

Transporte balístico e fórmula de Landauer



1. Eléctrons em sólidos

função de Bloch

$$\Psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k},n}(\vec{r})$$

onde $u_{\vec{k},n}(\vec{r})$ é periódica com a rede

$\hbar\vec{k}$ é quase-momento ou momento cristalino \rightarrow ver Ashcroft & Mermin

n é o índice de banda

$E_n(\vec{k})$ é solução da equação de Schrödinger \rightarrow periódica em \vec{k}
energia das bandas

Velocidade do elétron

$$\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

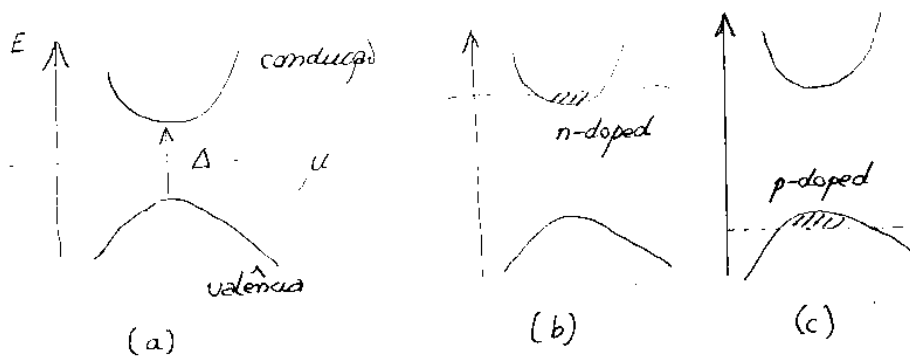
massa efetiva (situações com simetria esférica)

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k^2}$$

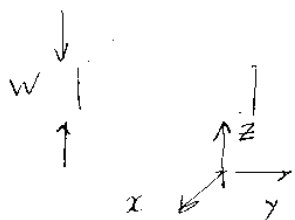
Interpretação: teoria efetiva, quase-eléctrons, líquido de Fermi

\downarrow
ver Brueckner & Flensburg

Exemplo de
teoria efetiva
semicondutores

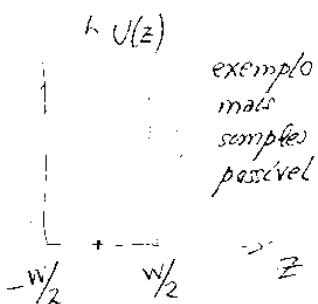


2. Confinamento



$$\psi(x,y,z) = e^{ik_x x + ik_y y} \phi(z)$$

$$\phi(z = \pm w/2) = 0$$



$$\phi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{w}} \sin\left[k_n\left(z - \frac{w}{2}\right)\right]$$

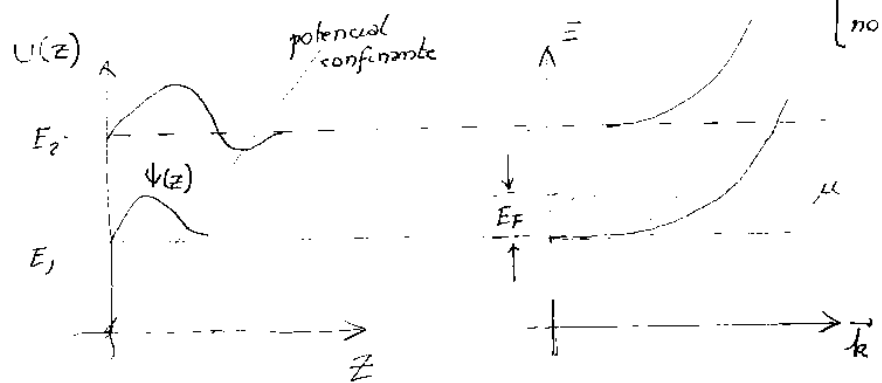
$$k_n = \frac{\pi n}{L} \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n}{L}\right)^2$$

$$\hat{H}\psi_{E_n}(\vec{r}) = E_n(k_x, k_y) \psi_{E_n}(\vec{r}) \quad \dots \quad E_n(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + E_n$$

↑ movimento livre em 2D
↑ modos transversais ao 2DEG

Resolva o caso de um fio, onde apenas o movimento ao longo de x é livre. É o caso 1D

Em heteroestruturas semicondutoras U(z) é um pouco mais complexo



$$E_n(\vec{k}) = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

↑ interpretação: n... índice de banda

GaAs - $m^* = 0,067m$

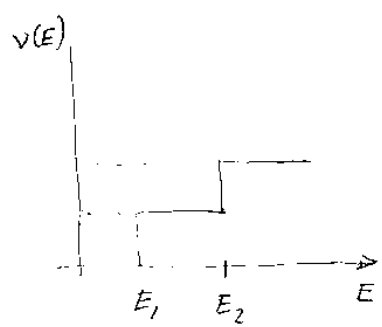
densidade de estados

$$\nu(E) = \frac{2s}{(2\pi)^2} \int \frac{d\vec{k}}{2} \delta[E - E_n(\vec{k})]$$

$$\nu(E) = \frac{2s}{2\pi} \int \frac{dk^2}{2} \delta\left(E - E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right)$$

$$\nu(E) = \begin{cases} \frac{2s m^*}{2\pi \hbar^2} & \text{se } E > E_n \\ 0 & \text{se } E < E_n \end{cases}$$

$$\nu(E) = \frac{2s m^*}{2\pi \hbar^2} \Theta(E - E_n)$$



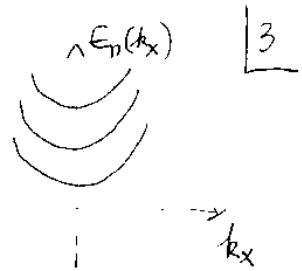
para GaAs: $E_F < E_2 - E_1$

$$\lambda = \sqrt{2\pi n_0}$$

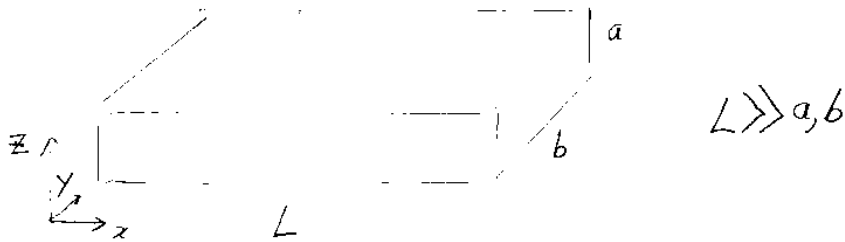
$$n_0 = \int_0^\mu dE \nu(E) f(E)$$

$$\lambda \approx 40 - 80 \text{ nm} \gg \lambda_{\text{metals}}$$

3 Transporte em um guia de onda



3



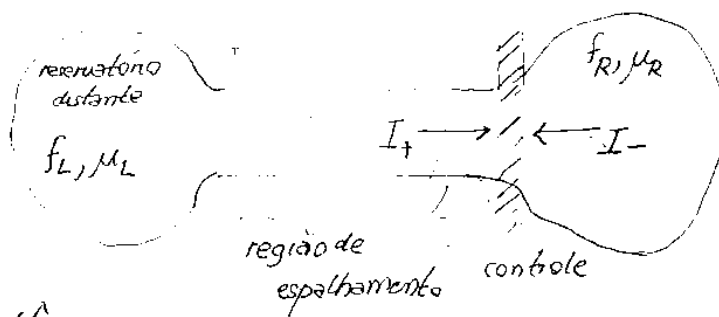
$$\vec{J} = 2s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e\vec{v}(\vec{k}) f(\vec{k})$$

lembrete dos cursos básicos
 $\sum_{\vec{k}} (\dots) \rightarrow L^d \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} (\dots)$
 d... dimensões

$$\int \frac{dk_x}{2\pi} \int \frac{dk_y}{2\pi} \int \frac{dk_z}{2\pi} (\dots) \rightarrow \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{1}{ab} \sum_n (\dots)$$

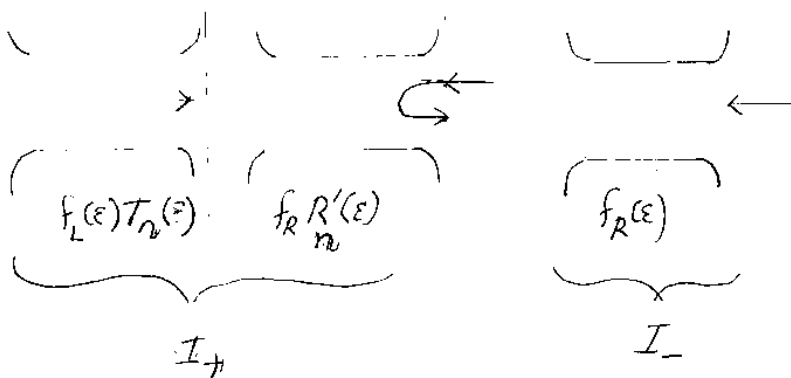
$$I = 2s e \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x}{2\pi} v_x(k_x) f_n(k_x)$$

Como usar?
 No caso balístico
 geometria é
 fundamental



equilíbrio
 térmico
 $f_{\alpha} = n_F(\epsilon - \mu_{\alpha})$

Caminhos eletrônicos



$$v_x = \frac{\partial \epsilon_{k,n}}{\hbar \partial k_x}$$

$$I_R = I_+ - I_- = 2s e \sum_n \int \frac{dk_x}{2\pi} v_x(k_x) \left\{ f_L T_n + f_R R'_n - f_R \right\}$$

$$T + R' = 1 \Rightarrow T'_n = -(R'_n - 1) = T_n$$

discreto?

$$= \frac{2s e}{2\pi \hbar} \sum_n \int dE [f_L(E) - f_R(E)] T_n(E)$$

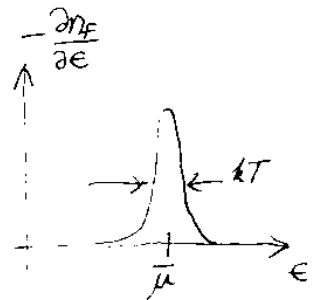
Vamos considerar diferenças de potencial químico "pequenas" e expandir $f_x(E)$ em torno de

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_R + \mu_L}{2}$$

$$f_R(E) = \eta_F(E - \bar{\mu}) + \left. \frac{\partial \eta_F}{\partial \mu} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu_R - \bar{\mu}) + \dots$$

$$f_L(E) = \eta_F(E - \bar{\mu}) + \left. \frac{\partial \eta_F}{\partial \mu} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu_L - \bar{\mu}) + \dots$$

$$\begin{aligned} f_R(E) - f_L(E) &= \left. \frac{\partial \eta_F}{\partial \mu} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu_R - \mu_L) + \dots \\ &= - \left. \frac{\partial \eta_F}{\partial E} \right|_{\mu=\bar{\mu}} eV + \dots \end{aligned}$$



$$I_R = \left[\frac{2s e^2}{h} \sum_n \int dE \left(- \frac{\partial \eta_F}{\partial E} \right) T_n(E) \right] V + \mathcal{O}(V^2)$$

em resposta linear $I = \mathcal{G} V$ ou

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \frac{dI}{dV} = 2s \frac{e^2}{h} \sum_n \int dE \left(- \frac{\partial \eta_F}{\partial E} \right) T_n(E) \\ &= \mathcal{G}_0 \sum_n T_n(\bar{\mu}) \end{aligned}$$

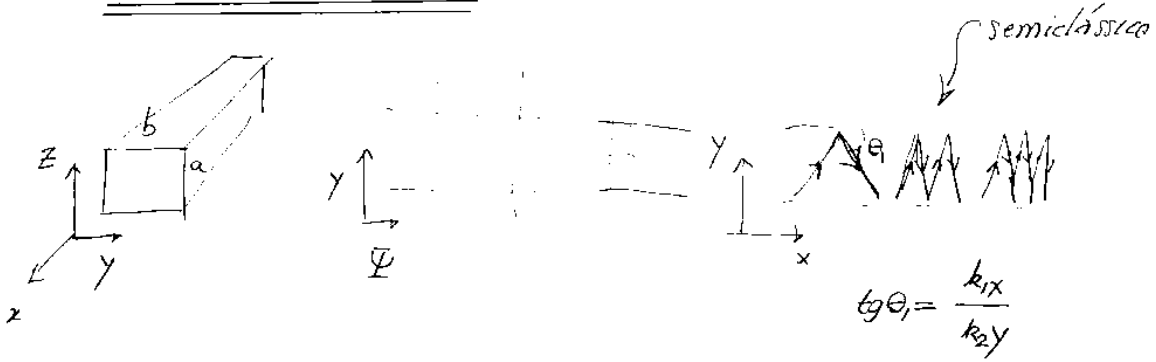
com $\mathcal{G}_0 = 2s \frac{e^2}{h}$... "quantum" de condutância

$$T(\bar{\mu}) = \sum_n T_n(\bar{\mu}) \text{ --- transmissões}$$

Note que

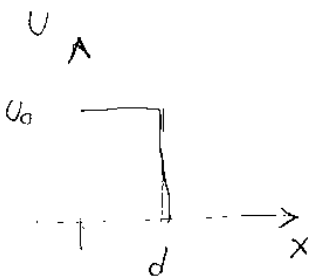
$$\lim_{T \rightarrow 0} \left(- \frac{\partial \eta_F}{\partial E} \right) = \delta(E - \bar{\mu})$$

4. Espalhamento em 1D



Para um modo n:

$$H\psi_n(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi_n(x) = E \psi_n(x)$$



$$U = \begin{cases} U_0 & 0 < x < d \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & x < 0 \\ B e^{ikx} + C e^{-ikx} & 0 < x < d \\ t e^{ikx} & x > d \end{cases}$$

casamento!

$$\psi(x)|_{x=0_-} = \psi(x)|_{x=0_+}$$

$$\psi'(x)|_{x=0_-} = \psi'(x)|_{x=0_+}$$

$$\chi = \sqrt{2m(E - E_n - U_0)} / \hbar = \sqrt{k^2 - 2mU_0/\hbar^2}$$

$$T(E) = |t|^2$$

$$R(E) = |r|^2 = 1 - T(E)$$

$$T(E) = \frac{4k^2 \chi^2}{(k^2 - \chi^2)^2 \mu n^2 \chi d + 4k^2 \chi^2}$$

