \\
|Z|^2 &= |1 - e^{2i\varphi} (1 - \varepsilon) r_1' r_2|^2 = 1 + (1 - \varepsilon)^2 R_1 R_2 - 2(1 - \varepsilon) \sqrt{R_1 R_2} \cos(2\varphi + \varrho_1' + \varrho_2) \\
T_{p1} &= |t_{13}|^2 + |t_{14}|^2 = \frac{1}{|Z|^2} (\varepsilon T_1 + \varepsilon (1 - \varepsilon) R_2 T_1) = \frac{T_1}{|Z|^2} \varepsilon [1 + (1 - \varepsilon) R_2] \\
T_{p2} &= |t_{23}|^2 + |t_{24}|^2 = \frac{1}{|Z|^2} (\varepsilon T_2 + \varepsilon (1 - \varepsilon) R_1 T_2) = \frac{T_2}{|Z|^2} \varepsilon [1 + (1 - \varepsilon) R_1] \\
I_p &= \frac{2e^2}{h} [T_{p1} (V_p - V_1) + T_{p2} (V_p - V_2)] = 0 \\
V_p &= \frac{V_1 T_{p1} + V_2 T_{p2}}{T_{p1} + T_{p2}} \\
I_1 &= \frac{2e^2}{h} [T_{1p} (V_1 - V_p) + T_{12} (V_1 - V_2)] = \\
&= \frac{2e^2}{h} \left[ T_{1p} \left( V_1 - \frac{V_1 T_{p1} + V_2 T_{p2}}{T_{p1} + T_{p2}} \right) + T_{12} (V_1 - V_2) \right] = \\
&= \frac{2e^2}{h} (V_1 - V_2) \left[ T_{12} + \frac{T_{1p} T_{2p}}{T_{1p} + T_{2p}} \right]
\end{aligned}$$

Der Leitwert ist darum

$$\begin{aligned}
G_{12,2P} &= \frac{2e^2}{h} \left[ T_{12} + \frac{T_{1p} T_{2p}}{T_{1p} + T_{2p}} \right] \\
&= \frac{2e^2}{h} \frac{T_1 T_2}{|Z|^2} \left[ (1 - \varepsilon) + \varepsilon \frac{[1 + (1 - \varepsilon) R_1][1 + (1 - \varepsilon) R_2]}{T_1 [1 + (1 - \varepsilon) R_2] + T_2 [1 + (1 - \varepsilon) R_1]} \right].
\end{aligned}$$

Wir betrachten, wie sich der Leitwert mit  $\varepsilon$  ändert.

**Fall  $\varepsilon = 0$ :** Das System ist also kohärent.

$$G_{12,2P} = \frac{2e^2}{h} \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}$$

**Fall  $\varepsilon = 1$ :** Es gilt  $|Z| = 1$ ,  $T_{12} = 0$ ,  $T_{p1} = T_1$ ,  $T_{p2} = T_2$  und somit

$$\begin{aligned}
G_{12,2P} &= \frac{2e^2}{h} \frac{T_1 T_2}{T_1 + T_2} \\
G_{12,2P}^{-1} &= \frac{h}{2e^2} \left( \frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} \right)
\end{aligned}$$

Das so gewonnene Ergebnis entspricht der inkohärenten Addition der Widerstände, also dem klassischen Verhalten.

**Zerstörung der Phasenkohärenz** Die Phasenkohärenz der propagierenden Elektronen wird aufgrund der Wechselwirkung mit unkontrollierten Freiheitsgraden zerstört. Die Längenskala auf der dies passiert wird mit  $l_\varphi$  bezeichnet. Sobald die Abmessungen  $L$  eines Leiters diese Phasenkohärenzlänge  $l_\varphi$  übersteigen, muss bei der Leitwertberechnung der Verlust der Phaseninformation berücksichtigt werden. Das obige Beispiel zeigt, wie wir das theoretisch modellieren können.

Qualitativ können wir wie folgt vorgehen: Man zerteilt zur Bestimmung von  $G(L > l_\varphi)$  den Draht in Segmente der Länge  $l_\varphi$  (Abb. 5.30). Nun berechnet man  $G^{-1}(l_\varphi)$  unter Annahme dass der Transport innerhalb jedes Segments phasenkohärent erfolgt. Die inkohärente Addition der so erhaltenen Teilwiderstände ergibt den Gesamtwiderstand  $G^{-1}(L > l_\varphi) = \frac{L}{l_\varphi} G^{-1}(l_\varphi)$ .

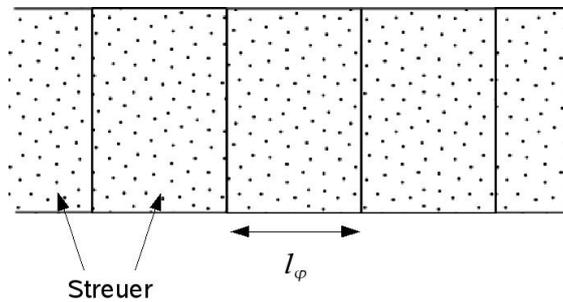


Abbildung 5.30: Zur Bestimmung des Widerstandes eines Leiters mit einer Länge  $L > l_\varphi$  wird dieser in Segmente von der Größe der Phasenkohärenzlänge zerlegt.

## 5.10 Anderson Lokalisierung

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels beschäftigen wir damit, wie mehrere hintereinander befindliche Barrieren den Transport beeinflussen. Dies ist ein Modell für einen 1-dimensionalen Leiter mit Störstellen.

Wir hatten gesehen, dass der Widerstand von zwei hintereinanderliegenden Streuern gegeben ist durch

$$G_{4P}^{-1} = \frac{h}{2e^2} g^{-1}$$

$$g^{-1} = \frac{R_1 + R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}{T_1 T_2}.$$

Wenn die Phase  $\vartheta$  zufällig verteilt ist, ergibt sich im Mittel für  $\cos \vartheta = 0$  und

$$\langle g^{-1} \rangle = \frac{R_1 + R_2}{T_1 T_2} = R_1/T_1 + R_2/T_2 + 2R_1 R_2/T_1 T_2.$$

Beachte, dass sich dieser Widerstand vom Ohm'schen (als Summe der 4-Punkt-Widerstände) unterscheidet,  $g_{\text{Ohm}}^{-1} = R_1/T_1 + R_2/T_2$ . Nur für  $R_i \ll 1$  gilt  $\langle g_{12}^{-1} \rangle \approx g_{\text{Ohm}}^{-1}$ .

Wir iterieren diese Formel, um den Widerstand einer Serienschaltung von  $n$  Barrieren plus einer  $(n + 1)$ -ten zu bestimmen,

$$\langle g_{n+1}^{-1} \rangle = \frac{R_{1\dots n} + R_{n+1}}{T_{1\dots n} \cdot T_{n+1}}.$$

Für  $R_i \ll 1$  und  $T_i \approx 1$  ist

$$\begin{aligned} \langle g_{n+1}^{-1} \rangle &= \langle g_n^{-1} \rangle \frac{1}{T_{n+1}} + \frac{R_{n+1}}{T_{1\dots n}} \\ &= \langle g_n^{-1} \rangle \frac{1}{1 - R_{n+1}} + \frac{R_{n+1}}{T_{1\dots n}} \end{aligned}$$

Diese Rekursionsformel schreiben wir um als Differentialgleichung (mit  $R_n = R$ )

$$\begin{aligned} \frac{d}{dn} \langle g_n^{-1} \rangle &= \langle g_n^{-1} \rangle R + \frac{R}{T_{1\dots n}} \\ &= R \left[ \langle g_n^{-1} \rangle + \frac{R_{1\dots n} + T_{1\dots n}}{T_{1\dots n}} \right] \\ &= R [2\langle g_n^{-1} \rangle + 1] \end{aligned}$$

Als Lösung erhält man

$$\langle g_n^{-1} \rangle = \frac{1}{2} (e^{2Rn} - 1).$$

Somit wächst der Widerstand  $\langle g_n^{-1} \rangle$  eines 1-dimensionalen ungeordneten Systems exponentiell mit der Länge  $L \propto n$ . Dieser quantenmechanische Effekt ist als Anderson Lokalisierung bekannt. Das hier diskutierte einfache Modell kann die Thematik nur anschnitten. Offensichtliche Fragen sind: Was geschieht in mehr als 1 Dimension? Was sind quantitative Konsequenzen? ...