
Der Einfluss der Randstreuung
auf ballistischen Magnetotransport

Nikhil Chandra

München 2000

Der Einfluss von Randstreuung auf ballistischen Magnetotransport

Dissertation der
Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von Nikhil Chandra
aus Berlin

München, den 28. Juli 2000

1. Gutachter: Prof. Dr. Wilhelm Zwerger
2. Gutachter: Prof. Dr. Herbert Spohn

Tag der mündlichen Prüfung: 22. Dezember 2000.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Widerstände in ballistischen metallischen Leitern untersucht, in denen Streuung an rauen Oberflächen die dominante Streuung ist. Dies geschieht durch eine numerische Simulation, die sich als extrem rechenintensiv herausstellt. Die betrachteten Widerstände sind der Hall- und der Bend-Widerstand, der bei einer Stromablenkung um 90 Grad auftritt, sowie der longitudinale Widerstand. In der Rechnung werden geeignete Geometrien in einem Tight-Binding-Modell diskretisiert. Mit Hilfe des Landauer-Büttiker-Formalismus werden über die Transmissionsamplituden die erwünschten Widerstände berechnet und ihre Magnetfeldabhängigkeit untersucht.

Ohne Randstreuung liefern die Simulationen die wesentlichen Features des integralen Quanten-Hall-Effekts, wie die Hall-Plateaus im Hall-Widerstand und das Verschwinden des longitudinalen und des Bend-Widerstands.

Nach dem Einschalten der Randstreuung treten einige neue Phänomene auf, darunter ein Quenching des Hall-Widerstands bei kleinen Magnetfeldern, ein positiver Magnetowiderstand im longitudinalen Widerstand und ein positiver Bereich im Bend-Widerstand. Besonders interessant ist, dass die Stärke der Randstreuung keinen Einfluss auf den Bend- und den Hall-Widerstand hat.

Diese Phänomene können zum Teil durch klassische Effekte erklärt werden, das Hall-Quenching hat allerdings einen neuen Ursprung. Es zeigt sich, dass die Randstreuung zu einer Kollimation des Elektronenstrahls führt, da die hohen Moden am Rand stärker gestreut werden als die niedrigen. Dies führt zu einer Geschwindigkeitsverteilung, in der die Elektronen in der Mitte schneller als am Rand fließen. Zur Ablenkung eines solchen kollimierten Strahls ist ein größeres Magnetfeld nötig als zur Ablenkung eines Strahls, der gleichmäßig in der gesamten Zuleitung fließt. Dies ist ähnlich zur Kollimation in Geometrien mit sich langsam öffnenden Zuleitungen, in denen in den 80-er Jahren bereits Quenching im Hall-Widerstand beobachtet worden war.

Die Resultate der Simulation sind in guter Übereinstimmung zu einem Experiment, bei dem die rauen Oberflächen ebenfalls als dominierende Streuursache identifiziert wurden. Allerdings ergeben sich deutliche qualitative Abweichungen, wenn als dominante Streuung Bulk-Effekte durch eine Unordnung in der on-Site-Energie untersucht werden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Das Ohmsche Gesetz	3
1.2	Ballistischer Transport in kleinen Proben	4
1.3	Der Aufbau dieser Arbeit	8
2	Die Randstreuung	11
2.1	Experimente in metallischen Nanodrähten	11
2.2	Analytische Resultate zur Randstreuung	15
2.2.1	Die klassische Betrachtung mittels Boltzmann-Gleichung	15
2.2.2	Eine quantale Betrachtung	17
2.2.3	Crossover vom quasiklassischen zum Quanten-Limit	20
3	Landauer-Büttiker-Formalismus	23
3.1	Das Landauer-Problem zweier Zuleitungen	23
3.2	Büttiker-Formalismus	25
3.2.1	Die Streumatrix und ihre Berechnung durch Green-Funktionen	27
4	Numerische Simulation	31
4.1	Diskretisierung	31
4.2	Die Selbstenergie	33
4.3	Der numerische Algorithmus	35
4.3.1	Die Berechnung von Hall- und Bend-Widerstand	35
4.3.2	Die Berechnung des longitudinalen Widerstands	38
5	Der Quanten-Hall Effekt	41
5.1	Allgemeines zum Quanten-Hall Effekt	41
5.2	Büttiker Theorie für das Quanten-Hall Regime	45
5.3	Simulationen zum Quanten-Hall-Effekt	47
5.4	Charakterisierung der numerischen Simulation	51
6	Ergebnisse bei Streuung durch Unordnung	55
6.1	Ergebnisse für Randstreuung	55

6.1.1	Die Stärke der Randstreuung	55
6.2	Die Kollimation eines Elektronenstrahls	57
6.3	Veränderung anderer Parameter	63
6.4	Ergebnisse für on-Site Unordnung	67
7	Streuung an einzelnen Störstellen	71
7.1	Die schwache Lokalisierung	71
7.2	Der Reibungskoeffizient zweier Störstellen	74
7.2.1	Eine Störstelle	75
7.2.2	Zwei Störstellen	76
7.3	Backflow einer einzelnen Störstelle	77
7.3.1	Reduktion der Transmission durch eine Störstelle in einer Dimension	77
7.3.2	Berechnung des Rückstreuterm im Backflow einer einzelnen Störstelle	79
8	Zusammenfassung	83
A	Berechnung einiger Green-Funktionen	85
A.1	Green-Funktion für einen unendlichen Draht	85
A.2	Green-Funktion für einen halbusendlichen Draht	87
B	Berechnung des Backflow-Terms	89
B.1	$d = 3$	89
B.2	$d = 2$	91

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Das Ohmsche Gesetz

Die Bestimmung von elektrischen Widerständen in metallischen Objekten geht zurück auf die erste Hälfte des 19. Jahrhunderts. Georg Simon Ohm fand 1826/27 das berühmte Gesetz, das heute seinen Namen trägt. Danach ist für einen metallischen Draht der Widerstand gegeben durch den Quotienten aus Spannung und Stromstärke. Dabei postulierte er, dass die Stromstärke im ganzen Leiter gleich sei.

Heute nennt man einen Leiter „ohmsch“, wenn der Widerstand proportional zur Länge und reziprok zur Querschnittsfläche ist, der Proportionalitätsfaktor ist der spezifische Widerstand, eine Materialkonstante.

In den letzten Jahrzehnten sind viele Materialien und physikalische Systeme bekannt geworden, die das Ohmsche Gesetz verletzen. Zu den wichtigsten Beispielen zählen Halbleiter-Bauelemente wie Transistoren oder Dioden, Gasentladungsröhren oder Supraleiter.

In Metallen kommt es also bei der Bestimmung des elektrischen Widerstandes nur auf rein makroskopische Größen wie Länge oder Durchmesser an, nicht auf die mikroskopische Struktur. Erste Erklärungen für dieses erstaunliche Resultat kamen in den Anfangsjahren des 20. Jahrhunderts, beginnend mit Drude. Danach treten die mikroskopischen Ursachen des Widerstandes, also Störstellen (Fremdatome), Gitterunregelmäßigkeiten (Phononen) oder -defekte, allein in einer einzigen phänomenologischen Konstante auf, der Stoßzeit.¹ Sie bezeichnet die Zeitspanne zwischen zwei Änderungen des Elektronimpulses, dazwischen fliegt das Elektron frei nur unter dem Einfluss eventueller äußerer Felder wie in einem Gas.

Diese Stoßzeit ist so kurz, dass die freie Weglänge, also die Strecke, die das Elektron im Mittel zwischen zwei Stößen zurücklegt, sehr klein ist. Sie liegt in typischen Metallen in der Größenordnung weniger Nanometer, oft auch noch klei-

¹Dies gilt strenggenommen nur in Metallen, in denen die Ladungsträgerdichte konstant ist.

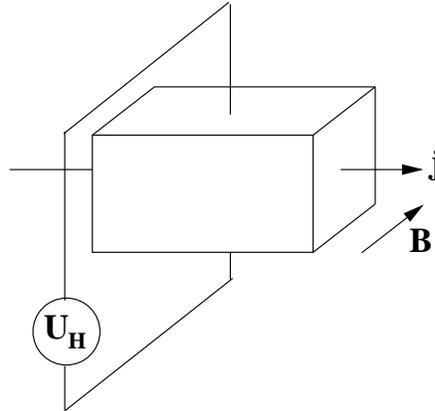


Abbildung 1.1: Fließt ein Strom \mathbf{j} durch einen Leiter bei senkrecht dazu angelegtem Magnetfeld \mathbf{B} , so entsteht eine Hallspannung U_H .

ner. Die Stoßzeit selbst ist von der Ordnung $10^{-14} - 10^{-15}$ sec. Damit ist die Bewegung von Elektronen in Metall diffusiv, die zurückgelegten Bahnen füllen den Raum aus und die Driftgeschwindigkeit, also die effektive Geschwindigkeit über einen langen Zeitraum, ist nur ein geringer Bruchteil der Momentangeschwindigkeit. In Kupfer bei Zimmertemperatur, zum Beispiel, ist die Driftgeschwindigkeit bei einem angelegten elektrischen Feld von $E = 10^3$ V/m von der Größenordnung weniger m/sec, die Fermigeschwindigkeit liegt dagegen in der Größenordnung 10^6 m/sec.

Bei Anwesenheit eines Magnetfeldes tritt noch ein weiteres Phänomen auf, der Hall-Effekt. In einem stromdurchflossenen Leiter in einem senkrecht zur Stromrichtung anliegenden Magnetfeld bildet sich durch die Lorentz-Kraft im stationären Fall eine Spannung U_H in die dritte Dimension aus, siehe hierzu Abb. 1.1. Sie definiert den Hall-Widerstand $R_H = U_H/I$. Er ist proportional zum angelegten Magnetfeld. Die Proportionalitätskonstante, der Hall-Koeffizient, gibt Aufschluss über die Art der Ladungsträger (Elektronen oder Löcher). Der longitudinale Widerstand ist durch das Feld nicht verändert.

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass in einem klassischen ohmschen System der longitudinale Widerstand nur von der Länge des Leiters und seinem Querschnitt beeinflusst ist, nicht von den mikroskopischen Gegebenheiten. Im Magnetfeld verändert er sich nicht, neu hinzu kommt quer zur Stromrichtung der Hall-Widerstand, der proportional zum angelegten Feld ist.

1.2 Ballistischer Transport in kleinen Proben

Diffusivem Transport gegenüber steht ballistischer Transport, der auftritt, falls die freie Weglänge von derselben Größenordnung der Geometrie des Leiters ist. Dann findet nur noch relativ wenig Streuung an Fehlstellen und Phononen statt

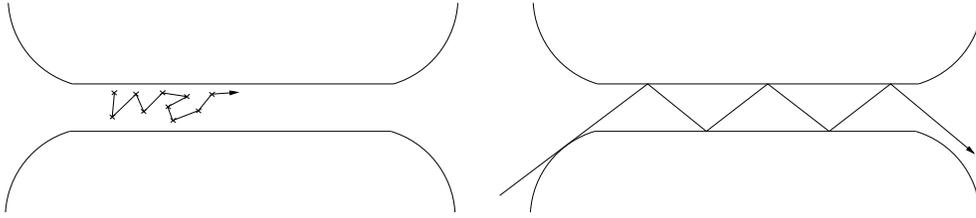


Abbildung 1.2: Der Unterschied zwischen diffusivem (links) und ballistischem (rechts) Transport. Im ballistischen Regime ist die freie Weglänge deutlich größer als die Abmessungen der Geometrie (hier: die Länge des Quantendrahtes), im diffusiven Fall ist das Verhältnis umgekehrt, das Elektron stößt oft, hier mit Kreuzen dargestellt.

und an glatten Wänden werden die Teilchen spekulär zurückgeworfen (gemäß dem Reflexionsgesetz). Schematisch ist der Unterschied in Abbildung 1.2 dargestellt.

Wie wir gleich noch sehen werden, sind elektronische Transporteigenschaften in diesem Regime deutlich von denen diffusiver Metalle verschieden. Wie man sofort in Abb. 1.2 erkennen kann, ist zum Beispiel der Einfluss der Randeigenschaften eines Nanodrahtes erheblich größer. Allerdings treten auch neue, vorher völlig unerwartete Phänomene auf.

Mit der Entwicklung von zweidimensionalen Elektronengasen (2DEG) in Halbleiter-Heterostrukturen wurde in größerem Maße auch ballistischer Transport im Experiment sichtbar (Beenakker und van Houten 1991; Thornton 1998). Dabei wurden vor allem GaAs/AlGaAs-Heterostrukturen verwendet. In AlGaAs sind sowohl Bandlücke als auch Fermi-Energie E_F größer als in GaAs. Durch die Entstehung von Raumladungen an der Grenzschicht verformen sich die Energiebänder und es entsteht ein dreiecksförmiges Potenzial. In diesem sammelt sich ein an der Grenzfläche entlang gut bewegliches Elektronengas, welches sich in die beiden Dimensionen der Schicht ausdehnt. Da die Qualität der Schichten durch genaue Molekularstrahlepitaxie sehr hoch ist, können routinemäßig mittlere freie Weglängen im Mikrometerbereich erreicht werden. Zur weiteren Reduktion in ein eindimensionales System wäre eine Ätztechnik denkbar, welche aber technologisch sehr schwierig ist. Stattdessen wurde vor allem die „split-gate“-Technik verwendet, um das 2DEG an bestimmten Stellen in einer Raumdimension einzuschnüren.

Dabei handelt es sich um die Aufbringung zweier Elektroden auf die Heterostruktur. Je nach angelegter Gatespannung kann es so elektrostatisch zu einer Verarmung der Ladungsträger im direkt darunterliegenden Bereich des 2DEG kommen. So kann man Weiten des für die Elektronen erreichbaren Bereichs von 100 nm oder weniger erzielen. Dies liegt allerdings deutlich unter den in solchen Strukturen üblichen freien Weglängen l von 10 μm .

Die ideale Struktur, die mit split-gates erzielt werden kann, ist eine kurze, relativ dünne Einschnürung des 2DEG, die unter dem Namen Quantenpunktkontakt

(QPC) bekannt geworden ist. Dabei beträgt die Länge eines solchen QPC oft nicht mehr als 500 nm. Das bedeutendste Experiment ist sicherlich die Quantisierung des elektrischen Leitwerts bzw. des Widerstands in einem QPC. Wharam et al. (1988) und van Wees et al. (1988) zeigten unabhängig voneinander, dass sich der Leitwert in Einheiten von $2e^2/h$ verändert, wenn die negative Gate-Spannung verändert wird. Die Erklärung dafür liefert die Landauer-Büttiker-Theorie (siehe Kap. 3): Durch die laterale Einschränkung wird die Anzahl der möglichen Subbänder reduziert und der Leitwert ergibt sich als Anzahl der besetzten Subbänder multipliziert mit dem Leitwert-Quantum $2e^2/h$.

Zwei weitere Phänomene, welche das nicht-ohmsche Verhalten in ballistischen Systemen deutlich zeigen, sind das Quenching des Hall-Widerstandes und der negative Bend-Widerstand.

Ein negativer Bend-Widerstand R_B wurde zum ersten Mal von Takagaki et al. (1988) gesehen und wenig später von Timp et al. (1988) bestätigt. Dabei handelt es sich um einen Widerstand, der in einer Kreuz-Geometrie auftritt, wenn der Strom gezwungen wird, um eine Ecke zu fließen. In einem diffusiven Regime könnten wir bei der Messung einer solchen Größe eigentlich kein Ergebnis erwarten, und wenn dann höchstens einen sehr kleinen positiven Widerstand. Gemessen wurden aber relativ große negative Werte. Ein typischer Versuchsaufbau für die Messung des Bend-Widerstandes und eine Messkurve sind in Abbildung 1.3 zu sehen. Bei kleinen Magnetfeldern ist R_B negativ, wechselt dann das Vorzeichen und erst bei sehr großen Magnetfeldern verschwindet der Bend-Widerstand. Die Erklärung für einen solchen Effekt kam sehr schnell von Timp et al. (1988) und bezog sich auf die bevorzugte Transmission nach vorn gegenüber rechts oder links. Dadurch kommt es zu einem Widerstand, weil nur ein Bruchteil der Elektronen der Potenzialdifferenz folgen können. Dies konnte durch einfache klassische Simulationen in geraden Kreuz-Geometrien gezeigt werden.

Unter dem Quenching des Hall-Widerstandes versteht man dessen Verschwinden bei sehr kleinen Magnetfeldern in zweidimensionalen Hall-Strukturen. Der Versuchsaufbau und typische Messergebnisse sind in Abbildung 1.4 dargestellt. Quenching ist offensichtlich von der Dicke der verwendeten 1-D Strukturen abhängig. Der Effekt wurde zum ersten Mal von Roukes et al. (1987) gesehen und kurz darauf von mehreren Gruppen (Ford et al. 1988; Chang et al. 1989; Ford et al. 1989) bestätigt. Frühe Erklärungen beruhten auf dem Einfangen der Wellenfunktion durch die Kreuz-Geometrie (Ravenhall et al. 1989) oder auf einer Unterdrückung der edge-States (diese werden in Kap. 5.1 genauer eingeführt) (Beenakker und van Houten 1988). Allerdings konnten beide Ansätze nicht die Breite erklären, auf der der Hall-Widerstand unterdrückt war. Erst durch das Phänomen der Kollimation waren die experimentellen Daten zufriedenstellend zu erklären. Kollimation wurde von Beenakker und van Houten (1989a) zur Deutung von Streuung in QPCs herangezogen und von Baranger und Stone (1989a) auf das Quenching des Hall-Widerstands übertragen. Bei diesem Effekt, auf den wir noch genauer in Kap. 6 eingehen werden, handelt es sich um ein klassisches

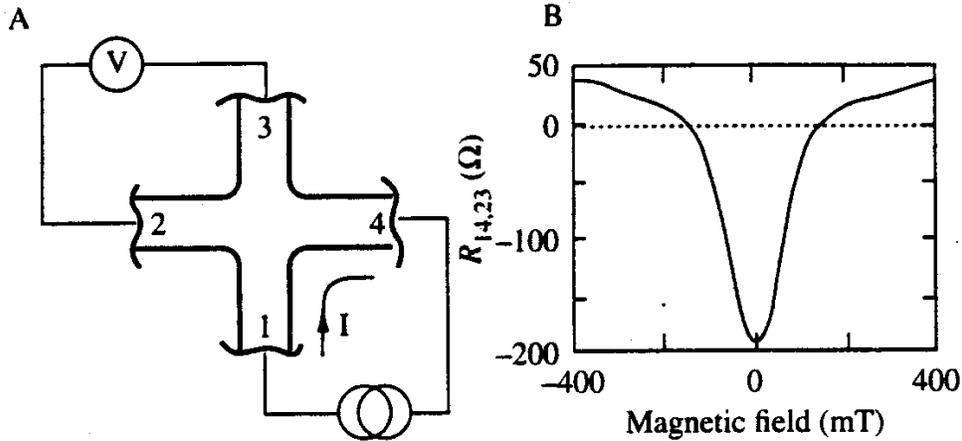


Abbildung 1.3: Aufbau zur Messung des Bend-Widerstands und Ergebnisse in einer ballistischen Probe. R_B ist negativ für kleine Magnetfelder. (Thornton 1998)

Phänomen: Durch die graduelle Öffnung der einzelnen Arme werden erlaubte Einfallswinkel für transmittierende Elektronen verkleinert. Bei größeren Winkeln werden die Elektronen reflektiert und kommen nicht in den Draht hinein. Dieser Effekt wurde auch in klassischen Billiard-Modellen bei Geometrien mit abgerundeten Ecken gefunden (Beenakker und van Houten 1989b). Der große Effekt einer geeigneten Geometrie wurde von Ford et al. (1989) herausgestellt, welcher in einer rhombischen Geometrie den Kollimationseffekt soweit erhöhen konnte, dass es zu einem negativen Hall-Widerstand bei sehr kleinen Magnetfeldern kam.

Vor kurzem wurde nun auch zum ersten Mal in einem metallischen System ballistischer Transport nachgewiesen und untersucht (Mikhailov et al. 1998). Das Experiment ist genauer in Kap. 2.1 vorgestellt. Dabei wurde besonders auch der Einfluss des Randes, oder genauer, der Rauigkeit des Randes mitberücksichtigt. Um die Beschreibung dieses Experiments und weitergehende Untersuchungen geht es in dieser Arbeit. Dabei werden in einer numerischen Simulation, welche in Kapitel 4 genauer erklärt wird, die drei im Experiment betrachteten Widerstände berechnet (longitudinaler Widerstand R_L , Hall- R_H und Bend-Widerstand R_B). Die Parameter der Simulation sind möglichst nahe am Experiment gestaltet, damit zunächst eine Reproduktion der dortigen Daten erzielt werden kann, um in einem zweiten Schritt weitergehende Untersuchungen durchführen zu können.

Ein wesentliches Ergebnis ist, dass auch die Randstreuung zu einer Kollimation führen kann, obwohl es keinerlei graduelle Öffnung der Zuleitungen gibt, und damit ebenfalls zum Hall-Quenching und zu einem negativen Bend-Widerstand.

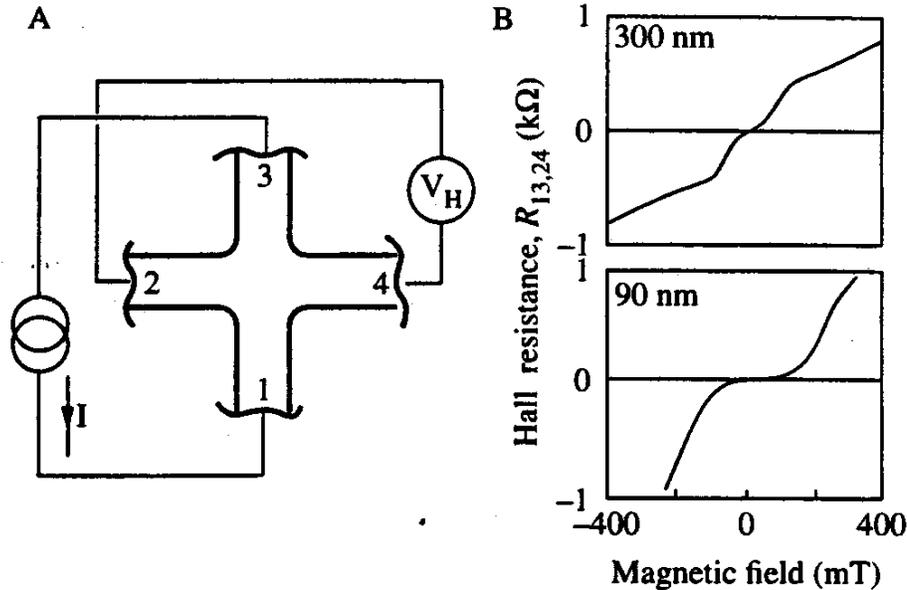


Abbildung 1.4: Aufbau zur Messung des Hall-Widerstands und Ergebnisse in ballistischen Proben. Bei kleinerer Dicke der Nanodrähte ist das Quenching bei niedrigen Magnetfeldern, die Absenkung von R_H vom linearen Verlauf auf ein Plateau bei Null deutlich sichtbar. Bei dickeren Drähten tritt dieser Effekt nicht auf, obwohl sich auch dort Abweichungen vom klassischen Fall zeigen. (Thornton 1998)

1.3 Der Aufbau dieser Arbeit

Kapitel 2 erläutert den Hintergrund der vorliegenden Arbeit. Es geht vor allem um die Beschreibung des bereits erwähnten Experiments von Mikhailov et al. (1998). Mit einer genaueren Betrachtung der bisherigen analytischen Ergebnisse zum Einfluss der Streuung an rauen Wänden auf die elektronische Leitfähigkeit schließt dieser Abschnitt.

In Kapitel 3 werden wir uns zunächst mit dem Landauer-Büttiker-Formalismus beschäftigen. Er liefert das theoretische Fundament für die folgenden Rechnungen. Neben einer allgemeinen Einführung werden wir insbesondere darauf eingehen, wie eine Streumatrix und daraus die sogenannten Transmissionskoeffizienten aus der Green-Funktion berechnet werden können. Dies wird zur sogenannten Fisher-Lee-Formel führen.

In Kapitel 4 gehen wir auf die Besonderheiten bei den numerischen Simulationen ein. Dazu gehören die Diskretisierung des Hamilton-Operators und das Ansetzen von Randbedingungen. Dies ist hier besonders wichtig, da wir es mit einem im Prinzip unendlich ausgedehnten System zu tun haben. Dies wird zum Konzept der Selbstenergie führen. Eine Erläuterung des benutzten Algorithmus

und die Vorstellung der Geometrie, in welcher die Widerstände bestimmt werden, schließt dieses Kapitel ab.

Kapitel 5 widmet sich dem (integralen) Quanten-Hall-Effekt. Obwohl die numerische Untersuchung dieses Phänomens nicht im Vordergrund der Arbeit steht, ist es doch ein interessanter Punkt. Ein großer Teil der Simulationen finden bei so großen Magnetfeldern statt, dass das System in das Quanten-Hall-Regime gebracht wird. Daher wird das Verhalten in solchen Magnetfeldern untersucht und mit Experimenten verglichen. Daneben widmet sich das Kapitel auch der Charakterisierung der verwendeten Geometrien und der Festlegung geeigneter Parameter für die weiteren Simulationen.

In Kapitel 6 schließlich werden die Ergebnisse der Berechnungen der verschiedenen Widerstände vorgestellt. Dabei werden sowohl Streuung durch Oberflächenrauigkeiten als auch Streuung durch on-Site-Unordnung simuliert. Es werden die Einflüsse der verschiedenen in der Rechnung veränderbaren Parameter vorgestellt und erläutert.

Kapitel 7 befasst sich mit einem etwas anders gelagerten, aber doch verwandten Thema. Dabei geht es um den Einfluss einer einzelnen, stationären Störstelle auf das Verhalten des Stroms um sie herum. Es kommt zu einem Rückfluss, also zu Backflow. Dieser Backflow wird berechnet und als Viskosität oder Energieverlust ausgedrückt. Weiterhin untersuchen wir die Frage, ob die Rate, mit der zwei Störstellen dem System Energie entziehen, größer als zweimal die Einzelrate ist. Dies könnte einen neuen Zugang zum Problem der schwachen Lokalisierung in solchen Anordnungen ergeben.

Mit einer Zusammenfassung in Kapitel 8 schließt die Arbeit.

Kapitel 2

Die Randstreuung - Experiment und analytische Arbeiten

2.1 Experimentelle Untersuchung von Widerständen in metallischen Nanodrähten

In einem neuartigen Experiment einer Kollaboration aus Russland, Frankreich und Schweden (Mikhailov et al. 1998) wurde zum ersten Mal ballistischer Transport in quasi-zweidimensionalen Strukturen in einem anderen System als einem 2DEG beobachtet. Hier handelt es sich um metallische Nanodrähte, die aus einem dünnen metallischen Film ausgeschnitten werden. Als Material dient Wolfram (W) oder Molybdän (Mo). Alle hier vorgestellten Ergebnisse betreffen Wolfram-Drähte, aber es gibt keine nennenswerten qualitativen Unterschiede zu Molybdän.

Die Herstellung der Nanodrähte ist nicht einfach, da der Draht möglichst dünn sein soll, gleichzeitig aber die Defektdichte klein bleiben soll, um ballistischen Transport zu erreichen. Dazu muss ja gewährleistet sein, dass die freie Weglänge der Elektronen größer ist als typische Abmessungen der Probe. Besonders die Rauigkeit der Oberfläche des Films ist dabei ein Problem. Bei herkömmlicher Fabrikation mittels Ionenätzen und chemischer Prozessierung dieser Oberfläche können leicht Strukturdefekte und Fehlstellen am Interface auftreten, die zu einer Reduzierung der freien Weglänge führen.

Der Prozess zur Herstellung von den im Experiment verwendeten metallischen Nanodrähten ist daher etwas aufwendiger (Mikhailov et al. 1998). Zunächst wird ein dünner monokristalliner Film auf eine beheizte Saphir-Oberfläche durch Laser-Ablation gewachsen. Dies geschieht in einer Ultra-Hochvakuumkammer (3×10^{-7} Pa). Ein gepulster Laserstrahl trifft auf einen rotierenden Block aus Metall (W oder Mo) mit einer Leistungsdichte von einigen Gigawatt pro cm^2 . Die austretenden Atome treffen auf eine 1170K heiße $[\bar{1}012]$ Saphir-Oberfläche und bilden dort einen $[001]$ orientierten Einkristall (Mikhailov et al. 1996).

Dieser Einkristall wird dann durch einen epitaktischen Lift-Off durch Pho-

tolithographie in die gewünschte Geometrie gebracht. Allerdings wird, anders als bei gewöhnlichen Lift-Offs, zwischen Belichtung und dem Ablösen der nicht benötigten Struktur ein 100nm dicker Aluminium-Film aufgebracht. Dadurch ist die Struktur definiert und besteht aus einem metallischen Film mit einer dünnen Al-Haut.

In einem nächsten Schritt wird nun ein Ionen-Ätzen mit 500 eV Xenon-Ionen durchgeführt, dabei dient der Aluminium-Film als Maske. Dabei werden die oben angesprochenen Probleme, die bei freiem Ionen-Ätzen auftreten könnten, vermieden. Nach dem Ätzzvorgang, der die Oberfläche des Metallfilms erheblich glättet, wird durch Auftragen von KOH die Aluminiumschicht entfernt, so dass der reine Wolfram- bzw. Molybdän-Film übrig bleibt. Dieser hat eine Randraugigkeit, die nun deutlich kleiner als die Breite und Höhe des Films ist, und somit zu ballistischem Transport führen sollte. Allerdings ist der Film so frei von Störstellen, dass die Rauigkeit der dominante Streuterm für die Elektronen ist.

Zusammenfassend handelt es sich also um ballistischen Transport mit dominanter Randstreuung. Die Abmessung der betrachteten Geometrie beträgt bei den verwendeten Nanodrähten 95nm in der Höhe bei einer Breite von 300nm. Die Länge ist typischerweise mindestens von der Größenordnung μm . Die Unschärfe in der lateralen Abmessung beträgt etwas über 10-20nm. Damit ergibt sich (wichtig für den Vergleich mit den Daten aus der Simulation) eine relative Unschärfe (später Δ genannt) von 0.03 - 0.06. Demgegenüber ist die Unschärfe in der Filmdicke deutlich kleiner als 1nm, so dass die Streuung an der oberen und unteren Begrenzung vernachlässigt werden kann.

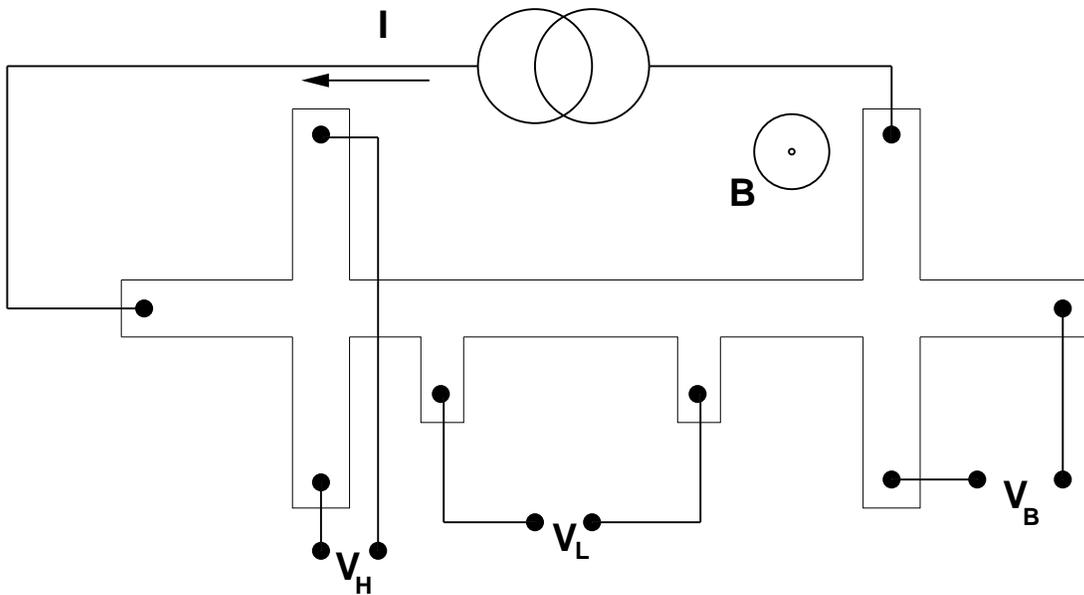


Abbildung 2.1: Geometrie für die gleichzeitige Messung des Hall-, Bend- und long. Widerstandes. (Mikhailov et al. 1998)

Die Geometrie, die in den Experimenten verwendet wurde, ist in Abbildung 2.1 dargestellt. Sie ist relativ einfach und erlaubt die gleichzeitige Messung von Hall-, Bend- und longitudinalem Widerstand. Obwohl es sich eigentlich bei Widerständen um reziproke Leitfähigkeiten handelt, die deswegen auch nicht negativ werden können, sind im Experiment und dementsprechend auch für diese Arbeit die Widerstände als Verhältnis von Spannung V zum angelegten Strom I definiert. Dementsprechend gilt also für den Hall-Widerstand $R_H = V_H/I$, für den Bend-Widerstand $R_B = V_B/I$ und ebenso für den longitudinalen Widerstand R_L .

Durch die Messung von R_L und den Fit an die Formel

$$R_L(T) = (\rho_{ph}(T) + \rho_{sc}) \frac{L}{A}$$

mit den spezifischen Widerständen ρ_{ph} aufgrund von Elektron-Phonon-Wechselwirkung und ρ_{sc} aufgrund von Streuung am Rand und an Störstellen (L ist die Länge des Drahtes, A die Querschnittsfläche) kann ρ_{sc} bestimmt werden, ρ_{ph} ist tabelliert bekannt. Das Drude-Modell liefert dann aus dem Wert für ρ_{sc} die mittlere freie Weglänge, die so zu 200nm bestimmt wurde. Dies ist größer als die Höhe des Films und etwas kleiner als die Breite. Daher sind die Elektronen sicher nicht im vollständig diffusiven Regime, sondern eher auf der ballistischen Seite, wie angenommen.

Eine grafische Auftragung der wichtigsten Resultate ist in Abb. 2.2 zu sehen. Die Hauptergebnisse der Messungen waren folgende:

- Bei niedrigen Temperaturen und Veränderung des Magnetfeldes:
 - Der longitudinale Widerstand zeigt einen starken positiven Magnetowiderstand, das heißt, dass R_L mit zunehmendem Magnetfeld stark ansteigt. Bei größeren Magnetfeldern scheint dieser Anstieg linear zu verlaufen.
 - Im Hall-Widerstand tritt Quenching auf. Erst bei höheren Magnetfeldern findet ein Übergang zu einem linearen Regime statt. Daneben scheint es zu einer Hysterese zu kommen. Außerhalb des gequenchten Bereichs liegt ein normaler linearer Verlauf vor.
 - Der Bend-Widerstand zeigt bei kleinen Magnetfeldern wiederum einen negativen Wert. Bei Steigerung wächst er an und wird schließlich positiv.
 - Der Übergang von negativen zu positiven Werten des Bend-Widerstandes und das Ende des gequenchten Hall-Widerstandes treten bei den gleichen Magnetfeldern ($B \approx 2$ T) auf.
- Daneben ergab sich bei Veränderung der Temperatur ohne angelegtes Magnetfeld:

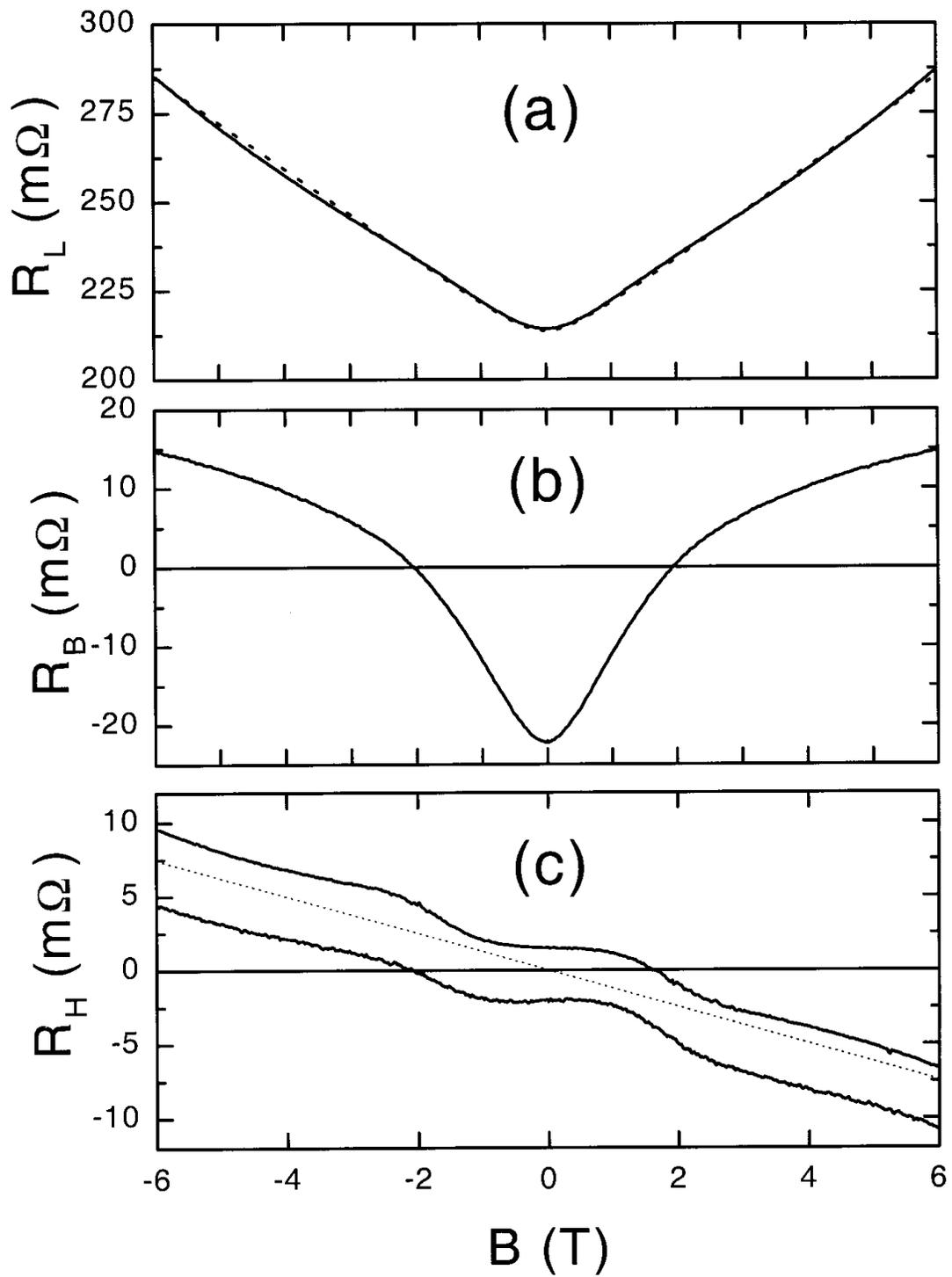


Abbildung 2.2: Messung des Hall-, Bend- und long. Widerstandes. (Mikhailov et al. 1998)

- Der longitudinale Widerstand kann gut durch das Ohmsche Gesetz mit temperaturabhängigem spezifischen Widerstand durch Phonon-Streuung beschrieben werden.
- Der Bend-Widerstand ist negativ für kleine Temperaturen ($< 50\text{K}$), steigt an und wird schliesslich positiv. Dies ist über den ganzen Temperaturbereich (0 - 200 K) ein nicht-ohmsches Verhalten.

2.2 Analytische Resultate zum Einfluss der Randstreuung auf elektrische Transporteigenschaften

2.2.1 Die klassische Betrachtung mittels Boltzmann-Gleichung

Die ersten Arbeiten zu Auswirkungen von Randstreuung auf die elektrische Leitfähigkeit von Metallen stammen aus den Anfängen des 20. Jahrhunderts (Thomson 1901). Danach waren es Fuchs (1938) und Sondheimer (1952), die erste theoretische Ergebnisse lieferten, welche bis weit in die 80-er Jahre nur unwesentlich verbessert wurde. Diese Theorie basiert auf einer Boltzmann-Formulierung und ist quasiklassisch (die Quantenmechanik tritt nur durch die Bandstruktur und die Fermistatistik auf).

Nach Boltzmann muss die Verteilungsfunktion der Elektronen $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ im Gleichgewichtsfall folgende Gleichung erfüllen:

$$-\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = \dot{f}_{\mathbf{k}}|_{\text{scatt}}. \quad (2.1)$$

Dabei ist \mathbf{E} das elektrische Feld, $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ die Geschwindigkeit, und der Term auf der rechten Seite der Gleichung beschreibt die Änderung der Verteilungsfunktion durch Streuprozesse, die noch völlig allgemein sind.

Nach einer Näherung durch

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + g(\mathbf{r}, \mathbf{k})$$

betrachten wir nur noch die Abweichung $g(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ vom Gleichgewichtsfall ohne angelegtes elektrisches Feld. Die Gleichung kann nun sehr einfach linearisiert werden, nur Terme von der Ordnung g werden behalten, ebenso ihre Produkte mit \mathbf{E} .

Nun müssen wir uns um den Rand kümmern. Im Rahmen dieser Theorie ist dies durch die explizite Formulierung als Randbedingungen gegeben, nämlich als

$$g(\mathbf{r}_{\mathbf{B}}, \mathbf{k})|_{v_n > 0} = \int d\mathbf{k}' g(\mathbf{r}_{\mathbf{B}}, \mathbf{k}')|_{v_n < 0} R_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \quad (2.2)$$

Diese Gleichung sagt aus, dass an den Rändern \mathbf{r}_B die auslaufenden Teilchen (mit Geschwindigkeitskomponente normal zur Oberfläche $v_n > 0$) durch die einlaufenden Teilchen (mit negativer Normalgeschwindigkeit) gegeben sind, gewichtet mit einer Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand \mathbf{k} in \mathbf{k}' $R_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$.

Dieses Problem ist noch immer viel zu schwierig für eine analytische Lösung, da zur Berechnung des Streuterm $\dot{f}_{\mathbf{k}}$ im Prinzip das gesamte Streuproblem angegangen werden muss, also die genaue Struktur der Oberfläche und die Orte der lokalisierten Störstellen bekannt sein müsste. Daher greifen wir an dieser Stelle zu einer phänomenologischen Näherung mit einer einzigen anzupassenden Konstante, nämlich der mittleren Stoßzeit τ :

$$\dot{f}_{\mathbf{k}}|_{\text{scatt.}} = -\frac{1}{\tau}g(\mathbf{r}, \mathbf{k}). \quad (2.3)$$

Nun müssen wir noch durch eine weitere Näherung die Rauigkeit der Oberfläche beschreiben. Bei der Streuung an einer Oberfläche gibt es zwei Grenzfälle, einerseits eine vollständige elastische Streuung wie an einem glatten Spiegel, andererseits eine diffuse Streuung in isotrop verteilte Endzustände, also ein kompletter Verlust der Information über die Anfangsgeschwindigkeit. Nach Fuchs und Sondheimer wird ein Gemisch dieser beiden Fälle betrachtet, mit einer Wahrscheinlichkeit p tritt spekulare Streuung auf, mit $1 - p$ diffuse Streuung. Damit gilt dann also:

$$g(\mathbf{r}_B, \mathbf{k})_{v_n} = p g(\mathbf{r}_B, \mathbf{k}')_{-v_n} + (1 - p) C \int d\mathbf{k}'' g(\mathbf{r}_B, \mathbf{k}'')_{v_n < 0} \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}''}) \quad (2.4)$$

Dabei entsteht \mathbf{k}' aus \mathbf{k} durch Invertierung der Normalkomponente v_n .

Nach diesen Näherungen können wir nun eine analytische Lösung der linearisierten Boltzmann-Gleichung für $g(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ angeben:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \tau e \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \left[1 - \frac{1 - p}{1 - p \exp(-|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}'_B|/l_0)} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_B|}{\tau |\mathbf{v}|}\right) \right] \quad (2.5)$$

Dabei bezeichnet l_0 die freie Weglänge, die aufgrund von lokalisierten Streuern etc. auftritt, \mathbf{r}_B ist der Ort, an dem das Elektron zuletzt die Wand berührt hat, \mathbf{r}'_B derjenige Ort, bei dem es davor spekulär abgeprallt ist.

Dieses Ergebnis impliziert nur eine kleine Abweichung im Ausdruck für die elektrische Leitfähigkeit nach dem Drude-Sommerfeld-Modell:

$$\sigma = \frac{ne^2}{mv_F} l_0 = \frac{k_F^2}{3\pi^2 \hbar} l_0. \quad (2.6)$$

Dabei wird dieses Gesetz meistens durch die Stoßzeit, gegeben durch $\tau = l_0/v_F$, ausgedrückt (Ashcroft und Mermin 1976). v_F steht für die Fermi-Geschwindigkeit, k_F für die Fermi-Wellenzahl.

Im Fall der klassischen Betrachtung von Randstreuung gilt dieses alte Ergebnis nun ebenso, allein die freie Weglänge l_0 wird durch eine neue Weglänge l ersetzt, die zusätzlich durch die Stöße am Rand verändert wird. Dafür gilt:

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = \frac{l}{l_0} = \frac{3}{4\pi S_c} \int d\Omega \int dS_c \cos^2 \theta \left[1 - \frac{(1-p) \exp(-|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}'_B|/l_0)}{1 - p \exp(-|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}'_B|/l_0)} \right] \quad (2.7)$$

Dabei ist S_c der Querschnitt der Geometrie und θ der Winkel zwischen dem Vektor $\mathbf{r}_B - \mathbf{r}'_B$ und dem \mathbf{E} -Feld.

In einer zylindrischen Geometrie können die Integrale ausgewertet werden, ebenso für einen dünnen Film (Dingle 1950). In beiden Fällen ergibt sich folgender, deswegen als unabhängig von der Geometrie angenommener, Ausdruck:

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} \approx 1 - \frac{3}{16}(1-p)\frac{l_0 P}{S_c}, \quad (2.8)$$

wobei P der Durchmesser des Zylinders, bzw. die Länge des Films ist.

An dieser Stelle ist noch interessant, dass im Fall des Films zwar die oben angegebenen Integrale analytisch ausgewertet werden können, allerdings divergiert das Winkelintegral im Fall unendlich dünner Filme oder bei unendlicher freier Weglänge für $\theta = 0$. Dies liegt daran, dass Elektronen, die sich nahezu parallel zu den Oberflächen bewegen, einen Hauptteil des Stroms tragen, und im reinen Limit $l_0 \rightarrow \infty$ einen unendlichen Beitrag zur Leitfähigkeit beitragen. Damit ist die Theorie nur für relativ dicke Filme mit hoher Randstreuung zutreffend.

2.2.2 Eine quantale Betrachtung

Es dauerte bis in die zweite Hälfte der 80-er Jahre, bis die quasiklassische Betrachtung von Fuchs und Sondheimer auf voll quantenmechanische Beine gestellt wurde. Dies hat sicherlich damit zu tun, dass erst in dieser Zeit experimentell das Limit erreicht wurde, in dem die obige Theorie versagt, nämlich ultradünne, extrem glatte Filme.

Die erste voll quantenmechanische Behandlung des Problems der Auswirkungen von Randstreuung auf das Verhalten von freien Elektronen in dünnen Filmen stammt von Tešanović et al. (1986). Wie im quasiklassischen Fall wird der raue Rand als Randbedingung des freien Hamilton-Operators betrachtet. Dann wird dieser einfache Hamilton-Operator mit schwierigen Randbedingungen in einen anderen transformiert, in dem die Randbedingungen sehr einfach sind. Dafür entstehen neue Terme, die als neuartige Kopplungen interpretiert werden können. Der Hamilton-Operator ist damit nicht mehr quadratisch, in den neuen Kopplungen kann allerdings dann mit Störungstheorie gearbeitet werden, um Ergebnisse für niedrige Variationen in den Randbedingungen (also für geringe Rauigkeit) zu erzielen.

Tešanović et al. (1986) definieren zunächst einen Raum x_{\parallel} parallel zu den Wänden. Im senkrechten Raum x_{\perp} variiert das Einschlusspotenzial $U_{\alpha}(x_{\perp})$ auf

einer Längenskala α , die um einen Mittelwert auf x_{\parallel} schwanken soll. Der volle Hamilton-Operator ist gegeben durch:

$$H = H_0(x_{\parallel}) + H_{\alpha(x_{\parallel})}(x_{\perp}) = H_0(x_{\parallel}) - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\perp}^2 + U_{\alpha(x_{\parallel})}(x_{\perp}). \quad (2.9)$$

Es wird im weiteren angenommen, dass die Schwankungen von $\alpha(x_{\parallel})$ klein sein sollen, so dass eine Störungstheorie in dieser Größe möglich ist.

Die Transformation, die oben erwähnt wurde, wird erzeugt durch einen Operator, der aus zwei Teilen besteht. Ein Teil ist unitär und beschreibt die Transformation der Eigenzustände des rauen Problems auf ein geglättetes auf der durch den Mittelwert von α gegebenen Längenskala, der andere ist nicht-unitär und transformiert den Hamilton-Operator selbst. Als kleiner Parameter dient $\lambda = \ln(\alpha_0/\alpha(x_{\parallel}))$, wobei α_0 den Mittelwert bezeichnet. Aus dieser Transformation entsteht ein effektiver Hamilton-Operator, in welchem ein Pseudopotenzial V_{nm} die verschiedenen Subbänder miteinander koppelt. Nehmen wir an, der Film läge in der $x - y$ -Ebene, und in die z -Richtung sei die Oberfläche rau, dann gilt:

$$V_{nm} = E_{nm} \delta_{nm} + \frac{1}{2}(E_m - E_n) \left[z \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} z \right]_{nm}. \quad (2.10)$$

Dabei ist E_n die Eigenenergie des n -ten Subbandes von $H_{\alpha_0}(z)$, dem Hamilton-Operators eines glatten Films mit Dicke α_0 . Dies ist analog zu Ulreich und Zwirger (1998). Dort führt eine Weitenabhängigkeit zu Streuung zwischen den adiabatischen Niveaus E_n .

Im Allgemeinen ist dieses Problem selbst in Störungstheorie nicht zu lösen, denn typischerweise ist die Anzahl der Subbänder n_c sehr groß ($\sim 100 - 1000$). Außerdem ist das Einschlusspotenzial wichtig für das Auffinden der Eigenenergien und auch die Funktion $\alpha(x_{\parallel})$, also der Rand, muss noch bestimmt werden.

Allerdings kann für einen wichtigen Spezialfall eine Lösung angegeben werden. Dazu wird angenommen, dass es sich beim Einschluss um ein „Hartewand-Potenzial“ handelt, damit sind die Eigenenergien einfach zu berechnen und die Matrix V_{nm} separiert in ihren Variablen. Es ergibt sich nämlich $V_{nm} = nm(-1)^{n+m}(\hbar^2 \pi^2 / Md^2)$, wobei d wiederum die Dicke des Films bezeichnet.

Außerdem wird für den Rand eine unkorrelierte, auf atomarer Skala raue Oberfläche angenommen (dies entspricht dem Fall $p = 0$ bei Fuchs und Sondheimer). Dies wird durch die Annahme eines „weißen Rauschens“ im Oberflächenprofil deutlich gemacht und für die Varianz wird ein Parameter H durch $\langle \lambda(q) \lambda(q') \rangle = H^2 / (k_F d)^2$ definiert. Dabei ist $\lambda(q)$ die Fourier-Transformierte von $\langle \lambda | x_{\parallel} | \lambda(x_{\parallel} = 0) \rangle$ bezüglich x_{\parallel} . Die Berechnung der Leitfähigkeit erfolgt mit Hilfe der Kubo-Formel und liefert:

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar} 6\pi s(n_c) \frac{n_c^3}{k_F^2 H^2} \left(1 + \mathcal{O} \left(\frac{k_F^4 H^4}{n_c^2} \right) \right) \quad (2.11)$$

mit $s(n_c) = \sum_{n=1}^{n_c} (1/n^2) \approx \pi^2/6$.

Es gilt in guter Näherung $n_c \approx k_F d / \pi$, somit ist die Leitfähigkeit von der Ordnung d^3 . Sie ist auch bei vollständigem Fehlen sonstiger Störstellen nicht unendlich wie im quasiklassischen Fall, sondern bleibt endlich. Im quasiklassischen Fall waren für das unbegrenzte Anwachsen der Leitfähigkeit Elektronbahnen verantwortlich, die parallel zu den Rändern in der Mitte des Films verlaufen. Quantenmechanisch ist das Präparieren eines solchen Zustandes nicht möglich, durch Nullpunktsfluktuationen in z -Richtung verlassen die Teilchen ihre anfänglichen $x - y$ -Ebenen. Das führt zu einem endlichen spezifischen Widerstand $\rho = \sigma^{-1}$. Eine Berechnung der mittleren freien Weglänge führt aus diesem Grund auch zu einem endlichen Wert und es zeigt sich, dass sie durch die freie Weglänge des niedrigsten Subbandes $n = 1$ dominiert wird. Dies ist ein wichtiges Ergebnis und sollte für die weitere Diskussion an dieser Stelle herausgehoben werden.

Die Arbeit wurde vertieft und ergänzt von Trivedi und Ashcroft (1988). Dort wurde auch die Formel 2.11 um einen Beitrag für die Störstellenstreuung erweitert, die Störstellen werden auf niedrigster Ordnung berücksichtigt.

Ein anderer Weg zur Berechnung der Leitfähigkeit eines dünnen Films findet sich in Fishman und Calecki (1989). Dort wird zwar nur eine raue Seite betrachtet, aber die Ergebnisse sind natürlich ohne weiteres auf den Fall, dass beide Seiten zur Streuung beitragen, anwendbar. Auch hier liegt der Film in der $x - y$ -Ebene mit Begrenzungen bei $z = \pm d/2$. Nun gelte für den oberen Rand $z = d/2 + f(\rho)$, wobei ρ ein direkter zwei-dimensionaler Vektor ist. Der Hamilton-Operator umfasst die kinetische Energie wechselwirkungsfreier Elektronen und starre Potenzialstufen mit Potenzial V an den Rändern. Durch die Einführung des unebenen Randes tritt ein zusätzlicher Term im Hamilton-Operator auf, nämlich:

$$U = V \left(\theta(z - \frac{1}{2}d - f(\rho)) - \theta(z - \frac{1}{2}d) \right) \approx -V f(\rho) \delta(z - \frac{1}{2}d). \quad (2.12)$$

Gerechnet wird in niedrigster Ordnung in $f(\rho)$. Für den Rand wird folgende Parametrisierung angesetzt:

$$\langle f(\rho') f(\rho' + \rho) \rangle = \Delta^2 G(\rho/\xi). \quad (2.13)$$

Dies definiert die Stärke der Unordnung Δ und eine Korrelationslänge ξ . Die Funktion $G(r)$ bzw. ihre Fourier-Transformation $F(k)$ bleibt zunächst unbestimmt.

Mit diesen Eingaben ist die Leitfähigkeit in erster Ordnung in der Randfluktuation berechenbar. Die Autoren erhalten im wichtigen Spezialfall $V \rightarrow \infty$ und $\xi k_{max} \ll 1$, wobei k_{max} der maximale der Fermi-Wellenvektoren k_ν , also der des niedrigsten Subbandes, ist:

$$\sigma \approx \frac{e^2}{\hbar} \frac{d^5}{2\pi^5 \Delta^2 \xi^2} \frac{1}{F(0)} \frac{6}{n_c(n_c + 1)(n_c + 2)} \sum_{\nu=1}^{n_c} \frac{k_\nu^2}{\nu^2}. \quad (2.14)$$

Dieser Ausdruck kann nun in verschiedenen Limiten für die Anzahl der Subbänder ausgewertet werden. Für ein einzelnes Subband, also $n_c = 1$, erhält man die Proportionalität $\sigma \propto d^6$. Dieses Limit ist in Halbleitern zu erwarten. Im anderen Fall, der für metallische Filme zutreffend ist, nämlich $n_c \gg 1$, gilt:

$$\sigma \sim d^2 \left(1 - \frac{6}{(3n\pi^5)^{1/3}} \frac{1}{d} \right). \quad (2.15)$$

Dabei ist n die Zahl der Ladungsträger. In einem numerischen Beispiel für dünne CoSi_2 Filme ergibt sich hier $\sigma \propto d^{2.1}$. Dies ist in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten, die $\sigma \propto d^{2.3}$ zeigen (Duboz et al. 1988; Henz et al. 1987). Der wesentliche Unterschied zum obigen Resultat von Tešanović et al. (1986) ist, dass hier die Annahme des weißen Rauschens im Oberflächenprofil fallengelassen und durch eine Korrelationsfunktion mit einer neu eingeführten Korrelationslänge ersetzt wurde.

An dieser Stelle ist noch interessant, dass die Auswirkungen verschiedener Randkorrelationen, ausgedrückt durch die Funktion $G(r)$ bzw. die Fourier-Transformierte $F(k)$, kaum, nämlich nur durch den Wert $F(0)$ in den Ausdruck für die elektrische Leitfähigkeit eingehen. Dabei ist dieser Wert bei verschiedenen Modellfunktionen (Gauss-Funktion, exponentielle Abnahme, Lorentz-Funktion und andere) jeweils von derselben Größenordnung $\mathcal{O}(\pi)$.

2.2.3 Crossover vom quasiklassischen zum Quanten-Limit

Eine Theorie, die zwischen dem quasiklassischen Limit von Fuchs und Sondheimer einerseits und den rein quantenmechanischen Rechnungen von Tesaonovic et al. und Fishman und Calecki vermittelt, wurde von Sheng et al. (1995) vorgestellt. Sie wählen einen Zugang über Green-Funktionen und Dyson-Gleichung, um einen Ausdruck für die elektrische Leitfähigkeit mittels des Kubo-Formalismus herzuleiten, welcher in den entsprechenden Grenzfällen in die vorher besprochenen Ausdrücke übergeht, aber auch dazwischen gilt.

Die Autoren rechnen in einem sehr ähnlichen Modell zu den bisher vorgestellten, also mit wechselwirkungsfreien Elektronen in einem dünnen Film mit Dicke d und Wänden bei $z = 0$ und $z = d$. Das Einschlusspotenzial an diesen Wänden hat die Höhe V und wird sofort an der Wand vollständig eingeschaltet. Der Stör-Hamiltonian hat die Form $H' = \sum_{l=1,2} V f_l(\mathbf{r}_{\parallel}) \delta(z - z_l)$. Hier werden beide Oberflächen als rau angenommen. Bei f_l handelt es sich um ein „weißes Rauschen“-Potenzial.

Daneben wird auch der Einfluss von statischen Störstellen, beschrieben durch ein lokalisiertes Unordnungspotenzial U , mitberücksichtigt. Dieses führt in niedrigster Ordnung zu einer Änderung der freien Green-Funktion von $G_0(\bar{k}, n) = 2m/(\bar{k}^2 - q_n^2)$ mit $\bar{k} = (k_F^2 - k_{\parallel}^2)^{1/2}$ auf $\bar{G}(\mathbf{k}_{\parallel}, n) = 2m/(k^2 - q_n^2)$ mit $k = (\bar{k}^2 + ik_F/\lambda)^{1/2}$. λ ist die freie Weglänge aufgrund der Stöße mit den Störstellen, $q_n = n\pi/d$ bezeichnet die diskreten Werte des Impulses in z -Richtung.

Mittels dieser Green-Funktion kann nun die volle Green-Funktion G über die Dyson-Gleichung berechnet werden:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}'' \int d\mathbf{r}''' \bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \Sigma(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') G(\mathbf{r}''', \mathbf{r}'). \quad (2.16)$$

Dies definiert die Selbstenergie Σ . Ihre Berechnung geschieht nach den üblichen Regeln der Viel-Teilchen-Physik. Der reale Teil kann in eine Redefinition der Energielevel umgewandelt werden, der imaginäre Rest liefert

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -iVQ\delta(z - z') \sum_l \delta(z - z_l) \quad \text{mit} \quad (2.17)$$

$$Q = -\text{Im} \int \frac{d^2 \mathbf{q}_{\parallel}}{(2\pi)^2} \langle |f|^2 \rangle (VG(\mathbf{q}_{\parallel}, z, z)) \quad (2.18)$$

Dabei steht $\langle |f|^2 \rangle$ für eine Mittelung des Oberflächenprofils über alle möglichen Realisationen. Die Gleichung für Q ist selbstkonsistent, es gilt nämlich:

$$Q = \frac{\langle |f|^2 \rangle}{2d} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{q_n^2}{1 + q_n Q}. \quad (2.19)$$

Die niedrigste Ordnung in Q liefert einfach $Q_0 = (\pi^2/2d^3) \langle |f|^2 \rangle \sum_{n=1}^{n_c} n^2$. Sie ist für $k_F Q \ll 1$ gültig.

Die Leitfähigkeit kann durch Einsetzen der Green-Funktion in die Kubo-Formel ermittelt werden, nach einiger Rechnung folgt als Ergebnis:

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{\lambda}{2\pi k_F N_e d^2} \sum_{n=1}^{n_c} q_n (k_F^2 - q_n^2) \frac{(1-R)(1-E_d)}{1-RE_d}. \quad (2.20)$$

N_e bezeichnet die Anzahl der Elektronen und $E_d = \exp(-k_F d/q_n \lambda)$. Der Parameter R hat eine analoge Bedeutung zur Theorie von Fuchs und Sondheimer, nämlich die eines Reflektionsparameters. Allerdings ist er hier nicht ad-hoc eingeführt, sondern kann aus mikroskopischen Parameter berechnet werden. In niedrigster Ordnung in Q ergibt sich:

$$R = \left(\frac{1 - \bar{k} Q_0}{1 + \bar{k} Q_0} \right)^2. \quad (2.21)$$

Die Formel (2.20) ist bereits sehr ähnlich zum Resultat von Fuchs und Sondheimer, allerdings gibt es zwei wesentliche Unterschiede. Zum einen hat die Konstante R , wie bereits erwähnt, eine mikroskopische Grundlage, zum anderen ist im vorliegenden Fall der transversale Impuls quantisiert.

Die Quantisierung des transversalen Impulses ist nur im Limes dünner metallischer Filme, also für $k_F d \ll 1$ von Bedeutung. Im entgegengesetzten Limit kann q_n durch $q_n/k_F = u \approx \cos \theta$ mit θ als dem Einfallswinkel des Elektrons auf die Oberfläche ausgedrückt werden. In diesem Fall erhält man das Fuchs-Sondheimer

Resultat für σ . R ist aber weiterhin keine reine Konstante, sondern enthält eine Winkelabhängigkeit (über θ muss weiterhin integriert werden):

$$R|_{k_F d \gg 1} = \left(\frac{1 - uk_F Q}{1 + uk_F Q} \right)^2 \quad (2.22)$$

Im Quanten-Limit mit der Einschränkung, dass die Streuung durch die Oberflächenterme dominiert ist (also $d \ll \lambda$), kann der Reflektionsparameter durch $R \approx 1 - 4q_n Q_0$ in niedrigster Ordnung in Q genähert werden. Dann ergibt sich für die Leitfähigkeit:

$$\sigma \approx \frac{e^2}{2\pi k_F d} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{k_F^2 - q_n^2}{\lambda^{-1} + 4q_n^2 Q_0 / (k_F d)}. \quad (2.23)$$

Für den Fall ohne Störstellenstreuung ($\lambda^{-1} = 0$) folgt durch Einsetzen von Q_0 sofort:

$$\sigma \approx \frac{e^2 d^5}{4\pi^5 \langle |f|^2 \rangle \sum_{n=1}^{n_c} n^2} \sum_{n=1}^{n_c} \frac{k_F^2 - q_n^2}{n^2}. \quad (2.24)$$

Dies ist äquivalent zum Ausdruck von Fishman und Calecki, sehen wir von einem Faktor 2 ab, da hier zwei raue Oberflächen betrachtet werden.

Da im vorliegenden Fall die Streuung durch Störstellen und die Oberflächenstreuung unkorreliert sind, ist der Ausdruck 2.20 auch analog zum Ergebnis der Arbeit von Trivedi und Ashcroft.

Kapitel 3

Landauer-Büttiker-Formalismus

Um sich dem Problem der Berechnung von Widerständen in 2-dimensionalen Elektronengasen widmen zu können, muss zunächst einmal das theoretische Fundament gelegt werden, in welchem die Rechnungen durchgeführt werden können.

Dies ist in unserem Fall die Landauer-Büttiker-Theorie (LB) für allgemeine Leiter. Es wäre sicher auch denkbar zu versuchen, über generelle Zugänge wie die allgemeine nichtlokale Leitfähigkeit $\sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, Aussagen zu treffen, aber diese würden schnell in extrem schwierigen Rechnungen enden. Der LB-Formalismus hat die für unsere Zwecke sehr nützliche Eigenschaft, dass eben nicht lokale Stromdichten $\mathbf{j}(\mathbf{x})$, sondern totale Ströme I_n in den verschiedenen Zuleitungen betrachtet und durch das Streuproblem miteinander verknüpft werden.

3.1 Das Landauer-Problem zweier Zuleitungen

Zunächst ist es instruktiv, sich mit dem Fall von zwei Zuleitungen zu beschäftigen. Eine typische Konfiguration ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Weit weg von der Streuregion nehmen wir an, dass die Zuleitungen in einem Reservoir enden, welches durch ein chemisches Potenzial μ beschrieben werden kann. Die Leitungen sind ideal, und die Elektronen in ihnen haben alle dieselbe Energie μ wie das Reservoir, an das sie angeschlossen sind. Dabei ist die Energie durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\epsilon = \epsilon_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2M} \quad (3.1)$$

Dabei ist M die (effektive) Masse des Elektrons. ϵ_n ist die Energie der transversalen Bewegung, die durch ein eindimensionales Problem, in das die Begrenzung des Leiters eingeht, beschrieben wird. Die Wellenzahl in longitudinaler Richtung kann aus obiger Gleichung leicht bestimmt werden, ebenso die Geschwindigkeit $v_n = \hbar k_n / M$. Es gilt dafür:

$$v_n(\epsilon) = \sqrt{\frac{2}{M}(\epsilon - \epsilon_n)} \quad (3.2)$$

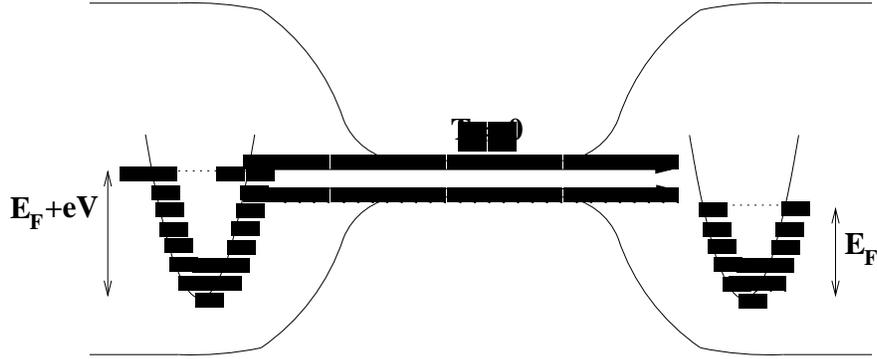


Abbildung 3.1: Eine Konfiguration von zwei Reservoirs und einer Streuregion. Links ist die Fermienergie durch das Anlegen einer Spannung V erhöht. Damit können einige Elektronenzustände (durch die Pfeile angedeutet) von links nach rechts transmittieren, denn die Anfangszustände sind besetzt und die Endzustände sind frei. Die Größe T_i hängt allerdings noch von der genauen Beschaffenheit der Streuregion ab.

Die Geschwindigkeit v_n bestimmt auch die eindimensionale Zustandsdichte D_n der Elektronen im Kanal n über

$$D_n(\epsilon) = \frac{1}{\hbar v_n(\epsilon)} \quad (3.3)$$

Es ist offensichtlich, dass $\epsilon > \epsilon_n$ gelten muss, damit die Geschwindigkeit einen reellen Wert annimmt. Wir nennen die Kanäle n , für die diese Bedingung erfüllt sind, „offene Kanäle“. Demgegenüber sind „geschlossene Kanäle“ durch $\epsilon < \epsilon_n$ gekennzeichnet. Im Falle von unendlich hohen Wänden können die transversalen Eigen-Energien problemlos analytisch angegeben werden:

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2 M b^2}. \quad (3.4)$$

Dabei ist b die Breite des Leiters.

Nun können wir uns mit der Anordnung zweier Zuleitungen beschäftigen. Eine angelegte Spannung V erhöht das chemische Potenzial der Zuleitung 1 auf $\mu + eV$, das andere chemische Potenzial bleibt auf μ . Ohne jetzt genauer auf das Streuproblem einzugehen, können wir feststellen, dass ein Teil T_n der Elektronen transmittiert werden wird und schließlich im zweiten Reservoir aufgenommen wird. Der Transmissionskoeffizient T_n ist abhängig vom Streuproblem und im Allgemeinen für jeden Kanal n und darüberhinaus für jede Energie verschieden.

Damit kann nun der Strom, der von diesem Kanal herrührt, leicht berechnet werden, er beträgt:

$$I_n = e \int_{\mu}^{\mu+eV} d\epsilon D_n(\epsilon) v_n(\epsilon) T_n(\epsilon). \quad (3.5)$$

Bei Temperatur $T = 0$ liegt das chemische Potenzial bei der Fermienergie, im Grenzfall $V \rightarrow 0$ brauchen dann auch nur Größen an der Fermienergie betrachtet zu werden. Dann vereinfacht sich der Strom wegen (3.3) zu

$$I_n = \frac{e^2 V}{\hbar} T_n. \quad (3.6)$$

Der Gesamtstrom ist dann gegeben durch die Aufsummation aller einzelnen Kanäle $I = \sum_n I_n$. Es ist bequemer, anstelle des Stroms I den Leitwert G , der über $I = G V$ definiert ist, zu betrachten. Für diesen gilt dann:

$$G = \frac{2 e^2}{h} \sum_n T_n, \quad (3.7)$$

wobei ein Faktor 2 für die Spin-Entartung hinzugenommen wurde. Für den Spezialfall eines idealen Leiters gilt nun, dass $T_n = 1$, falls $\mu < \epsilon_n < \mu + eV$ und $T_n = 0$ sonst. Daraus folgt sofort, dass der Leitwert G quantisiert ist und dass ein Leitwertquantum den Wert $2e^2/h$ hat. Interessanterweise ist der Leitwert eines idealen Leiters also nicht unendlich, sondern hat auf jeden Fall einen endlichen Wert. Im Umkehrschluss folgt demnach auch sofort, dass der Widerstand dieses Leiters $R = 1/G$ auf keinen Fall gleich Null ist. Obwohl es also keine Störstellen, Randstreuungseffekte oder ähnliches gibt, ist ein endlicher Widerstand vorhanden, der auch nicht von der Geometrie des Leiters (Dicke, Länge etc.) abhängt. Es handelt sich um einen reinen Kontaktwiderstand, der allein durch die beiden Kopplungen an die zwei Reservoirs verursacht wird.

3.2 Büttiker-Formalismus

In unseren Anwendungen brauchen wir neben den beiden Zuleitungen, durch die die Elektronen in das ungeordnete Gebiet hinein- und hinausfließen, nun noch zwei weitere, die die anliegende Spannung, also jeweils das lokale elektrochemische Potenzial, messen. Im makroskopischen Fall müssen diese nicht weiter betrachtet werden. Im mesoskopischen Fall sind diese zwei Leiter allerdings qualitativ von den beiden stromtragenden Zuleitungen nicht mehr zu unterscheiden. Daher gibt es viele mögliche Probleme bei der Betrachtung dieser Anordnung (Datta 1995), zum Beispiel Quanteninterferenzeffekte oder das Problem, dass man normalerweise gar nicht zwei identische Messleiter im Experiment zur Verfügung hat.

Die Formulierung von Büttiker (1986) erlaubt es nun, alle Leiter, stromtragend oder nicht, direkt durch Ströme und angelegte Spannungen zu beschreiben, ohne die interne Struktur des Streubereichs näher zu betrachten. Alle vier Zuleitungen werden gleich behandelt und die oben abgeleitete Formel im Zwei-Leitungs-Fall (3.6) kann sofort auf mehrere (in unserem Fall: vier) Leitungen erweitert werden:

$$I_n = \frac{2e}{h} \left((1 - R_n) \mu_n - \sum_{m \neq n} T_{nm} \mu_m \right) \quad (3.8)$$

Dabei laufen die Indizes m und n über die Zuleitungen und die Größen T_{mn} sind Transmissionskoeffizienten ganz analog zum vorigen Fall. Allerdings bezeichnen die Indizes nicht mehr die einzelnen Kanäle, über diese ist bereits summiert worden. Sie beschreiben, welcher Anteil der Elektronen aus Zuleitung n in m ankommt. Man beachte die Reihenfolge der Indizes, der Elektronentransfer findet also vom zweiten zum ersten Buchstaben statt. Die allgemeinste Form von Transmissionskoeffizienten, die wir später noch kennenlernen werden, hat vier Indizes, zwei für die Zuleitungen und zwei für die Kanäle. R_n bezeichnet den Reflektionskoeffizienten, also den Anteil der Elektronen aus Zuleitung n , die in diese wieder zurückgestreut werden.¹

Betrachten wir nun eine Anordnung, in der ein Strom I_1 in Leitung 1 gegeben wird und aus 3 herauskommt, sowie einen zweiten Strom I_2 (hinein in 2, hinaus aus 4), so drückt Gleichung (3.8) diese zwei Ströme als Differenzen der Spannungen V_i , bzw. Fermienergien $\mu_i = eV_i$ aus:

$$I_1 = \frac{2e^2}{h} (\alpha_{11}(V_1 - V_3) - \alpha_{12}(V_2 - V_4)) \quad (3.9)$$

$$I_2 = \frac{2e^2}{h} (\alpha_{21}(V_1 - V_3) - \alpha_{22}(V_2 - V_4)) \quad (3.10)$$

Eine einfache Rechnung ergibt die Koeffizienten α_{ii} :

$$\alpha_{11} = (1 - R_1) - \frac{1}{S}(T_{14} + T_{12})(T_{41} + T_{21}) \quad (3.11)$$

$$\alpha_{12} = \frac{1}{S}(T_{12}T_{34} - T_{14}T_{32}) \quad (3.12)$$

$$\alpha_{21} = \frac{1}{S}(T_{21}T_{43} - T_{23}T_{41}) \quad (3.13)$$

$$\alpha_{22} = (1 - R_2) - \frac{1}{S}(T_{21} + T_{23})(T_{32} + T_{12}) \quad (3.14)$$

mit

$$S = T_{12} + T_{14} + T_{32} + T_{34} = T_{21} + T_{41} + T_{23} + T_{43}. \quad (3.15)$$

Nehmen wir an, der Strom fließe von 1 nach 3, während 2 und 4 die Messleitungen seien. Dann werden zwei Potenziale μ_2 und μ_4 gemessen, I_2 ist Null, I_1 ist ungleich Null. Aus der Bedingung $I_2 = 0$ kann durch Einsetzen in (3.10) $(V_2 - V_4)$ durch die andere Spannungsdifferenz ausgedrückt und in Gleichung (3.9) eingesetzt werden. Dadurch kann der gemessene Widerstand $R_{13,24}$ in den α_{ij} geschrieben werden als

$$R_{13,24} = \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}}. \quad (3.16)$$

¹Hierbei werden die Vorzeichen der Ströme wie in der Originalarbeit von Büttiker so gewählt, dass sie ins Streugebiet hineingehen, dadurch unterscheiden sich z.B. die Formeln um ein globales Minuszeichen von Zwerger (1998)

Die ersten beiden Indizes des Widerstandes geben die beiden Zuleitungen an, durch die der Strom zu- bzw. abfließt, die beiden anderen bezeichnen die beiden Zuleitungen, welche die Spannung messen. Genauso kann schließlich jeder gewünschte Widerstand $R_{mn,kl}$ mit Strom von m nach n fließend und Spannungsmessungen in k und l analog berechnet werden. Es ergibt sich:

$$R_{mn,kl} = \frac{h}{2e^2} \frac{T_{km}T_{ln} - T_{kn}T_{lm}}{D}. \quad (3.17)$$

D ist dabei die Subdeterminante der Matrix der T_{ij} und R_i , nachdem ein Eigenvektor zum Eigenwert Null herausprojiziert wurde. Dieser hängt mit der Möglichkeit zusammen, eine beliebige Spannung zu allen vier Spannungen zu addieren, ohne physikalische Änderungen hervorzurufen. Dann ergibt sich D eindeutig:

$$D = \left(\frac{h}{2e^2} \right)^2 (\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}) S. \quad (3.18)$$

Damit können alle gewünschten Widerstände berechnet werden, wenn die verschiedenen Transmissionskoeffizienten bekannt sind.

3.2.1 Die Streumatrix und ihre Berechnung durch Green-Funktionen

Nachdem die Berechnung der Widerstände auf die Transmissionskoeffizienten zurückgeführt worden ist, stellt sich nun die Frage, wie diese zu erhalten sind. Sie hängen vom mikroskopischen Streuproblem ab.

Wie wir bereits gesehen haben, nehmen wir weit weg von der Streuregion an, dass sich transversale Eigenmoden ausbilden, die in longitudinaler Richtung einfache ebene Wellen sind. Die Moden können zum Beispiel nach ihrer Energie und der Zuleitung, zu denen sie gehören, klassifiziert werden. Weiterhin können sie nach der Richtung des \mathbf{k} -Vektors nach einlaufenden und auslaufenden Moden unterschieden werden.

Ein nützliches Konzept zur Darstellung des Streuproblems ist die Streumatrix. Sie verknüpft die Amplituden der auslaufenden Moden (b_i) mit denen der einlaufenden (a_i) über

$$b_n = \sum_m s_{nm} a_m. \quad (3.19)$$

Die Matrix hat die Dimension $M_{tot} \times M_{tot}$, wobei M_{tot} die Anzahl aller Moden in allen Leitungen bezeichnet. Die Transmissionskoeffizienten, die ja die globalen Widerstände bestimmen, sind einfach mit den Einträgen der Streumatrix verknüpft. Es gilt nämlich:

$$T_{nm} = |s_{nm}|^2. \quad (3.20)$$

Während die Streumatrix die Verknüpfung zwischen den verschiedenen Zuleitungen herstellt, enthalten Green-Funktionen weitergehende Informationen. Sie

beschreiben die Antwort an einem beliebigen Ort im System auf eine Störung oder Anregung an einer beliebigen anderen. Dies ist ein extrem mächtiges Konzept und hat vor allem bei der Berechnung wechselwirkender Modelle gute Dienste geleistet. Obwohl wir hier ein im Inneren des Leiters wechselwirkungsfreies System betrachten – die Streuung wird ja nur durch die Wände gegeben – liefert der Formalismus mit Green-Funktionen auch hier wertvolle Vereinfachungen und macht die Rechnungen komfortabler.

Eine Green-Funktion wird hier als Lösung der folgenden Differenzialgleichung definiert:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [\langle \mathbf{r} | E - H | \mathbf{r}' \rangle]^{-1}, \quad (3.21)$$

dabei ist H der Hamilton-Operator des Problems.

Bisher ist die Lösung der Gleichung nicht eindeutig, dazu sind weitergehende Annahmen, z.B. die Festlegung von Randbedingungen, nötig. Physikalisch erwarten wir bei einer Anregung, dass sie an den anderen Orten zu einer Antwort führt, die zeitlich hinter der Anregung liegt.² Diese Annahme kann in die Differenzialgleichung eingebaut werden, indem ein zusätzlicher infinitesimaler imaginärer Summand hinzugefügt wird. Dann lautet die Definition (vgl. 3.21)

$$G^{ret}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [\langle \mathbf{r} | E - H + i\eta | \mathbf{r}' \rangle]^{-1}. \quad (3.22)$$

Eine solche Green-Funktion bezeichnet man als retardiert, wie auch durch den zusätzlichen Superscript kenntlich gemacht. Dabei muss gelten: $\eta > 0$. Der entgegengesetzte Fall eines negativen imaginären Summanden führt zur sogenannten avancierten Green-Funktion. Diese zeichnet sich dadurch aus, dass alle Antworten auf Störungen zeitlich *vor* derselben liegen. Da wir in Zukunft nur noch die retardierte Green-Funktion benötigen, wird diese im folgenden kurz als Green-Funktion bezeichnet.

Eine Umformung ergibt sofort folgende, ebenfalls bekannte, Darstellung der Green-Funktion:

$$[E - H + i\eta] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.23)$$

Würde die rechte Seite Null lauten, wäre obige Gleichung einfach die Schrödinger-Gleichung. Die rechte Seite impliziert die Anregung bei $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$.

Eine dritte Darstellung der Green-Funktion ist eine Entwicklung in Eigenfunktionen. Wenn die vollständigen Eigenfunktionen $\psi_a(\mathbf{r})$ des Hamilton-Operators, definiert durch

$$H\psi_a(\mathbf{r}) = \epsilon_a\psi_a(\mathbf{r}), \quad (3.24)$$

bekannt sind, dann läßt sich die Green-Funktion auch ausdrücken als:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_a \frac{\psi_a(\mathbf{r})\psi_a^*(\mathbf{r}')}{E - \epsilon_a + i\eta}. \quad (3.25)$$

²Dies wird als Kausalität bezeichnet. Eine physikalische Reaktion kann zeitlich nur nach ihrer Ursache liegen.

Dies können wir relativ einfach durch eine Entwicklung der Green-Funktion in Eigenfunktionen bei \mathbf{r} sehen:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_a C_a(\mathbf{r}') \psi_a(\mathbf{r}). \quad (3.26)$$

Durch Einsetzen in (3.23) erhalten wir dann sofort:

$$\sum_a (E - \epsilon_a + i\eta) C_a(\mathbf{r}') \psi_a(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.27)$$

da der Hamilton-Operator nur auf \mathbf{r} wirkt. Durch Ausnutzen der Orthogonalitäts-Relationen für die Eigenfunktionen erhalten wir das oben genannte Ergebnis für die Green-Funktion.

Als Beispiel für die Berechnung einer Green-Funktion betrachten wir in Anhang A einen zweidimensionalen perfekten, in x -Richtung unendlichen langen Leiter ohne Magnetfeld. Für diese erhält man (vgl. A.6)

$$G(x, y, x', y') = \sum_m -\frac{i}{\hbar v_m} \chi_m(y) \chi_m(y') \exp[ik_m |x - x'|]. \quad (3.28)$$

χ_m ist die m -te Eigenmode des Leiters.

Mit Hilfe der Green-Funktion kann nun einfach auf die Streumatrix geschlossen werden (Fisher und Lee 1981). Dazu kann man sich überlegen, dass weit weg vom Streugebiet die transversale Dimension der Leiter vernachlässigt werden kann. Eine Anregung in Leiter n führt dann wie im eindimensionalen Fall zu zwei Wellen, die sich in entgegengesetzte Richtungen ausbreiten, die Welle mit Amplitude A_n^- weg vom Streugebiet und die Welle mit Amplitude A_n^+ hin zu den anderen Leitern. Diese wird schliesslich in die anderen Leitern m gestreut. Die Green-Funktion zwischen Punkten (x_n, y_n) und (x_m, y_m) , die beide als weit weg von der Streuregion liegend angenommen werden, sollte dann nur von den beiden y -Werten (also der transversalen Koordinate in jedem Leiter) abhängen. In x -Richtung liegen ja ebene Wellen vor. Die Green-Funktion $G_{mn}(x_m, y_m, x_n, y_n)$ sieht dann bei einer Mode pro Leiter folgendermaßen aus:

$$G_{mn} = \delta_{mn} A_n^- + s_{mn} \sqrt{v_n/v_m} A_n^+. \quad (3.29)$$

Der zusätzliche Faktor der Wurzeln der Geschwindigkeiten muss berücksichtigt werden, weil möglicherweise die transversalen Moden verschiedene Eigenenergien haben, oder die verschiedenen Kontakte, an die die Leitern angekoppelt sind, unterschiedliche Fermi-Energien tragen. Daher wird eine Normierung durchgeführt, dass in jeder Mode ein identischer Beitrag zum Strom zu finden ist.

Kommen nun zusätzlich noch verschiedene Moden p in Leiter n und q in m vor, so erweitert sich obige Formel zu:

$$G_{mn} = \sum_{p \in n} \sum_{q \in m} \left(\delta_{qp} A_p^- + s_{qp} \sqrt{v_p/v_q} A_p^+ \right). \quad (3.30)$$

Die Amplituden A_p^+ bzw. A_p^- für diesen quasi-eindimensionalen Fall sind dieselben wie oben beim strikt eindimensionalen Fall (A.4). Damit folgt für die Green-Funktion:

$$G_{mn} = \sum_{p \in n} \sum_{q \in m} -\frac{i}{\hbar \sqrt{v_p v_q}} \chi_p(y_n) (\delta_{pq} + s_{pq}) \chi_q(y_m). \quad (3.31)$$

Zur Invertierung der Gleichung, um einen Ausdruck für die Elemente der Streumatrix zu erhalten, können wir beide Seiten mit $\chi_p(y_n) \chi_q(y_m)$ multiplizieren und anschließend über beide Leiterquerschnitte integrieren. Wegen der Orthogonalität der transversalen Funktionen χ_p erhalten wir schließlich:

$$s_{pq} = -\delta_{pq} + i\hbar \int dy_m \int dy_n \chi_q(y_m) G_{mn}(y_m, y_n) \chi_p(y_n) \quad (3.32)$$

Diese Formel ist das zentrale Ergebnis dieses Kapitels. Es verbindet die Green-Funktion, die, wie wir im nächsten Kapitel sehen werden, direkt durch eine Simulation bestimmt werden kann, mit globalen Größen wie der Streumatrix oder den Transmissionskoeffizienten. Diese bestimmen aber wiederum die globalen, im Experiment messbaren Widerstände via (3.17).

Da wir die Magnetfeldabhängigkeit der Widerstände untersuchen wollen, ist es noch nötig, sich über eventuelle Schwierigkeiten bei Rechnungen im Magnetfeld Gedanken zu machen. Die bedeutendste Änderung bei einem globalen Magnetfeld besteht darin, dass die transversalen Eigenfunktionen in den Zuleitungen nicht mehr einfach zu bestimmen sind und auch nicht mehr eine orthogonale Eigenbasis bilden. Dennoch kann eine der Fisher-Lee-Formel (3.32) entsprechende Relation zwischen den Transmissionsamplituden und Green-Funktionen auch bei globalem Vektorpotential abgeleitet werden. (siehe Formel (88) in Baranger und Stone (1989b)) Eine weitere Schwierigkeit bei der Behandlung zweidimensionaler Probleme ist die richtige Eichung des Vektorpotentials. Baranger und Stone (1989b) haben (siehe Anhang E) eine explizite Eichung angegeben, die in jeder gerade von der Streuregion wegführenden Zuleitung zu einer Landau-Eichung führt. In dieser Eichung ist das Vektorpotential proportional zur transversalen Koordinate in jeder Zuleitung, die Richtung ist von der Streuregion wegführend.

Solch eine Eichung ist von analytischem Interesse, da sie es erlaubt, bei vollständiger Magnetfelddurchdringung Resultate zu erzielen. Dennoch ist sie in praktischen Rechnungen de facto extrem schwer zu implementieren, da sie nur asymptotisch (also unendlich weit von der Streuregion entfernt) exakt definiert ist. Daher werden wir uns im weiteren Verlauf der Arbeit mit folgendem Trick behelfen: In genügendem Abstand werden wir das Magnetfeld in allen Zuleitungen gleichförmig langsam abklingen lassen. Dann können wir beim Abschneiden der Zuleitungen von einem magnetfeldfreien System ausgehen und die Green-Funktion und die transversalen Eigenfunktionen entsprechend bestimmen.

Kapitel 4

Numerische Simulation

4.1 Diskretisierung des Hamilton-Operators und der Schrödinger-Gleichung

Um gemäß (3.22) die Green-Funktion für ein gegebenes Problem berechnen zu können, muss der Hamilton-Operator invertiert werden. Die typische Methode, um dies zu erreichen, ist die Diskretisierung der Geometrie zu einem Gitter, welches die Geometrie des zu betrachtenden Leiters so gut wie möglich nachbildet.

Durch eine solche Diskretisierung wird auch die Green-Funktion und der Hamilton-Operator diskretisiert, beide werden zu (gegebenenfalls noch unendlichen) Matrizen, eine zusätzliche Trunkierung des Problems zu einer endlichen Geometrie sorgt außerdem noch für eine endliche Dimension der Matrizen. Damit werden diese in einer numerischen Simulation handhabbar.

Wie kann nun der Hamilton-Operator auf einem solchen Gitter dargestellt werden? Da im Folgenden alle Rechnungen auf zweidimensionalen Gittern ausgeführt werden, betrachten wir einen 2-d Hamilton-Operator mit einem unbestimmten Potential $V(x, y)$ und einem Magnetfeld $\mathbf{B}(x, y)$, welches durch ein Vektorpotenzial $\mathbf{A}(x, y)$ erzeugt wird. Dieser lautet dann:

$$H(x, y) = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(x, y) \quad (4.1)$$

Wir wählen die Koordinaten so, dass ohne Beschränkung der Allgemeinheit das Magnetfeld in z -Richtung liegt. Für das Vektorpotenzial benutzen wir die Landau-Eichung und erhalten so $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_x$. Damit ergibt sich für den Hamilton-Operator:

$$\begin{aligned} H(x, y) &= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \partial_x - eBy \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \partial_y \right)^2 \right] + V(x, y) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\partial_x^2 - \partial_y^2 + 2i \frac{e}{\hbar} By \partial_x + \frac{e^2}{\hbar^2} y^2 B^2 \right) + V(x, y). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Wenn wir nun die Diskretisierung – eine Abbildung auf ein quadratisches Gitter mit Abstand a als Gitterkonstante – durchführen, müssen wir neben der Abbildung der Wellenfunktion

$$\psi(x, y) \rightarrow \psi(na, ma) =: \psi_{n,m} \quad (4.3)$$

auch die Ableitungen diskretisieren. Dies geschieht durch eine Näherung für den Fall, dass a klein ist:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=(n+1/2)a, y=ma} \rightarrow \frac{1}{a} [\psi_{n+1,m} - \psi_{n,m}], \quad (4.4)$$

beziehungsweise für den Fall, dass die Ableitung an einem Gitterplatz genommen werden soll:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=na, y=ma} \rightarrow \frac{1}{2a} [\psi_{n+1,m} - \psi_{n-1,m}], \quad (4.5)$$

Dies gilt natürlich genauso für eine Ableitung in y -Richtung. Für die zweite Ableitung ergibt sich entsprechend:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right|_{x=na, y=ma} &\rightarrow \frac{1}{a} \left[\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=(n+1/2)a, y=ma} - \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=(n-1/2)a, y=ma} \right] \\ &\rightarrow \frac{1}{a^2} (\psi_{n+1,m} - 2\psi_{n,m} + \psi_{n-1,m}). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Durch Einsetzen in (4.2) erhalten wir dann für die Schrödinger-Gleichung folgendes:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2ma^2} &[(4 + V_{nm}) \psi_{n,m} - \psi_{n-1,m} - \psi_{n+1,m} - \psi_{n,m-1} - \psi_{n,m+1} \\ &+ i \frac{e}{\hbar} B m a^2 (\psi_{n+1,m} - \psi_{n-1,m}) - \frac{e^2}{\hbar^2} B^2 m^2 a^4 \psi_{n,m}] = E \psi_{n,m}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Wenn wir nun im B^2 -Term die Ersetzung

$$\psi_{n,m} \rightarrow \frac{1}{2} (\psi_{n+1,m} + \psi_{n-1,m})$$

durchführen, dann können wir folgende Näherung machen, indem wir Terme mit $\psi_{n+1,m}$ bzw. $\psi_{n-1,m}$ zusammenfassen:

$$1 + i \frac{e}{\hbar} m a^2 B - \frac{e^2}{\hbar^2} B^2 m^2 a^4 \approx \exp \left(i m \frac{e}{\hbar} B a^2 \right).$$

Dieser sogenannte Peierls-Faktor ist korrekt bis zur zweiten Ordnung und sollte für geringe Magnetfelder oder für kleine Diskretisierungen ausreichend sein. Im

Exponenten ist das Verhältnis des Magnetflusses durch ein Quadrat des Gitters Ba^2 zum „Flussquant“ h/e erkennbar. Wir nennen diesen Faktor α , also

$$\alpha = \frac{e}{h}Ba^2. \quad (4.8)$$

Damit erhalten wir als Ergebnis folgenden Hamilton-Operator als linke Seite von (4.7):

$$H\psi = (4 + V_{nm})t\psi_{n,m} - \exp(2\pi im\alpha)t\psi_{n-1,m} - \exp(-2\pi im\alpha)t\psi_{n+1,m} - t\psi_{n,m-1} - t\psi_{n,m+1}. \quad (4.9)$$

Die Energieskala ist durch

$$t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

festgelegt. Im folgenden werden alle Energien in Einheiten von t angegeben werden. Da t das Matrixelement zwischen benachbarten Gitterplätzen im Hamilton-Operator – wie aus (4.7) leicht zu sehen – repräsentiert, wird es oft auch als Überlapp- oder Hüpfmatrixelement bezeichnet. Wie (4.7) zeigt, hat der Hamilton-Operator nur von Null verschiedene Matrixelemente für Gitterplätze, die höchstens einen Gitterabstand a voneinander entfernt sind. Damit handelt es sich um ein sogenanntes Tight-Binding-Modell, ein oft gebrauchtes Modell in der Theorie der kondensierten Materie, welches sowohl analytisch als auch numerisch zu behandeln ist.

4.2 Die Selbstenergie

Ein grundlegendes Problem ist aber bisher noch ungelöst. Zwar können wir nun eine Matrix aufstellen, die den Hamilton-Operator abbildet, allerdings ist diese noch immer von unendlicher Dimension, da wir die unendlichen Zuleitungen im Problem berücksichtigen müssen. Abhilfe schafft hier eine Methode, die sich ebenfalls in Datta (1995) findet: ein Abschneiden der unendlichen Leiter und deren Berücksichtigung mit Hilfe einer Selbstenergie. Dabei erscheint der Term „Selbstenergie“ an dieser Stelle nur aufgrund der formalen Analogie zu der Selbstenergie im Formalismus von wechselwirkenden Fermi-Systemen.

Hier ist der entscheidende Punkt, dass die Green-Funktion für eine Zuleitung bekannt ist, bei der die Streuung ausgeschaltet ist, ebenso das Magnetfeld, und die ein einfaches Einschlusspotenzial besitzt. Damit kann dann die Streuregion an einer vom eigentlichen Streuproblem weit entfernten Stelle einfach abgeschnitten werden. Dann ist die „innere“ Matrix endlich gemacht worden. Sofern die Green-Funktion für die Zuleitungen analytisch bekannt ist (dies wird in unseren Rechnungen immer der Fall sein), müssen nur noch die Verbindungen zwischen beiden Stücken bestimmt werden. Dann ist ohne irgendeine Näherung die Green-Funktion des gesamten Problems durch Invertierung einer endlich-dimensionalen Matrix berechenbar.

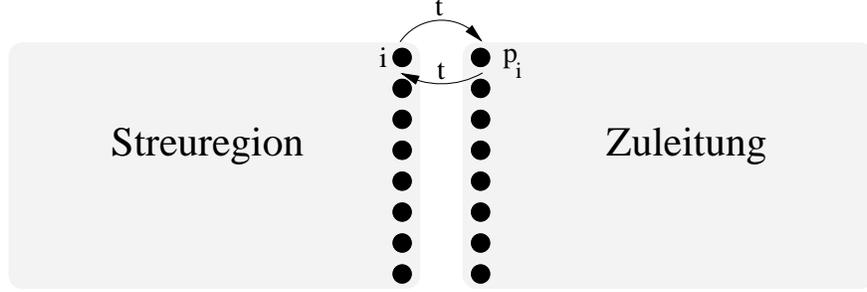


Abbildung 4.1: Die Selbstenergie koppelt die letzten Sites i der Streuregion aneinander. Dies geschieht durch das Hüpfen in die angrenzende Zuleitung auf die Sites p_i und die Green-Funktion, die diese aneinander koppelt.

Bezeichnet G_Z symbolisch die Green-Funktion einer Zuleitung und H_Z deren Hamilton-Operator und ebenso G_s und H_s die Green-Funktion und den Hamilton-Operator der Streuregion, dann kann die obige Aussage folgendermaßen geschrieben werden:

$$\begin{bmatrix} G_Z & G_{Zs} \\ G_{sZ} & G_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E + i\eta)I - H_Z & \tau_p \\ \tau_p^+ & (E + i\eta)I - H_s \end{bmatrix}^{-1} \quad (4.10)$$

Dabei ist I eine Einheitsmatrix geeigneter Größe, G_{sZ} bzw. G_{Zs} stehen für die Teile der Green-Funktion, die zwischen beiden Systemen vermitteln und τ_p ist die Kopplungsmatrix zwischen Streuregion und Zuleitung. Diese hat einfach an benachbarten Orten Einträge von der Größe des Hüpfmatrixelements t , ansonsten ist sie Null.

Aus dem Auflösen des obigen Gleichungssystems erhält man folgende Gleichungen:

$$G_{Zs} = -g_Z \tau_p G_s \quad (4.11)$$

$$G_s = \left(E I - H_s - \tau_p^+ g_Z \tau_p \right)^{-1} \quad (4.12)$$

Dabei ist g_Z die Green-Funktion der Zuleitung:

$$g_Z = ([E + i\eta] I - H_Z)^{-1}.$$

Sofern g_Z analytisch bekannt ist, haben wir mit Gleichung (4.12) unser Ziel erreicht, ohne Näherung G_s als Inverse einer endlichen Matrix darzustellen. Ist dagegen g_Z nicht bekannt, ist das Problem nur verschoben, denn dann muss zur Bestimmung der Green-Funktion der Zuleitung weiterhin ein unendlich-dimensionales Problem bearbeitet werden.

Der Term $\tau_p^+ g_Z \tau_p$ ist mit der Definition von τ_p einfach

$$[\tau_p^+ g_Z \tau_p]_{ij} = t^2 g_Z(p_i, p_j),$$

der Term koppelt die Endsites, die an die Zuleitung angrenzen (siehe zu den Bezeichnungen auch die Abbildung 4.1). Wenn man jetzt die vernünftige Annahme macht, dass alle Zuleitungen genügend weit voneinander entfernt sind, so dass ihre Effekte einander nicht beeinflussen, können sie additiv behandelt werden.

Mit der Definition einer „Selbstenergie“ durch

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

wobei p die verschiedenen Zuleitungen zählt, kann die vollständige Green-Funktion nun in Analogie zum Fall wechselwirkender Elektronen wie folgt geschrieben werden:

$$G = (EI - H_s - \Sigma)^{-1}. \quad (4.13)$$

Als letzten Schritt müssen wir nun noch die Green-Funktion für eine quasi-eindimensionale Zuleitung berechnen. Dabei ist zu beachten, dass es sich hier nicht um den Fall eines unendlich langen Leiters handelt, den wir schon betrachtet haben. Hier geht es um einen halbusendlichen Leiter, der an einer Seite, nämlich der der Streuregion zugewandten, durch eine unendlich hohe Wand abgeschlossen ist.

Die Lösung für diese Green-Funktion berechnen wir im Anhang A.2. Sie lautet für zwei Punkte am Rand:

$$g_Z(p_i, p_j) = -\frac{1}{t} \sum_m \chi_m(p_i) \chi_m(p_j) \exp(i k_m a), \quad (4.14)$$

wobei, wie üblich, χ_m die Eigenfunktion und k_m die Wellenzahl der Mode m ist.

Das Endergebnis für diesen Abschnitt bildet schließlich die Selbstenergie für die Zuleitung p

$$\Sigma_p(i, j) = -t \sum_{m \in p} \chi_m(p_i) \chi_m(p_j) \exp(i k_m a). \quad (4.15)$$

4.3 Der numerische Algorithmus

Nun sind alle Teile zusammen, die für die Implementierung des numerischen Algorithmus zur Berechnung der einzelnen Widerstände nötig sind.

4.3.1 Die Berechnung von Hall- und Bend-Widerstand

Zunächst müssen wir die Geometrie festlegen und in einzelne Sites diskretisieren. Dabei wird der Hall-Widerstand R_H und der Bend-Widerstand R_B in einer Kreuz-Geometrie wie in Abbildung 4.2 gemessen. Dabei ist R_H in der Büttiker-Schreibweise (siehe S. 27) als $R_{13,24}$ und R_B als $R_{12,34}$ aufzufassen. Beide können parallel bestimmt werden, was in der Simulation auch immer der Fall war.

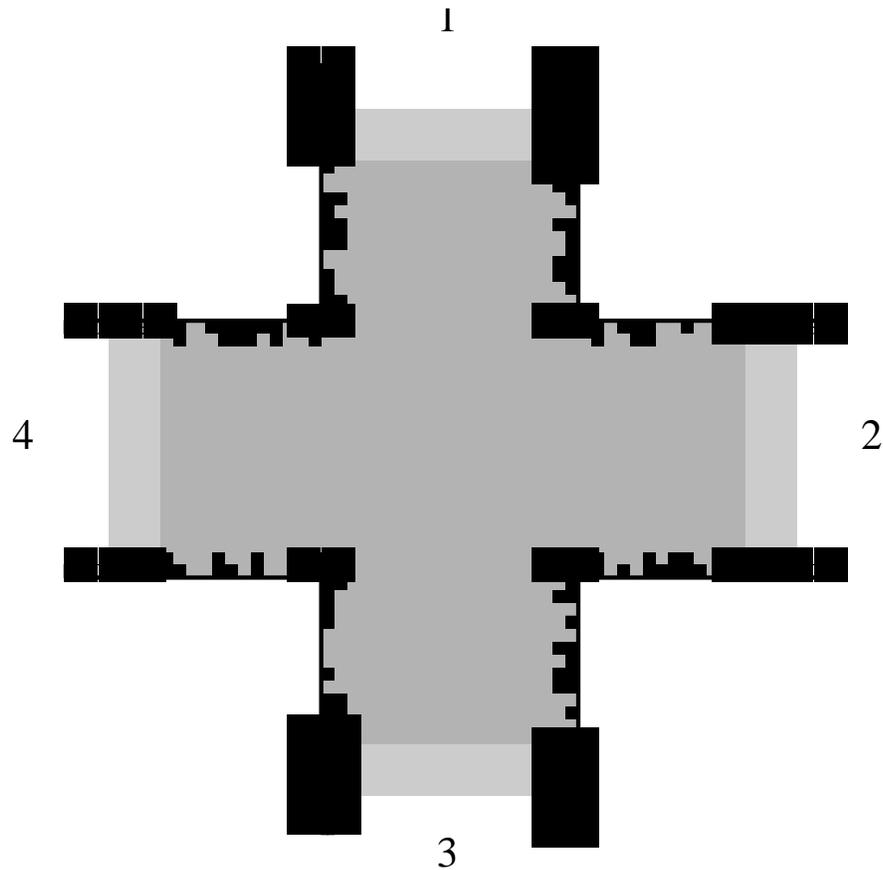


Abbildung 4.2: Kreuz-Geometrie zur Berechnung von Hall- und Bend-Widerstand.

Dabei hat eine Zuleitung typischerweise eine transversale Breite d von 15-20 Sites (Gitterplätze) und eine Länge l von 20-25 Sites. Wie bereits angesprochen, wird das Magnetfeld in den Enden auf Null gesetzt, damit in allen Leitern gleichzeitig eine Green-Funktion für eine unendlich lange weitere Leitung inklusive Reservoir mittels einer Selbstenergie angeschlossen werden kann. Diese Sites sind in der Abbildung weiß dargestellt. Im Streubereich (dunkelgrau dargestellt) hat das Magnetfeld volle Stärke. Um Unstetigkeiten und weitere unphysikalische Streuungen zu vermeiden, wurde noch ein Abfall des Magnetfeldes über 3-5 Sites (im Bild hellgrau dargestellt) dazwischen geschaltet. Der Abfall geschieht linear über die gesamte Länge dieses Bereichs.

Die (äußeren) Wände des Systems, also die Flächen außerhalb der schwarzen Begrenzungen der Abbildung, sind unendlich hoch, im Hamilton-Operator äußert sich dies durch ein Wegfallen der Hüpfamplitude t zu einem solchen Gitterplatz. Demgegenüber sind die schwarz gefärbten, eigentlichen Wände des Systems, nicht unendlich hoch. Da ja über eine Randunordnungschar gemittelt werden soll, darf das Hüpfen auf solche Randsites nicht von vornherein ausgeschlossen sein.

Daher wird den schwarz gefärbten Sites eine on-Site-Energie zugewiesen, die um mehrere Größenordnungen über der on-Site-Energie der inneren Plätze liegt (on-site-Energie im Bereich von wenigen Einheiten der Hüpfamplitude ($\approx (1-5)t$), die der Randsites bei $10000t$). Damit wird effektiv ausgeschlossen, daß ein Hüpfen auf solche Sites stattfindet.

Die Rauigkeit wird über eine zufällige Wahl des Randes erreicht. An den Rändern in den Bereichen mit abfallendem oder nicht vorhandenem Magnetfeld erhält fest jeweils der letzte Site an jeder Seite die hohe Strafenergie. Damit beträgt die effektive Breite der Zuleitungen zwei Sites weniger als a priori vorgegeben. Im restlichen Bereich (mit vollem Magnetfeld) wird für jeden Randplatz eine Zufallszahl (mit Hilfe des Algorithmus `ran2` aus Press et al. (1992)) zwischen 0 und 1 ermittelt. Liegt diese unterhalb eines festgelegten Parameters Δ , so erhält kein Randterm eine Strafenergie, bei einem Wert über Δ und unterhalb von $1 - \Delta$ ein, und oberhalb von $1 - \Delta$ zwei Randsites. Damit beträgt der Mittelwert der Breite der Zuleitungen $d - 2$ und die Varianz der Breite 2Δ , wobei d die vorgegebene Breite bei Initialisierung der Simulation ist.

Daneben werden auch Berechnungen durchgeführt, bei denen eine zufällige Unordnung dadurch modelliert wird, dass die on-Site-Energien zusätzlich zur oben gegebenen Energie noch eine zufälligen Summanden dazubekommen. Einzelheiten zu diesem Modell finden sich in Kapitel 6. Die Implementierung einer linearen Zufallsverteilung ist offensichtlich. Die Sites, bei denen die Unordnung auftritt, sind dieselben, die ein Magnetfeld ungleich Null haben. Ebenso wird die Unordnung über den gleichen Bereich langsam eingeschaltet.

Nachdem die Gitterplätze durchnummeriert sind, wird gemäß (4.9) der Hamilton-Operator gebildet. Dieser ist dann eine komplexe Matrix mit der Dimension $4 * l * d + d^2$. Bei den oben genannten Werten für Länge und Breite der Zuleitungen handelt es sich um ungefähr 1800-2100 Sites, die Matrix (gebildet aus double-Variablen) nimmt damit einen Speicherplatz von über 100MB ein.

Der wichtige und zeitraubende Schritt ist nun die Berechnung der Green-Funktion zwischen den einzelnen Sites. Dazu wird nach (4.13) zunächst die Matrix $EI - H_s - \Sigma$ mit der Selbstenergie Σ aus Gl. (4.15) gebildet. Die Inversion der Matrix erfolgt mit Hilfe eines LU-Verfahrens (mit kleineren Modifikationen aus Press et al. (1992) übernommen). Dabei wird die zu invertierende Matrix in zwei Faktoren zerlegt, von denen der eine eine in der unteren Hälfte triangulare (L = lower half), der andere eine in der oberen Hälfte triangulare (U = upper half) Matrix ist. Nach dieser Aufspaltung sind zwei Gleichungssysteme zu lösen, von denen jedes einzelne durch die Triangularität trivial ist. Obwohl jedes dieser Gleichungssysteme für jede Spalte neu zu lösen ist, muss nur einmal aufgespalten werden, daher ist der Aufwand erheblich geringer als bei anderen Verfahren. Darüberhinaus bietet der spezielle Algorithmus (Crout's Algorithmus mit partieller Pivotierung, siehe S. 46 in Press et al. (1992)) den Vorteil, dass die beiden neuen Matrizen anstelle der alten, ursprünglichen Matrix gespeichert werden. Dies spart natürlich erheblichen Speicherplatz, so dass dieser durch die

ursprüngliche Dimensionierung vollständig ausgenutzt werden kann. Der Algorithmus skaliert mit der Dimension der zu invertierenden Matrix N wie N^3 und ist daher einen Faktor 4 besser als ein vergleichbares Gaußsches Eliminationsverfahren.

Der Zeitaufwand auf einer normalen 600MHz-Alpha-Workstation beträgt bei kleineren Matrizen (1400 Sites) ungefähr 15 Minuten, bei größeren (2100 Sites) bereits deutlich über einer Stunde.

Nach der Berechnung der Green-Funktion können dann direkt durch Anwendung der Fisher-Lee Formel (3.32) die einzelnen Elemente der Streumatrix berechnet werden. Da die Breite der Zuleitungen durch $d-1$ gegeben ist, ergibt sich die Zahl der offenen Kanäle durch das maximale n , welches $\pi^2 n^2 / (d-1)^2 < \epsilon_F$ erfüllt, wenn die Fermi-Energie in Einheiten von t angegeben wird (ungefähr 10). Die Summation über die Absolutquadrate der Streumatrixelemente aller offenen Moden in zwei Zuleitungen ergibt dann die Transmissionskoeffizienten, aus denen wiederum durch Einsetzen in (3.17) die gesuchten Widerstände berechnet werden.

Nun muss noch eine Unordnungsmittelung durchgeführt werden. Dazu wird der obige Algorithmus mit jeweils anderem Rand mehrmals durchgeführt und der Mittelwert sowie die Standardabweichung der Widerstände ermittelt. Die Zahl der Iterationen ist allerdings a priori nicht einfach zu bestimmen. Die Standardabweichung hängt ganz entscheidend von der untersuchten Geometrie, dem Unordnungsparameter Δ oder der eingestellten Fermi-Energie ab. Daher muss die Anzahl der Durchläufe laufend den jeweiligen Parametern angepasst werden. Da viele der zu erwartenden Ergebnisse nahe am Wert Null liegen, macht es wenig Sinn, hier einen bestimmten relativen Fehler anzustreben. Also wurde versucht, in den einzelnen Runs auf genügend kleine absolute Fehler zu kommen. Diese lagen normalerweise in der Größenordnung von $0.007[h/e^2]$ bei den Widerstandsberechnungen. Dazu waren zwischen 50 und bis zu 500 Iterationen nötig. Offensichtlich nahm die Anzahl der Iterationen mit steigender Unordnung Δ zu, ebenso mit kleinerer Breite der Zuleitungen. Daher ergab sich hier ein diffiziles Wechselspiel in der Frage nach möglichst kurzer Rechenzeit, da bei größerer Geometrie zwar ein einzelner Durchlauf (deutlich) länger dauerte, aber insgesamt weniger Iterationen nötig waren. Insgesamt dauerten die wesentlichen Runs, auf die im Lauf dieser Arbeit eingegangen wird, mehrere Tage, oft über eine Woche (wohlgemerkt: pro einzelner Punkt = festgelegtes Magnetfeld). Es waren daher umfangreiche Rechnungen, typischerweise auf über 10 Prozessoren gleichzeitig durchzuführen, bis einzelne Kurven in den folgenden Kapiteln fertiggestellt waren.

4.3.2 Die Berechnung des longitudinalen Widerstands

Um den longitudinalen Widerstand R_L zu bestimmen, ist eine neue Geometrie erforderlich, welche in Figur 4.3 dargestellt ist. Ansonsten ist der Algorithmus genau derselbe.

Wie im Fall der Kreuz-Geometrie muss auch hier wieder das Magnetfeld in den Zuleitungen Null sein. Um eine möglichst lange Strecke zur Bestimmung des Widerstandes zu erhalten, musste leider aus Speicherplatz- und Rechenzeiterwägungen das Magnetfeld bereits in den Kreuzungsbereichen auf Null gesetzt werden. Die Strecke, auf der das Magnetfeld abfällt, hätte sonst in die Zuleitungen verlegt werden müssen, woraufhin diese mindestens eine Länge von 10 Gitterplätzen erreicht hätten. Es ist ja noch eine zusätzliche Strecke ohne Magnetfeld erforderlich, um eine Relaxation zu den feldfreien Eigenzuständen zu erreichen.

Die Randunordnung wurde wie im anderen Fall modelliert, sie tritt erst im vom Magnetfeld durchsetzten Bereich auf. Auch die Modellierung der zufälligen Unordnung der on-Site-Energien geschieht analog.

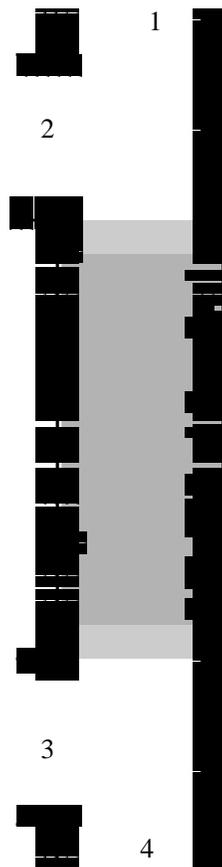


Abbildung 4.3: Geometrie zur Berechnung des longitudinalen Widerstands.

Kapitel 5

Der Quanten-Hall Effekt

5.1 Allgemeines zum Quanten-Hall Effekt

Bei der Betrachtung von Elektronen in zweidimensionalen Systemen kommen wir bei starken Magnetfeldern schnell in ein Regime, welches sich durch eine Quantisierung des Hall-Widerstandes und gleichzeitiger Reduktion des longitudinalen Widerstandes auf Null auszeichnet. Dies wird als Quanten-Hall Effekt bezeichnet (Chakraborty und Pietiläinen 1995; Prange und Girvin 1987). Experimentell wurde dieser Effekt zum ersten Mal von von Klitzing et al. (1980) in einem Silizium Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistor (Si-MOSFET) bei einem senkrechten Magnetfeld von $19 T$ beobachtet. Später wurde er auch noch in vielen anderen Materialien gefunden, unter anderem in einer GaAs-Heterostruktur (Tsui und Gossard 1981) oder einer InGaAs/InP-Heterostruktur (Nicholas et al. 1980).

Der integrale Quanten-Hall Effekt zeichnet sich durch Plateaus im Hall-Widerstand R_H oder in der Hall-Leitfähigkeit σ_H aus, die bei Werten $R_H = h/ne^2$ bzw. $\sigma_H = ne^2/h$ liegen, wobei n eine ganze Zahl ist. Zusammen mit einem dieser Plateaus in R_H fällt der longitudinale Widerstand R_L auf Null. Siehe dazu auch Abbildung 5.1. Im Plateauwert für R_H treten mit der Planckschen Konstante h und der Elementarladung e nur noch Naturkonstanten auf. Er ist extrem genau eingehalten, unabhängig vom verwendeten Material, von der Geometrie der Probe, von der Reinheit der Probe. Selbst die Art des zweidimensionalen Systems ist nicht wichtig, da der Effekt in einer Fülle von verschiedenen Halbleiter-Heterostrukturen beobachtet wurde. Dabei wurde der Wert der Hall-Konstante (auch „von Klitzing-Konstante“ genannt) $R_K = h/e^2$ mit einer Genauigkeit von 3.7×10^{-9} bestätigt, er liegt bei $R_K = 25812.807\Omega$ (Mohr und Taylor 2000). Dieser Wert ist per Definition exakt, und da er genauer messbar ist als jeder andere Widerstand, wurde das Widerstandsnormale über den Quanten-Hall Effekt definiert. Auch die Feinstrukturkonstante wird im 98-er CODATA-System physikalischer Größen über den Quanten-Hall-Effekt bestimmt (zu $\alpha^{-1} = 137.0360037(33)$), denn dieser besitzt die kleinste relative Ungenauigkeit aller Größen des CODATA-

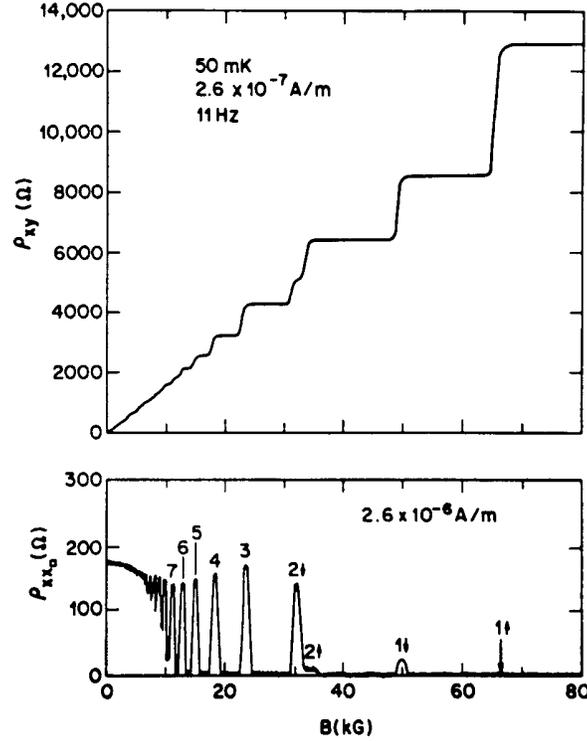


Abbildung 5.1: Experimentelle Daten zum Quanten-Hall-Effekt. Oben ist R_H , unten R_L gegen das Magnetfeld aufgetragen. In R_H zeigen sich die Hall-Plateaus bei gleichzeitigem Verschwinden von R_L . Nach Paalanen et al. (1982).

Systems (außer den exakten natürlich).

Um zu verstehen, wie es zu so präzise definierten Plateaus im Hall-Widerstand bei gleichzeitigem Verschwinden des longitudinalen Widerstands kommen kann, können wir uns der im letzten Kapitel eingeführten Landauer-Büttiker-Theorie bedienen. Zunächst sollten wir uns allerdings einige grundsätzliche Überlegungen zu Elektronen in starken Magnetfeldern machen.

Für ein Elektron mit effektiver Masse M in einem Vektorpotenzial A , welches ein Magnetfeld $B = \nabla \times A$ hervorruft, gilt folgender Hamilton-Operator:

$$H = \frac{1}{2M}(\Pi_x^2 + \Pi_y^2), \quad (5.1)$$

wobei der kinetische Operator Π durch $\Pi = -i\hbar\nabla + \frac{e}{c}A$ definiert ist. Die Bewegung findet auf einer Kreisbahn statt, die Zyklotron-Bewegung. Dies können wir am leichtesten nach der Ersetzung

$$X = x - \zeta \quad \text{und} \quad Y = y - \eta$$

mit

$$\zeta = \frac{c}{eB}\Pi_x \quad \text{und} \quad \eta = \frac{c}{eB}\Pi_y$$

sehen. Dabei stellen X und Y die Zentrumskoordinaten und ζ und η die Relativkoordinaten der Kreisbewegung dar. Die Frequenz der Bewegung ist die Zyklotron-Frequenz ω_c und der Radius wird durch die magnetische Länge l_B bestimmt, gegeben durch:

$$\omega_c = \frac{eB}{Mc} \quad \text{und} \quad l_B = \left(\frac{\hbar c}{eB} \right)^{1/2}$$

Der Hamilton-Operator transformiert sich schließlich zu

$$H = \frac{\hbar\omega_c}{2l_B^2}(\zeta^2 + \eta^2). \quad (5.2)$$

Wegen der Vertauschungsrelation $[\zeta, \eta] = -il_B^2$ können wir analog zum harmonischen Oszillator Operatoren a, a^+ definieren durch $a = 1/\sqrt{2}(\zeta + i\eta)l_B$ und erhalten mit $n = a^+a$, dass seine Eigenenergien diskrete sogenannte Landau-Level sind:

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (5.3)$$

Sie sind hochentartet, der Entartungsgrad N_s in einem endlichen System (Ausdehnung $L_x \times L_y$) wird durch die Anzahl der Flussquanten $\Phi_0 = hc/e$ im gesamten Fluss gegeben, also durch

$$N_s = \frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2}.$$

All diese Überlegungen gelten allerdings nur für ein perfektes System, bisher haben wir Einflüsse wie Störstellen sowie die Ränder vernachlässigt.

Bei Störstellen im System weichen die Landau-Levels auf, das heißt, die Zustandsdichte weist keine Delta-Peak-Struktur bei den Energien $\hbar\omega_c(n + 1/2)$ auf, sondern diese Delta-Peaks werden durch die Störstellen-Potenziale verschmiert (Wegner 1983). Dabei ergibt sich ein fundamentaler Unterschied zwischen den Mitten dieser Bänder rund um die Landau-Energie, wo die Energien von ausgedehnten Eigenzuständen zu finden sind, und den Schwänzen der Bänder, in denen sich lokalisierte Zustände befinden (Ono 1982). Eine genauere Erklärung kann durch Perkulationsrechnungen oder numerische Rechnungen erhalten werden.

Dies ändert sich, wenn die Ränder der endlichen Geometrie mit in Betracht gezogen werden. Halperin (1982) erkannte als erster, dass die Einschlusspotenziale wichtig werden. Dies kann näherungsweise durch ortsabhängige Landau-Niveaus beschrieben werden. Nehmen wir ein Potenzial in y -Richtung an, welches harte Wände bei y_1 und y_2 besitzt. (Genauere Rechnungen dazu finden sich z.B. bei MacDonald und Streda (1984).) Das Energiespektrum findet sich schematisch in Figur 5.2. Die Energien sind dann eine Funktion von

$$E = E(n, \omega_c, X),$$

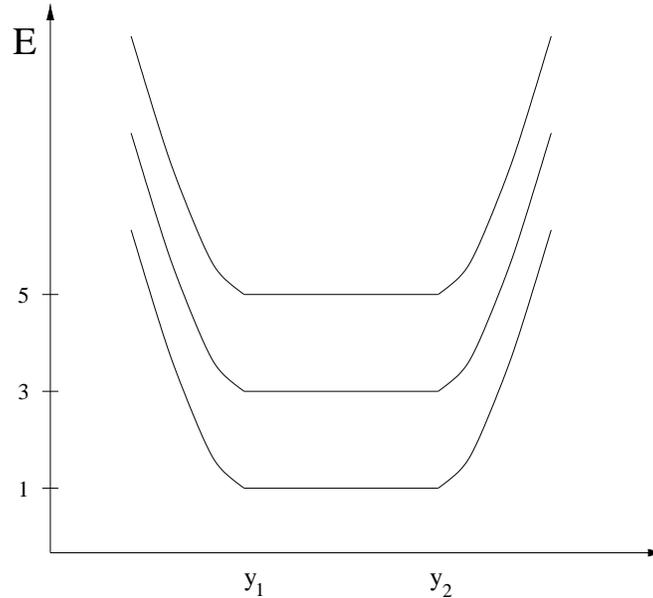


Abbildung 5.2: Die Energiestufen eines perfekten Leiters, aufgetragen gegen die transversale Koordinate y , bei Einschlusspotenzial zwischen y_1 und y_2 . Die Energie ist aufgetragen in Einheiten von $\hbar\omega/2$. Nach Halperin (1982).

wobei $X = -kl_B^2$ ist. Wir sehen, dass nahe am Rand die Energien anzusteigen beginnen. Bei gegebener Fermi-Energie wird diese die Energielevels nur am Rand schneiden, sofern nicht zufällig ein Landau-Niveau getroffen wird. Liegt E_F also in einem Bereich, in dem alle Zustände im Volumen lokalisiert sind, müssen die transporttragenden Moden am Rand liegen. Es kann nämlich gezeigt werden, dass ähnlich zum Fall von Bloch-Funktionen eine longitudinale Geschwindigkeit gegeben ist als

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dX} \frac{dX}{dk}.$$

Dabei ist an einem Rand dX/dk positiv und am anderen negativ. In der Mitte des Leiters ist diese Größe dagegen Null und die Geschwindigkeit verschwindet.

Klassisch kann man die Bewegung der Elektronen einfach kennzeichnen. In der Leiternmitte führen sie Kreisbahnen aus. Dagegen gibt es am Rand sogenannte „skipping orbits“, entlang derer Ladungstransport stattfindet (siehe Figur 5.3). Da die Zyklotronbahn nicht komplett ausgeführt werden kann, „stoßen“ die Elektronen im klassischen Bild gegen die Wand und werden nach vorn abgestoßen. Dies sind die sogenannten „edge states“, also die stromtragenden Randzustände.

Zusammenfassend können wir also feststellen, dass in zweidimensionalen Systemen bei starkem Magnetfeld (und Unordnung) stromtragende Zustände nur am Rand existieren. Sie sind abzählbar und wenn die Fermi-Energie verringert wird, dann verschwinden die Moden einzeln und diskontinuierlich beim Durchgang der Fermi-Energie durch ein Landau-Niveau.

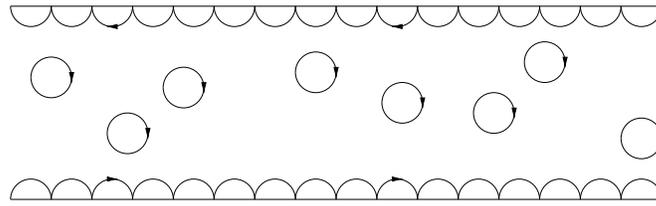


Abbildung 5.3: Die möglichen Wege von Elektronen in einem starken Magnetfeld senkrecht zur Blattebene. Im Inneren des Leiters geschieht die Bewegung auf Zyklotron-Kreisbahnen. Nur am Rand kann durch „skipping orbits“ Transport stattfinden.

5.2 Büttiker Theorie für das Quanten-Hall Regime

Eine typische Geometrie, in welcher sowohl longitudinaler Widerstand als auch der Hall-Widerstand gemessen werden können, ist ein 4-Terminal-Leiter wie in Figur 5.4. In dieser Figur sind auch die entstehenden edge states eingetragen. Damit können wir nun sehr einfach mit Hilfe des Landauer-Büttiker-Formalismus aus Kap. 3.2 die Widerstände berechnen. Büttiker (1988)

Dazu gebrauchen wir Formel (3.17). Zunächst müssen wir die Transmissionskoeffizienten T_{kl} bestimmen. Dies ist jedoch sehr einfach, denn wir können sie sofort in der Skizze 5.4 ablesen. Es ist sinnvoll anzunehmen, dass alle Ränder durch das gleiche Einschlusspotenzial charakterisiert sind. Dann gibt es auch an allen Rändern die gleiche Anzahl N von offenen Randkanälen.

Wenn wir zunächst die linke Figur aus 5.4 betrachten, dann können wir sehen, dass nur sehr wenige der Transmissionskoeffizienten von Null verschieden sind, nämlich diejenigen, welche durch Pfeile miteinander verbunden sind. Diese Koeffizienten sind gleich der Anzahl der edge-states N , wenn wir uns im idealen System befinden. (Dies gilt immer noch bei Unordnung, weil keine Rückstreuung zustande kommen kann. Dies wird weiter unten noch genauer ausgeführt.)

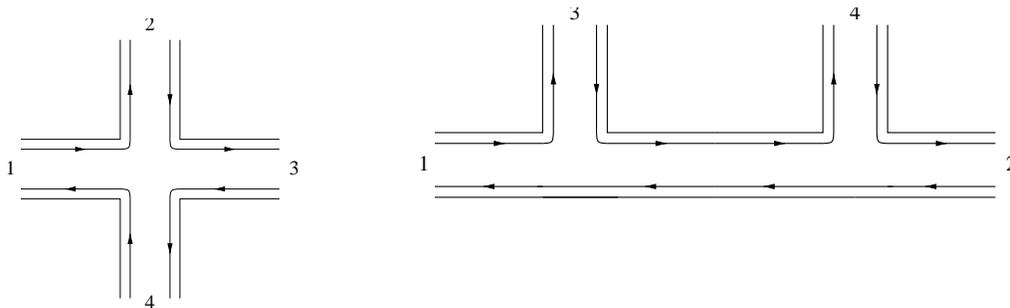


Abbildung 5.4: Zwei mögliche 4-Terminal-Geometrien zur Bestimmung des Hall-Widerstandes (links) und des longitudinalen Widerstandes (rechts).

Insgesamt ergibt sich:

$$T_{kn}^H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & N \\ N & 0 & 0 & 0 \\ 0 & N & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N & 0 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Der Hall-Widerstand kann als $R_{24,31}$ ausgedrückt werden. Die Subdeterminante D der Matrix (5.4) ist N^3 . Einsetzen in (3.17) ergibt dann einfach

$$R_H = R_{24,31} = \frac{h N * N - 0}{e^2 N^3} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{N}. \quad (5.5)$$

Dagegen liefert die Formel für den Bend-Widerstand ($R_{23,41}$) im Zähler Null. Damit erwarten wir in den Bereichen, wo R_H quantisiert ist, dass $R_B = 0$.

Ganz analog lässt sich der longitudinale Widerstand in der Anordnung aus 5.4 rechts betrachten. Hier ergibt sich für die Matrix der Transmissionskoeffizienten:

$$T_{kn}^L = \begin{pmatrix} 0 & N & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N \\ N & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N & 0 \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

Der longitudinale Widerstand ist $R_{12,34}$. Wiederum ist die Subdeterminante der Matrix (5.6) gleich N^3 . Allerdings ergibt das Einsetzen in (3.17)

$$R_L = R_{12,34} = \frac{h}{e^2} \frac{0}{N^3} = 0. \quad (5.7)$$

Mit diesem sehr einfachen Modell werden also die experimentellen Befunde des (integralen) Quanten-Hall-Effekts erklärt und der physikalische Mechanismus, der hinter dem Effekt steht, wird deutlich. Es ist aber wichtig zu erkennen, dass dieser Formalismus nur in den Bereichen zur Anwendung kommen kann, welche durch ganzzahlige Transmissionskoeffizienten gegeben sind, und die durch Plateaus im Hall- und Verschwinden des longitudinalen Widerstands gekennzeichnet sind. Die experimentelle Beobachtung der Stromverteilung zeigt allerdings deutlich kompliziertere Ergebnisse, die von der genauen Anordnung von Störstellen abhängig sind (Sichel et al. 1985; Ebert et al. 1985). In normalen (ungeordneten) Quanten-Hall-Samples fließt der Strom nicht nur am Rand! (Eine Übersicht zu weiteren experimentellen und theoretischen Arbeiten findet sich bei Beenakker und van Houten (1991) in Kapitel 18 c.)

Der Übergang zwischen den Plateaus bzw. die Wiederkehr des longitudinalen Widerstands beim Durchgehen eines Landau-Niveaus durch die Fermi-Energie durch Erhöhung des Magnetfeldes kann damit nicht erklärt werden, solange nicht die genaue Änderung der Transmissionskoeffizienten bekannt ist. Es existieren jedoch keine konkreten Rechnungen im Rahmen dieses Formalismus.

Allerdings haben wir uns bisher nur mit idealen Systemen beschäftigt. Diese finden sich in Experimenten natürlich nie, und doch wurden die theoretischen Ergebnisse mit einer bestechenden Genauigkeit verifiziert. Dieses erstaunliche Resultat beruht auf der Irrelevanz von lokalisierten Störstellen im Quanten-Hall-System. Wie Büttiker (1988) als erster aufzeigte, bleibt der Quanten-Hall-Effekt bestehen, solange der mittlere Abstand zwischen zwei Störstellen kleiner ist als der Zyklotron-Radius (l_B) bei diesem Magnetfeld. Deswegen sind in Experimenten auch die oberen Hallstufen immer besser ausgeprägt als die unteren, bei denen der Zyklotron-Radius größer ist.

Der Grund dafür liegt in der Tatsache, dass Störstellen nicht die Richtung eines Elektrons umdrehen können. Es finden immer nur vergleichsweise kleine Richtungsänderungen statt. Erst die Streuung an einer größeren Anzahl von Streuern führt zu einer Umkehr. Im Quanten-Hall-Regime führen die Elektronen jedoch Zyklotron-Bewegungen aus. Wenn nun im Umkreis von l_B um eine einzelne Störstelle keine weitere vorhanden ist, wird die Rückstreuung über größere Distanzen als der Zyklotronradius effektiv unterdrückt.

Damit lässt sich das Transmissionsproblem in viele kleine Bereiche der Größe l_B aufteilen. In jedem dieser Bereiche können Störstellen sitzen, allerdings gibt es keine Rückstreuung. Damit kommen N Moden in diesen Bereich hinein, und aus Gründen der Ladungserhaltung verlassen auch N Moden dieses Gebiet. Dabei kann es durchaus zu komplizierten Mischungen der Moden untereinander kommen, wichtig ist jedoch nur, dass die Transmission über einen Bereich, und damit über den ganzen Rand hinweg exakt gleich N ist. Dann ist der Rand für die Transmission der Elektronen trotz Anwesenheit einer geringen Anzahl von Störstellen „ideal“ im obigen Sinne und die Rechnung, die wir aufgestellt haben, gilt auch in einem solchen Fall.

5.3 Ergebnisse der Simulationen zum Quanten-Hall-Effekt

Kommen wir nun zu den numerischen Rechnungen, welche bis in das Quanten-Hall-Regime hineinreichen. Zunächst untersuchen wir dabei die Kreuz-Geometrie und die Widerstände R_H und R_B .

In Abbildung 5.5 ist der Hall-Widerstand über einen großen Bereich des Magnetfeldes dargestellt. Um den in der Simulation gebrauchten Peierls-Exponenten α (siehe Gleichung (4.8)) in ein Magnetfeld umzurechnen, wird eine Breite der Geometrie von 100 nm angenommen, wie im Experiment von Mikhailov et al. Im Bild ist sowohl der lineare Anstieg bei sehr kleinen Magnetfeldern, also der klassische Hall-Effekt, als auch deutlich ausgeprägte Plateaus bei 1 , $1/2$ und $1/3 h/e^2$ zu sehen. Der Übergang zwischen den beiden Regimes ist durch eine unruhige Aufwärtsbewegung gekennzeichnet, dabei handelt es sich um Finite-Size-Effekte,

wie auch durch Abbildung 5.6 gezeigt. Dabei wurde die Breite b der Zuleitungen von 18 Gitterplätzen in 5.5 auf 15 bzw. 12 verringert. Wie wir sehen können, gibt es auch bei reduzierter Breite weiterhin Plateaus im Hall-Widerstand. Allerdings wandern sie mit kleinerer Breite zur niedrigeren Magnetfeldern. Die Steigung im linearen Bereich ist bei allen Breiten gleich, allerdings bilden sich danach deutlich unterschiedliche Merkmale in den Kurven heraus. So geht bei einer Breite von 12 Sites der Hall-Widerstand sogar fast wieder auf Null zurück. Aus diesen Bildern liegt der Schluss nahe, dass für weitere Simulationen in der Kreuz-Geometrie mindestens eine Breite von 18 Sites verwendet werden sollte.

Die Veränderung des Bend-Widerstands mit steigendem Magnetfeld ist in Abbildung 5.7 zu sehen. Sowohl bei einer Breite von 18 als auch 15 Sites ist der Bend-Widerstand bei kleinen Magnetfeldern zunächst negativ und wechselt dann bei steigendem Feld das Vorzeichen. Bei Magnetfeldern, die im Hall-Widerstand zu einem Plateau führen, verschwindet der Bend-Widerstand wie von der Büttiker-Theorie vorhergesagt. Im Übergangsbereich zwischen zwei Hall-Stufen gibt es einen positiven Beitrag im Bend-Widerstand. Dies ist für $b = 18$ Sites ganz rechts in Abbildung 5.7 gerade noch zu erkennen.

Bei der Berechnung des longitudinalen Widerstands ist zu beachten, dass bei einer Wahl einer Magnetfelddurchsetzung wie in Abbildung 4.3 kein Quanten-Hall-Effekt in R_L beobachtet werden kann, da in den Zuleitungen die stromtragenden Zustände nicht an den Rand gedrängt werden. Damit kann aber auch ein Transport wie in Abbildung 5.4 nicht entstehen. Es muss in den Zuleitungen also ein Magnetfeld eingeschaltet werden. Die Rechnung zum longitudinalen Widerstand, die in Bild 5.8 zu sehen ist, ist in einer Geometrie entstanden, die 40 Sites als langes Mittelstück hatte und 15 Sites in den Zuleitungen. In diesen hatten 9 Sites volles Magnetfeld. Das Mittelstück ist damit erheblich kürzer als in den noch folgenden Simulationen (80 Sites), da die Gesamtzahl der Sites durch die Speicherkapazität begrenzt ist. Somit sind auch die Ergebnisse in den verschiedenen Geometrien nicht direkt vergleichbar.

In 5.8 ist das Quanten-Hall-Regime gut daran zu erkennen, dass der Widerstand auf Null absinkt. Auch sind die Übergänge zwischen den Hall-Stufen sichtbar, in denen R_L einen kleinen positiven Wert aufweist. Bei sehr kleinen Magnetfeldern ist der Magnetowiderstand positiv, R_L wächst mit steigendem Feld. Dies wird erst durch das Einsetzen des Quanten-Hall-Effektes zerstört.

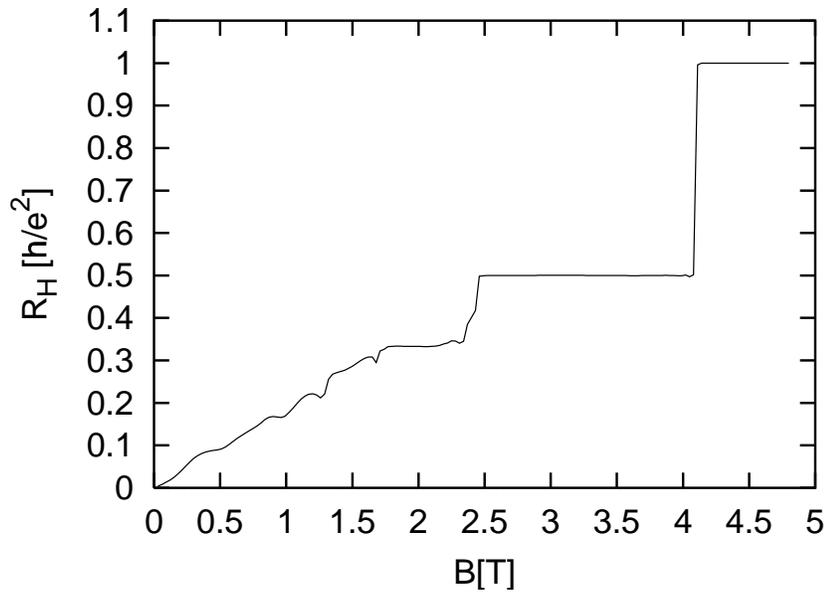


Abbildung 5.5: Hall-Widerstand mit Zuleitungen hinreichender Breite (18 Sites).

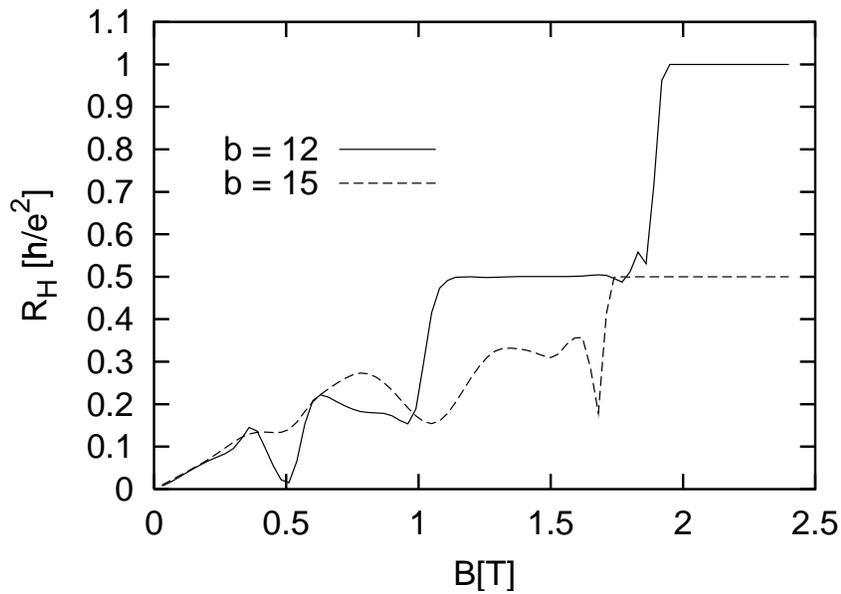


Abbildung 5.6: Hall-Widerstand bei kleinerer Breite der Zuleitungen (12 bzw. 15 Sites).

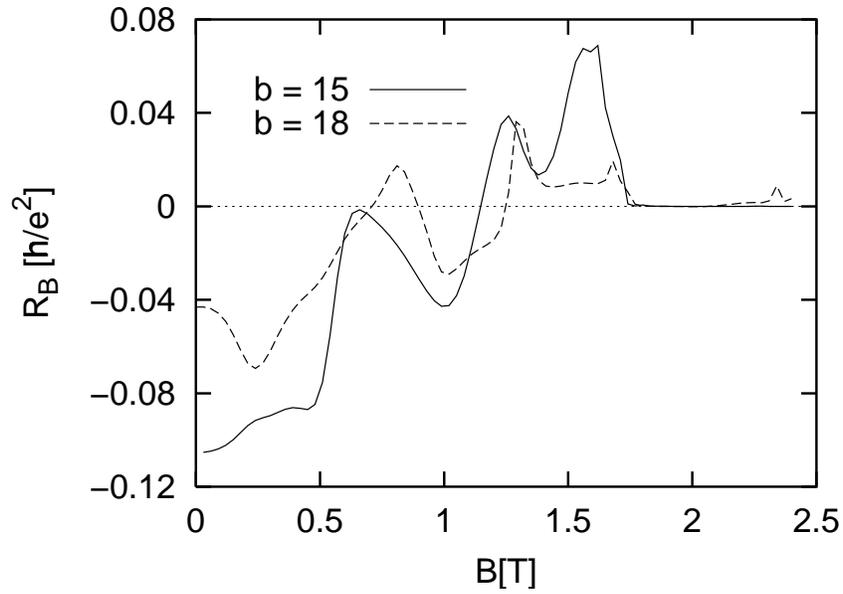


Abbildung 5.7: Bend-Widerstand bei zwei verschiedenen Breiten der Zuleitungen, 15 und 18 Sites.

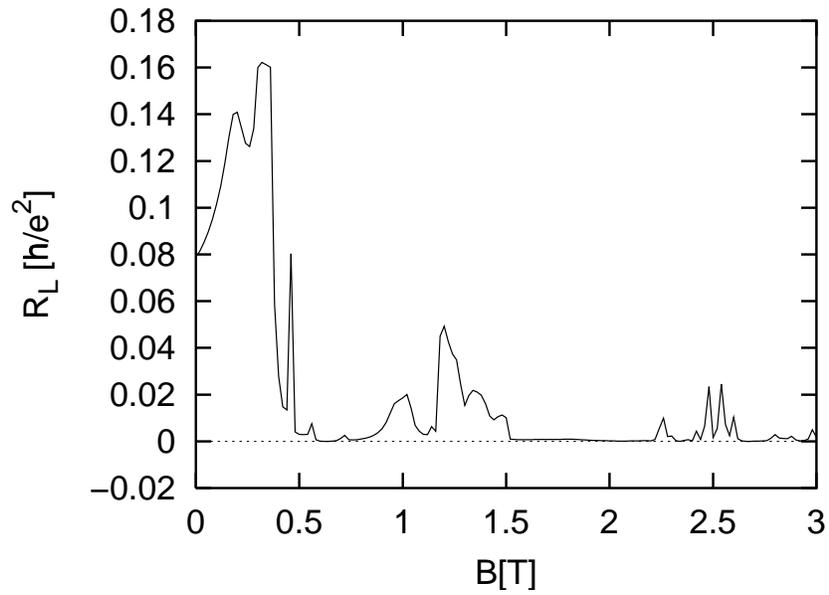


Abbildung 5.8: Longitudinaler Widerstand in Geometrie, in der sich das Magnetfeld auch in die Zuleitungen erstreckt.

5.4 Charakterisierung der numerischen Simulation und Festlegung der Parameter

Bei der Diskussion der Daten ohne Streuung durch den Rand oder on-site-Unordnung sollten wir bei dieser Gelegenheit die Parameter festlegen, mit denen später die Simulationen durchgeführt werden. Die wichtigsten Festlegungen betreffen die Geometrie. Einerseits sollen möglichst viele Sites Finite-Size-Effekte minimieren, andererseits leidet natürlich die Rechenzeit darunter. Daneben muss vor allem noch die Fermi-Energie festgelegt werden, die zusammen mit der Breite der Zuleitungen die Anzahl der Moden bestimmt. Sie wurde so gewählt, dass typischerweise 10-16 Moden vorhanden sind, entsprechend einer Fermi-Energie von 6.0 (in Einheiten der Hüpfamplitude t) bei einer Breite von 18 Sites. Bei kleineren Zuleitungen wurde sie entsprechend angepasst.

Die wesentlichen Parameter der Geometrie sind neben der Breite (b) der Zuleitungen des Kreuzes, die bereits im vorangegangenen Abschnitt untersucht und auf 18 Sites gesetzt wurde, die Länge der einzelnen Zuleitungen bzw. die Länge des langen Abschnitts (L) bei der Bestimmung des longitudinalen Widerstands. Dazu kommen die Anzahl der Sites, über die das Magnetfeld abfällt (ABF) und die Anzahl derer ohne Magnetfeld (NOF) zur Relaxation in die Normalmoden.

Untersuchen wir zuerst die Kreuz-Geometrie, in der Hall- und Bend-Widerstand berechnet werden (siehe S. 36). In Abbildung 5.9 ist dargestellt, wie sich beide Widerstände verändern, wenn die Zuleitungen verlängert werden. Dabei sind die wesentlichen qualitativen Merkmale der beiden Größen nicht stark verändert, aber es gibt doch einige Unterschiede. Dies hängt sicherlich damit zusammen, dass das Magnetfeld die entscheidende Einflussgröße ist. In beiden Bildern lagen die anderen Parameter bei $NOF = 3$ und $ABF = 8$, und damit die Anzahl der Sites, die dem gesamten Magnetfeld ausgesetzt sind, bei 7, 9 und 11. Im Hall-Widerstand (rechts in 5.9 dargestellt) sind die finite-size-Effekte im Übergang vom linearen Regime bei $B < 0.4T$ zum Quanten-Hall-Regime bei $B > 1.6T$ bei den drei Längen zwar unterschiedlich, aber es ist unmöglich, eine qualitative Rangfolge zur Bestimmung einer möglichst geeigneten Länge herauszufinden. Dies ist deutlich einfacher im Bend-Widerstand (links in 5.9). Dort ist ein wichtiges qualitatives Feature, nämlich das lokale Maximum bei $B = 0.8$, bei einer Länge von unter $L = 20$ nicht herausgearbeitet. Da eine zusätzliche Verlängerung auf $L = 22$ das Minimum bei $B = 0.25$ besser zeigt, wurde als Länge $L = 22$ festgelegt.

Wie in Abbildung 5.10 sichtbar, ist die Länge der feldfreien Teile (weiße Sites in Abbildung 4.2) ohne spürbaren Einfluss auf die beiden Widerstände. Daraus ist erkennbar, dass bereits zwei Sites vollständig ohne Magnetfeld ausreichend sind, um eine totale Relaxation auf die feldfreien Eigenzustände zu erreichen. Für die folgenden Simulationen wurde der Parameter NOF auf 3 gelegt.

Ebenso ohne wesentlichen Einfluss ist die Anzahl der Sites, auf denen das

Magnetfeld von voller Stärke auf Null abklingt (hellgrau in Abbildung 4.2). Allerdings treten bei zu niedrigen Werten merkwürdige Features auf, die erst bei $ABF = 6$ verschwinden. Dann allerdings, wie in Abbildung 5.11 zu sehen, hat eine weitere Erhöhung praktisch keinen Effekt mehr. Nur im Bend-Widerstand wandert das Maximum leicht zu höheren Werten für das Magnetfeld. Dies könnte damit zu tun haben, dass bei höherem ABF natürlich die Anzahl der Sites mit vollem Magnetfeld sinkt. Für alle weiteren Rechnungen liegt ABF bei 8.

Damit sind die Parameter für die Kreuz-Geometrie bestimmt, nun müssen wir dasselbe für die lange Geometrie zur Bestimmung des longitudinalen Widerstands tun. Hier ist zu beachten, dass anders als im vorigen Abschnitt das Magnetfeld erst im langen Teil ein- und dann auch wieder ausgeschaltet wird (siehe dazu auch Abbildung 4.3), so dass die Zuleitungen komplett feldfrei sind. Ihre Länge wird mit ZUL bezeichnet. Wie das linke Bild in 5.12 zeigt, ist die die Größe von ZUL für die Berechnung des longitudinalen Widerstands nicht entscheidend, ebenso die Strecke, auf der das Magnetfeld abfällt (ABF , in 5.12 rechts). In weiteren Rechnungen wurden daher folgende Festlegungen getroffen: $ZUL = 6$ und $ABF = 5$. Wir können sehen, dass der positive Magnetowiderstand über den ganzen, zugegeben relativ kleinen, Bereich bestehen bleibt.

Dagegen haben die Breite und die Länge eines Leiters durchaus Auswirkungen auf den longitudinalen Widerstand eines Leiters. Nach dem Ohmschen Gesetz ist der Widerstand proportional zur Länge und reziprok zum Querschnitt, in zwei Dimensionen also zur Breite. Beides ist in Abbildung 5.13 auf qualitativen Niveau sichtbar. Links ist die Variation der Breite zu sehen, rechts die der Länge. In beiden Fällen ist es allerdings schwierig, durch Vergleich der qualitativen Features auf geeignete Wahlen der Parameter zu schließen. Daher diktiert die Rechenzeit eine möglichst geringe Zahl. Für die Breite gilt deshalb im Folgenden: $B = 15$. Bei der Länge ist nach Einschalten der Randstreuung noch zu beachten, dass ein relativ großer Bereich bleiben muss, in dem tatsächlich ein ungeordneter Rand vorliegt. Daher wurden die Simulationen bei $L = 80$ durchgeführt, mit $ABF = 5$ tritt die Randstreuung damit also auf einer Länge von 70 Sites auf.

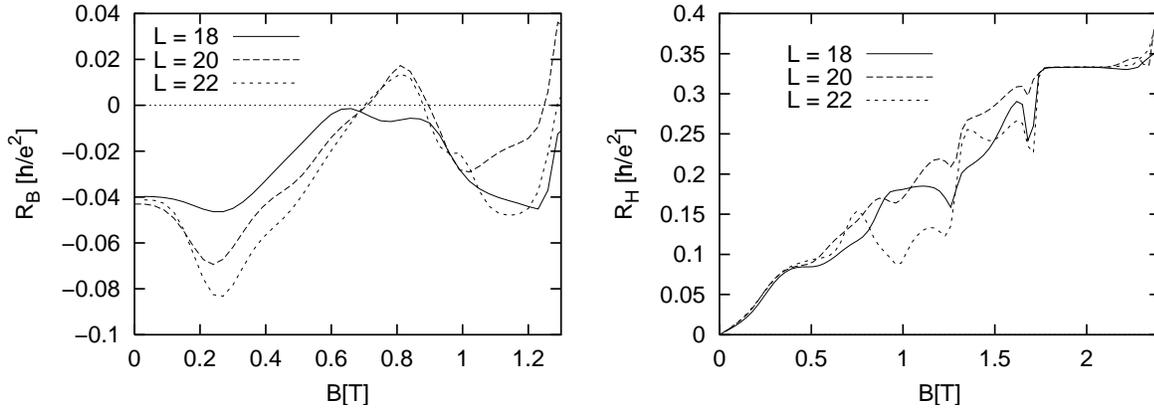


Abbildung 5.9: Bend-Widerstand (links) und Hall-Widerstand (rechts) bei einer Veränderung der Längen der Zuleitungen.

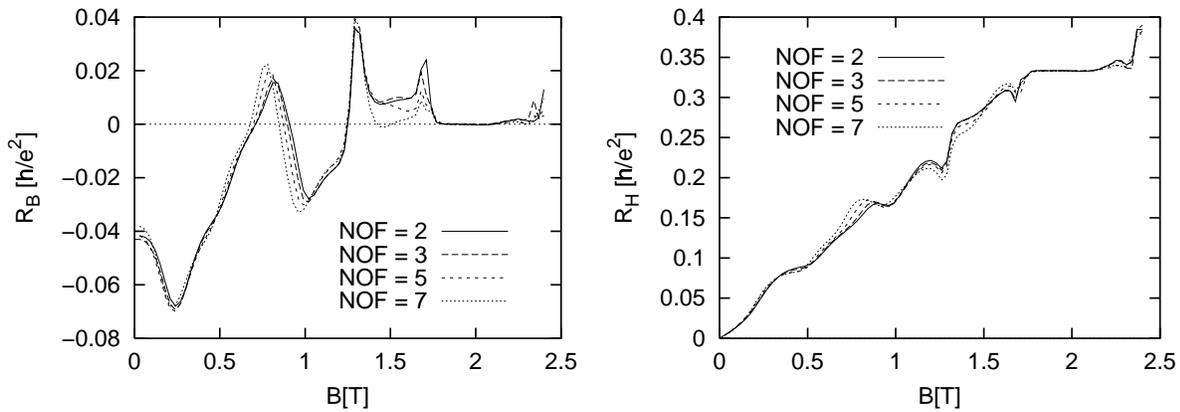


Abbildung 5.10: Bend-Widerstand (links) und Hall-Widerstand (rechts) bei einer Veränderung der Länge der feldfreien Teile der Zuleitungen.

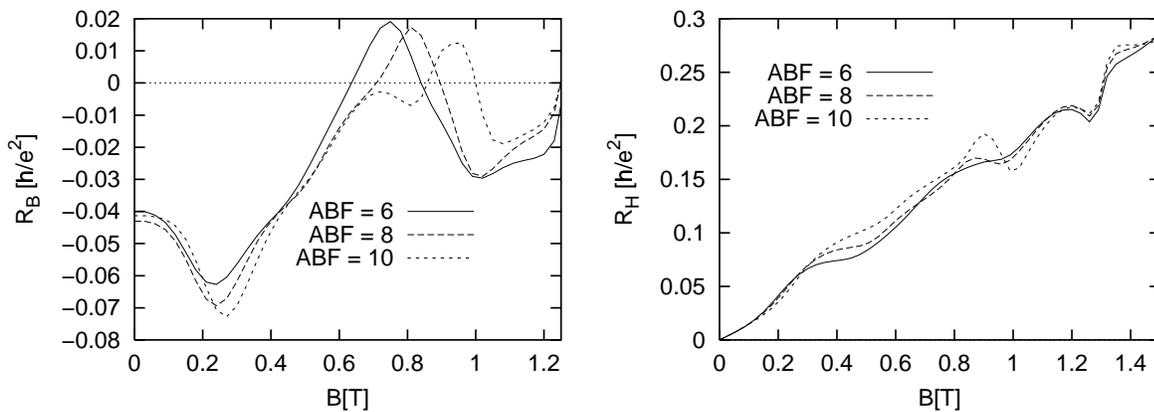


Abbildung 5.11: Bend-Widerstand (links) und Hall-Widerstand (rechts) bei verschieden schnellem Abfall des Magnetfeldes in den Zuleitungen.

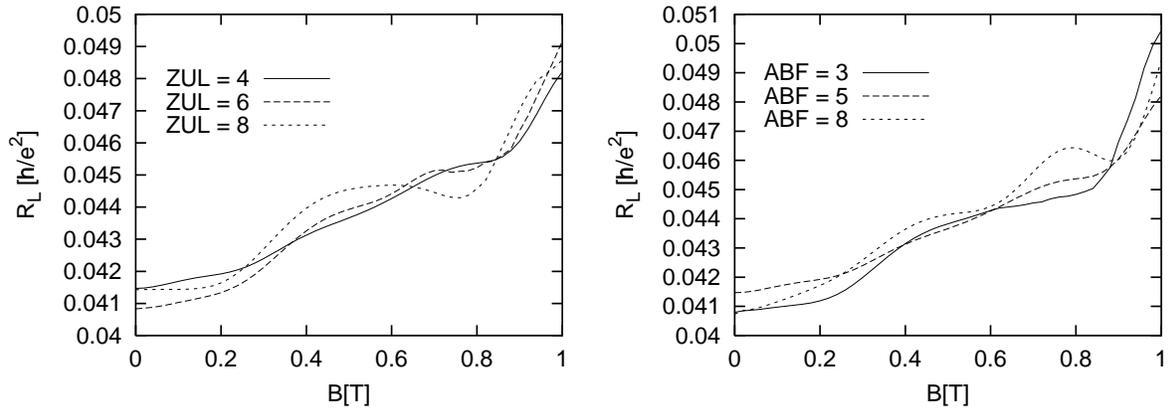


Abbildung 5.12: Variation der Länge der Zuleitungen (links) bzw. des Abfalls des Magnetfeldes (rechts) in der langen Geometrie zur Berechnung des longitudinalen Widerstands.

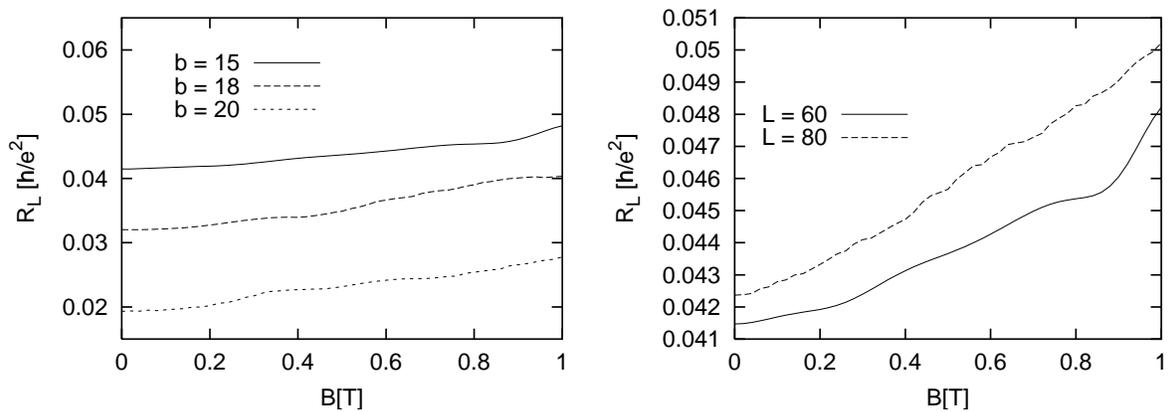


Abbildung 5.13: Variation der Breite (links) und der Länge (rechts) des Leiters in der langen Geometrie zur Berechnung des longitudinalen Widerstands.

Kapitel 6

Ergebnisse bei Streuung durch Unordnung

6.1 Ergebnisse für Randstreuung

Nachdem die Parameter für die wesentlichen Simulationen festgelegt worden sind, können diese nun in Angriff genommen werden. Bevor die wichtigsten Ergebnisse präsentiert werden können, muss noch auf einen wichtigen Punkt eingegangen werden, nämlich auf die Tatsache, dass der Widerstand in einem System mit Unordnung von der mikroskopischen Realisation der Unordnung abhängig ist. Für eine vollständige Aussage benötigen wir also eigentlich die komplette Verteilung des Widerstands für alle möglichen Realisationen. Dies ist natürlich nicht möglich, daher müssen wir uns mit den ersten Momenten einer solchen Verteilung begnügen. Im Folgenden zeigen die Abbildungen jeweils den Mittelwert einer solchen Größe nach einer Zahl (typischerweise 400) von Wiederholungen. Daneben wird die Standardabweichung als Fehlerbalken angezeigt. Dabei zeigt sich, dass die Verteilung der einzelnen Resultate nicht gaussisch ist. Abbildung 6.1 zeigt ein typisches Histogramm von Werten für R_H . Hier beträgt der Mittelwert ziemlich genau Null und die Standardabweichung liegt etwas über 0.01. Dennoch liegen über 92% der Werte außerhalb des 1-Sigma-Intervalls und 80% außerhalb von drei Standardabweichungen um den Mittelwert. Daher unterschätzt besonders bei einer hohen Zahl an Iterationen die Standardabweichung den echten Fehler und sollte nur als Anhaltspunkt dienen, da der wirkliche Fehler nicht näher bestimmbar ist.

6.1.1 Die Stärke der Randstreuung

Die Ergebnisse bei einer Veränderung der Stärke der Randstreuung für den Bend-Widerstand R_B und den Hall-Widerstand R_H sind in den Abbildungen 6.3 bzw. 6.2 dargestellt. Dabei wurde der Parameter Δ (S. 37) in Schritten von 0.1 zwischen 0.1 und 0.4 variiert.

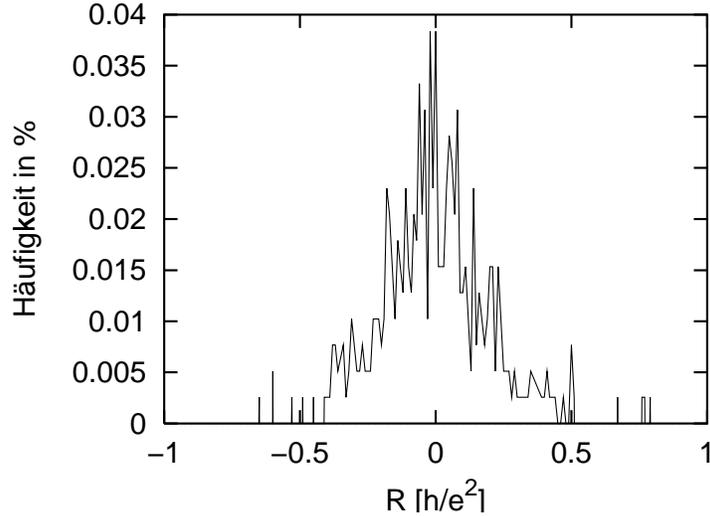


Abbildung 6.1: Histogramm einer typischen Simulation von R_H bei Randstreuung. Bei dem hier gezeigten Run wurden 400 Iterationen durchgeführt, der Mittelwert liegt bei -0.0038141 und die Standardabweichung bei 0.011312 .

Zunächst kann das experimentelle Ergebnis (Abbildung 2.2 auf S. 14) durch die Simulation gut nachgebildet werden. Der Hall-Widerstand zeigt das Quenching bis ungefähr zu einer Magnetfeldstärke von $1.0 T$, allerdings ist R_H leicht positiv und geht nicht vollständig auf Null zurück. Warum das Magnetfeld nicht vollständig verschwindet, konnte nicht eindeutig geklärt werden. Bei höherem Magnetfeld geht R_H in ein lineares Regime über. Dieses Verhalten ist in guter qualitativer Übereinstimmung mit dem Experiment. Allerdings sind die quantitativen Werte, insbesondere die Stärke des Magnetfeldes, doch erheblich kleiner als im Experiment beobachtet, so geht dort der gequenchte Bereich bis ca. $1.6 T$. Für quantitative Aussagen ist die Rasterung eines Quantendrahtes durch 18 Sites viel zu grob. Daher beschränken wir uns hier vor allem auf qualitative Ergebnisse, für die jedoch die Anzahl der Sites ausreichend ist.

Der Bend-Widerstand R_B , in Abbildung 6.3 zu sehen, zeigt ebenfalls das charakteristische Verhalten, das bereits aus dem Experiment bekannt ist. Bei kleinen Magnetfeldern ist R_B zunächst negativ, geht dann ins Positive, um schließlich bei hohen Magnetfeldern gegen Null zu laufen. Der longitudinale Widerstand R_L (Abbildung 6.4) zeigt für größere Werte der Randstreuung einen positiven Magnetowiderstand über den gesamten Magnetfeldbereich $B < 1.2 T$. Bei kleinerem Streuparameter $\Delta = 0.1$ ist er leicht negativ.

Im Vergleich zu den Ergebnissen ohne Randstreuung sehen wir kaum eine Veränderung im Bend-Widerstand. Im Hall-Widerstand tritt Quenching bei kleinen Magnetfeldern auf, im Gegensatz zum linearen Verlauf ohne Randstreuung. Der longitudinale Widerstand zeigt stark erhöhte Werte (fast eine Größenord-

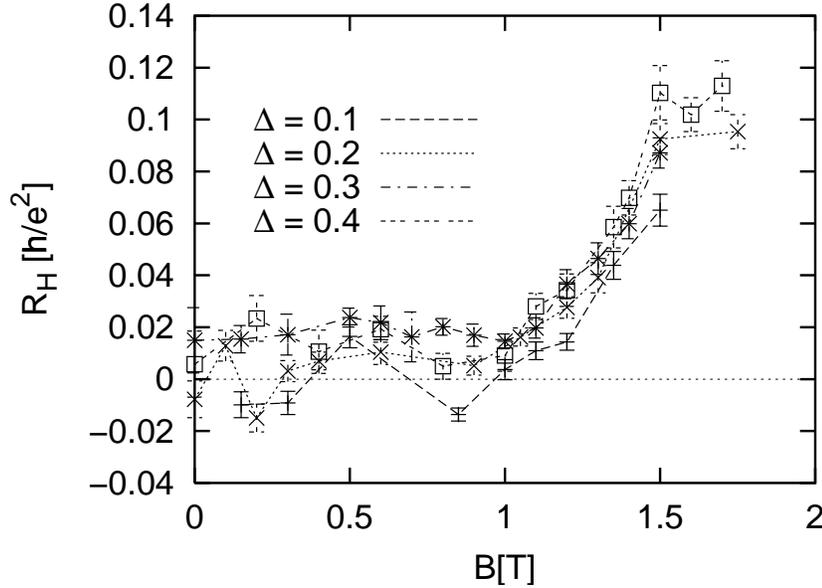


Abbildung 6.2: Hall-Widerstand bei verschiedenen Stärken der Randstreuung Δ .

nung), aber das qualitative Verhalten ist sehr ähnlich. Allerdings verhindert die Randstreuung einen Übergang ins Quanten-Hall-Regime, da sich keine ausgedehnten edge-states ausbilden können (es kommen ja plötzliche Randsprünge von zwei Sites vor).

Wenn wir uns ansehen, wie sich die Widerstände verändern, wenn die Stärke der Randstreuung von $\Delta = 0.1$ bis hin zu $\Delta = 0.3$ vergrößert wird, ist offensichtlich, dass bei den beiden Widerständen in der Kreuz-Geometrie, R_H und R_B praktisch keine Unterschiede außerhalb der statistischen Fehler auftreten. Dagegen steigt R_L stark mit höherem Δ an. In der Tat ist der Zusammenhang zwischen R_L und Δ fast proportional. Dies ist intuitiv einsichtig, da die Stärke der Randstreuung eine Art spezifischen Widerstand in R_L darstellt.

Hingegen sind die Ergebnisse für R_H und R_B nicht so einfach zu verstehen. Dazu befassen wir uns mit dem Phänomen der Kollimation, welches Ende der 80-er Jahre herangezogen wurde, um die ersten Experimente zu erklären, die Quenching im Hall-Widerstand zeigten.

6.2 Die Kollimation eines Elektronenstrahls

Bereits kurz nach den ersten Experimenten, die den negativen Bend-Widerstand und das Quenching im Hall-Widerstand zeigten, gaben Beenakker und van Houten (1989a) eine semiklassische Erklärung beider Phänomene.

Dazu nutzen wir zunächst die Symmetrie des Problems. Da das Kreuz nach einer Unordnungsmittelung in allen Zuleitungen symmetrisch ist, treten nur drei

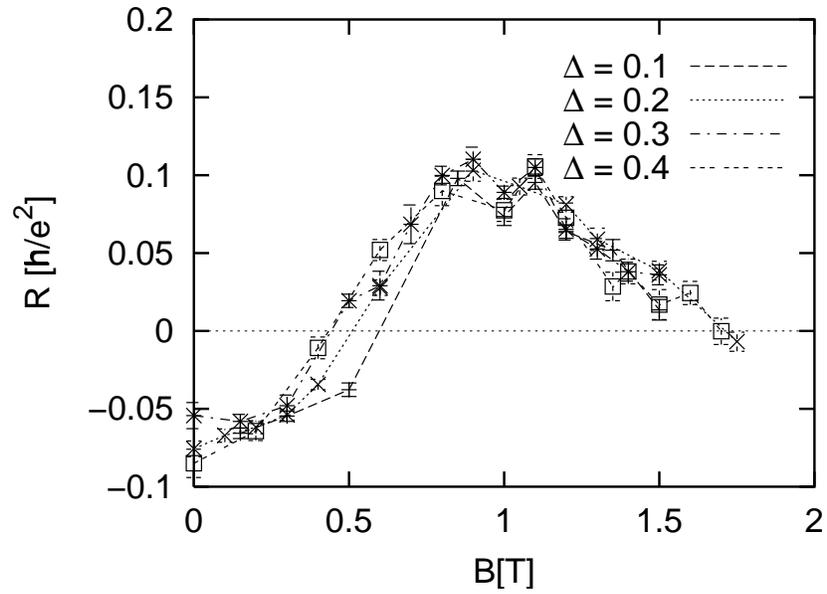


Abbildung 6.3: Bend-Widerstand bei verschiedenen Stärken der Randstreuung Δ .

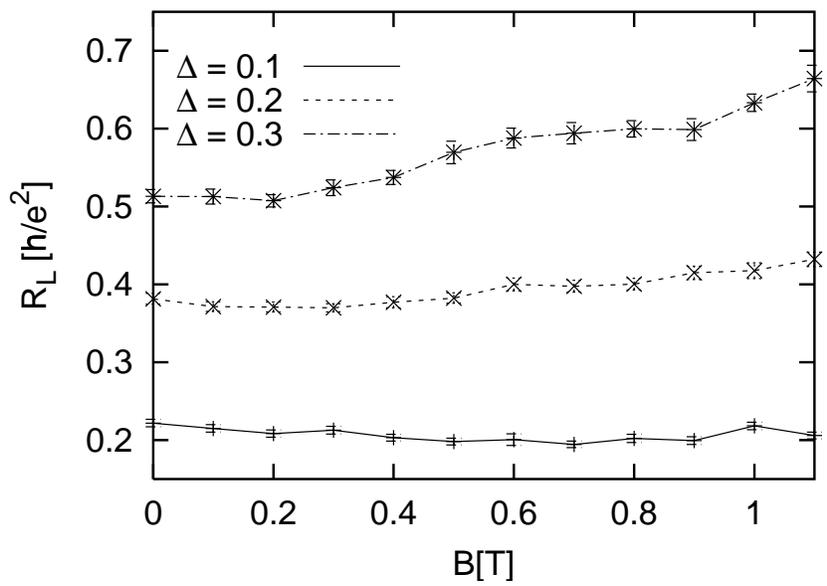


Abbildung 6.4: Longitudinaler Widerstand R_L für verschiedene Stärken Δ der Randstreuung.

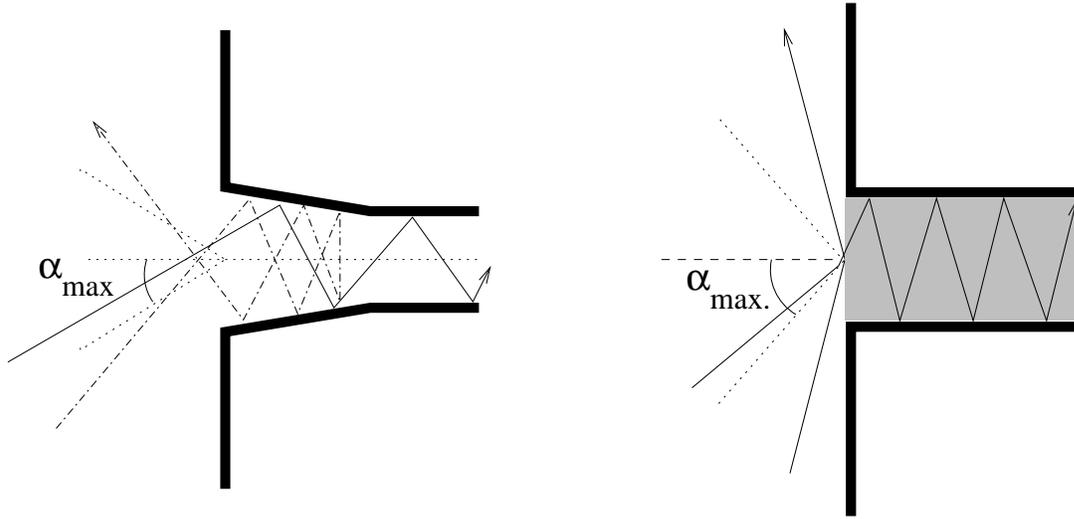


Abbildung 6.5: Der Kollimationseffekt. Links der Fall einer graduellen, adiabatischen Öffnung vor einer abrupten Öffnung ins Reservoir, rechts der Fall einer Potenzialbarriere (der graue Bereich liegt auf einem höheren Potenzial). Links werden Elektronen, die unter einem zu hohen Öffnungswinkel einfallen von der Geometrie zurückgestreut, rechts besitzen sie zu wenig kinetische Energie. In beiden Fällen ist der maximale Winkel α_{max} deutlich kleiner als $\pi/2$.

verschiedene Transmissionskoeffizienten auf, die wir mit T_F , T_L und T_R bezeichnen, jeweils für die Transmission in Vorwärtsrichtung, nach links und nach rechts. Wenn wir dies in die Büttiker-Formel zur Berechnung von R_H und R_B einsetzen, erhalten wir im Zähler für $R_H \propto T_R - T_L$ (bzw. umgekehrt, je nach Magnetfeldrichtung) und für $R_B \propto T_R T_L - T_F^2$. Der Nenner, die Subdeterminante D , ist groß und positiv und ist deshalb für die Fragen, wann R_H Null und wann R_B negativ ist, nicht wichtig.

Der physikalische Mechanismus, den Beenakker und van Houten (1989a) nun vorschlugen, war eine Kollimation, nur Elektronen mit einem bestimmten Einfallswinkel $\alpha < \alpha_{max}$ können in eine Zuleitung hineingelangen, der Rest wird wieder zurückgestreut. Dazu gibt es zwei Möglichkeiten: Einerseits tritt dieser Effekt auf, wenn bei einer abrupten Öffnung einer Zuleitung in ein Reservoir eine Potenzialbarriere dazukommt (die Zuleitung also auf einer anderen Fermi-Energie liegt), andererseits kommt Kollimation vor, wenn sich die Öffnung der Zuleitung langsam adiabatisch erweitert, bevor sie sich schließlich abrupt öffnet. Die beiden Fälle sind in Abbildung 6.5 dargestellt. Wir wollen uns im Folgenden auf den zweiten Fall beschränken, der damals auch als Grund für die experimentellen Daten angesehen wurde.

Semiklassisch ist Kollimation zu verstehen, weil das Produkt aus Kanalbreite b und dem transversalen Impuls $\hbar k_y$ adiabatisch invariant ist (Yacoby und Imry 1990). Der adiabatische Transport bricht an der Stelle zusammen, an der

sich die Zuleitung vollständig öffnet. Für die Elektronen gilt dort, dass der Ein-/Austrittswinkel α folgende Ungleichung erfüllen muss: $b_{max}|\sin \alpha| < b_{min}$. Daraus folgt dann sofort, dass $\alpha_{max} = \arcsin(b_{min}/b_{max})$. Bei Austritt aus einer sich graduell weitenden Öffnung ist die Winkelverteilung proportional zu $\cos \alpha$.

Liegt die Zuleitung auf einem höheren Potenzial als das Reservoir, aus dem das Elektron in die Zuleitung hineinläuft, so reicht bei zu großem Einfallswinkel die kinetische Energie in Richtung der Zuleitung nicht aus, um die zusätzliche Energie aufzubringen – das Teilchen wird zurückgestreut. Auch hier gibt es also einen maximalen Einfallswinkel unter dem Elektronen in die Zuleitung hineinkommen können.

Diese Kollimation führt dazu, dass die Elektronen wie von einer Linse gebündelt in die Zuleitung hinein bzw. aus ihr heraustreten. Bei niedrigen Magnetfeldern reicht die Lorentz-Kraft dann nicht aus, um diesen Strahl deutlich in eine Richtung auszulenken. Da $R_H \propto T_R - T_L$, ist der Unterschied zwischen beiden Transmissionen sehr klein – es kommt zu einem Quenching. Erst bei höheren Magnetfeldern können die Elektronen genug abgelenkt werden, so dass es zu einem merklichen Unterschied zwischen den beiden Transmissionen kommt.

Die Erklärung des negativen Bend-Widerstandes ist ganz ähnlich. R_B ist proportional zu $T_R T_L - T_F^2$. Da kleine Magnetfelder nicht ausreichend sind, den kollimierten Strahl gut abzulenken, ist die bevorzugte Transmissionsrichtung die Vorwärtsrichtung. Also ist R_B für diesen Fall negativ. Erst bei höheren Magnetfeldern kann sich die Lorentz-Kraft durchsetzen und die Elektronen ablenken. Die Transmission in Vorwärtsrichtung geht zurück und die Transmission nach rechts nimmt zu, also wird R_B positiv. Bei sehr hohen Magnetfeldern werden so gut wie alle Elektronen durch das Magnetfeld nach rechts gedrückt, da nun aber T_L sehr klein wird, geht schließlich R_B gegen Null.

Wie wir sehen, können damit also durch einen im Prinzip klassischen Effekt beide Phänomene in einer geeigneten Geometrie erklärt werden, nur der Ursprung der Kollimation ist quantenmechanisch.

Baranger und Stone (1989a) zeigten in Simulationen, dass in einem Kreuz mit geraden Zuleitungen Quenching nur dann auftritt, wenn eine Mode transmittiert wird. Dies ist evident, da auch dann eine Art von Kollimation auftritt, weil die unterste Mode eine einfache Sinusfunktion ist. Erst wenn höhere Moden mit hinzugenommen werden, gleicht sich die Geschwindigkeitsverteilung einer Konstanten über die gesamte Breite der Zuleitung an (z. B. 3 Moden), in diesem Fall verschwindet aber auch das Quenching und der Hall-Widerstand verläuft linear.

Im Fall von sich graduell öffnenden Zuleitungen fanden sie auch bei höheren Modenzahlen Quenching. Dies bestätigte eindrucksvoll die Überlegungen von Beenakker und van Houten (1989a).

Im Folgenden wollen wir nun erklären, aus welchem Grund es auch in unserem Fall zu Quenching in R_H und negativem R_B kommen kann, obwohl die Modenzahl deutlich größer als Eins ist und keine Weitung der Zuleitungen und auch keine Potenzialbarriere vorliegt.

Der Grund liegt in den unterschiedlichen Auswirkungen der Randstreuung auf die verschiedenen Moden. Höhere Moden haben einen größeren Gradienten am Rand und sind deshalb anfälliger für die Streuung, während die tieferliegenden Moden weniger beeinflusst werden.

Quantitative Hinweise für diese Behauptungen liefert die Abbildung 6.6. Hier sind die Rückstreuamplituden R_i bei Randstreuung für die Kreuz-Geometrie aufgetragen. Der Parameter Δ betrug nur 0.1, also die kleinste Stärke der in den Abb. 6.2 und 6.3 verwendeten. Es wurde über 400 Unordnungsrealisationen gemittelt. Wir erkennen, dass die Randstreuung bei den höheren Moden deutlich stärker zu Rückstreuung führt, so steigt sie von ungefähr 35% (Mode 1) auf fast 95% bei Mode 10 an. Dies liefert auch eine nachträgliche Rechtfertigung, warum wir nur 10 Moden zu betrachten brauchten. Die höheren Moden haben wohl keinen Effekt, sondern werden praktisch vollständig zurückgestreut. So ist auch die qualitative Ähnlichkeit zum Experiment mit 200 Moden zu erklären. Daneben können wir nun auch verstehen, warum eine Erhöhung von Δ nicht zu messbaren Veränderungen in R_H oder R_B führt. Da schon bei einer Randstreuung von $\Delta = 0.1$ die wesentliche Streuung stattfindet, führt eine Zunahme in Δ nicht zu einer weiteren Veränderung, zumindest nicht in den Parametern, die für R_H und R_B wichtig sind.

Die Rückstreuung der hohen Moden führt ebenfalls zu einer Kollimation. In einer ganz qualitativen Rechnung können wir eine Art Geschwindigkeitsprofil erstellen. Dazu wird eine einfache Geometrie betrachtet, bei der ein gerader Leiter mit zwei Zuleitungen durch einen Bereich mit Randstreuung ergänzt wird. Aus den Transmissionsamplituden erhalten wir die Besetzung der verschiedenen Moden der ausgehenden Zuleitung. Wenn nun die Annahme gemacht wird, dass die überschüssige Energie einer Mode $E_F - \epsilon_i$, mit ϵ_i als transversale Eigenenergie der Mode i , nur kinetische Energie in Stromrichtung ist, dann können wir ein Geschwindigkeitsprofil wie in Abbildung 6.7 erhalten. Natürlich ist dies mit größter Vorsicht zu behandeln. Für ein echtes Stromprofil ist eine Rechnung mit Nicht-Gleichgewichts-Green-Funktionen nötig, wir liefern hier nur eine Skizze des echten Verlaufs. Dennoch ist schon zu sehen, dass der Strahl der Elektronen durch die Randstreuung (in diesem Fall 25 Sites lang, also etwas länger als im Kreuz, $\Delta = 0.1$) kollimiert wird: Der Strom fließt bevorzugt in der Mitte des Drahtes.

Um das Quenching von R_H noch genauer zu verstehen, betrachten wir den sogenannten Asymmetrie-Parameter, der bereits von Baranger und Stone (1989a) eingeführt wurde, definiert als $\alpha = (T_R - T_L)/(T_R + T_L)$. Er ist ein Maß für die Ablenkung durch das Magnetfeld und bestimmt den gequenchten Bereich von R_H . In Abbildung 6.8 ist für jede Mode einzeln der Asymmetrie-Parameter dargestellt. Wie bereits von Baranger und Stone (1989a) beobachtet, ist α nur für die untersten Moden klein. Dies ändert sich auch nicht bei Randstreuung. Auch in unserem Fall wächst α schnell an und sollte R_H auf einen positiven Wert bringen, würde nicht der absolute Wert der Transmissionskoeffizienten bei den höheren Moden durch den bereits beschriebenen Effekt der Randstreuung stark

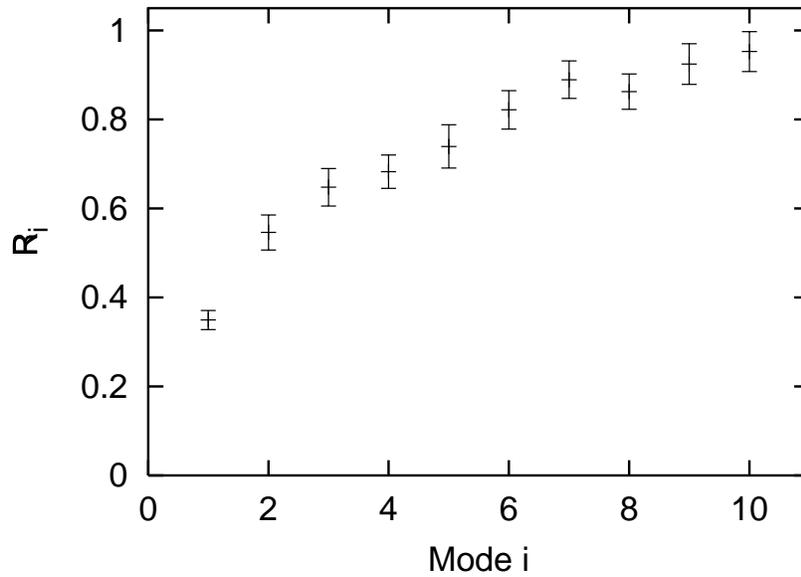


Abbildung 6.6: Rückstreuamplituden R_i für die einzelnen Moden i bei Randstreuung in der Kreuz-Geometrie mit einer Stärke von $\Delta = 0.1$. Es wurde eine willkürliche Zuleitung herausgegriffen.

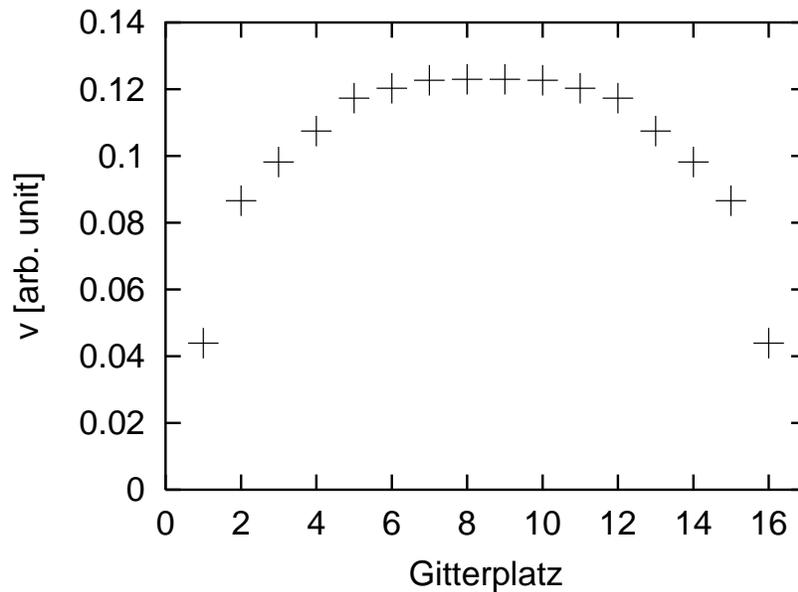


Abbildung 6.7: Verteilung der Geschwindigkeiten in Richtung entlang der Zuleitung nach Durchlaufen eines Abschnitts mit Randstreuung (25 Sites, $\Delta = 0.1$). Der Fehler ist schwer abzuschätzen, sollte in obigen Einheiten aber in der Größenordnung von 0.03 sein.

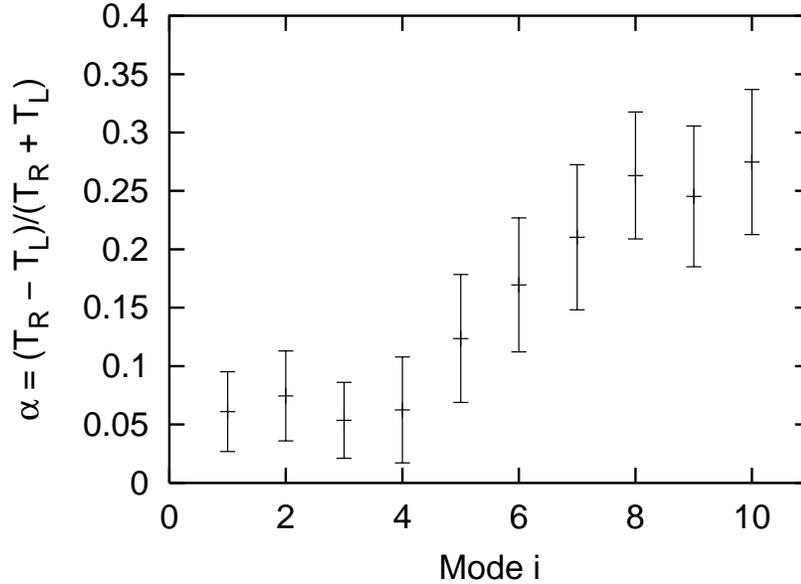


Abbildung 6.8: Der Asymmetrie-Parameter α jeder Mode in der Kreuz-Geometrie bei einer Randstreuung von $\Delta = 0.1$ und einem Magnetfeld von $B = 0.5 T$, also im gequenchten Bereich.

absinken.

Während das Quenching von R_H also stark durch die Randstreuung beeinflusst wird, ist das Verhalten des Bend-Widerstandes weiterhin durch das quasiklassische Bild verständlich, die wesentlichen Features treten ja bereits bei den Rechnungen ohne Randstreuung auf. Auch hier führt eine Erhöhung der Stärke nicht zu einer Veränderung von R_B .

6.3 Veränderung anderer Parameter

Neben der Stärke der Randstreuung gibt es noch weitere Parameter, deren Veränderung von Interesse ist. Zunächst beschäftigen wir uns mit einer Verringerung der Fermi-Energie, die bisher bei 6.0 in Einheiten der Hüpfamplitude t gelegen hatte. Eine Verringerung hat zwei direkte Auswirkungen: Zum einen wird die Anzahl der Moden verkleinert, die hohen Moden sind nicht mehr besetzt, zum anderen haben die einzelnen Moden weniger kinetische Energie. In Bezug auf die Kollimation sind dies wichtige Effekte, die kleinere kinetische Energie verringert den Effekt, dagegen sollte die Konzentration auf die niedrig liegenden Moden für stärkere Fokussierung und damit für eine Erhöhung des Effektes sorgen.

Wie wir in Abbildung 6.9 sehen können, ist der Fokussierungseffekt stärker. Das Quenching nimmt bei Verringerung der Fermi-Energie ab. Bei $E_F = 2.0$ verläuft der Hall-Widerstand praktisch linear. Dies ist ein weiterer Hinweis für

den Kollimations-Effekt. Die niedrigste Mode hat eine transversale Eigenenergie von lediglich 0.03, das heißt, praktisch die gesamte Energie ist kinetisch. Bei einer Drittelung von $E_F = 6.0$ auf $E_F = 2.0$ ist die Mode nicht mehr „kräftig“ genug, um stark kollimiert im Kreuzungsbereich weiter geradeaus zu laufen, sondern wird stärker durch das Magnetfeld beeinflusst. Der zweite Effekt der niedrigeren Modenzahl ist bei eingeschalteter Randstreuung nicht so entscheidend, da die höheren Moden sowieso nur zu einem geringen Teil transmittiert werden. Ein komplettes Ausschalten hat nur noch geringe Auswirkungen.

Im Bend-Widerstand zeigt sich dagegen kaum eine Abhängigkeit von der Fermi-Energie, siehe Abbildung 6.10. Eine Verringerung der Fermi-Energie führt lediglich zu einer weiteren kleinen Absenkung von R_B . Dies zeigt wiederum den klassischen Ursprung dieses Effekts.

Im longitudinalen Widerstand schließlich zeigen sich nur die Auswirkungen der niedrigeren Anzahl von Moden, der Widerstand sinkt mit fallender Fermi-Energie deutlich ab, wie in Abbildung 6.11 gezeigt. Bei einer Verlängerung der Länge des Bereichs mit Randstreuung wächst, wie intuitiv klar, R_L an. Dies geschieht ganz ähnlich zum Fall ohne Streuung. Auch im qualitativen Verhalten besteht kein Unterschied zwischen den beiden Längen $L = 80$ und $L = 100$. Es war allerdings nicht möglich, ein ohmsches Verhalten (eine echte Proportionalität) über einen hinreichend großen Längenbereich zu testen.

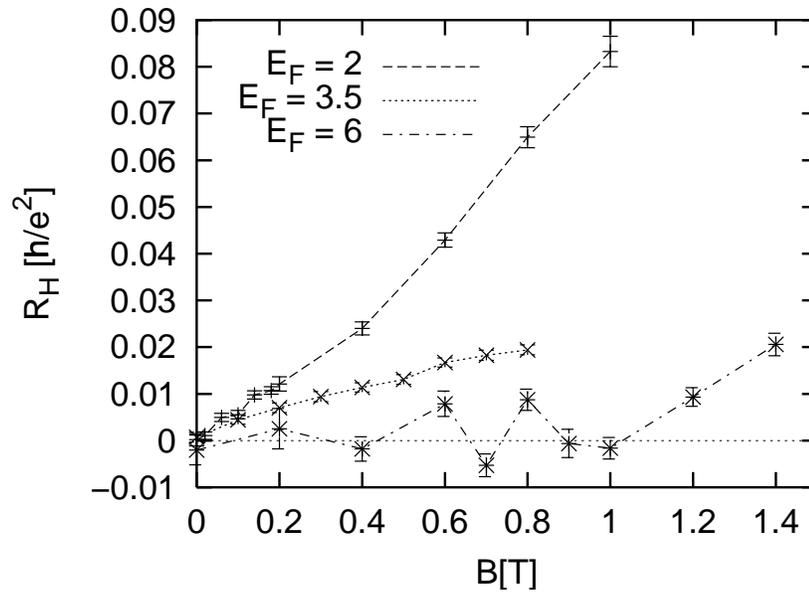


Abbildung 6.9: Hall-Widerstand bei verschiedenen Stärken der Fermi-Energie.

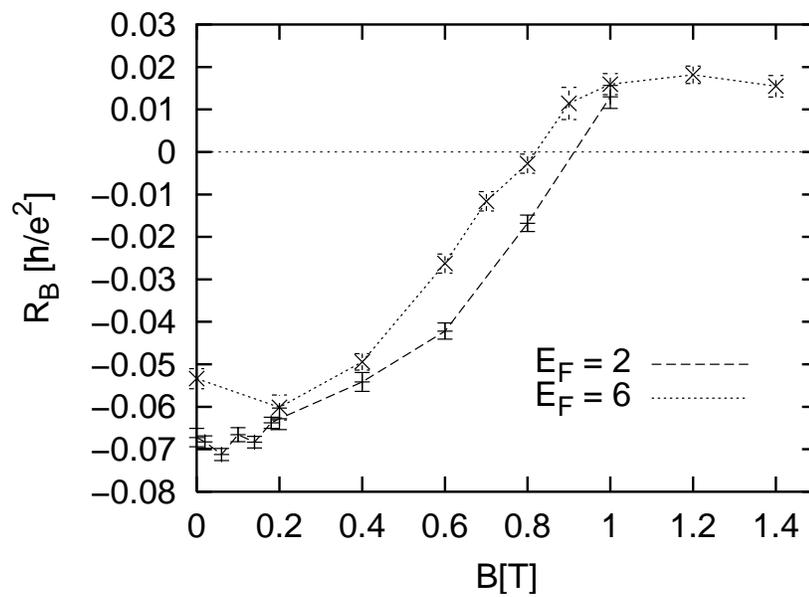


Abbildung 6.10: Bend-Widerstand bei verschiedenen Stärken der Fermi-Energie.

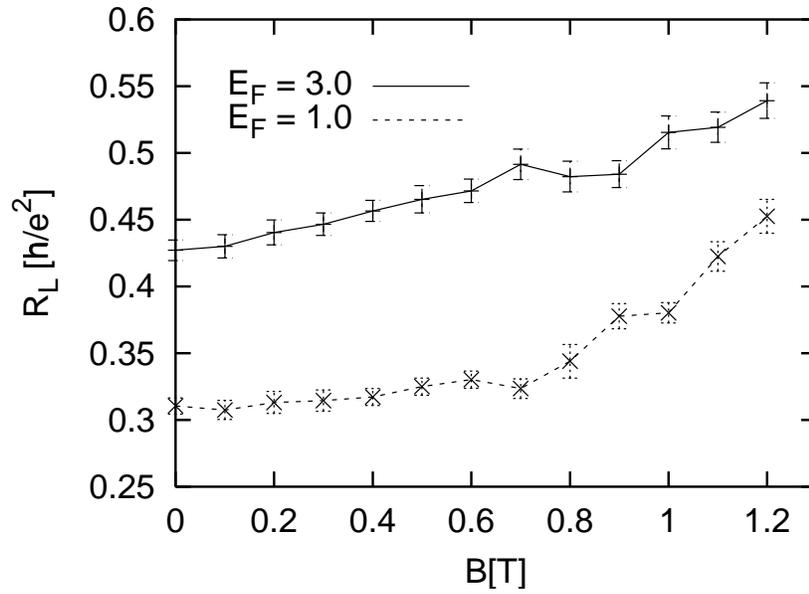


Abbildung 6.11: Longitudinaler Widerstand R_L bei verschiedenen Stärken der Fermi-Energie E_F .

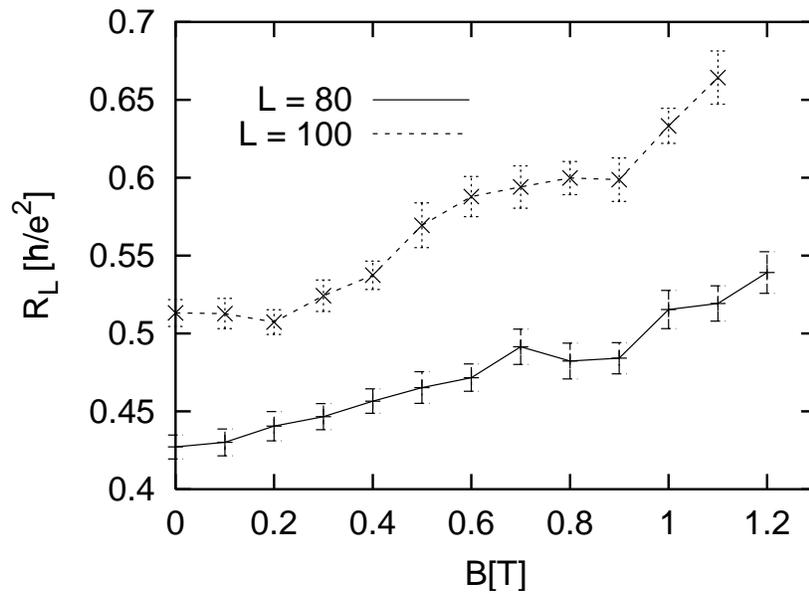


Abbildung 6.12: Longitudinaler Widerstand R_L für verschiedene Längen L des Streubereiches.

6.4 Ergebnisse für on-Site Unordnung

Um zu testen, ob die qualitativen Merkmale der berechneten Daten des letzten Abschnitts von der Art der Unordnung abhängen, testen wir ein zweites Modell. Es soll die Streuung durch Störstellen beschreiben, die im Volumen des Leiters auftreten. Im Modell besteht die Unordnung in einer zufälligen on-Site-Energie ϵ_n der einzelnen Sites. Sie ist im Hamilton-Operator (Gleichung 4.9) mit V_{nm} gekennzeichnet. An jedem Site wird V_{nm} zufällig bestimmt, mit einer konstanten Wahrscheinlichkeit aus einem Intervall $[-W, W]$, wobei W im Folgenden in Einheiten der Fermi-Energie (also nicht in Einheiten von $t!$) als der entscheidenden Energieskala angegeben wird.

Dieser Term ist nur in den magnetfelddurchsetzten Gebieten ungleich Null und wird ebenso wie das Magnetfeld adiabatisch eingeschaltet. Insgesamt waren die Simulationen etwas weniger aufwändig, da die Breite der Verteilung der einzelnen Werte kleiner als im Fall der Randstreuung war. Daher waren bei den hier gezeigten Läufen nur ungefähr 200 Realisationen nötig. Die Geometrie ist unverändert zum letzten Abschnitt.

In Abbildung 6.13 ist der Bend-Widerstand für verschiedene Stärken der on-Site-Unordnung aufgetragen. Wir können deutliche Unterschiede zum Fall der Randstreuung erkennen: Zwar ist der Bend-Widerstand negativ für niedrige Magnetfelder, aber bei Randstreuung wird er bei mittleren Magnetfeldern positiv, um dann auf Null abzusinken. Hier bleibt er über einen großen Bereich negativ, um schließlich für hohe Magnetfelder auch gegen Null zu gehen. Dies ist auch ein wesentlicher Unterschied zur Simulation ohne jegliche Streuung, bei der es ja auch zu Magnetfeldbereichen mit positivem R_B kommt.

Der Hall-Widerstand zeigt in Abbildung 6.14 eine Tendenz zu einem Quenching bei ganz niedrigen Magnetfeldern, allerdings nur bei relativ kleinen Werten von $W = 0.1E_F$. Die Tendenz zu einem Quenching nimmt mit steigender Stärke der Unordnung schnell ab. Bei $W = 0.2E_F$ sieht es sogar schon eher nach einem linearen Verlauf aus, allerdings ist hier keine eindeutige Aussage aufgrund der großen Fehler möglich. Selbst für einen linearen Verlauf ist aber die Steigung, also der Hall-Koeffizient deutlich kleiner als bei einem Leiter ohne Streuung.

Eine on-site-Unordnung wirkt, anders als die Randstreuung, auf alle Moden gleichermaßen. Darüberhinaus kommt es zu starker Streuung zwischen den einzelnen Moden, so dass Argumente, die sich auf einigermaßen lange freie Weglängen berufen, nicht möglich sind. So ist wohl ein fehlender positiver Bereich im Bend-Widerstand darauf zurückzuführen, dass die Elektronen trotz stärkeren Magnetfelds nicht lange genug ohne Streuung bleiben, um T_F so weit zu mindern, dass R_B positiv werden kann. Ebenso zerstört auch eine Verstärkung der Unordnung ein eventuelles Quenching, das bei $W = 0.1E_F$ noch auftreten könnte.

Der longitudinale Widerstand R_L wächst stark mit zunehmender Unordnung an, R_L ist im Wesentlichen direkt proportional zu W . Im Gegensatz zur Randstreuung scheint hier jedoch ein negativer Magnetowiderstand aufzutreten, jedoch ist

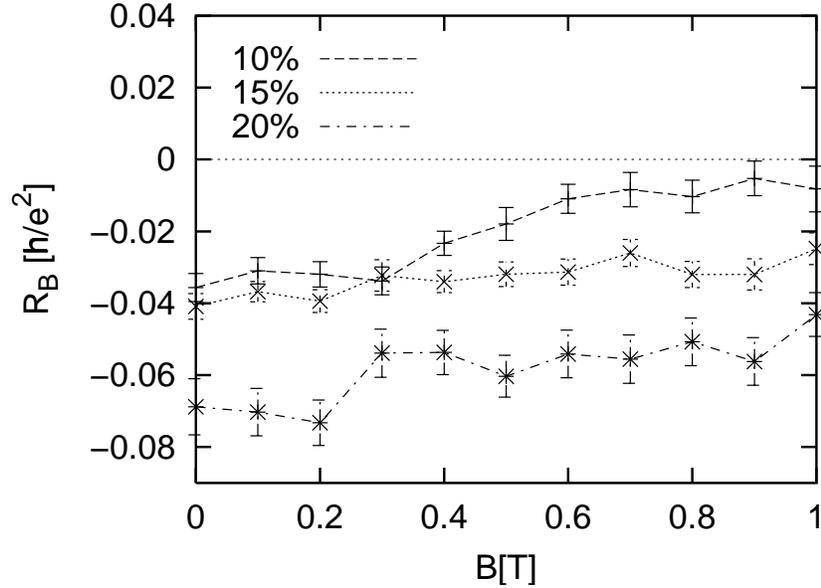


Abbildung 6.13: Bend-Widerstand bei verschiedenen Stärken der on-site Unordnung in Prozent der Fermi-Energie E_F .

das Verhalten bei kleinem W und höheren Magnetfeldern nicht eindeutig. Dort scheint R_L ab einem Magnetfeld von $0.8 T$ wieder zuzunehmen. Insgesamt sind hier kleinere W aufgetragen, da bei Unordnung über $0.1E_F$ bei einzelnen Realisationen Ergebnisse auftraten, die um mehrere Größenordnungen über den durchschnittlichen lagen – es kam also bereits zu einem Übergang in ein lokalisiertes Regime.

Insgesamt bestehen also zwischen diesen beiden Arten von Unordnung deutliche Unterschiede, so dass in einem Experiment Rand- und Volumenstreuung eindeutig getrennt werden können. Als Fazit ergibt sich also, dass alle drei der im Experiment von Mikhailov et al. (1998) gemessenen Größen qualitativ durch ein Modell mit Randstreuung erklärt werden können, dagegen scheint die Volumenstreuung nur eine untergeordnete Rolle zu spielen.

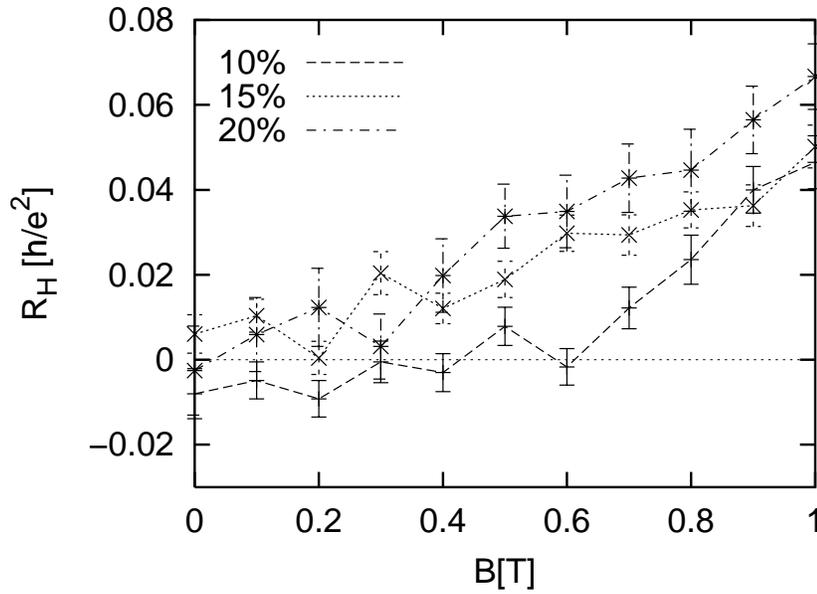


Abbildung 6.14: Hall-Widerstand bei verschiedenen Stärken der on-site Unordnung in Prozent der Fermi-Energie E_F .

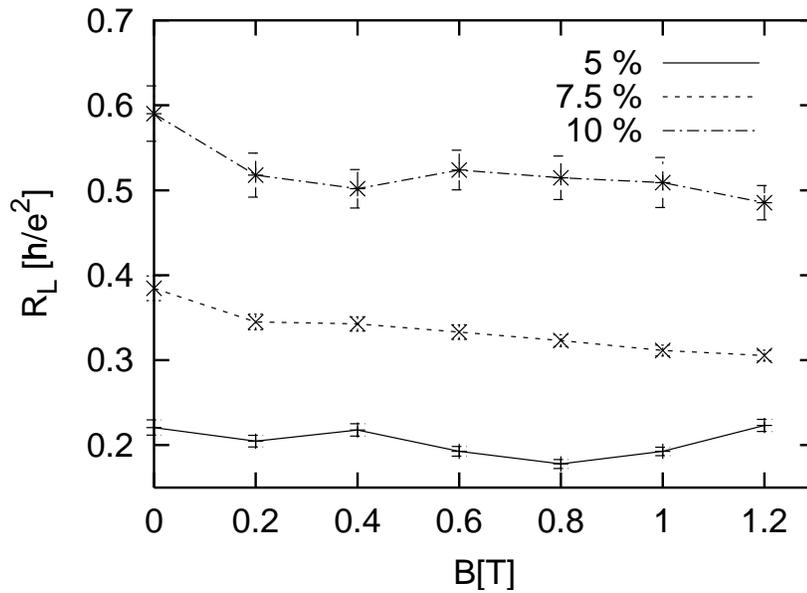


Abbildung 6.15: longitudinaler Widerstand bei verschiedenen Stärken der on-site Unordnung in Prozent der Fermi-Energie E_F .

Kapitel 7

Streuung an einzelnen Störstellen

7.1 Die schwache Lokalisierung

In Metallen, die aufgrund einer hohen Störstellenkonzentration ungeordnet sind, treten Abweichungen von der klassischen Drude-Leitfähigkeit σ_0 auf. Wenn nun die mittlere freie Weglänge l_0 von der Größenordnung der Fermi-Wellenlänge oder kleiner ist, sollten die elektronischen Eigenzustände lokalisiert sein. Dieses Regime ist in höchstem Maß nicht-klassisch und zeichnet sich durch ein totales Verschwinden der Leitfähigkeit σ bei Temperatur Null aus. Der Übergang zur Lokalisierung von der metallischen Seite kann durch eine Störungstheorie mit dem Verhältnis λ_F/l_0 als kleinem Parameter beschrieben werden. Dies führt bereits in erster Ordnung auf die sogenannte schwache Lokalisierung. Dabei zeigt sich bereits in führender Ordnung dieser Störungstheorie eine starke Abhängigkeit von der Dimension der betrachteten Probe. Während in drei Dimensionen nur eine schwache Korrektur auftritt, divergiert diese in Dimensionen $d \leq 2$ schon in erster Ordnung mit der Systemgröße.

Die herkömmliche Art der Ableitung dieses Ergebnisses führt über die Berechnung sogenannter Langer-Neal-Graphen und eine Aufsummation einer geometrischen Reihe von maximal gekreuzten Graphen. Details finden sich zum Beispiel in Lee und Ramakrishnan (1985).

Chakravarty und Schmid (1986) stellten eine physikalisch viel anschaulichere Methode vor, mit der die Korrekturen der schwachen Lokalisierung zur Leitfähigkeit berechnet werden können, die im Folgenden kurz vorgestellt werden soll. Sie hat den Vorteil, dass ein intuitiver Zugang zu den physikalischen Ursachen dieses Phänomens vorgetragen wird. Diese physikalischen Gründe werden uns auch im Folgenden weiter beschäftigen.

In der klassischen Transporttheorie gilt, dass die Leitfähigkeit σ mit der Diffusionskonstante D über die Einstein-Relation verknüpft ist:

$$\sigma = 2e^2 N(\epsilon_F) D, \quad (7.1)$$

wobei wir die Zustandsdichte an der Fermi-Energie hier mit $N(\epsilon_F)$ bezeichnen.

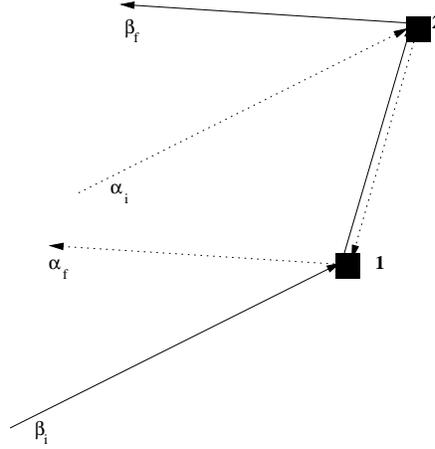


Abbildung 7.1: Konstruktive Interferenz bei der Streuung an zwei Zentren.

In der klassischen Boltzmann-Theorie kann die Diffusionskonstante aus der integrierten Geschwindigkeitskorrelationsfunktion K berechnet werden:

$$K := \frac{1}{3} \int_0^{\infty} dt \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = D_0. \quad (7.2)$$

Dabei sollte der Geschwindigkeitskorrelator exponentiell mit der Zeit auf einer Skala abfallen, welche durch die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen τ gegeben ist. Damit ergibt sich die Diffusionskonstante zu $D = 1/3v_F^2\tau = 1/3v_F l_0$, wobei $l_0 = v_F\tau$ die mittlere freie Weglänge ist.

Dieses Resultat bedeutet einfach, dass nach einem Stoß, der nach einer Zeitskala τ oder einer räumlichen Skala l_0 stattfindet, jegliche Korrelation der Endgeschwindigkeit zur Anfangsgeschwindigkeit verloren gegangen ist.

Im quantenmechanischen Fall gibt es Interferenzeffekte zwischen der End- und Anfangsgeschwindigkeit. Diese hängen natürlich stark von der jeweiligen Lage des Streuzentrums ab und fallen deshalb normalerweise bei einer Mittelung über eine zufällige Anordnung von Störstellen weg. Allerdings gibt es eine Klasse von Streueignissen, die einen endlichen Interferenzbeitrag liefern und damit für die schwache Lokalisierung verantwortlich sind.

Betrachten wir nun folgende Anordnung zweier Störstellen 1 und 2 und zwei mögliche Wege für eine einfallende Welle wie in Abbildung 7.1. Ein Weg (α) führt entlang der gepunkteten Linie von der einfallenden Front α_i über Störstelle 2 zu 1 und fällt dann entlang α_f wieder aus, der Weg β (durchgezogene Linie) führt dagegen zunächst zu 1 und dann zu 2.

Die totale Wahrscheinlichkeit für diesen Prozess erhalten wir semiklassisch, indem die Amplituden über die klassischen Wege addiert werden. Dies führt zur Gesamtamplitude:

$$|\psi|^2 = |\psi_\alpha|^2 + |\psi_\beta|^2 + \psi_\alpha\psi_\beta^* + \psi_\beta\psi_\alpha^* \quad (7.3)$$

Die ersten beiden Terme sind die klassischen Streuterme, daneben tragen aber noch die beiden Interferenzterme konstruktiv bei, wie wir gleich sehen werden. Sie haben einen negativen Beitrag zum Geschwindigkeitskorrelator K und vermindern dadurch die Leitfähigkeit. Betrachten wir zwei Punkte (der Einfachheit halber nehmen wir an, dass es sich ebenfalls um Streuzentren handelt) \mathbf{r}_i (Anfangspunkt) und \mathbf{r}_f (Endpunkt), zwischen denen die Matrixelemente zur Berechnung von K gebildet werden. Die Endzustände der beiden Wellen bei \mathbf{r}_f sind auslaufende Streuwellen, deren Ursprung bei \mathbf{r}_1 bzw. \mathbf{r}_2 liegen. Dabei müssen wir berücksichtigen, dass zwischen den beiden Orten keine weitere Streuung stattgefunden haben darf, es gilt also:

$$\psi_\alpha^f = g(\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_1) \quad \text{und} \quad \psi_\beta^f = g(\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_2) \quad (7.4)$$

mit $g(\mathbf{r}) = 1/(4\pi l_0)^{1/2} \exp(i(k_F + i/2l_0)r)/r$. Damit gilt dann:

$$\langle \psi_\beta^f | \mathbf{v} | \psi_\alpha^f \rangle = \frac{\hbar}{mi} \int d\mathbf{r}_f g^*(\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_2) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_f} g(\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_1) \quad (7.5)$$

$$= -\frac{\hbar}{mi} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} q(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (7.6)$$

$$\text{mit } q(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}_f g^*(\mathbf{r}_f) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_f) = \frac{\sin k_F r}{k_F r} e^{-r/2l_0} \quad (7.7)$$

Für die Anfangszustände gilt, da es sich ebenfalls um Streuwellen handelt, dass das zu betrachtende Matrixelement das gleiche ist, also $\langle \psi_\alpha^i | \mathbf{v} | \psi_\beta^i \rangle = \langle \psi_\beta^f | \mathbf{v} | \psi_\alpha^f \rangle$.

Insgesamt ergibt sich für den zusätzlichen Term im Geschwindigkeitskorrelator ΔK :

$$\Delta K = \frac{1}{3} \int_0^\infty \int d\mathbf{r}_i \langle \psi_\alpha^i | \mathbf{v} | \psi_\beta^i \rangle^2. \quad (7.8)$$

Die Differenziation im Matrixelement muss im quasiklassischen Limit nur im schnell oszillierenden Zähler vorgenommen werden, daraus entsteht im Absolutquadrat ein Term $\cos^2(k_F r)$. Dieser kann bei der Unordnungsmittelung durch seinen Mittelwert $1/2$ ersetzt werden und es ergibt sich schließlich:

$$\Delta K = -\frac{1}{3} v_F^2 \frac{\lambda_F^2 l_0}{2\pi} \int dt W_t. \quad (7.9)$$

Wenn dieses Verfahren anstelle zweier Störstellen für viele durchgeführt wird, so kann dasselbe Argument für die Verbindung von jeweils zweien angesetzt werden. Damit bleibt das Resultat gleich, es gibt für jede besuchte Störstellenkombination $1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow n$ eine weitere $n \rightarrow n-1 \rightarrow \dots \rightarrow 1$, die zu einer konstruktiven Interferenz führt. Allerdings müssen auch die ausfallenden bzw. einfallenden Wellen bei 1 und n noch kohärent sein, daher dürfen diese Streuzentren nicht weiter als l_0 auseinanderliegen, das heisst, die Welle muss effektiv zu ihrem Ausgangspunkt zurückgestreut werden. Daher wird dieses Phänomen auch

kohärente Rückwärtsstreuung genannt. Bei der Betrachtung vieler Störstellen ist die Näherung sinnvoll, dass $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_n$. Dann muss der obige Ausdruck noch mit der Wahrscheinlichkeit multipliziert werden (dies ist in obiger Formel schon der Fall), dass die Welle überhaupt noch einmal in einer Zeit t zu ihrem Ausgangspunkt zurückkehrt. Diese Wahrscheinlichkeit ist mit W_t bezeichnet. Sie kann mit Hilfe der klassischen Diffusionsgleichung leicht berechnet werden und ergibt sich zu:

$$W_t = (4\pi D_0 t)^{-d/2} a^{-(3-d)}. \quad (7.10)$$

für eine Geometrie, die in d Dimensionen auf eine Länge L ausgedehnt ist und in die übrigen $3 - d$ Dimensionen die Dicke a besitzt. In $d \leq 2$ divergiert das Zeitintegral über W_t . Daher führt man eine Phasenkohärenzzeit τ_0 ein, auf der W_t exponentiell abnimmt: $W_t \rightarrow W_t \exp(-t/\tau_0)$.

Damit erhalten wir als Endergebnis für die Korrektur der schwachen Lokalisierung zur Leitfähigkeit, bzw. zum Leitwert durch eine Einheit (Kubus, Quadrat oder Länge) Δg :

$$\Delta g = \Delta \sigma a^{3-d} = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \begin{cases} (3/\pi)^{1/2} l_0^{-1} & (d = 3) \\ \ln(\tau_0/\tau) & (d = 2) \\ 2\pi(D\tau_0)^{1/2} & (d = 1) \end{cases} \quad (7.11)$$

Auch wenn das obige Resultat mit demjenigen aus einer diagrammatischen Störungsrechnung vollständig übereinstimmt, so hat doch die vorgestellte Ableitung mit Hilfe des Zwei-Störstellen-Problems durch Chakravarty und Schmid (1986) einen qualitativen Charakter. Allerdings ist es die einzige Formulierung, die vom Niveau einzelner Störstellen auf die makroskopische Auswirkung in der Leitfähigkeit schließt.

7.2 Der Reibungskoeffizient zweier Störstellen

Eine weitere, sehr eng mit der Leitfähigkeit bzw. dem Widerstand verknüpfte Größe ist der Reibungskoeffizient oder die Energie-Transferrate (ETR). Es liegt daher nahe zu überprüfen, ob in dieser Größe eine zusätzliche Reibung, bzw. zusätzlicher Energieverlust durch die Interferenz zweier Streuzentren auftritt. Dazu kommt der Vorteil, dass die Rechnung ohne Näherung analytisch durchgeführt werden kann.

Das betrachtete Modell ist ein Elektronengas und ein mit konstanter Geschwindigkeit \mathbf{v} strömendes, bei $\mathbf{x} = \mathbf{v}t$ lokalisiertes Störpotenzial $V_{\mathbf{v}t}$. Ist $|\phi(t)\rangle$ eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung, dann ist die Rate, mit der dem Elektronengas Energie entzogen wird, gegeben durch (Schönhammer 1988):

$$(\Delta \dot{\epsilon})_t = \langle \phi(t) | \dot{V}_{\mathbf{v}t} | \phi(t) \rangle. \quad (7.12)$$

Der Reibungskoeffizient für eine oder mehrere Störstelle(n) η mit Masse M ist dann definiert durch:

$$\eta(v) = \frac{(\Delta\dot{\epsilon})_t}{Mv^2}. \quad (7.13)$$

Die gesamte Reibungskraft von N_i Störstellen ist $\mathbf{F} = -N_i\eta\mathbf{v}$. Dies kann im Rahmen der Drude-Theorie mit $\mathbf{F} = -NM\mathbf{v}/\tau$ gleichgesetzt werden, N ist die Anzahl der Elektronen. Dies verknüpft die Stoßzeit τ mit η über $1/\tau = (N_i/N)(\eta/M)$. Diese liefert aber via $\rho = M/ne^2\tau$ den spezifischen Widerstand (n ist hier die Elektronendichte).

Gemäß Schönhammer (1988) können wir dann die ETR durch Kraftmatrixelemente mit Streuzuständen $|\mathbf{p}+\rangle$ als Eigenzuständen des Hamilton-Operators bilden:

$$(\Delta\dot{\epsilon})_t = \int d\mathbf{p} f(\epsilon_{\mathbf{p}}) \left\langle (\mathbf{p} - m\mathbf{v}) + \left| \left(-\mathbf{v} \cdot \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}} \right) \right| (\mathbf{p} - m\mathbf{v}) + \right\rangle \quad (7.14)$$

Diese Matrixelemente können ausgerechnet werden, indem die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, von der $|\mathbf{p}+\rangle$ ja eine Lösung ist, nach \mathbf{x} abgeleitet und durch eine Green'sche Identität in ein Oberflächenintegral über eine Kugel mit Radius r (mit $r \rightarrow \infty$) umgewandelt wird:

$$\langle \mathbf{p} + | \nabla_{\mathbf{x}} V | \mathbf{p} + \rangle = \int dS \frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi_{\mathbf{p}}^* \frac{\partial}{\partial r} \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{p}} - \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{p}} \frac{\partial \psi_{\mathbf{p}}^*}{\partial r} \right). \quad (7.15)$$

7.2.1 Eine Störstelle

Eine Rechnung für eine Störstelle wird von Bönig und Schönhammer (1989) durchgeführt. Dabei gilt für die Wellenfunktion mit einer Streuamplitude $f(\theta)$:

$$\psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{h^{3/2}} \left(e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} + f \frac{e^{ipr/\hbar}}{r} \right). \quad (7.16)$$

Die Ableitungen lauten dann folgendermaßen:

$$\nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{h^{3/2}} \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} + \frac{i}{\hbar} f p \hat{\mathbf{x}} \frac{e^{ipr/\hbar}}{r} \right), \quad (7.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{h^{3/2}} \left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\hat{\mathbf{x}}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} + \frac{i}{\hbar} f p \frac{e^{ipr/\hbar}}{r} \right), \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{h^{3/2}} \left(-\frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{p}\hat{\mathbf{x}}) \mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} - \frac{1}{\hbar^2} f p^2 \hat{\mathbf{x}} \frac{e^{ipr/\hbar}}{r} \right). \quad (7.19)$$

Mit Hilfe der Relation

$$\int d\Omega_{\mathbf{x}} (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}) f(\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, r) = \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{p}} \int d\Omega_{\mathbf{x}} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{x}}) f(\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, r) \quad (7.20)$$

können wir das Kraftmatrixelement, welches zu berechnen ist, auch darstellen als:

$$\langle \mathbf{p} + |\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} V| \mathbf{p} + \rangle = -\frac{p}{m} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{r \rightarrow \infty} \int d\Omega_{\mathbf{x}} \left\{ \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{x}} |f|^2 + \frac{r}{2} (1 + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{x}}) (f^* e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} e^{-ipr/\hbar} + h.c.) \right\}.$$

Im zweiten Term des Integranden gilt nun wegen

$$\lim_{pr \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar - ipr/\hbar} = \frac{2\pi\hbar}{ipr} \delta(\Omega_{\hat{\mathbf{p}}} - \Omega_{\hat{\mathbf{x}}}), \quad (7.21)$$

dass dieser nach Integration zu $-(4\pi\hbar/p)\text{Im}f(0)$ wird, gemäß dem optischen Theorem also zu dem totalen Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega (1 - \cos\theta) \sigma(\theta)$.

Insgesamt ergibt sich also für das Matrixelement:

$$\langle \mathbf{p} + |\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} V| \mathbf{p} + \rangle = \frac{p}{m} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}}{(2\pi\hbar)^3} \left(\sigma_{\text{tot}} - \int d\Omega_{\mathbf{x}} \cos\theta |f(\theta)|^2 \right). \quad (7.22)$$

Der Ausdruck in Klammern entspricht aber gerade dem Transportquerschnitt σ_{tr} , als Endresultat ergibt sich also für die ETR einer einzelnen Störstelle

$$(\Delta\dot{\epsilon})_t = - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\epsilon_{\mathbf{p}-m\mathbf{v}}) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}) \frac{p}{m} \sigma_{tr}. \quad (7.23)$$

7.2.2 Zwei Störstellen

Nun betrachten wir zwei Störstellen an Orten $\mathbf{r}_{\mathbf{A}}$ und $\mathbf{r}_{\mathbf{B}}$. Dann können wir analog zu oben in niedrigster Ordnung für die Wellenfunktion ansetzen:

$$\psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\hbar^{3/2}} \left(e^{(i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar)} + f_1 \frac{e^{ipr_1/\hbar}}{r_1} + f_2 \frac{e^{ipr_2/\hbar}}{r_2} \right). \quad (7.24)$$

Dabei wird von jetzt ab $r_1 = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{A}}|$ und $r_2 = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{B}}|$ gesetzt.

Damit können dann auch die Ableitungen wie oben angegeben werden:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{p}} &= \frac{1}{\hbar^{3/2}} \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} e^{(i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar)} + \frac{i}{\hbar} f_1 p \hat{\mathbf{x}}_1 \frac{e^{ipr_1/\hbar}}{r_1} + \frac{i}{\hbar} f_2 p \hat{\mathbf{x}}_2 \frac{e^{ipr_2/\hbar}}{r_2} \right) \\ \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\mathbf{p}} &= \frac{1}{\hbar^{3/2}} \left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\hat{\mathbf{x}}) e^{(i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar)} + \frac{i}{\hbar} f_1 p \frac{e^{ipr_1/\hbar}}{r_1} + \frac{i}{\hbar} f_2 p \frac{e^{ipr_2/\hbar}}{r_2} \right) \\ \frac{\partial}{\partial r} \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{p}} &= -\frac{1}{\hbar^{3/2}} \frac{1}{\hbar^2} \left((\mathbf{p}\hat{\mathbf{x}}) \mathbf{p} e^{(i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar)} + f_1 p^2 \hat{\mathbf{x}}_1 \frac{e^{ipr_1/\hbar}}{r_1} + f_2 p^2 \hat{\mathbf{x}}_2 \frac{e^{ipr_2/\hbar}}{r_2} \right) \end{aligned}$$

Nach dem Einsetzen in das Matrixelement können die Terme, welche allein zu einer der beiden Störstellen gehören, leicht identifiziert werden. Sie liefern natürlich

einen Term proportional zum Transportquerschnitt wie im Ein-Störstellen-Fall. Da wir im Limes $r \rightarrow \infty$ arbeiten, können wir $\hat{\mathbf{x}}_1 = \hat{\mathbf{x}}_2 = \hat{\mathbf{x}}$ setzen. Außerdem treten aber auch zusätzliche Interferenzterme auf, die folgende Gestalt haben:

$$\langle \mathbf{p} + |\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} V| \mathbf{p} + \rangle |_{Int.} = -\frac{1}{mh^3} \lim_{r \rightarrow \infty} \int d\Omega_{\mathbf{x}} \left\{ 2(f_1 f_2^*) p^2 (\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) e^{ip(r_1 - r_2)/\hbar} \frac{r^2}{r_1 r_2} + 2(f_1^* f_2) p^2 (\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) e^{-ip(r_1 - r_2)/\hbar} \frac{r^2}{r_1 r_2} \right\}$$

Nun kann (7.20) angewendet werden. Im Limes ($r \rightarrow \infty$) gilt $r^2/r_1 r_2 = 1$ und $(r_1 - r_2) = 0$, und so folgt schließlich für den Interferenzbeitrag zum Matrixelement:

$$\langle \mathbf{p} + |\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} V| \mathbf{p} + \rangle |_{Int.} = -\frac{4p}{m(2\pi\hbar)^3} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}) \int d\Omega_{\mathbf{x}} \cos \theta |f(\theta)|^2. \quad (7.25)$$

Damit gibt es zwar einen Interferenzbeitrag zur Energie-Transferrate, allerdings verschwindet dieser im Fall von reiner s-Wellen-Streuung, da dort f keine Winkelabhängigkeit hat und daher das Winkelintegral über $\cos(\theta)$ Null ist. Da die schwache Lokalisierung von der Art der Streuung unabhängig ist, spiegelt sich offenbar die damit verbundene Reduktion der Leitfähigkeit nicht in einer entsprechend erhöhten Energie-Transferrate für zwei Störstellen wider. Erst für höhere Drehimpulsbeiträge (p-Wellen-Streuung, etc.) gibt es einen zusätzlichen Energieverlust des Elektronengases.

7.3 Rückstreuung im Backflow einer einzelnen Störstelle

7.3.1 Reduktion der Transmission durch eine Störstelle in einer Dimension

Selbst eine einzige Störstelle kann in niedrigen Dimensionen schon zu dramatischen Auswirkungen in den Transporteigenschaften führen. So zeigten Matveev, Yue und Glazman (1993), dass die Transmission in einer Dimension in einem Elektronengas, dessen Wechselwirkung in Hartree-Fock-Näherung beschrieben werden kann, schon bei Streuung an einer Störstelle völlig verschwindet. Dabei wird die Störstelle durch ein Delta-Potenzial bei $x = 0$ genähert. Im wechselwirkungsfreien Fall spaltet sich eine einkommende Welle in zwei Teile, einen transmittierten mit Amplitude t_0 und einen reflektierten Anteil mit Amplitude r_0 . Matveev et al. untersuchten nun, wie sich bei Einschalten einer Elektron-Elektron-Wechselwirkung $V(x - y)$ die Größen t_0 und r_0 verändern. Dabei streuen die Elektronen an V_H , dem Hartree-Potenzial, und an V_{ex} , dem Austauschpotenzial mit

$$V_H(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dz V(y - z) \delta n(z)$$

$$V_{ex}(y, z) = V(y - z) \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \psi_k^*(y) \psi_k(z).$$

Die Modulation der Dichte $\delta n(z)$ oszilliert mit $2k_F$ und wird als Friedel-Oszillation bezeichnet. Sie hat ihren Ursprung in der scharfen Kante der Impulsabhängigkeit, welche sich nach einer Fourier-Transformation in eine Oszillation umwandelt:

$$\delta n(z) = \frac{|r_0|}{2\pi|z|} \sin(2k_F|z| + \arg(r_0)). \quad (7.26)$$

In einer Störungsrechnung erster Ordnung in $V(x - y)$ sinkt die Transmission von ihrem freien Wert $T_0 = |t_0|^2$ um δT mit:

$$\delta T = -2\alpha T_0(1 - T_0) \ln \left(\frac{1}{|k - k_F|d} \right), \quad (7.27)$$

wobei d eine Reichweite des Potentials V angibt und α eine dimensionslose Größe für Stärke der Wechselwirkung ist, $\alpha = (V(0) - V(2k_F))/(2\pi\hbar v_F)$. Die beiden Terme kommen direkt aus dem Hartree-Beitrag ($V(0)$) bzw. dem Austauschpotential.

Dieses Resultat divergiert für $k \rightarrow k_F$. Um ein endliches Resultat zu erhalten, müssen also unendlich viele Terme in der Störungsentwicklung aufsummiert werden. Dies geschieht hier durch eine Renormierungsgruppenrechnung. Nur eine Energieschale mit Breite $D_0 = \hbar v_F/d$ kann überhaupt gestreut werden, da die Wechselwirkung räumlich beschränkt ist. Wird diese Schale auf eine kleinere transformiert, muss gleichzeitig auch T_0 transformiert werden. Diese Transformation führt schließlich zur Renormierungsgleichung, die angewandt wird, bis eine Energieschale von einer Breite $k_B\tau$ erreicht ist (wir bezeichnen hier die Temperatur mit τ , um eine Verwechslung mit der Transmission zu vermeiden). Die renormierte Transmission T lautet dann:

$$T = \frac{T_0(k_B\tau/D_0)^{2\alpha}}{R_0 + T_0(k_B\tau/D_0)^{2\alpha}}. \quad (7.28)$$

Dabei ist $R_0 = 1 - T_0$ die freie Reflektionswahrscheinlichkeit. Wie leicht erkennbar, verschwindet die Transmissionswahrscheinlichkeit für $\tau \rightarrow 0$ algebraisch. Ein analoges Verschwinden Resultat wurde bereits von Kane und Fisher (1992) mittels Bosonisierung gefunden. Sie fanden eine Abhängigkeit proportional zu $\tau^{2\alpha}$ für den Fall $T_0 \rightarrow 0$. Das vorliegende Resultat gilt dagegen für jegliches T_0 .

In der obigen Rechnung wurde der Spinfreiheitsgrad unterdrückt. Sein Einfluss wurde ebenfalls von Matveev et al. (1993) untersucht und liefert qualitativ ein ähnliches Resultat, wenn auch der Abfall der Transmission mit der Temperatur wegen einer größeren Anzahl von unterschiedlichen Wechselwirkungen komplizierter ist. Es bleibt aber bei einer totalen Reflektion einer einlaufenden Welle für bei Temperatur Null, das heißt, dass bereits eine einzige Störstelle in einer Luttingerflüssigkeit zu einer vollständigen Lokalisierung führt.

7.3.2 Berechnung des Rückstreuterm im Backflow einer einzelnen Störstelle

Da es selbst für eine einzige Störstelle mit verschwindender Streuung zu solch drastischen Auswirkungen im Transport in einer Dimension kommen kann, ist die Frage naheliegend, ob sich das Verhalten in höhere Dimensionen fortsetzt. Allerdings ist der Ansatz von Matveev et al. (1993) nicht in $d = 2$ fortsetzbar. In zwei und mehr Dimensionen ist die Streuwellenfunktion nicht mehr allein durch einen Parameter (t_0) gekennzeichnet, sondern durch eine winkelabhängige Streuamplitude $f(\theta)$. Dies macht eine analoge Rechnung unmöglich.

Allerdings treten Rückstreuterm, die ihren Ursprung in Friedel-Oszillationen haben, auch in einer anderen, einfacher zu berechnenden Größe auf, nämlich in der lokalen Stromverteilung in der Umgebung einer Störstelle.

Fließt eine Flüssigkeit an einem massiven Teilchen vorbei (bzw. fließt dieses durch die Flüssigkeit), so kommt es zu einer Änderung des Flusses, dem sogenannten „Backflow“. Wir betrachten hier den Fall einer Fermiflüssigkeit (vereinfachend als nicht-wechselwirkend angesehen), nämlich eines Elektronengases in einem stromdurchflossenen Leiter. In einem Bezugssystem, in dem die Störstelle am Nullpunkt ruht, ist der ungestörte Strom einfach als $\mathbf{j}_0(\mathbf{x}) = n\mathbf{v}$ gegeben, wobei n die Dichte der Elektronen darstellt und \mathbf{v} die Driftgeschwindigkeit ist. Durch Streuung an der Störstelle unterscheidet sich der resultierende Strom $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ von $\mathbf{j}_0(\mathbf{x})$ um den Backflow $\delta\mathbf{j}(\mathbf{x})$.

In linearer Antwort-Theorie hat der Backflow eine dipolare Struktur, wie von Pines und Nozieres (1966) erkannt. Der physikalische Hintergrund dieses Ergebnisses ist recht einfach, da der Backflow aufgrund der Stationarität keine Divergenz haben sollte, und keine Rotation, da es sich um eine longitudinale Störung handelt. Die einzige Vektorfunktion mit beiden Eigenschaften ist ein Dipol.

Zwinger (1997) berechnete die führenden Terme des Backflow im Abstand r von der Störstelle und fand neben dem dipolaren Beitrag von der Ordnung r^{-d} auch einen radialen Term proportional zu $r^{-(d-1)}$. Das Ergebnis in diesen beiden Ordnungen lautet für zwei oder drei Dimensionen:

$$\delta\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{k_F^d}{(2\pi)^d} \frac{\sigma_{tr}}{r^{(d-1)}} (\hat{\mathbf{x}}\mathbf{v})\hat{\mathbf{x}} - \frac{h_0}{2\pi(d-1)} \frac{d(\hat{\mathbf{x}}\mathbf{v})\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{v}}{r^d}. \quad (7.29)$$

Dabei bezeichnet σ_{tr} den Transportquerschnitt und die Größe h_0 kann durch die Phasenverschiebungen δ_l in einer üblichen Entwicklung nach Legendre-Polynomen ausgedrückt werden:

$$h_0 = -\frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} a_l \sin 2\delta_l - \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} c_l \sin \delta_l \sin \delta_{l+1} \sin(\delta_l - \delta_{l+1}). \quad (7.30)$$

Dabei ist in $d = 2$ a_l gleich $2 - \delta_{l,0}$ und $c_l = 2l + 1$, während in drei Dimensionen gilt: $a_l = 2l + 1$ und $c_l = (l + 1)^2$. Der dipolare Term hat einen weiteren Beitrag,

welcher zusätzlich mit einem Faktor $\exp(2ik_F r)$ moduliert ist. Diesen wollen wir im Folgenden berechnen. Er hat seinen Ursprung in Friedel-Oszillationen, die in d Dimensionen bei ruhender Fermiflüssigkeit, also $\mathbf{v} = 0$, zu folgender allgemeiner Modulation der Dichte führen:

$$\delta n(\mathbf{x}) \propto |f_{k_F}(\pi)| \frac{\cos(2k_F r + \phi)}{r^d}. \quad (7.31)$$

Den Strom können wir ausdrücken durch:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{k_F^{d-1}}{(2\pi)^d} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v} \operatorname{Im} (\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}))|_{k=k_F}. \quad (7.32)$$

Wir widmen uns zunächst dem Fall von drei Dimensionen. Dort gilt für die Wellenfunktion:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} + \tilde{f}(\theta) \frac{e^{ikr}}{r^2} + \mathcal{O}(r^{-3}). \quad (7.33)$$

Die Streuamplituden werden in ihre Drehimpulsbeiträge entwickelt:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}) \quad (7.34)$$

$$\tilde{f}(\theta) = \frac{1}{2k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) \frac{1}{2} l(l+1) P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}), \quad (7.35)$$

wobei $P_l(x)$ die Legendre-Polynome bezeichnet. Es folgt:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= i\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + ik\hat{\mathbf{x}} f \frac{e^{ikr}}{r} - f\hat{\mathbf{x}} \frac{e^{ikr}}{r^2} \\ &\quad + (\hat{\mathbf{k}} - (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{x}}) f' \frac{e^{ikr}}{r^2} + ik\hat{\mathbf{x}} \tilde{f} \frac{e^{ikr}}{r^2}. \end{aligned}$$

Bei der Berechnung von $\psi \nabla \psi$ treten Terme mit $\exp(2ik_F r)$ nur in solchen auf, die $\exp i(\mathbf{k}\mathbf{x} - kr)$ enthalten, denn:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{x}}). \quad (7.36)$$

Mit Y_{lm} sind die Kugelflächenfunktionen bezeichnet und $j_l(x)$ sind die Bessel-Funktionen 1. Art. Für sie gilt für große Argumente folgende Entwicklung:

$$j_l(kr) = \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{(kr)^2} \cos\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) + \mathcal{O}(r^{-3}) \quad (7.37)$$

und somit für den gesamten Ausdruck:

$$\begin{aligned} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - kr)} &= \sum_l \frac{(2l+1)}{2ikr} P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}) + \sum_l \frac{l(l+1)(2l+1)}{4(kr)^2} P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}) \\ &+ \sum_l i \frac{(2l+1)(-1)^l}{2kr} e^{-2ikr} P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}) + \sum_l i \frac{l(l+1)(2l+1)(-1)^l}{4(kr)^2} e^{-2ikr} P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}). \end{aligned}$$

Wir interessieren uns für die beiden letzten Terme, da sie proportional zu $\exp(2ik_F r)$ sind. Der erste enthält dabei eine Deltafunktion für den auftretenden Winkel $\delta(\Omega_{\hat{\mathbf{k}}} - \Omega_{-\hat{\mathbf{x}}})$. Die Terme in $\psi \nabla \psi$, die $\exp i(\mathbf{k}\mathbf{x} - kr)$ enthalten, sind:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &\rightarrow ik\hat{\mathbf{x}}f \frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r} + i\mathbf{k}f^* \frac{e^{-i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r} - f\hat{\mathbf{x}} \frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^2} \\ &+ f'(\hat{\mathbf{k}} - (\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{x}}) \frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^2} + ik\hat{\mathbf{x}}\tilde{f} \frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^2} + i\mathbf{k}\tilde{f}^* \frac{e^{-i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^2}. \end{aligned}$$

Somit können wir zunächst die Terme proportional zu r^{-2} betrachten. Für diese gilt:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|_{k=k_F} &\Rightarrow \frac{k_F}{r} (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{k}}) \operatorname{Re} \left\{ f(\theta) e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})} \right\} \\ &\Rightarrow \frac{1}{2r^2} (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{k}}) \operatorname{Re} \left\{ f(\theta) \sum_l i(2l+1)(-1)^l e^{-2ik_F r} P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}) \right\} \\ &= \frac{1}{2r^2} (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{k}}) \operatorname{Im} \left\{ f(\theta) e^{-2ik_F r} \sum_l (2l+1)(-1)^l P_l(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}}) \right\} \\ &= 0, \end{aligned}$$

denn die letzte Summe über l ergibt die oben angesprochene Deltafunktion $\delta(\Omega_{\hat{\mathbf{k}}} - \Omega_{-\hat{\mathbf{x}}})$, die $(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{k}})$ verschwinden läßt. Damit treten Terme mit $e^{-2ik_F r}$ erst in der Ordnung r^{-3} auf. Aus dem gleichen Grund wie eben fallen auch die Terme mit \tilde{f} weg, und da auch $(\hat{\mathbf{k}} - (\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{x}})$ für $\hat{\mathbf{k}} = -\hat{\mathbf{x}}$ Null ist, sind nur drei Terme zu betrachten, nämlich:

$$\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \Rightarrow ik\hat{\mathbf{x}}f \frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r} + i\mathbf{k}f^* \frac{e^{-i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r} - f\hat{\mathbf{x}} \frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^2}. \quad (7.38)$$

Die Berechnung dieser Terme wird in Anhang B durchgeführt. Das Ergebnis für den Backflow lässt sich am besten in folgender allgemeiner Form des Stroms angeben:

$$\delta\mathbf{j}(\mathbf{x}) = h_0(r)(\hat{\mathbf{x}}\mathbf{v})\hat{\mathbf{x}} + h_1(r)\mathbf{v}. \quad (7.39)$$

Die Rechnung liefert für die $2k_F$ -Beiträge (vergleiche (B.16) und (B.17)):

$$h_1(r) = -\frac{a}{2r^3} \operatorname{Re}\{f(\pi)e^{2ik_F r}\} + \frac{ak_F}{r^2} \operatorname{Im}\{f(\pi)e^{2ik_F r}\}, \quad (7.40)$$

$$h_0(r) = \frac{3a}{2r^3} \operatorname{Re}\{f(\pi)e^{2ik_F r}\} - \frac{ak_F}{r^2} \operatorname{Im}\{f(\pi)e^{2ik_F r}\}. \quad (7.41)$$

mit $a = -2k_F/(2\pi)^3$.

In zwei Dimensionen ist eine ganz analoge Rechnung möglich. Dort lautet die Streuwellenfunktion in zweiter Ordnung:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f_2(\phi) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} + \tilde{f}_2(\phi) \frac{e^{ikr}}{r^{3/2}} \quad (7.42)$$

mit

$$f_2(\phi) = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{k}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{l=0}^{\infty} e^{il\phi} e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

$$\tilde{f}_2(\phi) = -\frac{e^{-i\pi/4}}{8k^{3/2}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{l=0}^{\infty} (4l^2 - 1) e^{il\phi} e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

Die Entwicklung von $\exp i(\mathbf{k}\mathbf{x} - kr)$ lautet in zwei Dimensionen:

$$e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - kr)} = \sqrt{\frac{2\pi}{kr}} \left(e^{-i\pi/4} \delta(\phi) + e^{-2ikr+i\pi/4} \delta(\phi - \pi) \right)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2\pi kr}} \sum_l \frac{4l^2 - 1}{8kr} e^{il\phi} e^{i\pi/4} - \frac{1}{\sqrt{2\pi kr}} \sum_l \frac{4l^2 - 1}{8kr} e^{il\phi} e^{-2ikr+i\pi-\pi/4}$$

Wiederum sind die Terme proportional zu e^{2ikr} leicht zu erkennen. In der Entwicklung von $\psi_{\mathbf{k}} \nabla \psi_{\mathbf{k}}$ tritt $\exp i(\mathbf{k}\mathbf{x} - kr)$ in diesen Termen auf:

$$\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \rightarrow ik \hat{\mathbf{x}} f_2 \frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{\sqrt{r}} + i\mathbf{k} f_2^* \frac{e^{-i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{\sqrt{r}} - f_2 \hat{\mathbf{x}} \frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{2r^{3/2}}$$

$$+ f_2'(\hat{\mathbf{k}} - (\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{x}}) \frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^{3/2}} + ik \hat{\mathbf{x}} \tilde{f}_2 \frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^{3/2}} + i\mathbf{k} \tilde{f}_2^* \frac{e^{-i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^{3/2}}.$$

Da der Term in $\exp i(\mathbf{k}\mathbf{x} - kr)$ in niedrigster Ordnung ($r^{-1/2}$) wieder eine Deltafunktion im Winkel ($\delta(\phi - \pi)$) enthält, entfällt der Beitrag zur Rückwärtsstreuung in Ordnung r^{-1} genau analog zum Fall dreier Dimensionen. Damit liefern die Friedel-Oszillationen erst in der Ordnung r^{-2} einen Beitrag zum Backflow. Die dazu beitragenden Terme sind:

$$\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \Rightarrow ik \hat{\mathbf{x}} f_2 \frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{\sqrt{r}} + i\mathbf{k} f_2^* \frac{e^{-i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{\sqrt{r}} - f_2 \hat{\mathbf{x}} \frac{e^{i(kr - \mathbf{k}\mathbf{x})}}{2r^{3/2}}. \quad (7.43)$$

Die Berechnung dieses Beitrags, durchgeführt im Anhang B, liefert für die $2k_F$ -Beiträge bei Form des Stroms aus (7.39) (vergleiche (B.31) und (B.32)):

$$h_1(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} k_F r^2} \text{Im}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\} + \frac{2}{(2\pi)^{3/2} r^2} \text{Re}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\}, \quad (7.44)$$

$$h_0(r) = -\frac{2}{(2\pi)^{3/2} k_F r^2} \text{Im}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\} - \frac{2}{(2\pi)^{3/2} r^2} \text{Re}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\}. \quad (7.45)$$

Kapitel 8

Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse

Ausgangspunkt für die vorliegende Arbeit waren die experimentellen Daten von Mikhailov et al. (1998). Dort wurden Widerstandsmessungen im Magnetfeld in einer ballistischen metallischen Probe durchgeführt, in der Streuung an der Oberfläche der dominante Streuterm war.

In zwei geeigneten Geometrien, einer Kreuz- und einer langgestreckten Geometrie, berechneten wir den Hall-, Bend- und den longitudinalen Widerstand unter dem Einfluss von Randstreuung. Die Geometrien wurden in einem Tight-Binding-Modell diskretisiert.

Die Berechnung der Widerstände geschah im Rahmen des Landauer-Büttiker-Formalismus. Dazu wurde zunächst direkt aus der Resolvente die Green-Funktion bestimmt, wobei die unendlichen Zuleitungen in Form einer Selbstenergie exakt berücksichtigt wurden. Aus der Green-Funktion konnten die gewünschten Widerstände über die Transmissionsamplituden bestimmt werden. Die Randstreuung selbst wurde simuliert, indem auf einigen Randsites die on-Site-Energie stark erhöht wurde.

Bei Rechnungen ohne Randstreuung konnten wir die wesentlichen Features des integralen Quanten-Hall-Effekts herausarbeiten. Im Hall-Widerstand waren mehrere Plateaus sichtbar, auch wenn die Anzahl der Plateaus, das dazugehörige Magnetfeld und die Übergänge stark von der gewählten Breite der Zuleitungen abhängig waren. Die Tatsache, dass der Bend- bzw. der longitudinale Widerstand auf Null zurückgehen, konnte ebenso gezeigt werden.

Bei Berücksichtigung von Randstreuung traten neue Phänomene auf. So wurde der Hall-Widerstand bei kleinen Magnetfeldern gequench, der Bend-Widerstand war bei kleinen Magnetfeldern negativ und wechselte bei größeren Feldern das Vorzeichen. Der longitudinale Widerstand zeichnete sich durch einen positiven Magnetowiderstand aus. Dabei waren der Hall- und der Bend-Widerstand von der Stärke der Randstreuung unabhängig, der longitudinale Widerstand war näherungsweise proportional zur Randstreuung.

Die physikalische Erklärung dieser Effekte beruhte auf der Kollimation des Elektronenstrahls, ähnlich der Erklärungen Ende der 80-er Jahre, die das Quenching des Hall-Widerstandes auf Kollimation durch graduelle Öffnungen der Zuleitungen erklärten. Im Fall der Randstreuung kam Kollimation dadurch zustande, dass hohe Moden mit größerem Gradienten am Rand von der Streuung stärker beeinflusst wurden als niedrig liegende. Daher war die Driftgeschwindigkeit der Elektronen in der Mitte eines Drahtes mit Randstreuung höher als außen. Dieses Modell wurde auch durch die Beobachtung gestützt, dass der Effekt mit sinkender Fermi-Energie verschwindet.

Außerdem behandelten wir ein etwas anders gelagertes Problem, nämlich den Einfluss einzelner Störstellen auf den Strom und die Energie-Transferrate. Wir fanden, dass der Energieverlust von zwei Störstellen bei s-Wellen-Streuung einfach durch das Doppelte des Ergebnisses einer Störstelle gegeben ist, und in dieser Größe keine Verbindung zu einer erhöhten Rückstreuung durch schwache Lokalisierung erkennbar war. Daneben berechneten wir einen Beitrag zum Backflow des Stroms in der Anwesenheit einer einzelnen Störstelle, der seinen Ursprung in Friedel-Oszillationen hat.

Als Ausblick bleibt zu hoffen, dass das spannende Gebiet der Randstreuung in ballistischen metallischen Leitern weitere Experimente hervorbringt. Besonders eine Variation der Randstreuung wäre ein sehr interessanter Versuch im Hinblick auf die vorhergesagte Unabhängigkeit des Hall- und Bend-Widerstandes. Auch wäre die zweifellos sehr schwierige Messung einer lokalen Geschwindigkeitsverteilung wünschenswert. In diesem Zusammenhang wäre auch eine bessere numerische Behandlung der Stromverteilung im Rahmen von Nicht-Gleichgewichts-Green-Funktionen wichtig.

Anhang A

Berechnung einiger Green-Funktionen

A.1 Green-Funktion für einen unendlichen Draht

Als Beispiel für die Berechnung einer Green-Funktion betrachten wir einen zweidimensionalen perfekten, in x -Richtung unendlichen langen Leiter ohne Magnetfeld. Wir können sie $G(x, y, x', y')$ nennen. Dabei ist (x', y') der Ort der Anregung und (x, y) die Stelle, an der die Wellenfunktion betrachtet wird. Eine punktförmige Anregung sollte sich in ebenen Wellen vom Anfangspunkt wegbewegen, die sich nur in x -Richtung ausbreitet. Damit können wir zunächst folgenden Ansatz machen:

$$G(x, y, x', y') = \sum_{\pm} \sum_m A_m^{\pm} \chi_m(y) \exp[\pm i k_m(x - x')]. \quad (\text{A.1})$$

Mit A_m^+ und A_m^- sind die Amplituden der Wellen in positive und negative x -Richtung gemeint, m bezeichnet die verschiedenen Moden. Siehe dazu auch Figur A.1. Für die transversale Wellenfunktion der Eigenmode m χ_m gilt die transver-

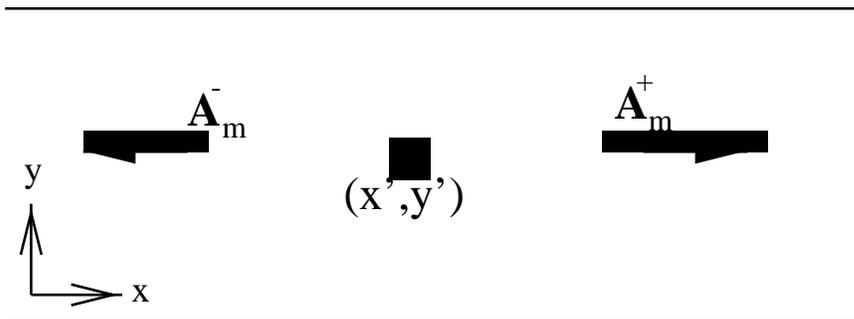


Abbildung A.1: Betrachtete Geometrie im Beispiel für den unendlichen Draht.

sale Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + U(y) \right] \chi_m(y) = \epsilon_{m,0} \chi_m(y). \quad (\text{A.2})$$

Dabei ist $U(y)$ das Einschlusspotenzial, das den Leiter an seinen Seiten begrenzt. Zum Beispiel könnte es sich dabei um ein „Harte-Wand“-Potenzial handeln, welches zu den Eigenenergien aus Gl. (3.4) führen würde. Die Eigenfunktionen $\chi_m(y)$ können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit als reell annehmen.

Um die Amplituden A_m^+ und A_m^- zu berechnen, müssen wir die Differenzialgleichung für die Green-Funktion (siehe 3.23)

$$\left[E - U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \right] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{A.3})$$

lösen, wobei bereits der Hamilton-Operator für das Problem eingesetzt worden ist. Die oben eingeführten ebenen Wellen lösen diese Gleichung an allen Punkten außer bei $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Daraus lassen sich folgende Bedingungen ableiten:

$$\begin{aligned} [G(x, y, x', y')]_{x=x'+} &= [G(x, y, x', y')]_{x=x'-} \\ \left[\frac{\partial G(x, y, x', y')}{\partial x} \right]_{x=x'+} - \left[\frac{\partial G(x, y, x', y')}{\partial x} \right]_{x=x'-} &= \delta(y - y'), \end{aligned}$$

die sich nach Einsetzen von (A.1) so darstellen:

$$\begin{aligned} \sum_m A_m^+ \chi_m(y) &= \sum_m A_m^- \chi_m(y) \\ \sum_m ik_m (A_m^+ + A_m^-) \chi_m(y) &= \frac{2m}{\hbar^2} \delta(y - y'). \end{aligned}$$

Da die Eigenfunktionen orthogonal zueinander sind, können wir beide Gleichungen mit einer anderen Eigenfunktion $\chi_{m'}(y)$ multiplizieren und über y integrieren. Dann erhalten wir aus der ersten Gleichung sofort die Gleichheit $A_m^+ = A_m^-$ und aus der zweiten folgt:

$$A_m^+ = A_m^- = -\frac{i}{\hbar v_m} \chi_m(y'). \quad (\text{A.4})$$

Dabei ist v_m wiederum die Geschwindigkeit der Mode m (siehe Gl. 3.2). Daneben gilt für den Wellenvektor k_m

$$k_m = \frac{\sqrt{2m(E - \epsilon_{m,0})}}{\hbar}. \quad (\text{A.5})$$

Als Endergebnis für die eindimensionale Green-Funktion eines unendlich langen Leiters erhalten wir also schliesslich durch Einsetzen von (A.4) in (A.1):

$$G(x, y, x', y') = \sum_m -\frac{i}{\hbar v_m} \chi_m(y) \chi_m(y') \exp[ik_m|x - x'|]. \quad (\text{A.6})$$

A.2 Green-Funktion für einen halbusendlichen Draht

Betrachten wir nun einen halbusendlichen Draht ähnlich zu dem obigen, aber nun mit einer harten Wand bei $x = 0$. Dort muss die Wellenfunktion also verschwinden. Damit kommen in x -Richtung nur noch Sinuswellen als Lösung der Schrödinger-Gleichung in Frage, wir können also für die Eigenfunktionen ansetzen:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{L}} \chi_m(y) \sin(\beta x). \quad (\text{A.7})$$

L ist die Länge des Drahtes und χ_m sind, wie üblich, die transversalen Eigenfunktionen. Durch Einsetzen in die Eigenfunktionsentwicklung (3.25) können wir nun die Green-Funktion in folgender Weise ausdrücken:

$$G(x, y, x, y') = \frac{2}{L} \sum_m \sum_{\beta > 0} \frac{\chi_m(y) \chi_m(y') \sin^2(\beta x)}{E - \epsilon_m - (\hbar^2 \beta^2 / 2M) + i\eta}, \quad (\text{A.8})$$

dabei ist ϵ_m die transversale Eigenenergie in der Mode m , M ist die (effektive) Elektron-Masse. Die Einschränkung $\beta > 0$ erfolgt, weil eine Ausdehnung ja nur in eine Richtung möglich ist. Im Limes $L \rightarrow \infty$ kann die β -Summe in ein Integral überführt werden:

$$G(x, y, x, y') = \frac{2}{\pi} \sum_m \chi_m(y) \chi_m(y') \int_0^\infty d\beta \frac{\sin^2(\beta x)}{E - \epsilon_m - (\hbar^2 \beta^2 / 2M) + i\eta}. \quad (\text{A.9})$$

Durch einfache trigonometrische Umformungen im Zähler des Integranden wird daraus:

$$G(x, y, x, y') = \frac{1}{2\pi} \sum_m \chi_m(y) \chi_m(y') \int_{-\infty}^\infty d\beta \frac{1 - \exp(2i\beta x)}{E - \epsilon_m - (\hbar^2 \beta^2 / 2M) + i\eta}. \quad (\text{A.10})$$

Dieses Integral können wir nun einfach durch eine Integration in der komplexen Ebene lösen. Dazu schließen wir die Kontur in der oberen Halbebene. Die Pole lassen sich bestimmen, indem wir den Nenner als

$$E - \epsilon_m - (\hbar^2 \beta^2 / 2M) + i\eta = -\frac{\hbar^2}{2M} (\beta^2 - k_m^2 (1 + i\delta)) \quad (\text{A.11})$$

schreiben. Dabei gilt:

$$k_m^2 = \frac{2M}{\hbar^2} (E - \epsilon_m) \quad \text{und} \quad \delta = \frac{\eta}{(E - \epsilon_m)}. \quad (\text{A.12})$$

k_m ist die Wellenzahl der Mode m . Also liegen die Pole bei

$$\beta = \pm k_m \sqrt{1 + i\delta} = \pm k_m \left(1 + \frac{i\delta}{2} \right). \quad (\text{A.13})$$

Die letzte Umformung gilt, da δ infinitesimal klein ist. Diese Größe dient dazu, die Pole von der reellen Achse zu verschieben. Einsetzen in (A.10) ergibt

$$G(x, y, x, y') = - \sum_m \chi_m(y) \chi_m(y') \frac{2 \sin(k_m x)}{\hbar v_m} \exp(ik_m x). \quad (\text{A.14})$$

Dabei ist v_m die Geschwindigkeit der Mode m , gegeben durch $v_m = \hbar k_m / M$. Dies ist die Lösung, falls wir einen kontinuierlichen Draht betrachten. Für den hier interessanten Fall eines Gitters mit Gitterlänge a , muss $x = a$ gesetzt werden. Die Werte für y und y' können vom Gitter übernommen werden. Mit Hilfe der Relation

$$\hbar v_m = 2at \sin(k_m a)$$

wegen $v = 1/\hbar \partial \epsilon / \partial k$ folgt dann als Endergebnis schließlich die Gleichung (4.14).

Anhang B

Berechnung des Backflow-Terms

B.1 $d = 3$

Wir starten bei der Berechnung des Backflow-Terms mit den zu betrachtenden Termen (vergleiche auch Gleichung (7.38)):

$$\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x})\nabla_{\mathbf{x}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \Rightarrow ik\hat{\mathbf{x}}f\frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r} + i\mathbf{k}f^*\frac{e^{-i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r} - f\hat{\mathbf{x}}\frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r^2}. \quad (\text{B.1})$$

Davon ist der Beitrag des dritten Terms nicht schwer zu untersuchen, denn dieser enthält eine Deltafunktion:

$$\text{Im}\{\psi^*\nabla\psi\} \Rightarrow \hat{\mathbf{x}}\frac{2\pi}{k_F r^3}\text{Re}\{f(\pi)e^{2ikr}\}\delta(\Omega_{\hat{\mathbf{k}}} - \Omega_{-\hat{\mathbf{x}}}), \quad (\text{B.2})$$

und daher für den Beitrag zum Strom:

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(3)} &= \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega_{\mathbf{k}} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}} \frac{2\pi}{k_F r^3} \text{Re}\{f(\pi)e^{2ikr}\} \delta(\Omega_{\hat{\mathbf{k}}} - \Omega_{-\hat{\mathbf{x}}}) \\ &= -\frac{\hat{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v})}{r^3} \frac{k_F}{(2\pi)^2} \text{Re}\{f(\pi)e^{2ikr}\}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Dagegen sind die beiden anderen Anteile nicht einfach für allgemeine $\hat{\mathbf{x}}$ zu berechnen. Allerdings kann hier der gleiche Trick wie bei der Berechnung des Vorwärtsstroms (Zwinger 1997) verwendet werden. Es muss gelten, dass der Strom und damit alle einzelnen Komponenten verschwindende Divergenz haben. Daher reicht es, den Strom an einer beliebigen Stelle auf der Einheitskugel zu bestimmen, dadurch wird die gesamte Funktion eindeutig charakterisiert. Wir wählen hier $\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}$. Daher bleiben zu berechnen:

$$\delta\mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(1)} = \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega_{\mathbf{k}} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}} k_F \text{Re} \left\{ f(\theta) \frac{e^{i(kr-\mathbf{k}\mathbf{x})}}{r} \right\} \Big|_{k=k_F, \hat{\mathbf{x}}=-\hat{\mathbf{v}}} \quad (\text{B.4})$$

und

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(2)} = \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega_{\mathbf{k}} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{k}} k_F^2 \operatorname{Re} \left\{ f(\theta) \frac{e^{i(kr - \mathbf{kx})}}{r} \right\} \Big|_{k=k_F, \hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}}. \quad (\text{B.5})$$

Zunächst betrachten wir das Integral aus (B.4). Mit $x = \cos \theta = (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{x}})$ und

$$\operatorname{Re} \left\{ f(\theta) \frac{e^{i(kr - \mathbf{kx})}}{r} \right\} = \frac{1}{8k_F^3 r^3} \sum_{l'} \operatorname{Re} \left\{ -i(e^{2i\delta_l} - 1) e^{2ikr} \right\} \\ (2l+1)l'(l'+1)(2l'+1)(-1)^{l'} P_l(x) P_{l'}(x) \quad (\text{B.6})$$

wird (B.4) zu:

$$- \frac{(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}}(2\pi)}{8k_F^2 r^3} \sum_{l'} \operatorname{Re} \left\{ -i(e^{2i\delta_l} - 1) e^{2ikr} \right\} (2l+1)l'(l'+1)(2l'+1)(-1)^{l'} \int_{-1}^1 dx x P_l(x) P_{l'}(x)$$

Das Integral findet sich zum Beispiel in Jackson (1975, (3.31)). Nach dem Einsetzen erhalten wir schließlich:

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(1)} = \frac{(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}}(2\pi)}{r^3} \operatorname{Im} \left\{ \tilde{f}(\pi) e^{2ik_F r} \right\} + \frac{(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}}(2\pi)}{k_F r^3} \operatorname{Re} \left\{ f(\pi) e^{2ik_F r} \right\}. \quad (\text{B.7})$$

Dementsprechend wird (B.5) mit (B.6) zu:

$$- \frac{(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}}(2\pi)}{8k_F r^3} \sum_{l'} \operatorname{Im} \left\{ -i(e^{2i\delta_l} - 1) e^{2ikr} \right\} (2l+1)l'(l'+1)(2l'+1)(-1)^{l'} \int_{-1}^1 dx x^2 P_l(x) P_{l'}(x)$$

Durch die Lösung des Integrals (Jackson 1975, (3.32)) folgt daraus:

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(2)} = - \frac{(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}}(2\pi)}{r^3} \operatorname{Im} \left\{ \tilde{f}(\pi) e^{2ik_F r} \right\} - 2 \frac{(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}}(2\pi)}{k_F r^3} \operatorname{Re} \left\{ f(\pi) e^{2ik_F r} \right\}. \quad (\text{B.8})$$

Als Endergebnis der Summe von (B.7), (B.8) und (B.3) ergibt sich für den vollständig bei $\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}$ zurückgestreuten Backflow-Beitrag:

$$\delta \mathbf{j}(\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}) = -2 \frac{k_F}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{v}}{r^3} \operatorname{Re} \left\{ f(\pi) e^{2ik_F r} \right\}. \quad (\text{B.9})$$

Allgemein hat der Strom die Gestalt:

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{x}) = h_0(r) (\hat{\mathbf{x}} \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}} + h_1(r) \mathbf{v}. \quad (\text{B.10})$$

Für $\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}$ gilt dann:

$$\delta \mathbf{j}(\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}) = [h_0(r) + h_1(r)] \mathbf{v}. \quad (\text{B.11})$$

Die Bestimmung von $h_0(r)$ und $h_1(r)$ einzeln kann durch die Forderung nach der Divergenzfreiheit erfolgen. Deshalb schreiben wir für $\nabla \cdot \delta \mathbf{j}(\mathbf{x}) = 0$ (B.10) in Kugelkoordinaten:

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{x}) = h_0(r)v \cos \theta \hat{e}_r + h_1(r)v \cos \theta \hat{e}_r - h_1(r)v \sin \theta \hat{e}_\theta \quad (\text{B.12})$$

Die Divergenz dieses Ausdrucks muss Null sein:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \delta \mathbf{j}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 (h_0(r) + h_1(r)) v \cos \theta \right] - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} [\sin \theta h_1(r) v \sin \theta] \\ &= \frac{v \cos \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 (h_0(r) + h_1(r)) \right] - 2 \frac{h_1(r) v \cos \theta}{r} \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Daraus folgt dann die Differenzialgleichung:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 (h_0(r) + h_1(r)) \right] - 2h_1(r) = 0. \quad (\text{B.14})$$

Mit (B.9) ergibt sich damit:

$$2h_1(r) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{a}{r} \operatorname{Re}\{f(\pi) e^{2ik_F r}\} \right] \quad \text{mit} \quad a = \frac{-2k_F}{(2\pi)^3} \quad (\text{B.15})$$

und schließlich als Endergebnis für die $2k_F$ -Beiträge:

$$h_1(r) = -\frac{a}{2r^3} \operatorname{Re}\{f(\pi) e^{2ik_F r}\} + \frac{ak_F}{r^2} \operatorname{Im}\{f(\pi) e^{2ik_F r}\}, \quad (\text{B.16})$$

$$h_0(r) = \frac{3a}{2r^3} \operatorname{Re}\{f(\pi) e^{2ik_F r}\} - \frac{ak_F}{r^2} \operatorname{Im}\{f(\pi) e^{2ik_F r}\}. \quad (\text{B.17})$$

B.2 $d = 2$

Hier ist der Ausgangspunkt Gleichung (7.43):

$$\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \Rightarrow ik \hat{\mathbf{x}} f_2 \frac{e^{i(kr - \mathbf{kx})}}{\sqrt{r}} + i\mathbf{k} f_2^* \frac{e^{-i(kr - \mathbf{kx})}}{\sqrt{r}} - f_2 \hat{\mathbf{x}} \frac{e^{i(kr - \mathbf{kx})}}{2r^{3/2}}. \quad (\text{B.18})$$

Der dritte Beitrag ist direkt zu berechnen, denn:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\{\psi \nabla \psi\} &\Rightarrow \frac{\hat{\mathbf{x}}}{2r^{3/2}} \operatorname{Im}\left\{f_2 \sqrt{\frac{2\pi}{kr}} e^{2ikr} e^{-i\pi/4} \delta(\phi - \pi)\right\} \\ &= \frac{\sqrt{2\pi} \hat{\mathbf{x}}}{2kr^2} \operatorname{Im}\{f_2(\pi) e^{2ikr}\} \delta(\phi - \pi). \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(3)} &= \frac{k_F}{(2\pi)^2} \int d\phi_{\mathbf{k}} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}) \frac{\sqrt{2\pi} \hat{\mathbf{x}}}{2kr^2} \operatorname{Im}\{f_2(\pi) e^{2ikr}\} \delta(\phi - \pi) \\ &= -\frac{\hat{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}}\mathbf{v})}{r^2} \frac{1}{2(2\pi)^{3/2}} \operatorname{Im}\{f_2(\pi) e^{2ikr}\}. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Für die beiden anderen Terme benutzen wir den gleichen Trick wie in drei Dimensionen, wir werten sie nur an der Stelle $\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}$ aus. Die Integrale lauten:

$$\delta\mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(1)} = \frac{k_F}{(2\pi)^2} \int d\phi_{\mathbf{k}} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}) \hat{\mathbf{x}} \operatorname{Re} \left\{ f_2(\theta) \frac{e^{i(kr-\mathbf{kx})}}{\sqrt{r}} \right\} \Big|_{k=k_F, \hat{\mathbf{x}}=-\hat{\mathbf{v}}}, \quad (\text{B.20})$$

$$\delta\mathbf{j}(\mathbf{x})|^{(2)} = \frac{k_F}{(2\pi)^2} \int d\phi_{\mathbf{k}} (\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{k} \operatorname{Re} \left\{ f_2(\theta) \frac{e^{i(kr-\mathbf{kx})}}{\sqrt{r}} \right\} \Big|_{k=k_F, \hat{\mathbf{x}}=-\hat{\mathbf{v}}}. \quad (\text{B.21})$$

Analysieren wir zunächst den Ausdruck aus (B.20):

$$\frac{k_F \hat{\mathbf{x}}}{\sqrt{r}} \operatorname{Re} \left\{ f_2(\theta) \frac{e^{i(kr-\mathbf{kx})}}{\sqrt{r}} \right\} = \frac{\hat{\mathbf{x}}}{\pi r} \sum_{l'} \sin \delta_l \frac{4l'^2 - 1}{8k_F r} \operatorname{Im} \{ e^{i(l-l')\phi} e^{i\delta_l} e^{2ik_F r - il'\pi} \}. \quad (\text{B.22})$$

Das zu berechnende Winkelintegral lautet dann:

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\phi \cos \phi \cos(l-l')\phi = \pi \cdot (\delta_{l-l',1} + \delta_{l+l',1}). \quad (\text{B.23})$$

Schließlich ergibt sich als Endergebnis für den Beitrag zum Backflow:

$$\delta\mathbf{j}(\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}})|^{(1)} = \frac{\hat{\mathbf{v}}}{8(2\pi)^{3/2} k_F r^2} \sum_l (8l^2 + 6) \operatorname{Im} \{ f_2(\pi) e^{2ik_F r} \}. \quad (\text{B.24})$$

In (B.21) muss folgender Ausdruck berechnet werden:

$$\frac{k_F \hat{\mathbf{k}}}{\sqrt{r}} \operatorname{Re} \left\{ f_2(\theta) \frac{e^{i(kr-\mathbf{kx})}}{\sqrt{r}} \right\} = \frac{\hat{\mathbf{k}}}{\pi r} \sum_{l'} \sin \delta_l \frac{4l'^2 - 1}{8k_F r} \operatorname{Im} \{ e^{i(l-l')\phi} e^{i\delta_l} e^{2ik_F r - il'\pi} \}. \quad (\text{B.25})$$

Diesmal entsteht das folgende ϕ -Integral:

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\phi \cos^2 \phi \cos(l-l')\phi = \pi \delta_{l,l'} + \frac{\pi}{2} (\delta_{l,l'+2} + \delta_{l,l'-2}). \quad (\text{B.26})$$

Das Endergebnis für diesen Term lautet:

$$\delta\mathbf{j}(\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}})|^{(2)} = -\frac{\hat{\mathbf{v}}}{8(2\pi)^{3/2} k_F r^2} \sum_l (8l^2 + 14) \operatorname{Im} \{ f_2(\pi) e^{2ik_F r} \}. \quad (\text{B.27})$$

Schließlich erhalten wir als Gesamtbackflow bei $\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}$ als Summe von (B.24), (B.27) und (B.19):

$$\delta\mathbf{j}(\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}})|^{(2)} = -\frac{\hat{\mathbf{v}}}{k_F (2\pi)^{3/2} r^2} \operatorname{Im} \{ f_2(\pi) e^{2ik_F r} \}. \quad (\text{B.28})$$

Nun müssen wir wieder versuchen, $h_0(r)$ und $h_1(r)$ aus Gleichung (B.10) zu erhalten. Diese Gleichung lautet in Polarkoordinaten:

$$\delta\mathbf{j}(\mathbf{x}) = h_0(r)v \cos \phi \hat{e}_r + h_1(r)v \cos \phi \hat{e}_r - h_1(r)v \sin \phi \hat{e}_\phi. \quad (\text{B.29})$$

Die Forderung nach der Divergenzfreiheit führt in zwei Dimensionen zu folgender Differenzialgleichung:

$$h_1(r) = \frac{\partial}{\partial r} (r(h_0(r) + h_1(r))) = \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{1}{\mathbf{v}} \delta\mathbf{j}(\hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{v}}) \right). \quad (\text{B.30})$$

Daraus folgt schließlich als Endergebnis in $d = 2$ für die $2k_F$ -Beiträge:

$$h_1(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} k_F r^2} \text{Im}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\} + \frac{2}{(2\pi)^{3/2} r^2} \text{Re}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\}, \quad (\text{B.31})$$

$$h_0(r) = -\frac{2}{(2\pi)^{3/2} k_F r^2} \text{Im}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\} - \frac{2}{(2\pi)^{3/2} r^2} \text{Re}\{f_2(\pi) e^{2ik_F r}\} \quad (\text{B.32})$$

Literaturverzeichnis

- Ashcroft, N. W. und Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics*. Philadelphia: Holt-Saunders.
- Baranger, H. U. und Stone, A. D. (1989a). *Phys. Rev. Lett.*, *63*, 414.
- Baranger, H. U. und Stone, A. D. (1989b). *Phys. Rev. B*, *40*, 8169.
- Beenakker, C. und van Houten, H. (1988). *Phys. Rev. Lett.*, *60*, 2406.
- Beenakker, C. und van Houten, H. (1989a). *Phys. Rev. B*, *39*, 10445.
- Beenakker, C. und van Houten, H. (1989b). *Phys. Rev. Lett.*, *63*, 1857.
- Beenakker, C. und van Houten, H. (1991). *Solid State Physics. Volume 44*, (S. 1-228). Boston: Academic Press.
- Bönig, L. und Schönhammer, K. (1989). *Phys. Rev. B*, *39*, 7413.
- Büttiker, M. (1986). *Phys. Rev. Lett.*, *57*, 1761.
- Büttiker, M. (1988). *Phys. Rev. B*, *38*, 9375.
- Chakraborty, T. und Pietiläinen, P. (1995). *The Quantum Hall Effects*. Berlin: Springer.
- Chakravarty, S. und Schmid, A. (1986). *Phys. Rep.*, *140*, 193.
- Chang, A. M., Chang, T. Y., und Baranger, H. U. (1989). *Phys. Rev. Lett.*, *63*, 996.
- Datta, S. (1995). *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge, Großbritannien: Cambridge University Press.
- Dingle, R. B. (1950). *Proc. Roy. Soc. A*, *201*, 545.
- Duboz, J. B., Badoz, P. A., Rosencher, E., Henz, J., Ospelt, M., von Känel, H., und Briggs, A. (1988). *Appl. Phys. Lett.*, *53*, 788.
- Ebert, G., von Klitzing, K., und Weimann, G. (1985). *J. Phys. C*, *18*, L257.

- Fisher, D. und Lee, P. A. (1981). *Phys. Rev. B*, *23*, 6851.
- Fishman, G. und Calecki, D. (1989). *Phys. Rev. Lett.*, *62*, 1302.
- Ford, C. J. B., Thornton, T. J., Newbury, R., Pepper, M., Ahmed, H., Peacock, D. C., Ritchie, D. A., Frost, J. E. F., und Jones, G. A. C. (1988). *Phys. Rev. B*, *38*, 8518.
- Ford, C. J. B., Washburn, S., Büttiker, M., Knoedler, C. M., und Hong, J. M. (1989). *Phys. Rev. Lett.*, *62*, 2724.
- Fuchs, K. (1938). *Proc. Camb. Phil. Soc.*, *34*, 100.
- Halperin, B. I. (1982). *Phys. Rev. B*, *25*, 2185.
- Henz, J., von Känel, H., Ospelt, M., und Wachter, P. (1987). *Surf. Sci.*, *189/190*, 1055.
- Jackson, J. D. (1975). *Classical Electrodynamics*. New York: Wiley.
- Kane, C. L. und Fisher, M. P. A. (1992). *Phys. Rev. Lett.*, *68*, 1220.
- Lee, P. A. und Ramakrishnan, T. V. (1985). *Rev. Mod. Phys.*, *57*, 287.
- MacDonald, A. H. und Streda, P. (1984). *Phys. Rev. B*, *29*, 1616.
- Matveev, K. A., Yue, D., und Glazman, L. I. (1993). *Phys. Rev. Lett.*, *71*, 3351.
- Mikhailov, G. M., Apershina, L. I., Chernykh, A. V., Dubonos, S. V., Koval, Y. I., und Malikov, I. V. (1998). *Nanotechn.*, *9*, 1.
- Mikhailov, G. M., Chernykh, A. V., Dubonos, S. V., Koval, Y. I., Malikov, I. V., Fioshko, A. M., Joyez, P., Pothier, H., Pierre, F., Urbina, C., Devoret, M. H., Esteve, D., Ryen, L., und Olsson, E. (1998). unpubl.
- Mikhailov, G. M., Chernykh, A. V., und Petrashov, V. T. (1996). *J. Appl. Phys.*, *80*, 948.
- Mohr, P. J. und Taylor, B. N. (2000). *Rev. Mod. Phys.*, *72*, 351.
- Nicholas, R. J., von Klitzing, K., und Englert, T. (1980). *Solid State Comm.*, *33*, 51.
- Ono, Y. (1982). *J. Phys. Soc. Jpn.*, *51*, 237.
- Paalanen, M. A., Tsui, D. C., und Gossard, A. C. (1982). *Phys. Rev. B*, *25*, 5566.
- Pines, D. und Nozieres, P. (1966). *The Theory of Quantum Liquids*. New York: Benjamin.

- Prange, R. E. und Girvin, S. M. (1987). *The Quantum Hall Effect*. New York: Springer.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., und Flannery, B. P. (1992). *Numerical Recipes in C*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Ravenhall, D. G., Wyld, H. W., und Schult, H. W. (1989). *Phys. Rev. Lett.*, *62*, 1780.
- Roukes, M. L., Scherer, A., Allen Jr., S. J., Craighead, H. G., Ruthen, R. M., Beebe, E. D., und Harbison, J. P. (1987). *Phys. Rev. Lett.*, *59*, 3011.
- Schönhammer, K. (1988). *Phys. Rev. B*, *37*, 7735.
- Sheng, L., Xing, D. Y., und Wang, Z. D. (1995). *Phys. Rev. B*, *51*, 7325.
- Sichel, E. K., Sample, H. H., und Salerno, J. P. (1985). *Phys. Rev. B*, *32*, 6975.
- Sondheimer, E. H. (1952). *Adv. Phys.*, *1*, 1.
- Takagaki, Y., Gamo, K., Namba, S., Ishida, S., Ishibashi, K., und Murase, K. (1988). *Solid State Comm.*, *68*, 1051.
- Tešanović, Z., Jarić, M., und Maekawa, S. (1986). *Phys. Rev. Lett.*, *57*, 2760.
- Thomson, J. J. (1901). *Proc. Camb. Phil. Soc.*, *11*, 120.
- Thornton, T. J. (1998). *Superlattices and Microstructures*, *23*, 601.
- Timp, G., Baranger, H. U., deVegvar, P., Cunningham, J. E., Howard, R. E., Behringer, R., und Mankiewich, P. M. (1988). *Phys. Rev. Lett.*, *60*, 2081.
- Trivedi, N. und Ashcroft, N. W. (1988). *Phys. Rev. B*, *38*, 12298.
- Tsui, D. C. und Gossard, A. C. (1981). *Appl. Phys. Lett.*, *38*, 550.
- Ulreich, S. und Zwerger, W. (1998). *Europhys. Lett.*, *41*, 117.
- van Wees, B. J., van Houten, H., Beenakker, C., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P., van der Marel, D., und Foxon, C. T. (1988). *Phys. Rev. Lett.*, *60*, 848.
- von Klitzing, K., Dorda, G., und Pepper, M. (1980). *Phys. Rev. Lett.*, *45*, 494.
- Wegner, F. (1983). *Z. Phys. B*, *51*, 279.
- Wharam, D. A., Thornton, T. J., Newbury, R., Pepper, M., Ahmen, H., Frost, J. E. F., Hasko, D. G., Peacock, D. C., Ritchie, D. A., und Jones, G. A. C. (1988). *J. Phys. C*, *21*, L209.

Yacoby, A. und Imry, Y. (1990). *Phys. Rev. B*, *41*, 5341.

Zwerger, W. (1997). *Phys. Rev. Lett.*, *79*, 5270.

Zwerger, W. (1998). *Quantum Transport and Dissipation*, (S. 1-79). Weinheim: Wiley-VCH.

Lebenslauf

5.5. 1973 Geburt in Berlin
1979-1983 Melanchthon-Grundschule in Oberhausen/Rheinland
1983-1992 Freiherr-vom-Stein-Gymnasium in Oberhausen/Rheinland
darin 1989/90 Austauschjahr an der St. Clair High School in St. Clair, MI/USA
1992-1997 Studium der Physik an der RWTH Aachen
1996/97 Anfertigung der Diplomarbeit bei Prof. Dr. Vollhardt
 in Aachen und am EKM Augsburg
 Thema: „Gitterunabhängiger Wert am Kreuzungspunkt
 der spezifischen Wärme von Hubbard-Modellen“
1993-1997 Stipendiat der Studienstiftung des deutschen Volkes
ab 1997 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der
 Ludwig-Maximilians-Universität München