rész I

A Landauer szemléletmód

A Landauer elmélet alapvető üzenete hogy egy nanoszerkezetben mért vezetőképesség direkt kapcsolatban áll a nanoszerkezet kvantummechanikai szórási tulajdonságaival. Ebben a fejezetben röviden felelevenítjük Landauer gondolatmenetét.

Először is képzeljünk el két töltés tartály-t amelyek között egy kis $\delta\mu$ kémiai potenciál különbség van. Kösse össze ezt a két tartályt egy ideális egydimenziós vezeték. Ekkor a vezetéken meginduló δI áram a következő alakot ölti

$$\delta I = ev\frac{\partial n}{\partial E}\delta\mu. \tag{1}$$

Itt v az elektronok sebessége, e az elektron töltése illetve $\partial n/\partial E$ a vezeték állapot sűrűsége. Az állapotsűrűséget hullámszám térben kifejezve kapjuk hogy:

$$\frac{\partial n}{\partial E} = \frac{\partial n}{\partial k}\frac{\partial k}{\partial E} = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\hbar v}. \tag{2}$$

Tehát az áram kifejezése a

$$\delta I = \frac{e}{h}\delta\mu = \frac{e^2}{h}\delta V, \tag{3}$$

alakra egyszerűsödik. Ha az ideális vezeték egy szórási tartományon keresztül köti össze a két töltés tartályt akkor a töltések csak valamilyen T transzmissziós valószínűséggel tudnak eljutni a célig. Azaz az áram

$$\delta I = \frac{e^2}{h}T\delta V \tag{4}$$

alakú lesz. Ebből a kifejezésből le tudjuk olvasni a kis feszültségek esetén mért vezetőképességet:

$$\mathcal{G} = \frac{e^2}{h}T. \tag{5}$$

Ez a Landauer formula. Ha a szórási tartomány-t egy S szórás mátrixal jellemezzük aza akkor a transzmissziós valószínűség és a szórásmátrix transzmissziós amplitúdói közt az ismert

$$T = \sum_{i,j}|t_{i,j}|^2 = \mathrm{Tr}(t^\dagger t) \tag{6}$$

kapcsolat áll fenn.

rész II

Egy dimenziós diszkrét szórásprobléma

Ebben a fejezetben a legegyszerűbb egy dimenziós szórásproblémákat fogjuk vizsgálni egy diszkrét rácson. A probléma megoldását Green függvények segítségével keressük. Először egy végtelen lánc Green függvényét számítjuk ki majd ebből megfelelő peremfeltételek segítségével felírjuk a félvégtelen lánc Green függvényét. A félvégtelen lánc Green függvényének birtokában megoldunk néhány alapvető szórásproblémát.

1. Végtelen és félvégtelen lánc Green függvénye

Kezdjük a Schrödinger egyenlettel:

$$(E\hat{I} - \hat{H})\underline{\Psi} = \underline{0} \tag{7}$$

Tegyük fel hogy a vizsgált rendszer egy egydimenziós lineáris lánc ϵ_0 on-site energiával és $-\gamma$ hoppingal és a rácsállandóval. Kiírva (7)-t kapjuk hogy

$$\epsilon_0\psi_p - \gamma\psi_{p+1} - \gamma\psi_{p-1} = E\psi_p. \tag{8}$$

Tegyük fell hogy a hullámfüggvény síkhullám alakban kereshető

$$\psi_p = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tilde{k}ap}. \tag{9}$$

Itt $\tilde{k}$ a hullámszám. Átskálázva a rendszer hosszát $1/a$-val új hullámszámot vezethetünk be $k = \tilde{k}a$. Behelyettesítve a fenti ansatz-ot (8)-be kapjuk a

$$E = \epsilon_0 - 2\gamma\cos(k) \tag{10}$$

diszperziós relációt, illetve a csoportsebességet

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{\hbar}2\gamma\sin(k). \tag{11}$$

A továbbiakban fontos szerepe lesz a (7) Schrödinger egyenlethez tartozó Green függvénynek. A Green függvény definíciója:

$$(E\hat{I} - \hat{H})\hat{G} = \hat{I}. \tag{12}$$

Tehát $\hat{G}$ egy, operátor mint maga $\hat{H}$. Vegyük észre hogy a Green függvény egyes oszlopai (mátrix reprezentációban) egy (7)-hez hassonló Schrödinger egyenletet elégítenek ki egy forrás tag jelenlétében (Ez folytonos esetben egy Dirac delta potenciálnak felel meg).

Számítsuk ki a (8)-hez tartozó Green függvényt! A Green egyenlet erre a problémára az

$$(E - \epsilon_0)G_{p,q} + \gamma(G_{p+1,q} + G_{p-1,q}) = \delta_{pq} \tag{13}$$

alakot ölti. Amint ezt fentebb is említettük ez az egyenlet nem más mint egy Schrödinger egyenlet egy forrástag jelenlétében. Keressük (13) megoldását a forrásból kiinduló síkhullám alakjában. (Vegyük észre, ez nem a legáltalánosabb alak... kereshetnénk a megoldást a forrás felé propagáló síkhullám alakjában is. De erről majd később.) Legyen tehát

$$\begin{aligned} G_{p,q} &= A_{-}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(p-q)} \quad p \leq q \\ G_{p,q} &= A_{+}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}k(p-q)} \quad p \geq q. \end{aligned} \tag{14}$$

Vegyük észre hogy ez az ansatz kielégíti a (13) Green egyenletet ha $q \neq p$. Az $A_{\pm}$ eggyütthatókat a Green függvény $q = p$-beli folytonosságából és a Green egyenlet $q = p$ helyen történő kielégítéséből határozzuk meg. Egyszerű behelyettesítéssel kapjuk a folytonossági kritériumból hogy

$$A_{+} = A_{-} = A. \tag{15}$$

A (13) Green egyenlet a (14) ansatz-al pedig a következő alakot ölti:

$$(E - \epsilon_0)A + 2\gamma A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k} = 1. \tag{16}$$

Behelyettesítve a (10) diszperziós relációt ez tovább alakítható

$$-2A\gamma\cos(k)A + 2\gamma A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k} = A\gamma(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}) = A\mathrm{i}2\gamma\sin(k) = A\mathrm{i}\hbar v = 1. \tag{17}$$

Az utolsó lépésben (11) alapján helyettesítettük be a csoport sebességet. Ezzel a végtelen egy dimenziós lánc Green függvénye a

$$G_{p,q} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar v}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|p-q|} \tag{18}$$

kompakt alakot ölti. Ez a probléma retardált Green függvénye, ha a pontforrástól kiinduló síkhullámok helyett a pontforrás felé haladó síkhullámokat tételezünk fel, akkor egy hasonló kifelyezéshez jutunk

$$G^{A}_{p,q} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar v}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|p-q|}, \tag{19}$$

ez a probléma avanzsált Green függvénye. A továbbiakban csak a retardált Green függvényt fogjuk használni, s ezért elhagyjuk a retardált jelzőt.

Ezután szükségünk lesz egy félvégtelen lánc Green függvényére. Ezt a végtelen lánc Green fügvényéből származtatjuk. Vegyük észre hogy ha a (18) Green függvényhez hozzá adunk egy hullámfüggvényt ami teljesíti a (8) Schrödinger egyenletet akkor a kapott objektum szintén teljesíteni fogja a Green egyenletet. Keressük tehát egy olyan lánc Green függvényét melyből az $p \geq p_0$ rácspontok hiányoznak a következő alakban:

$$G^{l}_{p,q} = G_{p,q} + \phi^{p0,q}_{p} \tag{20}$$

Mivel retardált Green függvényt keresünk a $\phi^{p0,q}_{p}$ hullámfüggvényt a

$$\phi^{p0,q}_{p} = B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kp} \tag{21}$$

alakú. A B együtthatót a $G^{l}_{p_0,q} = 0, q \leq p_0$ peremfeltétel kielégítésével tudjuk meghatározni, azaz

$$0 = G^{l}_{p_0,q} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar v}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(p_0-q)} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kp_0}. \tag{22}$$

Tehát a keresett együttható

$$B = \frac{\mathrm{i}}{\hbar v}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(2p_0-q)}, \tag{23}$$

és keresett hullámfüggvény pedig

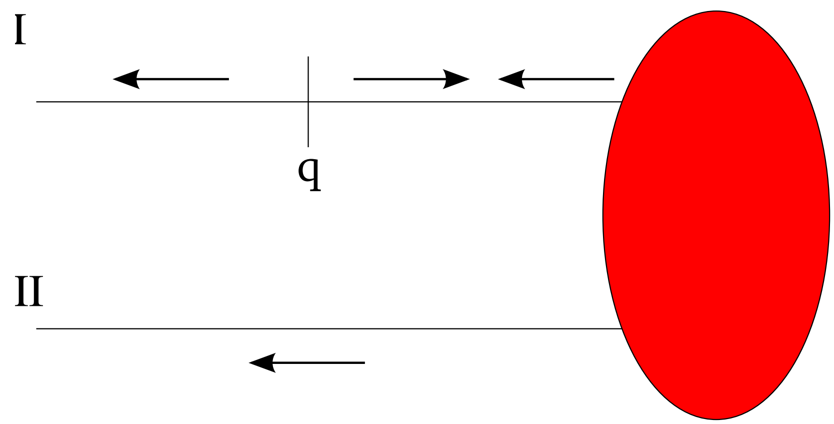
$$\phi^{p0,q}_{p} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar \mathrm{v}}\mathrm{e}^{-\mathrm{ik(p-2p_0+q)}}. \tag{24}$$

A Green függvény a lánc utolsó pontján a következő egyszerű alakra hozható a (11) csoportsebesség segítségével

$$G^{l}_{p_0-1,p_0-1} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar v} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar v}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k2} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k})}{-2\mathrm{i}\gamma\sin(k)} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}}{-\gamma}. \tag{25}$$

Ennek az eredménynek, amint később látni fogjuk, fontos gyakorlati jelentősége van.

2. A szórásprobléma Green függvénye



1. ábra. Szórás probléma két vezetékkel (I és II). A nyilak a q pontban történő gerjesztés hatására kiinduló hullámokat ábrázolják.

Ebben a fejezetben két egydimenziós vezeték (I és II) közötti szórásprobléma Green függvényét fogjuk meghatározni szórási hullámfüggvények segítségével. A probléma geometriai elrendezését az 1. ábrán láthatjuk. Válaszuk mind a két vezetékben a koordináta rendszert úgy hogy $-\infty$ be tartsanak és az első koordináta a 0 legyen. Legyen továbbá mind a két vezeték egydimenziós lánc ϵ_β on-site energiával és $-\gamma_\beta$ hoppingal. Mind a két vezetékben külön külön bevezethetünk a szórási tartomány felé illetve a szórási tartománytól távolodó állapotokat. Jelölje ezeket $w_p^{\beta\pm}$, ahol $\beta \in \{I, II\}$, $+$ a szórási tartomány felé haladó illetve $-$ a szórási tartománytól távolodó állapotnak felel meg. Ezek ahogy azt fennt látuk síkhullám alakúak melyeket leosztunk a hozzájuk tartozó csoportsebesség gyökével, hogy egységnyi részecske fluxust képviseljenek, azaz

$$w_p^{\beta\pm} = \frac{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i} kp}}{\sqrt{\hbar v_k^\beta}}. \tag{26}$$

Ezekből felépíthetjük a rendszerben jelen lévő szórási hullámfüggvények komponenseit a vezetékekben az alábbi módon:

$$\phi_p^\beta\big|_{p\in\alpha} = \delta_{\alpha,\beta} w_p^{\alpha+} + S_{\alpha,\beta} w_p^{\alpha-}. \tag{27}$$

Itt bevezettük az $S_{\alpha,\beta}$ szórás mátrixot. Mivel a $w_p^{\beta\pm}$ hullámfüggvények fluxus normáltak ezért a szórási mátrix unitér. A szórási mátrix diagonális elemei a reflexiós $r_{\beta,\beta} = S_{\beta,\beta}$, az off-diagonális elemei pedig a transzmissziós $t_{\alpha,\beta} = S_{\alpha,\beta}$ szórási amplitúdók.

Keressük a szórásprobléma Green függvényét a következő alakban:

$$\begin{aligned} G_{p,q} &= A_s \phi_p^{II} \phi_q^I \qquad && p \le q \qquad && ,q \in I, \\ G_{p,q} &= A_s \phi_p^{I} \phi_q^{II} && p \ge q,\ \text{vagy } p \in II && ,q \in I, \end{aligned} \tag{28}$$

illetve

$$\begin{aligned} G_{p,q} &= B_s \phi_p^{I} \phi_q^{II} \qquad && p \le q \qquad && ,q \in II, \\ G_{p,q} &= B_s \phi_p^{II} \phi_q^{I} && p \ge q,\ \text{vagy } p \in I && ,q \in II. \end{aligned} \tag{29}$$

Az A_s és B_s együtthatókat a (12) Green egyenlet $p = q$ beli kielégítéséből tudjuk meghatározni. Határozzuk meg először A_s-t ! A kielégítendő Green egyenlet a következő alakot ölti:

$$(E - \epsilon_I) A_s \phi_p^{II} \phi_p^I + \gamma_I A_s (\phi_{p-1}^{II} \phi_p^I + \phi_{p+1}^I \phi_p^{II}) = 1. \tag{30}$$

Kihasználva hogy a ϕ_p^β szórási hullámfüggvények a Schördinger egyenlet megoldásai a vezetékekben kapjuk, hogy

$$(A_s \phi_p^{II}) \left[(E - \epsilon_I) \phi_p^I + \gamma_I (\phi_{p-1}^I + \phi_{p+1}^I) \right] = 0. \tag{31}$$

Kivonva (30)-ből (31)-t :

$$\begin{gathered} \gamma_I A_s (\phi_{p-1}^{II} \phi_p^I - \phi_{p-1}^I \phi_p^{II}) = 1 \\ \gamma_I A_s t_{1,2} \left[(w_{p-1}^{I-})(w_p^{I+} + r_{1,1} w_p^{I-}) - (w_{p-1}^{I+} + r_{1,1} w_{p-1}^{I-})(w_p^{I-}) \right] = 1 \\ \gamma_I A_s t_{1,2} \left[(w_{p-1}^{I-})(w_p^{I+}) - (w_{p-1}^{I+})(w_p^{I-}) \right] = 1 \end{gathered} \tag{32}$$

A $w_p^{\beta\pm}$ hullámfüggvények (26) definíciói segítségével ez tovább alakítható:

$$\frac{A_s t_{1,2}\gamma_I}{\hbar v_k^I}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}\right]=\mathrm{i}\frac{A_s t_{1,2}2\gamma_I\sin(k)}{\hbar v_k^I}=\mathrm{i}A_s t_{1,2}=1, \tag{33}$$

azaz

$$A_s=-\frac{\mathrm{i}}{t_{1,2}}. \tag{34}$$

Hassonló módon kapjuk a másik vezetékben kielégítve a Green egyenletet hogy

$$B_s=-\frac{\mathrm{i}}{t_{2,1}}. \tag{35}$$

Vezessük be a β_p jelölést a β-val jelölt vezetékek koordinátáinak indexelésére! Írjuk fel a Green függvényt a vezetékek felületén!

$$G_{I_0,I_0}=\frac{\mathrm{i}}{t_{1,2}}\phi^I_{I_0}\phi^{II}_{I_0}=-\frac{\mathrm{i}}{t_{1,2}}\frac{(1+r_{1,1})}{\sqrt{\hbar v_k^I}}\frac{t_{1,2}}{\sqrt{\hbar v_k^I}}. \tag{36}$$

Ebből a reflexiós amplitudót kifejezve kapjuk

$$r_{1,1}=\mathrm{i}\hbar v_k^I G_{I_0,I_0}-1. \tag{37}$$

Hasonlóan

$$G_{II_0,I_0}=-\frac{\mathrm{i}}{t_{1,2}}\phi^I_{II_0}\phi^{II}_{I_0}=-\frac{\mathrm{i}}{t_{1,2}}\frac{t_{2,1}}{\sqrt{\hbar v_k^{II}}}\frac{t_{1,2}}{\sqrt{\hbar v_k^I}}, \tag{38}$$

tehát

$$t_{2,1}=\mathrm{i}\sqrt{\hbar v_k^{II}}\sqrt{\hbar v_k^I}G_{II_0,I_0}. \tag{39}$$

Hasonlóképpen kapjuk a fennmaradó két szórási amplitúdót:

$$r_{2,2}=\mathrm{i}\hbar v_k^{II}G_{II_0,II_0}-1,\ \text{illetve}\ t_{1,2}=\mathrm{i}\sqrt{\hbar v_k^{II}}\sqrt{\hbar v_k^I}G_{I_0,II_0}. \tag{40}$$

A (37),(39) és (40) egyenletek tömörebb alakban írva kapjuk a

$$S_{\alpha,\beta}=\mathrm{i}\sqrt{\hbar v_k^\alpha}\sqrt{\hbar v_k^\beta}G_{\alpha_0,\beta_0}-\delta_{\alpha,\beta} \tag{41}$$

Fisher-Lee relációt ami egy szórás probléma felületi Green függvényét köti össze a megfelelő szórási amplitúdókkal. (HF: Ellenőrizzük hogy S valóban unitér!)

3. Felületi Green függvények és a Dyson-egyenlet

Ebben a fejezetben megvizsgáljuk a szórásprobléma felületi Green függvénye illetve a szétcsatolt rendszer vezetékeinek felületi Green függvénye közti kapcsolatát. Induljunk ki a teljes szórásprobléma Green egyenletéből illetve a szétkapcsolt szórásprobléma Green egyenletéből:

$$(E\hat{I}-\hat{H}_0-\hat{H}_1)\hat{G}=\hat{I}, \tag{42}$$

$$(E\hat{I}-\hat{H}_0)\hat{G}_0=\hat{I}. \tag{43}$$

Beszúrva a $\hat{G}_0\hat{G}_0^{-1}=\hat{I}$ egységoperátort (42)-be és kihasználva (43)-t kapjuk hogy

$$((E\hat{I}-\hat{H}_0)\hat{G}_0\hat{G}_0^{-1}-\hat{H}_1)\hat{G}=\hat{I}, \tag{44}$$

$$(\hat{G}_0^{-1}-\hat{H}_1)\hat{G}=\hat{I}. \tag{45}$$

Ezt balról szorozva $\hat{G}_0$-al:

$$(\hat{I}-\hat{G}_0\hat{H}_1)\hat{G}=\hat{G}_0. \tag{46}$$

Amiből következik a Dyson egyenlet:

$$\hat{G}=(\hat{I}-\hat{G}_0\hat{H}_1)^{-1}\hat{G}_0=(\hat{G}_0^{-1}-\hat{H}_1)^{-1} \tag{47}$$

Kihasználva $\hat{H}_1$ szórás problémabeli struktúráját (csak a szórási tartomány felülete és a vezetékek felülete között nem zérus) belátható hogy a teljes Green függvény $\hat{G}$ felületi részére $\hat{g}$-re is teljesül a Dyson-egyenlet, azaz

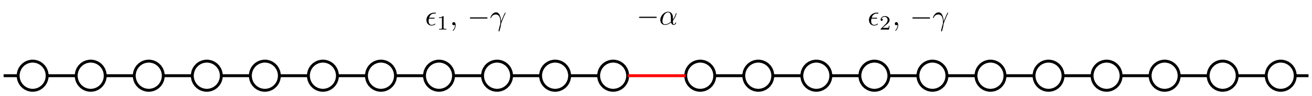
$$\hat{g}=(\hat{g}_0^{-1}-\hat{h}_1)^{-1}, \tag{48}$$

ahol $\hat{g}_0$ a szétkapcsolt rendszer felületi Green függvénye illetve $\hat{h}_1$ a $\hat{H}_1$ operátor nemzérus része.

4. Néhány egyszerű példa

A fentiekben beláttuk hogy a $\hat{g}_0$ felületi Green-függvény és $\hat{h}_1$ ismeretében a szórás mátrix meghatározása gyakorlatilag két véges mátrix invertálására redukálódik. Ebben a fejezetben gyakorlás képp megvizsgálunk néhány egyszerű feladatot.

4.1. Potenciál lépcső és szakadás



2. ábra. Potenciál lépcső egy láncon

Vizsgáljuk meg a 2. ábrán felvázolt szórásproblémát! Legyen tehát két vezeték melyeket rendre ϵ_1 és ϵ_2 on-site potenciál jellemez, illetve mind a kettőben legyen a hopping $-\gamma$. Kösse őket össze egy $-\alpha$ hopping. Ekkor a diszperziós reláció a két vezetékben az

$$E = \epsilon_1 - 2\gamma\cos(k_1) = \epsilon_2 - 2\gamma\cos(k_2) \tag{49}$$

alakot ölti. A Green-függvény pedig (48)alapján

$$g = \begin{pmatrix} -\gamma \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1} & \alpha \\ \alpha & -\gamma \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{\alpha^2 - \gamma^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_1+k_2)}} \begin{pmatrix} \gamma \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2} & \alpha \\ \alpha & \gamma \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1} \end{pmatrix}. \tag{50}$$

A (41) Fisher-Lee relációkból pedig a transzmissziós illetve a reflexiós amplitúdókra kapjuk hogy

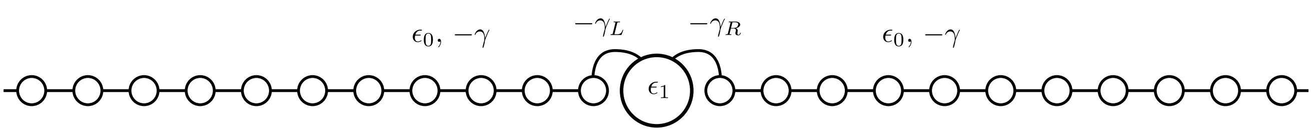
$$r_{1,1} = \mathrm{i}2\gamma\sin(k_1)\frac{\gamma \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2}}{\alpha^2 - \gamma^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_1+k_2)}} - 1, \tag{51}$$

illetve

$$t_{2,1} = \mathrm{i}2\gamma\sqrt{\sin(k_1)\sin(k_2)}\frac{\alpha}{\alpha^2 - \gamma^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_1+k_2)}}. \tag{52}$$

Ahogy azt már a Fisher-Lee relációkból is lehet sejteni a transzmisszió zérus illetve a reflexió egy ha bármely vezetékben a sáv szélén vagyunk, azaz $E = \epsilon_{1,2} \pm 2\gamma$. Továbbá az is tisztán látszik hogy a transzmisszió mindig zérus ha a két vezeték szét van csatolva azaz $\alpha = 0$. (HF: Lássuk be hogy $|t_{2,1}|^2 + |r_{1,1}|^2 = 1$, illetve hogy $|r_{1,1}|^2 = 1$ ha valamelyik k képzetes. Magyarázuk az eredményeket!)

4.2. Breit-Wigner rezonancia



3. ábra. Rezonáns állapoton történő szórás.

Vizsgáljuk meg a 3. ábrán felvázolt szórásproblémát! Azaz legyen két vezeték egy ϵ_1 on-site energiájú rezonáns állapothoz csatolva $\gamma_L$illetve γ_R hoppingal. Vegyünk továbbá $\gamma = 1$ illetve $\epsilon_0 = 0$ értékekkel jellemezett vezetékeket. A diszperziós reláció most mind a két vezetékben ugyan az:

$$E = -2\cos(k). \tag{53}$$

A Green-függvény a vezetékek felületén illetve a rezonancia helyén a

$$g = \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} & 0 & \gamma_L \\ 0 & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} & \gamma_R \\ \gamma_L & \gamma_R & E - \epsilon_1 \end{pmatrix}^{-1} \tag{54}$$

alakot ölti. Vizsgáljuk a rendszer transzmissziós együtthatóját! A megfelelő transzmissziós amplitudó

$$t_{2,1} = \mathrm{i}2\sin(k)g_{2,1} = \frac{2\mathrm{i}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k}\gamma_L\gamma_R\sin(k)}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\left(\gamma_L^2 + \gamma_R^2\right) + (E - \epsilon_1)} = \frac{2\mathrm{i}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k}\gamma_L\gamma_R\sin(k)}{\mathrm{i}\sin(k)\left(\gamma_L^2 + \gamma_R^2\right) + (E - \tilde{\epsilon}_1)}. \tag{55}$$

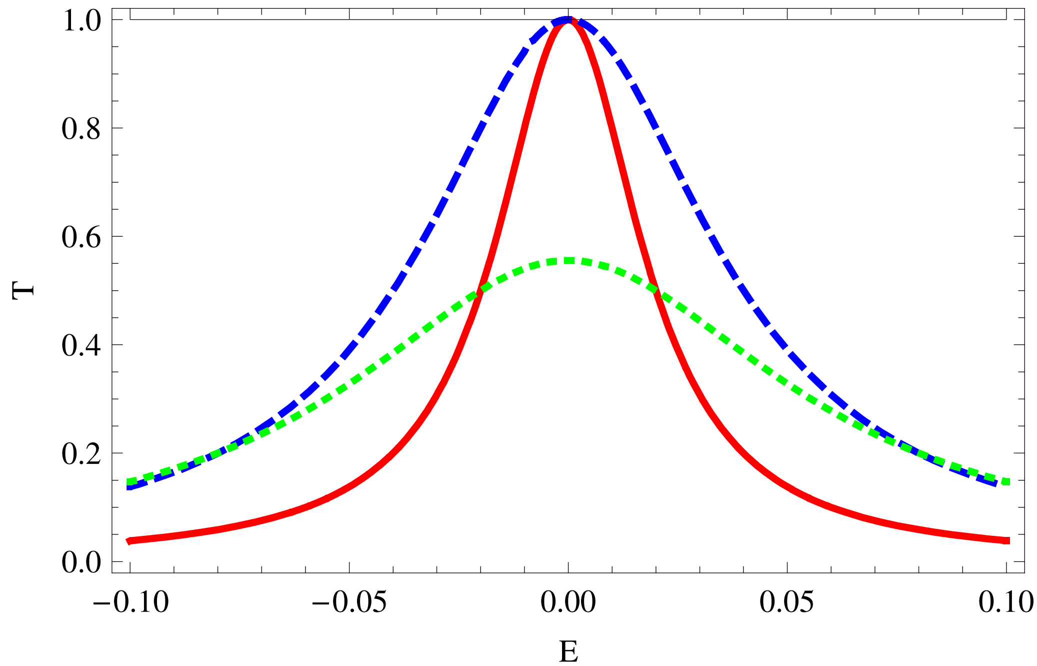


Figure 4: Breit-Wigner rezonancia $\Gamma_L = \Gamma_R = 0.01$ (piros vonal), $\Gamma_L = \Gamma_R = 0.02$ (kék szaggatott vonal) és $\Gamma_L = 0.05$, $\Gamma_R = 0.01$ (zöld pöttyözött vonal) esetén. Mind a három esetben $\tilde{\epsilon}_1 = 0$.

Ahol bevezettük a renormalizált rezonáns energiát:

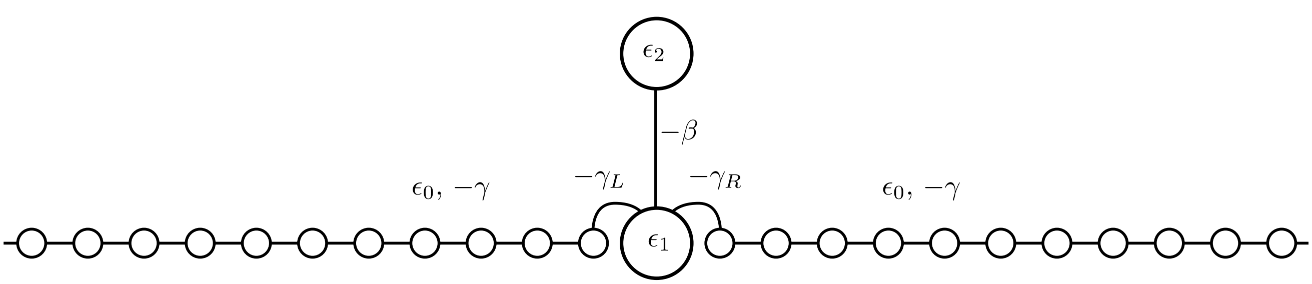
$$\tilde{\epsilon}_1 = \epsilon_1 \text{-} \cos(k)\left(\gamma_L^2 + \gamma_R^2\right). \tag{56}$$

A transzmissziós valószínűség tehát a a jól ismert Breit-Wigner alakra hozható:

$$T = tt^* = \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{(E - \tilde{\epsilon}_1)^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R)^2}. \tag{57}$$

A $\Gamma_{L,R}$ együtthatók pedig $\Gamma_{L,R} = \gamma_{L,R}^2 \sin(k) = \gamma_{L,R}^2 \sqrt{1 - E^2/4}$. Látjuk tehát hogy az eredeti ϵ_1 rezonancia a vezetékek hatására kiszélesedik illetve eltolódik. Néhány paraméter értékre a 4. ábra tartalmazza a megfelelő transzmissziós együtthatókat.

4.3. Fano rezonancia és a decimálás



5. ábra. Szórás egy rezonáns állapoton egy „oldalcsoporttal”.

Ebben az utolsó példában vizsgáljuk meg az 5. ábrán vázolt szórás problémát. A transzmissziós együtthatót meghatározhatnánk a már ismert úton, felírva a felületi Green-függvényekre vonatkozó Dyson-egyenletet és invertálva a megfelelő 4×4-es mátrixot. Ez az út egyre bonyolultabb és egyre nagyobb mátrixok invertálásához vezet. Érdemes tehát valahogyan redukálni az invertálandó mátrix méretét. Induljunk ki ismét egy általános Schrödinger egyenletből:

$$\sum_j H_{ij}\psi_j = E\psi_i. \tag{58}$$

Ezt $i = l$- esetére kírva ki tudjuk fejezni a l-edik pontban a hullámfüggvény értékét:

$$\sum_{j \neq l} H_{lj}\psi_j + H_{ll}\psi_l = E\psi_l, \rightarrow \psi_l = \sum_{j \neq l} \frac{H_{lj}}{E - H_{ll}}\psi_j. \tag{59}$$

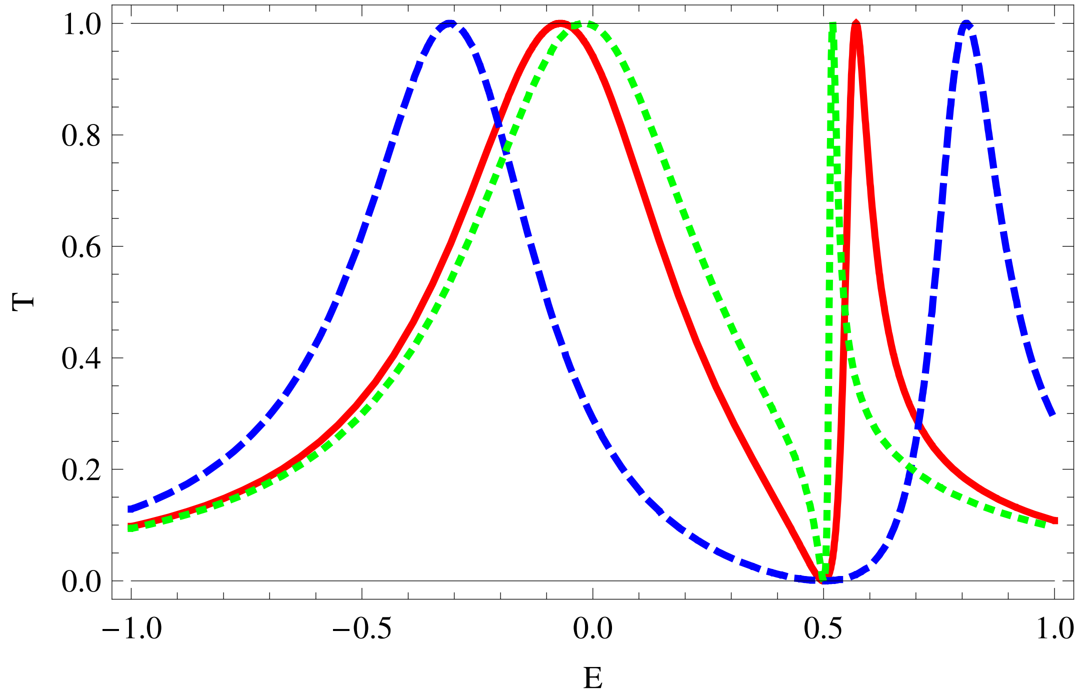


Figure 6: Példa Fano rezonanciára. Mind a három esetben $\Gamma_L = \Gamma_R = 0.4$,$\epsilon_1 = 0.0$ és $\epsilon_2 = 0.5$, továbbá $\beta = 0.1$(zöld pöttyözött vonal), $\beta = 0.2$ (piros vonal) és $\beta = 0.5$ (kék szaggatott). Mind a három görbe két maximummal rendelkezik és nulla $E = 0.5$-ra.

Tegyük fel hogy a továbbiakban olyan problémával foglalkozunk amelyben az l-edik pont csak közvetett szerepet kap. (Például ha a 5. ábrán vizsgált rendszerben a két vezeték közti transzmisszió a kérdés az ϵ_2-es pont ilyen). Ilyen esetekben érdemes ezeket a pontokat kiredukálni a Schrödinger egyenletből. Ezt a redukációt, vagy más néven decimálást (59) segítségével könnyen megtehetjük. Ha $i \neq l$ a Schrödinger egyenlet a következő alakot ölti

$$\sum_{j\neq l} H_{ij}\psi_j + H_{il}\psi_l = \sum_{j\neq l} H_{ij}\psi_j + H_{il}\sum_{j\neq l}\frac{H_{lj}}{E-H_{ll}}\psi_j = \sum_{j\neq l} H^{'}_{ij}\psi_j = E\psi_i, \tag{60}$$

ahol bevezettük az effektív, vagy decimált Hamilton operátort mint

$$H^{'}_{ij} = H_{ij} + \frac{H_{il}H_{lj}}{E-H_{ll}}. \tag{61}$$

A decimált Hamilton operátor egy kisebb Hilbert-téren hat viszont a spektruma megeggyezik az eredeti Hamiltoni spektrumával. Ez nem más mint egy elegánsan burkolt Gauss-elimináció.

Alkalmazva a decimálás technikáját könnyen beláthatjuk hogy a jelen vizsgált szórás probléma transzmissziós együtthatója a (57) Breit-Wigner formulából származtatva a

$$T = tt^* = \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(E-\tilde{\epsilon}_1-\frac{\beta^2}{E-\epsilon_2})^2 + (\Gamma_L+\Gamma_R)^2} \tag{62}$$

alakot ölti. Vegyük észre hogy ez $E = \epsilon_2$-re mindig azonosan nulla. Továbbá az is látszik hogy két maximum lesz a

$$E = \frac{1}{2}\left(\tilde{\epsilon}_1 + \epsilon_2 \pm \sqrt{(\tilde{\epsilon}_1-\epsilon_2)^2 + 4\beta^2}\right) \tag{63}$$

helyeken. Ez a transzmissziós együttható a Fano jelalakra redukálódik ha a két rezonancia távol kerül egymástól és ϵ_2-vel tartunk az egyik felé. Végezetül néhány paraméterre a 6. ábrán a (62)-nek megfelelő néhány jelalakot láthatunk.

rész III

Általánosított vezetékek

5 Végtelen vezetékek Hamilton-operátora és állapotai

Az előző fejezetben szigorúan egy dimenziós vezetékeket tárgyaltunk. Ebben a fejezetben kibővítjük a fenti formalizmust általánosított vezetékekre. Vizsgáljuk meg először a végtelen vezeték esetét. A Hamilton-operátor egy általános végtelen vezetékre a

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & H_0 & H_1 & 0 & 0 \\ 0 & H_1^\dagger & H_0 & H_1 & 0 \\ 0 & 0 & H_1^\dagger & H_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \tag{64}$$

alakot ölti. Itt H_0 illetve H_1 általában egy $N \times N$ dimenziójú mátrix. Keressük ennek a Hamilton-operátornak a sajátértékeit egy síkhullám és egy N dimenziós vektor szorzataként!

$$\underline{\Psi} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \left|\phi\right\rangle . \tag{65}$$

Ehhez a hullámfüggvényhez tartozó energia sajátértéket a

$$\det(H_0 - E \cdot I + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} H_1 + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} H_1^\dagger) = 0 \tag{66}$$

szekuláris egyenlet megoldásaként, a $\left|\phi\right\rangle$ vektorokat pedig a

$$\left(H_0 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} H_1 + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} H_1^\dagger\right) \left|\phi\right\rangle = E \left|\phi\right\rangle \tag{67}$$

hullámszámfüggő Schrödinger egyenlet kielégítésével kapjuk.

Tehát minden k hullámszámra rendelkezésünkre fog állni N darab energia érték $E^n(k)$ illetve N darab sajátfüggvény $\left|\phi^n(k)\right\rangle$. Általában egy szórásproblémánál egy fordított feladattal állunk szenben. A részecskék energiája ismert és az adott energiához tartozó hullámszám az ismeretlen mennyiség. Egy lehetséges, ámbár kevéssé praktikus megoldás a fenn említett problémára egy kereső allgoritmus allkalmazása az $E^n(k)$ értékekre.

Ennél sokkal célszerűbb ha közvetlenül a hullámszámokra írunk fel egy sajátérték problémát. Legyen $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k}\left|\phi\right\rangle = \left|\theta\right\rangle$, ezzel a (66) Schrödinger egyenlet a

$$\begin{aligned} (H_0 - E \cdot I)\left|\phi\right\rangle \quad & +H_1^\dagger \left|\theta\right\rangle &= -\mathrm{e}^{\mathrm{i}k} H_1 \left|\phi\right\rangle , \\ \left|\phi\right\rangle \quad & \;\; 0\left|\theta\right\rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\left|\theta\right\rangle , \end{aligned} \tag{68}$$

alakot ölti. Az első sort beszorozva $-H_1^{-1}$-el kapjuk, hogy

$$\begin{pmatrix} -H_1^{-1}(H_0 - E \cdot I) & -H_1^{-1} H_1^\dagger \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left|\phi\right\rangle \\ \left|\theta\right\rangle \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} \begin{pmatrix} \left|\phi\right\rangle \\ \left|\theta\right\rangle \end{pmatrix} . \tag{69}$$

Ez egy sajátérték probléma melynek megoldásai közvetlenül megadják a keresett hullámszámot és a keresett hullámfüggvényeket az energia függvényében. A későbbiekben szükségünk lesz a megfelelő állapotok csoport sebességére is amely a hullámszám és az állapot függvények ismeretében egyszerűen kifejezhető:

$$\begin{aligned} \hbar v^k = \partial_k E = \partial_k \left\langle\phi\right| H_0 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} H_1 + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} H_1^\dagger \left|\phi\right\rangle = \\ = \left\langle\partial_k \phi\right| \ldots \left|\phi\right\rangle + \left\langle\phi\right| \ldots \left|\partial_k \phi\right\rangle + \mathrm{i}\left\langle\phi\right| \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} H_1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} H_1^\dagger \left|\phi\right\rangle = \\ = \mathrm{i}\left\langle\phi\right| \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} H_1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} H_1^\dagger \left|\phi\right\rangle . \end{aligned}$$

Vegyük észre hogy a (69) egyenletnek $2N$ megoldása van. Ezeket célszerű két kategória szerint rendezni. Először is vannak propagáló azaz $\mathrm{Im}(k) = 0$ állapotok illetve lecsngő tehát $\mathrm{Im}(k) \neq 0$ állapotok. Továbbá mind a két kategóriában vannak jobbos illetve balos állapotok annak megfelelően hogy csoportsebességük szerint melyik irányba propagálnak illetve hullámszámuk szerint hogyan csengenek le. Ezt a felosztást az alábbi táblázatban foglaljuk össze.

	bal$(n = 1 \ldots N)$	jobb $(n = 1 \ldots N)$
propagál	$v^{k_n} < 0$ és $\mathrm{Im}(k) = 0$	$v^{k_n} > 0$ és $\mathrm{Im}(k) = 0$
lecseng	$\mathrm{Im}(k) < 0$	$\mathrm{Im}(k) > 0$
új index	$k_n^B(E), v_n^B(E), \left|B_n(E)\right\rangle$	$k_n^J(E), v_n^J(E), \left|J_n(E)\right\rangle$

Itt bevezettük a $k_n^\mu, v_n^\mu, |\mu_n\rangle$ jelölést ami $\mu = J$ esetén a jobbos állapotok illetve $\mu = B$ esetén a balos állapotok megfelelő tulajdonságait indexeli. Jegyezzük meg hogy adott energián a $|\mu_n\rangle$ általában nem ortogonálisak egymásra. (Szemben az azonos hullámszámhoz tartozó állapotvektorokkal melyek mindig ortogonális rendszert allkotnak.) A $|\mu_n\rangle$-ek ra ortogonális, úgynevezett duális vektorok halmazát az

$$\langle \tilde{\mu}_n | \mu_m \rangle = \delta_{n,m} \tag{70}$$

összefüggés definiálja. Vegyük észre hogy gyakorlatban ez egy mátrix invertálással egyenértékű.

6 Green-függvények

A $k_n^\mu, v_n^\mu, |\mu_n\rangle$mennyiségek segítségével, az egydimenziós esethez hasonlóan elkezdhetjük a végtelen vezeték Green-függvényének kiszámítását. Keressük ezt a következő alakban:

$$G_{z,z'} = \sum_{p=1}^N \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^B(z-z')} |B_p\rangle \langle w_p^B| \quad z \le z', \tag{71}$$

$$G_{z,z'} = \sum_{p=1}^N \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^J(z-z')} |J_p\rangle \langle w_p^J| \quad z \ge z'. \tag{72}$$

A Green-fügvény $z = z'$ kontinuitásából következik, hogy

$$\sum_{p=1}^N |B_p\rangle \langle w_p^B| = \sum_{p=1}^N |J_p\rangle \langle w_p^J| = \sum_{p=1}^N |\mu_p\rangle \langle w_p^\mu| . \tag{73}$$

A (66) Schrödinger-egyenlethez tartozó Green-egyenlet az

$$(E \cdot I - H_0)G_{z,z} - H_1 G_{z+1,z} - H_1^\dagger G_{z-1,z} = I \tag{74}$$

alakot ölti. Behelyettesítve a (72) ansatz-ot kapjuk, hogy

$$\sum_{n=1}^N \left[(E \cdot I - H_0) |J_n\rangle \langle w_n^J| - H_1 |J_n\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_n^J} \langle w_n^J| - H_1^\dagger |B_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n^B} \langle w_n^B| \right] = I. \tag{75}$$

Felhasználva hogy a $|\mu_n\rangle$ állapotok kielégítik a Schrödinger egyenletet, azaz

$$\sum_{n=1}^N \left[(E \cdot I - H_0) |\mu_n\rangle \langle w_n^\mu| - H_1 |\mu_n\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_n^\mu} \langle w_n^\mu| - H_1^\dagger |\mu_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n^\mu} \langle w_n^\mu| \right] = 0, \tag{76}$$

a Green-egyenlet a

$$\sum_{n=1}^N H_1^\dagger \left[|J_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n^J} \langle w_n^J| - |B_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n^B} \langle w_n^B| \right] = I \tag{77}$$

alakra egyszerűsödik. A duális vektorok definíciójából egyenesen következik, hogy

$$\sum_{p=1}^N \langle \tilde{\mu}_n | \mu_p\rangle \langle w_p^\mu| = \langle w_n^\mu| . \tag{78}$$

Ezt behelyettesítve (77)-be:

$$\sum_{n=1}^N H_1^\dagger \left[|J_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n^J} \left(\left\langle \tilde{J}_n \right| \sum_{p=1}^N |J_p\rangle \langle w_p^J| \right) - |B_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_{B_n}} \left(\left\langle \tilde{B}_n \right| \sum_{p=1}^N |B_p\rangle \langle w_p^B| \right) \right] = I, \tag{79}$$

most kihasználva (73) azt kapjuk hogy

$$\sum_{n=1}^N H_1^\dagger \left[|J_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n^J} \left\langle \tilde{J}_n \right| - |B_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_{B_n}} \left\langle \tilde{B}_n \right| \right] \sum_{p=1}^N |\mu_p\rangle \langle w_p^\mu| = I. \tag{80}$$

Tehát

$$\sum_{p=1}^N |\mu_p\rangle \langle w_p^\mu| = \left(\sum_{n=1}^N H_1^\dagger \left[|J_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n^J} \left\langle \tilde{J}_n \right| - |B_n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_{B_n}} \left\langle \tilde{B}_n \right| \right] \right)^{-1} = \mathcal{V}^{-1}, \tag{81}$$

azaz a keresett együttható vektorok az egyszerű

$$\langle w_p^\mu| = \langle \tilde{\mu}_p| \mathcal{V}^{-1} \tag{82}$$

alakot öltik, amivel a végtelen vezeték Green-függvénye

$$
\begin{aligned}
G_{z,z'} =& \quad \sum_{p=1}^{N} |B_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^B(z-z')} \left\langle \tilde{B}_p \right| \mathcal{V}^{-1} \quad z \leq z' \\
G_{z,z'} =& \quad \sum_{p=1}^{N} |J_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^J(z-z')} \left\langle \tilde{J}_p \right| \mathcal{V}^{-1} \quad z \geq z'.
\end{aligned}
\tag{83}
$$

Amint azt láttuk az egydimenziós szórásproblémánál is, szükségünk lesz a félvégtelen vezeték felületi Green-függvényére. Tegyük fel hogy a vezeték $z \geq z_0$ darabjai hiányoznak, azaz keressük azt a Green-függvényt melyre

$$
G^B_{z_0,z'} = 0, \quad z_0 \geq z' \tag{84}
$$

teljesül. Keressük a megoldást a

$$
G^B_{z,z'} = G_{z,z'} - \sum_{p=1}^{N} |B_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^B z} \left\langle \Delta_p^B(z', z_0) \right| \tag{85}
$$

alakban. Tehát

$$
G_{z_0,z'} = \sum_{p=1}^{N} |B_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^B z_0} \left\langle \Delta_p^B \right| . \tag{86}
$$

a (83) Green-függvény alakját és a duális vektorok definícióját felhasználva ez tovább alakítható:

$$
\sum_{p=1}^{N} |J_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^J(z_0-z')} \left\langle \tilde{J}_p \right| \mathcal{V}^{-1} = \sum_{p=1}^{N} |B_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^B z_0} \left\langle \Delta_p^B \right| , \tag{87}
$$

$$
\left\langle \tilde{B}_q \right| \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_q^B z_0} \sum_{p=1}^{N} |J_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^J(z_0-z')} \left\langle \tilde{J}_p \right| \mathcal{V}^{-1} = \left\langle \Delta_q^B \right| , \tag{88}
$$

$$
G^B_{z,z'} = G_{z,z'} - \sum_{p,q=1}^{N} |B_q\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_q^B(z-z_0)} \left\langle \tilde{B}_q \, | J_p \right\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^J(z_0-z')} \left\langle \tilde{J}_p \right| \mathcal{V}^{-1}. \tag{89}
$$

A $z = z' = z_0 - 1$ felületen tehát a Green-fügvény a

$$
G^B_{z_0-1,z_0-1} = \left[I - \sum_{p,q=1}^{N} |B_q\rangle \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_q^B} \left\langle \tilde{B}_q \, | J_p \right\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^J} \left\langle \tilde{J}_p \right| \right] \mathcal{V}^{-1} \tag{90}
$$

alakot ölti. Hasonlóan ha a $z \leq z_0$ darabok hiányoznak a vezetékből, azaz

$$
G^J_{z_0,z'} = 0, \quad z_0 \leq z', \tag{91}
$$

akkor a

$$
G^J_{z,z'} = G_{z,z'} - \sum_{p=1}^{N} |J_p\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p^J z} \left\langle \Delta_p^J(z', z_0) \right| \tag{92}
$$

ansatzból kapjuk hogy a felületi Green-függvény a

$$
G^J_{z_0-1,z_0-1} = \left[I - \sum_{p,q=1}^{N} |J_q\rangle \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_q^J} \left\langle \tilde{J}_q \, | B_p \right\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_p^J} \left\langle \tilde{B}_p \right| \right] \mathcal{V}^{-1} \tag{93}
$$

alakra hozható.

7 A Fisher-Lee relációk álltalánosított vezetékek jelenlétében

Amint az egydimenziós esetnél már láttuk, a vezetékek és a szórásitartomány Green-függvényének ismeretében a Dyson egyenlet segítségével meghatározható a szórás probléma Green-függvénye. Ezen Green-függvény ismeretében a Fisher-Lee relációk segítségével kaptuk meg a szórásprobléma S szórási mátrixát. A fennt bevezetett $v_n^\mu, |\mu_n\rangle, \langle\tilde{\mu}_p|, \mathcal{V}$ mennyiségek és a teljes G Green-függvény ismeretében az S mátrix az alábbi alakot ölti:

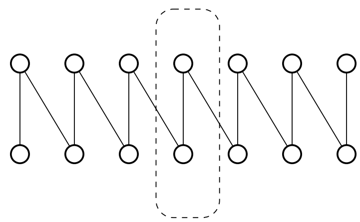
$$
S_{\alpha_p,\beta_q} = \left\langle \tilde{\alpha}_p^- \right| G_{\alpha|_0,\beta|_0} \mathcal{V}_\beta - \delta_{\alpha,\beta} \left| \beta_q^+ \right\rangle \sqrt{\frac{\left|v_p^{\alpha-}\right|}{\left|v_q^{\beta+}\right|}}. \tag{94}
$$

Itt a görög indexek a megfelelő vezetékeket jelölik, $+$ jel a szórási tartomány felé haladó, $-$pedig a szórási tartományból érkező állapotokat indexeli. A $G_{\alpha|_0,\beta|_0}$mennyiségek pedig a teljes Green-függvény megfelelő felületi elemeit jelölik. S_{α_p,β_q} tehát a β-adik vezeték q-adik csatornájából érkező részecske α-adik vezeték p-edik csatornájába történő szórásához tartozó valószínűségi amplitúdó.

8 Gyakran felmerülő problémák és orvoslásuk

Ebben a részben a fenn tárgyalt formalizmus két alapvető problémáját fogjuk tárgyalni. Az első probléma a H_1 mátrixok invertálásával kapcsolatos, a második probléma az áram operátor és a spektrum degenerált részén felvett alakjából adódik.

8.1 A H_1 probléma



7. ábra. A H_1 probléma illusztrációja. Jelölje a szaggatott vonallal bekerített rész a vezeték elemi celláját. Legyen az on-site energia mindenhol ϵ_0 a hopping pedig $-\gamma$. Könnyen belátható hogy erre az esetre a H_1 mátrix szingulárisnak adódik. Vegyük észre hogy ha a rendszert „széthúzzuk” a már jól ismert egydimenziós lánc problémájára jutunk.

Vegyük észre hogy a (69) sajátérték probléma megoldásához sükségünk van a H_1mátrix inverzére. Általában ez a mátrix nem feltétlenül invertálható. Példának okáért vizsgáljuk meg a 7. ábrán vázolt szituációt. Ekkor a H_1 mátrix a

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\gamma & 0 \end{pmatrix} \tag{95}$$

alakot ölti. Ez a mátrix jól láthatóan szinguláris, nem létezik inverze. Egyszerűen belátható ha a felső sort kidecimáljuk akkor a probléma az egydimenziós vezeték alakjára hozható ahol az on-site energia illetve a hopping a

$$\epsilon_0' = \epsilon_0 + 2\frac{\gamma^2}{E-\epsilon_0}, \quad \gamma' = \frac{\gamma^2}{E-\epsilon_0} \tag{96}$$

alakot öltik. Általában is igaz az az állítás hogy H_1 invertálhatatlanságából fakadó problémát egy jól kitalált decimálással lehet orvosolni. Első ránézésre azonban nem mindig triviális kitalálni a megfelelő decimálási stratégiát. Amint azt a 7. ábra is illusztrálja a H_1 probléma akkor merül fel ha a vezeték valójában kevesebb módust tartalmaz mint ahogy azt első ránézésre vélnénk.

Egy általános decimálási procedúra kidolgozását jelentősen megkönnyíti ha képezzük a H_1 mátrix úgynevezett szinguláris érték dekompozícióját, azaz legyen

$$H_1 = U\Sigma V^\dagger \tag{97}$$

ahol U és V hermitikus mátrixok illetve Σ egy diagonális mátrix nem negatív valós elemekkel. Minden mátrix felbontható ilyen alakban. Könnyen belátható, hogy H_1 szingularitása Σ egy vagy akár több diagonális elemének nulla voltának következménye. Általában a konvenció szerint a Σ diagonális elemei csökkenő sorrendbe vannak rendezve.

Vezessük be a következő unitér transzformációkat:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & U & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & V & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{98}$$

Ha $\hat{U}$ val eltranszformáljuk a (64) Hamilton operátort akkor H_1 illetve H_0 az alábbi módon transzformálódnak

$$H_1' = U^\dagger H_1 U = \Sigma V^\dagger U, \text{illetve} \quad H_0' = U^\dagger H_0 U. \tag{99}$$

Ha pedig a transzformációt a $\hat{V}$ operátorral hajtjuk végbe akkor a

$$H_1' = V^\dagger H_1 V = V^\dagger U \Sigma, \text{illetve} \quad H_0' = V^\dagger H_0 V. \tag{100}$$

transzformált mennyiségekre jutunk. Vizsgáljuk azt az esetet amikor a Σ mátrix első n eleme nem zérus a maradék $N-n$ pedig nulla. Ekkor ha az $\hat{U}$ transzformációt alkalmazzuk a teljes Hamilton-operátorra akkor a transzformált menyiségek a következő struktúrát fogják ölteni

$$H_0' = \begin{pmatrix} H_0^m & W \\ W^\dagger & H_0^d \end{pmatrix}, \text{illetve} \quad H_1' = \begin{pmatrix} K & L \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{101}$$

Itt H_0^m és K $n \times n$-es mátrixok ,H_0^d $(N-n) \times (N-n)$-es, W és L pedig $n \times (N-n)$-es.

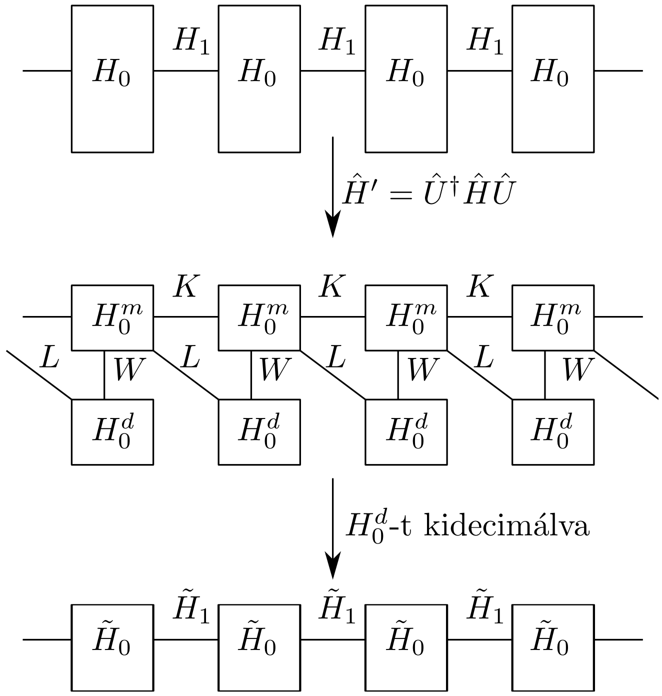


Figure 8: A H_1 probléma megoldása $\hat{U}$-val való transzformáció decimálás segítségével.

Az 8. ábra segítségével könnyen leolvasható hogy miután minden elemi cellában kidecimáltuk a H_0^d-vel leírt szabadsági fokokat az új

$$\tilde{H}_0 = H_0^m + W(EI - H_0^d)^{-1} W^\dagger + L(EI - H_0^d)^{-1} L^\dagger, \tag{102}$$

$$\tilde{H}_1 = K + L(EI - H_0^d)^{-1} W^\dagger \tag{103}$$

mennyiségek segítségével már nem ütközünk invertálási problémákba.

Ha $\hat{V}$ vel transzformáljuk a Hamilton-operátort akkor a transzformált mennyiségek struktúrája

$$H_0' = \begin{pmatrix} H_0^m & W \\ W^\dagger & H_0^d \end{pmatrix} \text{,illetve} \quad H_1' = \begin{pmatrix} K & 0 \\ L & 0 \end{pmatrix} \tag{104}$$

lesz. Ezekből decimálás után a

$$\tilde{H}_0 = H_0^m + W(EI - H_0^d)^{-1} W^\dagger + L^\dagger (EI - H_0^d)^{-1} L, \tag{105}$$

$$\tilde{H}_1 = K + W(EI - H_0^d)^{-1} L \tag{106}$$

redukált Hamilton-operátort kapjuk.

8.2. Az áram operátor és a spektrum degenerált alterei.

Felírva a (64) Hamilton-operátorhoz tartozó áramoperátort belátható hogy az adott energián jelenlévő síkhullám jellegű állapotok lineárkombinációja diagonalizálják azt, feltéve hogy egy adott energián egy adott hullámszámhoz csak egy állapot tartozik. Ekkor a

$$\underline{\Psi} = \sum_p \alpha_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p z} \left| \phi_p \right\rangle . \tag{107}$$

alakú állapot $|\alpha|^2$ áramot képvisel. Ha egy adott k hullámszámhoz több állapot is tartozik akkor a fennti lineárkombináció nem feltétlenül diagonalizálja az áramoperátort. Ebben az esetben a szórásmátrix nem lesz unitér. Ezt orvosolni tudjuk ha az adott alteret kifeszítő hullámfüggvényeken végrehajtunke egy unitér transzformációt.

Legyenek $\left|\phi_p^i\right\rangle$ a k_p hullámszámhoz tartozó hullámfüggvény komponensek. Ekkor ebbn az altérben az áramoperátor elemeire a következő kifejezést kapjuk:

$$J_{i,j} = -\mathrm{i} \left\langle \phi_p^i \right| H_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p} - H_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_p} \left| \phi_p^i \right\rangle \tag{108}$$

Diagonalizálja ezt a mátrixot egy X unitér transzformáció, azaz

$$J^d = X^\dagger J X \tag{109}$$

ahol J^dmár diagonális. Ekkor a keresett állapotok melyek diagonalizálják az áram operátort a

$$\left|\phi_p^l\right\rangle = \sum_i X_{i,l} \left|\phi_p^i\right\rangle \tag{110}$$

alakban állnak elő.