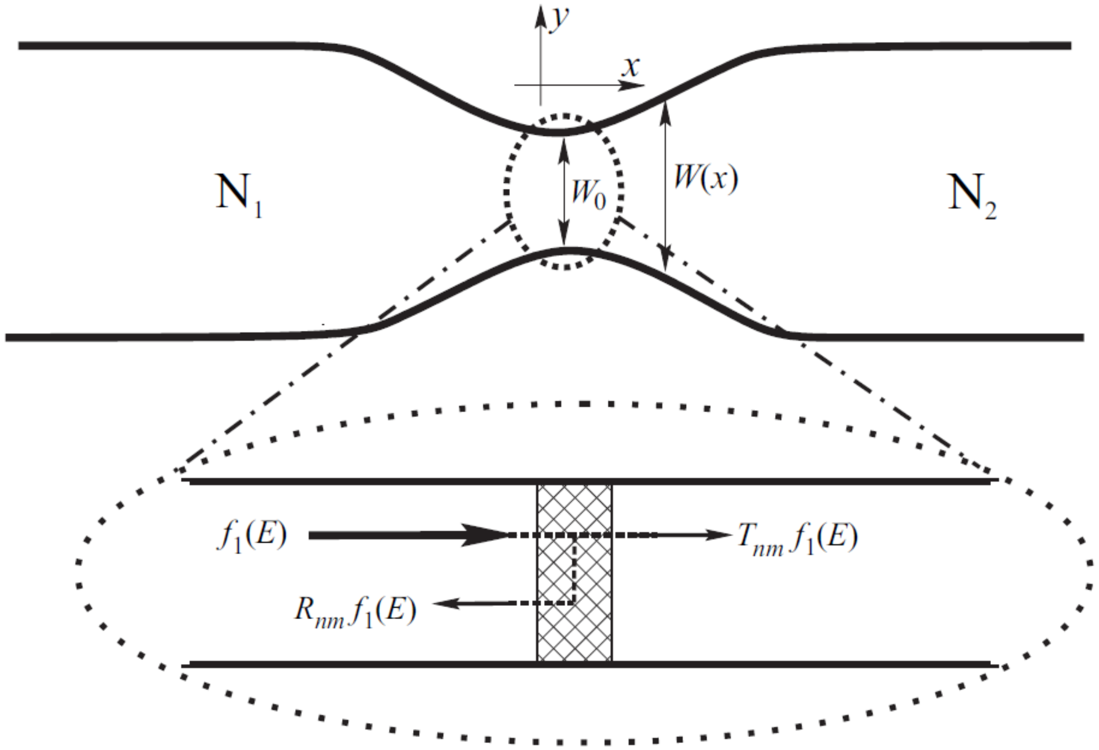
Кинетические коэффициенты квантового точечного контакта

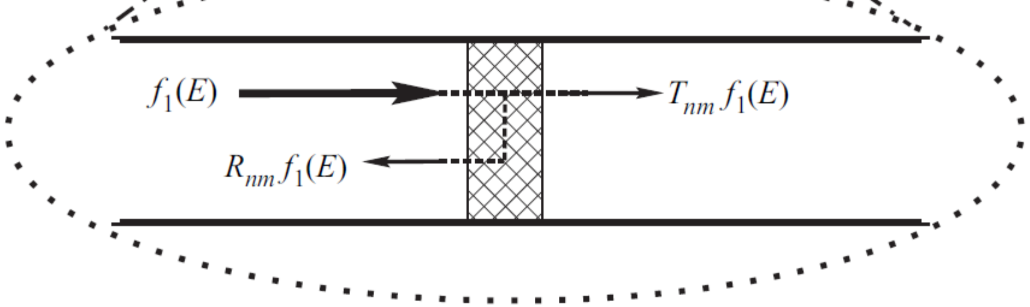
Квантовый точечный контакт. Для простоты, слева и справа один канал. Тогда имеем квазиодномерную задачу…



Из вероятностей прохождения и отражения составляем матрицу:

$$T_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} R & D' \\ D & R' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & D \\ D & R \end{pmatrix}.$$

$$f_\alpha(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu_\alpha)/T]+1}, \qquad \alpha = 1, 2$$



$$f_\alpha(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu_\alpha)/T]+1}, \qquad \alpha = 1, 2$$

$$T_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} R & D' \\ D & R' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & D \\ D & R \end{pmatrix},$$

Согласно P.N. Butcher, J. Phys. C 2, 4869 (1990):

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - T_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} D & -D \\ -D & D \end{pmatrix}.$$

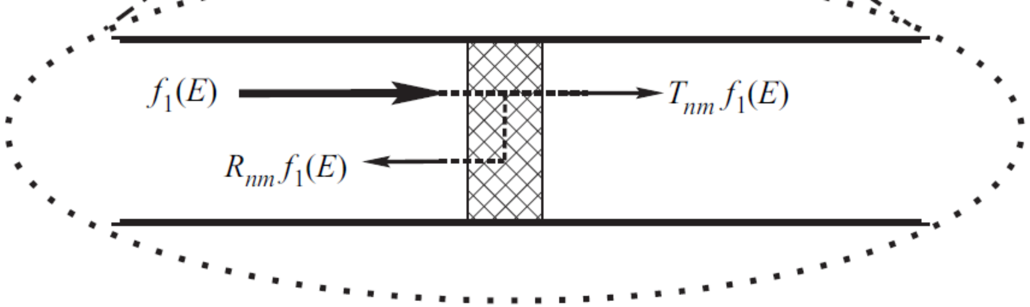
$$I_\alpha = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon \Gamma_{\alpha\beta} f_\beta(\varepsilon).$$

Если α=1, то $I_1 = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon \left(\Gamma_{11} f_1(\varepsilon) + \Gamma_{12} f_2(\varepsilon) \right) = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon D \left(f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon) \right).$

Согласно P.N. Butcher, J. Phys. C 2, 4869 (1990) и многим другим публикациям, поток тепла:

$$I_\alpha^{(\mathrm{Q,Butcher})} = \frac{2}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon \left(\varepsilon - \mu_\alpha \right) \Gamma_{\alpha\beta} f_\beta(\varepsilon).$$

Эта формула в линейном отклике дает правильные кинетические коэффициенты.



$$f_\alpha(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu_\alpha)/T]+1}, \qquad \alpha = 1,2$$

$$T_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} R & D' \\ D & R' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & D \\ D & R \end{pmatrix},$$

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - T_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} D & -D \\ -D & D \end{pmatrix}.$$

$$I_\alpha = \frac{2e^2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\,\Gamma_{\alpha\beta} f_\beta(\varepsilon).$$

$$I_\alpha^{(\mathrm{Q,Butcher})} = \frac{2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(\varepsilon-\mu_{eq}\right)\Gamma_{\alpha\beta} f_\beta(\varepsilon).$$

Эта формула в линейном отклике дает правильные кинетические коэффициенты.

$$I_\alpha^{(\mathrm{Q,Butcher})} = \frac{2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(\varepsilon-\mu_\alpha\right)\Gamma_{\alpha\beta} f_\beta(\varepsilon).$$

$$f_\alpha \approx f_\alpha^{(0)} + \delta f = f^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon} f^{(0)}\right)\left(eV_\alpha - \frac{\varepsilon-\mu}{T}\theta_\alpha\right), \quad \theta_\alpha = T_\alpha - T.$$

$$I_\alpha^{(\mathrm{Q,Butcher})}\left(f^{(0)}\right) \equiv 0,$$

$$I_\alpha^{(\mathrm{Q,Butcher})} = \frac{2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(\varepsilon-\mu_\alpha\right)\Gamma_{\alpha\beta}\delta f_\beta(\varepsilon) \approx \frac{2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(\varepsilon-\mu\right)\Gamma_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon} f^{(0)}\right)\left(eV_\alpha - \frac{\varepsilon-\mu}{T}\theta_\alpha\right),$$

$$I_1^{(\mathrm{Q,Butcher})} \approx \frac{2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(\varepsilon-\mu\right)\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon} f^{(0)}\right) D\left(e\delta V - \frac{\varepsilon-\mu}{T}\delta T\right), \quad \delta V = V_2 - V_1, \quad \delta T = T_2 - T_1.$$

$$I_1 \approx \frac{2e}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon} f^{(0)}\right) D\left(e\delta V - \frac{\varepsilon-\mu}{T}\delta T\right).$$

$$I_1^{(Q)} = \mathbf{J}_Q \approx \frac{2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\,(\varepsilon-\mu)\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}f^{(0)}\right)D\left(e\delta V - \frac{\varepsilon-\mu}{T}\delta T\right), \quad \delta V = V_2 - V_1, \quad \delta T = T_2 - T_1.$$

$$I_1 = \mathbf{J}_e \approx \frac{2e}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}f^{(0)}\right)D\left(e\delta V - \frac{\varepsilon-\mu}{T}\delta T\right).$$

На лекциях использовались обозначения:

$$\boxed{\begin{aligned}\mathbf{J}_e &= \sigma\boldsymbol{\varepsilon} - \beta\nabla T,\\ \mathbf{J}_Q &= \chi\boldsymbol{\varepsilon} - \kappa\nabla T.\end{aligned}}$$

Для точечного контакта:

$$\boxed{\begin{aligned}\mathbf{J}_e &= \sigma\delta V - \beta\delta T,\\ \mathbf{J}_Q &= \chi\delta V - \kappa\delta T.\end{aligned}}$$

$$\sigma = G = \frac{2e^2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}f^{(0)}\right)D \approx \frac{2e^2}{2\pi\hbar}D = G_q D,$$

$$\kappa = \frac{2}{2\pi\hbar T}\int d\varepsilon\,(\varepsilon-\mu)^2\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}f^{(0)}\right)D \approx \frac{2}{2\pi\hbar T}D\frac{\pi^2}{3}T^2 = G_q D\frac{\pi^2}{3e^2}T.$$

Второй способ -- вычисление кин-коэф., через поток энтропии.
(по статье U. Sivan and Y. Imry PRB 1986).

$$\frac{\partial S(r,t)}{\partial t} + \mathrm{div}(\mathbf{J}_s) = -\mathbf{J}_Q \cdot \frac{\nabla T}{T^2} + \mathbf{J}_e \cdot \frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{T},$$

$$\mathbf{J}_S(r,t) = \mathbf{J}_Q(r,t) / T(r,t).$$

$$\mathbf{J}_S(r,t) = -\frac{1}{2\pi\hbar}\int\left[f_1\ln f_1 + (1-f_1)\ln(1-f_1)\right]\mathrm{d}E +$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int\left[\left(Rf_1 + D'f_2\right)\ln\left(Rf_1 + D'f_2\right) + \left(1 - Rf_1 - D'f_2\right)\ln\left(1 - Rf_1 - D'f_2\right)\right]\mathrm{d}E,$$

$$D = D', R = R'.$$

$$f_\alpha \approx f^{(0)} + \delta f_\alpha = f^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial\varepsilon}f^{(0)}\right)\left(eV_\alpha - \frac{\varepsilon-\mu}{T}\theta_\alpha\right), \quad \theta_\alpha = T_\alpha - T.$$

$$\mathbf{J}_S(r,t) \approx \frac{1}{2\pi\hbar}\int D\left[\ln\frac{f^{(0)}}{1-f^{(0)}}\right]\left(\delta f_2 - \delta f_1\right)\mathrm{d}E = -\frac{1}{2\pi\hbar T}\int D[\varepsilon-\mu]\left(f_2 - f_1\right)\mathrm{d}E.$$

$$\mathbf{J}_S(r,t) \approx \frac{1}{2\pi\hbar}\int D\left[\ln\frac{f^{(0)}}{1-f^{(0)}}\right](\delta f_2 - \delta f_1)\,\mathrm{d}\,E = -\frac{1}{2\pi\hbar T}\int D[\varepsilon-\mu](f_2 - f_1)\,\mathrm{d}\,E.$$

$$\mathbf{J}_S(r,t) = \mathbf{J}_Q(r,t)\,/\,T(r,t).$$

$$\mathbf{J}_Q(r,t) \approx -\frac{1}{2\pi\hbar}\int D[\varepsilon-\mu](f_2 - f_1)\,\mathrm{d}\,E.$$

Что и требовалось доказать…