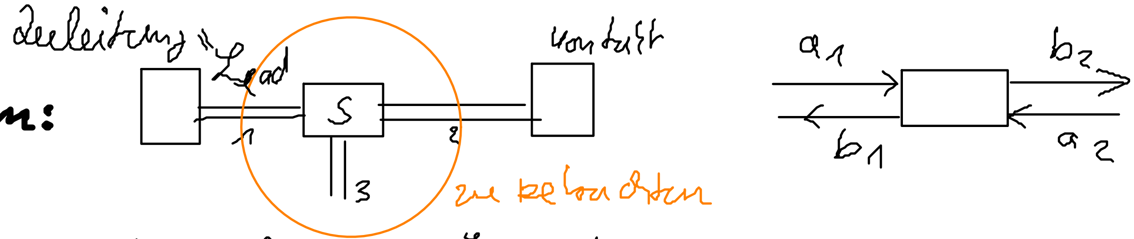
3 Anwendungen der Streutheorie des Leitwerts

3.1 Greensche Funktion und die Spurformel der Transmission

• **Bisher:** $I_p = \sum'_q G_{p\leftarrow q}(V_p - V_q)$

$$G_{p\leftarrow q} = \frac{2e^2}{h} T_{p\leftarrow q} \quad ; \quad T_{p\leftarrow q} = \sum'_{m\in q} \sum'_{n\in p} T_{nm}$$

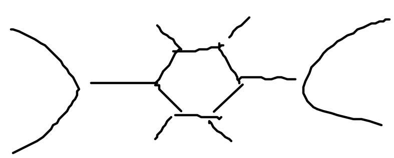
• **System:**



$T_{nm} = |S_{nm}|^2$; $\vec{b} = S\vec{a}$; S unitäre Streumatrix

• **Ziel:** Konkrete Berechnung der Streumatrix eines (beliebig geformten) Streuers

z.B. Molekül



• S-Matrix ist Antwort bei Lead x aufgrund von Anregung bei anderem Lead y

• G-Funktion ist Antwort bei Ort $\vec{r}$ aufgrund von Anregung bei $\vec{r}\,'$

• Annahme: nicht wechselwirkende Elektronen $L \ll L_m, L_\varphi$

⇒ kohärenter Transport

⇒ erhalte S und G durch Lösen der Schrödingergleichung

Literatur: Economou, Green's Functions in Quantum Physics

$(z - L(\vec{r}))\, u(\vec{r}) = f(\vec{r})$ (*) inhomogene DGL

↑ komplex

$L(\vec{r})$ Differentialoperator

hier: zeitunabh., linear und hermitesch

Definiere Greensche Fkt:

$$(z - L(\vec{r}))\, G(\vec{r}, \vec{r}\,', z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$$

Lösung von (*): $u(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r'\, G(\vec{r}, \vec{r}\,', z)\, f(\vec{r}\,')$

$L(\vec{r})\,\phi_n(\vec{r}) = \lambda_n\,\phi_n(\vec{r})$ $\{\phi_n(\vec{r})\}$ bilden vollst. orthonormale Basis

$\int d^3r'\,\phi_n^*\,\phi_m = \delta_{nm}$ und $\sum_n \phi_n^*\,\phi_n = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$

- wie in QM:

$\phi_n(\vec{r}) = \langle r|\phi_n\rangle$ $\phi_n^*(\vec{r}) = \langle \phi_n|r\rangle$

$\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') = L(\vec{r}) = \langle r|L|r'\rangle$ $L = |r\rangle L\,|r\rangle\langle r|$

$A_{ij} = \delta_{ij}A_i = \langle i|A|j\rangle = \underbrace{\langle i|j\rangle}_{\delta_{ij}}\langle i|A|i\rangle$

$G(\vec{r},\vec{r}\,',z) = \langle r|G|r'\rangle$

$\langle r|r'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$ $\int d^3r\,|r\rangle\langle r| = 1$

$(z-L)\,G = 1$

$L|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle$; $\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}$, $\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1$

"$G = \dfrac{1}{z-L}$" oder $G(z) = \dfrac{1}{z-L}\sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \sum_n \dfrac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z-\lambda_n}$

Nebenrechnung

$\langle\vec{r}|\,(z-L)\int d^3r'\,|r'\rangle\langle r'|\,G\,|r''\rangle$

$= \int d^3r'\,\delta(r-r')\,(z-L)\,\langle r'|G|r''\rangle$

$= (z-L)\,G(r,r'',z) = \langle r|r''\rangle$

- $G(z)$ hat Polstellen bei $\lambda_n = z$ bestimmen die (diskreten) Eigenwerte von L

- retardierte GF: $G^r(\vec{r},\vec{r}\,',\lambda) = \lim_{s\to 0^+} G(\vec{r},\vec{r}\,',\lambda+is)$

- avancierte GF: $G^a(\vec{r},\vec{r}\,',\lambda) = \lim_{s\to 0^+} G(\vec{r},\vec{r}\,',\lambda-is)$

Identität $G^a(\vec{r},\vec{r}\,',z) = \left(\sum_n \dfrac{\phi_n(\vec{r})\,\phi_n^*(\vec{r}\,')}{z-\lambda_n}\right)^*$ λ_n reell da L hermitesch

$= G(\vec{r}\,',\vec{r},z^*)$

$G^a(\vec{r},\vec{r}\,',\lambda) = G^r(\vec{r}\,',\vec{r},\lambda)$

$$\lim_{y\to 0^+}\frac{1}{x\pm iy} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\,\delta(x)$$

Spektralfunktion $A(\vec{r},\vec{r}\,',E) = i(G^r - G^a)$

lokale Zustandsdichte $\rho(\vec{r},E) = \dfrac{1}{2\pi}A(\vec{r},\vec{r},E) = \mp\dfrac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[G^{r/a}(\vec{r},\vec{r},E)\right]$

Zustandsdichte $N(E) = \frac{1}{2\pi}\,\mathrm{Tr}(A(\vec r,\vec r',E)) = \frac{1}{2\pi}\int d^3r\, A(\vec r,\vec r,E)$

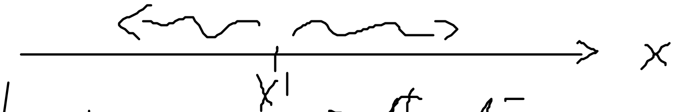
$$= \mp \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}[\mathrm{Tr}(G^{r/a}(\vec r,\vec r',E))]$$

Beispiel: 1D-Draht bei const. Potential $U=U_0$

$$\left(E - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U_0\right)\right) G(x,x') = \delta(x-x')$$

$$G(x,x') = \begin{cases} A^+ \exp[ik(x-x')] & x>x' \\ A^- \exp[-ik(x-x')] & x<x'\end{cases} \quad \text{mit } k = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$$

• Anschlussbed.: (retardiert)



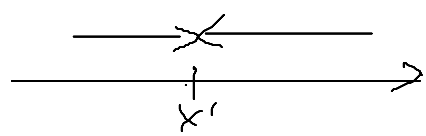
$G(x,x')|_{x=x'^+} = G(x,x')|_{x=x'^-} \Rightarrow A^+=A^-$

$\frac{\partial G}{\partial x}\Big|_{x=x'^+} - \frac{\partial G}{\partial x}\Big|_{x=x'^-} = \frac{2m}{\hbar^2} \quad \Rightarrow ik(A^+ + A^-) = \frac{2m}{\hbar^2}$

$\Rightarrow A^+ = -\frac{i}{\hbar v}$ mit $v = \frac{\hbar k}{m}$

$G^r(x,x') = \frac{i}{\hbar v}\exp[ik|x-x'|]$

• Zweite Lösung: (avanciert)



$G^a(x,x') = -\frac{i}{\hbar v}\exp[-ik|x-x'|]$

• oder über $G^{r/a}(E) = \sum_n \frac{\phi_n(\vec r)\phi_n^*(\vec r')}{E \pm i\eta - \lambda_n}$

• Randbedingungen: $\eta > 0$

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \pm i\eta\right) G^{r/a}(x,x') = \delta(x-x')$$

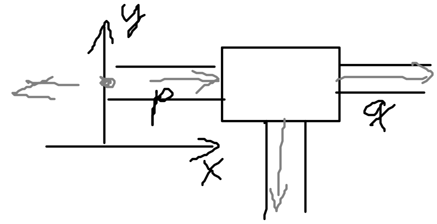
$$k' = \frac{\sqrt{2m(E+i\eta-U_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}\sqrt{1+\frac{i\eta}{E-U_0}}$$

$$\approx k\left(1+\frac{i\eta}{2(E-U_0)}\right) = k\cdot(1+i\delta)$$

G^a wäre nicht beschränkt für $|x-x'| \to \infty$

$G^{r/a}(E) = (E \pm i\eta - H)^{-1}$ $\qquad H_{ij} = \langle\phi_i|H|\phi_j\rangle$

Relation S-Matrix $\Leftrightarrow$ Greensche Fkt.



$$G_{qp} = \delta_{qp} A_p^- + S'_{qp} A_p^+$$

$$A_p^+ = A_p^- = -\frac{i}{\hbar v_p} \qquad S'_{qp} = S_{qp}\sqrt{\frac{v_p}{v_q}}$$

$$G_{qp} = -\delta_{qp}\frac{i}{\hbar v_p} - \sqrt{\frac{v_p}{v_q}}\, S_{qp}\frac{1}{\hbar v_p} = -\delta_{qp}\frac{i}{\hbar v_p} - \frac{i}{\sqrt{v_p v_q}} S_{qp}$$

$$\boxed{S_{qp} = -\delta_{qp} + i\hbar\sqrt{v_q v_p}\; G_{qp}}$$