

Ballistischer Transport von Elektronen durch Nanostrukturen I - Streuung an Potentialbarrieren

SCHRIFTLICHE AUSARBEITUNG DES VORTRAGS VOM 3. DEZEMBER 2014
IM SEMINAR ZUR THEORIE DER ATOME, KERNE UND KONDENSIERTEN
MATERIE

ALEXANDER EICH¹

16. DEZEMBER 2014

WESTFÄLISCHE WILHELMS-UNIVERSITÄT MÜNSTER
FACHBEREICH PHYSIK

¹a_eich07@wwu.de

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung/Motivation	2
2	Potentialwall	2
3	Doppelbarriere	4
3.1	Analytische Lösung	5
3.2	Eigenschaften der Parameter	8
3.2.1	Variation des Abstands a	8
3.2.2	Variation der Breite b	8
4	Numerische Methode zur Lösung von Streuproblemen	10
4.1	Wave Function Matching	10
4.2	Vergleich Analytische und Numerische Methode	12
	Literaturverzeichnis	13

1 Einleitung/Motivation

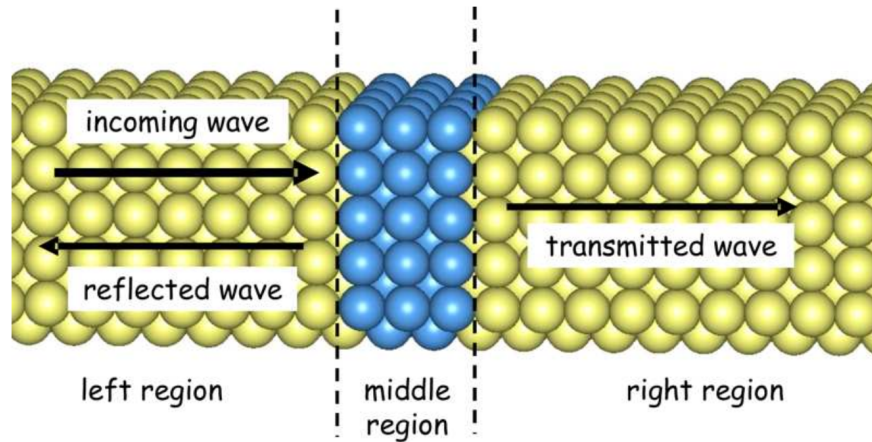


Abbildung 1: Schematische Darstellung einer Tunnelbarriere. Die gelben Kugeln repräsentieren Atome eines Metalls, die blauen die eines Isolators. Die linke und rechte Region ist deutlich weiter als der Isolator ausgedehnt. Die Elektronenwelle wird an der mittleren Region entweder reflektiert oder transmittiert. [1]

Ein einfaches Beispiel für den ballistischen Transport von Elektronen durch Nanostrukturen ist in Abb. 1 zusehen. Hierbei geht es grundsätzlich um die Betrachtung der Grenzflächen, wobei ein typisches Beispiel hierbei die Leitfähigkeit bei Materialübergängen ist.

Im Prinzip ist in der Abb. 1 eine einfache Potentialbarriere zusehen. Es wird sich nun im folgenden zunächst mit dem auf eine Dimension reduzierten Potentialwall beschäftigt.

2 Potentialwall

Der Vorteil bei einem Streuprobblem, welches stückweise konstant ist, liegt darin, dass es vollständig analytisch lösbar ist. Das zunächst betrachtete System besteht hierbei aus einer Potentialbarriere wie in Abb 2 zu sehen.

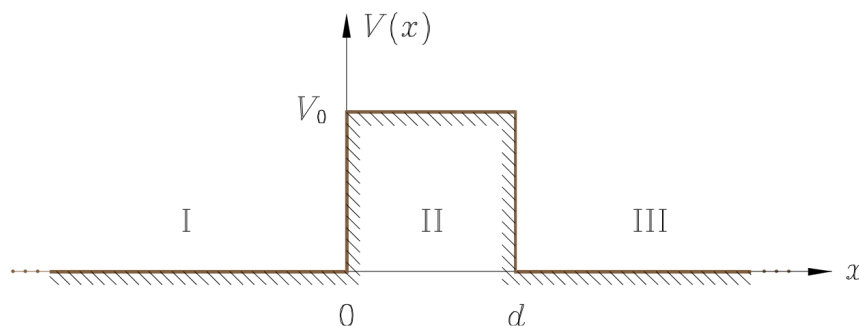


Abbildung 2: Einfacher Potentialwall der Breite d mit der Höhe V_0 [2]

Für die Schrödingergleichung gilt in den einzelnen Raumbereichen (**I,II,III**):

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi_n(x) = E \psi_n(x) \text{ mit } n = 1, 2, 3 \quad (1)$$

Da das Potential in jedem Raumbereich konstant ist, sind die Lösungen gegeben durch:

$$\psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x} \quad (2)$$

Dabei gilt für die einzelnen Wellenzahlen:

$$k_n = \sqrt{\frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2}}$$

Hierbei steht der erste Teil von $\psi(x)$ für den nach rechts laufenden, der zweite für den nach links laufenden Teil der Welle. Reflexionen im Unendlichen ($x \rightarrow \infty$) werden ausgeschlossen, somit wird dabei B_3 auf null gesetzt. Weiterhin wird angenommen, dass die einlaufende Welle A_1 bekannt ist und gleich eins gesetzt wird. Die Beziehung zwischen den Koeffizienten zweier angrenzender Bereiche wird über Transfermatrizen \mathbf{R}_n beschrieben, für welche gilt:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathbf{R}_n \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \quad (3)$$

\mathbf{R}_n folgt aus einer Umstellung der Stetigkeitsbedingungen, wobei dabei 0_- für $\lim_{x \rightarrow -0} f(x)$ (linksseitiger Limes) und 0_+ für $\lim_{x \rightarrow +0} f(x)$ (rechtsseitiger Limes) steht (analog für d_- und d_+):

Bereich I und II	Bereich II und III
$\psi(0_-) = \psi(0_+)$	$\psi(d_-) = \psi(d_+)$
$\psi'(0_-) = \psi'(0_+)$	$\psi'(d_-) = \psi'(d_+)$.

$$\Rightarrow \mathbf{R}_n = \frac{1}{2k_n} \begin{pmatrix} (k_n + k_{n+1})e^{i(-k_n + k_{n+1})x_n} & (k_n - k_{n+1})e^{i(-k_n - k_{n+1})x_n} \\ (k_n - k_{n+1})e^{i(k_n + k_{n+1})x_n} & (k_n + k_{n+1})e^{i(k_n - k_{n+1})x_n} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Hierdurch lässt sich ein direkter Zusammenhang zwischen A_1 , B_1 und A_3 , B_3 gewinnen:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Bei vorgegebener Energie E und Amplitude A_1 sowie der Annahme $B_3 = 0$ lassen sich mit (5) B_1 und A_3 bestimmen. Für das vorgegebene Potential in Abb. 2 gilt:

$$\begin{aligned} V_1 &= V_3 = 0 \\ V_2 &= V_0 \\ k &= k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \kappa_{0/1} &= k_2 = i^{0/1} \sqrt{\frac{2m|E - V_0|}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Hierbei steht für die Wellenzahl $\kappa_{0/1}$ im Bereich II für zwei Fälle, welche sich aus $E > V_0$ 0 und dem Spezialfall des Tunneleffekts $E < V_0$ 1 zusammensetzen.

Die Transmission T lässt sich nun mit Hilfe des einfallenden ($J_{\text{ein}} = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2$) und transmittierten Teilchenstroms ($J_{\text{aus}} = \frac{\hbar k_3}{m} |A_3|^2$) berechnen.

$$\Rightarrow T = \frac{k_3}{k_1} \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 \quad (6)$$

Damit ergibt sich für die gesamte Transmission:

$$E > V_0 \Rightarrow T = \frac{4\kappa_0^2 k^2}{4\kappa_0^2 k^2 + (\kappa_0^2 + k^2)^2 \sin(\kappa_0 d)^2}$$

$$E < V_0 \Rightarrow T = \frac{4\kappa_0^2 k^2}{4\kappa_0^2 k^2 + (\kappa_0^2 + k^2)^2 \sinh(\kappa_0 d)^2}.$$

Der Gleichung ist zu entnehmen, dass ein Maximum der Transmission $T = 1$ auftritt, wenn $\sin(\kappa_0 d)^2 = 0$. Damit folgt, dass ein Maximum bei $\kappa_0 d = n\pi \Leftrightarrow d = n \frac{\lambda}{2}$ mit $n \in \mathbb{N}$ auftritt.

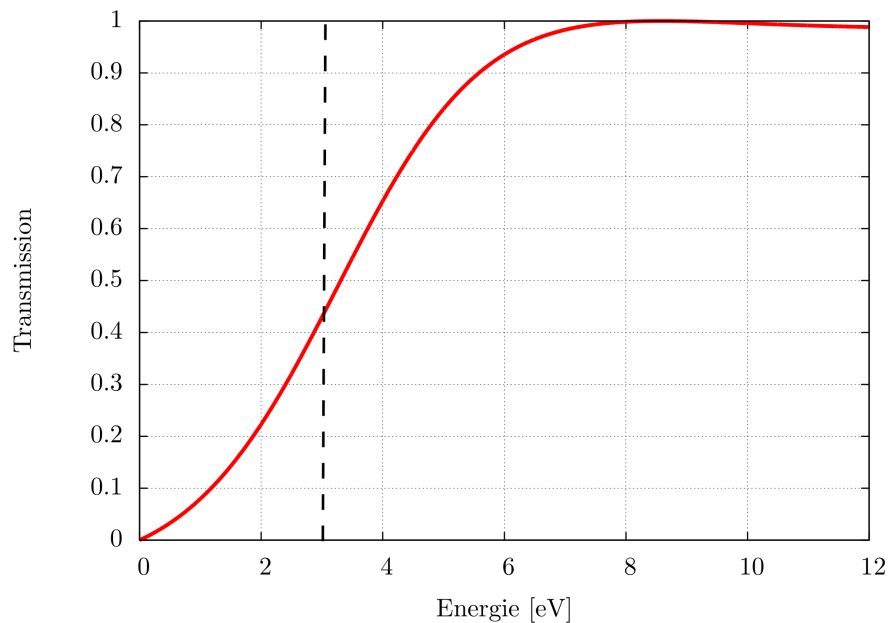


Abbildung 3: Transmission durch einen einfachen Potentialwall in Abhängigkeit von der Energie des einfallenden Elektrons ($V_0 = 3$ eV, $d = 4\text{\AA}$). Ein Maximum ist bei ca. 8.6 eV erkennbar.

3 Doppelbarriere

Nun wird das gelöste Problem der einfachen Potentialbarriere erweitert durch einen zusätzlichen Potentialwall der gleichen Breite mit einem Abstand a (s. Abb. 3.1).

3.1 Analytische Lösung

Die Rechnung erfolgt hierbei analog zu der des einfachen Potentialwalls. Somit gilt erneut für die Schrödingergleichung in den einzelnen Raumbereichen (**I,II,III,IV,V**):

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi_n(x) = E \psi_n(x) \text{ mit } n = 1, \dots, 5 \quad (7)$$

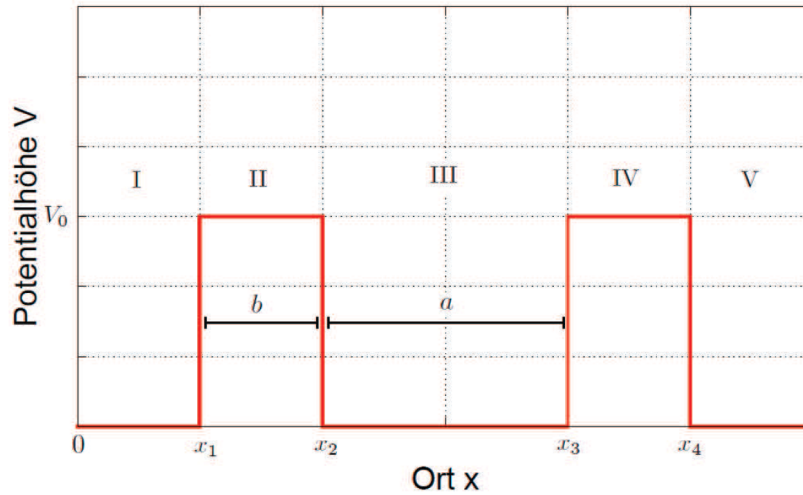


Abbildung 4: Symmetrische Doppelbarriere mit der Potentialhöhe V_0 , dem Abstand $a = x_3 - x_2$ und der Breite $a = x_2 - x_1 = x_4 - x_3$ [3]

mit:

$$\psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x} \quad \text{und} \quad k_n = \sqrt{\frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2}}. \quad (8)$$

Die Annahmen sind erneut analog gewählt wie zuvor, sodass A_1 gleich eins gesetzt wird und Reflexionen im Unendlichen ausgeschlossen werden $B_5 = 0$.

Mit Hilfe der Transfermatrix (4) lässt sich nun wieder ein direkter Zusammenhang zwischen A_1 , B_1 und A_5 , B_5 erlangen:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_3 \mathbf{R}_4 \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (9)$$

Zunächst wird nun der Spezialfall des Tunneleffekts $E < V_0$ betrachtet. Hierbei gilt für das Potential:

$$\begin{aligned} V_1 &= V_3 = V_5 = 0 \\ V_2 &= V_4 = V_0 \\ k_1 &= k_3 = k_5 = k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k_2 &= k_4 = i\kappa = i\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Damit folgt direkt die Transmission:

$$T = \frac{k_5}{k_1} \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 = [1 + V_0^2 \sinh(\kappa b)^2 \frac{H^2}{4E^2(V_0 - E)^2}]^{-1}$$

Mit $H = 2\sqrt{E(V_0 - E)} \cosh(\kappa b) \cos(ka) - (2E - V_0) \sinh(\kappa b) \sin(ka)$

Hier ist klar ersichtlich, dass ein Maximum der Transmission $T = 1$ für $H = 0$ auftritt. Die Resonanzenergie kann nun aus $H = 0$ berechnet werden (s. Abb. 6).

$$\Rightarrow \tan(ka) \tanh(\kappa b) = \frac{2\sqrt{E(V_0 - E)}}{2E - V_0} = \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}$$

Mit der Näherung $\tanh(\kappa b) \approx 1$ vereinfacht sich dies zu²:

$$\Rightarrow \tan(ka) = \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}$$

Dies entspricht den Energien der gebunden Zustände im Potentialtopf mit endlichen hohen Wänden (vgl. Abb. 5 und Abb. 6).

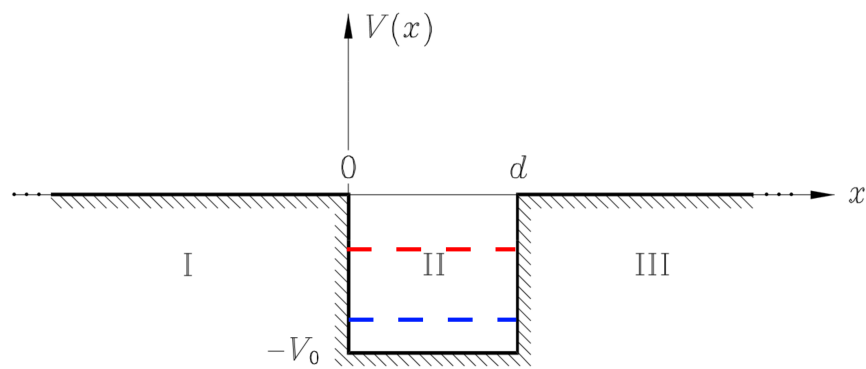


Abbildung 5: Einfacher Potentialtopf der Tiefe V_0 . Eingezeichnet sind hier die gebunden Energiezustände.[2]

Nun wird der Fall $E > V_0$ betrachtet. Hierbei ist die Rechnung analog mit der Ausnahme, dass $\kappa = i\kappa_{\text{Tunneleffekt}}$ gewählt wird. Damit folgt für die Transmission:

$$T = [1 + V_0^2 \sin(\kappa b)^2 \frac{H'^2}{4E^2(V_0 - E)^2}]^{-1}$$

Mit $H' = 2\sqrt{E(V_0 - E)} \cos(\kappa b) \cos(ka) - (2E - V_0) \sin(\kappa b) \sin(ka)$.

Wiederum tritt eine Resonanz auf, wenn $T = 1$ erfüllt ist, welches nun für $H' = 0$ oder $\sin(\kappa b)^2 = 0$ auftritt. Dabei ist klar erkenntlich, dass die Resonanz durch $\sin(\kappa b)^2 = 0$ unabhängig vom Abstand a der Barrieren ist. Weiterhin ist hierbei zu sehen, dass für $a = 0$ die exakt gleiche Bedingung wie bei einer einfachen Potentialbarriere der Breite $d = 2b$ entsteht (dazu: Additionstheorem anwenden).

²Beispielsweise ergibt sich für $E = 2\text{eV}$, $V_0 = 3\text{eV}$ und $b = 8\text{\AA} \Rightarrow \tanh(\kappa b) = 0,9902$

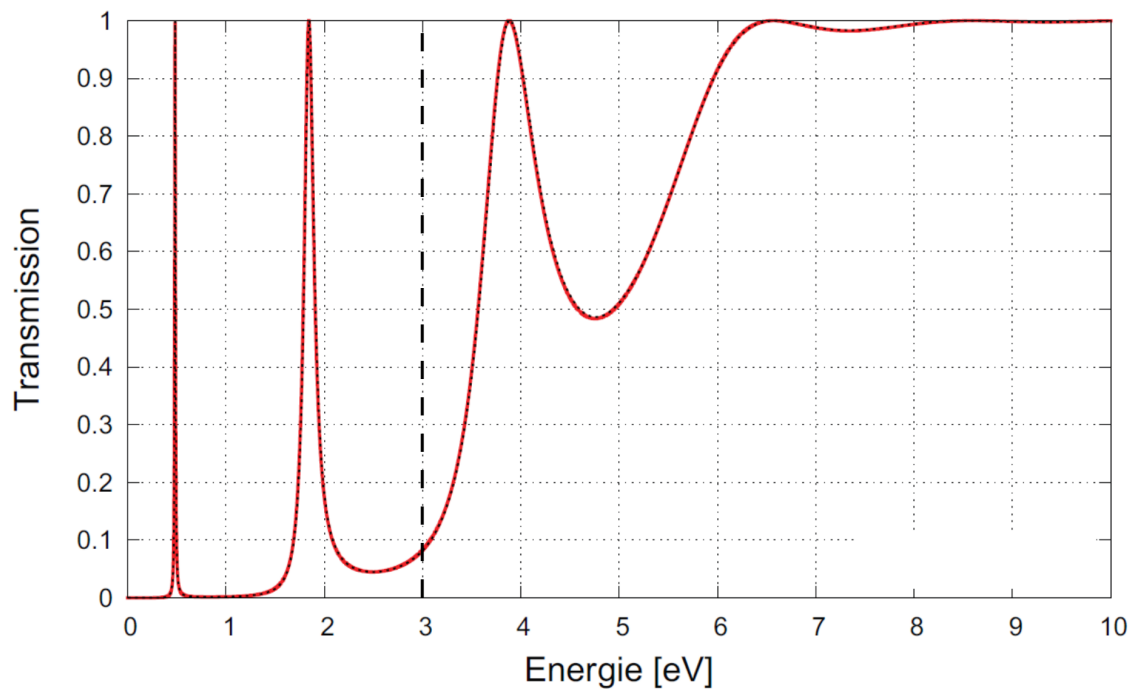


Abbildung 6: Transmission durch eine Doppelbarriere in Abhängigkeit der Energie des einfallenden Elektrons ($V_0 = 3$ eV, $b = 4$ Å, $a = 10$ Å). [3]

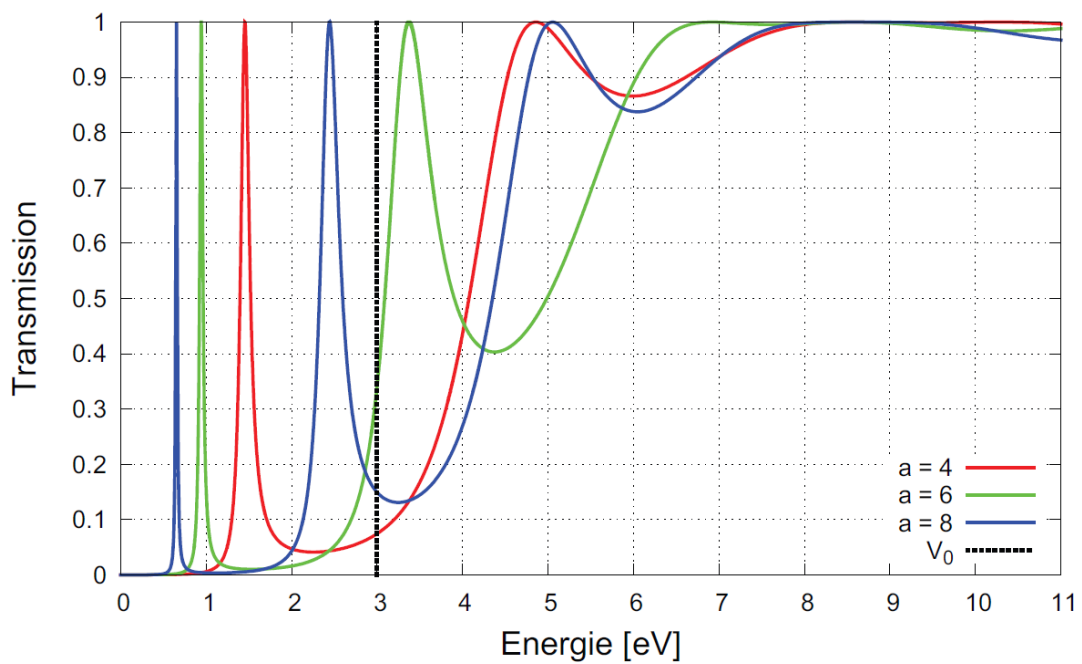


Abbildung 7: Transmission für verschiedene Potentialabstände a [Å] ($b = 4$ Å, $V_0 = 3$ eV). Die Resonanzen verschieben sich für größere Abstände. [3]

3.2 Eigenschaften der Parameter

Nun stellt sich die Frage, inwiefern die Variation des Abstands bzw. der Breite die Transmission beeinflusst.

3.2.1 Variation des Abstands a

Zunächst wird die Breite konstant gehalten und der Abstand variiert. In Abb. 7 ist zu beobachten, dass für geringere Energien die Resonanzen schmaler sind. Alle Graphen besitzen bei $E = 8.6$ eV ein Maximum, welches durch das einfache Rechteckpotential der Breite b zurückzuführen ist ($\sin(\kappa b)^2 = 0 \Rightarrow T = 1$). Für ein größeres a verschieben sich die Resonanzen in Richtung niedrigerer Energien und es bilden sich neue Resonanzen unterhalb von V_0 .

Zuvor wurde bereits festgestellt, dass die Resonanzenergien näherungsweise den Energien der gebundenen Zustände des Potentialtopfs mit endlichen hohen Wänden gleicher Breite a entsprechen. Mit diesem endlichen Potentialtopf lässt sich nun erklären, dass für größere Abstände sich die Resonanzen verschieben und neue Resonanzen unterhalb von V_0 auftreten. Für größere Abstände sinken die Energien der gebundenen Zustände im Topf ab, gleichzeitig kommt es zur Ausbildung weiterer gebundener Zustände, da größere Abstände der Wände eine entsprechend größere Wellenlänge zwischen den Barrieren bzw. im Topf bedeutet, welches zu einer Absenkung der Energie führt.

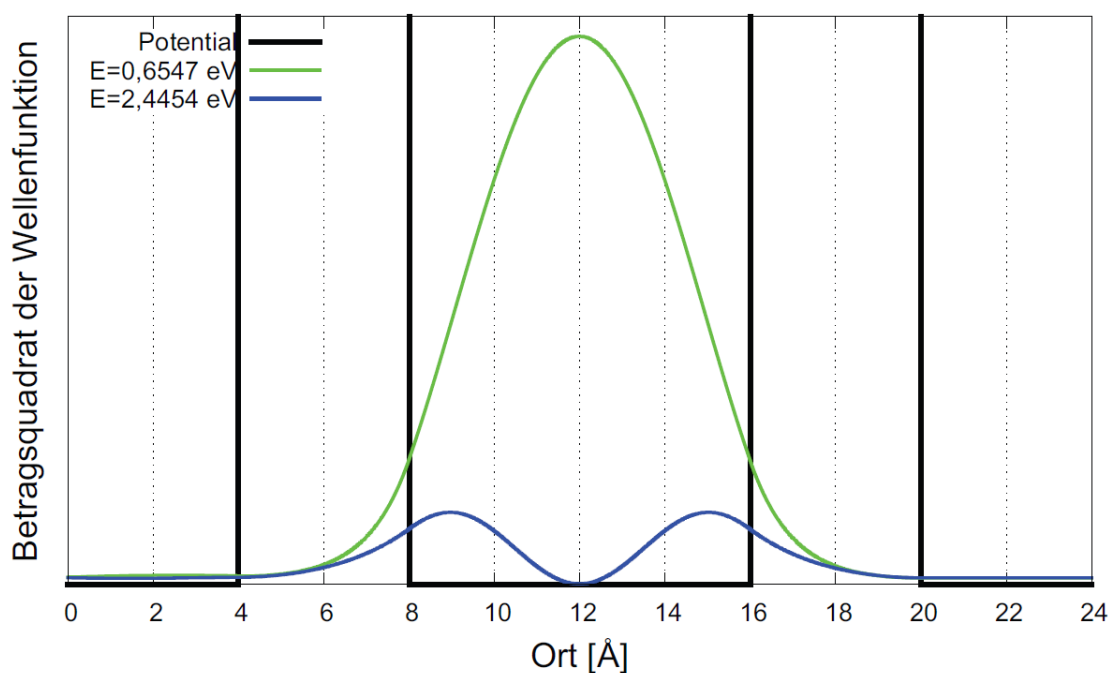


Abbildung 8: Betragssquadrat der Wellenfunktion über dem gesamten Potentialbereich für die erste und zweite Resonanzenergie des Barrieresystems ($V_0 = 3$ eV, $b = 4$ Å, $a = 8$ Å). Vgl. Abb. 6. [3]

3.2.2 Variation der Breite b

Nun wird der Abstand a der beiden Barrieren konstant gehalten und die Breite b variiert. In Abb. 9 sind folgende Beobachtungen fest zuhalten: Zum einen werden die Resonanzen mit zunehmender

Potentialbreite b schmaler, zum anderen kommt es zu einer Verschiebung der Resonanzen. Dabei verschiebt sich die erste Resonanz in Richtung höhere Energie, wohingegen sich die anderen Resonanzen in Richtung tieferer Energien verschieben. Die schmalen Resonanzen lassen sich hierbei

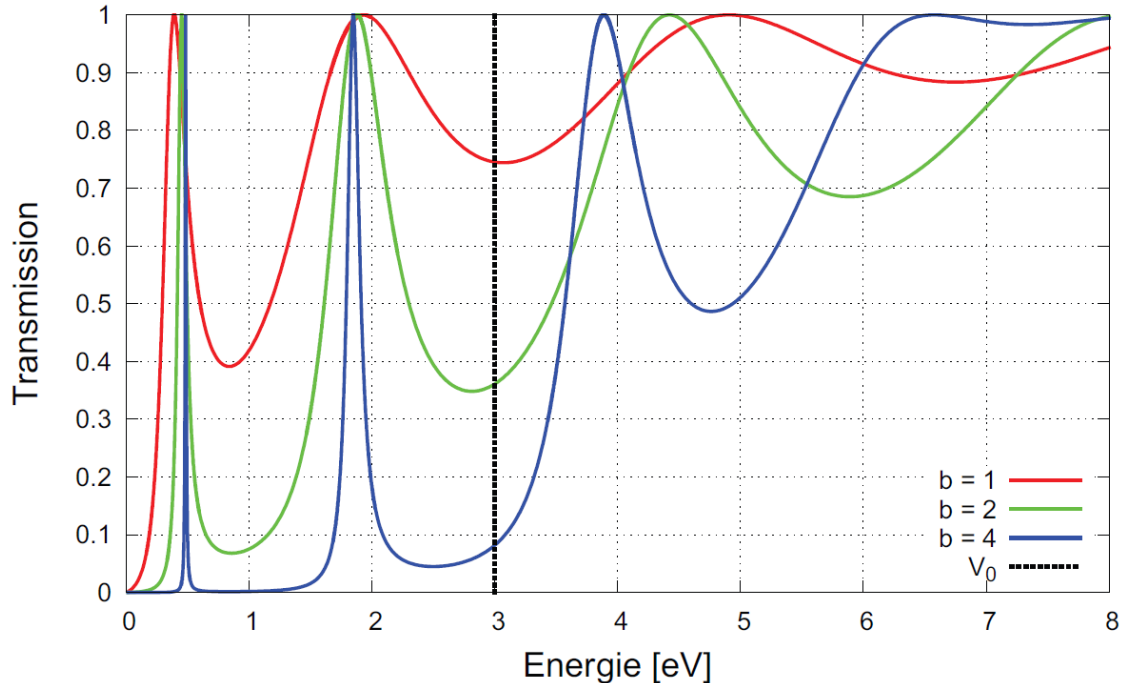


Abbildung 9: Transmission für verschiedene Potentialbreiten $b[\text{\AA}]$ ($V_0 = 3$ eV, $a = 10\text{\AA}$). Die Resonanzen werden schärfer und verschieben sich für größere Breiten. [3]

darauf zurückführen, dass die Wahrscheinlichkeit eine Potentialbarriere zu durchtunneln, mit ihrer Breite näherungsweise exponentiell abnimmt. Dies bewirkt einen Abfall der Transmission in der Nähe von den Resonanzen und somit werden diese hervorgehoben. Für die Erklärung der Verschiebung der Resonanzen wird erneut der Potentialtopf herangezogen (s Abb. 10). Hierbei ist klar zu erkennen, dass sich für alle Potentialabstände die Energie der ersten Resonanz mit größerer Potentialbreite der tiefsten Energie des endlichen Potentialtopfes annähert. Durch diese Annäherung verschiebt sich daher die Resonanz, in Abhängigkeit vom Potentialabstand, entweder zu höheren oder zu niedrigeren Energien.

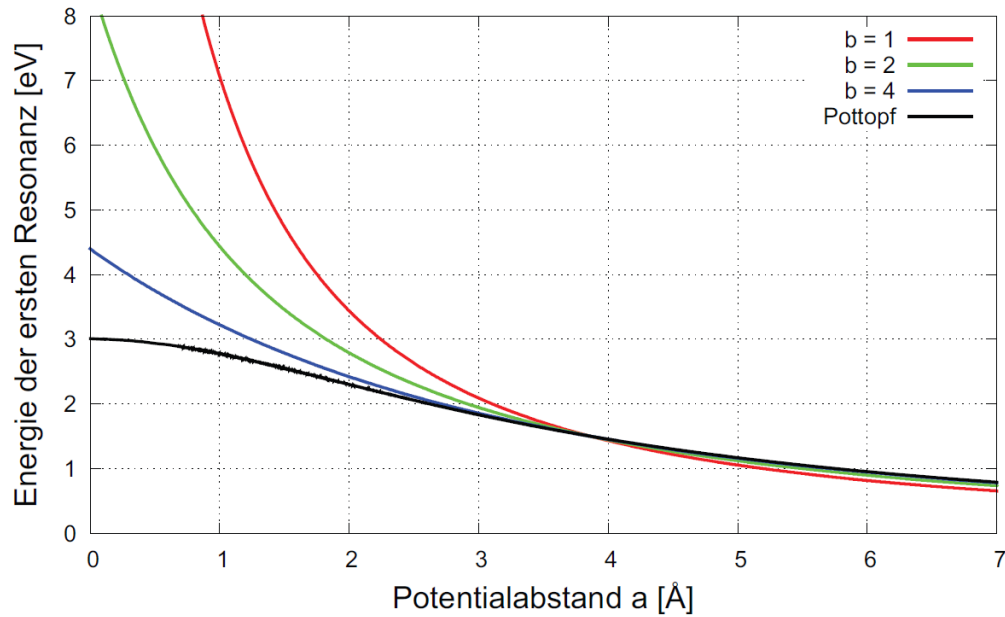


Abbildung 10: Energie der ersten Resonanz der Doppel-Potentialbarriere im Vergleich zur Energie des tiefsten gebundenen Zustands im Potentialtopf der Breite a mit endlich hohen Wänden ($V_0 = 3$ eV). Mit zunehmendem Abstand a und zunehmender Breite b nähern sich alle Kurven der Energie des endlichen Topfes an. [3]

4 Numerische Methode zur Lösung von Streuproblemen

Die bisher behandelten Streuprobleme waren komplett analytisch lösbar, da es sich um abschnittsweise konstante Potentiale handelte. In diesem Teil beschäftigen wir uns nun mit der Lösung von Potentialen, die eben jene Eigenschaft nicht aufweisen. Das Problem hierbei ist, dass die Wellenfunktionen sowie die Transmission nicht mehr analytisch berechenbar sind.

4.1 Wave Function Matching

Eine mögliche Herangehensweise ist hierbei das numerische Verfahren des **Wave Function Matching**. Dieses arbeitet mit einer Schrödingergleichung, welche sich numerisch über finite Differenzen lösen lässt. Dabei sind aber gewisse Voraussetzungen an das Streugebiet gegeben. Zum einen muss das Gebiet des Streuproblems eine endliche Länge besitzen, zum anderen muss die Wellenfunktion außerhalb der Streuregion bekannt sein, somit die Wellenfunktion an die jeweiligen Grenzen angepasst werden kann.

Zur Lösung der Schrödingergleichung wird diese, wie zuvor genannt, über finite Differenzen approximiert (s. Abb. 11):

$$E\psi_i + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(\psi_{i+1} - \psi_i) - (\psi_i - \psi_{i-1}))}{\Delta^2} \right) - V_i\psi_i = 0 \quad \text{mit } V_i = V_i(x), \psi_i = \psi_i(x).$$

Hierbei wird das Potential in N Stützstellen aufgeteilt (Diskretisierung) und dabei entspricht Δ dem Abstand zweier Stützstellen. Es wird angenommen, dass außerhalb der Streuregion ebene Wellen vorliegen, dabei wird die ebene Welle in der linken $\psi_0(x) = Ae^{ik_L x} + Be^{-ik_L x}$ und rechten $\psi_{n+1}(x) =$

$F e^{ik_R x}$ Region definiert. Wobei hier, wie zuvor, Reflexionen im Unendlichen ausgeschlossen werden und A die einlaufende, B die reflektierte Welle und F die transmittierte Welle ist. Hierbei gilt:

$$k_L = \frac{\sqrt{2m(E - V_L)}}{\hbar} \quad k_R = \frac{\sqrt{2m(E - V_R)}}{\hbar}.$$

Das Verfahren führt so auf $N+2$ Gleichungen (für jeden Stützpunkt eine). Dabei müssen die erste

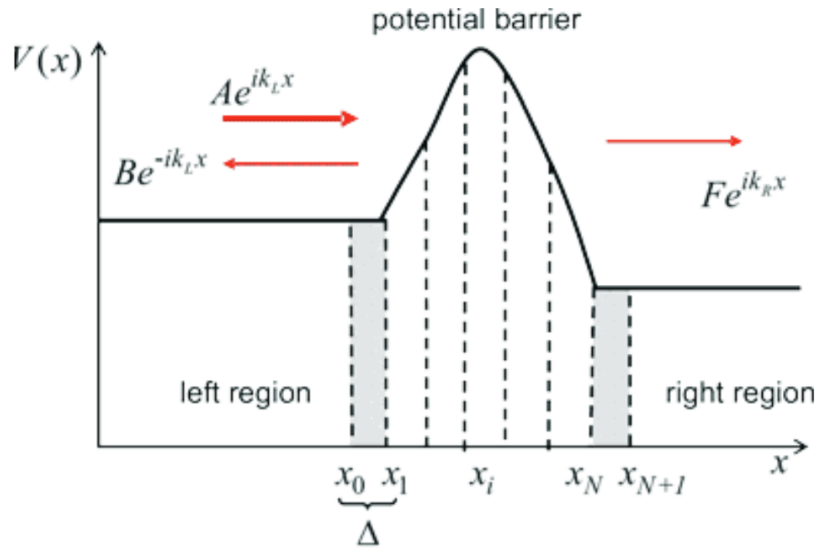


Abbildung 11: Diskretisierung der Potentialbarriere. Das Potential ist für $x < x_1$ und $x > x_N$ konstant.[1]

und letzte Gleichung gesondert betrachtet werden, da Wellenfunktionen vorkommen, die nicht im betrachteten Gebiet liegen. Für die linke Region ($i = 0$) gilt:

$$E\psi_0 + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}(\psi_1 - 2\psi_0 + \psi_{-1}) - V_0\psi_0 = 0$$

Hierbei liegt ψ_{-1} nicht im betrachteten Gebiet. Jedoch ist bekannt, dass für $x < x_1$ $\psi_0(x) = Ae^{ik_L x} + Be^{-ik_L x}$ gilt. Wenn nun $x_0 = 0$ gewählt wird, folgt daraus $B = \psi_0 - A$. Damit lässt sich nun schreiben $\psi_{-1} = Ae^{-ik_L \Delta} + (\psi_0 - A)e^{ik_L \Delta}$. Womit nun für die erste Gleichung folgt:

$$E\psi_0 + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}(\psi_1 - (2 - e^{ik_L \Delta})\psi_0) - V_0\psi_0 = \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}A(e^{ik_L \Delta} - e^{-ik_L \Delta}).$$

Dabei wird auch direkt der Quellterm $q = \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}A(e^{ik_L \Delta} - e^{-ik_L \Delta})$ eingeführt.

Für die rechte Region ($i = N + 1$) gilt:

$$E\psi_{N+1} + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}(\psi_{N+2} - 2\psi_{N+1} + \psi_{N-1}) - V_{N+1}\psi_{N+1} = 0$$

Direkt zu erkennen ist, dass dabei ψ_{N+2} nicht im betrachteten Gebiet liegt. Jedoch lässt sich nun dies mit Hilfe von ψ_{N+1} ausdrücken: $\psi_{N+2} = Fe^{ik_R(N+2)\Delta} = Fe^{ik_R(N+1)\Delta} \cdot e^{ik_R \Delta} = \psi_{N+1}e^{ik_R \Delta}$.

Damit folgt für die letzte Gleichung:

$$E\psi_{N+1} + \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}(\psi_N - (2 - e^{ik_L \Delta})\psi_{N+1}) - V_{N+1}\psi_{N+1} = 0$$

Nun lässt sich dieses $(N + 2) \times (N + 2)$ -Gleichungssystem in vektorieller Schreibweise darstellen:

$$(E\mathbb{1} - \mathbf{H})\vec{\psi} = \vec{q}$$

- E ist die Energie des Elektrons
- $\mathbb{1}$ ist die Einheitsmatrix
- \vec{q} ist der Quellvektor, mit $q_0 = q$ und $q_i = 0$ für $i \neq 0$
- $\vec{\psi}$ besteht aus den Koeffizienten ψ_0 bis ψ_{N+1}
- \mathbf{H} ist die $(N + 2) \times (N + 2)$ Hamilton-Matrix

Über Invertieren der Matrix lässt sich dieses Gleichungssystem nun lösen (zum Beispiel unter Anwendung des Gauß-Verfahrens).

$$\vec{\psi} = (E\mathbb{1} - \mathbf{H})^{-1}\vec{q}$$

4.2 Vergleich Analytische und Numerische Methode

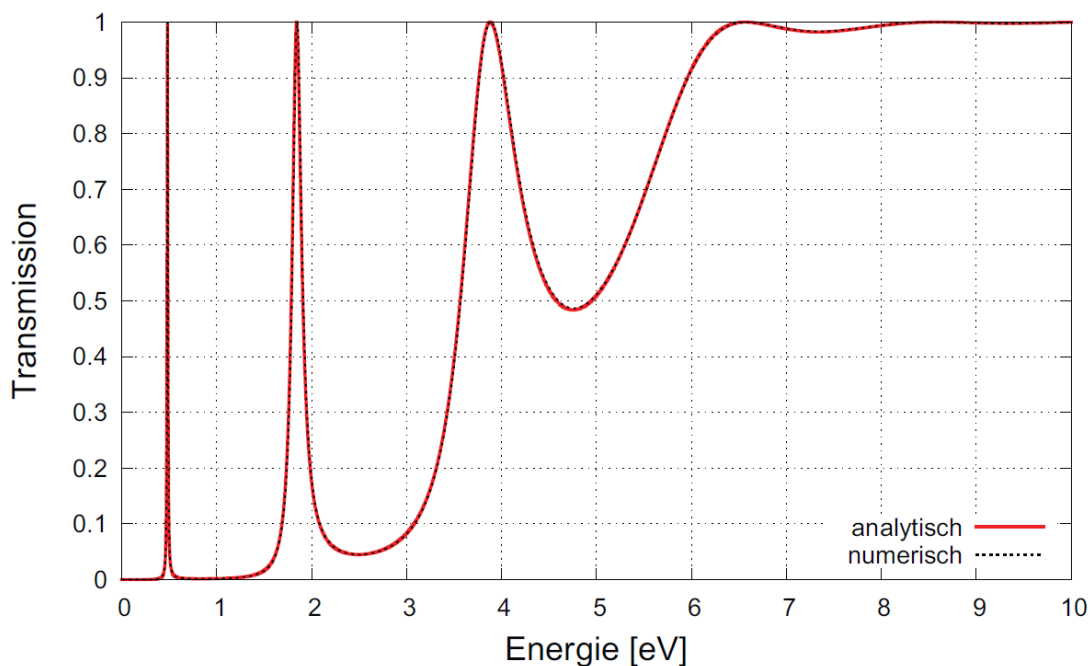


Abbildung 12: Vergleich der numerischen mit der analytischen Berechnung der Transmission durch die Doppel-Potentialbarriere für eine Stützstellenzahl von $N = 1000$ ($V_0 = 3$ eV, $b = 4$ Å, $a = 10$ Å). [3]

In Abb. 12 sind kaum Unterschiede zwischen der Numerischen und analytischen Methode zu erkennen, dabei ist zu sehen, dass das Verfahren somit gut zur Berechnung der Transmission geeignet ist.

Literatur

- [1] G. Brocks; V.M. Karpan; P.J. Kelly u.a. Calculating scattering matrices by wave function matching. ψ_k Newsletter, 80:144-161, 2007.
- [2] <http://www.dietrich-grau.at/aufgabensammlung534.pdf>.
- [3] Matthias Drüppel, Elektronen in Nanostrukturen: Berechnung der Transmission und Reflexion (Bachelorarbeit). Institut für Festkörpertheorie, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2011.