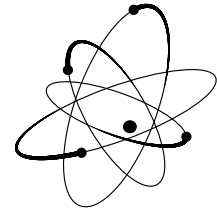




Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

Wydział Fizyki i Informatyki
Stosowanej



Praca magisterska

Robert Kalina

kierunek studiów: fizyka techniczna

specjalność: fizyka komputerowa

Badanie relacji mikrodwralności dla pakietu falowego opisywanego nieliniowym równaniem Schrödingera

Opiekun: dr hab. inż. Bartłomiej Szafran

Kraków, kwiecień 2008

Oświadczam, świadomy odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę dyplomową wykonałem osobiście i samodzielnie i nie korzystałem ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

Kraków, 24 kwiecień 2008

**Tematyka pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej Roberta Kaliny,
studenta V roku studiów kierunku fizyka techniczna, specjalności fizyka
komputerowa**

Temat pracy magisterskiej: **Badanie relacji mikroodwracalności dla pakietu
falowego opisywanego nieliniowym równaniem Schrödingera**

Opiekun pracy: dr hab. inż. Bartłomiej Szafran
Recenzenci pracy:
Miejsce praktyki dyplomowej: WFiIS AGH, Kraków

Program pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej

1. Omówienie realizacji pracy magisterskiej z opiekunem.
2. Zebranie i opracowanie literatury dotyczącej tematu pracy.
3. Praktyka dyplomowa:
 - zapoznanie się z ideą efektu induktonowego i interferencją Aharonova-Bohma w pierścieniach kwantowych,
 - przygotowanie oprogramowania,
 - dyskusja i analiza wyników,
 - sporządzenie sprawozdania z praktyki.
4. Kontynuacja obliczeń związanych z tematem pracy magisterskiej.
5. Zebranie i opracowanie wyników obliczeń.
6. Analiza wyników obliczeń numerycznych, ich omówienie i zatwierdzenie przez opiekuna.
7. Opracowanie redakcyjne pracy.

.....
(podpis kierownika zakładu)

.....
(podpis opiekuna)

Merytoryczna ocena pracy przez opiekuna:

Końcowa ocena pracy przez opiekuna:

Data:

Podpis:

Merytoryczna ocena pracy przez recenzenta:

Końcowa ocena pracy przez recenzenta:

Data:

Podpis:

Skala ocen: 6.0 – celująca, 5.0 – bardzo dobra, 4.5 – ponad dobra, 4.0 – dobra, 3.5 – ponad dostateczny, 3.0 – dostateczna, 2.0 – niedostateczna

*Serdecznie dziękuję Panu dr Bartłomiejowi Szafranowi
za okazaną życzliwość, zrozumienie, opiekę nad
pracą, wiele ciekawych pomysłów i cennych
uwag oraz pomoc, dzięki której praca
ta przybrała ostateczną formę.*

Spis treści

1	Wstęp	7
1.1	Cel pracy	7
1.2	Indukton	8
1.3	Wygięte druty kwantowe	9
1.4	Odchylenie trajektorii przez siłę Lorentza	11
1.5	O potrzebie rozwiązywania zaleźnego od czasu równania Schrödingera	12
2	Struktura modelowa i rozwiązanie problemu stacjonarnego	15
2.1	Rozważana struktura	15
2.2	Potencjał indukowany	16
2.3	Rozwiązanie problemu stacjonarnego w bazie wielocentrowej	17
3	Transport pakietu przez półpierzść kwantowy pod nieobecność metalu	25
3.1	Wprowadzenie	25
3.2	Procedura rozwiązania zaleźnego od czasu równania Schrödingera w bazie wielocentrowej	25
3.3	Test efektywności bazy wielocentrowej	33
3.4	Transport pakietu przez półpierzść	34
4	Transport induktonu przez półpierzść kwantowy w obecności pola magnetycznego	39
4.1	Wprowadzenie	39
4.2	Sposób prowadzenia obliczeń	39
4.3	Otrzymane wyniki	41
4.4	Wpływ efektu induktonowego na interferencję Aharonova-Bohma	48
5	Wnioski i podsumowanie	53

Rozdział 1

Wstęp

1.1 Cel pracy

Celem pracy jest zbadanie prawdopodobieństwa transmisji solitonu elektronowego (tzw. induktonu [1]) przez wygięty przewód półprzewodnikowy w zewnętrznym polu magnetycznym. W szczególności chcemy sprawdzić czy prawdopodobieństwo transmisji $T(B)$ jest parzystą funkcją pola magnetycznego. Innymi słowy chcemy sprawdzić czy relacja mikroodwracalności (tzw. relacja Onsagera) $T(B) = T(-B)$ jest spełniona dla induktonu.

Dla układów opisywanych liniowym równaniem Schrödingera, relacje mikroodwracalności są zawsze spełnione [2], nawet jeśli układ jest asymetryczny. Chociaż stosunkowo łatwe do udowodnienia [2], relacje mikroodwracalności trudno uznać za intuicyjnie oczywiste ze względu na przeciwny zwrot siły Lorentza działającej na poruszający się pakiet falowy przy przeciwnych zwrotach pola \mathbf{B} . Indukton [1] jest opisywany przez *nieliniowe* równanie Schrödingera. Relacje mikroodwracalności nie muszą więc być spełnione dla induktonu. Wiadomo, że relacje mikroodwracalności łamane są w zakresie transportu nieliniowego [3], w silnych polach elektrycznych. Nieliniowe charakterystyki prądowo napięciowe okazują się [3] niesymetryczne względem kierunku pola z powodu zależności potencjału ekranowania ośrodka od zwrotu pola magnetycznego. W naszym problemie rolę ośrodka odgrywać będzie ładunek wyindukowany przez soliton elektronowy na powierzchni metalu przykrywającego przewód półprzewodnikowy, w którym soliton się porusza. Potencjał indukowany śledzi ruch pakietu elektronowego, a więc zmienia się w czasie (t) i to w sposób zależny od zwrotu pola magnetycznego. Dla liniowego równania Schrödingera tylko kształt pakietu (a nie potencjał zewnętrzny) zależy od zwrotu pola, co jak pokażemy nie prowadzi do złamania relacji Onsagera.

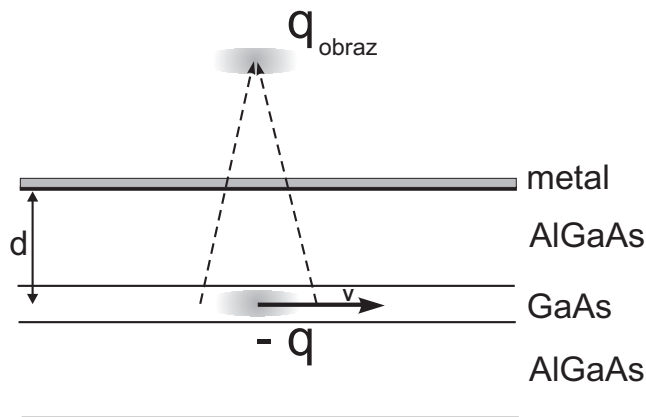
Indukton nie został dotychczas wykryty eksperymentalnie. Jeśli znajdziemy złamanie relacji mikroodwracalności dla induktonu wskażemy sposób jego eksperymentalnej detekcji.

1.2 Indukton

Elektron znajdujący się w półprzewodnikowej studni kwantowej umieszczonej w pobliżu nieskończenie rozległej metalowej płyty wywołuje redystrubucję ładunku na powierzchni metalu (patrz rys. 1.1), co powoduje pojawienie się potencjału indukowanego działającego na elektron, który w metodzie obrazów ma kształt:

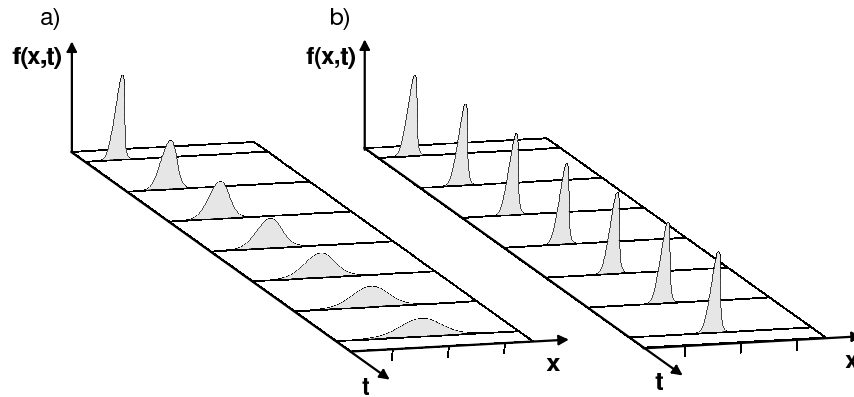
$$\varphi_{ind}(x, y) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{ind}(x', y')}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + 4d^2}} dx' dy', \quad (1.1)$$

gdzie ρ_{ind} jest potencjałem obrazu, a d odległością między studnią a metalem (zobacz rys. 1.1). Potencjał indukowany zawiera składową uwięzienia bocznego elektronu w studni. W rezultacie elektron ulega samopułapkowaniu w wyindukowanym przez sie-



Rys. 1.1: Pakiet elektronowy poruszający się z prędkością v w studni kwantowej GaAs oraz działający na niego potencjał ładunku wyindukowanego na powierzchni metalu. Potencjał ten najłatwiej wyliczyć metodą obrazów.

bie potencjale tworząc pakiet falowy o skończonych rozmiarach. Pakiet taki może się poruszać w kierunku równoległym do powierzchni przewodnika wykazując własności solitonu [1]. Przez soliton rozumiany jest pakiet falowy (patrz rys. 1.2), którego kształt w czasie ruchu pozostaje stabilny mimo dyspersji ośrodka (zależności prędkości fazowej od wektora falowego). Jeśli dyspersja nie jest niczym równoważona pakiet rozmywa

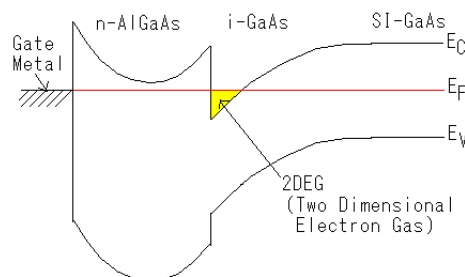


Rys. 1.2: Ilustracja przedstawiająca w kolejnych chwilach czasowych zwykłą paczkę falową (a) i soliton (b).

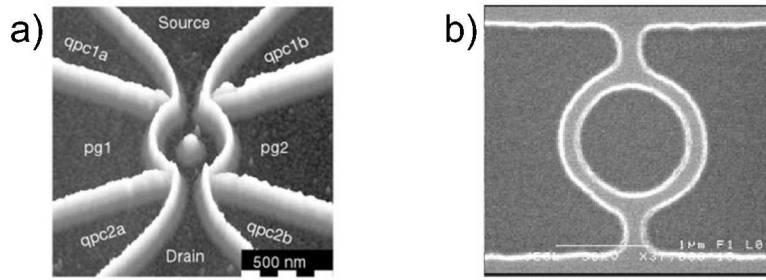
się. Tak jest na przykład w przypadku ewolucji pakietu gaussowskiego opisywanego liniowym równaniem Schrödingera. Pakiet taki konstruowany jest jako superpozycja fal płaskich $\exp(ikx)$, z których każda porusza się z inną prędkością $v(k) = \hbar k/m$, stąd rozmywanie się pakietu. Stabilizacja pakietu następuje dzięki efektom nieliniowym, tzn. dzięki temu, że paczka falowa z otoczeniem oddziałuje i zmienia jego własności. Ponieważ potencjał kształtujący soliton pochodzi od ładunku indukowanego na powierzchni przewodnika, układ taki nazywany jest induktonem [1].

1.3 Wygięte druty kwantowe

Indukton w studni kwantowej ma pełną swobodę ruchu w dwóch wymiarach [1]. Nas natomiast interesuje wygięty przewód o nanometrowych rozmiarach, czyli wygięty drut kwantowy.

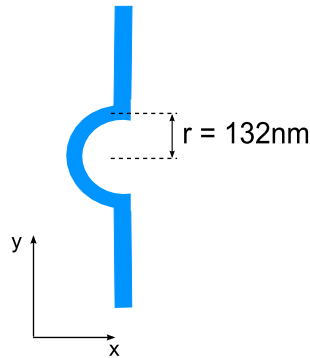


Rys. 1.3: Przykład profilu krawędzi pasm energetycznych struktury heterozłączonej zawierającej dwuwymiarowy gaz elektronowy [4].



Rys. 1.4: Półprzewodnikowe otwarte pierścienie kwantowe: (a) uzyskane metodą oksydacji powierzchni nad 2DEG [5] oraz (b) struktura trawiona $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ [6].

Druty kwantowe można wytwarzać na bazie heterostruktury GaAs oraz stopu Al-GaAs, charakteryzującą się doskonałą jakością heterozłącza, wynikającą z tej samej stałej sieci w obu materiałach. W heterostrukturze z domieszkowaną donorami barierą n-AlGaAs tworzy się *dwuwymiarowy gaz elektronowy* (ang. Two Dimensional Electron Gas - 2DEG). Część elektronów przechodzi wtedy z poziomów donorowych do GaAs, który posiada niżej położone niż AlGaAs dno pasma przewodnictwa (patrz rys. 1.3). Elektrony w GaAs będą przyciągane do heterozłącza przez dodatni ładunek zjonizowanych donorów. Ich ruch w kierunku prostopadłym do warstw jest ograniczony, a w pozostałych dwóch wymiarach swobodny, dzięki czemu 2DEG może przewodzić prąd tylko wzdłuż warstw.



Rys. 1.5: Schemat drutu kwantowego rozważanego w niniejszej pracy. Przez r oznaczono promień półpierścienia.

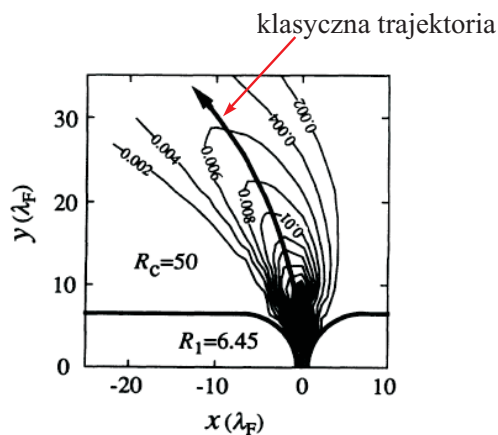
Poprzez oksydację powierzchni nad 2DEG lub trawienie można uzyskać wygięte druty kwantowe lub np. pierścienie. Mikrofotografia 1.4a przedstawia pierścień kwantowy o średnicy 132nm wykonany pierwszą z wymienionych technologii. Na tym zdjęciu

linie tlenku są jasne a obszary ciemne to warstwa przewodząca. Elektrony płynące od źródła do drenu przechodzą przez kwantowe kontakty punktowe uformowane przez tlenek. Na zdjęciu 1.4b pokazany jest pierścień kwantowy uzyskany przez wytrawienie heterostruktury $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Promień tego pierścienia wynosi $0.65\mu m$.

W naszych rachunkach rozważymy wygięty w kształcie półpierścienia drut (rys. 1.5) o promieniu wygięcia, który odpowiada strukturze z rysunku 1.4a.

1.4 Odchylenie trajektorii przez siłę Lorentza

Teoria Landauera, która z powodzeniem opisuje transport w mezoskopowych układach metalowych [2] traktuje przewody jako ściśle jednowymiarowe i całkowicie zaniedbuje efekt odchylenia torów elektronów przez zewnętrzne pole magnetyczne. Zaniedbanie siły Lorentza jest usprawiedliwione, gdy promień orbity cyklotronowej jest znacznie większy od szerokości przewodu. Siły magnetyczne w półprzewodniku odchylają tory



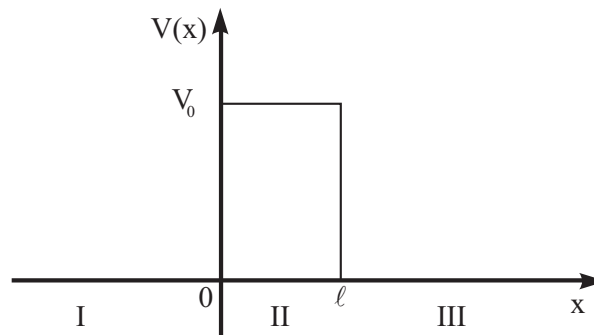
Rys. 1.6: Wyniki symulacji komputerowej wstrzyknięcia elektronu przez półprzewodnikowy kwantowy kontakt punktowy w obecności jednorodnego pola magnetycznego [7]. Czarną strzałką zaznaczono orbitę cyklotronową.

cząstek wielokrotnie silniej niż w metalach. Przykładowo dla GaAs masa efektywna elektronu $m^* = 0.067m_0$, prędkość Fermiego $V_F(2DEG) = 10^5 m/s$ a stąd promień orbity cyklotronowej $R_C(GaAs) = m^*V_F/eB \approx 50nmT/B$ (dla $B = 0.288T$ promień orbity cyklotronowej elektronu w GaAs jest równy promieniowi półpierścienia przez nas rozpatrywanego). Ten sam rachunek dla Au, dla którego $m^* \approx m_0$, $V_F = 10^6 m/s$ daje wynik $R_C(Au) \approx 50\mu mT/B$. Dla połączeń o rozmiarze rzędu 50nm i pól magnetycznych mniejszych niż 1T zaniedbanie siły Lorentza jest usprawiedliwione dla metali, ale dla półprzewodników już nie.

Ponieważ w półprzewodniku elektrony są dużo bardziej niż w metalu podatne na odchylenia, uwzględnienie siły Lorentza w modelu numerycznym odgrywa ważną rolę. Jeden z pierwszych takich modeli opisywał wstrzyknięcie elektronu przez półprzewodnikowy kwantowy kontakt punktowy w obecności jednorodnego pola magnetycznego [7]. Rysunek 1.6 pokazuje wynik tej symulacji. Widać na nim, że elektronowy pakiet falowy propagowany jest wzdłuż klasycznej trajektorii (zaznaczonej na rysunku 1.6 czarną strzałką), którą w tym przypadku jest orbita cyklotronowa.

1.5 O potrzebie rozwiązywania zależnego od czasu równania Schrödingera

Podstawowym parametrem opisującym transport jest współczynnik transmisji T . Jest to prawdopodobieństwo tego, że cząstka przejdzie przez obiekt, na którym jest rozpraszana, np. przez barierę potencjału, czy tak jak w naszym przypadku przez półprześcięć. Jeśli problem jest liniowy to współczynnik transmisji T możemy wyznaczyć na dwa sposoby. Pierwszy z nich polega na rozwiązaniu niezależnego od czasu równania Schrödingera. Jako przykład rozwiązania problemu tym sposobem można wziąć



problem tunelowania cząstki przez barierę potencjału na przykład daną równaniem:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0 & (\text{obszar I}) \\ V_0 & \text{dla } 0 \leq x \leq l & (\text{obszar II}) \\ 0 & \text{dla } x > l & (\text{obszar III}) \end{cases} \quad (1.2)$$

Zakładamy, że cząstka pada na barierę z lewej strony. Wtedy w obszarze I występuje zarówno fala padająca jak i odbita a w obszarze III tylko fala przechodząca przez

barierę potencjału:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{w obszarze } I), \\ \psi(x) &= Fe^{ikx} \quad (\text{w obszarze } III).\end{aligned}\tag{1.3}$$

W powyższych wzorach A , B i F oznaczają odpowiednio amplitudę fali padającej, odbitej i przechodzącej przez barierę a liczba falowa k określona jest wzorem $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

Po rozwiązaniu równania własnego hamiltonianu, prawdopodobieństwo transmisji T cząstki przez barierę potencjału można wyrazić wzorem:

$$T(k) = \frac{|F|^2}{|A|^2}.\tag{1.4}$$

Alternatywnym sposobem wyznaczania współczynnika T jest rozwiązanie zależnego od czasu równania Schrödingera. W tym celu jako warunek początkowy formujemy pakiet (np. gaussowski), poprzez superpozycję stanów własnych energii (fal płaskich):

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) \cdot e^{ikx} dk.\tag{1.5}$$

Pakietowi (1.5) nadajemy średni pęd $\langle \hbar k \rangle$ mnożąc go przez funkcję postaci $\exp(ikx)$. Następnie rozwiązujemy równanie zależne od czasu aż pakiet całkowicie opuści region rozpraszania. Aby znaleźć zależność prawdopodobieństwa transmisji od k rozkładamy część pakietu, która przetransmitowała przez potencjał rozpraszający. Sprowadza się to do transformaty Fouriera części pakietu, która przetransmitowała i wtedy:

$$T(k) = |c_T(k)/c(k)|^2,\tag{1.6}$$

gdzie

$$c_T(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \psi(x, t \rightarrow \infty) \cdot e^{-ikx} dx.\tag{1.7}$$

Tak więc, gdy problem opisywany jest równaniem liniowym można go rozwiązać albo poprzez równanie Schrödingera niezależne od czasu albo zależne od czasu – zależnie od uznania. Przechodzenie między obrazami zależnym i niezależnym od czasu umożliwia liniowość równania Schrödingera i zasada superpozycji, która np. w problemie 1D sprowadza się do transformaty Fouriera.

Ponieważ induktor jest obiektem nieliniowym nie możemy skorzystać z zasady su-

perpozycji. Potencjał indukowany zależy od czasu ponieważ sam pakiet powodujący jego powstanie od czasu zależy. Dlatego skazani jesteśmy na rozwiązywanie zależnego od czasu (i nieliniowego) równania Schrödingera.

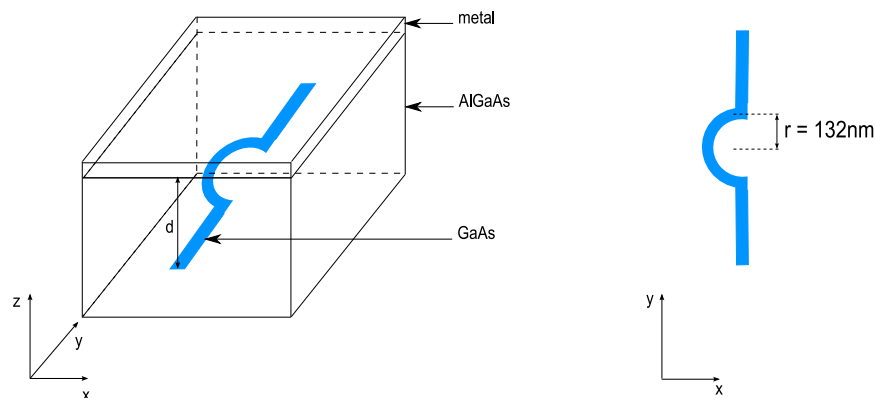
Numeryczne rozwiązanie równania zależnego od czasu dla problemu jednowymiarowego jest stosunkowo łatwe i można je uzyskać dowolną metodą np. metodą różnic skończonych. Nasz problem jest dwuwymiarowy, a to oznacza większą ilość punktów siatki potrzebnych do prowadzenia obliczeń tą metodą. Poza tym bezpośrednia dyskretyzacja operatora energii kinetycznej w obecności pola produkuje operator różnicowy, który łamie niezmienniczość cechowania (pojawia się zależność wyników od przyjętego cechowania). Z tych powodów do rozwiązania naszego problemu wykorzystujemy bazę funkcji zadanych analitycznie, a współczynniki rozwinięcia uzyskujemy wg metody Galerkinia. Zobaczymy, że w jednym wymiarze baza gaussowska pozwala na kilkukrotną redukcję liczby równań rozwiązywanych w jednym kroku czasowym. Pozwala to oszczędzić pamięć alokowaną przez program. Przyjmijmy bazę, w której niezmienniczość cechowania jest wpisana do postaci analitycznej funkcji. Do rozwiązania wprowadzimy odpowiedniki metody Askara-Cakmaka [8] i Cranka-Nicolsona [9], które są dobrze znane dla techniki różnic skończonych.

Rozdział 2

Struktura modelowa i rozwiązanie problemu stacjonarnego

2.1 Rozważana struktura

Rozpatrujemy wygięty drut kwantowy z GaAs (w kształcie półkola o promieniu 132nm), nad którym znajduje się nieskończenie rozległa płaszczyzna metalowa. Drut oddzielony jest od metalu izolatorem lub barierą tunelową z AlGaAs o wyżej położonym dnie



Rys. 2.1: Schemat struktury wraz z zaznaczonym wygiętym drutem kwantowym.

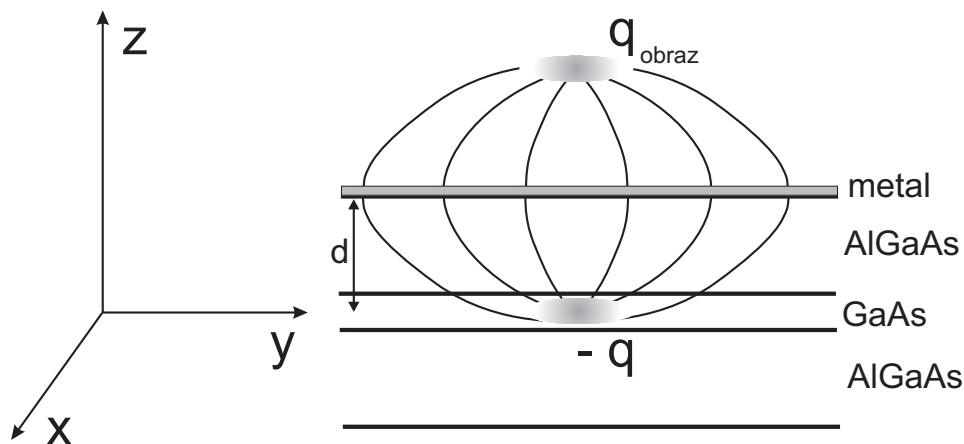
pasma przewodnictwa. Rysunek 2.1 przedstawia schemat rozważanej struktury oraz orientację kartezjańskiego układu współrzędnych przyjętego do obliczeń. Oś z tego układu skierowana jest prostopadle do płaszczyzny metalowej a d to odległość drutu kwantowego od metalu mierzona wzdłuż osi z .

W rachunkach zakładamy transport pojedynczego elektronu. Elektron w pobliżu metalu powoduje redystrybucję ładunku na powierzchni metalu, a co za tym idzie in-

dukuje potencjał kulombowski, który mu towarzyszy w czasie ruchu. Ponieważ płaszczyna metalowa jest nieskończenie rozległa to potencjał indukowany możemy łatwo wyliczyć analitycznie wykorzystując do tego celu metodę obrazów.

2.2 Potencjał indukowany

Elektron nie ma swobody ruchu w kierunku z . Jego ruch opiszemy w przybliżeniu dwuwymiarowym. Potencjał wyindukowany znajdujemy metodą obrazów (patrz rys. 2.2).



Rys. 2.2: Ilustracja przedstawiająca położenie fikcyjnego ładunku, który bierzemy pod uwagę rozwiązując zagadnienie elektrostatyki metodą obrazów.

Potencjał na metalowej płaszczynie jest stały i przyjmujemy go jako poziom odniesienia ($V(x, y, z = d) = 0$). Warunek ten będzie spełniony jeśli obliczenia będą przeprowadzone tak jakby po przeciwnej stronie płaszczyny w tej samej odległości znajdował się ładunek o znaku przeciwnym. W istocie pole wytworzone przez ładunek wyindukowany na powierzchni metalu jest w obszarze $z < d$ takie samo jak pole wytworzone przez ładunek o znaku przeciwnym znajdujący się w odległości $2d$ od elektronu.

Całkowity potencjał elektrostatyczny w układzie stanowi sumę potencjałów pochodzących od ładunku właściwego elektronu $-q/4\pi\epsilon\epsilon_0 r_1$ oraz ładunku indukowanego $q/4\pi\epsilon\epsilon_0 r_2$, gdzie:

$$r_1 = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad r_2 = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - 2d)^2}.$$

Zatem:

$$\varphi_{tot}(x, y, z) = \frac{q}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \left[\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - 2d)^2}} - \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right]. \quad (2.1)$$

Potencjał ten istotnie spełnia warunek brzegowy, to znaczy jest równy zero dla $r_1 = r_2$, czyli dla $z = d$. Ponieważ stan elektronu opisuje funkcja falowa $\psi(x, y)$ więc ładunek punktowy występujący we wzorze (2.1) należy zastąpić gęstością ładunku elektronu:

$$\rho_e(x, y) = -|e| |\psi(x, y)|^2, \quad (2.2)$$

a wtedy wzór na potencjał elektronu przybiera postać:

$$\varphi_e(x, y, z) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_e(x', y')}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + z^2}} dx' dy'. \quad (2.3)$$

Natomiast potencjał indukowany odczuwany przez elektron w studni kwantowej jest różnicą potencjału całkowitego $\varphi_{tot}(x, y, z)$ i potencjału pochodzącego od ładunku właściwego elektronu $\varphi_e(x, y, z)$:

$$\varphi_{ind}(x, y, z) = \varphi_{tot}(x, y, z) - \varphi_e(x, y, z). \quad (2.4)$$

Energię potencjalną uwięzienia bocznego dla elektronu obliczamy zatem zgodnie ze wzorem:

$$V(x, y) = -|e| \varphi_{ind}(x, y, z = 0) = \frac{-|e|}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{ind}(x', y')}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + 4d^2}} dx' dy'. \quad (2.5)$$

2.3 Rozwiązanie problemu stacjonarnego w bazie wielocentrowej

Funkcja falowa w naszym przypadku zależy od potencjału indukowanego, a on z kolei od rozkładu gęstości elektronowej (2.5) dlatego obliczenia początkowej funkcji falowej wykonujemy iteracyjnie rozwiązując stacjonarne równanie Schrödingera, aż do uzyskania samouzgodnienia. Do zadania warunku początkowego w obliczeniach z czasem

wykorzystywać będziemy stan własny o najniższej energii własnej operatora Hamiltona:

$$H = T + V = \frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 + V(x, y), \quad (2.6)$$

gdzie m^* to masa efektywna elektronu (w rozważanym przez nas przypadku wartość tej masy równa jest masie efektywnej w GaAs czyli $m^* = 0.067m_e$), e - to ładunek elektronu a $V(x, y)$ określone jest wzorem (2.5), w którym $\epsilon = 12.4$. Ponieważ rozpatrujemy cząstkę naładowaną w polu magnetycznym stąd w hamiltonianie pojawia się potencjał wektorowy \mathbf{A} . Pole magnetyczne \mathbf{B} łączy się z potencjałem wektorowym relacją:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (2.7)$$

Przyjmujemy cechowanie Landaua:

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0). \quad (2.8)$$

Przy takim cechowaniu Hamiltonian (2.6) przybiera postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + i\hbar\omega_c y \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m^*\omega_c^2}{2} y^2 + V(x, y). \quad (2.9)$$

Rozwiązań stacjonarnego równania Schrödingera:

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y), \quad (2.10)$$

szukamy w bazie gaussowskiej:

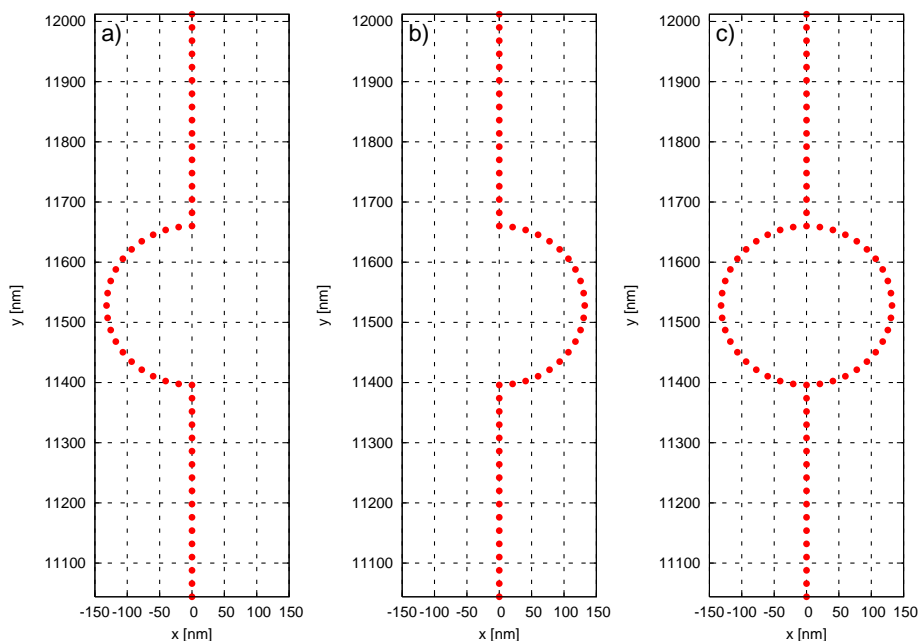
$$\psi(x, y) = \sum_{p=1}^n c_p f_p(x, y), \quad (2.11)$$

przy czym n to ilość centrów użytych do obliczeń a

$$f_p = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{4}\alpha \left[(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2 \right] + \frac{1}{2} \frac{ieB}{\hbar} (x - x_p)(y + y_p) \right\} \quad (2.12)$$

stanowią funkcje bazowe. We wzorze (2.12) α to parametr określający stopień lokalizacji gaussianu względem centrum (x_p, y_p) . Kluczowym punktem rachunków jest to, że sam wygięty drut kwantowy będzie modelowany przy pomocy odpowiedniego wyboru centrów. W ten sposób można modelować dowolne kształty np. prosty drut (2.4a) lub wygięty w kształcie półkola (patrz rys. 2.3). Modelowanie drutu kwantowego przy

pomocy wyboru centrów nie wymaga wprowadzania żadnego potencjału uwięzienia. Pakiet falowy opisany przez (2.11) nie może uciec do obszaru, w którym znikają wszystkie funkcje bazowe. Dlatego $V(x, y)$ w (2.9) będzie identyczny z potencjałem indukowanym (1.1). Odległości między centrami oraz parametr α muszą być tak dobrane, aby pakiet falowy mógł się swobodnie przemieszczać wzdłuż drutu. Jednocześnie wybór α określi efektywną szerokość drutu. Stopień lokalizacji induktonu oraz rozważane pędy wymagają odległości między centrami około 22nm. Sprawdziliśmy, że swobodny transport pakietu, w którym nie widać ziarnistego charakteru bazy osiągamy dla $\alpha = \frac{4}{(28nm)^2}$. Mniejsza wartość α powoduje zwiększenie zasięgu przekrywania funkcji bazowych (2.12), co wymaga rezerwowania większej pamięci przy tablicowaniu całek. Porównanie wyników uzyskanych w bazie gaussowskiej z metodą różnic skończonych przedstawione są w rozdziale następnym. Zespólna część eksponenty w (2.12) wynika z tzw. translacji magnetycznej i zapewnia niezmienniczość cechowania, to jest równoważność wszystkich funkcji bazowych w obecności pola magnetycznego. Równoważność polega na identycznej wartości oczekiwanej $\langle f_p | H | f_p \rangle$ dla każdego p .



Rys. 2.3: Przykładowe rozkłady centrów modelujące (a,b) odpowiednio lewy i prawy półpierścień oraz (c) pierścień.

Dla wybranych funkcji bazowych współczynniki rozwinięcia c_p wyznaczamy pod-

stawiając (2.11) do równania (2.10):

$$H \sum_{p=1}^n c_p f_p(x, y) = E \sum_{p=1}^n c_p f_p(x, y). \quad (2.13)$$

Zgodnie z metodą Galerkina, aby uzyskać przepis na współczynniki c_p równanie (2.13) mnożymy obustronnie przez f_q^* i całkujemy wynik. Otrzymamy wtedy:

$$\sum_{p=1}^n c_p \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^*(x, y) H f_p(x, y) dx dy = E \sum_{p=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^*(x, y) f_p(x, y) dx dy. \quad (2.14)$$

Dla uproszczenia zapisu definiujemy macierz hamiltonianu:

$$\mathbf{H}_{qp} = \mathbf{T}_{qp} + \mathbf{V}_{qp} = \langle f_q | H | f_p \rangle = \langle f_q | T | f_p \rangle + \langle f_q | V | f_p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^* H f_p dx dy, \quad (2.15)$$

oraz macierz przekrywania:

$$\mathbf{S}_{qp} = \langle f_q | f_p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^* f_p dx dy. \quad (2.16)$$

Obie macierze są macierzami kwadratowymi o wymiarze $n \times n$. Korzystając z tych definicji różniczkowy problem własny (2.10) sprowadza się do macierzowego uogólnionego problemu własnego:

$$\mathbf{Hc} = E\mathbf{Sc}. \quad (2.17)$$

Do wyznaczenia wektorów własnych \mathbf{c} i wartości własnych E wykorzystujemy funkcję *ZHEGV* z biblioteki *LAPACK*.

Hamiltonian (2.9) zależy od swojego wektora własnego Ψ przez potencjał indukowany (1.1). Zależność ta, która wprowadza nieliniowość do Hamiltonianu, powoduje że równanie własne (2.10) należy rozwiązać w sposób samouzgodniony.

W zerowym kroku iteracyjnym rozwiązujemy problem własny (2.10), w którym $V(x, y) = 0$. Pomimo, że nie ma jawnego potencjału zewnętrznego pakiet pozostanie zlokalizowany przez wybór centrów rozłożonych tak jak to zaznaczono czarnymi kropkami na rysunku 2.4a. W wyniku przeprowadzenia zerowej iteracji otrzymujemy stany własne i wartości własne spośród których wybieramy ten o najniższej energii czyli stan podstawowy. W kolejnym kroku mając już współczynniki rozwinięcia możemy wyliczyć

rozkład gęstości elektronowej zgodnie ze wzorem:

$$\rho(x', y') = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n c_k^* c_l f_k^*(x', y') f_l(x', y'). \quad (2.18)$$

Mając gęstość ładunku obliczamy elementy macierzowe potencjału indukowanego:

$$\mathbf{V}_{qp} = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n c_k^* c_l \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^*(x, y) \left[\frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_k^*(x', y') f_l(x', y')}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + 4d^2}} dx' dy' \right] f_p(x, y) dx dy. \quad (2.19)$$

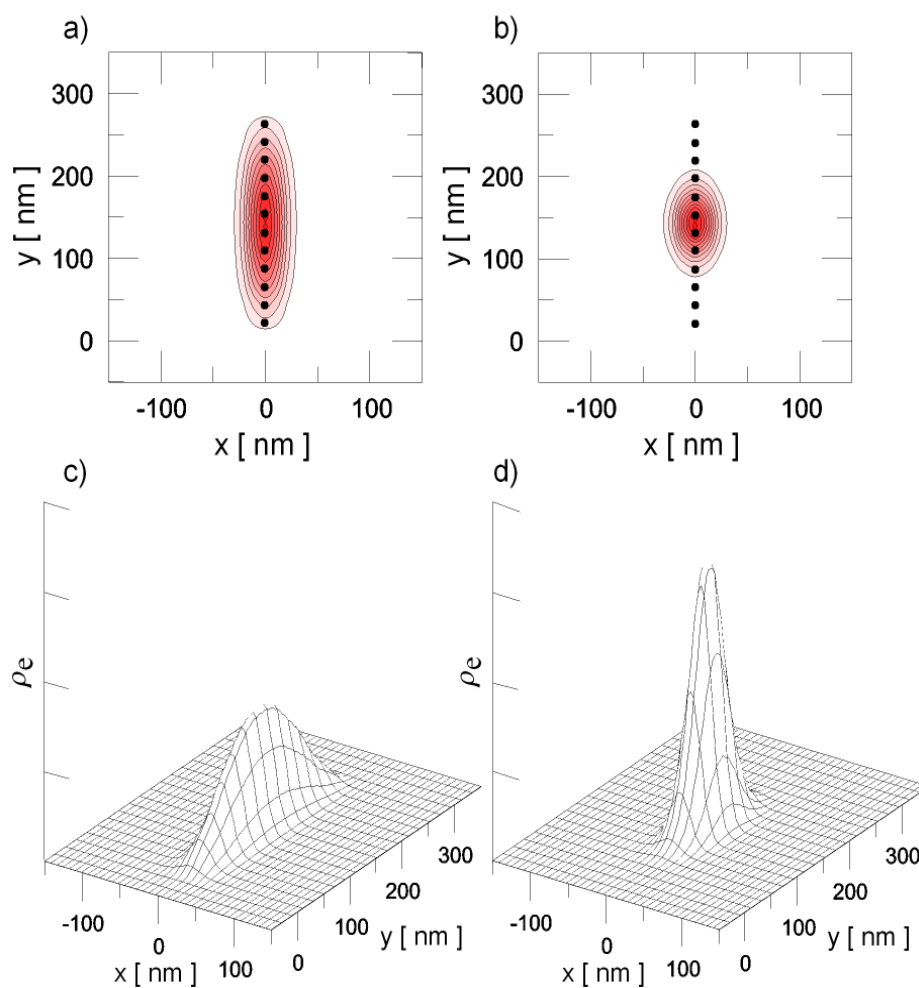
Całkę:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_q^*(x, y) f_p(x, y) f_k^*(x', y') f_l(x', y')}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + 4d^2}} dx' dy' dx dy \quad (2.20)$$

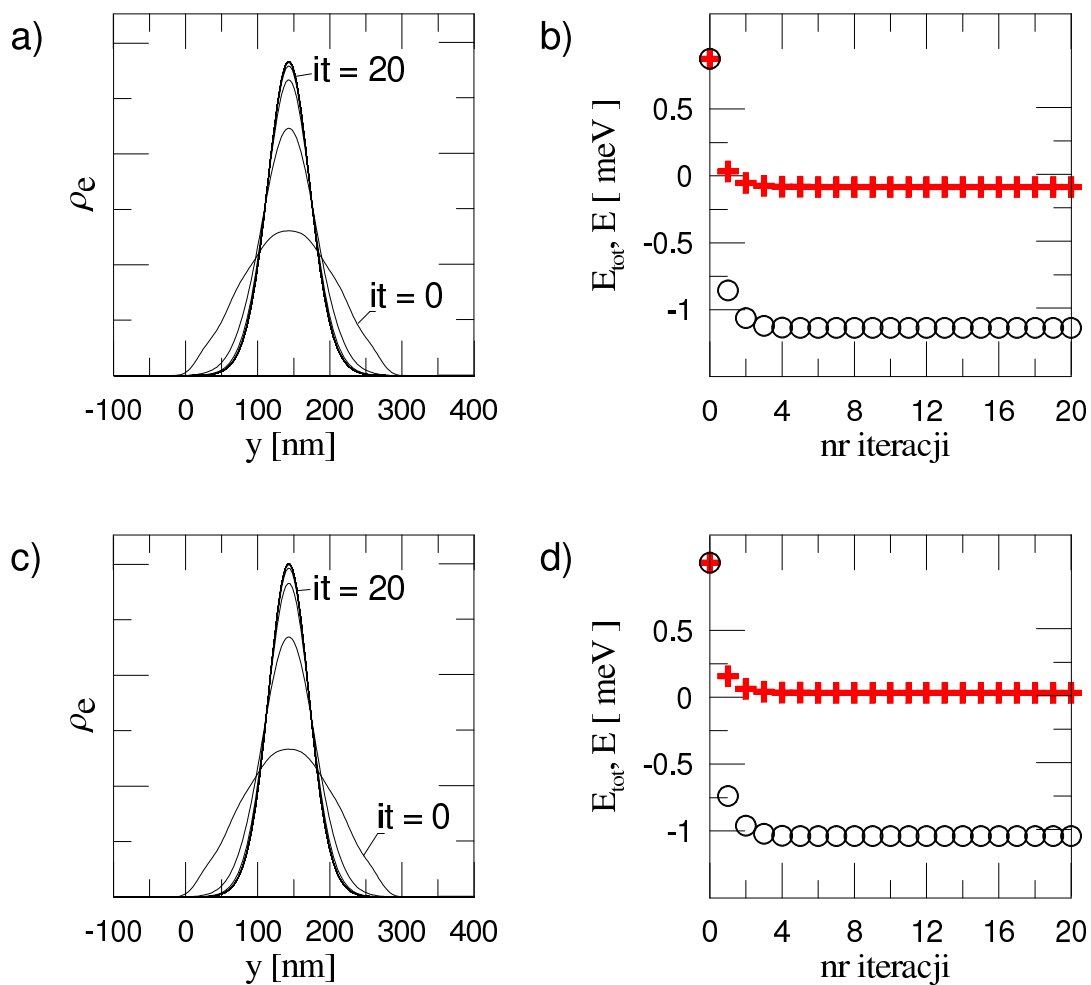
można stabilizować tzn. policzyć tylko raz i zachować w pamięci. Taki zabieg pozwala znacznie skrócić czas obliczeń ale zwiększa ilość pamięci alokowanej przez program. Problem pamięci okazał się na tyle poważny, że jego rozwiązanie było warunkiem koniecznym do prowadzenia dalszych symulacji. Dotyczyło to przede wszystkim obliczeń zależnych od czasu, gdzie używaliśmy dużej liczby centrów (100 i więcej). Rozwiązanie tego problemu było możliwe dzięki zlokalizowanemu charakterowi funkcji bazowych. Całka (2.20) jest równa zero gdy wartość $|(x_q - x_p, y_q - y_p)|$ lub $|(x_k - x_l, y_k - y_l)|$ jest dostatecznie duża - wtedy funkcja podcałkowa znika. Pozwoliło to na znaczne zmniejszenie rozmiaru przechowywanych tablic i umożliwiło przeprowadzenie rachunków przedstawionych poniżej.

Rysunek 2.4a przedstawia mapę gęstości prawdopodobieństwa – wynik rozwiązania równania (2.10) w zerowej iteracji tzn. dla hamiltonianu (2.9), w którym $V(x, y) = 0$. W tym przypadku pakiet jest rozmyty po całej długości drutu, to jest na wszystkich 12 centrach (centra zaznaczone są na tym wykresie czarnymi kropkami).

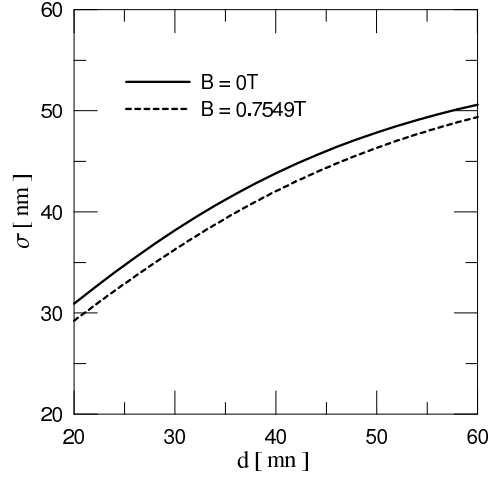
Zgodnie z opisaną procedurą prowadzącą do samouzgodnienia w iteracji pierwszej i kolejnych uwzględnione było oddziaływanie z metalem. Pakiet lokalizował się coraz bardziej wokół środka drutu. Rozkład gęstości ładunku elektronu $\rho_e(x=0, y)$ w kolejnych iteracjach pokazuje rysunek 2.5a i c. Można z niego odczytać, że zmiany kształtu pakietu są coraz mniejsze w kolejnych iteracjach. W 20 iteracji następuje uzgodnienie pakietu z potencjałem indukowanym. Na mapie 2.4b widać, że w iteracji 20 pakiet jest silnie zlokalizowany i nie jest rozmyty na całym drucie (pakiet obejmuje 6 centrów). Oznacza to, że drut jest na tyle długi, że nie wpływa na stopień lokalizacji elektronu w



Rys. 2.4: Rozkład gęstości ładunku elektronu w iteracjach 0 (a,c) i 20 (b,d). Wykresy wykonano dla następujących wartości parametrów: $\alpha = \frac{4}{(28nm)^2}$, $d = 20nm$, $B = 0$, $n = 12$.



Rys. 2.5: (a,c) Rozkład gęstości ładunku elektronu $\rho_e(x=0, y)$ w kolejnych iteracjach, (b, d) energia elektronu w kolejnych iteracjach. Okręgami zaznaczono energię E będącą wartością własną równania (2.10), krzyżami energię całkowitą E_{tot} daną wyrażeniem (2.22). Wykresy wykonano dla $B = 0$ (a,b) oraz $B = 0.7549 \text{ T}$ (c,d).



Rys. 2.6: Wykres szerokości połówkowej pakietu samouzgodnionego w funkcji odległości płaszczyzny metalowej od studni kwantowej, w której uwięziony jest elektron bez pola magnetycznego (linia ciągła) i w polu magnetycznym o indukcji $B = 0.7549\text{T}$ (linia przerywana).

stanie podstawowym. Dodatkowo stworzony został wykres quasi-trójwymiarowy 2.4d.

Obliczenia pokazały, że pole magnetyczne powoduje większą lokalizację pakietu. Widoczne to jest na wykresach 2.5a i c oraz na wykresie 2.6, który przedstawia wykres szerokości połówkowej pakietu samouzgodnionego w funkcji odległości płaszczyzny metalowej od drutu, w którym zlokalizowany jest elektron. Szerokość połówkowa była liczona zgodnie ze wzorem:

$$\sigma = \sqrt{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}. \quad (2.21)$$

Na rysunkach 2.5b i d zamieszczona jest energia E będąca wartością własną występującego w równaniu (2.10) operatora. Występujący w hamiltonianie potencjał elektrostatyczny zawiera zależność od funkcji falowej, którą uwzględniamy w procedurze samouzgodnienia. Sytuacja jest analogiczna do jednoelektronowego przybliżenia w układzie wielu ciał, uzyskiwanego w przybliżeniu pola średniego. W tym przypadku wartość własna samouzgodnionego hamiltonianu ma sens „energii jednoelektronowej” [10]. Energia całkowita E_{tot} wymaga odjęcia połowy oddziaływania [10]:

$$E_{tot} = E - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x, y) |\psi(x, y)|^2 dx dy. \quad (2.22)$$

W rozpraszaniu tylko energia całkowita jest zachowana. Energia całkowita została przedstawiona na rysunku 2.5b i d krzyżkami.

Rozdział 3

Transport pakietu przez półprzewodnikowy półprzewodnik pod nieobecność metalu

3.1 Wprowadzenie

Gdy płaszczyzna metalowa znajduje się w nieskończonej odległości ($d=\infty$) od półprzewodnika, poruszający się w nim pakiet falowy nie będzie wykazywał właściwości solitonu gdyż nie ma żadnej przyczyny, która miałaby podtrzymywać jego kształt. Jest to graniczny przypadek rozważanego w pracy problemu. Jaki wpływ w tym przypadku będzie miała siła Lorentza na prawdopodobieństwo transmisji przez półprzewodnikowy półprzewodnik? Można by oczekiwać, że prawdopodobieństwo T będzie zależęć od tego jak skierowane jest pole magnetyczne. Jak pokazują wyniki, oddziaływanie z polem magnetycznym powoduje inne skutki. Jakież? Odpowiedź na to pytanie dają wyniki symulacji zaprezentowane w tym rozdziale.

3.2 Procedura rozwiązania zależnego od czasu równania Schrödingera w bazie wielocentrowej

Symulacja transportu elektronu przez półprzewodnikowy półprzewodnik w obecności jednorodnego pola magnetycznego polega na numerycznym rozwiązaniu za-

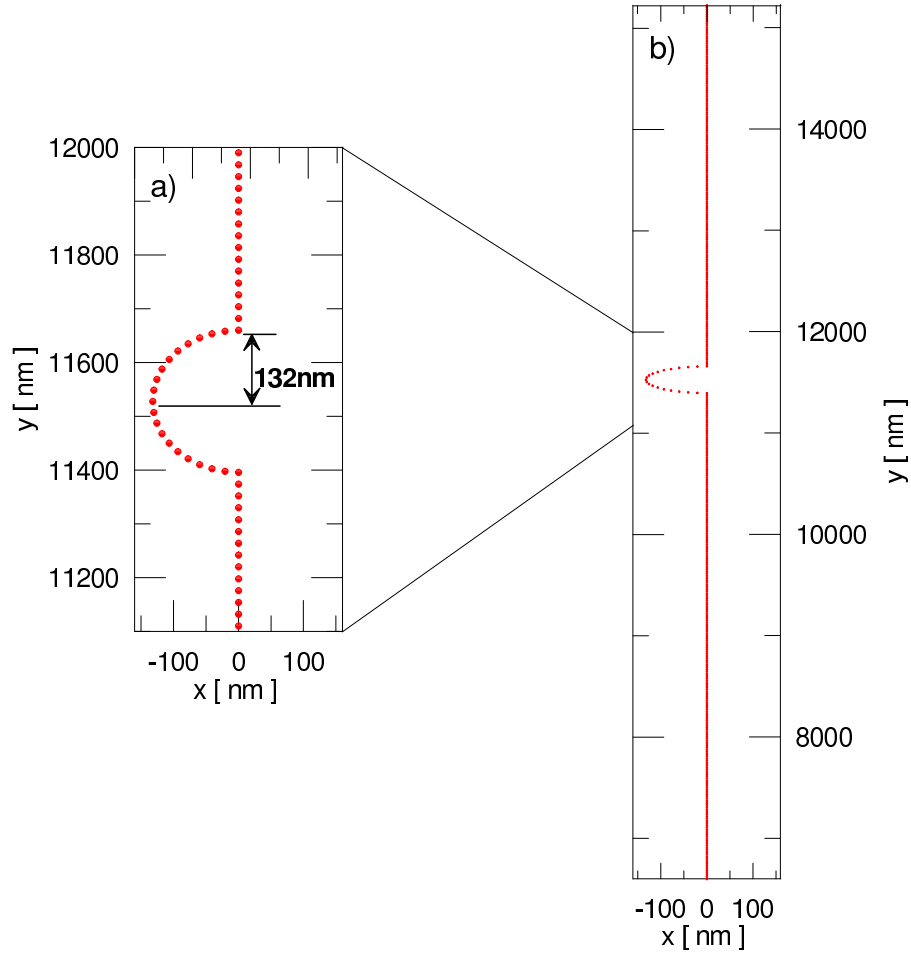
leżnego od czasu równania Schrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) = H\psi(x, y, t), \quad (3.1)$$

w którym hamiltonian wyraża się wzorem (2.9) (z $V(x, y) = 0$ dla problemu bez metalu). Zależnych od czasu rozwiązań szukamy w bazie gaussowskiej:

$$\psi(x, y) = \sum_{p=1}^n c_p(t) f_p(x, y), \quad (3.2)$$

gdzie n to ilość centrów określających geometrię struktury rozłożonych tak jak to pokazuje rys. 3.1, a funkcje bazowe f_p zadane są wzorem (2.12). Zwróćmy uwagę, że



Rys. 3.1: Rozkład centrów modelujących półpierścieni o promieniu wygięcia 132nm.

półpierścieni stanowi tylko drobną część pudła obliczeniowego. Końce pudła (końce drutu) działają jak nieskończona studnia potencjału. Pakiet się od nich odbija. Druty

za i przed półpłaszczyzną muszą być na tyle długie, aby pakiet po odbiciu nie wrócił do półpłaszczyzny.

W naszym modelu numerycznym zależność czasową zawierają tylko współczynniki rozwinięcia, a nie same funkcje bazowe. Wyrażenie na współczynniki rozwinięcia wyznaczamy wstawiając rozwinięcie (3.2) do zależnego od czasu równania Schrödingera. W ten sposób uzyskujemy:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{p=1}^n c_p(t) f_p(x, y) = H \sum_{p=1}^n c_p(t) f_p(x, y). \quad (3.3)$$

Kolejny krok to obustronne przemnożenie przez f_q^* i scałkowanie:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{p=1}^n c_p(t) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^* f_p dx dy = \sum_{p=1}^n c_p(t) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^* H f_p dx dy. \quad (3.4)$$

Wykorzystanie definicji (2.15) oraz (2.16) prowadzi do układu równań liniowych w postaci macierzowej na zależne od czasu współczynniki rozwinięcia $c_p(t)$:

$$\mathbf{S} \dot{\mathbf{c}}(t) = \mathbf{H} \mathbf{c}(t) / i\hbar. \quad (3.5)$$

Rozwiązaniem tego układu są pochodne współczynników rozwinięcia, a chcąc otrzymać współczynniki $c_p(t)$ postępujemy według schematu:

$$c_p(t + dt) = c_p(t) + \dot{c}_p(t) dt. \quad (3.6)$$

Schemat ten jednak nie zachowuje normy funkcji falowej, co powoduje konieczność sprawdzania unormowania co kilka kroków czasowych. Można by przezwyciężyć ten niepożądany efekt stosując bardzo mały krok czasowy. Istnieje jednak bardziej ekonomiczne rozwiązanie, które zostało zaproponowane przez Askara i Cakmaka [8]. Polega ono na rozwinięciu w szereg Taylora funkcji:

$$\psi(x, y, t + dt) = \psi(x, y, t) + \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, y, t) dt^2 + \dots \quad (3.7)$$

oraz

$$\psi(x, y, t - dt) = \psi(x, y, t) - \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, y, t) dt^2 + \dots \quad (3.8)$$

i odjęciu stronami. Po przeszerogowaniu stronami otrzymujemy:

$$\psi(x, y, t + dt) = \psi(x, y, t - dt) + 2\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, y, t) dt + \mathcal{O}(dt^3) + \dots \quad (3.9)$$

Odrzucamy wyrazy rzędu trzeciego i wyższych, pochodną czasową przyjmujemy zgodnie z równaniem Schrödingera:

$$\psi(x, y, t + dt) = \psi(x, y, t - dt) - \frac{2i}{\hbar} dt H \psi(x, y, t). \quad (3.10)$$

Powyższy schemat jest stabilny i zachowuje normę. Ponadto jest symetryczny względem zmiany kierunku upływu czasu ($t \rightarrow -t$). Po zastosowaniu w tym schemacie rozwinięcia funkcji w bazie gaussowskiej otrzymujemy układ równań liniowych w postaci:

$$\mathbf{S}\mathbf{c}(t + dt) = \mathbf{S}\mathbf{c}(t - dt) - 2idt\mathbf{H}\mathbf{c}(t) / \hbar. \quad (3.11)$$

Układ ten rozwiązujemy przy pomocy procedury *ZGETRS* z biblioteki *LAPACK*. Macierz układu równań (\mathbf{S} po lewej stronie) nie zmienia się w kolejnych krokach czasowych. Dlatego poddajemy ją (jednokrotnej) dekompozycji \mathbf{LU} co znacznie obniża czas wykonania każdego kroku czasowego – każdy krok sprowadza się do rozwiązania dwóch układów równań o trójkątnych macierzach, co odpowiada złożoności obliczeniowej rzędu n^2 (metody dokładne rozwiązujące ogólne układy równań posiadają złożoność n^3). Do rozpoczęcia obliczeń tym schematem trzeba znać współczynniki rozwinięcia w chwili $t = 0$ i $t = \Delta t$. Współczynniki rozwinięcia w chwili $t = 0$ otrzymujemy z rozwinięcia w bazie gaussowskiej początkowej funkcji falowej (szczegółowo o zadaniu warunku początkowego w dalszej części tego paragrafu) natomiast współczynniki w chwili $t = \Delta t$ trzeba obliczyć. Można to zrobić używając schematu (3.5) przy pomocy, którego możemy obliczyć funkcję falową w chwili $t + \Delta t$ znając funkcję falową w chwili t . Można też zrobić inaczej: Obliczyć współczynniki rozwinięcia w chwili $\Delta t/10$ schematem (3.5) i kontynuować obliczenia schematem (3.11) z krokiem $\Delta t/10$, aż do momentu gdy $t = \Delta t$. Po czym wykorzystać $c_p(0)$ i obliczone $c_p(\Delta t)$ do dalszych obliczeń schematem (3.11) ale już z krokiem czasowym Δt . Drugie podejście ogranicza do minimum skutki powodowane wadami schematu (3.5).

Jako warunek początkowy przyjmujemy stacjonarny stan własny Ψ induktonu uzyskany w procedurze samouzgodnienia opisanej w poprzednim rozdziale. Pakietowi nadajemy średni pęd $\langle \hbar k \rangle$ mnożąc pakiet stacjonarny Ψ przez falę płaską $\exp(iky)$. Warunek

początkowy sprowadzamy do formy wektorowej przez rozwinięcie w bazie gaussowskiej:

$$\Psi(x, y)e^{iky} = \sum_{p=1}^n c_p(t=0)f_p(x, y). \quad (3.12)$$

Stan własny jest określony przez l współczynników rozwinięcia c_r i jego rozwinięcie w bazie funkcji f_p przebiega następująco:

$$\sum_{r=1}^l c_r f_r(x, y) e^{iky} = \sum_{p=1}^n c_p(t=0) f_p(x, y). \quad (3.13)$$

Przeprowadzając dalej standardową procedurę prowadzącą do obliczenia niewiadomych współczynników rozwinięcia c_p w chwili początkowej, mnożymy (3.13) przez f_q^* i całkujemy co prowadzi do :

$$\sum_{r=1}^l c_r \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_q^* f_r e^{iky} dx dy = \sum_{p=1}^n c_p(t=0) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_q^* f_p dx dy. \quad (3.14)$$

Uproszczenie zapisu będzie możliwe dzięki (2.16) i definicji macierzy:

$$\mathbf{P}_{qr} = \sum_{r=1}^l c_r \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_q^* f_r e^{iky} dx dy. \quad (3.15)$$

W ten sposób dochodzimy do układu równań liniowych na nieznanne współczynniki rozwinięcia c_p w chwili początkowej $t = 0$:

$$\mathbf{S}c(0) = \mathbf{P}. \quad (3.16)$$

Rozwiązanie tego układu uzyskujemy wykorzystując gotową procedurę numeryczną *ZGESV* z biblioteki *LAPACK*.

W przypadku obliczeń bez metalu jako warunek początkowy można zastosować jedną z funkcji bazowych (2.12) i tak też było robione w symulacjach opisanych w pracy [11]. Natomiast w tym przypadku zastosowanie funkcji z metody samouzgodnienia ma na celu późniejsze zestawienie różnic w wynikach obliczeń z metalem i bez dla tego samego warunku początkowego.

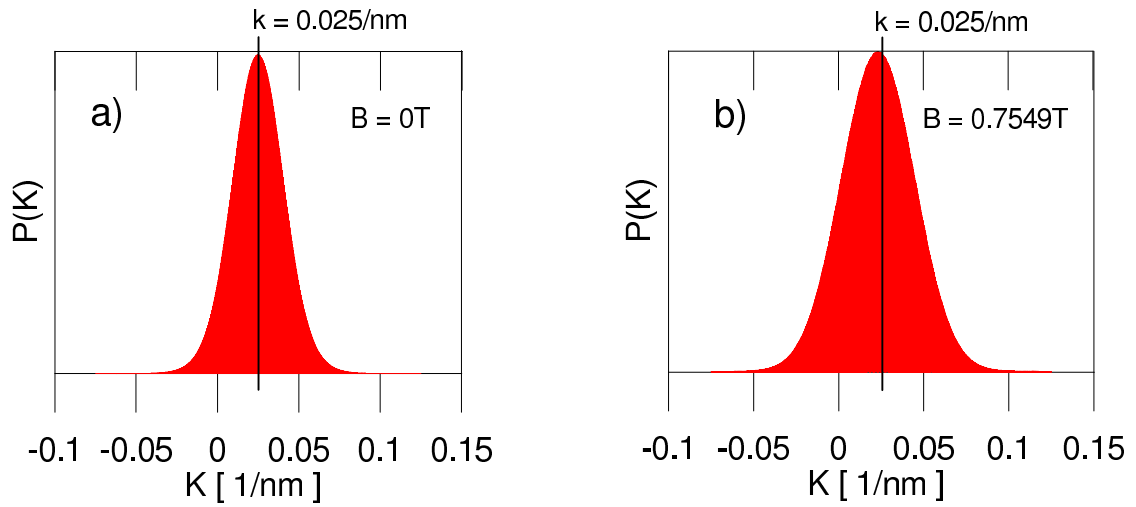
Z przeprowadzonych obliczeń wywnioskowaliśmy, że po wyrzutowaniu stanu własnego Ψ obliczonego metodą samouzgodnienia na bazę gaussianów pęd pakietu jest mniejszy od zadanego i efekt ten zależny jest od pola magnetycznego. Obliczenia te polegały

na wyznaczeniu transformaty Fouriera początkowej funkcji falowej $\psi(x, y, t = 0)$:

$$P(K) = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, y, t = 0) e^{-iKy} dx dy \right|^2 \quad (3.17)$$

oraz na wykreśleniu wartości oczekiwanej (3.18) pakietu falowego w wybranej chwili czasowej w funkcji pola magnetycznego przy ustalonym parametrze k .

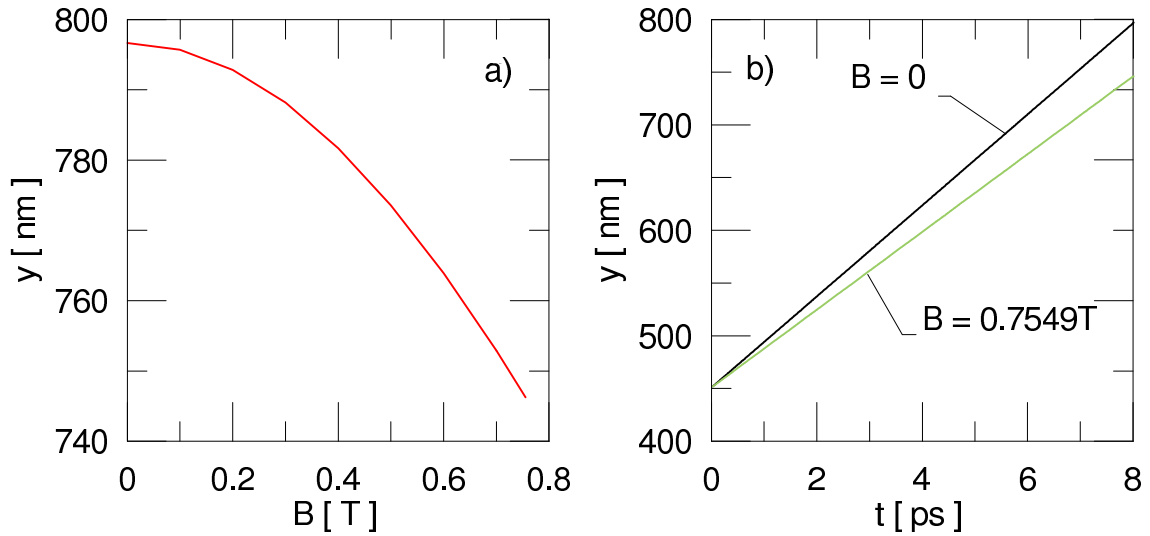
$$\langle \psi | y | \psi \rangle = \sum_{q=1}^n \sum_{p=1}^n c_q^* c_p \langle f_q | y | f_p \rangle. \quad (3.18)$$



Rys. 3.2: Transformata Fouriera funkcji $\psi(x, y, t = 0)$ wykonana dla przypadku z wyłączonym polem magnetycznym (a) i w polu o indukcji $B = 0.7549\text{T}$ (b). W obu przypadkach wartość parametru k wynosiła $0.025/\text{nm}$.

Wykres 3.2 przedstawia transformatę Fouriera funkcji falowej w chwili $t = 0$ w dwóch przypadkach: z wyłączonym polem magnetycznym (rys. 3.2a) i w polu magnetycznym o indukcji $B = 0.7549\text{T}$ (rys. 3.2b). Parametr k przyjęto równy $0.025/\text{nm}$ zarówno w obliczeniach z polem jak i bez niego. W obecności pola przy wyrzutowaniu warunku początkowego na wielocentrową bazę gaussowską otrzymujemy nieco inny rozkład pędu niż zamierzony: maksimum pakietu w przestrzeni pędów przesunięte jest nieco do mniejszych wartości. Z obliczeń wartości oczekiwanej pędu (3.19)

$$\langle \psi | p_y | \psi \rangle = \sum_{q=1}^n \sum_{p=1}^n c_q^* c_p \langle f_q | -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} | f_p \rangle \quad (3.19)$$



Rys. 3.3: Wartość oczekiwana położenia pakietu odczytana po upływie 8ps od jego startu w funkcji pola magnetycznego (a) i wartość oczekiwana położenia w funkcji czasu (b). Wartość parametru k przyjętego do obliczeń wynosiła 0.025/nm. Pakiet poruszał się w prostym drucie.

wynika, że średni wektor falowy dla $B = 0.7549\text{T}$ wynosi 0.023/nm, a nie 0.025/nm. Im silniejsze pole magnetyczne tym pęd pakietu falowego w naszym modelu jest mniejszy od wprowadzanego do warunku początkowego k . Efekt ten można zniwelować zagęszczając rozkład centrów gaussowskich, co zwiększyłoby złożoność obliczeniową rachunków. Można również wprowadzić zależność $k(B)$ tak aby po wyrzutowaniu pęd był równy nominalnemu (patrz niżej). Uznaliśmy jednak, że redukcja wartości średniej o 0.002/nm jest akceptowalna. Interesuje nas przede wszystkim zależność wyników od zwrotu pola magnetycznego. Upewniliśmy się, że pęd średni pakietu po wyrzutowaniu na bazę gaussowską od znaku B nie zależy.

Na wykresie 3.3a pokazaliśmy położenie środka ciężkości pakietu w prostym drucie 8ps po starcie rachunków w funkcji pola magnetycznego. Redukcja przesunięcia o około 3/40 przy wzroście pola od zera do 0.7549T jest konsystentna z początkowym rozkładem pędu. Pakiet nie oddziaływał z metalem. W chwili początkowej zlokalizowany był na długości 452nm drutu mierzącego 1760nm. Wykres 3.3b przedstawia wartość oczekiwaną położenia pakietu w funkcji czasu dla granicznych wartości pola z wykresu 3.3a. Na uwagę zasługuje fakt, że prędkość pakietu poruszającego się w prostym drucie nie zmienia się w czasie i to niezależnie od tego czy pole magnetyczne działa czy nie.

Brak wpływu pola magnetycznego na ruch pakietu falowego w przewodach wymaga wytłumaczenia ponieważ w prawdziwych dwuwymiarowych przewodach siła Lorentza

może odchylić (i nawet zawrócić) pakiet wewnątrz drutu. W modelowych drutach zbudowanych z szeregu centrów gaussowskich taki proces nie jest możliwy, co poniżej wyjaśnimy korzystając z zasady Ehrenfesta zastosowanej do naszej bazy. Nasze druty są efektywnie jednowymiarowe i siły magnetyczne w nich nie działają. Rozkład pędu pakietu nie ulega zmianie w czasie ruchu przez prosty odcinek drutu. Prędkość pakietu wzdłuż drutu nie zmienia się w czasie. Model zezwala na działanie sił magnetycznych tylko w obszarze, gdzie struktura wytworzona przez centra nie jest prostoliniowa – czyli tam gdzie znajduje się półokrągłe wygięcie będące obiektem naszych badań. Ta cecha modelu ułatwia opis rozpraszania w obecności pola magnetycznego i jest w przybliżeniu spełniona dla prawdziwych drutów gdy pola nie są wielkie (u nas zawsze $< 1\text{T}$). Gdy druty są krótkie (jak na rysunku 1.4b na przykład) efekt obracania wektora prędkości w ramach doprowadzeń między rezerwuarami a pierścieniem jest również zaniedbywalny. Oczywiście ta cecha modelu odpowiada po prostu cienkim drutom. Poniżej podajemy uzasadnienie tej cechy modelu wg dyskusji przedstawionej w pracy [11].

Centrum pakietu porusza się w przestrzeni położeń zgodnie z twierdzeniem Ehrenfesta $d\langle \mathbf{r} \rangle / dt = \langle \mathbf{p} + e\mathbf{A} \rangle / m^*$ (wzór ten odpowiada klasycznej formule $V = \pi/m$, gdzie $\pi = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ to pęd uogólniony w obecności pola magnetycznego). Przy zastosowanym przez nas cechowaniu $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, w przewodach zorientowanych wzdłuż osi y , mamy $d\langle y \rangle / dt = \langle p_y \rangle / m^*$, jak pod nieobecność pola.

Zobaczmy teraz, że pole magnetyczne w naszym drucie nie obróci wektora pędu. Twierdzenie Ehrenfesta dla zmian średniego pędu w czasie ma postać:

$$\frac{d\langle \mathbf{p} + e\mathbf{A} \rangle}{dt} = -\frac{e}{m^*} \langle \mathbf{p} + e\mathbf{A} \rangle \times \mathbf{B}, \quad (3.20)$$

i jest odpowiednikiem drugiej zasady Newtona dla siły Lorentza $\mathbf{F} = q\mathbf{V} \times \mathbf{B}$. (3.20) daje dla składowej y wyrażenie:

$$\frac{d\langle p_y \rangle}{dt} = \frac{d\langle -i\hbar\partial/\partial y \rangle}{dt} = -\frac{eB}{m^*} \left\langle i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + eyB \right\rangle. \quad (3.21)$$

Gdy do wzoru (3.21) wstawimy rozwinięcie w bazie funkcyjnej uzyskamy przepis:

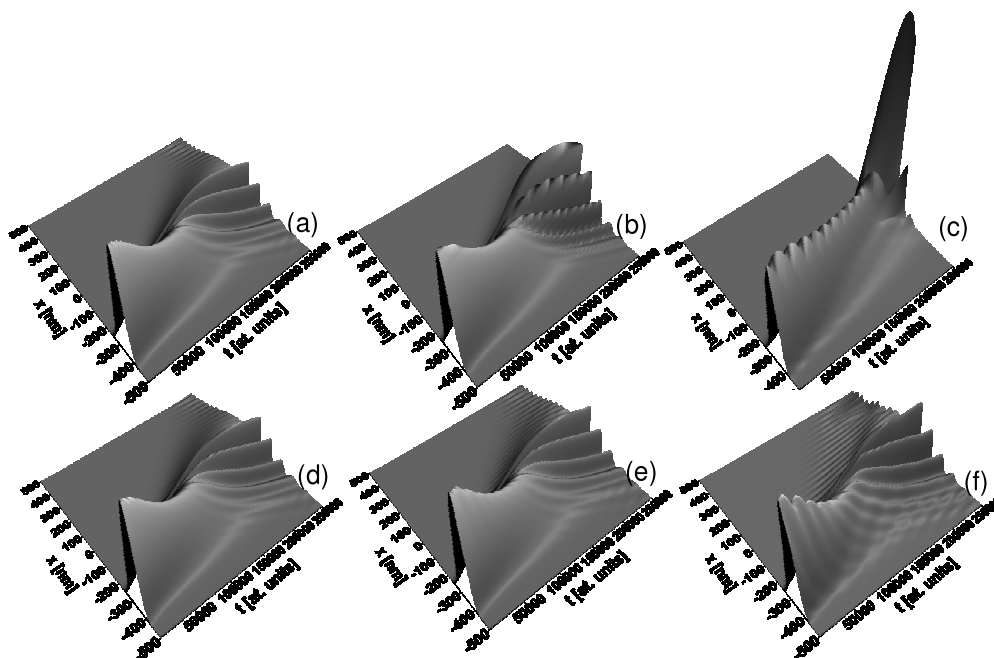
$$\frac{d\langle p_y \rangle}{dt} = \sum c_q^* c_p \langle f_q | i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + eyB | f_p \rangle. \quad (3.22)$$

Elementy macierzowe operatora $\langle f_q | i\hbar\partial/\partial x + eyB | f_p \rangle$ są równe zero dla $x_q = x_p$, więc w przewodach (zorientowanych równoległe do osi y) średnia wartość pędu w kierunku y jest zachowana. Innymi słowy, pole magnetyczne nie może odchylić pędu elektronu

poruszającego się w przewodach zdefiniowanych jako sekwencja gaussianów stanowiących funkcje bazowe zlokalizowanych wzdłuż tej samej osi. Podsumowując, w naszym modelu siły magnetyczne nie są aktywne w przewodach (pęd pakietu jest zachowany w czasie ruchu), chociaż dla $B \neq 0$ operator pędu nie komutuje z operatorem Hamiltona. Jeśli zależałoby nam na wprowadzeniu siły Lorentza do drutu należałoby je formować z szeregu dwóch lub więcej ścieżek złożonych z centrów gaussowskich.

3.3 Test efektywności bazy wielocentrowej

W celu pokazania efektywności metody numerycznej i prezentacji płynnego poruszania się pakietu pomiędzy centrami wykonaliśmy obliczenia w jednym wymiarze w obec-



Rys. 3.4: Ewolucja czasowa gęstości jednowymiarowego pakietu falowego rozpraszanego na gaussowskiej barierze potencjału. Wykresy (a,b,c) pokazują wyniki uzyskane metodą różnic skończonych na siatce składającej się odpowiednio z 201, 101 i 41 punktów. Wykresy (d,e,f) pokazują wyniki uzyskane metodą wykorzystaną w niniejszej pracy z bazą gaussianów opartą na 51, 41 i 31 centrach.

ności zewnętrznego pola magnetycznego dla elektronu tunelującego przez barierę w kształcie gaussianu danego wzorem $V(x) = V_0 \exp(-x^2/R^2)$ z $V_0 = 5\text{meV}$ i $R = 2\text{nm}$. Wybraliśmy barierę w kształcie gaussianu ponieważ nasza metoda nie pasuje do potencjałów schodkowych. Tak jest z powodu faktu, że baza gaussianów (2.12) odtwarza tylko funkcje z ciągłą drugą pochodną. Warunkiem początkowym był pakiet falowy

$\psi(x, t) = (2/\pi)^{1/4} \exp\left(- (x - x_0)^2 / R_0^2 + ikx\right) / \sqrt{R_0}$ z $x_0 = -350\text{nm}$, $R_0 = 60\text{nm}$ i $k = 0.04/\text{nm}$. Porównanie standardowej metody różnic skończonych z wynikami omawianej metody zaprezentowane jest na rysunku 3.4. W obliczeniach z bazą gaussianów przyjęliśmy $\alpha = \Delta X$, gdzie ΔX jest to odległość pomiędzy równomiernie rozłożonymi centrami. Obliczenia były wykonane w pudle obliczeniowym o długości $1\mu\text{m}$. Efektywność obu metod może być bezpośrednio porównana przez użycie różnej liczby punktów siatki (centrów). Rysunek 3.4a pokazuje wynik uzyskany metodą różnic skończonych dla symulacji przeprowadzonej na siatce składającej się z 201 punktów. Ten wynik jest numerycznie dokładny i nie może być wyraźnie poprawiony. Większa część pakietu odbija się od bariery potencjału (dla przyjętego k średnia wartość energii kinetycznej $\hbar k^2 / 2m^*$ jest równa 0.9meV). Na górze wykresu (odpowiada to długiemu czasowi i największej wartości dodatniej x) interferencyjne prążki pochodzą od odbitej przetransmitowanej części pakietu od końca pudła obliczeniowego (jest to równoważne odbiciu od nieskończonej bariery potencjału). Dla obliczeń wykonanych na 101 punktach (rys. 3.4b) prawdopodobieństwo transmisji jest niedoszacowane i zaburzone prążkami interferencyjnymi związanymi z odbiciem od bariery. W końcu dla 41 punktów (rys. 3.4c) wynik jest kompletnie niefizyczny – funkcja falowa staje się całkowicie zlokalizowana na barierze. Z drugiej strony, w prezentowanej metodzie, dokładność porównana z rys. 3.4a, który przedstawia dokładny wynik jest uzyskiwana już dla 51 gaussianów (rys. 3.4d). Dla 41 gaussianów (rys. 3.4e) prawdopodobieństwo transmisji jest tylko nieznacznie przeszacowane. Proces fizyczny jest jakościowo poprawnie opisany również dla 31 gaussianów (rys. 3.4f), chociaż widoczne jest krótko-okresowe pulsowanie prawdopodobieństwa. Jest to efekt ziarnistości bazy. Pakiet rozmywa się bardziej gdy jego centrum jest między centrami. Mimo to pakiet przemieszcza się z poprawnie wyliczoną prędkością. Wnioskujemy stąd, że użycie wielocentrowej bazy gaussianów pozwoli na znaczącą redukcję złożoności obliczeniowej problemu. Oczywiście, ta redukcja będzie większa w układzie dwuwymiarowym, który badamy.

3.4 Transport pakietu przez półpierścien

Paczka falowa reprezentująca elektron może poruszać się tylko pomiędzy centrami to też ich rozmieszczenie determinuje geometrię struktury. Centra są usytuowane na półokręgu o promieniu 132nm i formują półpierścien (rys. 3.1a). Natomiast przewody są utworzone jako łańcuchy centrów zorientowanych równoległe do osi y . Liczba centrów n , tworzących druty połączone z półpierścieniem, została tak dobrana aby można było wykluczyć wpływ odbić pakietu od końców pudła co jest równoznaczne z założeniem

drutów o niekończonej długości (rys. 3.1b). Parametrowi lokalizacji α w (2.12) została nadana wartość $\frac{4}{(28nm)^2}$. Jako warunek początkowy przyjęliśmy funkcję falową uzyskaną metodą samouzgodnienia zlokalizowaną poniżej półpierzścienia i przemnożoną przez falę płaską $\exp(iky)$ nadając tym samym paczce falowej pęd w kierunku półpierzścienia. Parametr k przyjęliśmy równy $k = 0.05/nm$ ($\hbar^2k^2/2m^* = 1.42meV$). Odległość między centrami wynosi 22nm. Zamiast stosować zmianę kierunku wygięcia drutu stosowaliśmy zmianę orientacji pola magnetycznego. Można tak zrobić ponieważ wyniki obliczeń są identyczne niezależnie od tego, który sposób obliczeń się wybierze.

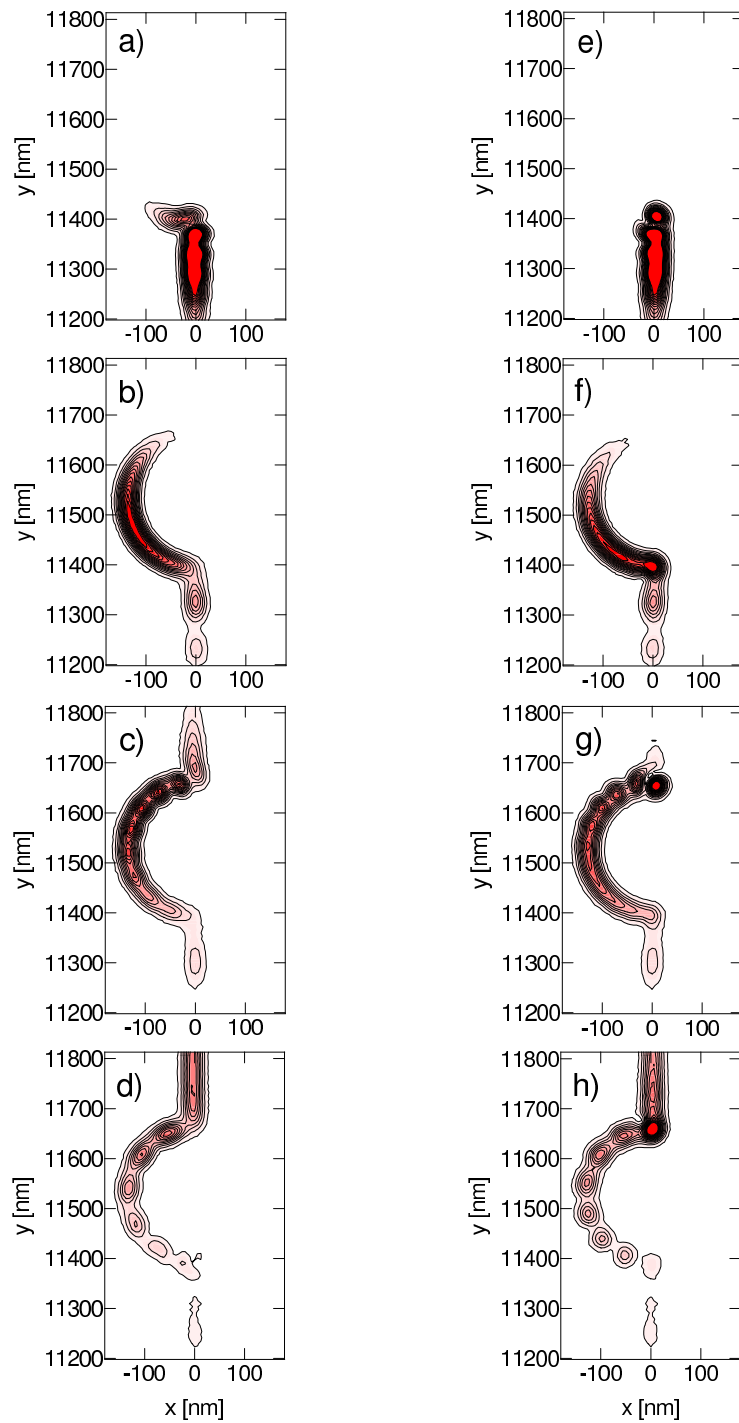
Na rysunku 3.5 zostały pokazane mapy gęstości prawdopodobieństwa w wybranych chwilach czasowych. Rysunki 3.5(a)-(d) z polem magnetycznym o indukcji $B = 0.7549T$, a rysunki 3.5(e)-(f) dla elektronu w polu magnetycznym o indukcji $B = -0.7549T$. W zależności od tego, w którą stronę skierowane jest pole na elektron działa siła Lorentza w różnym kierunku. W przypadku gdy pole skierowane jest wzdłuż osi z siła Lorentza jest skierowana przeciwnie do osi x i wtedy pomaga ona we wstrzyknięciu pakietu w lewe półkole. Natomiast gdy pole skierowane jest przeciwnie do osi z to siła Lorentza skierowana jest zgodnie z osią x i jak się okazuje towarzyszy ona wstrzykiwaniu ładunku do lewego półkola tylko po odbiciu tzn. wtedy gdy prędkość pakietu zmienia kierunek na przeciwny. Podobnie dzieje się z częścią pakietu, która znalazła się w półpierzścieniu w obecności pola o indukcji $B = -0.7549T$. Na zagięciu drutu, tuż przy wyjściu najpierw następuje zmiana kierunku prędkości a dopiero potem pakiet przedostaje się do drutu połączonego z półpierzścieniem. Zależność czasowa ładunku zgromadzonego w półokrągłej części drutu (pomiędzy $11330nm < 11726nm$ tj. region wyrysowany na rysunku 3.5) jak również prawdopodobieństwo znalezienia elektronu poniżej i powyżej tego obszaru pokazane jest na rysunku 3.6. Wykres 3.6 przedstawia prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w drutach przed i za półpierzścieniem oraz w półpierzścieniu. Wykonany został w polu o indukcji $B = 0.7549T$ (linia ciągła) i dla $B = -0.7549T$ (linia przerywana). Część pakietu za pierścieniem (dla $y > Y$) była liczona zgodnie ze wzorem:

$$T = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_Y^{\infty} dy |\Psi(x, y)|^2. \quad (3.23)$$

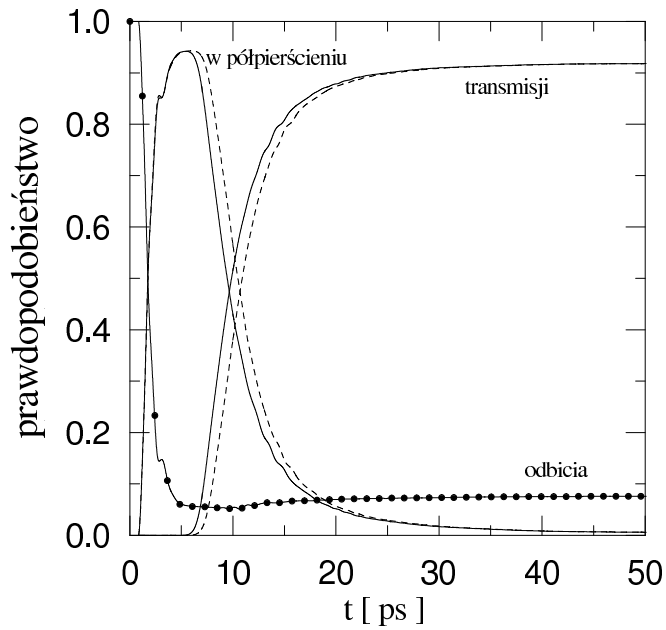
Bardzo dobrym przybliżeniem powyższego wyrażenia jest:

$$T(B, t) = \sum_{q=1}^n \sum_{p=a}^b c_q^*(t) c_p(t) S_{qp}, \quad (3.24)$$

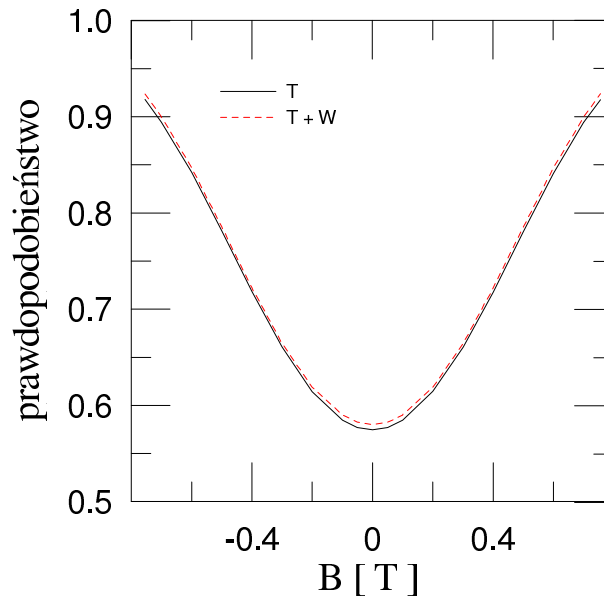
gdzie n jest ilością wszystkich centrów determinujących geometrię półpierzścienia a sumowanie po p odbywa się w granicach oznaczonych przez a i b , przy czym ($y_a > Y$) a b



Rys. 3.5: Mapy gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w półpierścieniu. Klatki (a)-(d) oraz (e)-(h) zostały wykonane odpowiednio w chwilach czasowych 2.11ps, 4.82ps, 6.68ps oraz 9.52ps. Rysunki (a)-(d) przedstawiają ruch cząstki w polu magnetycznym o indukcji $B = 0.7549\text{T}$ natomiast mapy (e)-(h) ilustrują wyniki obliczeń dla pola magnetycznego $B = -0.7549\text{T}$.



Rys. 3.6: Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu wewnątrz półpierścienia oraz przed (krzywa "odbicia") i za nim (krzywa "transmisji") w funkcji czasu dla $B = \pm 0.7549T$. Linia ciągła (przerywana) pokazuje wyniki dla $B > 0$ ($B < 0$). Prawdopodobieństwo odbicia dla $B < 0$ jest zaznaczone kropkami.



Rys. 3.7: Prawdopodobieństwo transmisji elektronu przez lewy półpierścień w funkcji indukcji pola magnetycznego (linia czarna ciągła). Suma prawdopodobieństw wewnątrz i za półpierścieniem oznaczona jest linią czerwoną przerywaną.

to numer ostatniego centrum. Podobnie liczone były części pakietu wewnątrz półpierścienia i przed nim.

Wyniki przedstawione na rysunku 3.6 pokazują, że część pakietu przed pierścieniem jest w każdej chwili czasowej identyczna dla obydwu orientacji pola magnetycznego. Siła Lorentza wywołuje opóźnienie czasowe w transporcie elektronu dla $B < 0$. Półpierścień nie wiąże w sposób trwały nawet drobnej części pakietu. Ponieważ przed pierścieniem jest w każdej chwili taka sama część pakietu niezależnie od znaku B , równość uzyskać musimy również dla części przetransmitowanej gdy pakiet całkowicie opuści półpierścień. Widzimy, że relacje mikroodwracalności są chwilowo łamane:

$$T(B, t) \neq T(-B, t). \quad (3.25)$$

Część pakietu, która przeszła przez półpierścień w chwili t zależy od zwrotu pola magnetycznego, ale w granicy dużych t uzyskujemy ten sam wynik niezależnie od znaku B

$$T(B) = T(-B), \quad (3.26)$$

z

$$T(B) \equiv T(B, t \rightarrow \infty) \quad (3.27)$$

$$T(-B) \equiv T(-B, t \rightarrow \infty). \quad (3.28)$$

Ostatni wykres w tym rozdziale (rys. 3.7) przedstawia prawdopodobieństwo transmisji w funkcji indukcji pola magnetycznego. Prawdopodobieństwo to zostało oznaczone literą T . Było ono obliczane zgodnie ze wzorem (3.23), w którym parametr a odpowiadał centrum znajdującym się tuż za półpierścieniem a parametr b był równy n , czyli ilości wszystkich centrów. Jak widać wykres jest symetryczny bo $T(B) = T(-B)$. T rośnie z polem bo siła Lorentza asystuje w transporcie – wstrzykuje pakiet do wygiętej części drutu. Na wykresie widnieje również krzywa przedstawiająca sumę prawdopodobieństw: transmisji i wewnątrz półpierścienia ($T+W$). Nasze rachunki przerywamy po skończonym czasie. W nie jest jeszcze równe dokładnie zero. Wartość $T + W$ to ograniczenie od góry dokładnego prawdopodobieństwa transmisji, jakie uzyskalibyśmy gdyby cała część W ostatecznie przeszła za półpierścień (w rzeczywistości część W wraca przed wygiętą strukturę). Dla induktonu będziemy mogli stwierdzić złamanie relacji mikroodwracalności, tylko gdy różnice w transmisji dla $\pm B$ przekroczą margines błędu dany przez W .

Rozdział 4

Transport induktonu przez półpierścień kwantowy w obecności pola magnetycznego

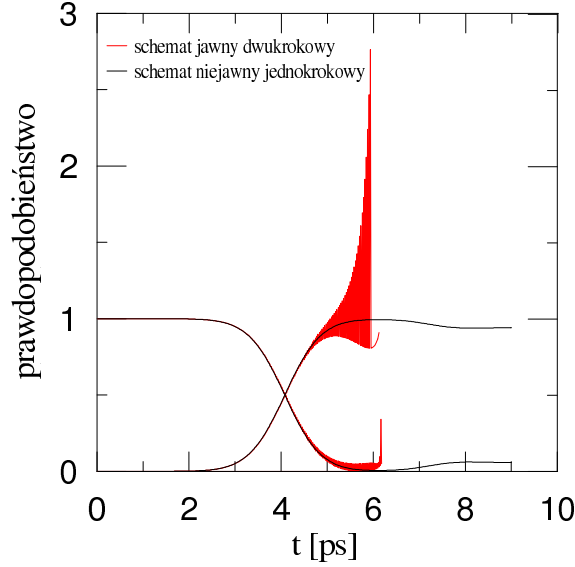
4.1 Wprowadzenie

Przedmiotem tego rozdziału jest transport induktonu przez wygięty drut kwantowy w obecności jednorodnego pola magnetycznego. W szczególności symulacje komputerowe miały dać odpowiedź na pytanie: Czy dla induktonu prawdopodobieństwo transmisji $T(B)$ jest parzystą funkcją pola magnetycznego? Czy w tym przypadku spełniona będzie relacja mikroodwracalności (tzw. relacja Onsagera) $T(B) = T(-B)$? Wiadomo, że dla układów opisywanych liniowym równaniem Schrödingera relacja Onsagera jest zawsze spełniona [2] ale indukton jest obiektem nieliniowym więc odpowiedź na zadane wyżej pytanie nie jest oczywista. Ostatecznie problem rozstrzygają wyniki symulacji zaprezentowane w tym rozdziale.

4.2 Sposób prowadzenia obliczeń

Symulacja sprowadza się do rozwiązania zaleźnego od czasu równania Schrödingera (3.1), w którym hamiltonian wyraża się wzorem (2.9) z $V(x, y)$ zadanym wzorem (2.5). Rozwiązanie tego problemu uzyskujemy wykorzystując metodę numeryczną opisaną w poprzednim rozdziale.

W czasie obliczeń z metalem natknęliśmy się na nowy problem natury numerycznej. Polegał on na pojawieniu się niestabilności schematu (3.11) przy zmniejszeniu pędu



Rys. 4.1: Eksplozja prawdopodobieństwa spowodowana niestabilnością schematu jawnego dwukrokowego (linie czerwone) oraz poprawne wyniki uzyskane schematem niejawnym jednokrokovym (linie czarne).

pakietu $\langle \hbar k \rangle$ z $k = 0.05/nm$ do $k = 0.025/nm$. Niestabilność udało się wyeliminować wpisując w dotychczasowy schemat, schemat Cranka-Nicolsona w postaci:

$$\mathbf{S}\mathbf{c}(t + dt) = \mathbf{S}\mathbf{c}(t) - \frac{1}{2\hbar}idt [\mathbf{H}(t + dt)\mathbf{c}(t + dt) + \mathbf{H}(t)\mathbf{c}(t)]. \quad (4.1)$$

Po prawej stronie tego przepisu występuje uśredniony iloczyn hamiltonianu i funkcji falowej z chwili (t) i $(t + dt)$. W obliczeniach, w których uwzględniamy oddziaływanie elektronu z metalem hamiltonian zależy od czasu – w każdej chwili czasowej zmienia się $V(x, y)$ (2.5). Ponieważ prawa strona (4.1) zawiera $\mathbf{H}(t + dt)$ i $\mathbf{c}(t + dt)$ należy przeprowadzić samouzgodnienie tj. iterować powyższy wzór tak aby $\mathbf{c}(t + dt)$ osiągnęło ustaloną wartość. We wzorze (4.1) występują dwa potencjały oddziaływania elektron–metal, z których jeden odpowiada chwili poprzedniej (t) a drugi bierzącej $(t + dt)$.

Schemat Cranka-Nicolsona to schemat niejawnny jednokrokový w odróżnieniu od opisanego w poprzednim rozdziale schematu jawnego dwukrokowego (3.11). Schematy niejawne na ogół gwarantują lepszą stabilność ale trudniej je rozwiązać (w naszym przypadku konieczne jest samouzgodnienie równania). Stosując to podejście udaje się uniknąć niestabilności. Wykres 4.1 pokazuje stabilizację rozwiązania przez schemat niejawnny. Na wykresie 4.1 widać prawdopodobieństwo znalezienia induktonu wewnątrz półprzewodnika oraz przed i na nim w funkcji czasu. Prawdopodobieństwo liczone było

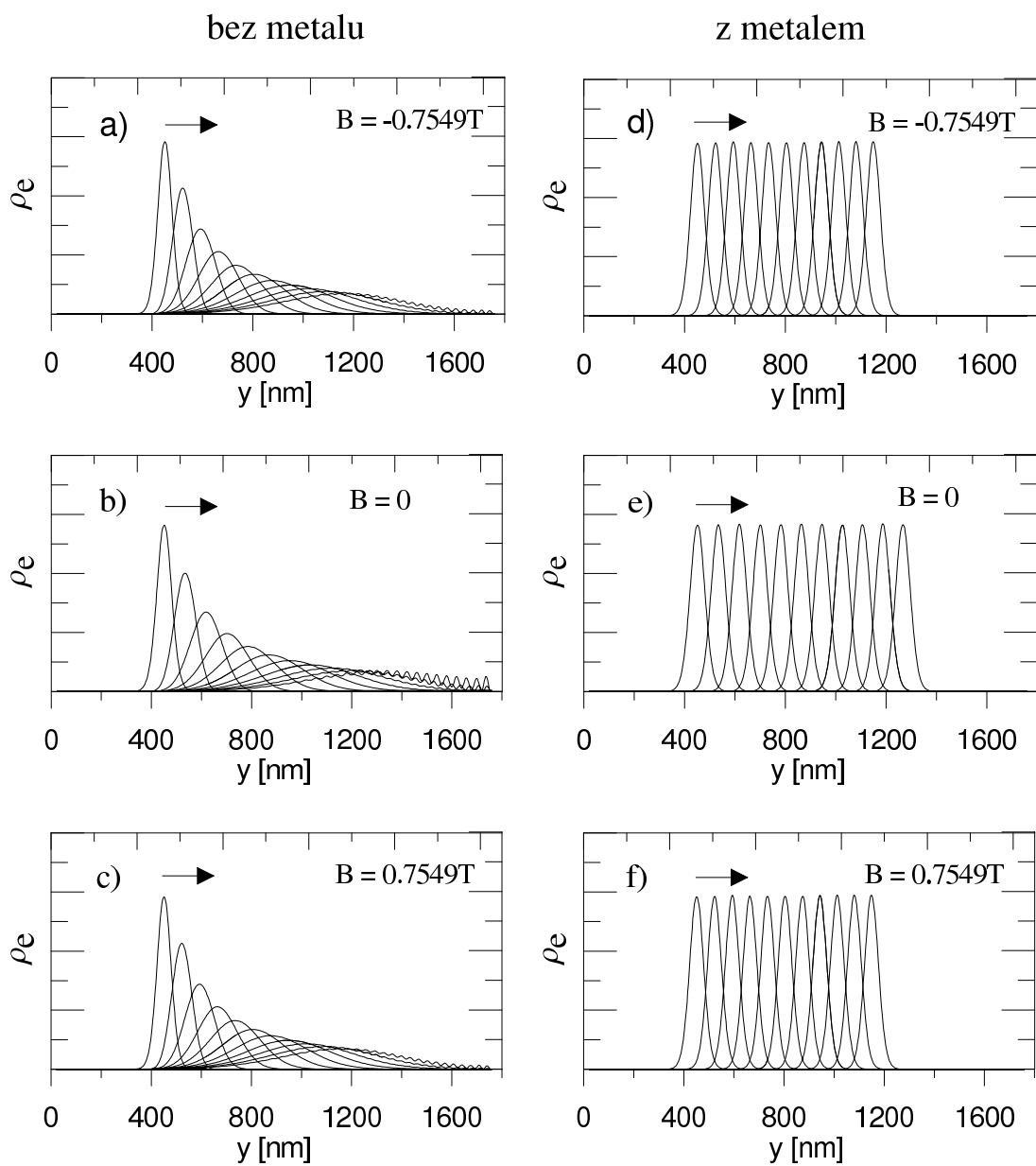
według wzoru (3.23). W chwili początkowej paczce falowej nadany został średni pęd $\langle \hbar k \rangle$ z $k = 0.025/\text{nm}$ ($\hbar^2 k^2 / 2m^* = 0.36\text{meV}$). Linia czerwona pokazuje wyniki uzyskane schematem jawnym dwukrokovym (3.11). Jak widać po pewnym czasie dochodzi do eksplozji prawdopodobieństwa. Linia czarną oznaczone są poprawne wyniki uzyskane schematem niejawnym jednokrokovym (4.1).

4.3 Otrzymane wyniki

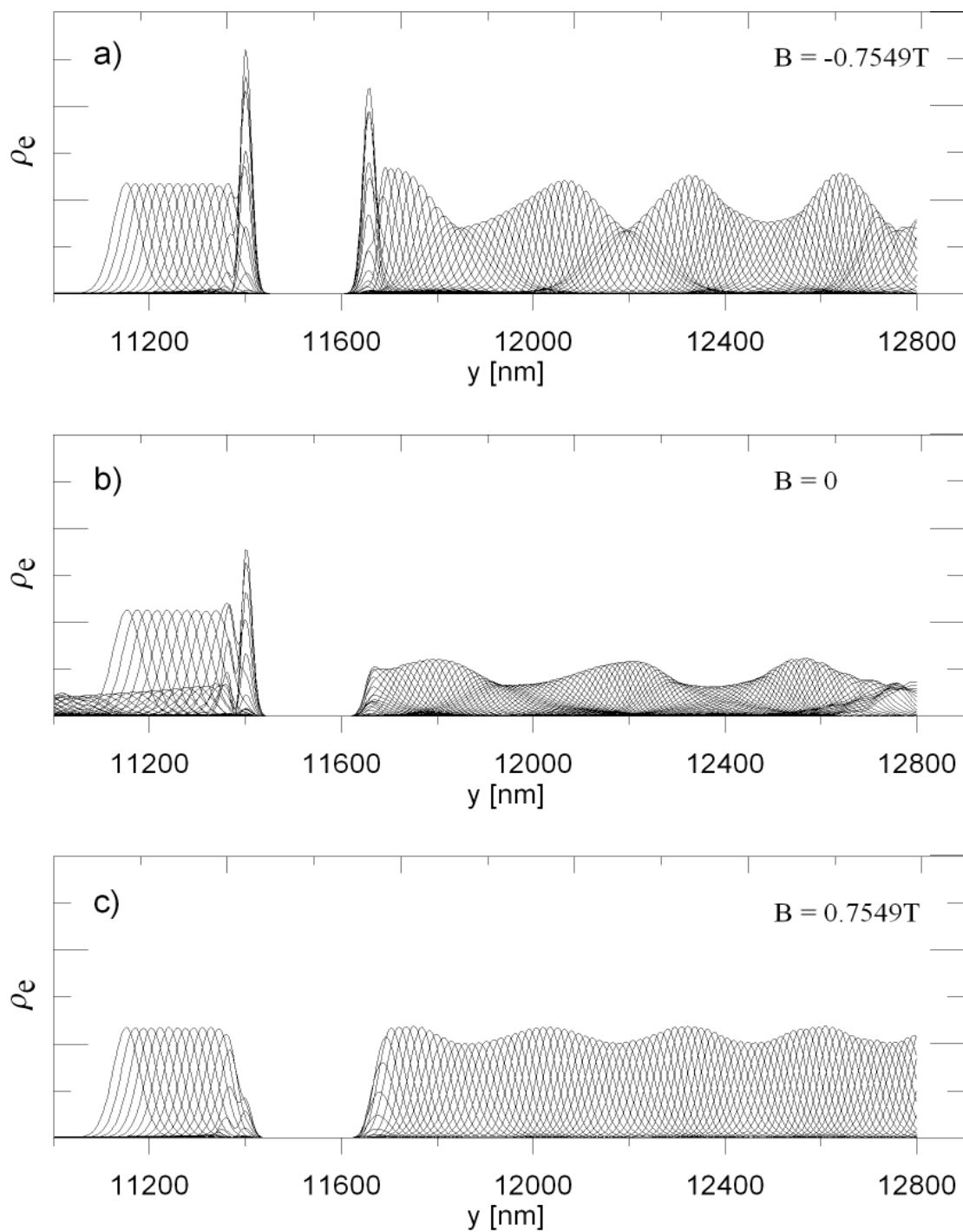
W obliczeniach, których wyniki prezentowane są poniżej warunek początkowy stanowił stacjonarny stan własny Ψ induktonu uzyskany w procedurze samouzgodnienia. Mnożąc Ψ przez falę płaską $\exp(iky)$ ($k = 0.05/\text{nm}$, $\hbar^2 k^2 / 2m^* = 1.42\text{meV}$) nadajemy pakietowi średni pęd $\langle \hbar k \rangle$. W chwili początkowej pakiet został zlokalizowany tuż przed półprzestrzenią. Płaszczyzna metalowa była umieszczona w odległości $d = 20\text{nm}$ od półprzestrzeni.

Pierwszy z wykresów (rys. 4.2) prezentuje różnicę w zachowaniu pakietu w czasie ruchu w prostym przewodzie przed półprzestrzenią (pakiet porusza się w kierunku oznaczonym czarną strzałką) bez oddziaływania z metalem (wykresy 4.2(a,b,c)) oraz w przewodzie, nad którym znajduje się płaszczyna metalowa (wykresy 4.2(e,f,g)). W przypadku bez metalu pakiet po starcie szybko ulega rozmyciu. Inaczej jest w sytuacji, w której uwzględniamy metal. Dzięki efektowi induktonowemu pakiet zachowuje swój kształt w czasie przemieszczania się. Na wykresie widzimy całą długość drutu, która wynosi 1760nm . Symulacja za każdym razem była przerywana w tym samym momencie. Pomimo to gdy pakiet poruszał się w zerowym polu magnetycznym (patrz rys. 4.2(b,e)) zawędrował nieco dalej niż w obecności pola czy to mniejszego czy większego od zera. Jest to skutek zaniżenia zadanego pędu pakietu w wyniku wyrzutowania stanu własnego na bazę gaussianów.

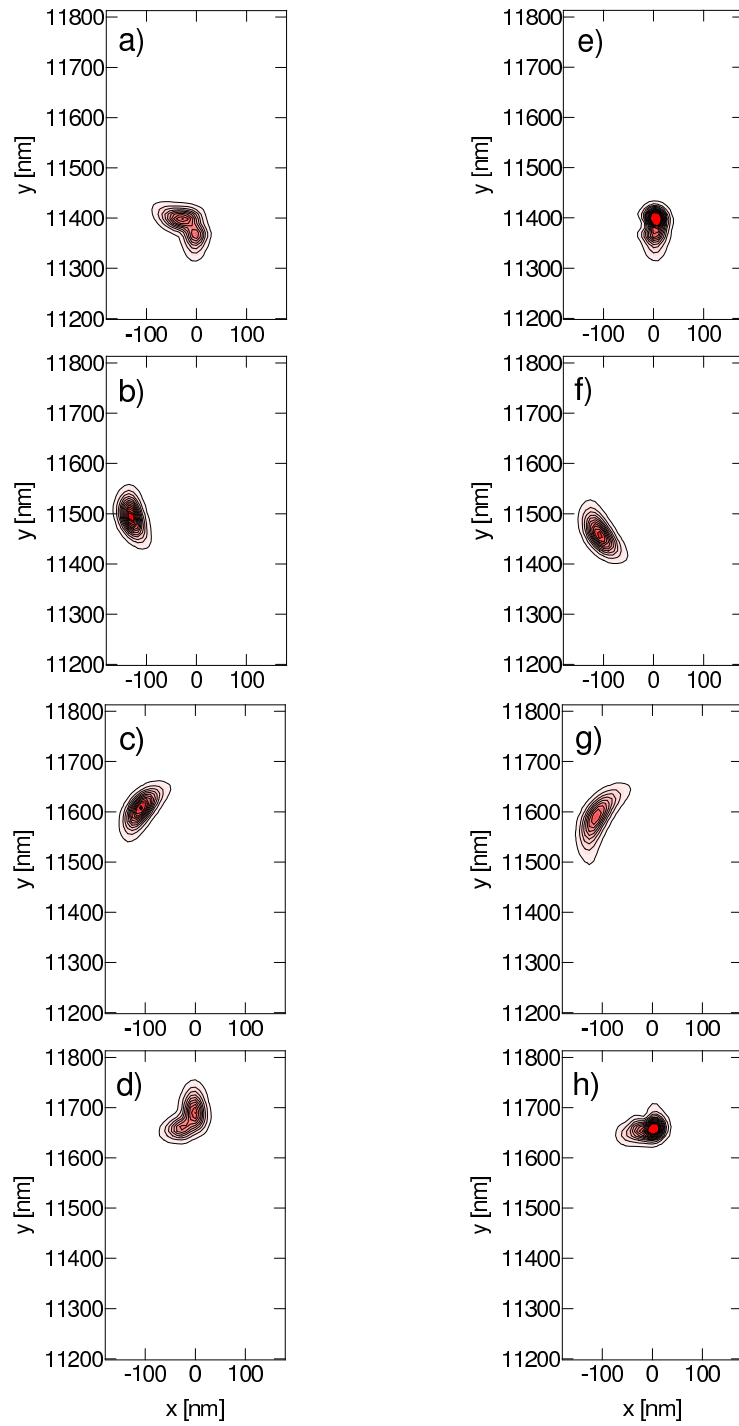
Tak samo jak rysunek 4.2 tak i rysunek 4.3 pokazuje kolejne zdjęcia kształtu paczki falowej wykonane wzdłuż osi $x = 0$ ale tym razem przewód jest wygięty i między $y = 11400\text{nm}$ a $y = 11600\text{nm}$ odchodzi od osi $x = 0$ stąd przerwa na rysunkach. Pakiet startuje z lewej części rysunku. Rysunki 4.3(a,b,c) zostały wykonane dla różnych pól magnetycznych. Niezależnie od wartości pola paczka początkowo zachowuje swój kształt (początkowo tzn. zanim dojdzie do wygięcia drutu). Dla $B = 0$ (rys. 4.3b) widać wzrost wartości pakietu gdy wpada on na wygięcie drutu. Gdy pakiet wychodzi po drugiej stronie widać, że "oddycha" – zmienia swój kształt w czasie. Rozpraszanie pakietu na wygięciu destabilizuje jego kształt. Zauważmy, że tylko na rysunku 4.3b widać część pakietu odbitego od wygięcia. W wyższych polach pakiet w całości przechodzi



Rys. 4.2: Rozkład gęstości ładunku elektronu $\rho_e(x=0, y)$ w kolejnych chwilach czasowych. Wykresy przedstawiają kształt pakietu poruszającego się w prostym drucie bez oddziaływania z metalem (a,b,c) i z metalem (d,e,f) w polu magnetycznym $B = -0.7549\text{T}$, $B = 0\text{T}$ oraz $B = 0.7549\text{T}$.



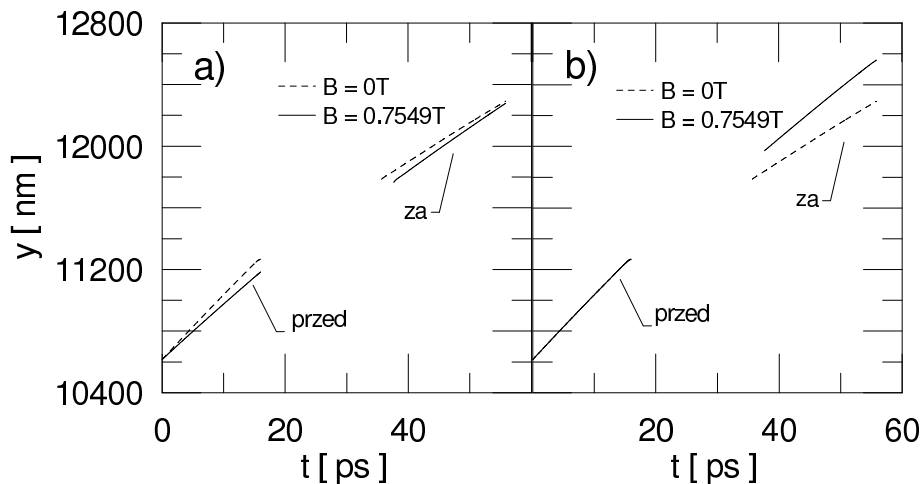
Rys. 4.3: Rozkład gęstości ładunku elektronu $\rho_e(x=0, y)$ w kolejnych chwilach czasowych. Wykresy przedstawiają kształt pakietu odpowiednio przed i za lewym półprzestrzeniem w polu magnetycznym $B = -0.7549\text{T}$, $B = 0$ oraz w polu $B = 0.7549\text{T}$.



Rys. 4.4: Mapy gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w półpłaszczyźnie. Klatki (a)-(d) oraz (e)-(h) zostały wykonane odpowiednio w chwilach czasowych 3.39ps, 5.81ps, 7.74ps oraz 9.67ps. Rysunki (a)-(d) przedstawiają ruch cząstki w polu magnetycznym o indukcji $B = 0.7549\text{T}$ natomiast mapy (e)-(h) ilustrują wyniki obliczeń dla pola magnetycznego $B = -0.7549\text{T}$.

przez wygięcie. Również dla zwykłej paczki pole stabilizowało pakiet. Zauważmy, że dla $B > 0$ pakiet przechodzi przez półpierścień prawie bez zmiany kształtu. Siła Lorentza w tej sytuacji jest skierowana tak, że pakiet wchodzi do półpierścienia bezpośrednio z drutu. Dla $B < 0$ natomiast [panel (a)] konieczna jest zmiana kierunku poruszania się pakietu zanim siła Lorentza go odeśle do zagiętej części drutu. W porównaniu z (c) na (a) widać piki zarówno przed wygięciem jak i za wygięciem. Zdjęcia objęły chwile gdy pakiet zmieniał kierunek ruchu. W (c) zmiana nie była konieczna. W porównaniu z (c) na (a) widać również oddychanie pakietu za półpierścieniem, które jest wynikiem chwilowej kompresji paczki przy odbiciach.

Proces przejścia przez półpierścień ilustrują dodatkowo mapy gęstości prawdopodobieństwa 4.4(a)-(d) oraz 4.4(e)-(h), które wykonane zostały dla kilku wybranych chwil czasowych. Widać na nich opóźnienie w ruchu pakietu dla $B < 0$ związane z odbiciami od wygięć.



Rys. 4.5: Wartość oczekiwana położenia induktonu przed i za lewym półpierścieniem pod nieobecność pola magnetycznego (linia przerywana) i w polu magnetycznym o indukcji $B = 0.7549\text{T}$ (linia ciągła). Wykresy (a) i (b) różnią się wartością parametru k przyjętego w obliczeniach dla pakietów w polu magnetycznym.

Rysunek 4.5 przedstawia wartość oczekiwaną położenia induktonu przed i za półpierścieniem w funkcji czasu (liczymy średnie położenie tej części pakietu, która jest za lub przed półpierścieniem). Dla potrzeb tego rysunku normalizacja została przeprowadzona oddzielnie dla obydwu części pakietu. W chwili początkowej paczce falowej nadany został średni pęd $\langle \hbar k \rangle$ z $k = 0.025/\text{nm}$ ($\hbar^2 k^2 / 2m^* = 0.36\text{meV}$).

Wykres 4.5a został stworzony dla tej samej wartości parametru k zarówno dla $B = 0$ jak i $B = 0.7549\text{T}$. Jak wyjaśniliśmy poprzednio, w wyniku rzutowania warunku

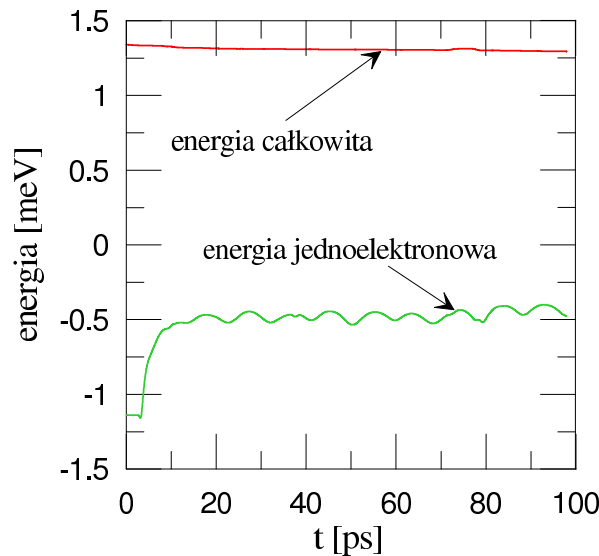
początkowego z nominalnym wektorem falowym k na bazę wielocentrową uzyskujemy nieco mniejsze pędy dla większego B . Na rysunku 4.5a widzimy, że dla $B > 0$ pakiet porusza się nieco wolniej. Widzimy, że w obydwu przypadkach z polem i bez pola pakiet za półpierścieniem porusza się wolniej. Część energii kinetycznej ruchu postępowego idzie na "oddychanie" pakietu omówione powyżej. Oddychanie można rozumieć jako wynik superpozycji dwóch stanów stacjonarnych induktonu. Domieszka stanu wzbudzonego wymaga dostarczenia energii. Na rysunku 4.4a widać, że redukcja prędkości jest większa dla przypadku bez pola. Jak widzieliśmy w obecności pola $B > 0$ oddychanie jest znacznie słabsze.

Wykres 4.5b przedstawia to samo z tym, że tym razem nominalne k w warunku początkowym zostało podniesione tak, aby zniwelować efekt redukcji pędu przy rzutowaniu. Dla przyjętego na rysunku $k = 0.0292/\text{nm}$ pakiet w polu o indukcji $B = 0.7549\text{T}$ porusza się tak jak dla $k = 0.025$ przy $B=0$. Na tym rysunku wyraźniej widać różnicę w stopniu redukcji prędkości pakietu za półpierścieniem dla $B = 0$ i $B \neq 0$.

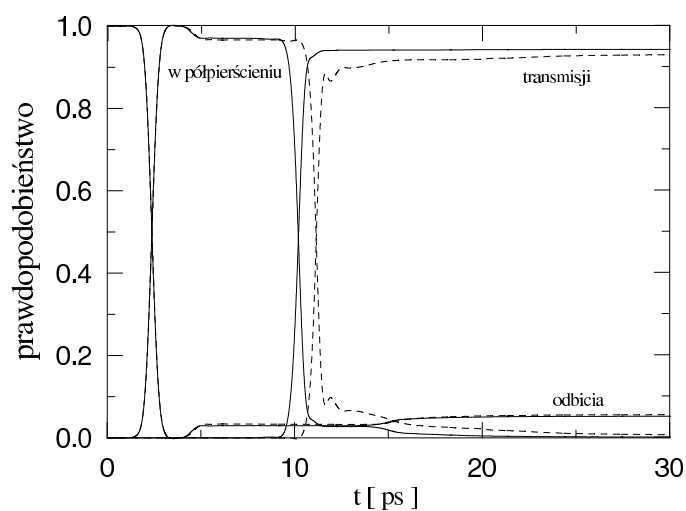
Ponadto obliczona została energia całkowita E_{tot} i jednoelektronowa E (rys.4.6) według wzoru (4.2). Zgodnie z teorią z pracy [1] w czasie ruchu zachowana jest energia całkowita E_{tot} .

$$E_{tot} = E - W = \langle \psi | T + V | \psi \rangle - \frac{1}{2} \langle \psi | V | \psi \rangle. \quad (4.2)$$

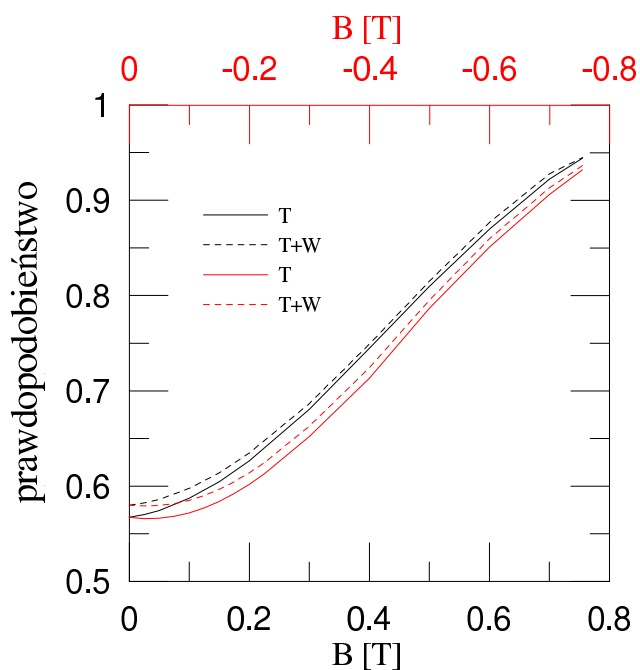
Energia E_{tot} powinna być dokładnie stała, u nas są widoczne pewne zmiany, które są wynikiem ograniczonej precyzji całkowania oddziaływania.



Rys. 4.6: Wykres energii całkowitej i jednoelektronowej w czasie przepływu induktonu przez półpierścień pod nieobecność pola magnetycznego.



Rys. 4.7: Prawdopodobieństwo znalezienia induktonu wewnątrz półpierscienia oraz przed (krzywa "odbicia") i za nim (krzywa "transmisji") w funkcji czasu dla $B = \pm 0.7549T$. Linia ciągła (przerywana) pokazuje wyniki dla $B > 0$ ($B < 0$).



Rys. 4.8: Prawdopodobieństwo transmisji induktonu przez lewy półpierscień w polu magnetycznym. Linia przerywaną oznaczono sumę prawdopodobieństw wewnątrz i za pierścieniem.

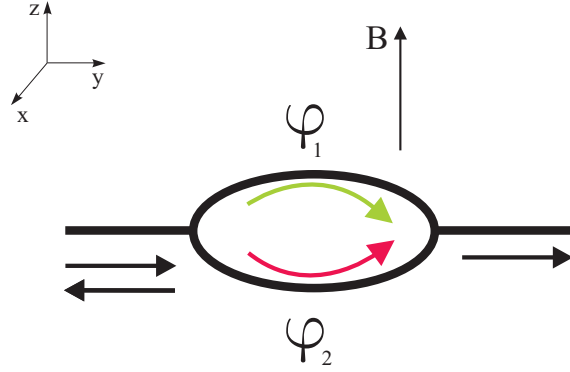
Na rysunku 4.7 pokazane są części pakietu wewnątrz półpierścienia, za nim i przed nim dla przeciwnych zwrotów pola magnetycznego. Linie przerywane odpowiadają polu $B = -0.7549\text{T}$ a ciągłe $B = 0.7549\text{T}$. Widać opóźnienie dla ujemnego B , podobnie jak na rysunku 3.6 pod nieobecność metalu. Różnica między tymi rysunkami polega na tym, że część pakietu przed pierścieniem (opisana jako "odbicia") na rysunku zależy od zwrotu pola. Widzimy, że dla ujemnego pola dla $t = 30\text{ps}$ za pierścieniem (krzywa opisana jako "transmisji") jest mniejsza część pakietu niż przed. Ponieważ również większa część pakietu jest wewnątrz półpierścienia dla $B < 0$ istnieje szansa, że część pakietu, która przeszła przez wygięcie będzie podobna w obydwu przypadkach. Okazuje się jednak, że nawet gdyby cała część pakietu chwilowo przebywająca w półpierścieniu dla $B < 0$ przeszła za półpierścień, to i tak transmisja nie dorówna tej, otrzymanej dla $B > 0$.

Wykres 4.8 prezentuje prawdopodobieństwo transmisji (linia ciągła) oraz sumę prawdopodobieństw transmisji i wewnątrz półpierścienia w funkcji indukcji pola magnetycznego. Tak jak w przypadku bez metalu tak i tu na wykresie przedstawiającym prawdopodobieństwo transmisji prezentujemy krzywą przedstawiającą sumę prawdopodobieństw: transmisji i wewnątrz półpierścienia (T+W). Wskazuje ona największą wartość prawdopodobieństwa transmisji jaką moglibyśmy otrzymać gdyby symulacja trwała nieskończenie długo. Widzimy, że przy $|B| > 0.1\text{T}$ oszacowanie od dołu prawdopodobieństwa transmisji T dla $B > 0$ jest większe niż oszacowanie od góry prawdopodobieństwa transmisji T dla $B < 0$. Stwierdzamy, że indukton łamie relację mikroodwracalności.

4.4 Wpływ efektu induktonowego na interferencję Aharonova-Bohma

Z punktu widzenia fizyki bardzo ciekawa jest geometria pierścienia kwantowego, gdyż możemy w niej obserwować efekt Aharonova-Bohma [12]. W otwartym pierścieniu kwantowym, czyli takim który połączony jest z dwoma przewodami tak jak to jest pokazane na rysunku 4.9 objawia się on oscylacjami przewodnictwa.

Założmy, że pakiet porusza się w kierunku pierścienia z lewej strony (rys. 4.9). U wejścia do pierścienia wstrzykiwany jest do obu ramion pierścienia. Fazy amplitud prawdopodobieństwa w ramionach wynoszą φ_1 i φ_2 . Przy wyjściu z pierścienia dochodzi do spotkania części pakietu z obu ramion i interferencji amplitud. Ta interferencja może być konstruktywna, destruktywna lub pośrednia. Konstruktywna interferencja odpo-



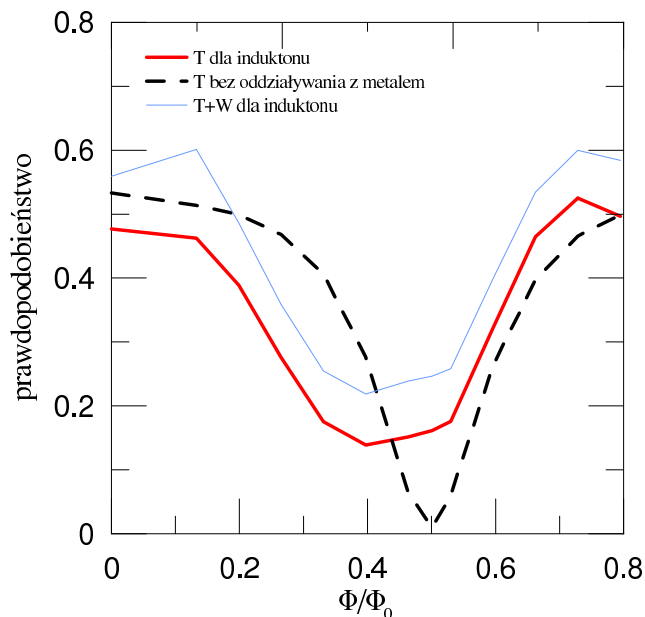
Rys. 4.9: Schemat otwartego pierścienia kwantowego penetrowanego przez jednorodne pole magnetyczne.

wiada wysokiej konduktancji pierścienia a destruktywna niskiej. Rodzaj interferencji określony jest przez różnicę faz $\Delta\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ a ta z kolei zdeterminowana jest przez wartość strumienia pola magnetycznego penetrującego pierścień a konkretnie, wyraża się ona poprzez potencjał wektorowy w sposób następujący:

$$\Delta\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \Phi, \quad (4.3)$$

gdzie $\Phi_0 = h/e$ to kwant strumienia magnetycznego a Φ jest równe strumieniowi pola magnetycznego przenikającego przez powierzchnię o polu πr^2 (w naszym przypadku $r = 132\text{nm}$).

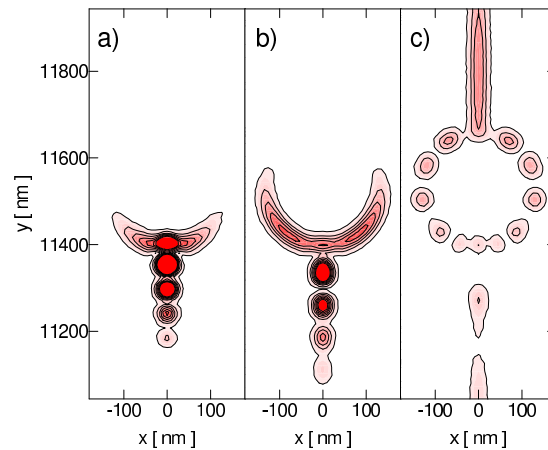
Wszystkie obliczenia były przeprowadzane tak jak to opisane było wyżej w tym rozdziale i rozdziale poprzednim z wyjątkiem tego, że tym razem centra były rozmieszczone tak jak na rysunku 2.3c. Promień pierścienia kwantowego wynosił $r = 132\text{nm}$. Dla obliczeń z metalem przyjęliśmy $d = 20\text{nm}$. Również pęd jaki został nadany w chwili początkowej był identyczny jak przy poprzednich obliczeniach. Jak widać na wykresie przedstawiającym prawdopodobieństwo transmisji (rys. 4.10), gdy nie ma oddziaływania z metalem dla pola magnetycznego, dla którego strumień przez powierzchnię pierścienia wynosi $\Phi = \Phi_0/2$ dochodzi do destruktywnej interferencji i prawie całkowitej blokady transportu elektronu przez pierścień. W wyniku oddziaływania z metalem również pojawia się destruktywna interferencja przy czym nie blokuje ona całkowicie transportu. Drobne różnice w częściach pakietu, które weszły do lewego i prawego ramienia powodują pojawienie się innego potencjału indukowanego z lewej i prawej strony. Faza, którą zbierają części pakietu w obydwu ramionach od potencjału wektorowego jest przeciwna. Gdyby faza zebrana od potencjału indukowanego była identyczna uży-



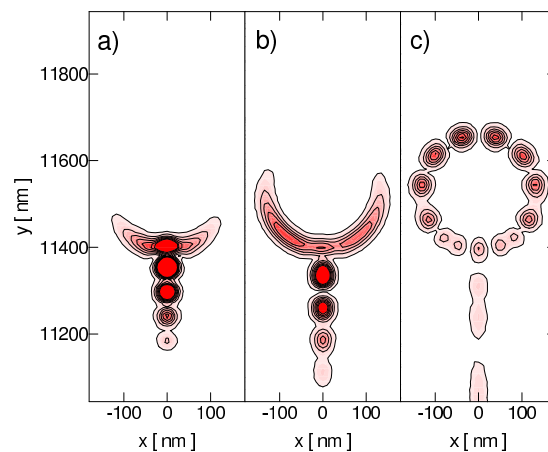
Rys. 4.10: Prawdopodobieństwo transmisji pakietu falowego (linia czarna przerywana) i induktonu (linia ciągła czerwona) przez pierścień kwantowy w funkcji strumienia pola magnetycznego. Linia niebieską oznaczono sumę prawdopodobieństwa transmisji i prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w pierścieniu.

skalibyśmy całkowicie destruktywną interferencję przy wyjściu – jak pod nieobecność metalu. Ale faza od potencjału indukowanego jest różna. Dlatego pakiety nie spotykają się dokładnie w antyfazie przy wyjściu i część pakietu z niego wychodzi. Bardzo dobrze opisaną sytuację obrazują mapy gęstości prawdopodobieństwa 4.11-4.14, które zostały wykonane zarówno dla przypadku z metalem jak i bez. Pierwszy z wykresów (patrz rys. 4.11) przedstawia transport elektronu przez pierścień bez oddziaływania z metalem i polem magnetycznym. Widzimy, że pakiet jest wstrzykiwany symetrycznie do obu ramion pierścienia, a w czasie jego wychodzenia dochodzi do interferencji konstruktywnej i niezerowej konduktancji. Inaczej jest w polu magnetycznym, którego strumień magnetyczny przez powierzchnię wyznaczoną przez pierścień wynosi $\Phi = \Phi_0/2$ (rys. 4.12(a)-(c)). Tym razem widoczny jest już wpływ siły Lorentza, który ze względu na kierunek pola magnetycznego objawia się asymetrią we wstrzykiwaniu pakietu do obu ramion. Pakiet ma większą tendencję do wpływania w lewe ramię (najlepiej jest to widoczne na mapach 4.12a i 4.12b). Strumień $\Phi = \Phi_0/2$ odpowiada polu magnetycznemu o indukcji $B = 0.0378$ T i został wybrany nie przez przypadek ponieważ właśnie w takim polu konduktancja pierścienia półprzewodnikowego jest najmniejsza (patrz wykresy 4.10 i 4.12c). Dla pokazania jak wygląda transport induktonu przez pierścień

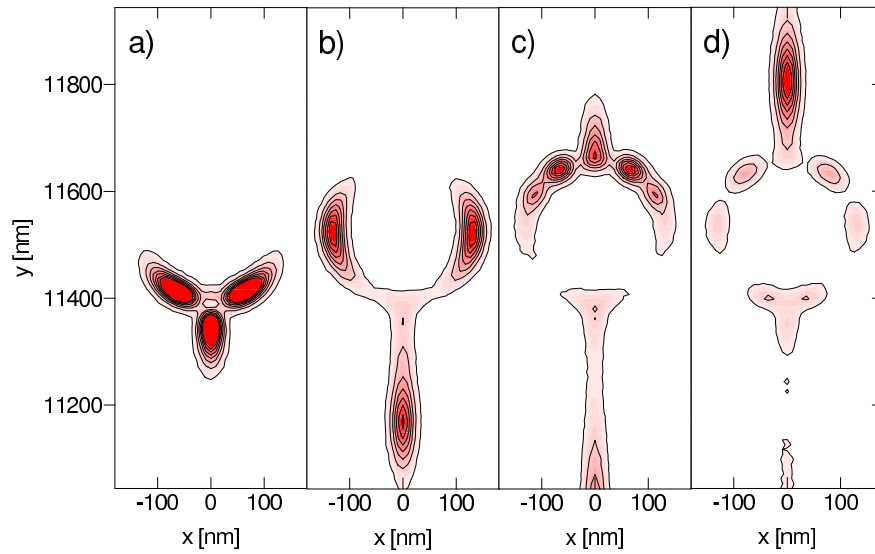
kwantowy wykonaliśmy mapy gęstości prawdopodobieństwa 4.13 i 4.14. Tak samo jak w transporcie elektronu pod nieobecność metalu tak i tutaj gdy nie ma oddziaływania z polem magnetycznym pakiet jest wstrzykiwany symetrycznie do obu ramion a przewodność pierścienia jest duża (rys. 4.13). Natomiast w polu magnetycznym, w którym zgodnie z teorią Aharonova-Bohma w przypadku bez metalu dochodzi do blokady przewodnictwa, efekt induktonowy powoduje, że prawdopodobieństwo znalezienia elektronu za pierścieniem jest znacząco różne od zera (rys. 4.14).



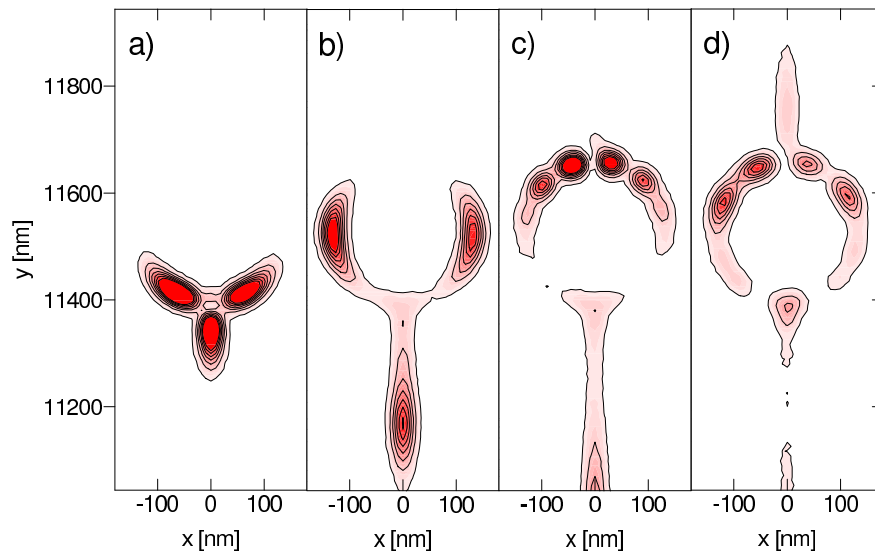
Rys. 4.11: Gęstość prawdopodobieństwa dla pakietu falowego uformowanego metodą samouzgodnienia o energii kinetycznej $\hbar^2 k^2 / 2m^* = 1.42 \text{ meV}$ transportowanego przez pierścień kwantowy o promieniu 132nm w zerowym polu magnetycznym. (a)-(c) odpowiadają $t=2.90, 3.87$ i 9.19 ps . Skala dla ładunku jest taka sama na każdym z wykresów.



Rys. 4.12: Takie samo jak rys.4.11 ale dla $B = 0.0378 \text{ T}$ co odpowiada $\Phi = \Phi_0/2$.



Rys. 4.13: Gęstość prawdopodobieństwa dla pakietu falowego uformowanego metodą samouzgodnienia o energii kinetycznej $\hbar^2 k^2 / 2m^* = 1.42 \text{meV}$ transportowanego przez pierścień kwantowy o promieniu 132nm nad którym znajduje się płaszczyzna metalowa w zerowym polu magnetycznym. (a)-(d) odpowiadają $t=3.87, 5.81, 8.22$ i 11.13ps . Skala dla ładunku jest taka sama na każdym z wykresów.



Rys. 4.14: Takie samo jak rys.4.13 ale dla $B = 0.0378 \text{T}$ co odpowiada $\Phi = \Phi_0/2$.

Rozdział 5

Wnioski i podsumowanie

W pracy przedstawione zostało studium rozpraszania pakietu elektronowego na wygięciu drutu kwantowego w obecności zewnętrznego pola magnetycznego prostopadłego do płaszczyzny uwięzienia. W obecności pola magnetycznego pakiet elektronowy porusza się pod wpływem siły Lorentza, której zwrot zależy od zwrotu pola magnetycznego. Rachunki zostały wykonane w bazie funkcji gaussowskich po zamianie problemu różniczkowego (równania Schrödingera zależnego od czasu) na problem algebraiczny. Wybór centrów w bazie gaussowskiej posłużył do wymodelowania drutu kwantowego – prostego i wygiętego w półpierścieni oraz tworzącego pierścieni kwantowy.

Wyjaśniliśmy, że w przyjętej bazie działanie siły Lorentza na ruch pakietu ograniczone jest do obszaru wygięcia struktury. W naszym modelu w drutach doprowadzających pakiet do obiektu rozpraszającego siły magnetyczne nie są aktywne.

Dla struktury, która nie ma symetrii lewo-prawo (np. dla wygiętego drutu kwantowego) proces rozpraszania dla pola magnetycznego skierowanego do góry i na dół jest inny. Pokazaliśmy, że dla pakietu opisanego liniowym równaniem Schrödingera prawdopodobieństwo transmisji nie zależy od zwrotu pola magnetycznego, zgodnie z relacjami mikroodwracalności. Ponadto, część pakietu, który pozostaje przed obiektem rozpraszającym jest dokładnie identyczna przy obydwu zwrotach pola.

Następnie wprowadziliśmy do modelu nieskończoną metalową płytę, która przykrywa modelowany drut kwantowy. Oddziaływanie pakietu elektronowego z metalem zostało uwzględnione poprzez potencjał elektrostatyczny związany z gęstością ładunku pakietu. W bazie gaussowskiej rozwiązaliśmy problem własny dla stanu podstawowego induktonu. Pokazaliśmy, że może on się poruszać w drucie bez zmiany kształtu.

Zbadaliśmy rozpraszanie induktonu dla przeciwnych zwrotów pola magnetycznego. Dla induktonu część pakietu przed obiektem rozpraszania zależy od pola magnetyczne-

go, w przeciwieństwie do ruchu pakietu bez metalu. Pokazaliśmy, że prawdopodobieństwo transmisji dla induktonu zależy od zwrotu pola. Wyniki dla prawdopodobieństwa transmisji przy przeciwnych zwrotach pola różnią się w sposób wykraczający poza granice błędu wyznaczone przez część pakietu pozostającą w wygiętym drucie pod koniec symulacji.

Indukton łamie relacje mikroodwracalności. Informacja ta może posłużyć do jego wykrycia eksperymentalnego.

Rozważyliśmy również transport przez pierścień kwantowy. Dla połowy kwantu strumienia pola magnetycznego przenikającego przez pierścień, transport pakietu opisanego liniowym równaniem Schrödingera jest zablokowany przez efekt Aharonova-Bohma. Siła Lorentza wywołuje asymetrię w częściach pakietu, które zostają wprowadzone do lewego i prawego ramienia pierścienia. Potencjał oddziaływania z metalem jest inny w obydwu ramionach. Inna jest również faza zebrana od tego potencjału przez pakiet. Z powodu tej różnicy faz interferencja przy wyjściu z pierścienia nie jest całkowicie destruktywna. Efekt induktonowy prowadzi do niezerowej wartości prawdopodobieństwa transmisji dla połowy kwantu strumienia pola przenikającego przez pierścień.

Bibliografia

- [1] S. Bednarek, B. Szafran, and K. Lis. *Electron soliton in semiconductor nanostructures*. Phys. Rev. B **72**, 075319 (2005).
- [2] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1995.
- [3] D. Sánchez and M. Büttiker. *Magnetic-Field Asymmetry of Nonlinear Mesoscopic Transport*. Phys. Rev. Lett. **93**, 106802 (2004).
- [4] <http://en.wikipedia.org/wiki/2DEG>.
- [5] A. Fuhrer, S. Lüscher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, and M. Bichler. *Energy spectra of quantum rings*. Nature **413**, 822-825 (2001).
- [6] S. Pedersen, A. E. Hansen, A. Kristensen, C. B. Sørensen, and P.E. Lindelof. *Observation of quantum asymmetry in an Aharonov-Bohm ring*. Phys. Rev. **B61**, 5457 (1999).
- [7] T. Usuki, R.A. Kiehl, M. Takatsu, and N. Yokoyama. *Numerical analysis of electron-wave detection by a wedge-shaped point contact*. Phys. Rev. **B50**, 7615 (1994).
- [8] A. Askar and A.S. Cakmak. *Explicit integration method for the Schrödinger time-dependent equation for collision problems*. J. Chem. Phys. **68**, 2794–2798 (1978).
- [9] Å. Björck and G. Dahlquist. *Metody numeryczne*. Wydawnictwo Naukowe PWN, 1987.
- [10] S. Bednarek and B. Szafran. *Energy dissipation of electron solitons in a quantum well*. Phys. Rev. B **73**, 155318 (2006).
- [11] B. Szafran and F.M. Peeters. *Time-dependent simulations of electron transport through a quantum ring: Effect of the Lorentz force*. Phys. Rev. B **72**, 165301 (2005).
- [12] Y. Aharonov and D. Bohm. *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*. Phys. Rev. **115**, 485 (1959).