

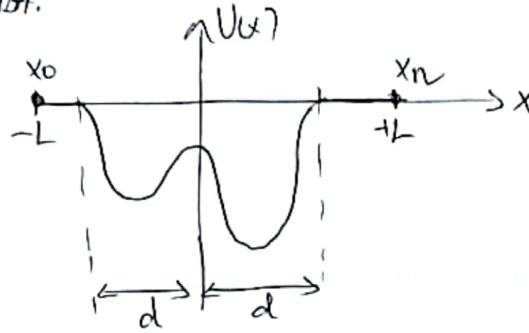
1) Прикажили постојеће одређивања дискретних стања у полупроводничкој квантој јами методом Гурова.

Шредингерова јма:

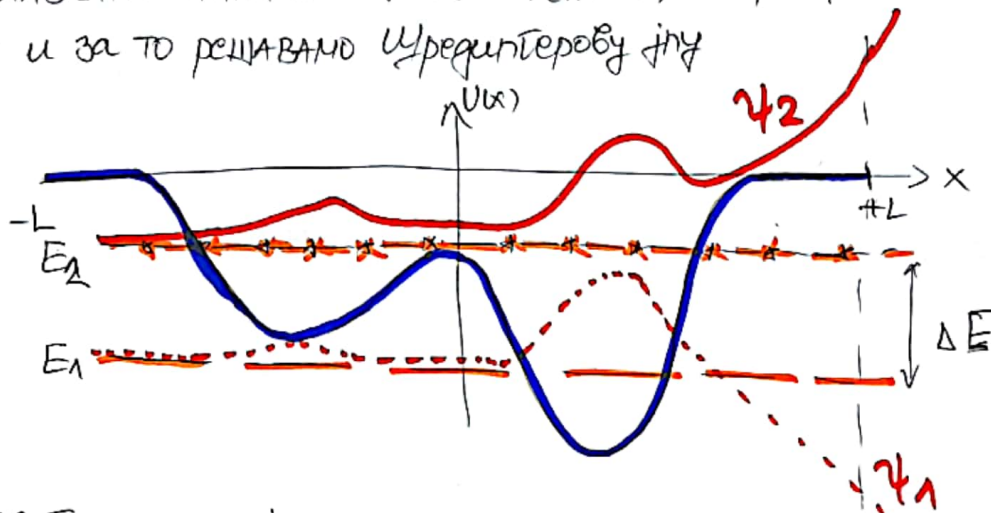
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi = E \psi$$

познато $m, U(x)$

$\Rightarrow$ одређујемо E и ψ



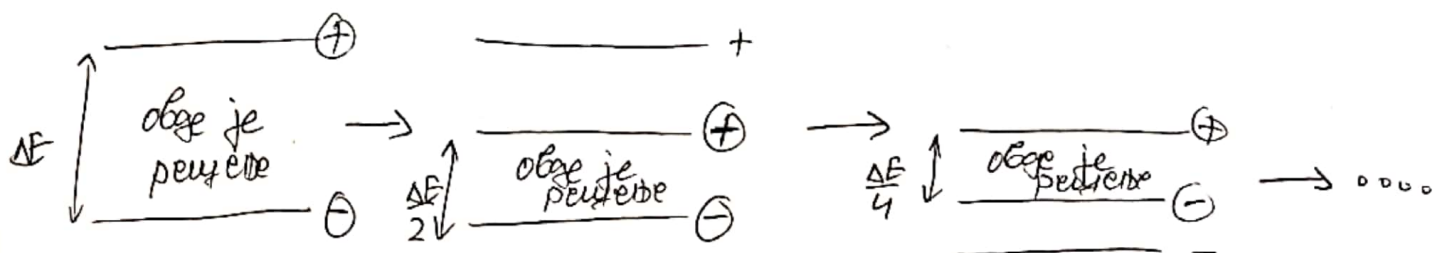
- Шредингерову јму решавамо у домену $[-L, L]$. Правило граничној која мора да има екстремални облик ивица. или $\psi'(x=-L)=0$
- постављано гранични услов $\psi(x=-L)=0$, бирамо неку вредност енергије E и за то решавамо Шредингерову јму



- енергетска оса је издвојена на интервале ΔE . Ако се за две суседне изабране вредности енергије једи промена знака таласне ф-је у $x=L$, онда се одређује вредност енергије ситурно налази на том интервалу.

$$\Delta E = E_2 - E_1 ; \quad \begin{array}{l} E_1 \rightarrow \psi_1 \quad \psi_1(L) < 0 \\ E_2 \rightarrow \psi_2 \quad \psi_2(L) > 0 \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} \text{на } \Delta E \text{ се налази } E \\ \text{коју тражимо} \end{array} \right\}$$

- јер се ΔE поклапа и постојеће се поклапа, све док $|\psi_n| \leq \epsilon$, где је ϵ унапред задато



Пропитационна јпта

(имплементација метода тађања понову методе коначних разлика)

96

4. Metod jake veze

Решавано шрегитеративу јпту:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi \quad \text{на } x \in [-L, L]$$

Постављано претну тку.

$$\left. \begin{aligned} x_0 &= -L \\ x_1 &= -L+h \\ &\vdots \\ x_n &= L \end{aligned} \right\}$$

$\Delta x = h$ корак претне

$$\left. \frac{d^2\psi}{dx^2} \right|_x \approx \frac{\frac{d\psi}{dx}|_{x+h} - \frac{d\psi}{dx}|_{x-h}}{2h}$$

$2h \rightarrow h$ и добијано:

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x+h} \approx \frac{\psi(x+2h) - \psi(x)}{2h}$$

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x-h} \approx \frac{\psi(x) - \psi(x-2h)}{2h}$$

$$\left. \frac{d^2\psi}{dx^2} \right|_x \approx \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2} + O(h^4)$$

оду вредност нећемо у помету
шрегитеративу јпту

$$\Rightarrow \underbrace{\psi(x+h)}_{\psi_{\tau+1}} - 2\underbrace{\psi(x)}_{\psi_{\tau}} + \underbrace{\psi(x-h)}_{\psi_{\tau-1}} = \frac{2m}{\hbar^2} h^2 \underbrace{(U(x) - E)}_{V_{\tau}} \psi(x)$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{\tau+1} = \left[\frac{2m}{\hbar^2} h^2 (V_{\tau} - E) + 2 \right] \psi_{\tau} - \psi_{\tau-1}}$$

→ формула за пропацију

Ако је познато ψ и $\psi_{\tau-1} \Rightarrow$ лако одређујемо $\psi_{\tau+1}$

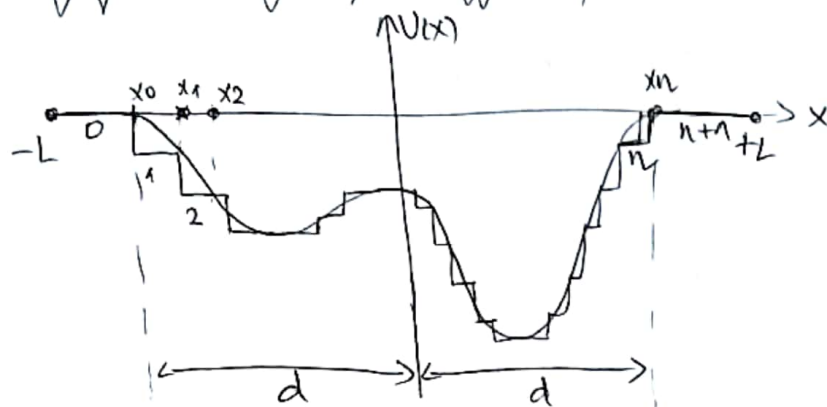
- Како усвајамо граничне услове?

$$\left. \begin{aligned} \psi_0 &= 0 \text{ nm}^{-1/2} \\ \psi_1 &= 1 \text{ nm}^{-1/2} \end{aligned} \right\}$$

не могу обе вредности бити једнаке нули
јер онда немају пропацију.

[2] Приказати поступак određivanja svojstvenih vrednosti diskretnih stanja u poluprovodničkoj kvantnoj jami ponetu metodom transfer matrice.

- Потенцијал се дискретизује хоризонталним правоугаоним сегментима



За сегмент i на коме потенцијал има вредност V_i^0 , пожељно писати

$$\psi^{(i)}(x) = \begin{cases} C_1^{(i)} \cos(k_i x) + C_2^{(i)} \sin(k_i x) & , E > V_i^0 \\ C_1^{(i)} e^{k_i x} + C_2^{(i)} e^{-k_i x} & , E < V_i^0 \end{cases}$$

- Матрицу Φ_i и њен први извод пожељно писати у форми

$$\begin{bmatrix} \psi^{(i)}(x) \\ \psi^{(i)'}(x) \end{bmatrix} = M_i(x) \begin{bmatrix} C_1^{(i)} \\ C_2^{(i)} \end{bmatrix}$$

при чему је

$$1^\circ \quad E > V_i^0 \quad k_i = \sqrt{\frac{2m_i(E - V_i^0)}{\hbar^2}}$$

$$M_i(x) = \begin{bmatrix} \cos(k_i x) & \sin(k_i x) \\ -k_i \sin(k_i x) & k_i \cos(k_i x) \end{bmatrix}$$

$$2^\circ \quad E < V_i^0 \quad k_i = \sqrt{\frac{2m_i(V_i^0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$M_i(x) = \begin{bmatrix} e^{k_i x} & e^{-k_i x} \\ k_i e^{k_i x} & -k_i e^{-k_i x} \end{bmatrix}$$

- Матрица Φ_i је повезана са граници оба сегмента, Φ_i :

$$\begin{bmatrix} \psi^{(i+1)}(x) \\ \psi^{(i+1)'}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi^{(i)}(x) \\ \psi^{(i)'}(x) \end{bmatrix}$$

или на други начин написати:

$$M_{T+1}(x_T) \begin{bmatrix} C_1^{(T+1)} \\ C_2^{(T+1)} \end{bmatrix} = M_T(x_T) \begin{bmatrix} C_1^{(T)} \\ C_2^{(T)} \end{bmatrix}$$

84

3. Višezonski k · p modeli

odavde je
$$\begin{bmatrix} C_1^{(T+1)} \\ C_2^{(T+1)} \end{bmatrix} = M_{T+1}^{-1}(x_T) M_T(x_T) \begin{bmatrix} C_1^{(T)} \\ C_2^{(T)} \end{bmatrix}$$

- postavljamo граниčne uslove

$$C_2^{(0)} = 0 \quad \text{u} \quad C_1^{(n+1)} = 0$$

$$\begin{bmatrix} C_1^{(n+1)} \\ C_2^{(n+1)} \end{bmatrix} = M_{n+1}^{-1}(x_n) M_n(x_n) \dots M_1^{-1}(x_0) M_0(x_0) \begin{bmatrix} C_1^{(0)} \\ C_2^{(0)} \end{bmatrix}$$

- ovo se može kompaktnije napisati u sledećoj formi:

$$\begin{bmatrix} C_1^{(n+1)} \\ C_2^{(n+1)} \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} C_1^{(0)} \\ C_2^{(0)} \end{bmatrix}$$

gde je $T = \prod_{i=0}^n M_{i+1}^{-1}(x_i) M_i(x_i)$ transfer MATRICA

- prema tome ako su poznati $C_1^{(0)}$ i $C_2^{(0)}$ mogu se odrediti $C_1^{(n+1)}$, $C_2^{(n+1)}$

- Postupak: biramo energije E_1 i E_2 ($\Delta E = E_2 - E_1$) u $E_1, E_2 \in (U_{\text{min}}, 0)$

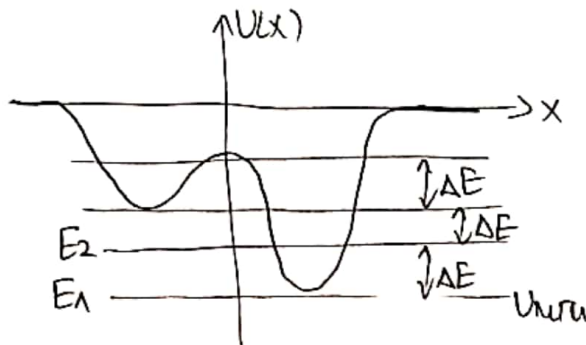
odredimo transfer matricu

postavimo $C_2^{(1)} = 0$

probaćemo rešenje od x_0 do x_n .

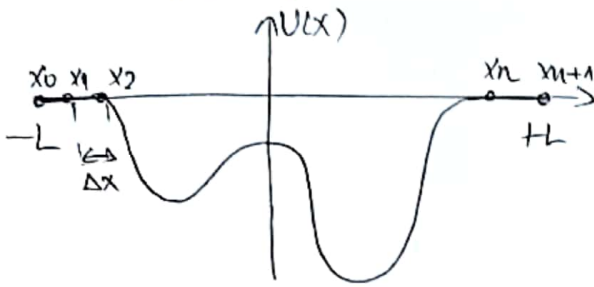
Svojstvena vrednost energije je ona za koju je

ispunjeno $|C_1^{(n+1)}| < \epsilon$, gde je ϵ zadata tolerancija

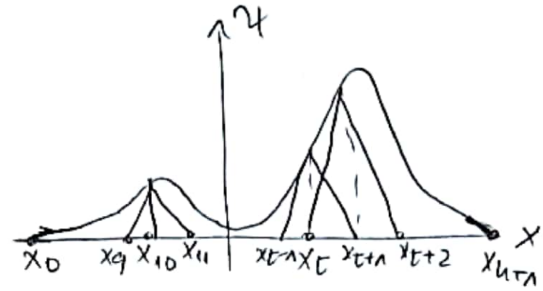


$$\left. \begin{array}{l} E_1 \rightarrow C_1^{(n+1)} > 0 \\ E_2 \rightarrow C_1^{(n+1)} < 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \Delta E = E_2 - E_1 \\ \text{odgovarajuće rešenje} \end{array}$$

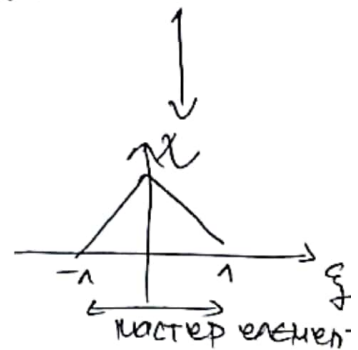
3] Приказати поступак одређивања својствених вредности дискретних стања полупроводничке квантнојаме понотку метода кошица елемената



- домен се дели на одређене трапичне елементе су танке мреже
- и-ти сегмент, не морају бити исто дугачине



- таласна ф-ја је представљена као суперпозиција базисних ф-ја које имају облик кане



- Таласна ф-ју напишемо у облику $\psi(x) = \sum_{j=1}^n a_j f_j(x)$

где су f_j ф-је облика,

при чему -у $a_0 = a_{n+1} = 0$

ф-је облика се највише задржу на мастер елементу (после се врши скалирање на задати корак мреже)

- Решавамо Шредингерову јмгу:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi = E \psi \quad \oplus \quad \psi = \sum_{j=1}^n a_j f_j(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n a_j \frac{d^2 f_j}{dx^2} + \sum_{j=1}^n a_j U(x) f_j(x) = E \sum_{j=1}^n a_j f_j(x) \quad / \cdot \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i \frac{d^2 f_j}{dx^2} dx + \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i U(x) f_j(x) dx = E \sum_{j=1}^n a_j \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_j(x) f_i(x) dx$$

парцијална интегралација

$$\int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i \frac{d^2 f_j}{dx^2} dx = \underbrace{f_i \frac{df_j}{dx}}_{\emptyset} \bigg|_{x_0}^{x_{n+1}} - \int_{x_0}^{x_{n+1}} \frac{df_i}{dx} \frac{df_j}{dx} dx$$

- Уводимо следеће ознаке:



$$T_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L \frac{df_i}{dx} \frac{df_j}{dx} dx$$

$-L=x_0$
 $L=x_{n+1}$ } мислимо да је свеједно!

118

5. Jednoelektronske naprave

$$U_{ij} = \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) U(x) f_j(x) dx$$

$$S_{ij} = \int_{x_0}^{x_{n+1}} f_i(x) f_j(x) dx \quad / \quad \text{ово је матрица преклапања и није}$$

ЈЕДИНИЧНА МАТРИЦА

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^n (T_{ij} + U_{ij}) a_j = E \sum_{j=1}^n S_{ij} a_j$$

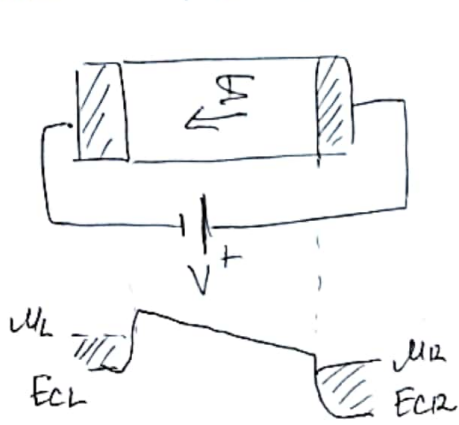
Понављајући процедуру за сва f_i ($i=1, 2, \dots, n$) долазимо до

$$H a = E S a \quad / \quad \text{тепермисати својствени проблем}$$

где је $H_{ij} = T_{ij} + U_{ij}$ Хамилтонова матрица

* ~~$S_{ij} = \delta_{ij}$~~ Базисне ϕ је у општем случају могу бити ортонормалне и зато је $S_{ij} \neq 0$ у општем случају

4) Известен вид израз за струјно-напонску карактеристику наноелектронске напреже са 1D каналом



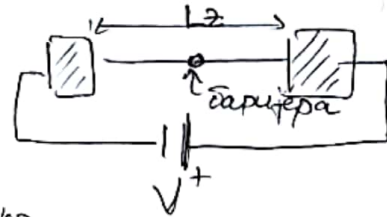
$$\Delta F = 2e V_z(k_z) T(k_z) \frac{1}{L_z}$$
 (счит)

$\uparrow$
 густота струје које носи једно стање
 које пролази

$T(k_z)$ - коеф. трансмисије
 (не прелази сви електрони
 из једног до другог контакта)

$\Rightarrow$ Вероватноћа заузетости стања у левом контакту: $f[E(k_z), \mu_L]$

$$\sum_{k_z} \rightarrow - \frac{\int \dots dk_z}{2\pi/L_z}$$



$$\Rightarrow I_L = 2e \int_0^{+\infty} f[E(k_z), \mu_L] V_z(k_z) T(k_z) \frac{dk_z}{2\pi}$$

$$V_z = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_z}$$

$$E(k_z) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\frac{dE}{dk_z} = \frac{\hbar^2 k_z}{m} = \frac{\hbar p_z}{m} = \hbar V_z \quad \left\{ \begin{array}{l} dk_z = \frac{dk_z}{dE} dE = \frac{1}{\hbar V_z} dE \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow I_L = 2e \int_{V_L}^{+\infty} f(E, \mu_L) V_z T(E) \frac{dE}{2\pi \hbar V_z}$$

$$I_L = \frac{2e}{h} \int_{V_L}^{+\infty} f(E, \mu_L) T(E) dE \quad / \quad \text{струја електрона инјектованих са леве на десну страну}$$

$$\Rightarrow I_R = - \frac{2e}{h} \int_{V_R}^{+\infty} f(E, \mu_R) T(E) dE \quad / \quad \text{струја електрона инјектованих из десног контакта}$$

$$I = I_L + I_R = \frac{2e}{h} \int_{V_L}^{+\infty} [f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)] T(E) dE$$

[5] Известно Breit-Wignerov фазу

2. Elektronski transport u nanostrukturama

$$T = \frac{T_L \cdot T_R}{(1 - \sqrt{R_L R_R})^2 + 4 \sqrt{R_L R_R} \sin^2 \frac{\phi}{2}} \quad \text{коэффициент трансмиссии}$$

Ако су T_L, T_R мали и у околини резонанције:
- у околини резонанције

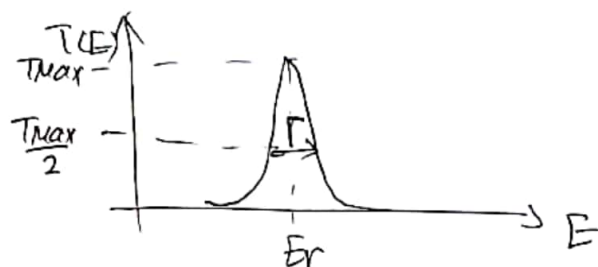
$$\phi = 2n\pi + \delta\phi \quad \text{иа је } \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right) \approx \frac{\delta\phi^2}{4}$$

$$T_{\max}(\sin \frac{\phi}{2} = 0) = \frac{T_L T_R}{(1 - \sqrt{R_L R_R})^2}$$

$$\Rightarrow T \approx \frac{T_{\max}}{1 + \frac{4\delta\phi^2}{(T_L + T_R)^2}} = \frac{T_{\max}}{1 + \left(\frac{\delta\phi}{\frac{1}{2}\phi_0}\right)^2} \quad / \quad \phi_0 = T_L + T_R$$

$$\frac{\delta\phi}{\phi_0} = \frac{\delta E}{\Gamma} \quad ; \quad \delta E = E - E_r$$

$\delta\phi = 2a\delta k$ / варијација фазе
у околини E_r



$\phi = 2ka + \psi_L + \psi_R$ / ψ_L, ψ_R се слабо мењају у околини E_r

$$\delta k = \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_r} \cdot \delta E = \frac{\delta E}{\frac{\hbar^2 k}{m} \Big|_{E_r}} = \frac{\delta E}{\hbar v_r} \quad / \quad v_r \Rightarrow \text{брзина електрона за } E_r$$

$$\Rightarrow \frac{\delta E}{\delta\phi} = \frac{\Gamma}{\phi_0} \quad \text{и} \quad \frac{\delta E}{\delta\phi} = \frac{\hbar v_r}{2a}$$

$$\Rightarrow \Gamma = \frac{\hbar v_r}{2a} \cdot \phi_0$$

$$\Rightarrow \boxed{\Gamma = \frac{\hbar v_r}{2a} (T_L + T_R)} = \text{const}$$

$$\Rightarrow \frac{\delta E}{\delta \phi} = \text{const}$$

$$\delta \phi = \frac{\phi_0}{T} \cdot \delta E \Rightarrow \text{уврстимо у } T$$

$$\Rightarrow T = \frac{T_{\max}}{1 + \left(\frac{\delta E}{T/2} \right)^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{T = \frac{T_{\max}}{1 + \left(\frac{E - E_F}{T/2} \right)^2}}$$

Бреит-Вигнера формула
 (како су T_D, T_L мали, скоро-
 приближење у околици
 резонанције)

6) За бољистички проводник извести контактну (Шервингову) отпорност у фји дрџа трансверзалних модова

$$M(E) = \sum_i \theta(E - E_{0i}) \quad \left| \begin{array}{l} \text{дрџ модова са енергијом} \\ \text{мањом од } E \end{array} \right.$$

- посматрамо +k стање у модови i. фја расподеле овог стања је $f^+(E) = f_F(+k)$. Река је електроном тас униформан по дужини канала са n електрона брзине v по јединици дужине.

- Укупна струја +k стања

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_{k,s} v f^+(E) = \frac{e}{L} \sum_{k,s} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} f^+(E)$$

при чему је дрџ Нормализација у стању k на дужини L једнак $n = \frac{1}{L}$.
 Суму трансформисамо у интеграл (за велику дужину канала):

$$\sum_{k,s} \rightarrow \dots 2 \cdot \frac{L}{2\pi} \int_0^{+\infty} \dots dk$$

$$\Rightarrow I^+ = \frac{2e}{\hbar} \int_{E_0}^{+\infty} f^+(E) dE \quad \left| E_0 - \text{минимална енергија мода } i \right.$$

Ако у транспорту учествује више +k модова:

$$I^+ = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} f^+(E) M(E) dE$$

→ Укупна струја:

$$\boxed{I = I^+ - I^- = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} M(E) [f^+(E) - f^-(E)] dE}$$

На $T=0K$, горниот струјни гатџ само појави у опсегу $\mu_1 - \mu_2$ За
 КОНСТАНТЕН број носача у тој опсегу и $\int_{\mu_2}^{\mu_1} dE = \mu_1 - \mu_2$, Ватни:

$$\mathcal{S} = \frac{2e^2}{h} M \underbrace{\frac{\mu_1 - \mu_2}{e}}_V$$

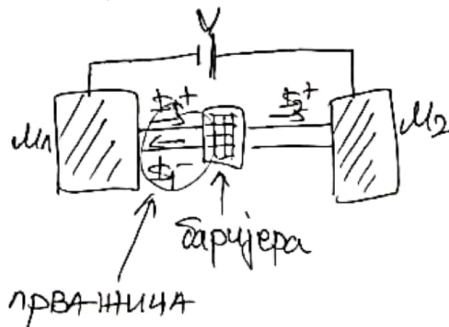
$$G_C = \frac{2e^2}{h} M \quad \text{Проводност балистичког проводника}$$

↑ број носача кои допринесе струји у интервалу $[\mu_1, \mu_2]$

$R_C = G_C^{-1} = \frac{h}{2e^2 M}$

 $\Rightarrow$ КОНТАКТНА (Шарвинова) отпорност

[7] Ландауерова формула



$\Rightarrow$ укупна струја у пробирници:

$$\mathcal{S} = \mathcal{I}_1^+ - \mathcal{I}_1^- = \frac{2e}{h} M T (\mu_1 - \mu_2)$$

$$\mu_1 - \mu_2 = eV$$

$G = \frac{\mathcal{S}}{V} = \frac{2e^2}{h} M \cdot T$

 Ландауерова формула
 за проводност

$$\mathcal{I}_1^+ = \frac{2e}{h} M (\mu_1 - \mu_2)$$

$$\mathcal{I}_2^+ = \frac{2e}{h} M T (\mu_1 - \mu_2)$$

$$T = \frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \int_{\mu_2}^{\mu_1} T(E) dE$$

$$\mathcal{I}_1^- = -\frac{2e}{h} M (1-T) (\mu_1 - \mu_2)$$

* Ако је $T=1$, на основу ове формуле добијамо израз за КОНТАКТНУ провo-
 годност балистичког проводника.

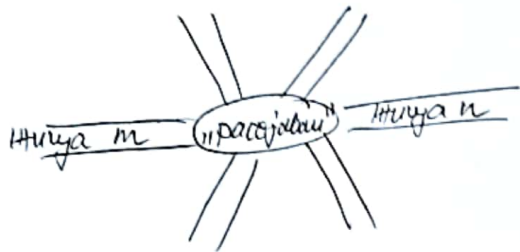
* Шта ако нису исте димензије? ТАДА је присутно међумодно расејање

$$T_{nm} = |t_{nm}|^2 \quad \text{из } m \text{ у } n$$

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_m \sum_n |t_{nm}|^2 = \frac{2e^2}{h} \sum_{m,n} t_{nm} t_{nm}^* = \frac{2e^2}{h} \sum_{m,n} t_{nm} t_{nn}^+$$

$$= \frac{2e^2}{h} \sum_n (t t^+)_{nn} = \frac{2e^2}{h} \text{Tr} (t t^+)$$

⊕ Извести Ландауер-Бјуттигерову формулу



Посматрамо систем који се састоји од
рассеивајућег који је спојено нитица
нитица

$\alpha, \beta \Rightarrow$ пропалативни модови у нитицама

$N_m \Rightarrow$ број модова у нитицама

- За мод α у нитици m :

$$\Phi_{m\alpha}^{inc} = \frac{2e^2}{h} V_m$$

ако се електрони расеју у мод β , струја је $-\Phi_{m\alpha}^{inc} |t_{\beta, m\alpha}|^2$

$\Gamma_{\beta, m\alpha} = t_{\beta, m\alpha}$ / амплитуда рефлексије $\Phi_{\beta, m\alpha}^{trans}$

$$\Phi_{\beta, m\alpha}^{ref} = -\Phi_{m\alpha}^{inc} |\Gamma_{\beta, m\alpha}|^2$$

$$= -\Phi_{m\alpha}^{inc} |t_{\beta, m\alpha}|^2$$

$$\Rightarrow \Phi_{mm} = -\frac{2e^2}{h} \left(\sum_{\alpha=1}^{N_m} \sum_{\beta=1}^{N_m} |t_{\beta, m\alpha}|^2 \right) V_m$$

↑ струја електрона у нитици m услед електрона инјектованих
из нитице m

- Дефинисамо коефицијенте трансмисије и рефлексије

$$T_{mm} = \sum_{\beta=1}^{N_m} \sum_{\alpha=1}^{N_m} |t_{\beta, m\alpha}|^2$$

$$R_{mm} = T_{mm} = \sum_{\beta=1}^{N_m} \sum_{\alpha=1}^{N_m} |\Gamma_{\beta, m\alpha}|^2$$

} обе вредности могу бити
веће од 1

$$\Rightarrow \Phi_{mm} = \underbrace{\frac{2e^2}{h} N_m V_m}_{\Phi_{inc}} - \underbrace{\frac{2e^2}{h} R_{mm} V_m}_{\Phi_{ref}} \quad / \text{ струја инјектована у нитицу } m$$

→ на основу је континуитета

$$\Phi_{mm} + \sum_{n \neq m} \Phi_{nm} = \phi$$

$$\mathcal{E}_{nm} = -\frac{2e^2}{h} T_{nm} V_m$$

односно јна континуиета се може написати и преко коэф. трансмисије и рефлексије:

$$N_m - R_m = \sum_{n \neq m} T_{mn}$$

- струја n даје допринос струји у нивоу m :

$$\mathcal{E}_{nm, \text{trans}} = -\frac{2e^2}{h} T_{mn} V_n$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{E}_m = \frac{2e^2}{h} \left[(N_m - R_m) V_m - \sum_{n \neq m} T_{mn} V_n \right]} \rightarrow \text{Ландауер-Бјутиксрова формула}$$

* може и у групацијем облику:

$$\mathcal{E}_m = \frac{2e^2}{h} \left(\sum_{n \neq m} T_{nm} V_m - \sum_{n \neq m} T_{mn} V_n \right)$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_m = \frac{2e^2}{h} \sum_{n \neq m} (T_{nm} V_m - V_n T_{mn})$$