

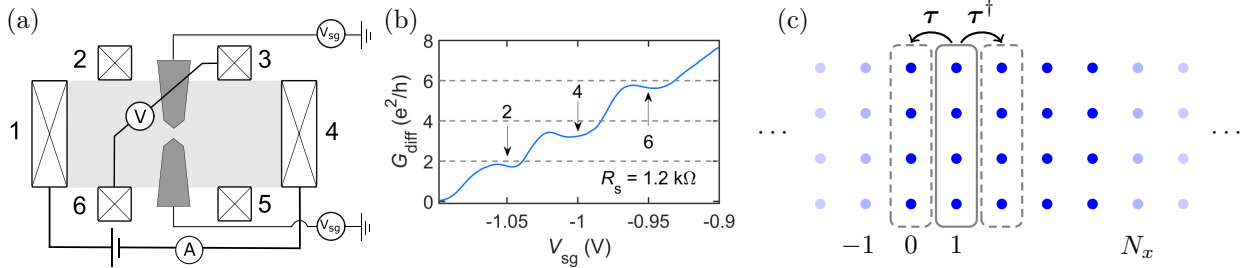
Transport elektronowy w układzie 2D: kwantowy kontakt punktowy

A. Mreńca-Kolasińska

3 kwietnia 2022; ostatnia aktualizacja 24 kwietnia 2024

1 Wstęp

Zajmiemy się transportu elektronowego w dwuwymiarowym gazie elektronowym (2DEG). Badany układ to tzw. kwantowy kontakt punktowy (ang. quantum point contact, QPC), który zawiera bramki elektrostacyjne, zubażające gaz elektronowy w ten sposób wytwarzając zwężenie [Rys. 1(a)]. Elektrony przepływające między źródłem a drenem są więc częściowo rozpraszane wstecznie, w konsekwencji czego przewodność jest niższa niż dla układu bez bramek i przyjmuje skwantowane wartości [Rys. 1(b)]. Jako przykład rozważymy eksperyment¹ z QPC wytworzonym elektrostacyjnie w nanostrukturze InSb. Problem rozwiążemy przy pomocy quantum transmitting boundary method (QTBM).



Rysunek 1: (a) Schemat układu eksperymentalnego, (b) wynik pomiaru [1] oraz (c) schemat siatki obliczeniowej.

1.1 Dyskretyzacja równania Schrödingera

Hamiltonian dla rozważanego przez nas problemu (wyrażony w jednostkach atomowych) ma postać

$$\hat{H}(t) = -\frac{1}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_{QPC}(x, y), \quad (1)$$

gdzie $V_{QPC}(x, y)$ to potencjał wytworzony przez elektrody.

Obliczenia wykonamy na dyskretnej siatce o $N_x \times N_y$ węzłów o współrzędnych $(x_i, y_j) = (x_{min} + i\Delta x, y_{min} + j\Delta x)$, $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$, równomiernie rozmieszczonych między (x_{min}, y_{min}) a (x_{max}, y_{max}) oraz $\Delta x = (x_{max} - x_{min})/(N_x + 1)$. Zapiszemy pochodną przestrzenną w postaci ilorazu różnicowego

$$\hat{H}\Psi(x_i) \approx -\frac{1}{2m^*} \frac{\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} + \psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j}}{\Delta x^2} + V_{i,j}\psi_{i,j}. \quad (2)$$

Oznaczając $\alpha = \frac{1}{2m^*\Delta x^2}$, a także przeprowadzając zamianę indeksów $(i, j) \rightarrow k = iN_y + j$ (patrz: wykład 1), hamiltonian można wyrazić w postaci macierzy blokowej

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \tau^\dagger & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \tau & \mathbf{H}_1 & \tau^\dagger & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \tau & \mathbf{H}_{N_x-2} & \tau^\dagger \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \tau & \mathbf{H}_{N_x-1} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

¹Z. Lei et al, *Gate-defined quantum point contact in an InSb two-dimensional electron gas* Phys. Rev. Res. 3,023042(2021)

gdzie

$$\mathbf{H}_i = \begin{pmatrix} 4\alpha + V_{i,0} & -\alpha & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha & 4\alpha + V_{i,1} & -\alpha & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\alpha & 4\alpha + V_{i,N_y-2} & -\alpha \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\alpha & 4\alpha + V_{i,N_y-1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} -\alpha & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\alpha & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\alpha \end{pmatrix}$$

są macierzami $N_y \times N_y$. Macierz \mathbf{H}_i opisuje pojedynczą „komórkę elementarną” kontaktu [oznaczone prostokątną ramką na Fig. 1(c)].

1.2 Relacja dyspersji w kanale wejściowym i wyjściowym

W celu obliczeń transportu zakładamy, że układ rozproszeniowy jest połączony do nieskończonych kanałów [Rys. 1(a)]. Oczywiście nie jesteśmy w stanie rozwiązać problemu dla nieskończonego układu (a więc nieskończonej macierzy), dlatego zastosujemy odpowiednie warunki brzegowe na wejściu i wyjściu z układu. W tym celu najpierw znajdziemy rozwiązanie w tak dużej odległości od obszaru rozproszeniowego, że wpływ QPC (lub innej „przeszkody”) jest zaniedbywalny i kanał można uznać za jednorodny i translacyjnie niezmienny. Otrzymane rozwiązanie zszyjemy z funkcją falową na siatce.

W celu znalezienia rozwiązań w jednorodnym kanale, zauważmy, że w macierzy hamiltonianu (3) można zaniedbać potencjał QPC. Otrzymujemy nieskończoną macierz

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & 0 & 0 \\ \cdots & \mathbf{H}_{i-1} & \boldsymbol{\tau}^\dagger & 0 \\ & \boldsymbol{\tau} & \mathbf{H}_i & \boldsymbol{\tau}^\dagger \\ & 0 & \boldsymbol{\tau} & \mathbf{H}_{i+1} & \cdots \\ & 0 & 0 & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

W jednorodnym kanale $\mathbf{H}_i = \mathbf{H}_{i\pm 1} \equiv \mathbf{H}$ i hamiltonian można zapisać

$$\boldsymbol{\tau}\psi_{i-1} + \mathbf{H}\psi_i + \boldsymbol{\tau}^\dagger\psi_{i+1} = E\psi_i. \quad (4)$$

ψ_i oznacza wektor w pojedynczej „warstwie”: $\psi_i = (\psi_{i,0}, \psi_{i,1}, \dots, \psi_{i,N_y-1})^T$. Ponieważ układ jest niezmienny w kierunku x , zgodnie z twierdzeniem Blocha, rozwiązanie można zapisać w postaci

$$\psi_{i\pm 1} = e^{\pm ik_x \Delta x} \psi_i.$$

Po wstawieniu tego rozwiązania do równania (4) otrzymamy równanie własne

$$e^{-ik_x \Delta x} \boldsymbol{\tau} \psi_i + \mathbf{H} \psi_i + e^{ik_x \Delta x} \boldsymbol{\tau}^\dagger \psi_i = E \psi_i,$$

czyli (macierz ma rozmiar $N_y \times N_y$)

$$\begin{pmatrix} 4\alpha - \alpha(e^{ik_x \Delta x} + e^{-ik_x \Delta x}) & -\alpha & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\alpha & 4\alpha - \alpha(e^{ik_x \Delta x} + e^{-ik_x \Delta x}) & -\alpha & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\alpha & 4\alpha - \alpha(e^{ik_x \Delta x} + e^{-ik_x \Delta x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{i,0} \\ \psi_{i,1} \\ \vdots \\ \psi_{i,N_y-1} \end{pmatrix} = E(k_x) \begin{pmatrix} \psi_{i,0} \\ \psi_{i,1} \\ \vdots \\ \psi_{i,N_y-1} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Korzystając z (5), można dla k_x w przedziale $(-\pi/\Delta x, \pi/\Delta x)$ (pierwsza strefa Brillouina) numerycznie obliczyć wartości własne $E(k_x)$. Zobaczymy, że będzie to N_y wartości własnych tworzących podpasma.

1.3 Obliczenia modów poprzecznych w kanale wejściowym i wyjściowym

Przy obliczeniach transportu zwykle znana jest energia padających elektronów E , a nie ich k_x . Dlatego w kolejnej części zadania, do obliczeń modów poprzecznych przyjmujemy inne podejście. Równanie własne (4) zapisujemy w postaci

$$-\boldsymbol{\tau}\psi_{i-1} + (E - \mathbf{H})\psi_i - \boldsymbol{\tau}^\dagger\psi_{i+1} = 0.$$

Oznaczając $\lambda = e^{ik_x \Delta x}$, $\psi_i \equiv \mathbf{u}$ oraz $\psi_{i+1} = \lambda \mathbf{u} \equiv \mathbf{w}$, można dojść do

$$\begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\boldsymbol{\tau} & E\mathbf{I} - \mathbf{H} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{w} \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\tau}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{w} \end{pmatrix} = 0, \quad (6)$$

co stanowi uogólniony problem własny o rozmiarze $2N_y$. Rozwiązaniami jest $2N_y$ wartości własnych $\lambda_{\pm,n} \equiv e^{ik_x^{\pm,n}\Delta x}$ i wektorów własnych $(\mathbf{u}_{\pm,n}, \lambda_{\pm,n}\mathbf{u}_{\pm,n})^T$.

$\mathbf{u}_{\pm,n}$ to tzw. mody poprzeczne. Rozwiązania spełniające $|\lambda_{\pm,n}| < 1$ i $|\lambda_{\pm,n}| > 1$ to tzw. mody zanikające, a $|\lambda_{\pm,n}| = 1$ mody propagujące się. Z tych rozwiązań znajdujemy mody propagujące się w lewo i w prawo. Można tego dokonać dla rozwiązań o $|\lambda_{\pm,n}| = 1$ wyliczając prędkość

$$v_{\pm,n} = -\frac{2\Delta x}{\hbar} \text{Im}[\lambda_{\pm,n} \mathbf{u}_{\pm,n}^\dagger \boldsymbol{\tau}^\dagger \mathbf{u}_{\pm,n}], \quad (7)$$

gdzie $v_{+,n} > 0$ dla modów propagujących się w prawo i $v_{-,n} < 0$ dla modów propagujących się w lewo. **Uwaga:** w tym problemie wzory można znacząco uprościć zauważając, że w naszym przypadku, bez pola magnetycznego i przy zerowym potencjale w obu kontaktach, dla modów propagujących się w lewo i w prawo: $k_x^{+,n} = -k_x^{-,n}$, a zatem $\lambda_{+,n} = e^{ik_x^{+,n}\Delta x} = e^{-ik_x^{-,n}\Delta x} = (\lambda_{-,n})^{-1}$, a także można przyjąć $\mathbf{u}_{+,n} \equiv \mathbf{u}_{-,n} \equiv \mathbf{u}_n$ oraz ortogonalność: $\mathbf{u}_m^\dagger \mathbf{u}_n = \delta_{m,n}$. Mając oba rodzaje modów propagujących się, możemy przejść do rozwiązania problemu rozproszeniowego. Poniżej zakładamy oznaczenia $k_x^{+,n} = k_x^n$, $-k_x^{-,n} = -k_x^n$.

1.4 Obliczenia transmisji

Mając mody poprzeczne, konstruujemy warunki brzegowe oparte na ciągłości funkcji falowej i jej pochodnej, które zastosujemy w hamiltonianie (3). Załóżmy, że dla energii E w kanale jest N_m modów propagujących się. Funkcja falowa w kanale wejściowym (lewym) ma postać kombinacji modów wchodzących $\mathbf{u}_{+,n}$ i rozproszonych wstecz $\mathbf{u}_{-,n}$ ² (przy czym w naszym zadaniu $\mathbf{u}_{+,n} \equiv \mathbf{u}_{-,n} \equiv \mathbf{u}_n$)

$$\psi(x, y) = \sum_{n=0}^{N_m-1} [c_{in,n} e^{ik_x^n x} \mathbf{u}_n + c_{out,n} e^{-ik_x^n x} \mathbf{u}_n]. \quad (8)$$

W komórce elementarnej leadu dla $x = 0$:

$$\psi_0 = \sum_{n=0}^{N_m-1} [c_{in,n} \mathbf{u}_n + c_{out,n} \mathbf{u}_n], \quad (9)$$

a w wyjściowym już tylko modów propagujących się w prawo

$$\psi_{N_x-1} = \sum_{n=0}^{N_m-1} d_{out,n} \mathbf{u}_n, \quad (10)$$

gdzie brak jest $e^{-ik_x(N_x-1)\Delta x}$, ponieważ jest to faza, którą będzie zawierał współczynnik $d_{out,n}$. $c_{in,n}$ określają amplitudę modu wchodzącego (będziemy osobno obliczać transmisję każdego modu m : $c_{in,n} = \delta_{nm}$ i na końcu je zsumujemy). Po wyprowadzeniach, przedstawionych w Dodatku A, otrzymujemy równanie macierzowe (przy założeniu, że mody są ortonormalne, $\mathbf{u}_m^\dagger \mathbf{u}_n = \delta_{m,n}$)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 - E + \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\alpha} & \boldsymbol{\tau}^\dagger & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \boldsymbol{\tau} & \mathbf{H}_1 - E & \boldsymbol{\tau}^\dagger & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \boldsymbol{\tau} & \mathbf{H}_{N_x-2} - E & \boldsymbol{\tau}^\dagger \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \boldsymbol{\tau} & \mathbf{H}_{N_x-1} - E + \boldsymbol{\tau}^\dagger - \boldsymbol{\tau}^\dagger \boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{N_x-2} \\ \psi_{N_x-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha \sum_{n=0}^{N_m-1} c_{in,n} \mathbf{u}_n (\Delta_{+,n} - \Delta_{-,n}) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

W porównaniu do oryginalnej macierzy (3), na diagonalu odjęto E , zmodyfikowano pierwszy i ostatni rząd, a po prawej stronie w pierwszym rzędzie pojawiają się wyrazy opisujące źródło elektronów. W równaniu (11)

$$\alpha_{\mu\nu} = \sum_{n=0}^{N_m-1} (u_n^\nu)^* u_n^\mu (1 - 1/\lambda_{-,n}), \quad \beta_{\mu\nu} = \sum_{n=0}^{N_m-1} (u_n^\nu)^* u_n^\mu (1 - \lambda_{+,n}),$$

$$\Delta_{+,n} = (1 - 1/\lambda_{+,n}), \quad \Delta_{-,n} = (1 - 1/\lambda_{-,n})$$

Powyżej, indeksy μ, ν użyto dla odróżnienia od n . n jest "numerem" modu poprzecznego; \mathbf{u}_n jest wektorem o N_y komponentach, a μ, ν indeksami tych komponentów. Po utworzeniu macierzy i wektora wyrazów wolnych, rozwiązujemy otrzymany układ równań przy pomocy wybranej biblioteki numerycznej. Rozwiązaniem jest funkcja

²Standardowym zabiegiem jest uwzględnienie również modów zanikających, co poprawia dokładność obliczeń, jednak dla uproszczenia pomijamy je w tym zadaniu.

falowa $(\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{N_x-1})^T$ i korzystając z niej wyliczamy współczynniki:

$$c_{out,m} = \sum_{\nu=0}^{N_y-1} ((u_m^\nu)^* \psi_0^\nu - c_{in,m}), \quad (12)$$

$$d_{out,m} = \sum_{\nu=0}^{N_y-1} (u_m^\nu)^* \psi_{N_x-1}^\nu. \quad (13)$$

stąd prawdopodobieństwo transmisji T_n modu n i jego odbicia R_n :

$$T_n = \sum_{n=0}^{N_m-1} \left| \frac{d_{out,m}}{c_{in,n}} \right|^2 \left| \frac{v_{+,m}}{v_{+,n}} \right|, \quad R_n = \sum_{n=0}^{N_m-1} \left| \frac{c_{out,m}}{c_{in,n}} \right|^2 \left| \frac{v_{-,m}}{v_{+,n}} \right| \quad (14)$$

Całość sumujemy po modach wejściowych aby uzyskać całkowitą transmisję/odbicie:

$$T = \sum_{n=0}^{N_m-1} T_n, \quad G = \frac{2e^2}{h} T, \quad R = \sum_{n=0}^{N_m-1} R_n \quad (15)$$

2 Zadania do wykonania

Obliczymy przewodność QPC, masę efektywną dla InSb: $m^* = 0.017$. Zakładamy, że bramki wytwarzają profil energii potencjalnej opisywany funkcją modelową

$$V_{QPC}(x, y) = -0.035 V_{gates} \left[\exp \left(- \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y - y_{min})^2}{\sigma_y^2} \right)^2 \right) + \exp \left(- \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y - y_{max})^2}{\sigma_y^2} \right)^2 \right) \right],$$

gdzie V_{gates} to napięcie przyłożone do bramek ($V_{QPC}(x, y)$ jest wyrażone w eV; pamiętamy o przeliczeniu na jednostki atomowe: $V_{QPC}(x, y)/Ha$), $\sigma_x = 300$ nm, $\sigma_y = 300$ nm. Na lewym i prawym końcu siatki potencjał powinien mieć wartość (prawie) 0, dlatego przy obliczeniach relacji dyspersji i modów nie musimy uwzględniać wartości $V_{QPC}(x, y)$.

1. Na początek obliczymy relację dyspersji w jednorodnym kanale (ustawiamy $V_{QPC}(x, y) = 0$) dla $N_y = 19$ i $y_{max} = -y_{min} = 10$ nm, $\Delta x = (y_{max} - y_{min})/(N_y + 1) = 1$ nm. Proszę zaprogramować wyliczanie macierzy $N_y \times N_y$ (5) i obliczyć $E(k_x)$ dla $k_x \in (\frac{\pi}{\Delta x}, \frac{\pi}{\Delta x})$ (proszę dobrać krok dk tak, by wykres był gładki), dla każdego k_x rozwiązując problem własny przy pomocy wybranej biblioteki numerycznej. Proszę stworzyć wykres $E(k_x)$.
2. Obliczymy k_x i mody dla energii $E = 0.2$ eV i $E = 0.4$ eV. Proszę zaprogramować rozwiązanie uogólnionego problemu własnego (6). Uwaga, wybierając funkcję do rozwiązania numerycznego **pamiętajmy, że macierze nie są hermitowskie**. Proszę z uzyskanych modów wybrać mody propagujące się korzystając z instrukcji we wstępie, a także ich prędkość przy pomocy (7). Dla uzyskanych modów propagujących się w lewo i w prawo wyliczyć $k_x^{\pm, n} = \text{Im} \ln(\lambda_{\pm, n})$ i narysować punkty $(k_x^{\pm, n}, E)$ na wykresie relacji dyspersji wyliczonej w zadaniu 1. **Uwaga:** proszę wyliczyć tylko $\mathbf{u}_{+, n} \equiv \mathbf{u}_n$ i przypisać $\mathbf{u}_{-, n} := \mathbf{u}_n$, ponieważ numerycznie wyliczone $\mathbf{u}_{-, n}$ różnią się od $\mathbf{u}_{+, n}$ fazą i nie byłby spełniony warunek ortogonalności. Proszę **unormować** funkcje falowe \mathbf{u}_n : dla zgodności ze wzorami QTBM tak, że $\mathbf{u}_m^\dagger \mathbf{u}_n = \delta_{m, n}$. Proszę także narysować część rzeczywistą i urojoną modów \mathbf{u}_n dla obu energii. Dla $E = 0.2$ eV powinien być to tylko 1 mod, a dla $E = 0.4$ eV: 2 mody.
3. **(Pozostała część 30 pkt)** Proszę stworzyć siatkę N_x na N_y węzłów i zaprogramować wypełnianie macierzy $(N_x N_y \times N_x N_y)$ oraz wektora wyrazów wolnych (11). Na razie przyjmujemy $N_x = 9$ i $N_y = 19$. Po wypełnieniu macierzy rozwiązujemy numerycznie uzyskany układ równań.
Uwaga w przypadku błędów: W celu przetestowania, czy wypełnianie macierzy jest poprawne, można wykonać kilka testów (z $V(x, y) \equiv 0$ na całej siatce)

- Początkowe rzędy macierzy wypełniamy jak w (11), a w ostatnich N_y rzędach ustawiamy na diagonalu 1, a w pozostałych komórkach 0. W wektorze wyrazów wolnych wstawiamy 0 wszędzie poza ostatnimi N_y elementami; te wypełniamy wartościami u_n . Można narysować mapę kwadratu modułu funkcji falowej (zsumowanej po modach): $|\psi(x, y)|^2 = \sum_{n=0}^{N_m-1} |\psi_n(x, y)|^2$. Rozwiązaniem powinna być funkcja falowa o kwadracie modułu niezależnym od x : $|\psi(x, y)|^2 = \sum_{n=0}^{N_m-1} |u_n(y)|^2$.

- Analogicznie postępujemy na przeciwnym końcu siatki.
 - Testy T i R : wypełnić macierz i wektor według (11) i wstawić niezerową energię potencjalną $V(x, y)$ w środku układu. Poprawny wynik dla $E = 0.2$ eV to $T + R = 1$, a $E = 0.4$ eV $T + R = 2$.
4. Proszę ustawić $N_x = 49, N_y = 34, y_{max} = -y_{ymin} = 350$ nm, $x_{max} = -x_{ymin} = 500$ nm, co odpowiada $\Delta x = 20$ nm. Narysować mapę $V_{i,j}$ dla $V_{gates} = -1$ V, a następnie dla $V_{gates} \in [-1.3, -0.7]$ V przeprowadzić obliczenia T i R (początkowy krok np. 0.05 V, do raportu mniejszy) dla energii $E = 0.015$ eV. Kolejno obliczać transmisję każdego modu m : $c_{in,n} = \delta_{nm}$, wypełniając wektor wyrazów wolnych na nowo (czyli we wzorze (11) $-\alpha \sum_{n=0}^{N_m-1} c_{in,n} \mathbf{u}_n(\Delta_{+,n} - \Delta_{-,n}) = -\alpha \mathbf{u}_m(\Delta_{+,m} - \Delta_{-,m})$), i na końcu je zsumować [wzór (15)]. Na wykresie narysować $T(V_{gates}), R(V_{gates}), T(V_{gates}) + R(V_{gates})$. Na wykresie T powinny być widoczne plateaus o przewodności $T = 1, 2$, czyli $G = G_0, 2G_0, G_0 = 2e^2/h$.
5. Mapy gęstości elektronowej: proszę ustawić V_{gates} tak, by przewodność wynosiła około $G = 0, G_0, 2G_0$ i narysować dla nich mapy kwadratu modułu funkcji falowej, zsumowanej po modach wchodzących $\sum_{n=0}^{N_m-1} |\psi_n(x, y)|^2$.

A Wyprowadzenie równań QTBM

Pochodna na lewym końcu pudła w przybliżeniu ma postać

$$\frac{1}{\Delta x}(\psi_0 - \psi_{-1}) = \frac{1}{\Delta x} \sum_{n=0}^{N_m-1} [c_{in,n}(1 - 1/\lambda_{+,n}) + c_{out,n}(1 - 1/\lambda_{-,n})] \mathbf{u}_n.$$

Stąd wyliczamy ψ_{-1} (oznaczamy też $(1 - 1/\lambda_{\pm,n}) = \Delta_{\pm,n}$)

$$\psi_{-1} = \psi_0 - \sum_{n=0}^{N_m-1} [c_{in,n}\Delta_{+,n} + c_{out,n}\Delta_{-,n}] \mathbf{u}_n, \quad (16)$$

które możemy wstawić do równania opisującego lewy koniec (nieskończonej) siatki, czyli (4) z $i = 0$:

$$\tau\psi_{-1} + \mathbf{H}\psi_0 + \tau^\dagger\psi_1 = E\psi_0. \quad (17)$$

Nieznane jest jeszcze \mathbf{c}_{out} , ale można wyliczyć je dokonując iloczynu skalarnego (9) z \mathbf{u}_m^\dagger

$$\sum_{\nu=0}^{N_y-1} (u_m^\nu)^* \psi_0^\nu = c_{out,m} + c_{in,m}. \quad (18)$$

Stąd

$$c_{out,n} = \sum_{\nu=0}^{N_y-1} (u_n^\nu)^* \psi_0^\nu - c_{in,n}. \quad (19)$$

Po wstawieniu (19) i (16) do (17), otrzymamy równanie

$$((\mathbf{H}_0 - \mathbf{E})\psi_0)^\mu + (\tau\psi_0)^\mu + (\tau^\dagger\psi_1)^\mu - \sum_{\nu=0}^{N_y-1} \psi_0^\nu \overbrace{\sum_{n=0}^{N_m-1} (u_{-,n}^\nu)^* (\tau\mathbf{u}_{-,n})^\mu \Delta_{-,n}}^{\alpha_{\mu\nu}} = \sum_{n=0}^{N_m-1} c_{in,n} (\tau\mathbf{u}_n)^\mu (\Delta_{+,n} - \Delta_{-,n}),$$

co dla τ diagonalnego ma postać

$$((\mathbf{H}_0 - \mathbf{E})\psi_0)^\mu + (\tau\psi_0)^\mu + (\tau^\dagger\psi_1)^\mu - \tau \sum_{\nu=0}^{N_y-1} \psi_0^\nu \overbrace{\sum_{n=0}^{N_m-1} (u_{-,n}^\nu)^* u_{-,n}^\mu \Delta_{-,n}}^{\alpha_{\mu\nu}} = -\alpha \sum_{n=0}^{N_m-1} c_{in,n} u_n^\mu (\Delta_{+,n} - \Delta_{-,n}).$$

Podobnie uwzględniamy ciągłość fukcji falowej i pochodnej na wyjściu. Pochodna ma postać

$$\frac{1}{\Delta x}(\psi_{N_x} - \psi_{N_x-1}) = \frac{1}{\Delta x} \sum_{n=0}^{N_m-1} d_{out,n} \mathbf{u}_n (\lambda_{+,n} - 1).$$

Stąd

$$\psi_{N_x} = \psi_{N_x-1} + \sum_{n=0}^{N_m-1} d_{out,n} \mathbf{u}_n (\lambda_{+,n} - 1).$$

Z mnożenia (10) skalarnie przez \mathbf{u}_n wyliczamy \mathbf{d}_{out} i po wstawieniu wszystkiego do równania Schödingera, otrzymujemy

$$((\mathbf{H}_0 - \mathbf{E})\psi_{N_x-1})^\mu + (\tau^\dagger\psi_{N_x-1})^\mu + (\tau\psi_{N_x-2})^\mu + \tau^\dagger \sum_{\nu=0}^{N_y-1} \psi_{N_x-1}^\nu \overbrace{\sum_{n=0}^{N_m-1} (u_n^\nu)^* u_n^\mu (\lambda_{+,n} - 1)}^{-\beta_{\mu\nu}} = 0,$$

Po uwzględnieniu warunków brzegowych, pełna macierz ma postać (11).