

Flutningur rafeinda í einvíðum skammtavír

Ómar Valsson

Sérverkefni í eðlisfræði
í umsjón dr. Viðars Guðmundssonar
Háskóli Íslands

Janúar 2006

Efnisyfirlit

1	Inngangur	2
2	Fræði	2
	2.1 Lippmann-Schwinger jafna	2
	2.2 Leiðni	4
	2.3 Deltamætti	5
3	Niðurstöður	7
	3.1 Fráhrindandi Gauss mætti	7
	3.2 Aðdráttar Gauss mætti	8
	3.3 Deltamætti	8
4	Lokaorð	20
A Green fallið		22
B Tölulegar lausnir		25
1	Lippmann-Schwinger	25
2	Leiðni	29
3	Deltamætti	31

1 Inngangur

Skammtavírar eru leiðandi skammtakerfi rafeinda á nanóskala og eru því stundum nefndir nanóvírar. Enn sem komið er eru skammtavírar bara til á rannsóknarstofum en miklar vonir eru til þess að þeir verði mikilvægur hluti af örtækni framtíðanir. Hinn smáa lengdarskali leiðir til þess að nota þarf skammtafræði ef skoða á líkön af flutningi rafeinda í slíkum skammtavírum.

Þegar flutningur rafeinda er skoðaður í skammtakerfum er yfirleitt notað sjónarmið Landauer þar sem litið er á leiðni sem tengda framferð rafeindana í kerfinu [1], þannig er hægt að tengja saman leiðni og dreifingu.

Meðal þess sem kemur í ljós þegar skammtavírar eru skoðaðir er að leiðin í hreinum skammtavírum er skömmtuð í $G_0 = 2e^2/h = 7.7481 \times 10^{-5}$ S, en G_0 er stundum kallaður Landauer fastinn. Þetta hefur verið sýnt fram á, bæði í tilraunum [2] og fræðilegum útreikningum. Við getum hugsað okkur skammtavír með endalegri breidd þar sem rafeindin eru frjálssar til að ferðast eftir vírnum, en vegna þess hve vírinn er grannur segir skammtafræðin að hreyfingar þeirra þvert á vírinn séu skammtaðar. Við segjum því að rafeind í vissum þversveifluhætti n ferðist eftir vírnum í hætti eða borða n , hver borði gefur mest leiðina G_0 .

Það sem vantar inni núverandi tímaóháða útreikninga [3] er hvernig líkja skal eftir því þegar forspenna er á vírnum og hvernig spennufallið lítur út, um það eru skiptar skoðanir og er því spennandi að skoða þennan þátt líkanagerðar.

Hér í þessu verkefni eru skoðuð fyrstu skref í því hvernig undirbúa má lýsingu á forspennuni í tímaóháðum dreifireikningum. Gerum ráð fyrir því að vírinn sé nákvæmlega einvíður, eða svo orkulega langt sé á milli borðana að okkar rafeindir ferðast aðeins í orkulægasta borðanum. Í vírnum er þrep og sett er fram Green fall sem er notað í Lippmann-Schwinger jöfnuni, Green fallið tekur tillit til þrepsins og verður það mikilvægt í seinni tíma útreikningum. Skoðum síðan hvaða áhrif þrepið og dreifimætti, sem kemur á eftir þrepinu, hafa á leiðnina sem fall af orku rafeindanna með því að skoða dreifingu rafeinda í kerfinu með Gauss mætti sem dreifimætti.

2 Fræði

2.1 Lippmann-Schwinger jafna

Skoðum, eins og yfirleitt er gert þegar skoðuð er dreifing í eini vídd, rafeindir sem koma inn óendanlega langt að frá vinstri, við höfum þá rafeindir sem speglast eða komast áfram í gegnum dreifimættið.

Kerfið hefur eftirfarandi mætti

$$V(z) = V_0[1 - \theta(z)] + V_s(z), \quad (1)$$

þar sem V_0 er styrkur þrepsins, $V_s(z)$ er dreifimættið og

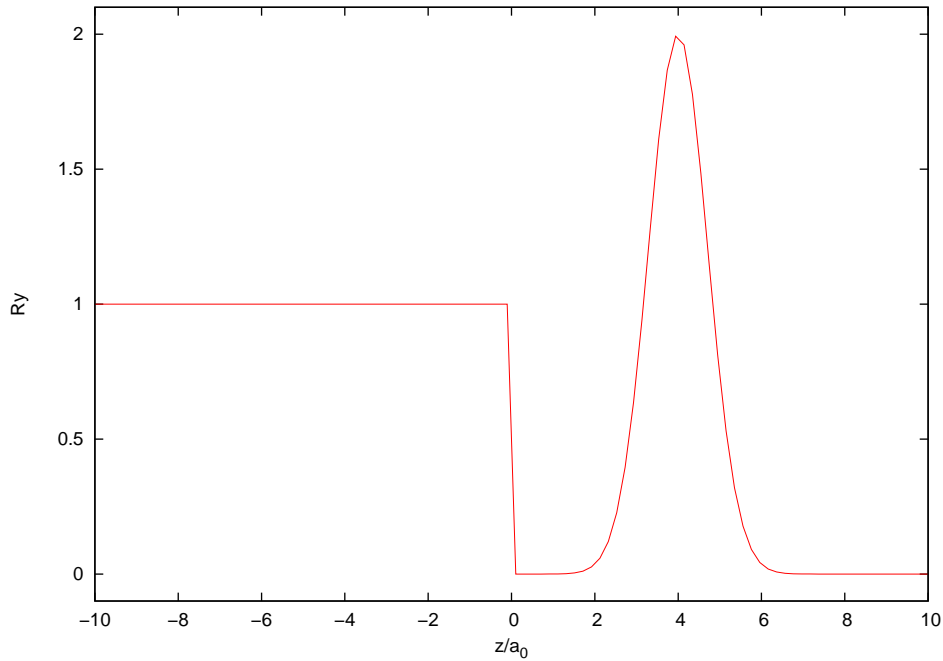
$$\theta(z) = \begin{cases} 0 & z < 0 \\ 1 & z > 0 \end{cases} \quad (2)$$

er þrepafallið. Þrepið sem er í $z = 0$ leyfir okkur að athuga kerfi með mismunandi orkuviðmiðum á svæðunum fyrir utan áhrifasvæði dreifimættisins, þ.e.a.s. fyrir $|z| \gg R$ þar sem R er drægni dreifimættisins í einhverjum skilningi.

Munum hér skoða Gauss dreifimætti

$$V_s(z) = V_G e^{-\alpha(z-z_i)^2}, \quad (3)$$

þar sem $\alpha > 0$ segir til um drægni eða breidd Gauss mættisins og $z_i > 0$ er staðsetning Gauss toppsins. Sjá má kerfið á mynd 1.



Mynd 1: Kerfið sem samstendur af þrepinu og Gaussmætti, einingar á orku í Rydbergum og fjarlægðir í Bohrgeislum. $V_0 = 1Ry$, $V_G = 2Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.

Sístæðu ástandi kerfisins er lýst með tímaóháðari Schrödinger jöfnu

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_0[1 - \theta(z)] + V_s(z) \right\} \psi_E(z) = E\psi_E(z) \quad (4)$$

fyrir rafeindir með orku E

Í dreifireikningum er þægilegra að ummynda Schrödinger jöfnuna í heildisjöfnu með hjálp Green fallsins sem verður skilgreint hér á eftir. Í staðsetningarrúminu er Lippmann-Schwinger jafnan

$$\psi_E(z) = \psi_E^0(z) + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz' G_s(z, z') V_s(z') \psi_E(z'). \quad (5)$$

Hér er $\psi_E^0(z)$ ótruflaða bylgjufallið sem uppfyllir

$$\left\{ \frac{d^2}{dz^2} + k^2 - K^2 [1 - \theta(z)] \right\} \psi_E^0(z) = 0, \quad (6)$$

þar sem $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ og $K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$. Ótruflaða bylgjufallið hefur jaðarskilyrði innbylgju frá vinstri, skoðum bara tilfellið ef orka rafeindana er fyrir ofan þrepið ($k^2 > K^2$)

$$\psi_E^0(z) = \begin{cases} A e^{i\sqrt{k^2 - K^2}z} + A \frac{\sqrt{k^2 - K^2} - k}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} e^{-i\sqrt{k^2 - K^2}z} & z < 0 \\ A \frac{2\sqrt{k^2 - K^2}}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} e^{ikz} & z \geq 0. \end{cases} \quad (7)$$

Hægt er að velja stöðlunina A frjálst, veljum því til þæginda $A = 1$. $G_s(z, z')$ er Green fall sem tekur tillit til þrepafallsins og uppfyllir

$$\left\{ \frac{d^2}{dz^2} + k^2 - K^2 [1 - \Theta(z)] \right\} G_s(z, z') = \delta(z - z'). \quad (8)$$

Green fallið var leitt út og er sett fram í viðauka A en vegna þrepsins verður Green fallið ekki eins einfalt og ef ekkert þrepafall væri.

2.2 Leiðni

Form bylgjufallisins $\psi_E(z)$ fyrir utan áhrifasvæði dreifimættisins er

$$\psi_E(z) = \begin{cases} e^{i\sqrt{k^2 - K^2}z} + r_E e^{-i\sqrt{k^2 - K^2}z} & z < 0 \text{ og } z \ll -R \\ t_E e^{ikz} & z > 0 \text{ og } z \gg R. \end{cases} \quad (9)$$

Við höfum hér innbylgju frá vinstri, speglaða bylgju með speglunar sveifluvídd r_E og framferðar bylgju með framferðar sveifluvídd t_E . Við leiðum nú út jöfnu fyrir framferðar sveifluvíddinni t_E , ef $z > 0$ fæst út úr Lippmann-Schwinger jöfnuni (5) að

$$\begin{aligned} \psi_E(z) &= \frac{2\sqrt{k^2 - K^2}}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} e^{ikz} \\ &+ \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dz' \left(-\frac{i}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} e^{ikz - i\sqrt{k^2 - K^2}z'} \right) V_s(z') \psi_E(z') \\ &+ \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dz' \left(\frac{i}{2k} \left(\frac{\sqrt{k^2 - K^2} - k}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} \right) e^{ik(z+z')} - \frac{i}{2k} e^{ik|z-z'|} \right) V_s(z') \psi_E(z'). \end{aligned} \quad (10)$$

Nú er $|z - z'| \approx z - z'$ ef $z \gg R$, með því að bera saman jöfnur (9) og (10) fæst að

$$t_E = \frac{2\sqrt{k^2 - K^2}}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dz' \left(-\frac{i}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} e^{-i\sqrt{k^2 - K^2}z'} \right) V_s(z') \psi_E(z') + \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dz' \left(\frac{i}{2k} \left(\frac{\sqrt{k^2 - K^2} - k}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} \right) e^{ikz'} - \frac{i}{2k} e^{-ikz'} \right) V_s(z') \psi_E(z'). \quad (11)$$

Á sama hátt má leiða út jöfnu fyrir r_E með því að nota að $|z - z'| \approx -(z - z')$ ef $z \ll -R$.

Við höfum síðan að framferðarlíkanar eru

$$T_E = \frac{k}{\sqrt{k^2 - K^2}} |t_E|^2. \quad (12)$$

Hér höfum við augljóslega það skilyrði að $T_E \leq 1$. Við notum síðan Landauer jöfnuna til að reikna leiðnina

$$G_E = \frac{2e^2}{h} T_E = G_0 T_E, \quad (13)$$

þar sem

$$G_0 = \frac{2e^2}{h} = 7.7481 \cdot 10^{-5} \text{ S} \quad (14)$$

er stundum kallaður Landauer fastinn og er nátturulegur leiðni skammtur í næstum einvíðum skammtavír. Vegna þess að kerfið sem við skoðum hér er nákvæmlega einvitt eða þar sem skoðaður er bara lægsti orkuborðinn verður alltaf $G_E \leq G_0$.

Við tölulega reikninga var notast við forritunarmálið Fortran 90 en í viðauka B er því lýst hvernig þessum jöfnum er breytt fyrir tölulega útreikninga þannig að tekið er tillit til einkenna Green fallsins.

2.3 Deltamætti

Það getur verið atyglisvert að bera saman niðurstöðunar fyrir Gauss mættið við deltamætti þar sem hægt er að leiða út leiðnina nákvæmlega mjög einfaldlega út frá Lippmann-Schwinger jöfnuni.

Við höfum dreifimættið

$$V_s(z) = \beta \delta(z - z_d), \quad (15)$$

þar sem $z_d > 0$ er staðsetning delta-fallsins og β er styrkur deltamættisins sem hefur víddina orka*lengd þar sem delta fallið hefur víddina 1/lengd.

Lippmann-Schwinger jafnan (5) gefur að

$$\begin{aligned}\psi_E(z) &= \psi_E^0(z) + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz' G_s(z, z') \beta \delta(z - z_d) \psi_E(z') \\ &= \psi_E^0(z) + \frac{2m\beta}{\hbar^2} G_s(z, z_d) \psi_E(z_d).\end{aligned}\quad (16)$$

Nú gefur $z = z_d$

$$\psi_E(z_d) = \psi_E^0(z_d) + \frac{2m\beta}{\hbar^2} G_s(z_d, z_d) \psi_E(z_d), \quad (17)$$

þannig að

$$\psi_E(z_d) = \psi_E^0(z_d) \left(1 - \frac{2m\beta}{\hbar^2} G_s(z_d, z_d)\right)^{-1}. \quad (18)$$

Ef $z_d > 0$ gefa jöfnur (7) og (A.2) að

$$\psi_E(z_d) = \frac{2\sqrt{k^2 - K^2}}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} e^{ikz_d} \left(1 - \frac{im\beta}{k\hbar^2} \left(\frac{\sqrt{k^2 - K^2} - k}{\sqrt{k^2 - K^2} + k}\right) e^{2ikz_d} + \frac{im\beta}{k\hbar^2}\right)^{-1}. \quad (19)$$

Nú vitum við að

$$\psi_E(z) = t_E e^{ikz} \quad (20)$$

ef $z > z_d$ og þar sem bylgjufallið er samfellt höfum við

$$\psi_E(z_d) = t_E e^{ikz_d}. \quad (21)$$

Samanburður milli (19) og (21) gefur

$$t_E = \frac{2\sqrt{k^2 - K^2}}{\sqrt{k^2 - K^2} + k} \left(1 - \frac{im\beta}{k\hbar^2} \left(\frac{\sqrt{k^2 - K^2} - k}{\sqrt{k^2 - K^2} + k}\right) e^{2ikz_d} + \frac{im\beta}{k\hbar^2}\right)^{-1}. \quad (22)$$

Innsetning (19) inní (11) gefur sömu niðurstöðu eftir smá umritun, fæst þá eftir nokkra útreikninga að

$$\begin{aligned}G_E = G_0 T_E = G_0 \sqrt{\frac{k^2}{k^2 - K^2}} |t_E|^2 &= G_0 4(k^2 - K^2) \sqrt{\frac{k^2}{k^2 - K^2}} 4(k^2 - K^2) \\ &\left[\left(\sqrt{k^2 - K^2} + k\right)^2 - \frac{2m\beta K^2}{k\hbar^2} \left(\sin(2kz_d) - \frac{m\beta}{k\hbar^2} \cos(2kz_d)\right) \right. \\ &\left. + \frac{m^2\beta^2}{k^2\hbar^4} (4k^2 - 2K^2) \right]^{-1}.\end{aligned}\quad (23)$$

Ef skoðað er markgildið $V_0 \rightarrow 0$ ($K^2 \rightarrow 0$) þá fæst

$$G_E = G_0 T_E = G_0 4k^2 \left((2k)^2 + \frac{4m^2\beta^2}{k^2\hbar^4}\right)^{-1} = G_0 \left(1 + \frac{m^2\beta^2}{k^2\hbar^4}\right)^{-1}. \quad (24)$$

sem passar við deltamætti í z_d og ekkert þrep (staðsetning deltamættisins hefur enginn áhrif).

3 Niðurstöður

3.1 Fráhrindandi Gauss mætti

Á myndum 2, 3, 4 og 5 má sjá hvernig mismunandi styrkur þrepsins og Gauss mættisins hefur áhrif á leiðnina, mynd 6 sýnir hvernig mismunandi breidd Gauss mættisins hefur áhrif á leiðnina.

Á mynd 2 má hvernig leiðnin er ef ekkert þrep væri til staðar, má sjá að leiðninn rís jafnt og einkennalaus upp í G_0 eins og við er að búast.

Á myndum 3 og 4 má sjá að þegar styrkur Gauss mættisins er svipaður eða ekki mikið stærri heldur en styrkur þrepsins þá hefur leiðnin hermur og hefur mun meiri einkenni en ef ekkert þrep væri. Þegar styrkur Gauss mættisins er aukinn þá verður leiðnin einkennalaus og næstum alveg eins og ef um ekkert þrep er að ræða þannig að þrepið hefur lítil áhrif.

Á mynd 5 má sjá betur að áhrif þrepsins á leiðnina eru meiri þegar styrkur Gauss mættisins er svipaður eða ekki mikið stærri en styrkur þrepsins.

Þegar $V_0 = 1Ry$ og $V_G = 1Ry$ (mynd 3) kemur fram sú herma sem er hvað skörpust en á mynd 6 má sjá hvernig breidd á Gauss mættinu hefur áhrif á hermuna. Sjá má að herman sem er rétt fyrir ofan $1Ry$ minnkar þegar Gauss mættið verður mjórra en hins vegar er enginn regla í því hvernig breiddinn hefur áhrif á dalinn sem kemur þar á eftir. Toppurinn sem er rétt fyrir ofan $3Ry$ er alltaf á sama stað en hins vegar verður dalurinn sem kemur þar á eftir dýpri eftir því Gauss mættið verður mjórra.

Það sem gerist hér er að Gauss mættið og þrepið skilgreina grunnan brunn sem leiðir til herma þegar orkan fer að nálgast orku næstum bundins ástands.

Á myndum 7 og 8 má sjá líkindaþéttleika og bylgjufallið í hermutoppinum sem sjá má á mynd 3. Sjá má af líkindaþéttleikanum að mestar líkur eru fyrir því að rafeindinn sé í $3a_0$ sem er í samræmi við það að rafeindinn eyðir miklum tíma í mættinu. Reyndar er toppurinn í $3a_0$ ekki mikið stærri en aðrir toppar enda er ekki um skarpan hermutopp að ræða. Eins má sjá fyrir $z < 0a_0$ að sveiflur myndast sem eru í samræmi við að það að þar höfum við innbylgju og dreifða bylgju sem fer til baka, sveiflunar eru ekki mjög stórar né skarpar sem skýrist af því að hér er sveifluviddinn á dreifðu bylgjuni sem fer til baka ekki stór vegna þess leiðnin er mjög nálægt G_0 og því mjög litlar líkur fyrir því að rafeindinn fari til baka. Fyrir $z > 6a_0$ er líkindaþéttleikinn fasti þannig að mættið er hætt að hafa áhrif þar, við þessu er að búast þar sem við höfum aðeins útbylgju sem kemst í gegnum mættið.

Á myndum 9 og 10 má sjá líkindaþéttleika og bylgjufallið í venjulegu ástandi með $G \approx 0.5G_0$ sem sjá má á mynd 3. Af líkindaþéttleikanum má sjá að það eru þó nokkrar líkur fyrir að rafeindinn sé í $3a_0$ en toppurinn er samt minni en aðrir toppar, einnig sést að það er toppur í $1a_0$ þar sem í hermutoppnum á mynd 7 var lággildi. Fyrir $z < 0a_0$ myndast sveiflur og eru þar mestar líkur fyrir því að rafeindinn sé þar, sveiflunar eru stærri og skarpari en fyrir hermutoppinn sem

skýrist af því að hér er sveifluviddinn á dreifðu bylgjuni sem fer til baka mun stærri. Eins og við er búast er líkindaþéttleikinn fyrir $z > 6a_0$ fasti eins og fyrir hermutoppinn.

3.2 Aðdráttar Gauss mætti

Á myndum 11, 12, 13 og 14 má sjá hvernig mismunandi styrkur þrepsins og Gauss mættisins hefur áhrif á leiðnina, mynd 15 sýnir hvernig mismunandi breidd Gauss mættisins hefur áhrif á leiðnina.

Á mynd 11 má sjá að þegar ekkert þrep er rís leiðnin mun hraðar upp í G_0 en þegar um fráhrindandi Gauss mætti er að ræða.

Á myndum 12 og 13 má sjá að leiðnin rís einkennalaust upp í G_0 , sjá má líka þegar þrepið er á að þá hefur styrkur Gauss mættisins ekki eins mikill áhrif og þegar ekkert þrep er á en það má sjá betur á mynd 14

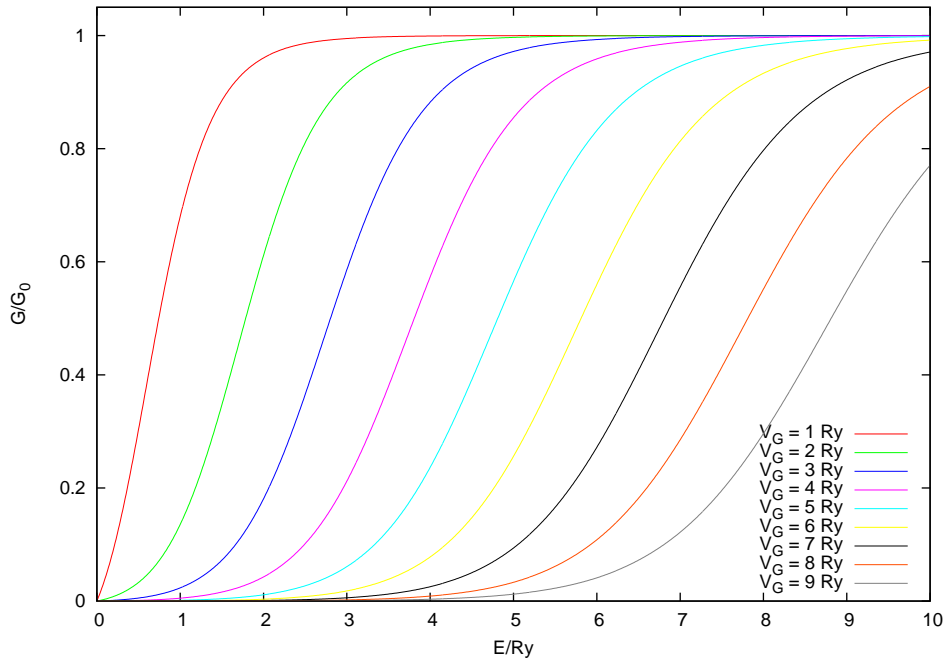
Á mynd 15 má sjá að með því að mjökka Gauss mættið má fá fram hermur fyrir aðdráttar Gauss mættið þó reyndar ekki sé um skarpa né afgerandi hermutoppa að ræða enda ber að athuga kvarðan á mynd 15. Þeir verða þó skarpari eftir því sem Gauss mættið verður mjóra.

Eins og fyrir fráhrindi Gauss mættið skilgreinir þrepið og aðdráttar Gauss mættið einskonaar brunn, þó kannski ekki í þeim skilningi sem maður leggjur venjulega í það. Leiðir það til herma fyrir rafeindir með orku sem nálgast orku næstum bundins ástands. Fyrirfram hefðum við ekki búist við að sjá hermur fyrir þetta mætti en kannski út frá einfaldri skammtafræði er þetta ekki svo skrítið, við höfum hér speglun bæði fyrir þrepið og Gauss mættið þannig að það myndast næstum bundið ástand sem leiðir til herma sem sjást hér.

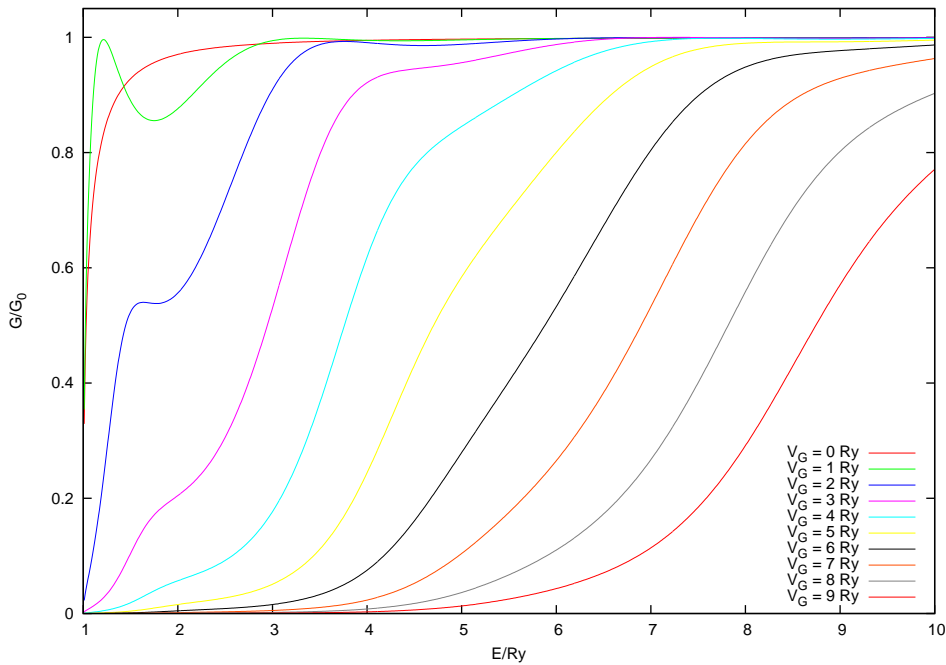
Á myndum 16 og 17 má sjá líkindaþéttleika og bylgjufallið í hermutoppinum sem sjá má á mynd 15. Sjá má af líkindaþéttleikanum að mikill líkandi eru fyrir að rafeindinn sé í $z < 0a_0$, þar er eins og við er að búast sveifur sem eru hvorki mjög stórar né skarpar. Fyrir $z > 0a_0$ er toppur í $2.5a_0$ sem er reyndar ekki sérlega stór sem má skýra með því að ekki er um mjög skarpan hermu topp að ræða, þessi toppur bendir til þess að rafeindinn eyði einhverjum tíma í mættinu. Sjá má að fyrir z ekki mikið stærra en $4a_0$ er líkindaþéttleikinn fasti eins og búast má við, hins vegar verður hann fasti mun fyrr en fyrir fráhrindandi Gauss mætti enda er mættið mjórri hér en fyrir þar.

3.3 Deltamætti

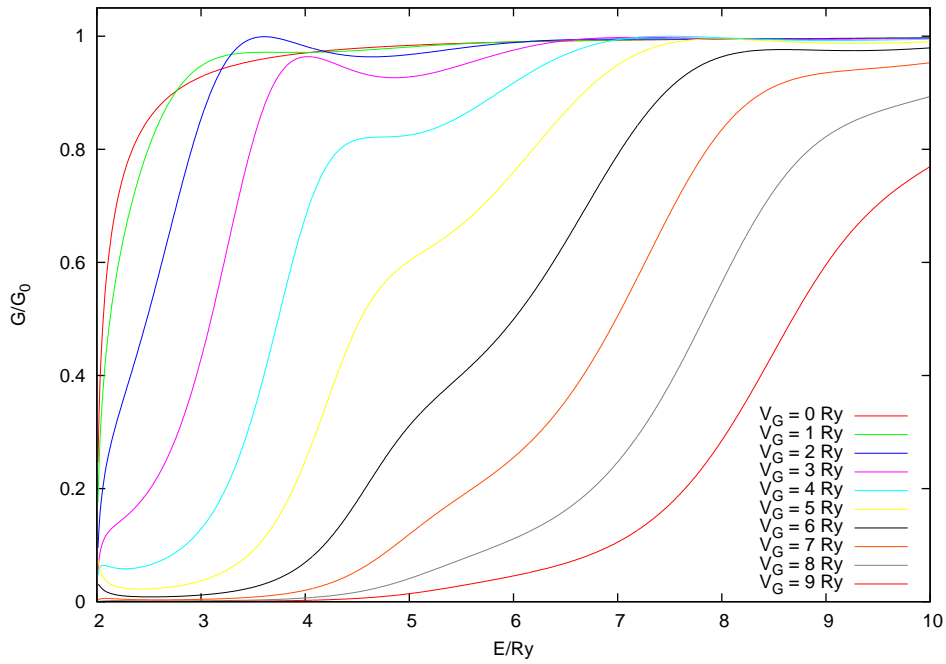
Samanburð á Gauss mætti og deltamætti má sjá á myndum 18 og 19. Sjá má að hermunar fyrir Gaussmættinn og deltamættið eru á sömu stöðum og að best samræmi virðist vera við Gauss mætti sem er ekkert sérlega mjótt. Auk þess má sjá að samræmið er ekki gott fyrir rafeindir með orku fyrir ofan $4Ry$ sem er svo sem ekki undarlegt því þá eru þær komnar fyrir ofan Gauss mættið en fara ennþá gegnum deltamættið.



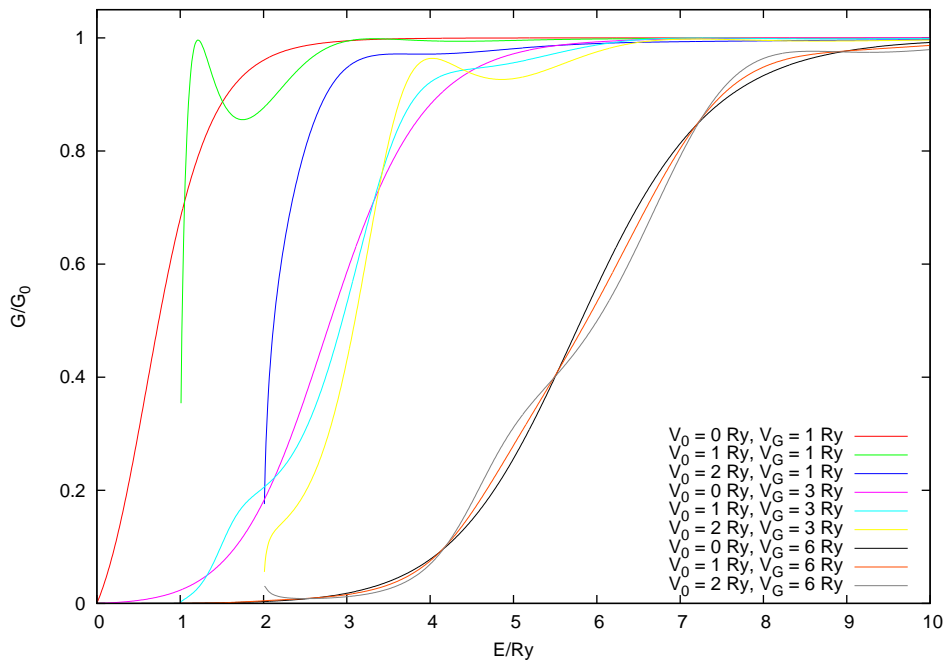
Mynd 2: Leiðni gegnum fráhrindandi Gauss mætti, ekkert þrep, mismunandi styrkur á mættinu. $V_0 = 0 Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



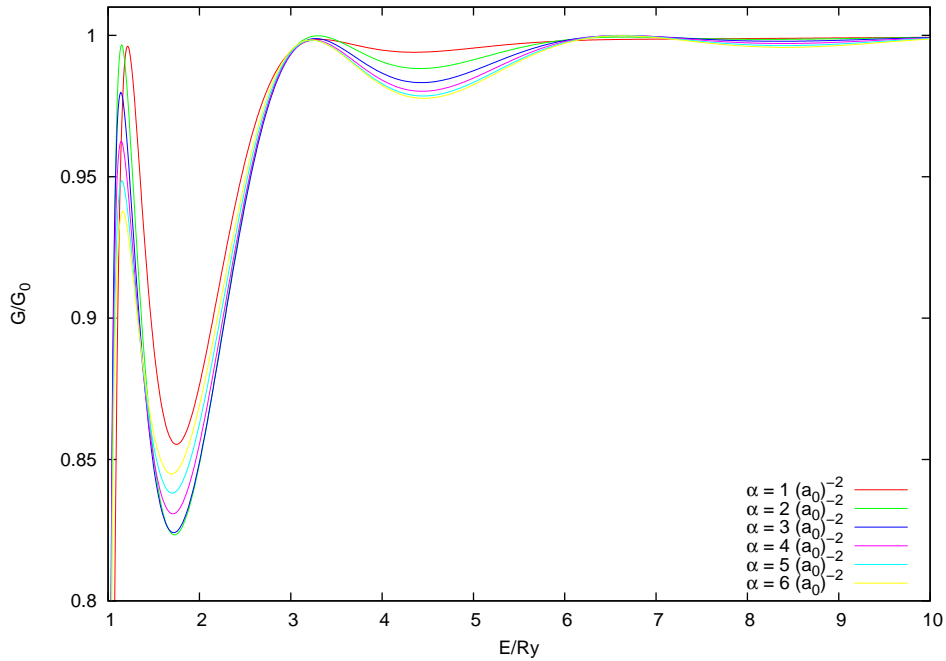
Mynd 3: Leiðni gegnum fráhrindandi Gauss mætti, mismunandi styrkur á mættinu. $V_0 = 1 Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



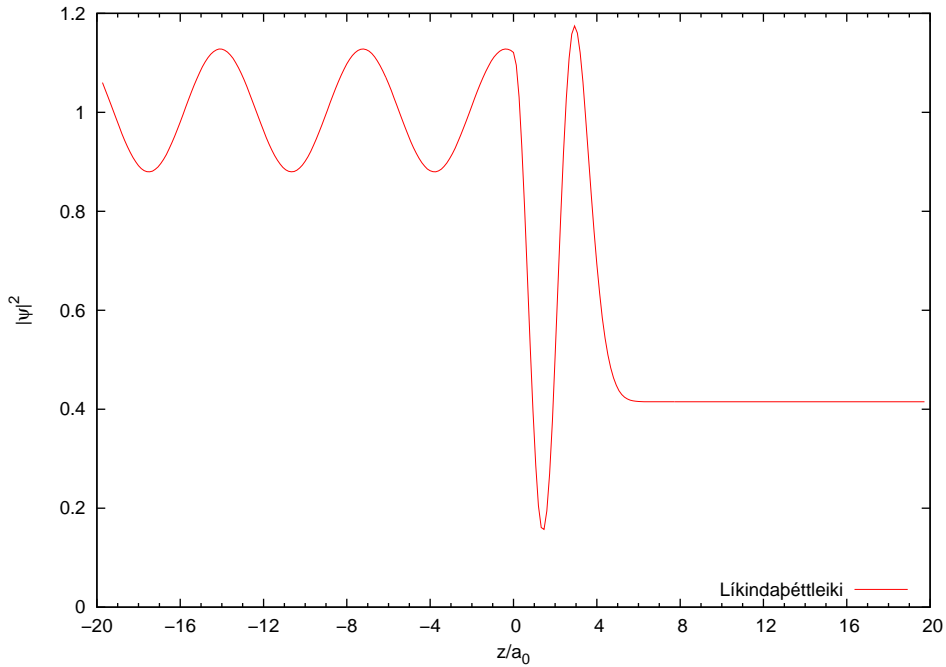
Mynd 4: Leiðni gegnum fráhrindandi Gauss mætti, mismunandi styrkur á mættinu. $V_0 = 2Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



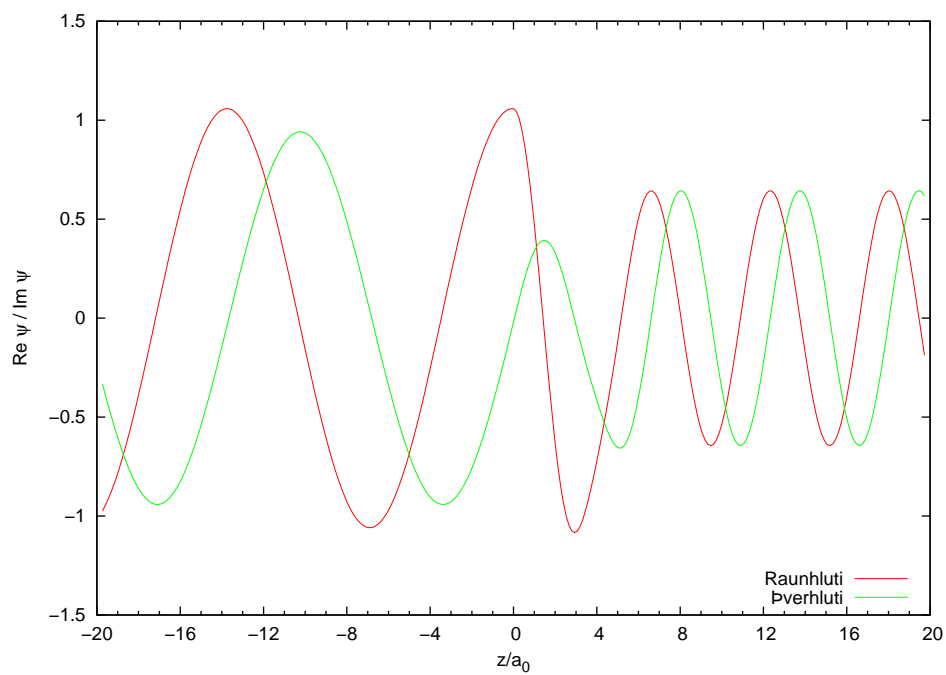
Mynd 5: Leiðni gegnum fráhrindandi Gauss mætti. $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



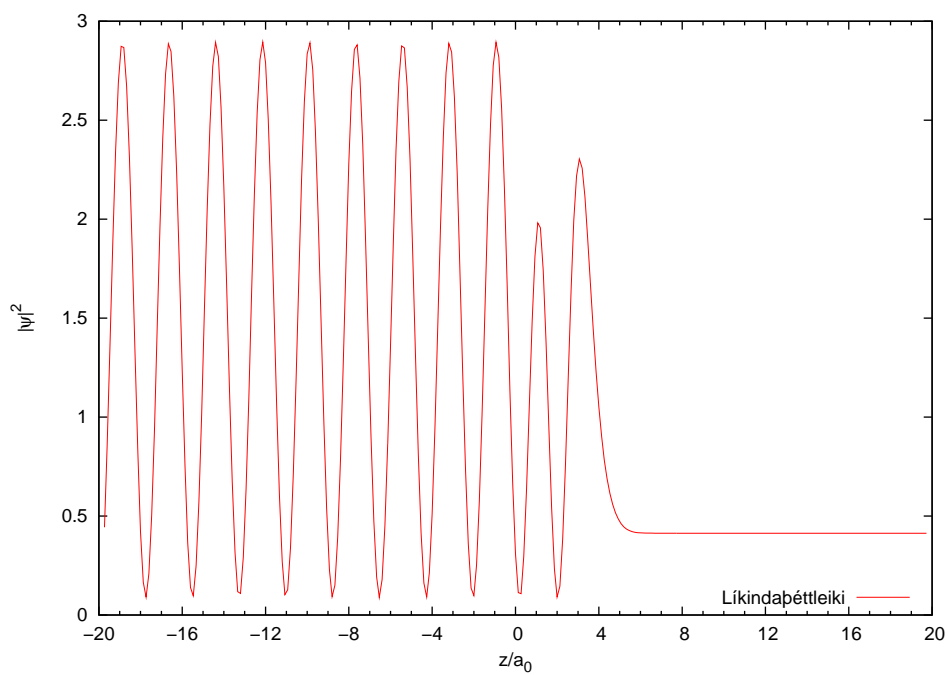
Mynd 6: Leiðni gegnum fráhrindandi Gauss mætti, mismunandi breidd á mættinu. $V_0 = 1Ry$, $V_G = 1Ry$ og $z_i = 4a_0$.



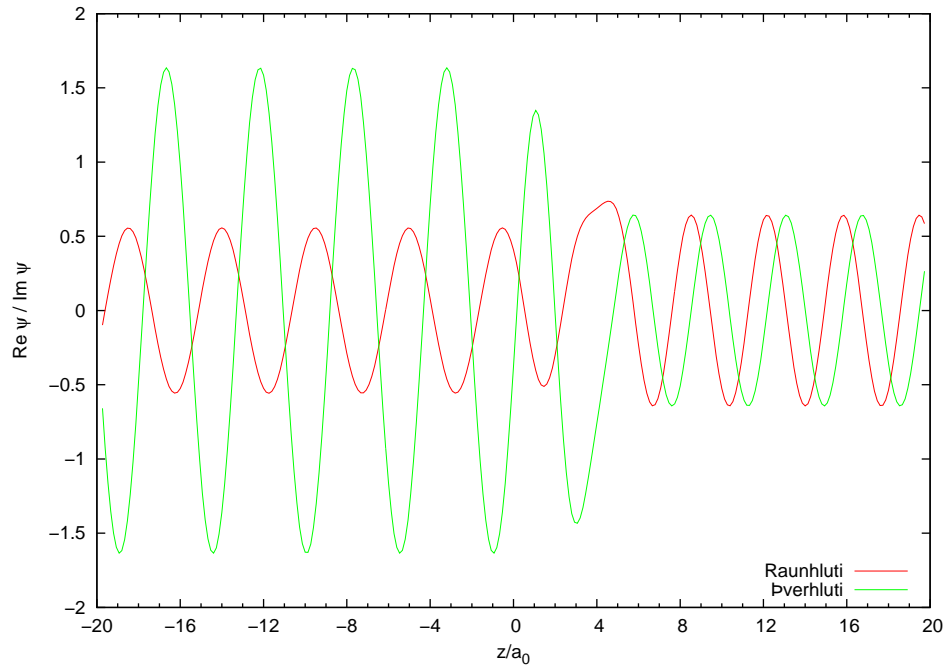
Mynd 7: Líkindaþéttleiki í hermutoppi fyrir fráhrindandi Gauss mætti, sjá samsvarandi leiðnikúrfu á mynd 3. $E = 1.21Ry$, $G \approx 0.996G_0$, $V_0 = 1Ry$, $V_G = 1Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



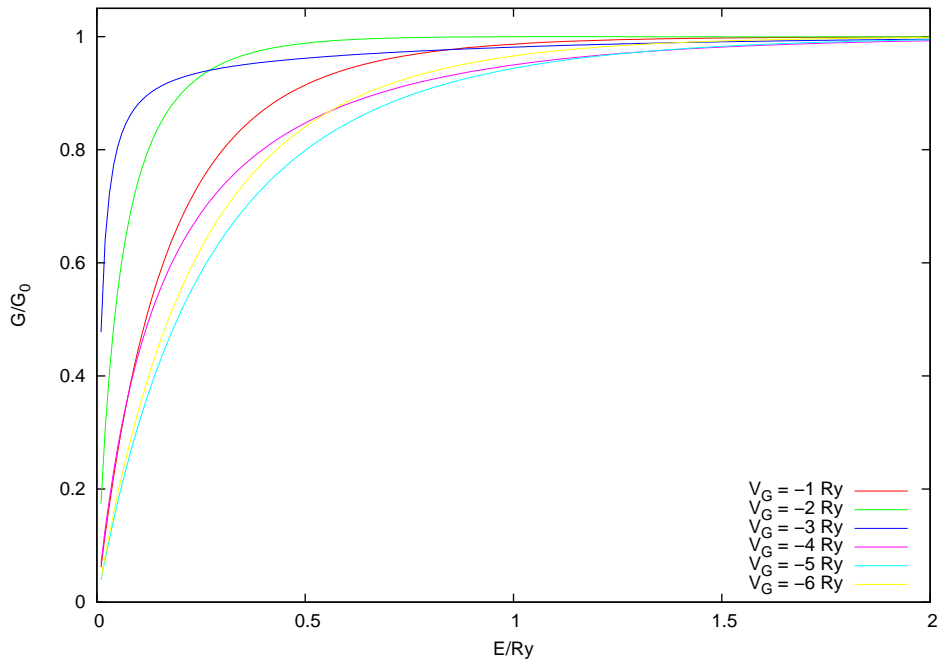
Mynd 8: Bylgjufall í hermutoppi fyrir fráhrindandi Gauss mætti, sjá samsvarandi leiðnikúrfu á mynd 3. $E = 1.21Ry$, $G \approx 0.996G_0$, $V_0 = 1Ry$, $V_G = 1Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



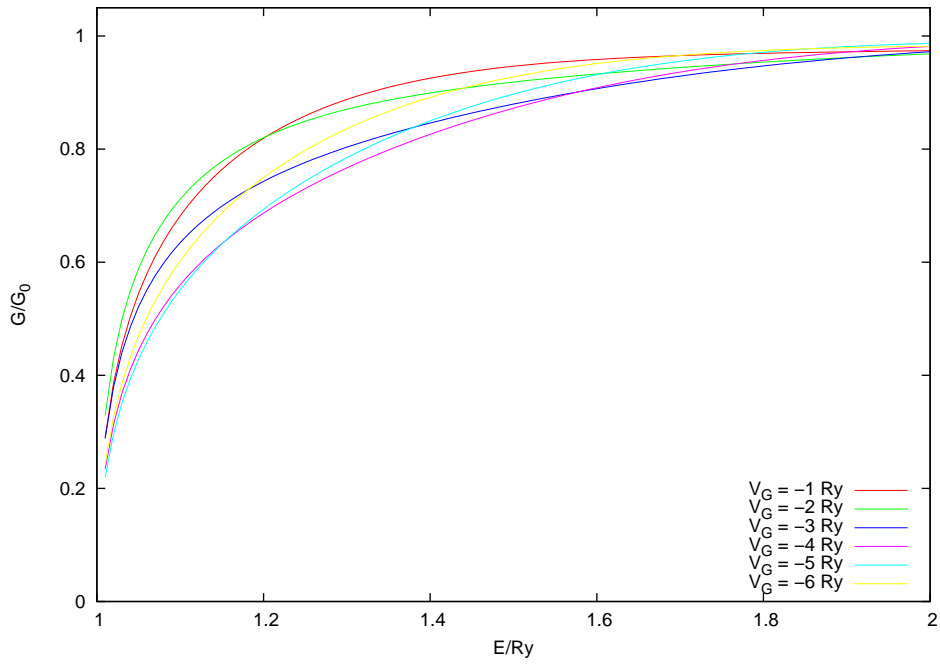
Mynd 9: Líkindaþéttleiki í venjulegu ástandi fyrir fráhrindandi Gauss mætti, sjá samsvarandi leiðnikúrfu á mynd 3. $E = 2.96Ry$, $G \approx 0.508G_0$, $V_0 = 1Ry$, $V_G = 3Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



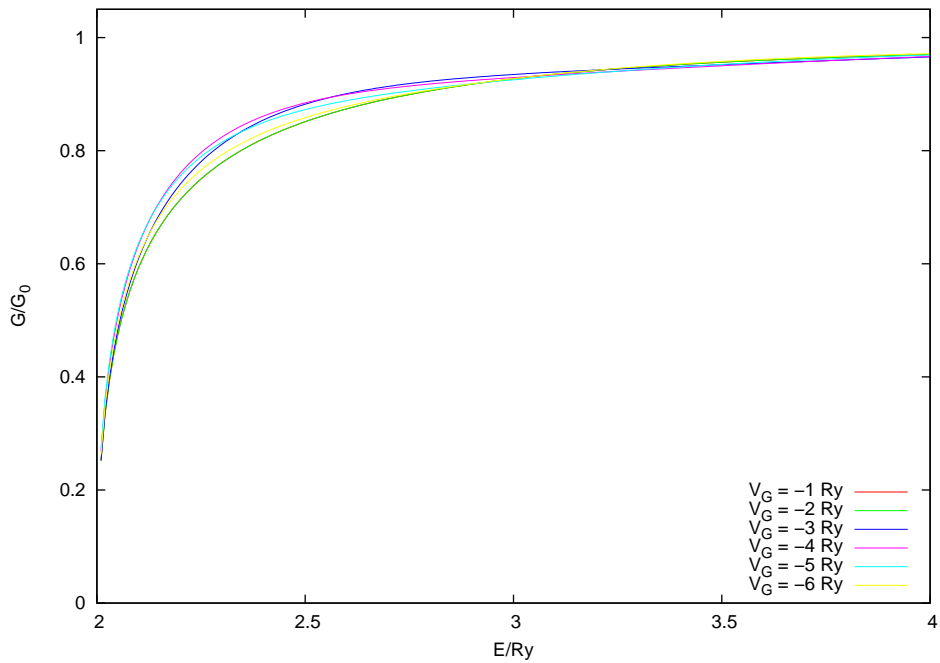
Mynd 10: Bylgjufall í venjulegu ástandi fyrir fráhrindandi Gauss mætti, sjá samsvarandi leiðnikúrfu á mynd 3. $E = 2.96Ry$, $G \approx 0.508G_0$, $V_0 = 1Ry$, $V_G = 3Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



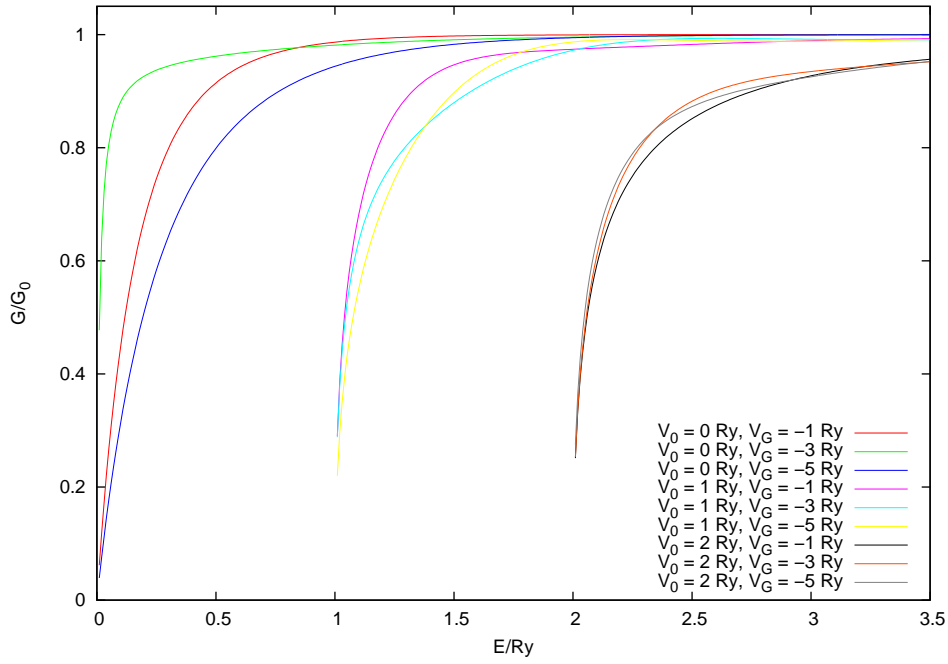
Mynd 11: Leiðni gegnum aðdráttar Gauss mætti, mismunandi styrkur á mættinu. $V_0 = 0Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



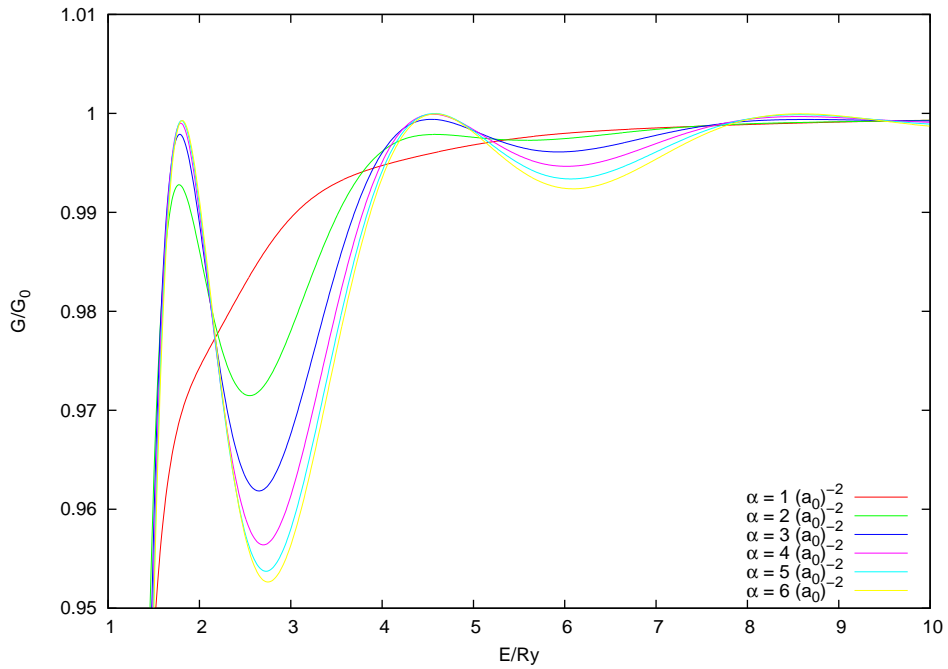
Mynd 12: Leiðni gegnum aðdráttar Gauss mætti, mismunandi styrkur á mættinu. $V_0 = 1Ry$, $\alpha = 1a_0$ og $z_i = 4a_0$.



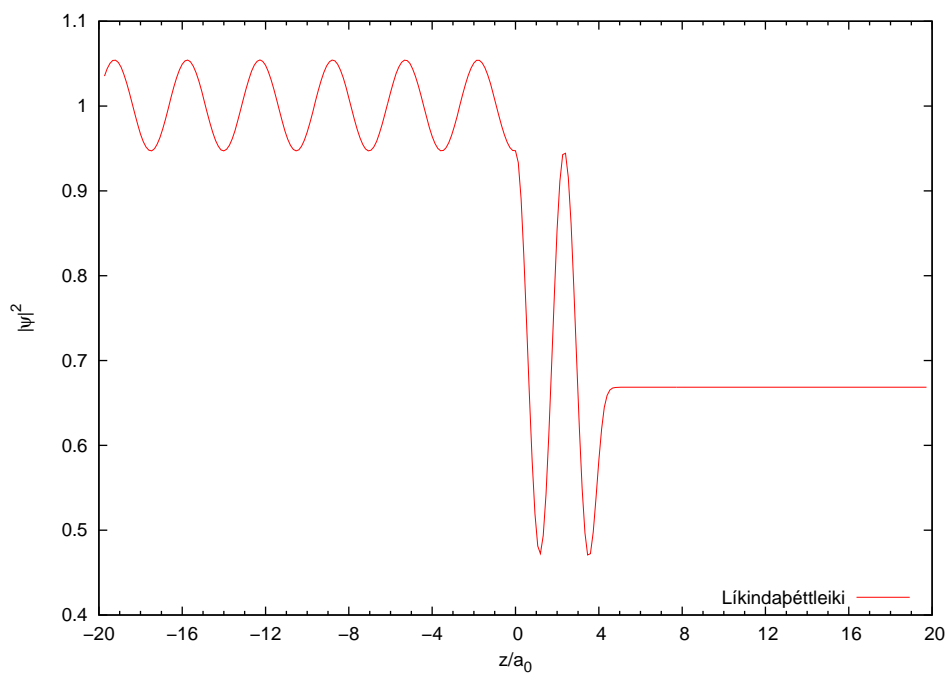
Mynd 13: Leiðni gegnum aðdráttar Gauss mætti, mismunandi styrkur á mættinu. $V_0 = 2Ry$, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



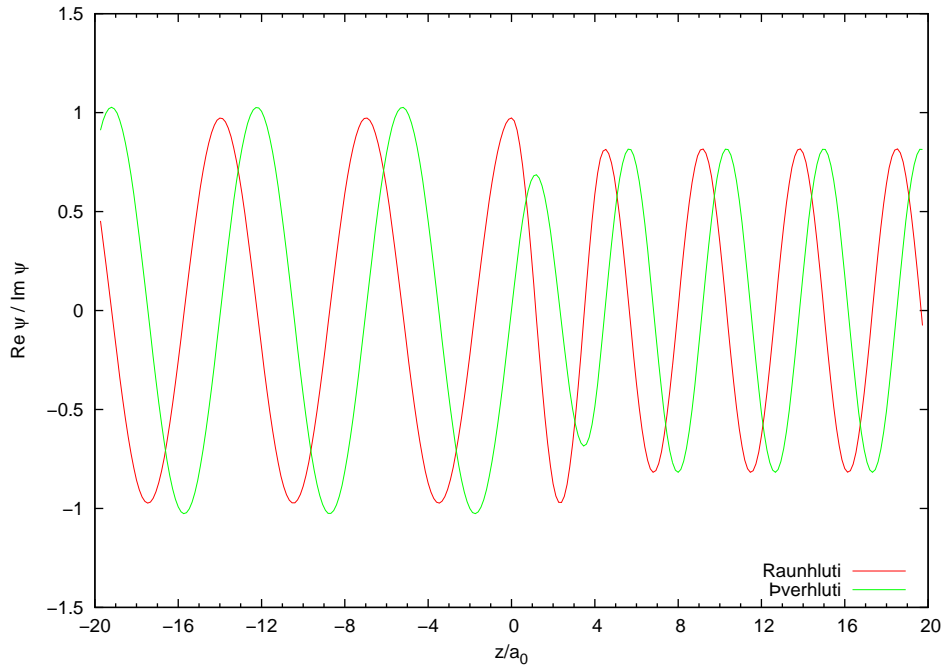
Mynd 14: Leiðni gegnum aðdráttar Gauss mætti, $\alpha = 1(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$



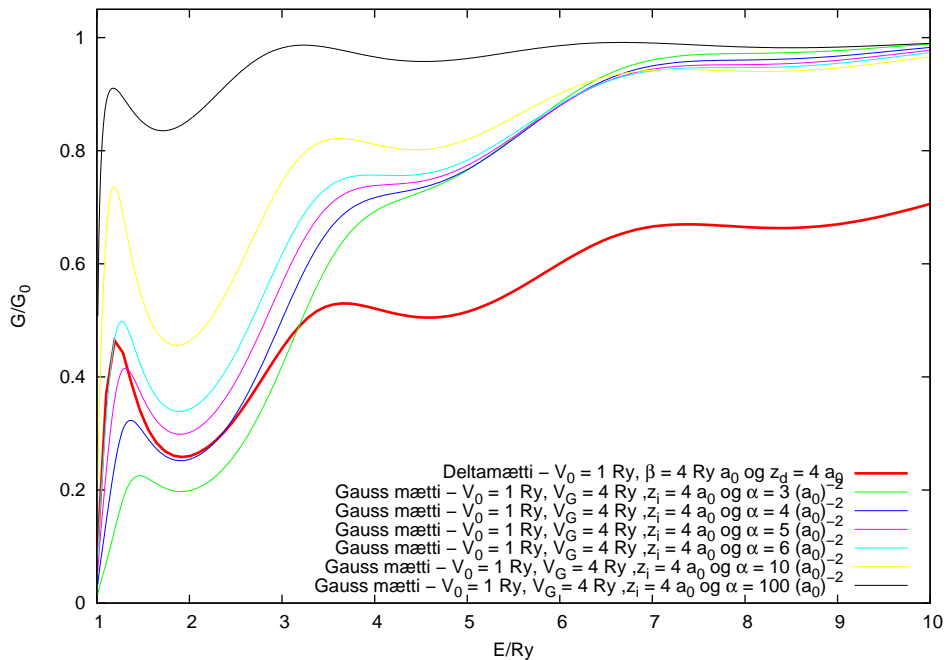
Mynd 15: Leiðni gegnum aðdráttar Gauss mætti, mismunandi breidd á mættinu. Athugið skalan. $V_0 = 1Ry, V_G = -1Ry$ og $z_i = 4a_0$.



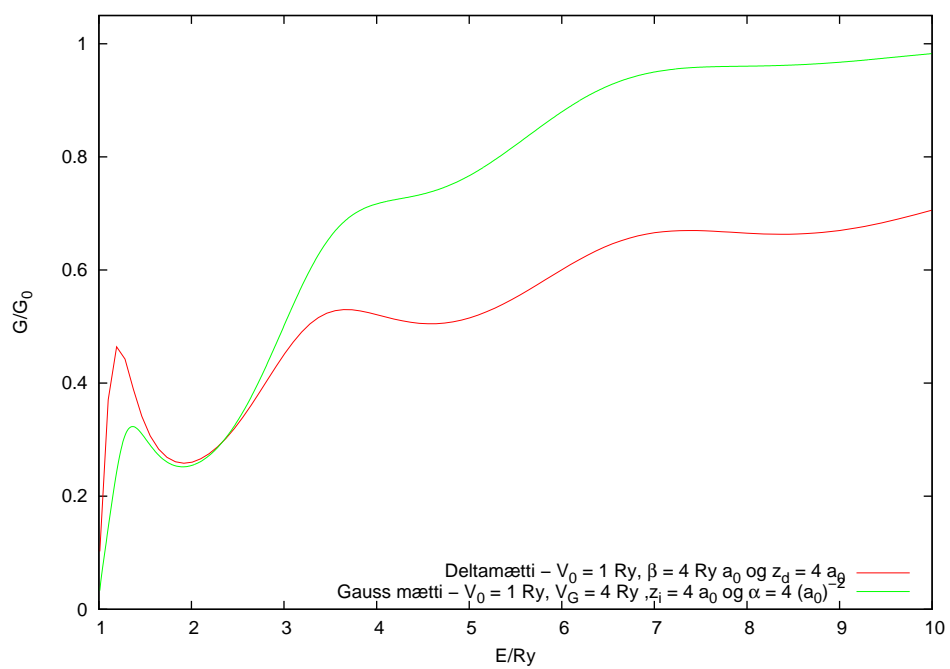
Mynd 16: Líkindaþéttleiki í hermutoppi fyrir aðdráttar Gauss mætti, á mynd 15 má sjá samsvarandi leiðnikúrfu. $E = 1.81Ry$, $G \approx 0.999G_0$, $V_0 = 1Ry$, $V_G = -1Ry$, $\alpha = 6(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



Mynd 17: Bylgjufall í hermutoppi fyrir aðdráttar Gauss mætti, á mynd 15 má sjá samsvarandi leiðnikúrfu. $E = 1.81Ry$, $G \approx 0.999G_0$, $V_0 = 1Ry$, $V_G = -1Ry$, $\alpha = 6(a_0)^{-2}$ og $z_i = 4a_0$.



Mynd 18: Samanburður Gauss mættis og deltamættis, mismunandi breidd á Gaussmættinu



Mynd 19: Samanburður Gauss mættis og deltamættis, það Gauss mætti sem virðist vera í mestu samræmi við deltamættið

4 Lokaorð

Við höfum fundið leiðnina í kerfi með þrepi og dreifmætti og leiddum auk þess út aðferðir til að reikna tölulegar lausnir þannig að tillit er tekið til einkenna Green fallsins.

Með því að nota Gauss mætti sem dreifmætti höfum við sé að leiðninn verður einkenameiri og með hermun þegar þrepið er haft á. Fyrir fráhrindandi Gauss mætti skýrist það með því að Gauss mættið og þrepið mynda grunnan brunn sem leiðir til herma þegar orka rafeindanna nálgast orku næstum bundins ástands í brunninum. Fyrir aðdráttar Gauss mætti koma líka fram hermur þó reyndar þær séu ekki afgerandi, fyrirfram myndi maður kannski ekki búast við þeim en líka útskýra það með því að þar myndast einskona brunnur þó kannski ekki í þeim skilningi sem maður leggur venjulega í það. Athuga ber að hermur finnast hér þar sem Lippmann-Schwinger lýsir nákvæmlega síendurteknum árekstrum í þessum brunninum sem myndast hér.

Green fallið sem var leitt út og sett fram hér verður líklega mikilvægt í seinni tíma sjálf samkvæmum útreikningum og því eru þessi fyrstu skref sem voru stigin hér í undirbúningni á lýsingu á forspennu í skammtavírum áhugaverð og mikilvæg.

Heimildir

- [1] Y. Imry og R. Landauer, *Conductance viewed as transmission*, Rev. Mod. Phys. **71**, S306 (1999)
- [2] B.J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamsom, I. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, og C. T. Foxon, *Quantized Conductance of Point Contacts in Two-Dimensional Electron Gas*, Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988)
- [3] Jens H. Bárðarson, Meistararitgerð, Háskóli Íslands, 2004, vefslóð <http://www.raunvis.hi.is/reports/2004/RH-09-2004.html>.

Viðauki A

Green fallið

Green fall sem tekur tillit til þrepsins í $z = 0$ uppfyllir

$$\left\{ \frac{d^2}{dz^2} + k^2 - K^2 [1 - \Theta(z)] \right\} G_s(z, z') = \delta(z - z'), \quad (\text{A.1})$$

þar sem $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ og $K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$.

Höfum það jaðarskilyrði að Green fallið er útbylgja frá z' . Við mun ekki leiða út Green fallið hér heldur bara setja það fram. Gerum alltaf ráð fyrir að $K^2 > 0$, skoðum fyrst tilfellið ef $k^2 > K^2$.

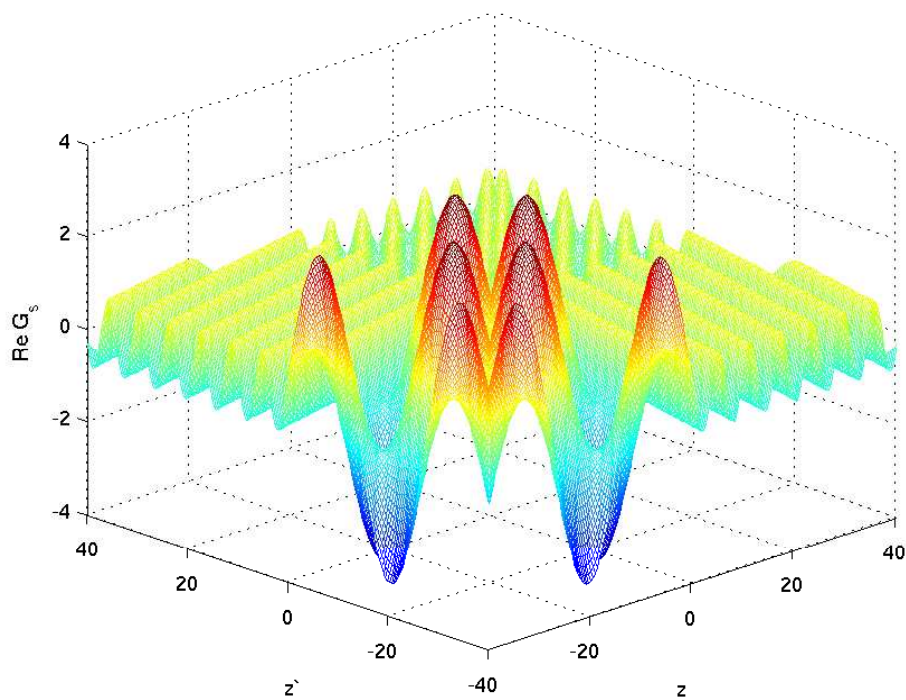
$$G_s(z, z') = \begin{cases} -\frac{i}{2\sqrt{k^2-K^2}} \left(\frac{\sqrt{k^2-K^2}-k}{\sqrt{k^2-K^2}+k} \right) e^{-i\sqrt{k^2-K^2}(z+z')} \\ -\frac{i}{2\sqrt{k^2-K^2}} e^{i\sqrt{k^2-K^2}|z-z'|} & z \leq 0 \text{ \& } z' \leq 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{k^2-K^2}+k} e^{-i\sqrt{k^2-K^2}z+ikz'} & z \leq 0 \text{ \& } z' \geq 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{k^2-K^2}+k} e^{ikz-i\sqrt{k^2-K^2}z'} & z \geq 0 \text{ \& } z' \leq 0 \\ \frac{i}{2k} \left(\frac{\sqrt{k^2-K^2}-k}{\sqrt{k^2-K^2}+k} \right) e^{ik(z+z')} \\ -\frac{i}{2k} e^{ik|z-z'|} & z \geq 0 \text{ \& } z' \geq 0. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Green fallið er allstaðar samfellt nema í $z = z'$ þar sem brot er í raunhlutanum eins og sjá má á myndum A.1 og A.2.

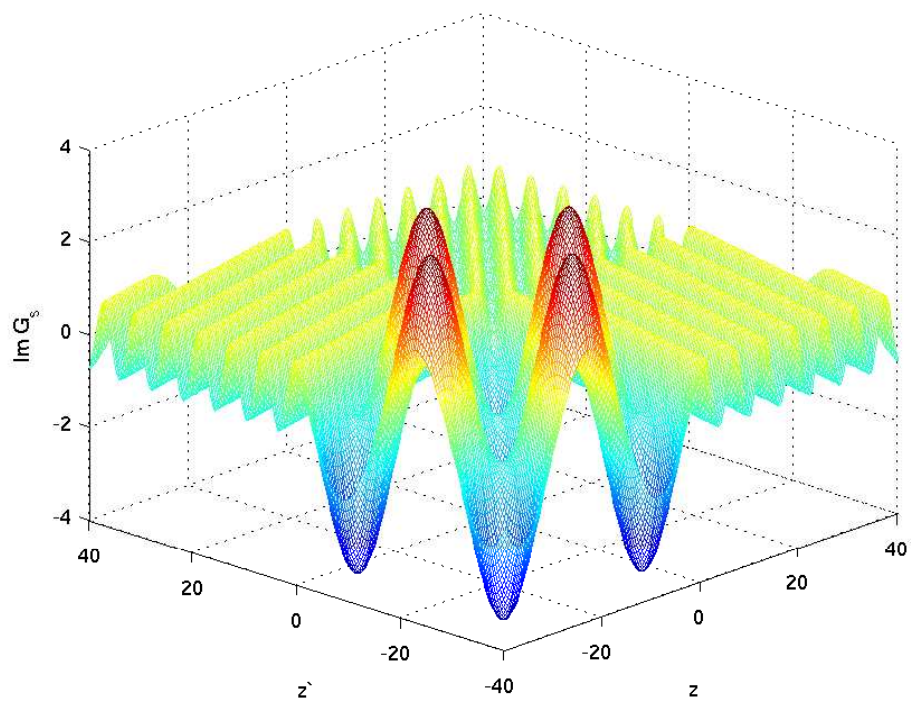
Skoðum líka þó það sé ekkert notað í þessu verkefni tilfellið ef $k^2 < K^2$ eða $k^2 = K^2$. Ef $k^2 < K^2$ og $k^2 > 0$ þá er $\sqrt{k^2 - K^2}$ tvinntala og k rauntala. Með því að nota $\sqrt{k^2 - K^2} = i\sqrt{K^2 - k^2}$, þar sem $\sqrt{K^2 - k^2}$ er rauntala, inni jöfnu (A.2) má fá Green fallið fyrir þetta tilfelli. Er þá Green fallið veldisvísis deyjandi fyrir öll tilfelli nema $z \geq 0$ & $z' \geq 0$. Eins má fyrir $k^2 < K^2$ og $k^2 < 0$ nota $\sqrt{k^2 - K^2} = i\sqrt{K^2 - k^2}$ og $k = i\kappa$, þar sem κ er rauntala, inni (A.2) og fá Green

fallið sem er þá veldisvísis deyjandi fyrir öll tilfelli. Ef $k^2 = K^2$ þá þarf að skoða sérstaklega tilfellið ef $z \leq 0$ & $z' \leq 0$ annars dugar að nota $k^2 = K^2$ inni jöfnu (A.2). Fæst þá fyrir $z \leq 0$ & $z' \leq 0$

$$G_s(z, z') = \begin{cases} z' - \frac{i}{k} & z \leq 0 \text{ \& } z' \leq 0 \text{ \& } (z - z') < 0 \\ z - \frac{i}{k} & z \leq 0 \text{ \& } z' \leq 0 \text{ \& } (z - z') > 0. \end{cases} \quad (\text{A.3})$$



Mynd A.1: Raunhluti Green fallisins fyrir $E = 1.05Ry$ og $V_0 = 1.00Ry$



Mynd A.2: Þverhluti Green fallisins fyrir $E = 1.05Ry$ og $V_0 = 1.00Ry$

Viðauki B

Tölulegar lausnir

1 Lippmann-Schwinger

Til að leysa Lippmann-Schwinger jöfnuna þá byrjum við á því að skala hana þannig að orka er sköluð í Rydbergum $Ry = \frac{me^4}{2\hbar}$ og lengdir í Bohr geislum $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

Skilgreinum $\hat{z}' = z'/a_0$, $\hat{E} = E/Ry$ og $\hat{V}_0 = V_0/Ry$, fæst þá einingalaus jafna fyrir skalaða bylgjufallið $\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z})$

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}) = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}) + \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{z}' \hat{G}_s(\hat{z}, \hat{z}') \hat{V}_s(\hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'), \quad (\text{B.1})$$

þar sem skalaða ótruflaða bylgjufallið er

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}) = \begin{cases} e^{i\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}\hat{z}} + \left(\frac{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}-\sqrt{\hat{E}}}{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}+\sqrt{\hat{E}}} \right) e^{-i\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}\hat{z}} & \hat{z} \leq 0 \\ \frac{2\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}}{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}+\sqrt{\hat{E}}} e^{i\sqrt{\hat{E}}\hat{z}} & \hat{z} \geq 0. \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Skalaða dreifimættið er

$$\hat{V}_s(\hat{z}) = \frac{V_s(\hat{z})}{Ry} \quad (\text{B.3})$$

og fæst fyrir Gauss mættið sem er notað í þessu verkefni að

$$\hat{V}_s(\hat{z}) = \hat{V}_G e^{-\hat{\alpha}(\hat{z}-\hat{z}_i)^2}, \quad (\text{B.4})$$

þar sem $\hat{\alpha} = \alpha a_0^2$, $\hat{V}_G = V_G/Ry$ og $\hat{z}_i = z_i/a_0$. Skalaða Green fallið er

$$\hat{G}_s(\hat{z}, \hat{z}') = \begin{cases} -\frac{i}{2\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}} \left(\frac{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}-\sqrt{\hat{E}}}{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}+\sqrt{\hat{E}}} \right) e^{-i\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}(\hat{z}+\hat{z}')} \\ -\frac{i}{2\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}} e^{i\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}|\hat{z}-\hat{z}'|} & \hat{z} \leq 0 \ \& \ \hat{z}' \leq 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}+\sqrt{\hat{E}}} e^{-i\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}\hat{z}+i\sqrt{\hat{E}}\hat{z}'} & \hat{z} \leq 0 \ \& \ \hat{z}' \geq 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}+\sqrt{\hat{E}}} e^{i\sqrt{\hat{E}}\hat{z}-i\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}\hat{z}'} & \hat{z} \geq 0 \ \& \ \hat{z}' \leq 0 \\ \frac{i}{2\sqrt{\hat{E}}} \left(\frac{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}-\sqrt{\hat{E}}}{\sqrt{\hat{E}-\hat{V}_0}+\sqrt{\hat{E}}} \right) e^{i\sqrt{\hat{E}}(\hat{z}+\hat{z}')} \\ -\frac{i}{2\sqrt{\hat{E}}} e^{i\sqrt{\hat{E}}|\hat{z}-\hat{z}'|} & \hat{z} \geq 0 \ \& \ \hat{z}' \geq 0. \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

Eru þá allar stærðir í jöfnu (B.1) einingalausar.

Finnum tölulega aðferð til að leysa þessa jöfnu sem tekur tillit til brotsins í $z = z'$ í Green fallinu. Byrjum á því að skilgreina til þæginda

$$K(\hat{z}, \hat{z}') = \hat{G}_s(\hat{z}, \hat{z}')\hat{V}_s(\hat{z}'), \quad (\text{B.6})$$

fæst þá jafnan

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}) = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}) + \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{z}' K(\hat{z}, \hat{z}')\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'). \quad (\text{B.7})$$

Má segja að $K(\hat{z}, \hat{z}')$ sé kjarni heildisjöfnunar. Skiptum heildinu upp í tvö heildi vegna brotsins í $\hat{z} = \hat{z}'$

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}) = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}) + \int_{-\infty}^{\hat{z}} d\hat{z}' K(\hat{z}, \hat{z}')\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}') + \int_{\hat{z}}^{\infty} d\hat{z}' K(\hat{z}, \hat{z}')\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'). \quad (\text{B.8})$$

Þar sem dreifimættið hefur takmarkaða drægni R þá er hægt að nálga $\pm\infty$ í heildunum með endalegri tölu b þar sem $|b| \gg R$. Þar er dreifimættið orðið agnarsmátt og þar af leiðandi kjarninn í heildisjöfnuni líka og hefur því hverfandi áhrif í heildinu.

Með það að leiðarljós að nálga heildin með samsettri Simpsons reglu þá setjum við \hat{z} og \hat{z}' á net með jöfnu millibili. Veljum hámarksfjölda netpunkta N_g á bilinu frá $-\hat{z}'_{\max}$ upp í \hat{z}'_{\max} þar sem $\pm\hat{z}'_{\max}$ er hæsta/lægsta tala sem $\pm\infty$ er nálgað með í heildunum. Fæst það skilyrði á N_g að N_g og $(N_g + 1)/2$ eru oddatölur. Höfum þá að bilið milli netpunktana er

$$h = \frac{2\hat{z}'_{\max}}{N_g - 1} \quad (\text{B.9})$$

og netpunktanir eru

$$\hat{z}_n = -\hat{z}_{\max} + (n-1)h \quad n = 1, 2, \dots, N_g. \quad (\text{B.10})$$

Byrjum á því að setja netið fyrir \hat{z} inní jöfnu (B.8)

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n) = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}_n) + \int_{-\infty}^{\hat{z}_n} d\hat{z}' K(\hat{z}_n, \hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}') + \int_{\hat{z}_n}^{\infty} d\hat{z}' K(\hat{z}_n, \hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'). \quad (\text{B.11})$$

Fyrir hvert n munum við síðan nálgva hvort heildi fyrir sig með samsettri Simpsons reglu. Lágmarks fjöldi netpunkta í samsettri Simpsons reglu eru þrjú netpunktar þannig að ekki er heildað fyrir $n = 1, 2, N_g - 1, N_g$, auk þess þar sem fjöldi netpunkta í samsettri Simpsons verður að vera oddatala er $\pm\infty$ ekki alltaf nálgva með sömu endalegu töluni. Þetta verður til þess að bylgjufallið $\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n)$ sem leyst er verður ekki rétt í $n = 1, 2, N_g - 1, N_g$.

Skoðum fyrst ef n er oddatala, þá nálgum við $\pm\infty \approx \pm\hat{z}'_{\max}$

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n) = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}_n) + \int_{\hat{z}'_1}^{\hat{z}_n} d\hat{z}' K(\hat{z}_n, \hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}') + \int_{\hat{z}_n}^{\hat{z}'_{N_g}} d\hat{z}' K(\hat{z}_n, \hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'). \quad (\text{B.12})$$

Simpsons regla gefur

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n) = & \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}_n) + \frac{h}{3} \left[K(\hat{z}_n, \hat{z}'_1) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_1) + 4 \sum_{\substack{m=2 \\ \text{jafnar}}}^{n-1} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \right. \\ & + 2 \sum_{\substack{m=3 \\ \text{odda}}}^{n-2} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) + K(\hat{z}_n, \hat{z}'_n) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_n) \left. \right] + \frac{h}{3} \left[K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \right. \\ & + 4 \sum_{\substack{m=n+1 \\ \text{jafnar}}}^{N_g-1} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) + 2 \sum_{\substack{m=n+2 \\ \text{odda}}}^{N_g-2} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \\ & \left. + K(\hat{z}_n, \hat{z}'_{N_g}) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_{N_g}) \right]. \quad (\text{B.13}) \end{aligned}$$

Skoðum síðan ef n er jöfn tala, þá nálgum við þá nálgum við $\pm\infty \approx \pm(\hat{z}'_{\max} - h)$

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n) = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}_n) + \int_{\hat{z}'_2}^{\hat{z}_n} d\hat{z}' K(\hat{z}_n, \hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}') + \int_{\hat{z}_n}^{\hat{z}'_{N_g-1}} d\hat{z}' K(\hat{z}_n, \hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'). \quad (\text{B.14})$$

Simpsons regla gefur

$$\begin{aligned}
\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n) = & \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}_n) + \frac{h}{3} \left[K(\hat{z}_n, \hat{z}'_2) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_2) + 4 \sum_{\substack{m=3 \\ \text{odda}}}^{n-1} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \right. \\
& + 2 \sum_{\substack{m=4 \\ \text{jafnar}}}^{n-2} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) + K(\hat{z}_n, \hat{z}'_n) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_n) \left. \right] + \frac{h}{3} \left[K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \right. \\
& + 4 \sum_{\substack{m=n+1 \\ \text{odda}}}^{N_g-2} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) + 2 \sum_{\substack{m=n+2 \\ \text{jafnar}}}^{N_g-3} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \\
& \left. + K(\hat{z}_n, \hat{z}'_{N_g-1}) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_{N_g-1}) \right]. \quad (\text{B.15})
\end{aligned}$$

Með því að skilgreina vægisstuðla w_{nm} er hægt að taka jöfnur (B.13) og (B.15) saman í eina jöfnu sem gildir fyrir $n = 1, 2, \dots, N_g$

$$\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n) = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}_n) + \frac{h}{3} \sum_{m=1}^{N_g} w_{nm} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m), \quad (\text{B.16})$$

þar sem

$$w_{nm} = \begin{cases} 0 & (n = 1, 2, N_g - 1, N_g \text{ og } m = 1, 2, \dots, N_g) \\ & \text{eða } (n \text{ jöfn og } m = 1, N_g) \\ 1 & (n \text{ odda og } m = 1, N_g) \\ & \text{eða } (n \text{ jöfn og } m = 2, N_g - 1) \\ 2 & (n \text{ odda og } m \text{ odda}) \\ & \text{eða } (n \text{ jöfn og } m \text{ jöfn}) \\ 4 & (n \text{ odda og } m \text{ jöfn}) \\ & \text{eða } (n \text{ jöfn og } m \text{ odda}). \end{cases} \quad (\text{B.17})$$

Skilgreinum síðan $\hat{\psi}_{\hat{E},n} = \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}_n)$ sem stak í vigrinum $\hat{\psi}_{\hat{E}}$, $\hat{\psi}_{\hat{E},n}^0 = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0(\hat{z}_n)$ sem stak í vigrinum $\hat{\psi}_{\hat{E}}^0$ og $\tilde{K}_{nm} = \frac{h}{3} w_{nm} K(\hat{z}_n, \hat{z}'_m)$ sem stak í fylkinu $\tilde{\mathbf{K}}$. Hér er $\tilde{\mathbf{K}}$ er $N_g \times N_g$ fylki og vigranir $\hat{\psi}_{\hat{E}}$ og $\hat{\psi}_{\hat{E}}^0$ hafa lengd N_g . Þá er hægt að skrifa jöfnu (B.16) á fylkjaformi sem

$$\hat{\psi}_{\hat{E}} = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0 + \tilde{\mathbf{K}} \hat{\psi}_{\hat{E}} \Leftrightarrow (\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{K}}) \hat{\psi}_{\hat{E}} = \hat{\psi}_{\hat{E}}^0. \quad (\text{B.18})$$

Erum þannig búin að breyta Lippmann-Schwinger jöfnuni (B.1) í fylkjajöfnu sem er auðvelt að leysa. Við fáum út þessari fylkjajöfnu bylgjufallið $\hat{\psi}_{\hat{E}}(z)$ á netinu \hat{z}_n . Vegna þess tillits sem var tekið til brotsins í $\hat{z} = \hat{z}'$ verður bylgjufallið $\hat{\psi}_{\hat{E}}(z)$ ekki rétt í netpunktunum $\hat{z}_1, \hat{z}_2, \hat{z}_{N_g-1}, \hat{z}_{N_g}$.

2 Leiðni

Jafnan fyrir framferðar sveifluvæðina t_E verður sköluð í Rydberg orku og Bohr geislum

$$\begin{aligned}
t_{\hat{E}} &= \frac{2\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} \\
&\quad + \int_{-\infty}^0 d\hat{z}' \left(-\frac{i}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} e^{-i\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}\hat{z}'} \right) \hat{V}_s(\hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}') \\
&\quad + \int_0^{\infty} d\hat{z}' \left(\frac{i}{2\sqrt{\hat{E}}} \left(\frac{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} - \sqrt{\hat{E}}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} \right) e^{i\sqrt{\hat{E}}\hat{z}'} - \frac{i}{2\sqrt{\hat{E}}} e^{-i\sqrt{\hat{E}}\hat{z}'} \right) \hat{V}_s(\hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}').
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Eins og áður má vegna takmarkaðar drægni dreifimættisins nálgast $\pm\infty$ í heildunum með endalegri tölu, með hliðsjón af tölulegri lausnini fyrir bylgjufallið $\hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z})$ í Lippmann-Schwinger jöfnuni þá heildum frá \hat{z}'_3 upp í 0 og frá 0 upp í \hat{z}'_{N_g-2} . Skilgreinum

$$g_1(\hat{z}') = \left(-\frac{i}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} e^{-i\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}\hat{z}'} \right) \hat{V}_s(\hat{z}') \tag{B.20}$$

og

$$g_2(\hat{z}') = \left(\frac{i}{2\sqrt{\hat{E}}} \left(\frac{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} - \sqrt{\hat{E}}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} \right) e^{i\sqrt{\hat{E}}\hat{z}'} - \frac{i}{2\sqrt{\hat{E}}} e^{-i\sqrt{\hat{E}}\hat{z}'} \right) \hat{V}_s(\hat{z}'). \tag{B.21}$$

Jafna (B.19) verður þá

$$t_{\hat{E}} = \frac{2\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} + \int_{\hat{z}'_3}^0 d\hat{z}' g_1(\hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}') + \int_0^{\hat{z}'_{N_g-2}} d\hat{z}' g_2(\hat{z}') \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'). \tag{B.22}$$

Nálgum heildið með samsettri Simpsons reglu á sama net og var notað áður í Lippmann-Schwinger jöfnuni. Nú er

$$\hat{z}'_{\left(\frac{N_g+1}{2}\right)} = 0. \tag{B.23}$$

Við fáum því

$$\begin{aligned}
t_{\hat{E}} = & \frac{2\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} + \frac{h}{3} \left[g_1(\hat{z}'_3) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_3) + 4 \sum_{\substack{m=4 \\ \text{jafnar}}}^{\frac{N_g-1}{2}} g_1(\hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \right. \\
& + 2 \sum_{\substack{m=5 \\ \text{odda}}}^{\frac{N_g-3}{2}} g_1(\hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) + g_1(\hat{z}'_{\frac{N_g+1}{2}}) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_{\frac{N_g+1}{2}}) \left. \right] + \frac{h}{3} \left[+ g_2(\hat{z}'_{\frac{N_g+1}{2}}) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_{\frac{N_g+1}{2}}) \right. \\
& + 4 \sum_{\substack{m=\frac{N_g+3}{2} \\ \text{jafnar}}}^{N_g-3} g_2(\hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) + 2 \sum_{\substack{m=\frac{N_g+5}{2} \\ \text{odda}}}^{N_g-4} g_2(\hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m) \\
& \left. + g_2(\hat{z}'_{N_g-2}) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_{N_g-2}) \right]. \quad (\text{B.24})
\end{aligned}$$

Fæst af þessari jöfnu það skilyrði á N_g að $\frac{N_g+1}{2}$ verður að vera oddatala. Skilgreinum síðan vægisstuðla l_m

$$l_m = \begin{cases} 0 & m = 1, 2, N_g - 1, N_g \\ 1 & m = 3, N_g - 2 \\ 2 & m \text{ odda} \\ 4 & m \text{ jafnar} \end{cases} \quad (\text{B.25})$$

og

$$g(\hat{z}') = \begin{cases} g_1(\hat{z}') & \hat{z}' \leq 0 \\ g_2(\hat{z}') & \hat{z}' \geq 0. \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

Við getum þá skrifað jöfnu (B.24) sem

$$t_{\hat{E}} = \frac{2\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} + \frac{h}{3} \sum_{m=1}^{N_g} l_m g(\hat{z}'_m) \hat{\psi}_{\hat{E}}(\hat{z}'_m). \quad (\text{B.27})$$

Skilgreinum síðan $\tilde{g}_m = \frac{h}{3} l_m g(\hat{z}'_m)$ sem stak í vigrinum $\tilde{\mathbf{g}}$, þá getum við skrifað jöfnu (B.27) sem innfeldi tveggja vigra

$$t_{\hat{E}} = \frac{2\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}}} + \tilde{\mathbf{g}} \cdot \hat{\boldsymbol{\psi}}_{\hat{E}}. \quad (\text{B.28})$$

Síðan eru framferðarlíkurar

$$T_{\hat{E}} = \frac{\sqrt{\hat{E}}}{\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0}} |t_{\hat{E}}|^2. \quad (\text{B.29})$$

Skölum síðan leiðnina í G_0

$$\hat{G}_{\hat{E}} = \frac{G_{\hat{E}}}{G_0} = T_{\hat{E}}. \quad (\text{B.30})$$

Eins og áður sagði var forritunarmálið Fortran 90 notað við alla tölulega útreikninga og í öllum útreikningum sem sýndir eru í þessari skýrslu var notað $N_g = 301$ og $\hat{z}_{max} = 20$.

3 Deltamætti

Fáum að leiðnin fyrir deltamættið, jafna (23), verður sköluð í Rydbergum og Bohr geislum

$$\hat{G}_{\hat{E}} = \frac{G_{\hat{E}}}{G_0} = T_{\hat{E}} = 4(\hat{E} - \hat{V}_0) \sqrt{\frac{\hat{E}}{\hat{E} - \hat{V}_0}} \left[\left(\sqrt{\hat{E} - \hat{V}_0} + \sqrt{\hat{E}} \right)^2 - \frac{\hat{\beta}\hat{V}_0}{\sqrt{\hat{E}}} \left(\sin(2\sqrt{\hat{E}}\hat{z}_d - \frac{\hat{\beta}}{2\sqrt{\hat{E}}} \cos(2\sqrt{\hat{E}}\hat{z}_d) \right) + \frac{\hat{\beta}^2}{4\hat{E}}(4\hat{E} - 2\hat{V}_0) \right], \quad (\text{B.31})$$

þar sem $\hat{z}_d = z_d/a_0$ og $\hat{\beta} = \frac{\beta}{Ry \cdot a_0}$.