

# Transport elektronowy w układzie 2D: kwantowy kontakt punktowy

Marta Wleklińska

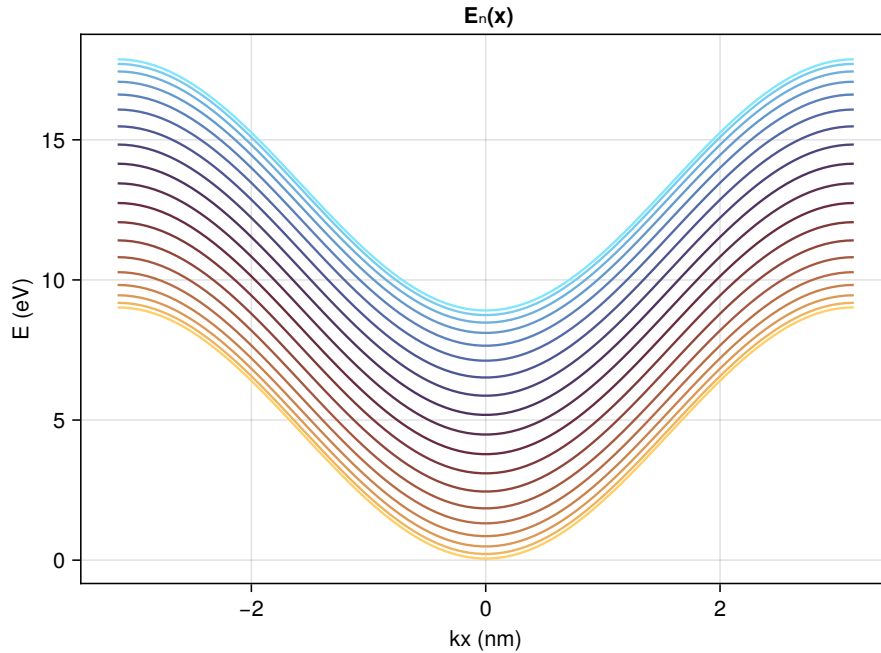
16 lipca 2025

## 1 Wstęp i wyniki

Rozpatrywany był układ kwantowego kontaktu punktowego. Początkowo było badane zachowanie się układu (relacja dyspersji na kanałach) na krańcach, wobec tego potencjał przyjmowaliśmy zero. Mogliśmy wówczas zapisać równanie własne

$$\begin{bmatrix} 4\alpha - \alpha(e^{ik_x\Delta x} + e^{-ik_x\Delta x}) & \alpha & 0 \cdots & 0 & 0 \\ -\alpha & 4\alpha - \alpha(e^{ik_x\Delta x} + e^{-ik_x\Delta x}) & \alpha & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{i,0} \\ \psi_{i,1} \\ \cdots \\ \psi_{i,N_y-1} \end{bmatrix} = E(k_x) \begin{bmatrix} \psi_{i,0} \\ \psi_{i,1} \\ \cdots \\ \psi_{i,N_y-1} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

które można było rozwiązać uzyskując wartości własne dla `kx_vals = LinRange(-\pi / dx, \pi / dx, 100)` otrzymując wyniki przedstawione na rysunku 1. Możemy zauważyć paraboliczny kształt relacji dyspersji dla  $k_x$  bliskich zero.



**Rysunek 1:** Relacja dyspersji w jednorodnym kanale

Dodatkowo, pierwsze energie charakteryzują się bliskimi sobie wartościami oraz tak samo końcowe - wartości środkowe są bardziej od siebie oddalone. Nie zmienia to faktu, że każde z nich charakteryzują się tym samym kształtem.

Ciągle pozostając w kanale wejściowym i wyjściowym przyjmując potencjał równy zero, na układ spojrzemy inaczej - będziemy chcieli poznać  $k_x$ . Ponownie rozwiążemy równanie własne, jednak w tym przypadku uogólnione równanie własne

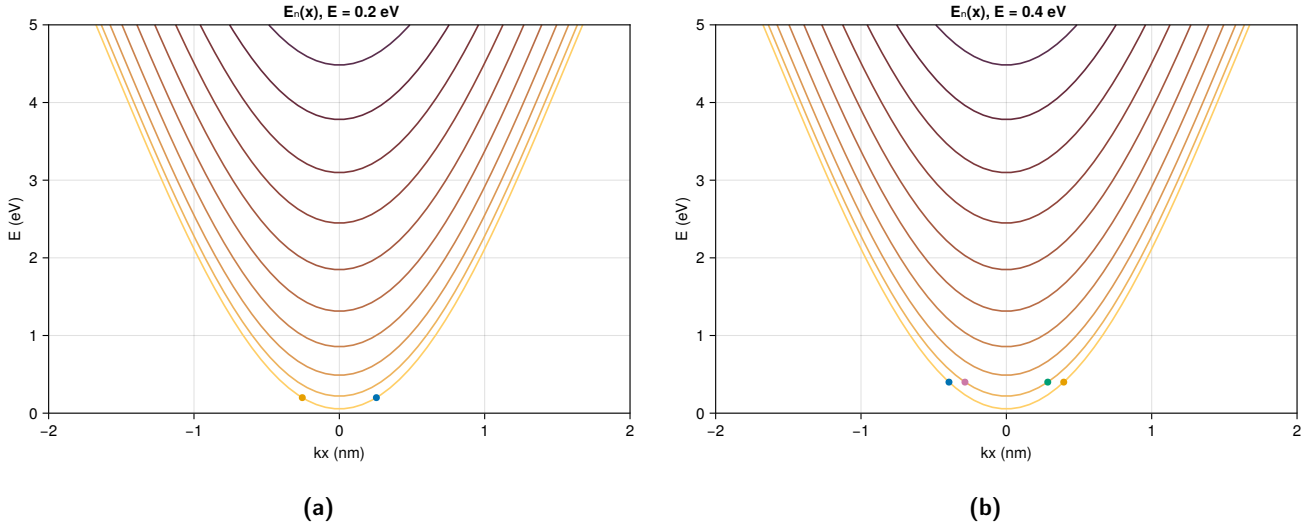
$$\begin{bmatrix} 0 & \hat{1} \\ \hat{\tau} & E\hat{1} - \hat{H} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{w} \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & \hat{\tau}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{w} \end{bmatrix} = 0. \quad (2)$$

W powyższym równaniu przyjęliśmy, że wektory  $\psi_{i-1} \equiv \mathbf{u}$  oraz  $\psi_i = \lambda \mathbf{u} \equiv \mathbf{w}$ . Wartość  $k_x$  mieści się w wartościach własnych  $\lambda$ , które będą rozwiązywane. Każda z macierzy będących elementami każdej z macierzy w uogólnionym problemie własnym ma wymiar  $N_y$ , wobec tego uzyskujemy  $2N_y$  wartości własnych  $\lambda = e^{ik_x^\pm \Delta x}$  i wektorów własnych  $[\mathbf{u}_{\pm,n} \quad \lambda_{\pm,n} \quad \mathbf{u}_{\pm,n}]^T$ . Po rozwiązaniu równania postawiliśmy warunek *segregujący* wektory i wartości  $|\lambda_{\pm,n}| = 1$  używając mody propagujące się. Na ich podstawie można było wyznaczyć prędkość i podzielić je na te propagujące w lewo i prawo

$$v_{\pm,n} = -\frac{2\Delta x}{\hbar} \Im \left[ \lambda_{\pm,n} \mathbf{u}_{\pm,n}^\dagger \boldsymbol{\tau}^\dagger \mathbf{u}_{\pm,n} \right]. \quad (3)$$

Z uzyskanych wartości własnych mogliśmy wyekstrahować wartości  $k_x = 1/(i\hbar * \Delta x) \log(\lambda)$ . W problemie (2) występuje wartość  $E$  - będziemy zatem rozpatrywać wartości  $E = \{0.2, 0.4\}$  eV.

Wracając do relacji dyspersji na rysunku 1 dla energii  $E = 0.2$  eV powinniśmy zaobserwować 1 mod (dwa przecięcia  $E = 0.2$  eV z relacją dyspersji) oraz dla  $E = 0.4$  eV - dwa mody. Na rysunku 2a zostały przedstawione wyznaczone wartości  $k_x$  dla każdego z przypadków ( $E = 0.2$  eV: rys. 2a,  $E = 0.4$  eV: rys. 2b).

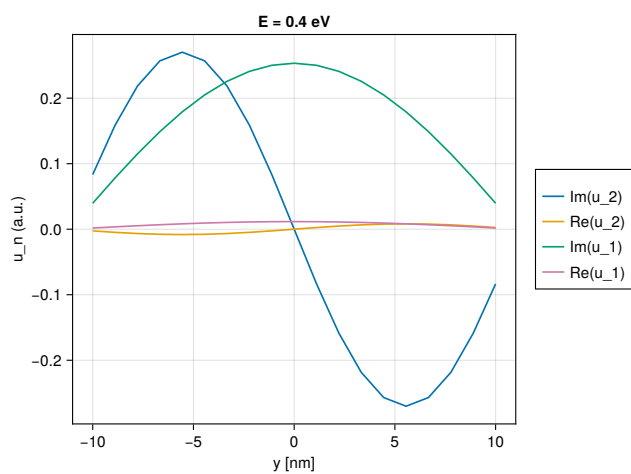


**Rysunek 2:** Relacja dyspersji dla **(a)**  $E = 0.2$  eV; **(b)**  $E = 0.4$  eV dla niższych energii. Punkty reprezentują mody propagujące się w prawo i lewo

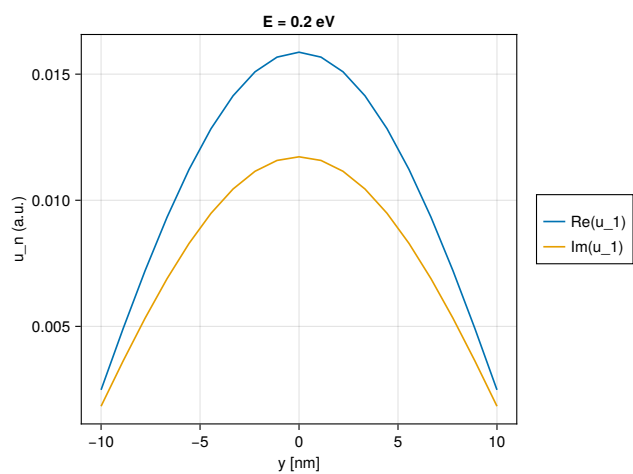
Korzystając ponownie z uzyskanych wektorów własnych możemy sprawdzić jak zachowują się części rzeczywiste i urojone (po normalizacji). Oczywiście dla  $E = 0.2$  eV uzyskaliśmy jedną wartość własną, której odpowiada jeden wektor własny, którego części zostały przedstawione na rysunku 3b. Przy  $E = 0.4$  eV uzyskaliśmy dwa wektory, co zostało przedstawione na rysunku 3a. W pierwszym przypadku, możemy zauważyć podobne zachowanie, kształt krzywej dla części rzeczywistej i urojonej. Jednak przy  $E = 0.4$  eV obserwujemy dodatkowo sinusoidalny (określony na prawie całym okresie) kształt przy pierwszym stanie.

## 2 Podsumowanie

W ramach projektu wyznaczono relację dyspersji w jednorodnym kanale oraz obliczono propagujące mody dla wybranych energii, korzystając z rozwiązań uogólnionego problemu własnego. Przedstawiono zależność  $E_k$ , obliczono prędkości modów oraz zilustrowano ich profile. Pozostała część projektu, dotycząca pełnej implementacji układu 2D i obliczeń  $T/R$ , nie została zrealizowana ze względu na trudności implementacyjne i brak uzyskania poprawnych wyników.



(a)



(b)

**Rysunek 3:** Część rzeczywista i urojona funkcji własnych  $u_{-,n}$  dla (a)  $E = 0.2$  eV; (b)  $E = 0.4$  eV