

# **Skript zur Vorlesung**

## **Nanoelektronik**

Institut für Theoretische Festkörperphysik

Universität Karlsruhe

Vorläufige Version: SS09 - in Bearbeitung

# Inhaltsverzeichnis

|  |           |
|--|-----------|
| <b>1 Rückblick und Einführung</b>                          | <b>4</b>  |
| 1.1 Allgemeine Vorbemerkungen . . . . .                    | 4         |
| 1.1.1 Typische Längenskalen . . . . .                      | 4         |
| 1.1.2 Typische Energieskalen . . . . .                     | 5         |
| 1.1.3 Vergleich . . . . .                                  | 6         |
| 1.2 Systeme und Technologie . . . . .                      | 7         |
| 1.2.1 Metalle und Halbleiter . . . . .                     | 7         |
| 1.2.2 Herstellung von Heterostrukturen . . . . .           | 7         |
| 1.3 Zustandsdichte . . . . .                               | 10        |
| 1.4 Leitfähigkeit . . . . .                                | 13        |
| 1.4.1 Drude-Leitfähigkeit . . . . .                        | 13        |
| 1.5 Boltzmannsche Transporttheorie . . . . .               | 14        |
| 1.5.1 Boltzmann-Gleichung . . . . .                        | 14        |
| 1.5.2 Boltzmann-Leitfähigkeit . . . . .                    | 15        |
| 1.5.3 Diffusiver Transport . . . . .                       | 16        |
| 1.6 Sharvin-Leitwert eines Punktkontaktes . . . . .        | 18        |
| 1.7 Leitwert eines 1-dimensionalen Leiters . . . . .       | 19        |
| <b>2 Leitwert als Streuproblem</b>                         | <b>21</b> |
| 2.1 Typische Systeme, Konzepte . . . . .                   | 21        |
| 2.2 Eindimensionaler Leiter zwischen Reservioren . . . . . | 22        |
| 2.3 Quasi-eindimensionaler Leiter . . . . .                | 23        |
| 2.4 Barrieren im Leiter . . . . .                          | 24        |
| 2.5 Die Formel von Landauer . . . . .                      | 25        |
| 2.6 Multikanalproblem . . . . .                            | 27        |
| 2.7 Adiabatische Einschnürung . . . . .                    | 28        |
| 2.8 Multi-Kontakt-Systeme . . . . .                        | 31        |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 2.9      | S-Matrix für Streuung . . . . .                              | 34        |
| 2.9.1    | Reihenschaltung . . . . .                                    | 38        |
| 2.9.2    | Reihenschaltung für viele Kanäle . . . . .                   | 41        |
| 2.10     | Resonantes Tunneln . . . . .                                 | 42        |
| 2.11     | Übergang von kohärentem nach klassischem Verhalten . . . . . | 44        |
| 2.12     | Anderson Lokalisierung . . . . .                             | 47        |
| <b>3</b> | <b>Quanten-Hall-Effekt</b>                                   | <b>49</b> |
| 3.0.1    | (Zu) einfaches Bild . . . . .                                | 49        |
| 3.0.2    | Kritik an der bisherigen Herleitung und Diskussion . . . . . | 51        |
| 3.0.3    | Unordnung und lokalisierte Zustände . . . . .                | 52        |
| 3.0.4    | Topologisches Argument . . . . .                             | 53        |
| 3.1      | Der fraktionelle Quanten-Hall-Effekt . . . . .               | 54        |
| 3.2      | Randkanäle . . . . .   | 54        |
| 3.3      | QHE in Graphen . . . . .                                     | 60        |
| 3.4      | Kompressible und inkompressible Bereiche . . . . .           | 60        |
| <b>4</b> | <b>Molekulare Elektronik</b>                                 | <b>63</b> |
| <b>5</b> | <b>Quanteninterferenzeffekte</b>                             | <b>64</b> |
| 5.1      | Der Aharonov-Bohm-Effekt . . . . .                           | 65        |
| 5.2      | Schwache Lokalisierung . . . . .                             | 67        |
| 5.2.1    | Rückstreuwahrscheinlichkeit . . . . .                        | 67        |
| 5.2.2    | Diffusionsgleichung . . . . .                                | 69        |
| 5.2.3    | Schwache Lokalisierung im Magnetfeld . . . . .               | 71        |
| 5.2.4    | Sharvin-Sharvin-Experiment . . . . .                         | 73        |
| 5.3      | Universelle Leitwertfluktuationen . . . . .                  | 74        |
| <b>6</b> | <b>Spintronik</b>  | <b>77</b> |
| 6.1      | Majoritäts- und Minoritätsspin . . . . .                     | 77        |
| 6.2      | Tunnel-Magnetowiderstand (TMR) . . . . .                     | 78        |
| 6.2.1    | Jullière-Modell . . . . .                                    | 78        |
| 6.2.2    | Beliebiger Polarisationswinkel . . . . .                     | 80        |
| 6.2.3    | Spinakkumulation . . . . .                                   | 82        |
| 6.2.4    | Spinrelaxation . . . . .                                     | 84        |
| 6.3      | Riesenmagnetowiderstand (GMR) . . . . .                      | 85        |
| 6.3.1    | CPP - Konfiguration . . . . .                                | 86        |
| 6.3.2    | CIP - Konfiguration . . . . .                                | 86        |
| 6.4      | Spin-Bahn-Kopplung . . . . .                                 | 87        |

|  |           |
|--|-----------|
| <b>7 Einzelelektroneffekte</b>                             | <b>88</b> |
| 7.1 Der Tunnel - Hamiltonoperator . . . . .                | 88        |
| 7.2 Einzelelektroneneffekte . . . . .                      | 90        |
| 7.3 Elektronenbox, Coulomb-Blockade . . . . .              | 91        |
| 7.3.1 Tunnelrate . . . . .                                 | 92        |
| 7.4 Einzelelektron-Transistor . . . . .                    | 94        |
| 7.5 Master-Gleichung . . . . .                             | 96        |
| 7.6 Cotunneling processes . . . . .                        | 98        |
| 7.6.1 Broadening of the steps . . . . .                    | 100       |
| 7.7 Influence of the electromagnetic environment . . . . . | 101       |
| 7.7.1 The model Hamiltonian . . . . .                      | 102       |
| 7.7.2 The single-electron tunneling rate . . . . .         | 104       |
| 7.7.3 General properties . . . . .                         | 105       |
| 7.7.4 The effect of an Ohmic resistor . . . . .            | 107       |
| 7.8 Quantenpunkte . . . . .                                | 109       |
| 7.8.1 Energieskalen . . . . .                              | 111       |
| 7.8.2 Addition Spectrum . . . . .                          | 111       |
| 7.8.3 Transportspektroskopie . . . . .                     | 112       |
| 7.8.4 Tunnelraten . . . . .                                | 114       |

# Kapitel 1

## Rückblick und Einführung

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

### 1.1 Allgemeine Vorbemerkungen

#### 1.1.1 Typische Längenskalen

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

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

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

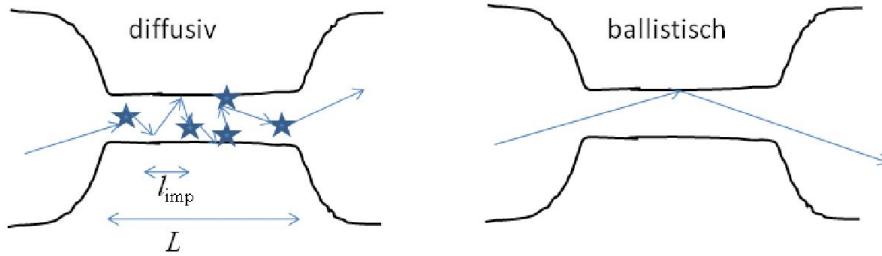


Abbildung 1.1: Vergleich zwischen diffusivem und ballistischem Transport zwischen zwei Reservoirn.

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

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

Im folgenden eine Tabelle mit wichtigen mesoskopischen Längenskalen:

|                                |   |
|--------------------------------|---|
| $1 \text{ \AA}=0.1 \text{ nm}$ | Abstand zwischen Atomen   |
| $1 \text{ nm}$                 | Fermiwellenlänge in Metallen  |
| $1\text{nm}-10\text{nm}$       | mittlere freie Weglänge in diffusiven Metallen  |
| $10\text{nm}$                  | mittlere freie Weglänge in polykristallinen Metallfilmen  |
| $10 \text{ nm}-100 \text{ nm}$ | Fermiwellenlänge in Halbleitern   |
| $100 \text{ nm}-1 \mu\text{m}$ | kommerzielle Halbleiterbauelemente  |
| $10 \mu\text{m}$               | Phasenkohärenzlänge in sauberen Metallfilmen  |
| $100 \mu\text{m}$              | mittlere freie Weglänge und Phasenkohärenzlänge in Halbleitern mit hohen Mobilitäten, bei $T < 4 \text{ K}$ |
| $1\text{mm}$                   | mittlere freie Weglänge in Quanten-Hall-Systemen  |

### 1.1.2 Typische Energieskalen

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

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

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

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

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

### 1.1.3 Vergleich

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

## 1.2 Systeme und Technologie

### 1.2.1 Metalle und Halbleiter

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

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

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

### 1.2.2 Herstellung von Heterostrukturen

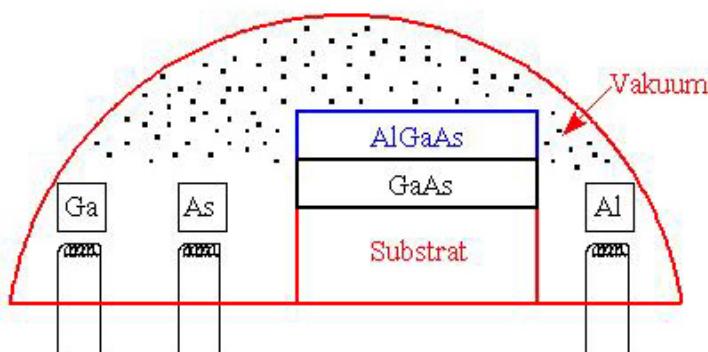


Abbildung 1.2: Bei Molekularstrahlepitaxie werden Materialien auf das Substrat aufgedampft.

Bei der Elektronenstrahl-Lithographie wird zunächst ein elektronensensitiver Film eines “Resist”-Materials, z.B. das Polymer PMMA, auf ein Trägermaterial aufgebracht (Abb. 1.2). Danach wird ein fokussierter Elektronenstrahl über die Probe bewegt, um selektiv das geplante Muster der Nanostruktur auf den Film zu schreiben.

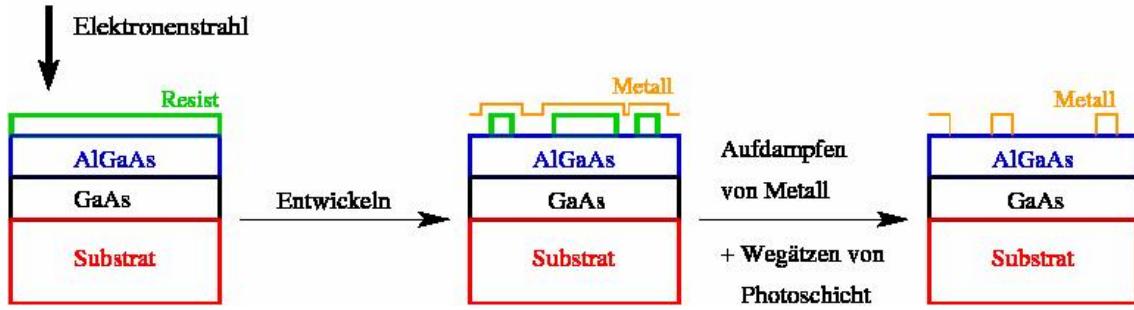


Abbildung 1.3: Mit Hilfe der Elektronenstrahl-Lithographie wird eine laterale Strukturierung erzeugt.

Der Film wird daraufhin entwickelt, die bestrahlten Bereiche verschwinden und legen das Trägermaterial frei. Beim Metall-lift-off-Verfahren (Abbn. 1.3 und 1.4) wird daraufhin die Probe mit Metall bedampft und schließlich der restliche Resist in einem Lösungsmittel aufgelöst. Das darüberliegende Metall kann dann durch den Lift-off-Schritt entfernt werden, und nur die metallische Nanostruktur bleibt zurück. Eine Alternative ist, erst eine Metallschicht aufzudampfen, dann den Resist, und nach Bestrahlung mit Elektronen und Entwickeln die freigelegten Metallbereiche mit z.B. Chlor-Ionen wegzuätzen (Abb. 1.4).

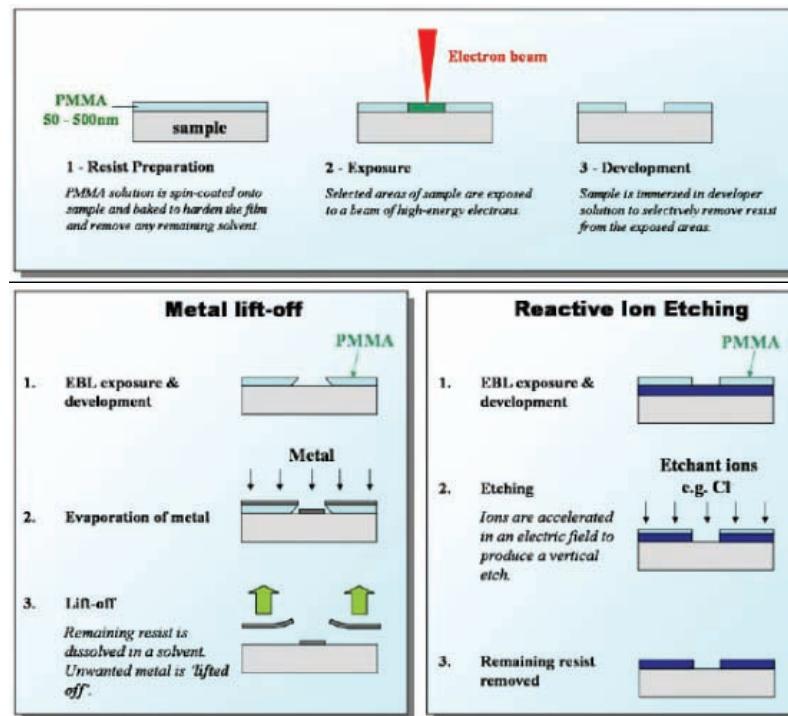


Abbildung 1.4: Der Prozess der Elektronenstrahl-Lithographie. (Quelle: <http://www.shef.ac.uk/eee/research/ebl/principles.html>)

## Zweidimensionales Elektronengas

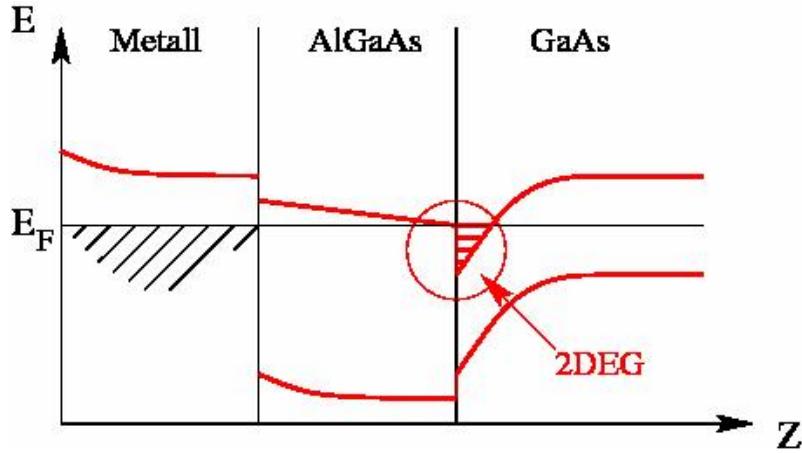


Abbildung 1.5: Beispiel einer Heterostruktur, die ein zweidimensionales Elektronengas (2DEG) ergibt.

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

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

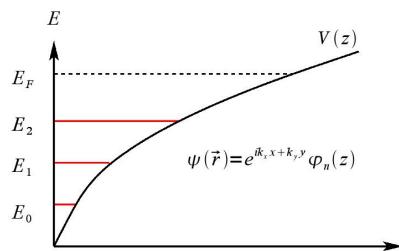


Abbildung 1.6: Energien der Eigenzustände im Dreieckspotenzial  $V(z)$ .

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

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

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

Mit zunehmender Breite oder Energie nimmt die Zahl der Zustände zu ( $m = 0, 1, 2, \dots$ ), und man geht zu einer quasi-eindimensionalen und schließlich zweidimensionalen Situation über.

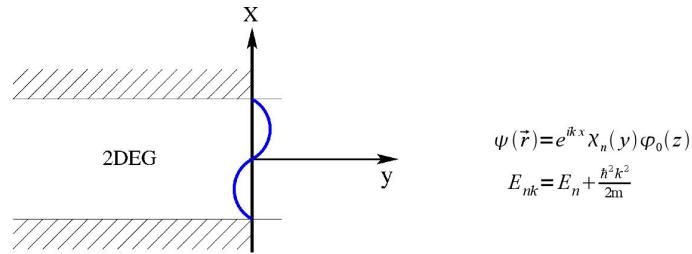


Abbildung 1.7: Durch laterale Strukturierung lassen sich auch eindimensionale oder quasi-eindimensionale Strukturen erzeugen.

### 1.3 Zustandsdichte

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

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

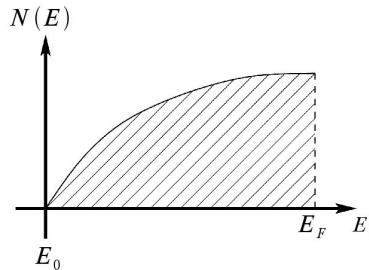
#### 3-dimensional:

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

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

Durch Vergleich finden wir die Zustandsdichte (pro Volumen)

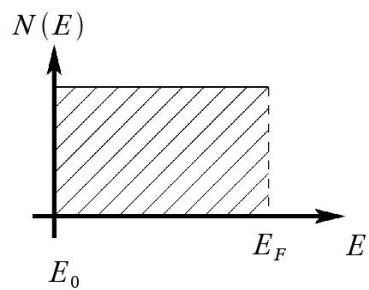
$$N^{3d}(E) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot \sqrt{2m(E - E_0)} \Theta(E - E_0)$$



**2-dimensional:**

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

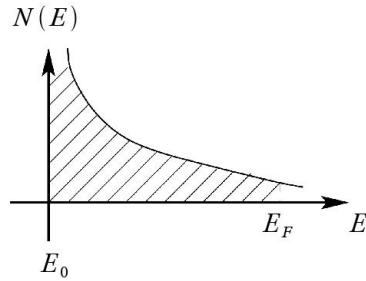
$$\Rightarrow N^{2d}(E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot \Theta(E - E_0)$$



### 1-dimensional:

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

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



### quasi-2-dimensional:

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

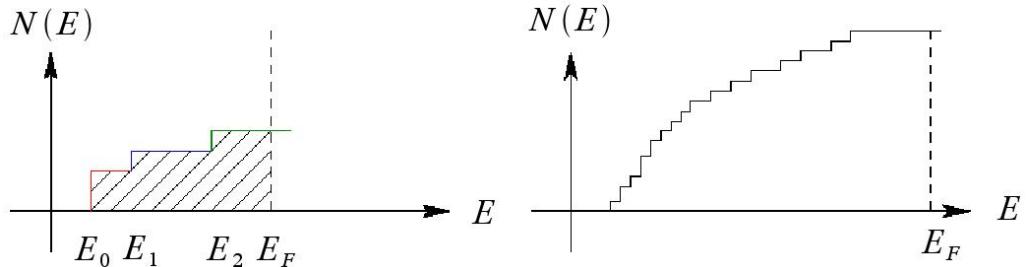


Abbildung 1.8: Energien und Zustandsdichte eines quasi-2-dimensionalen Systems

### quasi-1-dimensional:

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

Allgemein gilt in  $d$  Dimensionen

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

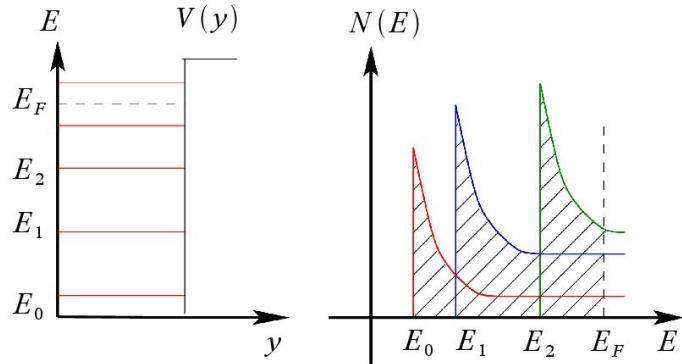


Abbildung 1.9: Zustände und Zustandsdichte eines quasi-1-dimensionalen Systems

## 1.4 Leitfähigkeit

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

### 1.4.1 Drude-Leitfähigkeit

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

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

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

Hier ist  $n$  die Elektronendichte und  $v$  die Elektronengeschwindigkeit. Die innerhalb der Zeit  $\tau$  zurückgelegte Wegstrecke bezeichnet man als mittlere freie Weglänge,  $l = v \cdot \tau$ . Somit lässt sich die Drude-Leitfähigkeit für Gleich- und Wechselstrom berechnen.

$$\text{Gleichstrom: } \vec{j} = \frac{n e^2 \tau}{m} \vec{E} = \sigma \vec{E} \Rightarrow \sigma = \frac{n e^2 \tau}{m}$$

$$\text{Wechselfelder: } \vec{j}(\omega) = \frac{n e^2}{m(\frac{1}{\tau} + i\omega)} \vec{E}(\omega) \Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{n e^2 \tau}{m(1 + i\omega\tau)}$$

## 1.5 Boltzmannsche Transporttheorie

### 1.5.1 Boltzmann-Gleichung

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

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

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

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

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

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

$$\left( \partial_t + \frac{\vec{p}}{m} \nabla_{\vec{r}} + e \vec{E} \nabla_{\vec{p}} \right) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (1.1)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{imp}} &= -n_{\text{imp}} v_F \int d\Omega_{\vec{p}'} \sigma(\vartheta_{\vec{p}, \vec{p}'}) [f(\vec{p}) - f(\vec{p}')] \\ &= -\frac{1}{\tau_{\text{imp}}} f(\vec{p}) + n_{\text{imp}} v_F \int d\Omega_{\vec{p}'} \sigma(\vartheta_{\vec{p}, \vec{p}'}) f(\vec{p}') \Big|_{\epsilon_{\vec{p}'} = \epsilon_{\vec{p}}} \end{aligned} \quad (1.2)$$

mit

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

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

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} f \right)_{\text{imp}} = -\frac{1}{\tau_{\text{imp}}} [f(\vec{p}) - \langle f(\vec{p}) \rangle] \quad (1.3)$$

wobei

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

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

Häufig genügt es, für das Stoßintegral einen Relaxationsansatz zu machen

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

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

### 1.5.2 Boltzmann-Leitfähigkeit

Aus der Boltzmann-Gleichung lässt sich nun die Leitfähigkeit berechnen. Wir betrachten dazu eine stationäre (zeitunabhängige) und räumlich homogene Situation. Ein homogenes angelegtes elektrisches Feld wird die Verteilungsfunktion im Impulsraum verschieben (Abb. 1.10), dagegen wird die Störstellenstreuungen die Verschiebung rückgängig machen und die Verteilung relaxieren. Entsprechend machen wir den Ansatz

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

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

Einsetzen des Ansatzes  $f = f_0 + \delta f$  in die Gleichung (1.1) mit dem Stoßintegral (1.3) liefert in erster Ordnung in  $\vec{E}$

$$e \vec{E} \cdot \nabla_p f^0 = -\frac{1}{\tau_{\text{imp}}} \delta f$$

und

$$\delta f = -\tau_{\text{imp}} e \vec{E} \cdot \vec{v}_p \frac{\partial f^0}{\partial E}$$

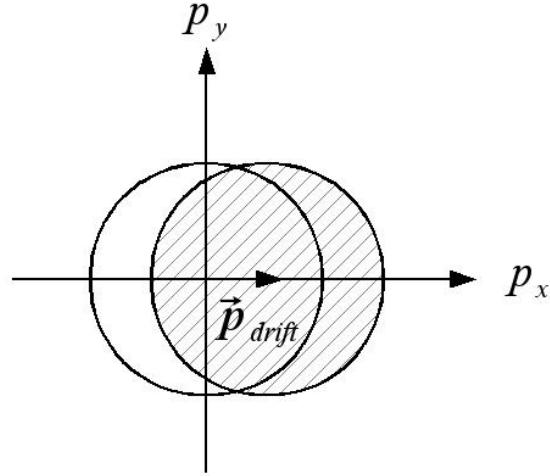


Abbildung 1.10: Verschobene Fermikugel im Impulsraum

Damit erhalten wir für die Stromdichte

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

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

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

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

### 1.5.3 Diffusiver Transport

Wir betrachten eine Situation, für die die Störstellenstreurerate  $\tau_{\text{imp}}^{-1}$  sehr groß ist. Dadurch wird eine im Impulsraum anisotrope Verteilungsfunktion schnell relaxieren, allerdings ändert sich die Energie dabei nicht. Wir führen nun neue Variablen ein, die Energie

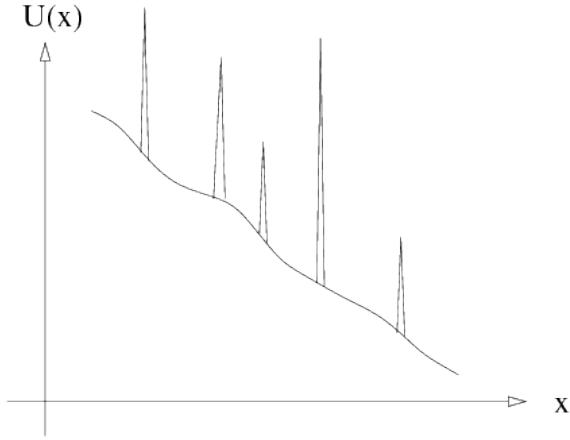


Abbildung 1.11: Möglicher Verlauf des Potentials  $U(\vec{r})$  in einer Dimension. Peaks stellen Störstellen dar.

$E = E_p + U(\vec{r})$  und die Richtung des Impulses  $\hat{p}$ , die dies berücksichtigen. Für diese Funktion  $\tilde{f}(\vec{r}, E = E_p + U(\vec{r}), \hat{p}, t) = f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  gilt

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

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

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

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

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

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

Diese Gleichung lässt sich näherungsweise nach dem anisotropen Anteil lösen

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

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

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

## 1.6 Sharvin-Leitwert eines Punktkontaktes

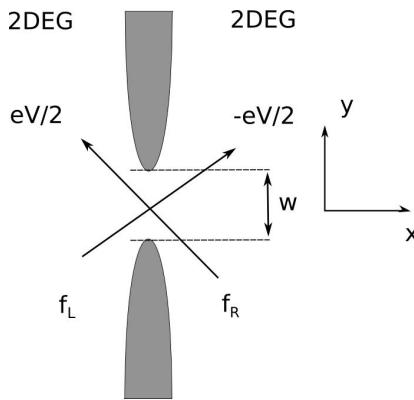


Abbildung 1.12: Ein Punktkontakt in einem 2-dimensionalen Elektronengas

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

$$\begin{aligned} \vec{j} &= 2e \left[ \int_{p_x > 0} \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \vec{v}_p f_L(E_p) + \int_{p_x < 0} \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \vec{v}_p f_R(E_p) \right] \\ &= 2e \int_{p_x > 0} \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \vec{v}_p [f0(E_p - eV/2) - f0(E_p + eV/2)] \end{aligned}$$

Damit wird der Gesamtstrom durch den Punktkontakt

$$I = 2eW \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \cos \varphi \int dEN^{2d}(E)v [f0(E_p - eV/2) - f0(E_p + eV/2)]$$

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

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

mit

$$\begin{aligned} G^{2d} &= 2e2W \frac{2}{2\pi} v_F N^{2d}(E_F) = 2e2W \frac{2}{2\pi} v_F \frac{m}{2\pi\hbar^2} = \frac{W k_F}{\pi} \frac{2e2}{h} \\ &= \frac{W k_F}{\pi} \frac{2}{R_K} \end{aligned} \quad (1.4)$$

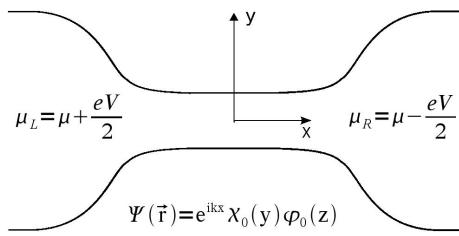
Der erste Term vergleicht die Breite des Kontaktes mit der Fermiwellenlänge. Der zweite Term führt einen "Quantenwiderstand" ein

$$R_K = \frac{h}{e2} = 25,8 \dots k\Omega, \quad (1.5)$$

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

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

## 1.7 Leitwert eines 1-dimensionalen Leiters



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

$$\begin{aligned} I &= 2e \left[ \int_{p_x > 0} \frac{dp}{2\pi\hbar} v_p f_L(E_p) + \int_{p_x < 0} \frac{dp}{2\pi\hbar} v_p f_R(E_p) \right] \\ &= \frac{2e}{2} \int dEN^{1d}(E)v [f0(E_p - eV/2) - f0(E_p + eV/2)] \\ &= \frac{2e}{2} QHE \int dE \frac{2}{2\pi\hbar} \frac{1}{dE/dp} \frac{dE}{dp} [f0(E_p - eV/2) - f0(E_p + eV/2)] \end{aligned}$$

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

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

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

$$G = 2 \frac{e^2}{h} = \frac{2}{R_K}. \quad (1.6)$$

## Kapitel 2

# Leitwert als Streuproblem

In diesem Kapitel werden wir den sogenannten Landauer-Büttiker-Formalismus beschreiben. Zuerst werden wir uns mit typischen Systemen und den Arten des Transports auseinandersetzen, um dannach eine einfache Variante eines solchen Systems zu betrachten, nämlich einen eindimensionalen Leiter zwischen Reservoiren. Mit dem Übergang zu quasi-eindimensionalen Leitern, dem Konzept von Kanälen und der Betrachtung von Barrieren im Leiter kommen wir schließlich zur Formel von Landauer. Anschließend erweitern wir das Ein-Kanal- auf ein Multi-Kanal-Problem, betrachten adiabatische Einschnürungen und kommen zu Multi-Kontakt-Systemen. Abschließend diskutieren wir die S-Matrix für Streuung, den teilweisen Verlust der Phasenkohärenz, resonantes Tunnellen sowie S-Matrix mit Wellenvektor "missmatch" und adiabatische Barrieren.

### 2.1 Typische Systeme, Konzepte

Typische Systeme, die wir in diesem Abschnitt betrachten wollen, sind Reservoirs im Gleichgewicht bei i.a. verschiedenen elektrochemischen Potentialen. Zwischen diesen Reservoirs befindet sich dann das System, das für uns von Interesse ist. Beispiele für solche Systeme sind metallische Nanodrähte, durch Elektroden kontaktierte Moleküle und 2-dimensionale Elektronengase mit lateraler Strukturierung.

Es gibt verschiedene Arten des Transports in solchen Systemen. Die für den Transport wichtigen Längenskalen sind (i) die Ausdehnung des Systems  $L$ , (ii) die mittlere freie Weglänge  $l_{imp}$ , die im wesentlichen durch Störstellen bestimmt wird, sowie die Phasenkohärenzlänge  $L_\phi$ , auf der die Phasenkohärenz, z.B. durch inelastische Streuprozesse, zerstört wird.

**ballistischer Transport**

$$L < l_{imp} < L_\phi$$

**diffusiv, aber kohärent**

$$l_{imp} < L < L_\phi$$

**klassisch**

$$l_{imp} < L_\phi < L$$

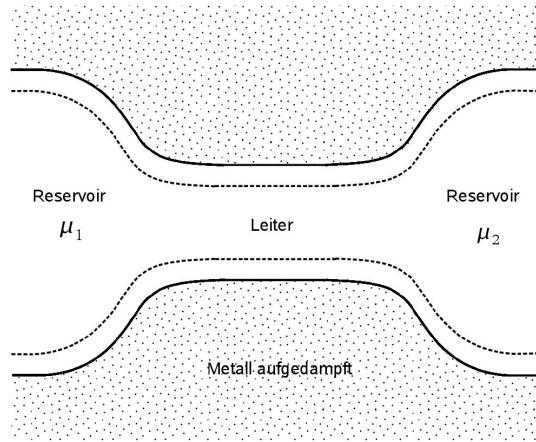


Abbildung 2.1: Leiter zwischen zwei Reservoirs realisiert mit Hilfe eines zweidimensionales Elektronengases mit lateraler Struktur. Elektronische Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}) = \varphi_0(z)\psi(x, y)$  mit dem Grundzustand  $\varphi_0(z)$  bzgl. der z-Richtung.

Die Mesoskopik beschreibt den Bereich zwischen der Mikroskopik, für die atomare Skalen charakteristisch sind, und der Makroskopik. Während im Leiter eine Nichtgleichgewichtssituation herrschen kann, stellt sich das Gleichgewicht in den Reservoirs ein.

## 2.2 Eindimensionaler Leiter zwischen Reservioren

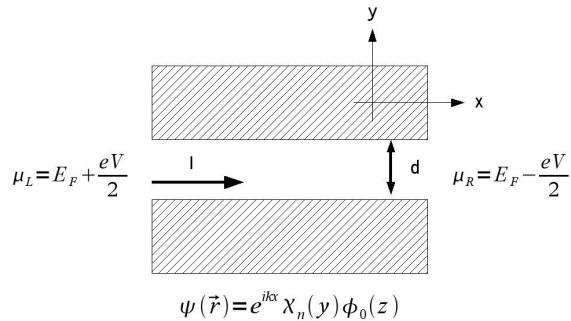


Abbildung 2.2: Die Wellenfunktion in einem eindimensionalen Leiter

Ein einfaches Beispiel bildet das Konzept eines eindimensionalen Leiters, der sich zwischen zwei Reservoirs befindet. Die Reservoirs unterscheiden sich durch unterschiedliche elektrochemische Potentiale  $\mu_1$  und  $\mu_2$ . Der Leiter hat eine Ausdehnung in y-Richtung von  $d$ , wie in Abb. 2.2 dargestellt. Die Wellenfunktion des Elektrons wird dann durch folgende Gleichung beschrieben

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

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

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

Die Gesamtenergie des jeweiligen Zustands berechnet sich dann zu

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## 2.3 Quasi-eindimensionaler Leiter

Gehen wir nun von der Betrachtung von  $n = 1$ , also einem "Kanal", über zu einer Betrachtung mehrerer Kanäle  $n_F$  in einem quasi-eindimensionalen Leiter. Jeder Kanal  $1 \leq n \leq n_F$  habe die Eigenschaft

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

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

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

beiträgt.

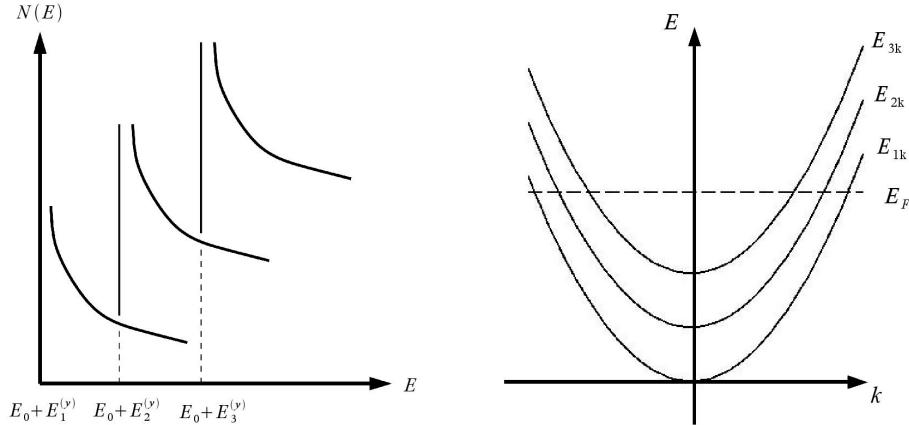


Abbildung 2.3: Zustandsdichte und Energien eines quasi-1d Leiters

## 2.4 Barrieren im Leiter

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

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

Für einen Kanal gilt dann

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

Betrachten wir mehrere Kanäle, so lässt sich dies wie folgt verallgemeinern

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

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

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

Wie wir im nächsten Abschnitt jedoch sehen werden, postulierte Landauer, dass der Leitwert bei einer 2-Punkt-Messung gegeben ist durch

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

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

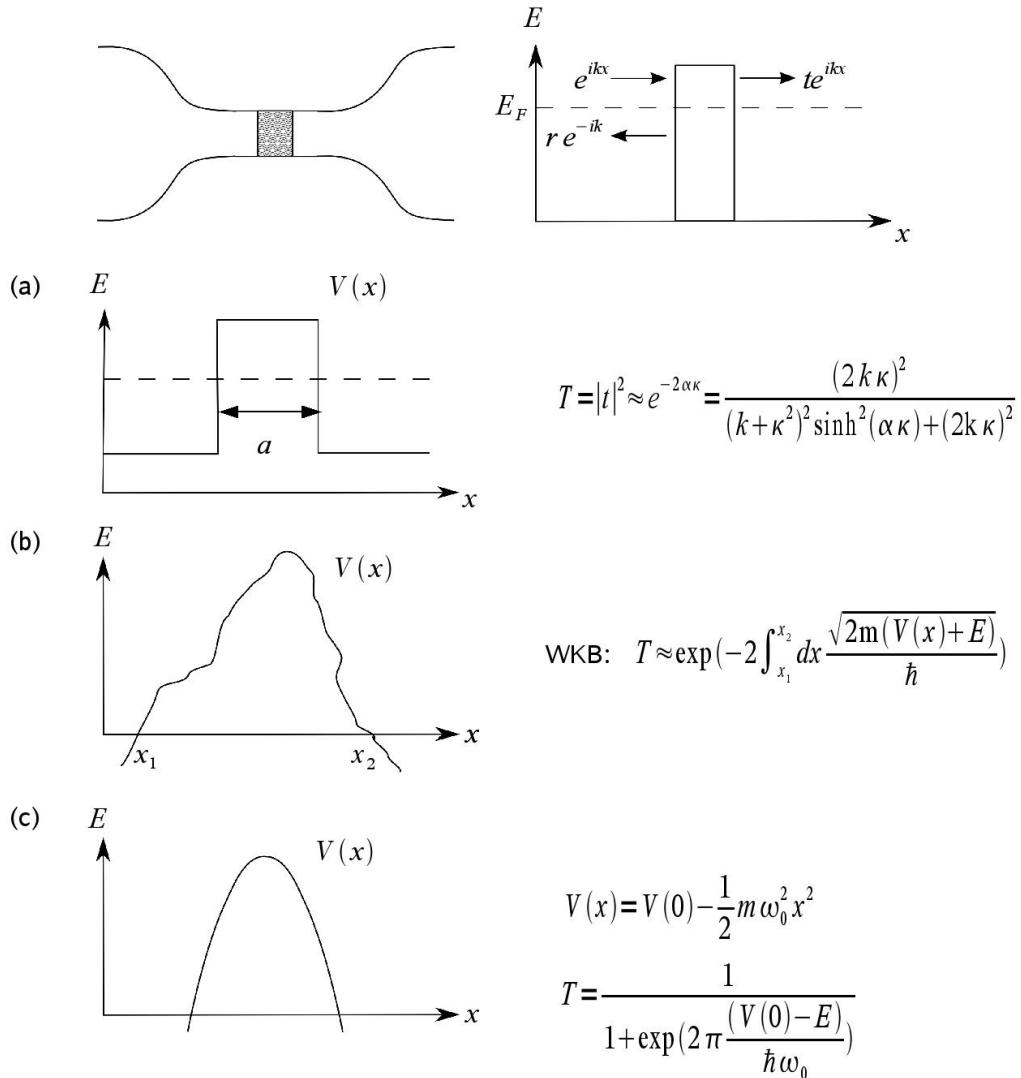


Abbildung 2.4: Beispiele für Barrieren und die Transmissionswahrscheinlichkeiten.

## 2.5 Die Formel von Landauer

Wir betrachten einen Zweipunktkontakt, jedoch erweitern wir ihn um zwei Spannungsmesskontakte mit den chemischen Potentialen  $\mu_L$  und  $\mu_R$ , wie in Abb. 2.5 gezeigt. Wir betrachten einen Kanal, für den der Landauer  $G_{4P} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R}$  postuliert. Der Vorteil dieses Postulats ist, dass für  $T = 1$ , also ideale Transmission,  $G_{4P} = \infty$  ist.

Im Weiteren stellen wir nun die Verteilungsfunktionen  $f^L(E)$  für links und  $f^R(E)$  für rechts der Barriere auf (Abb. 2.5). Jede der Verteilungsfunktionen hat dabei einen nach

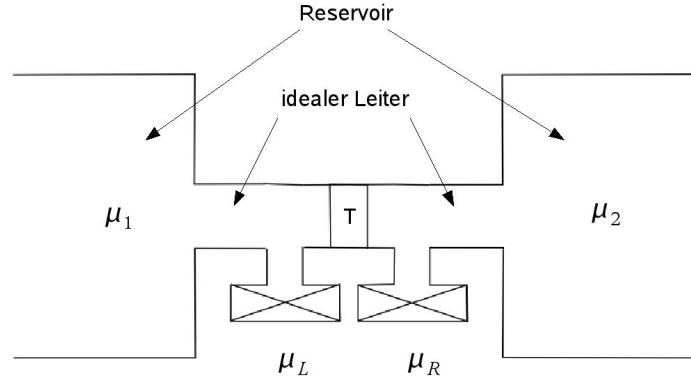


Abbildung 2.5: Der Leitwert eines Zweipunktkontaktes ohne zusätzliche Spannungsmesskontakte ist definiert durch  $G_{2P} = eI/(\mu_1 - \mu_2)$ . Führt man wie dargestellt zusätzliche Spannungsmesskontakte ein, so erhalten wir ein 4-Kontakt-System mit einem durch  $G_{4P} = eI/(\mu_L - \mu_R)$  definierten 4-Punkt-Leitwert.

rechts → und nach links ← laufenden Anteil.

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

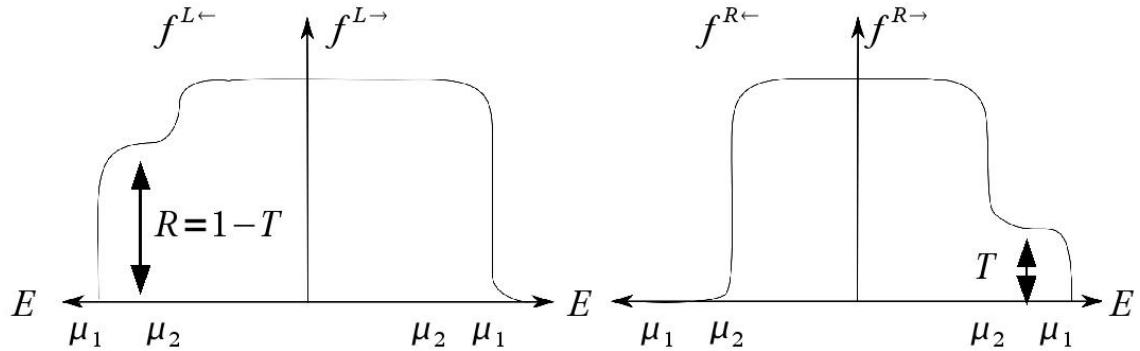


Abbildung 2.6: Die Verteilungsfunktionen links und rechts der Barriere für jeweils Vorwärts- und Rückwärtspropagation.

Die chemischen Potentiale der Spannungsmesskontakte werden so eingestellt, dass kein

Nettostrom fließt. Hierzu muss das Potential bei einer beliebigen Verteilungsfunktion  $f(E)$  gewählt werden als  $\bar{\mu} = \int_0^\infty dE f(E)$ .

Um dies zu beweisen, beobachten wir zunächst, dass für  $f^{th}(E) = \{\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right) + 1\}^{-1}$  offenbar  $\bar{\mu} = \mu$ . Beim Spannungskontakt  $L$  in Abb. 2.5 fordern wir, dass  $I = \frac{2e}{h} \int dE [f(E) - f^{th}(E - \mu_L)] = \frac{2e}{h} [\int dE f(E) - \mu_L]$  verschwindet. Somit muss  $\mu_L = \bar{\mu} = \int dE f(E)$  gewählt werden. Analoge Schlüsse gelten für andere Spannungskontakte.

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

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

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

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

und bestätigt das Postulat von Landauer.

## 2.6 Multikanalproblem

Wir wollen nun das 1-Kanal-Problem auf ein Multi-Kanal-Problem erweitern. Die ersten, die sich mit dieser Frage auseinandersetzen, waren Stone und Szafer [A. Szafer and A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. **62**, 300 (1989)].

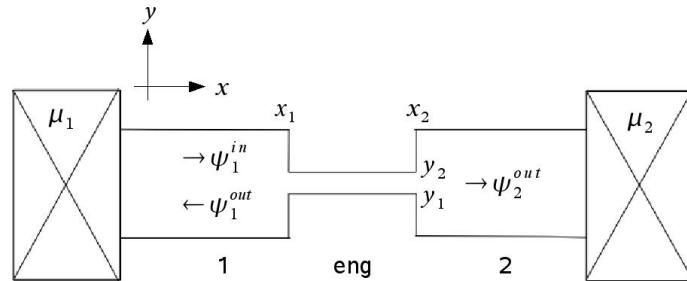


Abbildung 2.7: Weite Zuleitungen in Bereichen 1 und 2 sind durch einen engen Leiter miteinander verbunden.

Wir betrachten das System aus Abb. 2.7 und stellen die Wellenfunktionen der Elektronen für die Bereiche “1”, “eng” und “2” auf.

**weit 1:**

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

**eng:**

$$\psi^{(eng)}(x, y) = \sum_p \chi_p^{(eng)}(y) \left[ \alpha_p e^{ik_p x} + \beta_p e^{-ik_p x} \right]$$

Hierbei sind auch imaginäre  $k_p = i\kappa_p$  möglich, die der Gleichung  $E_F = \varepsilon_p + \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m}$  genügen.

**weit 2:**

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

Die Randbedingungen bei  $x_1$  und  $x_2$  sind im wesentlichen die Stetigkeit der Amplituden und der Ableitungen:

$$\psi^{(i)}(x_i = 0, y) = 0 \text{ für } y \geq y_2 \text{ oder } y \leq y_1$$

$$\psi^{(i)}(x_i = 0, y) = \psi^{(eng)}(x_i = 0, y) \text{ und } \psi'^{(i)}(x_i = 0, y) = \psi'^{(eng)}(x_i = 0, y) \text{ bei } y \in ]y_1, y_2[$$

Dieses Problem ist numerisch lösbar. Somit ist der Leitwert

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

mit  $T_n = \sum_m |t_{mn}|^2$  bei einlaufendem Kanal  $n$  und auslaufenden Kanälen  $m$ .

## 2.7 Adiabatische Einschnürung

In diesem Abschnitt betrachten wir einen Leiter mit einer langsamen Variation des Durchmessers und Konsequenzen für den Leitwert.

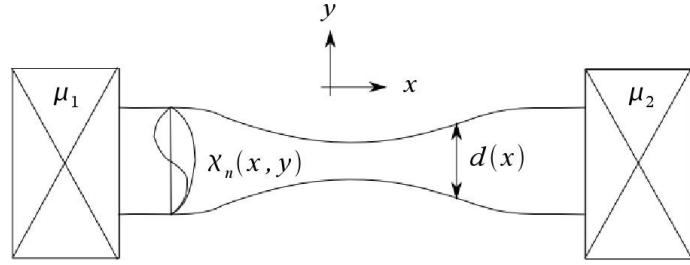


Abbildung 2.8: Eine adiabatische Enschnürung in einem Leiter.

Wir nehmen an, dass das Potenzial in  $y$ -Richtung steile Wände hat,

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

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

Das System wird durch folgende Gleichung beschrieben

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

Wir machen den Ansatz

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

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

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

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

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

$$\text{mit } U_n(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{d(x)} \right)^2.$$

Setzen wir unseren Ansatz mit der expliziten Gestalt der  $\chi_n(y; x)$  in die Schrödinger-Gleichung ein, so erhalten wir

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

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

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

mit

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

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

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

ist eindimensional in einem effektiven Potential

$$U_n(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{d(x)} \right)^2.$$

Für dieses effektive 1-dimensionale Potenzial können wir nun wieder die Transmissionskoefizienten bestimmen

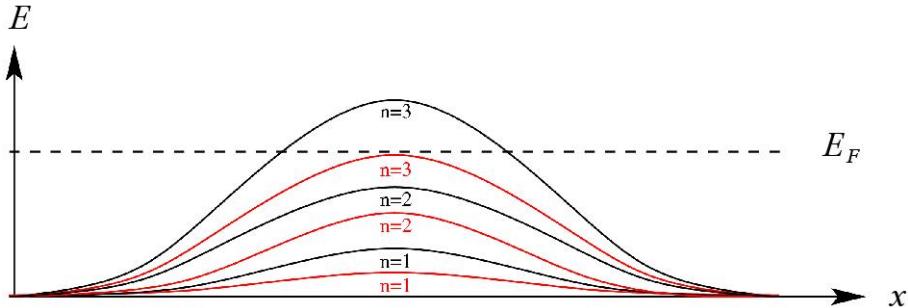


Abbildung 2.9: Verlauf des Potenzials  $U_n(x)$  für zwei verschiedenen breite Einschnürungen.

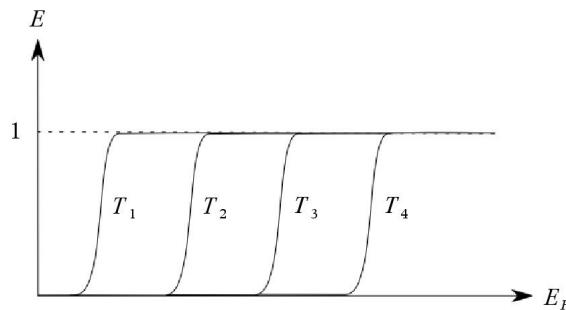


Abbildung 2.10: Sukzessives Öffnen der Transmissionskanäle.

In Abb. 2.10 ist die Situation für  $T_1 \approx T_2 \approx 1$  und  $0 \leq T_3 \leq 1$  skizziert. Die Kanäle öffnen sich für einen breiter werdenden Kontakt nacheinander (Abb. 2.10).

## 2.8 Multi-Kontakt-Systeme

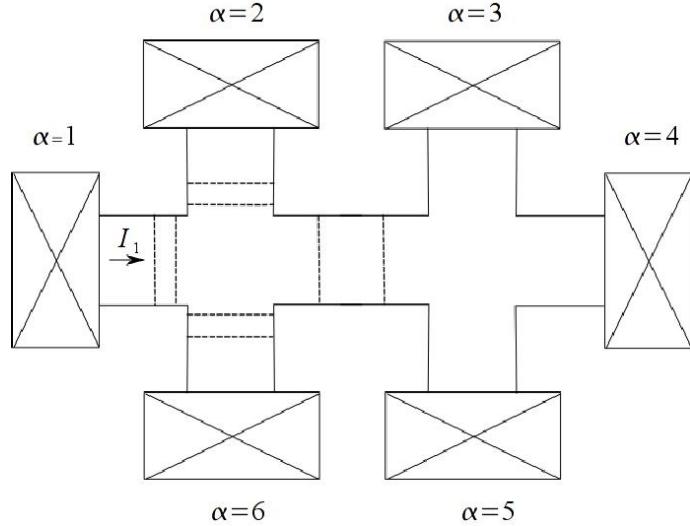


Abbildung 2.11: Leiter mit 6 Kontakten.

Wir diskutieren nun Multi-Kontakt-Systeme, wie das 6-Kontakt-System in Abb. 2.11. Für die Beschreibung eines solchen Systems benötigen wir die Transmissions- und Reflexionsamplituden für Übergänge von Kontakt  $\alpha$  nach Kontakt  $\beta$  aus Kanal  $n$  und Kanal  $m$ :

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

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

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

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

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

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

Wir berechnen den linearen Leitwert, d.h. wir nehmen an, dass die Potenzialdifferenzen klein sind,  $\mu_\alpha \approx E_F$ . Darum gilt weiterhin

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

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

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

folgt

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

und somit

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

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

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

mit  $G_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} T_{\alpha\beta}(E_F)$ . Mit der Relation  $N_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta\alpha} + R_\alpha$  lässt sich der Strom noch weiter umformen zu

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

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

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

Dieser Ausdruck verschwindet wegen der Relation  $N_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta\alpha} + R_\alpha$ . Außerdem ist erkennbar, dass eine konstante Verschiebung aller  $\mu_\alpha$  den Strom nicht ändert, so dass man eines der  $\mu_\alpha = E_F$  setzen kann.

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

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

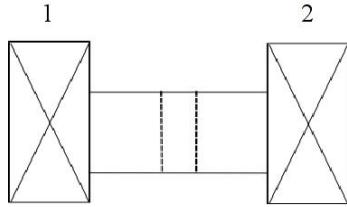


Abbildung 2.12: 2-Punkt-Geometrie

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

Summation liefert

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

und somit

$$\frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e2}{h}T = G.$$

Addition liefert dagegen die triviale Beziehung

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

**4-Kontakt-System** Wir betrachten nun ein System mit jeweils zwei Strom- und Spannungskontakten. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass die Spannungskontakte schwach und symmetrisch angekoppelt seien, d.h.  $\tau = T_3 = T_4 \ll 1$  (also auch  $R_3 = R_4$ ). Wir möchten  $G_{4P} = eI / (\mu_3 - \mu_4)$  bestimmen.

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

Wir schätzen die Transmissionen ab:

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

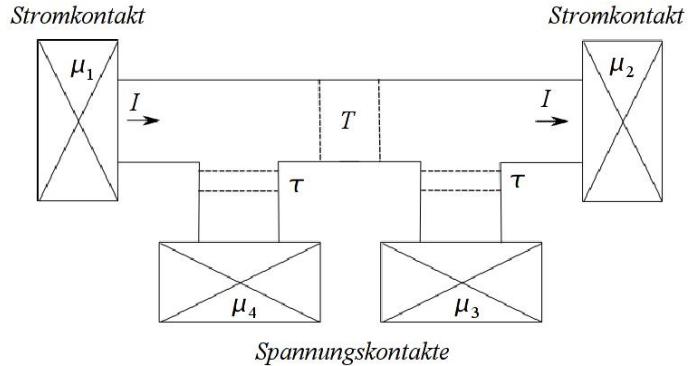


Abbildung 2.13: 4-Punkt-Geometrie

Unter Vernachlässigung der Terme  $O(\tau)$  ergibt sich aus der Differenz der ersten beiden Gleichungen (2.1) und (2.1)

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

Die Differenz der letzten beiden Gleichungen (2.1) und (2.1) liefert

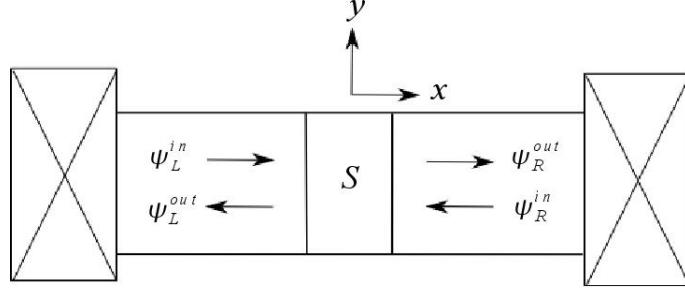
$$\begin{aligned} 0 &= (1 - R_3)(\mu_3 - \mu_4) - T_{31}(\mu_1 - \mu_2) - T_{32}(\mu_2 - \mu_1) \\ 0 &= (T_{13} + T_{23} + \underbrace{T_{43}}_{\approx 0})(\mu_3 - \mu_4) - (T_{32} - T_{31})(\mu_2 - \mu_1) \\ \mu_3 - \mu_4 &= \frac{T_{32} - T_{31}}{T_{32} + T_{31}}(\mu_2 - \mu_1) = R(\mu_2 - \mu_1).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

Somit gilt

$$\begin{aligned} G_{2P} &= \frac{eI}{\mu_1 - \mu_2} = \frac{2e2}{h}T, \\ G_{4P} &= \frac{eI}{\mu_4 - \mu_3} = \frac{eI}{R(\mu_1 - \mu_2)} = \frac{2e2}{h}\frac{T}{R}. \end{aligned}$$

## 2.9 S-Matrix für Streuung

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir die Auswirkungen von Störstellen oder Streuern auf den Leitwert durch die Einführung der Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$  berücksichtigt. Wie können wir nun den Transport in mesoskopischen Systemen beschreiben, die sich z.B. als Reihenschaltung vieler Streuer auffassen lassen? Hierbei stellt sich das Konzept der Streumatrix, kurz S-Matrix, als nützlich heraus, das die Amplituden einlaufender Wellen mit denen der auslaufenden verknüpft. So lassen sich Subsysteme durch S-Matrizen charakterisieren und die Transporteigenschaften des gesamten Systems ergeben sich aus einer geeigneten ‘Matrixmultiplikation’ der S-Matrizen. Im Folgenden wollen wir die Eigenschaften der S-Matrizen genauer untersuchen.



Die von links und rechts einlaufenden Wellen seien

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

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

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

Die Anzahl der einfallenden und der ausfallenden Komponenten kann als identisch angenommen werden. Hierzu werden z.B. einige Amplituden (bzw. Transmissionen und Reflexionen) ein- oder auslaufender Wellen als verschwindend angenommen. Wir erhalten die S-Matrix

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Dies können wir kompakt umschreiben wie

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Der Leitwert ergibt sich als

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

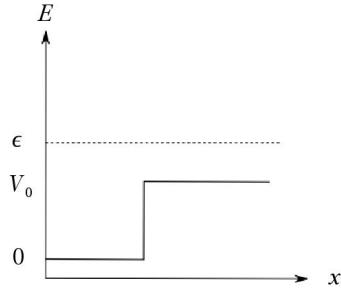
**S-Matrix bei Wellenvektor-”Mismatch”** Wir wollen hier diskutieren, wie die Streumatrix für ein Problem aussieht, bei dem sich die Wellenvektoren der propagierenden Moden in der linken und rechten Elektrode unterscheiden. Zur Vereinfachung konzentrieren wir uns auf eine Mode und betrachten die in der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

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

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

Wie üblich bietet sich der Ansatz an

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



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

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

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

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

Auflösen liefert dann

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

Wir stellen fest, dass

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

Definieren wir dagegen

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

so gilt

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

wir wir es aufgrund der Erhaltung der Teilchenzahl erwarten.

### 2.9.1 Reihenschaltung

Wenn wir komplexere Systeme untersuchen möchten, ist es sinnvoll diese Systeme in Untersysteme aufzuteilen, deren S-Matrizen wir einfach aufstellen können. Die S-Matrix des Hauptsystems lässt sich über eine geeignete Verknüpfung der S-Matrizen der Untersysteme erhalten. Wir betrachten die Reihenschaltung und suchen die Streumatrix  $S_{12}$  für das System aus Abb. 2.14.

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

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

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

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

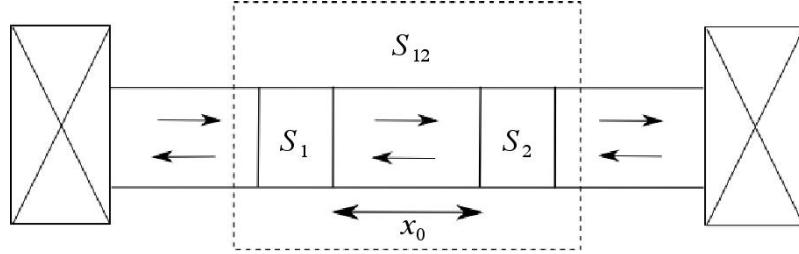


Abbildung 2.14: Leiter, der sich als Reihenschaltung von S-Matrizen beschreiben lässt.

Aus den Relationen für die S-Matrix

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

folgt für die Komponenten der Wellenfunktion auf der rechten Seite

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

Damit ergibt sich für  $M$

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

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

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

wobei die Propagation um  $x_0$  durch

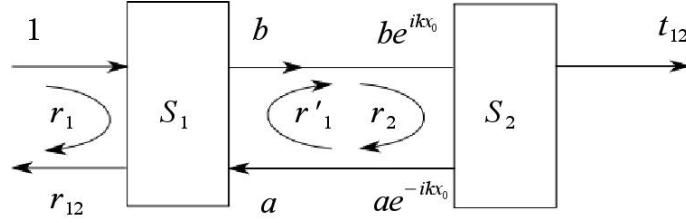
$$M_{prop} = \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix}$$

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

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

Wir erhalten bei diesem Vorgehen

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



Aus den Beziehungen folgt

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

und schließlich

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

Das Ergebnis lässt sich physikalisch interpretieren, über folgenden Zusammenhang

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

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

Für die Transmissionswahrscheinlichkeit erhalten wir

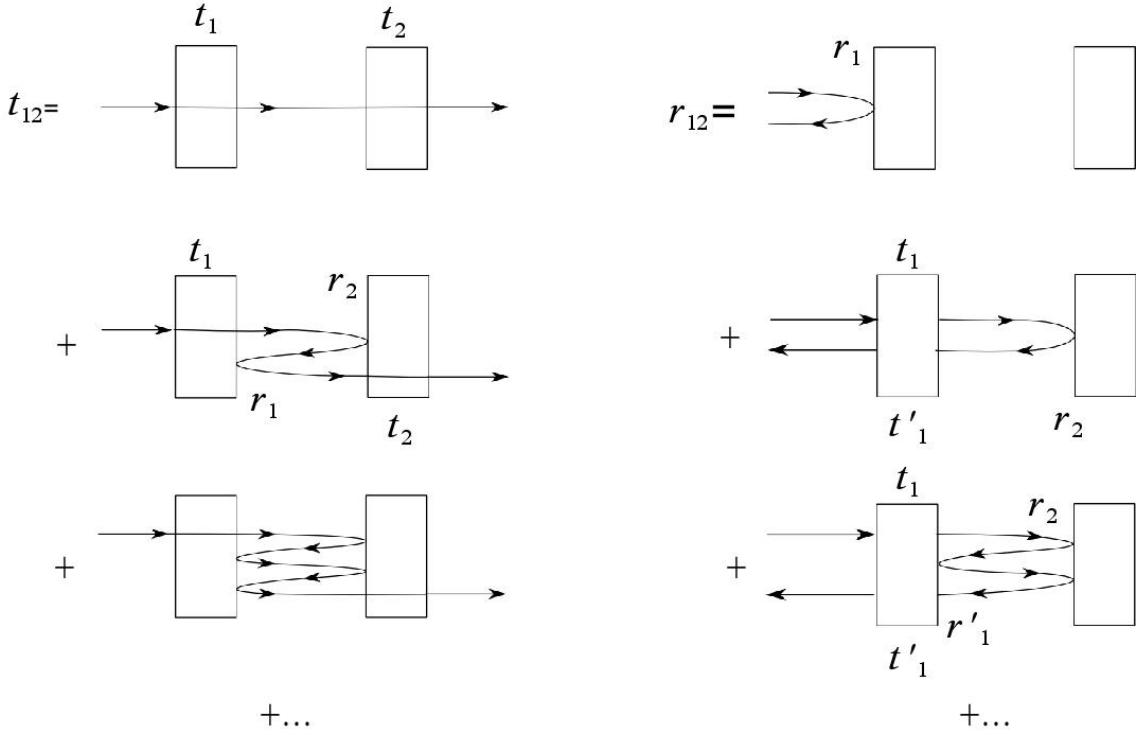
$$T_{12} = |t_{12}|^2 = \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}$$

mit  $\vartheta = 2ikx_0 + \underbrace{\arg(r'_1 r_2)}_{\rho'_1 + \rho_2}$ . Die Reflexionswahrscheinlichkeit ist dagegen  $R_{12} = |r_{12}|^2 = 1 - T_{12}$  und der Quotient liefert

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

Somit beträgt der 4-Punkt-Leitwert

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



und der 2-Punkt-Leitwert

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

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

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

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

### 2.9.2 Reihenschaltung für viele Kanäle

Wir wollen die Reihenschaltung von Streuern für den Fall mehrerer Kanäle erweitern, wie es in Abb. 2.15 angedeutet ist. Die beiden Streuer seien durch folgende S-Matrizen beschrieben

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

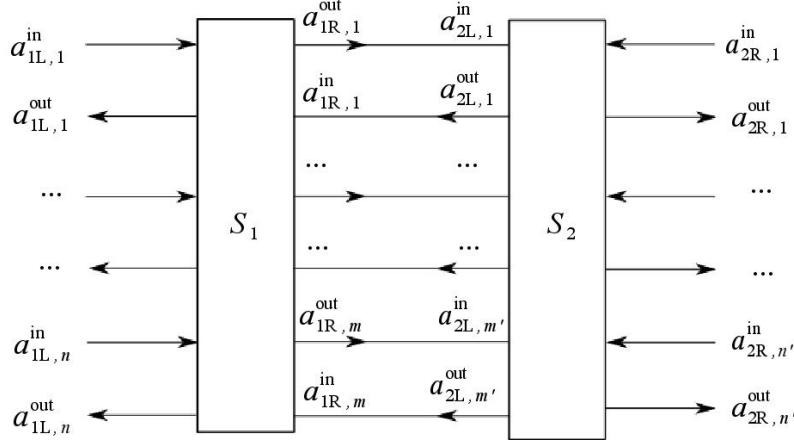


Abbildung 2.15: Reihenschaltung zweier Streuer im Fall mehrerer Kanäle.

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

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

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

erhalten wir schliesslich

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

## 2.10 Resonantes Tunneln

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

Wie in Abschn. 2.9.1 haben wir die Transmission für zwei Streuer hergeleitet und

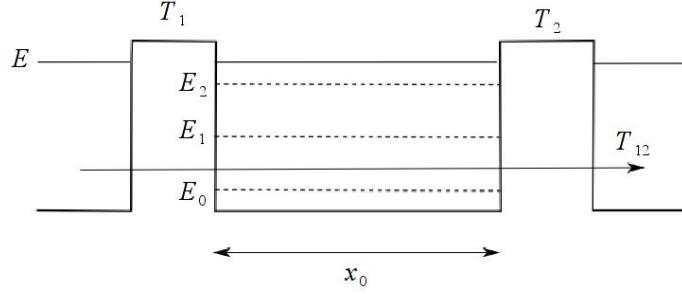


Abbildung 2.16: Leiter mit zwei Barrieren mit Transmissionswahrscheinlichkeiten  $T_1$  und  $T_2$ . An solchen Systemen kann resonantes Tunneln beobachtet werden. Typischerweise gilt  $T_1, T_2 \ll 1$ .

können dieses Resultat nun direkt übernehmen.

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

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

Der Einfachheit halber nehmen wir hier an, dass

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

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

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

Wir entwickeln  $\vartheta(E) = 2x_0\sqrt{2mE}/\hbar$  der Nähe von  $E_n$

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

Für  $\cos \vartheta(E)$  folgt

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

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

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

Für die Transmission ergibt sich somit

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

Durch Umschreiben erhalten wir

$$T_{12}(E) = \frac{4T_1 T_2}{(T_1 + T_2)^2} \frac{1}{1 + \frac{8x_0^2 m}{\hbar^2} \cdot \frac{(E - E_n^2)^2}{E_n (T_1 + T_2)^2}}.$$

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

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

mit

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

Hierbei entspricht  $\Gamma_i/\hbar$  der Rate für das Überwinden der Barriere  $i$

$$\frac{\Gamma_i}{\hbar} = \underbrace{\frac{T_i}{\text{Fluchtwahrscheinlichkeit}}}_{\text{Wiederholungsrate}} \underbrace{\frac{\hbar v_n}{2x_0}}_{\text{Wiederholungsrate}}.$$

## 2.11 Übergang von kohärentem nach klassischem Verhalten

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit dem Verlust der Phasenkohärenz und dem Übergang zum klassischen Verhalten. Wir gehen dabei von folgendem Schaubild aus.

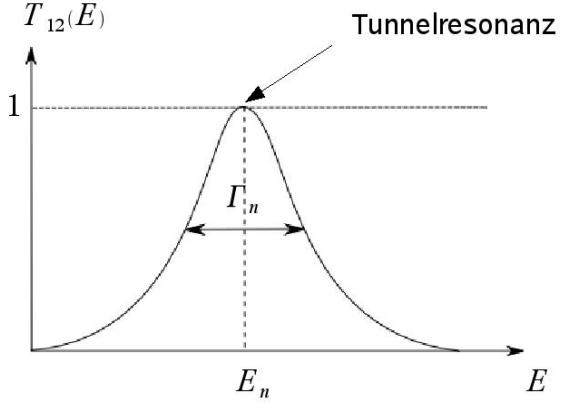


Abbildung 2.17: Transmission in der Nähe einer Resonanz. Die Transmission besitzt dann die Form einer Lorentzkurve. Hier wurde der Fall symmetrischer Barrieren  $T_1 = T_2$  betrachtet, für den  $T_{12}(E) = 4T_1T_2/(T_1 + T_2)^2 = 1$ , obwohl  $T_1, T_2 \ll 1$ . Resonantes Tunneln ist beispielsweise in Quantenpunkten beobachtbar.

In Reservoiren wird die Phasenkohärenz zerstört. Die Idee bei dem her betrachteten System ist es, einen Teil der Elektronen zum Reservoir  $p$  propagieren zu lassen, vom dem die Elektronen inkohärent wieder eingespeist werden. Hierbei fliesse kein Nettostrom zur Probe  $I_p = 0$  und mit  $\varepsilon$  lässt sich der Anteil der inkohärenten Elektronen kontrollieren. Für die S-Matrix  $S_\square$  dieser Weiche zum Reservoir  $p$  gilt (Büttiker, 1988)

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

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

Unter der Annahme, dass die Phasen, die bei Propagation von Streuer 1 oder 2 zu  $\square$  aufgesammelt werden gerade  $\varphi/2 = kx_0$  sind, erhält man

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

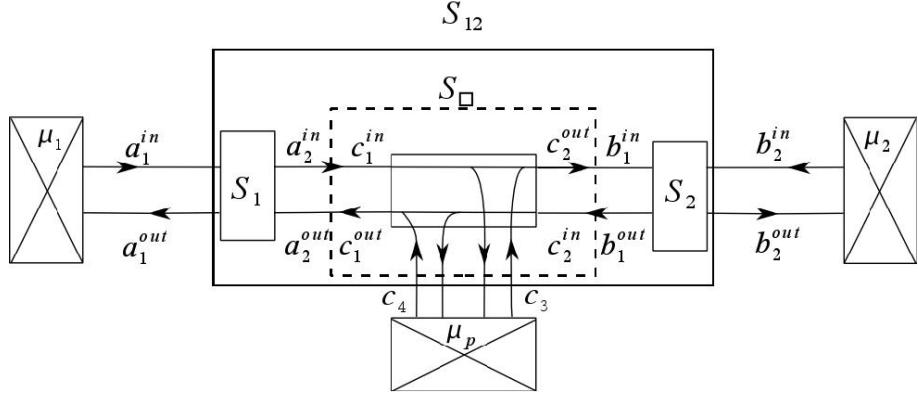


Abbildung 2.18: Zur Simulation von Dekohärenz nehmen wir an, dass ein Teil der Wellen in ein zusätzliches Reservoir mit Potenzial  $\mu_p$  propagiert und gleichzeitig ein Teil aus dem Reservoir phasen-inkohärent zurückfließt, so dass der Nettostrom zu diesem Reservoir gleich 0 ist.

Für die Transmissionen, Ströme und Spannungen erhält man folgende Ausdrücke

$$\begin{aligned}
 T_{12} &= \frac{T_1 T_2 (1 - \varepsilon)}{|Z|^2} \\
 |Z|^2 &= |1 - e^{2i\varphi}(1 - \varepsilon)r'_1 r_2|^2 = 1 + (1 - \varepsilon)^2 R_1 R_2 - 2(1 - \varepsilon)\sqrt{R_1 R_2} \cos(2\varphi + \varrho'_1 + \varrho_2) \\
 T_{p1} &= |t_{13}|^2 + |t_{14}|^2 = \frac{1}{|Z|^2}(\varepsilon T_1 + \varepsilon(1 - \varepsilon)R_2 T_1) = \frac{T_1}{|Z|^2} \varepsilon [1 + (1 - \varepsilon)R_2] \\
 T_{p2} &= |t_{23}|^2 + |t_{24}|^2 = \frac{1}{|Z|^2}(\varepsilon T_2 + \varepsilon(1 - \varepsilon)R_1 T_2) = \frac{T_2}{|Z|^2} \varepsilon [1 + (1 - \varepsilon)R_1] \\
 I_p &= \frac{2e^2}{h} [T_{p1}(V_p - V_1) + T_{p2}(V_p - V_2)] = 0 \\
 V_p &= \frac{V_1 T_{p1} + V_2 T_{p2}}{T_{p1} + T_{p2}} \\
 I_1 &= \frac{2e^2}{h} [T_{1p}(V_1 - V_p) + T_{12}(V_1 - V_2)] = \\
 &= \frac{2e^2}{h} \left[ T_{1p} \left( V_1 - \frac{V_1 T_{p1} + V_2 T_{p2}}{T_{p1} + T_{p2}} \right) + T_{12}(V_1 - V_2) \right] = \\
 &= \frac{2e^2}{h} (V_1 - V_2) \left[ T_{12} + \frac{T_{1p} T_{2p}}{T_{1p} + T_{2p}} \right]
 \end{aligned}$$

Der Leitwert ist darum

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

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

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

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

**Fall  $\varepsilon = 1$**  Dies entspricht der inkohärenten Addition der Widerstände. Es gilt  $|Z| = 1$ ,  $T_{12} = 0$ ,  $T_{p1} = T_1$ ,  $T_{p2} = T_2$  und somit

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

**Zerstörung der Phasenkohärenz** Sobald die Abmessungen  $L$  eines Leiters die Phasenkohärenzlänge  $l_\varphi$  übersteigen, muss bei der Leitwertberechnung der Verlust der Phaseninformation berücksichtigt werden. Wie wir anhand des obigen Beispiels gesehen haben, kann man dann wie folgt vorgehen.

Man zerteilt zur Bestimmung von  $G(L > l_\varphi)$  den Draht in Segmente der Länge  $l_\varphi$  (Abb. 2.19). Nun berechnet man  $G^{-1}(l_\varphi)$  unter Berücksichtigung der Phasenkohärenz. Die inkohärente Addition der Widerstände ergibt den Gesamtwiderstand  $G^{-1}(L > l_\varphi) = \frac{L}{l_\varphi} G^{-1}(l_\varphi)$ .

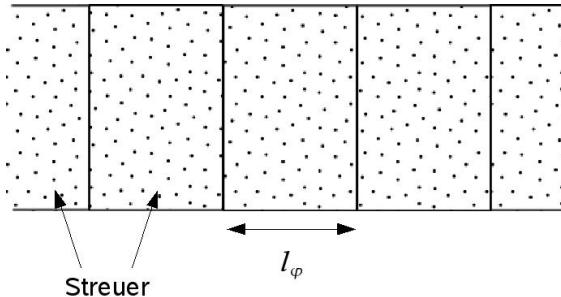


Abbildung 2.19: Zur Bestimmung des Widerstandes eines Leiters mit einer Länge  $L > l_\varphi$  wird dieser in Segmente von der Größe der Phasenkohärenzlänge zerlegt.

## 2.12 Anderson Lokalisierung

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

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

$$\begin{aligned} G_{4P}^{-1} &= \frac{h}{2e^2} g^{-1} \\ g^{-1} &= \frac{R_1 + R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \vartheta}{T_1 T_2}. \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

Diese Rekursionsformel schreiben wir um als Differntialgleichung

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

Als Lösung erhält man

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

wobei  $R \ll 1$ , aber  $Rn \gtrsim 1$ . Somit wächst der Widerstand  $\langle g_n^{-1} \rangle$  eines 1-dimensionalen ungeordneten systems exponentiell, was als Anderson Lokalisierung bekannt ist.

## Kapitel 3

# Quanten-Hall-Effekt

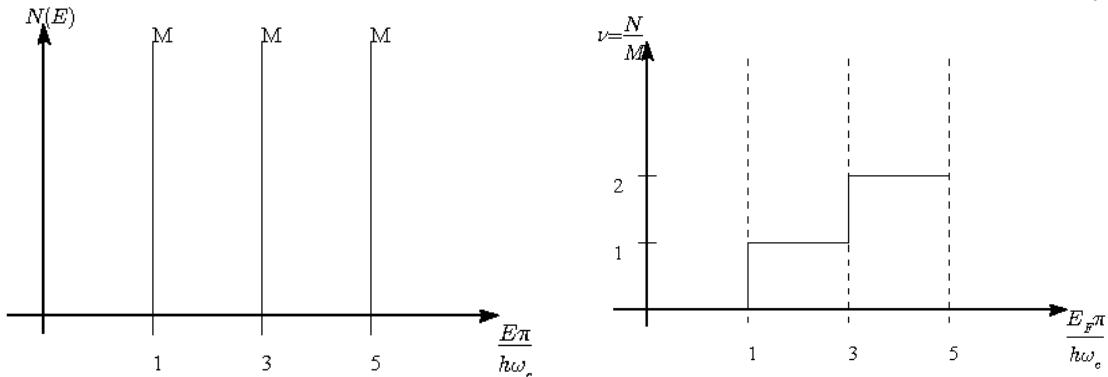
### 3.0.1 (Zu) einfaches Bild

Dieser Abschnitt führt uns nun zum eigentlichen Punkt dieses Kapitels, dem Quanten-Hall-Effekt. Zur Vereinfachung ignorieren wir im Folgenden zunächst den Spin.

Aufgrund der Entartung können in jedem Landau-Niveau  $M$  Elektronenzustände besetzt werden. Wenn wir nun die Fermi-Energie  $E_F$  unabhängig von allen anderen Parametern variieren könnten, würde sich die Zahl der Elektronen in Stufen von  $M$  ändern jedesmal, wenn  $E_F$  auf einem Landau-Niveau vorbeigeschoben wird. D.h. der Füllfaktor, das Verhältnis zwischen der Zahl der Elektronen und der Entartung

$$\nu = \frac{N}{M} = 0, 1, 2, \dots$$

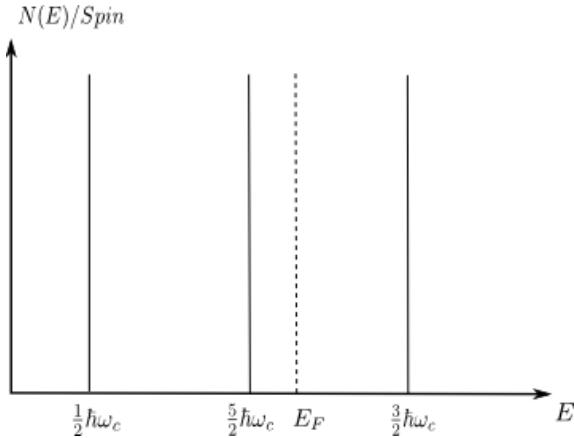
ändert sich in ganzen Zahlen.



Kombinieren wir dies mit dem klassischen Ergebnis, dass der Hall-Widerstand nur von der Elektronendichte abhängt, so erhalten wir

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{B}{n^{2d}|e|c} = \frac{BF}{N|e|c} = \frac{\Phi}{N|e|c} = \\ &= \frac{\Phi/\Phi_0}{N|e|^2/hc} = \frac{M}{N} \frac{h}{|e|^2} = \frac{1}{\nu} \frac{h}{|e|^2} \quad \text{mit } \nu = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

D.h. der inverse Hall-Widerstand  $1/R_H$  nimmt ganzzahlige Vielfache von  $e^2/h$  an, aber auch der Hall-Widerstand  $R_H$ , oder gleichbedeutend  $\rho_H$ , ändern sich in Stufen.



In der Regel können wir nicht die Fermi-Energie unabhängig einstellen. Schon eher können wir uns vorstellen, dass die Fermi-Energie konstant ist, und wir das Magnetfeld verändern. Dann ändert sich aber weiterhin der Füllfaktor in ganzzahligen Stufen und entsprechend der inverse Hall-Widerstand in Vielfachen von  $e^2/h$ . Das Ergebnis für  $\rho_H$  geplottet als Funktion des Magnetfeldes ist in Abb. 3.1 dargestellt.

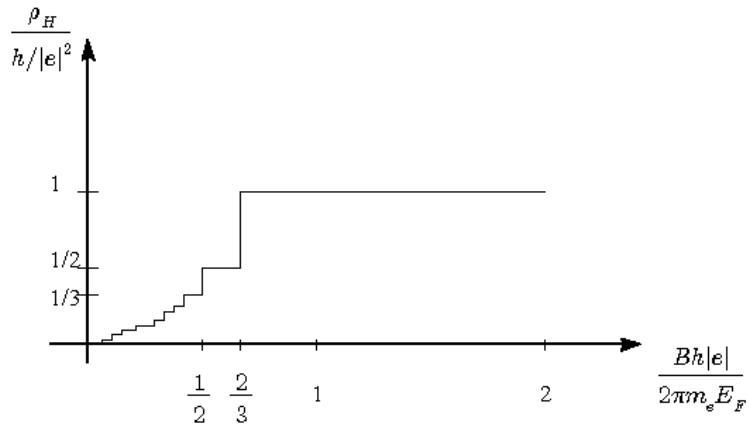


Abbildung 3.1: Der Hall-Widerstand als Funktion des Magnetfeldes

Das so gewonnene Bild ähnelt schon in wichtigen Eigenschaften dem, das von K. von Klitzing im Experiment beobachtet wurde. Im Gegensatz zum klassischen Hall-Effekt, wo  $\rho_H$  linear mit dem Magnetfeld zunimmt, gibt es beim Quanten-Hall-Effekt Plateaus, in denen der Hall-Widerstand als Funktion des Magnetfeldes sich nicht ändert. Auf diesen Plateaus ist  $1/\rho_H$  ein ganzzahliges Vielfaches von

$$\frac{e^2}{h} = \frac{1}{25,812807572 \text{ k}\Omega} \equiv \frac{1}{R_K}$$

Der so definierte Quantenwiderstand  $R_K$ , der nur von Naturkonstanten abhängt, wird nach K. von Klitzing benannt. Er stellt heute den Standard für den Widerstand dar. D.h.,

das ein Quanten-Hall-Experiment herangezogen wird, um die Skala von Widerstandsmessungen festzulegen. Zusammen mit anderen Experimenten, z.B. den Josephson Effekt, der einen Standrad für  $h/e$  liefert, kann man so  $e$  und  $h$  mit hoher Präzission (mehr als 8 Stellen) messen.

Für seine Arbeiten zum Quanten-Hall-Effekt erhielt Klaus von Klitzing 1985 den Physik-Nobelpreis.

### 3.0.2 Kritik an der bisherigen Herleitung und Diskussion

1) Im Experiment können wir nicht  $E_F$  unabhängig festhalten, sondern die Teilchenzahl  $N$  ist weitgehend fest. D.h. fast immer sind ein Teil,  $i = 0, 1, 2, \dots$  der Landau-Niveaus gefüllt, während das nächsthöhere nur partiell gefüllt ist.

Wenn wir nun z.B. das Magnetfeld variieren, liegt die Fermi-Energie  $E_F$  fast auf einem

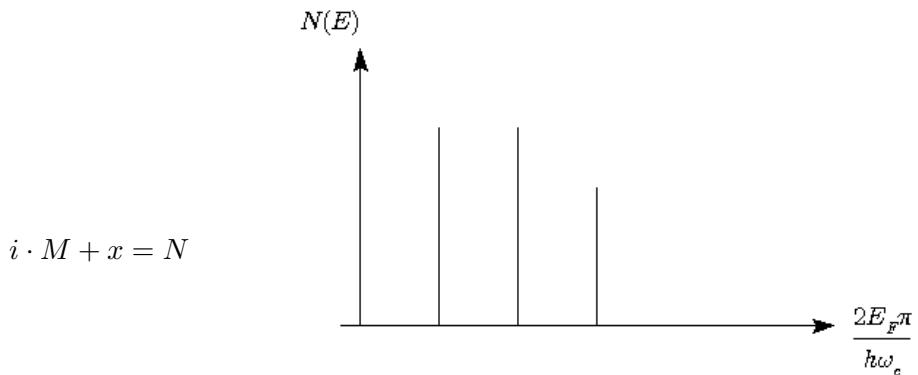


Abbildung 3.2:  $i$  Landau Niveaus sind ganz gefüllt, das nächste ist partiell gefüllt.

Landau Niveau, und wenn dies gefüllt ist, wird sie springen. Dies bedeutet, dass wir die bisherige Erklärung der Quantisierung, die darauf beruhte, dass wir immer ganz gefüllte Landau-Niveaus betrachteten, nicht ausreicht.

2) Das Experiment zeigt, dass im Bereich der Plateaus des Hall-Widerstandes  $\rho_H = \rho_{xy}$  der Transportwiderstand  $\rho_{xx}$  (und damit auch  $\sigma_{xx}$ ) verschwinden, während beide dort wo  $\rho_{xy}$  Stufen - mit endlicher Breite - hat,  $\rho_{xx}$  und  $\sigma_{xx}$  groß sind.

Dieses Verhalten des Transportwiderstandes lässt sich ebenfalls als Folge der Kombination des Störstellenpotenzials und der Landau-Niveaus verstehen. Es gilt für die Streureate

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\pi}{\hbar} N(E_F) \cdot c_{\text{imp}} \cdot U^2$$

wobei  $c_{\text{imp}}$  die Störstellenkonzentration und  $U$  das Störstellenpotenzial ist. Die Streureate und damit der Transportwiderstand  $\rho_{xx} = \frac{m}{ne^2\tau}$  sind also dort groß, wo die Zustandsdichte  $N(E_F)$  groß ist und verschwindet zwischen den Landau-Niveaus. Die damit verbundenen Oszillationen des Widerstands mit dem Magnetfeld waren schon vor der Entdeckung des Quanten-Hall-Effekts als Schubnikov-de Haas Oszillationen bekannt.

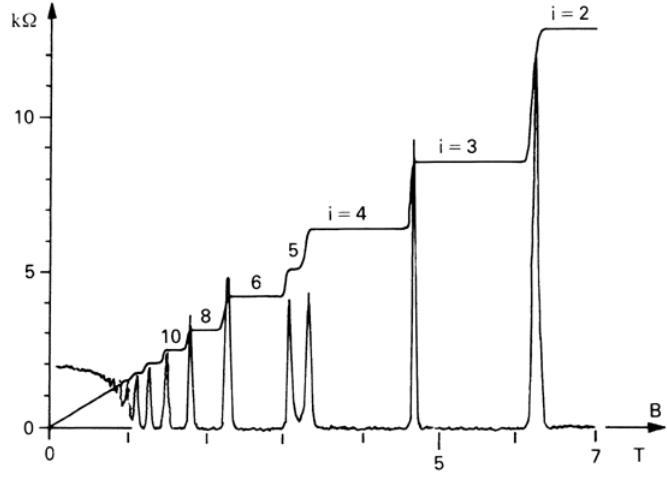


Abbildung 3.3: Der ganzzahlige Quanten-Hall-Effekt (Quelle: www.ptb.de)

### 3.0.3 Unordnung und lokalisierte Zustände

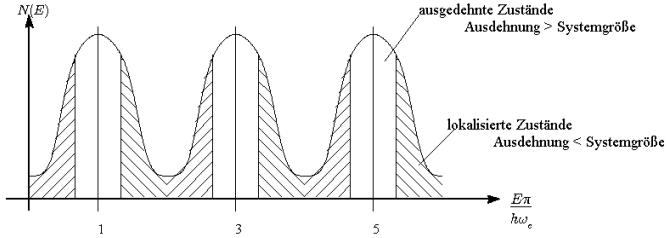


Abbildung 3.4: Elektronische Zustandsdichte in einem Leiter mit Störstellenstreuung und Magnetfeld

Die Störstellenstreuung ändert auch die Zustandsdichte. Anstelle von  $M$ -fach entarteten Landau-Niveaus bei den Energien  $E_n = (n+1/2) \hbar\omega_c$  erhalten wir verbreiterte Bereiche wie in Abb. 3.4 gezeigt. Weiterhin wissen wir auf Grund der Arbeiten von P.W. Anderson, dass in 2-dimensionalen Systemen (ebenso in 1-dimesnionalen sowie in 3-Dimensionen, wenn die Störstellenstrueung eine kritischen Stärke überschreitet), dass die Elektronenzustände nicht länger ausgedehnt sind (z.B. ebene Wellen), sondern dass sie “lokalisiert” sind. D.h.  $\psi(\vec{r})$  ist nur in einem beschränkten räumlichen Bereich von der Größe  $\xi$  von 0 verschieden. Diese Lokalisierungslänge hängt von der Energie ab

$$\xi \sim |E - E_n|^{-s}$$

mit einem Exponenten, der von der Größe  $s \approx 1 \dots 2$  ist. Die Lokalisierungslänge ist nun mit der Größe  $L_x$  des Systems zu vergleichen. Zustände mit Energie  $E$  nahe bei  $E_n$  sind effektiv ausgedehnte Zustände, dagegen diejenigen die weiter weg sind, sind lokalisiert.

Mit diesen lokalisierten Zuständen ändert sich die Fermienergie  $E_F$  kontinuierlich, wenn wir die Teilchenzahl  $N$  oder bei fester Teilchenzahl das Magnetfeld ändern. Zur

Vereinfachung der Diskussion nehmen wir wieder zunächst an, dass wir bei festem  $B$  die Fermienergie und damit die Elektronenzahl  $N$  verändern. Dann füllen wir, je nachdem, wo die  $E_F$  liegt entweder lokalisierte Zustände auf oder die ausgedehnten. Dasselbe gilt, wenn wir bei fester Teilchenzahl das Magnetfeld ändern. Daraus folgt offensichtlich

- Wenn  $E_F$  im Bereich der lokalisierten Zustände liegt, dann folgt  $\sigma_{xx} \propto \rho_{xx} \approx 0$ .
- Wenn  $E_F$  im Bereich der ausgedehnten Zustände liegt, dann ist  $\sigma_{xx}$  groß und daher auch  $\rho_{xx} \neq 0$ .

Es gilt weiterhin

- Wenn  $E_F$  im Bereich der lokalisierten Zustände liegt, dann ist  $\sigma_{xy}$  quantisiert in ganzzahligen Vielfachen von  $e^2/h$ .

Letzteres ist intuitiv nicht offensichtlich. Als einfachste Erklärung können wir sagen, dass für das Zustandekommen einer Hall-Spannung sich die Elektronen ja nicht in senkrechter Richtung zum Strom bewegen müssen, da die Hall-Spannung ja gerade die Lorentz-Kraft kompensiert. Insofern sind lokalisierte wie ausgedehnte Elektronenzustände gleichwertig.

### 3.0.4 Topologisches Argument

Die Quantisierung des Hall-Widerstands folgt aus einem topologischen Argument, das auf R.B. Laughlin zurückgeht, der später den Nobelpreis für die Theorie des fraktionellen Quanten-Hall-Effektes erhielt. Für dieses Argument stellen wir uns vor, dass die Hall-Probe in  $x$ -Richtung zu einem Ring (mit Radius  $R = L_x/(2\pi)$  und Breite  $W$  in  $y$ -Richtung) gebogen ist. Das angelegte Magnetfeld, das zuvor in  $z$ -Richtung zeigte, zeigt nun strahlenförmig nach außen. Der Transportstrom  $I$  ist nun ein Kreisstrom, der einen magnetischen Fluss  $\phi$  durch den Ring erzeugt. (Beachte dieser Fluss ist zu unterscheiden vom Fluss  $\Phi$ , der vom angelegten Magnetfeld  $B$  herrührt.)

Alle quantenmechanischen Zustände auf dem Ring sind natürlich periodische Funktionen der Variable  $\varphi$ , die anstelle der ursprünglichen Variablen  $x = R\varphi$  die Lage auf dem Ring beschreibt. Der Fluss  $\phi$ , bzw. das zugehörige Vektorpotenzial  $\vec{a}$  kann durch eine Eichtransformation berücksichtigt werden (vergleiche die Beschreibung des Aharonov-Bohm-Effektes)

$$\psi_\phi(\varphi) = \psi_0(\varphi) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{|e|}{c} \int^x dx' \vec{a}(x') \right]$$

und kann so effektiv durch verschiedene Randbedingungen bei  $\varphi = 0$  und  $\varphi = 2\pi$  berücksichtigt werden. Damit wird klar, dass die Eigenenergien der Elektronenzustände, die von dem Fluss  $\phi$  abhängen, periodische Funktion von  $\phi$  mit Periode  $\Phi_0 = hc/e$  sind. Man kann nun weiter zeigen, dass der quantenmechanische Dauerstrom (“persistent current”), der mit diesem Zustand verknüpft ist, sich als Ableitung der Energie nach dem Fluss schreiben lässt, und dies gilt für jeden besetzten Zustand. Also gilt für die folgende Relation zwischen Gesamtstrom und Gesamtenergie

$$I = c \frac{\partial E}{\partial \phi}$$

Wenn wir nun den Fluss  $\phi$  verändern, verändern sich effektiv die Randbedingungen an die Zustände in  $x$ -Richtung, und somit verschieben sich die Lagen der Zentren der Wellenfunktionen  $y_k$ , die wir in den Abbildungen durch die Punkte gekennzeichnet hatten. Und wenn wir  $\phi$  um ein Quantum  $\Phi_0$  verschoben haben, haben wir jeden Zustand gerade auf den Platz verschoben, den zuvor sein Nachbar inne hatte. D.h. aber auch, dass gerade ein Zustand pro besetztes Landau-Niveau durch die Breite  $W$  der Probe durchgeschoben wurde. Da diese Bewegung gegen die Hall-Spannung durchgeführt wird, kostet es für  $\delta\phi = \Phi_0$  bei  $i$  besetzten Niveaus die Energie  $\delta E = i|e|V_H$ . Damit ergibt sich

$$\sigma_{xy} = \frac{I}{V_H} = \frac{c}{V_H} \frac{\delta E}{\delta\phi} = \frac{i|e|c}{\Phi_0} = i \frac{e^2}{h}$$

D.h. das topologische Argument liefert genau den quantisierten Wert der Hall-Leitfähigkeit.

### 3.1 Der fraktionelle Quanten-Hall-Effekt

Einige Jahre nach der Entdeckung des ganzzahligen Quanten-Hall-Effekts wurden in sehr reinen Proben viele weitere Plateaus bei nicht-ganzzahligem  $\nu$  gefunden. Beim ganzzahligen QHE liegen die Plateaus in  $\rho_{xy} = \frac{1}{i} \frac{h}{e^2}$  bei Füllfaktoren  $\nu = i = 1, 2, 3, \dots$  und  $\rho_{xx}$  verschwindet. Zwischen den Plateaus nimmt  $\rho_{xx}$  große Werte an. Der fraktionelle QHE ist charakterisiert durch weitere Plateaus in  $\rho_{xy}$  bei gleichzeitigem Verschwinden von  $\rho_{xx}$  und zwar bei gebrochenzahligen Füllfaktoren

$$\nu = \nu_p = \frac{p}{2p+1} \quad \text{und} \quad \nu = 1 - \nu_p, 1 + \nu_p, 2 - \nu_p, \dots, \quad \text{mit } p = 0, 1, 2, \dots$$

d.h.  $\nu = (0), \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \dots \rightarrow \frac{1}{2}$  und  $\nu = 1, \frac{2}{3}, \frac{3}{5}, \frac{4}{7}, \dots, \frac{4}{3}, \frac{7}{5}, \dots$   
sowie bei

$$\nu = \bar{\nu}_p = \frac{p}{4p \pm 1} \quad \text{und} \quad 1 - \bar{\nu}_p, 1 + \bar{\nu}_p, 2 - \bar{\nu}_p, \dots, \quad \text{mit } p = 0, 1, 2, \dots$$

### 3.2 Randkanäle

Dieses anschauliche Bild der Randkanäle folgt auch aus der quantenmechanischen Analyse. Dazu nehmen wir an, dass das Potenzial  $V(y)$ , das den Rand definiert, kontinuierlich von 0 auf große Werte steigt. Die Zustände in der Nähe des Randes haben daher die Energie

$$E_{nk} \approx \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + V(y_k) \quad y_k = \frac{\hbar c}{|e|B} k$$

und somit die Gruppengeschwindigkeit

$$v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{nk}}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial V(y_k)}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar c}{|e|B} \frac{\partial V}{\partial y}$$

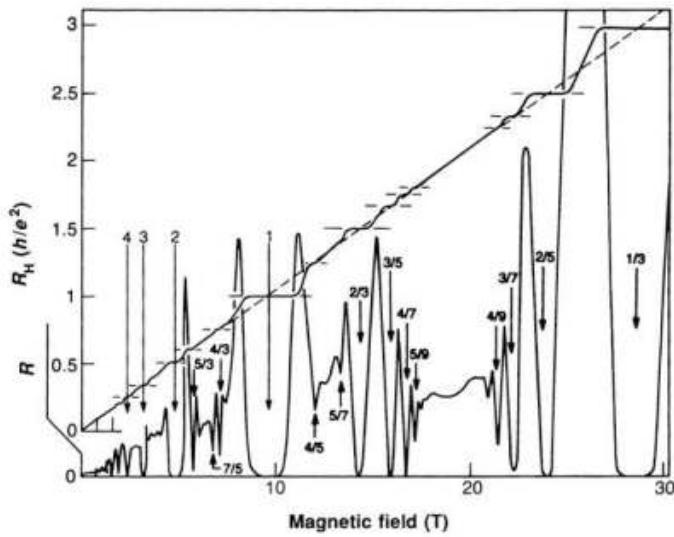
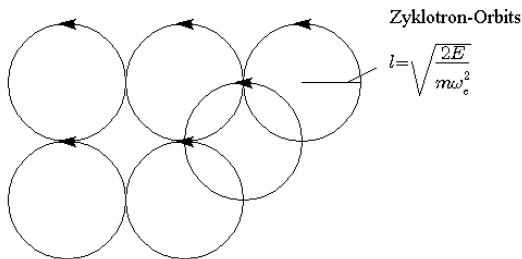


Abbildung 3.5: Der fraktionelle Quanten-Hall-Effekt zeigt weitere Plateaus im Hall-Widerstand (Quelle: <http://www.prequark.org/Q4.htm>)



Im Magnetfeld bewegen sich freie Elektronen auf Zyklotronbahnen. Im Innern einer Probe kompensieren sich diese überall und die Stromdichte verschwindet.



Am Rand der Probe bleibt aber eine Netto-Stromdichte übrig.

Die Richtung des Stromes hat verschiedenes Vorzeichen an den beiden Rändern. Von Bedeutung sind nur die Zustände, deren Energie bei der Fermi-Energie liegt, d.h. Zustände deren am Rand nach oben gebogene Landau-Niveaus das Fermi-Niveau schneiden. Für jeden der Randkanäle gilt wieder, dass das Produkt aus Zustandsdichte und Gruppengeschwindigkeit konstant ist,  $N(E) v_k = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\partial E / \partial k} \hbar \frac{\partial E}{\partial k} = \text{const.}$  D.h. der Leitwert pro Randkanal (und Spin) ist  $e^2/h$ .

In den Hall-Proben haben wir somit eine ideale Realisierung 1-dimensionaler Leitwertkanäle. Diese können wir nun mit dem von Büttiker entwickelten Multikanal - Multi-Proben Formalismus analysieren

$$\frac{h}{2e} I_\alpha = (N_\alpha - R_\alpha) \mu_\alpha - \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta \rightarrow \alpha} \mu_\beta .$$

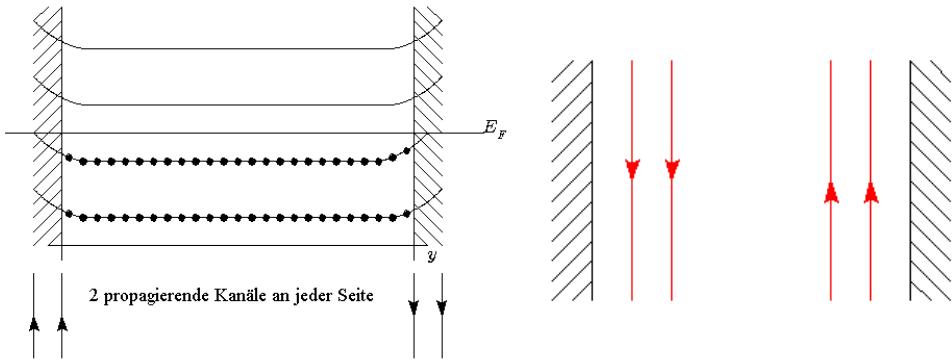
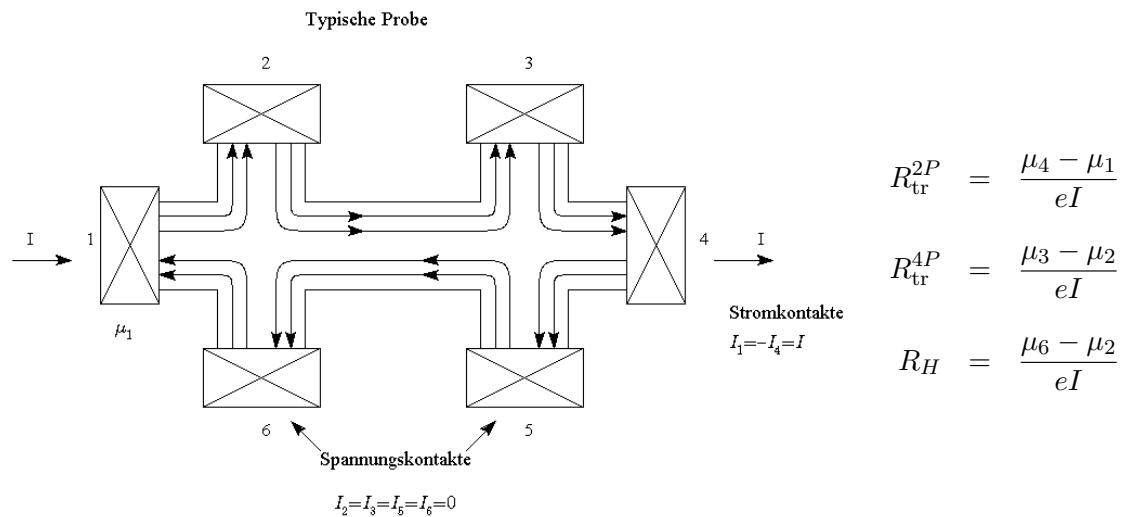


Abbildung 3.6: Landau-Niveaus unterhalb der Fermienergie schneiden diese am Rand und bilden eine entsprechende Zahl von Randkanälen. Diese propagieren an den beiden Seiten in verschiedene Richtung.

#### Einfaches Beispiel:

Wir betrachten zunächst eine typische Hall-Proben-Geometrie mit Strom- und Spannungskontakten und wollen den Transportwiderstand für 2-Proben und 4-Proben-Messung sowie den Hall-Widerstand bestimmen.



Wir nehmen an, dass es  $N$  Kanäle gibt, die alle jeweils zwischen benachbarten Kontakten völlig transparent sind  $T_{21} = T_{32} = T_{43} = T_{65} = T_{16} = T = N$ , während die restlichen

Transmissions und Reflexionskoeffizienten verschwinden,  $T_{ij} = 0$ ,  $R_{ij} = 0$ .

$$\begin{aligned}\frac{h}{2e}I_1 &= \frac{h}{2e}I = N\mu_1 - N\mu_6 \\ 0 &= N\mu_2 - N\mu_1 \\ 0 &= N\mu_3 - N\mu_2 \\ -\frac{h}{2e}I &= N\mu_4 - N\mu_3 \\ 0 &= N\mu_5 - N\mu_4 \\ 0 &= N\mu_6 - N\mu_5\end{aligned}$$

Aus der 2. und 3. Gleichung schließen wir, dass  $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3$ , während aus den letzten beiden Gleichungen  $\mu_4 = \mu_5 = \mu_6$  folgt. Damit wird

$$\Rightarrow \quad \frac{h}{2e}I = N\mu_2 - N\mu_6 \quad \Rightarrow \quad R_H = \frac{\mu_6 - \mu_2}{eI} = \frac{1}{N} \frac{h}{2e} \frac{I}{eI}$$

Wir finden also dass der Hall-Widerstand quantisiert ist,

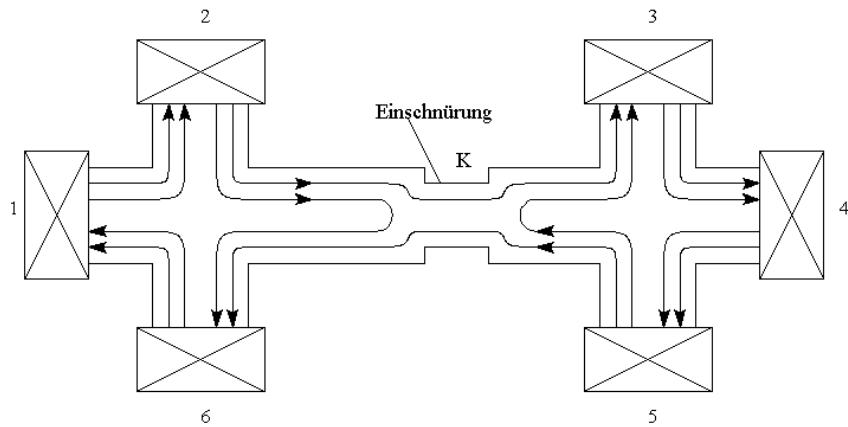
$$R_H = \frac{1}{N} \frac{h}{2e^2}$$

wobei  $N$  = Zahl der Kanäle und damit Zahl der vollen Landau-Niveaus ist. Analog kann man zeigen dass der 4-Punkts-Widerstand verschwindet,  $R_{tr}^{4P} = 0$ , während der 2-Punktwiderstand  $R_{tr}^{2P} = \frac{1}{N} \frac{h}{2e^2}$  die Zahl der Kanäle widerspiegelt.

#### Weniger einfaches Beispiel:

Wir nehmen nun an, dass

weniger einfaches Beispiel



$$\begin{aligned}T_{21} &= T_{16} = T_{43} = T_{54} = N \\ T_{32} &= T_{56} = K \quad \text{mit } 0 \leq K \leq N \\ T_{62} &= T_{35} = N - K\end{aligned}$$

Eingesetzt in das Büttiker-Schema erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \frac{h}{2e}I_1 &= \frac{h}{2e}I = N\mu_1 - N\mu_6 \\
 0 &= N\mu_2 - N\mu_1 \\
 0 &= N\mu_3 - K\mu_2 - (N-K)\mu_5 \\
 -\frac{h}{2e}I &= N\mu_4 - N\mu_3 \\
 0 &= N\mu_5 - N\mu_4 \\
 0 &= N\mu_6 - K\mu_5 - (N-K)\mu_2
 \end{aligned}$$

und somit (nach ein paar Zwischenschritten) für die Widerstände

$$\begin{aligned}
 R_{14,32} = R_{\text{tr}}^{4P} &= \frac{\mu_3 - \mu_2}{eI} = \frac{N - K}{NK} \frac{h}{2e^2} \neq 0 \quad (4 - \text{Punktwiderstandsmessung}) \\
 R_{14,41} = R_{\text{tr}}^{2P} &= \frac{\mu_4 - \mu_1}{eI} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{K} \quad (2 - \text{Punktwiderstandsmessung}) \\
 R_{14,62} = R_H &= \frac{\mu_6 - \mu_2}{eI} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{N}
 \end{aligned}$$

Hier haben wir noch ein gebräuchliche Notation eingeführt: die ersten beiden Indizes bezeichnen die Stromkontakte, die letzten beiden die Spannungskontakte. Bei dem Beispiel finden wir wieder, dass der Quanten-Hall-Widerstand quantisiert ist. Das nächste Beispiel wird aber diesen ändern.

#### Streuung über die Probe:

Streuung über die Probe wird im Allgemeinen die Quantisierung zerstören. Wir nehmen

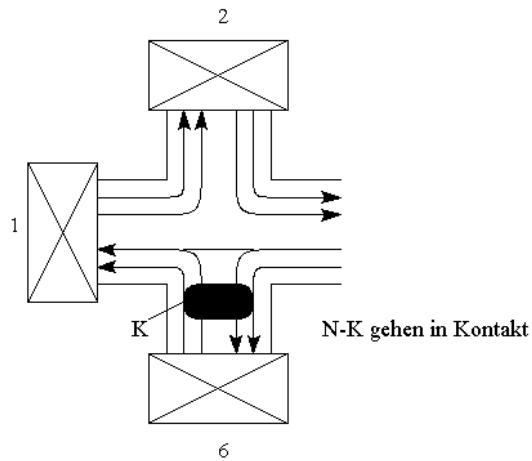


Abbildung 3.7: Die Abbildung ist hier nur ein Platzhalter. Das richtige Bild muss noch gemacht werden.

nun an, dass

$$\begin{aligned} T_{14} &= T_{32} = N \\ T_{41} &= T_{23} = N - K \\ T_{21} &= T_{43} = K \end{aligned}$$

Eingesetzt in das Büttiker-Schema erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{h}{2e}I &= N\mu_1 - K\mu_2 - (N - K)\mu_4 \\ 0 &= N\mu_4 - N\mu_1 \\ -\frac{h}{2e}I &= N\mu_3 - K\mu_4 - (N - K)\mu_2 \\ 0 &= N\mu_2 - N\mu_3 \end{aligned}$$

und somit (nach ein paar Zwischenschritten) für die Widerstände

$$R_{13,42} = R_H = \frac{\mu_4 - \mu_2}{eI} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{K}$$

das letzte Beispiel illustriert, warum der Quanten-Hall-Effekt so präzise ist. Streuer im Innern haben sie keinen Einfluss auf die Randkanäle. Deshalb sind sie unwichtig. Nur solche Streuer sind potentiell wichtig, die von einem Rand an den anderen Rand streuen. Das ist aber unwahrscheinlich, wenn die Probe genügend breit ist auf der Skala der magnetischen Länge, d.h. für  $W \gg l_c$ .

### Störstellenpotenzial

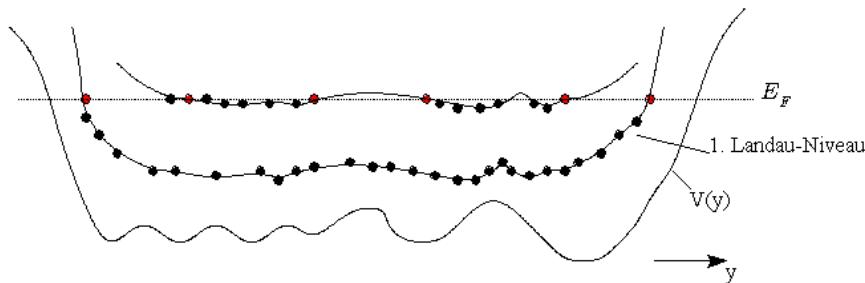


Abbildung 3.8: Landau-Niveaus mit Unordnung

Die Abbildung 3.8 illustriert, wie Störstellen die Landau-Niveaus verändern, und wir sehen, dass es bei jeder Energie Zustände gibt, die bei Variation der Fermi-Energie  $E_F$  kontinuierlich bestzt werden. Die entsprechenden Randkäle sind in Abb. 3.9 illustriert. Solange sie nicht den Rand betreffen, haben sie keinen Einfluss auf den Hall-Widerstand.

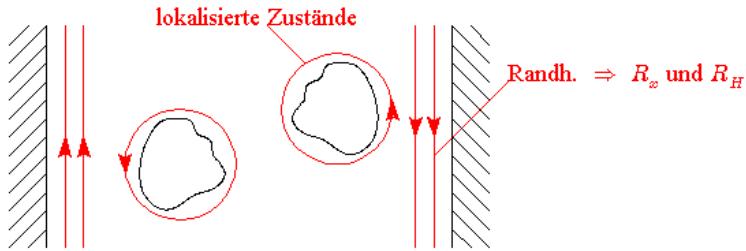


Abbildung 3.9: Randkanäle mit Unordnung

### 3.3 QHE in Graphen

Wegen seine besonderen Bandstruktur wird Graphen durch die Dirac-Gleichung masseloser Teilchen beschrieben, was zu verschiedenen ungewöhnlichen Eigenschaften führt. Es war eine Übungsaufgabe in Quantenmechanik II die Eigenzustände von Graphen in einem Magnetfeld zu bestimmen. Analog zu den oben behandelten Landau-Niveaus findet man hier ebenfalls Landau-Niveaus. Ihre Energie ist aber

$$E_{\pm} = \pm \hbar \omega_c \sqrt{n} \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Sie liegen also nicht mehr äquidistant, außerdem gibt es ein Niveau schon bei  $E = 0$ . Die Niveaus mit  $n \geq 1$  sind wieder alle  $M$ -fach entartet. Dagegen ist das  $n = 0$  Niveau nur  $M/2$  fach entartet. Hinzu kommt neben der Spinentartung, die wir hier nicht diskutiert hatten, noch eine 2-fache Entartung die die 2 Untergitter betrifft (Pseudospin). Damit wird

$$\sigma_{xy} = \frac{c}{V_H} = 2 \times 2 \times \left(i + \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{h} \quad \text{mit } i = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Das Ergebnis ist dass der Hall-Widerstand als Funktion der Fermi-Energie einen Sprung halber Höhe schon bei  $E_F = 0$  macht, gefolgt von ganzen Sprüngen bei den nächsten (nun nicht mehr äquidistanten) Landau-Niveaus. Das Bild sieht also charakteristisch anders aus, als wir es von gewöhnlichen 2-dimensionalen Systemen her kennen. Dieses Verhalten wurde im Experiment beobachtet.

### 3.4 Kompressible und inkompressible Bereiche

Siehe Chklovskii, Shklovskii, and Glazman, Phys. Rev. B **46**, 4026 (1992)

Das bisher entwickelte Bild von Randkanälen ist immer noch zu idealisiert. Es geht davon aus, dass am Rand wo das Potenzial anwächst (wir gehen hier davon aus, dass dies kontinuierlich, also nicht sprunghaft passiert) auch die Landau-Niveaus nach oben gebogenen sind und der Reihe nach von der Fermieenergie geschnitten werden. Die Niveaus unterhalb  $E_F$  sind besetzt, die darüber leer. Dies impliziert aber, dass sich die

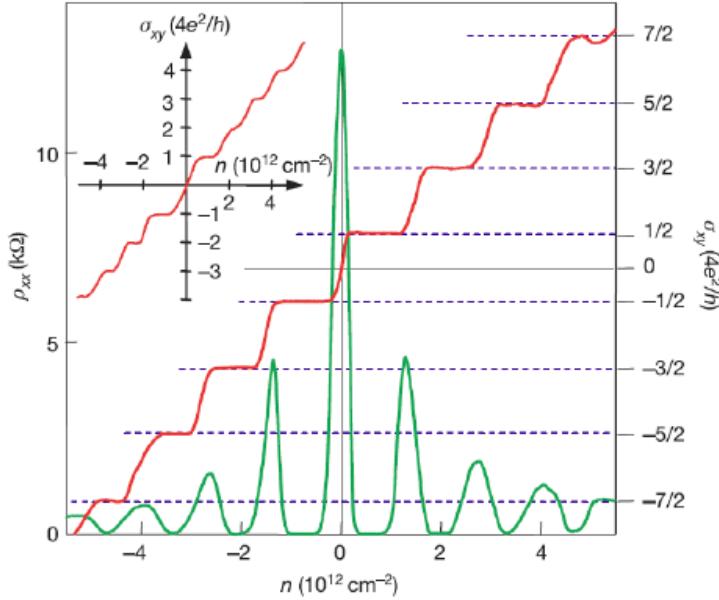


Abbildung 3.10: Graphen QHE

Elektronendichte mit dem Abstand vom Rand in Stufen ändert. Dies ist aber sicher nicht physikalisch. In der oben zitierten Arbeit wird daher das Problem selbstkonsistent analysiert, nämlich es wird berücksichtigt, dass die Elektronendichte über die Poisson-Gleichung das Potenzial beeinflusst. Dadurch wird der Potenzialverlauf am Rande stark verändert, wie in der Abbildung dargestellt. Es kommt zu einem Einrasten, derart, dass das Potenzial in gewissen Bereichen, den sogenannten "kompressiblen" Bereichen, konstant ist mit einem Wert derart dass die darüber liegenden Landau Niveaus jeweils mit anderen Landau-Niveaus weiter im Inneren der Probe zusammenfallen. Dazwischen ändert sich das Potenzial und die Landau-Niveaus kontinuierlich. Die Fermi-Energie fällt nun meist mit einem der Landau-Niveaus zusammen, das dann nur partiell gefüllt ist.

Die Bezeichnung "kompressibel" hängt mit einer thermodynamischen Relation zusammen. Es gilt für die Kompressibilität

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = \frac{V}{N^2} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \frac{1}{n^2} \left( \frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,V}.$$

In den kompressiblen Bereichen ändert sich die Dichte  $n$  stark mit einer Veränderung des chemischen Potenzials  $\mu$ , d.h. die Kompressibilität ist groß. Dazwischen ändert sich die Dichte (fast) nicht, und die Kompressibilität ist verschwindend klein.

In Experimenten, bei denen der Verlauf des elektrischen Potenzials vermessen wird, sind diese abwechselnden kompressiblen und inkompressiblen Bereiche beobachtet worden.

Das Bild der kompressiblen und inkompressiblen Bereiche lässt auch die Frage, wo der Strom fließt, in neuem Licht erscheinen. Hier kann dies nicht genügend diskutiert wer-

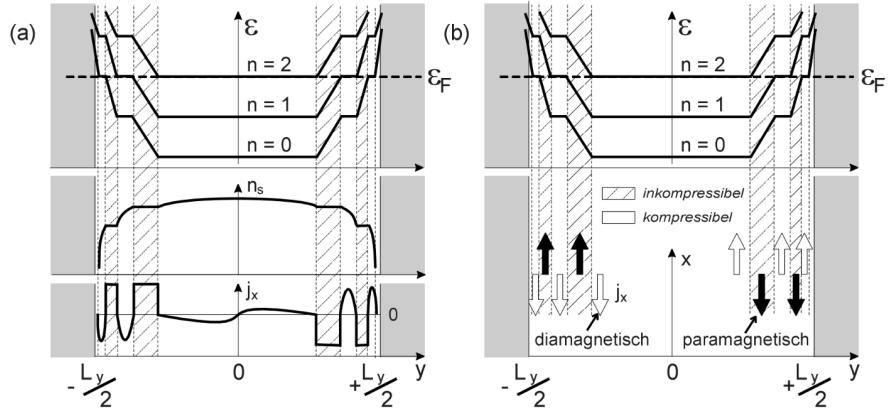


Abbildung 3.11: (a) Randmodell im Gleichgewicht nach Geller und Vignale. Die Spinaufspaltung ist nicht berücksichtigt, inkompressible Bereiche sind grau hinterlegt. Gezeigt sind die Verläufe des selbstkonsistenten elektrostatischen Potentials und der Elektronenkonzentration. Zusätzlich aufgeführt ist auch die lokale Stromdichte, die sich lokal in den einzelnen Streifen paramagnetisch ( $\propto dV(y)/dy$ ) oder diamagnetischen ( $\propto dns(y)/dy$ ) bei entgegengesetztem Vorzeichen verhält, wie in (b) nochmals deutlicher gekennzeichnet. (Quelle: Erik Ahlswede - Potential- und Stromverteilung beim Quanten-Hall-Effekt bestimmt mittels Rasterkraftmikroskopie)

den. Wir wollen nur soviel betonen: Der Strom fließt **nicht** dort lokalisiert, wo wir es aufgrund des einfachen Randkanalbildes erwarten würden, nämlich scharf lokalisiert dort wo die (nicht selbstkonsistent bestimmten) Landau-Niveaus die Fermieenergie schneiden. Stattdessen fließt er in räumlich weit ausgedehnteren Bereichen. Auch dies wurde in Experimenten bestätigt.

## Kapitel 4

# Molekulare Elektronik

## Kapitel 5

# Quanteninterferenzeffekte

In nanoskaligen Systemen kann die Phasenkohärenzlänge  $L_\phi$  größer oder vergleichbar mit der Systemgröße  $L$  sein. In diesen Systemen führen Interferenzeffekte der Elektronenwellenfunktionen zu beobachtbaren Effekten. Wichtige Beispiele sind der Aharonov-Bohm Effekt und verwandte Effekte, die in folgenden Abschnitten diskutiert werden. Interferenzeffekte führen auch zu einer Änderungen der Leitfähigkeit in ungeordneten Proben, bekannt als “schwache Lokalisierung” mit einer charakteristischen Magnetfeldabhängigkeit. Eine weitere Konsequenz sind die sogenannten “universellen Leitwertfluktuationen”.

## 5.1 Der Aharonov-Bohm-Effekt

Der Aharonov-Bohm-Effekt ist ein quantenmechanischer Interferenzeffekt. Er beruht darauf, dass die Phase der Wellenfunktion durch ein Vektorpotenzial, verbunden mit einem angelegten Magnetfeld kontrolliert werden kann. (Durch einen geeigneten Aufbau des Experiments kann man sicherstellen, dass das Experiment nicht durch die Lorentzkraft beeinflusst wird.) Der Effekt wurde zuerst für im Vacuum propagierende Elektronen in einer Geometrie die vergleichbar ist mit dem Youngschen Doppelspalt-Versuch (siehe die Abb.). Er ist aber auch sehr schön in nanoelektronischen Ringstrukturen beobachtbar.

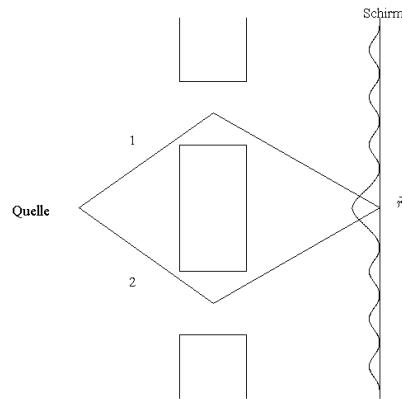


Abbildung 5.1: Doppelspalt

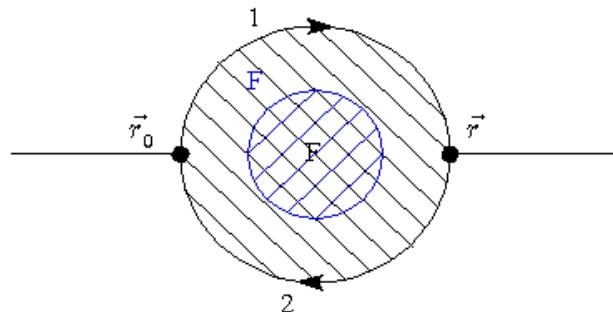


Abbildung 5.2: Ringstruktur

Der Hamilton-Operator eines geladenen Teilchens im Magnetfeld lautet

$$H_B = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}).$$

Angenommen wir kennen die Wellenfunktion ohne Magnetfeld:  $H_0\psi_0(\vec{r}) = E\psi_0(\vec{r})$ , und nehmen wir weiter an, dass wir uns - wie in den beiden darstellten Geometrien - im

wesentlichen auf eindimensionale Wellenausbreitung beschränken können. Dann erhalten wir für die Wellenfunktion im Magnetfeld  $H_B \psi_B(\vec{r}) = E \psi_B(\vec{r})$  die folgende Lösung

$$\psi_B^{(p)}(\vec{r}) = \psi_0^{(p)}(\vec{r}) \exp \left[ \frac{i}{\hbar c} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}^{(p)}} \vec{A}(\vec{r}') d\vec{r}' \right]$$

Hierbei drückt der Index  $p$  die Pfadabhängigkeit aus.

Elektronenpartialwellen, die von der Quelle beim Doppelspalt oder vom Kontakt bei  $\vec{r}_0$  ausgehen, interferieren auf dem Schirm bzw. beim andern Kontakt bei  $\vec{r}$ , d.h. die Wellenfunktion dort ist die Summe der Partialwellenfunktionen. Ohne Magnetfeld haben wir

$$\psi_0(\vec{r}) = \psi_0^{(1)}(\vec{r}) + \psi_0^{(2)}(\vec{r}) = |\psi_0^{(1)}(\vec{r})| e^{i\theta_0^{(1)}} + |\psi_0^{(2)}(\vec{r})| e^{i\theta_0^{(2)}}$$

D.h.

$$|\psi_0(\vec{r})|^2 = |\psi_0^{(1)}|^2 + |\psi_0^{(2)}|^2 + 2|\psi_0^{(1)}||\psi_0^{(2)}| \cos(\theta_0)$$

wobei  $\theta_0 = \theta_0^{(1)} - \theta_0^{(2)}$ . Wir sehen an dieser Stelle den bekannten quantenmechanischen Interferenzeffekt: abhängig von der Phasendifferenz  $\theta_0$  gibt es eine konstruktive oder destruktive Interferenz. Für  $\psi_0^{(1)} = \psi_0^{(2)}$  und  $\theta_0 = 0$  ist  $|\psi_0(\vec{r})|^2 = 4|\psi_0^{(1)}|^2$ , d.h. doppelt so groß wie bei klassischer Addition von Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, bzw. für  $\theta_0 = \pi/2$  gilt  $|\psi_0(\vec{r})|^2 = 0$ .

Das Vektorpotenzial verändert die Phasen. Es gilt

$$\begin{aligned} \theta_B^{(1)} &= \theta_0^{(1)} + \frac{i}{\hbar c} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}^{(1)}) d\vec{r}^{(1)} \\ \theta_B^{(2)} &= \theta_0^{(2)} + \frac{i}{\hbar c} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}^{(2)}) d\vec{r}^{(2)} \end{aligned}$$

wobei für  $\theta^{(1)}$  der obere Weg (1) und für  $\theta^{(2)}$  der untere Weg (2) zu nehmen ist. Für die Differenz der Phasen erhalten wir damit

$$\theta_B = \theta_0 - \frac{i}{\hbar c} \oint \vec{A}(\vec{r}) d\vec{r}$$

wobei die Integration vorwärts längs (2) und zurück längs (1) sich zu einer geschlossenen Kontour zusammenfassen lässt. (Der Vorzeichenwechsel ist nötig, damit das Umlaufintegral, wie es sich gehört, im Gegenuhrzeigersinn läuft.)

Unter Verwendung des Stoke'schen Satzes können wir das Linienintegral in ein Flächenintegral umschreiben

$$\begin{aligned} \oint \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} &= \oint_F \text{rot} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{f} \\ &= \oint_F \vec{B}(\vec{r}) \cdot d\vec{f} = \Phi \end{aligned}$$

und stellen fest, dass es gerade der von den Wegen eingeschlossene magnetische Fluss ist. Für Elektronen mit  $q = -e$  und der Definition des Flussquantes

$$\phi_0 = \frac{hc}{e}$$

erhalten wir somit

$$\theta_B = \theta_0 + i 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

Wir sehen also, dass man durch Variation des Magnetfelds die Wellenfunktion am Kontakt  $\vec{r}$  zwischen maximalen und minimalen Werten verändern kann. Dies äußert sich durch eine entsprechende Variation des Leitwertes des Systems, der in geeigneten Experimenten beobachtet wird.

#### Bemerkungen:

1. Das ideales Aharonov-Bohm-Experiment beschränkt Magnetfelder auf Bereiche, in denen Elektronen nicht propagieren, damit diese keine Lorentzkraft spüren, sondern nur die Auswirkung des Vektorpotentials. In Festkörpern ist die Lorentzkraft aber relativ schwach, sodass einfach ein homogenes Magnetfeld angelegt werden kann.
2. Viele Kanäle addieren sich stochastisch, und  $\theta_1 - \theta_2$  ist stochastisch verteilt. D.h., der Effekt wächst nur mit  $\sqrt{N}$ , und ist daher nur in nanoskaligen Systemen mit dünnen Ringen zu beobachten.
3. Vergleichen Sie hierzu die Übungsaufgabe für die Transmission einer Ringstruktur.

$$T = \frac{4\varepsilon}{1 - 2(1 - 2\varepsilon) \cos\left(2\theta_0 + 2\pi \frac{\phi}{\phi_0}\right) + (1 - 2\varepsilon)^2}$$

## 5.2 Schwache Lokalisierung

Für weiterführende Literatur siehe

S. Chakravarty, A. Schmidt (Phys. Rep. 140, 193 (1986))

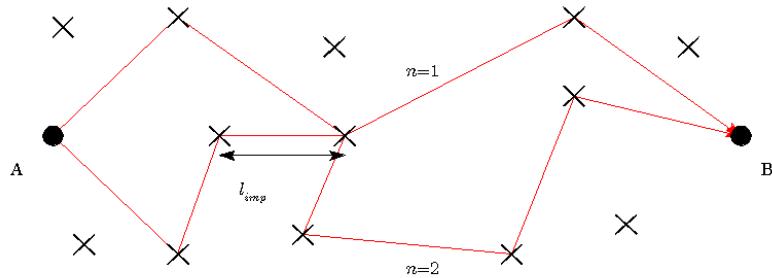
G. Bergmann (Phys. Rev. 107)

Altshuler, Aronov, Khmelnitskii, Larkin, in "Quantum Theory of Solids"

Die schwache Lokalisierung ist ein Effekt, der auf der Interferenz zeitumgekehrter Elektronenpfade in einem Material mit Störstellen beruht. Hierzu werden wir als erstes die Rückstreuwahrscheinlichkeit eines Elektrons zu seinem ursprünglichen Startpunkt betrachten, zunächst unter der Annahme dass die Propagation phasenkohärent ist.

### 5.2.1 Rückstreuwahrscheinlichkeit

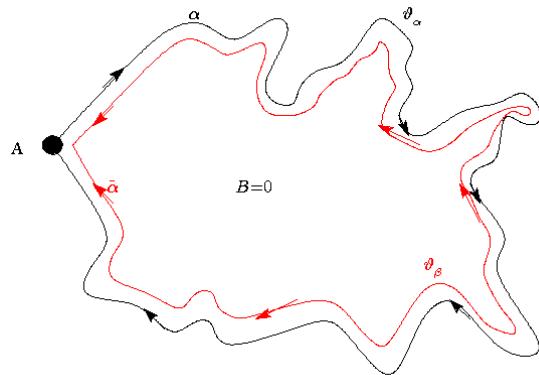
Wir wissen, dass der Leitfähigkeit zwischen zwei Punkten A und B proportional zur Transmissionswahrscheinlichkeit ist  $\sigma \propto T_{AB} = |t_{AB}|^2 = 1 - R_A$ . Diese Wahrscheinlichkeit setzt



sich aus einem klassischen und einem quantenmechanischen Anteil zusammen

$$T_{AB} = \left| \sum_{\alpha} t_{\alpha} \right|^2 = \underbrace{\sum_{\alpha} |t_{\alpha}|^2}_{\text{klassisch}} + \underbrace{\sum_{\beta \neq \alpha} t_{\alpha} t_{\beta}^*}_{\text{quantenmechanisch}}$$

Statt der Transmission von A nach B ist es einfacher die Rückkehrwahrscheinlichkeit zu berechnen. Eine erhöhte Rückkehrwahrscheinlichkeit bedeutet eine Reduzierung des Leitwertes. Bezeichnen wir mit  $t_{\alpha}(A)$  die Transmissionsamplitude im Kanal  $\alpha$  von A zurück nach A, dann gilt



$$R_A = \left| \sum_{\alpha} t_{\alpha}(A) \right|^2 = \sum_{\alpha} |t_{\alpha}(A)|^2 + \sum_{\alpha \neq \beta} t_{\alpha}(A) t_{\beta}^*(A)$$

Der Beitrag von verschiedenen Pfaden mittelt sich statistisch wegen der verschiedenen Längen und der stochastischen Phasen bei der Streuung an Störstellen weg, mit einer Ausnahme, nämlich das Produkt was sich aus einem Pfad  $\alpha$  und seinem zeitumgekehrten

Pfad  $\bar{\alpha}$  ergibt, die dieselben Phasenverschiebungen erleiden.

$$\begin{aligned}
R_A &= \sum_{\alpha} |t_{\alpha}(A)|^2 + \sum_{\alpha \neq \bar{\alpha}} t_{\alpha}(A) t_{\bar{\alpha}}^*(A) + \underbrace{\sum_{\beta \neq \alpha, \bar{\alpha}} t_{\alpha}(A) t_{\beta}^*(A)}_{\text{mittelt sich stochastisch weg}} \\
&= 2 \sum_{\alpha} |t_{\alpha}(A)|^2 \\
&= 2 \times \text{klassischesErgebnis}
\end{aligned}$$

Wie wir nun sehen, ist die Rückstreuwahrscheinlichkeit beim quantenkohärenten Transport doppelt so groß wie im klassischen Fall. Das beruht auf der Phasenkohärenz der zeitumgekehrten Pfade, die wir im klassischen Fall nicht haben. Das bedeutet eine Reduktion der Leitfähigkeit, was als schwache Lokalisierung bezeichnet wird.

### 5.2.2 Diffusionsgleichung

Zur quantitativen Berechnung der Leitfähigkeit erinnern wir daran, dass sie mit der Diffusionskonstante und Zustandsdichte verknüpft ist,  $\sigma = 2e^2 N(0) \cdot D$ , mit  $N(0)_{3D} = \frac{p_F^2}{2\pi^2 \hbar^3 v_F}$  und

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} dt \underbrace{\langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \rangle}_{v_F^2 e^{-\frac{t}{\tau_{imp}}}} = \frac{v_F^2 \tau_{imp}}{3}$$

Eine erhöhte Rückkehrwahrscheinlichkeit auf Grund der quantenmechanischen Kohärenz  $\tilde{W}_t$  liefert (nach einigen hier übersprungenen Überlegungen)

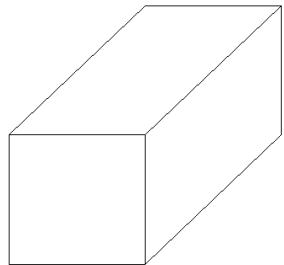
$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2}{\pi\hbar} D \int_{\tau_{imp}}^{\infty} dt \tilde{W}_t$$

Da eine Rückkehr zum Aufpunkt mindestens eine Streuung an einer Störstelle erfordert, fügen wir als unter Grenze des Integrals die entsprechende Zeitkonstante ein.

Die kohärente Rückkehrwahrscheinlichkeit erhalten wir aus einer Diffusionsgleichung, in der wir auch den Zerfall der Kohärenz auf der Zeitskala  $\tau_{\varphi}$  berücksichtigen können,

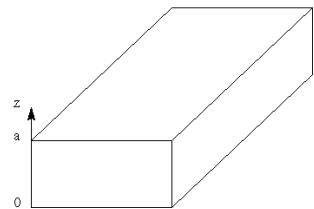
$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - D \nabla^2 + \frac{1}{\tau_{\varphi}} \right) \tilde{W}_{\vec{r}, r_i, t, t_i} = \delta(t - t_i) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) .$$

Deren Lösungen in 1, 2 und 3 Dimensionen sind  
3D:



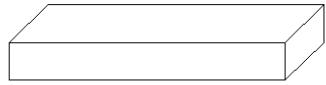
$$\tilde{W}_{\vec{r},0,t,0} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4Dt} - \frac{t}{\tau_\varphi}}$$

2D: (Filmdicke  $a \ll \sqrt{Dt}$ )



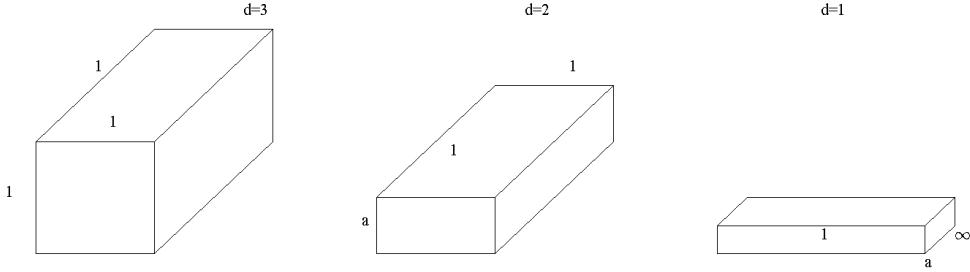
$$\tilde{W}(\vec{r}, 0, t, o) = \frac{1}{4\pi Dta} e^{-\frac{r^2}{4Dt} - \frac{t}{\tau_\varphi}}$$

1D:  $a \ll \sqrt{Dt}$



$$\tilde{W}(x, 0, t, 0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dta^2}} e^{-\frac{x^2}{4Dt} - \frac{t}{\tau_\varphi}}$$

Wir definieren den Leitwert ,  $g = \sigma \cdot a^{3-d}$ , der folgenden Elemente



Auswerten von  $\int_{\tau_{imp}} dt \tilde{W}_t$  liefert für  $a \ll L_\varphi = \sqrt{D\tau_\varphi}$

$$\Delta g = a^{3-d} \Delta \sigma = -\frac{e^2}{h} \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{l_{imp}} - \frac{1}{\sqrt{D\tau_p}}, & d = 3; \\ \ln\left(\frac{\tau_\varphi}{\tau_{imp}}\right), & d = 2; \\ 2\pi \sqrt{D\tau_\varphi}, & d = 1. \end{cases}$$

Da  $\Delta g$  über  $\tau_\varphi(T)$  temperaturabhängig ist, lassen sich die "schwachen Lokalisierungs-Korrekturen" auch über einem unbekannten Untergrund messen.

### 5.2.3 Schwache Lokalisierung im Magnetfeld

Wir wollen nun den Einfluss eines Magnetfelds auf die schwache Lokalisierung untersuchen. Dazu müssen wir die Diffusionsgleichung erweitern

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + D \left( -i\vec{\nabla} - \frac{2e}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + \frac{1}{\tau_\varphi} \right] \tilde{W}_t(\vec{r}, 0, t, 0) = \delta(t)\delta(\vec{r})$$

Wir betrachten zwei Konfigurationen.

a) Angenommen das Magnetfeld  $\vec{B}$  ist parallel zum Film. Dann können wir  $\vec{A} = (0, -B(z-a/2), 0)$  wählen Mitteln der Diffusionsgleichung über z liefert dann

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} - D (\partial_x^2 + \partial_y^2) + \frac{1}{\tau_B} + \frac{1}{\tau_\varphi} \right] \tilde{W} = \delta(t)\delta(x)\delta(y)$$

wobei

$$\frac{1}{\tau_B} = D \left( \frac{2e}{\hbar c} \right)^2 \frac{1}{a} \int_0^\alpha dz A^2(z) = \frac{1}{3} D \left( \frac{eBa}{\hbar c} \right)^2$$

zu  $1/\tau_\varphi$  addiert wird,  $1/\tau_\varphi \rightarrow 1/\tau_\varphi + 1/\tau_B$ . D.h., das Magnetfeld zerstört effektiv die Phasenkohärenz. Die schwache Lokalisierungskorrektur zu Leitfähigkeit ist daher

$$\Delta g = -\frac{e^2}{h} \ln \left( \frac{\frac{1}{\tau_{imp}}}{\frac{1}{\tau_\varphi} + \frac{1}{\tau_B}} \right) = -\frac{e^2}{h} \left[ \ln \frac{\tau_\varphi}{\tau_{imp}} - \tau_\varphi \frac{D}{3} \cdot \left( \frac{eBa}{\hbar c} \right)^2 + \dots \right]$$

b) Angenommen  $\vec{B}$  zeigt senkrecht zum Film  $\Rightarrow \vec{A} = (0, Bx, 0)$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} - D \left( \frac{1}{i} \partial_x^2 + \left( \frac{1}{i} \partial_y^2 - \frac{2eB}{\hbar c} x \right)^2 \right) + \frac{1}{\tau_\varphi} \right] \tilde{W} = \delta(t) \frac{1}{a} \delta(x) \delta(y)$$

Auf Grund der Ähnlichkeit zur Schrödinger-Gleichung für die Landau-Niveaus suchen wir Lösungen in der Form

$$\psi_n \left( x - \frac{\hbar c}{2eB} k \right) e^{iky - \omega_n t - t/\tau_\varphi}$$

mit  $\omega_n = \frac{4eBD}{\hbar c} \left( n + \frac{1}{2} \right)$ .

Die Randbegingung

$$\tilde{W}(\vec{r}_f, \vec{r}_i, t, 0) \xrightarrow[t \rightarrow 0]{} \delta(t) \frac{1}{a} \delta(\vec{r}_f - \vec{r}_i)$$

wird erfüllt durch

$$\tilde{W}(\vec{r}_f, \vec{r}_i, t, 0) = \frac{1}{a} \sum_n \int \frac{dk}{2\pi} \psi_n \left( x_f - \frac{\hbar ck}{2eB} \right) \psi_n^* \left( x_i - \frac{\hbar ck}{2eB} \right) e^{ik(y_f - y_i) - \omega_n t - t/\tau_\varphi}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \tilde{W}_t \equiv W(0, 0, t, 0) &= \frac{1}{a} \frac{1}{2\pi} \sum_n \underbrace{\int dq \psi_n(q) \psi_n^*(q) e^{-\omega_n t - \frac{t}{\tau_\varphi}}}_1 \\ &= \frac{2eB}{2\pi\hbar ca} \sum_n e^{-4\frac{eBD}{\hbar c}(n+\frac{1}{2})t} \left[ e^{-\frac{t}{\tau_\varphi}} - e^{-\frac{t}{\tau_{imp}}} \right] \end{aligned}$$

Der letzte Term wurde abgezogen um einen Kurzzeit cut-off zu bieten. Für die Korrektur zur Leitfähigkeit erhalten wir somit

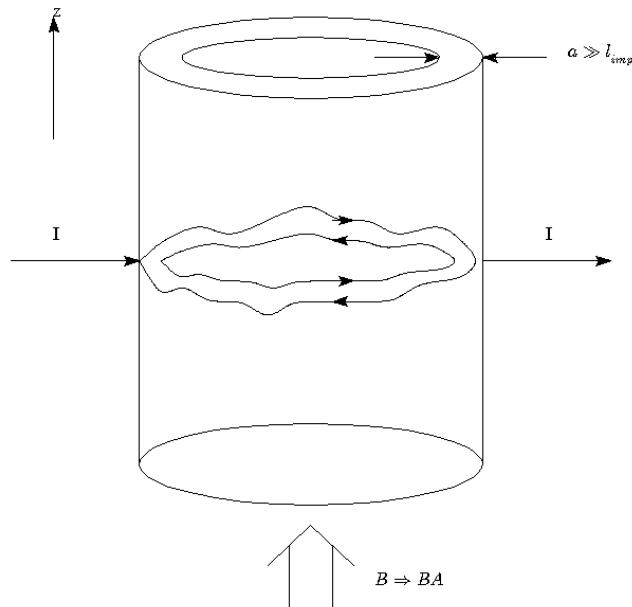
$$\begin{aligned} \Delta g &= -\frac{2e^2}{\pi\hbar} D \int_0^\infty dt \tilde{W}_t \\ &\sim -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left[ \ln \frac{\tau_\varphi}{\tau_{imp}} - \frac{1}{6} \left( \frac{eBD\tau_\varphi}{\hbar c} \right)^2 + \dots \right] \end{aligned}$$

In beiden Fällen sehen wir, dass ein Magnetfeld die Phasenkohärenz zerstört, die die Basis der schwachen Lokalisierung ist. D.h. der Effekt der schwachen Lokalisierung geht mit steigendem Magnetfeld zurück und die Leitfähigkeit nimmt zu. Dieses ungewöhnliche Verhalten wird als anomaler Magnetowiderstand bezeichnet.

### 5.2.4 Sharvin-Sharvin-Experiment

Das Sharvin-Sharvin-Experiment (Vater und Sohn) von 1981 ist ähnlich dem Aharonov-Bohm-Experiment, mit dem Unterschied, dass es sich hier um einen Zylinder handelt, und nicht nur um einen einfachen Ring.

Wir haben gesehen, dass beim Aharonov-Bohm-Effekt auf Grund von Interferenzeffekten der Leitwert periodisch vom eingeschlossenen magnetischen Fluss  $\Phi$  abhängt mit der Periode  $\Phi_0$ . Die Frage war die Phase  $\theta_0$  ist, also ob z.B. bei  $\Phi = 0$  ein Maximum oder Minimum oder sonst etwas vorliegt, hängt von mikroskopischen und unkontrollierten Details ab. Ein Zylinder kann als Parallelschaltung mehrerer Ringe angesehen werden. Wenn man nun davon ausgeht, dass in jedem einzelnen Ring eine Oszillation mit einer anderen Phase vorherrscht, so bedeutet das, dass wir für den Zylinder über alle Phasen mitteln müssen, was aber zur Auslöschung der Oszillationen führt. Das Experiment zeigt jedoch, dass es Oszillationen als Funktion von  $\Phi$  gibt, die diese Mittelung „überleben“, allerdings mit einer anderen Periode, nämlich  $\Phi_0/2 = hc/2e$ . Zur Berechnung von  $\tilde{W}_t$  gehen wir von der



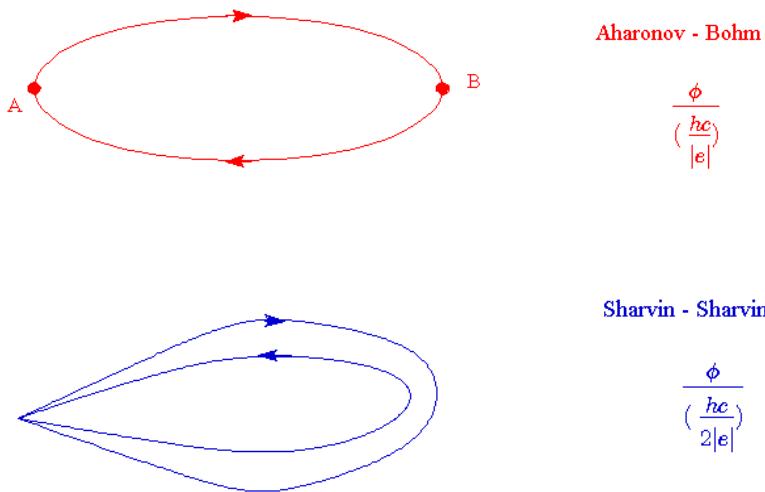
2-D Form aus, allerdings kann die Diffusion mehrfach ( $n$ -fach) um den Zylinder erfolgen, und der eingeschlossene Fluss hängt von dieser Windungszahl ab. Ein Faktor 2 kommt beim Fluss hinzu, weil ja die Interferenz von zwei gegeneinanderlaufenden Partialwellen

relevant ist. Also gilt

$$\begin{aligned}
 \tilde{W}_t &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{4\pi D t a} e^{-\frac{n^2 L^2}{4Dt} + i \frac{4\pi n \phi}{\phi_0}} e^{-\frac{t}{\tau_\varphi}} \\
 &\approx W_t^0 + 2 \cos\left(4\pi \frac{\phi}{\phi_0}\right) \cdot \frac{1}{4\pi D t a} \cdot e^{-\frac{L^2}{4Dt}} e^{-\frac{t}{\tau_\varphi}} \\
 \Rightarrow \Delta g &= \Delta g(B=0) - \frac{2e^2}{h\pi} \cos\left(4\pi \frac{\phi}{\phi_0}\right) \int_{\tau_{\text{imp}}}^{\infty} dt \frac{e^{-\frac{L^2}{4Dt}} e^{-\frac{t}{\tau_\varphi}}}{t} \\
 &= \Delta g(B=0) - \frac{4e^2}{h\pi} \cos\left(4\pi \frac{\phi}{\phi_0}\right) K_0\left(\frac{L}{l_\varphi}\right)
 \end{aligned}$$

wobei  $l_\varphi = \sqrt{D\tau_\varphi}$  die Phasenkphärenlänge und  $K_0$  eine modifizierte Besselfunktion ist. Das zeigt, dass die Leitfähigkeit mit der Periode  $\phi_0/2 = hc/(2|e|)$  oszilliert.

Zum Vergleich: Der Aharonov-Bohm-Effekt liefert Oszillationen mit der Periode  $\phi_0 = \frac{hc}{|e|}$ . Dagegen beruht der Sharvin-Sharvin-Effekt auf einer "pairing of trajectories". Das bedeutet, dass Trajektorien und zeitumgekehrte Trajektorien interferieren, wodurch die zweite Harmonische (der Oszillationen) auftritt.



### 5.3 Universelle Leitwertfluktuationen

Das detaillierte Interferenzmuster hängt von der jeweiligen Konfiguration der Störstellen der Probe ab. Dabei sind neben Phasenverschiebungen bei der Streuung auch die Phasenänderungen, die das Elektron zwischen den Streuungen an den Störstellen erwirkt,

wichtig. Der Leitwert ändert sich daher auch, wenn das Magnetfeld geändert wird. Das Ergebnis sieht zunächst aus wie zufällige Schwankungen, allerdings sind diese völlig reproduzierbar, solange die Störstellen nicht neu verteilt werden (z.B nach einem Aufheizen). Diese probenspezifischen Schwankungen nennt man daher ‘‘magnetische Fingerabdrücke’’.

Leitwertfluktuationen können in Abhängigkeit von einem Magnetfeld, einem elektrischen Feld oder der Fermienergie sowie durch Umordnung der Störstellenkonfiguration auftreten. Zur quantitativen Analyse betrachten wir  $\delta G = [\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2]^{\frac{1}{2}}$ , wobei  $\langle \rangle$  die Mittelung über die Störstellenposition bedeutet. Klassisch erwarten wir, dass für große Proben die relativen Schwankungen proportional zu  $\delta G/G \propto \sqrt{l_\varphi/L}$  verschwinden, wobei  $L/l_\varphi$  die Zahl der inkohärenten und daher phasenmäßig unabhängigen Blöcke ist. Insofern war es eine Überraschung in den 80er Jahren, als Altshuler sowie Lee und Stone zeigten, dass  $\delta G$  einen universellen Wert hat  $\delta G \approx 2e^2/h$ .

Gemäß der Landauer-Formel drücken wir den Leitwert durch die Transmissionskoeffizienten aus. Diese sind aber nicht unabhängig voneinander, da sich ihr Wert als Ergebnis vieler Streuprozesse ergibt. Im Gegensatz dazu fluktuiieren die Reflexionskoeffizienten  $r_{ij}$ , die nur einen Streuprozess brauchen, unabhängig voneinander. Wir schreiben daher

$$\begin{aligned} G &= \frac{2e^2}{h} \cdot \sum_{ij} |t_{ij}|^2 = \frac{2e^2}{h} \left( N - \sum_{ij} |r_{ij}|^2 \right) \\ \langle G^2 \rangle &= \left( \frac{2e^2}{h} \right)^2 \left[ N^2 - 2N \sum_{ij} \langle |r_{ij}|^2 \rangle + \sum_{ijkl} \langle |r_{ij}|^2 |r_{kl}|^2 \rangle \right] \end{aligned}$$

und somit

$$\delta G^2 = \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2 = \left( \frac{2e^2}{h} \right)^2 \left[ \sum_{ijkl} (\langle |r_{ij}|^2 |r_{kl}|^2 \rangle - \langle |r_{ij}|^2 \rangle \langle |r_{kl}|^2 \rangle) \right].$$

Die Annahme unkorrelierter Reflexionswahrscheinlichkeiten  $R_{ij} = |r_{ij}|^2$  bedeutet

$$\begin{aligned} \sum_{i \neq k, j \neq l} \langle |r_{ij}|^2 |r_{kl}|^2 \rangle &= \langle |r_{kl}|^2 \rangle \sum_{i \neq k, j \neq l} \langle |r_{ij}|^2 \rangle = \langle R_{kl} \rangle \sum_{i \neq k, j \neq l} \langle R_{ij} \rangle \\ \sum_{i=k, j=l} \langle |r_{ij}|^2 |r_{kl}|^2 \rangle &= \langle |r_{kl}|^4 \rangle = \langle R_{kl}^2 \rangle \end{aligned}$$

und für die Leitwertfluktuationen ergibt sich somit

$$\delta G^2 = \left( \frac{2e^2}{h} \right)^2 \sum_{ij} (\langle R_{ij}^2 \rangle - \langle R_{ij} \rangle^2) = \left( \frac{2e^2}{h} \right)^2 N^2 (\delta R_{ij})^2.$$

Wir schreiben nun die Reflexionswahrscheinlichkeiten als Betragsquadrat der Summe der Reflexionsamplituden  $A_p$  aller Pfade  $\alpha$ , die  $i$  und  $j$  verbinden,  $R_{ij} = |\sum_\alpha A_\alpha|^2$ . Damit

ergeben sich die Relationen

$$\begin{aligned}
\langle R_{ij} \rangle &= \left\langle \sum_{\alpha\beta} A_\alpha^* A_\beta \right\rangle = \sum_{\alpha} |A_\alpha|^2, \\
\langle R_{ij}^2 \rangle &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle A_\alpha^* A_\beta A_\gamma^* A_\delta \rangle \\
&= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle |A_\alpha|^2 \rangle \langle |A_\beta| \rangle^2 (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\gamma\beta}) = 2\langle R_{ij} \rangle^2, \\
(\delta R_{ij})^2 &= \langle R_{ij} \rangle^2
\end{aligned}$$

Für die Leitwertfluktuationen ergibt sich als Zwischenergebnis

$$\delta G = \frac{2e^2}{h} N \langle R_{ij} \rangle,$$

und wir benötigen noch einen Ausdruck für  $\langle R_{ij} \rangle$ .

In zwei Dimensionen gilt nun für die Leitfähigkeit

$$\sigma^{2D} = \frac{n^{2D} e^2 \tau_{imp}}{m} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} k_F v_F \tau_{imp} = \frac{e^2}{h} k_F l_{imp}$$

und damit den Leitwert

$$G = \frac{W}{L} \frac{e^2}{h} k_F l_{imp} = \frac{2e^2}{h} \frac{\pi l_{imp}}{2L} N,$$

wobei wir die zweidimensionale Zustandsdichte  $n^{2D} = 2\pi k_F^2 / (2\pi)^2$  und die Anzahl der Kanäle  $N = Wk_F/\pi$  benutzt haben. Wegen

$$\sum_{ij} |r_{ij}|^2 = N - \sum_{ij} |t_{ij}|^2 = N - \frac{G}{2e^2/h} = N(1 - \frac{\pi l_{imp}}{2L})$$

erhalten wir die Beziehung

$$\langle R_{ij} \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{ij} \langle |r_{ij}|^2 \rangle = \frac{1}{N} \left(1 - \frac{\pi l_{imp}}{2L}\right).$$

Für die Leitwertfluktuationen gilt damit schließlich

$$\delta G = \frac{2e^2}{h} \left(1 - \frac{\pi l_{imp}}{2L}\right).$$

Für Systeme deren Abmessungen groß gegenüber der mittleren freien Weglänge sind ( $L \gg l_{imp}$ ) ist somit  $\delta G \approx 2e^2/h$ .

# Kapitel 6

## Spintronik

### 6.1 Majoritäts- und Minoritätsspin

Die Spintronik (aus den Worten Spin und Elektronik), manchmal auch Spinelektronik genannt, ist ein neues Forschungsgebiet in der Nanoelektronik. Sie nutzt das magnetische Moment des Elektrons, das mit dem Spin verknüpft ist, zur Informationsdarstellung und -verarbeitung und nicht nur dessen Ladung wie in der herkömmliche Elektronik. Ein wichtiges Prinzip ist die Möglichkeit der Spininjektion z. B. von einem Ferromagneten in einen Halbleiter oder metallisches Material. Dadurch werden in den genannten Materialien spinpolarisierte Ströme erzeugt, die mit Betrag und Richtung als zusätzliche Eigenschaften für die Informationsdarstellung genutzt werden können. Unter dem älteren Begriff Magnetoelektronik wird ähnliches verstanden, allerdings ist in dem allgemeineren Begriff Spintronik u. a. auch dem Rechnung getragen, dass man Spins nicht nur mit Magnetfeldern, sondern z. B. auch mit elektrischen Feldern manipulieren kann.

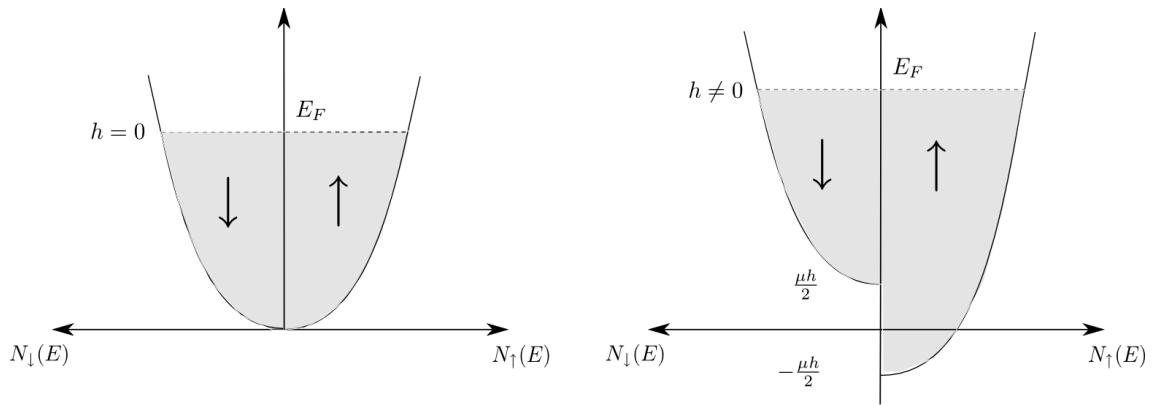
Die Spintronik bezieht sich auf *spinabhängigen* elektronischen Transport. Hierbei spielen itinerante Ferromagnete (Bandferromagnete), z. B. Eisen (Fe), Cobalt (Co) oder Nickel (Ni) eine wesentliche Rolle. Am einfachsten ist es, den Magnetismus durch ein Austauschfeld  $\vec{h}$  zu beschreiben, so dass der Hamilton-Operator wie folgt lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x) - \frac{\mu}{\hbar} \vec{h} \cdot \vec{S}.$$

Hierbei ist  $\mu$  das magnetische Moment und  $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$  der Spinoperator, der durch Pauli Matrizen ausgedrückt werden kann

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}.$$

Aufgrund des Austauschfeldes ist die Zustandsdichte der Elektronen mit Spin parallel bzw. antiparallel zum Austauschfeld verschieden. Für eine energieabhängige Zustands-



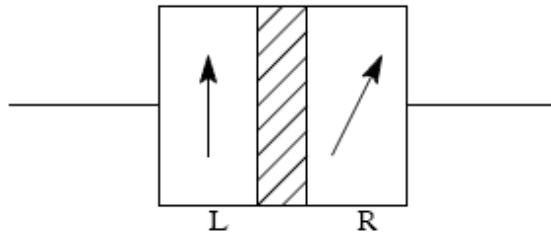
dichte  $N_0(E)$  gilt für die Majoritäts- ( $M$ ) bzw. Minoritäts-Spins ( $m$ )

$$N_M(E) = N_0 \left( E + \frac{\mu h}{2} \right) \quad \text{Zustandsdichte für } e^- \text{ mit Spin } \uparrow,$$

$$N_m(E) = N_0 \left( E - \frac{\mu h}{2} \right) \quad \text{Zustandsdichte für } e^- \text{ mit Spin } \downarrow.$$

## 6.2 Tunnel-Magnetowiderstand (TMR)

Eine Struktur zur Messung des TMR besteht aus zwei Schichten ferromagnetischen Materials, die durch eine dünne Schicht nichtmagnetischen Isolators getrennt sind, durch die die Elektronen hindurchtunnellen können. Mit Hilfe eines äußeren Magnetfeldes kann die Richtung des Spins der magnetischen Schichten (in Maßen) unabhängig voneinander gesteuert werden. Wenn die magnetischen Schichten gleich ausgerichtet sind, ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron durch die Isolatorschicht zwischen ihnen tunneln, größer (und damit der elektrische Widerstand kleiner) als bei nicht paralleler Ausrichtung.



### 6.2.1 Jullière-Modell

Wir erinnern daran, dass wir in unmagnetischen Systemen ausgehend von einem Tunnel-Hamilton-Operator

$$H = H_L + H_R + \sum_{q,k;\sigma} T_{qk} c_{k\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + h.c.$$

den Leitwert

$$\frac{1}{R_T} = G_T = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \cdot \frac{2\pi e^2}{\hbar} \cdot |T|^2 \cdot N_L N_R$$

erhalten, wobei  $N_L$  und  $N_R$  die Zustandsdichten der beiden Elektroden an der Fermi-Kante sind und  $T = T_{qk}$  als von den Zuständen auf der linken und rechten Seite unabhängig angesehen wurde. Der Spin liefert nur einen Faktor 2.

Der Tunnel-Magnetowiderstand in magnetischen Strukturen kann im Rahmen des so genannten Jullière-Modells (1975) verstanden werden, welches auf zwei Annahmen basiert.

Erstens nimmt man an, dass der Spin eines Elektrons während des Tunnelvorgangs erhalten ist. Daraus folgt, dass das Tunneln von up- und down-spin-Elektronen zwei unterschiedliche Prozesse sind, der Transport also in den zwei unterschiedlichen Spin-Kanälen auftritt. Das bedeutet, dass Elektronen mit einer Spinausrichtung aus dem ersten ferromagnetischen Film von den ungefüllten Zuständen desselben Spinzustands des zweiten Films aufgenommen werden. Sind beide Filme parallel magnetisiert, tunneln die Minoritäts-Spins zu den Minoritäts-Zuständen sowie die Majoritäts-Spins zu den Majoritäts-Zuständen. Bei antiparalleler Magnetisierung der Schichten tunneln die Majoritäts-Spins des ersten Films zu den Minoritäts-Zuständen des zweiten Films und umgekehrt.

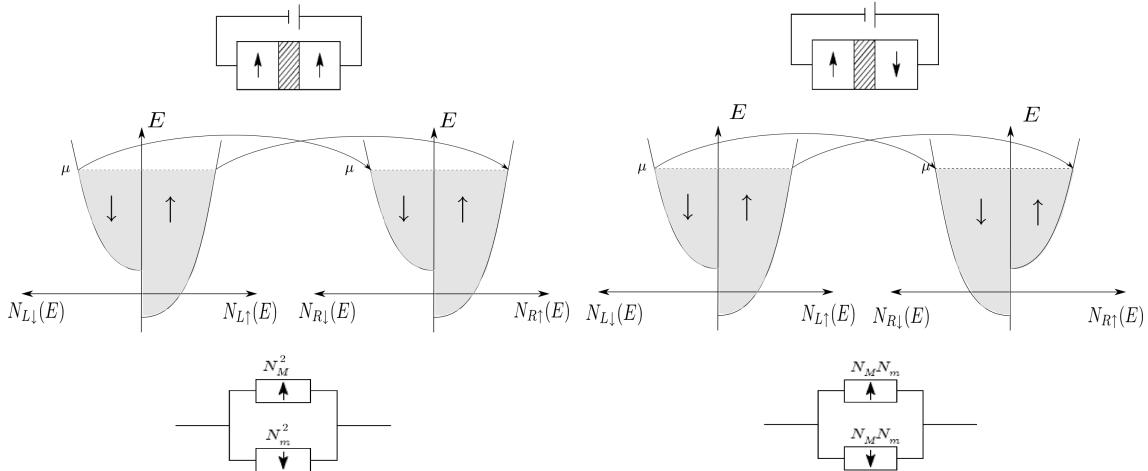


Abbildung 6.1: Tunnels zwischen parallel und antiparallel orientierten Ferromagneten und zugehörige Ersatzschaltbilder.

Zweitens gilt, dass der Leitwert für eine bestimmte Spin-Orientierung proportional zum Produkt der effektiven Zustandsdichten der zwei ferromagnetischen Elektroden ist.

Aus diesen zwei Annahmen ergibt sich der Leitwert für eine parallele (P) bzw. antiparallele (AP) Orientierung der Magnetisierung der beiden Kontakte

$$G^P = \frac{e^2}{h} |T|^2 \cdot (N_M N_M + N_m N_m) \quad \text{bzw.} \quad G^{AP} = \frac{e^2}{h} |T|^2 \cdot 2 N_M N_m$$

Dabei sind  $N_M$  und  $N_m$  die (für links und rechts gleich angenommenen) Zustandsdichten der Majoritäts- und Minoritätselektronen an der Fermi-Kante.

Wir definieren die Polarisierung

$$P = \frac{N_M - N_m}{N_M + N_m}$$

Im unmagnetischen System ist  $P = 0$ , in sogenannten “half metals”, wo an der Fermikante nur Spins mit einer Ausrichtung vorkommen (siehe Bild), nimmt die Polarisierung den Wert  $P = 1$  an.<sup>1</sup> Zu beachten ist, dass die so durch die Zustandsdichten an der Fermikante definierte Polarisierung *nicht* die Magnetisierung ist, da sich die Magnetisierung durch die besetzten Zuständen unter dem Fermi-Niveau ergibt wird.

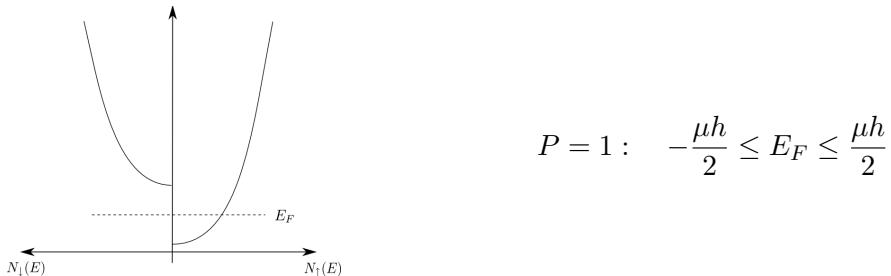


Abbildung 6.2: Zustandsdicht für ein “half metal”.

Damit können wir den Leitwert für parallele und antiparallele Magnetisierung wie folgt ausdrücken

$$G^{P/AP} = \frac{e^2}{h} |T|^2 \frac{(N_M + N_m)^2 \pm (N_M - N_m)^2}{2} = \bar{G} (1 \pm P^2); \quad \bar{G} = \frac{e^2}{h} |T|^2 \frac{(N_M + N_m)^2}{2}$$

Schließlich definieren wir den “tunnel magneto resistance” (TMR) und erhalten für ihn im Rahmen des Juliére-Modells

$$\text{TMR} \equiv \frac{G^P - G^{AP}}{G^{AP}} = \frac{R^{AP} - R^P}{R^P} = \frac{2P^2}{1 - P^2}.$$

### 6.2.2 Beliebiger Polarisationswinkel

Als nächstes wollen wir den Fall von beliebigen Ausrichtungen der Magnetisierungen betrachten, wie dies erstmals 1989 von Slonczewski untersucht wurde [J. C. Slonczewski, Phys. Rev. B **39**, 6995 (1989)]. Wir wollen dabei herausfinden, inwiefern der Polarisationswinkel in die Gleichung für den Leitwert einfließt. Wir nehmen an auf der linken Seite zeigen die Majoritäts- und Minoritätsspins in  $\pm z$ -Richtung, dagegen sind sie auf der rechten Seite um einen Winkel  $\vartheta$  gedreht. Die Drehung ist durch den Operator  $U = \exp[i\frac{\vartheta}{2}\sigma_y]$  beschreibbar.

Da der Spin beim Tunneln erhalten bleibt, ist auch der Tunnel-Hamilton-Operator unverändert,

$$H_T = \sum_{q \in L, k \in R, \sigma} T_{qk} c_{k\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + h.c.,$$

---

<sup>1</sup>“Half metals” sind also in der Fermienergie komplett spinpolarisiert. Sie sind nicht zu verwechseln mit den Halbmetallen (engl. “semi metals”).

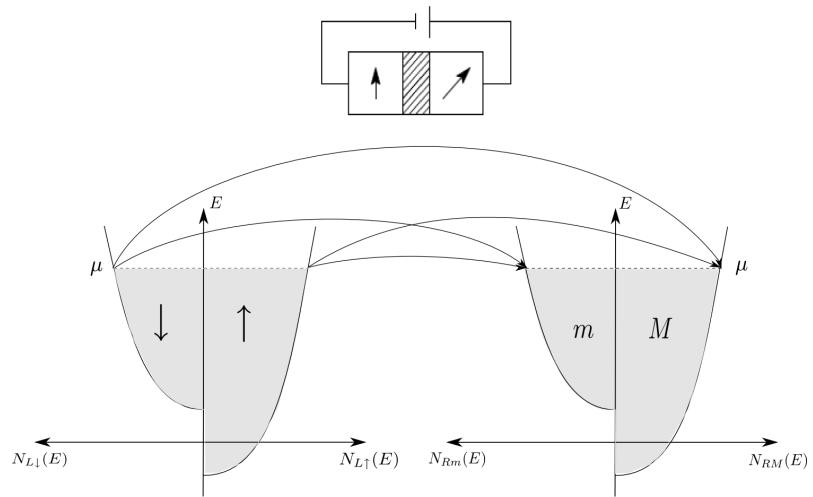


Abbildung 6.3: Tunneln zwischen nicht parallel ausgerichteten Ferromagneten

wobei o.B.d.A.  $\sigma = \pm 1$  die Spins in  $\pm z$  bezeichnet. Aber auf der rechten Seite sind diese Richtungen nicht die der Majoritäts- und Minoritätsspins. Wir drücken dazu die Majoritäts-  $|M_R\rangle$  und Minoritätspinzustände  $|m_R\rangle$  auf der rechten Seiten in der Basis in  $z$ -Richtung aus

$$\begin{aligned} |M_R\rangle &= \cos \frac{\vartheta}{2} |\uparrow\rangle - \sin \frac{\vartheta}{2} |\downarrow\rangle \\ |m_R\rangle &= \sin \frac{\vartheta}{2} |\uparrow\rangle + \cos \frac{\vartheta}{2} |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Entsprechend schreiben wir die Erzeuger und Vernichter um, z.B.

$$c_{k\uparrow}^\dagger = \cos \frac{\vartheta}{2} c_{kM}^\dagger + \sin \frac{\vartheta}{2} c_{km}^\dagger$$

Damit wird der Tunnel-Hamilton-Operator

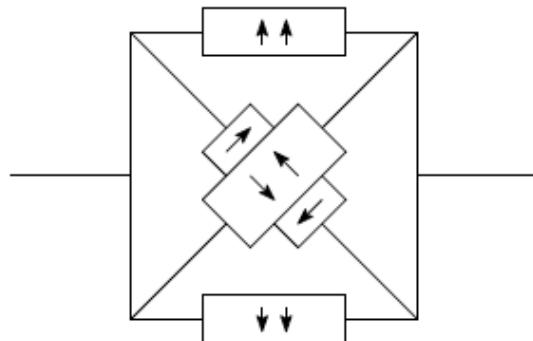


Abbildung 6.4: Ersatzschaltbild für das Tunneln zwischen nicht parallel ausgerichteten Ferromagneten.

$$H_T = \sum_{kq} T_{qk} \left( \cos \frac{\vartheta}{2} c_{kM}^\dagger c_{q\uparrow} + \sin \frac{\vartheta}{2} c_{km}^\dagger c_{q\uparrow} - \sin \frac{\vartheta}{2} c_{kM}^\dagger c_{q\downarrow} + \cos \frac{\vartheta}{2} c_{km}^\dagger c_{q\downarrow} \right) + h.c.,$$

und es ergibt sich der Leitwert

$$G = \frac{e^2}{h} |T|^2 \left( \cos^2 \frac{\vartheta}{2} (N_M^2 + N_m^2) + \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cdot 2N_M N_m \right) = \bar{G} (1 + P^2 \cos \vartheta).$$

### 6.2.3 Spinakkumulation

In diesem Abschnitt betrachten wir das Nichtgleichgewichtsphänomen der Spinakkumulation für einen Aufbau, wie er in der Abbildung 6.5 dargestellt ist. Ein nichtmagnetisches Material ist über zwei Tunnelbarrieren an zwei ferromagnetische Elektroden gekoppelt. Wir nehmen an, dass die Barrieren links und rechts gleich sind und unterscheiden die Fälle paralleler und antiparalleler Ausrichtung der Magnetisierungen in den beiden Elektroden.

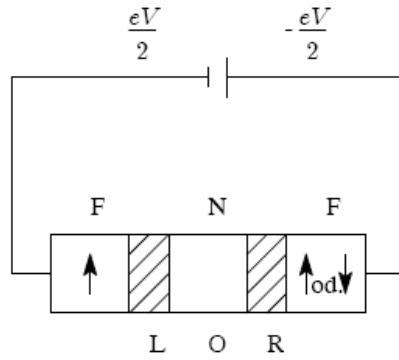


Abbildung 6.5: Versuchsaufbau zur Untersuchung der Spinakkumulation.

**parallele Ausrichtung:** Bei paralleler Ausrichtung sind dann die Spannungsabfälle gleich, und wir erhalten

$$\begin{aligned} I_{\uparrow L} &= \alpha N_M N \frac{V}{2}, \quad I_{\uparrow R} = I_{\uparrow L}, \\ I_{\uparrow R} &= \alpha N_m N \frac{V}{2}, \quad I_{\downarrow R} = I_{\downarrow L}. \end{aligned}$$

Der Gesamtstrom ist also

$$I^P = \alpha (N_M N + N_m N) \frac{V}{2}.$$

Hier ist  $N$  die Zustandsdichte im nichtmagnetischen Material, und wir haben den Parameter  $\alpha = \frac{e^2}{h} |T|^2$  eingeführt.

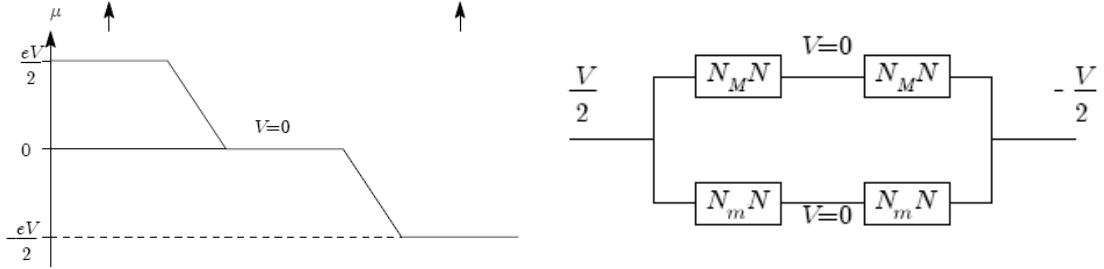


Abbildung 6.6: Spanungsabfall bei paralleler Ausrichtung und zugehöriges Ersatzschaltbild.

**antiparallele Ausrichtung:** Bei einer unsymmetrischen Situation müssen wir davon ausgehen, dass das Potenzial nicht einfach symmetrisch abfällt. Tatsächlich ist es verschieden für die beiden Spinkomponenten

$$I_{\uparrow L} = \alpha N_M N \left( \frac{V}{2} - V_{\uparrow} \right),$$

$$I_{\uparrow R} = \alpha N_m N \left( \frac{V}{2} + V_{\uparrow} \right),$$

und ähnlich für den Spin  $\downarrow$ .

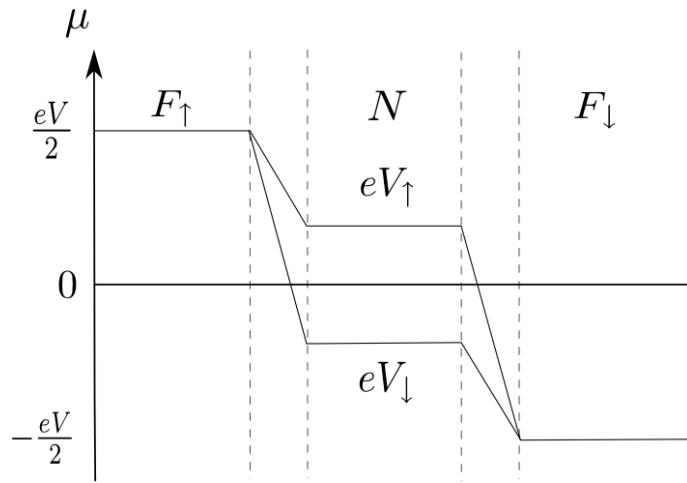


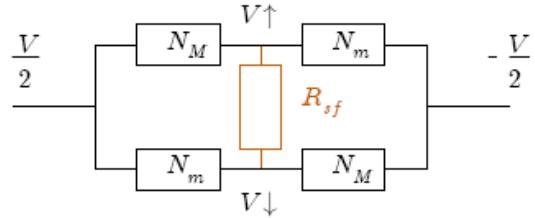
Abbildung 6.7: Spanungsabfall bei antiparalleler Ausrichtung.

Der Strom muss aber für jeden Spin erhalten sein,  $I_{\uparrow L} = I_{\uparrow R}$  und  $I_{\uparrow L} = I_{\downarrow R}$ , denn wir haben (noch) keine Spinflips erlaubt. Daraus ergeben sich Bedingungen für die Potenziale in dem nichtmagnetischen Material

$$V_{\uparrow} = \frac{V}{2} \frac{N_M - N_m}{N_M + N_m} = \frac{1}{2} PV$$

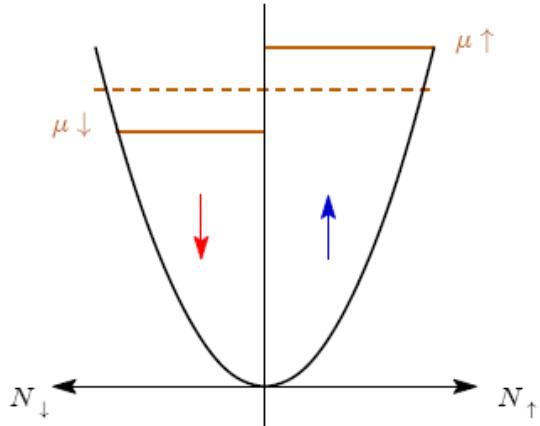
$$V_{\downarrow} = -\frac{1}{2} PV = -V_{\uparrow}$$

Verschiedene Potenziale für die beiden Spinkomponenten bedeuten aber auch, dass die Zustände bis zu verschiedenen hohen Energien besetzt sind, was wiederum bedeutet, dass sich in dem nichtmagnetischen Material mehr Elektronen mit einer als mit der anderen Spinausrichtung befinden. Dies wird mit dem Begriff Spinakkumulation bezeichnet wird. Wenn wir die oben beschriebenen Verhältnisse in einem



Ersatzschaltbild darstellen, sieht es so aus als gäbe es einen Kanal, der die beiden parallelen Kanäle verbindet.

#### 6.2.4 Spinrelaxation



Wir untersuchen nun, wie das Umklappen oder ‘‘Flippen’’ des Spins die Verhältnisse ändert. Dazu nehmen wir an, dass der Gesamtspin (Magnetisierung) verbunden mit der Spinakkumulation mit der Rate  $1/\tau_{sf}$  (sf steht für ‘‘spin flip’’) relaxiert,

$$\frac{d}{dt}S = -\frac{1}{\tau_{sf}}S.$$

Dabei gilt  $S = \Delta\mu \cdot N$  und  $\Delta\mu = \mu_\uparrow - \mu_\downarrow = e(V_\uparrow - V_\downarrow)$ . Bei der Berechnung des Stromes durch das System äußert sich die Spinrelaxation wie ein Strom. Dieser Spinrelaxationsstrom ist

$$I_{sf} = -e \frac{dS}{dt} = \frac{eN\Delta\mu}{\tau_{sf}} = \frac{e^2N}{\tau_{sf}} \cdot (V_\uparrow - V_\downarrow)$$

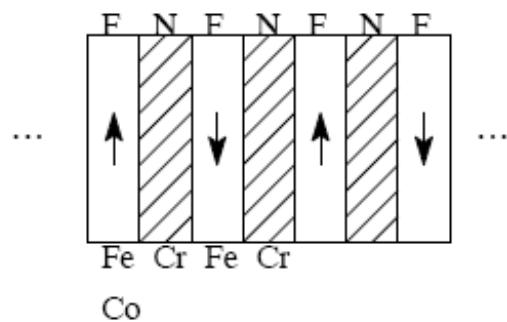
Mit den Definitionen  $G_{M/m} = \alpha \cdot N_{M/m} \cdot N$  und  $G_{sf} = e^2N/\tau_{sf}$  erhalten wir damit

$$V_\uparrow = V \cdot \frac{G_M - G_m}{G_M + G_m + 2G_{sf}}.$$

### 6.3 Riesenmagnetowiderstand (GMR)

Der Riesenmagnetowiderstand wird in Strukturen beobachtet, die aus sich abwechselnden magnetischen und nichtmagnetischen dünnen Schichten mit einigen Nanometern Schichtdicke bestehen. Der Effekt bewirkt, dass der elektrische Widerstand der Struktur von der relativen Orientierung der Magnetisierung der magnetischen Schichten abhängt, und zwar ist er bei Magnetisierung in entgegengesetzte Richtungen deutlich höher als bei Magnetisierung in die gleiche Richtung.

Der Effekt wurde zuerst 1988 von Peter Grünberg am Forschungszentrum Jülich und Albert Fert an der Universität Paris-Süd in voneinander unabhängiger Arbeit entdeckt. Hierfür wurden sie 2007 gemeinsam mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.



Wir unterscheiden zwei geometrische Anordnungen, mit dem Strom senkrecht zu den Schichten oder parallel dazu (s. Abb. 6.8).

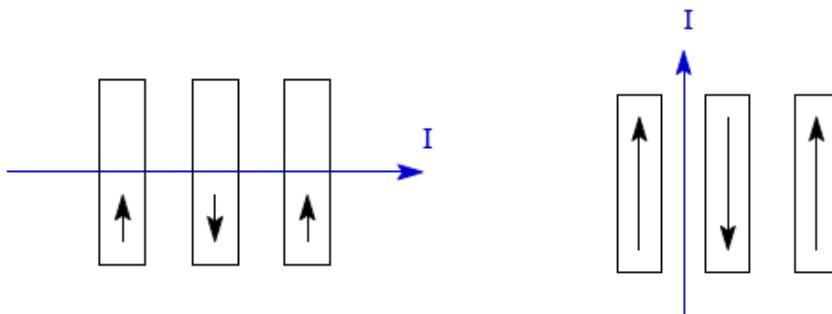


Abbildung 6.8: Links: Konfiguration “current perpendicular plane” (CPP); rechts: Konfiguration “current in plane” (CIP).

Für Anwendungen stellt sich der CIP Fall als besonders interessant heraus. Die Größe von Interesse ist der “giant magneto resistance” (GMR)

$$\text{GMR} = \frac{R^{AP} - R^P}{R^P} \quad \sim \quad 220\% \quad T = 1,5K \\ \sim \quad 42\% \quad T = 300K$$

für den große Werte gefunden wurden, wie im Zahlenbeispiel angegeben.

### 6.3.1 CPP - Konfiguration

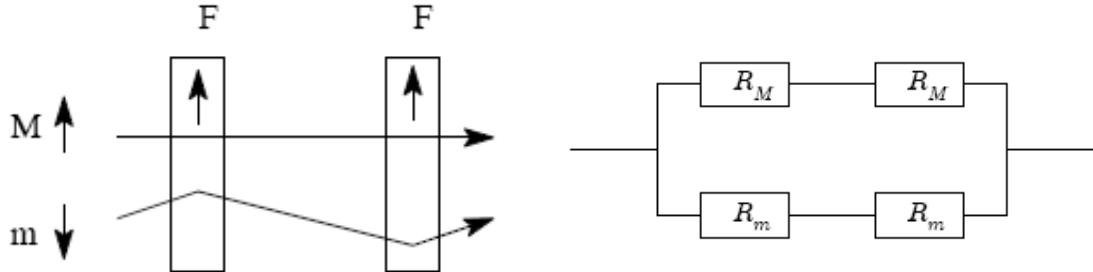


Abbildung 6.9: Streuung bei paralleler Orientierung der Magnetisierung.

Die Analyse verläuft ähnlich wie wir es beim TMR diskutiert haben. Als Ergebnis findet man (bei  $R_M \ll R_m$ ) bei paralleler Orientierung der Magnetisierung

$$R^P = 2 \frac{R_m R_M}{R_m + R_M} \approx 2R_M.$$

Bei antiparalleler Magnetisierung findet man

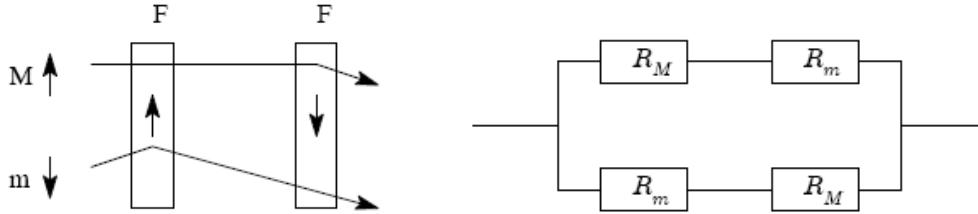


Abbildung 6.10: Streuung bei antiparalleler Orientierung der Magnetisierung

$$R^{AP} = \frac{R_M + R_m}{2} > R^P.$$

Der Unterschied ist

$$\begin{aligned} \text{GMR} = \frac{R^P - R^{AP}}{R^P} &= \frac{(R_m + R_M)^2 - 4R_M R_m}{2(R_m + R_M)} \cdot \frac{(R_m + R_M)}{2R_m R_M} \\ &= \frac{(R_m + R_M)^2}{4R_m R_M} \approx \frac{R_m}{4R_M} \end{aligned}$$

### 6.3.2 CIP - Konfiguration

Beim GMR-Effekt in der CIP Konfiguration spielt ein quantenmechanischer Effekt, nämlich die Spinabhängigkeit der Streuung von Elektronen an Grenzflächen eine wesentliche Rolle. Dies führt zu Unterschieden im Leitwert für parallele oder antiparallele Orientierung der Magnetisierung in benachbarten Schichten. Dies lässt sich z. B. im Rahmen einer Boltzmann-Gleichung herleiten, würde hier aber zu weit führen.

## **6.4 Spin-Bahn-Kopplung**

To be continued.

# Kapitel 7

## Einzelelektroneneffekte

### 7.1 Der Tunnel - Hamiltonoperator

Zunächst wollen wir eine einfache Tunnelbarriere zwischen zwei metallischen Leitern L und R, an die eine Spannung  $V$  angelegt ist, betrachten (siehe Abb. 7.1). Die Tunnelschicht besteht meist aus einem dünnen Oxid.

Der Hamilton-Operator  $H$  dieses einfachen Systems kann in zweiter Quantisierung geschrieben werden als:

$$H = H_L + H_R + H_T = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{q,\sigma} (\epsilon_q - eV) c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + \sum_{k,q,\sigma} (T_{kq} c_{k\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + T_{kq}^* c_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) \quad (7.1)$$

Hierbei beschreiben die ersten Teile mit den Zähloperatoren  $c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  und  $c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma}$  die Energien der Elektronen auf den Inseln mit wegen der angelegten Spannung um  $eV$  relativ zueinander verschobenen Energien. Der dritte Teil beschreibt das Tunneln der Elektronen durch die Vernichtung eines Elektrons auf der einen Seite im Zustand  $q$  und Erzeugung eines Elektrons auf der anderen Seite im Zustand  $k$  mit gleichem Spin  $\sigma$  und umgekehrt, charakterisiert durch eine Transmissionsamplitude (Matrixelement)  $T_{kq}$ . Die Summen laufen dabei über alle Wellenvektoren  $k$  bzw.  $q$  (in der ersten Brioullin-Zone) der Blochzustände in den beiden Kontakten  $L$  und  $R$ .

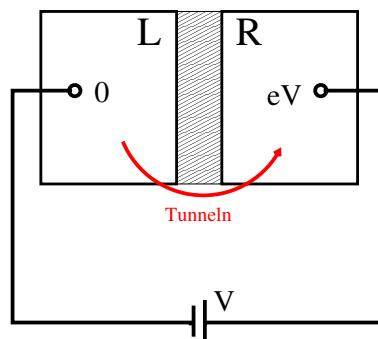


Abbildung 7.1: Tunnelkontakt

Die Zustände können wir durch die Besetzungszahlen der verschiedenen Einteilchenzustände  $k, \sigma$  und  $q, \sigma$  beschreiben. Da es sich hier um Elektronen (Fermionen) handelt, können diese nur 0 oder 1 sein,

$$|n_{k_1,\sigma_1}, n_{k_2,\sigma_2}, n_{k_3,\sigma_3}, \dots; n_{q_1,\sigma_1}, n_{q_2,\sigma_2}, \dots\rangle. \quad (7.2)$$

Die Erzeuger bzw. Vernichter wirken auf diese Zustände wie folgt:

$$\begin{aligned} c_m^\dagger | \dots \underbrace{1}_m \dots \rangle &= 0 ; \quad c_m | \dots \underbrace{0}_m \dots \rangle = 0 \\ c_m^\dagger | \dots \underbrace{0}_m \dots \rangle &= | \dots \underbrace{1}_m \dots \rangle ; \quad c_m | \dots \underbrace{1}_m \dots \rangle = | \dots \underbrace{0}_m \dots \rangle \end{aligned}$$

### Tunnelrate

Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Anfangszustand  $i$  zum Endzustand  $f$  ergibt sich nach Fermis Goldener Regel zu

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |\langle f | H_T | i \rangle|^2 \cdot \delta(E_f - E_i) \quad (7.3)$$

Die Deltafunktion  $\delta(E_f - E_i)$  garantiert dabei, dass die Energie erhalten ist. Die Mikrozustände in der obigen Formel sind charakterisiert durch die Besetzungszahlen (7.2). Uns interessiert aber nur die Gesamtwahrscheinlichkeit, dass irgend ein Elektron von L nach R tunneln. Diese erhalten wir, indem wir über alle Mikrozustände summieren, multipliziert mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten, dass sie ursprünglich als Ausgangszustand besetzt bzw. als Endzustand leer waren. Dies drücken wir durch Fermi-Funktionen aus und erhalten

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\sigma} \sum_k \sum_q |T_{kq}|^2 f^L(\epsilon_k) (1 - f^R(\epsilon_q)) \delta(\epsilon_k - \epsilon_q + eV).$$

Wir wandeln die Summen über die Impulse in Integrale über Energien um. Die Zustandsdichten und Matrixelemente hängen von Energien auf der Skala von eVolt ab. Da wir nur an kleinen Temperaturen  $T \leq 1 \dots 10$  K und niederen Spannungen interessiert sind, können sie als Konstanten aus dem Integral gezogen werden, und wir erhalten

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = \frac{4\pi}{\hbar} N^L(\epsilon_F) \cdot N^R(\epsilon_F) \cdot |T|^2 \int dE \int dE' f(E) (1 - f(E')) \delta(E - E' + eV) \quad (7.4)$$

Diesen Ausdruck können wir weiter auswerten: Als untere Integrationsgrenze können wir  $-\infty$  setzen, da die Besetzungsfunction exponentiell schnell gegen eins und der Integrand daher gegen Null geht. Dann gilt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot f(E) (1 - f(E + eV)) &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot \frac{1}{e^{E/k_B T} + 1} \left( \frac{e^{(E+eV)/k_B T}}{e^{(E+eV)/k_B T} + 1} \right) \\ &= \frac{1}{e^{-eV/k_B T} - 1} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot \frac{e^{E/k_B T} - e^{(E+eV)/k_B T}}{(e^{(E+eV)/k_B T} + 1) \cdot (e^{E/k_B T} + 1)} \\ &= \frac{1}{e^{-eV/k_B T} - 1} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot (f(E + eV) - f(E)) \\ &= \frac{-eV}{e^{-eV/k_B T} - 1} \end{aligned}$$

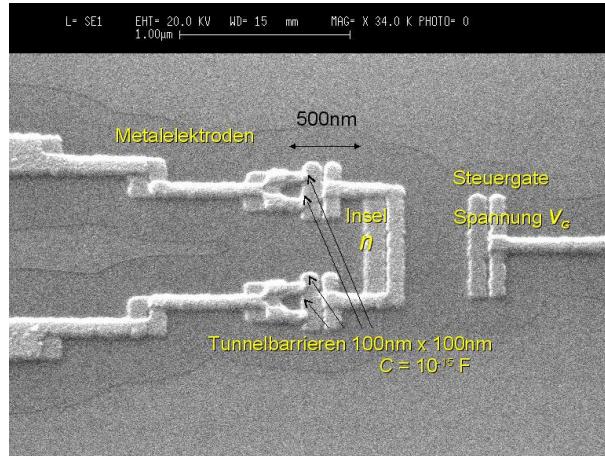


Abbildung 7.2: Ein Einzelelektronentransistor mit Tunnelkontakte mit sehr kleiner Kapazität

Für die totale Übergangsrates ergibt sich damit

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = \frac{1}{e^2 R_T} \frac{-eV}{e^{-eV/k_B T} - 1}. \quad (7.5)$$

Hier haben wir, was sich unten als sinnvoll erweisen wird, den Tunnelwiderstand  $R_T$  des Tunnelkontakte eingeführt,

$$\frac{1}{R_T} = e^2 \frac{4\pi}{\hbar} N^L(\epsilon_F) N^R(\epsilon_F) |T|^2 \quad (7.6)$$

Der Strom von L nach R ist einfach  $I_{L \rightarrow R} = e\Gamma_{L \rightarrow R}$ , und der totale Strom ergibt sich dann zu

$$I = I_{L \rightarrow R} - I_{R \rightarrow L} = -\frac{V}{R_T} \left[ \frac{1}{e^{-eV/k_B T} - 1} + \frac{1}{e^{eV/k_B T} - 1} \right] = \frac{V}{R_T} \quad (7.7)$$

Für den Tunnelstrom durch eine Tunnelbarriere gilt also eine lineare Strom-Spannungsrelation mit einem Tunnelwiderstand, der durch das Tunnelmatrixelement und Zustandsdichte gegeben ist.

## 7.2 Einzelelektroneneffekte

Wir betrachten nun Systeme mit sehr kleiner Kapazität  $C$ . Ein Beispiel ist dargestellt in Abb. (7.2). In diesen Systemen ist die Kapazität so klein, dass die elektrostatische Energie  $Q^2/2C$ , die mit einer Ladung  $Q$  auf der Kapazität verknüpft ist, schon bei der kleinsten möglichen Ladung, der eines einzigen Elektrons  $Q = e$ , eine messbare Größe ist. Betrachten wir als Beispiel eine Kapazität mit  $C = 10^{-15} \text{ F}$ . Dann ist

$$E_C = \frac{e^2}{2C} = e \frac{1,6 \dots 10^{-19} \text{ C}}{2 \cdot 10^{-15} \text{ F}} \approx 10^{-4} \text{ eV} \approx 1 k_B \text{ K} \quad (7.8)$$

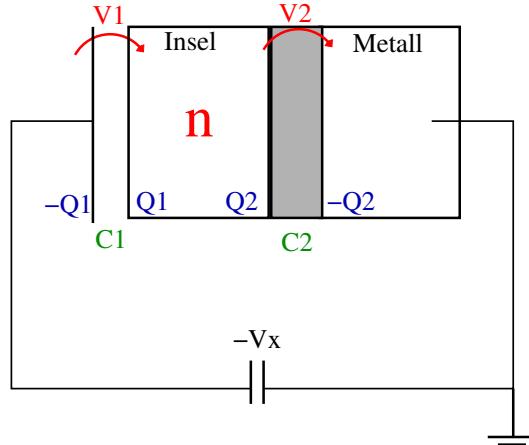


Abbildung 7.3: Elektronenbox

(Zur Erinnerung:  $F = \text{Farad}$ ,  $C = \text{Coulomb}$ ,  $V = \text{Volt}$ ,  $K = \text{Kelvin}$ .) Der letzte Ausdruck drückt die Energie durch eine äquivalente Temperatur in Kelvin aus, was direkt angibt, bei welchen experimentellen Bedingungen, nämlich  $k_B T \leq E_C$  diese Energie eine Rolle spielt.

Eine kleine Kapazität  $C = \epsilon \epsilon_0 S/d$  ist leicht herzustellen, indem wir einen großen Abstand  $d$  wählen. Wir wollen aber im Folgenden auch Tunnelkontakte mit sehr kleinen Kapazitäten betrachten, bei denen die Dicke der Oxidschicht typisch  $d = 10\text{\AA}$  ist. Also muss die Fläche  $S$  klein gewählt werden. Mit  $\epsilon \approx 10$  können wir leicht abschätzen, dass eine Fläche von  $S = (10\text{nm})^2$  den Wert  $C \approx 10^{-15}\text{F}$  liefert. Offensichtlich ist bei kleineren Kontakten, z.B. für  $S = (30\text{nm})^2$ , die Kapazität kleiner,  $C \approx 10^{-16}\text{F}$ , und die Ladungsenergie größer, beim Beispiel  $E_C = 10 k_B \text{ K}$ .

### 7.3 Elektronenbox, Coulomb-Blockade

Wir betrachten nun eine Elektronenbox, bestehend aus einer metallischen Insel, die über eine Tunnelbarriere mit kleiner Kapazität  $C_2$  mit einer Metallelektrode verbunden ist (siehe Abb. (7.3)). Außerdem ist sie kapazitiv, mit Kapazität  $C_1$ , an die Spannungsquelle in dem Stromkreis gekoppelt. Auf der Insel befinden sich bereits  $n$  Elektronen, relativ zu einem ladungsneutralen Referenzzustand. Wir berechnen nun die elektrostatische Energie dieser Anordnung als Funktion der Zahl der zusätzlichen Elektronen auf der Insel  $n$  und der angelegten Spannung  $V_x$ .

Für die Spannungen an den beiden Kapazitäten gilt  $-V_x = V_1 + V_2$ . Ihnen entsprechen Oberflächenladungen (die durch Polarisation entstehen und nicht ganzzahlige Vielfache von Elementarladungen sein müssen)

$$Q_1 = -C_1 \cdot V_1 \quad (7.9)$$

$$Q_2 = C_2 \cdot V_2 \quad (7.10)$$

Die Gesamtladung auf der Insel ist aber quantisiert und ein Vielfaches der Elementarladung

$$e \cdot n = Q_1 + Q_2 . \quad (7.11)$$

Die Energie auf der Insel ergibt sich aus der Summe der Energien der Kapazitäten, abzüglich der Energie  $Q_1 V_x$ , die von der Spannungsquelle aufgebracht werden muss, um die Ladung zu erzeugen (Legendre Transformation)

$$E_{\text{ch}}(n) = \frac{C_1}{2} V_1^2 + \frac{C_2}{2} V_2^2 - Q_1 V_x \quad (7.12)$$

Durch Umformungen der obigen Gleichungen ergibt sich

$$\begin{aligned} V_1 &= \frac{1}{C} (-e \cdot n - C_2 V_x) \\ V_2 &= \frac{1}{C} (e \cdot n - C_1 V_x) \end{aligned}$$

Hierbei ist die relevante, von der Insel aus gesehene Gesamtkapazität  $C = C_1 + C_2$ . Diese Zwischenergebnisse in (7.12) eingesetzt und umgeformt ergibt

$$\begin{aligned} E_{\text{ch}}(n) &= \frac{1}{2C^2} \left( C_1 (-e \cdot n - C_2 V_x)^2 + C_2 (e \cdot n - C_1 V_x)^2 \right) + V_x \frac{C_1}{C} (-e \cdot n - C_2 V_x) \\ &= \frac{1}{2C} (e \cdot n)^2 + \frac{V_x^2}{2C^2} (C_1 + C_2) C_1 C_2 - V_x^2 \frac{C_1 C_2}{C} - V_x \frac{C_1}{C} e \cdot n \\ &= \frac{1}{2C} (e \cdot n - C_1 V_x)^2 + \frac{V_x^2}{2C} C_1 C_2 - \frac{C_1^2 V_x^2}{2C} \end{aligned}$$

Die letzten Terme, die nicht von  $n$  abhängen, schreiben wir im Folgenden nicht an und erhalten so einen übersichtlichen Ausdruck für die Ladungsenergie

$$E_{\text{ch}}(n) = \frac{1}{2C} (e \cdot n - C_1 V_x)^2 . \quad (7.13)$$

Diese Energie ist in der folgenden Abbildung als Funktion der angelegten Spannung, bzw. der „Gateladung“  $Q_x = C_1 V_x$  dargestellt.

Wir sehen, dass bei kleinen Spannungen der Zustand mit  $n = 0$  die niedrige Energie hat, aber für  $C_1 V_x / e \geq 1/2$  hat der Zustand mit  $n = 1$  die niedrigere Energie und so weiter. Entsprechend erwartet man, dass bei tiefen Temperaturen sich die Zahl der Ladungen in Stufen erhöht. Dies wurde in der Tat im Experiment gesehen, wie in der Abb. (7.4) dargestellt.

### 7.3.1 Tunnelrate

Die Tunnelrate für das  $(n + 1)$ -te Elektron, wenn schon  $n$  Elektronen auf der Insel sind, zwischen vorgegebenen Anfangs- und Endzuständen  $k$  und  $q$  ergibt sich zu

$$\Gamma_{k \rightarrow q; n \rightarrow n+1} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{kq}|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_q + E_{\text{ch}}(n) - E_{\text{ch}}(n+1)) .$$

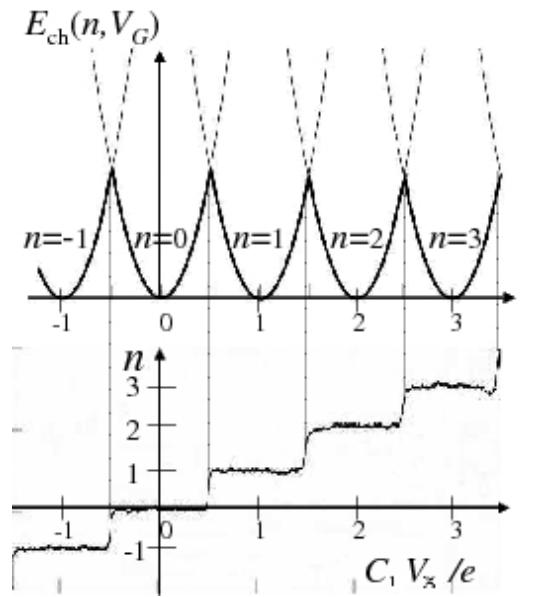


Abbildung 7.4: Ladungsenergie der Elektronenbox und Zahl der Ladungen  $n$  auf der Insel in Abhängigkeit von der Gateladung.

Bei der  $\delta$ -Funktion, die die Energieerhaltung garantiert, müssen wir berücksichtigen, dass sich auch die Ladungsenergie  $E_{\text{ch}}$  ändert. Wie zuvor interessiert uns nur die totale Tunnelrate, dass Ladung transferiert wurde. D.h. wir summieren über die Mikrozustände,

$$\Gamma_{n \rightarrow n+1} = \frac{1}{e^2 R_T} \int dE \int dE' f(E) (1 - f(E')) \delta(E + E_{\text{ch}}(n) - E' - E_{\text{ch}}(n+1)).$$

Daraus erhalten wir die Rate

$$\Gamma_{n \rightarrow n+1} = \frac{1}{e^2 R_T} \frac{\Delta E_{\text{ch}}}{e^{\Delta E_{\text{ch}}/k_B T} - 1}. \quad (7.14)$$

Sie hängt entscheidend von der Änderung der Ladungsenergie  $\Delta E_{\text{ch}} = E_{\text{ch}}(n+1) - E_{\text{ch}}(n)$  ab. Im Grenzfall  $T \rightarrow 0$  reduziert sich die Rate auf

$$\Gamma_{n \rightarrow n+1} = \frac{1}{e^2 R_T} \begin{cases} |\Delta E_{\text{ch}}| & \text{für } \Delta E_{\text{ch}} < 0 \\ 0 & \text{für } \Delta E_{\text{ch}} > 0 \end{cases} \quad (7.15)$$

Der Energieunterschied hängt von  $V_x$  und  $n$  ab

$$\Delta E_{\text{ch}} = \frac{1}{C} e (e \cdot n - Q_x) + \frac{e^2}{2C}.$$

Für  $n = 0$ , also das erste zusätzliche Elektron auf die Insel gilt

$$\Delta E_{\text{ch}} = \frac{e}{C} \left( \frac{e}{2} - C_1 V_x \right) = \begin{cases} < 0 & \text{für } C_1 V_x > \frac{e}{2} \\ > 0 & \text{für } C_1 V_x \leq \frac{e}{2} \end{cases}$$

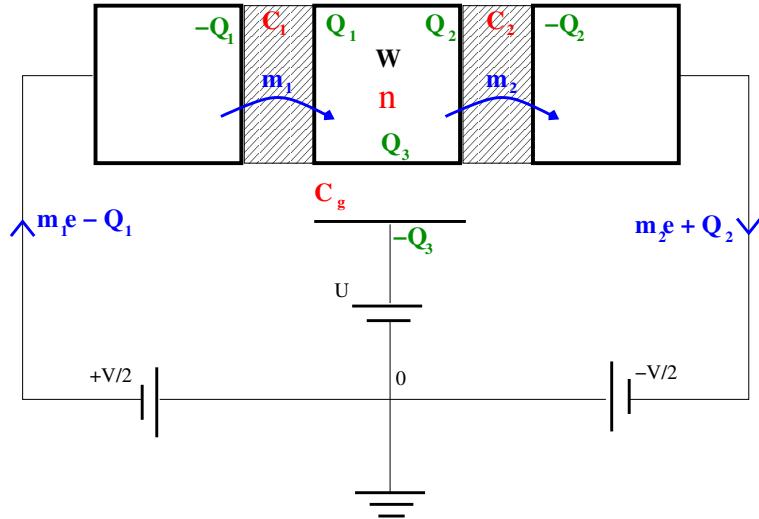


Abbildung 7.5: Der Einzelektronentransistor.

Wie man sieht, setzt das Tunneln erst ein, wenn  $V_x > \frac{e}{2C_1}$ . Dagegen ist unterhalb von  $\frac{e}{2C_1}$  bei  $T = 0$  Tunneln unterdrückt. Dies bezeichnet man als ‘‘Coulomb-Blockade’’.

Wir bemerken dass die Raten in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts erfüllen

$$\frac{\Gamma_{n \rightarrow n+1}}{\Gamma_{n+1 \rightarrow n}} = e^{-\Delta E_{\text{ch}}/k_B T}$$

## 7.4 Einzelektron-Transistor

Der Einzelektronentransistor besteht aus einer Insel, die über zwei Tunnelbarrieren mit geringer Kapazität an Elektroden (Source und Drain) gekoppelt ist. Zusätzlich ist aber noch eine Gate-Elektrode angebracht, mit der man die elektrostatische Energie steuern kann. Einzelektronentransistoren (auch SETs genannt, vom englischen Single-Electron Transistor) werden entweder aus Metallen oder Halbleitern hergestellt.  $n$  ist wieder die Anzahl der Elektronen auf der Insel, dagegen bezeichnet  $m$  die Zahl der Elektronen, die tunnellen.

Durch Anwendung der Maschenregel kann man die verschiedenen Spannungsabfälle berechnen:

$$W = \frac{V}{2} + \frac{Q_1}{C_1} = -\frac{V_2}{2} + \frac{Q_2}{C_2} = U + \frac{Q_3}{C_g}.$$

Die Summe der Ladungen ist wiederum ein Vielfaches der Elementarladung

$$n \cdot e = Q_1 + Q_2 + Q_3$$

Ein Analyse, ähnlich wie bei der Elektronenbox beschrieben, führt zum folgenden Ausdruck für die Ladungsenergie

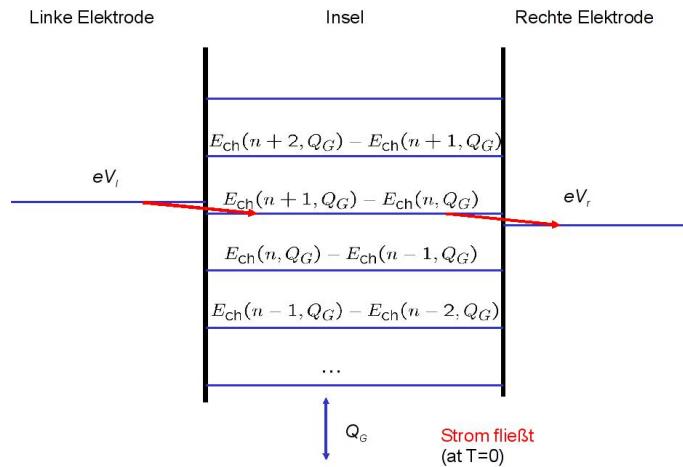
$$E_{\text{ch}} = \frac{1}{2C_{\Sigma}}(ne - Q_g)^2 \quad (7.16)$$

Sie hängt ab von der Gesamtkapazität der Insel  $C_{\Sigma} = C_1 + C_2 + C_g$  und der Gateladung

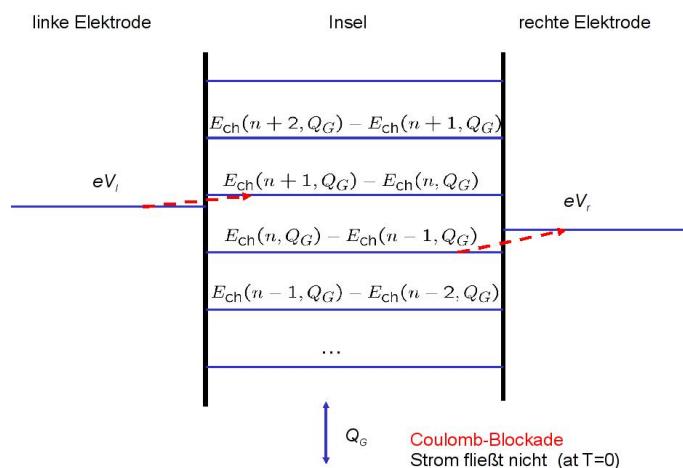
$$Q_g = C_g U + C_1 V_1 + C_2 V_2, \quad (7.17)$$

wobei beim gezeichneten Beispiel  $V_1 = -V_2 = V/2$  ist. Man erkennt sofort die quadratische Abhängigkeit der Energie von der Gateladung. Dies erlaubt es, die Anzahl der Elektronen auf der Box direkt über die Gatespannung  $U$  zu steuern.

Alleine durch die Betrachtung der Energie können wir schon die Funktion des Einzel-elektronentransistors verstehen. Dies ist im Folgenden in zwei Beispielen veranschaulicht. In der Mitte sind die Energieunterschiede für verschiedene Ladungen auf der Insel dargestellt, links bzw. rechts davon die angelegten elektrochemischen Potenziale der Elektroden.



In der obigen Situation ist das elektrochemische Potenzial der linken Elektrode genügend hoch, dass durch Tunneln links der Übergang von  $n$  nach  $n+1$  stattfinden kann. Andererseits ist der Energiegewinn beim Übergang  $n+1 \rightarrow n$  durch Tunneln rechts ausreichend, um in die rechte Elektrode oberhalb deren elektrochemischem Potenzial eindringen zu können. In dieser Situation kann ein Strom durch die Insel fließen.



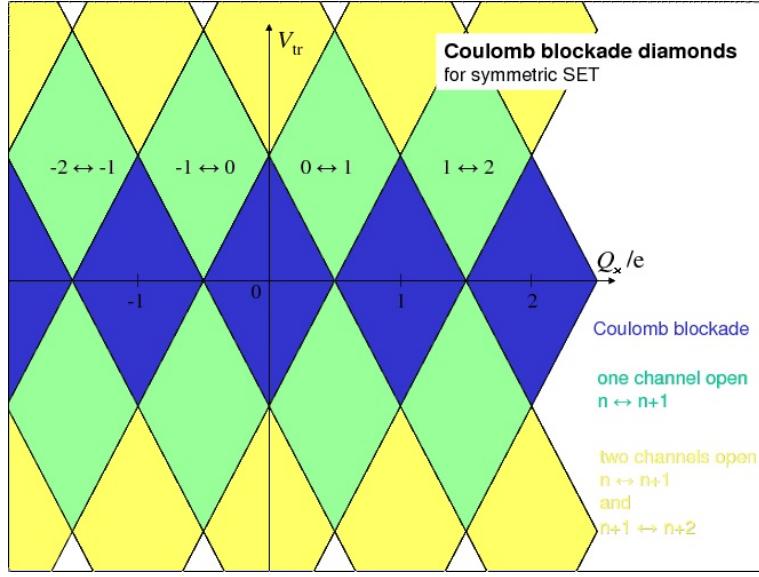


Abbildung 7.6: Die ‘‘Coulomb-Rauten’’(oder Diamanten) markieren Bereiche mit Coulomb-Blockade bzw. verschiedenen starken Strömen.

Im zweiten Beispiel gibt es keinen Zyklus, wo Elektronen wiederholt links rein- und rechts raustunneln können. Der Strom verschwindet, es sei denn die Temperatur ist hoch genug, dass die angedeuteten Übergänge durch thermische Aktivierung möglich sind.

Die Frage, ob bei tiefen Temperaturen ein Strom fließt oder nicht hängt entscheidend von der Gate- und der Transportspannung  $V = V_L - V_R$  ab. In gewissen Bereichen dargestellt in Abb. (7.6) kommt es zur Coulomb-Blockade  $I = 0$  (blaue Bereiche). Bei größeren Transportspannungen - wie groß hängt von den Gatespannungen ab - sind Zyklen, wie oben beschrieben möglich (grüne Bereiche). Bei noch höheren Transportspannungen sind gleichzeitig mehrere Übergänge, z.B.  $n \leftrightarrow n + 1$  und  $n + 1 \leftrightarrow n + 2$ , möglich, und der Strom ist größer (gelbe Bereiche).

## 7.5 Master-Gleichung

Die Übergangsraten zwischen linker ( $L$ ) Elektrode und Insel ( $I$ ) bzw. rechter ( $R$ ) Elektrode und Insel werden wie zuvor berechnet mit demselben Ergebnis wie (7.14) (abgesehen von offensichtlichen Abhängigkeiten von den Parametern der jeweiligen Kontakte. Sie hängen wie zuvor entscheidend von der Änderung der elektrostatischen Energie  $E_{\text{ch}}$  ab. Als Beispiel, und um die folgende Notation einzuführen, betrachten wir den Grenzfall  $T \rightarrow 0$ . Dann gilt

$$\Gamma_{L \rightarrow I}(n \rightarrow n + 1) \equiv \Gamma_{L \rightarrow I}(n) = \begin{cases} \frac{|\Delta E_{\text{ch}}|}{e^2 R_{t,L}} & \text{für } \Delta E_{\text{ch}} \leq 0 \\ 0 & \text{für } \Delta E_{\text{ch}} \geq 0 \end{cases}$$

wobei  $\Delta E_{\text{ch}} = E_{\text{ch}}(n + 1) - E_{\text{ch}}(n) - eV_L$  ist.

Zu einer quantitativen Berechnung des Stromes stellen wir ein Master Gleichung auf. Die Wahrscheinlichkeit  $\rho(n, t)$  zur Zeit  $t$  gerade  $n$  Elektronen auf der Insel zu finden, ändert

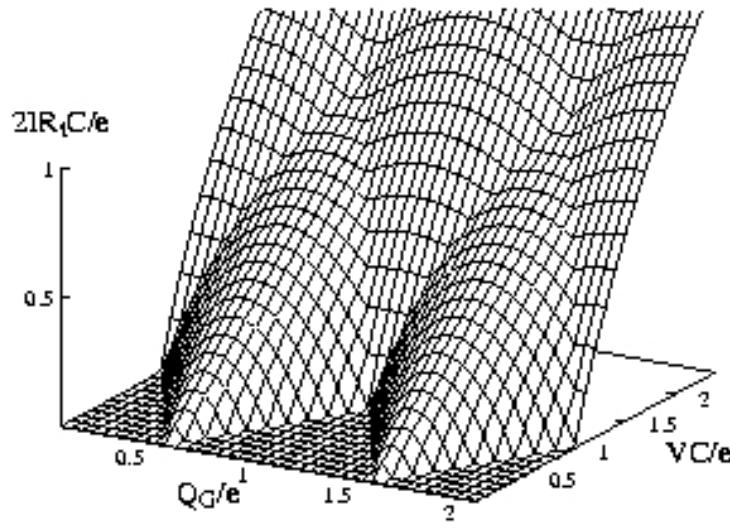


Abbildung 7.7: The current of a symmetric transistor is shown as a function of gate and transport voltages. At low temperatures and low transport voltages  $V_C/e < 1$  only two charge states play a role, and the Coulomb oscillations are clearly demonstrated. At larger transport voltages, more charge states are involved.

sich in der Zeit auf Grund von Tunnelprozessen zwischen Zuständen mit  $n$  und  $n - 1$  oder  $n$  und  $n + 1$  Ladungen,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(n, t) = & - [\Gamma_{L \rightarrow I}(n) + \Gamma_{I \rightarrow L}(n) + \Gamma_{R \rightarrow I}(n) + \Gamma_{I \rightarrow R}(n)]\rho(n, t) \\ & + [\Gamma_{L \rightarrow I}(n - 1) + \Gamma_{R \rightarrow I}(n - 1)]\rho(n - 1, t) \\ & + [\Gamma_{I \rightarrow L}(n + 1) + \Gamma_{I \rightarrow R}(n + 1)]\rho(n + 1, t). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Der Strom ist

$$I_{L \rightarrow I}(t) = e \sum_n [\Gamma_{L \rightarrow I}(n) - \Gamma_{I \rightarrow L}(n)]. \quad (7.19)$$

Die Mastergleichung muss i.A. numerisch gelöst werden. Für tiefe Temperaturen und geringen Spannungen spielen aber nur zwei benachbartere Ladungswerte, z.B.  $n$  und  $n + 1$  eine Rolle. Dann finden wir analytisch die stationäre Lösung

$$\rho(n) = \frac{\Gamma_{I \rightarrow L}(n + 1) + \Gamma_{I \rightarrow R}(n + 1)}{\Gamma_{L \rightarrow I}(n) + \Gamma_{I \rightarrow L}(n) + \Gamma_{R \rightarrow I}(n) + \Gamma_{I \rightarrow R}(n)} \quad (7.20)$$

und

$$I = e \frac{\Gamma_{L \rightarrow I}(n)\Gamma_{I \rightarrow R}(n + 1) - \Gamma_{R \rightarrow I}(n)\Gamma_{I \rightarrow L}(n + 1)}{\Gamma_{L \rightarrow I}(n) + \Gamma_{R \rightarrow I}(n) + \Gamma_{I \rightarrow L}(n + 1) + \Gamma_{I \rightarrow R}(n + 1)}. \quad (7.21)$$

Mit

$$\Delta E_{ch} = \pm [(n + \frac{1}{2}) - \frac{Q_g}{e}] \frac{e^2}{c} \pm \frac{eV}{2}$$

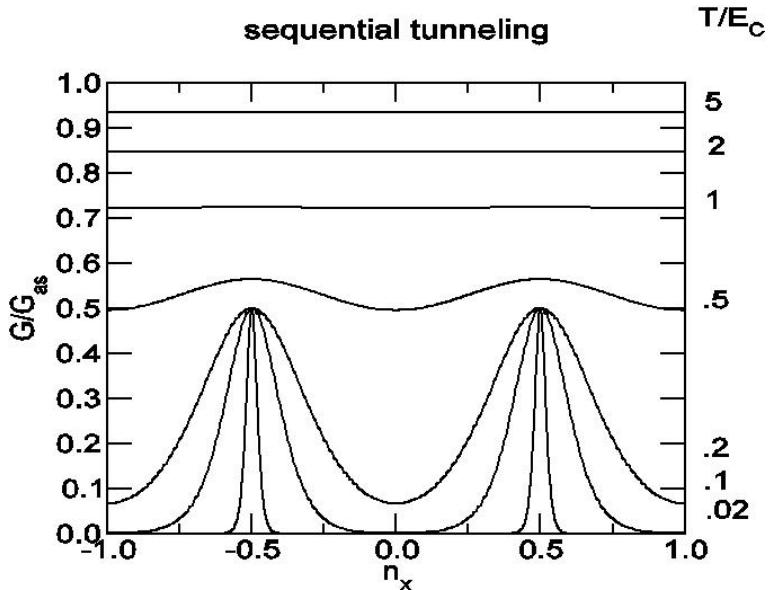


Abbildung 7.8: The linear conductance  $G(T, Q_G)$  of a SET at different values of the temperature.

finden wir damit für den Strom bei  $T = 0$  den folgenden Ausdruck

$$I = \begin{cases} \frac{1}{V \cdot R_T} \left[ \frac{V^2}{4} - \frac{e^2}{C^2} \left( \frac{Q_g}{e} - n - \frac{1}{2} \right)^2 \right] & \text{für Stromfluss} \\ 0 & \text{für Coulomb-Blockade} \end{cases} \quad (7.22)$$

Der Strom hängt quadratisch von der Gatespannung ab (umgekehrte Parabel) oder er verschwindet in den Bereichen der Coulomb-Blockade. das Ergebnis ist in Abb. (7.5) dargestellt.

At low temperatures, such that only two adjacent charges,  $n$  and  $n + 1$ , play a role,  $|E_{\text{ch}}(n+1, Q_G) - E_{\text{ch}}(n, Q_G)| \approx k_B T \ll E_C$ , we obtain from (7.21) the linear conductance ( $V \rightarrow 0$ )

$$G(T, Q_G) = \frac{1}{2R_{\text{ass}}} \frac{\delta E_{\text{ch}}}{\sinh(\delta E_{\text{ch}}/k_B T)} . \quad (7.23)$$

It is peaked near the points of degeneracy where  $\delta E_{\text{ch}} = E_{\text{ch}}(n+1, Q_G) - E_{\text{ch}}(n, Q_G)$  vanishes. The width of the peaks is proportional to the temperature. Even at the maxima the conductance reaches only 1/2 of the asymptotic value  $R_{\text{ass}} = R_{t,L} + R_{t,R}$  corresponding to the series addition of the two junction resistors.

## 7.6 Cotunneling processes

If sequential single-electron tunneling is suppressed by the Coulomb blockade, higher-order processes such as coherent “cotunneling” through several junctions become crucial. As a

specific example, we consider a SET transistor, biased such that the current in lowest-order perturbation theory vanishes. At low temperatures sequential tunneling is exponentially suppressed in this regime since the energy of a state with an excess charge on the island lies above the Fermi levels of the leads. On the other hand, if a transport voltage is applied, even if it is small, a higher-order tunneling process transferring an electron charge coherently through the *total* system from L tot R is energetically allowed. In this case the state with an excess electron charge in the island exists only virtually. Standard second-order (or fourth, depending on the counting) perturbation theory yields the rate

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\psi} \frac{\langle i | H_t | \psi \rangle \langle \psi | H_t | f \rangle}{E_{\psi} - E_i} \right|^2 \delta(E_i - E_f). \quad (7.24)$$

The energy of the intermediate virtual state lies above the initial one,  $E_{\psi} - E_i > 0$ , but it enters only into the denominator rather than into the exponent of the sequential tunneling rate. Hence the higher-order rate is nonzero even at very low temperatures.

When analyzing the process we have to pay attention to the following:

- (i) There are actually two channels which add coherently. Either an electron tunnels first from the left lead onto the island, and then an electron tunnels from the island to the other lead. In this case the increase in charging energy of the intermediate state compared with the initial one is  $\Delta E_L = E_{ch}(n+1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G) - eV_L$ . Or an electron tunnels first out of the island to the right lead and another electron from the left lead replaces the charge. In this case the increase in energy of the intermediate state is  $\Delta E_R = E_{ch}(n-1, Q_G) + eV_R - E_{ch}(n, Q_G)$ . Both amplitudes have to be added before the matrix element is squared.
- (ii) The leads contain a macroscopic number of electrons. Therefore, with overwhelming probability the outgoing electron will come from a different state than the one which the incoming electron occupies. Hence, after the process an electron-hole excitation is left in the island, which explains why it is called “inelastic” cotunneling.

Transitions involving different excitations are added incoherently. The resulting rate for inelastic cotunneling is

$$\begin{aligned} \Gamma_{cot} &= \frac{\hbar}{2\pi e^4 R_{t,L} R_{t,R}} \int_{k \in L} d\epsilon_k \int_{q \in I} d\epsilon_q \int_{q' \in I} d\epsilon_{q'} \int_{k' \in R} d\epsilon_{k'} f(\epsilon_k)[1-f(\epsilon_q)]f(\epsilon_{q'})[1-f(\epsilon_{k'})] \\ &\times \left[ \frac{1}{\epsilon_q + \Delta E_L - \epsilon_k} + \frac{1}{\epsilon_{k'} + \Delta E_R - \epsilon_{q'}} \right]^2 \delta(eV + \epsilon_k - \epsilon_q + \epsilon_{q'} - \epsilon_{k'}). \end{aligned} \quad (7.25)$$

At  $T = 0$  the integrals can be performed analytically with the result

$$\begin{aligned} \Gamma_{cot} &= \frac{\hbar}{2\pi e^3 R_{t,L} R_{t,R}} V \left[ \left( 1 + \frac{2}{eV} \frac{\Delta E_L \Delta E_R}{\Delta E_L + \Delta E_R + eV} \right) \left( \sum_{r=L,R} \ln \left( 1 + \frac{eV}{\Delta E_r} \right) \right) - 2 \right] \\ &= \frac{\hbar}{12\pi e R_{t,L} R_{t,R}} \left( \frac{1}{\Delta E_L} + \frac{1}{\Delta E_R} \right)^2 V^3 \quad \text{for } eV \ll \Delta E_L, \Delta E_R. \end{aligned} \quad (7.26)$$

At finite temperatures forward and backward processes occur. They obey a detailed balance relation  $\Gamma_{\text{cot}}(-V) = \exp(-eV/k_B T)\Gamma_{\text{cot}}(V)$ . The current then is

$$I(V) = \frac{\hbar}{12\pi e^2 R_{t,L} R_{t,R}} \left( \frac{1}{\Delta E_L} + \frac{1}{\Delta E_R} \right)^2 [(eV)^2 + (2\pi k_B T)^2] V . \quad (7.27)$$

Fig.(7.6) shows the linear conductance as a function of the gate voltage including the effect of cotunneling. It should be compared to Fig.(7.5).

In the Coulomb blockade regime of a SET transistor the  $V^3$  dependence of the cotunneling current has been observed. In systems with  $N$  junctions a corresponding  $N$ -th order process (or  $2N$ -th order, depending on the counting) leads to a current  $I \propto V^{2N-1}$ . As an example we consider  $N = 4$  junctions with  $C = 10^{-15}\text{F}$  and tunneling resistance  $R_t$ . In this case  $\Gamma_{\text{cot}} = (2.5 \times 10^{-3}/\text{s}) (V/\mu\text{V})^7 (\text{k}\Omega/R_t)^4$ . These cotunneling processes limit the accuracy, when single-electron transistors are used for metrological applications, e.g. as current standard, even under the most favorable situations, i.e. low  $T$  and low frequency, where thermally activated multi-electron transfer processes and missed cycles play little role.

The expression for the cotunneling rate diverges logarithmically when the intermediate and initial or final states are degenerate. This divergence is removed by life-time broadening effects.

There exists also the process where *one* electron tunnels through the total system, leaving no excitations in the island. This process is called “elastic cotunneling”. Its rate has a small prefactor  $\propto 1/[\Omega_I N_I(0)]$  (inversely proportional to the number of states of the island) compared with the inelastic cotunneling rate. On the other hand, it yields a current which is linear in the applied voltage, which makes it important at very low voltages and temperatures  $k_B T, eV \ll [E_C/\Omega N(0)]^{1/2}$ .

### 7.6.1 Broadening of the steps

Even at  $T = 0$  where thermal effects are frozen, tunneling of electrons leads to an uncertainty in their location. This leads to a broadening of the steps in  $\langle n(Q_G) \rangle$  in the electron box. This effect can be estimated in perturbation theory. We start from the basis states  $|n; \dots\rangle$  with total charge  $n$  on the island and certain single-electron states of the lead and the island occupied or empty (indicated by the dots). Due to tunneling the states are modified. In lowest-order perturbation theory the corrections

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle^{(1)} = & \sum_{k,q} \left[ \frac{T_{q,k}}{\epsilon_q - \epsilon_k + E_{\text{ch}}(n+1, Q_G) - E_{\text{ch}}(n, Q_G)} |n+1; q, \bar{k}\rangle \right. \\ & \left. + \frac{T_{k,q}}{\epsilon_k - \epsilon_q + E_{\text{ch}}(n-1, Q_G) - E_{\text{ch}}(n, Q_G)} |n-1; \bar{q}, k\rangle \right], \end{aligned} \quad (7.28)$$

arise due to tunneling from an electron state  $k$  of the lead (leaving it empty  $\bar{k}$ ) into the state  $q$  of the island, increasing the charge to  $n+1$ , or reversely. The resulting change in

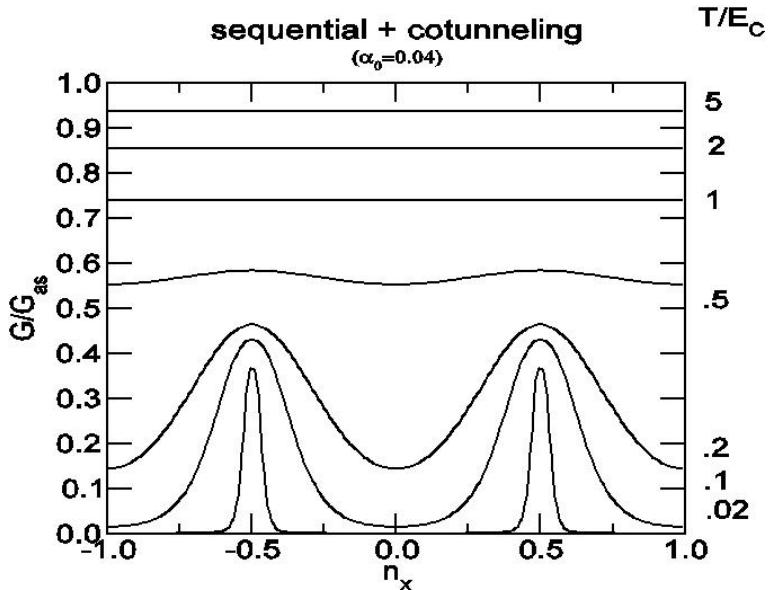


Abbildung 7.9: The linear conductance  $G(T, Q_G)$  of a SET at different values of the temperature, including the effect of cotunneling processes.

the expectation value of the electron number,  $\delta n(Q_G) = \langle \psi_n^{(1)} | \hat{n} | \psi_n^{(1)} \rangle$ , is

$$\begin{aligned} \delta n(Q_G) &= |T|^2 N_L N_I \int d\epsilon_k \int d\epsilon_q \left\{ \frac{f(\epsilon_k)[1-f(\epsilon_q)]}{[\epsilon_q - \epsilon_k + E_{ch}(n+1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G)]^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{f(\epsilon_q)[1-f(\epsilon_k)]}{[\epsilon_k - \epsilon_q + E_{ch}(n-1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G)]^2} \right\}, \end{aligned} \quad (7.29)$$

which for  $T = 0$  reduces to

$$\delta n(Q_G) = \frac{R_K}{8\pi^2 R_t} \ln \frac{E_{ch}(n-1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G)}{E_{ch}(n+1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G)}. \quad (7.30)$$

The result displays several important properties: (i) the expansion parameter is the dimensionless tunneling conductance  $R_K/R_t$ , where the quantum resistance  $R_K$  serves as reference, (ii) tunneling of single electrons leads to logarithmic corrections, (iii) the perturbation theory fails at the points of degeneracy of the charging energy,  $Q_G/e = n + 1/2$ . In the last Sections of this Chapter we will present the theoretical framework which describes tunneling beyond perturbation theory and regularizes these expressions.

## 7.7 Influence of the electromagnetic environment

So far we have assumed that the electron box or the SET transistor are driven by ideal voltage sources, and we have considered ideal measurement devices. On the other hand, in

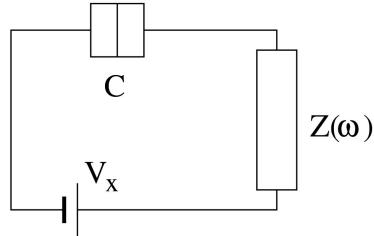


Abbildung 7.10: A junction in an external circuit characterized by an impedance  $Z(\omega)$ .

a real experiment the sources are outside the cryostat, some distance away from the single-electron device to which they are connected by leads. This introduces stray capacitances and Ohmic resistors as well as thermal fluctuations. We have to understand their influence on single-electron tunneling in order to describe a realistic situation – or to know how to set up an experiment close to ideal. We, therefore, will consider now a tunnel junction which is connected to an electric circuit described by a general impedance  $Z(\omega)$ . It is a specific example of the general problem how to describe dissipation in quantum mechanics, which has been addressed for instance by Caldeira and Leggett. In this approach the fluctuating linear circuit is modelled by an ensemble of harmonic oscillators.

### 7.7.1 The model Hamiltonian

The simplest example is a single tunnel junction in series with an impedance  $Z(\omega)$  and both driven by a voltage source as shown in Fig. 7.10. The tunnel junction is modeled in the usual way by a tunneling Hamiltonian. It is coupled to an ensemble of harmonic oscillators to account for the effect of the impedance. Due to this coupling tunneling processes in general are accompanied by emission or absorption processes of “photons”.

We will calculate the tunneling current  $I(V)$  as a function of the dc-voltage at the junction. Because of the voltage drop at the impedance the voltage at the junction

$$\tilde{V}(t) = V + \delta V(t) \quad (7.31)$$

is reduced below the applied value,  $V = V_x - I(V)Z(0)$ . Since this drop depends again on the current to be determined, we are left – even after we found  $I(V)$  – with a self-consistency problem. Furthermore, the impedance produces current and hence voltage fluctuations at the junction  $\delta V(t)$  with  $\langle \delta V(t) \rangle = 0$ .

Let us recall what is known about the fluctuations of a resistor, or in general of a linear circuit element with impedance  $Z(\omega)$ . For this purpose we ignore tunneling, which means that the junction is reduced to a capacitor  $C$ . Then the balance of currents in the circuit satisfies (after Fourier transformation)

$$[i\omega C + Z^{-1}(\omega)]\delta V(\omega) = \delta I(\omega) . \quad (7.32)$$

The power spectrum of the Gaussian current noise is given by the standard Johnson-

Nyquist relation

$$\begin{aligned}\langle \delta I \delta I \rangle_\omega &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega(t-t')} \frac{1}{2} \langle \{\delta I(t), \delta I(t')\} \rangle \\ &= \text{Re}\{Z^{-1}(\omega)\} \hbar\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right).\end{aligned}\quad (7.33)$$

Hence the fluctuations of the voltage at the junction are governed by

$$\langle \delta V \delta V \rangle_\omega = \text{Re}\{Z_t(\omega)\} \hbar\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right). \quad (7.34)$$

Here  $Z_t(\omega)$  is the impedance seen at the site of the junction, i.e. the effect of  $Z(\omega)$  and the capacitance of the junction shunted in parallel,

$$Z_t(\omega) = [i\omega C + Z^{-1}(\omega)]^{-1}. \quad (7.35)$$

A microscopic description of the system consisting of the junction and the impedance is provided by the Hamiltonian

$$H = \sum_{k,\sigma} \left( \epsilon_k + e\tilde{V}(t) \right) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \sum_{q,\sigma} \epsilon_q c_{q,\sigma}^\dagger c_{q,\sigma} + \sum_{k,q,\sigma} T_{k,q} c_{k,\sigma}^\dagger c_{q,\sigma} + \text{h.c.} + H_{\text{bath}}. \quad (7.36)$$

The first terms describe the right and left electrodes and the tunneling. The last term,  $H_{\text{bath}}$ , describes the degrees of freedom responsible for the fluctuations  $\delta V(t)$ . Since they result from a linear circuit element they are Gaussian and are in general described by an ensemble of harmonic oscillators. We set

$$H_{\text{bath}} = \sum_j \left( \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j}{2} \Omega_j^2 x_j^2 \right) \quad \text{and} \quad \delta\phi(t) = \sum_j c_j x_j(t). \quad (7.37)$$

Here we introduced a phase as the time-integral of the voltage

$$\hbar\phi(t) \equiv \int_0^t dt' e\tilde{V}(t') = eVt + \hbar\delta\phi(t), \quad \hbar\delta\phi(t) = \int_0^t dt' e\delta V(t'), \quad (7.38)$$

which will turn out to be the natural variable. The distribution of the oscillator frequencies  $\Omega_j$  and the coefficients  $c_j$  have to be chosen appropriately in order to produce the correct power spectrum.

Using properties of the harmonic oscillators,

$$\langle x_j(t)x_{j'}(t') \rangle_{\text{bath}} = \delta_{j,j'} \frac{\hbar}{2m_j \Omega_j} \left\{ \coth\left(\frac{\hbar\Omega_j}{2k_B T}\right) \cos[\Omega_j(t-t')] - i \sin[\Omega_j(t-t')] \right\},$$

we find for the Fourier transform of the symmetrized correlation function of  $\delta\phi$

$$\frac{1}{2} \langle \{\delta\phi(t), \delta\phi(t')\} \rangle_{\text{bath},\omega} = J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right). \quad (7.39)$$

The coefficient  $c_j$  and the frequencies of the oscillators enter only in the combination

$$J(\omega) \equiv \pi \sum_j \frac{c_j^2 \hbar}{2m_j \Omega_j} [\delta(\omega - \Omega_j) - \delta(\omega + \Omega_j)] . \quad (7.40)$$

We can reproduce the Johnson-Nyquist correlation functions (7.34) by choosing

$$J(\omega) = \frac{e^2}{\hbar \omega} \text{Re}\{Z_t(\omega)\} . \quad (7.41)$$

Technically it is inconvenient to deal with time-dependent energies in the electrodes. Therefore, we perform a unitary transformation  $H = U^\dagger H' U - i\hbar U^\dagger \partial U / \partial t$ , where

$$U = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int^t dt' e \tilde{V}(t') \sum_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \right] . \quad (7.42)$$

In the resulting Hamiltonian  $H'$  the electrodes appear in unperturbed form

$$H' = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \sum_{q,\sigma} \epsilon_q c_{q,\sigma}^\dagger c_{q,\sigma} + \sum_{k,q,\sigma} T_{k,q} e^{i\phi(t)} (c_{k,\sigma}^\dagger c_{q,\sigma} + \text{h.c.}) + H_{\text{bath}} , \quad (7.43)$$

but the tunneling term acquired a time-dependent phase factor, depending on the integral of the voltage introduced by (7.38).

### 7.7.2 The single-electron tunneling rate

When evaluating the tunneling rates we have to take into account that a tunneling process (from state  $k$  in one electrode to  $q$  in the other) in general is accompanied by a transition in the bath ( $X \rightarrow X'$ ) as well. Using the golden rule we find the rate for tunneling in one direction

$$\begin{aligned} \Gamma^+(V) &= \frac{1}{e^2 R_t} \int d\epsilon_k \int d\epsilon_q f(\epsilon_k) [1 - f(\epsilon_q)] \\ &\times \sum_{X,X'} \rho_{\text{bath}}(X) \left| \langle X' | e^{i\delta\phi} | X \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_k + eV + E_X - \epsilon_q - E_{X'}) . \end{aligned} \quad (7.44)$$

Here  $\rho_{\text{bath}}(X)$  denotes the probability to find the bath in a state  $X$ . In thermal equilibrium and lowest-order in the coupling it is  $\rho_{\text{bath}}(X) = \langle X | \exp[-\beta H_{\text{bath}}] | X \rangle / Z_{\text{bath}}$ . We write  $\delta(\epsilon_k + eV + E_X - \epsilon_q - E_{X'}) = \int \frac{dt}{2\pi\hbar} \exp[\frac{i}{\hbar}(\epsilon_k + eV + E_X - \epsilon_q - E_{X'})t]$  and interpret the exponential of the bath energies as the time evolution operators of the bath. This allows us to express (7.44) as

$$\begin{aligned} \Gamma^+(V) &= \frac{1}{e^2 R_t} \int d\epsilon_k \int d\epsilon_q f(\epsilon_k) [1 - f(\epsilon_q)] \int \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i(\epsilon_k + eV - \epsilon_q)t/\hbar} \\ &\times \sum_{X,X'} \rho_{\text{bath}}(X) \langle X | e^{i\delta\phi(t)} | X' \rangle \langle X' | e^{-i\delta\phi(0)} | X \rangle . \end{aligned} \quad (7.45)$$

The second line of this expression can be expressed as a bath correlation function

$$\langle e^{i\delta\phi(t)} e^{-i\delta\phi(0)} \rangle_{\text{bath}} = e^{\langle [\delta\phi(t) - \delta\phi(0)]\delta\phi(0) \rangle_{\text{bath}}} \equiv e^{K(t)} . \quad (7.46)$$

We arrived at the second form using the Baker-Hausdorff formula and properties of a harmonic system. The correlation function  $K(t)$ , unlike the symmetrized correlation functions (7.39), depends on the order of the operators. It can be expressed as

$$K(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \frac{\text{Re}\{Z_t(\omega)\}}{R_K} \left\{ \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) [\cos(\omega t) - 1] - i \sin(\omega t) \right\} . \quad (7.47)$$

The tunneling rate in forward direction can now be written as

$$\Gamma^+(V) = \frac{1}{e^2 R_t} \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_{-\infty}^{\infty} dE' f(E) [1 - f(E')] P(E + eV - E') , \quad (7.48)$$

where the function  $P(E)$  is related to  $K(t)$  by

$$P(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[K(t) + iEt/\hbar] . \quad (7.49)$$

This completes the derivation. The calculation of the tunneling rate is reduced to integrations. We will continue with a discussion and derive some limiting results.

### 7.7.3 General properties

The coupling to the environment (bath) is accounted for by the function  $P(E)$  in the integral (7.48). In comparison to the usual expression for the tunneling rate of a voltage biased junction (see e.g. Eq. (7.4) with  $\delta E_{\text{ch}}$  replaced by  $eV$ ),  $P$  replaces the energy conserving  $\delta$ -function. This can be made apparent also by rewriting the rate (7.48) as a convolution

$$\Gamma^+(V) = \int dE \Gamma_{Z=0}^+ \left( V - \frac{E}{e} \right) P(E) = \frac{1}{e^2 R_t} \int dE \frac{E - eV}{\exp[(E - eV)/k_B T] - 1} P(E) . \quad (7.50)$$

In the absence of the impedance and its fluctuations i.e. for  $K(t) = 0$ ,  $P(E)$  reduces to a  $\delta$ -function, and we recover the standard result for the voltage-biased junction. In general, the function  $P(E)$  describes the emission ( $E > 0$ ) and absorption ( $E < 0$ ) of energy during a tunneling process due to the coupling of the electrons to the oscillator bath.

The vanishing of  $K(t = 0) = 0$  implies that the function  $P(E)$  is normalized

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE P(E) = 1 . \quad (7.51)$$

We obtain a second sum rule by taking the derivative of  $\exp[K(t)]$ , with the result

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE E P(E) = i\hbar K'(0) = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\text{Re}\{Z_t(\omega)\}}{R_K} = E_C . \quad (7.52)$$

At  $T = 0$  the function  $P(E)$  vanishes for negative energies,  $P(E < 0) = 0$ , and only the forward tunneling rate is nonzero. From the tunneling rates we obtain the current  $I(V) = e\Gamma^+$ ,

$$I(V) = \frac{1}{eR_t} \int_0^{eV} dE (eV - E) P(E), \quad (7.53)$$

which provides a convenient relation

$$\frac{d^2 I}{dV^2} = \frac{e}{R_t} P(eV). \quad (7.54)$$

At large voltages, such that  $eV$  is larger than the energies where  $P(E)$  gives a noticeable contribution, the limits of integration in (7.53) can be extended to  $\pm\infty$ . In this case the sum rules derived above are sufficient to determine the current-voltage relation

$$I(V) = \frac{1}{R_t} \left( V - \frac{e}{2C} \right). \quad (7.55)$$

The shift of the  $I$ - $V$  characteristic is a manifestation of the Coulomb blockade.

At finite temperatures  $T \neq 0$  the function  $P(E)$  obeys a detailed balance relation  $P(E)/P(-E) = e^{E/k_B T}$ . The current then is

$$I(V) = e(\Gamma^+(V) - \Gamma^+(-V)) = \frac{1}{eR_t} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1 - e^{-\beta eV}}{1 - e^{-\beta E}} EP(eV - E). \quad (7.56)$$

Below we will present further analytic and numerical results. For the moment we only stress that the calculation of  $I(V)$  is reduced to integrations. We have to recall, however, that in Eq. (7.31) we have split the voltage at the junction  $\tilde{V}(t) = V + \delta V(t)$  into a dc part  $V$  and a fluctuating part with vanishing average. There remains the problem to determine the dc part, which differs from the applied voltage  $V_x$  due to the voltage drop at the junction. This in turn is proportional to the current  $I(V)$ , leading to the following self-consistency relation

$$I(V)Z(\omega = 0) + V = V_x. \quad (7.57)$$

Along the same line we can also describe a current-biased junction with a parallel Ohmic resistor. Here the imposed current  $I_x$  is divided into a current through the junction  $I(V)$  and a current through the resistor, which in turn depends on the voltage at the junction. Hence

$$I(V) + \frac{V}{R} = I_x. \quad (7.58)$$

In both cases we combine the standard linear circuit description (Kirchhoff's laws) for resistors, capacitances, sources, ... with the "black-box" relation  $I(V)$  for the junction, which is assumed to be the only nonlinear element in the circuit. The properties of the junction depend on the impedance  $Z_t(\omega)$  seen at the site of the junction. It is the same for both examples mentioned above.

At this stage we would like to comment on the range of validity of the treatment presented above. The transition rate was obtained in lowest-order perturbation theory.

This requires that the tunneling conductance  $1/R_t$  is low, but the question remains what is the reference scale. Furthermore, it appears that no assumption was made about the value of the series impedance  $Z(\omega)$ . A systematic analysis of the problem where the tunneling and the Ohmic resistor are treated on an equal footing, yields the requirement  $R_t \gg Z(0)$ . Obviously, in the extreme limit it is not crucial to solve the self-consistency relation (7.57). However, in intermediate situations only the self-consistent calculation produces results with the correct asymptotic behavior.

The analysis presented above can be generalized to more complex systems involving networks of junctions and general impedances. The basic point is that we treat the tunneling in lowest-order perturbation theory, i.e. for a tunneling process in one junction all the other junctions only act as capacitors. This means that the transition rate in each junction has the form presented above. However, it depends on the specific impedance  $Z_t(\omega)$  between the two sides of the considered junction, which in turn depends on the capacitances of all other junctions. The calculation of that impedance follows the classical electrodynamics rules.

#### 7.7.4 The effect of an Ohmic resistor

As an important example we consider a tunnel junction in series with an Ohmic resistor  $Z(\omega) = R$ , defining the dimensionless conductance

$$\alpha_s \equiv R_K/R . \quad (7.59)$$

The resulting function  $P(E)$  is plotted in Fig. 7.7.4 for different values of  $\alpha_s$  at  $T = 0$ . and the corresponding current-voltage characteristics in Fig. 7.7.4. The curves display a pronounced crossover. As  $R/R_K$  is increased the peak of  $P(E)$  shifts from the origin to  $E_C$ , and the  $I$ - $V$  characteristics changes from a classical, linear dependence to a nonlinear one with a pronounced Coulomb gap.

In the limit of a low impedance environment,  $R/R_K \ll 1$ , the function  $P(E)$  reduces to  $P(E) \rightarrow \delta(E)$ . In this case we recover the classical linear  $I$ - $V$  characteristic of a junction driven by a constant voltage source. In the opposite limit of a high impedance environment,  $R/R_K \gg 1$ , the external voltage source and the series resistor act as a current source, which should lead to Coulomb blockade effects. Indeed at finite temperatures,  $k_B T \gg \hbar/RC$ , where it is sufficient to replace  $\text{Re}\{Z_t(\omega)\} = R/(1 + (\omega RC)^2) \rightarrow (\pi/C)\delta(\omega)$ , we find  $K(t) = -\pi/(CR_K)(it + k_B T t^2/\hbar)$ . Hence,  $P(E)$  is peaked around the Coulomb gap  $E_C = e^2/2C$ ,

$$P(E) = \frac{1}{\sqrt{4\pi E_C k_B T}} \exp \left[ -\frac{(E - E_C)^2}{4E_C k_B T} \right] , \quad (7.60)$$

and the  $I$ - $V$  characteristic shows a Coulomb gap. At very low temperatures,  $k_B T \ll \hbar/RC$ , the width of the peak of  $P(E)$  is proportional to  $E_C \sqrt{\alpha_s}$ .

We proceed by deriving further asymptotic results for  $P(E)$  and the  $I$ - $V$  characteristics. At low temperatures  $K(t)$  can be expressed by Exponential Integrals

$$\frac{d}{d\tau} K(\tau) = \frac{1}{\alpha_s} [e^{-\tau} E_1(-\tau) - e^\tau E_1(\tau)] . \quad (7.61)$$

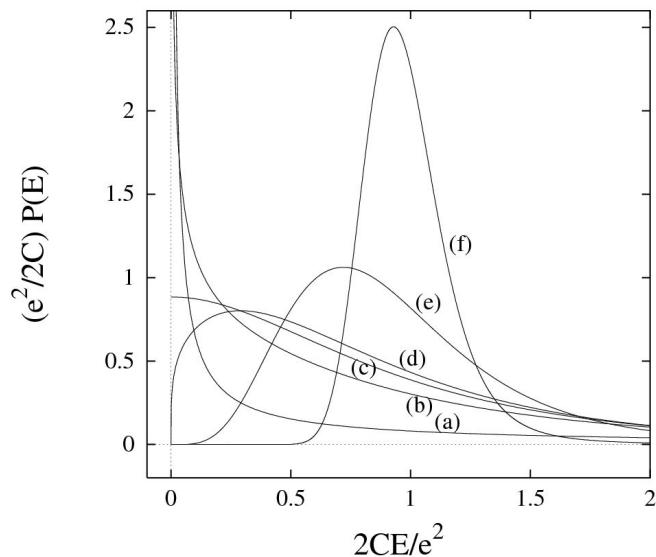


Abbildung 7.11: The function  $P(E)$  at  $T = 0$  for different values of the series resistor. From (a) to (f)  $\alpha_s \equiv R_K/R = 20, 3.2, 2, 1.6, 0.4, 0.04$ .

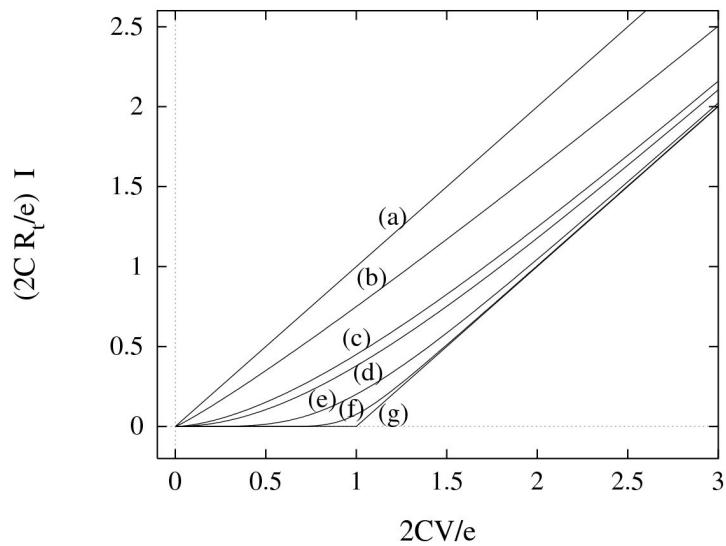


Abbildung 7.12:  $I$ - $V$  characteristic of a junction in an electric circuit at  $T = 0$  for different values of the series resistor. From (a) to (g)  $\alpha_s \equiv R_K/R = \infty, 20, 3.2, 2, 0.4, 0.04, 0$ .

Here we have introduced  $\tau = t/RC$ . In the long-time limit  $\tau \rightarrow \infty$  we have

$$K(\tau) = -\frac{2}{\alpha_s} \left[ \ln(\tau) + \gamma + i\frac{\pi}{2} + \dots \right] \quad (7.62)$$

where  $\gamma = 0.5772\dots$  is Euler's constant. From this we obtain  $P(E)$  at low energies, up to a constant which is fixed by the normalization condition. Hence, we have

$$\begin{aligned} P(E \rightarrow 0+) &\propto e^{-2\gamma/\alpha_s} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \tau^{-2/\alpha_s} e^{iERC\tau/\hbar} \\ &= \frac{e^{-2\gamma/\alpha_s}}{\Gamma(2/\alpha_s)} \frac{1}{E} \left[ \frac{\pi}{\alpha_s} \frac{E}{E_C} \right]^{2/\alpha_s}. \end{aligned} \quad (7.63)$$

Inserting the expansion into (7.53) we find for  $T = 0$

$$I(V) = \frac{e^{-2\gamma/\alpha_s}}{\Gamma(2 + 2/\alpha_s)} \frac{V}{R_t} \left[ \frac{\pi}{\alpha_s} \frac{e|V|}{E_C} \right]^{2/\alpha_s}. \quad (7.64)$$

We note that at low temperature, as long as the series resistance does not vanish,  $R \neq 0$ , the differential conductance near  $V = 0$  vanishes as a power law. At finite temperatures,  $T \neq 0$ , the conductance is finite. The linear conductance is

$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=0} \propto \frac{1}{R_t} \left[ \frac{\pi}{\alpha_s} \frac{2k_B T}{E_C} \right]^{2/\alpha_s}. \quad (7.65)$$

These examples show that a single tunnel junction only shows Coulomb blockade effects if shunted in series with a resistor exceeding the quantum resistance  $R_K$ . This is difficult to realize in an experiment since a high resistor close to the metal junction can be fabricated only by bringing different materials into good electric contact. Indeed single-electron effects and Coulomb blockade are easier studied in more complex systems, such as SET transistors discussed previously. In this case one junction effectively acts as a high resistor for the other junctions.

## 7.8 Quantenpunkte

Im folgenden Abschnitt betrachten wir Systeme, bei denen die Insel ein “Quantenpunkt” ist. Ein Quantenpunkt ist so klein, dass die Quantisierung der Energieniveaus beobachtbar wird. Quantenpunkte können auf viele verschiedene Arten hergestellt werden. Z.B. durch laterale Strukturierung eines 2-dimensionalen Elektronengases durch entsprechende metallische Elektroden auf der Oberfläche der Probe, wie in Abb. (7.8) zu sehen ist. Dies hat den Vorteil, dass sowohl die Größe des Quantenpunkts als auch die Barriere zu den Elektroden (das ausgedehnte 2-dimensionale Elektronengas) kontrollierbar sind. Weitere wichtige Beispiele sind Moleküle zwischen Elektroden (siehe Abb. 7.8) oder (quasi-1-dimensionale) Kohlenstoff-Nanoröhren die durch Störstellen in Segmente aufgebrochen sind.

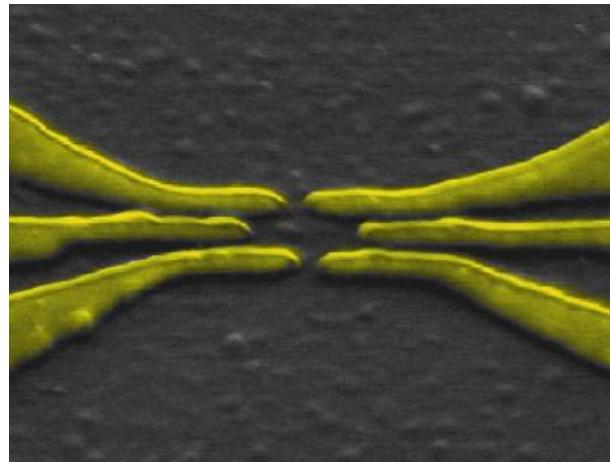


Abbildung 7.13: Die metallischen Elektroden strukturieren das darunter liegende 2DEG und erzeugen einen Quantenpunkt.

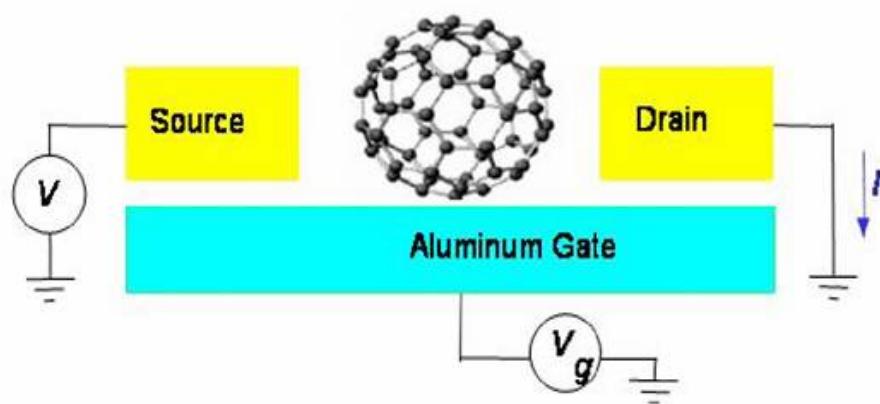


Abbildung 7.14: Ein  $C_{60}$  Molekül als Quantenpunkt.

### 7.8.1 Energieskalen

Die charakteristischen Energieabstände zwischen den Niveaus eines Quantenpunkts werden gewöhnlich mit  $\delta$  bezeichnet. Angenommen der Quantenpunkt wäre eine quadratische Form mit Länge  $L$  und  $\infty$ -steilen Wänden in einem 2-dimensionalen Elektronengas (mit Bandmasse  $m^*$ ), dann wären die Energieeigenwerte

$$E_{i,j} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2}{L^2} (i^2 + j^2) \quad \text{mit } i, j, = 1, 2, 3, \dots . \quad (7.66)$$

D.h. der typische Abstand zwischen den Niveaus ist

$$\delta \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} . \quad (7.67)$$

Ein anderes Beispiel ist ein kreisrunder Quantendot mit parabolischem Potenzial  $V(x, y) = \frac{1}{2}m^*\Omega^2(x^2 + y^2)$ . Dann sind die Energieeigenwerte

$$E_{i,j} = \hbar\Omega(i + j - 1) \quad \text{mit } i, j, = 1, 2, 3, \dots . \quad (7.68)$$

Als Größe des Quantenpunkts können wir die Ausdehnung des Grundzustands nehmen. Dafür gilt  $\hbar\Omega = m^*\Omega^2 R^2$ . D.h. der typischen Energieabstand ist

$$\delta \sim \hbar\Omega = \frac{\hbar^2}{m^* R^2} . \quad (7.69)$$

Eine wichtige Frage ist, wie sich der typische Niveauabstand  $\delta$  mit der Ladungsenergie  $E_C = e^2/2C$  vergleicht. Es ist bekannt, dass eine Scheibe mit Radius  $R$  die Kapazität  $C = \epsilon R$  hat. Das Verhältnis der beiden Skalen ist also

$$\frac{E_C}{\delta} = \frac{e^2 E^2 m}{\epsilon R \hbar^2} = \frac{m^* R}{\epsilon m a_0} . \quad (7.70)$$

Solange der Radius  $R$  groß ist gegenüber dem Bohr'schen Radius  $a_0 = \hbar^2/(e^2 m) \approx 2\text{\AA}$  ist also die Ladungsenergie die größere Skala. Allerdings kann sie, besonders wenn die Bandmasse klein ist auch vergleichbar werden.

### 7.8.2 Addition Spectrum

Für Transportprobleme ist wichtig wie sich die Energie eines Quantenpunktes ändert, wenn ein zusätzliches Elektron dorthin tunneln muss. Dazu muss das nächste freie Energieniveau (oder höhere) besetzt werden, was typischerweise die Energie  $\delta$  erfordert. Darüber hinaus ändert sich aber auch die Coulomb-Wechselwirkungsenergie mit all den anderen Elektronen um einen Betrag von der Größenordnung  $E_C$ . Mit quantenchemischen Methoden können wir diese Energien – es ist gerade die Ionisationsenergie – berechnen. Qualitativ können wir aber von folgendem Bild ausgehen:

Die Energieniveaus des Quantendots bei fester Elektronenzahl  $n$  seien mit  $\epsilon_i$  mit  $i = 1, 2, \dots$  bezeichnet. Diese sind besetzt oder leer  $n_i = 0, 1$ , und es gilt  $n = \sum_i n_i$ .

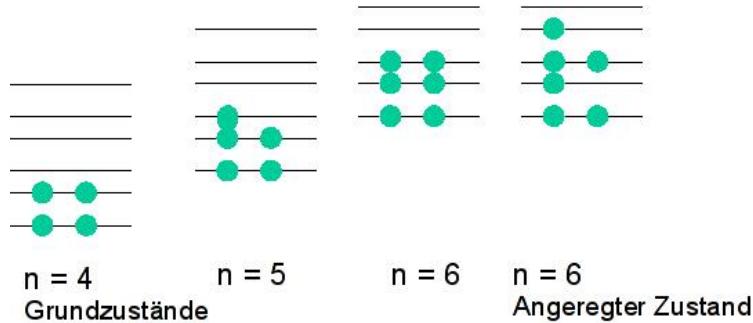


Abbildung 7.15: Die Energieniveaus in der Addition spectrum-Näherung für verschiedene Elektronenzahlen.

Die Coulomb-Wechselwirkung approximieren wir durch eine effektive Kapazität,  $U(n) = (ne - Q_G)^2 / 2C$ . Dann ist approximativ die Energie der Zustände  $|s\rangle = |\{n_i\}\rangle$

$$E_s = U(n) + \sum_{i=1}^{\infty} n_i \epsilon_i \quad (7.71)$$

Z.B. die Energie des Grundzustands bei  $n$  Elektronen ist  $E_{n;0} = U(n) + \sum_{i=1}^n \epsilon_i$ . Dieses Bild ist in Abb. (7.8.2) illustriert.

### 7.8.3 Transportspektroskopie

Qualitativ können wir nun wie bei den metallischen Inseln weitervorgehen. Z.B. in einem Einzelektrontransistor mit einem Quantenpunkt als Insel zwischen metallischen Elektroden fließt bei tiefen Temperaturen im Grenzfall verschwindender Transportspannung,  $V \rightarrow 0$ , (linearer Leitwert) nur dann ein Strom, wenn das elektrochemische Potenzial der linken Elektrode gerade ausreicht, um ein zusätzliches Elektron in dem Quantenpunkt zu erzeugen, und weiterhin die damit verknüpfte zusätzliche Energie gerade groß genug ist, um das rechte elektrochemische Potenzial zu überwinden. D.h.

$$\begin{aligned} \mu_L = \mu_R = \epsilon_F &= E_{n+1;0} - E_{n;0} \\ &= U(n+1) - U(n) + \epsilon_{n+1} \\ &= \left( n + \frac{1}{2} - \frac{Q_G}{e} \right) 2E_C + \epsilon_{n+1}. \end{aligned} \quad (7.72)$$

Wenn wir also  $\epsilon_F$  oder  $Q_G$  variieren, werden wir eine Sequenz von Leitwertmaxima beobachten, wenn immer für einen Wert von  $n$  die Bedingung (7.72) erfüllt ist. Die Abstände zwischen den Maxima sind

$$\Delta\epsilon_F = 2E_C + (\epsilon_{n+1} - \epsilon_n) \quad \text{bzw.} \quad \frac{\Delta Q_G}{e} = 1 + \frac{(\epsilon_{n+1} - \epsilon_n)}{2E_C}. \quad (7.73)$$

Der erste Term ändert sich auch im Experiment nur schwach mit  $n$ , zumindest wenn  $n$  nicht zu klein ist. Der zweite, der von der Größenordnung  $\delta$  ist, hängt von  $n$  ab und

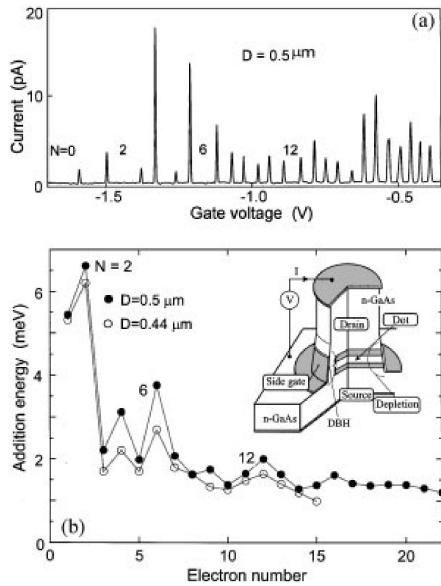


Abbildung 7.16: Der lineare Leitwert als Funktion der Gatespannung und die Abstände zwischen den Leitwertmaxima.

führt dazu, dass die Maxima nicht äquidistant sind. Im Gegensatz dazu sind bei einer metallischen Insel, wo  $\delta$  verschwindend klein ist, die Maxima äquidistant.

Wenn wir den Spin berücksichtigen, der uns erlaubt jedes Niveau  $i$  2-fach zu besetzen, erwarten wir dass es einen charakteristischen Unterschied zwischen geraden und ungeraden Werten von  $n$  gibt. Also gilt typischerweise

$$\Delta\epsilon_F = \begin{cases} 2E_C + \delta & \text{für } n = \text{gerade} \rightarrow n + 1 \\ 2E_C & \text{für } n = \text{ungerade} \rightarrow n + 1 \end{cases} . \quad (7.74)$$

Diese Asymmetrie zwischen gerade und ungerade wird gelegentlich im Experiment gesehen, häufig aber auch nicht. Dies braucht nicht zu verwundern; denn auch in Atomen werden die Niveaus in der Regel nicht alternierend mit Spin-up und -down gefüllt, wie wir von der Hund'schen Regel wissen.

Ein weiterer Unterschied zu metallischen Inseln besteht darin, dass bei Quantenpunkten die Tunnelmatrixelemente stark von den "atomaren" Zuständen des Quantenpunkts abhängen. Daher hängt die Tunnelwahrscheinlichkeit und damit die Höhe der Leitwertmaxima im Allgemeinen von  $n$  ab. Abb. (7.8.3) illustriert diesen Sachverhalt.

Wenn wir den nichtlinearen Leitwert betrachten, also endliche Transportspannung  $V$  finden wir eine weitere Besonderheit. Es ist nämlich auch möglich, dass das zusätzliche Elektron nicht in das nächst niedere Enerieniveau tunneln sondern in einen angeregten Zustand. Dies führt zu weiteren Maxima im (nichtlinearen) Leitwert. Das Ergebnis ist in Abb. (7.8.3) illustriert.

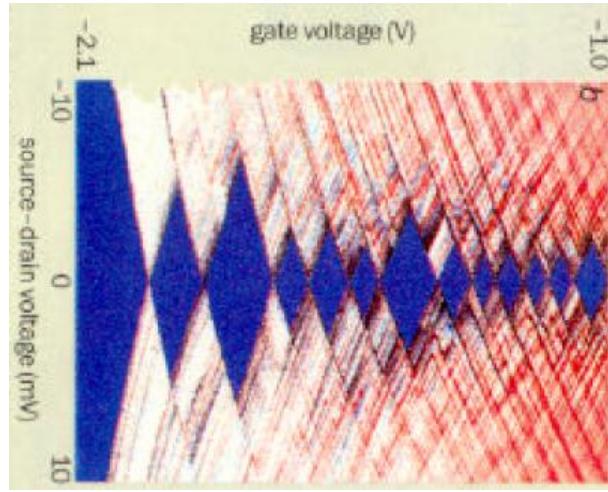


Abbildung 7.17: Der Leitwert als Funktion von Transport- und Gatespannung ist farbkodiert dargestellt. Angeregte Zustände (bei gleicher Elektronenzahl) führen zu einer Feinstruktur in der Höhe des Leitwertes.

#### 7.8.4 Tunnelraten

Der Hamilton-Operator eines Einzelelektronentransistors mit einem Quantenpunkt (quantum dot) ist

$$\begin{aligned}
 H &= H_D + H_{\text{Leads}} + H_T \\
 H_D &= \sum_s E_s |s\rangle\langle s| \\
 H_{\text{Leads}} &= \sum_{k,\sigma;r=R,L} (\epsilon_{k,r} - \mu_r) c_{k\sigma;r}^\dagger c_{k\sigma;r} \\
 H_T &= \sum_{k,i,\sigma;r} \left( T_{kq}^r c_{k\sigma;r}^\dagger a_{i\sigma} + T_{ki}^{r*} a_{i\sigma}^\dagger c_{k\sigma;r} \right)
 \end{aligned} \tag{7.75}$$

wobei die Operatoren  $c_{k\sigma;r}$  sich auf die Elektrode  $r$  beziehen und  $a_{i\sigma}$  auf den Quantenpunkt.

Die Rate für einen Tunnelprozess von der linken Elektrode auf den Quantenpunkt, der dort vom Zustand  $|s'\rangle$  zum Zustand  $|s\rangle$  führt, ist nach Summation und entsprechender Wichtung über den mikroskopischen Ausgangszustand

$$\gamma_{LD}(s' \rightarrow s) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k f(\epsilon_{k;L} - \mu_L) |T_{ki}^L|^2 \delta(E_s - E_{s'} - \epsilon_{k;L} - \mu_L) \delta_{n_s - n_{s'}, 1} \tag{7.76}$$

Im Zustand  $|s\rangle$  ist das Niveau  $i$  besetzt, dagegen war es leer bei  $|s'\rangle$ . Die Fermifunktion  $f(E) = 1/(e^{E/k_B T} + 1)$  beschreibt die Elektrode. Zur weiteren Auswertung führt man die

“spektrale Funktion”

$$\Gamma_i^r(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k |T_{ki}^r|^2 \delta(E - \epsilon_{k;r}) \quad (7.77)$$

ein. Damit wird

$$\gamma_{LD}(s' \rightarrow s) = f(E_s - E_{s'}) |T_{ki}^L|^2 \delta(E_s - E_{s'} - \epsilon_{k;L} - \mu_L) \delta_{n_s - n_{s'}, 1}. \quad (7.78)$$

während wir für den umgekehrten Prozess

$$\gamma_{DL}(s \rightarrow s') = (1 - f(E_s - E_{s'})) |T_{ik}^L|^2 \delta(E_s - E_{s'} - \epsilon_{k;L} - \mu_L) \delta_{n_s - n_{s'}, 1}. \quad (7.79)$$

finden. Beide Raten erfüllen das detaillierte Gleichgewicht

$$\frac{\gamma_{LD}(s' \rightarrow s)}{\gamma_{DL}(s \rightarrow s')} = \frac{f(E_s - E_{s'})}{1 - f(E_s - E_{s'})} = e^{-(E_s - E_{s'})/k_B T} \quad (7.80)$$

Wir können nun, ähnlich zum Fall der metallischen Insel, wieder ein Mastergleichung aufstellen, um die Wahrscheinlichkeit für die verschiedenen Zustände des Quantenpunkts und den Strom zu berechnen. Die Rechnung ist prinzipiell “straightforward” aber sprengt den Rahmen dieses Skripts. Ich verweise den interessierten Leser auf die Literatur:

C.W.J. Beenakker, *Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot*, Phys. Rev. B **44**, 1646 (1991)

D.V. Averin, A.N. Korotkov, and K.K. Likharev, *Theory of single-electron charging of quantum wells and dots*, Phys. Rev. B **44**, 6199 (1991).