

# BAZELE FIZICE ALE NANOSTRUCTURILOR

## Introducere

Cercetarile actuale in domeniul fizicii solidului se concentreaza pe structuri semiconductoare cu dimensionalitate redusa (asa-numitele nanostructuri sau structuri mezoscopice) si superconductori. In particular, interesul pentru nanostructuri este justificat de evolutia (revolutia) tehnologica care permite fabricarea acestora pe scara din ce in ce mai larga si incorporarea lor in obiecte de uz general, pornind de la calculatoare pana la telefoane mobile. In acest curs ne vom ocupa de descrierea unor fenomene asociate transportului de sarcina in nanostructuri in prezenta unor campuri externe electrice si magnetice.

De ce este nevoie de un curs de bazele fizice ale nanostructurilor? Fizica starii solide pe care ati studiat-o pana in prezent nu este suficienta, deoarece descrierea proprietatilor unui material, si in special descrierea transportului electric depinde de dimensiunile materialului. Mai precis, pana acum ati studiat fenomene la scara microscopica si macroscopica.

Nivelul microscopic este cel care descrie un material la scara atomica si permite clasificarea acestora in metale, izolatoare si semiconductori. Tratarea cuantica la nivel microscopic permite introducerea modurilor proprii ale propagarii functiei de unda electronice in reseaua atomica (adica a undelor/functiilor Bloch), care la randul lor formeaza benzile de energie. Intr-un semiconductor exista doua benzi permise pentru miscarea electronilor: banda de conductie BC (cu energie mai mare) si banda de valenta BV, separate printr-o banda interzisa BI. Electronii din BC si golurile din BV au, in apropierea extremelor benzilor de energie, o relatie de dispersie parabolica, de tipul  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Masa efectiva (sau de banda)  $m$  este, in special in BC, anizotropica (datorita anizotropiei retelei cristaline) si deci este descrisa printr-un tensor. Masa efectiva fi pozitiva sau negativa si este legata de curbura benzii in domeniul considerat de energii si de vectori de unda ai undelor Bloch. BV, care este aproape plina cu electroni, conduce sarcina electrica prin miscarea starilor libere – goluri. BV isi are originea in starile electronilor de valenta, care formeaza legaturi covalente intre atomii din cristal. De fapt exista mai mult de o banda de valenta, aceste (sub)benzi fiind diferite prin valorile diferite ale masei efective.

BC este aproape libera si reprezinta starile electronice excitate care sunt ocupate de electronii provenind din legaturile covalente localizate care devin electroni delocalizati ce ocupa stari extinse in cristal. Acesti electroni aproape liberi sunt accelerati usor de un camp

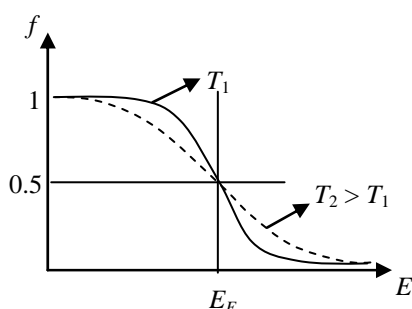
electric exterior si contribuie la curent. De aceea banda se numeste BC. De obicei masa golurilor este mai mare decat a electronilor.

Ex: GaAs, goli grele:  $0.6 m_0$ , electroni:  $0.067 m_0$ .

Intr-un semiconductor omogen, ultima banda ocupata se numeste banda de valenta (BV), iar prima banda libera se numeste banda de conductie (BC). Starile energetice grupate in benzi sunt ocupate in conformitate cu principiul lui Pauli: o stare caracterizata de un set de numere cuantice nu poate fi ocupata decat de un singur electron (in general, de o singura particula cu spin ne-intreg (fermioni)). Functia de distributie a electronilor dupa energii este de tip Fermi-Dirac,

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F) / k_B T]},$$

unde  $E_F$  este energia Fermi care, in cazul semiconductorilor, se afla in interiorul benzii interzise. (La metale  $E_F$  este in banda – ultima banda este doar partial ocupata cu electroni.)



Intr-un semiconductor, electronii pot trece din BV in BC datorita fluctuatiilor cuantice, agitatiei termice, etc. (banda interzisa (BI) este suficient de mica – spre deosebire de izolatori – pentru ca la temperatura camerei sa avem un numar de purtatori de sarcina in BC, locurile ramase libere in BV fiind echivalate cu prezenta/formarea golurilor in BV).

Intr-un semiconductor neimpurificat si cu mase egale ale electronilor si golurilor,  $E_F$  se afla la jumatatea BI, astfel incat in BC am un numar relativ mic de purtatori. Pentru a creste numarul de purtatori (curentul) materialul se impurifica cu atomi donori (care “dau” un electron in BC si care au nivele energetice apropiate de BC) sau acceptori (“accepta” un electron din BV, si au nivele energetice apropiate de BV). Aceste impuritati sunt atomi de alta natura decat cei care formeaza retea cristalina si deci provoaca deformari ale retelei cristaline in vecinatatea acestora. Se produce astfel o perturbare a periodicitatii retelei. Electronii sunt imprastiati de aceste impuritati (mai pot fi imprastiati si prin ciocniri electron-electron la

concentratii mari de purtatori de sarcina, prin ciocniri electron-fonon la temperaturi mari, sau prin ciocniri cu defectele rețelei).

La scara macroscopica, adica pentru dimensiuni ale conductorului mai mari decat 1 mm, un conductor (semiconductor sau metal) este caracterizat in punct de vedere al transportului electric de o conductivitate  $\sigma$ , functie de care se defineste conductanta  $G = \sigma A/L$ , unde  $A$  este sectiunea transversala si  $L$  lungimea conductorului. La nivel macroscopic este valabila legea lui Ohm si legile Kirchhoff dau relatiile intre curent si tensiune. Parametrul macroscopic  $\sigma$  este legat de parametrii microscopici prin formula Drude  $\sigma = ne^2\tau/m$ , unde  $n$  este densitatea de electroni si  $\tau$  este timpul mediu de relaxare. Intr-un semiconductor omogen, electronii de valenta/purtatorii de sarcina sunt liberi sa se miste in tot volumul semiconductorului si interactioneaza cu/sunt imprastiati de electronii/atomii inconjuratori, impuritati sau defecte. Conductivitatea se poate obtine dintr-o teorie semi-clasica Boltzmann, care se bazeaza pe raspunsul linear al materialului (caracterizat prin densitatea de curent  $\mathbf{j}$ ) la aplicarea unui camp electric local  $\mathbf{E}$ . Ecuatia Boltzmann descrie transportul difuziv al electronilor care presupune existenta unor precese de ciocnire aleatoare si independente in cursul carora atat energia cat si directia de propagare a electronului se modifica, astfel incat miscarea acestuia intr-un semiconductor omogen este dezordonata. In plus, ecuatia de transport Boltzmann presupune structuri in care potentialul variaza incet atat pe o scara spatiala de ordinul lungimii termice a electronilor (lungimea de unda de Broglie  $\lambda_B = h/mv$ ) cat si pe o scara temporală de ordinul de marime al proceselor de imprastiere. Timpul  $\tau$  se poate introduce fenomenologic sau poate fi calculat intr-un formalism microscopic folosind regula de aur Fermi. Aceasta regula da rezultate in concordanta cu experimentul daca  $\tau$  reprezinta timpul de imprastiere inelastica al electronilor cuplati slab cu mediul exterior (cu fononi, fotoni, etc.). In teoria Boltzmann, diferitele procese de imprastiere sunt tratate independent si rezultatele sunt mediate pe configuratia impuritatilor. Geometria probei nu este in general considerata ca relevanta.

Insa, la temperaturi suficient de joase, chiar la scara macroscopica, presupunerea unor procese de imprastiere independente nu descrie efectele de coerenta (in faza) a electronilor. Experimentele au confirmat ca exista o lungime caracteristica  $L_{rf}$  (lungimea de coerenta cuantica sau lungimea de relaxare a fazei) sub care toate "trajectoriile" posibile ale electronului interfera cuantic. In consecinta, sistemul nu mai poate fi descompus in subsisteme independente, sau, in cel mai bun caz, o astfel de descompunere trebuie facuta cu precautie pentru ca rezultatul masuratorilor incep sa nu mai aiba sens (sensul obisnuit la scara

macroscopica) sub  $L_{rf}$ .  $L_{rf}$  reprezinta distanta dupa care coerenta (memoria de faza) electronilor se pierde; ea are valori tipice de 10–30 nm in cazul metalelor si al semiconductorilor dopati la temperatura camerei, dar poate ajunge si la zeci/sute de microni la temperaturi mici si in materiale de inalta calitate (cu foarte putine defecte/impuritati). Memoria de faza este pierduta in procese care nu sunt invariante la inversia temporala, cum ar fi ciocniri electron-electron, procese de imprastiere dinamica, sau imprastierea pe impuritati care au un grad de libertate intern (de exemplu spin) care se modifica in cursul procesului.

O nanostructura se deosebeste de un semiconductor omogen prin faptul ca miscarea electronului este restrictionata (confinata) spatial intr-o regiune cu dimensiuni comparabile sau mai mici decat  $L_{rf}$ . Fizica conductorilor cu dimensiuni sub lungimea de coerenta se aplica structurilor cu dimensiuni intre cele microscopice si macroscopice si se dovedeste a fi diferita fata de cea a conductorilor macroscopici. Mai mult, proprietatile conductorilor mezoscopici nu sunt legate direct doar de dimensiunile acestora ci (si) de temperatura, lungimea de unda Fermi,  $k_F$ , si de gradul de dezordine din material. Proprietatile de transport in regim macroscopic se pot caracteriza prin:

- Dependenta de conductor. Conductorii mezoscopici din acelasi material si obtinuti prin aceleasi metode tehnologice au coeficienti de transport (de exemplu, conductivitati) diferite. In particular, fluctuatiile conductantei ca functie de campul magnetic (sau alti parametri externi) sunt diferite (dar reproductibile) in diferiti conductori.
- Nelocalitate. Proprietatile de transport ale conductorilor mezoscopici nu depind doar de portiunea conductorului intre punctele de masura, ci regiuni ale conductorului in afara “traietoriei” curentului influenteaza puternic aceste proprietati.
- Violarea unor simetrii macroscopice. Unele simetrii in proprietatile semiconductorilor macroscopici care nu rezulta doar din simetrii macroscopice ci presupun alte conditii (de exemplu, simetria (ca medie a) potentialului de imprastiere) nu sunt satisfacute in semiconductori microscopici. Un exemplu este magnetorezistenta longitudinala. O masurare a acestui parametru presupune injectarea si colectarea curentului la doua capete ale conductorului, si masurarea tensiunii induse intre doua puncte diferite de capete, de-a lungul conductorului. In aceste conditii magnetorezistenta nu mai este simetrica la inversarea sensului campului magnetic  $\mathbf{B}$ , ca in conductorii omogeni, deoarece ipoteza simetriei la inversarea lui  $\mathbf{B}$  a probabilitatii de transmisie a electronilor nu mai este satisfacuta in conductorii mezoscopici.

- Dependenta de geometria masuratorii. Masurarea rezistentei, de exemplu, depinde de ce tip de contacte (late sau inguste) sunt folosite in masuratoare, deoarece un electron are o dificultate mai mare de a-si pastra coerenta de faza in cazul in care revine in conductor din contacte late/macroscoapice.
- Dependenta de geometria probei/conductorului. In special in semiconductori mezoscopici cu mobilitate mare (sper deosebire de conductori metalici dezordonati) sursa rezistentei este chiar geometria/dimensiunile probei. In consecinta, teoria transportului electric in structuri mezoscopice trebuie sa depinda de dimensiunile probei (teoria Boltzmann nu depinde!).

Ce aduce nou din punct de vedere fizic regimul mezoscopic de transport? In primul rand, la scara  $L_{rf}$  notiunea de conductivitate locala (in sensul ca poate fi definita in orice punct) nu mai are sens. In schimb, se poate in continuare defini conductanta  $G$ , care leaga curentul electric  $I$  care trece printr-un conductor mezoscopic plasat intre doua contacte/rezervoare de electroni macroscoapice de diferenta de potential electrochimic  $\Delta\mu = eV$  aplicat intre contacte. Aceasta legatura se face prin intermediul formulei Landauer in care intervine notiunea de coeficient de transmisie al functiei de unda electronice. In interiorul conductorului mezoscopic electronii nu se mai propaga prin ciocniri (ca si particule) ci ca unde, exact ca fotonii intr-un ghid de unda optic. De aceea, transportul electronic la scara mezoscopica prezinta fenomene care nu au analog la scara macroscoapica, care includ:

- legea lui Ohm nu se mai aplica. In particular, rezistenta nu mai este aditiva, adica rezistenta a doi conductori in serie nu mai este egala cu suma rezistentelor conductorilor.
- cuantizarea conductantei. Conductanta variaza in trepte de  $e^2/h$ , a caror numar poate fi controlat in conductori cu latime comparabila cu lungimea de unda electronica.
- exista interferenta intre functii de unda electronice. In particular, daca un electron poate parcurge doua drumuri cu amplitudini de probabilitate complexe  $a_1 = |a_1| \exp(i\phi_1)$  si respectiv  $a_2 = |a_2| \exp(i\phi_2)$ , probabilitatea totala de transmisie  $T = |a_1 + a_2|^2$  prezinta oscilatii cu o diferenta de faza  $\phi_1 - \phi_2$ . Evident, acest fenomen are analog in optica.
- efect de tunelare rezonant. Functia de unda a electronului care se propaga intre doua bariere prezinta interferente care duc la o rezonanta/maxim in conductanta in cazul interferentei constructive. Un sistem electronic care se comporta in acest fel este similar cu un rezonator Fabry-Perot in optica.

- rezistivitate finita a metalelor la temperaturi joase, care implica localizarea slaba a electronilor (adica cresterea rezistentei datorita interferentei cuantice constructive a functiei de unda electronice imprastiate inapoi) si fluctuatii universale ale conductantei (interferente intre functii de unda electronice care au ca rezultat variatii mici dar reproductibile ale conductantei, de ordinul  $e^2/h$ , cand este variat campul magnetic exterior). Si aceste fenomene au analog in optica.
- blocada Coulomb in puncte cuantice (structuri confinate spatial in toate cele trei directii din spatiu), care se datoreaza interactiilor electrostatice intre purtatorii de sarcina. Acest fenomen este utilizat pentru masuratori foarte precise ale sarcinii electrice (se pot masura sarcini pana la  $10^{-5}$  electroni).

## **Transportul balistic al electronilor**

Regimul de transport in care faza functiei de unda electronice se pastreaza in urma unor ciocniri elastice pe impuritati si in care efectele de interferenta cuantica modifica conductivitatea unui conductor dezordonat (in care au loc imprastieri) este inca difuziv. Daca insa dimensiunile conductorului se reduc si mai mult si devin comparabile (sau mai mici) decat drumul liber mediu  $L_{lm}$ , electronii se propaga intre contacte practic fara imprastiere. Drumul liber mediu este o masura a distantei intre ciocniri succesive ale electronului cu impuritatile sau fononii care modifica impulsul initial al electronului. Acest regim de transport se numeste balistic. Regimul balistic are loc cand dimensiunile conductorului (cel putin pe o directie) sunt mai mici decat  $L_{lm}$  si  $L_{rf}$ . Primul parametru este critic in dispozitive bazate pe fenomene de transport al electronilor, al doilea in dispozitive bazate pe interferenta.  $L_{ml}$  este de acelasi ordin de marime ca  $L_{rf}$  dar in general de cateva ori mai mic: de ordinul a zeci de nm in filme metalice policristaline si de sute de microni in semiconductori cu mobilitate mare la temperaturi joase (mai mici de 4 K). Acesta este motivul pentru care regimul de transport balistic este mai usor de pus in evidenta in semiconductori.

In general in transportul balistic trebuie indeplinita si conditia ca dimensiunea conductorului sa fie mai mica decat lungimea de unda Fermi definita ca  $\lambda_F = \sqrt{2\pi/n}$  unde  $n$  este densitatea de electroni. Aceasta conditie este relevanta doar cand exista regiuni interzise

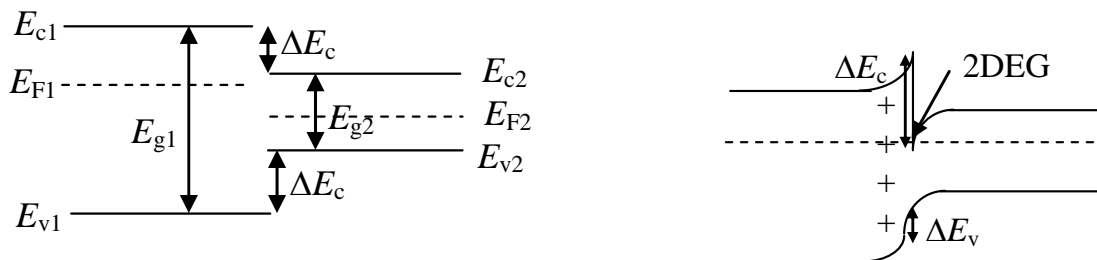
pentru propagarea clasica (bariere), caz in care lungimea de unda Fermi trebuie sa fie mai mare decat bariera; electronii trebuie sa “simta” regiunea din spatele barierei.

Spre deosebire de regimul difuziv in care ecuatia Schrödinger este valabila doar intre ciocniri, in cazul regimului balistic ea este valabila pe intreg parcursul electronului intre cele doua contacte. Mai mult, toti electronii sunt descrisi de aceeaasi ecuatie Schrödinger si se propaga “in faza”, ca si o unda electromagnetica intr-un ghid de unde. Din acest motiv, regimul de transport balistic mai este numit si optica electronica.

Pentru a pune in evidenta regimul de transport balistic este necesara fabricarea unor heterostructuri semiconductoare cu latimi foarte mici, care sa confineze miscarea electronilor pe una, doua sau trei directii. Heterostructurile semiconductoare se numesc gropi cuantice, fire cuantice sau puncte cuantice daca confineaza miscarea electronilor, respectiv, in una, doua sau trei dimensiuni. Densitatea de electroni in aceste structuri poate fi controlata prin potentiale electrice aplicate prin porti/electrozi de suprafata. Nu doar electronii ci si golurile si chiar cvasi-particulele (de exemplu, fononi) se propaga balistic in aceleasi conditii definite mai sus, dar avand propriile drumuri libere medii si lungimi de relaxare a fazei.

Confinarea electronilor se poate produce daca se modifica potentialul pe care electronul il simte, astfel incat sa se creeze o regiune de potential scazut in raport cu mediul inconjurator in care electronii sa se “adune”/numarul lor sa fie mai mare. O astfel de modificare a potentialului poate apare la interfata intre doua materiale semiconductoare cu energii Fermi diferite in urma tendintei de compensare a gradientului de purtatori care apare la interfata intre doua materiale 1 si 2 (vezi figura de mai jos, stanga). Avem deci nevoie de heterostructuri pentru a realiza confinarea spatiala. O heterostructura se compune din mai multe heterojunctiuni.

O heterojunctiune se formeaza prin contactul/alipirea a doi semiconductori cu BI diferite. Diagramele de benzi ideala si reala sunt date in figura de mai jos.

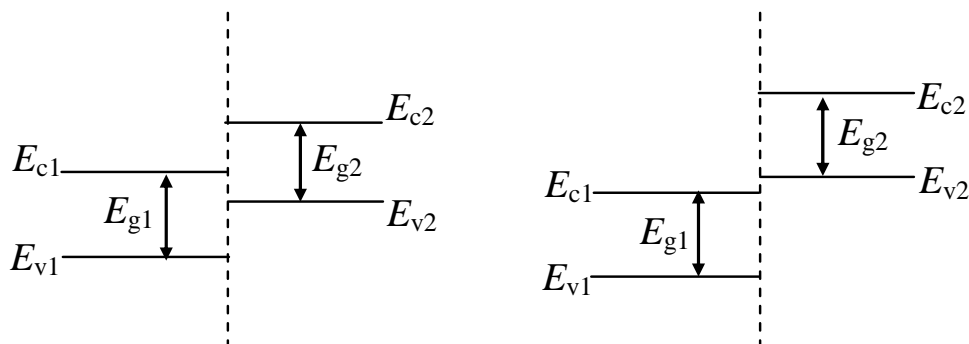


Curbarea benzilor de energie in apropierea interfetei se datoreaza redistribuirii sarcinii electrice. Daca  $E_{F1} > E_{F2}$ , electronii difuzeaza din materialul 1 lasand in urma donori incarcati pozitiv. Aceasta sarcina spatiala de la interfata da nastere unui potential electrostatic care

produce curbarea benzilor astfel incat la echilibru energia Fermi este constanta de-a lungul structurii (figura din dreapta).

In regiunea de interfata intre cele doua materiale electronii sunt confinati si se poate intampla ca energia Fermi sa fie in interiorul BC. In acest caz se formeaza o regiune ingusta, conductoare, care se numeste gaz electronic bidimensional 2DEG (two-dimensional electron gas). Pentru a se obtine o interfata buna/fara defecte, constantele de retea a celor doi semiconductori trebuie sa fie apropiate ca valoare. Heterostrutura de mai sus se numeste de tip I si este caracterizata de faptul ca BI ingusta este plasata in interiorul BI largi. Electronii si golurile se acumuleaza in acelasi strat, stratul 1. Discontinuitatea intre BC este egala cu diferenta dintre afinitatile electronice ale celor doi semiconductori, iar discontinuitatea BV este data, pentru heterostructuri de tip I, de  $\Delta E_c + \Delta E_v = E_{g2} - E_{g1}$ .

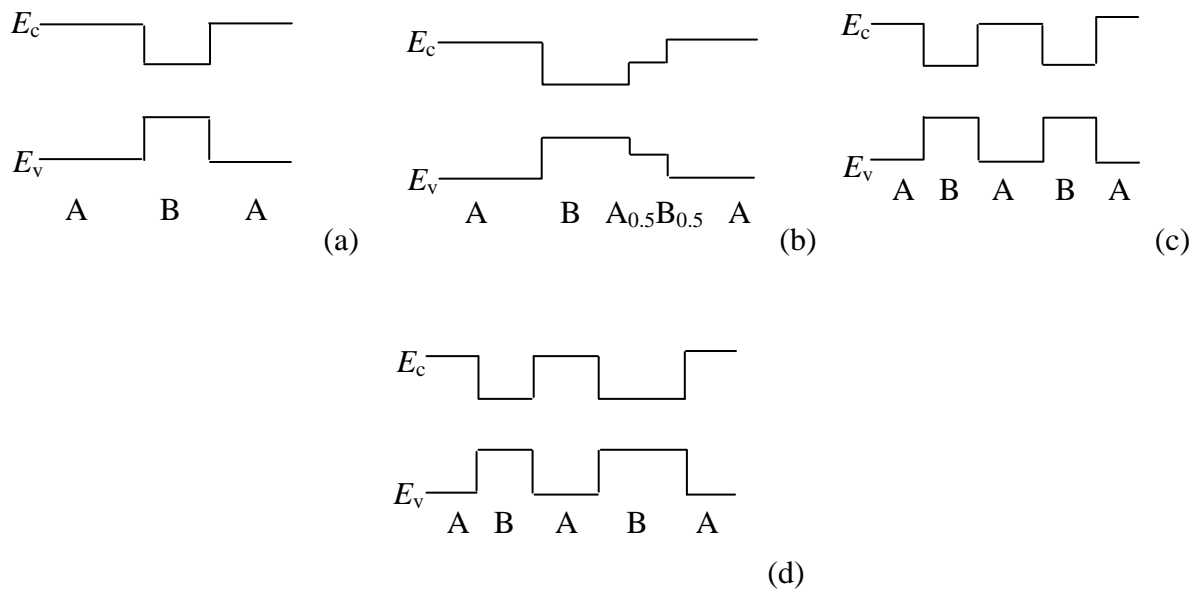
Mai exista heterostructuri de tip II (figura de mai jos-stanga) si de tip III (figura de mai jos-dreapta). In aceste cazuri are loc o deplasare in acelasi sens a benzilor celor doi semiconductori, structura rezultata putand avea o BI comuna (heterostructuri tip II) sau nu (heterostructuri tip III). In ambele cazuri electronii se acumuleaza in stratul 1, iar golurile in stratul 2 (cele doua tipuri de purtatori sunt separate spatial). Avem  $\Delta E_v - \Delta E_c = E_{g1} - E_{g2}$ .



Miscarea electronilor intr-o heterojunctiune se face, in aproximatia masei effective, rezolvand ecuatia Schrödinger in fiecare din cele doua regiuni. In acest caz, masa efectiva poate fi functie de pozitie (de exemplu, masa efectiva in cei doi semiconductori ai heterojunctiunii este diferita). De asemenea, discontinuitatea in BC si BV se modeleaza prin introducerea unei energii potientiale constante.

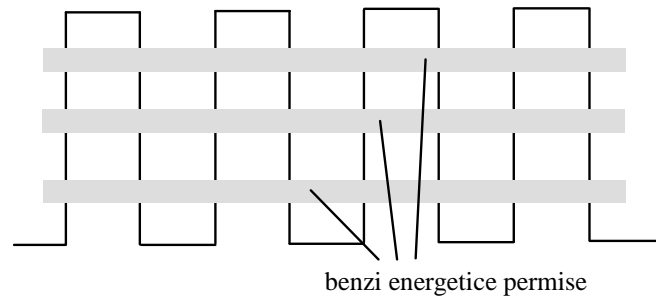
O heterostrutura este formata din mai multe heterojunctiuni. Un dispozitiv semiconductor, si in special un dispozitiv la scara mezoscopica include aproape in toate cazurile o heterostrutura. Exista o infinitate de heterostructuri (vezi figura de mai jos).





In figura (a) electronii si golurile se acumuleaza in stratul B; acelasi lucru se intampla si in figura (b) dar gradul de confinare este mai scazut pentru ca discontinuitatea in BC si BV intre diverse straturi este mai mica. Daca stratul B este suficient de ingust structurile din (a) si (b) se numesc groapa cuantica, si respectiv, groapa cuantica SQW (single quantum well) in trepte sau asimetrica. In figurile (c) si (d) avem o succesiune simetrica, respectiv asimetrica de heterostructuri sau de gropi cuantice daca stratul B este suficient de ingust. Daca avem o succesiune de doua gropi cuantice (ca in (c) si (d)) structura este rezonanta (vezi seminar), iar mai multe gropi cuantice formeaza o structura MQW (multiple quantum well). Intr-o structura de tip MQW functia de unda electronica este localizata intr-o groapa cuantica si transportul electronilor de la o groapa la alta in prezenta unor campuri externe, de exemplu, are loc prin tunelare secventiala intre gropi cuantice adiacente.

Daca gropile cuantice din MQW sunt suficient de apropiate unele de altele astfel incat electronii dintr-o groapa sa fie influentati de electronii din cealalta, structura se numeste superlatice; gropile cuantice sunt in acest caz cuplate. Interactia dintre electronii din gropile adiacente duce la formarea de benzi energetice permise si interzise, analog cu cazul electronilor dintr-o retea cristalina care formeaza BC si BV datorita periodicitatii retelei. Intr-o superlatice, pozitia si latimea benzilor energetice se poate controla prin grosimea straturilor A si B care formeaza superlaticea. Intr-o superlatice functia de unda electronica este extinsa in toata structura si stările de energie nu mai sunt discrete ci continue (sub forma de benzi). In figura de mai jos este reprezentata formarea unei superlatice (a benzilor permise si interzise de energie) pentru electronii din BC. Analog, se formeaza benzi si pentru golurile din BV.



## Subbenzi energetice si densitati de stari in transportul balistic

Transportul balistic are loc cand cel mult cateva procese de imprastiere au loc, astfel incat miscarea electronilor este caracterizata in acest regim de o energie constanta  $E$  si poate fi descrisa de ecuatia Schrödinger independenta de timp pentru anvelopa functiei de unda electronice  $\Psi$ , care variaza doar putin intr-o celula elementara a cristalului:

$$-\frac{\hbar^2}{2}[\nabla(\nabla\Psi/m)] + V\Psi = E\Psi .$$

In aceasta ecuatie, valabila cand cuplajul intre diferite benzi electronice este neglijabil,  $m$  este masa efectiva a electronului care incorporeaza efectul asupra miscarii acestuia a potentialului periodic al cristalului si  $V$  este energia potentiala (alta decat cea cristalina). Energia potentiala  $V$  include discontinuitatile in banda de conductie in heterojonctiuni, care este componenta dominanta in cazul doparii slabe si a unui numar mic de purtatori liberi, potentialul electrostatic datorat donatorilor si acceptorilor ionizati, care se determina dintr-o solutie self-consistenta a ecuatiilor cuplate Schrödinger si Poisson, precum si potentialele self-consistente Hartree si de schimb datorate purtatorilor liberi. Energia electronilor  $E$  in ecuatia de mai sus se masoara fata de minimul benzii de conductie  $E_c$ ; s-a presupus un semiconductor izotrop.

Solutia ecuatiei Schrödinger necesita conditii la limita adecvate. Sa presupunem initial ca electronii din banda de conductie se misca aproape liber (lucru care nu este adevarat in general in semiconductorii macroscopici!) intr-un potential  $V = 0$ . Ne intereseaza solutia ecuatiei Schrödinger in acest caz si distributia dupa energii a electronului caracterizata de densitatea de stari energetice  $\rho(E)$  care reprezinta numarul de stari energetice pe unitate de volum a cristalului cu energii intre  $E$  si  $E + dE$  ( $E$  depinde in general de vectorul de unda  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ). Daca notam cu  $\Omega = L_x L_y L_z$  volumul cristalului cu dimensiuni  $L_x$ ,  $L_y$ , si respectiv  $L_z$  pe directiile  $x$ ,  $y$  si  $z$ , electronul este descris de o functie de unda normalizata

$$\Psi(x, y, z) = \Omega^{-1/2} \exp(ik_x x + iyk_y + izk_z)$$

cu  $\int_{\Omega} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$ . Punand conditia de periodicitate (insensitivitate la suprafata cristalului)

$\Psi(x, y, z) = \Psi(x + L_x, y + L_y, z + L_z)$ , rezulta ca impulsul electronului este  $k_x = 2\pi p / L_x$ ,  $k_y = 2\pi q / L_y$ ,  $k_z = 2\pi r / L_z$ , unde  $p, q, r$  sunt numere intregi. Impulsul electronului este practic continuu daca  $L_x, L_y$ , si  $L_z$  sunt foarte mari; aceste relatii pentru impuls nu intervin decat in calculul densitatii de stari (vezi mai jos). Atunci, relatia de dispersie pentru electronul cvasi-liber intr-un semiconductor macroscopic este

$$E(k) = E_c + \hbar^2 k^2 / 2m$$

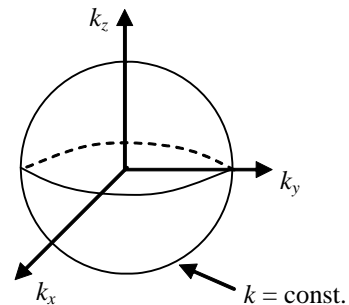
unde  $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ .

Deoarece vectorul de unda este un numar cuantic, in spatiul  $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = (2\pi / L_x)(2\pi / L_y)(2\pi / L_z) = (2\pi)^3 / \Omega$  nu se poate gasi decat un electron (doi, daca consider degenerare de spin) si deci numarul de stari in spatiul  $\mathbf{k}$  intr-un volum cu  $k = \text{const.}$  este

$$N(k) = \frac{4\pi k^3 / 3}{(2\pi)^3 / \Omega} = \frac{\Omega}{(2\pi)^2} \frac{2k^3}{3}$$

obtinem numarul de stari ca functie de energie

$$N(E) = \frac{\Omega}{(2\pi)^2} \frac{2}{3} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{3/2}.$$



Densitatea de stari pentru semiconductorul omogen in care electronul este cvasi-liber si poate fi descris de o functie de unda este deci

$$\rho_{3D}(E) = \frac{1}{\Omega} \frac{dN}{dE} = \frac{1}{(2\pi)^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}.$$

Ce se intampla daca miscarea electronului este confinata spatial? In aceste conditii (in care electronii se misca fara a se ciocni) ecuatiile lor de miscare este ecuatiile Schrödinger. Dupa cum vom vedea in cele ce urmeaza, constrangerile asupra miscarii electronilor in structurile

balistice impun modificarea relatiei de dispersie si aparitia unor nivele de energie discrete de-a lungul directiei constrangerii din care rezulta discontinuitati in densitatea de stari. De exemplu, intr-o groapa cuantica electronii de conductie sunt liberi sa se miste de-a lungul directiilor  $x$  si  $y$ , si sunt confinati de bariere de potential de-a lungul axei  $z$  intr-o regiune de latime  $L_z$ . Pentru bariere de inaltime infinita, functia de unda electronica

$$\Psi(x, y, z) = \sqrt{2/L_z} \sin(k_z z) \sqrt{1/L_x L_y} \exp(ik_x x) \exp(ik_y y),$$

obtinuta din ecuatia Schrödinger pentru  $V = 0$ , cu  $L_x$  si  $L_y$  dimensiunile dispozitivului de-a lungul axelor  $x$  si  $y$ , trebuie sa satisfaca conditiile la limita  $\Psi(x, y, 0) = \Psi(x, y, L_z) = 0$ . Acestea induc un spectru discret  $k_z = p\pi/L_z$  pentru componenta impulsului pe  $z$ , cu  $p$  un intreg, si o relatie de dispersie de forma

$$E(k_x, k_y, k_z) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{p\pi}{L_z} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2),$$

unde  $E_p$  limita inferioara (cut-off) a energiei pentru subbanda sau modul transversal cu indice  $p$ . Distanta in energie intre nivele discrete  $p$  creste daca  $L_z$  descreste, adica daca electronii devin mai puternic confinati. Existenta nivelelor discrete se poate observa prin efecte specifice (valori discrete, “in treapta” ale conductivitatii electrice) doar daca  $L_z$  este suficient de mic ca distanta intre nivelele discrete sa fie mai mare decat energia termica  $k_B T$ .

Desi conditiile la limita periodice impuse pe directiile  $x$  si  $y$  necesita de asemenea cuantizarea  $k_x$  si  $k_y$  de forma  $k_x = q(2\pi/L_x)$ ,  $k_y = r(2\pi/L_y)$ , cu  $q$  si  $r$  intregi, spectrul energetic ramane cvasi-continuu in planul  $k_x-k_y$  deoarece  $L_x, L_y \gg L_z$ . Cuantizarea componentelor vectorului de unda de-a lungul axelor  $x$  si  $y$  influenteaza doar densitatea de stari deoarece unei stari individuale  $i$  se asociaza o arie  $(2\pi/L_x) \times (2\pi/L_y)$  in planul bidimensional  $k_x-k_y$ . In aceste conditii, numarul total de stari (dublu) degenerate in spin cu un numar de unda mai mic decat  $k$  (sau cu o energie mai mica decat  $E$ , pentru  $E > E_p$ ), care ocupa in planul  $k_x-k_y$  o arie  $\pi k^2 = \pi(k_x^2 + k_y^2)$ , este  $N(k) = 2\pi k^2 / [(2\pi/L_x)(2\pi/L_y)] = k^2(L_x L_y) / 2\pi$  (sau  $N(E) = m(L_x L_y)(E - E_p) / \pi \hbar^2$ ). Atunci, densitatea de stari pe unitate de arie  $S = L_x L_y$  si pe unitate de energie in subbanda  $p$  este

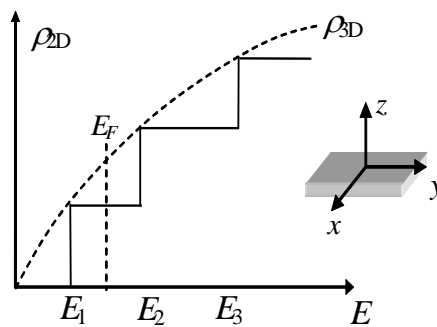
$$\rho_{2D,p}(E) = \frac{1}{S} \frac{dN(E)}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \mathcal{G}(E - E_p) = \rho_0 \mathcal{G}(E - E_p),$$

unde  $\mathcal{G}$  este functia treapta, iar densitatea totala de stari  $\rho_{2D}(E) = \sum_p \rho_{2D,p}$  este discontinua,

spre deosebire de semiconductorii omogeni in care nu sunt impuse constrangeri spatiale asupra miscarii electronilor si in care densitatea totala de stari este parabolica (vezi mai sus):

$\rho_{3D}(E) \propto \sqrt{E - E_c}$ . In ultimul caz  $N(k) = (4\pi k^3 / 3)(L_x L_y L_z) / (2\pi)^3 \propto E^{3/2}$ . A se observa ca

$$\rho_{3D}(E = (n\pi / L_z)^2 \hbar^2 / 2m) = \rho_{2D}(E_n)$$



Densitatea de electroni de echilibru pe unitate de suprafata este

$$\begin{aligned} n &= \int_0^\infty \sum_p \rho_{2D,p}(E) f(E) dE = k_B T \frac{m}{\pi\hbar^2} \sum_p \ln[1 + e^{(E_F - E_p)/k_B T}] \\ &= \sum_p n_p = k_B T \rho_0 \sum_p \ln[1 + e^{(E_F - E_p)/k_B T}] \end{aligned}$$

nivelele de energie fiind ocupate de electroni in acord cu functia de distributie Fermi-Dirac

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F) / k_B T]}.$$

La temperaturi mici sau in cazul degenerat, cand  $k_B T \ll E_F$ , functia de distributie Fermi-Dirac devine proportionala cu  $\mathcal{G}(E_F - E)$  si toate subbenzile electronice sunt umplute pana la nivelul energiei Fermi si goale deasupra ei. In acest caz toti electronii care participa la transport au energii apropiate de  $E_F$ , spre deosebire de regimul difuziv de transport in care electronii au o distributie larga de energii. Deci, la temperaturi mici,  $n_{2D} = \rho_0(E_F - E_1) = (m / \pi\hbar^2)(E_F - E_1)$ .

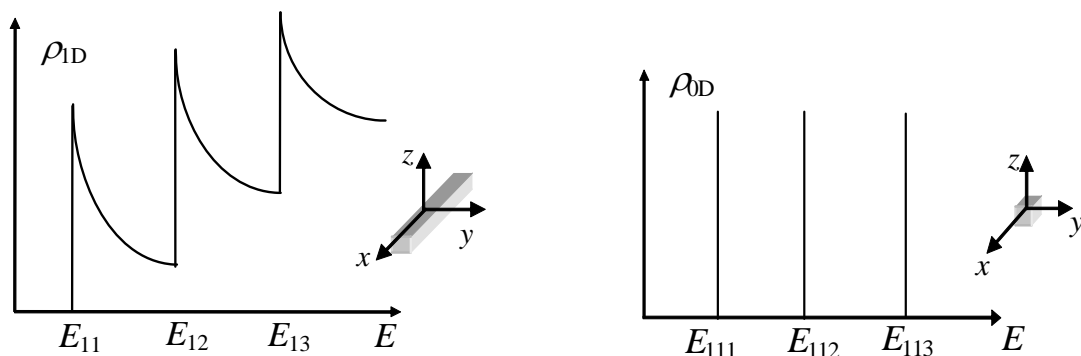
Numarul de subbenzi  $M(E)$  ocupate la temperaturi mici cu electroni cu energie  $E$  se obtine numarand modurile transversale cu limita inferioara a energiei mai mica decat  $E$ . Caracteristicile sistemului 2D devin pregnante cand  $T$  si  $L_z$  sunt mici, dar la temperaturi mici densitatea de electroni este mica.

Analog, daca miscarea electronului este confinata de potentiale cu inaltime infinita de-a lungul directiilor  $y$  si  $z$ , conditiile la limita impuse functiei de unda electronice

$$\Psi(x, y, z) = 2/\sqrt{L_y L_z} \sin(k_y y) \sin(k_z z) \sqrt{1/L_x} \exp(ik_x x)$$

implica  $k_y = p\pi/L_y$ ,  $k_z = q\pi/L_z$ , cu  $p, q$  intregi. Intr-un astfel de fir balistic unidimensional electronii sunt liberi sa se miste de-a lungul directiei  $x$ , relatia de dispersie fiind

$$E(k_x, k_y, k_z) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{p\pi}{L_y} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{q\pi}{L_z} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = E_{pq} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}.$$



Numarul total de stari cu componenta vectorului de unda de-a lungul axei  $x$  mai mica decat  $k_x$ , care ocupa o ‘‘arie’’ in planul  $k_x$  egala cu  $2k_x$ , este acum  $N(k_x) = 2 \times 2k_x / (2\pi / L_x)$ , unde primul factor 2 provine de la degenerescenta de spin. Densitatea de stari in planul  $k_x$  pe unitate de lungime,  $\rho_{1D}(k_x) = L_x^{-1} dN / dk_x$ , este constanta si egala cu  $2/\pi$ , jumatate din aceasta valoare reprezentand contributia starilor cu  $k_x$  pozitiv si cealalta jumatate contributia starilor cu  $k_x$  negativ.  $\rho_{1D}(k_x)$  corespunde unei densitati totale de stari dependente de energie  $\rho_{1D}(E) = (1/\pi)(2m/\hbar^2)^{1/2} \sum_{p,q} (E - E_{pq})^{-1/2}$ , care este reprezentata in figura de mai sus. Ultima formula rezulta din faptul ca  $N(E) \propto \sqrt{E - E_{pq}}$  si  $\rho_{1D}(E) \propto dN(E)/dE \propto 1/\sqrt{E - E_{pq}}$ .

In puncte cuantice miscarea electronilor este confinata in toate directiile, spectrul de energie

$$E(k_x, k_y, k_z) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{p\pi}{L_x} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{q\pi}{L_y} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{r\pi}{L_z} \right)^2 = E_{pqr}$$

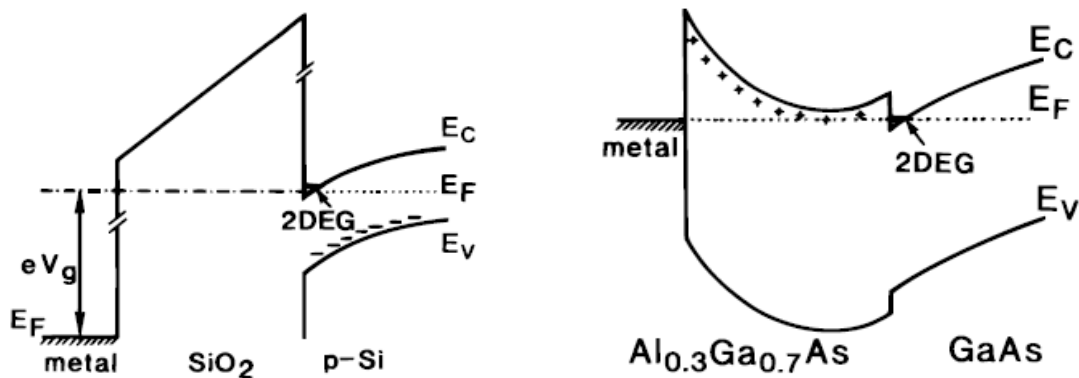
fiind discret, ca in atomi sau molecule. Din acest motiv punctele cuantice, cu o densitate de stari  $\rho_{0D} \propto \delta(E - E_{pqr})$  (vezi figura de mai sus-dreapta), pot fi considerate ca atomi artificiali.

## Gazul electronic bidimensional

Daca intr-o groapa cuantica (vezi figura de mai sus) pozitia nivelului Fermi level intr-o groapa cuantica este intre prima si a doua subbanda energetica, densitatea de electroni pe unitate de suprafata,  $n = (m/\pi\hbar^2)(E_F - E_1)$ , este legata de numarul de unda Fermi  $k_F$  prin  $k_F = \sqrt{2\pi n}$ . Numarul de unda Fermi este dat de energia cinetica a electronilor:  $E_{kin} = E_F - E_1 = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ . Cand doar starea fundamentala (cu  $n = 1$ ) este ocupata cu electroni, sistemul de electroni bidimensional atinge limita cuantica extrema. Electronii formeaza in acest caz un gaz de electroni bidimensional (two-dimensional electron gas 2DEG), care are o comportare metalica deoarece  $E_F$  este in interiorul benzii de conductie. Dar, spre deosebire de metale, avantajul in acest caz este ca densitatea electronica, care este mica (si care implica o lungime de unda Fermi mare, comparabila cu dimensiunile dispozitivelor mezoscopice, deci cu drumul liber mediu) poate fi controlata aplicand un camp electric exterior.

Observatie: spre deosebire de semiconductorii mesoscopici, unde in general o singura subbanda este ocupata, in metale densitatea de electroni este mult mai mare si, chiar in filme de 10 nm grosime, cateva zeci de subbenzi sunt ocupate. In consecinta, putem trata metalele ca si conductori tridimensionali.

Primele sisteme 2DEG s-au format in straturi de inversie in Si si in heterostructuri GaAs/AlGaAs (vezi figurile de mai jos). In prezent aceste sisteme se formeaza crescand straturi foarte subtiri de diferite materiale semiconductoare, unul peste celalalt printr-o metoda numita MBE (molecular beam epitaxy). Latimea tipica a 2DEG este de 10 nm, concentratia de purtatori fiind de  $10^{12}/\text{cm}^2$ , astfel incat lungimea de unda Fermi este de 35 nm. Concentratia de purtatori in 2DEG poate fi modificata/scazuta prin aplicarea unui potential negativ pe poarta.



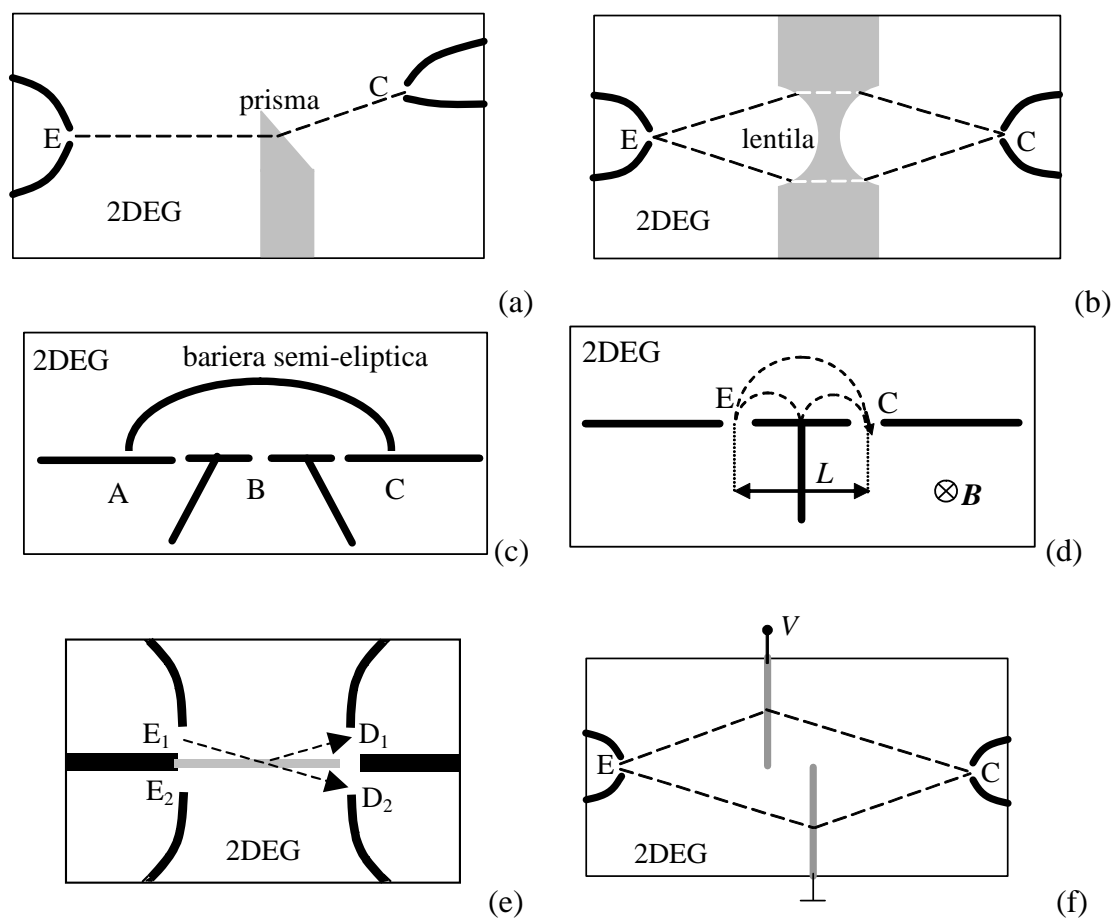
In figura de mai sus, stanga, un substrat de tip  $p$  din Si este acoperit de un strat de SiO<sub>2</sub> care joaca rolul de izolator (strat cu BI larga) intre suprafata (100)Si si electrodul metalic de poarta. Daca se aplica o tensiune suficient de mare si pozitiva pe poarta,  $V_g$ , un strat 2DEG este indus electrostatic in stratul  $p$ -Si de sub poarta. Concentratia de suprafata a electronilor (sau densitatea de suprafata),  $n_s$ , este data de  $en_s = C_{ox}(V_g - V_{th})$ , unde  $V_{th}$  este tensiunea de prag pentru formarea stratului de inversie, si  $C_{ox} = \epsilon_{ox}/d_{ox}$ , cu  $\epsilon_{ox} = 3.9\epsilon_0$  pentru SiO<sub>2</sub> si  $d_{ox}$  grosimea stratului de oxid, este capacitatea pe unitate de suprafata a electrodului de poarta. Dependenta lineara a  $n_s$  de  $V_g$  este una dintre cele mai importante proprietati ale stratului de inversie in Si. La interfata Si/SiO<sub>2</sub> se formeaza o groapa de potential de forma triunghiulara. Datorita confinarii intr-o singura directie in aceasta groapa de potential, banda de conductie 3D se separa intr-o serie de subbenzi 2D si electronii se pot misca liber paralel cu interfata.

In sistemele 2DEG care se formeaza la interfata dintre straturi de GaAs intrinsic si AlGaAs dopat  $n$  (vezi figura de mai sus, dreapta), separatia spatiala a atomilor dopanti in AlGaAs de electronii liberi care formeaza un strat de inversie in GaAs la interfata cu AlGaAs asigura rate de imprastiere foarte mici. In heterostructuri GaAs/AlGaAs dopate gradat, stratul 2DEG se formeaza la interfata GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, electronii fiind confinati de groapa de potential repulsiva formata de discontinuitatea intre BC a celor doi semiconductori si de potentialul atractiv datorita donatorilor incarcati pozitiv in AlGaAs. (In Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As largimea BI este  $E_g = 1.424 + 1.245x$ , pentru  $x < 0.45$ .) Pentru a reduce imprastierea pe acesti donori, stratul dopat este separat de interfata printr-un strat nedopat AlGaAs. Spre deosebire de structura din figura de mai sus, stanga, aceasta interfata nu intrerupe periodicitatea cristalina (GaAs si AlGaAs au aproximativ aceeasi constanta de retea). Deci, deoarece nu am imprastiere pe dislocatiile interfetei mobilitatea electronilor (raportul intre viteza de drift si campul electric aplicat) creste cu ordine de marime. Ca si in cazul stratului de inversie in Si, de obicei o



singura subbanda este populata. GaAs are banda interzisa directa cu un singur minim (Si are banda interzisa indirecta, cu 6 minime echivalente ale BC pe directiile (100) in spatiul reciproc!) si imprastierea intervali (ca in cazul Si) este absenta.

Densitatea de electroni in 2DEG poate fi variata modificand energia cinetica a electronilor prin tensiunea electrostatica negativa aplicata pe porti Schottky de suprafata situate in apropiere de 2DEG; aceasta tensiune saraceste de electroni stratul 2DEG sub poarta si lateral fata de marginea geometrica a portii pana cand nu mai raman electroni liberi si se creaza astfel o bariera pentru electroni.



Reprezentare schematica a unei (a) prisme pentru electroni, (b) lentila refractiva pentru electroni, (c) lentila cu reflexie totala, (d) lentila magnetica pentru electroni, (e) divizor de fascicul, si (f) interferometru. Electronii sunt emisi din orificiul ingust E si sunt colectati de colectorul C. Liniile intrerupte reprezinta traiectoriile electronilor

Coerenta functiei de unda electronice in structuri balistice si posibilitatea modificarii numarului de unda al electronilor permite implementarea analogului electronic al sistemelor optice si a dispozitivelor de interferenta. In figurile de mai sus sunt aratate schematic, o prisma pentru electroni, diverse tipuri de lentile, un divizor de fascicul si un interferometru. Ca si in

teoria electromagnetica clasica, refractia la interfata dintre doua sisteme 2DEG cu densitati de electroni  $n_1$  si  $n_2$  satisface legea Snell pentru electroni balistici:

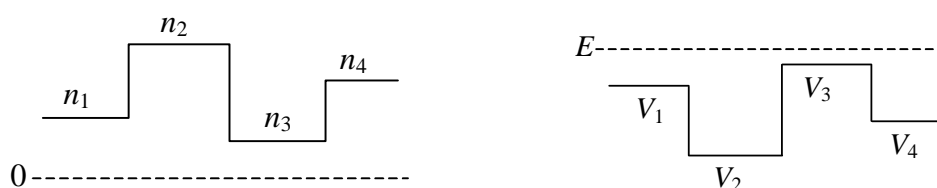
$$k_1 \sin \theta_1 = k_2 \sin \theta_2,$$

sau  $\sin \theta_1 / \sin \theta_2 = (n_2 / n_1)^{1/2}$ , unde  $\theta_i$  este unghiul in regiunea  $i$  cu normala la interfata. Functia de unda electronica este partial reflectata si partial transmisa la interfata. Constrangeri inguste in 2DEG create de porti de saracire de electroni (in negru in figurile de mai sus) actioneaza ca surse de electroni cu spectru unghiular larg, electrozii gri in figurile de mai sus indicand porti ce saracesc partial 2DEG si astfel refracta undele electronice.

Analogia intre propagarea balistica a electronilor in conductori si propagarea undelor electromagnetice se bazeaza pe analogia formala intre ecuatia Schrödinger independenta de timp pentru functia de unda electronica si ecuatia Helmholtz

$$\nabla^2 \mathbf{F} + k^2 \mathbf{F} = 0$$

satisfacuta de componenta  $\mathbf{F}$  a campului electromagnetice (camp electric, camp magnetic, sau potential vector). Caracterul vectorial al  $\mathbf{F}$  sugereaza ca eventualele analogii cantitative intre parametrii electronici si ai luminii (energie, masa efectiva, energie potentiala si, respectiv, frecventa, permitivitate electrica si permeabilitate magnetica) depind de care componenta a campului electromagnetice este comparata cu functia de unda electronica scalara. Diferite seturi de parametri analogi intre functia de unda electronica si campul electromagnetice se gasesc daca, pe langa similaritatea evidenta  $\mathbf{F} \leftrightarrow \Psi$ , avem  $k \leftrightarrow [2m(E - V)]^{1/2} / \hbar$ , si se iau in considerare conditiile la limita pentru diferite componente ale campului  $\mathbf{F}$ . Din aceste echivalente rezulta ca o heterostructura, descrisa de straturi cu  $V$  diferit, are ca analog in optica un mediu stratificat in care indicele de refractie  $n = k / k_0$  difera (vezi figura de mai jos). In plus, undele monocromatice sunt echivalente cu electroni de o energie fixata (electroni la energia Fermi, la temperaturi mici).



## Rezistenta unui conductor balistic

Un transfer net de electroni de-a lungul unui conductor balistic plasat intre doua contacte care actioneaza ca rezervoare de electroni este posibil daca se aplica o tensiune exterioara  $V$  intre contacte. Aceasta tensiune aduce sistemul de electroni in conductorul balistic departe de echilibru, astfel incat nu exista o energie Fermi comuna; in locul ei, se poate defini un nivel cvasi-Fermi ce variaza spatial si ia valorile  $E_{F1}$  si  $E_{F2}$  in contactele din stanga si, respectiv, dreapta. Curentul net poate fi usor calculat daca contactele nu au reflexii, adica daca electronii pot intra in ele dinspre conductor fara a suferi reflexii. Daca  $E_{F1} > E_{F2}$ , astfel incat pentru o tensiune aplicata mica  $E_{F1} - E_{F2} = eV$ , doar electronii care curg dinspre starea ocupate din stanga catre starea libere din dreapta contribuie la curentul net. La temperatura de zero absolut exista un current net doar in intervalul de energii electronice  $E_{F2} < E < E_{F1}$ , contributia la curentul de electroni in fiecare subbanda ocupata fiind aditiv in conditiile in care conductorul balistic are o sectiune constanta; in acest caz nu exista imprastiere a electronilor dintr-o subbanda (mod transversal) in alta. Curentul net intr-o subbanda datorat densitatii de electroni aditionale in contactul din stanga,  $\delta n = (dn/dE)eV$ , este  $I = ev\delta n$ , cu  $v = \hbar^{-1}(dE/dk)$  viteza electronilor de-a lungul directie de curgere a curentului. Prelucrand aceasta expresie,

$$I = (e^2 / \hbar)V(dn/dE)(dE/dk),$$

sau

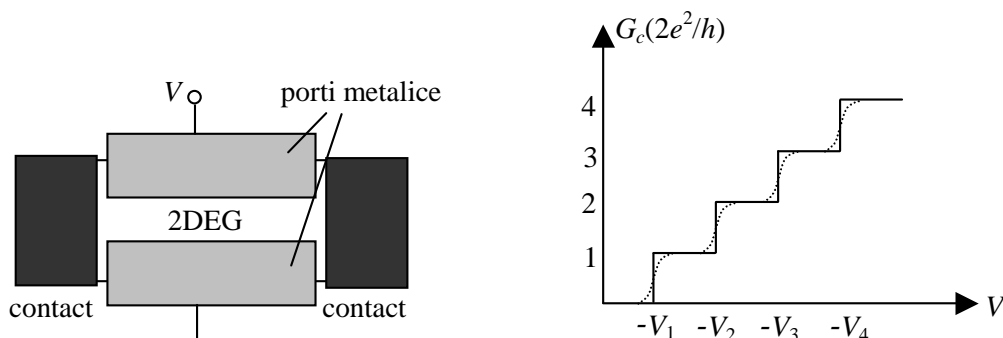
$$I = (2e^2 / h)V$$

pentru un conductor unidimensional pentru care  $(dn/dE)(dE/dk) = dn/dk = \rho_{1D}(k)/2$ , cu  $\rho_{1D}(k) = 2/\pi$ , pentru electronii ce se deplaseaza in directia tensiunii aplicate (valoarea este jumătate din cea de la firul cuantic deoarece se iau in considerare doar jumătate dintre electroni, adica cei care se misca de-a lungul uneia din cele doua directii posibile). Curentul total se poate exprima ca  $I = (2e^2 / h)MV$  daca numarul modurilor transversale  $M(E)$  este constant in intervalul energetic  $E_{F2} < E < E_{F1}$ , conductorul balistic avand o conductanta  $G_c = I/V = 2e^2M/h$  sau, echivalent, o rezistenta

$$R_c = 1/G_c = \frac{h}{2e^2 M} \cong \frac{12.9 \text{ k}\Omega}{M}.$$

In regimul de propagare fara ciocniri rezistenta poate fi cauzata doar de diferenta intre numarul finit de moduri transversale care se pot propaga in conductorul balistic si numarul infinit de moduri transversale in contacte. Rezistenta se numeste rezistenta de contact deoarece aceasta diferenta apare la interfata conductor/contact.  $R_c$  descreste cu numarul modurilor transversale (a subbenzilor energetice) in conductorul balistic.

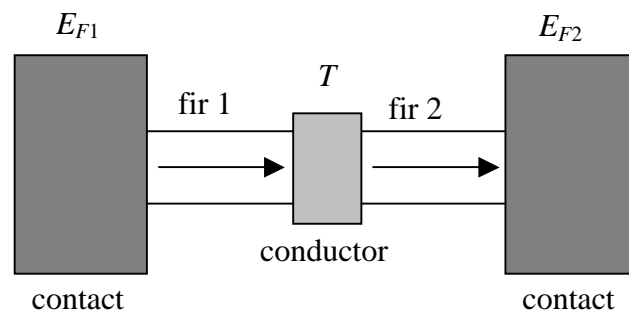
Spre deosebire de conductanta  $G = \sigma A/L$  in material macroscopice, unde  $\sigma$  este conductivitatea materialului,  $L$  lungimea si  $A$  sectiunea transversala a dispozitivului, conductanta structurilor balistice nu depinde de lungimea conductorului. (O generalizare nejustificata a domeniului de valabilitate a formulei conductantei din cazul macroscopic ar implica o crestere foarte mare a  $G$  in conductorii balistici daca  $L$  scade.) Totusi, in conductorii balistici  $G_c$  depinde de  $W$  (latimea conductorului unidimensional) deoarece numarul de moduri transversale ocupate de electroni care se propaga cu numarul de unda Fermi poate fi estimat din  $M = \text{Int}[k_F W / \pi]$ , unde  $\text{Int}[\ ]$  semnifica valoarea intreaga a argumentului. Aceasta dependenta poate fi pusa in evidenta masurand  $G_c$  intr-un conductor balistic delimitat dintr-un 2DEG printr-o pereche de porti metalice (vezi figura de mai jos), latimea conductorului fiind determinata de tensiunea negativa  $-V_M$  aplicata pe porti. O crestere a conductantei in trepte de inaltime  $2e^2/h$  se observa la temperaturi mici (linia plina in figura de mai jos) si/sau pentru electroni confinati cu intervale mari intre nivele de energie cand  $M$  creste cu o unitate. Aceasta discontinuitate este "netezita" de miscarea termica (linia punctata).



## Formula Landauer

Formula gasita anterior pentru conductanta structurilor balistice presupune ca electronii injectati de contactul din stanga sunt transmisi cu probabilitate unitate catre contactul din dreapta. Acesta nu este intotdeauna cazul. In particular, transmisia partiala (mai mica decat unitatea) a electronilor de la un contact la celalalt are loc cand conductorul balistic este compus din parti care difera prin latime sau energie potentiala. In acest caz, conductanta se calculeaza modeland conductorul cu probabilitatea de transmisie  $T$  ca fiind conectat la doua contacte fara reflexie prin fire conductoare balistice care au fiecare  $M$  moduri transversale. In modelul prezentat in figura de mai jos,  $T$  este probabilitatea medie ca un electron injectat in firul conductor 1 sa fie transmis in firul conductor 2, conductanta masurata intre contacte la temperatura zero absolut fiind data de formula Landauer

$$G = \frac{2e^2}{h} MT \quad \text{sau} \quad I = \frac{2e}{h} MT(E_{F1} - E_{F2}).$$



In aceasta formula, conductanta nu depinde de natura sau de dimensiunile geometrice ale probei, spre deosebire de cazul macroscopic. Consecinta este ca in conductorii mezosocopici conductivitatea  $\sigma$  nu are sens/ea nu mai este o constanta de material pentru conductor. Expresia de mai sus poate fi interpretata ca versiunea mezoscopica a relatiei Einstein  $\sigma = e^2 \rho D$  daca se inlocuieste conductivitatea  $\sigma$  cu  $G$ , densitatea de stari  $\rho$  cu  $M$  si constanta de difuzie  $D$  cu  $T$ . Rezistenta totala  $R = h/(2e^2 MT) = R_c + R_s$  masurata intre contacte este suma intre rezistenta de contact  $R_c = h/(2e^2 M)$  si rezistenta unui element care "imprastie" electronul cu transmisie  $T$ ,  $R_s = h(1-T)/(2e^2 MT)$ , care ar fi masurata intre cele doua fire conductoare.

Aceasta identificare permite calculul rezistentei mai multor centre de imprastiere cu probabilitati de transmisie  $T_i$  conectate in serie ca  $R_s = \sum_i R_{s_i}$ , cu  $R_{s_i} = h(1 - T_i)/(2e^2 M T_i)$ , sau calculul probabilitatii totale de transmisie ca  $(1 - T)/T = \sum_i (1 - T_i)/T_i$ . Aceasta lege de adunare, care poate fi obtinuta alternativ prin sumarea contributiilor undelor succesive partial transmise, este o expresie a naturii coerente a functiei de unda electronice in conductori balistici.

Observatie: raspunsul linear,  $I \propto (E_{F1} - E_{F2}) \propto V$  nu este intotdeauna valabil, deoarece interferentele cuantice pot produce rezonante inguste in  $T(E)$ , caz in care coeficientul de transmisie variaza rapid cu energia (ca, de exemplu, in dispozitivele cu tunelare rezonanta). Aceste maxime se aplatizeaza la temperaturi mari, cand drumul liber mediu este mai mic si regimul de transport se modifica din balistic in difuziv. Cand astfel de maxime apar raspunsul devine neliniar, chiar si daca  $(E_{F1} - E_{F2}) \ll k_B T$ .

La temperaturi finite, cand distributia Fermi-Dirac nu mai este de tip treapta, transportul electronic prin mai multe canale de energie are loc in intervalul energetic  $E_{F2} - \Delta E < E < E_{F1} + \Delta E$ , unde  $\Delta E$  este de ordinul a catorva  $k_B T$ . Deoarece atat numarul modurilor transversale  $M$  cat si probabilitatea de transmisie  $T$  depind in general de  $E$ , curentul net intre contactele din stanga si din dreapta in absenta imprastierii inelastice este

$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{h} \int M(E) T(E) [f_1(E)(1 - f_2(E)) - f_2(E)(1 - f_1(E))] dE \\ &= \frac{2e}{h} \int M(E) T(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE \end{aligned}$$

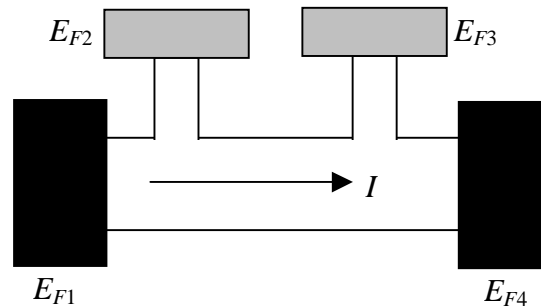
unde  $f_1(E)$ ,  $f_2(E)$  sunt cvasi-distributiile Fermi-Dirac in contactele stang si drept. Aceasta relatie se numeste formula Landauer. Primul termen  $f_1(E)(1 - f_2(E))$  din paranteza dreapta din prima linie reprezinta probabilitatea ca un electron aflat intr-o stare ocupata in contactul din stanga (descrisa de  $f_1(E)$ ) sa treaca intr-o stare libera in contactul din dreapta (probabilitatea de a gasi o astfel de stare libera fiind  $1 - f_2(E)$ ). Al doilea termen,  $f_2(E)(1 - f_1(E))$ , care exista doar la temperaturi finite, reprezinta probabilitatea procesului invers: ca un electron aflat intr-o stare ocupata in contactul din dreapta sa treaca intr-o stare libera in contactul din stanga. Formula Landauer a curentului este valabila indiferent de detaliile regiunii caracterizate prin probabilitatea de transmisie  $T$ . Probabilitatea de transmisie se calculeaza folosind formalismul matricial (vezi seminar!).

## Formula Büttiker

Expresia curentului net sau a conductantei in structurile balistice se poate generaliza pentru cazul existentei mai multor contacte sau terminale. Acest caz se intalneste, de exemplu, in masuratorile cu patru terminale (vezi figura de mai jos), unde doua terminale aditionale sunt folosite pentru masurarea caderii de tensiune de-a lungul unui conductor, in afara celor doua terminale prin care circula curentul. Modeland terminalele aditionale prin care nu circula curent exterior ca centre de imprastiere caracterizate de probabilitati de transmisie, curentul prin terminalul  $p$  la temperatura de zero absolut este data de formula Büttiker

$$I_p = \frac{2e^2}{h} \sum_q [\bar{T}_{qp} V_p - \bar{T}_{pq} V_q] = \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q],$$

unde  $G_{pq} = (2e^2 / h) \bar{T}_{pq}$  este conductanta asociata transferului de electroni dinspre terminalul  $q$  cu nivel cvasi-Fermi de energie  $E_{Fq} = eV_q$  spre terminalul  $p$  cu nivel cvasi-Fermi de energie  $E_{Fp} = eV_p$ .  $\bar{T}_{pq}$  este in general produsul dintre numarul de moduri  $M$  si probabilitatea de transmisie per mod  $T_{pq}$  la energia Fermi. Conditia ca sa avem zero curent net la echilibru, cand toate potentialele sunt egale, implica  $\sum_q G_{qp} = \sum_q G_{pq}$ .



La temperaturi finite curentul net prin terminalul  $p$  este dat de

$$I_p = \frac{2e}{h} \int \sum_q [\bar{T}_{qp}(E) f_p(E) - \bar{T}_{pq}(E) f_q(E)] dE.$$

Formula lui Büttiker este importanta deoarece descrie terminalele in functie de curentii si tensiunile masurate, fara a se referi la variatia spatiala a potentialului in proba.

## Viteza de drift sau viteza Fermi

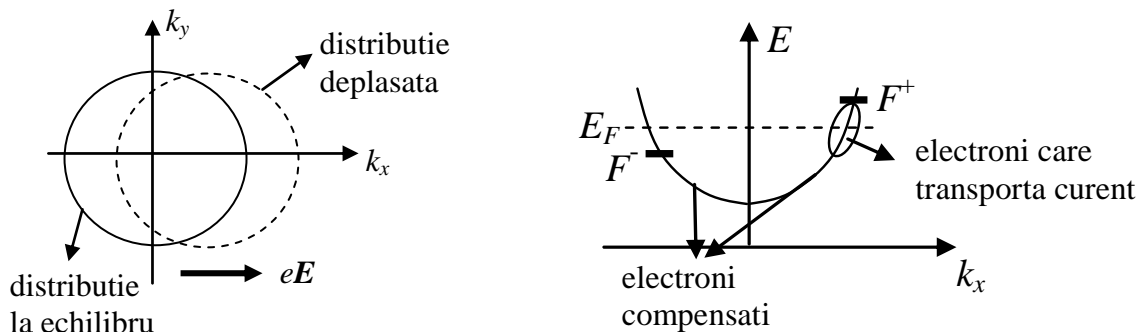
Intr-un conductor omogen

$$j = nev_d$$

unde  $v_d$  este viteza de drift si  $n$  este densitatea de electroni. Aceasta formula sugereaza ca toti electronii de conductie se deplaseaza pe directia campului aplicat si contribuie la curent. In realitate, curentul datorat electronilor cu diverse energii este diferit de zero doar intr-o portiune de cativa  $k_B T$  in jurul energiei Fermi, ceea ce inseamna ca la curent participa doar electronii cu  $E \cong E_F$ .

Pentru a intelege de ce, sa presupunem ca electronii au o functie de distributie dupa stari in spatiul  $\mathbf{k}$  notata cu  $f(\mathbf{k})$ , care da probabilitatea cu care o stare  $\mathbf{k}$  este ocupata. La echilibru,

$$f(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1, & |\mathbf{k}| < k_F \\ 0, & \text{in rest} \end{cases}$$



La aplicarea unui camp electric  $E$  distributia se deplaseaza cu  $\mathbf{k}_d$  (vezi figura punctata), astfel incat

$$\hbar \mathbf{k}_d / m = \mathbf{v}_d = e\mathbf{E} \tau / m.$$

In majoritatea ariei ocupate de electroni in spatiul  $\mathbf{k}$  stările ocupate raman in continuare ocupate. Doar in jurul stărilor  $+k_F$  stările libere devin ocupate cu electroni, iar in jurul  $-k_F$  stările ocupate devin libere.



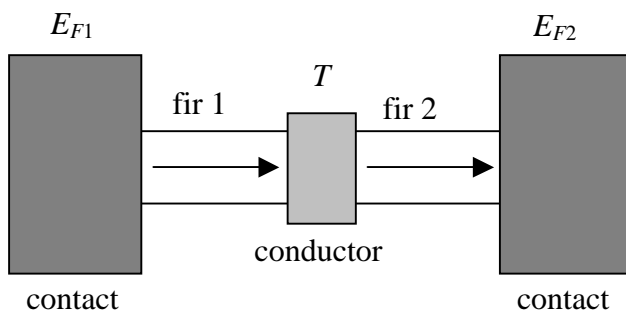
Chiar daca, din punctual de vedere al unei particule, campul electric imprima tuturor electronilor o viteza de drift, dintr-un punct de vedere colectiv campul electric transporta doar electronii din jurul lui  $-k_F$  in jurul lui  $+k_F$ . Deci, doar fractiunea  $v_d/v_F$  a numarului total de electroni contribuie la  $j$ .

Deplasarea in functia de distributie  $f(k)$  este echivalenta cu definirea unui cvasi-nivel Fermi  $F^+$  pentru electronii care se misca in aceeasi directie cu  $\mathbf{E}$ , si unui alt cvasi-nivel Fermi  $F^-$  pentru electronii care se misca in directie opusa. Toate starile sub  $F^-$  sunt pline si nu contribuie la curent.  $F^+$  si  $F^-$  se estimeaza din

$$F^+ \cong \frac{\hbar^2(k_F + k_d)^2}{2m}, \quad F^- \cong \frac{\hbar^2(k_F - k_d)^2}{2m}$$

Daca  $k_F \gg k_d$ ,  $F^+ - F^- \cong 2\hbar^2 k_F k_d / m = 2e |\mathbf{E}| v_F \tau = 2e |\mathbf{E}| L_{lm}$ , si separarea intre nivelele cvasi-Fermi este proportionala cu energia pe care electronul o castiga in camp electric in drumul liber mediu. Nivelul Fermi pentru electroni se defineste ca  $F_n = (F^+ + F^-)/2$ .

Daca consider curentul ca fiind de drift,  $\sigma = |e| n_{2D} \mu$ . Insa il pot considera si ca datorat difuziei, caz in care  $\sigma = e^2 \rho_0 D$ , cu  $\rho_0 = m/\pi \hbar^2$  si  $D$  coeficientul de difuzie. Intr-adevar, pot considera ca difuzia are loc in intervalul de energie intre  $F^-$  si  $F^+$ , unde exista un gradient de concentratie. Atunci, din egalarea celor doua expresii pentru  $\sigma$  rezulta  $D = n_{2D} \mu / e \rho_0$ .



Intr-un conductor, potentialele  $F^+$  si  $F^-$  pentru electronii care intra si ies trebuie sa fie diferite pentru a avea un curent net

$$I = \frac{2e}{h} M(F^+ - F^-).$$

Daca contactele intre electrozi si conductor sunt fara reflexie,  $E_{F1} = F^+$  si  $E_{F2} = F^-$ . Intr-un electrod/contact larg, cu un numar mare de moduri/subbenzi, curentul per mod este infinitesimal si  $F^+ = F^-$ . Din contra, intr-un conductor mesoscopic exista doar cateva moduri si  $F^+ \neq F^-$ . Un astfel de conductor nu poate fi in echilibru local la aplicarea unui camp electric si nu are un nivel Fermi propriu. Electronii care intra, si respectiv ies din conductor sunt in echilibru cu contactele din stanga, respectiv dreapta. Formula Büttiker evita cunoasterea energiilor Fermi locale de-a lungul conductorului, si se bazeaza doar pe simetria dispozitivului.

# Campuri magnetice in gropi si fire cuantice

## Campuri magnetice in gropi cuantice

Exista doua cazuri separate:

- 1)  $\mathbf{B}$  paralel cu directia de propagare a electronilor
- 2)  $\mathbf{B}$  perpendicular pe directia de propagare a electronilor

Daca o particula libera este supusa unui camp magnetic, ea simte forta Lorentz

$$\mathbf{F} = e\mathbf{v} \times \mathbf{B},$$

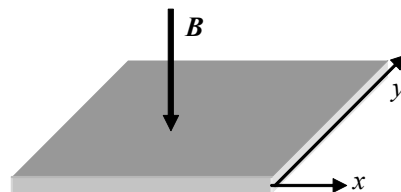
care este perpendiculara pe directia de miscare a particulei. In cazul 1) campul magnetic nu are nici o influenta asupra particulei, deci consideram doar cazul 2). In aceasta situatie, daca nu mai exista alte forte aplicate, miscarea electronului este circulara, cu o frecventa unghiulara

$$\omega_c = eB / m_c,$$

unde  $m_c$  este masa ciclotronica, care este media masei pe orbitele circulare in spatiul  $\mathbf{k}$  pe suprafete de energie constanta (particula nu pierde sau castiga energie datorita acceleratiei unghiulare in camp magnetic). Pentru sisteme izotrope,  $m_c = m$ .

Sa presupunem ca (vezi figura)

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A},$$



unde  $\mathbf{A}$  este potentialul vector. Daca  $\mathbf{B}$  este dat,  $\mathbf{A}$  nu este unic, deoarece pot inlocui  $\mathbf{A}$  cu  $\mathbf{A} + \nabla F$  unde  $F$  este un camp scalar, pentru ca  $\nabla \times \nabla F = 0$ . Aplicarea unui camp magnetic are ca efect modificarea impulsului  $\mathbf{p}$  al particulei,  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ .

Daca  $\mathbf{B}$  este perpendicular pe planul gropii cuantice, miscarea electronului liber in plan devine total cuantizata. Sa presupunem  $\mathbf{B} = (0,0,B)$ , deci  $\mathbf{A} = (0,Bx,0)$ , si ecuatia Schrödinger devine

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_r + e\mathbf{A} \right)^2 + V \right] \Psi(\mathbf{r}, z) = E \Psi(\mathbf{r}, z).$$

Caut solutii de tipul  $\Psi(\mathbf{r}, z) = \varphi(z) \chi(x, y)$ , astfel incat

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V \right] \varphi(z) = E_z \varphi(z), \quad \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m\omega_c^2}{2} (x - x_0)^2 \right] \chi(x, y) = E_{xy} \chi(x, y)$$

unde energia totala este  $E = E_{xy} + E_z$  si  $x_0 = -\frac{1}{eB} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$  este coordonata centrului de masa.

Daca  $\chi(x, y) = \chi(x) \exp(ik_y y)$ ,  $x_0 = -\hbar k_y / eB$  si  $\chi(x)$  satisface ecuatia oscilatorului armonic ale carui solutii depind de un numar intreg  $n$  (numarul subbenzii):

$$\chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} l_m}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2l_m^2}\right) H_n\left(\frac{x - x_0}{l_m}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

unde  $H_n(z)$  sunt polinoamele Hermite de ordin  $n$ , si  $l_m = \sqrt{\hbar / eB}$  este lungimea magnetica, care reprezinta raza ciclotronica a starii fundamentale.  $x_0$  poate fi vazuta si ca pozitia medie a starii magnetice, deoarece  $\langle \chi_n | x | \chi_n \rangle = x_0$ .

Valorile proprii pentru energie sunt independente de  $x_0$  si  $k_y$ :

$$E_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Pentru a afla semnificatia fizica a  $l_m$ : viteza electronului pe orbita circulara cu raza  $r_n$  este

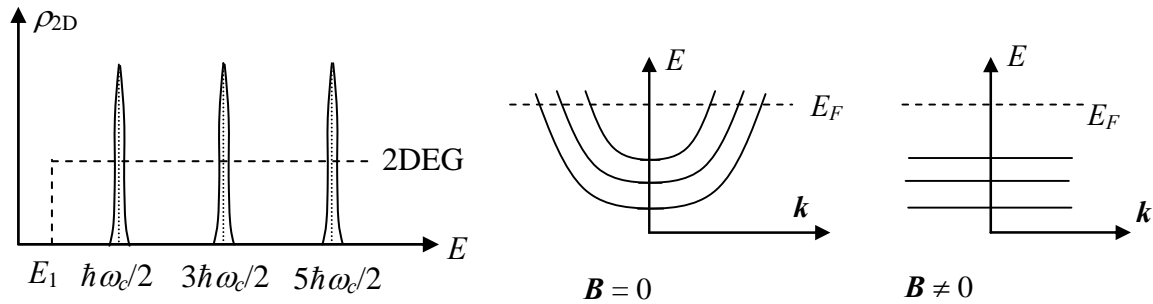
$$v = r_n \omega_c. \text{ Atunci, din } E_n = mv^2 / 2 \text{ rezulta } r_n = \sqrt{\frac{2\hbar(n + 1/2)}{eB}}, \text{ adica } r_0 = l_m \text{ pentru } n = 0.$$

Fiecare  $n$  intreg corespunde unui nivel Landau (LL – Landau level) asociat unei subbenzi magnetice, ca in cazul 3D. Spre deosebire de un semiconductor omogen, unde electronul mai are un grad de libertate asociat miscarii paralele cu campul magnetic, spectrul energetic total al unei gropi cuantice este discret:

$$E = E_p + \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right),$$

unde  $E_p$  este valoarea proprie a energiei datorata potentialului de confinare. In cazul unui 2DEG, numarul intreg  $p$  poate lua doar valoarea  $p = 1$ .

Chiar daca Hamiltonianul contine impulsul/numarul de unda dupa  $y$ ,  $k_y$ , energia totala este independenta de  $k$ . In consecinta, viteza de grup este  $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_y} = 0$ . Densitatea de stari (functii delta in cazul ideal, cand  $B \neq 0$ ) si relatia de dispersie intr-un 2DEG arata ca in figurile de mai jos.



Pana acum n-am considerat spinul. In general, trebuie adaugat inca un termen in Hamiltonian:

$$H_s = g\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

unde  $\boldsymbol{\sigma}$  este operatorul de spin,  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$  este magnetonul Bohr, iar  $g$  este factorul Landé (egal cu 2 in vid,  $\neq 2$  in semiconductori). Electronii cu spin sus au o energie mai mare (decat valoarea cand spinul nu este considerat explicit) cu  $g\mu_B B/2$ , cei cu spin jos au o energie mai mica cu aceeaasi valoare. Aceasta inseamna ca degenerarea de spin a nivelelor energetice este ridicata si fiecare nivel se imparte in doua.

Din figura de mai sus rezulta ca densitatea de stari in prezenta campului magnetic seamana cu cea a unui punct cuantic. Dar, spre deosebire de punctul cuantic, fiecare LL este puternic degenerat, deoarece contine toate stările 2D cu o energie in intervalul  $\pm \hbar\omega_c/2$  care

colapseaza in LL. Daca  $\rho_0 = \frac{\eta_v \eta_s m}{2\pi \hbar^2}$  este densitatea starilor intr-o singura subbanda pe unitate de suprafata, cu  $\eta_{v,s}$  degenerarea de vale si spin, rezulta ca numarul de stari pe unitate de suprafata in fiecare LL este  $D = \rho_0 \hbar \omega_c = \eta_v \eta_s eB / h$ . Deci,  $D$  creste linear cu  $B$  si nu depinde de  $n$ , fiind acelasi pentru toate LL. Aceasta inseamna ca, pe masura ce densitatea de purtatori in sistem creste (prin tensiuni pe poarta sau excitatie optica), nivelul Fermi este fixat in cea mai inalta subbanda magnetica ocupata, pana cand aceasta se ocupa complet, dupa care variaza discontinuu/sare pe LL urmator.

Cea mai inalta subbanda magnetica ocupata (la  $T = 0$  K) corespunde densitatii totale de purtatori impartita la densitatea unui LL:

$$n_{\max} = \text{Int} \left[ \frac{\hbar n_{2D}}{\eta_v \eta_s eB} + 1 \right],$$

unde  $\text{Int}[\cdot]$  inseamna parte intreaga.

Daca  $B$  creste,  $D$  creste in subbenzile deja ocupate si, la un camp magnetic dat, cea mai inalta subbanda magnetica ocupata devine depopulata si  $E_F$  sare pe LL interior. Discontinuitatea in  $E_F$  ca functie de densitatea de stari sau  $B$  produce oscilatii Shubnikov-de Haas (SdH) in rezistenta (de fapt, in magneto-rezistenta  $\rho_{xx}$ ) sau conductivitate ca functie de campul magnetic, din care se determina densitatea de stari a subbenzilor 2DEG.

Daca sistemul nu este ideal (exista impuritati, procese de imprastiere, etc.), densitatea LL nu mai este tip  $\delta$  ci se lateste:

$$D(E) = \frac{1}{2\pi d_m^2} \sum_n \left[ 1 - \left( \frac{E - E_n}{\Gamma_n} \right)^2 \right]^{1/2}$$

$\Gamma_n$  este factorul de largire asociat impuritatilor cu raza scurta (short-range) de actiune. Daca

aceste impuritati au un potential asociat de latime  $d < l_m / \sqrt{2n+1}$ ,  $\Gamma^2 \cong \frac{2}{\pi} \hbar \omega_c \frac{\hbar}{\tau_f}$ , unde  $\tau_f$

este timpul de imprastiere la  $E = E_F$  si  $B = 0$ .

Daca  $1/\tau_f$  este suficient de mare, LL se suprapun si oscilatiile SdH se atenuaza. Criteriul de observare al oscilatiilor este  $\Gamma < \hbar \omega_c$  sau  $\omega_c \tau_f > 2/\pi \cong 1$ . Spre deosebire de oscilatiile SdH in 3D, in 2D ele depind doar de componenta campului magnetic perpendicular

pe 2DEG,  $B$ , si nu de componenta sa in planul 2DEG. Oscilatiile sunt periodice in  $1/B$  si sunt legate de densitatea 2DEG. Daca

$$E = E_p + \hbar\omega_c(n + 1/2),$$

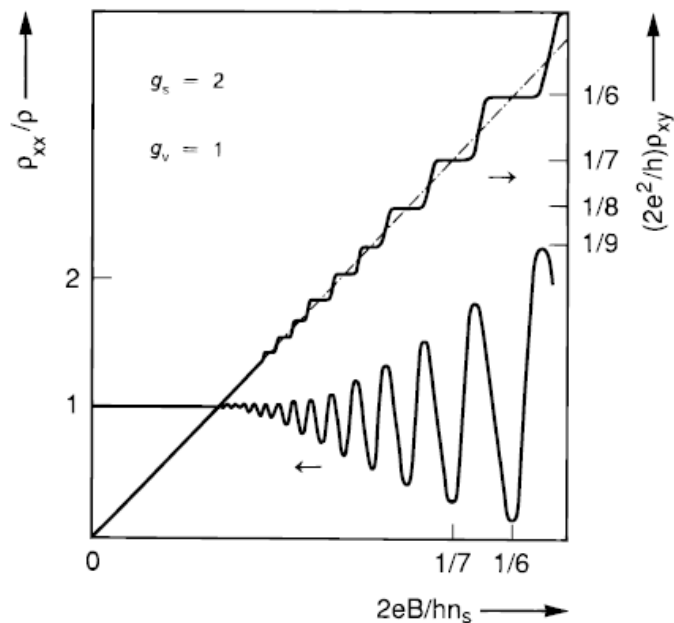
cu  $E_p$  energia subbenzii  $p$ , electronii de pe LL  $n$  au orbite circulare in spatiul  $k$  si aria unei astfel de orbite este

$$A = \pi k_n^2 = \pi(2mE_n)/\hbar^2 = \left(\frac{2e\pi B}{\hbar}\right)\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Pe de alta parte, Numarul de unda Fermi care rezulta din relatia de dispersie parabolica este

$$k_F = \sqrt{\frac{4\pi n_p}{\eta_s \eta_v}} \text{ cu } n_p \text{ densitatea de purtatori in subbanda } p, \text{ astfel incat}$$

$$A = \pi k_F^2 = \frac{4\pi^2 n_p}{\eta_s \eta_v}$$



si apare un maxim in conductivitate cand un LL trece prin nivelul Fermi, ceea ce se intampla cand (in figura de mai sus densitatea de electroni este notata cu  $n_s$ )

$$\left(\frac{2e\pi B}{\hbar}\right)\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{4\pi^2 n_p}{\eta_s \eta_v}.$$

Deci, spatiul intre LL este  $\Delta(1/B) = \eta_s \eta_v e / (2\pi \hbar n_p)$ , de unde rezulta (experimental)

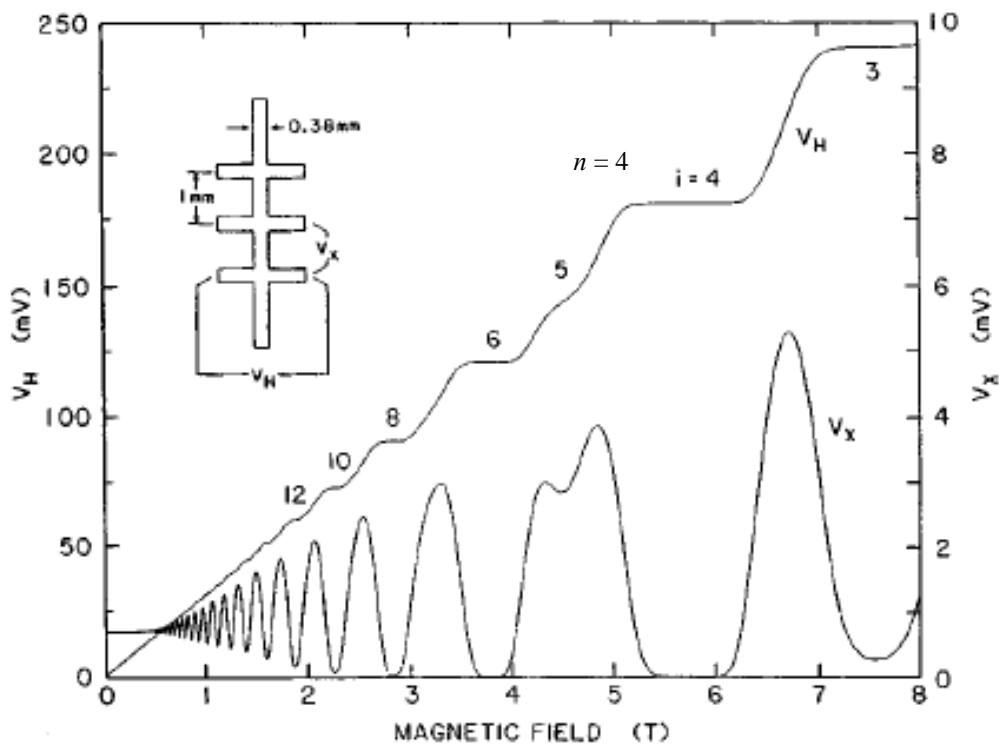
$$n_p = \left[ |e| \frac{d\rho_{xy}}{dB} \right]^{-1} = \frac{I / |e|}{dV_H / dB}.$$

Daca sunt ocupate mai multe subbenzi, se observa oscilatii cu frecvente diferite, corespunzand densitatilor ne-egale din fiecare subbanda.

Analog,

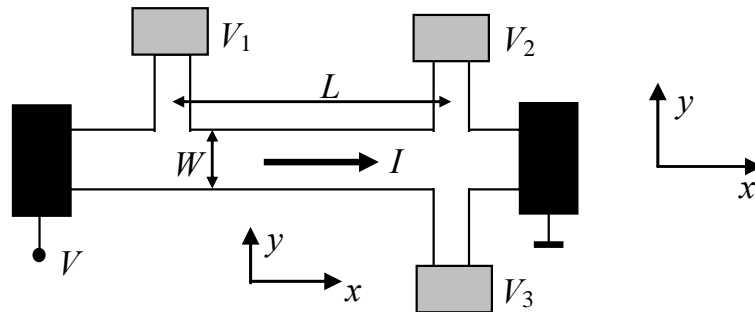
$$\mu = \frac{1}{|e| n_p \rho_{xx}} = \frac{I / |e|}{n_p V_x W / L},$$

unde  $W$  si  $L$  sunt latimea si lungimea unei probe Hall,  $V_H$  este tensiunea Hall, si  $V_x$  tensiunea masurata pe directia de curgere a curentului (vezi figura de mai jos).





Pentru a intelege figura de mai sus, sa presupunem ca directia de curgere a curentului este  $x$  (vezi figura de mai jos) si masuram caderea de potential/tensiune longitudinala  $V_x = V_1 - V_2$  si caderea de potential transversala (sau Hall)  $V_H = V_2 - V_3$ .



In general, daca  $\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$  este campul electric ( $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ ) avem

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix}.$$

Daca  $j_y = 0$ ,  $E_x = \rho_{xx} j_x$ ,  $E_y = \rho_{yx} j_x$ . Pentru ca  $I = j_x W$ ,  $V_x = E_x L$ , si  $V_H = E_y W$ ,

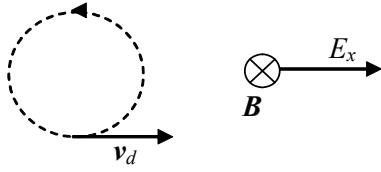
$$\rho_{xx} = \frac{V_x W}{I L}, \quad \rho_{yx} = \frac{V_H}{I}.$$

Deoarece  $\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$ , cu  $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$  si  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$  din conditii de simetrie, si

$$[\rho] = [\sigma]^{-1} = \frac{1}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{xy} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{pmatrix},$$

rezulta ca

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2}, \quad \rho_{yx} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2}.$$



Pentru  $\mathbf{B}$  perpendicular pe 2DEG si un camp electric  $E_x$  in plan, electronii se misca in cicloide, cu o miscare neta zero pe directia campului electric si miscare neta perpendiculara pe  $E_x$  cu viteza de drift  $v_d = E_y / B$  (vezi figura de mai sus), determinata din conditia de egalitate a fortei electrice pe directia  $y$  (forte Hall) cu forta Lorentz:  $eE_y = ev_d B$ . Miscarea perpendiculara pe campul electric este posibila in prezenta unui camp magnetic. In aceste conditii,  $\sigma_{xy} = j_y / E_y = n_{2D} e v_d / E_y = e n_{2D} / B$  (daca ar curge curent dupa directia  $y$ ) si  $\sigma_{xx} = 0$  daca sunt in situatia in care LL  $n+1$  se depopuleaza pana cand  $n$  este complet ocupat,  $n+1$  este liber si  $E_F$  se afla intre ele. In aceste conditii nu exista curent pe directia  $x$ , ca si intr-un izolator cu benzi complet ocupate la  $T = 0$ . In consecinta,  $\rho_{xx} = 0$  si  $\rho_{yx} = B / (e n_{2D})$ .

Deoarece  $\rho_{yx}$  creste liniar cu  $B$ , avem un background ce creste liniar cu campul magnetic, peste care se suprapun platouri Hall din figura de mai sus, care apar cand  $\rho_{xx} = 0$ , conditie in care

$$\rho_{yx} = h / n e^2$$

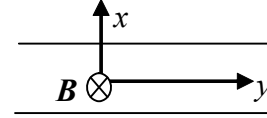
deoarece densitatea starilor ocupate per LL este  $eB/h$  si am  $n$  LL ocupate, deci  $n_{2D} = n e B / h$ , cu  $n$  intreg. Rezulta ca  $\rho_{yx}$  este cuantizat, efect cunoscut sub numele de efectul Hall cuantic. Pentru  $n_{2D} = 2 \cdot 10^{11} / \text{cm}^2$ , campul necesar observarii efectului Hall cuantic este de 8 T.

Ce se intampla daca cresc  $B$  si mai mult? Ar trebui sa nu mai observ alte platouri, pentru ca nivelul Fermi este in cel mai jos LL. Totusi, in probe foarte pure se observa platouri cand  $\rho_{yx} = h / p e^2$ ,  $p = 1/3, 2/5, 4/7, \dots$  (fractioni rationale). Acesta este efectul Hall fractional, care apare datorita formarii unei stari fundamentale multi-particula.

## Camp magnetic in fire cuantice. Stari de margine (edge states)

Consideram cazul  $\mathbf{B} \parallel z$ , astfel incat  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ , potentialul de confinare pe directia  $x$  si axa firului pe  $y$ . Ecuatia de miscare a electronilor in planul  $xy$  este

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_r + e\mathbf{A} \right)^2 + V(x) \right] \chi(x, y) = E_{xy} \chi(x, y)$$



(ignoram spinul pentru simplitate). Daca (similar cu cazul precedent)  $\chi(x, y) = \chi(x) \exp(ik_y y)$  si  $x_0 = -\hbar k_y / eB$ , ecuatia Schrödinger devine

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega_c^2}{2} (x - x_0)^2 + V(x) \right] \chi(x) = E_{xy} \chi(x)$$

cu  $\omega_c = eB/m$ . Daca presupunem ca potentialul de confinare este tot parabolic, de forma

$$V(x) = m\omega_0^2 x^2 / 2,$$

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m(\omega_c^2 + \omega_0^2)}{2} x^2 - m\omega_c^2 x x_0 + \frac{m\omega_c^2}{2} x_0^2.$$

Definind un nou centru al coordonatelor ca  $x_0' = x_0 \omega_c^2 / \omega^2$ , cu  $\omega^2 = \omega_c^2 + \omega_0^2$ , obtinem

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x - x_0')^2 + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2M},$$

unde  $\hbar^2 k_y^2 / 2M = m\omega_c^2 \omega_0^2 x_0^2 / 2\omega^2$ , si deci  $M = m\omega^2 / \omega_0^2 = m(\omega_c^2 + \omega_0^2) / \omega_0^2$ , deoarece  $\omega_c x_0 = (eB/m)(\hbar k_y / eB) = \hbar k_y / m$ . Daca comparam expresia Hamiltonianului de mai sus cu cea obtinuta in cazul gropii cuantice in camp magnetic, se observa un termen dispersiv/de tip energie cinetica pentru un electron liber cu masa efectiva  $M$ . Energia totala este

$$E = E_p + \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2M},$$

unde  $E_p$  este nivelul discret de energie datorat confinarii pe directia  $z$ , expresie din care rezulta ca LL nu mai sunt degenerate, densitatile de stari nu mai sunt discrete, si viteza de grup pe  $y$  nu mai este zero, ci  $v = \hbar k_y / M$ . In particular, daca

$$\omega_c \gg \omega_0, \quad M \rightarrow \infty$$

si am o comportare similara cazului 2DEG, iar daca

$$\omega_c \ll \omega_0, \quad M \rightarrow m,$$

si obtinem cazul firului cuantic cu  $B = 0$  (in absenta campului magnetic).

Funcțiile de unda sunt localizate de o parte sau alta a firului cuantic, depinzand de  $x_0' = f(k_y)$ : daca  $k_y > 0$ ,  $\chi$  este deplasata spre partea dreapta a firului, iar daca  $k_y < 0$ , este deplasata spre partea stanga. In consecinta, fluxul de probabilitate intr-o directie este localizat pe o parte a firului, in timp ce stările cu flux care se propaga in directie opusa sunt localizate pe partea opusa. Acestea sunt stari de margine (edge states).

Daca potentialul de confinare in firul de latime  $W$  nu mai este parabolic, ci patrat

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq W \\ \infty, & \text{in rest} \end{cases}$$

solutia ecuatiei Schrödinger nu mai este analitica, ci  $\chi(x) = \sum_n a_n \sin(n\pi x / W)$ , si avem

$$\sum_n a_n \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2 - E_{xy} \right] \sin\left( \frac{n\pi x}{W} \right) + \frac{m\omega_c^2}{2} (x - x_0)^2 \sum_n a_n \sin\left( \frac{n\pi x}{W} \right) = 0.$$

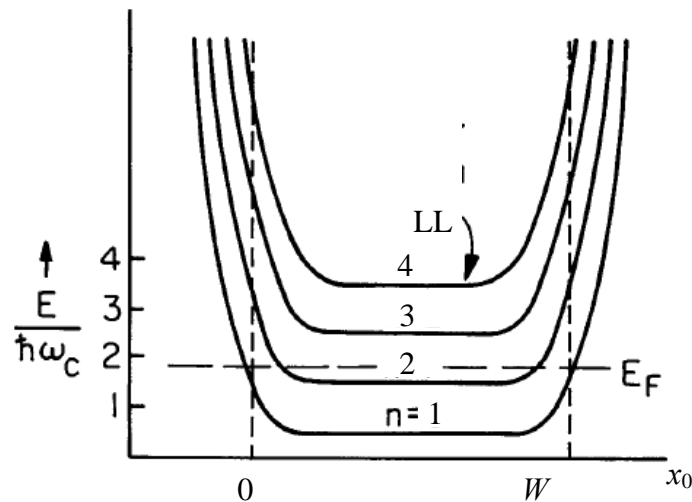
Daca inmultesc aceasta ecuatie cu  $\frac{2}{W} \sin\left( \frac{p\pi x}{W} \right)$  si integrez pe latimea firului, folosind ortogonalitatea functiilor de unda in groapa cu pereti infiniti, obtin

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{p\pi}{W} \right)^2 a_p + \sum_n F_{pn} a_n = E_{xy} a_p$$

cu

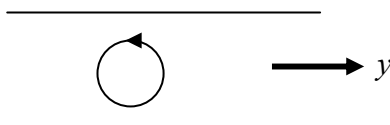
$$F_{pn} = \frac{m\omega_c^2}{W} \int_0^W dx (x-x_0)^2 \sin\left(\frac{p\pi x}{W}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{W}\right).$$

Dependenta energiei de pozitia centrului de coordonate (de componenta dupa  $y$  a vectorului de unda,  $k_y$ ) arata ca in figura de mai jos.



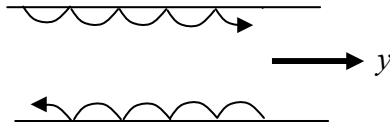
Relatia de dispersie in firul cuantic se poate explica prin faptul ca exista trei tipuri de orbite ale electronului:

- orbite ciclotronice pure, cand distanta intre centrul coordonatelor si pereti/marginile firului cuantic este mai mare decat raza orbitei ciclotronice  $r_n$ . Electronul se misca in acest caz ca si in 2DEG, si energia nu are dispersie (regiunea plata a relatiei de dispersie din figura de mai sus).



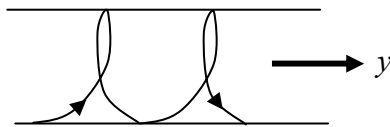
- orbite de margine, sau stari de margine, pentru care distanta intre centrul de coordonate si unul dintre pereti este mai mica decat  $r_n$ . Aceasta implica imprastiere undei pe

suprafata. Daca imprastierea este elastica, am reflexie in loc de difuzie si electronul are un impuls net pe directia  $\pm y$ , functie de semnul (pozitiv sau negativ) al  $x_0$  (si  $k_y$ ).



Aceste stari dau partea ne-plata, parabolica, a relatiei de dispersie, panta relatiei de dispersie fiind determinata de viteza de grup.

- orbite transverse, care apar la energii mari, si care formeaza partea intermediara a relatiei de dispersie, intre regiunile corespunzatoare celorlalte doua tipuri de orbite



## Transportul electronilor in conductori mezoscopici dezordonati

Am vazut ca pentru electroni balistici intr-un mod transversal/o subbanda, conductanta este legata de probabilitatea de transmisie prin formula Landauer,

$$G_s = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{1-T}$$

daca masuratorile de conductanta se fac imediat langa contacte (deci pe centrul de imprastiere (CI) cu rezistenta  $R_s = (h/2e^2)(1-T)/T$ ), sau

$$G = (2e^2/h)T$$

daca caderea de potential se masoara intre contactele/rezervoarele de electroni intre care este plasat conductorul (cele doua expresii sunt legate prin  $1/G = 1/G_s + 1/G_c$ , cu  $G_c = 1/R_c = 2e^2/h$  conductanta de contact). In aceste doua expresii este inclusa degenerarea dupa spin a electronilor (prin factorul 2).

Formula Landauer poate fi generalizata pentru cazul imprastierii inelastice, in care coeficientul de transmisie  $T$  devine suma a doi termeni: unul care reprezinta electronii coerenti (in faza) care nu au fost imprastiati inelastice, si al doilea care include contributia electronilor care au suferit cel putin o ciocnire inelastica. Procesele inelastice de imprastiere pot fi descrise printr-o pierdere a unei parti din fluxul incident de particule, astfel incat pentru partea coerenta  $T_c + R_c < 1$  dar, pentru ca sarcinile electrice nu sunt distruse sau create, fluxul lipsa poate fi considerat ca flux transmis prin alt canal (transmis la o alta energie la care ajunge in urma procesului de ciocnire inelastica). Este deci un flux pierdut din partea coerenta, pentru care  $T_i + R_i = 1 - T_c - R_c$ , coeficientul total de transmisie fiind  $T = T_i + T_c$ . In cazul tunelarii rezonante influenta imprastierii inelastice se manifesta prin reducerea valorii maxime a transmisiei si prin largirea rezonantei.

Formula Landauer este valabila in sisteme metalice sau semiconductori puternic dopati de dimensiune finita in care conductivitatea nu tinde la zero la temperaturi joase. In izolatori sau semiconductori nedopati, in care conductanta tinde la zero daca temperatura tinde spre 0 K, transportul electronilor are loc prin hopping, care este un proces incoerent de transport.

In conductori dezordonati/in care au loc imprastieri (elastice sau inelastice), conductanta se gaseste modeland conductorul ca un ansamblu de bariere pentru propagarea electronului. Am vazut deja ca, daca se neglijeaza interferenta intre CI successive, probabilitatea de transmisie  $T(L)$  printr-un conductor de lungime  $L$  este proportionala cu  $1/L$ , mai exact

$$T(L) = \frac{L_0}{L + L_0},$$

cu  $L_0$  de ordinul de marime al  $L_{lm}$ . Din aceasta expresie rezulta ca rezistenta unei succesiuni de CI este proportionala cu  $L$ , ca in legea Ohm:

$$r(L) = \frac{1}{MT(L)} = \frac{L + L_0}{ML_0} \xrightarrow{L \gg L_0} \frac{L}{ML_0},$$

unde  $r$  este rezistenta normalizata la  $h/2e^2$ .

Legea lui Ohm este valabila daca  $L_{rf}$  este mai mica decat distanta intre CI successive. Aceasta si conditia de valabilitate, daca dezordinea nu este puternica, a ecuatiei cinetice Boltzman. Mai precis, presupun ca in sisteme bi-dimensionale, de exemplu, in prezenta unui camp electric in plan si a unui camp magnetic perpendicular pe planul gropii cuantice, componenta in-plan a impulsului purtatorilor de sarcina satisface ecuatia

$$\frac{d(\hbar\mathbf{k})}{dt} = \mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

cu  $\mathbf{v} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$  viteza electronului in cristal. Presupun ca daca dezordinea nu este puternica, starile electronului sunt in continuare date de ecuatia Schrödinger, valabila intre ciocniri, si imprastierea este elastica. De asemenea, ciocnirile sunt presupuse a avea loc instantaneu in timp si spatiu si se considera a fi independente. In aceste conditii, ecuatia de transport Boltzmann

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_p - \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_p + \left. \frac{\partial f_p}{\partial t} \right|_{cioc},$$



descrie variatia in timp a functiei de distributie uni-particula a electronilor pe subbanda  $p$ ,  $f_p(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  in spatiul  $2n$ -dimensional  $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ , cu  $n$  dimensionalitatea sistemului. Ultimul termen reprezinta rate de schimbare a functiei de distributie datorita imprastierilor/ciocnirilor. Daca ciocnirile duc la pierderea memoriei de faza, ca si in cazul clasic, electronul isi pierde corelatia (impusa de ecuatia Schrödinger) cu ceilalti electroni, si ultimul termen se exprima ca o balanta intre evenimente care duc la imprastierea in si dinspre o subbanda  $p$  intr-o subbanda  $q$ :

$$\left. \frac{\partial f_p}{\partial t} \right|_{\text{cioc}} = \sum_{q, \mathbf{k}'} S_{qp}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_q(\mathbf{k}') [1 - f_p(\mathbf{k})] - S_{pq}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_p(\mathbf{k}) [1 - f_q(\mathbf{k}')],$$

unde  $S_{qp}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  este rata de imprastiere dintr-o stare in subbanda  $q$  cu vector de unda  $\mathbf{k}'$  intr-o stare in subbanda  $p$  cu vector de unda  $\mathbf{k}$  (in fire cuantice vectorul de unda este de fapt un scalar, si stările posibile in urma imprastierii sunt fie in directia incidenta a electronului, fie in directie opusa, astfel incat suma se reduce la doi termeni). Daca  $p = q$  avem imprastiere intrasubbanda, iar daca  $p \neq q$  imprastierea este intersubbanda. Pentru un sistem de electroni in stare de cvasi-echilibru, si in conditiile de valabilitate a ecuatiei Boltzmann, se obtine pentru functia de distributie intr-o subbanda si pentru curent relatii similare cu cele clasice valabile in aproximatia timpului de relaxare. Densitatea de curent in subbanda  $p$  se defineste ca

$$\mathbf{j}_p = -e \int d\mathbf{k} \rho(\mathbf{k}) \mathbf{v} \Delta f_p(\mathbf{k})$$

unde  $\rho(\mathbf{k})$  este densitatea de stari in spatiul  $\mathbf{k}$  si  $\Delta f_p(\mathbf{k}) = -\tau_p \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) (\partial f_p^0 / \partial E)$  este perturbatia in functia de distributie de echilibru,  $f_p^0$ , produsa de aplicarea fortei  $\mathbf{F}$ , cu  $\tau_p$  timpul de relaxare al purtatorilor de sarcina in subbanda  $p$ . Formula curentului este similara formulei Landauer. Este interesant de mentionat ca formula Landauer nu face distinctia intre transportul balistic si difuziv, ea este doar mai usor de aplicat pentru transportul balistic.

Daca insa, conditia ca  $L_{rf}$  sa fie mai mica decat distanta intre CI successive nu este indeplinita, si deci interferenta cuantica este importanta,  $r(L)$  se defineste ca medie peste un ansamblu de conductori care au un numar egal de CI, dar aranjati diferit. De exemplu, am

vazut la seminar ca probabilitatea de transmisie totala a doi CI in serie, cu probabilitati de transmisie individuale  $T_1, T_2$  este

$$T = \frac{T_1 T_2}{(1 - \sqrt{R_1 R_2})^2 + 4\sqrt{R_1 R_2} \cos^2 \theta} = \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 + 2\sqrt{R_1 R_2} \cos(2\theta)}$$

unde  $\theta = kL + (\arg M_{1,12} + \arg M_{2,21} - \arg M_{1,11} - \arg M_{2,11})/2$ , este diferenta de faza care apare la un drum dus-intors intre CI, iar  $R_1, R_2$  sunt probabilitatile de reflexie corespunzatoare, definite ca  $R_i = J_{refl} / J_{inc}$ , sau  $R_i = 1 - T_i$ .

Daca efectuez insa medierea pe ansamblu, obtin

$$r_{12} = \left\langle \frac{1-T}{T} \right\rangle = \int \frac{d\theta}{2\pi} \frac{1 + R_1 R_2 - T_1 T_2 + 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \theta}{T_1 T_2} = \frac{1 + R_1 R_2 - T_1 T_2}{T_1 T_2}$$

(medierea se realizeaza in realitate de catre fluctuatiile termice). Deci, daca  $r_1 = \frac{1-T_1}{T_1}$ ,

$r_2 = \frac{1-T_2}{T_2}$  sunt rezistentele individuale ale CI,

$$r_{12} = r_1 + r_2 + 2r_1 r_2.$$

Ca sa obtin o expresie a  $r(L)$ , presupun ca adaug o portiune de lungime  $dL$  la o sectiune de lungime  $L$ , astfel incat, daca  $r_1 = r(L)$ ,  $r_2 = dL / L_{loc}$ , unde  $L_{loc}$  este un parametru constant, am

$$r(L + dL) = r(L) + [1 + 2r(L)]dL / L_{loc},$$

sau

$$\frac{r(L + dL) - r(L)}{dL} = \frac{dr}{dL} = \frac{1 + 2r}{L_{loc}},$$

adica

$$r(L) = \frac{1}{2} \left[ \exp\left(\frac{2L}{L_{loc}}\right) - 1 \right].$$

Aceasta lege de variatie a rezistentei cu lungimea conductorului este diferita de legea Ohm, care presupune o dependenta liniara de lungime a unei arii de CI.

Observatie: daca am fi facut medierea pe ansamblu asupra lui  $T$ , am fi obtinut

$$\langle T \rangle = \int \frac{d\theta}{2\pi} \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2 + 2\sqrt{R_1 R_2} \cos \theta} = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2},$$

adica legea lui Ohm, deoarece pot scrie in acest caz  $\frac{1 - \langle T \rangle}{\langle T \rangle} = \frac{1 - T_1}{T_1} + \frac{1 - T_2}{T_2}$ . Legea lui Ohm

se refera la o succesiune de CI independenti, pe cand variatia exponentiala a rezistentei presupune interferenta intre procese de imprastiere. Deci, desi imprastierile pot exista atat in regimul cvasi-ballistic cat si difuziv, in ultimul caz no exista traiectorii “balistice” care sa fie extinse pe o lungime semnificativa in proba, adica  $L \gg L_{lm}$  si transportul este modelat ca o succesiune de drumuri scurte intre un numar mare de CI.

Procedura de mediere dupa faza este corecta doar daca probabilitatea de distributie a CI este inclusa explicit in mediere. Aceasta duce la o dependenta a rezistentei normalizate functie de lungime un pic diferita de forma precedenta, dar tot exponentiala:  $r(L) \propto [\exp(L/L_{loc}) - 1]$ . Aceasta dependenta exponentiala este o caracteristica a localizarii electronului in conductorul dezordonat. (Cresterea exponentiala a rezistentei cu  $L$  sugereaza ca electronul nu poate “depassi” lungimea caracteristica  $L_{loc}$  si este deci localizat in interiorul unei regiuni cu aceasta dimensiune.)  $L_{loc}$  mai este denumita si lungime de localizare si este de ordinul de marime al  $L_{rf}$ . Trebuie notat ca, desi derivata pentru un conductor cu un singur mod, rezistenta poate creste exponential cu lungimea si in conductori cu mai multe moduri daca este suficient de lung astfel incat rezistenta lui sa fie de ordinul  $h/2e^2$ . Deci, lungimea conductorului trebuie sa fie  $L > L_{loc} = ML_0$  cu  $M$  numarul de moduri (pentru  $L_0$  vezi descrierea modului in care legea Ohm se obtine din transportul balistic).

Regimul de transport in care rezistenta depinde exponential de lungime este numit **localizare puternica** (sau Anderson) a electronilor. Pentru observarea localizarii puternice este necesar ca  $L_{loc} < L_{rf}$ , conditie mai greu de realizat (dar posibila) in metale fata de

semiconductori, pentru ca un fir metalic de sectiune  $200 \text{ nm} \times 200 \text{ nm}$  are un numar  $M = 10^6$  moduri, ceea ce presupune  $L_{loc} = 1 \text{ mm}$ , pentru  $L_{lm} = 1 \text{ nm}$ . In acest regim starile electronice sunt localizate datorita interferentei cuantice, spre deosebire de starile electronice localizate in izolatori sau semiconductori nedopati, in care transportul electronilor se face prin hopping.

### Localizarea slaba a electronilor

Tranzitia intre starile extinse, caracteristice conductorilor balistici sau conductorilor cu putine ciocniri cu CI (ciocniri presupuse independente), si starile localizate ale electronului nu este abrupta. Regimul de transport intermediar intre cel balistic si de localizare puternica se numeste **localizare slaba** al electronilor/fotonilor. Pe masura ce densitatea CI creste treptat, fluctuatiile undei in diferite puncte nu mai sunt arbitrare ci prezinta corelatii statistice, ce dau nastere la fluctuatiile universale ale conductantei, sau la cresterea undei imprastiate inapoi/backscattering (in cazul luminii), care se datoreaza interferentei constructive intre perechi de succesiune de procese de imprastiere efectuate in ordine inversa/inversate in timp, respectiv la aparitia magneto-rezistentei negative in cazul electronilor. Aceste fenomene sunt consecinta aparitiei unei interferente complexe intre functii de unda electronice imprastiate de diverse CI.

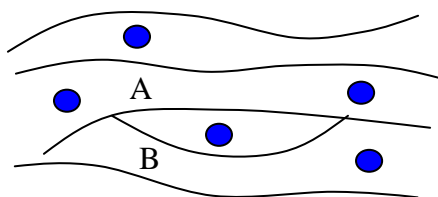
Fluctuatiile universale in conductanta sau coerenta imprastierii inapoi sunt o indicatie a depasirii aproximatiei de dezordine slaba/putine ciocniri cu CI. Acest caz este diferit si de cel balistic si de cel descris de ecuatie Boltzmann, in care se presupune CI independente si, in particular, lipsa unor traiectorii de tip curba inchisa. Conductorii reali pot fi considerati ca un ansamblu de segmente de lungime  $L_{rf}$ . Deviatii de la legea clasica (Ohm) se observa doar daca  $L_{loc} \cong L_{rf}$ .

In regimul intermediar, de dezordine slaba, avem  $L \ll L_{loc}$ , astfel incat o functie de unda electronica coerenta, care este incidenta pe mediul dezordonat, nu este (puternic) localizata, ci are la iesire o faza care variaza aleator de-a lungul frontului de unda, astfel incat amplitudinea undei la iesire, intr-un punct dat, poate fi considerate ca o suma de amplitudini necorelate. In acest regim, rezistenta variaza cu lungimea ca  $r(L) \propto [\exp(L/L_{loc}) - 1] \cong (L/L_{loc}) + (1/2)(L/L_{loc})^2 = r_{cl}(L) + \Delta r(L)$ , unde  $r_{cl}(L)$  este rezistenta clasica (ohmica), si  $\Delta r(L)$  este deviatia de la legea clasica datorata interferentelor cuantice.

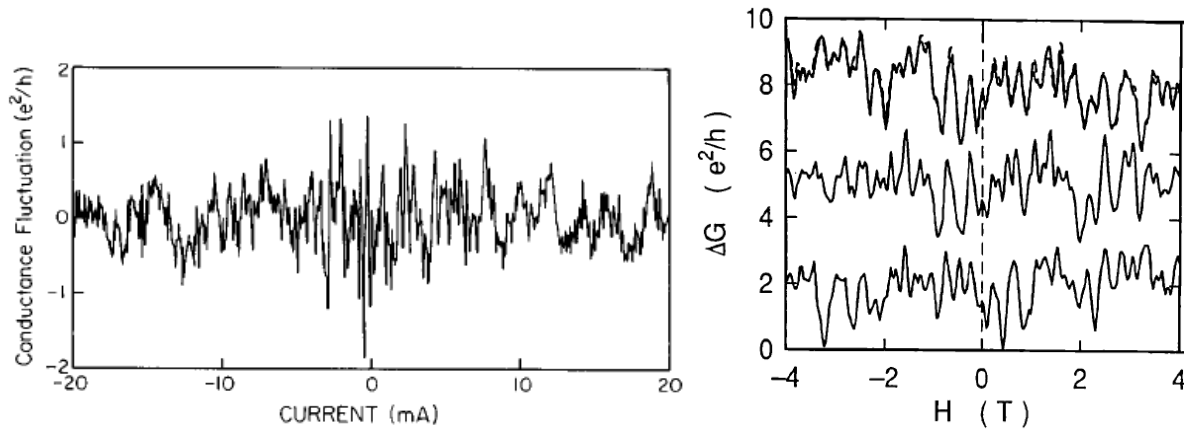
## Fluctuatiile universale ale conductantei

Acest fenomen apare in conductori mesoscopici daca  $L_{lm} \ll L < L_{rf}$ . In acesti conductori mezoscopici diferenta de energie intre diversele moduri/subbenzi este de ordinul  $k_B T$  la temperaturi  $T$  mici, astfel incat procedura de mediere a fazei nu este automat facuta de fluctuatiile termice. In consecinta, proprietatile unui conductor care contine un potential de impratiere aleator, in particular conductanta, fluctueaza de la conductor la conductor, adica pentru diverse dispuneri ale CI. Variatia conductantei intre diversi conductori se numeste “fluctuatia universala a conductantei”. Un grup de conductori mezoscopici, indiferent de valoarea conductantei (de numarul de moduri/subbenzi ocupate), este caracterizat de faptul ca abaterea statistica a conductantei, definita ca  $(\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2)^{1/2}$ , este de acelasi ordin de marime ca si  $G_0$  (“cuanta” conductantei), adica este de ordinul a  $e^2/h$ . Acest rezultat spune ca media conductantei cuantice este mai mica decat valoarea clasica a conductantei cu  $e^2/h$ ; aceasta descrestere a conductantei se datoreaza interferentei intre CI. Medierea este facuta aici pe un ansamblu de sisteme mezoscopice similare, cu diferite dispuneri ale CI.

Pentru conductori metalici medierea se poate face si pe acelasi conductor daca se aplica un camp magnetic variabil care modifica factorul de faza al unei electronice care se propaga de la un CI la altul, efect similar cu o dispunere aleatoare a pozitiei CI. In general fluctuatiile universale ale conductantei nu se observa in conductori metalici cu mobilitate mare, in care transportul este cvasi-balistic, ci doar in conductori metalici cu mobilitate mica, in care transportul este predominant difuziv. In alti conductori mezoscopici, cu un numar mai mic de purtatori de sarcina, medierea se poate face pe un singur conductor daca, pe langa campul magnetic, se modifica si nivelul Fermi. Daca se modifica energia Fermi datorita tensiunii de poarta sau a unui camp magnetic care scade numarul de purtatori din BC, detaliile suprafetei Fermi pe care se misca electronul/dispunerea CI se modifica astfel incat (vezi figura de mai jos), daca initial se misca pe o parte a impuritatii (cercuri in figura de mai jos), incepe sa se miste pe cealalta parte; drumul urmat se modifica din A in B.



Exemplu de oscilatii aperiodice ale conductantei ca functie de tensiunea aplicata sau de campul magnetic perpendicular pe o groapa cuantica, sunt prezentate in figurile de mai jos.



Aceste oscilatii sunt un rezultat al fluctuatiilor universale ale conductantei. Diversele curbe sunt masurate la diverse tensiuni de poarta pe un 2DEG, si se observa ca fluctuatiile sunt independente de timp, tensiunea de poarta si de directia campului magnetic  $\mathbf{B}$  si persista pentru valori mari ale  $B$ . In plus, aceste fluctuatii care se manifesta in regimul de imprastiere slaba pentru care  $L_{lm} \gg \lambda_F$  (sau  $k_F L_{lm} \gg 1$ ), sunt independente de dimensiunea conductorului si de gradul de dezordine atata timp cat temperatura este suficient de mica astfel incat  $k_B T$  este mai mic decat inversul timpului in care un electron difuzeaza de-a lungul conductorului. Fluctuatiile universale ale conductantei prezinta deci o puternica dependenta de temperatura.

Din punct de vedere al teoriei macroscopice/clasice a transportului electric, abaterea statistica a conductantei intr-un conductor bidimensional ar trebui sa fie  $\delta G = (\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2)^{1/2} \approx (2e^2/h)(L_{lm}/L)$ , si deci ar trebui sa descreasca cu  $L$  (conductanta clasica nu depinde de pozitia relativa a CI, ci doar de numarul lor). Cresterea acestei abateri statistice in conductori de dimensiune mica fata de aceasta valoare clasica, si independenta fluctuatiilor universale ale conductantei de  $L$  sunt manifestari ale interferentei cuantice in sisteme mezoscopice. Aceasta independenta de  $L$  se observa daca  $L < L_{rf}$ , caz in care se mentine coerenta la imprastieri multiple, si deci aceste imprastieri sunt corelate, pe cand, daca  $L > L_{rf}$  masuratorile se fac peste un numar de  $N = L/L_{rf}$  regiuni independente si coerente in faza, fluctuatiile in rezistenta  $\delta R$  sunt proportionale cu  $\sqrt{N} \propto L^{1/2}$ , si deci fluctuatiile in conductanta  $\delta G = \delta R/R^2$  sunt proportionale cu  $L^{-3/2}$  ( $R \propto L$ ).

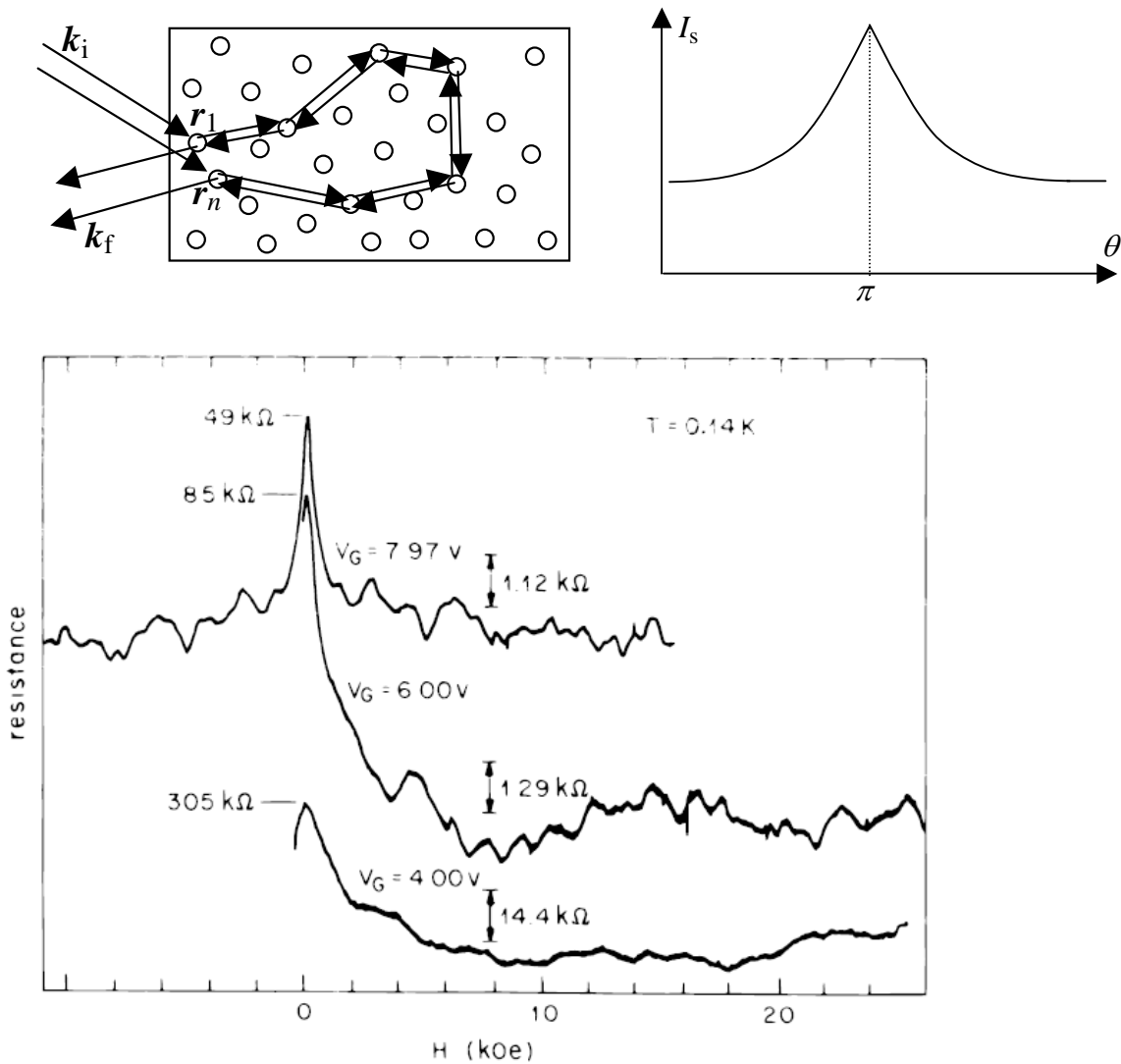
Trebuie mentionat ca exista un analog al fluctuatiilor universale ale conductantei in optica, care apare in medii dezordonate in care  $kL_{lm} \gg 1$ , cu  $k = 2\pi/\lambda$  numarul de unda al luminii in mediu si  $L_{lm}$  distanta medie intre doua fenomene de imprastiere a radiatiei electromagnetice pe CI. Spre deosebire de electroni, fotonii in sistemele mezoscopice optice isi pastreaza coerenta de faza mai mult timp si astfel de fluctuatii ale intensitatii imprastiate/difRACTATE sunt mai usor de observat. Aceste fluctuatii locale in intensitatea luminii, numite si speckles, au fost observate cu mult timp inainte de aparitia sistemelor mezoscopice electronice, in particular in cazul imprastierii multiple a luminii in suspensii coloidale optic dense. Si in acest caz fluctuatiile in intensitatea luminii sunt de ordinul de marime al intensitatii. Spre deosebire de electroni, care produc fluctuatii ale conductantei in circuite metalice, fotonii produc corelatii intre diferite moduri transmise/intensitati masurate la diverse unghiuri, ca functie de unghiul la care se masoara lumina transmisa sau ca functie de frecventa luminii incidente. Putem vorbi deci de "localizarea" luminii datorita interferentelor multiple intre CI.

### **Amplificarea imprastierii inapoi**

Fenomenul de amplificare a functiei de unda imprastiate inapoi caracterizeaza regimul de localizare slaba al fotonilor si electronilor, si se manifesta in cazul electronilor prin magneto-rezistenta negativa. (In semiconductori macroscopici avem fenomenul de magneto-rezistenta pozitiva, in care rezistenta creste cu cresterea campului electric.) Efectul de interferenta, care este la originea localizarii slabe, este distrus de un camp magnetic slab ( $< 100$  Gauss), si se observa in experimente de magneto-rezistenta, care sunt folosite pentru determinarea  $L_{rf}$ .

Pentru electroni, aparitia magneto-rezistentei negative in campuri magnetice slabe asociata corectiilor cuantice la constanta de difuzie, este similara cu efectul de amplificare a imprastierii inapoi (enhanced backscattering) in cazul luminii. (Localizarea slaba a luminii se refera la aparitia amplificarii imprastierii inapoi de-a lungul si in imediata vecinatate a direction care face un unghi  $\pi$  cu directia campului electromagnetic incident. In acest regim nu are loc de fapt localizarea luminii, dar se numeste localizare slaba deoarece este precursorul localizarii puternice.) Originea fenomenului este aceeaasi: interferenta constructiva intre functiile de unda electronice coerente imprastiate pe CI intr-o secventa inversa (vezi figura de mai jos: sus – manifestarea fenomenului in cazul luminii, jos – cazul electronilor (se observa si fluctuatiile universale ale conductantei)).

Aplicarea unui camp magnetic influenteaza puternic interferenta cuantica deoarece potentialul vector modifica faza functiei de unda electronice si deci distruge partial interferenta cuantica. Similar, in optica, distrugerea interferentei are loc daca unghiul intre vectorul de unda al luminii incidente si imprastiate creste. Fenomenul de localizare slaba al electronilor a fost observat in fire metalice foarte subtiri, precum si in gropi si fire cuantice semiconductoare.



In regimul de localizare slaba evenimentele de imprastiere sunt predominant elastice; amplificarea imprastierii inapoi se observa deci daca timpul in care starile electronice/fotonice raman coerente este mult mai mare decat timpul intre doua imprastieri elastice. Localizarea slaba se poate descrie ca interferenta intre functii de unde care se propaga de-a lungul unor bucle inversate in timp. Doua astfel de secvente successive de imprastieri pentru un



electron/foton care are initial un vector de unda  $\mathbf{k}_i$  si o stare finala cu aceeasi energie dar un vector de unda,  $\mathbf{k}_f = -\mathbf{k}_i$ ,  $\mathbf{k}_i \rightarrow \mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_2 \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{k}_n = \mathbf{k}_f$  si  $\mathbf{k}_i \rightarrow -\mathbf{k}_{n-1} \rightarrow \dots \rightarrow -\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_f$ , difera prin faptul ca in a doua secventa unda este imprastiata de aceiasi CI in ordine inversa si vectorii de unda sunt opusii celor din prima secventa, luati in ordine inversa. In consecinta, diferenta totala de faza intre undele care se propaga in order inversa este  $(\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f)(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n)$ , unde  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_n$  sunt pozitiile primului si ultimului CI. Daca  $\mathbf{k}_f = -\mathbf{k}_i$  aceste unde au aceeasi amplitudine si faza si se aduna coerent; la imprastierea inapoi intensity este deci mai mare cu un factor 2 (este dubla) fata de valoarea calculata cand mu se iau in considerare interferentele. Deoarece valoarea medie a  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n|$  pentru cea mai scurta bucla, cu  $n=2$ , este egala cu  $L_{rf}$ , latimea unghiulara (pentru fotoni, sau in camp magnetic pentru electroni) a imprastierii inapoi amplificate este  $\Delta\theta \cong \lambda / L_{rf}$ . Distributia intensitatii luminii imprastiate inapoi,  $I_s$ , in functie de unghiul de imprastiere are o forma triunghiulara in jurul valorii  $\theta = \pi$  cu o latime  $\Delta\theta$ ; avem deci un con de imprastiere inapoi. Masuratori ale latimii conului de imprastiere inapoi permit determinarea  $L_{rf}$  in medii slab dezordonate. Deoarece intervalul unghiular al unei bucle de interferenta este invers proportionala cu distanta intre punctele de inceput si sfarsit ale drumurilor ce formeaza bucla, contributia predominanta la varful conului de imprastiere inapoi este data de bucele de lungime mare, pe cand partile laterale ale conului sunt determinate de contributiile buclelor de lungime mica; forma conului reflecta distributia lungimii drumurilor intre CI in proba.

Imprastierea coerenta inapoi este asociata cu o scadere in coeficientul de difuzie. Imprastierea inapoi coerenta este mai importanta in probe cu latime  $L$  mai mare, deoarece numarul buclelor care se inchid intr-un anumit punct creste. In particular, localizarea slaba a luminii a fost observata in multe situatii ca, de exemplu, la imprastierea difuza a luminii pe diverse tipuri de microparticule (sfere de Ti in aer, microparticule de BaSO<sub>4</sub> inconjurate de un mediu solid compus din particule submicronice de SiO<sub>2</sub> in aer, etc) sau pulberi de materiale semiconductoare (Si, Ge, GaAs, si GaP). In toate cazurile s-a observat o reducere semnificativa a coeficientului de difuzie a undelor electromagnetice datorata imprastierii inapoi coerente.

Pentru a caracteriza cantitativ localizarea slaba a electronilor, consideram ca interferenta cuantica produce o corectie in conductanta, care este proportionala cu probabilitatea  $P(t)$  ca o particula care difuzeaza pe o anumita distanta se reintoarce in pozitia initiala cu aceeasi faza ca cea initiala. Aceasta probabilitate trebuie sa fie Gaussiana (forma ce

caracterizeaza difuzia) si sa satisfaca ecuatia de difuzie la distanta (si timp) mare de sursa de electroni,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D\nabla^2\right)P(\mathbf{r},t) = \delta(\mathbf{r})\delta(t),$$

unde  $D$  este coeficientul de difuzie. Solutia generala intr-un conductor de dimensiune  $d$ ,

$$P(\mathbf{r},t) = (4\pi Dt)^{-d/2} \exp(-\mathbf{r}^2 / 4Dt)$$

trebuie considerata pentru  $\mathbf{r} = 0$  (intoarcere in pozitia initiala) si multiplicata cu un factor exponential care exprima probabilitatea ca particula sa difuzeze prin ciocniri multiple fara a-si pierde memoria de faza. Rezultatul este

$$P(t) = (4\pi Dt)^{-d/2} \exp(-t / t_{ph}),$$

unde  $t_{ph}$  este timpul de relaxare al fazei. Acest rezultat trebuie modificat pentru a tine cont de faptul ca efecte difuzive nu pot fi intalnite in transportul balistic. Aceste efecte nu apar daca timpul este scurt, adica daca imprastierile au loc inainte ca transportul difuziv sa se manifeste. De aceea mai trebuie inclus un termen care sa tina cont de durata procesului, exprimat in functie de timpul  $\tau$  necesar pentru ca difuzia sa se manifeste:

$$P(t) = (4\pi Dt)^{-d/2} \exp(-t / t_{ph})[1 - \exp(-t / \tau)].$$

Corectia in conductivitate depinde de dimensionalitatea sistemului:

$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2}{h} \begin{cases} (2\pi L_{ph})^{-1} (\sqrt{1 + t_{ph} / \tau} - 1), & d = 3 \\ (2\pi)^{-1} \ln(t_{ph} / \tau + 1), & d = 2 \\ L_{ph} [1 - \sqrt{\tau / (\tau + t_{ph})}], & d = 1 \end{cases},$$

$$\text{cu } L_{ph} = \sqrt{Dt_{ph}}.$$

Distrugerea localizării slabe pentru electroni produsă de câmpul magnetic se poate explica ușor, dacă se consideră că amplitudinea funcției de undă a electronilor care trec prin două puncte foarte apropiate  $\mathbf{r}_i$  și  $\mathbf{r}_j$  se modifică în prezența câmpului magnetic cu factorul  $\exp[ie\mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/\hbar]$ . Deci, amplitudinea  $A_p$  asociată unui drum  $P$  se modifică cu o fază proporțională cu integrala de linie a potențialului vector de-a lungul lui  $P$ , iar în cazul în care  $P$  este o buclă cu aria  $S_p$  amplitudinea este

$$A_p \rightarrow A_p \exp\left[(ie/\hbar) \oint_P \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}\right] = A_p \exp[(ie/\hbar)BS_p].$$

Dacă  $B_p = h/|e|S_p$  este un câmp magnetic caracteristic buclei, amplitudinea undei se modifică cu

$$A_p(B) = A_p(0) \exp(-i2\pi B/B_p),$$

iar amplitudinea undei care parcurge buclă în sens invers este

$$A_p^{inv}(B) = A_p(0) \exp(i2\pi B/B_p),$$

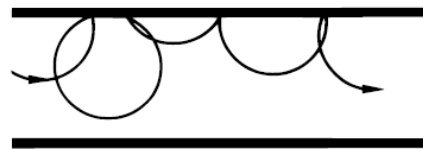
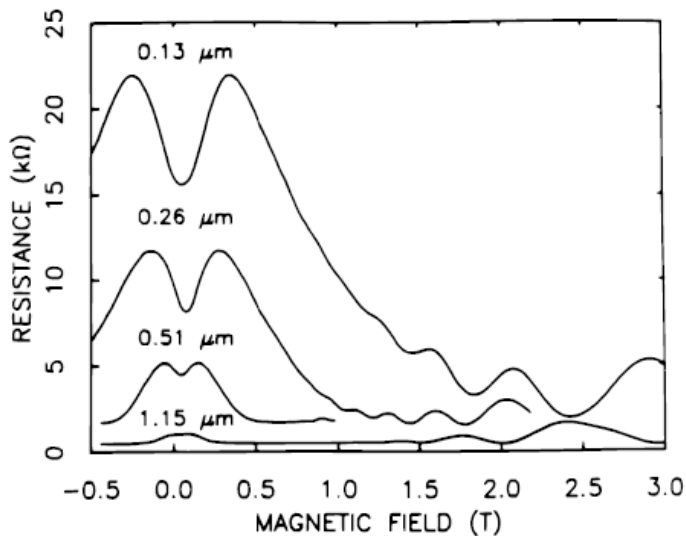
astfel încât amplitudinea totală devine  $A_p(B) + A_p^{inv}(B) = 2A_p(0) \cos(2\pi B/B_p)$ . În consecință, amplitudinea unei perechi de drumuri parcurse în sensuri opuse variază oscilator într-un câmp magnetic aplicat, cu o perioadă de oscilație specifică buclei. Această perioadă ia valori care variază de la un minim  $B_{p,\min}$  până la infinit, astfel încât amplitudinea totală

$$A = \sum_P 2A_p(0) \cos(2\pi B/B_p)$$

scade monoton cu  $B$ . Câmpul magnetic critic care distruge împrăștierea coerentă înapoi este dat de cea mai mică perioadă,  $B_{p,\min}$ , care corespunde celei mai mari arii,  $S_{p,\max}$ , care este de ordinul de mărime al  $L_{rf}^2$ . Pentru  $L_{rf} = 1 \mu\text{m}$ , acest câmp magnetic critic este de 40 G.

Trebuie precizat că, în cazul electronilor, fenomenele fiind mai complexe, se poate observa și o scădere (în loc de amplificare) a magneto-rezistenței în câmpuri magnetice slabe,

care se datoreaza interferentei distructive asociata cu rotatia spinului in timpul imprastierii. Aceasta anti-localizare se datoreaza interactiunii spin-orbita. Anti-localizare, sau mai degraba o suprimare a localizarii slabe pentru campuri magnetice mici (apare ca un con de imprastiere inapoi, cu o depresiune in varf – vezi figura de mai jos) se intalneste si in fire cuantice foarte subtiri, in care traiectoriile longitudinale sunt convertite in stari de margine, iar daca latimea conductorului este mai mare decat diametrul miscarii circulare in camp magnetic imprastierea inapoi este suprimata pentru ca orbitele sunt redirectionate in directia inainte.

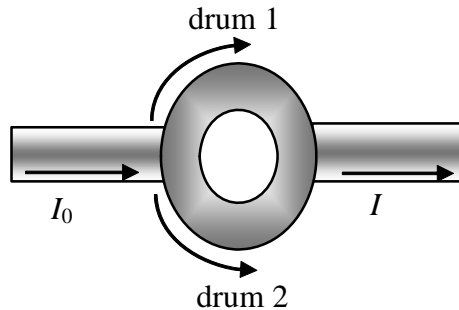


### Efectul Aharonov-Bohm $h/2e$

Un fenomen asociat cu localizarea slaba este efectul Aharonov-Bohm “injumatatit”. In cazul efectului Aharonov-Bohm pentru electroni liberi, faza introdusa de vectorul potential in drumurile 1 si 2 care ocolesc o regiune cu  $\mathbf{B} \neq 0$  ( $\mathbf{B} = 0$  insa de-a lungul drumurilor 1 si 2) duce la o figura de interferenta a electronilor din fasciculele reunite care se compune din franje de interferenta cu o perioada  $h/e$  in fluxul magnetic in regiunea inconjurata de drumurile 1 si 2. In cazul in care drumurile 1 si 2 se refera la electroni in fire cuantice, interferenta se manifesta in oscilatii in curentul  $I$  (vezi figura de mai jos), si se observa in fire cuantice in care transportul electronilor este balistic.

Interferenta electronilor coerenti in fire cuantice ne-balistice (dezordonate/in care avem procese de imprastiere elastice) se observa daca lungimea dispozitivului este mai mica decat  $L_{rf}$ . In acest caz, toate drumurile inconjoara aproximativ aceeasi arie  $S$ , si deci sunt asociate aceleiasi perioade de oscilatie in camp magnetic,  $B_0$ . In consecinta, curentul

(proportional cu coeficientul de transmisie, adica cu modulul patrat al amplitudinii functiei de unda) are o dependenta de campul magnetic de tipul



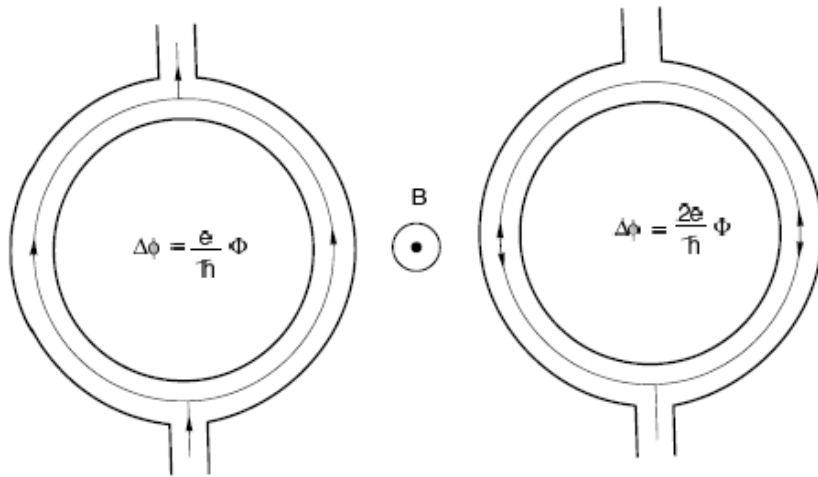
$$I(B) \propto \cos^2\left(\frac{2\pi B}{B_0}\right) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \cos\left(\frac{4\pi B}{B_0}\right) \right]$$

In acest caz, curentul nu mai scade monoton cu campul magnetic datorita suprapunerii oscilatiilor de perioade diferite, ci are o comportare oscilatorie (teoretic, cu maxime de valori duble fata de cazul in care nu exista interferenta, si minime nule) cu o perioada

$$\Delta B = \frac{B_0}{2} = \frac{h}{2|e|S}$$

In realitate oscilatiile in curent (sau rezistenta) se suprapun peste un fond constant.

Astfel de oscilatii au fost observate in inele metalici. Deoarece fluxul care inconjoara inelul, egal cu  $BS$ , se modifica cu  $h/2e$  intr-un ciclu de oscilatie, fenomenul este denumit efect Aharonov-Bohm  $h/2e$ , pentru a fi distins de efectul Aharonov-Bohm obisnuit, in care fluxul variaza cu  $h/e$ . Diferenta intre localizarea slaba si efectul Aharonov-Bohm obisnuit este ca in primul caz drumurile fac in inconjur complet al inelului, pe can in ultimul caz inconjoara doar jumatate din el (vezi figura de mai jos). In consecinta, fluxul este de doua ori mai mare decat in efectul Aharonov-Bohm obisnuit. Spre deosebire de efectul Aharonov-Bohm obisnuit care presupune o propagare balistica in jurul inelului, in localizarea slaba electronul difuzeaza in jurul inelului si interferenta se produce in jurul a doua traiectorii parcurse in sens opus.



In acest sens, fluctuatiile universale ale conductantei si imprastierea coerenta inapoi se pot interpreta ca efecte de interferenta in structuri mezoscopice care nu au forma de inel. Trebuie mentionat ca se pot obtine oscilatii ale rezistentei in camp magnetic si in cazul conductorilor in regim de localizare puternica, dar care nu au o alta origine: interactia electron-electron.

### **Criteria de localizare**

In medii cu dezordine slaba, imprastierea electronului poate fi aproximata ca o secventa de procese de imprastiere pe un singur CI. In acest regim de propagare functia de unda a electronului (sau analog, campul electromagnetic in medii dezordonate) este in continuare extinsa in intregul mediu (electronul/campul electromagnetic este delocalizat). Localizarea electronului/luminii implica imposibilitatea propagarii undelor de-a lungul unei distante mari; electronul/lumina devine localizata intr-o regiune data si intensitatea functiei de unda/campului electromagnetic descreste exponential in spatiu, fiind confinata intr-o regiune finita. In principiu, descresterea exponentiala a intensitatii undei apare intotdeauna in sisteme uni-dimensionale, pentru orice configuratie a CI, lungimea de localizare  $L_0$  depinzand doar de energie sau frecventa. In trei dimensiuni, conditiile de observare a localizarii electronului/luminii sunt mai restrictive.

### Criteria Ioffe-Regel de localizare

Aparitia localizarii, adica indeplinirea criteriului de imposibilitate a neglijarii interferentei intre undele imprastiate de diverse CI, depinde de dimensionalitatea sistemului. In trei

dimensiuni localizarea (puternica) a electronilor de energie joasa (sau a fotonilor) este prezisa de criteriul Ioffe-Regel:

$$k_F L_{rf} \cong 1.$$

Acest criteriu spune ca, daca  $L_{rf}$  este distanta pe care faza functiei de unda a electronului (sau a fotonului) devine arbitrara, incertitudinea in  $k_F$ , aproximativ egala cu  $1/L_{rf}$ , devine comparabila cu  $k_F$ . In regimul de localizare slaba,  $L_{rf}$  este cu cel putin un ordin de marime mai mare decat  $\lambda_F = 2\pi/k_F$ . Aparitia localizarii in cazul electronilor poate fi controlata prin scaderea  $k_F$ .

### Criteriul Thouless de localizare

Un criteriu de localizare aplicabil pentru medii dezordonate, indiferent de dimensiuni, este criteriul Thouless. In acest caz, se presupune ca localizarea starilor electronice apare cand conductanta unei probe nu se mai modifica la schimbarea conditiilor la limita/margine. Deci, daca electronii sunt localizati in regiuni mai mici decat dimensiunea conductorului, conductanta ramane neschimbata la modificarea conditiilor la margine, pe cand o astfel de modificare este resimtita puternic de starile electronice extinse. Criteriul Thouless apare intr-o teorie de scalare a localizarii aplicabila sistemelor metalice sau semiconductorilor puternic dopati, cu o densitate mare de stari la energia Fermi.

Modificarea conditiilor la limita a unui conductor de lungime  $L$  si dimensiune (a fenomenului de transport)  $d$  ( $=0, 1, 2$ , sau  $3$ ) se estimeaza printr-o modificare a nivelelor energetice ale electronilor, care se poate exprima ca

$$\Delta E(L) = \hbar D / L^2,$$

unde  $L^2 / D$  este timpul necesar pentru ca electronul sa difuzeze la marginea conductorului. Raspunsul sistemului de electroni la schimbarea conditiilor la margine duce la o modificare a diferentei medii intre nivelele de energie cu  $\delta E(L) = 1/[L^d \rho(E)]$ , unde  $\rho(E)\Delta E$  este numarul de stari in intervalul de energie  $\Delta E$  pe unitatea de volum  $L^d$  ( $\rho$  este densitatea de stari). Un parametru care poate descrie senzitivitatea conductantei la o variatie a conditiilor la margine este numarul Thouless, definit ca

$$\delta(L) = \Delta E(L) / \delta E(L).$$

Daca proba dezordonata are dimensiuni geometrice mult mai mari decat  $L_{lm}$ , numarul Thouless este legat de conductivitatea  $\sigma$  sau conductanta  $G$  ca

$$\delta(L) = \frac{2\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2} = \frac{2\hbar}{e^2} G(L).$$

(Conductanta/rezistenta depinde de  $L$  in transportul ne-balistic, dupa cum s-a vazut mai sus!)

In limita macroscopica avem  $\delta(L) \gg 1$  si  $G(L) = \sigma L^{d-2}$ , daca  $\sigma$  este independent de  $L$ , pe cand in cazul localizarii exponentiale a electronului conductanta scade exponential cu  $L$ , si  $\delta(L) = \delta_0 \exp(-L/L_{loc})$ , cu  $\delta_0$  un parametru constant.

Pentru  $d > 2$ , functia  $\beta = d \ln \delta / d \ln L$  este negativa pentru  $\delta(L) \ll 1$ , pozitiva pentru  $\delta(L) \gg 1$ , si se anuleaza pentru un numar Thouless  $\delta(L) = \delta_c$  de ordinul unitatii. Daca  $\delta(L) > \delta_c$ , pentru un conductor cu dimensiuni geometrice de ordinal  $L_{lm}$ , crescand dimensiunile creste si valoarea lui  $\delta(L)$ , pe cand o crestere a dimensiunilor conductorului pentru  $\delta(L) < \delta_c$  duce la o scadere a  $\delta(L)$ . Criteriul de localizare Thouless este deci  $\delta(L) = \delta_c \cong 1$ . La  $\delta_c$  caracterul functiei de unda electronice se schimba de la extinsa la localizata.

In semiconductori dezordonati dopati se poate defini un criteriu de localizare analog in termenii nivelului Fermi pentru electroni  $E_F$ : daca  $E_F < E_c$ , unde  $E_c$  este energia pentru care  $\beta = 0$ , proba este izolatoare din punct de vedere electric (functia de unda electronica este localizata), pe cand daca  $E_F > E_c$  proba este conductoare. Starile electronice localizate si extinse nu co-exista in general la o aceeasi energie.

$\beta$  este intotdeauna negativ pentru  $d \leq 2$ , astfel incat toate starile electronice intr-un mediu dezordonat cu aceasta dimensiune trebuie sa fie localizate. Deoarece comportarea functiei  $\beta$  este diferita pentru  $\delta \gg 1$  si  $\delta \ll 1$ , are loc o tranzitie graduala, in jurul unei valori  $\delta$  de ordinul unitatii intre o localizare logaritmica care apare la  $\delta \gg 1$  si o localizare exponentiala pentru  $\delta \ll 1$ . Deoarece localizarea logaritmica este mai puternica in sisteme uni-dimensionale, localizarea undelor se observa mai usor in fire cuantice pentru electroni, sau ghiduri de unda pentru fotoni.



Criteriul Thouless pentru localizare puternica se poate exprima in termeni de dimensiuni geometrice (deja prezente in criteriul Ioffe-Regel de localizare) introducand numarul Thouless modificat

$$\delta(L) = \Delta p(L) / \delta p(L),$$

unde  $\Delta p(L)$  este incertitudinea in impuls determinata de distributia de lungimi ale drumurilor intre doua puncte separate de distanta  $L$  si  $\delta p(L)$  este separarea intre nivele discrete ale starilor impulsului. Criteriul Thouless modificat cere ca  $\delta(L) = \delta_c \cong 1$  la aparitia localizarii. Pentru imprastierea electronilor pe impuritati snumerele Thouless original si modificat sunt echivalente.

#### Criteriul de localizare bazat pe scaderea drumului liber mediu de transport

Localizarea electronilor se poate defini si ca scadere (pana la zero) a conductantei. In cazul rezonantei la imprastieri multiple viteza de transport este foarte mica, dar criteriul de localizare nu este legat de viteza de transport ci de scaderea (pana la zero) a drumului liber mediu de transport  $L_{lm}$  (sau a coeficientului de difuzie); transportul electronilor (sau al fotonilor) inceteaza la tranzitia spre stari localizate. Interferenta intre undele imprastiate este singurul mecanism de anulare a  $L_{lm}$  intr-un mediu infinit. Intr-un mediu tri-dimensional infinit izotropic cu imprastieri elastice localizarea are loc daca  $L_{lm} = 0$  cand  $k_F L_{rf} \leq 1$ .

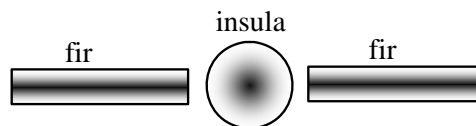
Pentru **recapitulare**, avem

- Transport balistic, daca  $L \ll L_{lm}, L_{rf}$  (fara ciocniri, in care conductanta este cuantizata in trepte de  $2e^2/h$  care apar cand numarul modurilor care se propaga variaza)
- Transport difuziv, daca  $L > L_{lm}$  (apar ciocniri)
- Localizare slaba a electronului, daca  $L_{lm} \ll L < L_{rf}$  (apar fluctuatii universale ale conductantei si imprastierea inapoi coerenta)
- Localizare (puternica) a electronului, daca  $L_{lm} \ll L_{rf} < L$  (rezistenta depinde exponential de lungime)
- Transport clasic/ohmic, daca  $L_{rf}, L_{rf} \ll L$  (rezistenta satisface legea Ohm)

# Blocada Coulomb. Tranzistorul cu un singur electron

## Blocada Coulomb

In nanostructuri puternic confinate, in special in puncte cuantice, interactia Coulomb devine semnificativa si duce la dependenta starilor electronice de numarul discret de particule (sarcini electrice) intr-un punct cuantic. Aceasta dependenta este evidentiata in fenomenul numit blocada Coulomb, care consta in aparitia unui interval interzis/banda interzisa BI de energie, in jurul nivelului Fermi, in spectrul energetic al electronilor confinati in puncte cuantice semiconductoare sau in particule metalice mici (generic, in insule) care sunt cuplate la fire metalice prin bariere de tunelare (vezi figura de mai jos).



Aceasta BI, similar cu cazul BI in semiconductori, poate fi inteleasa ca reprezentand energia aditionala necesara, datorita interactiei Coulomb intre electronii din insula, pentru ca un electron sa tuneleze in sau dinspre insula. Aceasta tunelare/redistribuire a sarcinii electrice este exprimata printr-o modificare in potentialul electrostatic. Mai exact, sarcina se redistribuie astfel incat campul electric intern devine zero si insula se transforma intr-o suprafata echipotentiala.

Observatie: in sisteme macroscopice, modificarea in potential datorata injectarii electronilor prin tunelare sau emisie termionica este neglijabila, si se manifesta in zgomot (shot noise).

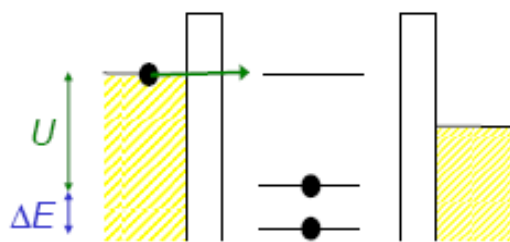
Aceasta energie aditionala, egala cu  $U = e^2 / 2C$  in insule metalice (sarcina in insula se scrie ca  $Q = CV$ , cu  $V$  potentialul electrostatic, iar energia este data de  $Q^2 / 2C$ ), unde  $C$  este capacitanta intre insula si mediul inconjurator, corespunde unei BI de latime  $e^2 / C$  in spectrul electronic in jurul nivelului Fermi deoarece nu numai electronii, dar si golurile, au nevoie de o energie aditionala  $e^2 / 2C$  pentru a tunela in insula.

Observatie: sarcina  $Q$  din capacitor nu trebuie neaparat asociata cu un numar discret de electroni. Aceasta sarcina se datoreaza redistribuirii sarcinii gazului de electroni fata de ionii incarcati pozitiv, si ca atare poate avea valori continue. Doar schimbarile in aceasta sarcina datorate tunelarii unui singur electron au o natura discreta.

Blocada Coulomb este observata la temperaturi mici, cand  $e^2 / C \gg k_B T$ , si daca numarul de electroni din insula este fixat, ceea ce implica o energie de incarcare Coulomb (charging energy)  $U = e^2 / C$  mult mai mare decat  $\hbar / \tau$  (latimea nivelului energetic), unde  $\tau$  este timpul de viata al electronilor. In termenii unui timp efectiv intr-un circuit  $RC$  ultima conditie presupune  $R \gg h / e^2$ , ceea ce implica decuplarea insulei de rezervoarele de electroni prin bariere de tunelare cu rezistente mult mai mari decat rezistenta cuantica.

Din figurile de mai jos se observa ca tunelarea electronilor intr-o insula metalica in prezenta blocadei Coulomb este posibila doar daca energia de incarcare este compensata de o tensiune aplicata, suficient de mare. Daca electronul tuneleaza, energia Fermi creste, o noua BI se formeaza in jurul ei si este nevoie de o alta crestere a tensiunii pentru ca un alt electron sa ajunga in insula. Aceste procese de tunelare corelata in si dinspre insula induc un curent net, caracteristica  $I - V$  avand forma unei scari scari ce consta dintr-o serie de platouri daca cele doua jonctiuni sunt foarte diferite. Aceste platouri sunt cauzate de blocada Coulomb care induce salturi abrupte in curent datorate efectelor de incarcare rapida.

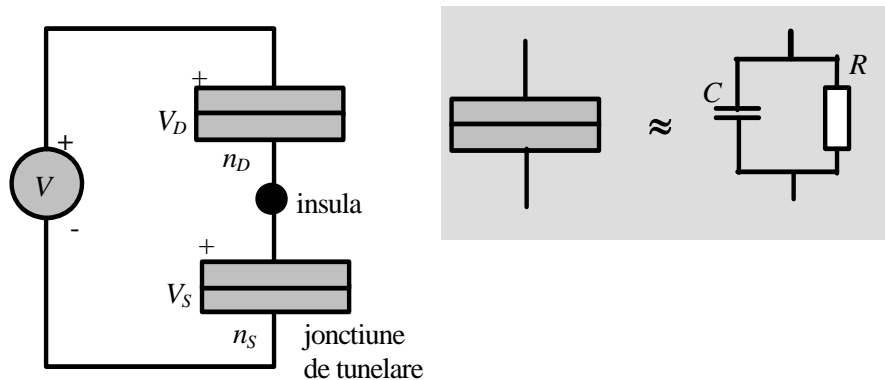
In insulele semiconductoare balistice blocada Coulomb se trateaza similar, dar trebuie tinut cont de efectul cuantizarii energiei (in particule metalice nu exista in general efectul cuantizarii datorat confinarii spatiale deoarece conditiile de transport balistic nu sunt indeplinite pentru ca in metale concentratia de purtatori este mai mare iar lungimea de unda Fermi scade la cativa nanometri). In acest caz, energia aditionala necesara pentru a aduce o sarcina in insula este  $U + \Delta E = e^2 / C + \Delta E$ , unde  $\Delta E$  este diferenta de energie intre stari cuantice adiacente.



Blocada Coulomb este un fenomen legat de un singur electron, care isi are originea in natura discreta a sarcinii electrice care poate fi transferata de la o insula conductoare conectata la rezervoarele de electroni prin bariere subtiri; spre deosebire de acest fenomen, dispozitivele cu tunelare rezonanta se bazeaza pe spectrul discret al nivelelor de energie rezonanta intr-o groapa cuantica cuplata la rezervoare de electroni prin bariere subtiri. Blocada Coulomb permite un control precis al unui numar mic de electroni, cu aplicatii importante in dispozitive

de comutare (switching devices) cu disipare scazuta de putere si deci o crestere a nivelului de integrare al circuitelor.

Comportarea insulei metalice cuplate slab (printr-un izolator subtire) la doi electrozi/rezervoare metalici, poate fi inteleasa din circuitul echivalent din figura de mai jos, care consta din drena (injectorul de electroni), o insula de dimensiuni nanometrice, si o sursa (colectorul de electroni).



In aceasta figura, ansamblul compus dintr-un izolator subtire si electrodul metalic este o jonctiune tunel/de tunelare, care injecteaza si extrage sarcini din insula. Aceasta jonctiune tunel poate fi modelata ca o configuratie paralela formata dintr-o rezistenta de tunelare  $R$  si o capacitate  $C$ . Caderile de tensiune pe cele doua jonctiuni tunel sunt notate cu  $V_D$  si  $V_S$ , si capacitatile respective ale circuitelor echivalente cu  $C_D$  si  $C_S$ , indicii  $D$  si  $S$  referindu-se la drena si, respectiv, sursa. Avem  $Q_{S,D} = C_{S,D}V_{S,D}$ . In continuare presupunem ca barierele de tunelare subtiri intre electrozii metalici si insula au inaltime mare, astfel incat rezistenta de tunelare este independenta de tensiunea aplicata pe jonctiuni si tunelarea este secventiala, electronii care ajung in insula relaxandu-se imediat prin imprastieri electron-electron. Energia circuitului echivalent din figura de mai sus, in care exista  $n_D$  electroni care tuneleaza prin jonctiunea drenei si  $n_S$  care tuneleaza prin jonctiunea sursei este data de diferenta intre energia electrostatica stocata in capacitori, si lucrul consumat de sursa de tensiune pentru a transfera sarcini in si dinspre insula.

Notand cu  $C = C_S + C_D$  capacitatea totala si cu  $Q = Q_D - Q_S = -(n_D - n_S)e = -ne$  sarcina din insula, avem

$$CV_D = C_S(V - V_S) + C_D V_D = C_S V + Q, \quad CV_S = C_S V_S + C_D(V - V_D) = C_D V - Q$$

de unde rezulta ca

$$V_D = (C_S V - ne) / C, \quad V_S = (C_D V + ne) / C,$$

si energia electrostatica stocata in condensatori este

$$E_{el-stat} = \frac{Q_S^2}{2C_S} + \frac{Q_D^2}{2C_D} = \frac{C_S V_S^2}{2} + \frac{C_D V_D^2}{2} = \frac{1}{2C} (C_S C_D V^2 + Q^2).$$

Lucrul consumat de sursa de tensiune pentru a transfera sarcini in si dinspre insula,

$$W = W(n_S) + W(n_D) = -eV(n_S C_D + n_D C_S) / C,$$

se obtine din  $W = V\Delta Q$ , unde  $\Delta Q$  este sarcina totala transferata de la sursa de tensiune, incluzand numarul intreg de electroni care tuneleaza in insula precum si sarcina de polarizare care se creaza in raspuns la schimbarea potentialului electrostatic din insula. O schimbare a sarcinii in insula datorita tunelarii prin  $S$  astfel incat  $n_S' = n_S + 1$  schimba sarcina pe insula in  $Q' = Q + e$  si numarul de electroni din insula in  $n' = n - 1$ . Ca raspuns, tensiunea pe jonctiunea  $D$  se schimba cu  $V_D' = V_D - e/C$  si apare o sarcina de polarizare compensatorie  $\Delta Q = -eC_D / C$ .

Energia circuitului echivalent este deci

$$E(n_S, n_D) = E_{el-stat} - W = (C_S C_D V^2 + Q^2) / 2C + eV(C_S n_D + C_D n_S) / C$$

Daca purtatorii de sarcina tuneleaza prin jonctiunea drenei, energia insulei metalice se modifica cu

$$\Delta E_D = E(n_S, n_D) - E(n_S, n_D \pm 1) = (e/C)[-(e/2) \pm (en - VC_S)],$$

pe cand daca electronii tuneleaza prin jonctiunea sursei energia insulei sa schimba cu

$$\Delta E_S = E(n_S, n_D) - E(n_S \pm 1, n_D) = (e/C)[-(e/2) \mp (en + VC_D)].$$

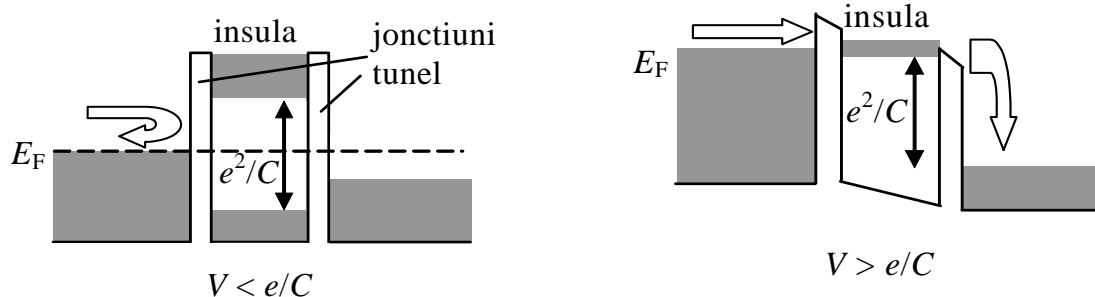
Intr-o insula metalica neutra, pentru care  $n = 0$ , modificarea energiei insulei cand un electron intra in sau pleaca din ea,

$$\Delta E_{S,D} = -e^2/2C \mp eVC_{D,S}/C > 0,$$

este zero doar daca se aplica o tensiune care sa permita electronului sa tuneleze intre sursa, insula si drena. Daca  $C_S = C_D = C/2$  aceasta tensiune de prag este data de

$$V_p = |V| = e/C.$$

Sub tensiunea de prag tunelarea nu are loc si  $I = 0$ . Acest regim de transport al electronilor, caracterizat de o conductanta mica in jurul originii curbei  $I - V$ , este blocada Coulomb. Regimul de blocada Coulomb este exemplificat in figura de mai jos. Daca nu se aplica o tensiune, sau pentru tensiuni  $V < e/C$ , in jurul nivelului Fermi se deschide o BI de latime  $e^2/C$ , care nu permite tunelarea intre contacte. La  $V > e/C$  tunelarea de la sursa la drena prin insula este permisa si deci blocada Coulomb este depasita, in insula  $n = 1$ , dar energia Fermi in insula creste din nou cu  $e^2/C$  si o alta tunelare este interzisa de aparitia unei noi BI, cu exceptia cazului cand tensiunea creste peste noua valoare de prag, adica la  $V > 3e/C$ , sau un alt electron din insula tuneleaza in celalalt fir.

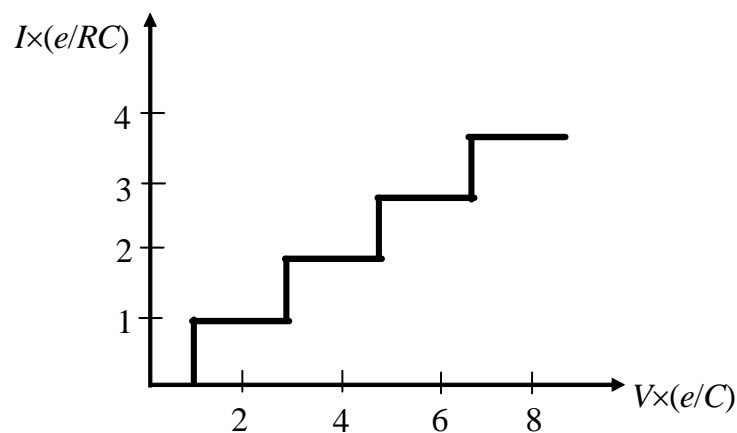


Intre cele doua valori de prag ale tensiunii nu exista curent prin structura, pana cand electronul din insula tuneleaza in dreana, si insula revine la starea cu  $n = 0$ . In aceasta situatie nivelul Fermi in insula scade si un alt electron poate tunela prin structura; acest ciclu se repeta de mai multe ori. Numarul mediu de electroni in insula creste cu 1 de fiecare data cand tensiunea creste in trepte de  $2e/C$ . Daca  $C$  este suficient de mare, efectul de blocada Coulomb este puternic atenuat, si chiar dispare pentru ca tensiunea de prag devine prea mica.

Daca rezistenta de tunelare in jonctiunea sursei este mult mai mare decat cea din jonctiunea drenei, adica daca  $R = R_s \gg R_D$ , dar capacitatile respective sunt egale, curentul prin ansamblul sursa-insula-dreana este controlat de tensiunea  $V_D = V/2 + ne/C$  care cade pe jonctiunea drenei. Tensiunea pe dreana sare cu  $e/C$  de fiecare data cand se atinge tensiunea de prag pentru jonctiunea drenei pentru valori  $n$  crescatoare. Salturile corespunzatoare in curent sunt date de

$$\Delta I = e/CR,$$

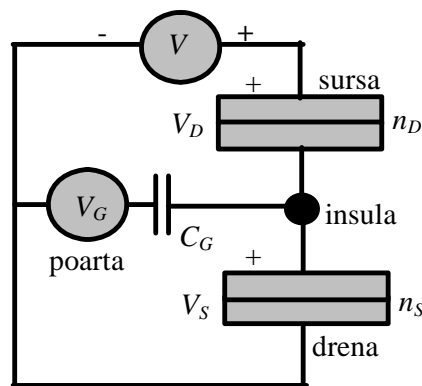
si caracteristica  $I - V$  a dispozitivului ia forma specifica de scara, reprezentata in figura de mai jos, care reflecta efectele de incarcare din insula. Aceasta forma specifica a curbei  $I - V$ , care este o manifestare macroscopica a fenomenelor cuantice, se observa doar daca energia de incarcare Coulomb este mai mare decat energia termica si cand fluctuatiile in numarul de electroni din insula sunt suficient de mici ca sa permita localizarea sarcinii in insula. Ultima conditie este indeplinita daca  $R \gg h/e^2 = 25.8 \text{ k}\Omega$ .



## Tranzistorul cu un singur electron

Dispozitivele cu un singur electron bazate pe blocada Coulomb au in general un control additional al sarcinii in insula printr-un electrod de poarta, care induce oscilatii periodice ale curentului prin fire ca functie de tensiunea de poarta; unele dispozitive constau dintr-o retea de insule. Dispozitivele cu un singur electron, in particular tranzistorul cu un singur electron, sunt electrometri extrem de senzitivi care pot detecta variatii de sub o sarcina electronica. Aceste dispozitive se bazeaza pe efectele produse cand un singur electron este injectat sau extras dintr-o insula nanometrica.

Tranzistorul cu un singur electron, SET (single electron transistor), consta din nou din drena, insula si sursa, dar insula este conectata la o poarta suplimentara. Circuitul echivalent este prezentat in figura de mai jos. Injectorul si colectorul de electroni sunt jonctiuni tunel, care constau din structuri de tip contact punctiform.



Capacitatea totala a SET-ului este  $C = C_S + C_D + C_G$  si energia totala este data de o formula similara cu cea din cazul precedent, dar care include energia capacitorului de poarta. In acest caz,

$$Q_G = C_G(V_G - V_S), \quad Q = Q_S - Q_D - Q_G = -ne + Q_p,$$

cu  $Q_p$  o sarcina parazita ce se datoreaza sarcinilor arbitrare ce se gasesc confinate in jurul jonctiunii. Cand au loc evenimente de tunelare in jonctiunea sursei astfel incat  $Q = -ne + Q_p$ ,



$$V_D = [(C_G + C_S)V - C_G V_G + ne - Q_p] / C, \quad V_S = [C_D V + C_G V_G - ne + Q_p] / C,$$

energia electrostatica este

$$E_{el-stat} = [C_G C_D (V - V_G)^2 + C_S C_D V^2 + C_G C_S V_G^2 + Q^2] / 2C,$$

iar

$$W(n_S) = -en_S (C_D V + C_G V_G) / C, \quad W(n_D) = -en_D [C_S V + C_G (V - V_G)] / C,$$

si

$$E = [C_G C_D (V - V_G)^2 + C_S C_D V^2 + C_G C_S V_G^2 + Q^2] / 2C + en_S (C_D V + C_G V_G) / C \\ + en_D [C_S V + C_G (V - V_G)] / C$$

Variatia energiei se exprima acum ca

$$\Delta E_S = (e / C) / \{-e / 2 \mp [en - Q_p + (C_G + C_D)V - C_G V_G]\},$$

daca tunelarea se face prin jonctiunea sursei, iar daca tunelarea are loc prin jonctiunea drenei avem

$$\Delta E_D = (e / C) / \{-e / 2 \pm [en - Q_p - C_S V - C_G V_G]\}.$$

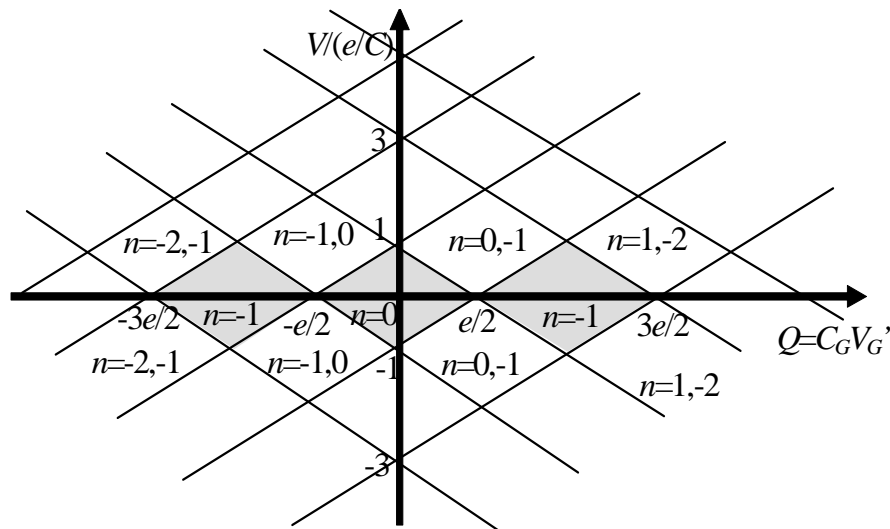
Tensiunea de poarta este folosita pentru controlul sarcinii din insula si pentru deplasarea regiunilor de blocada Coulomb pentru  $n \neq 0$ . Conditile pentru tunelarea in si dinspre insula sunt date de

$$-e / 2 \mp [en + (C_G + C_D)V - C_G V_G'] > 0,$$

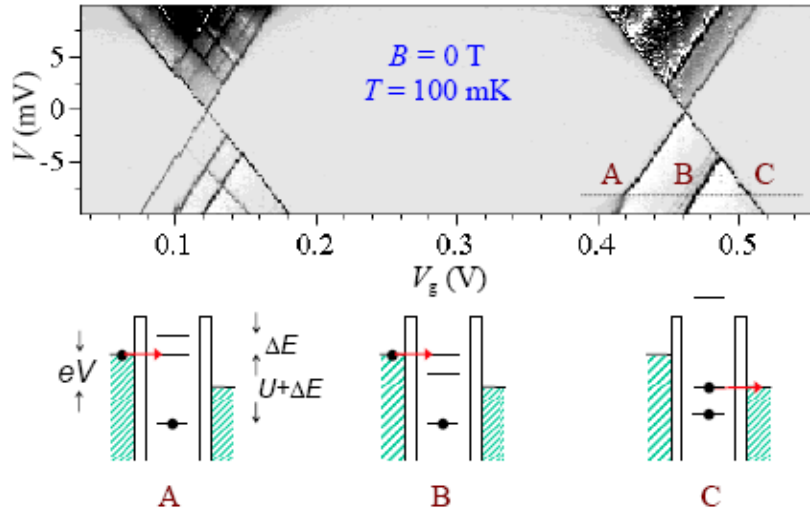
$$-e / 2 \pm [en - C_S V - C_G V_G'] > 0,$$

unde  $V_G' = V_G + Q_p / C_G$ .

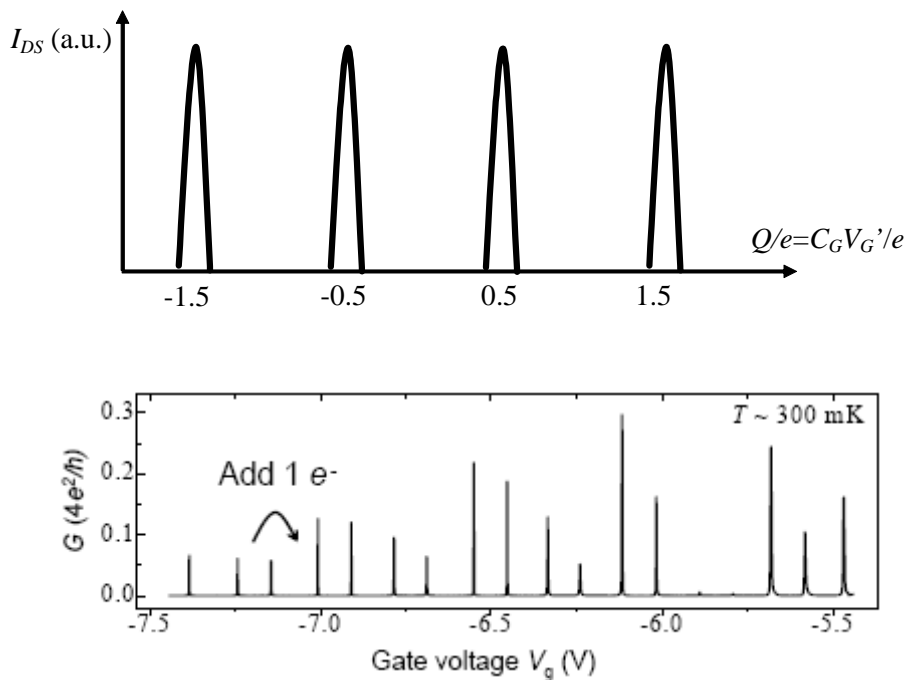
Ecuatiile de mai sus formeaza o familie de drepte in planul  $(V, V_G)$ , care se intersecteaza reciproc, dupa cum se observa in figura de mai jos. Aceste drepte delimiteaza conditiile de stabilitate ale SET-ului, ariile gri indicand regiuni cu blocada Coulomb.



In interiorul acestor regiuni stabile, numite diamante Coulomb (Coulomb diamonds), numarul electronilor este fixat, si fenomenul de tunelare nu are loc. Se poate trece de la o regiune stabila la alta prin modificarea tensiunii de poarta, ceea ce permite adaugarea sau scaderea cu o unitate a numarului de electroni din insula. Forma diamantelor Coulomb depinde doar de capacitatile de poarta si cele ale jonctiunilor. Din contra, in afara diamantelor Coulomb, numarul electronilor fluctueaza. Deasupra si dedesuptul diamantelor Coulomb, numarul electronilor variaza intre doua numere intregi consecutive. In aceste regiuni, tunelarea secventiala prin insula este permisa la o tensiune finita sursa-dena,  $V_{DS}$ . Regiunea maxima de blocaj este determinata de conditia ca  $C_G V_G'$  sa fie un multiplu intreg al sarcinii elementare (adica, sa fie egal cu  $pe$ , cu  $p \in Z$ ), in timp ce tunelarea este permisa daca acest produs are valori egale cu jumatati de multipli intregi ai sarcinii electronice. In puncte cuantice diamantele Coulomb arata ca in figura de mai jos.



Daca se modifica tensiunea de poarta la  $V_{DS}$  fixat, curentul de drena are o structura cu maxime multiple, care indica prezenta blocadei Coulomb si regiunile de tunelare secventiala (vezi figura de mai jos). Curentul circula doar daca numarul de electroni in poarta este jumatate dintr-un intreg, tensiunea de poarta care separa doua maxime consecutive fiind  $\Delta V_G = e/C_G$ . Intre maxime numarul de electroni din insula ramane fixat la o valoare stabila, intreaga. Daca  $eV \ll k_B T$  latimea maximelor este limitata termic, si maximele se atenuauza cu cresterea temperaturii la valori mai mari decat latimea (in energie) a regimului de blocada Coulomb. Aceasta comportare este o ilustrare a cuantizarii sarcinii electrice.



În conductori macroscopici cuantizarea sarcinii nu este evidentă deoarece funcția de undă electronică este extinsă pe distanțe mari. Din contra, în insule nanometrice electronii sunt localizați și funcția lor de undă este confinată într-o regiune foarte mică, condiție ce favorizează manifestarea cuantizării sarcinii. Dispozitivele cu un singur electron pot fi modelate cu metode mult mai elaborate decât circuitul echivalent de mai sus, dar acest model simplu explică fenomenele fizice principale.

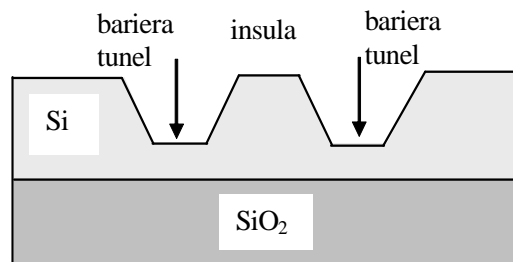
Observație: În analiza precedentă am considerat tunelarea unui singur electron. Totuși, dacă curentul de tunelare în regimul de blocadă Coulomb este mic, pot avea loc și procese (de ordin mai mare în teoria perturbăției) în care pot tunela simultan mai mulți electroni – aceste procese se numesc co-tunelări. Ele devin mai importante când rezistența joncțiunii tunel se apropie de valoarea  $e^2/h$  și fluctuațiile cuantice pot largi nivelele energetice, permițând mai multe canale/posibilități pentru transferul de sarcină. Deși în regimul de blocadă Coulomb, în primul ordin în teoria perturbăției, un electron nu poate tunela din fire în insulă datorită conservării energiei, astfel de procese sunt permise în ordine mai mari de perturbăție, în care un electron poate trece dintr-un fir în celălalt prin intermediul unor stări virtuale din insulă, energia conservându-se în întregul proces, deși nu se conservă în tunelarea într-o stare virtuală. Procesele de co-tunelare sunt parazite/nedorite în funcționarea dispozitivelor cu un electron.

Așa cum am văzut mai sus, apariția blocădei Coulomb este determinată de condiția ca energia de încărcare  $U = e^2/2C$  să fie mai mare decât energia termică. În caz contrar, electronii din insulă fluctuează chiar și în regiunile de blocadă Coulomb, și comportarea de SET este compromisă. Dacă insulă ar fi o sferă cu diametru  $d$  plasată într-un mediu dielectric cu permittivitate  $\epsilon$ , atunci  $C = 2\pi\epsilon_0\epsilon d$  și avem efect SET la temperatura camerei (pentru  $U = k_B T = 26$  meV și  $\epsilon = 4$ ) doar dacă  $d < 12$  nm. Mai exact, pentru  $U = 260$  meV, care este de 10 ori mai mare decât energia termică la temperatura camerei, avem nevoie de o insulă de Si cu un diametru de 1.3 nm și cu  $C = 0.3$  aF. Această capacitanță foarte mică este extrem de dificil de obținut tehnologic. De aceea, SET-uri care să funcționeze la temperatura camerei au fost fabricate doar recent, odată cu perfecționarea proceselor nanotehnologice.

Insulele pot fi făcute din orice material conductor (primele, care funcționau ca SET la 1 K fiind metalice sau superconductoare), dar se dorește implementarea SET-ului folosind semiconductori ca Si sau GaAs, pentru a permite integrarea acestora cu alte circuite electronice. Insule nanometrice din Si pot fi fabricate folosind metode nanolitografice. Se formează întâi un fir cuantic, care este confinat apoi pentru a forma o insulă prin corodare

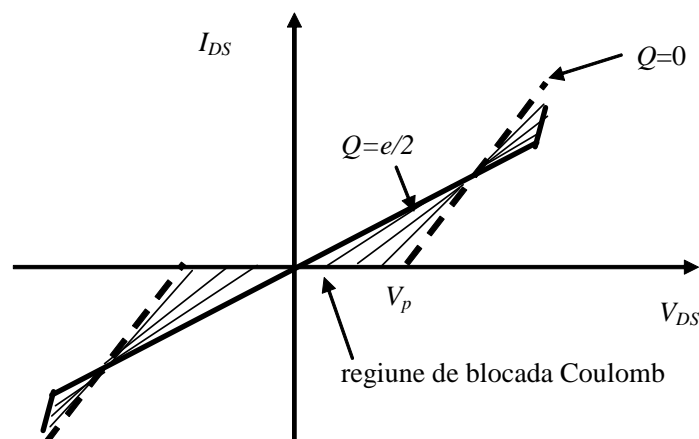
uscata si litografie cu fascicul de electroni. Deoarece inaltimea corugatiei este de 30 nm,  $U$  atinge valoarea de 2 meV, astfel incat acest SET lucreaza la temperaturi de doar cativa K.

Pentru a obtine un SET la temperatura camerei se foloseste STM ca metoda de nanofabricatie. De exemplu, se depune intai un strat subtire de Ti, cu o latime de 3 nm, deasupra unui substrat de  $\text{SiO}_2/n\text{-Si}$ , dupa care se oxideaza Ti prin anodizare folosind un varf de STM ca si catod. Se formeaza astfel un strat de  $\text{TiO}_x$ , insula fiind produsa inconjurand o arie de  $30\text{ nm} \times 30\text{ nm}$  de Ti cu  $\text{TiO}_x$  care actioneaza ca bariere (vezi figura de mai jos).



Alte materiale folosite pentru fabricarea SET la temperatura camerei sunt nanotuburile de carbon, care au  $U = 40\text{ meV}$ . SET-urile din compusi semiconductori AIII-BV lucreaza in prezent la temperaturi mai mici decat temperatura camerei.

Aplicatiile SET includ circuite logice, memorii si electrometre foarte sensibile. Principiul de functionare al electrometrului se bazeaza pe sensibilitatea foarte mare a curentului de drena la schimbari in tensiunea de poarta. Variatii ale sarcinii electronice mai mici decat sarcina elementara duc la schimbari masurabile in curentul de drena, dupa cum se vede in figura de mai jos, in care s-a reprezentat caracteristica  $I_{DS} - V_{DS}$  la diverse valori  $Q = C_G V_G'$  (la diverse tensiuni de poarta).

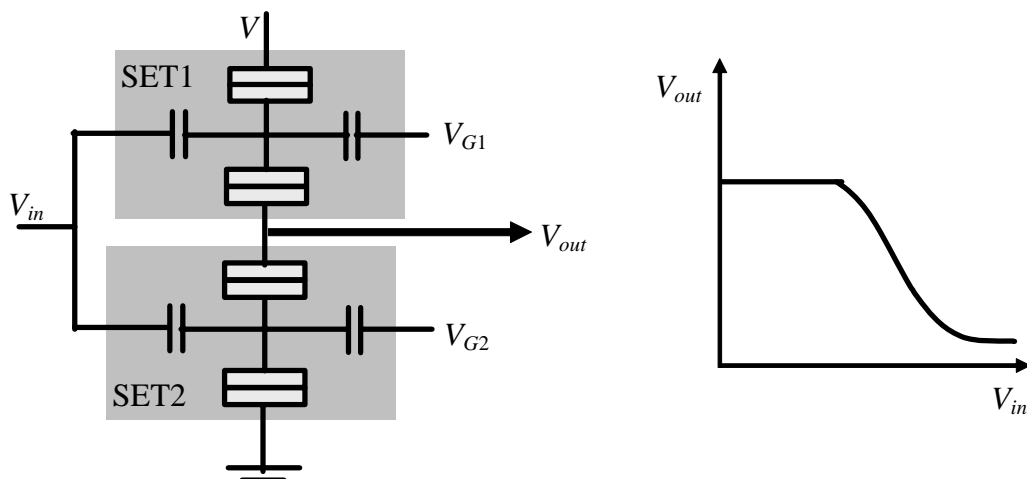


Caracteristica  $I_{DS} - V_{DS}$  sub  $V_p$  este lineara si este data de

$$I_{DS} \cong [V_{DS} - \text{sign}(V_{DS}) \times (e/2C)] / (R_S + R_D).$$

Sensitivitatea electrometrului este foarte mare la frecvente de operare mare, la care zgomotul  $1/f$  este neglijabil. De exemplu, la 1 MHz sensitivitatea la sarcina este  $1.2 \times 10^{-5} e / \text{Hz}^{1/2}$ , ceea ce corespunde la o sensitivitate in energie de  $41\hbar$ .

Dispozitivele logice bazate pe SET-uri au avantajul ca acest transistor are dimensiuni mici si consuma relative putina putere. Astfel de dispozitive includ invertoarele sau portile logice, cum ar fi NAND si XOR. Un exemplu de inverter este reprezentat in figura de mai jos. (Portile logice NAND si NOR pot fi implementate cu ajutorul unor variante ale circuitului inverter, doi invertoari formeaza celula de memorie a unui RAM static, iar trei invertoari formeaza un oscilator inel.) Tensiunea de iesire a unui inverter este mare cand intrarea/input-ul este mic si este mica cand intrarea este mare. In cazul circuitului de mai jos se aplica o tensiune de intrare  $V_{in}$  si se variaza cele doua tensiuni de poarta,  $V_{G1}$  si  $V_{G2}$ , astfel incat SET1 conduce si SET2 este intr-o stare de blocada Coulomb cand intrarea este mica; fiecare tranzistor poate conduce sau nu in functie de tensiunile de poarta.



## Heterojonctiuni dopate. Solutii self-consistente

Pana acum am tratat miscarea electronilor in structuri mezoscopice fara a considera interactia electronilor intre ei, si aproximand forma barierelor de potential cu dreptunghiuri. In barierele de potential de tip treapta se ignora efectele donozilor si acceptozilor ionizati, ca si interactia Coulombiana a electronilor liberi in solutia starilor discrete. Aceasta aproximatie este rezonabila in gropi cuantice nedopate, dar nu si, de exemplu, in 2DEG in GaAs/AlGaAs. In acest caz trebuie inclusi in energia potentiala in ecuatia Schrödinger doi termeni aditionali:  $V_D(z)$  si, respectiv,  $V_{ee}(z)$ . Termenul  $V_D(z)$  reprezinta interactia electrostatica a electronilor cu atomii de impuritate, iar  $V_{ee}(z)$  descrie contributia interactiei intre mai multe particule (many-body) la energia potentiala uni-particula. In general,  $V_{ee}(z) = V_h(z) + V_{xc}(z)$ , unde  $V_{xc}(z)$  descrie contributiile de schimb si de corelatie, iar  $V_h(z)$  reprezinta contributia Hartree, adica energia potentiala electrostatica datorata densitatii medii de sarcina a celorlalti electroni din sistem. Ambii termeni,  $V_D(z)$  si  $V_h(z)$ , sunt de natura electrostatica si se obtin din solutia ecuatiei Poisson (potentialul este  $\nabla^2\phi = -\rho/\epsilon$ , si campul electric  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ ):

$$\nabla^2\phi_e = -\frac{\rho_{ion}(z) - en(z)}{\epsilon},$$

unde  $\phi_e = V_h + V_D$ ,  $\rho_{ion}$  este densitatea de sarcina datorata donozilor si acceptozilor ionizati,  $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$  este permitivitatea semiconductorului, iar  $n(z) = \sum_p n_p |\Psi_p(z)|^2$  este densitatea de electroni 3D a 2DEG, cu  $n_p$  densitatea 2D de purtatori in subbanda  $p$ , in care functia de unda (normalizata) a electronilor este  $\Psi_p$ .

In ecuatia de mai sus se neglijeaza variatia  $\epsilon$  la interfata heterojonctiunii. In plus, daca interfata intre cele doua materiale dielectrice este abrupta, trebuie adaugat un potential de “image”, astfel incat sa se satisfaca conditia de continuitate a componenteii normale a campului electric la interfata. Acest potential duce la o singularitate neintegrabila in energie daca functia de unda penetreaza in bariera. Pentru a evita acest lucru se introduce un potential gradat la interfata, in concordanta cu situatia la scara atomica. In particular, in sistemul AlGaAs/GaAs diferenta in constanta dielectrica este mica si potentialul de image se poate ignora.

In AlGaAs/GaAs  $V_{xc}(z)$  are forma aproximativa

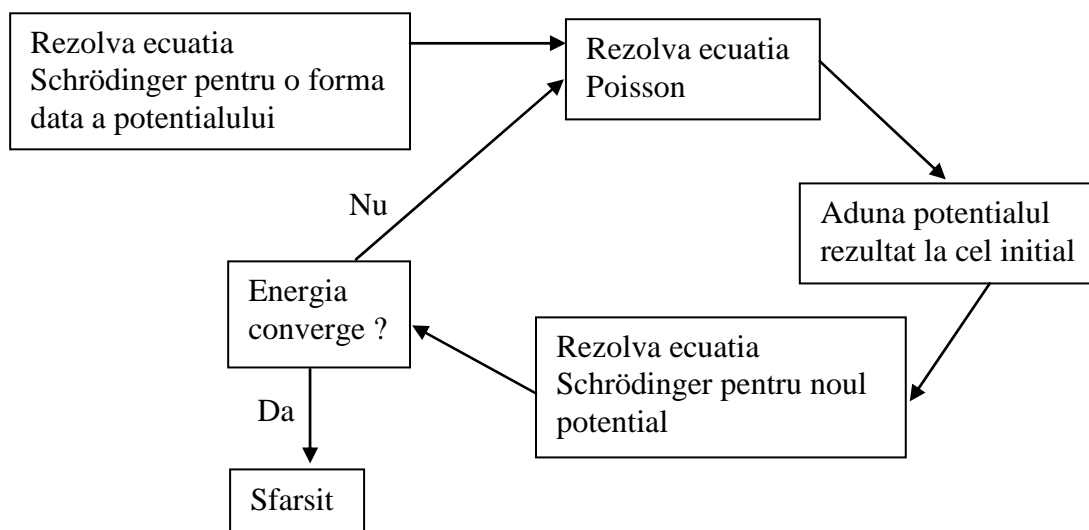
$$V_{xc}(z) \cong -[1 + 0.77x \ln(1 + 1/x)] 2Ry^* / (\pi \alpha r_s)$$

unde  $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$ ,  $x = r_s / 21$ ,  $r_s(z) = [(4\pi/3)a^3 n(z)]^{-1/3}$ , and  $a = \epsilon_r \hbar^2 / me^2$  este raza efectiva Bohr. Energia este masurata in unitati Rydberg efectiv (valoarea ei este de  $\cong 5$  meV in GaAs). In aceasta expresie aproximativa se presupune o constanta dielectrica fara discontinuitati la interfata.

Includerea efectelor multi-particula cupleaza ecuatia Schrödinger

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

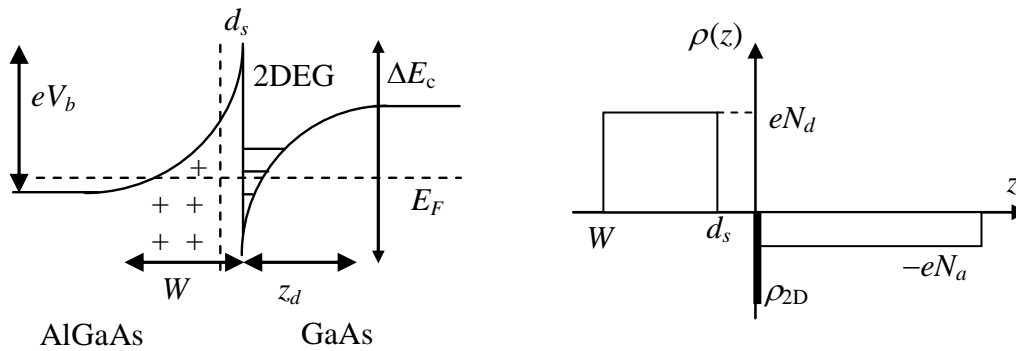
cu ecuatia Poisson prin  $n(z)$ . Solutia simultana a celor doua ecuatii se numeste solutie self-consistenta, care se gaseste numeric intr-o procedura iterativa (vezi figura de mai jos).



Se incepe calculul cu o forma data a potentialului/solutie de incercare  $\Psi^0(z)$ , care este solutia in absenta contributiilor multi-particula sau o solutie pentru o forma particulara a acestui potential. Se calculeaza  $n^0(z) = \sum_p n_p^0 |\Psi_p^0(z)|^2$  si se rezolva numeric ecuatia Poisson. Dupa ce se calculeaza potentialul electrostatic  $\phi_e^0$ , se calculeaza noua solutie a ecuatiei Schrödinger  $\Psi^1(z)$ , si asa mai departe. Se spera ca procedura iterativa converge dupa un numar de iteratii.



Un model simplu al unei heterostructuri reale este prezentat in figura de mai jos. Presupunem ca in sistemul GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As exista un strat ingust de separare, de largime  $d_s$ , intre regiunile dopate uniform  $n$  in AlGaAs si 2DEG. Presupunem de asemenea ca stratul de GaAs este dopat usor  $p$  cu concentratia de acceptori  $N_a$ . In acest model, densitatea de sarcina descreste cu distanta de la jonctiune, deoarece in regiunile omogene exista neutralitate de sarcina. Electronii din donorii ionizati, cu concentratie  $N_d$ , in AlGaAs migreaza in GaAs, unde sunt localizati la interfata de diferenta de potential  $\Delta E_c$  si de curbura benzilor.



Lucram in aproximatia in care concentratia purtatorilor liberi este zero in regiunea de saracire de latime  $W$  la stanga si  $z_d$  in dreapta, cu exceptia interfetei, unde are valoarea  $\rho_{2D}$ .  $z_d$  in GaAs este dat de conditia de inversie pentru formarea 2DEG la interfata:

$$z_d = \sqrt{\frac{2\epsilon V_{inv}}{eN_a}}, \quad \text{cu} \quad V_{inv} \cong \frac{2(E_{Fi} - E_{Fp})}{e},$$

unde  $V_{inv}$  este potentialul de curbura electrostatic al benzilor cand electronii incep sa populeze stratul de inversie 2DEG, iar  $E_{Fi} - E_{Fp}$  este diferenta intre nivelul Fermi intrinsec si nivelul Fermi in GaAs omogen/macroscopic.

Din legea Gauss (de neutralitate a sarcinii totale) rezulta ca

$$(W - d_s)N_d = n_{2D}(E_F) + N_a z_d.$$

Variatia totala de potential in AlGaAs, care rezulta din integrarea densitatii de sarcina de la

$-\infty$  la 0 de doua ori este  $V_b = \frac{eN_d(W^2 - d_s^2)}{2\epsilon}$ . Atunci, din diagrama de benzi rezulta

$$E_c - E_{Fn} + \frac{e^2 N_d (W^2 - d_s^2)}{2\varepsilon} = \Delta E_c - E_F$$

unde  $E_c$  si  $E_{Fn}$  sunt marginea BC si, respectiv, nivelul Fermi in AlGaAs departe de interfata.

Deoarece  $n_{2D}$  este functie de nivelul Fermi (de numarul de subbenzi populate), ultimele doua ecuatii se pot rezolva simultan pentru a obtine  $W$  si  $E_F$ . Procedura este iterativa, dupa cum s-a explicat mai sus.

Latimea efectiva a subbenzii  $p$  este

$$\langle z_p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} z |\Psi_p(z)|^2 dz$$

si creste cu  $p$ . Pentru a gasi simplu  $\Psi_p(z)$  se foloseste modelul unui potential triunghiular

$$V(z) = eF(z), \quad z > 0,$$

unde  $F = e(N_a z_d + n_{2D}/2)/\varepsilon$ , unde factorul  $1/2$  provine din considerarea unui camp mediu in 2DEG datorita sarcinii purtatorilor liberi  $n_{2D}$ . Daca  $\Delta E_c$  este suficient de mare se poate neglija penetrarea functiei de unda in cealalta regiune si se presupune  $\Psi_p(z) = 0$ , pentru  $z < 0$ .

Funcția de unda intr-un potential triunghiular are forma

$$\Psi_p(z) = C_p Ai \left[ \frac{(2m/\hbar^2 e^2 F^2)^{1/3}}{eFz} - E_p \right],$$

unde  $C_p$  sunt constante de normalizare. Energiile proprii  $E_p$  se determina din conditia Dirichlet la  $z = 0$  si din descompunerea in serie asimptotica:

$$E_p \cong \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \left[ \frac{3\pi e F}{2} \left( i - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3}, \quad p = 1, 2, \dots$$

## Functii Green

Pana acum stim sa calculam coeficientul de transmisie si conductanta  $G$  din solutiile de tip unda plana ale ecuatiei Schrödinger in diverse straturi succesive. Formalismul Landauer-Büttiker este valabil in conditii de cvasi-echilibru, cand energia asociata caderii de tensiune pe structura este mai mica decat separarea intre nivelele energetice discrete sau energia Fermi. Daca aceste conditii nu sunt indeplinite, si caderea de tensiunea pe dispozitiv este comparabila cu separarea energetica intre subbenzi (adica avem tensiuni de polarizare mari), numarul subbenzilor ocupate pentru transmisia electronilor in cele doua directii opuse difera, astfel incat pot rezulta comportari neliniare. In plus, ipoteza de transport coerent, fara ciocniri, nu mai este valabila pentru electroni injectati cu energie cinetica mare (relativ la energia Fermi in contactul colector), datorita cresterii ratei ciocnirilor cu fononii sau cu alti purtatori.

Din aceste motive, in multe situatii transportul electronilor in structuri mezoscopice se trateaza cu o metoda mai generala pentru determinarea raspunsului intr-un punct (inauntrul sau in afara conductorului) la o excitatie intr-un alt punct, bazat pe functiile Green. Spre deosebire de metoda matriciala, metoda functiilor Green permite introducerea interactiilor electron-electron si electron-fonon.

Functiile Green se pot introduce cand raspunsul  $R$  la o excitatie  $S$  se exprima printr-un operator diferential  $D$ :  $DR = S$ . Atunci,  $R = D^{-1}S = GS$ , cu  $G = D^{-1}$ . In cazul nostru raspunsul sistemului este functia de stare a electronului (functia de unda in reprezentarea coordonatelor) si

$$G = [E - H]^{-1}$$

unde  $E$  este energia electronilor, si

$$H = \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V$$

este Hamiltonianul sistemului (pentru generalitate s-a considerat si un camp magnetic aplicat, cu potential vector  $\mathbf{A}$ ). Inversul unui operator diferential nu este unic definit pana nu se specifica conditiile la limita. De obicei se definesc doua functii Green: retardata si avansata, care corespund la conditii la limita diferite.

Sa luam exemplul unui fir cuantic uni-dimensional, pe directia  $x$ , cu energia potentiala constanta  $V = V_0$ , in absenta campului magnetic. In aceste conditii, in reprezentarea coordonatelor,

$$G = \left( E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)^{-1}$$

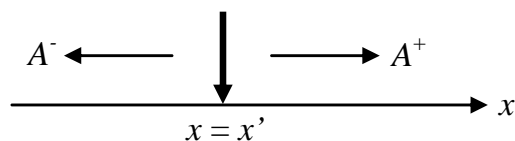
astfel incat functia Green satisface ecuatia

$$\left( E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) G(x, x') = \delta(x - x').$$

Aceasta ecuatie este similara cu ecuatia Schrödinger

$$\left( E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x) = 0$$

cu exceptia termenului  $\delta(x - x')$  in partea dreapta. Putem deci interpreta functia Green  $G(x, x')$  ca functia de unda la pozitia  $x$  care rezulta dintr-o excitatie unitate aplicata la  $x'$ . Din punct de vedere fizic, o asemenea excitatie da nastere la doua unde care se propaga in directii opuse dinspre punctul de excitatie, cu amplitudini  $A^+$  si  $A^-$  (vezi figura de mai jos).



In aceste conditii,

$$G(x, x') = \begin{cases} A^+ \exp[ik(x - x')], & x > x' \\ A^- \exp[-ik(x - x')], & x < x' \end{cases}$$

cu  $k = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar$ . Aceasta solutie satisface ecuatia functiei Green in toate punctele, in afara de  $x = x'$ , indiferent de valorile lui  $A^+$  si  $A^-$ . Pentru a satisface aceasta ecuatie si pentru  $x = x'$  trebuie puse conditiile de continuitate a functiei Green,

$$G(x = x'^+, x') = G(x = x'^-, x'),$$

si de discontinuitate a derivatei sale cu  $2m / \hbar^2$ :

$$\left. \frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right|_{x=x'^+} - \left. \frac{\partial G(x, x')}{\partial x} \right|_{x=x'^-} = \frac{2m}{\hbar^2}.$$

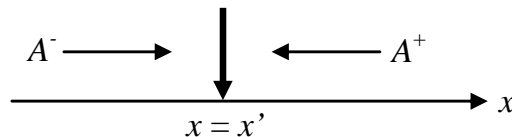
Din aceste conditii rezulta ca  $A^+ = A^- = -im / \hbar^2 k$ , adica

$$G^R(x, x') = -\frac{im}{\hbar^2 k} \exp(ik |x - x'|).$$

Aceasta este solutia retardata. Trebuie remarcat ca mai exista o alta solutie,

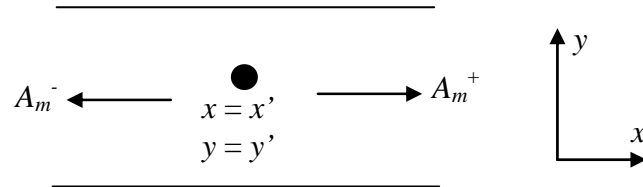
$$G^A(x, x') = \frac{im}{\hbar^2 k} \exp(-ik |x - x'|)$$

care satisface aceeasi ecuatie. Aceasta solutie, avansata, consta din unde care se propaga inspre punctul de excitatie si dispar in acest punct (vezi figura de mai jos).



Funcțiile Green avansata si retardata satisfac aceeasi solutie dar corespund la conditii la limita diferite: functia retardata corespunde la unde care se propaga dinspre punctul de excitatie, iar cea avansata la functii care se propaga inspre acest punct, avand originea in regiuni departate de punctul de excitatie.

Analog, functia Green  $G^R(x, y; x', y')$  intr-un fir cuantic multi-mod reprezinta functia de unda la pozitia  $(x, y)$  datorita unei excitatii la  $(x', y')$ . Aceasta excitatie induce unde care se propaga dinspre punctul de excitatie, in diferite moduri  $m$ . Mai precis,



$$G^R(x, x') = \sum_m A_m^\pm \chi_m(y) \exp[ik_m |x - x'|],$$

unde functia de unda transversala este solutie a ecuatiei

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(y) \right) \chi_m(y) = E_m \chi_m(y)$$

si  $V(y)$  este potentialul de confinare transversal, pe directia  $y$ . Aceste functii sunt ortonormate:

$$\int \chi_n(y) \chi_m(y) dy = \delta_{nm},$$

deoarece satisfac aceeasi ecuatie cu diferite valori proprii. Presupunem ca aceste functii sunt reale. Pentru a calcula amplitudinile modurilor,  $A_m^+$  si  $A_m^-$ , se procedeaza ca in cazul firului unidimensional, adica se folosesc conditiile

$$G^R(x = x'^+, x') = G^R(x = x'^-, x'),$$

$$\left. \frac{\partial G^R(x, x')}{\partial x} \right|_{x=x'^+} - \left. \frac{\partial G^R(x, x')}{\partial x} \right|_{x=x'^-} = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(y - y'),$$

din care se obtine

$$\sum_m A_m^+ \chi_m(y) = \sum_m A_m^- \chi_m(y),$$

$$\sum_m ik_m (A_m^+ + A_m^-) \chi_m(y) = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(y - y'),$$

adica  $A_m^+ = A_m^- = -\frac{im}{\hbar^2 k_m} \chi_m(y')$  si

$$G^R(x, x'; y, y') = \sum_m -\frac{im}{\hbar^2 k_m} \chi_m(y) \chi_m(y') \exp[ik_m |x - x'|]$$

cu  $k_m = \sqrt{2m(E - E_m)} / \hbar$ .

Similar, in trei dimensiuni, daca  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ , functia Green ia forma

$$G^{R,A}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = -\frac{mk}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(\pm ikR)}{kR}$$

O metoda de a incorpora conditiile la limita in ecuatie este de a adauga o parte imaginara infinitesimala la energie. Astfel ecuatia satisfacuta de functia Green retardata in reprezentarea coordonatelor devine (cu  $\eta > 0$ )

$$\left( E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + i\eta \right) G^R(x, x') = \delta(x - x').$$

Partea imaginara in energie introduce o parte imaginara pozitiva in numarul de unda, care se scrie acum

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E + i\eta - V_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \sqrt{1 + \frac{i\eta}{E - V_0}} \cong \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \left[ 1 + \frac{i\eta}{2(E - V_0)} \right] = k(1 + i\delta)$$

Aceasta parte imaginara face ca functia avansata sa creasca nelimitat pe masura ce ne indepartam de punctul de excitatie. In consecinta, functia retardata este singura acceptabila/limitata. In mod similar, functia Green avansata (in reprezentarea coordonatelor) este singura solutie acceptabila pentru ecuatia

$$\left( E - V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - i\eta \right) G^A(x, x') = \delta(x - x').$$

In general, se definește operatorul funcției Green retardată și avansată ca, respectiv,

$$\begin{aligned} G^R &= [E - H + i\eta]^{-1}, \quad \eta \rightarrow 0^+ & \text{sau} & \quad G^R = [E - H + i0]^{-1} \\ G^A &= [E - H - i\eta]^{-1}, \quad \eta \rightarrow 0^+ & \text{sau} & \quad G^A = [E - H - i0]^{-1} \end{aligned}$$

Funcția Green retardată este numită simplu funcție Green.

Pentru a calcula funcțiile Green în general, ne folosim de faptul că, pentru orice sistem de electroni, dacă stim funcțiile proprii ale operatorului Hamiltonian în reprezentarea coordonatelor,

$$H\psi_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r}),$$

putem calcula funcția Green ca

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\mathbf{r})\psi_\alpha^*(\mathbf{r}')}{E - E_\alpha + i\eta}.$$

Pentru a demonstra această relație ne bazăm pe ortonormalitatea funcțiilor proprii:

$$\int \psi_\beta^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{\beta\alpha},$$

ceea ce permite exprimarea funcțiilor Green ca

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\alpha C_\alpha(\mathbf{r}')\psi_\alpha(\mathbf{r})$$

unde coeficienții  $C_\alpha(\mathbf{r}')$  trebuie să fie determinați, de exemplu, prin introducerea acestei forme a funcției Green în ecuația

$$(E - H + i\eta)G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$



Deoarece operatorul  $H$  actioneaza doar asupra  $\mathbf{r}$  si nu  $\mathbf{r}'$ ,

$$\sum_{\alpha} (E - E_{\alpha} + i\eta) C_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

si, multiplicand cu  $\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})$  si integrand peste  $\mathbf{r}$  si facand uz de relatia de ortogonalitate, obtinem coeficientii  $C_{\alpha}$ :

$$C_{\alpha} = \frac{\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha} + i\eta}.$$

Similar, se poate demonstra ca, in reprezentarea coordonatelor,

$$G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha} - i\eta},$$

si

$$G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [G^R(\mathbf{r}', \mathbf{r})]^*, \quad \text{adica} \quad G^A = [G^R]^+.$$

Din relatiile de mai sus rezulta ca

$$\text{Im} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{2i}.$$

## Funcția Green și densitatea de stări

Toate informațiile continute în soluția ecuației Schrödinger se regăsesc în funcția Green. În particular, densitatea de stări și densitățile locale, respectiv nelocale, de stări se definesc ca

$$\rho(E) = \frac{1}{V} \sum_n \delta(E - E_n),$$

$$\rho_E(\mathbf{r}) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \delta(E - E_n),$$

$$\rho_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}') \delta(E - E_n).$$

Folosind

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\mathbf{r})\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha} + i0}$$

si expresia

$$\frac{1}{x + i0} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x),$$

cu  $P$  partea principala a integralei, putem scrie

$$\rho_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{2\pi} [G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}')],$$

$$\rho_E(\mathbf{r}) = \rho_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \frac{i}{2\pi} [G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}) - G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r})],$$

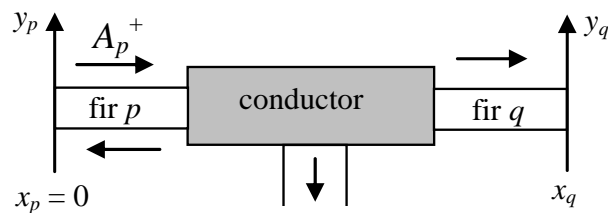
$$\rho(E) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \rho_E(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi V} \text{Im} \int d\mathbf{r} G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}).$$

In general, pentru orice reprezentare,  $\rho(E) = -\frac{1}{\pi V} \text{Im Tr}[G^R]$ .

## Funcția Green si coeficientul de transmisie al electronilor

In continuare, sa consideram un conductor conectat la fire ideale  $p$  si  $q$  (vezi figura de mai jos) astfel incat interfata intre firul  $p$  si conductor se afla la  $x_p = 0$ . Notam  $G_{qp}^R$  functia Green intre un punct in planul  $x_p = 0$  si un alt punct in planul  $x_q$ :

$$G_{qp}^R(y_q; y_p) = G^R(x_q, y_q; x_p = 0, y_p).$$



Incercam sa legam aceasta functie de coeficientul de transmisie in conditiile in care neglijam dimensiunea transversala si tratam problema ca fiind unidimensionala. O excitatie unitate la  $x_p = 0$  da nastere unei unde  $A_p^-$  care se propaga dinspre conductor (nu este aratata pe figura de mai sus), si unei unde de amplitudine  $A_p^+$  care se propaga spre conductor. Aceasta din urma este imprastiata de catre conductor in diferite fire. Putem deci scrie

$$G_{qp}^R = \delta_{qp} A_p^- + a_{qp} A_p^+.$$

Pe de alta parte stim ca  $A_p^+ = A_p^- = -\frac{im}{\hbar^2 k_p}$  si coeficientul de transmisie de la  $p$  la  $q$  este

$T_{qp} = J_q / J_{p,inc} = (k_q / k_p) |A_p^+|^2 = |t_{qp}|^2$ , unde  $J = (\hbar / 2mi)(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$  este curentul de probabilitate. In consecinta,  $a_{qp} = t_{qp} \sqrt{k_p / k_q}$  si din formula de mai sus rezulta ca

$$t_{qp} = -\delta_{qp} + i \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{k_q k_p} G_{qp}^R.$$

Am obtinut deci legatura intre coeficientul de transmisie al amplitudinii,  $t_{qp}$ , si functia Green. Coeficientul de transmisie al electronilor intre firele  $p$  si  $q$ , care intervine in formula Landauer sau in formula Büttiker, este  $T_{qp} = |t_{qp}|^2$ .

In cazul general, in care transmisia se face intre diferite moduri transversale, din formula

$$G_{qp}^R(y_q; y_p) = \sum_{m \in p} \sum_{n \in q} (\delta_{nm} A_m^- + a_{nm} A_m^+) \chi_n(y_q),$$

tinand cont ca  $A_m^+ = A_m^- = -\frac{im}{\hbar^2 k_m} \chi_m(y_p)$  si ca  $a_{nm} = t_{nm} \sqrt{k_m / k_n}$ , obtinem expresia

$$G_{qp}^R(y_q; y_p) = \sum_{m \in p} \sum_{n \in q} -\frac{im}{\hbar^2 \sqrt{k_n k_m}} \chi_n(y_q) (\delta_{nm} + t_{nm}) \chi_m(y_p),$$

din care putem gasi coeficientul de transmisie inmultind relatia de mai sus cu  $\chi_m(y_p)\chi_n(y_q)$ , integrand apoi peste  $y_p$  si  $y_q$  si folosind relatia de ortogonalitate pentru functiile de unda transversale. Rezultatul este

$$t_{qp} = -\delta_{qp} + i \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{k_q k_p} \iint \chi_n(y_q) G_{qp}^R(y_q; y_p) \chi_m(y_p) dy_q dy_p.$$

## Functia Green intr-un conductor conectat la fire infinite

Cum putem calcula functia Green pentru un conductor de forma arbitrara? Cea mai folosita metoda este sa discretizam coordonata spatiala astfel incat functia Green, care satisface ecuatia

$$(E - H + i\eta)G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

devine o matrice  $G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow G^R(i, j)$ , care este solutie a ecuatiei matriciale

$$[(E + i\eta)I - H]G^R = I$$

cu  $I$  matricea identitate, si se obtine inversand numeric matricea  $[(E + i\eta)I - H]$ .

De exemplu, pentru un conductor unidimensional in care coordonata spatiala devine discreta:  $x = ja$  cu  $j$  un intreg si  $a$  o constanta, actiunea hamiltonianului asupra unei functii arbitrare  $F(x)$  este

$$[HF]_{x=ja} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 F}{dx^2} \right]_{x=ja} + V_j F_j,$$

unde  $F_j = F(x = ja)$  si  $V_j = V(x = ja)$ . Daca  $a$  este mic derivata lui  $F$  se poate aproxima cu

$$\left[ \frac{dF}{dx} \right]_{x=ja} \cong \frac{F_{j+1} - F_j}{a}$$

$$\left[ \frac{d^2 F}{dx^2} \right]_{x=ja} \cong \frac{1}{a} \left( \left[ \frac{dF}{dx} \right]_{x=ja} - \left[ \frac{dF}{dx} \right]_{x=(j-1)a} \right) = \frac{F_{j+1} - 2F_j + F_{j-1}}{a^2},$$

astfel incat

$$[HF]_{x=ja} = (V_j + 2t)F_j - tF_{j-1} - tF_{j+1}$$

unde  $t = \hbar^2 / 2ma$  este elementul care leaga intre ele punctele discrete vecine. Matricea care reprezinta operatorul Hamiltonian pentru un lant unidimensional de puncte este

$$H = \begin{pmatrix} \dots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & V_{-1} + 2t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & V_0 + 2t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & V_{+1} + 2t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \dots \end{pmatrix}$$

Stim ca pentru un fir cuantic cu un potential constant  $V_0$  functiile de unda sunt unde plane,  $\psi_k(x) = \exp(ikx)$  si relatia de dispersie este parabolica:  $E = V_0 + \hbar^2 k^2 / 2m$ . Cum se modifica aceste relatii intr-o latice discreta?

Ecuatia Schrödinger discretizata se scrie

$$E\psi_j = (V_0 + 2t)\psi_j - t\psi_{j-1} - t\psi_{j+1},$$

iar solutiile sunt

$$\psi_j = \exp(ikja),$$

relatia de dispersie devenind  $E = V_0 + 2t[1 - \cos(ka)]$ .

Daca exista o reprezentare matriciala pentru operatorul Hamiltonian, se poate construi usor matricea  $[(E + i\eta)I - H]$ , care prin inversare da

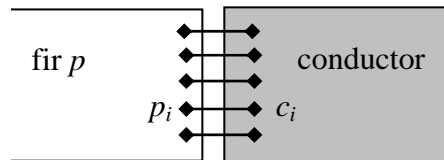
$$G^R = [(E + i\eta)I - H]^{-1}.$$

Singura problema este ca aceasta matrice are un numar infinit de dimensiuni. Motivul este ca avem un sistem deschis conectat la fire exterioare, care se intind la infinit. Daca am trunca matricea la un anumit punct, am putea descrie un sistem inchis cu margini perfect reflectante.

Pentru un conductor  $c$  conectat la firul  $p$ , putem partitiona functia Green in submatrici astfel incat

$$\begin{pmatrix} G_p & G_{pc} \\ G_{cp} & G_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E + i\eta)I - H_p & \tau_p \\ \tau_p^+ & EI - H_c \end{pmatrix}^{-1},$$

unde matricea  $[(E + i\eta)I - H_p]$  reprezinta firul izolat, iar  $[EI - H_c]$  reprezinta conductorul izolat. Matricea de cuplaj  $\tau_p(p_i, c_i) = t$  este diferita de zero doar pentru puncte adiacente din conductor si fir (vezi figura de mai jos).



Ceea ce ne intereseaza este submatricea  $G_c$ , care rezulta din

$$[(E + i\eta)I - H_p]G_{pc} + [\tau_p]G_c = 0,$$

$$[EI - H_c]G_c + [\tau_p^+]G_{pc} = 0,$$

adica

$$G_c = [EI - H_c - \tau_p^+ g_p^R \tau_p]^{-1}, \quad \text{cu} \quad g_p^R = [(E + i\eta)I - H_p]^{-1}.$$

In aceasta expresie matricile sunt finite, de dimensiune  $m \times m$ , unde  $m$  este numarul de puncte de contact intre conductor si fir.  $g_p^R$  este in continuare o matrice infinita, dar ea nu trebuie in general inversata numeric pentru ca  $g_p^R$  este functia Green pentru un fir izolat, si poate fi de obicei determinata analitic. Mai exact,  $[\tau_p^+ g_p^R \tau_p]_{ij} = t^2 g_p^R(p_i, p_j)$ .

Daca diferitele fire sunt independente, astfel incat efectele lor sunt aditive,

$$G^R = G_c = [EI - H_c - \Sigma^R]^{-1}$$

cu

$$\Sigma^R = \sum_p \Sigma_p^R, \quad \Sigma_p^R(i, j) = t^2 g_p^R(p_i, p_j).$$

Termenul  $\Sigma^R$  este un hamiltonian efectiv care rezulta din interactiunea conductorului cu firele, si se numeste energie proprie/self-energy. Termeni similari rezulta din interactia electronilor cu fononii sau cu alti electroni.

Pentru a gasi  $\Sigma^R$ , trebuie calculat  $g_p^R(p_i, p_j)$  intr-un fir izolat. Am calculat anterior functia Green pentru un fir infinit. Aici insa avem un fir semi-infinit, care se termina la conductor. In acest caz,

$$g_p^R(p_i, p_j) = -\frac{1}{t} \sum_m \chi_m(p_i) \exp(ik_m a) \chi_m(p_j),$$

astfel incat  $\Sigma_p^R(i, j) = -t \sum_m \chi_m(p_i) \exp(ik_m a) \chi_m(p_j)$ , si  $\Sigma_p^A = (\Sigma_p^R)^+$ .

Dupa ce se calculeaza functiile Green, se pot determina coeficientii de transmisie, care au forma (vezi exemplul de mai sus, de relatie intre coeficientul de transmisie al amplitudinii si functia Green intr-un conductor unidimensional cu mai multe moduri transversale)

$$T_{pq} = \text{Tr}[\Gamma_p G^R \Gamma_q G^A],$$

unde Tr indica trasa unei matrici (suma elementelor diagonale),  $T$  este de fapt produsul intre numarul de moduri si coeficientul de transmisie per mod, si

$$\Gamma_p(i, j) = i(\Sigma_p^R - \Sigma_p^A)(i, j) = \sum_m \chi_m(p_i) \frac{\hbar^2 k_m}{a} \chi_m(p_j)$$

descrie cuplajul intre conductor si fire.

In general  $\Gamma = i(\Sigma^R - \Sigma^A)$ . Analog,

$$A = i[G^R - G^A] = G^R \Gamma G^A = G^A \Gamma G^R$$

se numeste functie spectrala, si poate fi interpretata ca densitate de stari generalizata intr-un conductor, daca se iau in considerare si firele.

## Regula de sumare

Regula de sumare pentru coeficientul de transmisie reprezinta conservarea curentului, si este

$$\sum_q T_{pq} = \sum_q T_{qp} = M_p, \text{ adica } \sum_q T_{pq} = \text{Tr}[\Gamma_p G^R \Gamma G^A], \text{ cu } \Gamma = \sum_p \Gamma_p$$

unde  $M_p$  este numarul de moduri in firul  $p$ .

## Timpul de viata al unei stari proprii

Am vazut ca intr-un conductor conectat la fire Hamiltonianul efectiv este  $H_c + \Sigma^R$ , si

$$(H_c + \Sigma^R)\psi_\alpha = E_\alpha \psi_\alpha.$$

Spre deosebire de un sistem izolat, aici valorile proprii ale energiei sunt complexe deoarece energia proprie nu este in general hermitica. Mai precis,  $E_\alpha = E_{\alpha 0} - \Delta_\alpha - i\gamma_\alpha$ , unde  $E_{\alpha 0}$  este valoarea proprie a energiei in conductorul izolat si  $\Delta_\alpha$  este deplasarea in energie datorita modificarii dinamicii electronului in conductor in urma interactiei cu firele. Dependenta de timp a unei stari proprii a  $H_c + \Sigma^R$  are forma

$$\exp(-iE_\alpha t / \hbar) = \exp[-i(E_{\alpha 0} - \Delta_\alpha)t / \hbar] \exp(-\gamma_\alpha t / \hbar),$$

partea imaginara a energiei  $\gamma_\alpha$  reflectand "disparitia" unui electron din conductor in firele infinite. Deoarece probabilitatea de gasire a electronului este

$$|\psi_\alpha|^2 \exp(-2\gamma_\alpha t / \hbar),$$

$\hbar / 2\gamma_\alpha$  este timpul de viata, sau timpul mediu in care un electron ramane in starea  $\alpha$  inainte de a intra in fire.

Deoarece  $H_c + \Sigma^R$  nu este hermitic, starile proprii  $\psi_\alpha$  nu sunt ortogonale, spre deosebire de starile proprii ortogonale ale  $H_c$ . Notand  $\varphi_\alpha$  starile proprii ale operatorului adjunct,



$$(H_c + \Sigma^A)\varphi_\alpha = E_\alpha^* \varphi_\alpha$$

( $\psi_\alpha$  si  $\varphi_\alpha$  sunt identice pentru operatori hermitici), avem

$$\int \varphi_\alpha(\mathbf{r})\varphi_\beta^*(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{\alpha\beta}$$

si, analog cu formulele de mai sus (pentru operatori hermitici)

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\mathbf{r})\varphi_\alpha^*(\mathbf{r}')}{E - E_\alpha}$$

Funcțiile Green nu devin singulare daca  $E = E_\alpha$  deoarece valorile proprii ale energiei sunt acum complexe.

## Funcția spectrală

Intr-un conductor conectat la fire, funcția spectrală este definită ca  $A = i[G^R - G^A]$  si, tinand cont de ecuația de mai sus, se găsește ca

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\mathbf{r})\varphi_\alpha^*(\mathbf{r}')\gamma_\alpha}{(E - E_{\alpha 0} + \Delta_\alpha)^2 + (\gamma_\alpha / 2)^2}$$

Pe măsura ce cuplajul cu firele crește, energia proprie  $\Sigma^R$  crește, si maximele marimii  $\gamma_\alpha / [(E - E_{\alpha 0} + \Delta_\alpha)^2 + (\gamma_\alpha / 2)^2]$  sunt deplasate cu  $\Delta_\alpha$  si largite cu  $\gamma_\alpha$ . Dacă cuplajul crește suficient de mult, maximele diferitelor stări proprii  $\alpha$  nu mai pot fi distinse.

Funcția spectrală este legată de densitatea de stări prin relația

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[A(E)] = \frac{1}{2\pi} \int A(\mathbf{r}, \mathbf{r})d\mathbf{r} = \sum_\alpha \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_\alpha}{(E - E_{\alpha 0} + \Delta_\alpha)^2 + (\gamma_\alpha / 2)^2}$$

$$\xrightarrow{\gamma_\alpha \rightarrow 0} \sum_\alpha \delta(E - E_{\alpha 0} + \Delta_\alpha)$$

unde Tr indică trasa matricii. Deci, pentru stări cu timp de viață lung expresia densității de stări este cea cu care suntem obișnuiți.

Ca si în cazul unui conductor izolat, densitatea locală de stări se definește ca

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{2\pi} A(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)] = \sum_{\alpha} \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_{\alpha}}{(E - E_{\alpha 0} + \Delta_{\alpha})^2 + (\gamma_{\alpha}/2)^2} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r})$$

$$\xrightarrow{\gamma_{\alpha} \rightarrow 0} \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha 0}) |\psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2$$

## Funcția Green și conductivitatea electrică. Formula Kubo

Un alt exemplu de utilitate a funcției Green în conductori dezordonati se referă la calculul conductivității electrice. Formula Kubo leagă zgomotul la echilibru (adică, fluctuațiile) de conductanța în regimul de răspuns linear, în care conductivitatea  $\sigma$ , definită prin

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} ,$$

este independentă de  $\mathbf{E}$ . Această formulă, găsită prin metode specifice mecanicii statistice de echilibru, se exprimă ca

$$G = \frac{1}{2k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \langle I(t+t') I(t') \rangle_{eq} dt .$$

Conductanța este o proprietate de ne-echilibru, fiind definită în prezența unui câmp electric exterior. O relație similară există între conductivitatea nelocală  $\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  și densitatea de curent  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ . O altă formă a formulei Kubo, în care intervin funcțiile Green, se poate scrie, la temperaturi foarte mici, într-un conductor de dimensiune  $d$  și cu laturi de mărime  $L$ , ca

$$\sigma = \sigma_{xx} = \frac{2e^2}{h} \frac{\hbar^2}{L^d} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_x(\mathbf{k}') v_x(\mathbf{k}) |G^R(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2$$

dacă se consideră direcția curentului ca fiind  $x$  și dacă  $v_x(\mathbf{k}) = \hbar \mathbf{k} / m$  este viteza de mișcare a electronilor. În consecință,

$$G = \frac{\sigma L^{d-1}}{L} = \frac{2e^2}{h} \frac{\hbar^2}{L^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_x(\mathbf{k}') v_x(\mathbf{k}) |G^R(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 .$$

Aceasta relatie rezulta din formula Landauer,  $G = (2e^2/h)T$ . Mai sus am aratat ca, intr-un conductor discret in spatiul coordonatelor, expresia coeficientului de transmisie intre firele  $p$  si  $q$  are forma

$$T_{pq} = \text{Tr}[\Gamma_p G^R \Gamma_q G^A],$$

unde  $G^R$  descrie dinamica electronului in conductor (tinand cont de fire), in timp ce  $\Gamma_p$  reprezinta taria cuplajului firului  $p$  la conductor. Expresia aceasta este mult mai generala, si este valabila in orice reprezentare. De exemplu, in reprezentarea impulsului,

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Gamma_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') G^R(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \Gamma_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) G^A(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1).$$

In aceasta suma, termenii cu  $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$ , adica  $\Gamma_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}') G^R(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \Gamma_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}) G^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ , sunt reali si pozitivi deoarece  $G^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = [G^R(\mathbf{k}', \mathbf{k})]^*$  si elementele diagonale ale  $\Gamma$  sunt reale pentru ca operatorul  $\Gamma$  este hermitic. Ceilalti termeni din suma sunt complecsi, cu faze care variaza aleator si se anuleaza in medie, astfel incat pot fi omisi in suma. In consecinta,

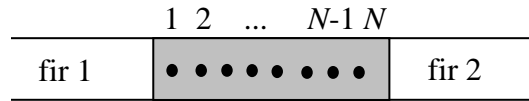
$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \Gamma_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}') |G^R(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \Gamma_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}),$$

expresie care este identica cu cea data mai sus daca  $\Gamma_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = \Gamma_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = \hbar v_x(\mathbf{k})/L$ . Aceasta ultima egalitate poate fi demonstrata usor intr-un conductor uniform cu doua fire identice. In acest caz,  $\Gamma_p(\mathbf{k}, \mathbf{k})$  reprezinta de  $\hbar/2$  ori rata la care un electron in starea  $\mathbf{k}$  scapa in firul  $p$ . Deoarece functia de unda a electronului este continuta intr-o regiune de marime  $L$  si electronul poate scapa prin cele doua suprafete cu viteza  $v_x$ , rata de scapare fiind  $2v_x/L$ , obtinem

$$\Gamma_p(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2} \frac{2v_x(\mathbf{k})}{L} = \frac{\hbar v_x(\mathbf{k})}{L}.$$

O demonstratie mai detaliata a acestei relatii intr-un conductor unidimensional cu  $N$  stari discrete aflate la distante  $a$ , este legata de figura de mai jos. In acest caz, singurele

componente diferite de zero ale energiei proprii se gasesc la capetele conductorului (doar la capete conductorul interactioneaza cu firele). Daca ambele fire sunt identice, folosind rezultatele de mai sus, avem



$$\Gamma_1(1,1) = \frac{\hbar v}{a} = \Gamma_2(N,N).$$

Trecand la o reprezentare a impulsului, folosind starile cuantice

$$|k\rangle = N^{-1/2} \sum_j \exp(-ikx_j) |j\rangle,$$

din regulile de transformare matriciala se obtine

$$\Gamma_p(k,k) = \sum_{i,j} \langle k|i\rangle \Gamma_p(i,j) \langle j|k\rangle,$$

iar pentru  $L = Na$ ,

$$\Gamma_1(k,k) = \frac{\hbar v}{L} = \Gamma_2(k,k).$$

Analog, intr-un conductor bidimensional cu sectiune uniforma, intr-o reprezentare modala in directie transversala si reprezentare in termeni de unde plane in directie longitudinala (ca in exemplul de la inceputul cursului)

$$\Gamma_1(m,k;m,k) = \frac{\hbar v_m}{L} = \Gamma_2(m,k;m,k).$$

In conductori largi marginile sunt neglijabile astfel incat conditiile la margine pot fi inlocuite cu conditii periodice, modurile pe directie transversala vor fi si ele de tip unde plane, si indicii  $(m,k)$  pot fi inlocuiti cu vectorul bidimensional  $\mathbf{k}$ .

## Funcția Green pentru probleme perturbative/dezordine

Un alt exemplu de aplicatie a functiei Green este in transportul electronilor in medii dezordonate/in prezenta imprastierilor. Presupunem ca in cazul unui conductor dezordonat,  $H = H_0 + V$ , cu  $H_0 = -(\hbar^2 / 2m)\nabla^2$  si  $V$  un potential dezordonat. Daca functia Green pentru Hamiltonianul  $H_0$  (in absenta dezordinii) este

$$G_0^{R,A}(E) = \frac{1}{E - H_0 \pm i0},$$

si pentru Hamiltonianul total functia Green are expresia

$$G^{R,A}(E) = \frac{1}{E - H \pm i0}.$$

Din

$$(E - H)G = I, \quad (E - H_0)G_0 = I,$$

obtinem

$$G = G_0 + G_0VG = G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + \dots$$

sau

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1)G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')d\mathbf{r}_1 \\ &= G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1)G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')d\mathbf{r}_1 \\ &\quad + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1)G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_2)G_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}')d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2 \\ &\quad + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1)G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_2)G_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)V(\mathbf{r}_3)G_0(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}')d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2d\mathbf{r}_3 + \dots \end{aligned}$$

Daca potentialul de dezordine este o functie continua, Gaussiana si aleatoare de pozitie, astfel incat media lui peste diverse realizari ale dezordinii (notata cu linie deasupra) este zero, adica  $\overline{V(\mathbf{r})} = 0$  si  $\overline{V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}')} = B(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , in urma medierii peste realizarile dezordinii, toti termenii de ordin impar in functia Green se anuleaza si cei de ordin par sunt exprimabili in functie de  $B$ .  $B(\mathbf{r})$  se numeste functie de corelatie. In aceste conditii obtinem

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int B(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}') d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \dots$$

Invarianta la translatie este regasita in urma medierii peste dezordine, astfel incat  $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , si, daca si  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , putem inlocui ecuatia de mai sus cu transformata sa Fourier. Definind functia Green in reprezentarea impulsului ca

$$G(\mathbf{k}) = \int G(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

obtinem

$$\bar{G}(\mathbf{k}) = G_0(\mathbf{k}) + V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} B(\mathbf{q}) G_0(\mathbf{k}) G_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}) G_0(\mathbf{k}) + \dots$$

In urma sumarii, rezultatul total este

$$\bar{G}(\mathbf{k}) = G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) \sum_{n=1}^{\infty} [\Sigma(\mathbf{k}) G_0(\mathbf{k})]^n$$

unde  $\Sigma(\mathbf{k})$  este energia proprie (self-energy), care se obtine prin sumare pe un numar infinit de termeni. In primul ordin al aproximarii,

$$\Sigma_1^{R,A}(\mathbf{k}) = V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} B(\mathbf{k} - \mathbf{q}) G_0^{R,A}(\mathbf{q}),$$

partea reala a energiei proprii fiind neimportanta (are ca efect doar deplasarea nivelului de referinta al energiei), pe cand partea imaginara este legata de densitatea de stari (vezi mai sus),

$$\text{Im} \Sigma_1^R(\mathbf{k}, E) = -\frac{\pi}{V} \sum_{\mathbf{q}} B(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta(E - E(\mathbf{q})),$$

si defineste timpul elastic de coliziune

$$\frac{\hbar}{2\tau_e} = -\text{Im} \Sigma_1^R(\mathbf{k}, E),$$

care este timpul de viata mediu al unei stari proprii cu vector de unda  $\mathbf{k}$  si energie  $E$ .

Din expresia energiei proprii calculata in primul ordin de aproximatie, se obtine

$$\bar{G}^{R,A}(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{E - E(\mathbf{k}) \pm i\hbar/2\tau_e},$$

care, pentru o relatie de dispersie parabolica cu  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$ , duce la expresia

$$\bar{G}^{R,A}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E) = -\frac{mk}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(\pm ikR)}{kR} \exp(-R/2l_e) = G_0^{R,A}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E) \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/2l_e),$$

unde

$$G_0^{R,A}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = -\frac{mk}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(\pm ikR)}{kR},$$

cu  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ,  $k_e^2 = k^2 \pm im/\hbar\tau_e$  si, cand  $kl_e \gg 1$ , unde  $l_e = v\tau_e$  este drumul liber mediu elastic, cu  $v$  viteza de grup, am  $k_e = k(1 \pm i/kl_e)^{1/2} \cong k \pm i/2l_e$ . Densitatea de stari obtinuta in urma medierii pe realizarile dezordinii este deci doar putin afectata daca  $kl_e \gg 1$ , corectia fiind de ordinul  $1/(kl_e)^2$  in trei dimensiuni, si  $1/kl_e$  in doua dimensiuni.