

KVANTUMOS TRANSPORTFOLYAMATOK STATIKUS ÉS  
IDŐFÜGGŐ KÜLSŐ TEREKBE

Egyetemi jegyzet

Földi Péter

Szegedi Tudományegyetem  
Elméleti Fizikai Tanszék  
2008.

# Tartalomjegyzék

<b>1. Rész</b>	<b>1</b>
Bevezetés	1
<b>1. Alapok</b>	<b>7</b>
1.1. Az elektronspin és más fogalmak . . . . .	7
1.2. Emlékeztető a szilárdtestek sávszerkezetéről . . . . .	14
1.3. Effektív tömeg közelítés . . . . .	20
<b>2. A transzportjelenségek alapjai</b>	<b>23</b>
2.1. Drift és mozgékonyosság . . . . .	23
2.2. Szabad úthosszak, ballisztikus transzport . . . . .	27
2.3. Vezetési jelenségek alacsony hőmérsékleten: A Fermi-felület szerepe . . . . .	31
***	
<b>2. Rész</b>	<b>34</b>
<b>3. A kvantumozott transzportfolyamatok leírása</b>	<b>38</b>
3.1. Elektronállapotok ballisztikus vezetőkben . . . . .	39
3.2. Vezetőképesség és transzmissziós valószínűség . . . . .	45
<b>4. Transzmissziós valószínűségek számítása</b>	<b>55</b>
4.1. A szórásprobléma megoldása elemi módszerekkel . . . . .	56
4.2. Szórási mátrix és Green függvények . . . . .	62
<b>5. Alkalmazások stacionárius esetben</b>	<b>77</b>
5.1. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás . . . . .	77
5.2. Kvantumos Hall effektus . . . . .	88
<b>6. Egy időfüggő példa: Optikai gerjesztés</b>	<b>93</b>
6.1. Modell és megoldása . . . . .	94
6.2. Eredmények . . . . .	98
<b>Összefoglalás</b>	<b>104</b>
<b>Irodalom</b>	<b>105</b>

# Ábrák jegyzéke

1.	Diszperziós reláció több keresztirányú módus esetén . . . . .	3
2.	Ugrások és platók a kis keresztmetszetű vezető ellenállásában . . . . .	4
3.	Nano-méretű gyűrű SEM képe . . . . .	5
4.	Spin precesszió Bloch gömbön ábrázolva . . . . .	9
5.	A Fermi-Dirac eloszlás magas és alacsony hőmérsékleten . . . . .	13
6.	Sávszerkezet szemléltetése . . . . .	19
7.	Elektromos tér hatására létrejövő klasszikus drift mozgás . . . . .	24
8.	Félvezető heterostruktúra vázlata . . . . .	25
9.	Szabad úthossz és ballisztikus transzport . . . . .	30
10.	A Fermi-felület eltolódása elektromos térben . . . . .	32
11.	A vezeték szélességének hatása . . . . .	36
12.	Diszperziós reláció több keresztirányú módus esetén . . . . .	41
13.	Ballasztikus vezető áramkörbe kapcsolása . . . . .	45
14.	Négy érintkezőhöz kapcsolódó ballisztikus vezető . . . . .	51
15.	Egydimenziós kvantumgyűrű . . . . .	56
16.	Kvantumgyűrű vezetőképessége . . . . .	61
17.	Hullámamplitúdók a szórás mátrix definíciójához . . . . .	63
18.	A szórásprobléma rácsmodellje . . . . .	71
19.	Rácsmodell végessé redukálása . . . . .	72
20.	A Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás következményei . . . . .	81
21.	A sajátspinorok irányai kétdimenziós kvantumgyűrűben . . . . .	82
22.	Spinfüggő elektrontranszport kvantumgyűrűben . . . . .	83
23.	Sajátspinorok kvantumgyűrűben . . . . .	84
24.	Kvantumgyűrű spinpolarizációja . . . . .	86
25.	A transzverzális potenciál a Hall effektushoz . . . . .	88
26.	Állapotok a vezető széleinél nagy mágneses térben . . . . .	90
27.	Lézerimpulzus és anyag kölcsönhatásának sematikus rajza . . . . .	96
28.	A lézerindukált töltés helyfüggése . . . . .	100
29.	Lézerimpulzus hatása modell-szilárdtestben . . . . .	102

# Bevezetés

A transzportfolyamatok klasszikus elmélete, ami például diffúziós egyenleteken alapulhat, mikroszkopikus szinten a newtoni mechanika szabályaira épül, azaz a részecskék a makrovilágból jól ismert mozgásegyenleteknek engedelmeskednek. Ez a megközelítés a legtöbb esetben igen jó, a kísérleti tapasztalatokkal egyező eredményeket ad, de időnként komoly eltérések jelentkezhetnek, amelyeket csak úgy lehet kielégítően megmagyarázni, ha abból indulunk ki, hogy a mikrorészecskék viselkedését a kvantummechanika írja le.

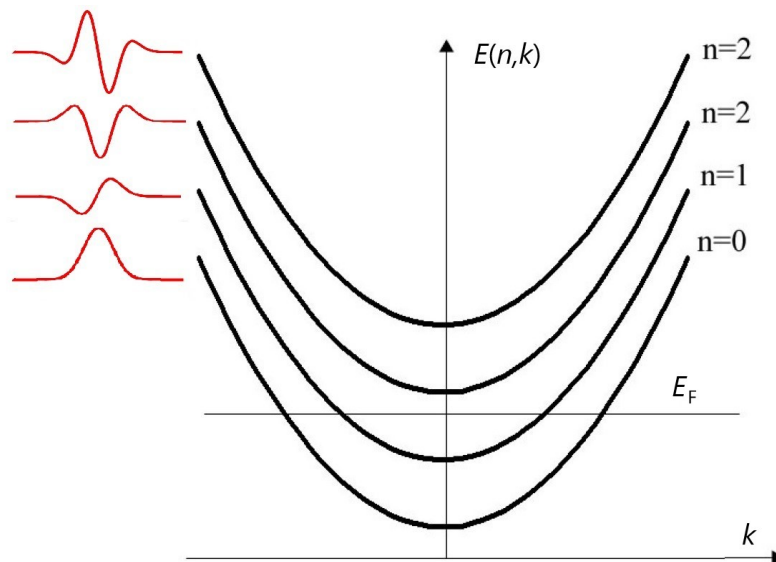
Az elektromos áram példáját tekintve, a klasszikus leírás nagy vonalakban azt jelenti, hogy elektronok sokasága halad a vezetőben átlagosan abba az irányba, amit az ott jelenlévő elektromos tér határoz meg. Ha emellett még valamilyen módon figyelembe vesszük azt is, hogy az elektronok nem gyorsulhatnak korlátlan mértékben, fékezőerő hat rájuk (aminek természetét ezen a ponton még nem szükséges részletesen meghatároznunk), arra jutunk, hogy a klasszikus elektronok lényegében állandó sebességgel haladnak át mondjuk egy vezetőken, nagyjából úgy, ahogyan piciny töltött biliárdgolyóktól várnánk. Ez a kép még szemléletesebbé tehető, ha a fékezőerőt gyakori ütközések következményének tekintjük, és bevezethetők olyan paraméterek is, amelyek a mérési eredményekkel kapcsolatba hozhatók, kísérletileg meghatározhatók. Ez a Drude-modell már alkalmas arra, hogy kísérletekkel összevethető jóslatokat tegyünk a segítségével. Figyelembe véve egyszerű voltát, a modell teljesítőképessége meglepően jó (pl. az Ohm törvény is származtatható ilyen módon).

Egy fontos ellenpélda már a 80-as évek vége óta ismeretes. Képzeld el, hogy valamilyen módon (pl. statikus elektromos tér alkalmazásával) egyre inkább csökkentjük egy (rövid) vezető keresztmetszetét. Ekkor – egy bizonyos mérettartomány alatt – az Ohm

törvénytől jelentősen eltérő módon az tapasztalható, hogy a minta vezetőképessége lényegében diszkrét értékeket vesz fel. A jelenség magyarázata hasonló ahhoz, mintha egyre csökkenő átmérőjű optikai szálak sorozatát tekintenénk. Ha adott frekvenciájú fény halad az üvegszálakban, akkor kezdetben, amikor az átmérő elég nagy, sok keresztirányú módust látunk, de végül eljutunk ahhoz a mérethez, amikor már csak egyetlen módushoz tartozik a szál mentén haladó hullámot leíró megoldás (egymódusú optikai szál). A kvantumos értelemben „hullámtermészetű” elektronokkal hasonló történik keskeny vezetőkben, a vezetőképesség ugrásai azoknál a keresztmetszeteknél figyelhetők meg, ahol a haladó (nem lecsengő) módusok száma megváltozik (ennek a részleteit később tekintjük át).

Fontos megjegyezni, hogy a fenti jelenség értelmezéséhez nem szükséges a kvantumos tulajdonságok összessége, az egyik legfontosabb, az interferenciaképesség (más néven koherencia) nem játszik szerepet itt. Ha azonban egy Young-interferométerhez hasonló elrendezést tekintünk, amelyben a beérkező elektron két útvonalat követve is eljuthat a kimenetre, akkor már nem mindegy, hogy az elektront leíró hullámfüggvény két „fele” képes-e interferálni a kimeneten. (Ilyen jellegű, egy bemenettel és egy kimenettel rendelkező, kísérletileg is létező geometriát mutat a 11. ábra.) A legfontosabb mennyiség itt a (fázis)koherenciahossz, ami lényegében azt mutatja meg, hogy mekkora az a távolság, amely esetén még jól észrevehető különbség tapasztalható a között a két eset között, amikor hullámhegy hullámhegygel vagy hullámvölgygel találkozik a kimenetnél. A koherenciahossz függ az anyagi minőségtől és a hőmérséklettől; ma már nem ritkák olyan minták, amelyekben (igaz, rendkívül alacsony hőmérsékleten) a tizedmilliméteres nagyságrendbe esik. (Érdemes megjegyezni, hogy a Dude modellbeli, szemléletes „átlagos szabad úthossz” helyett pontosabb leírás esetén még adott anyag esetén is több úthosszról kell beszélni, mivel pl. az energiarelagációhoz tartozó karakterisztikus hossz más lehet, mint a koherenciahossz.) Az elektronok szilárdtestbeli mozgásának teljesen kvantumos tartományát ballisztikus transzportnak szokás nevezni. (A másik – ebben a jegyzetben a továbbiakban kisebb mértékben érintett – véglet a diffúzív transzport, amikor a Drude modell jól működik, és érvényes az Ohm törvény.)

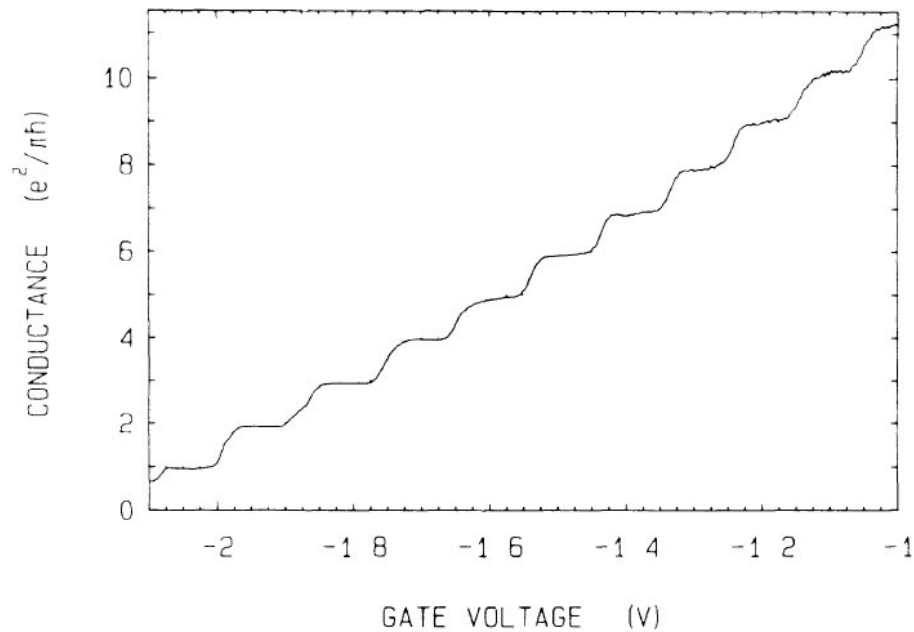
A másik irányból közelítve, a félvezető technológia hagyományos anyagai esetén a miniatürizálás lassacskán arra a fokra jut, amikor a kvantumos effektusok elkerülhetetlenné válnak. A kommerciális processzorokban jelenleg működő MOSFET technológia (megfelelő óvatossággal kezelendő) tervezett fejlődésének (International Roadmap for Devices and Systems) jelenlegi utolsó bejegyzése 5 nm csíkszélességet említ, ahol már mindenképpen jelentősek a kvantumos effektusok. Ez persze bizonyos szempontból pozitív, hiszen úgy is olvasható, hogy az emberi technológia azon a határon van, hogy kvantummechanikai alapokon működő szilárdtest eszközök tűnnek fel a láthatáron. (Ez még akkor is igaz, ha a mérőföldkőnek is tekinthető/kikiáltott Sycamore nevű kvantumprocesszor más technológián alapul, szupravezető áramkörökből áll.)



1. ábra. Az energia függése a  $k$  vektor áramirányú komponensétől különböző transzverzális módusokra, parabolikus  $V(y)$  potenciál esetén. Ennek a potenciálnak a sajátfüggvényeit (illetve azok valós részét) a bal oldalon pirossal felrajzolva láthatjuk.

Egy adott anyagban, konkrét  $V(y)$  potenciál esetén, csak véges sok transzverzális módushoz tartozik síkhullám megoldás: ha  $E(n, k) > E_F$  minden  $k$ -ra (mint az ábrán  $n > 1$  esetén), akkor az adott módus betöltetlen lesz a végtelennek gondolt vezetőben alacsony hőmérsékleten.

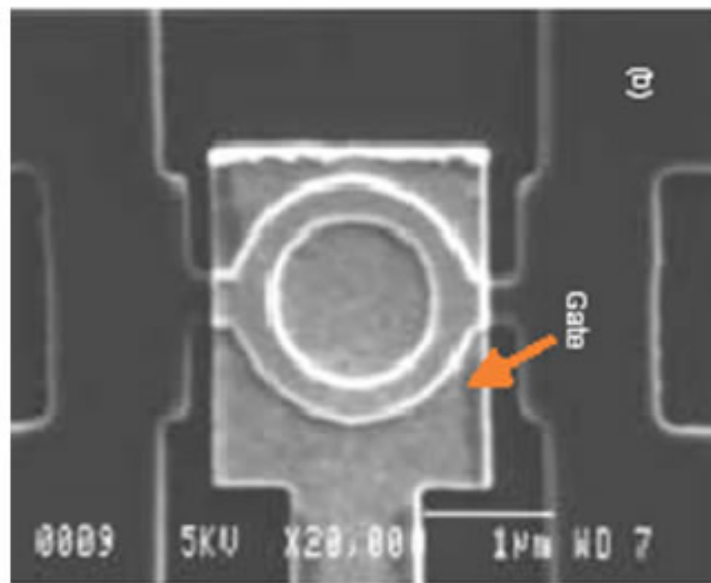
Visszatérve arra az esetre, amikor egyre inkább csökkentjük egy (rövid) vezető keresztmetszetét, azt tapasztaljuk, hogy – egy bizonyos mérettartomány alatt – az



2. ábra. Vezetőképesség a kapufeszültség függvényében egy olyan kísérletben ([5]), ahol a vezetőszakasz keresztmetszete folytonosan változtatható a kapufeszültség segítségével. Figyeljük meg az ugrásokat és a platókat, amiknek az észrevehető megjelenése azzal magyarázható, hogy a vezető módusok száma itt már elég kicsi, így akár egyetlen új módus belépése is mérhető.

Ohm törvénytől jelentősen eltérő módon az tapasztalható (2. ábra), hogy a minta vezetőképessége lényegében diszkrét értékeket vesz fel. Ez a jelenség hasonló ahhoz, mintha egyre csökkenő átmérőjű üvegszálak sorozatát tekintenénk. Ha adott frekvenciájú fény halad az üvegszálakban, akkor kezdetben, amikor az átmérő elég nagy, sok keresztirányú módust látunk, de végül eljutunk ahhoz a mérethez, amikor már csak egyetlen módushoz tartozik a szál mentén haladó hullámot leíró megoldás (egymódusú optikai szál). A kvantumos értelemben "hullámtermészetű" elektronokkal hasonló történik keskeny vezetőkben, az vezetőképesség ugrásai azoknál a keresztmetszeteknél történnek, ahol a haladó (nem lecsengő) módusok száma megváltozik.

A jegyzet első fele a fizikai alapok vázlatos áttekintését adja, a legelső fejezetben a szilárdtestek sávszerkezetéről, a periodikus potenciálban mozgó elektron effektív tömegéről és az elektron spinjéről lesz röviden szó. A második fejezet a transzport-



3. ábra. Nano-méretű gyűrű pásztázó elektronmikroszkópos képe. A vezetékek vastagsága 50 nm, az átmérő 250 nm, a gyűrű alakú félvezetőréteg vastagsága pedig 10 nm.

folymatokkal kapcsolatos alapfogalmakat tekinti át. Ez az első rész akár át is ugorható, ha az olvasó gyakorlottnak érzi magát ezekben a témákban.

A második részben először a Landauer és Büttiker nevéhez fűződő elméletről lesz szó, ami kapcsolatot teremt a minta vezetőképessége és a szóráselméleti fogalmak, mint pl. a transzmissziós és reflexiós együttható között. Ennek ismeretében a leggyakoribb kérdés ezeknek az együtthatóknak a meghatározása, ami egyes esetekben szinte elemi úton megoldható, a legtöbbször viszont a 4.2. alfejezetben röviden tárgyalt Green-függvények alkalmazását igényli. Végül az utolsó fejezetben a megismert módszereket fizikailag érdekes rendszerekre alkalmazzuk, a kvantum Hall effektusról és spinfüggő vezetési jelenségekről lesz szó.

A témával kapcsolatban, ha egyetlen könyvet kell ajánlani, akkor mindenképpen S. Datta [1] művét szeretném megemlíteni. Maga ez a jegyzet is sokat merít ebből a lehetőségekhez és mélységéhez mérten már-már olvasmányos könyvből. A fizikai alapok azonban nincsenek túlrészletezve benne, de szerencsére részben magyar nyelven is elérhető több kiváló kvantummechanika és szilárdtestfizika könyv [2–4], amivel



ez a hiányosság pótolható. És bár az érdeklődők számára első körben az [1–4] könyvek jelenthetnek segítséget, a teljesség kedvéért a szükséges helyeken az odavágó folyóirat-cikkekre való hivatkozás is megtalálható.

Azzal kapcsolatban, hogy milyen előképzettség szükséges a továbbiak megértéséhez, ismét az [1] könyvre utalnék, ahol a szerző "kicsivel több mint alap kvantummechanikát" említ. Ez lényegében azt jelenti, hogy egyrészt a kontextus jobb átlátása érdekében szilártestfizikai ismeretek mindenképpen hasznosak, és az is igaz, hogy a részletezendő kvantummechanikai modellek itt-ott túlmutatnak azokon az ismereteken, amiket egy bevezető előadás lefed, de az ezekkel kapcsolatos számítási módszerek nagy valószínűséggel menet közben elsajátíthatók.

# 1. fejezet

## Alapok

A továbbiakban jellemzően elektrontranszporttal fogunk foglalkozni, így mindenképpen hasznos az elektron néhány alapvető tulajdonságának az áttekintése, illetve annak a felidézése, hogy milyen módszerek használatosak az elektronállapotok leírására. Így a következő alfejezetben először az elektron spin és térbeli szabadsági fokaival foglalkozunk röviden, majd az atomtörzsek jelentette periodikus potenciál legfontosabb hatásait vizsgáljuk, külön figyelmet fordítva az effektív tömeg fogalmára. Nyilvánvalóan ez a fejezet nem pótolhat egy teljes kvantummechanika illetve szilárdtestfizika kurzust, itt csupán a legszükségesebb fogalmakat említjük meg.

### 1.1. Az elektronspin és más fogalmak

Az elektronspin, ahogyan a Dirac egyenlet is mutatja, természetes módon jelenik meg a relativisztikus kvantummechanikában. Maga koncepció azért kissé régebbi, Pauli már 1924-ben, az alkálifémek spektrumának vizsgálata során feltételezte, hogy az elektronoknak kétnívós belső struktúrájuk van. Ezután hosszabb idő eltelt, mire a kezdeti naiv képtől, ami egy forgó töltött részecskét képzelt el (innen az elnevezés) eljutottunk a mai nézőponthoz, ami szerint a spin az elektron belső impulzusmomentuma. Ennek az impulzusmomentumnak a nagysága  $\hbar/2$ , ami a részecske elválaszthatatlan tulajdonsága, ugyanúgy mint mondjuk nyugalmi tömege vagy a töltése. Ez persze azt jelenti, hogy

a spin fogalma mélyen kötődik az elemi részecskék fizikájához, de ezzel az aspektussal most nem foglalkozunk bővebben. A vizsgálandó jelenségek megértéséhez elegendő, ha a szokásos nemrelativisztikus kvantummechanikai leíráshoz (ami a térbeli szabadsági fokokhoz kapcsolódik) némileg mesterséges módon hozzáadunk egy kétállapotú belső struktúrát, ami a spint írja le.

Az elektronspin, mint impulzusmomentum környezetével talán a legközvetlenebb módon a hozzá kapcsolódó  $\mathbf{m} = g\mu_B\mathbf{S}$  mágneses momentumon keresztül hat kölcsön. Itt  $\mathbf{S}$  jelöli a spint, mint vektort,  $\mu_B$  a Bohr magneton,  $g$  pedig a giromágneses együttható, amelynek a meghatározása már szabad térben is (ahol értéke közel 2) kvantumelektrodinamikai számításokat igényel, és szilárdtestekben is összetett feladat.

A spinállapotok jellemzésére a továbbiakban kétkomponensű vektorokat (ún. Pauli spinorokat) használunk, ahol a vektorkomponensek tulajdonképpen kifejtési együtthatók egy adott bázisban, a legtöbbször a  $z$  spinirány sajátbázisában. Azaz egy tetszőleges tiszta spinállapotot a

$$|s\rangle = a|\uparrow\rangle_z + b|\downarrow\rangle_z \rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

módokon írhatunk fel, ahol

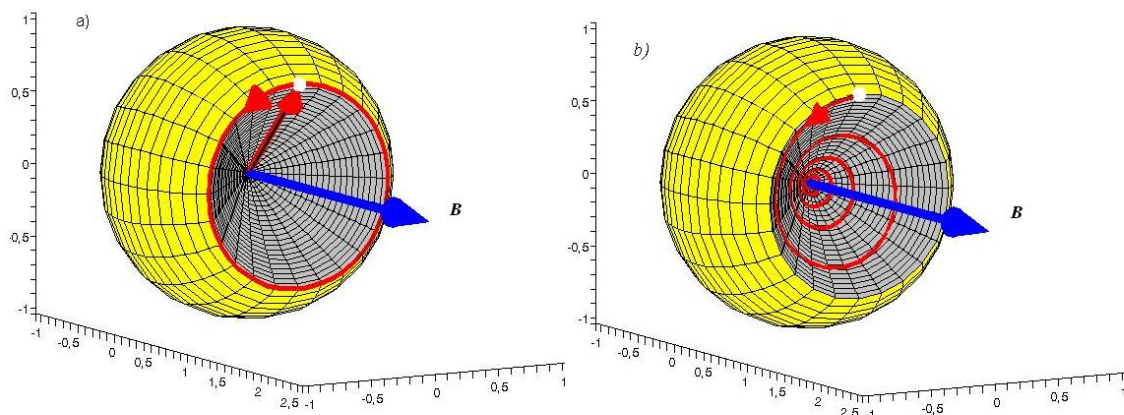
$$S_z|\uparrow\rangle_z = \hbar/2|\uparrow\rangle_z, \quad S_z|\downarrow\rangle_z = -\hbar/2|\downarrow\rangle_z, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (1.2)$$

Ezek a spinorok mindig teljesen polarizált állapotot írnak le. A polarizáció irányát gömbi koordinátarendszer polár és azimutuszögével jellemezhetjük, úgy, hogy  $\cos\theta = |a|^2 - |b|^2$  és  $\tan\phi = \Im(a^*b)/\Re(a^*b)$ . Általában azonban, ha sok elektron együtteséről beszélünk, vagy továbbra is egyetlen részecskéről, de úgy, hogy nem rendelkezünk állapotával kapcsolatban minden információval, sűrűségoperátorral kell jellemeznünk spin szabadsági fokot. Ekkor, figyelembe véve, hogy kétdimenziós kvantumrendszerről van

szó, a sűrűségoperátor mindig az alábbi alakba írható:

$$\rho = p \left( \frac{1}{2} \mathbf{1} + \mathbf{S} \mathbf{n} \right) + (1-p) \frac{1}{2} \mathbf{1}, \quad (1.3)$$

ahol  $\mathbf{S}$  jelöli a spinoperátorok vektorát ( $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ ),  $\mathbf{1}$  pedig az egységoperátor. Az  $\mathbf{n}$  egységvektor jelöli ki a (részleges) polarizáció irányát,  $p$  pedig a polarizációfokot jellemzi: ha  $p = 1$ , akkor az állapot teljesen spinpolarizált (azaz tiszta, olyan alakba írható, mint amit az (1.1) egyenlet mutat), míg a  $p = 0$  esetben az állapotot az egységgel arányos sűrűségoperátor jellemzi, azaz teljesen polarizálatlan, másként mondva a polarizáció teljesen véletlenszerű. A sűrűségoperátorral való jellemzéssel tel-



4. ábra. Spin precesszió Bloch gömbön ábrázolva. A bal oldali részen nincs külső, a kvantumozott koherenciát elrontó effektus, míg a jobb oldali ábra azt az esetet mutatja, amikor az állapot polarizáltsága fokozatosan eltűnik.

jesen egyenértékű, ha Bloch vektort használunk, aminek az iránya megegyezik az  $\mathbf{n}$  egységvektoréval, hossza pedig  $p$ . Így az (1.3) egyenlettel adott állapotok kölcsönösen egyértelműen leképezhetők egy egységsugarú gömbre (ezt hívják Bloch-gömbnek). A gömb felülete tiszta állapotokat jelöl, amelyek természetesen teljesen polarizáltak, még hozzá abban az irányban, amit az origóból az adott pontba mutató vektor határoz meg. A teljesen polarizálatlan állapotnak a gömb középpontja felel meg. Általában valamilyen külső, dekoherenciát előidéző folyamat okozza azt, hogy egy kezdetben tiszta spinál-

lapot időfejlődése során elveszti polarizáltságát, és esetleg végül tökéletes keverékké változik. A 4. ábra egy ilyen folyamatot szemléltet, a bal oldali panel a spin precesszióját mutatja egy külső mágneses tér körül egyéb zavaró tényezők nélkül, míg a jobb oldalon az látszik, hogy realiztikusabb leírás esetén a polarizációfok csökken az idő múlásával.

Az elektront azonban nem csupán a spin jellemzi, természetesen térbeli pozíciójával kapcsolatos állapota – amit leggyakrabban hullámfüggvénnyel jellemzünk – ugyanennyire fontos. Más szóval, ez a részecske két, jellegében különböző szabadsági fokkal rendelkezik, az egyik a térbeli helyzetével kapcsolatos, a másik pedig egy belső szabadsági fok, a spin. Tiszta kvantummechanikai állapotát így általánosan

$$\Psi = \sum_{nm} c_{nm} |\phi_n\rangle \otimes |s_m\rangle \quad c_{nm} \in \mathbb{C} \quad (1.4)$$

alakban írhatjuk, ahol a diszkrét de végtelen  $|\phi_n\rangle$  sorozat bázis a térbeli szabadsági fokhoz tartozó Hilbert-térben,  $|s_1\rangle, |s_2\rangle$  pedig két, ellentétes irányú spint leíró állapot (pl.  $|\uparrow\rangle_z$  és  $|\downarrow\rangle_z$ ). Ez utóbbiak a spin szempontjából természetesen szintén bázist alkotnak. Konkrét számítások esetén gyakran előfordul, hogy a térbeli rész  $|\phi_n\rangle$  vektorai folytonos sokaságot alkotnak (gondoljunk pl. a síkhullámok szerinti kifejtésre) a fenti diszkrét indexekkel jellemezhető bázis (ami konkrét esetben valamilyen ortogonális függvényrendszer lehet) helyett, de ebben a fejezetben a könnyebb áttekinthetőség érdekében maradunk az (1.4) egyenlet jelöléseinél.

Fontos megjegyezni, hogy a

$$\Psi_{prod} = |\phi\rangle \otimes |s\rangle \quad (1.5)$$

alakú, úgynevezett szorzatállapotok pusztán egy részhalmazát alkotják az (1.4) egyenlet által megadott összes lehetséges állapotnak: Gondoljunk pl. arra a szuperpozícióra, amit két, térben jól elkülöníthető hullámfüggvény alkot úgy, hogy a két helyen ellentétes irányú a spin:

$$\Psi_{np} = |\phi_1\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\phi_2\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \quad (1.6)$$

Azokat az állapotokat, amelyek a fentihez hasonlóan nem írhatók szorzatalakba, összefonódott állapotoknak hívjuk. Érdeemes megjegyezni, hogy az irodalom összefonódottságról általában két különböző részecske esetében beszél, itt azonban egyazon részecske két különböző szabadsági foka fonódik össze. (Angolul több részből álló rendszerek kapcsán az entanglement szót használják, míg esetünkben inkább az intertwining a pontos.)

Abban az esetben, ha egy fizikai rendszerben több elektron található, azt sem hagyhatjuk figyelmen kívül, hogy az elektronok fermionok, így tejesen (a spint is beleértve) ugyanazt az állapotot két elektron nem foglalhatja el (Pauli-féle kizárási elv). Pontosabban fogalmazva, a teljes rendszer állapotának mindig antiszimmetrikusnak kell lennie bármely két elektron felcserélésére. Ez az állítás magában foglalja az előzőt, hiszen ha két elektron ugyanabban az állapotban van, akkor az antiszimmetrizálás kinullázza ezt a globális állapotot. Példaként tekintsük a hidrogénszerű ionokat, amelyek energiaszintjei egyetlen elektron esetén tetszőleges magtöltésre analitikusan meghatározhatók. Ekkor – a semleges atom modellje felé haladva – szokásos azt a nulladik közelítést alkalmazni, hogy egy-egy újabb elektron hozzáadása a rendszerhez alapvetően nem befolyásolja a nívók helyzetét. (Érdeemes azért megjegyezni, hogy a Coulomb kölcsönhatás hosszú hatótávolsága miatt ez egy erős közelítés.) Ekkor, ha a hőmérséklet nem túl magas (azaz a tipikus termikus energia,  $kT$ , lényegesen kisebb mint a nívók közötti energiakülönbség), akkor az elektronok az alacsony energiájú állapotokat töltik be. A Pauli-elvnek megfelelően az újabb elektronok nem kerülhetnek az alapállapotba, ha az már betöltött. Az újabb és újabb elektronok számára csak egyre magasabb energiájú állapotok érhetők el.

Szilárdtest rendszerek esetében, amikor az elektronok száma sok nagyságrenddel túllépi az egyetlen atomra jellemző számot, a helyzet hasonló. Nulla hőmérsékleten az elektronok által elfoglalható energiaszintek közül az alacsonytól a magasabb energiák felé haladva annyi van betöltve, amennyi az elektronok száma. Az utolsó betöltött szint energiáját egyensúlyi esetben Fermi-energiának ( $E_f$ ) hívjuk. Mivel szilárdtesteknél általában a nívók közötti energiakülönbség lényegesen kisebb mint atomok esetében, így

termikus gerjesztések magasabb hőmérsékleten már észrevehető szerepet játszanak. Konkrétan, annak a valószínűsége, hogy egy  $E$  energiájú állapot betöltött, a Fermi-függvénnyel adható meg:

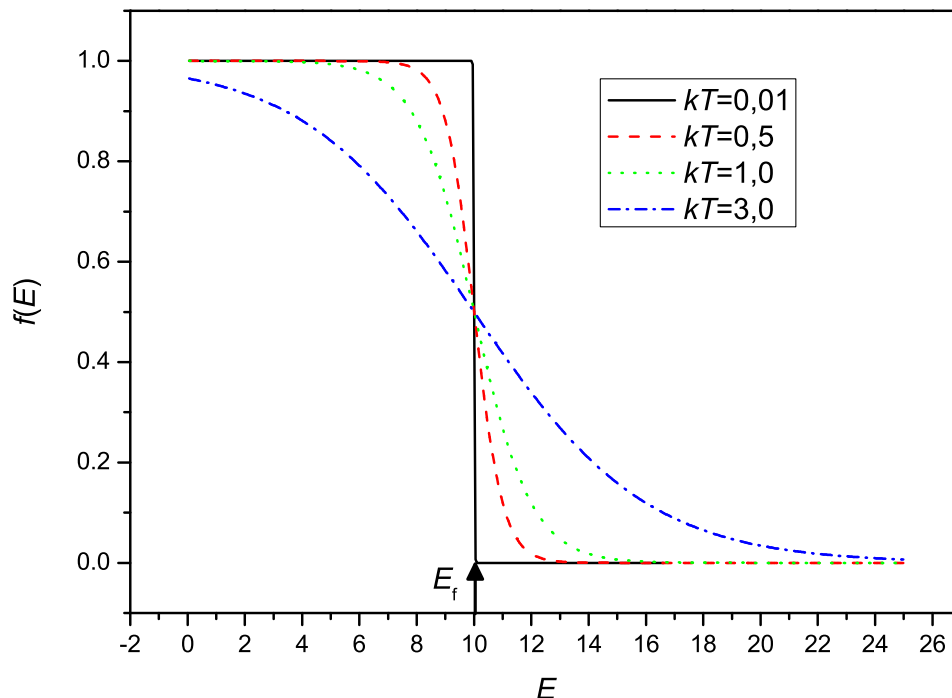
$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_f)/kT}}. \quad (1.7)$$

Amint az könnyen látszik,  $f(E) \leq 1$ , így a fentiekkel összhangban a Fermi-Dirac statisztikának eleget tévő elektronok közül egy adott energiaszinten mindig maximum egy tartózkodhat. Az 5. ábra négy különböző hőmérséklet esetére mutatja az  $f(E)$  függvény viselkedését. Érdeemes megjegyezni, hogy ha pl. az anyag homogén külső elektromos térbe kerül, akkor a Fermi-szint (és a teljes eloszlás) eltolódik, hiszen a töltött elektronok energiája megváltozik a tér nélküli esethez képest. Ha az elektromos potenciál nulláról  $V$ -re változik, akkor ez eltolódás mértéke  $eV$ . Ebben az esetben a Fermi-szint helyett inkább már kémiai potenciálról szokás beszélni, amit hagyományosan  $\mu$ -vel jelölnek. A kémiai potenciál a továbbiakban csak ebben a kontextusban ( $\approx$  Fermi-szint külső elektromos tér jelenlétében) fog előfordulni, de fontos fejben tartani, hogy ennél azért jóval általánosabb fogalom, a termodinamikában a részecskeszám megváltozására képes rendszereket jellemzi, így akár a kémiai reakciók leírásában is szerepe játszik.

Az 5. ábráról leolvasható (és persze számítással is igazolható), hogy alacsony hőmérsékletű határesetben (ekkor az alapállapotú és a Fermi energia különbsége jóval kisebb mint  $kT$ )

$$f(E) \approx \Theta(E_f - E), \quad (1.8)$$

azaz  $E_f$ -ig minden energiaszint betöltött, utána pedig egy sem ( $\Theta$  a Heaviside-féle egységugrás függvény). Ez az eset – amit degeneráltnak neveznek – igen fontos a kvantumtulajdonságok szempontjából, mivel általában a túl erős termikus fluktuációk elfedik a kvantumtulajdonságokat. Alacsony hőmérsékleten, amint azt később látni fogjuk, a vezetési jelenségeket azok az elektronok határozzák meg, amelyek energiája közel esik  $E_f$ -hez. Ezért érdemes bevezetni a rájuk jellemző  $k_f$  hullámszámvektort, ami az energiával a konkrét fizikai rendszer által meghatározott viszonyban van, szabad



5. ábra. A Fermi-függvény viselkedése különböző hőmérsékletek esetén. Ahogyan látható, az alacsony hőmérsékletű vagy degenerált esetben az (1.8) egyenlettel adott egységurás-szerű függvény közelíti jól az eloszlást, míg a degenerált, magas hőmérsékletű határesetben lényegében az (1.10) Boltzmann statisztikához jutunk.

elektron gáz esetén (lásd a következő alfejezet) pl.:

$$k_f = \frac{\sqrt{2mE_f}}{\hbar}, \quad (1.9)$$

ahol  $m$  az elektron tömege.

A másik, szintén könnyen számolható véglet a nemdegenerált vagy magas hőmérsékletű határeset, amikor is

$$f(E) \approx \frac{e^{-(E-E_f)/kT}}{1 + e^{-(E-E_f)/kT}}, \quad (1.10)$$

azaz Boltzmann statisztikával állunk szemben, ami már önmagában bizonyos klasszikus



viselkedést jelez.

## 1.2. Emlékeztető a szilárdtestek sávszerkezetéről

A molekulák és szilárdtestek fizikai-kémiai tulajdonságait szokásos körülmények között elektronszerkezetük határozza meg. Az összes, a teljes leíráshoz szükséges hullámfüggvény és a hozzájuk tartozó energia meghatározása első elvek alapján (a kvantummechanikai modelltől kiindulva) az elektronok számának növekedésével egyre bonyolultabbá váló feladat. Szilárdtestek esetén mindenképpen valamilyen közelítő eljárás szükséges ahhoz, hogy a kísérleti eredményekkel és a mindennapi tapasztalattal összevehetők eredményekre jussunk. Az elméleti leírásban alkalmazott közelítéseket szinteknek képzelhetjük, minél feljebb lépünk, annál realiztikusabb a modell, és ezzel párhuzamosan egyre több erőforrást igényel a kezelése. Nulladik közelítésben a szilárdtest méretének megfelelő dobozba zárt, nem kölcsönható elektronokat vizsgálunk. Ez a modell – egyszerűsége ellenére – több alapvető fogalom megértését segíti, ezért most röviden áttekinthetjük fontosabb tulajdonságait, következtetéseit. Tekintsük tehát a

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (1.11)$$

egyrészecske Hamilton operátort, ami minden elektronra azonos, és pusztán a kinetikus energiának megfelelő kifejezést tartalmazza. (Matematikailag a rendszer Hilbert-tere – mint ahogyan a későbbiekben is – az egyes elektronok állapotát leíró terek tenzorszorzata, de a kölcsönhatás elhanyagolása miatt elegendő egyetlen részecskére koncentrálnunk.) Az anyagdarab, amiben az elektrongáz található, legyen az egyszerűség kedvéért egy  $L$  oldalhosszúságú kocka. A kocka oldallapjain ebben az esetben periodikus peremfeltételt szokás szabni, azaz megköveteljük, hogy a hullámfüggvény  $L$  szerint periodikus legyen minden irányban. Ekkor  $H_0$  sajátfüggvényei derékszögű koordinátákkal a

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = L^{-3/2} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \quad (1.12)$$

módon adhatók meg, ahol a síkhullámnak megfelelő hullámszámkomponensek diszkrét értékeket vehetnek fel:  $k_x, k_y, k_z = m2\pi/L \dots$ , ahol  $m$  egész. Ez azt is jelenti, hogy a hullámszávektorok terének (röviden: a  $k$ -térnek) egységnyi térfogatában  $(\frac{L}{2\pi})^3$  megengedett állapot van.

A  $\Phi_{\mathbf{k}}$  állapothoz tartozó sajátenergiák a  $\mathbf{k}$  vektorkomponensek másodfokú függvényei

$$H_0\Phi_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k})\Phi_{\mathbf{k}}, \quad E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (1.13)$$

Ezt másképpen úgy szokták megfogalmazni, hogy az  $E(\mathbf{k})$  diszperziós reláció kvadratikus, az ekvienergiás felületek gömbök a  $k$ -térben. Emiatt egyszerűen kiszámítható, hogy egy adott  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  energiánál kisebb energiával rendelkező állapotok száma  $\frac{4\pi k^3}{3} (\frac{L}{2\pi})^3$  (illetve a spint is beleszámítva kétszer ennyi). Így ha  $N$  elektronunk van, akkor legfelső betöltött állapot energiája – azaz a Fermi-energia – az  $E_f = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$  kifejezéssel adható meg, ahol  $n_e = N/L^3$  az elektronsűrűség.

A szabad elektrongáznál pontosabb modellt kapunk, ha a kristályt alkotó atomtörzsek hatását is figyelembe vesszük. Ennek a legkönnyebb – és az atomtörzsek elektronokhoz képesti nagy tömegét figyelembe véve mindenképpen értelmes – módja az, ha a kristályrács rezgéseit nem vesszük figyelembe, állandó pozíciójú vonzócentrumok sorozatának tekintjük a kristályt. Ebben a jegyzetben eddig a szintig jutunk el, és, mint majd látni fogjuk, már így is érdekes eredmények kiszámítására nyílik mód. Modellünk tehát független elektronokat ír le, amelyek ugyanazt a potenciáletteret érzik, így a megfelelő Hamilton-operátor

$$H_{el} = \frac{P^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (1.14)$$

alakú, ahol az első tag a kinetikus energiának felel meg, míg a második a rács hatását írja le. A statikusnak tekintett rács ebben az esetben az energiához pusztán konstanssal járul hozzá.

A fokozatos közelítések következő szintjét az jelenti, amikor a rácsrezgések okozta effektusokat is figyelembe vesszük, ami az elektronokra vonatkozóan azzal jár, hogy

az (1.14) egyenlet által meghatározott állapotok élettartama nem lesz végtelen, a rácsrezgések "kiszórják" ezekből az állapotokból az elektronokat. A fenti egyenlet jelentette közelítés ebből a szempontból addig használható, amíg a megfelelő élettartamok elegendően hosszúak a vizsgált probléma szempontjából. (Nyilván más jellegű, pl. rácshibákból származó szórási folyamatok is jelen vannak, így valójában a fenti közelítés jogosságának vizsgálatakor az összes olyan effektust figyelembe kell venni, ami az állapotok élettartamát csökkenti.) Alacsony hőmérséklet és elegendő tisztaságú minta esetén az (1.14) egyenlet alkalmazása reálisnak tekinthető közelítést jelent. Meg kell persze jegyezni, hogy vannak jelenségek, amikor az elektronok egymás közötti kölcsönhatása adja az értelmezés kulcsát, az ezt leíró modellek tárgyalása azonban nem célja ennek a jegyzetnek.

Az ideális szilárdtest végtelen, periodikus (kristály)struktúra. Három dimenzióban gondolkodva, ez azt jelenti, hogy létezik három, nem egy síkban fekvő vektor, amelyeknek megfelelő eltolások az eredetivel ekvivalens helyzetbe viszik a kristályt. Természetesen, ha három ilyen vektort találunk, akkor azonnal végtelen sok a rendelkezésünkre áll, hiszen eltolások  $n$ -szeres egymásutánja ugyanazt az eredményt adja, mint egy  $n$ -szeres hosszúságú vektornak megfelelő eltolás. Általában a legrövidebb ilyen tulajdonságú vektorhármast  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$  tagjait hívjuk elemi rácsvektoroknak, de ettől eltérő választás is praktikus lehet bizonyos esetekben. Az elemi rácsvektorok által kifeszített paralelepipedont pedig elemi cellának nevezzük. Gyakran használatos még az ún. Wigner-Seitz cella is, amit lényegében úgy kapunk, hogy hozzárendeljük minden rácsponthoz azt a térfogatrészt, ami közelebb esik hozzá, mint bármely más, ekvivalens rácsponthoz (Dirichlet-szerkesztés [4]). Az elemi cellák szimmetriatulajdonságairól, osztályozásukról bővebben a [4] könyvben olvashatunk.

Már ezen a ponton érdemes rámutatni, hogy a rácsperiodicitás a fizikailag mérhető mennyiségekre vonatkozik, ami kvantumos esetben érdemel külön megfontolást. A legfontosabb az, hogy a hullámfüggvénynek nem kell periodikusnak lennie, mindaddig, míg a lokális fizikai mennyiségek mérése a hullámfüggvény által meghatározott állapotban ugyanazt az eredményt adja a rács ekvivalens pontjaiban. Az összes lehetséges

fizikai mennyiséget figyelembe véve ez persze azt jelenti, hogy a  $\Psi(x)$  hullámfüggvény pusztán fázisában különbözhet ezekben a pontokban, így pl. a  $|\Psi(x)|^2$ -tel arányos elektronsűrűség már periodikus lesz.

Konkrétabban, jelölje tehát az elemi rácsvektorokat  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ . Ekkor mindig található olyan  $\{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3\}$  ún. elemi reciprok rácsvektorok, amelyekkel

$$\mathbf{a}_i \mathbf{k}_j = \delta_{ij}, \quad (1.15)$$

ahol a jobb oldalon a Kronecker-féle  $\delta$  szimbólum jelenik meg. Mivel a rácsvektorok hosszúságdimenziójúak, a belső szorzat pedig dimenziótlan, a  $\mathbf{k}$  vektorokhoz pl.  $m^{-1}$  mértékegység tartozik. A rácsperiodicitás ezekkel a jelölésekkel úgy írható, hogy a kristályrácsot leíró (ebben a közelítésben időben állandó) potenciális energia kifejezésére teljesül, hogy

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}), \quad (1.16)$$

ahol  $\mathbf{R}$  egy tetszőleges rácsvektor, azaz  $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i$  egész  $n_1, n_2, n_3$ -mal. Ekkor a Bloch-tétel szerint a  $H_{el}$  operátor egy sajátállapotát tekintve,

$$H_{el}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1.17)$$

a sajátfüggvény egy síkhullám és egy periodikus függvény szorzataként is felírható:

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.18)$$

ahol tehát  $u(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{r})$ . Más szóval, minden sajátenergiához tartozik (legalább) egy olyan  $\mathbf{k}$  vektor, amivel a megfelelő állapot az (1.18) egyenlet által adott alakú. Továbbá, ha az energiát is az itt megjelenő  $\mathbf{k}$ -val indexeljük

$$H_{el}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.19)$$

akkor  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  periodikus lesz a  $k$ -térben:  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$ , ahol  $\mathbf{G}$  egy tetszőleges reciprok rácsvek-

tor:  $\mathbf{G} = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{k}_i$ , egész  $n_1, n_2, n_3$ -mal. Maguk azok a Bloch-állapotok, amik egymástól csupán reciprok rácsvektorban különböznek, azonos elektronsűrűséget adnak, és fázisaik is jól meghatározott kapcsolatban állnak egymással:

$$\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \widetilde{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.20)$$

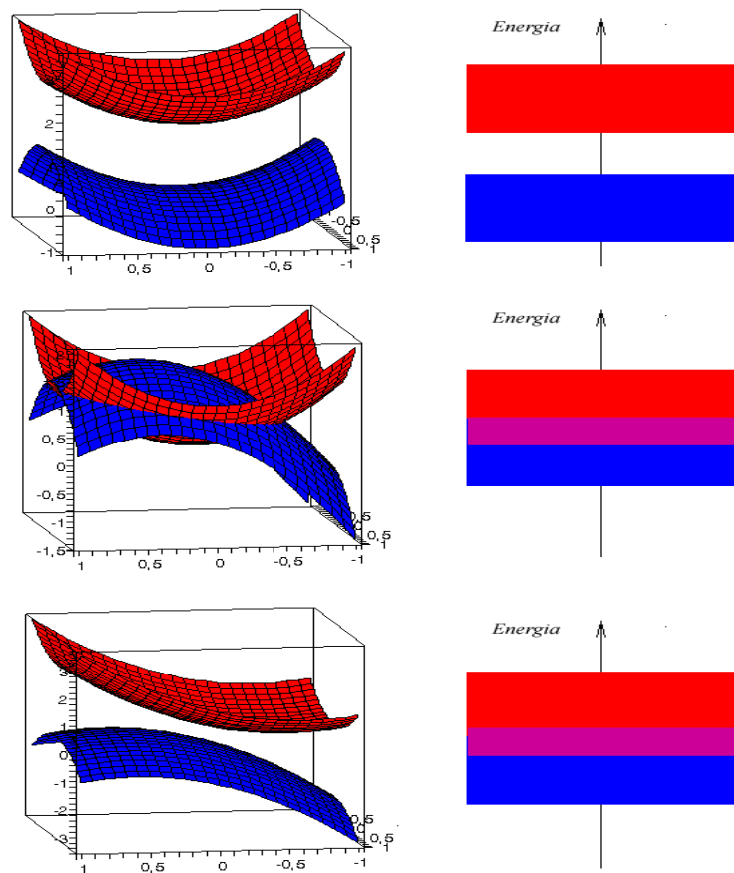
ahol tehát  $\widetilde{u}_{\mathbf{k}}$  szintén rácsperiodikus. Ez alapján elegendő azokra a  $\mathbf{k}$  vektorokra koncentrálni, amelyek az első Brillouin-zónában (ez a "reciprok rács Wigner-Seitz cellája" [4]) található, ezek ismeretében az elektronszerkezet teljesen leírható. Így az energiaszintek számítása elvben azt jelenti, hogy minden, az első Brillouin-zónába eső  $\mathbf{k}$  vektorra megoldjuk az (1.19) sajátértékegyenletet. Könnyen ellenőrizhető, hogy a síkhullám rész leválasztható az (1.18) alakú állapotokról, és minden  $\mathbf{k}$  vektorra a

$$H_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

egyenlethez jutunk, ahol koordinátareprezentációban

$$H_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar \nabla}{i} + \hbar \mathbf{k} \right)^2 + U(\mathbf{r}). \quad (1.22)$$

A sajátvektorok  $n$  indexe az azonos  $\mathbf{k}$  vektorokhoz lehetségesen tartozó különböző energiájú eseteket számozza. Ha valami módon az összes, az első Brillouin-zónába eső  $\mathbf{k}$ -ra meghatározzuk az energiákat, akkor három dimenzióban minden  $n$ -re egy hiperfelületet kapunk. Tulajdonképpen ezeket a hiperfelületeket nevezzük sávoknak. Ha megvizsgáljuk, hogy mekkora az a minimális és maximális energia, ami egy adott  $n$ -hez tartozik, akkor kapjuk azt az egyszerűbben áttekinthető sávképet, amiben pusztán energiák szerepelnek. Az ábrázolhatóság kedvéért kétdimenziós eseteket mutat a 6. ábra. A bal oldalon látható néhány példa, ahogyan két különböző sávban az energiák függhetnek a  $k_x, k_y$  reciprok vektoroktól, míg a jobb oldalon az egyes sávokhoz tartozó energiataromány látható a sávnak megfelelő színnel ábrázolva. A legfelső sorban a két sávhoz tartozó energiák nem fednek át, létezik egy ún. tiltott sáv, azaz bizonyos energiájú



6. ábra. Lehetséges sáv szerkezetek kétdimenziós kristályban. Az ábra a szemléltetés kedvéért készült, nem egy konkrét sáv szerkezeti számolás eredménye, de jól mutatja, hogyan fordulhat elő fém illetve szigetelő jellegű szerkezet, illetve azt is, hogy  $\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} = 0$  egyenlettel meghatározott pontokban a maximum és minimum mellett nyeregpontok is előfordulhatnak.

megoldások nem fordulnak elő. Ez alatt egy olyan eset látható, amikor a sávokhoz tartozó felületek a  $k$ -térben átmetszik egymást, ekkor nincs tiltott sáv. Ugyanígy minden energiaérték (a felső sáv maximuma és az alsó minimuma között) előfordulhat a legalsó sorban szemléltetett esetben, csak ekkor a sávokat szemléltető felületeknek nincs közös pontjuk. A valódi szilárdtestek sáv szerkezete természetesen ennél általában összetettebb, a [4] könyvben konkrét példákat is találunk. A továbbiak szempontjából fontos utalni arra, hogy szennyezett félvezetők esetén a vezetési tulajdonságok szempontjából lényeges tiltott sáv sem teljesen üres, a szennyező (ún. donor vagy akceptor) atomoknak

megfelelő energiaszintek itt helyezkednek el.

Érdemes megjegyezni azt is, hogy konkrét számítások esetén (a szabad elektrongázhoz hasonlóan), véges, de nagy kristályt szokás tekinteni, és ekkor a periodikus határfeltétel miatt a lehetséges  $\mathbf{k}$  vektorok sűrűn, de nem folytonosan helyezkednek el az első Brillouin-zónában. Ilyenkor – főleg ha a sávok közel kerülnek egymáshoz – már nem teljesen egyértelmű, hogy mely állapotok tartoznak ugyanahhoz a sávhoz. Ez különösen akkor lehet érdekes, amikor annak az eldöntése a kérdés, hogy egy adott pontban a nívók keresztezik-e egymást, vagy ellenkezőleg, kicsi, de véges marad az energiakülönbség közöttük.

### 1.3. Effektív tömeg közelítés

A szilárdtestek energiaszintjeinek az ismerete önmagában még nem elegendő az alapvető tulajdonságok leírásához, bár a sávszerkezet kiszámítás mindenképpen a legfontosabb (és leginkább munkaigényes) lépés. Fizikai szempontból a nívók betöltöttsége ugyanennyire lényeges. Adott sávszerkezet és elektronszám esetén az alapállapot meghatározása már nem túl bonyolult feladat, hiszen az állapotokat energia szerint sorba rendezve egyszerűen "alulról fölfelé" kell az elektronokat elhelyeznünk a nívókon. A Fermi-energia az alapállapotban még éppen betöltött legmagasabb energia lesz. Ahogyan azt a későbbiekben látni fogjuk, a vezetési jelenségekben alapvetően a Fermi-energiához közel eső állapotok vesznek részt, így a ennek a nívónak a helyzete a sávokhoz képest alapvető fontosságú. Ez különösen abban a nem ritka esetben érdekes, ha tiltott sáv jelenik meg a lehetséges energiák között. Egy sávon belül ugyanis az állapotok közötti energiakülönbség igen kicsi, így ha vannak be nem töltött állapotok is, akkor gyenge külső hatás (pl. elektromos tér) is képes annyi energiát átadni a rendszernek, ami makroszkopikusan érzékelhető áramhoz vezet. Ez történik fémekben, ahol a Fermi-nívó egy részlegesen betöltött sáv belsejébe esik. Ha azonban a Fermi-szint a tiltott sávban van, akkor lényegében az alatta lévő (ún. vegyértékkötési) sáv teljesen betöltött, míg felette lévő (vezetési) sáv üres. Ekkor a tiltott sáv szélessége lesz a lényeges paraméter, hiszen az határozza meg, hogy mennyi energiát kell befektetnünk a vezetési sávba való

gerjesztéshez. Szigetelők esetén a tiltott sáv elegendően széles ahhoz, hogy normális körülmények között lényegében ne folyhasson áram, míg félvezetőknel a termikus gerjesztés már elegendő lehet a vezetési jelenségek létrejöttéhez.

A továbbiak szempontjából fontos lesz az az eset, amikor a vizsgálandó tulajdonságokat megszabó elektronok egy sáv minimumához közel eső tartományban helyezkednek el. (Ez teljesül pl. alig betöltött fémes sávokra, de félvezetők vezetési sávjára is.) A leg-egyszerűbb, homogén esetben (pl. köbös kristályoknál), ha a minimum helye  $\mathbf{k}_0$ , akkor első nem eltűnő rendben

$$\epsilon_{\mathbf{k}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}_0} + A (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2, \quad (1.23)$$

ahol  $A = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}^2}$ . Szokásosan ezt az együtthatót az  $A = \frac{\hbar^2}{2m^*}$  alakba írjuk. Az itt megjelenő

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}^2} \right)^{-1}, \quad (1.24)$$

effektív tömegnek nevezett paraméterrel a diszperziós reláció tehát a szabad elektrongázra emlékeztető,  $\epsilon_{\mathbf{k}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m^*} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2$  alakú lesz. Ezt úgy is tekinthetjük, mintha a periodikus potenciált tartalmazó Hamilton operátor helyett egy

$$H_{eff} = \epsilon_{\mathbf{k}_0} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \quad (1.25)$$

effektív, szabad részecske-szerű operátor spektrumát látnánk. Ha az (1.23) közelítés érvényes, akkor azt szokás mondani, hogy az elektronrendszer a szabad elektrongázhoz hasonlóan viselkedik, azzal a különbséggel, hogy ez elektron  $m$  tömege helyett minden összefüggésben az  $m^*$  effektív tömeg használandó. Vegyük észre, hogy az (1.25) effektív Hamilton operátor használata nem pusztán azt jelenti, hogy a periodikus rácspotenciált az energiakifejezésben az effektív tömegem keresztül vesszük figyelembe, hanem azt is, hogy maguk az sajátállapotok is símábbak, nem tükrözik már a transzlációs szimmetriát, a rácsállandónak megfelelő gyors változás nem jelenik meg  $H_{eff}$  síkhullám sajátállapotaiban. (Továbbá  $H_{eff}$  síkhullám megoldásai  $\mathbf{k}_0$ -lal el vannak tolva az eredeti, periodikus Hamilton operátor Bloch-állapotaiban szereplő síkhullámokhoz képest.)



A fenti analógia tovább is vihető: Abban az esetben, ha a periodikus potenciálon túl külső elektromágneses tér is hat az elektronra, akkor megindokolható, hogy az  $i\hbar\nabla \rightarrow i\hbar\nabla + e\mathbf{A}$  (Peierls-) helyettesítés (ahol  $\mathbf{A}$  a külső tér vektorpotenciálja) a közelítés érvényességi körén belül helyes leírást ad. Az könnyen látható, hogy egy  $V$  külső potenciáltér additív módon kell hogy szerepeljen  $H_{eff}$ -ben, így

$$H_{eff} = \left[ \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m^*} \right] + V + \epsilon_{\mathbf{k}_0} \quad (1.26)$$

lesz az effektív Hamilton operátor következőkben használandó legáltalánosabb alakja. Jegyezzük meg, hogy maga az effektív tömeg fogalom, és így a fenti közelítés is egy adott sávon belül érvényes, különböző sávokban más és más  $m^*$  adódhat. Térben inhomogén esetben pedig effektív tömeg tenzort kell használnunk, mert ekkor a (reciprok) tér különböző irányokban különböző lesz az (1.23) sorfejtésben szereplő másodrendű tagok együtthatója [4].

Az ebben a fejezetben megismert közelítés jól alkalmazható félvezető heterostrukturák (pl. GaAS-AlGaAs, lásd később) vezetési sávjára, így gyakorlati szempontból jelentős eszközök leírásában is fontos szerepe van. A továbbiakban legtöbbször e modell keretein belül maradunk.

## 2. fejezet

# A transzportjelenségek alapjai

Ebben a fejezetben röviden összefoglaljuk a transzportfolyamatokkal kapcsolatos klasszikus elmélet azon fogalmait, amelyek használatosak a kvantumos leírás estén is. Megvizsgáljuk, hogy milyen feltételek mellett használhatók a klasszikus egyenletek, hol az a határ, ami után már más modell ad megfelelő leírást.

### 2.1. Drift és mozgékonyosság

Klasszikus részecskének képzelve a vezetési elektronokat, külső tér nélküli mozgásuk véletlenszerű, nincs benne kitüntetett irány, így nem is hoznak létre áramot. Ha azonban  $\mathbf{E}$  külső elektromos tér is jelen van, akkor erre a bolyongásszerű mozgásra ráakódik egy, a tér irányába mutató "drift" sebesség, ami már makroszkopikusan mérhető áramhoz vezet. Szemléletesen, a 7. ábrán látható mozgást képzelhetjük el, ahol a gyakori ütközések változtatják meg a sebesség irányát, de azért "átlagosan"  $\mathbf{E}$ -vel párhuzamosan mozog a részecske. Két ütközés között a tér gyorsítja, de hosszabb idő alatt egy állandónak tekinthető  $\mathbf{v}_d$  sebességgel mozog. Ha a részecske impulzusa az ütközések következtében  $\tau$  időállandóval változik, akkor

$$\frac{m\mathbf{v}_d}{\tau} = e\mathbf{E}, \quad (2.1)$$

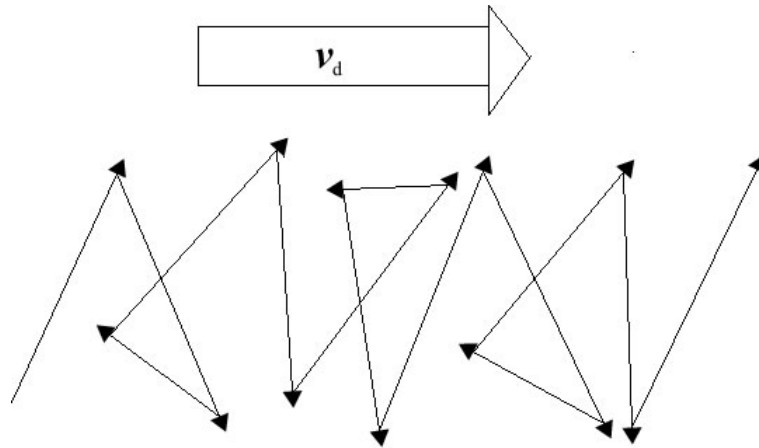
ami azt fejezi ki, hogy az ütközési folyamatokból származó fékezőerő egyenlő az elektromos mező által kifejtett erővel. Ha a

$$\mu = \left| \frac{v_d}{E} \right| \quad (2.2)$$

definícióval bevezetjük a mozgékonyágnak nevezett mennyiséget, akkor a fenti két egyenlet összevetéséből adódik, hogy ebben a képben:

$$\mu = \frac{|e|\tau}{Em}. \quad (2.3)$$

A mozgékonyág jelentőségét az adja, hogy kísérletileg meghatározható, és ha egy



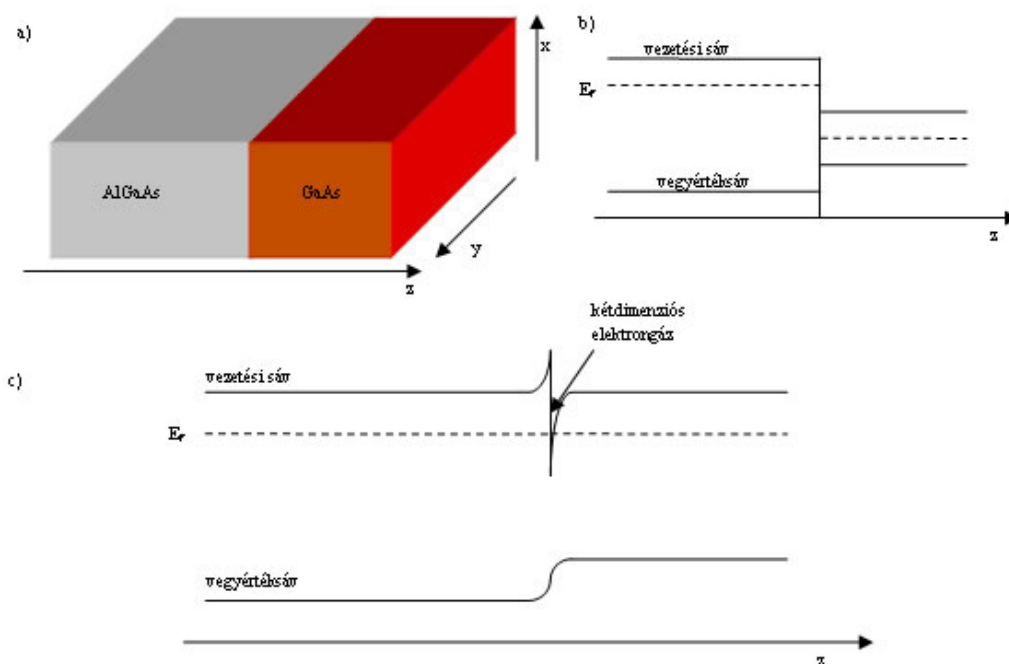
7. ábra. Elektromos tér hatására létrejövő klasszikus drift mozgás

adott mintára már ismert, akkor a fenti egyenlet segítségével a  $\tau$  relaxációs idő közelítő (a modellen belül pontos) értéke is könnyen kiszámítható. (Ha klasszikus hozzáállás már nem elegendő,  $\tau$  értékét gyakran akkor is így becsülik.)

A mozgékonyág a hőmérséklet csökkenésével nő, ami a rácsrezgések szerepének a gyengülésével magyarázható. Elegendően alacsony hőmérsékleten már lényegében csak a szennyezések, kristályhibák csökkentik  $\mu$  értékét, azaz a minta tisztasága a meghatározó. Számszerűen, "bulk", azaz nagy térfogatú szennyezett félvezetőkben pl.  $10^{17}/\text{cm}^3$  donorkoncentráció mellett a mozgékonyág nem nagyobb  $10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ -nál. Tiszta félvezetőkben lehet ennél lényegesen nagyobb is, de akkor a vezetési elektronok koncentrációja

igen alacsony lesz, így az alkalmazások szempontjából ez nem kimondottan érdekes.

Más a helyzet azonban, ha félvezető heterostrukturákat tekintünk. Ezek a legegyszerűbb esetben két, különböző anyagi minőségű félvezető összeillesztésével (vagy inkább összenövesztésével) jönnek létre, ahogyan a 8. ábra is mutatja. Itt két, különböző szélességű tiltott sávval rendelkező félvezető anyag határfelületét láthatjuk, amelyek közül az egyik (az AlGaAs) ráadásul szennyezett. Egyensúlyban a két anyag Fermi szintjeinek ugyanott kell elhelyezkednie (egyébként áram folyna, egészen addig, míg be nem áll ez az állapot), ami úgy jön létre, hogy a magasabb Fermi nívójú anyagból az elektronok "átfolynak" a határfelületen, eközben azonban a helyhez kötött donoratomok pozitív töltése kompenzálatlanul marad. Így az átmenet bal oldalán pozitív "tértöltés" jön létre, ami oda vezet, hogy a sávok a legelső rajzon szemléltetett módon torzulnak. (Kiszámítandó feladatnak tekintve a jelenséget, a térerősségre vonatkozó Poisson-egyenlet és az annak a jobb oldalán álló töltéssűrűség konzisztens megoldása adja az egyensúlyi sávképet.) Az energiaszintek ebben a heterostrukturában úgy alakulnak,



8. ábra. Félvezető heterostruktúra vázlatja. Az a) rész a geometriát mutatja, a b) ábrán azt az elképzelt sávképet látjuk, ami a kétféle anyag hirtelen összeillesztése után azonnal jönne létre, míg a kialakuló egyensúlyi sávszerkezetet a c) ábra mutatja.

hogy a felület mentén, egy vékony rétegben, a Fermi nívó "belelóg" a vezetési sávba, így környezetéhez képest ott erősen megnő az elektronsűrűség – ezt nevezik kétdimenziós elektrongáznak. Mivel ebben az esetben a szennyezések térben elkülönülnek az áramvezetésért felelős elektronoktól, a felület mentén történő mozgás során kevés az ütközés, így  $\mu$  túllépheti a  $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  értéket is. A heterostruktúrák, illetve a kétdimenziós elektrongáz jelentőségét pontosan ez a nagy mozgékonyság adja.

A mozgékonyság mérésére egyik lehetséges módszer az, amikor mágneses tér jelenlétében vizsgáljuk a minta ellenállását. A kétdimenziós esetről maradván, tekintsük tehát most azt a problémát, amikor a klasszikusan mozgó elektronokra az elektromos tér mellett a felületre merőleges mágneses mező is hat. Ekkor a Lorentz-erő miatt a (2.1) egyenlet helyett

$$\frac{m\mathbf{v}_d}{\tau} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_d\mathbf{B}), \quad (2.4)$$

ahol tehát, ha a mozgás az  $xy$  síkba zajlik,  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ . Ha figyelembe vesszük, hogy az áramsűrűség az  $n_s$  elektronsűrűséggel a  $\mathbf{J} = e\mathbf{v}_d n_s$  módon fejezhető ki, akkor kisebb átrendezés után a (2.4) egyenlet a következő mátrixos alakba írható:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sigma} \begin{pmatrix} 1 & -\mu B \\ \mu B & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

ahol  $\sigma = |e|n_s\mu$ . Mivel az  $\mathbf{E}$  térerősséget és a  $\mathbf{J}$  áramsűrűséget a  $\rho$  fajlagos vezetőképességi tenzor köti össze, azt kaptuk, hogy

$$\rho_{xx} = \frac{1}{\sigma}, \quad \rho_{yx} = -\rho_{xy} = \frac{\mu B}{\sigma} = \frac{B}{|e|n_s}. \quad (2.6)$$

Ebben a klasszikus képben tehát az elektromos térrel megegyező "hosszanti" irányú ellenállás konstans, míg "keresztirányban" az ún. Hall ellenállás lineárisan nő  $B$ -vel. Ez a viselkedés magas hőmérsékleteken és gyenge terek esetén jó közelítést ad. Ebben az esetben a szokásos mérési elrendezés az, hogy egy téglalap alakú minta két szemben fekvő végére feszültséget kötve egyenáramot hoznak létre ebben az irányban. Méri az áramerősséget, az áramot létrehozó feszültség nagyságát és az áramra merőleges irány-

ban kialakuló ún. Hall feszültséget. Ezekből az adatokból  $\rho_{xx}$  és  $\rho_{xy}$  meghatározható, onnan pedig a fentiek alapján mind a mozgékonyág, mind pedig az elektronsűrűség kiszámítható.

Erős terek és nagyon alacsony hőmérséklet esetén azonban a klasszikus Drude-modellen alapuló (2.6) eredmények már nem jól írják le a minták viselkedését, ekkor  $\rho_{xx}$  erősen oszcillál  $B$  függvényében, míg  $\rho_{xy}$  csúcsok egymásutánját mutatja. Ez a jelenség már csak kvantumos modellekkel értelmezhető, így a későbbiekben térünk vissza rá.

## 2.2. Szabad úthosszak, ballisztikus transzport

A 2.1. fejezet alapján látható, hogy egy adott mintát tekintve a töltéshordozók mozgékonyága és koncentrációja mérésekkel is meghatározható, és az eredményekből az impulzusra jellemző  $\tau$  relaxációs idő kiszámítható. Alaposabban megvizsgálva a kérdést, azt mondhatjuk, hogy ez a  $\tau$  és a és a két ütközés között eltelt átlagos  $\tau_c$  idő között a

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_c} \alpha \quad (2.7)$$

kapcsolat áll fenn, ahol  $0 \leq \alpha \leq 1$  az egyes ütközések "hatékonyágát" jellemzi: Ha egyetlen ütközés során alig változik meg az impulzus, akkor  $\alpha$  kicsi és  $\tau$  jóval hosszabb mint  $\tau_c$ . Az  $L$  átlagos szabad úthossz az a távolság, amit a részecske befut, amíg kezdeti impulzusa teljesen meg nem változik, azaz

$$L = v_f \tau. \quad (2.8)$$

Azért a  $v_f$  a Fermi-sebesség (a Fermi energiával rendelkező elektronok sebességének a nagysága) került az egyenletbe, mert – ahogyan később majd látjuk – a vezetési jelenségekért nem túl nagy hőmérsékleten ezek a részecskék a felelősek. Ettől az érveléstől eltekintve  $L$  fenti kifejezése felső becslésnek tekinthető, hiszen egy tetszőleges elektron sebessége általában kisebb mint  $v_f$ . Nagy mozgékonyágú félvezetőkben, alacsony hőmérsékleten, 10-100 $\mu$ m szabad úthossz tipikusnak tekinthető, de pl. polikristályos

fémfilmeknél  $L$  jellemzően három nagyságrenddel kisebb.

Az átlagos szabad úthossz fenti definíciójából látszik, hogy az a részecskék impulzusával kapcsolatos. Ha azonban a kvantummechanikai leírásra gondolunk, egy ettől eltérő, a fázisrelaxációval kapcsolatos karakterisztikus hossz szintén jelentőséggel bír. Tekintsük azt a folyamatot, amiben egy elektron hullámfüggvényének fázisa kezdetben jól meghatározott, majd az ütközések következtében egyre inkább véletlenszerűvé válik. A jelenség karakterisztikus ideje a  $\tau_\varphi$  fázisrelaxációs idő, ami  $\tau_c$ -vel a (2.7) egyenlethez hasonló módon hozható kapcsolatba:

$$\frac{1}{\tau_\varphi} = \frac{1}{\tau_c} \beta, \quad (2.9)$$

de általánosságban nem feltétlenül igaz, hogy  $\tau \approx \tau_\varphi$ . A legkönnyebben egy interferenciakísérletben képzelhetjük el, hogyan tanulmányozható a hullámfüggvény fázisának véletlenszerűvé válása: Valamilyen módon "két részre kell osztani" a hullámfüggvényt, elérni azt, hogy, az egyes "részek" fázisa kontrollálható módon változzon meg egymáshoz képest, majd újra egyesíteni őket, és meg kell vizsgálni, hogy mennyire látható a keletkező interferenciamintázat. Ennek az elképzelésnek az optikai megfelelője egy kétréses interferenciakísérlet, ahol a nyalábok fáziskülönbsége az általuk megtett utak különbözőségéből fakad. Szilárdtest rendszerekben pl. a 3. ábrán látható gyűrűszerű geometria alkalmas ilyen kísérlet elvégzésére, itt a gyűrű síkjára merőleges mágneses tér segítségével lehet a relatív fázist befolyásolni. Ilyen jellegű interferenciakísérletekben az várható, hogy a keletkező minimumok és maximumok annál markánsabban különíthetők el, minél rövidebb  $t_{bent}$  időt tölt a részecske a berendezésben. Kissé pontosabban azt írhatjuk, hogy egy valódi, véges  $\tau_\varphi$ -vel jellemezhető rendszerben az interferenciamintázat láthatósága

$$e^{-t_{bent}/\tau_\varphi} \quad (2.10)$$

faktorral csökken az ideális, fázisrelaxáció nélküli esethez képest. A lényeges különbség az impulzushoz képest az, hogy a fázis véletlenszerűvé válásához *időben állandó* szórócentrumok nem járulnak hozzá. Mindaddig ugyanis, amíg a kétutas interferenciakísér-

letben a két út között jól meghatározott fázisviszonyok vannak, addig az interferencia megmarad, bár lehet, hogy pl. a maximumok helye máshol lesz. (Ez olyan, mintha egy optikai interferométer egyik karjába egy üveglemez helyeznénk, ami fázistolást idéz elő.) Sztatikus szórási folyamatok esetén tehát  $\beta = 0$  a (2.9) egyenletben.

Ha azonban a szórócentrumok belső struktúrával rendelkeznek, így képesek állapotukat megváltoztatni, akkor már az interferenciát is el tudják rontani. Ez azzal függ össze, hogy interferenciakép akkor várható, ha (elvileg sem) lehet megmondani, hogy a részecske melyik utat követte. Ha azonban az pl. egyik útvonal mentén – ha éppen arra jár – az elektron jó eséllyel megváltoztatja egy szórócentrum belső állapotát, akkor elvben már tudható, hogy merre haladt, így nem is jön létre interferencia.

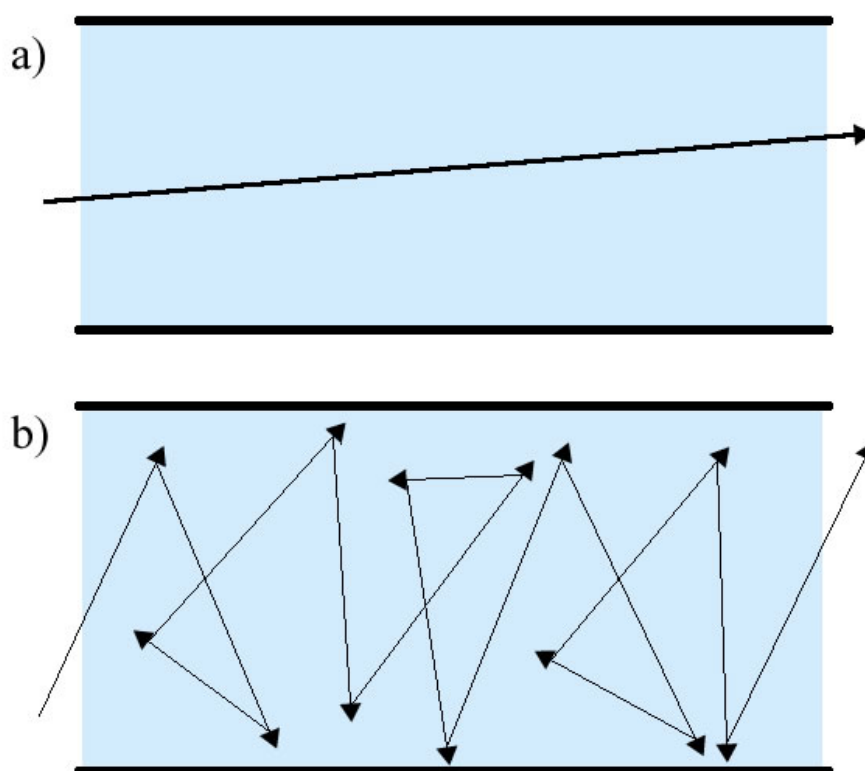
Időben változó szórási jelenségeket idézhetnek elő a rácsrezgések is, így hozzájárulnak a fázisrelaxációhoz. A rövidebb hullámhosszal rendelkezők nagyobb hatékonysággal, mivel esetükben kevésbé jellemző, hogy korreláltan változtatják meg a két úthoz kapcsolódó fázist. Az elektron-elektron kölcsönhatás szintén hozzájárul a fázis véletlenné válásához, sőt, alacsony hőmérsékleten ez a legfontosabb mechanizmus.

Az impulzus és a fázis relaxációjának karakterisztikus ideje tehát különböző módon függ attól, hogy milyen jellegű szórási folyamatokkal azonosítjuk a klasszikus modell "ütközéseit", így általában nem azonosak. Kis mozgékonyaságú félvezetőkben és polikristályos filmekben előfordul, hogy  $\tau_\varphi \gg \tau$ , ekkor a nagyszámú sztatikus centrumon történő rugalmas szórási folyamat következményeként a klasszikus mozgás már a 9. ábra alsó részén látható bolyongásjellegű, de közben a fáziskoherencia még megmarad. Nagy mozgékonyaságú minták esetén azonban általában igaz, hogy  $\tau \approx \tau_\varphi$ , és ekkor a fázisra jellemző koherenciahossz

$$L_\varphi = v_f \tau \quad (2.11)$$

alakba írható, és lényegében megegyezik az átlagos szabad úthosszal. Ekkor a minta mérete a meghatározó abból a szempontból, hogy koherens (azaz kvantumos), vagy inkoherens (klasszikus) viselkedést várunk. Ha a koherenciahosszknál lényegesen nagyobb mintában haladnak az elektronok, (a 9. ábra alsó része szemlélteti ezt az esetet) akkor nem várhatók olyan jelenségek, amelyek a klasszikus leírás keretein túlmutat-





9. ábra. Szabad úthossz, ballsztikus és diffuzív transport

nak. Ha azonban az elektronok lényegében zavartalanul, "ballisztikusan" haladnak át a mintán, ahogyan a 9. ábra felső része szemlélteti, akkor valójában már nem is érdemes az ábrán látható jól meghatározott pályán mozgó elektronra gondolni, mert a legtöbb jelenség megértése kvantummechanikai modellek alkalmazását igényli. A 3. fejezetben ezzel az utóbbi esettel fogunk foglalkozni.

## 2.3. Vezetési jelenségek alacsony hőmérsékleten:

### A Fermi felület szerepe

Egy homogén vezetőben a  $\mathbf{J}$  áramsűrűség arányos az elektronsűrűség és a drift sebesség szorzatával,  $\mathbf{J} = en_s \mathbf{v}_d$ . Ez azt sugallja, hogy az összes vezetési elektron átlagosan a drift sebességgel mozog, és így ténylegesen hozzájárul a létrejövő áramhoz. Alacsony hőmérsékletű degenerált elektrongázban azonban ez a kép nem teljesen helyes. Ha megmérnénk, hogy mekkora áram tartozik különböző energiájú elektronokhoz (ilyen jellegű méréseket ma már el is lehet végezni), az derülne ki, hogy a vezetéshez lényegében csak a Fermi-energiához esők ( $\pm$  néhányszor  $kT$ ) járulnak hozzá.

Szabad elektrongázban (vagy az effektív tömeg közelítés keretein belül) a jelenséget úgy képzelhetjük, hogy az áramot létrehozó (nem túl erős) külső elektromos tér "eltolja" az egyensúlyi energianívókat. Pontosabban, ha  $f(\mathbf{k})$  adja meg annak a valószínűségét, hogy egy  $\mathbf{k}$  hullámszámvektorral jellemzett állapot betöltött, akkor alacsony hőmérsékleten és egyensúlyban (külső tér nélkül)  $f(\mathbf{k}) = 1$ , ha  $k < k_f$ , a Fermi hullámszámnál nagyobb  $k$  értékekhez tartozó állapotok pedig betöltetlenek. Ha  $\mathbf{E}$  külső elektromos teret kapcsolunk a rendszerre, akkor, ahogyan azt a 10. ábra mutatja, a teljes eloszlás eltolódik a tér irányába:

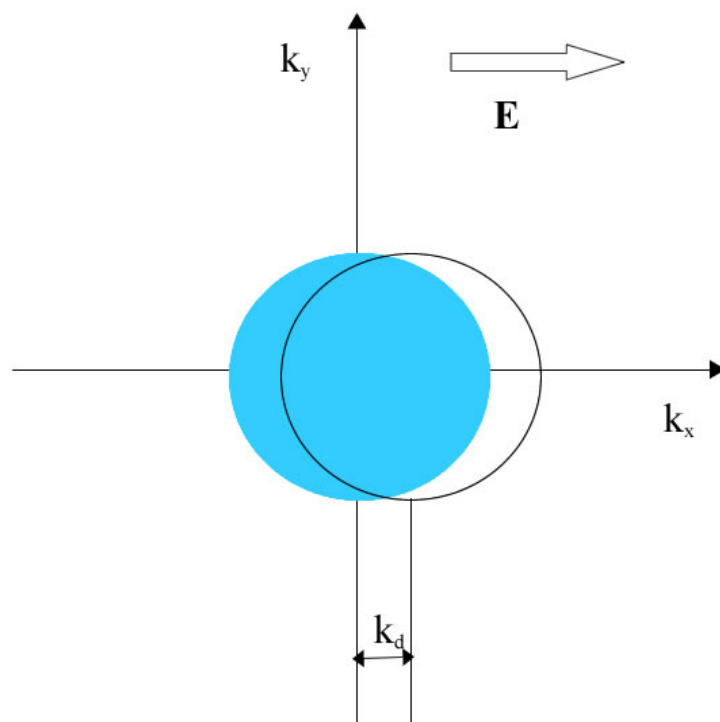
$$[f(\mathbf{k})]_{E=0} = [f(\mathbf{k} - \mathbf{k}_d)]_{E \neq 0}, \quad (2.12)$$

ahol az eltolódás mértékét a klasszikus képben a drift sebességhez tartozó hullámszámvektor adja meg:

$$\mathbf{k}_d = \frac{e\mathbf{E}\tau}{\hbar}. \quad (2.13)$$

Mindebben fizikailag az a fontos, hogy azokkal az elektronokkal, amelyek energiája jóval kisebb, mint  $E_f$ , gyakorlatilag nem történik semmi, mindaddig, amíg  $k_d$  elegendően kicsi  $k_f$ -hez képest: Ezek az alacsony energiájú állapotok teljesen betöltöttek akár van külső tér, akár nincs. A betöltöttség változása csak a  $k_f$ -hez közel eső állapotokat érinti, ezek közül azok, amelyek az  $E = 0$  esetben betöltetlenek de  $\mathbf{k}$  vektoruk a tér irányába esik betöltötteké válnak, míg az ellentétes irányú  $\mathbf{k}$  vektorral jellemzett állapotok

kiürülnek.



10. ábra. A Fermi-felület eltolódása külső elektromos térben.

A jelenség szemléltetésére azt a közelítést szokás alkalmazni, hogy két, ún. kvázi-Fermi nívót definiálunk, egyet a tér irányába mozgó elektronok, egyet pedig az ellentétes irányú mozgást végzők számára:

$$F^+ \approx \frac{\hbar^2(k_f + k_d)^2}{2m}, \quad F^- \approx \frac{\hbar^2(k_f - k_d)^2}{2m}. \quad (2.14)$$

Ha  $k_d \ll k_f$ , akkor a  $F^+ - F^-$  különbség könnyen ellenőrizhető módon azzal energiával lesz arányos, amit az elektron a külső tér hatására a szabad úthossznak megfelelő távolság befutása alatt nyer. Érdekes azt is megemlíteni, hogy a (2.12) eltolódást úgy is tekinthetjük, hogy a  $k$ -térben a külső elektromos térrel egyező irányban az elektronok sűrűsége megnő, így ebben a képben a vezetési jelenségek a koncentrációkülönbség következtében létrejövő diffúzióknak is tekinthetők.

Az interpretációtól függetlenül igaz azonban, hogy alacsony hőmérséklet esetén a

vezetési jelenségek leírását nagyban megkönnyíti az a tény, hogy ekkor nem szükséges az összes elektront figyelembe vennünk, elegendő a Fermi-szinthez közel eső energiával rendelkezőkkel foglalkoznunk. Kissé sarkítva, a "nulla hőmérsékleten" tapasztalható vezetés a Fermi-felület által meghatározott tulajdonság. És bár a gondolatmenet, amiből ezt az állítást leszűrtük, erősen támaszkodik klasszikus érvekre, a következtetés teljesen kvantumos leírás esetén is igaz.

## Alacsony dimenziós esetek

Az előzőekben az egyszerűség kedvéért többször használtunk olyan modellt, amelynél csak egyetlen transzverzális irányt vettünk figyelembe. Ez a kétdimenziós kép nem csupán a szemléltetés miatt érdekes, bizonyos esetekben a vezetés valóban egy felület mentén valósul meg, elegendő pl. a grafénre gondolnunk. Természetesen itt nem szigorúan kétdimenziós rendszerekről van szó, de igaz, hogy létezik egy irány (legyen az a  $z$ ), melyben a minta kiterjedése lényegesen kisebb, mint a másik kettőben. Ez természetesen azt is jelenti, hogy az elektronok hullámfüggvénye is sokkal jobban lokalizált a  $z$  irányban. Ha egyszerű, harmonikus potenciálokkal akarjuk leírni a jelenséget, akkor egy kétdimenziós kvantumdrót esetén írhatjuk, hogy a Hamilton-operátor

$$H_{3D} = \frac{p^2}{2m^*} + V(y, z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m^*} - \frac{1}{2m^*}(\omega_x x^2 + \omega_z z^2), \quad (2.15)$$

ahol  $\omega_z \gg \omega_y$  jelenti azt, hogy sokkal erősebb az az erő, ami  $z$  irányban a mintába szorítja az elektronokat annál, mint ami  $y$  irányban a vezetékben tartja őket (az áram terjedésének irányától ( $x$ ) pedig nem is függ a potenciál). A modellhez tartozó sajátenergiák  $E(n, m, k) = \hbar^2 k^2 / 2m^* + \hbar\omega_z(n + 1/2) + \hbar\omega_y(m + 1/2)$  alakú módon különülnek alsávok sokaságára (lásd a 12. ábrát), de geometriából következően  $E(n + 1, m, k) - E(n, m, k) \gg E(n, m + 1, k) - E(n, m, k)$ . Ez azt jelenti, hogy ha nem tekintünk túl nagy energiákat, akkor  $z$  irányban a rendszer az alaplómódban marad, miközben  $y$  irányban több módus is populált lehet. Ez annak a lehetőségét is felveti, hogy ezeken az energiákon olyan effektív Hamilton-operátort vezessünk be, amely pusztán  $x$ -től és  $y$ -től függ. Ez naivan azt jelenti, hogy egyszerűen elhagyjuk az (2.15) egyenletből a  $z$  irányú mozgáshoz tartozó kinetikus energiát,  $p_z^2/2m^*$ -ot. Ennél konzekvensebb módszer az, ha a fenti  $H_{3D}$ -nek a  $z$  irányú alapállapotban vett várható értékét tekintjük a kétdimenziós Hamilton-operátornak. Egyenlettel kifejezve: ha  $(p_z^2/2m^* - 1/2m^*\omega_z z^2)\chi_n(z) = \hbar\omega_z(n + 1/2)\chi_n(z)$ , akkor

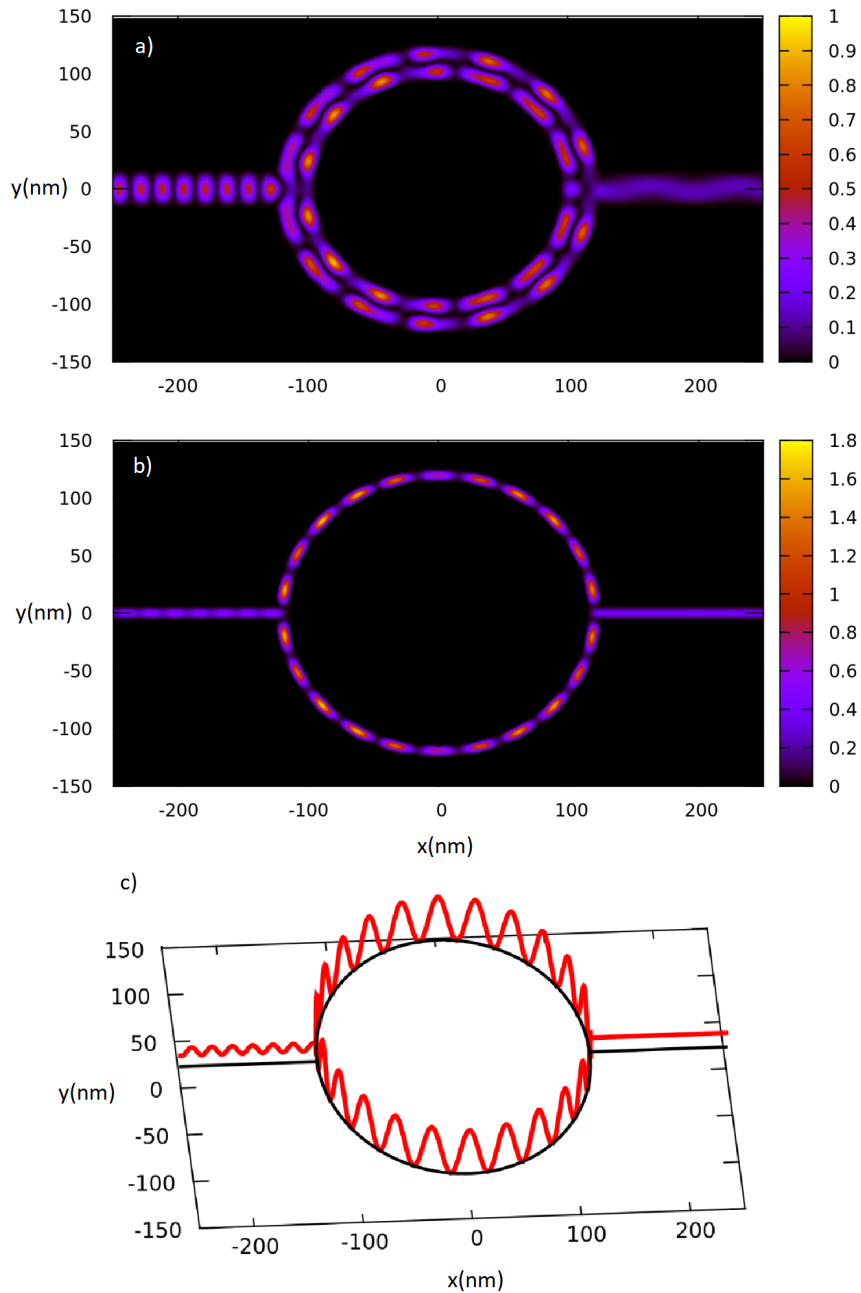
$$H_{2D} = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_0^*(z) H_{3D} \chi_0(z) dz. \quad (2.16)$$

Ez az eljárás és a naiv módszer ( $p_z^2/2m^*$  elhanyagolása) egyenes vezeték esetén egymástól csak konstansban különböző kétdimenziós Hamilton-operátorokat ad, de általános esetben az (2.16) egyenleten alapuló eljárás a megbízható.

Ez gondolatmenet továbbvihető arra az esetre is, amikor a tipikus energiák még az  $y$  irányú alap és első gerjesztett módus energiakülönbségénél is jóval kisebbek. Ekkor a rendszer lényegében egydimenziós, folyamatosan az  $y$  és  $z$  alaplómódusban van. Az effektív egydimenziós Hamilton-operátort pedig a fenti módon megkapott kétdimenziós  $H_{2D}$  várható értéke adja az  $y$  irányú alaplómódusban.

Ezidáig csak egyenes kvantumdrótokat tekintettünk, ahol a szennyezések híján a kvantumos terjedésben nem tapasztalható reflexió. Kísérletileg is léteznek azonban olyan esetek, amikor a geometria ennél jóval összetettebb. Ilyenkor magának a vezetéknek az alakja, esetleges elágazásai is okai lehetnek annak, hogy egy adott irányból belépő elektron hullámfüggvénye visszaszóródik ugyanebbe az irányba. A 11. ábra mutat egy tipikus példát, amikor a balról érkező elektron egy gyűrűbe lép be, ott kvantumos interferencia lép fel, aminek eredményeként reflexió tapasztalható, és a kimenő vezetékre vonatkozó transzmissziós valószínűség sem lesz egységnyi. Ez az ábra azt is jól szemlélteti, hogy hogyan is alakul ki a kvázi-egydimenziós viselkedés, ha egyre jobban szűkítjük a kvantumdrótok szélességét. Ez azért is fontos, mert az ábra c) részéhez tartozó egydimenziós sajátértékprobléma gyakran analitikusan is megoldható (ahogyan az a következő két fejezetben olvasható). Kicsit pontosabban az igaz, hogy pl. a kvantumgyűrű esetén mind az önmagában tekintett gyűrű, mind pedig az önmagában tekintett vezeték Hamilton-operátora analitikusan diagonalizálható. Ha azonban a részeket összeillesztjük, akkor a megoldhatósághoz szükséges, hogy a csomópontokban fizikailag értelmes feltételt szabjunk a hullámfüggvény viselkedésére. Stacionárius áramok esetén elő kell írunk, hogy Kirchhoff csomóponti törvényének kvantumos megfelelőjeként egy csomópontba be- illetve onnan kifolyó valószínűségi áramsűrűségek előjeles összege zéró legyen.

Emellett racionális megkövetelni a hullámfüggvények folytonosságát a csomópontokban. Ezeket az előírásokat Griffith-féle peremfeltételeknek nevezik, a továbbiakban



11. ábra. A vezeték szélességének hatása a ballisztikus transzport során létrejövő állandósult valószínűségi sűrűsége kvantumgyűrűk esetén. Az elektron a bal oldali vezetékből érkezik (pozitív  $x$  irányú  $k$  hullámszámmal), részben visszaverődik a gyűrűn (ez okozza az interferenciamintázatot a bal oldali vezetékben), a hullámfüggvény interferál a gyűrűben, ami meghatározza a jobb oldali vezetékbe történő szóródás (ami lényegében a transzmisszió) mértékét. A gyűrű külső átmérője minden esetben 250 nm, a vezetékek szélessége a felső ábrán 30 nm, középen 10 nm, legalul pedig az egydimenziós modell szemléltetését látjuk. A bejövő elektronenergia minden esetben 10 meV a legalsó alsáv aljától mérve. A sűrűségeket úgy normáltuk, hogy az a) ábra maximuma az egység.

ezen alapuló számításokat fogunk részletezni. (Másfajta, pl. az S-mátrixokon alapuló peremfeltételeket is megfogalmazhatók.)



## 3. fejezet

# A kvantumoz transzportfolyamatok leírása

A bevezető és szükséges eszköztárat felelevenítő részek után ebben a fejezetben térünk rá arra, hogyan lehet a kvantumoz transzportfolyamatokat leírni. A továbbiakban tehát a ballisztikus tartománnyal fogunk foglalkozni, amikor a vezető mérete lényeges kisebb, mint az elektronok szabad úthossza (és koherenciahossza). Bár talán intuitívan azt várnánk, hogy ekkor az ellenállás nulla lesz, látni fogjuk, hogy valójában nem ez a helyzet. A hullámvezetőkhez hasonlóan interferenciajelenségek és visszaverődés miatt általában korántsem biztos, hogy egy elektron átjut egy ballisztikus eszközön. Az átjutási (transzmissziós) valószínűség pedig – és ez ennek a fejezetnek a legfontosabb üzenete – arányos a minta vezetőképességével.

Az első alfejezetben megvizsgáljuk, hogy az effektív tömeg közelítés keretein belül a vezető csatornába kényszerített elektronok milyen állapotokkal rendelkeznek, itt lesz szó az áram irányára merőleges transzverzális módusokról, illetve az elektromos és mágneses tér hatásairól. Ezeket az eredményeket felhasználva a második alfejezetben a transzmisszió és a vezetőképesség összefüggésére koncentrálnak, eljutunk az ezt leíró, Landauer és Büttiker nevéhez kötődő formuláig. Megvizsgáljuk továbbá, hogy milyen körülmények mellett várhatunk lineáris választ egy ballisztikus vezetőtől, azaz meddig lesz az átfolyó áram arányos az alkalmazott feszültséggel.

### 3.1. Elektronállapotok ballisztikus vezetőkben

Félvezető heterostrukturákban, ahol a két anyag határán kétdimenziós elektrongáz jön létre, az eddigiek alapján a

$$H_{eff} = \left[ \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m^*} \right] + V + \epsilon_{\mathbf{k}_0} \quad (3.1)$$

effektív Hamilton-operátor egyelektron képben jó közelítésnek tekinthető. Itt tehát  $m^*$  az elektronok effektív tömege,  $\mathbf{A}$  és  $V$  pedig a külső tér vektor-, illetve skalárpotenciálja. A következőkben a fenti Hamilton operátor sajátértékeit és sajátvektorait fogjuk meghatározni különböző, a továbbiak szempontjából érdekes speciális esetekben. Az  $xy$  síkban mozgó elektronokat feltételezve, ez tehát a

$$H_{eff}\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (3.2)$$

sajátértékegyenlet megoldását jelenti.

Tekintsük először azt az esetet, amikor nincs külső mágneses tér ( $\mathbf{A} = 0$ ), az elektronok a  $V$  által meghatározott elektromos potenciáltérben mozognak. Egy "vezetékre" gondolva, amely az  $x$  irányban végtelen kiterjedésű (most egy pillanatra tekintsünk el attól, hogy ebben az esetben az eszköz nem lehet ballisztikus), a potenciál, amely ebbe a hullámvezetőbe kényszeríti az elektronokat, konstans az  $x$  irányban és minimummal rendelkezik a "vezeték közepén". A könnyebb kezelhetőség miatt tekintsünk parabolikus potenciált, amit az

$$V = V(y) = \frac{1}{2}m^*\omega_0^2y^2 \quad (3.3)$$

alakba írhatunk. Ha most a sajátállapotokat a

$$\Psi(x, y) = e^{ikx}\chi(y) \quad (3.4)$$

alakban keressük, akkor a  $\chi$  transzverzális függvény a

$$\left[ \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 y^2 \right] \chi(y) = E \chi(y) \quad (3.5)$$

sajátértékegyenletnek kell, hogy eleget tegyen. (Itt az egyszerűség kedvéért 0-nak választottuk a sáv alját reprezentáló, konstans  $\epsilon_{k_0}$  energiát. Ez mindaddig megtehető, amíg csupán a nívók relatív helyzete érdekel minket, ha azonban pl. a Fermi-energiához viszonyítjuk a kapott szinteket, akkor már nem feledkezhetünk el ettől az additív állandótól.) A fenti egyenlet lényegében megegyezik azzal, amit a kvantumos oszcillátor esetén kapunk, az egyetlen eltérés a  $k^2$ -tel arányos tag, ami egyszerűen csak hozzáadódik az energiához. Így a transzverzális függvények

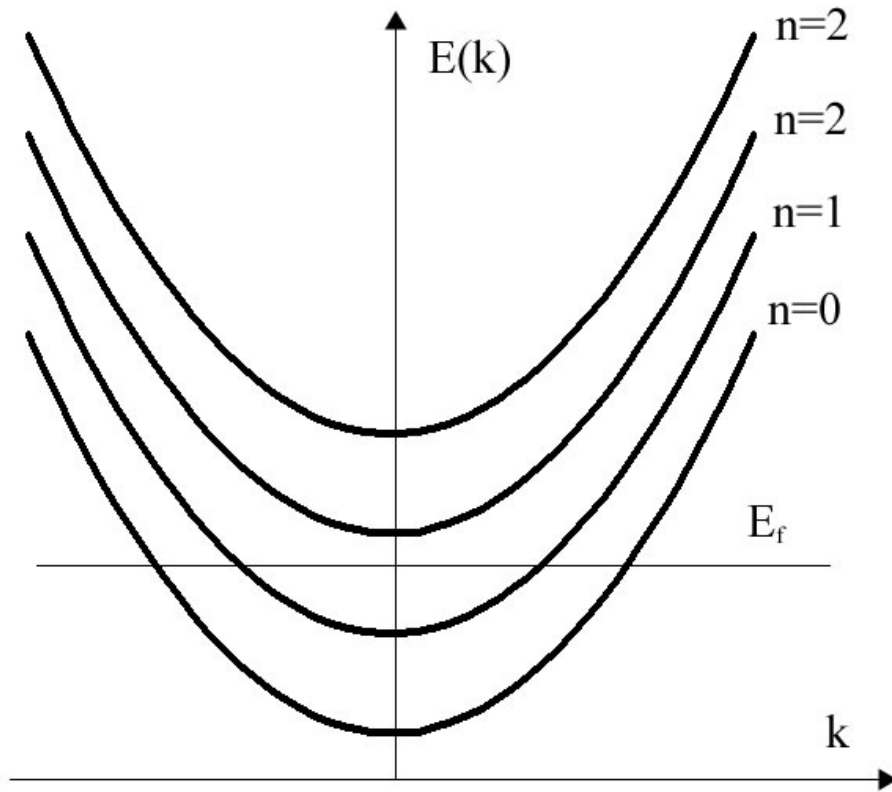
$$\chi_{nk}(y) = e^{-q^2/2} H_n(q), \quad q = q(y) = \sqrt{m\omega_0/\hbar} y \quad (3.6)$$

alakúak [3], ahol  $H_n$  az  $n$ -edik Hermite polinomot jelöli, a  $k$  index pedig azt fejezi ki, hogy ez a sajátfüggvény az  $\exp(ikx)$  síkhullámhoz tartozik. Az energiaszintekre pedig

$$E(n, k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_0 \quad (3.7)$$

adódik, ahol tehát  $n$  egész. Ez azt jelenti, hogy diszperziós reláció (azaz az  $E(k)$  függvény) parabolák sokaságából áll, ahogyan az a 12. ábrán látható. A különböző  $n$  értékekhez tartozó parabolák más-más transzverzális módusokhoz tartoznak, de gyakran használatos az elektromos "alsáv" (subband) vagy inkább alnívó elnevezés is, arra utalva, hogy az elektromos eredetű erő, ami a vezetékbe kényszeríti az elektronokat (confinement), olyan nívóstruktúrát hoz létre, amely az egymás fölött lévő sávokra hasonlít. Fontos azonban megjegyezni, hogy – ahogyan az elnevezés is mutatja – ezek az alnívók egy adott, a kristályszerkezet által meghatározott sávon (pl. a vezetési sávon) belül helyezkednek el, a közöttük lévő energiakülönbség ( $\hbar\omega_0$ ) általában nagyságrendekkel kisebb mint amit pl. a vezetési és a vegyértéksáv között találunk egy félvezető esetében.

Az egyes keresztirányú módusok betöltöttsége attól függ, hogy az adott anyag



12. ábra. Az energia függése a  $k$  vektor egyik komponensétől különböző transzverzális módusokra, parabolikus potenciál esetén. Egy adott anyagban, konkrét  $V(y)$  potenciál esetén, ami az elektronokat a hullámvezetőbe kényszeríti, csak véges sok transzverzális módushoz tartozik síkhullám megoldás: ha  $E(n, k) > E_f$  minden  $k$ -ra (mint az ábrán  $n > 1$  esetén), akkor az adott módus betöltetlen lesz a végtelen vezetőkben.

Fermi-szintje hogyan helyezkedik el a módusra jellemző  $E(n, k)$  görbe minimumához képest. Ha ez a minimum nagyobb, mint a Fermi-energia, akkor a módus alacsony hőmérsékleten lényegében betöltetlen lesz. Vegyük azonban észre, hogy az energia kifejezésében szereplő  $k^2$ -tel arányos tag előjele a (3.4) szorzatállapot felírásából adódott. Valós  $k$ -t feltételezve, a síkhullám helyett a  $e^{\pm kx}$  függvényeket véve, formálisan szintén megoldásokat nyerünk, csak ezek nem hullámot írnak le. Végtelen vezetőt feltételezve ezek a hullámfüggvények végtelenné válnak, így nem írnak le fizikailag értelmes állapotokat, de egy véges tartományon már ezek az – optikai analógiával – "evanescens" megoldások is fontos szerepet játszhatnak.

Következő lépésként tekintsünk olyan elektrongázt, amely egy  $z$  irányú mágneses tér hatásától eltekintve szabadon mozoghat az  $xy$  síkban ( $V = 0$ ). Emlékezzünk vissza, hogy a klasszikus kép alapján – mivel minden lehetséges sebesség merőleges a mágneses térre – körpályák létrejöttét várjuk. További fontos észrevétel, hogy a (3.1) egyenletben szereplő  $\mathbf{A}$  vektorpotenciál nem egyértelmű, most is, mint minden elektrodinamikával kapcsolatos probléma esetén, élhetünk a mérték megválasztásának a szabadságával. Legyen tehát

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0, \quad (3.8)$$

ahol  $B$  jelöli a külső mágneses tér nagyságát. Más mértéket választva a megoldások lényegesen különböző alakúaknak adódhatnak, de a fizikai következtetések, amelyeket az eredményekből vonunk le, természetesen mértékfüggetlenek. A fenti mértéket használva, és a (3.4) szorzatalakban keresve a megoldást, a transzverzális függvényre vonatkozó sajátértékegyenlet következő alakba írható

$$\left[ \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_c^2(y+y_k)^2 \right] \chi(y) = E\chi(y), \quad (3.9)$$

ahol  $y_k = \frac{\hbar k}{eB}$ , az  $\omega_c = \frac{|e|B}{m}$  mennyiséget pedig hagyományosan ciklotronfrekvenciának nevezik. Formailag (3.9) is egy parabolikus potenciált tartalmazó időfüggetlen Schrödinger egyenlet, csak a potenciál minimuma az origó helyett az  $y_k$  pontban van. Ennek megfelelően a következő megoldások adódnak:

$$\chi_{nk}(y) = e^{-\tilde{q}^2/2} H_n(\tilde{q}), \quad \tilde{q} = \tilde{q}(y) = \sqrt{m\omega_c/\hbar}(y+y_k), \quad (3.10)$$

$$E(n, k) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c. \quad (3.11)$$

Az itt megjelenő energiaszinteket nevezzük Landau-nívóknak. Vegyük észre, hogy ezek az energiaszintek (mágneses alnívók, "alsávok") függetlenek  $k$ -tól, egymástól való távolságukat pedig a ciklotronfrekvencián keresztül  $B$  nagysága szabja meg. Ha a szabad elektrongáz analógiájára az  $E(k)$  függvény  $k$  szerinti gradiensét az állapothoz tartozó

sebességgel arányosnak tekintjük, akkor ebben az esetben

$$\mathbf{v}(n, k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(n, k) = 0, \quad (3.12)$$

ami talán kissé erőltetetten, de kapcsolatba hozható a klasszikus képpel, hiszen a zárt körpályán mozgó elektron sem "megy sehová". További lényeges különbség a tisztán mágneses és tisztán elektromos alnívók között, hogy a mágneses esethez tartozó hullámfüggvények –  $y_k$ -nak megfelelően – transzverzális irányban eltolódnak, ahogyan  $\mathbf{k}$  változik.

Ennek az alfejezetnek a zárásaként foglalkozzunk azzal a viszonylag általános esettel, amikor mindkét eddig vizsgált jelenség befolyásolja az elektronok viselkedését, azaz tekintsünk hullámvezetőben haladó, mágneses tér hatásának is kitett elektronokat. Legyen tehát a skalár- és a vektorpotenciál ugyanaz, mint korábban, és továbbra is keressük a (3.4) egyenlet által adott szorzatalakban a sajátfüggvényeket. A transzverzális  $\chi(y)$  rész ekkor a

$$\left[ \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \frac{\omega_c^2 \omega_0^2}{\omega_{c0}^2} y_k^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_{c0}^2 \left( y + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} y_k \right)^2 \right] \chi(y) = E \chi(y) \quad (3.13)$$

sajátértékegyenletet elégíti ki, ahol

$$\omega_{c0}^2 = \omega_c^2 + \omega_0^2. \quad (3.14)$$

Ez az összetettnek látszó egyenlet lényegében még mindig csak parabolikus potenciált tartalmaz, így megoldásai is felírhatók:

$$\chi_{nk}(y) = e^{-\bar{q}^2/2} H_n(\bar{q}), \quad \bar{q} = \bar{q}(y) = \sqrt{m\omega_{c0}/\hbar} \left( y + \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} y_k \right), \quad (3.15)$$

$$E(n, k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \frac{\omega_c^2}{\omega_{c0}^2} + \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{c0}. \quad (3.16)$$

Ezek a mágneses-elektromos alnívók természetesen átmennek a korábbi eredményekbe,

ha  $V=0$  vagy  $B=0$ . Konkrétan a diszperziós relációt tekintve, zéró mágneses tér esetén parabolákat látunk, amiknek a minimumhoz közel eső része "kisímul," ha ezután egyre erősebb mágneses teret feltételezünk. Formálisan ez a jelenség olyan, mintha a mágneses tér jelenléte az elektromos alnívókat úgy torzítaná, hogy a tömeg megnövekszik, méghozzá eredeti  $m^*$  értékének  $1+\omega_c^2/\omega_0^2$ -szeresére. Ez akkor is igaz, ha az állapotokhoz tartozó sebességeket is kiszámítjuk a (3.12) egyenlet alapján, hiszen

$$v(n, k) = \frac{\hbar k}{m^*} \frac{\omega_0^2}{\omega_c^2}. \quad (3.17)$$

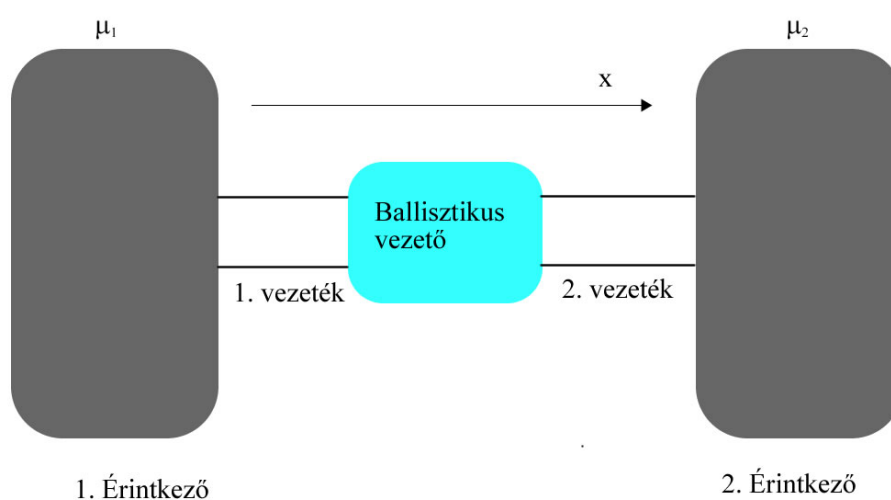
Maguk a sajátfüggvények azonban ennél bonyolultabb, és a fizikai tulajdonságok szempontjából lényegesebb változáson esnek át a mágneses tér nélküli esethez képest. Ezt a legjobban talán abból láthatjuk, ha  $k$  nagyságú hullámszámmal rendelkező sajátfüggvény transzverzális irányban vett  $y_k$  centrumát a fenti sebességgel fejezzük ki:

$$y_k = v(n, k) \frac{\omega_c^2 + \omega_0^2}{\omega_c \omega_0^2}. \quad (3.18)$$

Az  $y$  irányban tehát a hullámfüggvények a sebességgel arányosan tolódnak el. Növekvő mágneses tér esetén ez azt jelenti, hogy a pozitív  $x$  irányú áramot hordozó elektronok a minta egyik, míg az ellentétes irányban "haladók" a minta másik szélé felé tolódnak, azaz térben elválík egymástól a két irány. Ez az effektus klasszikusan is érthető (ellentétes irányú a Lorentz-erő), de igazi jelentősége abban áll, hogy ekkor az elektron-elektron szórások valószínűsége (illetve a visszaszórás hatékonysága) erősen lecsökken, ami a szabad úthossz jelentős növekedésével jár. Az 5.2 fejezetben, kvantum Hall effektus tárgyalásakor még visszatérünk erre a jelenségre.

### 3.2. Vezetőképesség és transzmissziós valószínűség

A továbbiakban azzal a kérdéssel fogunk foglalkozni, hogy véges méretű ballisztikus eszközök vezetőképessége (conductance) hogyan határozható meg. Ahhoz, hogy a probléma jóldefiniált legyen, a vizsgálni kívánt vezetőt össze kell kötnünk egy feszültségforrással, zárni kell az áramkört. Nyilván az is fontos, hogy a kört alkotó egyéb elemek vezessék az áramot, így a 13. ábrán vázolt elrendezés a célszerű, illetve a gyakorlat szempontjából ez bír a legnagyobb jelentőséggel. Itt tehát a "méréndő" eszköz vezetékén



13. ábra. Ballisztikus vezető áramkörbe kapcsolása. A két oldalon található érintkezőkben különbözik a kémiai potenciál, ennek hatására folyik az áram a vezetőben.

keresztül kapcsolódik az érintkezőknek (contact) nevezett, általában nagyobb méretű tartományokhoz, amelyekben a kémiai potenciál ("Fermi-szint") a külső feszültség (és esetleg a különböző anyagi minőség) miatt nem azonos. Úgy is tekinthetjük, hogy a vezetőből kiáramló töltéseket ezek az érintkezők pótolják, miközben belső állapotuk lényegében nem változik meg. Termodinamikai analógiával: az érintkezők olyanok, mint a hőtartályok, a vizsgálni kívánt "kis" rendszer szempontjából praktikusán végtelen sok szabadsági fokkal rendelkeznek, befolyásolják a kis rendszer állapotát, az azonban nem hat vissza rájuk. Klasszikus elektromosságtanra utalva, ahhoz, hogy a vezetőképesség



mérésének legyen értelme, az szükséges, hogy az érintkezők "végtelenül" jobb vezető legyenek, mint az a rendszer, amit mérni szeretnénk.

Elsőként tekintsük azt az esetet, amikor pusztán egy  $l$  hosszúságú,  $d$  szélességű, kétdimenziós ballisztikus vezetékot helyezünk az érintkezők közé. (Mintha a 13. ábrán nem volna közepén eszköz, és a két, ballisztikusnak gondolt vezeték összeérne.) Ha klasszikus, ohmos ellenállás esetével állnánk szemben, akkor a vezetőképességet a geometria és a  $\sigma$  (kétdimenziós) fajlagos vezetőképesség határozná meg:  $G = \sigma d/L$ . Ez azt jelenti, hogy  $l$  csökkenésével  $G$  minden határon túl növelhető. Ma már kísérletileg is igazolt tény, hogy ez nem így van, a vezető hosszának csökkentésével a vezetőképesség egy véges  $G_c$  értékhez tart. Ahogyan majd látni fogjuk, ez alapvetően annak a következménye, hogy a transzverzális módusok száma lényegesen nagyobb az érintkezőkben, mint a mintában (ahol az előző fejezetnek megfelelően az is elképzelhető, hogy csak egyetlen olyan módus van, ami haladó hullámú megoldáshoz kapcsolódik), a minta nem feltétlenül tud tetszőleges transzverzális eloszlással rendelkező áramot "felvenni". E miatt  $G_c$  reciprokát,  $R_c$ -t kontakt ellenállásnak (contact resistance) szokás hívni. Ennek a viszonylag kézenfekvő kiszámításához szükségünk van egy közelítésre, nevezetesen a "visszaverődésmentes" érintkező (reflectionless contact) bevezetésére. Ez azt jelenti, hogy a vezetéből az érintkezőbe veszteség (visszaverődés) nélkül tudnak átjutni az elektronok. Az idézőjel a "visszaverődésmentes" szó körül arra utal, hogy a fordított irányban ez korántsem feltétlenül igaz (ballisztikus esetben valójában ebből a visszaverődésből származik az ellenállás). Az a feltevés, hogy egy keskeny vezetéből az elektronok elhanyagolható reflexióval jutnak egy széles érintkezőbe, amellet, hogy fizikailag hihető, numerikus számításokkal is igazolható.

Tegyük fel most, hogy az áram a ballisztikus vezetében mondjuk balról jobbra folyik, legyen ez a pozitív  $x$  tengely iránya. Az ilyen irányú mozgást leíró állapotok hullámszámvektorának  $x$  komponense pozitív, hívjuk őket összefoglalóan  $+k$  állapotoknak. Ha ezekhez az állapotokhoz a (2.14) egyenletekhez hasonlóan egy  $F^+$ , míg a  $-k$  állapotokhoz egy  $F^-$  kvázi Fermi-nívót kapcsolunk, akkor egyszerű megfontolások alapján adódik, hogy  $F^+$  megegyezik a bal oldali érintkező  $\mu_1$  kémiai potenciáljával,

és  $F^- = \mu_2$  is fennáll. Induljunk ki ugyanis abból, hogy ha kezdetben  $\mu_1 = \mu_2$ , akkor természetesen a  $+k$  állapotokhoz tartozó  $F^+$  – mint minden egyéb állapothoz tartozó Fermi-nívó – megegyezik  $\mu_1$ -gyel. Ha most gondolat kísérletként  $\mu_2$ -t elkezdjük változtatni,  $F^+$  nem fog megváltozni, hiszen a "visszaverődésmentes" érintkezők miatt a  $+k$  állapotok semmilyen oksági viszonyban sincsenek a jobb oldali érintkezővel: nincs olyan elektron, amelyik a jobb oldali érintkezőből indul el, és a  $+k$  családba tartozik.

A fentiek ismeretében most már meghatározhatjuk a kontakt ellenállást. Egy adott  $E$  energián a véges keresztmetszetű vezetőben véges  $M(E)$  számú transzverzális módusokhoz tartozik haladó hullámot leíró megoldás, ami egyáltalán áramot vihet. Ha  $\epsilon_n$  jelöli az  $n$ -edik elektromos alnívó minimumát (parabolikus esetben – amit a 10. ábra is mutat –  $\epsilon_n = E(n, k = 0)$ ), akkor

$$M(E) = \sum_n \Theta(E - \epsilon_n). \quad (3.19)$$

Az egyes elektromos alnívókhoz tartozó transzverzális módusok ortogonálisak, a vezetéshez való hozzájárulásukat egymástól függetlenül fogjuk figyelembe venni. Egyetlen transzverzális módusra koncentrálva tehát, legyen  $f^+(E)$  a betöltöttség eloszlása energia szerint (alacsony hőmérsékleten  $f^+(E) = \Theta(E_f - E)$ ). Ha az  $l$  hosszúságú mintában az elektronsűrűség hosszúságegységenként állandó  $n$ -nek vehető, az elektronok sebessége pedig mindig  $v$ , akkor  $env$  áramot szállítanak. Esetünkben, egyetlen állapotra  $n = 1/l$ , továbbá, ahogyan az előző fejezetben is láttuk,  $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$ . A 2.3 fejezet alapján mondhatjuk, hogy alacsony hőmérséklet esetén az áramot azok a  $+k$  állapotok szállítják, amelyek energiája  $\mu_1$  és  $\mu_2$  közé esik, hiszen egyrészt ebben a tartományban nincsenek  $-k$  állapotok, másrészt pedig  $\mu_2$ -nél kisebb energia esetén minden állapot ( $+k$  és  $-k$  is) betöltött. Ezek alapján, az  $n$ -edik módusra:

$$I = \frac{e}{\hbar l} \sum_k \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E). \quad (3.20)$$

Most váltsuk át a diszkrét összeget  $k$  szerinti integrálra a  $\sum_k \rightarrow l/\pi \int dk$  egydimenzióban

érvényes összefüggés [4] alapján. Így

$$I = \frac{2e}{h} \int_{\max(\epsilon_n, \mu_1)}^{\mu_2} f^+(E) dE \quad (3.21)$$

adódik. Ha  $\epsilon_n < \mu_1$  és az alacsony hőmérsékletű határesetet vizsgáljuk, akkor az integrál könnyen elvégezhető:

$$I = \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2). \quad (3.22)$$

Innen a kontakt ellenállás:

$$R_c = G_c^{-1} = \left( \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} \right)^{-1} = \frac{h}{2e^2}. \quad (3.23)$$

Ha  $M$  módus szállítja az áramot, akkor a fentiekkel megegyező feltételek mellett azt kapjuk, hogy,

$$G_c = \frac{2e^2}{h} M, \quad R_c = \frac{h}{2e^2 M}, \quad (3.24)$$

ami számszerűen azt jelenti, hogy  $R_c = 12,9k\Omega/M$ , a kontakt ellenállás tehát egy viszonylag nagy értékről indul egyetlen módus esetén, de  $M$  reciprokával csökken, ahogyan a módusok száma növekszik. Ez azt is jelenti, hogy makroszkopikus esetben, amikor  $M$  igen nagy,  $R_c$  hozzájárulása az eredő ellenálláshoz rendszerint elhanyagolható. Ha azonban  $M$  elegendően kicsi, akkor, ahogyan a bevezetőben, a 2. ábrán látható kísérleti eredmény is mutatja, egy-egy újabb módus megjelenése az ellenállás mérhető csökkenéséhez vezet.

Tekintsük most azt az esetet, amikor magában a ballisztikus vezetőben (annak geometriája, vagy enyhe szennyezettsége miatt) is jelen vannak szórócentrumok. Ekkor azok az elektronok, amelyek egyszer már beléptek a vezetőbe, nem feltétlenül haladnak át rajta, ami ahhoz vezet, hogy az ellenállást sem csupán  $R_c$  határozza meg. A fentiek alapján ekkor

$$I_{be} = \frac{M2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \quad (3.25)$$

áram lép be a vezetőbe. Ha annak a  $T$  valószínűségét, hogy az elektronok átjutnak a

vezetőn, az egyszerűség kedvéért minden módusra azonosnak vesszük, akkor a kifolyó áram

$$I_{ki} = T \frac{M2e}{h} (\mu_1 - \mu_2). \quad (3.26)$$

A fenti két áram különbsége a "visszaverődik",

$$I_{vissza} = (1 - T) \frac{M2e}{h} (\mu_1 - \mu_2), \quad (3.27)$$

ezt az áramkomponenst tehát azok az elektronok alkotják, amelyek nem jutnak át a vizsgált vezetőn. A teljes áram ezek alapján  $I = I_{ki} = I_{be} - I_{vissza}$ , ahonnan a vezetőképesség:

$$G = \frac{2e^2}{h} MT. \quad (3.28)$$

Ez a Landauer-formula [7].

Ezen a ponton érdemes kissé megállni, és elemezni a (3.28) egyenletet. Egyrészt triviálisan látszik, hogy a  $T = 1$  esetben visszakapjuk a kontakt ellenállás reciprokát, azaz viszonylag szemléletesen látható, hogy a megnövekedett ellenállás a vezető belső struktúrájának a következménye. Formálisan, ha a Landauer-formula alapján adott ellenállást a

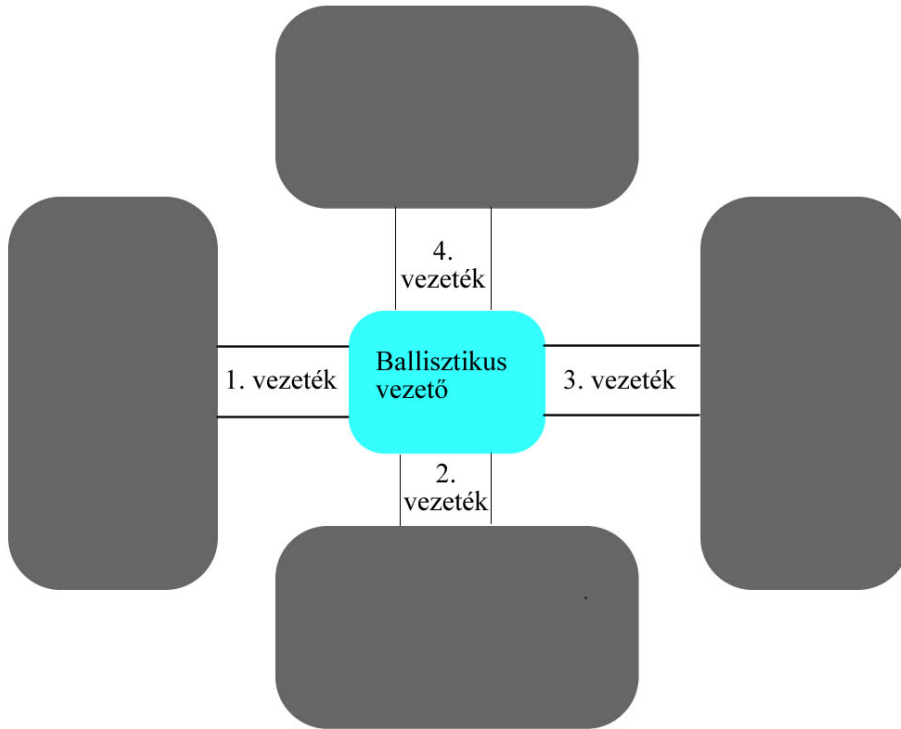
$$R = \frac{h}{2e^2 M T} = \frac{h}{2e^2 M} + \frac{h}{2e^2 M} \frac{1 - T}{T} \quad (3.29)$$

alakba írjuk, akkor azt látjuk, hogy az eredő ellenállás  $R_c$  és egy, a transzmissziós valószínűség által meghatározott tag összege, úgy, hogy ez utóbbi eltűnik, ha  $T = 1$ . A (3.28) egyenlet reciproka tehát a teljes a  $R$ -et adja meg, *beleértve* a kontakt ellenállást is. Fontos, és eddig nem részletezett kérdés azonban, hogy pontosan mit is értünk a  $T$  transzmissziós valószínűségen? Visszagondolva a 13. ábrára, arról van szó, hogy mely pontok (síkok) között értelmes  $T$ , "honnan" és "hová" jut el az elektron ezzel a valószínűséggel. Ez (számolás)technikai értelemben sem elhanyagolható kérdés, hiszen ha a két referencia pontot mélyen az érintkezők belsejében választjuk (ami első gondolatként természetesnek tűnik), akkor lényegesen nehezebb  $T$  meghatározása, mintha mondjuk azzal a valószínűséggel azonosítanánk, hogy az elektron a bal oldali vezeték-

ből átjut a jobb oldaliba. Az első lehetőség, szerencsére – amellet, hogy nehezebb problémát definiálna – nem is helyes, hiszen a kontakt ellenállás valamilyen értelemben már számot ad arról, hogy az érintkezők határfelületén már átjutottak az elektronok. "Visszaverődésmentes" érintkezőket feltételezve megmutatható [1], hogy fizikailag a második lehetőség értelmes, azaz  $T$  annak a valószínűségét adja meg, hogy magán a ballisztikus vezetón átjusson egy elektron. Tegyük hozzá, hogy ehhez erősen szükséges, hogy a 13. ábrán látható vezetékek "tökéletesek" legyenek, más szóval a rájuk vonatkozó (a fenti értelemben vett) transzmissziós valószínűség egységnyi legyen.

Érdekességként jegyezzük még meg, hogy ha a klasszikus határesetet tekintjük, amikor sok az "üközés," és a  $T$  annak a függvénye, hogy milyen hosszú a vezető, akkor hihető feltevések sorozatán eljuthatunk az Ohm törvény differenciális alakjához is. Pontosabban az eredmény a kontakt ellenállást leszámítva egyezik meg az Ohm törvénnyel, de a fentiek alapján  $R_c$  elegendően sok módus estén elhanyagolható. Ez azt sugallja, hogy a (3.28) egyenlet igen általános fizikai képet szolgáltat, nem feltétlenül csak a ballisztikus esetben alkalmazható. Érdemes azt is hangsúlyozni, hogy az az állítás, miszerint az alkalmazott feszültség és a létrejövő áram között a (3.26) egyenlettel adott viszony áll fenn, azt is jelenti, hogy a transzmissziós valószínűségek nem függenek sem a feszültségtől sem az áramtól. Így ennek a lineáris közelítésnek a keretein belül (amelynek érvényességi körére a fejezet végén térünk vissza) lényegében ezen mennyiségek említése nélkül meghatározható a vezetőképesség, ami a számításokat nagyban egyszerűsíti.

A fenti modell viszonylag kis változtatásokkal átvihető arra az esetre is, amikor a ballisztikus vezető kettő helyett három vagy több érintkezőhöz kapcsolódik. A legfontosabb példa talán a 2.1. fejezetben is említett Hall-feszültség mérése, amikor két érintkezőn át áram folyik, a másik kettő pedig feszültségmérésre használható. Ezt a "Hall-geometriát" mutatja szematikusan 14. ábra. A legáltalánosabb esetben az összes érintkező különböző kémia potenciállal rendelkezik. Praktikus szempontokból ilyenkor inkább a  $V$  feszültségeket szokás a probléma jellemzésére használni, amik persze azonos anyagú érintkezők esetén könnyen átválthatók kémiai potenciálokká. A fentiekben vá-



14. ábra. Négy érintkezőhöz kapcsolódó ballisztikus vezető sematikus rajza. Ilyen elrendezésben lehet pl. Hall feszültséget mérni.

zolt Landauer-féle elmélet Büttiker [8] nevéhez kötődő általánosítása szerint a  $p$ -edik érintkezőn átfolyó áram kifejezése

$$I_p = \frac{2e^2}{h} \sum_{q \neq p} \bar{T}_{q \leftarrow p} V_p - \bar{T}_{p \leftarrow q} V_q, \quad (3.30)$$

ahol a két érintkező esetétől felülvonással megkülönböztetett  $\bar{T}_{q \leftarrow p}$  annak a valószínűségét adja, hogy a  $p$ -edik vezetéken belépő elektron átjut a  $q$ -edik vezetékbe. (A továbbiakban a nyilat gyakran elhagyjuk az indexből.) Az észrevétel tehát lényegében az, hogy egy konkrét vezetéken átfolyó áramot az összes lehetséges módon idejutó elektronok együttes hatása hozza létre. A fenti egyenlet a vezetőképességi tenzor bevezetésével az

$$I_p = \sum_{q \neq p} G_{qp} V_p - G_{pq} V_q \quad (3.31)$$

alakot ölti, ahol tehát

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{p \leftarrow q}. \quad (3.32)$$

Ezek a mátrixelemek több szimmetriatulajdonsággal rendelkeznek, a legfontosabb talán a  $\sum_q G_{pq} = \sum_q G_{qp}$  összegszabály, ami a fizikai rendszer részleteitől függetlenül mindig fennáll, pusztán azzal függ össze, hogy nem folyik áram, ha az összes feszültség megegyezik. Ez alapján az áramokra vonatkozó egyenlet is egyszerűsíthető:

$$I_p = \sum_{q \neq p} G_{qp} (V_p - V_q). \quad (3.33)$$

Fontos észrevenni, hogy ez a leírás a feszültséget és az áramerősséget bizonyos értelemben azonos módon kezeli. Ha pl. két érintkező közötti feszültséget mérjük, akkor a "mérőkörben" nem folyhat áram, a mért feszültség pedig kifejezhető a vezetőképesség tenzor, valamint a többi feszültség ismeretében. Ha két érintkező között a feszültséget ismerjük, akkor pedig az átfolyó áram számítható ki  $G$  ismeretében.

Végezetül vizsgáljuk meg kissé részletesebben, hogy a fentiekben összefoglalt Landauer-Büttiker formalizmus milyen esetekben használható valódi fizikai rendszerek realiztikus leírására. Koncentráljunk most ennek a kérdésnek a hőmérséklettel összefüggő vonatkozásaira, illetve arra, hogy a modell linearitása milyen feltételek mellett teljesül.

Eddig lényegében "nulla" hőmérsékletéről beszéltünk, azt láttuk, hogy egyenleteink helyesek az alacsony hőmérsékletű határesetben. A (3.21) és (3.31) egyenleteket visszaidézve kézenfekvőnek tűnik (és helyes is [1]) az az általánosítás, hogy véges hőmérsékleten az áramot az

$$I_p = \int i_p(E) dE \quad (3.34)$$

energiára átlagolt kifejezés adja, ahol

$$i_p(E) = \frac{2e}{h} \sum_q \bar{T}_{pq}(E) (f_p(E) - f_q(E)). \quad (3.35)$$

Itt  $f_p(E)$  jelöli a  $p$ -edik érintkezőre vonatkozó Fermi-függvényt:

$$f_p(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu_p}{kT}\right) + 1}, \quad (3.36)$$

$\bar{T}_{pq}(E)$  pedig annak a valószínűsége, hogy egy  $E$  energiával rendelkező elektron, ami a  $q$ -adik vezetéken át lép be a ballisztikus eszközbe, átjut a  $p$ -edik vezetékbe. Ezután, ha a (3.35) egyenletben szereplő integrál argumentuma elegendően lassan változik, akkor sorbafejthetjük, és megállhatunk az első rendnél. Így lineáris választ nyerünk ( $V_p = \mu_p/|e|$ ):

$$I_p = \sum_{q \neq p} G_{qp} (V_p - V_q), \quad (3.37)$$

csak most már vezetőképesség tenzor elemei tartalmazzák az energiára történő átlagolást:

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq}(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (3.38)$$

Ebben az egyenletben az egyensúlyi Fermi-függvény szerepel,  $f_0(E)$  tehát azt a szituációt írja le, amikor a  $p$  és  $q$  érintkező azonos kémiai potenciálon van, és így áram sem folyik. Az ettől az egyensúlytól való kicsiny eltérést vettük a sorfejtéssel figyelembe. Így tehát maga a közelítés, ami a lineáris válaszhoz vezetett, akkor érvényes, ha a sorfejtés jó közelítésnek tekinthető. Ez akkor áll fenn, ha  $|\mu_p - \mu_q| \ll \epsilon_c + \text{"néhányszor } kT\text{"}$ , ahol az  $\epsilon_c$  "korrelációs energia" lényegében azt mutatja meg, hogy transzmissziós valószínűség mekkora tartományon tekinthető függetlennek az energiától. (Jegyezzük meg, hogy a fent feltételben az idézőjeles, a hőmérsékletre utaló tag nem igazán egzakt matematikai alapon került oda, ez sokkal inkább a nagyságrendek ismeretéről tanúskodó, jól használható ökölszabály.) Ha a fentiek felül még  $kT \ll \epsilon_c$  is teljesül, akkor

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}(E_f), \quad (3.39)$$

azaz visszakaptuk a korábban kiszámított eredményt. Összefoglalva tehát, azt, hogy a rendszer válasza lineáris lesz-e, az határozza meg, hogy a korrelációs energia hogyan viszonyul a két érintkező kémiai potenciájának a különbségéhez. Szintén az  $\epsilon_c$  energiát



kell  $kT$ -vel összehasonlítanunk ahhoz, hogy meghatározzuk, tekinthető-e a hőmérséklet alacsonynak a vizsgált probléma szempontjából.

## 4. fejezet

# Transzmissziós valószínűségek számítása

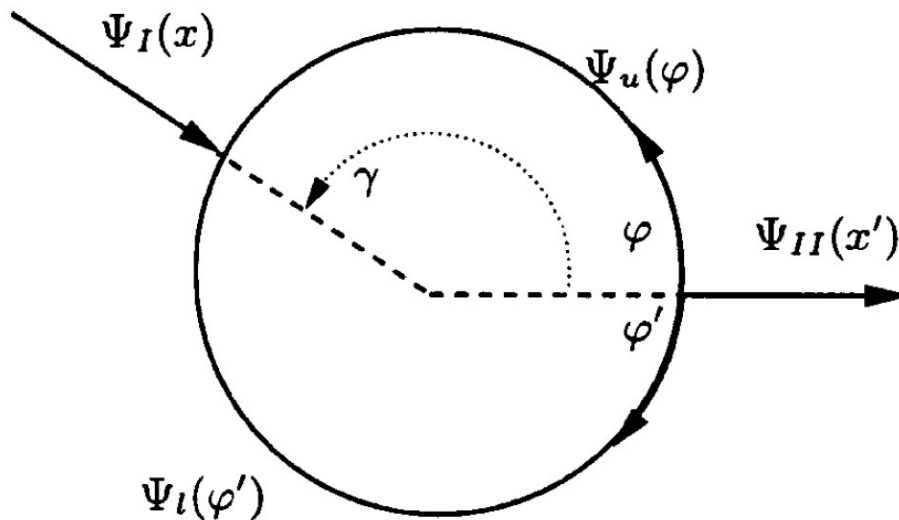
Az előző fejezet alapján azt mondhatjuk, hogy elegendően kicsi feszültségek és alacsony hőmérséklet esetén egy ballisztikus eszköz vezetőképességét az határozza meg, hogy a Fermi energiával rendelkező elektronok milyen valószínűséggel jutnak át az eszközön. Másképpen fogalmazva, a Landauer és Büttiker nevéhez köthető elmélet a vezetőképesség meghatározását tulajdonképpen kvantummechanikai szórásproblémára vezeti vissza, a feladat nem más, mint a transzmissziós és reflexiós együtthatók, illetve valószínűségek meghatározása, a szórásra jellemző peremfeltételek mellett. A kvantummechanikai szórásprobléma kezelésére – fontossága és gyakori előfordulása miatt – jól kidolgozott, szertágazó elmélet áll a rendelkezésünkre. Így a  $T$  transzmissziós valószínűség meghatározása is többféleképpen történhet, ebben a fejezetben példákat láthatunk ezekre az eljárásokra. A lehetséges módszerek sokszínűsége miatt természetesen nincs mód ezek teljes áttekintésére, de két fontos példa jól szemlélteti a probléma kapcsán felmerülő tipikus kérdéseket.

Az első alfejezetben egy példán keresztül megmutatjuk, hogy bizonyos, fizikailag is érdekes esetekben "elemi" módszerek használatával viszonylag könnyen célt érhetünk. Arról van szó, hogy ha a problémát leíró Schrödinger egyenlet a megfelelő peremfeltételek figyelembe vételével analitikusan megoldható, akkor az eredményül kapott

hullámfüggvényből könnyen meghatározható a transzmissziós valószínűség. Összetettebb esetekben azonban általában nem járható ez az út, ekkor általánosabb, pl. a Green-függvényeken alapuló technikát érdemes választani. A második alfejezetben ennek a hozzáállásnak az alapjait tekintjük át.

#### 4.1. A szórásprobléma megoldása elemi módszerekkel

Ebben az alfejezetben egy konkrét példán keresztül mutatjuk meg, hogy a szokásos kvantummechanikai módszerek hogyan alkalmazhatók a transzmissziós valószínűség meghatározására.



15. ábra. Egydimenziósnak tekinthető vezetékekből álló kvantumgyűrű és a leírásához használt hullámfüggvények.

Tekintsünk egy vékony vezetékekből álló ballisztikus gyűrűt, amit az érintkezőkkel ideális, egységnyi transzmisszióval rendelkező vezetékek kötnek össze. Ahogyan a 3. ábra is mutatja, félvezető heterostrukturákban ma már laboratóriumi körülmények között is létrehozhatók ilyen eszközök. Ha a vezetékek elegendően vékonyak, akkor csak egyetlen keresztirányú módushoz tartozik haladó hullámot leíró megoldás. Ilyenkor a vezetékek keresztirányú kiterjedése elhanyagolható, a probléma ilyen értelemben "egydimenziós" tekinthető (ezt mutatja a 15. ábra). Továbbá, ha valóban egy félvezető het-

erostruktúrában létrejövő kétdimenziós elektrongázt szeretnénk modellezni, akkor legtöbb esetben az effektív tömeg közelítés is alkalmazható. E modell keretein belül tehát a gyűrűhöz kapcsolódó vezetékben a

$$H_I = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad H_{II} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \quad (4.1)$$

Hamilton operátorok határozzák meg az elektronok állapotait. A gyűrűn belül szintén (effektív értelemben vett) szabad részecskékről beszélhetünk, amelyeknek a mozgása azonban a körvonal mentére korlátozódik. A 15. ábra jelöléseivel az alsó és a felső karhoz tartozó Hamilton operátorok

$$H_u = -\frac{\hbar^2}{2a^2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad H_l = -\frac{\hbar^2}{2a^2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \varphi'^2}, \quad (4.2)$$

ahol  $a$  jelöli a gyűrű sugarát,  $\varphi$  és  $\varphi'$  pedig az ábrán jelölt szögváltozók. A fenti Hamilton operátorok sajátfüggvényeit könnyen felírhatjuk,  $H_I$  és  $H_{II}$  esetén síkhullámokról van szó, míg a gyűrűben

$$\Psi_u = e^{in\varphi}, \quad \Psi_l = e^{in'\varphi'}. \quad (4.3)$$

A megfelelő sajátenergiák

$$E_I = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2, \quad E_{II} = \frac{\hbar^2}{2m^*} k'^2, \quad E_u = \frac{\hbar^2}{2a^2m^*} n^2, \quad E_l = \frac{\hbar^2}{2a^2m^*} n'^2, \quad (4.4)$$

ahol  $k$  és  $k'$  az  $I$  illetve  $II$  vezetékben terjedő síkhullámok hullámszáma. Kis feszültségek és alacsony hőmérséklet esetén az összes fenti energia  $E_f$ -fel egyezik meg, szóval  $|k| = |k'| = k_f$ , továbbá

$$|n| = |n'| = n_f = \sqrt{\frac{2E_f a^2 m^*}{\hbar^2}}. \quad (4.5)$$

Foglalkozzunk most a peremfeltételek kérdésével. Szórásproblémák esetén a leggyakoribb választás az, hogy tekintünk egy "bejövő" hullámot, aminek iránya megváltozik a szórás következtében. Pontosabban a tulajdonképpeni kérdés éppen a szórt hullám intenzitásának az irány szerinti eloszlása. Esetünkben érkezzen a "bejövő" hullám az

$I$  vezetéken át, ekkor a geometria miatt ennek iránya pusztán kétféleképpen változhat meg, vagy a ellentétes lesz az eredetivel (visszaverődés), vagy pedig a  $II$  "kimenő" vezeték pozitív irányába mutat. Ezeknek a peremfeltételeknek az  $E_f$  energián az alábbi sajátfüggvények felelnek meg:

$$\Psi_I = e^{ik_f x} + r e^{-ik_f x}, \quad \Psi_{II} = t e^{ik_f x'}, \quad (4.6)$$

ahol a "bejövő hullám" amplitúdóját egységnyinek választottuk, és így az  $r$  reflexiós és  $t$  transzmissziós együtthatóra (amelyek komplex számok) teljesülnie kell az  $|r|^2 + |t|^2 = 1$  összefüggésnek. Ezeknek a síkhullámoknak az iránya természetesen elemi hullám-tani ismeretek alapján megmondható, és így az is látszik, hogy a fenti választás lényegében azt fejezi ki, hogy a  $II$  vezetéken keresztül nem érkeznek elektronok a gyűrűbe. Bonyolultabb esetekben célszerű megkeresni a Hamilton operátorhoz kapcsolódó  $\mathbf{J}$  áramot és  $\rho$  sűrűséget, szóval azokat a mennyiségeket, amelyekre a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \mathbf{J} \quad (4.7)$$

lokális kontinuitási egyenlet teljesül. Jegyezzük meg, hogy legáltalánosabb esetben forrástag is szerepel a fenti egyenletben, de mi most a stacionárius esetre vagyunk kíváncsiak, azaz az idő szerinti derivált zéró, és így (az egydimenziós eset miatt) az áram sem mutat térfüggést. Ismeretes [3] (de könnyen ellenőrizhető is), hogy egy időfüggetlen  $H = P_x^2/2m + V$  Hamilton operátor esetén, amely a  $\psi(x)$  hullámfüggvények terén hat, a

$$\rho = |\psi(x)|^2, \quad \mathbf{J} = \Im\left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) \quad (4.8)$$

ún. valószínűségi sűrűség és áramsűrűség teljesíti a (4.7) kontinuitási egyenletet. A fenti  $\mathbf{J}$  iránya (egy dimenzióban az előjele) adja meg, hogy "merre folyik" az áram, valamint az is igaz, hogy az elektromos áram, ami egy  $\mathbf{J}$ -vel jellemzett,  $q$  töltésű részecskéhez kapcsolható, egyszerűen  $\mathbf{J}_e = q\mathbf{J}$  módon számítható. Ez alapján a 4.6 állapotokhoz

$$J_I = ek_f^2 (1 - |r|^2), \quad J_{II} = ek_f^2 |t|^2 \quad (4.9)$$

elektromos áramsűrűségek tartoznak, az egyszerű hullámtani képpel teljesen megegyezően. A  $T$  transzmissziós valószínűsége pedig az igaz, hogy

$$T = \frac{I_{ki}}{I_{be}} = \frac{|J_{II}|}{ek_f^2} = |t|^2. \quad (4.10)$$

Így tehát ha a  $t$  együtthatót meghatározzuk, lényegében megkapjuk a gyűrű vezetőképességét is.

Ebbe az irányba haladva, jelenleg tehát ott tartunk, hogy egyelőre ismeretlen  $t$  és  $r$  együtthatókkal felírtuk a hullámfüggvényeket a vezetékben. A gyűrű két karjában is ismerjük az  $E_f$  energiához tartozó megoldások alakját:

$$\Psi_u = a_u e^{in_f \varphi} + b_u e^{-in_f \varphi}, \quad \Psi_l = a_l e^{in_f \varphi'} + b_l e^{-in_f \varphi'}, \quad (4.11)$$

de az itt megjelenő  $a, b$  együtthatók még szintén ismeretlenek. Azt viszont pl. a  $H_u$  szögfüggő Hamilton operátorhoz tartozó

$$J_u = \frac{e}{a^2} \Im \left( \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \varphi} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \quad (4.12)$$

áramsűrűség előjelének vizsgálatával megállapíthatjuk, hogy  $b_u$  az óramutató járásával megegyező,  $a_u$  pedig azzal ellentétes irányban folyó áramot ír le.

Az ismeretlen együtthatók úgy határozhatók meg, hogy a megoldásokat egymáshoz illesztjük a tartományok határán, azaz azokban a pontokban, ahol a vezeték csatlakoznak a gyűrűhöz. Alapvető kíváncsi a hullámfüggvény folytonossága, ami persze a Schrödinger egyenlet, mint differenciálegyenlet rigorózusabb vizsgálatával is megindokolható. A folytonosság a 15. ábra jelöléseivel így írható:

$$\Psi_I(x=0) = \Psi_u(\varphi = \gamma) = \Psi_u(\varphi' = 2\pi - \gamma), \quad (4.13)$$

$$\Psi_{II}(x'=0) = \Psi_u(\varphi = 0) = \Psi_l(\varphi' = 0). \quad (4.14)$$

A probléma megoldhatóságához még két összefüggés hiányzik, amik a kontinuitási egyenletből adódnak, és azt fejezik ki, hogy a csatlakozási pontokba befolyó és on-

nan kifolyó áramok nagysága megegyezik. (Ez teljesen analóg a megfelelő klasszikus Kirchoff törvénnyel.) A koordinátarendszerek irányításának megfelelő előjeleket véve, ez azt jelenti, hogy

$$J_u(\varphi = \gamma) + J_l(\varphi' = 2\pi - \gamma) + J_I = 0, \quad J_u(\varphi = 0) + J_l(\varphi' = 0) + J_{II} = 0. \quad (4.15)$$

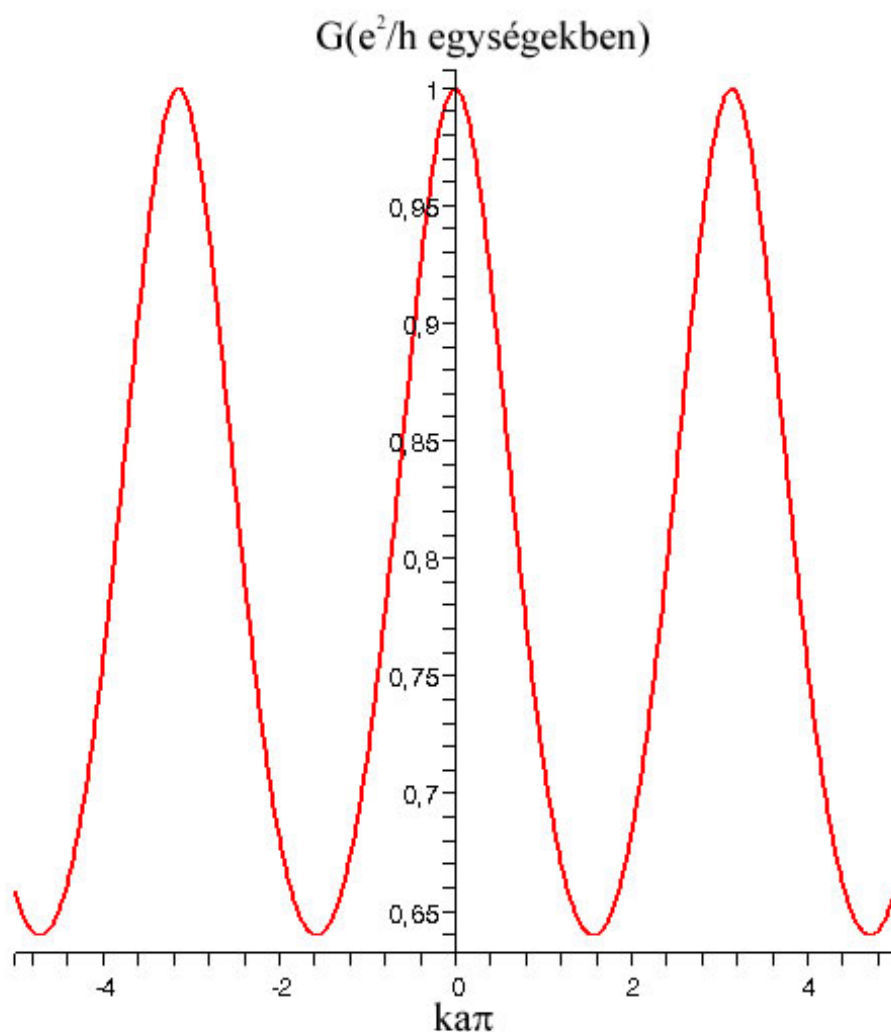
Ha a (4.14) egyenletek már teljesülnek, akkor az áramokra vonatkozó fenti megkötések a megfelelő deriváltak összegének az eltűnését fejezik ki, ami azért hasznos, mert az egyenletek így lineárisak lesznek a hat ismeretlen együtthatóban. Így egy hat egyenletből álló lineáris egyenletrendszert nyertünk. Fizikailag érezhető, hogy ennek az egyenletrendszernek mindig (minden  $E_f$  értékre) egyértelműen megoldhatónak kell lennie. Ez így is van, bár ha az együtthatók mátrixának a determináns egy adott  $k_f$  esetén eltűnik, az természetesen külön figyelmet érdemel. Mindenesetre az egyenletek számát tekintve ez a probléma még papíron, ceruzával (analitikusan) is könnyen megoldható.

A 16. ábra arra az esetre mutatja a  $T = |t|^2$  transzmissziós valószínűség függését a gyűrű  $a$  sugarától, amikor a vezetékek egymással szemben helyezkednek el, azaz a 15. ábrán látható  $\gamma$  szög  $\pi$ . Ekkor az analitikus megoldás

$$t = \frac{-8i \sin(ka\pi)}{5 - 5 \cos(2ka\pi) + 4i \sin(2ka\pi)}, \quad (4.16)$$

és ahogyan az ábrán látjuk, a transzmissziós valószínűség (vagy a vezetőképesség  $e^2/h$  egységekben) periodikus függvénye a gyűrű sugarának. Szemléltessen azt mondhatjuk, hogy ez annak a következménye, hogy az egymással szembe folyó áramokat leíró gyűrűbeli hullámfüggvények interferenciája a kimenetnél – ami a folytonosság miatt meghatározza a kifolyó áramot is – attól függ, hogy mekkora "utat" járnak be, azaz a hullám-számhoz képest mekkora a gyűrű sugara.

Kissé távolabbról tekintve az eredményre, azt mondhatjuk, hogy ebben a fejezetben egy szép példáját láttuk annak, amikor a transzmissziós valószínűséget analitikusan lehet meghatározni, tulajdonképpen pusztán alapvető kvantummechanikai ismeretekre támaszkodva. Módszerünk az volt, hogy a különböző tartományokon megoldottuk az



16. ábra. Egydimenziós kvantumgyűrű vezetőképessége  $e^2/h$  egységekben.

időfüggetlen Schrödinger egyenletet, a sajátfüggvények közül a Fermi-energiával rendelkezőket választottuk ki, majd illesztettük a megoldásokat. Ezután a teljes geometriát leíró hullámfüggvény ismeretében (azaz a probléma kvantummechanikai értelemben vett teljes megoldása után) már egyszerű volt a transzmissziós valószínűség meghatározása. A következő fejezetben azokra az esetekre is alkalmazható módszert vázolunk, amelyek nem könnyen kezelhetők a fenti eljárással.



## 4.2. Szórási mátrix és Green függvények

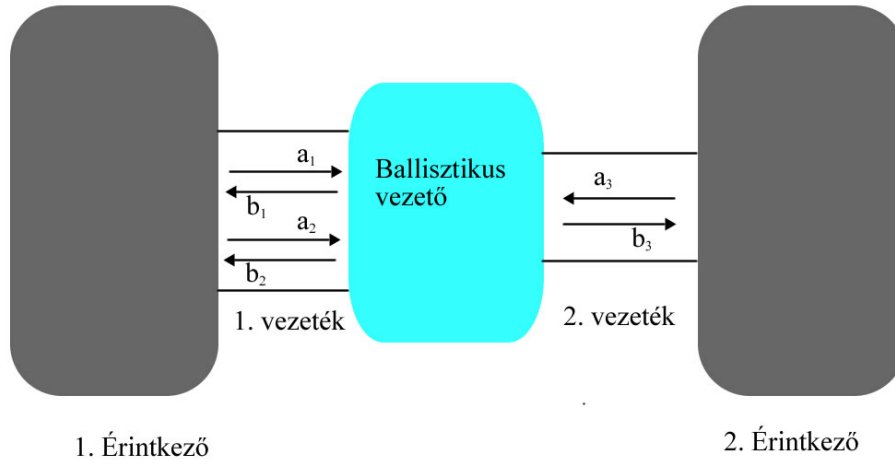
Ebben a fejezetben a szórásprobléma kapcsán azokat a módszereket tekintjük át, amelyek általánosak abban az értelemben, hogy segítségükkel a feladat mindig olyan alakba írható, ahonnan a kívánt eredményekhez már szokásos numerikusan eljárások vezetnek. Nyilvánvalóan ez még nem jelenti azt is, hogy így minden esetben könnyen kiszámíthatók pl. a transzmissziós valószínűségek, hiszen összetettebb esetekben az így kapott numerikus probléma gyakran számítástechnikai értelemben "nehéz" (vagy inkább bonyolult), megoldása komoly számítási kapacitást és/vagy hosszú időt igényel.

A fejezet első részében a szórási mátrixról lesz röviden szó, majd a számunkra érdekes Green-függvényekkel való megismerkedés után arra térünk rá, hogyan lehet diszkretizált (rács)modelleken belül meghatározni ezeket a függvényeket (mátrixokat) és felhasználni őket a lényeges fizikai mennyiségek kiszámítására.

### Szórási mátrix

Tekintsünk egy érintkezőkkel összeköttetésben lévő ballisztikus vezetőt, legyen egy adott  $E_f$  energián egyik oldali vezetékben  $n_1$ , a másikban pedig  $n_2$  a haladó hullámot leíró módusok száma. Ezek a haladó hullámok általában két irányban, a vezető felé, illetve attól távolodva haladhatnak. (A hullámok terjedési irányát – ahogyan az előző fejezetben láttuk – a megfelelő valószínűségi áramsűrűségek iránya adja meg.) A 17. ábra egy olyan esetet szemléltet, amikor  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 1$ . Az egyes irányokhoz tartozó amplitúdókat  $a_i$ -vel és  $b_i$ -vel jelölve (esetünkben az  $i$  index három értéket vesz fel, általában  $i = 1, 2, \dots, n_1 + n_2$ ), a szórási, vagy röviden  $S$ -mátrix a kimenő és a bejövő amplitúdókat köti össze:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$



17. ábra. Ballisztikus vezető a bejövő és kimenő hullámok amplitúdóinak a feltüntetésével.

A legáltalánosabb esetben, ha  $k$  vezeték csatlakozik a ballisztikus mintához,  $n_1, n_2, \dots, n_k$  haladó módussal, akkor  $S$   $n_1 + n_2 + \dots + n_k$  sorral illetve oszloppal rendelkező négyzetes mátrix. Könnyen látható, hogy annak a  $T_{m \leftarrow n}$  valószínűsége, hogy az  $n$ -edik módusban érkező elektron az  $m$ -edikbe szóródik megegyezik  $S$  megfelelő mátrixelemével:

$$T_{m \leftarrow n} = |s_{mn}|^2. \quad (4.18)$$

Az eddigiek alapján pedig a  $p \leftarrow q$ , két vezeték közötti átmeneti valószínűség a megfelelő módusokhoz tartozó  $T_{m \leftarrow n}$  valószínűségek összege:

$$T_{p \leftarrow q} = \sum_{n \in q, m \in p} T_{m \leftarrow n}, \quad (4.19)$$

ahol tehát  $q$  és  $p$  a vezetékeket indexeli. Ebből az értelmezésből, valamint abból a kíváncságból, hogy a (valószínűségi) áram az előző fejezetben látott Kirchoff-törvény szerű értelemben megmaradjon, adódik, hogy a szórás mátrix unitér:

$$S^{-1} = S^\dagger, \quad \sum_n |s_{mn}|^2 = \sum_m |s_{mn}|^2 = 1. \quad (4.20)$$

A félreértések elkerülése érdekében fontos megjegyezni, hogy gyakran használják  $S$  helyett azt az  $S'$  mátrixot, amelynek az elemei a megfelelő sebességekkel az

$$s'_{nm} = \sqrt{v_n v_m} s_{nm} \quad (4.21)$$

módon vannak súlyozva. (Ennek az az értelme, hogy a szórt hullámokhoz kapcsolható áram a sebességekkel arányos.) Ahogyan az látszik is, ha  $S$  unitér, akkor  $S'$  általában nem az, így az ebben a témában írt szövegek olvasásakor figyelmet kell fordítanunk arra, hogy a szerzők mit is értenek pontosan a szórási mátrixon.

## Röviden a Green-függvényekről

Ebben az alfejezetben röviden áttekintjük, hogy milyen Green-függvények kapcsolhatók az eddigiekben ismertett szóráspblémához. Green-függvényekkel a fizika igen sok területén találkozhatunk (elektrodinamika kapcsán érdemes a [9] könyvet kézbe venni), általánosan azt mondhatjuk, ha egy rendszer  $R$  "válasza" valamilyen  $F$  "gerjesztésre" egy  $D$  differenciáloperátorral írható le,

$$DR = F, \quad (4.22)$$

és  $D$  invertálható, akkor az  $R$  "válasz" a  $G = D^{-1}$  jelöléssel a

$$R = GF \quad (4.23)$$

alakba írható. Leginkább arról szokott szó lenni, hogy ha egy rendszert egy inhomogén differenciálegyenlet ír le, és ismerjük a megfelelő differenciáloperátor Green-függvényét (inverzét), akkor már tetszőleges gerjesztés esetén kiszámíthatjuk megoldást. Mielőtt továbblépnénk a kevésbé általános, cserébe könnyebben értelmezhető példák felé, jegyezzük már most meg, hogy Green-függvénye általában nem egy differenciáloperátornak van, hanem – mondjuk így – egy fizikai problémának: ezekkel a függvényekkel jóldefiniált differenciálegyenleteket tudunk megoldani, ahol tehát a megfelelő *perem-*

*feltételek is* adottak. Nem kimondottan témánkba vágó, de szemléletes példaként gondoljunk egy lokalizált, sztatikus  $\rho(\mathbf{r})$  töltéeloszlásra, amelyet a  $\phi$  skalárpotenciállal a Poisson egyenlet köt össze:

$$\Delta\phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (4.24)$$

Ekkor a szokásos eljárás az, hogy a potenciált a

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{y})}{|\mathbf{r} - \mathbf{y}|} d^3y \quad (4.25)$$

módon számítjuk ki, ahol az integrálást arra a  $V$  térfogatra terjesztjük ki, ahol  $\rho$  nem nulla. Ezt másképpen úgy is mondhatjuk, hogy

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (4.26)$$

a Laplace operátor azon Green függvénye, amely a  $\phi(\infty) = 0$  peremfeltételhez kapcsolódik. A bevezetőben említett operátor értelemben  $G$ , mint a Laplace differenciáloperátor inverze egy  $\rho$  függvényre a (4.25) egyenlet által megadott módon ("integrál értelemben") hat. Érdeemes hangsúlyozni, hogy a (4.25) megoldás nem "a" potenciál, ez pusztán egy konkrét (jóllehet a fizikai intuíciónak megfelelő) peremfeltételt teljesítő  $\phi$  függvényt ad meg. Más peremfeltétel esetén más lenne a Green-függvény is. Viszátérve a (4.26) egyenlethez, az is látható, hogy ez tulajdonképpen azt mutatja meg, hogy egy, az  $\mathbf{r}'$  pontba helyezett "elemi gerjesztés" (esetünkben a lényegében egy ponttöltés) milyen (a peremfeltételeknek megfelelő) potenciált hoz létre az  $\mathbf{r}$  pontban. Azaz a (4.26) függvény – kissé nagyvonalúan fogalmazva – a

$$\Delta_r G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (4.27)$$

egyenlet egy megoldása, ahol  $\delta$  a Dirac-féle delta függvényt (disztribúciót) jelöli, amelynek tulajdonságai természetesen biztosítják, hogy a (4.25) integrál valóban megoldása lesz a Poisson egyenletnek.

Abban az esetben, ha visszatérünk a szórásproblémához egy adott  $E$  energián, akkor

az előző fejezetekben tárgyalt közelítések keretein belül a

$$H_{eff} - E \tag{4.28}$$

differenciáloperátor inverzét keressük, ahol az (1.26) egyenletnek megfelelően

$$H_{eff} = \left[ \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m^*} \right] + V + \epsilon_{\mathbf{k}_0}. \tag{4.29}$$

Inverz alatt most is azt értjük, hogy megkeresendő az a  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  függvény, amellyel

$$(H_{eff} - E) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \tag{4.30}$$

Ez az egyenlet a jobb oldalon található "forrás" tagtól eltekintve olyan, mintha egy  $G$ -re vonatkozó hagyományos sajátértékegyenlet lenne. A Dirac-delta pedig egy "elemi gerjesztés", így  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  tulajdonképpen azt a hullámfüggvényt írja le az  $\mathbf{r}$  helyen, ami egy  $\mathbf{r}'$  helyről származó gerjesztés következtében jön létre. (Ahogyan a (4.26) Green-függvény is azt a potenciált írja le, amit egy ponttöltésnek megfelelő elemi gerjesztés hoz létre.) A peremfeltételek kapcsán tekintsünk most egy egyszerű példát, legyen

$$H_1 = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \tag{4.31}$$

ami egydimenziós szabad mozgást ír le az  $-\infty < x < \infty$  intervallumon. A Green-függvény meghatározására általában több módszer is használható, kövessünk most egy elemi eljárást, ami azonban a némiképpen a formalizmus tartalmára is rávilágít. Fizikailag azt várjuk, hogy az  $x'$ -beli gerjesztés innen kiinduló hullámokat kelt mindkét irányba; legyen ezek amplitúdója  $A^+$  és  $A^-$ . Ekkor a haladási irányokat figyelembe véve írhatjuk, hogy

$$G(x, x') = A^+ e^{ik(x-x')}, \quad x > x', \tag{4.32}$$

$$G(x, x') = A^- e^{-ik(x-x')}, \quad x < x'. \tag{4.33}$$

A  $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$  választással az amplitúdóktól függetlenül teljesül a (4.30) egyenlet (az értelemszerű  $H_{eff} \rightarrow H_1$  cserével) mindenhol, kivéve, ha  $x = x'$ . Itt (4.30) alapján  $G$  folytonos, deriváltja ugyanakkor ugrást szenved el, aminek a nagysága  $2m^*/\hbar^2$ . Ezt felhasználva adódik, hogy  $A^+ = A^- = im^*/\hbar^2k$  és így

$$G(x, x') = G^R(x, x') = -\frac{i}{\hbar v} e^{ik|x-x'|}, \quad (4.34)$$

ahol  $v = \hbar k/m^*$ . Fontos észrevenni, a

$$G^A(x, x') = \frac{i}{\hbar v} e^{-ik|x-x'|}, \quad (4.35)$$

ún. avanszált (advanced) Green-függvény matematikai szempontból szintén megfelelő lenne, de ez a megoldás a gerjesztési pont felé futó, ott eltűnő hullámokat ír le, azaz a fizikai intuíció által helyesnek vélttől eltérő peremfeltételekhez tartozik. Green-függvények alkalmazása során előfordulhatnak olyan esetek, amikor a  $G^A$  függvényt kell használnunk, de az ebben a jegyzetben felmerülő kérdések esetén mindig elegendő lesz a  $G^R$  retardált (retarded) Green-függvény alkalmazása, ezért a továbbiakban az index nélküli  $G$  mindig a retardált függvényt fogja jelenteni. Jegyezzük meg, hogy ha egy infinitezimálisan kicsiny pozitív  $\eta$  számmal azt írjuk, hogy

$$(H_{eff} - E - i\eta) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (4.36)$$

akkor megoldásként mindig a retardált Green-függvényt kapjuk, míg az  $\eta \rightarrow 0^-$  esetben  $G^A$ -hoz jutunk, azaz ilyen módon a peremfeltétel belekódolható a (4.30) egyenletbe. Az is fennáll továbbá, hogy ha ismerjük a  $H_{eff}$  operátor összes sajátfüggvényét és sajátenergiáját

$$H_{eff}\psi_i = \epsilon_i\psi_i, \quad (4.37)$$

akkor a  $\{\psi_i\}$  teljesnek tekintett függvényrendszer szerint kifejtethetjük a (4.36) egyen-

letet, és a sajátfüggvények ortogonalitását kihasználva azt kapjuk, hogy

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i \frac{\psi_i(\mathbf{r})\psi_i^*(\mathbf{r}')}{E - \epsilon_i - i\eta}. \quad (4.38)$$

Az összegzés elvégzése nem mindig triviális, ennek ellenére a fenti egyenlet gyakran jól használható a Green-függvények kiszámítására.

Vizsgáljuk most azt a kérdést, hogy a (retardált) Green-függvény ismeretében hogyan határozható meg a szórási mátrix, és így a transzmissziós valószínűségeken keresztül a vezetőképesség. Ha a ballisztikus vezetõhöz olyan vezeték kapcsolódik, amelyek egyetlen haladó módussal rendelkeznek, akkor ez kérdés szemléletesen is megválaszolható. Tegyük fel ugyanis, hogy a  $p$ -edik vezeték egy pontjában létrehozunk egy elemi gerjesztést, és jelölje  $G_{pq}$  a Green függvényt kiértékelve ezen pontban és a  $q$ -edik vezeték egy szintén előre kiválasztott pontjában. Az elemi gerjesztés a kiindulási pontból kiinduló hullámokat hoz létre, amelyek amplitúdója a vezetõ felé haladó irányban legyen  $A^+_p$  ezzel ellentétesen pedig  $A^-_p$ . A vezetõ felé haladó hullám a szórás következtében eljut az összes vezetékbe, a  $q$ -adikba  $A^+_p s'_{pq}$  amplitúdóval, ahol az esetlegesen eltérõ terjedési sebességek miatt jelenik meg a (4.21) egyenlettel adott "módosított" szórási mátrix. Összefoglalva tehát, azt írhatjuk, hogy

$$G_{pq} = \delta_{pq} A^-_p + A^+_p s'_{pq}. \quad (4.39)$$

Ebben az egydimenziós esetben kihasználhatjuk, hogy az elõzõ bekezdés alapján  $A^-_{-p} = A^+_p = -i/\hbar v_p$ , így a végül a (4.21) egyenlet felhasználásával az adódik, hogy

$$s_{pq} = -\delta_{pq} + i\hbar\sqrt{v_p v_q} G_{pq}. \quad (4.40)$$

Ez az egyenlet teremt tehát kapcsolatot egymódusú esetben a szórási mátrix és a Green-függvény között. Ha a vezetékben több módusban is terjedhetnek a hullámok, akkor  $G_{pq}$  transzverzális ( $y$ ) iránytól való függése már lényeges lesz, és arra juthatunk [10],

hogy

$$G_{pq}(y_p, y_q) = \sum_{m \in q, n \in p} -\frac{i}{\hbar \sqrt{v_p v_q}} (\delta_{nm} + s_{nm}) \chi_n(y_p) \chi_m(y_q), \quad (4.41)$$

ahol a 3.1 alfejezetben megismert  $\chi$  transzverzális függvények jelennek meg. Ezek ortogonalitását kihasználva a fenti összefüggésből kifejezhetők az egyes módusok közötti szórási mátrixelemek:

$$s_{nm} = -\delta_{nm} + i\hbar \sqrt{v_p v_q} \int \int \chi_n(y_p) \chi_m(y_q) G_{pq}(y_p, y_q) dy_p dy_q. \quad (4.42)$$

A fenti (4.40, 4.42) egyenleteket Fisher-Lee relációknak szokás nevezni [10], és a legfontosabb következményük az, hogy ha meghatározzuk a retardált Green függvényt a ballisztikus mintával érintkező vezetékek egy-egy keresztmetszetére, akkor végső soron minden fizikailag érdekes kérdést képesek leszünk megválaszolni.

## Diszkrét modell

Tekintsük most azt a gyakorlati szempontból fontos kérdést, hogyan is lehet meghatározni a számításokhoz szükséges retardált Green-függvényt. Általánosságban az mondható el, hogy különleges (és szép) speciális esetektől eltekintve nem lehetséges könnyen analitikus megoldást találni. A továbbiakban egy olyan numerikus eljárást vázolunk, ami elvben mindig megoldhatóvá teszi a feladatot. A módszer lényege, hogy a folytonos  $x, y$  koordináták helyett diszkrét pontrácsra képezzük le a problémát, és így függvények helyett mátrixokkal dolgozunk, amik már jól kezelhetők számítógéppel.

Elsőként tekintsünk egy egydimenziós, a

$$H_2 = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad (4.43)$$

Hamilton operátorral adott problémát. Az  $x$  folytonos koordináta helyett vegyünk most  $x_j = ja$ , ( $j$  egész) diszkrét pontokat, és írjuk át a differenciálegyenletet ezen az egydimenziós rácson (azaz láncon) értelmezett differenciaegyenletté. (Az eljárást, amelynek pontossága erősen függ az  $a$  távolság megválasztásától, gyakran véges differenciák mód-



szerének is hívják.) Egy  $f$ , a láncon értelmezett próbafüggvényt tekintve tehát a

$$[H_2 f]_{x=ja} \tag{4.44}$$

mennyiségeket kell tehát meghatározni. A példa kedvéért a legegyszerűbb standard differenciaoperátort alkalmazva

$$\left[ \frac{d^2 f}{dx^2} \right]_{x=ja} = \frac{1}{a^2} (f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}), \tag{4.45}$$

ahol  $f_j = f(x = ja)$ . Így  $H_2$  hatása a diszkrét pontokban értelmezett  $f$  függvényen mátrixszorzás alakba írható:

$$[H_2 f]_{x=ja} = \sum_i H_{ji} f_i, \tag{4.46}$$

ahol  $t = \frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$  és

$$H_{ji} = \begin{cases} U_i + 2t, & \text{ha } j = i, \\ -t, & \text{ha } j = i \pm 1, \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \tag{4.47}$$

A végtelen mátrix tehát csak a főátlóban, illetve az alatt és fölött tartalmaz nem nulla elemeket:

$$H_{ji} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \\ \cdots & U_{-1} + 2t & -t & 0 & \cdots \\ \cdots & -t & U_0 + 2t & -t & \cdots \\ \cdots & 0 & -t & U_1 + 2t & \cdots \\ \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{4.48}$$

Mivel ez pontrácson értelmezett Hamilton operátor formai szempontból hasonló ahhoz a szilárdtest illetve molekulafizikai modellhez, ami a magokhoz szorosan kötődő elektronok feltételezésével él, használatos a szoros kötésű (tight binding) Hamilton operátor

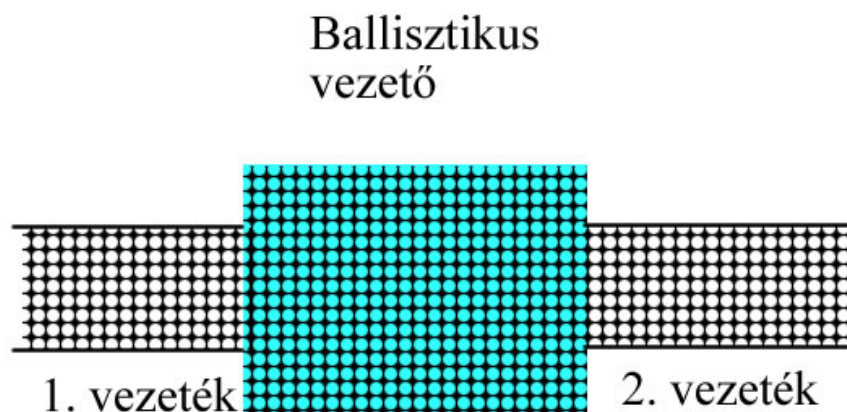
elnevezés is. Ebben a mátrixos formában a Green-függvények is valójában mátrixok,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow G_{ij} := G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (4.49)$$

és az őket meghatározó inverzképzést is mátrix értelemben értjük, azaz pl. a retardált esetben

$$(H_{eff} - E - i\eta) G^R = \mathbf{1}, \quad (4.50)$$

ahol tehát a jobb oldalon az egységmátrix jelenik meg. A továbbiakban  $G$  alatt mindig rácson értelmezett függvényt értünk.



18. ábra. A szórásprobléma kétdimenziós rácsmmodellje.

Ha a korábbiakban vázolt alapproblémára gondolunk vissza (vezetékekkel érintkező ballisztikus minta), akkor a diszkrét eset a 18. ábrán látható rácsnak felel meg. Bár a fentiekben csak a láncszerű rács esetét részleteztük, az eljárás könnyen átvihető az ábrán látható kétdimenziós esetre is, ekkor az (1.26, 4.29) egyenletekkel adott Hamilton operátor mátrixelemei a (négyzetes) rácson a következők lesznek:

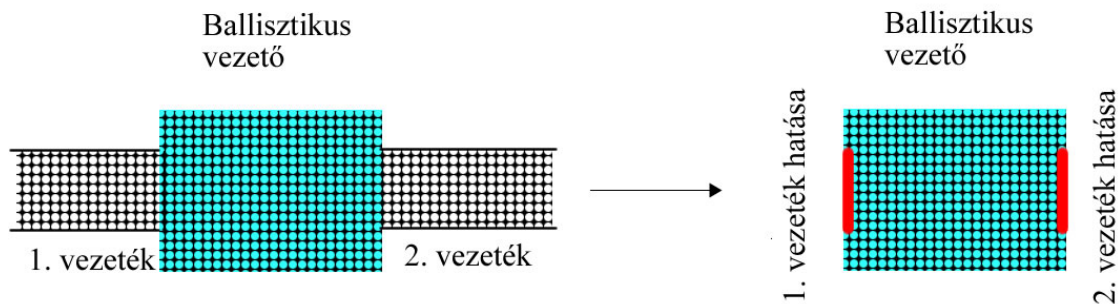
$$[H_{eff}]_{ij} = \begin{cases} U_i + 4t, & \text{ha } i = j, \\ -t_{ij}, & \text{ha } i \text{ és } j \text{ szomszédos pontok,} \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (4.51)$$

Ebben az egyenletben

$$t_{ij} = te^{\frac{ieA(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{\hbar}}, \quad (4.52)$$

ahol a vektorpotenciált a két pont ( $\mathbf{r}_i$  és  $\mathbf{r}_j$ ) között félúton ( $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/2$ -ben) kell kiértékelni, és utána szorozni skalárisan a  $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  különbséggel [1].

Ha a (4.50) egyenlet alapján szeretnénk most a Green függvényt meghatározni, a 18. ábra szerinti geometria esetén szembesülünk azzal a numerikusan nehezen kezelhető problémával, hogy a vezetékek miatt elvben végtelen mátrixokat kell invertálnunk. Ha az első ötletet követve egyszerűen "elegendően nagy" mátrixokat vennénk (azaz a végtelen rácsot a vezetőtől távol vágánk el), nem kapnánk helyes eredményt, mert a hullámok mindenképpen visszaverődnének a mesterségesen beillesztett végfelületekről. A feladat azonban – végiggondoltabb módon kivitelezett "levágással" – végessé, és így megoldhatóvá redukálható. A hozzáállás lényege, amit a 19. ábra szemléltet, az, hogy lehetséges pusztán a vezető Green-függvényére koncentrálni, csak ez függvény nem pontosan az lesz, mint amit izolált minta esetén kapnánk: a vezetékek hatására az invertálandó (immár véges) mátrix megváltozik az érintkezési felületeken.



19. ábra. Rácsmodell végessé redukálása a vezetékek szepének figyelembe vételével.

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk most pusztán egyetlen vezetéket, amit  $p$ -vel indexelünk. (A fizikailag érdekesebb, több vezetéket tartalmazó eset egyszerű általánosításként adódik majd a későbbiekben.) A rácspontok megfelelő sorrendű számozásával az in-

vertálandó (egyelőre végtelen) mátrix a következő alakú:

$$G = \begin{pmatrix} (E + i\eta)\mathbf{1} - H_p & \tau_p \\ \tau_p^\dagger & E\mathbf{1} - H_m \end{pmatrix}^{-1}, \quad (4.53)$$

ahol a  $\tau$  csatoló mátrix pusztán a minta és a vezeték illeszkedési határán nem 0, a legegyszerűbb esetben itt konstans ( $-t$ ). A  $H_p$  operátor a vezeték,  $H_m$  pedig a minta Hamilton operátora. A pozitív és infinitezimálisan kicsiny  $\eta$  biztosítja a peremfeltételt (retardált Green-függvény) a vezetékben, de magában a mintában – ahogyan azt nem-sokára látni fogjuk – nincs szükség ilyen jellegű változtatásokra.

Ha most a fenti inverz egyes részmátrixait elnevezzük a szerint, hogy szorzáskor mely pontokra hatnak, írhatjuk, hogy

$$G = \begin{pmatrix} G_p & G_{pm} \\ G_{mp} & G_m \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} (E + i\eta)\mathbf{1} - H_p & \tau_p \\ \tau_p^\dagger & E\mathbf{1} - H_m \end{pmatrix}^{-1}. \quad (4.54)$$

A mátrixszorzás szabályai alapján kapjuk, hogy

$$G_m = [E\mathbf{1} - H_m - \tau_p^\dagger g_p^R \tau_p]^{-1}, \quad (4.55)$$

ahol

$$g_p^R = [(E + i\eta)\mathbf{1} - H_p]^{-1} \quad (4.56)$$

az *önmagában álló* vezeték retardált Green-függvénye. Mivel a csatoló  $\tau$  mátrix csak a határfelületen nem tűnik el ( $\tau_{i,j} = 0$ , kivéve ha  $i = p_i$  a  $p$  vezeték végpontja és  $j$  vele szomszédos, a mintán belüli pont), abban az egyszerű esetben, amikor a nemzéró mátrixelemek megegyeznek  $-t$ -vel, azt kapjuk, hogy

$$[\tau_p^\dagger g_p^R \tau_p]_{ij} = t^2 [g_p^R]_{p_i p_j}, \quad (4.57)$$

ahol tehát  $p_i$  és  $p_j$  a vezeték határpontjai,  $i$  és  $j$  pedig a mintán belüli közvetlen szomszédok. Ha nem csupán egyetlen, eddig  $p$ -vel jelölt vezeték van, akkor a minta Green-

függvényéhez mindegyikük a fenti módon járul hozzá, így végül a témában szokásos jelölésekkel írhatjuk, hogy

$$G_m = [E\mathbf{1} - H_m - \Sigma^R]^{-1}, \quad (4.58)$$

ahol

$$\Sigma^R = \sum_p \Sigma_p^R, \quad [\Sigma_p^R]_{ij} = [t^2 g_p^R]_{p_i p_j}. \quad (4.59)$$

Vegyük észre, hogy a (4.58) egyenlettel adott Green-függvény már egy véges mátrix inverze, így numerikusan számolható. Pontosán ennek a függvénynek a vezetékek illeszkedési pontjain felvett értéke határozza meg a (4.40, 4.42) Fisher-Lee relációkon keresztül a szórási mátrixot, amiből pedig a vezetőképesség már kiszámítható. Fontos továbbá, hogy a (4.58) Green-függvényt *közelítések nélkül* kaptuk, az tehát a végtelen vezetékek szerepét egzaktul veszi figyelembe, legalábbis a diszkrét modell keretein belül. Tovább vizsgálva a (4.58) egyenletet, láthatjuk, hogy a vezetékekben használt, a peremfeltételt biztosító  $\eta$  szerepét  $G_m$ -ben a  $\Sigma^R$  tag veszi át. Ezt úgy tekinthetjük, mint egy effektív Hamilton operátort, ami vezetékekhez való csatolást veszi figyelembe (gyakran használatos a vezeték "sajátenergiája" kifejezés rájuk). Ha a modell pontosítása érdekében pl. az elektron-fonon kölcsönhatást is figyelembe szeretnénk venni, akkor hasonló jellegű tagot kellene még hozzáadnunk a minta Hamilton operátorához. Fontos azonban fejben tartani, hogy míg az ilyen jellegű módosítások általában csak közelítőleg adnak számot adott esetben a fononok hatásáról, addig a vezetékek sajátenergiája azok szerepét pontosan veszi figyelembe.

Végezetül szenteljünk figyelmet a vezetékek befolyását kifejező  $\Sigma^R$  tagnak. A (4.58) egyenlet viszonylag kevés gyakorlati jelentőséggel bírna, ha  $\Sigma^R$ -et nem tudnánk meghatározni. A fentiekben arra jutottunk, hogy  $\Sigma_p^R$  lényegében a  $p$ -edik, izoláltnak tekintett vezeték Green-függvénye, pontosabban ennek a tagnak az  $i, j$ -edik mátrixeleme  $g_p^R$  megfelelő ( $i$ -vel és  $j$ -vel szomszédos) határpontokban felvett értékével arányos. A fontos észrevétel itt az, hogy (a gyakorlati szempontból is fontos) viszonylag egyszerű alakú vezetékek esetén  $g_p^R$  különösebb nehézség nélkül kiszámítható. Részletes levezetés nélkül álljon

itt példaként egy, a mágneses tér hatásától mentes, egyenes, félig végtelen (a "másik, véges" felével a mintával érintkező) vezeték retardált Green-függvénye az érintkezési felület pontjaiban:

$$[g_p^R]_{p_i p_j} = -\frac{1}{ta} \sum_m \chi_m(p_i) \chi_m(p_j) e^{ik_m a}, \quad (4.60)$$

ahol bizonyos transzverzális függvények esetén még az összegzés is elvégezhető. Érdemes ezen a ponton elgondolkodni azon, hogy pl. a fenti Green-függvény milyen peremfeltételeknek felel meg. Ez a kérdés azért merül fel, mert a teljes probléma (beleértve a vezetőket és a mintát is) elvben végtelen kiterjedésű, így elegendő pusztán a retardációt megszabni peremfeltételként. A félig végtelen vezeték esetén azonban mesterségesen bevezetünk egy határfelületet, amin meg kell mondanunk, hogyan viselkedjen a megoldás. (A fenti példa a "rögzített" vég esetének felel meg.) Ugyanakkor, pontosan ennek a határfelületnek a mesterséges volta miatt, fizikailag azt várjuk, hogy a mérhető eredmények nem függenek a peremfeltétel megválasztásától. Ha a (4.60) függvényt visszairjuk a (4.58) egyenletbe, akkor két különböző  $p$  és  $q$  vezeték közötti transzmissziós valószínűség a (4.42) Fisher-Lee reláció felhasználásával a következő kompakt alakot ölti:

$$\overline{T_{pq}} = Tr [\Gamma_p G_m \Gamma_q G_m^\dagger], \quad (4.61)$$

ahol tehát a szögletes zárójelben szereplő mátrix átlósösszegét kell venni, továbbá

$$\Gamma_p = i \left[ \Sigma_p^R - (\Sigma_p^R)^\dagger \right]. \quad (4.62)$$

Ennek ismeretében már könnyen megmutatható, hogy ha pl. a (4.60) egyenlettel adott Green-függvény helyett az érintkezési felületen "szabad vég" peremfeltételhez tartozó függvényt vennénk, a transzmissziós valószínűségek nem változnának.

Összefoglalva azt mondhatjuk, hogy ha elegendő számítási kapacitás áll rendelkezésünkre, akkor az ebben a fejezetben vázolt módszer, ami végül a (4.61) egyenlethez vezetett, jól alkalmazható a transzportfolyamatokkal kapcsolatos problémák széles körében. Nyilvánvaló esztétikai hátránya, hogy teljesen numerikus, de ezt messze felülműlják használ-

hatóságából fakadó előnyei. A módszer további pozitívuma, hogy viszonylag csekély változtatásokkal alkalmassá tehető olyan problémák leírására is, amikor az eddig elhanyagolt elektron-elektron és fonon-elektron kölcsönhatásokat is figyelembe kell vennünk.

## 5. fejezet

# Alkalmazások stacionárius esetben

### 5.1. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás

#### Háromdimenziós eset

Az elektron spin szabadsági fokának manipulálására az egyik hatékony módszer az ún. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatáson alapul. Az elektronspin a relativisztikus kvantummechanikában természetes módon jelenik meg, a nemrelativisztikus elméletbe azonban bizonyos értelemben mesterséges módon kell beilleszteni. Egy lehetséges, konzisztens módszer, ha a külső elektromágneses tér figyelembevételével felírt Dirac-egyenlet nem-relativisztikus határesetét tekintjük. A fénysebesség reciproka ( $1/c$ ) szerint sorfejtést végezve, az első korrekció a Dirac-spinor „nagy komponensére” vonatkozó Pauli-egyenletet szolgáltatja. Maga a spin-pálya kölcsönhatás a sorfejtés következő rendjéből adódik, ekkor megjelenik egy  $\sigma(\mathbf{E} \times \mathbf{p})$ -vel arányos tag, ahol  $\sigma$  a Pauli mátrixok alkotta vektor,  $\mathbf{E}$  a külső elektromos mező,  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  pedig a kanonikus impulzus operátora. A jelenség szokásos értelmezése az, hogy a mozgó elektron vonatkoztatási rendszeréből az  $\mathbf{E}$  tér nem tisztán elektromos, lesz egy  $\mathbf{B}$  mágneses komponense is. A Lorentz transzformáció kis sebességekre érvényes közelítő alakjának felhasználásával láthatóvá válik, hogy ez a  $\mathbf{B}$  arányos  $\mathbf{E} \times \mathbf{p}$ -vel, azaz a spin-pálya kölcsönhatás lényegében a mozgó elektron által érzékelt mágneses mező kölcsönhatása az elektron spinjéhez csatolt mágneses nyomatékkal.



Mágneses tér nélkül, centrális  $V(\mathbf{r})=V(r)$  skalárpotenciál terében mozgó  $m$  tömegű elektronra ez a tag

$$H_{SOI} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{L}\mathbf{S} \quad (5.1)$$

alakba írható, ahol  $\mathbf{L}$  a pálya-impulzusmomentumot jelöli, és bevezettük az  $\mathbf{S} = \hbar\sigma/2$  spin operátort. Az  $\mathbf{L}\mathbf{S}$  szorzat indokolja a spin-pálya kölcsönhatás (spin-orbit interaction: SOI) elnevezést.

Emmanuel I. Rashba arra mutatott rá, hogy inverziós szimmetriát nélkülöző kristályrácsokban egy

$$H_{RSOI} = \alpha_R \sigma (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \quad (5.2)$$

alakú tag jelentős szerepet játszhat, a sávok spinfüggő felhasadását okozhatja pl. az energiaminimumok környékén. Ahogyan az látható, ez a kifejezés szinte megegyezik azzal, ami a Dirac-egyenletből származtatható, ugyanakkor a magok által létrehozott potenciál miatt a prefaktor (Rashba paraméter,  $\alpha_R$ ) jóval nagyobb is lehet, mint szabad térben. Mivel  $H_{RSOI}$ -ban megjelenik az elektronok által érzett  $\mathbf{E}$  elektromos tér, már ezen a ponton érdemes megjegyezni, hogy egy külső térerősség, amely hozzáadódik az anyagban egyébként is jelenlévő térerősséghez, befolyásolni tudja a Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatást. Az eddigiekben ismertetett jellegű, tömbi Rashba-effektust mutató anyagok közül jelenleg BiTeI kristályokban a legnagyobb a különböző spinirányokhoz tartozó sávok felhasadása ( $\approx 0.1$  eV). Ezek az anyagok azonban jelenleg még nem elegendően tiszták ahhoz, hogy a kísérletekben a ballisztikus transzportot is vizsgálni lehessen.

A teljesség kedvéért érdemes megjegyezni, hogy ismeretes egy más típusú (pl. köbös) kristályokban előforduló, Dresselhaus-típusú SOI-nak nevezett kölcsönhatás is, amely az impulzusokban köbös tagokat tartalmaz és nem kontrollálható külső elektromos térrel.

## Rashba-effektus két dimenzióban

1984-ban Bychkov és Rashba megmutatták, hogy kétdimenziós elektrongázban (two dimensional electron gas: 2DEG) zajló transzportfolyamatokra szintén jelentős hatással lehet a spin-pálya kölcsönhatás. Ilyen rendszerek jellemzően két különböző félvezető réteg határán jönnek létre, amikor a vezetés lényegében a közeghatár mentén zajlik. Természetesen általában (tetszőleges anyagpáros esetén) nem alakul ki 2DEG, a tipikus példa arra, amikor azonban kialakul, az InAlAs/InGaAs heteroátmenet, amikor a két anyag érintkezési felületénél a vezetési sávnak lokális minimuma van, úgy, hogy ennek a minimumnak az értéke a Fermi-energiánál kisebb. Ez azzal jár, hogy a közeghatár környékén található elektronok könnyen elmozdulnak, itt az anyag lényegében vezetőként viselkedik. Ez a jelenség teszi lehetővé, hogy a kísérletekben különböző geometriájú vezeték hálózatát hozzák létre azáltal, hogy egy szubsztrátra növesztett InAlAs rétegre pl. maszkolós molekulanyaláb-epitaxiával csak a kellő helyeken visznek fel InGaAs-et. A kétdimenziós viselkedés természetesen csak közelítés, az előző alfejezet alapján ezt úgy kell érteni, hogy az elektronok a felületre merőlegesen egy nagyon keskeny potenciálgödröt érzékelnek, és lényegében annak az alapállapotában vannak. Az az erő, amely az elektronok mozgását kétdimenziósra redukálja (confinement) alapvetően elektromos jellegű, ez veszi át a tömbi esetben érvényes (5.2) egyenletben a kristályrács teréből származó  $\mathbf{E}$  szerepét. Ez a tér jellemzően az elektrongáz síkjára merőleges. Ezt az irányt tekintve  $z$ -nek, a kétdimenziós elektrongázban érvényes egyelektron Hamilton-operátort Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében szokásosan a következő alakban írják:

$$H_{2DR} = \frac{1}{2m^*} (p_x^2 + p_y^2) + \alpha (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (5.3)$$

ahol  $m^*$  az effektív tömeg, a második tagban pedig  $\sigma \times \mathbf{p}$ -nek a  $z$  komponense jelenik meg. Az itt szereplő  $\alpha$  kétdimenziós Rashba paraméter, amely még dimenzióját tekintve sem egyezik meg az (5.2) egyenletben megjelenő  $\alpha_R$ -rel, lineáris a  $z$  irányúnak tekintett  $\mathbf{E}$ -ben. A továbbiakban az (5.3) Hamilton-operátort tekintjük kiindulási pontnak, Rashba paraméter alatt pedig a fenti  $\alpha$ -t fogjuk érteni. Fontos kísérletek bizonyítják azt, hogy  $\alpha$  külső elektromos térrel hangolható. Érdeemes megjegyezni, hogy

(talán a kétdimenziós effektus jelentősége miatt) elterjedt az a beszédmód is, amely azonosítja a Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatást a most tárgyalt esettel, amikor a felülethatáron létrehozott struktúra okoz olyan aszimmetrikus  $\mathbf{E}$  teret, ami végső soron felelős a jelenségért (structural inversion asymmetry). (Szemben a tömbi rendszerekben megjelenő „bulk inversion asymmetry”-vel, amit a Dresselhaus-féle spin-pálya kölcsönhatás kiváltójának tekintenek.)

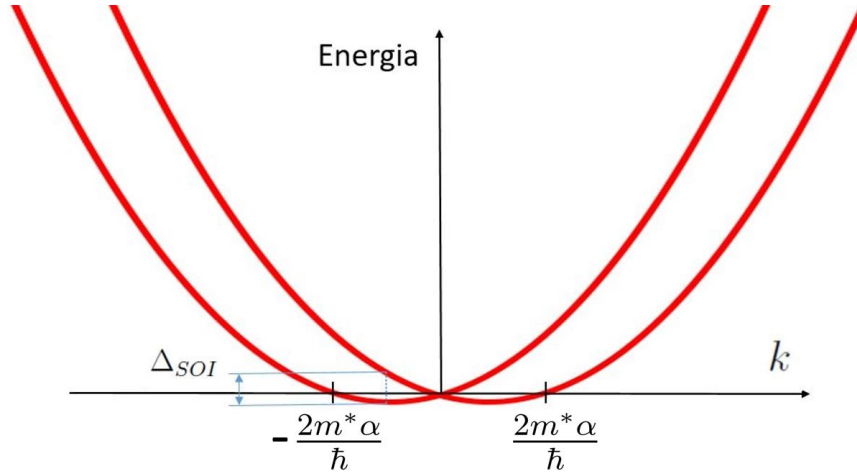
Az (5.3) Hamilton-operátor az eddigiek alapján (kétkomponensű) spinorértékű hullámfüggvények terén hat. A szemléltetés céljából érdemes felírunk a sajátértékeket és a sajátspinorokat. A peremfeltételek nélküli esetet (szabad tér) vizsgálva, célravezető, ha a sajátspinorokat síkhullám alakban keressük:  $|\varphi(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \exp[i(k_x x + k_y y)]$ . Ahogyan könnyen ellenőrizhető, ezek valóban sajátspinorok, ha  $a_1(\mathbf{k}) = -1/\sqrt{2}$ ,  $b_1(\mathbf{k}) = 1/\sqrt{2} \exp(-i\delta)$ , vagy  $a_2(\mathbf{k}) = 1/\sqrt{2} \exp i\delta$ ,  $b_2(\mathbf{k}) = 1/\sqrt{2}$ , ahol  $\tan(\delta) = k_y/k_x$ . Ezeknek a spinoroknak az iránya a tér minden pontjában azonos (de egymástól különböző), és mindenütt ortogonálisak a komplex test feletti kétdimenziós vektorok szokásos belső szorzatára nézve:

$$\langle \varphi_1(\mathbf{k}) | \varphi_2(\mathbf{k}) \rangle = a_1^*(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k}) + b_1^*(\mathbf{k})b_2(\mathbf{k}) = 0. \quad (5.4)$$

Ez – ahogyan a későbbiekben látni fogjuk – nem lesz igaz véges szélességű vezetékekre. A sajátspinorokhoz tartozó sajátenergiák  $\epsilon_1(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \hbar\alpha k$  illetve  $\epsilon_2(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \hbar\alpha k$ , ahol  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . Azt kaptuk hát, hogy a sajátenergiák továbbra is  $k$  másodfokú függvényei, de a spin-pálya kölcsönhatás nélküli parabolák most a spinirány szerint két részre hasadnak, úgy, hogy a minimumukat is más  $k$  értéknél veszik fel. A 20. ábra szemlélteti ezt a jelenséget, ahol a  $\Delta_{SOI}$  felhasadás definíciója is látható.

Érdemes még észrevenni, hogy a valószínűségi áram kifejezése SOI jelenlétében más, mint a szokásos, spinfüggetlen esetben. Konkrétan, tekintve egy  $|\varphi(\mathbf{r}, t)\rangle = \begin{pmatrix} a(\mathbf{r}, t) \\ b(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$  spinort, ha a valószínűségi sűrűséget a spinfüggetlen esettel egybecsengően a

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \langle \varphi(\mathbf{r}, t) | \varphi(\mathbf{r}, t) \rangle = |a(\mathbf{r}, t)|^2 + |b(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (5.5)$$



20. ábra. A Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás következtében spinirány szerint felhasadt sávok, ahol a felhasadás mértékét általában az ábrán jelölt  $\Delta_{SOI}$  energiadimenziójú mennyiséggel szokás jellemezni.

módon definiáljuk, akkor ahhoz, hogy a

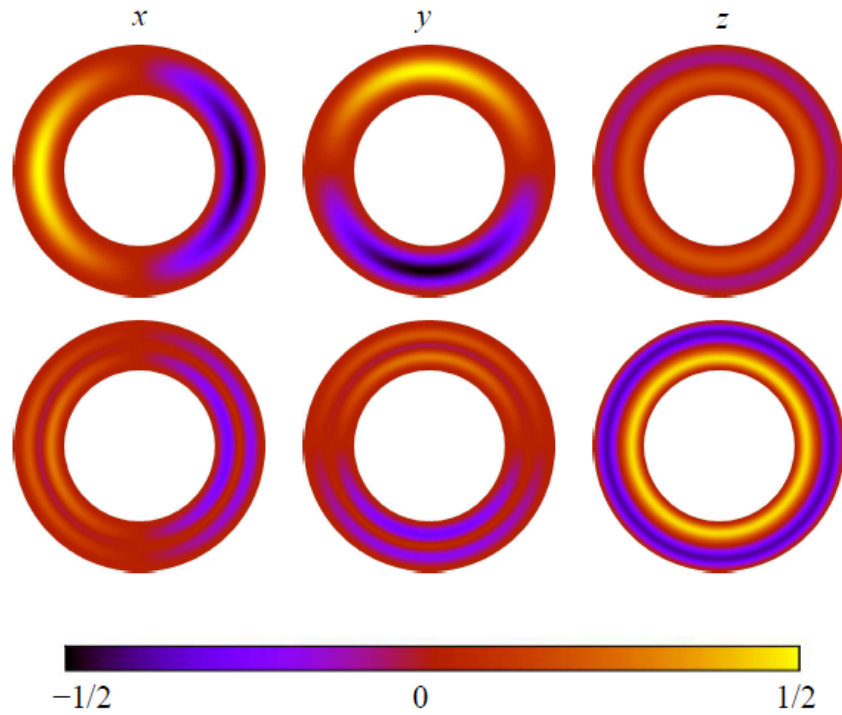
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (5.6)$$

forrásmentes kontinuitási egyenlet teljesüljön, az szükséges, hogy az áramsűrűség kifejezése

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m^*}\text{Im}\langle\varphi(\mathbf{r}, t)|\nabla\varphi(\mathbf{r}, t)\rangle - \alpha\langle\varphi(\mathbf{r}, t)|\tilde{\sigma}|\varphi(\mathbf{r}, t)\rangle \quad (5.7)$$

legyen, ahol a kétdimenziós (spinfüggetlen) gradiens szerepel. Maga  $\tilde{\sigma}$  szintén kétdimenziós a valós térben is,  $x$  komponense  $-\sigma_y$ ,  $y$  komponense pedig  $\sigma_x$ . A fenti egyenletben szereplő belső szorzat az (5.5) egyenletnek megfelelően csak a spin szabadsági fokot érinti, nem tartalmaz térbeli integrálást. Mivel az első tag a spinben diagonális, az  $\alpha = 0$  esetben  $\mathbf{j}$  fenti kifejezése visszaadja a szokásos, spinfüggetlen valószínűségi áramsűrűséget. (Magát az (5.7) egyenletet a spinfüggetlen esethez teljesen hasonlóan úgy lehet megkapni, hogy  $\rho$  időderiváltjának számításához használjuk az időfüggő Schrödinger-egyenletet és annak adjungáltját, majd megnézzük, hogy minek a divergenciája az eredmény.) Az (5.7) kifejezés azért fontos, mert ennek egydimenziós verzióját kell használnunk a spinorértékű hullámfüggvények csomópontokbeli illesztésénél

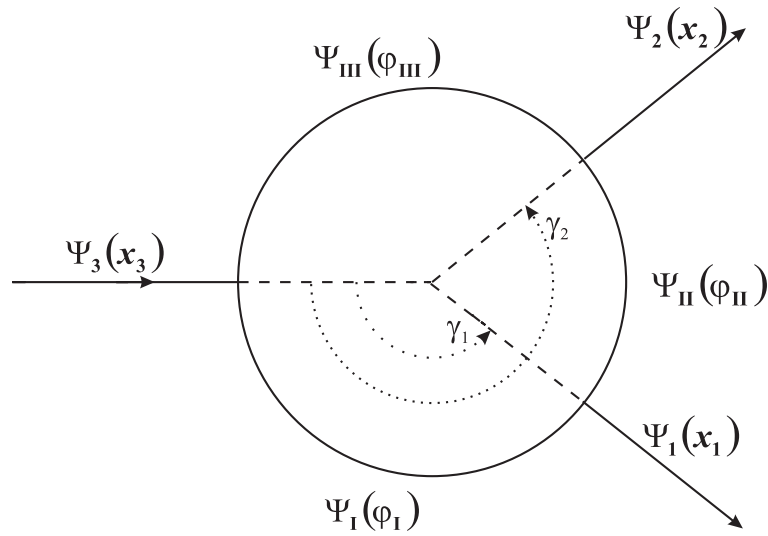
egyenes vezetékekből álló hálózat esetén.



21. ábra. Az első két radiális módushoz tartozó egy-egy sajátspinor esetén  $S_x$ ,  $S_y$  és  $S_z$  ( $\hbar$  egységekben mért) várható értéke kétdimenziós kvantumgyűrűkben, Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében.

A teljesség kedvéért térjünk vissza az (5.3) Hamilton-operátor sajátértékproblémájára abban az esetben, ha peremfeltételt is szabunk. Ekkor a megoldás sokkal összetettebb lesz. Általánosságban elmondható, hogy a 12. ábrán látható „alsávok” mindegyike két részre esik szét, és a részek egymástól különböző – ebben az esetben már helyfüggő – spinirányokhoz fognak tartozni. A sajátspinorok irányának helyfüggésére mutat egy példát a 21. ábra. Ennek az ábrának az egydimenziós megfelelőjét – amikor a radiális irányú integrálás miatt  $\langle S_z \rangle$  konstans lesz – a következő fejezetben mutatjuk be.

Egy konkrét példát tekintve, térjünk vissza a 4.1 alfejezetben már vizsgált kvantumgyűrűre, de most legyen jelen spin-pálya kölcsönhatás is, és vegyünk a 22. ábrának megfelelő geometriát, ahol tehát az elektronok két vezetéken keresztül is elhagyhatják a gyűrűt. Ekkor a gyűrű Hamilton operátora a spin-pálya kölcsönhatás miatt nem



22. ábra. Geometria és jelölések két kimenettel rendelkező kvantumgyűrű esetén, amelyben spin-pálya kölcsönhatás is jelen van.

pusztán egy differenciáloperátor, hanem egy  $2 \times 2$ -es mátrix, amelynek elemei a differenciáloperátorok. Az egydimenziós esetben adódik [12], hogy

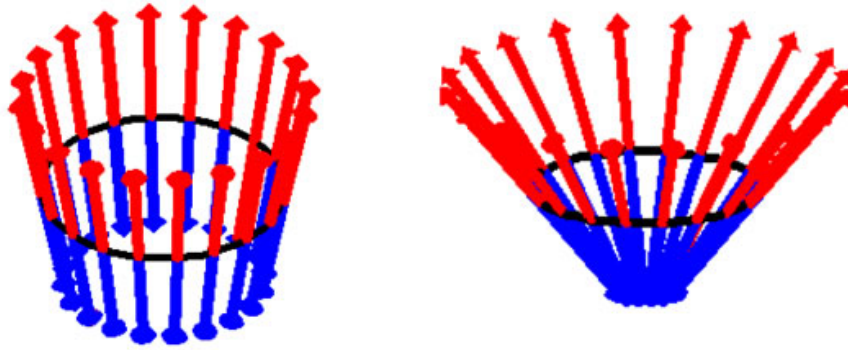
$$H = \hbar\Omega \left[ \left( -i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\omega}{2\Omega}(\sigma_x \cos\varphi + \sigma_y \sin\varphi) \right)^2 - \frac{\omega^2}{4\Omega^2} \right], \quad (5.8)$$

ahol a Pauli mátrixok jelennek meg, továbbá  $\hbar\Omega = \hbar^2/2m^*a^2$  és  $\omega$  jelöli azt a frekvencia dimenziójú mennyiséget, ami a spin-pálya kölcsönhatás erősségét adja meg, és változtatható külső tér alkalmazásával. Ez az operátor az 1.1 fejezetben bevezetett spinállapotok terén hat, csak most a kétállapotú spinorok helyfüggéssel rendelkeznek: spinor értékű hullámfüggvényekről beszélhetünk. Az (5.8) Hamilton operátornak megfelelő sajátértékegyenlet analitikusan megoldható, a

$$E = \hbar\Omega \left[ \kappa^2 - \mu\kappa w + 1/4 \right], \quad \mu = \pm 1, \quad w = \sqrt{1 + (\omega^2/\Omega^2)} \quad (5.9)$$

sajátenergiák négyszeresen degeneráltak lesznek. Ez abból adódik, hogy minden energiához két ellentétes spinirány tartozik, és egy adott sajátspinorhoz is kétféle, az óramutató járásával megegyező, illetve azzal ellentétes áram tartozhat. Maguk a sajátál-

lapotok is felírhatók analitikus alakban, szemléletesen a 23. ábra mutatja az irányukat a spin-pálya kölcsönhatás két értékére. Amint látjuk, ezen spinorok iránya úgy változik a gyűrű mentén, mintha egy kúp felületén elhelyezkedő vektorokat látnánk, ahol a kúp nyílásszöge a spin-pálya kölcsönhatás erősödésével növekszik.



23. ábra. Sajátspinorok kvantumgyűrűben. Az ábra az (5.8) Hamilton operátor sajátspinorjainak az irányát mutatja a gyűrű mentén. A spin-pálya kölcsönhatás a jobb oldalon látható esetben az erősebb, a különböző színek pedig az egymással ellentétes irányú spinorokat jelölik.

Ha az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a vezetékben nincs spin-pálya kölcsönhatás, akkor inentől kezdve szinte ugyanúgy járhatunk el, mint a 4.1 alfejezetben. A különbség pusztán abból fakad, hogy a hullámfüggvények most spinor értékűek. Így a vezeték csatlakozási pontjainál az illesztések elvégzése folyamán mindkét komponens folytonosságát biztosítanunk kell, és a valószínűségi áramsűrűségek kiszámítását is ennek megfelelően kell elvégezni [13]. Végeredményben azonban ebben az esetben is lineáris egyenletrendszert nyerünk, ami több egyenletből áll ugyan mint a spin nélküli esetben, de még mindig papíron-ceruzával megoldható. Ez azt jelenti, hogy tetszőleges bemenő  $\begin{pmatrix} f_{\uparrow} \\ f_{\downarrow} \end{pmatrix}$  spinor értékű hullámfüggvény esetén meg tudjuk mondani, hogy mi a reflexió és az egyes kimenő vezetékbe való eljutás valószínűsége, és ha az elektron egy adott vezetéken keresztül hagyja el a rendszert, akkor milyen irányú a spinje. Ter-

mészetesen a bejövő és a kimenő állapotokat

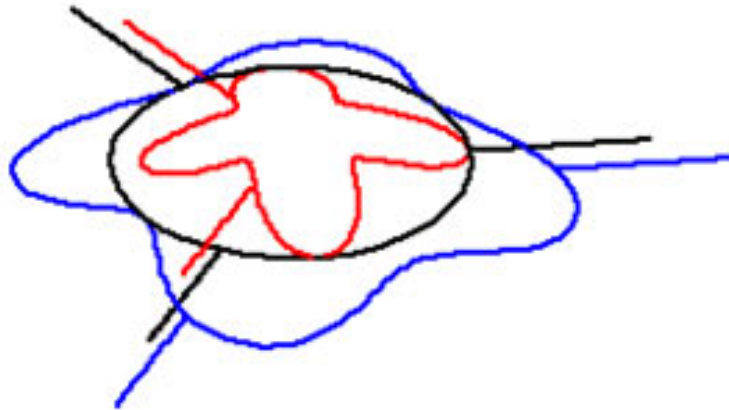
$$T^{(n)} \begin{pmatrix} f_{\uparrow} \\ f_{\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{\uparrow}^n \\ t_{\downarrow}^n \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

módon összekapcsoló  $T^{(1)}, T^{(2)}$  mennyiségek most nem pusztán komplex számok, hanem  $2 \times 2$ -es mátrixok. A fenti egyenlet nyilván arra ez esetre vonatkozik, ha a gyűrűhöz érkező elektronok teljesen spinpolarizáltak, azaz önmagában a spin szabadsági fokot is egy kvantummechanikai tiszta állapottal jellemezhetjük. Amennyiben nem ez az eset áll fenn, azaz az 1.1 fejezet szerint  $\rho_{be}$  sűrűségoperátorral kell jellemeznünk a bejövő spinállapotot, akkor a fenti mátrixok használatával azt írhatjuk, hogy az egyes kimenő vezetékeken át távozó elektronok spinjét a

$$\rho^n = T^{(n)} \rho_{be} (T^{(n)})^{\dagger}, \quad (5.11)$$

sűrűségoperátorok írják le. Ezek alapján természetesen tetszőleges spinállapottal rendelkező bemenő elektron esetén kiszámíthatók a transzmissziós valószínűségek, de ennél finomabb részleteket is megtudhatunk a rendszerről. Példaként tegyük fel azt a kérdést, hogy előfordulhat-e, hogy ez a két kimenettel rendelkező eszköz polarizátorként működik, azaz lehetséges-e az, hogy  $\rho_{be}$  arányos az egységmátrixszal, ugyanakkor  $\rho_1$  vagy  $\rho_2$  már spinpolarizált állapotot ír le? Az 5.11 egyenlet alapján matematikailag ez azt jelenti, hogy olyan paramétereket (geometriát és spin-pálya kölcsönhatás erősséget) keresünk, amelyre a  $T^{(n)} (T^{(n)})^{\dagger}$  mátrix determinánsa eltűnik. Érdekes módon az adódik, hogy található ilyen paraméterek, még úgy is, hogy közben a bejövő vezetékbe való visszaverődés valószínűsége elhanyagolhatóan kicsi. A jelenség fizikai magyarázatát akkor érthetjük meg a legjobban, ha a bejövő teljesen polarizálatlan spinállapotot a gyűrűre jellemző két saját spinirány inkoherens összegének tekintjük, és a gyűrű mentén felrajzoljuk, az ezeknek sajátirányoknak megfelelő (nem normált) valószínűségi sűrűségeket. Egy konkrét esetre ezt mutatja a 24. ábra. Ez alapján azt szűrhetjük le, hogy a polarizációs effektus fizikai magyarázata a térbeli szabadsági fokok interferenciája: Egy





24. ábra. A spinpolarizációs effektus szemléltetése kvantumgyűrűben.

adott kimeneten az egyik spinirány megtalálási valószínűsége az egymással szemben haladó hullámok destruktív interferenciája miatt nulla, az ellentétes irányú spinorhullámok viszont konstruktívan interferálnak itt. Így ebben a kimenő vezetékben pusztán a második iránynak megfelelő tiszta állapot jelenik meg. Ez az effektus tehát polarizált spinnel rendelkező állapotok előállítására is alkalmas lehet.

Összefoglalva, ebben a fejezetben arra láttunk példát, hogy spinfüggű problémák esetén hogyan határozhatók meg a transzmissziós mátrixok. Konkrétan a spin-pálya kölcsönhatás következtében létrejövő transzmissziós tulajdonságokat tanulmányoztuk két kimenettel rendelkező kvantumgyűrűkben, és azt láttuk, hogy ezek az eszközök alkalmasak lehetnek spinpolarizált állapotok előállítására.

## Spintronika

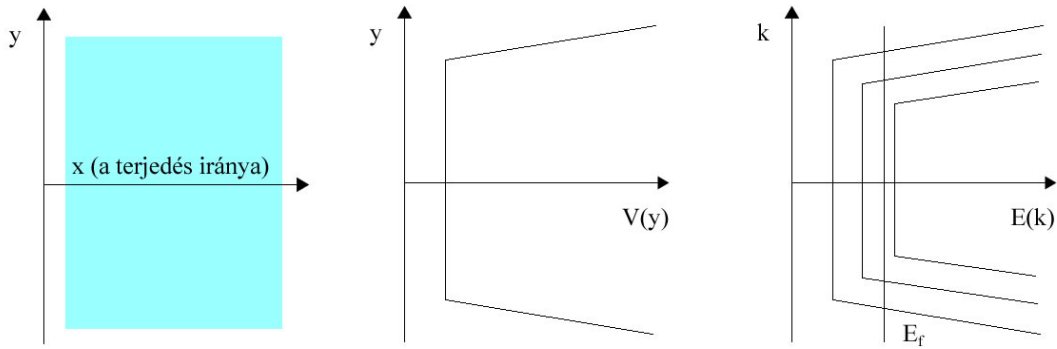
A spin szabadsági fok információfeldolgozásra való használata az utóbbi időkben fontos és gyorsan fejlődő területté vált. A spin alapú elektronika, azaz spintronika fő területe spinpolarizált áramok létrehozása, manipulálása és alkalmazása. Bár maga az elnevezés 1996-ban született, az elképzelés jóval régebbi, és természetesen a klasszikus mágnesség elméletétől a félvezetők fizikáján át a mezoszkopikus és szupravezető rendszerek leírásáig nagyon sok területtel kapcsolódik szorosan össze. Az alkalmazások közül

a leginkább elterjedtek esetén a spin klasszikus erőforrás, a kvantumozások nem játszanak szerepet. Ezzel kapcsolatban mindenképpen meg kell említeni az óriás mágneses ellenállás („giant magnetic resistance”, GMR jelenségét, ami talán az akkoriban még leginkább magnetoelektronikának nevezett terület legtöbb gyakorlati alkalmazással bíró effektusa. (Pl. a mai számítógépek merevlemezeinek olvasófeje is ezen az elven működik.)

Másrészt az elektronok spinje egy természetes kétállapotú rendszer, és mint ilyen, mindenképpen komoly jelölt a kvantumozás információfeldolgozás alapvető egységének, a kvantum bitnek (qubitnek) a realizálására. Ehhez természetesen az szükséges, hogy a spinpolarizált áramok létrehozása és detektálása mellett a spinre ható kvantumozás logikai kapukat tudjunk létrehozni.

## 5.2. Kvantumos Hall effektus

A korábbi fejezetekben már többször érintettük azt a kérdést, hogy mi történik abban az esetben, ha lényegében síkban mozgó elektronokra az áramot létrehozó elektromos téren kívül a síkra merőleges mágneses mező is hatást gyakorol. Klasszikus leírás esetében ekkor körpályák létrejöttét várjuk, kvantumosan, ahogyan a 3.1 fejezetben láttuk, Landau-nívók jönnek létre. Szélesebb vezetők esetén azonban a 3.1 fejezetbeli parabolikus transzverzális potenciál már nem igazán jó közelítés, a keresztmetszet közepén sokkal laposabb, vályúszerű potenciált várunk, olyasmit, amit a 25. ábra mutat. Ilyen, a széles vezetők leírására használható potenciál esetén a sajátértékprobléma



25. ábra. A transzverzális potenciál vázolata szélesebb vezetők esetén. A jobb oldali ábrán a sajátenergiák közelítő értéke látható a hullámszámvektor  $x$  komponensének a függvényében.

általában nem oldható meg analitikusan, ezért közelítéseket kell alkalmaznunk. A jelenség megértéséhez elegendő, ha abból indulunk ki, hogy ekkor a vezető keresztmetszetének a közepén lényegében mintha nem is lenne külső potenciál, azaz a 3.1 fejezet alapján itt a sajátállapotok

$$|n, k\rangle = e^{ikx} \chi_n(q + q_k) \quad (5.12)$$

alakúak, ahol

$$\chi_{nk}(y) = e^{-\tilde{q}^2/2} H_n(\tilde{q}), \quad \tilde{q} = \tilde{q}(y) = \sqrt{m\omega_c/\hbar}(y + y_k), \quad y_k = \frac{\hbar k}{eB} \quad (5.13)$$

és  $\omega_c = \frac{|e|B}{m}$ . A megfelelő sajátenergiák

$$\tilde{E}(n, k) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c. \quad (5.14)$$

Közelítésként a külső potenciált most perturbációszámítással vesszük figyelembe. Legalacsonyabb rendben

$$E(n, k) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \langle n, k | U(y) | n, k \rangle. \quad (5.15)$$

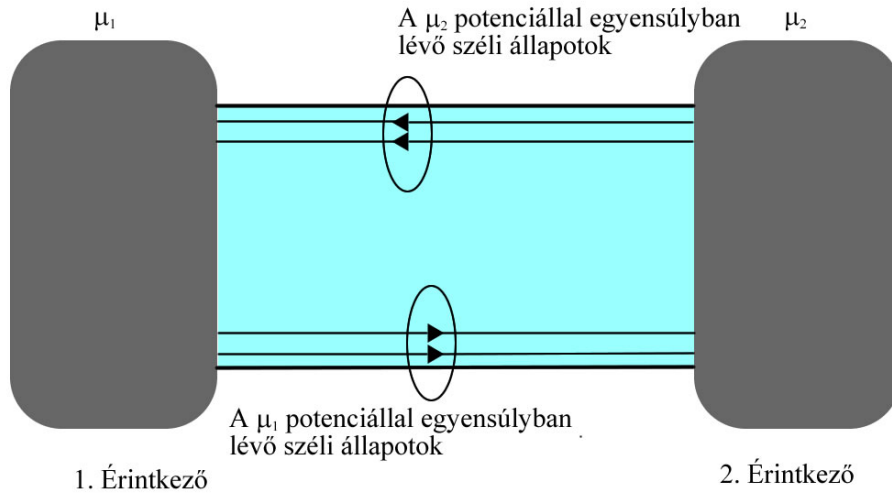
Az oszcillátor sajátfüggvényeit felidézve mondhatjuk, hogy minden  $|n, k\rangle$  állapot az  $y_k$  pont körül centrált hullámfüggvénnyel írható le, amelyek térbeli kiterjedése  $\hbar/m\omega_c$ -vel becsülhető. Ha feltesszük, hogy  $U$  gyakorlatilag konstans ekkora távolságon, akkor adódik, hogy

$$E(n, k) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + U(y_k), \quad (5.16)$$

azaz a sajátértékek  $k$ -függésében lényegében a potenciál tükröződik, ahogyan a 25. ábrán is látható. A minta közepén tehát lényegében a potenciálmentes eset Landau-nívóit látjuk, amelyek  $\hbar\omega_c$  lépésekkel követik egymást, a széleken azonban sokkal kisebb lehet a szomszédos állapotok közötti energiakülönbség. A kvantumos Hall-effektus szempontjából ezek a "széli állapotok" (edge states) kiemelkedő jelentőségűek lesznek. Ezért érdemes megvizsgálni, hogy ezekhez az állapotokhoz milyen áram tartozik. Ehhez számítsuk ki a  $v(n, k)$  sebességeket, amelyek a korábbiakhoz hasonlóan a diszperziós reláció  $k$  szerinti deriválásával kapunk:

$$v(n, k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(n, k)}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial U(y_k)}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial U(y)}{\partial y} \frac{\partial y_k}{\partial k} = \frac{1}{eB} \frac{\partial U(y)}{\partial y}. \quad (5.17)$$

Ebből azt láthatjuk, hogy azok a széli állapotok, amelyek transzverzális irányú centruma a minta ellentétes oldalán van, ellentétes irányú áramot is hordoznak. Így szemléletesen azt szokás mondani, hogy kvantumos Hall-effektussal összefüggő nagy elektron mozgékonyág arra vezethető vissza, hogy az ellentétes irányú áramot képviselő "szembe haladó" elektronok gyakorlatilag "nem találkoznak", hiszen jellemzően a minta különböző széleihez közel haladnak. Ezt láthatjuk a 26. ábrán.



26. ábra. A "széli állapotok" szemléltetése.

A 3.2 fejezet megfontolásait felidézve, ha "visszaverődésmentes" érintkezőket feltételezünk, akkor az ábra szerint a jellemzően a minta felső részén található, balra folyó áramot leíró széli állapotok a jobb oldali érintkező  $\mu_2$ , az ellentétes irányú áramot vivők pedig a  $\mu_1$  kémiai potenciállal vannak egyensúlyban. Alacsony hőmérsékleten a kisebb kémiai potenciálnál is alacsonyabb energiákra lényegében minden állapot betöltött, azaz a vezetési jelenségekért lényegében a  $\mu_1$  és  $\mu_2$  közötti tartomány a felelős. Az energianívók a 25. ábrán látható  $k$ -függése miatt az ebbe az energiatartományba eső állapotok  $M$  száma megegyezik a minta közepén betöltött Landau-nívók számával, azaz a vezetésben minden Landau-nívónak megfelelő széli állapot részt vesz, ezek játsszák most a 3.2 fejezet haladó hullámot leíró módusainak a szerepét. Így alacsony hőmérsékleten az átfolyó áram:

$$I = \frac{2e}{h} M(\mu_2 - \mu_1). \quad (5.18)$$

Ez alapján a Hall-ellenállás:

$$R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{h}{2e^2 M}. \quad (5.19)$$

Jegyezzük meg, hogy a 26. ábra alapján látható, hogy ebben a két érintkezőt tartalmazó geometriában  $R_H$  legegyszerűbben a hosszanti irányban mérhető, és a minta

átellenes oldalai között ugyanannyi a feszültségkülönbség, mint a két érintkező között. A minta egy adott oldala mentén ugyanakkor állandó a potenciál, így a longitudinális  $V_L$  feszültség nulla és így a  $R_L = V_L/I$  ellenállás is eltűnik. Ha a transzverzális feszültséget expliciten mérni szeretnénk, akkor a 14. ábrán látható módon négy érintkezőt kell a mintához kapcsolni. Ekkor az elméleti leírás a 3.2 fejezet második felében vázolt Landauer-Büttiker formalizmus felhasználásával megerősíti azokat az eredményeket, amelyeket a 26. ábra leegyszerűsített geometriája alapján kaptunk: A longitudinális ellenállás nulla,  $R_H$  pedig  $h/2e^2$  egységekben "kvantált", azaz  $R_H$  mint  $B$  függvénye konstans, amíg a betöltött Landau-nívók száma nem változik, ha pedig egy újabb nívó válik betöltötté, akkor hirtelen megváltozik,  $h/2e^2$ -nyit ugrik. Jegyezzük meg, hogy erős mágneses térben  $R_H$  szilárdtestfizikában szokatlanul pontos módon veszi fel az (5.19) egyenlettel adott diszkrét értékeit, a relatív hiba jellemzően  $10^{-6}$  nagyságrendű. Ez tehát annak köszönhető, hogy az ellentétes irányban folyó áramot jelentő elektronok a minta átellenes szélei mentén folynak, így az elektron-elektron kölcsönhatásból adódó, az impulzus előjelének megváltozásával járó visszaszórási jelenségek igen ritkák.

Az eddigi leírás során feltételeztük, hogy a Fermi-nívó a vezető belsejében két Landau-szint közé esik, és alatta  $M$  számú Landau-nívó található. A mágneses tér növelésével – mivel a szintek közötti energiakülönbség  $B$ -vel arányosan növekszik –  $M$  csökken, így  $R_H$  növekszik. Realisztikusnak tekinthető  $2 \times 10^{11}/\text{cm}^2$  elektronsűrűség esetén 8 Tesla környékén már elérjük az  $M=1$  esetet, ekkor tehát  $R_H$  a fentiek alapján maximális (25,8128 k $\Omega$ , ahol a korábbiakhoz képest egy kettes faktor a spin szerinti Zeema felhasadásból adódik). Ennél nagyobb tereknél a fenti, egyelektron modellen alapuló számítások alapján már nem várjuk újabb platók létrejöttét az  $R_H(B)$  függvényben. Fontos azonban megemlíteni, hogy a kísérleti tapasztalat ezzel ellentétben azt mutatja, hogy nagyon tiszta mintákban igen erős mágneses terek esetén az

$$R_H = \frac{h}{e^2 p} \quad (5.20)$$

formula érvényes, ahol  $p$  egész számok hányadosa, pl.  $\frac{1}{3}, \frac{2}{5}$ . Ezt a viselkedést a tört

kvantumos Hall effektusnak (fractional quantum Hall effect) szokás nevezni, megkülönböztetendő az eddigiekben tárgyalt esettől, ahol  $M$  egész volt (integer quantum Hall effect). A jelenség magyarázata túlmutat az egyelektron közelítés (és így jelen jegyzet) keretein, a megfelelő kollektív állapotok és gerjesztéseik figyelembe vételével tárgyalható [14].

## 6. fejezet

# Egy időfüggő példa: Optikai gerjesztés

Szilárdtestek optikai gerjesztésének modellezésére jól kidolgozott elméleti módszerek léteznek, különösen az alacsony intenzitástartományban. Ugyanakkor GV/m csúcster-erőségek és femtoszekundumos impulzushosszak esetén a hagyományos modellek gyakran már nem alkalmazhatóak. Kísérleti eredmények mutatják pl., hogy akár több elektron-voltnyi szélességű tiltott sávok is áthidalhatók közeli infravörös gerjesztéssel, anélkül, hogy maga a szilárdtest struktúra visszafordíthatatlan sérülést szenvedne. Az ilyen jellegű problémák leírására szolgáló modellek a gyenge terek esetén alkalmazott módszereknél sokkal kevésbé letisztultak jelenleg.

A sávátmenetek indukálása mellett az intenzív lézerpulzusok a szilárdtestekben áramokat is létrehozhatnak. Ezek az áramok időben olyan gyorsan oszcillálnak, hogy azt a jelenlegi detektorok nem képesek feloldani. Ezzel szemben időintegráljuk – azaz a lézerpulzus által elmozdított töltés – már mérhető. Az első ilyen jellegű kísérletet Garchingban végezték, de már a Wigner FK-ban is van olyan kísérleti elrendezés, amellyel ez a töltésmennyiség meghatározható. Ezeknek a méréseknek a fizikai hátterét nemcsak azért fontos pontosan megérteni, mert a korábban ismerttől lényegesen eltérő paramétertartományban korábban nem tapasztalt jelenségek lépnek fel, hanem azért is, mert a jelenségekhez kapcsolódó alkalmazások fontosak lehetnek. Itt elsősorban lézerpulzusok karakterizálására kell gondolni, egyszerű felépítésű, szilárdtest alapú eszközök felhasználásával.



A kísérletek elve viszonylag egyszerű, a mintát (illetve annak egy részét) lézerpulzus világítja meg, majd az elmozduló töltéseket jellemzően fémes érintkezők "gyűjtik össze", és vezetékek továbbítják a detektorhoz, ami lehet pl. egy érzékeny oszcilloszkóp. A részletek természetesen ennél jóval összetettebbek (pl. a lock-in jellegű erősítés szerepe nagyon fontos), de már ebből is látható, hogy a probléma modellezése sok kihívást jelent.

A továbbiakban az munka alapján egy olyan elméleti módszert mutatunk be, amelynek segítségével ennek a kérdéskörnek egy lényegi része leírható. Egyelektron közelítést alkalmazva megvizsgáljuk, hogy a véges ideig tartó, véges térbeli tartományon ható elektromágneses gerjesztés *után* tisztán kvantumviselkedést feltételezve hogyan számítható ki a gerjesztő lézerpulzus által elmozdított összes töltés. Ebben a cikkben a hangsúly tehát nem az intenzív fényimpulzusok és az anyag kölcsönhatásának már jelenleg is kiterjedt irodalommal rendelkező leírásán lesz, hanem a kölcsönhatás utáni folyamatokra fogunk koncentrálni.

Először egyetlen sávot tekintve tanulmányozzuk a kérdést. Ez az effektív tömeg közelítésen alapuló modell a fenti motiváción túl közel monoenergetikus nyalábok lokális gerjesztésének a leírására is alkalmas, és szemléletesen jól értelmezhető eredményt szolgáltat. Ezután – továbbra is az egyelektron közelítés keretei között maradva – tárgyaljuk az általánosabb, tetszőlegesen sok sávot leíró modellt. Fő eredményünk egy numerikusan is ellenőrzött analitikus kifejezés a lézertér által elmozdított töltés kiszámítására.

## 6.1. Modell és megoldása

Tekintsünk először egy egydimenziós modellt, ami egyszerűbbé teszi a számításokat és az eredmények leírását is. (A későbbiekben visszatérünk majd a lehetséges háromdimenziós általánosításokra.) Az 27. ábra szemlélteti a részleteket. Kezdetben, a kölcsönhatás előtt, a makroszkopikus minta egy kiterjedt sajátállapota egy zavartalanul terjedő elektronnak felel meg. (Ez az állapot egyetlen sáv és effektív tömeg közelítés esetén egy egyszerű síkhullám, de az ábra szimbolizálhat egy Bloch-állapotot is.) A

lézerimpulzus az egydimenziós "vezetékre" ( $x$  irány) merőlegesen terjed, és a  $t = 0$  időpillanatban éri el azt. A kölcsönhatás  $\tau$  ideig tart, ezután ismételten nulla a külső térerősség. Megfelelő mértéket választva ezt a lézertér vektorpotenciáljával írhatjuk le. Egydimenziós számításokhoz a vektorpotenciál  $x$  komponensét kell kiértékelnünk az  $x$  tengely mentén, erre egy gyakran használt példa a következő:

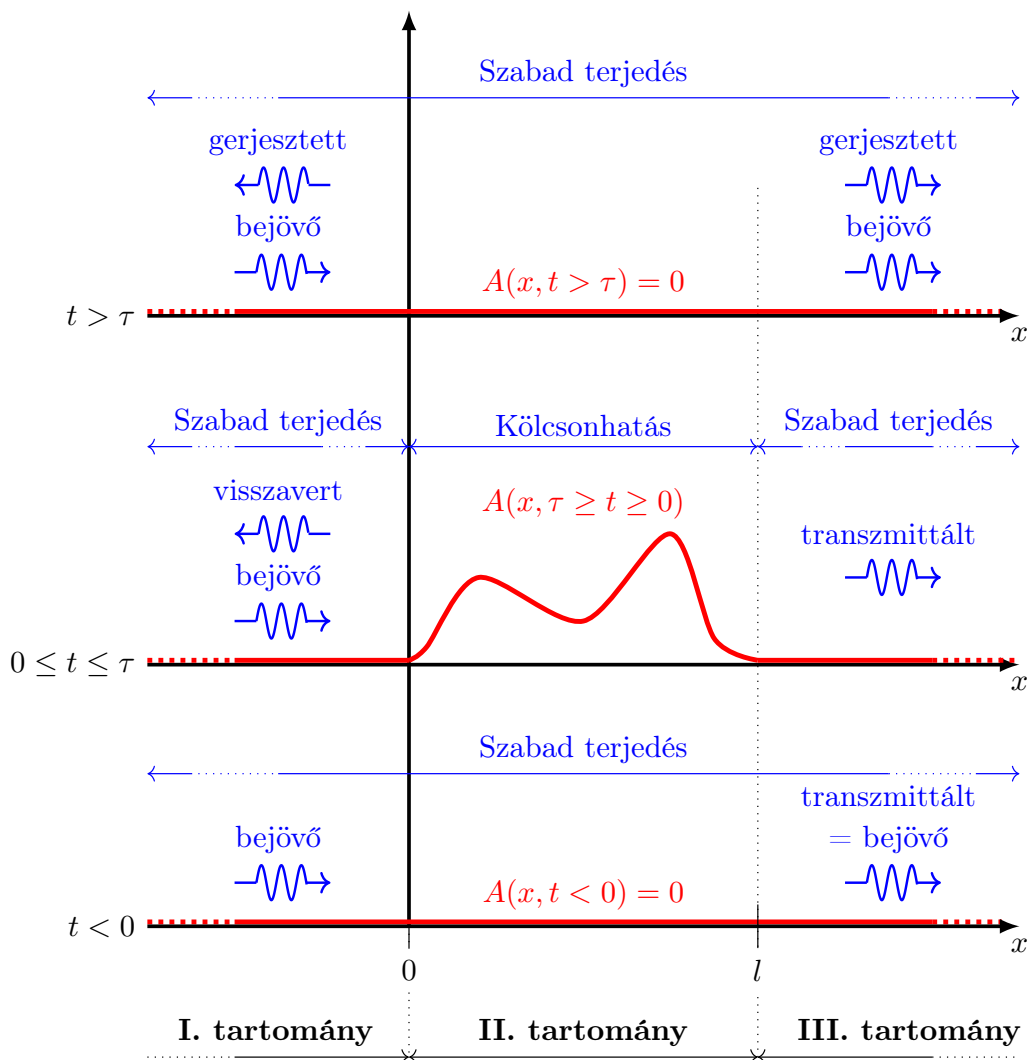
$$A(x, t) = A_0 \sin^2 \left( \frac{\pi}{l} x \right) \sin^2 \left( \frac{\pi}{\tau} t \right) \cos(\omega_0 t), \quad (6.1)$$

feltéve, hogy  $x$  a  $[0, l]$  intervallumba esik, illetve  $0 \leq t \leq \tau$  (egyébként  $A(x, t) = 0$ ).

A továbbiakban a  $t > \tau$  időtartományra fókuszálunk, azaz a lézerimpulzus elhaladta után vizsgáljuk a dinamikát. Ehhez természetesen az kell, hogy a látszólagos "lényeg", azaz a lézer-anyag kölcsönhatás eredménye ismert legyen. Bár sok szempontból elegendő lehet pusztán a kölcsönhatás ideje alatt kiszámítani a rendszer viselkedését, esetünkben az egy adott ponton átfolyó áram jellemzően hosszan lecsengő oszcillációkat mutat. Emiatt a lézertér által elmozdított összes töltés meghatározásához gyakran a  $\tau$  kölcsönhatási idő több százszorosáig kell követni a rendszer időfejlődését. Ez külső tér hiányában elvi nehézséget nem okoz, de mivel a lézertér hatásának eredménye legtöbbször numerikusan adódik, ezt a számítást is numerikusan kell kiviteleznünk, ami hosszú futási időket jelent.

Természetes feltevés, hogy a minta kezdetben termikus egyensúlyban van, így az elektron energia-sajátállapotok betöltési valószínűségét a Fermi-Dirac statisztika határozza meg. Egyelektronképben az is igaz, hogy ezeknek az energia-sajátállapotoknak az időfejlődése egymástól független, és az általuk szállított áramok összege szolgáltatja a teljes áramot (ami a lézertérrel való kölcsönhatás előtt természetesen nulla). Így a lézerimpulzus által elmozdított összes töltés kiszámításához elegendő kezdőállapotként egy tetszőleges energia-sajátállapotot tekintenünk.

A legszemléletesebb eset az, amikor egyetlen (vezetési) sávot tekintünk, amelyben a fémek Sommerfeld-modelljéhez hasonlóan az energia-sajátállapotok síkhullámok,  $\Psi_k(x) = \exp(ikx)$ , a hozzájuk tartozó energia pedig  $E(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ . (Ebben a kvadratikus



27. ábra. Lézerimpulzus és anyag kölcsönhatásának sematikus rajza. Három térbeli tartományt különböztetünk meg, ezek közül a középsőben (II.) játszódik le maga a kölcsönhatás, "ide világít" az  $A$  vektorpotenciállal jellemzett lézer a  $0 \leq t \leq \tau$  időtartományban. A  $t < 0$  esetben a példa kedvéért balról jobbra haladó, kiterjedt hullámfüggvény (a legegyszerűbb esetben síkhullám) szabadon terjed, a kölcsönhatási tartományt semmi nem különbözteti meg a minta többi részétől. A kölcsönhatás ezután lokális zavart kelt a II. tartományban, amely a lézerimpulzus elmúltával ( $t > \tau$ ) ismételen szabadon terjed, esetlegesen immár mindkét irányba.

diszperziós relációban  $m$  általában az effektív tömeget jelenti, de az egyszerűség és a szabad részecske esetére való alkalmazhatóság kedvéért a továbbiakban az elektron-tömeget értjük alatta.)

A fentiek alapján megtehető az, hogy az egyes síkhullám kezdőállapotokat függetlenül kezeljük. Legyen tehát rendszer állapota a  $t = 0$  időpillanatban  $\Psi_0(x) = \exp(ik_0x)/\sqrt{L}$  (ahol  $L$  minta hossza, és az  $1/\sqrt{L}$  faktor a normálást biztosítja). Lézertér nélkül ennek az állapotnak az időfejlődése nagyon egyszerű lenne,  $\Psi_0(x, t) = \Psi_0(x) \exp(-iE(k_0)t/\hbar)$ . A megvilágítás azonban ennél összetettebb dinamikát indukál, a  $t = \tau$  időpillanatban az általánosság megszorítása nélkül írhatjuk:

$$\begin{aligned} \Psi(x, \tau) &= \Psi_0(x, \tau) + \Phi(x) \\ &= \Psi_0(x, \tau) + \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \phi(k) dk, \end{aligned} \quad (6.2)$$

ahol tehát a második, Fourier-alakba írt tag felelős a lézertér hatásáért. Ezután a későbbi időpillanatokban kell kiszámítanunk a nemrelativisztikus (egydimenziós) valószínűségi áramsűrűséget a szokásos módon:

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right\}. \quad (6.3)$$

A (6.2) egyenlet alapján három tagot kapunk,

$$j(x, t) = j_0(x, t) + j_\Phi(x, t) + j_c(x, t), \quad (6.4)$$

ahol az első tag  $\Psi_0(x, t)$ -ből adódik, a második a (6.2) egyenlet második tagjához kapcsolódik,  $j_c$  pedig a "kereszttag". Ezek közül  $j_0$  a lézertér hatása nélkül is jelen van, így ha a megvilágítás hatására elmozduló összes töltésre vagyunk kíváncsiak, a második két tag integrálját kell kiszámítanunk:

$$Q_d(x) = e \int_{\tau}^{\infty} j_\Phi(x, t) + j_c(x, t) dt, \quad (6.5)$$

ahol  $e$  az elektron töltése, a  $d$  index pedig a lézerfény nélküli esethez képesti differenciára

utal. Numerikusan természetesen a végtelenbe tartó felső határ nem számítható ki, az oszcillációk lecsengéséig tartó "elegendően hosszú" ideig kell integrálnunk. Szerencsére a  $Q_d$  töltés papíron, ceruzával is kiszámítható. Ez azon múlik, hogy az idő szerinti integrál analitikusan elvégezhető, és eredménye leegyszerűsíti a megmaradó (a Fourier felbontás miatt megjelenő)  $k$  szerinti integrálok elvégzését is.

## 6.2. Eredmények

Az analitikus számításokat az előző fejezetben példaként használt, egyetlen kvadratikus diszperziójú sáv esetére elvégezve szemléletes eredmény adódik. A lézertér hatására keletkező állapothoz köthető töltés a következő alakú:

$$Q_{\Phi}(x) = e \int_0^{\infty} \tilde{\rho}(k) dk - e \int_x^{\infty} \rho(s) ds, \quad (6.6)$$

ahol a (6.2) egyenlet második tagjához tartó valós ( $\rho(x) = |\Phi(x)|^2$ ) és reciproka ( $\tilde{\rho}(k) = 2\pi/L|\phi(k)|^2$ ) térbeli sűrűségek jelennek meg.  $\Phi(x)$  és  $\phi(k)$  között a (6.2) egyenletben megjelenő Fourier transzformáció teremt kapcsolatot, továbbá

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}(k) dk = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(s) ds. \quad (6.7)$$

A (6.6) egyenlet jól interpretálható: Tekintsünk egy lokalizált hullámcsomagot, és egy attól távol, a pozitív  $x$  irányban elhelyezkedő megfigyelőt. Ekkor a (6.6) egyenlet második integrálja eltűnik, és egyszerűen arról van szó, hogy a megfigyelő által mért töltéshez pusztán  $\Phi$  pozitív irányba haladó komponensei járulnak hozzá. Ha megfigyelési pont olyan, hogy ott  $\rho(x)$  már nem 0, akkor ezt korrigálnunk kell a (6.6) egyenlet második integráljával. Ha pedig átkerülünk a lokalizált hullámcsomag másik oldalára, akkor (6.7) felhasználásával látszik, hogy immár csak  $\Phi$  negatív  $k$ -kal jellemzett komponensei adnak járulékot.

Ha a teljes problémát vizsgáljuk, azaz a kezdeti síkhullám és a lézertér által kel-

tett hullámcsomag együttes hatását szeretnénk meghatározni, akkor (6.4) alapján a (6.6) által adott töltéshez hozzá kell adnunk  $j_c(x, t)$  időintegrálját is. Ezt szemlélteti a 28. ábra abban az esetben, amikor  $\Phi(x)$  egy normált Gauss hullámcsomag:

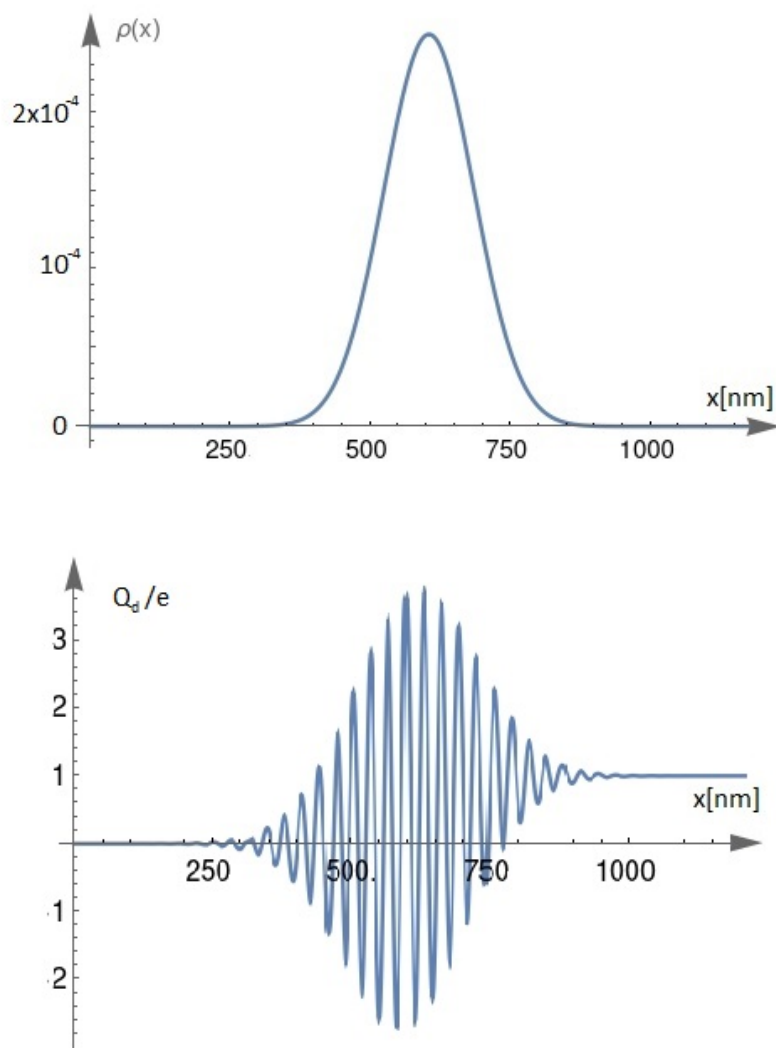
$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_x}} \exp\left(-\frac{(x-x_G)^2}{4\sigma_x^2} + i k_G (x-x_G)\right). \quad (6.8)$$

A 28. ábra felső paneljén konkrét paraméterek ( $\sigma_x$  szórás és  $x_G$  illetve  $k_G$  valós és reciprok térbeli várható értékek) esetén látható az ehhez a  $\Phi(x)$ -hez tartozó  $\rho(x)$  sűrűség, míg az alsó panel a teljes  $Q_d$  töltést mutatja a hely függvényében. Az itt szépen látható oszcillációk az eredeti síkhullám és a hullámcsomag interferenciájának a következményei. A  $Q_d(x \rightarrow -\infty) = 0$  és  $Q_d(x \rightarrow \infty) = 1$  határértékek abból adódnak, hogy a választott paraméterekkel  $\tilde{\rho}(k)$  lényegében 0 negatív  $k$  értékekre.

Érdemes hangsúlyozni, hogy a lézertérrel történő gerjesztés szinte biztosan nem hoz létre pontosan Gauss-alakú hullámcsomagot. Így a fenti példa szemléltető jellegű, cserébe a mi módszerünktől függetlenül, a tankönyvekből ismert időfejlődés felhasználásával is számolható. A  $Q_d$  töltést mindkét módszerrel meghatározva azonos eredményt kaptunk.

Nagyobb lézerintenzitások esetén az eddig tárgyalt, egyetlen sávot leíró modell természetesen nem alkalmazható, az optikai gerjesztés mindenképpen indukál sávátmeneteket is. Itt érdemes megjegyezni, hogy ha a gerjesztés helyfüggése elhanyagolható (dipólközelítés), akkor az átmenetek során a  $k$  index nem változik meg. ("Az optikai átmenetek vertikálisak", ami a mértékválasztástól függetlenül igaz.) Ettől a jól ismert esettől tehát akkor várható lényeges eltérés, ha a gerjesztés kis térrészre lokalizálódik.

A több sávot is figyelembe vevő, általános esetben a kezdőállapot nem pusztán egy síkhullám, hanem egy konkrét (pl. vegyérték)) sávhoz tartozó Bloch-állapot. A lézeres gerjesztés utáni állapotot a (6.2) egyenletben leírt helyett szintén Bloch-állapotok bázisán kell kifejttenünk, és ebben a kifejtésben szerepel egy sávokra történő összegzés is. Számításaink azt mutatják, hogy ha a tiltott sávok szélessége véges, akkor az egyes sávokhoz tartozó  $Q_d$  töltések egymástól függetlenül számíthatók. Ezen töltések helyfüg-



28. ábra. Lent: Síkhullám és Gauss-hullámcsomag esetén a  $Q_d$  töltés helyfüggése.  
 Fent: A normált Gauss-hullámcsomaghöz tartozó  $\rho(x)$  sűrűség. Paraméterek:  
 $x_G = 600$  nm,  $k_G = 0,2$  1/nm,  $\sigma_x = 80$  nm, a síkhullám esetén pedig  $k_0 = 2k_G$ ,  $L = 2000$  nm.

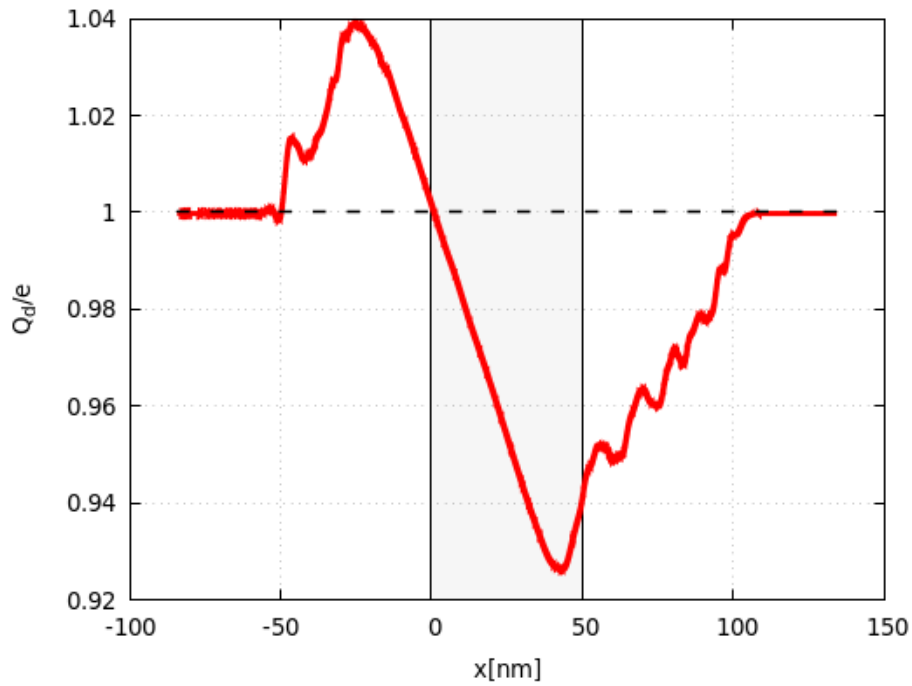
gésének a meghatározása ebben az általános esetben egy összetett feladat, viszont a távoli detektoroknak megfelelő  $x \rightarrow \pm\infty$  határesetek még mindig kiszámíthatók.

A 29. ábra egy példát mutat, amikor egy egydimenziós szilárdtest-modell (periodikus potenciálban mozgó elektron) esetén a lézertérrel való kölcsönhatást is végigszámoltuk numerikusan, majd elegendően hosszú ideig integrálva az áramokat, kiszámítottuk a lézertér által elmozdított töltést is. A lézerimpulzust itt az (6.1) egyenlet írta le, a maximális elektromos térerősség 1 GV/m volt (a többi paraméter megtalálható a képaláírásban.) Ebben a modellben csak két sávot vettünk figyelembe, a köztük lévő tiltott sáv szélessége 3.2 eV volt. Itt a cél annak az igazolása volt, hogy az egyes sávokhoz tartozó, a kölcsönhatási tartománytól távol mérhető  $Q_d$  töltésekre vonatkozó analitikus eredményünk egyezik a közvetlen numerikus számításokkal, amit az ábrán a szaggatott vonal szépen mutat is. Realisztikus számítások esetén természetesen több sávot is figyelembe kell venni, de ez az ellenőrzés azt mutatja, hogy módszerünkkel megbízhatóan számítható a távoli detektorok által mérhető  $Q_d$  töltés általános esetben is. Emellett a fentiekben vázolt eljárás természetes módon általánosítható a háromdimenziós esetre is.

Ez alapján ígéretesnek látszik az, hogy egy realisztikus modellben megvizsgáljuk az elvben mérhető  $Q_d$  töltés lézerparamétereiktől való függését. Ehhez természetesen már nem elegendő egyetlen kezdeti energia-sajátállapotot figyelembe venni, el kell végezni az összegzést az összes észrevehetően betöltött kezdőállapotra. Ez főként a kölcsönhatás számítása miatt jelent egy numerikus szempontból nehéz feladatot, magának a töltésnek a meghatározása a fentiek alapján könnyen kivitelezhető. Előzetes eredményeink alapján ez a töltés valóban mérhetően függ a lézerimpulzus paramétereitől.

Visszatérve az eredeti motivációt jelentő kísérletekhez, végezetül érdemes hangsúlyozni, hogy a tisztán kvantumosan leírt, anyagában homogén minta viselkedésének megismerése még csak az első lépés ezeknek a méréseknek a megértéséhez. Egyrészt a minta és a fém érintkezők közötti töltéstranszport, másrészt pedig a hosszú vezetékben fellépő szórásjelenségek szerepét még mindenképpen tisztázni kell. Emellett a számításainkat az egyelektron közelítés keretein belül végeztük el, ami mindenképpen





29. ábra. Lézerimpulzus által elmozdított töltés egy modell-szilárdtest két sávjában együttesen, egy  $k_0 = 0,2$  1/nm indexű vegyértéksávbeli kezdőállapotra. A lézerteret az (6.1) egyenlet írja le, ahol  $\omega_0 = 2,35$  1/fs,  $\tau = 20\pi/\omega_0$ ,  $l = 50$  nm, a maximális elektromos térerősség pedig 1 GV/m. Az ábrán a numerikus eredmény látható, ami a kölcsönhatási tartománytól távol jól egyezik a szaggatott vonallal szemléltetett analitikus határértékekkel. A szürke tartomány a kölcsönhatási régiót jelöli.

megszorítást jelent eredményeink alkalmazhatósági körét tekintve. Érdeemes ugyanakkor megemlíteni, hogy több olyan időfüggő transzportjelenség is ismeretes, amikor ez a közelítés kielégítően pontos leírást ad.

A fentiekben szilárdtestekben lézertérrel keltett áramokkal kapcsolatos eredményeinket foglaltuk össze. Megmutattuk, hogy ismerve az anyagi rendszer állapotát a kölcsönhatás után, a lézerpulzus által elmozdított összes töltés analitikusan kiszámítható. Ez az eredmény jó kiindulópontot szolgáltat ahhoz, hogy elméleti úton megvizsgálhassuk, a lézertér paramétereit milyen mértékben határozhatók meg az általa elmozdított töltés megméréseivel.

# Összefoglalás

Ez a jegyzet a Szegedi Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszékén tartott azonos című előadáshoz íródott. Témája egybeesik azokkal a kérdésekkel, amelyeket a szerző a legutóbbi négy-öt évben vizsgált, a tapasztalatok alapján elmondható, hogy az itt leírtak elsajátítása alapul szolgálhat nanoeszközök transzportfolymatainak akár tudományos igényű tanulmányozásához is. Ugyanakkor a viszonylag részletes bevezető részek és a tárgyalás módja alapján azon hallgatók számára is hasznos lehet, akik első körben pusztán bizonyos gyakran emlegetett jelenségek (pl. a kvantum Hall effektus) tágabb kontextusára és fizikai hátterére kíváncsiak.

Az itt részletezett elmélet az egyelektron közelítés keretein belül marad, megmutattuk, hogyan írható át ballisztikus vezetők esetén a vezetőképesség meghatározásának a kérdése kvantummechanikai szórásproblémává, és milyen módszerek használatosak az ilyen jellegű kérdések kezelésére. Részletesen kitértünk a diszkrét rácsmodellek kezelésére, amelyek gyakorlati szempontból kiemelt jelentőségűek, nem pusztán azért, mert így numerikusan kezelhetővé válnak a problémák, hanem azért is, mert ez a módszer viszonylag könnyen átvihető a nemegyensúlyi esetre is, amikor akár az elektron-elektron kölcsönhatás is figyelembe vehető. Így a jegyzet egy olyan bevezetőnek tekinthető, amely alapján a téma fő kérdései és az alkalmazott módszerek elsajátíthatók.

Földi Péter  
Szeged, 2008.

## Felhasznált és ajánlott irodalom

- [1] S. DATTA, *Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995.)
- [2] L. D. LANDAU ÉS E. M. LIFSHITZ, *Elméleti fizika III: Kvantummechanika, Nem-relativisztikus elmélet* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1980.)
- [3] C. COHEN-TANNOUJJI, B. DIU AND F. LALOË, *Méchanique Quantique*, vol. 2 (Hermann, Paris, 1977.), 2. kiadás
- [4] SÓLYOM J., *A modern szilárdtestfizika alapjai* (ELTE Eötvös kiadó, Budapest, 2003.)
- [5] B. J. VAN WEES, H. VAN HOUTEN, C. W. J. BEENAKKER ET AL., Phys. Rev. Lett. **60** (9), 848 (1988.)
- [6] J. NITTA, F. E. MEIJER AND H. TAKAYANAGI, Appl. Phys. Lett. **75**, 695 (1999.)
- [7] R. LANDAUER, IBM J. Res. Dev. **32**, 306 (1988.)
- [8] R. LANDAUER, IBM J. Res. Dev. **32**, 317 (1988.)
- [9] J. D. JACKSON, *Klasszikus elektrodinamika* (TypoTex, Budapest, 2004.)
- [10] D. S. FISHER ÉS P. A. LEE, Phys. Rev. B **23** (12), 6851 (1981.)

- [11] P. A. M. DIRAC, *The principles of quantum mechanics*. (Clarendon Press, Oxford, 1989.), 4. kiadás
- [12] F. E. MEIJER, A. F. MORPURGO, T. M. KLAPWIJK, Phys. Rev. B **66**, 033107 (2002.)
- [13] B. MOLNÁR, P. VASILOPOULOS ÉS F. M. PEETERS, Phys. Rev. B **72**, 075330 (2005.)
- [14] T. CHAKRABORTY ÉS P. PIETILAINEN, *The fractional quantum Hall effect* (Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg, 1988.)