

LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT
MÜNCHEN

BACHELORARBEIT

0.7-Analog in Quantenpunktkontakten

Christian Schmauder



betreut von
Prof. Dr. Jan von Delft

30. August 2017

LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT
MÜNCHEN

BACHELOR THESIS

0.7 Analog in Quantum Point Contacts

Christian Schmauder



supervised by
Prof. Dr. Jan von Delft

August 30, 2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	6
2	Theorie	7
2.1	Quantenpunktkontakte	7
2.2	Leitwert im QPC	8
2.3	0.7-Anomalie und 0.7-Analoga	10
2.4	Modell	13
2.4.1	Bandstruktur der Tight-Binding-Kette	13
2.4.2	Hamilton-Funktion des QPCs	14
2.4.3	Integration der Leads	19
2.5	Methode: Implementierung der zwei Ketten	24
2.6	Die Observablen	25
3	Tests	26
3.1	Ein-Band-Tests mit und ohne Wechselwirkung	26
3.1.1	Auftauchen der Stufe für den Leitwert	26
3.1.2	Aufhebung der Spin-Entartung in Anwesenheit eines Magnetfeldes	27
3.1.3	Unterschiede bei vorhandener Wechselwirkung	28
3.2	Zwei-Band-Tests ohne Wechselwirkung	28
3.2.1	Test, dass für $U^1 = 0$ Resultate für $n_b = 1$ und $n_b = 2$ übereinstimmen	29
3.2.2	Das Zwei-Band-Modell mit modifizierter Wechselwirkung als effektives Ein-Band-Modell	30
3.3	Zwei-Band-Tests mit Wechselwirkung	31
3.3.1	Konvergenz in der Feedbacklänge L	31
3.3.2	Vergleich der Konvergenz – Ein-Band-Modell vs. Zwei-Band-Modell mit modifizierter Wechselwirkung	32
4	Breite der zweiten Stufe	35
4.1	LDOS an ausgewählten Stellen	36
4.2	„Dichteanomalie“	41
5	0.7-Anomalie und 0.7-Analog	43
5.1	Auswirkung der Feedbacklänge – Vergleich mit einer früheren fRG-Methode	46
5.2	Verhalten im Bereich des 0.7-Analogs	48
6	Zusammenfassung und Ausblick	49

Zusammenfassung

Als Quantenpunktkontakte werden eindimensionale Engstellen in einem zweidimensionalen Elektronensystem bezeichnet. Durch Anlegen einer Spannung über Feldelektroden lässt sich die Breite des Transportkanals verändern. Der dabei gemessene Leitwert ist in Einheiten von $G_Q = 2e^2/h$ quantisiert. Es wurde gezeigt, dass sich im Modell mittels der funktionellen Renormierungsgruppe (fRG) wesentliche Eigenschaften, wie die 0.7-Anomalie im Leitwert, in guter Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten reproduzieren lassen. In dieser Arbeit wird ein Zwei-Band-Modell in der extended Coupled-Ladder Approximation (eCLA) untersucht. Für die verwendeten Parameter ergibt sich eine verbreiterte zweite Leitwert-Stufe als Folge des Zusammenspiels von Wechselwirkungen zwischen den Bändern und innerhalb der Bänder. Neben der 0.7-Anomalie als Auffälligkeit im Bereich kleiner Magnetfeldstärken reproduziert das Modell auch das experimentell beobachtete 0.7-Analog für höhere Feldstärken.

1 Einführung

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, mittels der statischen extended Coupled-Ladder Approximation (eCLA) im Rahmen der funktionellen Renormierungsgruppe (fRG) einen Quantenpunktkontakt mit zwei Bändern zu beschreiben. In früheren Veröffentlichungen konnte gezeigt werden, dass sich im Rahmen dieses Modells für ein Band wichtige Eigenschaften, wie die sogenannte 0.7-Anomalie, reproduzieren lassen [1]. Beim Übergang zu zwei Bändern ist aber mit weiteren Phänomenen zu rechnen. Konkret handelt es sich dabei um die experimentell gefundenen 0.7-Analoga, die in höheren Leitwertstufen bei größeren Magnetfeldstärken beobachtet werden und daher erst in Modellen, die mehr als ein Band betrachten, auftreten können. Abbildung 3 auf Seite 12 zeigt beispielhaft Messdaten, die sowohl die 0.7-Anomalie als auch die Analoga zeigen.

Zunächst wird in Kapitel 2 in die Theorie der Quantenpunktkontakte und das verwendete Modell eingeführt. Um zu überprüfen, ob der Übergang zum Zwei-Band-Modell sinnvoll beschrieben wird, werden in 3 die Ergebnisse verschiedener Tests dargestellt und diskutiert. Unter anderem werden dazu bekannte Eigenschaften des Ein-Band-Modells reproduziert. Im Hauptteil der Arbeit werden dann zwei Aspekte des Modells genauer untersucht. So zeigt sich in der zweiten Leitwert-Stufe eine Verbreiterung gegenüber der ersten Stufe. Kapitel 4 untersucht Verhalten dieser Stufe näher und gibt eine Erklärung für das Auftreten. Anschließend wird in Kapitel 5 das Auftreten der 0.7-Anomalie und des sogenannten 0.7-Analogs in diesem Modell beschrieben und näher untersucht. Kapitel 6 formuliert ausgehend von den Ergebnissen dieser Arbeit Ansätze für weiterführende Untersuchungen.

2 Theorie

2.1 Quantenpunktkontakte

Als Heterostruktur bezeichnet man die Schichtung von verschiedenen Halbleitermaterialien, die ähnliche Gitterkonstanten haben, deren Bandlücken aber unterschiedlich groß sind. Häufig werden GaAs/AlGaAs-Strukturen verwendet. Durch eine solche Heterostruktur kann in der Grenzschicht ein zweidimensionales Elektronensystem (2DES) realisiert werden. Dies wird auch als zweidimensionales Elektronengas (2DEG) bezeichnet und ist ein entartetes System, in dem sich die Elektronen im Leitungsband in einer Dimension effektiv in einem Quantentopf befinden [2].

In der zweidimensionalen Potentiallandschaft eines 2DEG bezeichnet man eine Engstelle als Quantenpunktkontakt (QPC). Realisiert wird der QPC mittels eines Split Gates, auch QPC-Gate genannt. Dieses erreicht man durch das Anbringen zweier Feldelektroden nahe am 2DEG in geringem Abstand zueinander. Durch das Anlegen der negativen Gate-Spannung werden den Bereichen um die Elektroden herum Elektronen entzogen und es entsteht insbesondere zwischen den Gates eine Verarmungszone. Diese stellt den Transportkanal des QPCs dar. Die Breite dieses Bereichs kann durch Variieren der Gate-Spannung kontrolliert werden. Als eindimensionaler Transportkanal trennt der QPC so die 2DES auf beiden Seiten und schafft damit voneinander getrennte Elektronenreservoirs. Eine Spannung zwischen den beiden Reservoirs – das heißt, wenn das chemische Potential auf beiden Seiten des QPCs unterschiedliche Werte annimmt – wird als Source-Drain-Spannung V_{sd} bezeichnet. Im Modell wird die Ankopplung des QPCs an die Elektronenreservoirs auf beiden Seiten durch halb-unendliche Zuleitungen, die sogenannten Leads beschrieben, siehe Kapitel 2.4.3.

Im QPC können sich Ladungsträger in die longitudinale Richtung frei bewegen, für die beiden transversalen Raumrichtungen ist der Transport jedoch stark eingeschränkt. Im 2DEG ist eine dieser transversalen Raumrichtungen dabei als so stark eingeschränkt anzusehen, dass nur ein einziger Zustand besetzt werden kann. Die zweite, durch das Split Gate eingeschränkte Raumrichtung führt für diese auch zu diskreten Energieniveaus. Je nach angelegtem chemischen Potential bleibt für diese Richtung aber nicht nur der Grundzustand besetzt, sondern es werden auch höhere Energieniveaus besetzt. Dadurch entstehen im QPC mehrere mögliche Kanäle. Je enger der Draht – das heißt je stärker die transversalen Raumrichtungen an dieser Stelle eingeschränkt sind –, desto energetisch höher liegt der Grundzustand sowie

die angeregten Zustände bezüglich dieser Richtung an dieser Stelle. Das führt zu einem effektiven Potential in der longitudinalen Richtung. Beschrieben werden kann diese Anordnung durch ein Sattelpunktpotential [3].

2.2 Leitwert im QPC

Im Quantenpunktkontakt ergibt sich ein gequantelter Leitwert. Die Diskretisierung des Leitwerts lässt sich im Ein-Elektronen-Bild verstehen.

Die Moden in y - und z -Richtung sind diskret. Durch die Halbleitereigenschaften werden die Elektronen in einer Dimension so stark in ihrer Bewegung eingeschränkt, dass in diese Richtung nur ein Zustand besetzt ist (2DEG), hier als z -Richtung bezeichnet. Die Depletierung durch die Gate-Spannung V_g lässt sich als ein effektives Potential auffassen, das eine Barriere einer gewissen Höhe und Krümmung im QPC zur Folge hat: Die Gate-Spannung erzeugt in y -Richtung eine Potential-Barriere, deren Variation durch Ändern der Gate-Spannung V_g unterschiedlich viele besetzte Zustände in y -Richtung zur Folge hat. Alternativ kann die Besetzung durch eine Verschiebung des Potentials μ geändert werden. In x -Richtung befinden sich auf den beiden Seiten des QPCs Reservoirs, Source und Drain genannt. Durch Anlegen einer Source-Drain-Spannung V_{sd} wird der Transport durch den QPC initiiert. Das Potential in x - und y -Richtung kann durch ein Sattelpunkt-Potential angenähert werden [3]:

$$V(x, y) = V_c - \frac{1}{2}m\omega_x x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y y^2. \quad (1)$$

Die Elektronen sind also in y -Richtung durch ein parabolisches Potential beschränkt, während sie eine quadratische Barriere in x -Richtung durchlaufen. Wichtige Eigenschaften, wie die Quantisierung des Leitwerts und das Leitwertquant selbst, lassen sich schon in einer einfachen Behandlung im Ein-Elektronen-Modell verstehen. Eine Source-Drain-Spannung V_{sd} mit unterschiedlichen chemischen Potentialen μ_L und μ_R links und rechts des QPCs führt zu einem Strom von Elektronen durch die Engstelle, der von der Barrierenhöhe abhängig ist.

Im Folgenden soll der Leitwert als lineare Antwortfunktion bei einer Temperatur $T = 0$ berechnet werden. Dazu wird der Strom I betrachtet. Im Gleichgewicht bei $V_{sd} = 0$ verschwindet dieser Strom, es wandern gleich viele Elektronen von links nach rechts durch den QPC wie umgekehrt. Bei endlicher Source-Drain-Spannung

entsteht ein Nettofluss von Quelle zu Senke und damit ein Strom. Zur Berechnung benötigt man die Zustandsdichte für beide Spin-Arten in einer Dimension

$$\rho_1 = 2 \frac{1}{2\pi} \frac{dk}{dE} \quad (2)$$

sowie die Gruppengeschwindigkeit

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (3)$$

Hieraus folgt, dass in einer Dimension die Zustandsdichte umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit ist:

$$\rho_1 \propto \frac{1}{v}. \quad (4)$$

f_L und f_R bezeichnen die Fermi-Verteilungsfunktionen links bzw. rechts des QPCs, wobei das chemische Potential links respektive rechts den Wert $\mu_L = \mu - \frac{eV_{sd}}{2}$ bzw. $\mu_R = \mu + \frac{eV_{sd}}{2}$ annimmt. n summiert über die Kanäle, $T_n(E)$ ist die Transmissionswahrscheinlichkeit für den zugehörigen Kanal. Damit erhält man

$$\begin{aligned} I &= \sum_n e \int_0^\infty v_n(E) \rho_1(E) f_R(E) T_n(E) dE - e \int_0^\infty v_n(E) \rho_1(E) f_L(E) T_n(E) dE \\ &= \sum_n e \int_{\mu_L}^{\mu_R} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \frac{1}{\pi} \frac{dk}{dE} T_n(E) dE \\ &= \sum_n \frac{2e}{h} \int_{\mu - \frac{eV_{sd}}{2}}^{\mu + \frac{eV_{sd}}{2}} T_n(E) dE. \end{aligned} \quad (5)$$

Daraus kann der Leitwert berechnet werden:

$$G = \left. \frac{dI}{dV_{sd}} \right|_{V_{sd}=0} = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(\mu) = G_Q \sum_n T_n(\mu). \quad (6)$$

Für den Fall, dass ein Kanal entweder offen oder geschlossen ist, dass also $T_n(\mu)$ die Werte 0 oder 1 annehmen kann, erhalten wir bei N offenen Kanälen $G = NG_Q$. Da-

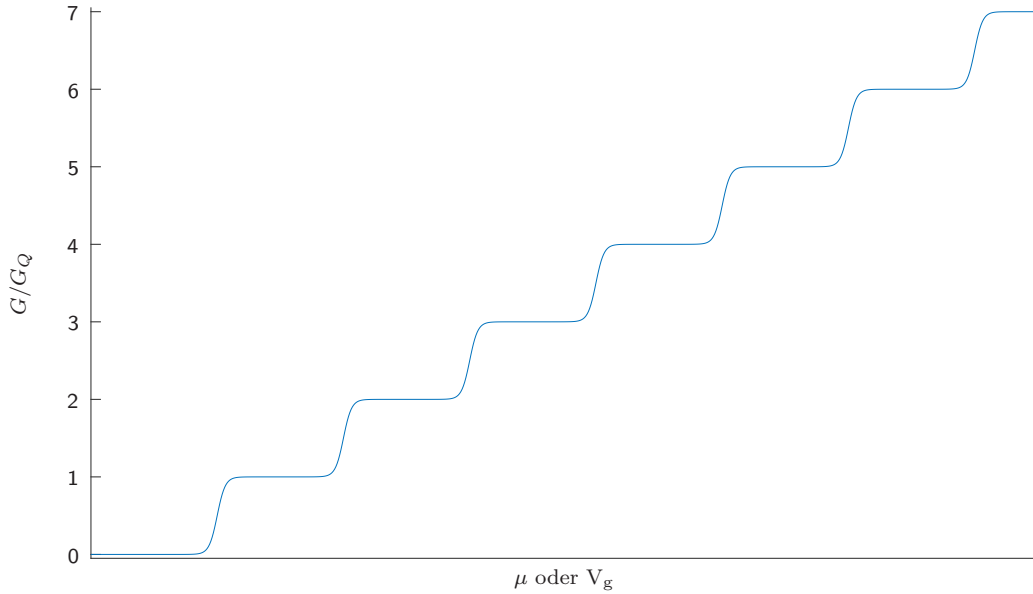


Abbildung 1: Leitwertkurve in Abhängigkeit von chemischem Potential μ oder Gate-Spannung V_g , wie sie im nichtwechselwirkenden Fall erwartet wird. Erhöht man μ bzw. V_g , kann ein Ansteigen des Leitwerts in Einheiten von G_Q beobachtet werden.

bei bezeichnet G_Q das Leitwertquant, das in dem hier betrachteten Spin-entarteten Fall den Wert $G_Q = \frac{2e^2}{h}$ hat [4]. Abbildung 1 zeigt idealisiert den Verlauf des Leitwerts mit zunehmender Anzahl offener Kanäle, zum Beispiel mit steigender Gate-Spannung V_g .

2.3 0.7-Anomalie und 0.7-Analoga

Experimentelle Daten zeigen das oben diskutierte stufenartige Verhalten. Schon in frühen Publikationen zu Quantenpunktkontakten sind allerdings besondere Merkmale zu beobachten [5]. Unter dem Begriff der 0.7-Anomalie werden dabei verschiedene Auffälligkeiten zusammengefasst, die im Bereich von einem Leitwert von ungefähr $0.7G_Q$ auftreten. Allgemeiner erstreckt sich der Bereich der Merkmale auf den Bereich zwischen $0.5G_Q$ und $0.9G_Q$. In diesem Bereich ist der erste Kanal gerade im Übergang zu einem offenen Kanal, der Bereich kann daher als sub-offenes Regime bezeichnet werden. Die Effekte, die sich im Leitwert zeigen, lassen sich im nichtwechselwirkenden Modell nicht erklären, es handelt sich um einen Viel-Teilchen-Effekt [4].

Experimentell ergibt sich für die 0.7-Anomalie eine Abhängigkeit von der Temperatur sowie vom angelegten Magnetfeld. Für endliche Source-Drain-Spannungen zeigen sich dazu weitere Effekte im Leitwert, wie zum Beispiel der Zero-Bias-Peak. In Ab-

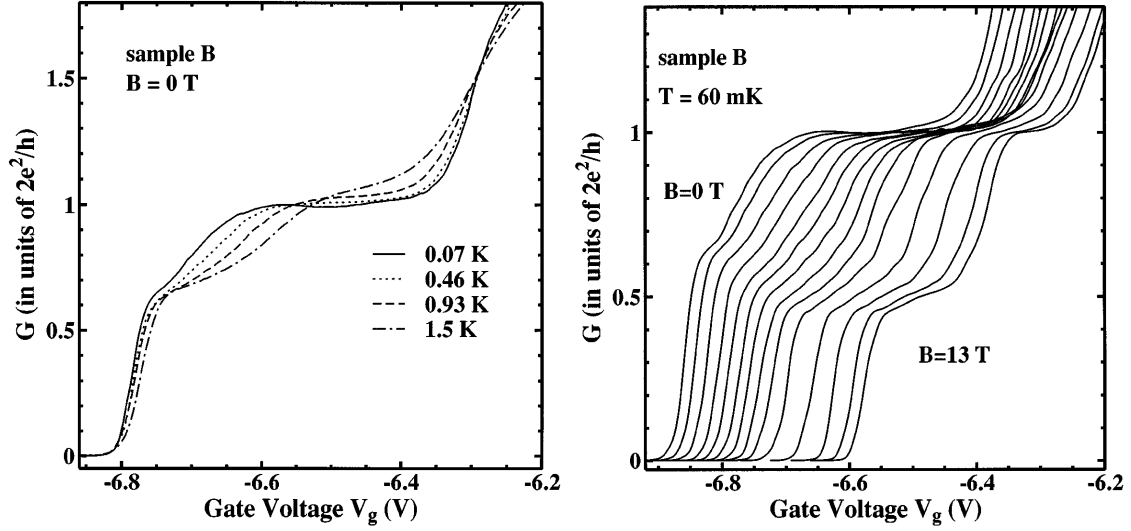


Abbildung 2: Experimentelle Plots, die die 0.7-Anomalie zeigen. Links ist das Verhalten bei verschiedenen Temperaturen gezeigt, rechts wird die Magnetfeldstärke variiert. Übernommen aus [5].

Abbildung 2 sind experimentelle Daten dargestellt, bei denen entweder das Magnetfeld oder die Temperatur variiert wurde.

Ein intuitives Bild, weshalb gerade hier das einfache Bild versagt und Wechselwirkungen eine wichtige Rolle spielen, lässt sich wie folgt gewinnen: Wenn der Leitwert ansteigt, befindet sich das chemische Potential in der Nähe des Barrierenmaximums. Klassisch bedeutet dies für die Elektronen, dass sie nur eine sehr geringe kinetische Energie besitzen können, wenn sie sich in der Mitte des QPCs befinden, an dem das Potential sein Maximum annimmt. Die Zustandsdichte in einer Dimension ist jedoch umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit, wie in Gleichung (4) angegeben. Die Zustandsdichte wird hier somit besonders groß. Dies wird als ausgeschmierte van-Hove-Singularität bezeichnet. Dadurch ist in diesem Bereich die effektive Wechselwirkung, also der Ausdruck $U\rho$, besonders groß. Damit sind in diesem Regime auch Wechselwirkungseffekte von besonderer Bedeutung [4, 6].

Das Modell in dieser Arbeit verwendet $T = 0$ und $V_{sd} = 0$, dafür aber unterschiedliche Magnetfeldstärken. Im Folgenden wird deshalb das prinzipiell erwartete Verhalten für den Leitwert mit steigendem Magnetfeld beschrieben. Das tatsächliche Verhalten und das Auftreten der 0.7-Anomalie in diesem Modell werden dann im entsprechenden Kapitel 5 behandelt.

Nichtwechselwirkend ist für ein Magnetfeld die Aufhebung der Spin-Entartung zu erwarten. Jedes Band N spaltet sich in zwei Sub-Bänder auf, N_\uparrow und N_\downarrow , die jeweils ein halbes Leitwertquant

$$\tilde{G}_Q = \frac{1}{2}G_Q = \frac{e^2}{h} \quad (7)$$

beitragen. Mit zunehmendem Magnetfeld wird eines dieser Sub-Bänder energetisch abgesenkt und das andere angehoben. Diese Trennung betrifft jedes Band, sodass sich die Stufen bei Vielfachen von G_Q im Leitwert in zwei Stufen mit einer Höhe von jeweils \tilde{G}_Q aufspalten. Wird die Magnetfeldstärke weiter erhöht, verschwinden die Plateaus bei ganzzahligen Vielfachen von G_Q . Dieser Punkt wird erreicht, wenn die unterschiedlichen Bänder, zum Beispiel 1_\downarrow und 2_\uparrow , energetisch aufeinandertreffen. Die Zeeman-Energie kompensiert dann gerade den Energieunterschied zwischen den beiden Bändern, zum Beispiel ΔE zwischen Band 1 und Band 2. Dadurch steigt der Leitwert an der ersten Stufe auf einen Wert von $0.5G_Q$ (durch das Band 1_\uparrow). Die folgenden Stufen erhöhen den Leitwert um ein ganzes Leitwertquant, die jeweils von den Sub-Bändern N_\downarrow und $(N+1)_\uparrow$ beigetragen werden.

Für noch größere Magnetfeldstärken wird das Band N_\downarrow energetisch noch weiter angehoben und liegt damit höher als $(N+1)_\uparrow$. Die Stufen treten dadurch auch wieder bei den ganzzahligen Vielfachen von G_Q auf.

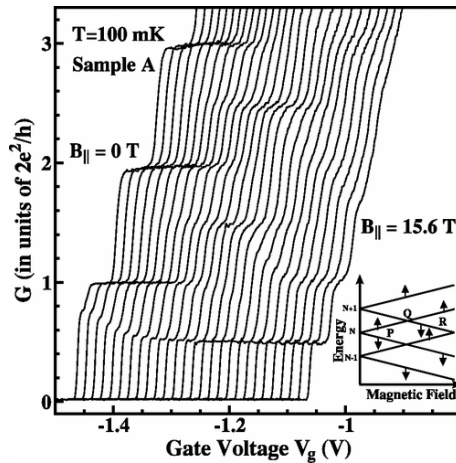


Abbildung 3: Leitwert aufgetragen gegen Gate-Spannung für verschiedene Magnetfeldstärken. Aufeinanderfolgende Kurven sind leicht gegeneinander verschoben. Zusätzlich zur 0.7-Anomalie werden hier die 0.7-Analoga bei höheren Magnetfeldstärken sichtbar. Eingesetzt ist die Energieaufspaltung der Bänder in Anwesenheit eines Magnetfeldes gezeigt. Übernommen aus [7].

Ähnlich wie das Auftreten der 0.7-Anomalie bei der Aufspaltung des ersten Bandes beginnend bei $B = 0$ kann beim Aufspalten der Bänder 1_\downarrow und 2_\uparrow , nachdem sie durch das Magnetfeld energetisch gleichgestellt wurden, experimentell eine Auffälligkeit beobachtet werden. Auch für höhere Bänder zeigt sich dieses Feature im Leitwert. Aufgrund ihrer Ähnlichkeit werden sie zusammengefasst als 0.7-Analoga bezeichnet. In Abbildung 3 sind experimentelle Daten gezeigt, die die 0.7-Analoga darstellen.

Es werden die Leitwert-Kurven mit zunehmendem Magnetfeld dargestellt, jeweils leicht gegeneinander verschoben.

2.4 Modell

In diesem Abschnitt wird das Modell dargelegt, das den Analysen zugrunde liegt. Zunächst wird die Bandstruktur einer Tight-Binding-Kette berechnet. Anschließend wird die genaue Hamilton-Funktion für die Wechselwirkungszone des QPCs sowie für die angekoppelten Zuleitungen angegeben. Schließlich wird mittels einer Projektion der Effekt dieser Zuleitungen in den wechselwirkenden Bereich überführt.

2.4.1 Bandstruktur der Tight-Binding-Kette

Im vorherigen Kapitel wurde beschrieben, warum es mehrere Bänder gibt. Hier wird nun zunächst erläutert, wie das Band aussieht, das sich unter der Annahme einer reinen Tight-Binding-Kette ergibt. In der Bra-Ket-Notation wird eine solche unendlich lange Kette, die den Übergang zwischen benachbarten Sites j und $j + 1$ erlaubt, beschrieben durch:

$$H_{TB} = -\tau \sum_j (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|). \quad (8)$$

Die Bedeutung von τ wird im nächsten Abschnitt genauer erläutert. Nach dem Bloch-Theorem kann die Hamilton-Funktion durch den folgenden Ansatz diagonalisiert werden:

$$|\psi_k\rangle = \sum_{j'} e^{ikj'} |j'\rangle. \quad (9)$$

Wir überprüfen, dass es sich um eine Eigenfunktion von H_{TB} handelt:

$$\begin{aligned}
H_{TB} |\psi_k\rangle &= -\tau \sum_j \sum_{j'} \left(e^{ikj'} |j\rangle \langle j+1|j'\rangle + |j+1\rangle \langle j|j'\rangle \right) \\
&= -\tau \sum_j \left(e^{ik(j+1)} |j\rangle + e^{ikj} |j+1\rangle \right) \\
&= -\tau \sum_j \left([e^{ik} + e^{-ik}] e^{ikj} |j\rangle \right) \\
&= -\tau (e^{ik} + e^{-ik}) |\psi_k\rangle \\
&= -2\tau \cos(k) |\psi_k\rangle.
\end{aligned}$$

Damit ist die Dispersionsrelation der Tight-Binding-Kette gefunden. Aus $E_k = -2\tau \cos(k)$ erhalten wir auch die Bandbreite von 4τ . Im nächsten Abschnitt wird dieses Modell ausführlich für den QPC erläutert. Wir verwenden dabei die hier gefundene Bandunterkante bei $E = -2\tau$ als Referenzpunkt, von dem aus die Potentialhöhe gemessen wird.

2.4.2 Hamilton-Funktion des QPCs

Wie im Kapitel 2.3 argumentiert wurde, lässt sich der QPC im relevanten Bereich der Verjüngung eindimensional beschreiben. Ausgangspunkt soll die nicht-wechselwirkende Hamilton-Funktion in ihrer kontinuierlichen Form sein:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (10)$$

Wir modellieren ein Potential $V(x)$, dessen Maximum im Zentrum des QPCs liegt. Aus praktischen Gründen soll hier auch der Koordinatenursprung liegen, $x = 0$. Der zentrale Bereich des QPCs soll bis $x = \pm x_0$ reichen, das heißt bis hierher können das Potential und die Wechselwirkungsstärke Werte ungleich 0 annehmen. Das Potential soll außerdem symmetrisch um den Ursprung sein. Ein rein quadratisches Potential stellt sich dabei als vorteilhaft heraus. So lässt sich hier der Leitwert analytisch berechnen [3], er steigt monoton von 0 auf den Wert des Leitwertquants G_Q und die Breite der Stufe ist proportional zur Energieskala Ω_x , auf der sich das Potential ändert [4]. Andere Potentialformen, wie zum Beispiel ein quartisches Potential, weisen dagegen Oszillationen im Leitwert auf. Es sind zwar auch in experimentellen Daten zum Teil solche Oszillationen vorhanden, für den Fall jedoch, dass sich scharfe

Plateaus im Leitwert ergeben, kann von einem Potential mit einem dominierenden quadratischen Term ausgegangen werden.

Ein allgemeiner Ansatz für das quadratische Potential der Höhe V_g lautet:

$$V(x) = V_g - \Omega_x \left(\frac{x}{2l_x} \right)^2. \quad (11)$$

Die Krümmung des Potentials ist $\frac{\Omega_x}{2l_x^2}$, wir verwenden Ω_x , das die Einheit einer Energie trägt, im Folgenden als Parameter für die Krümmung des Potentials. Korrespondierend hierzu kann man l_x als typische Längenskala definieren, auf der sich das Potential ändert.

Für die glatte Ankopplung an die Leads wird tatsächlich folgende, im Zentrum dem reinen quadratischen Potential sehr nahekommende Funktion verwendet:

$$V(x) = V_g e^{-\frac{(x/x_0)^2}{1-(x/x_0)^2}}, \quad (12)$$

$\pm x_0$ bezeichnet hierbei den Rand des QPCs, an dem das Potential verschwindet, also $V(\pm x_0) = 0$ gilt.

Zur Modellierung mit einer Tight-Binding-Kette müssen die Ausdrücke diskretisiert werden. Der Abstand benachbarter Sites j und $j + 1$ wird mit a bezeichnet. Dabei repräsentiert das hier eingeführte Gitter nicht das Atomgitter, a dient lediglich als Diskretisierungsparameter. j ist der Site-Index, für den innerhalb des QPCs mit $2N + 1$ Sites gilt

$$j \in \{-N, -N + 1, \dots, 0, \dots, N - 1, N\}, \quad (13)$$

es gilt dann $x = ja$ und das Potential in diskreter Form lautet:

$$V_j = V(ja). \quad (14)$$

Die erste und die zweite partielle Ableitung können diskretisiert werden durch

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{\psi((j+1)a) - \psi(ja)}{a} \quad (15)$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \frac{\psi((j+1)a) - 2\psi(ja) + \psi((j-1)a)}{a^2}. \quad (16)$$

In zweiter Quantisierung lautet die Hamilton-Funktion ohne Wechselwirkung deshalb:

$$H = \sum_j \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} [E_{j\sigma}n_{j\sigma} - \tau(d_{j\sigma}^\dagger d_{(j+1)\sigma} + h.c.)], \quad (17)$$

wobei $d_{j\sigma}^\dagger$ und $d_{j\sigma}$ den Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren eines Elektrons mit Spin σ am Ort j bezeichnen. *h.c.* ist das hermitesch Konjugierte zu dem vorherigen Summanden. Es gilt $n_{j\sigma} = d_{j\sigma}^\dagger d_{j\sigma}$, dies ist der Teilchenzahloperator. Zusammenfassen der Vorfaktoren führt zu

$$\tau = \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad (18)$$

dabei wird τ , das die Einheit einer Energie hat, als Hopping-Amplitude bezeichnet. In unseren Berechnungen wird τ als die für die anderen Größen relevante Energieeinheit verwendet.

In $E_{j\sigma}$ werden der Potential-Term V_j und ein Zeeman-Term zusammengefasst, der den Einfluss eines äußeren Magnetfeldes B beschreibt, dessen Feldlinien parallel zur Ausrichtung des QPCs verlaufen:

$$E_{j\sigma} = V_j - \frac{\sigma}{2}B, \quad (19)$$

dabei beschreibt $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ den Spin der Teilchen. Für den Fall $B = 0$ sind die Spin-Spezies entartet.

Analog zu dem Zusammenhang zwischen τ und a gilt zwischen Ω_x und l_x :

$$\Omega_x = \frac{\hbar^2}{2ml_x^2}. \quad (20)$$

Entwickelt man das tatsächlich verwendete Potential in Gleichung (12) bis zur zweiten Ordnung in x und vergleicht dies mit (11), erhält man für Ω_x den Ausdruck

$$\Omega_x = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{ma^2} \frac{\sqrt{V_g}}{N}} = \frac{2\sqrt{V_g\tau}}{N}. \quad (21)$$

Die Tight-Binding-Kette mit ihrem Diskretisierungsparameter a kann als gute Näherung für das kontinuierliche Modell angesehen werden, wenn der Abstand benachbarter Sites a klein gewählt wird im Vergleich zur Längenskala l_x , auf der sich das Potential ändert [8]. Aus

$$l_x = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\Omega_x}} \quad (22)$$

und

$$\tau = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (23)$$

ergibt sich

$$l_x/a = \sqrt{\frac{1}{\Omega_x/\tau}}. \quad (24)$$

Daraus folgt als Bedingung an das Modell, dass $\Omega_x \ll \tau$ gelten muss.

Als nächstes wird die Wechselwirkung zwischen den Elektronen eingeführt. Diese kann aufgrund des effektiven Screenings im Festkörper als kurzreichweitige Wechselwirkung angenommen werden, konkret wird sie hier als On-Site-Wechselwirkung modelliert. In einem Band kann eine Site nur von zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin besetzt werden, daher vereinfacht sich der Wechselwirkungsdruck hier zu

$$H_{int} = \sum_j U_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}. \quad (25)$$

Die Wechselwirkungsstärke ist dabei von der betrachteten Site abhängig. Um einen glatten Übergang in die nicht-wechselwirkenden Leads zu gewährleisten, wird sie wie folgt angenommen:

$$\begin{aligned} U_j &= U e^{-\frac{(x/x_0)^6}{1-(x/x_0)^2}} \\ &= U e^{-\frac{(j/N)^6}{1-(j/N)^2}}. \end{aligned}$$

Insgesamt lautet die Hamilton-Funktion für den QPC mit einem Energieniveau damit

$$H_1 = H_0 + H_{int}. \quad (26)$$

In dieser Arbeit wird für den größten Teil ein Modell mit zwei Bändern betrachtet. Zwischen diesen soll ein Energieoffset ΔE liegen. Anstelle eines komplett generellen Ansatzes für beliebig viele Bänder wird hier nur das Ein-Band-Modell erweitert. Um dies darzustellen, werden die Ausdrücke um einen Band-Index b ergänzt mit $b = 1, 2$. Der erste Term in H_0 muss für das zweite Band um den Energieoffset ergänzt werden durch

$$E_{j\sigma} \longrightarrow E_{jb\sigma} = E_{j\sigma} + \Delta E(b - 1). \quad (27)$$

Die Wechselwirkungen bleiben auf On-Site-Wechselwirkungen beschränkt, finden aber auch zwischen den Bändern statt, H_{int} wird deshalb ergänzt durch

$$U_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \longrightarrow U_{jb}^0 n_{jb\uparrow} n_{jb\downarrow} + \sum_{\sigma, \sigma'} U_j^1 n_{j1\sigma} n_{j2\sigma'}. \quad (28)$$

Dabei bezeichnet U^0 die Wechselwirkung innerhalb des ersten bzw. innerhalb des zweiten Bandes, die sogenannte Intraband-Wechselwirkungen. U^1 bezeichnet die Interband-Wechselwirkungen zwischen den beiden Bändern, für die noch über die Spins summiert werden muss, da hier auch Elektronen mit gleichem Spin auf den beiden Niveaus einer Site vorhanden sein können. Zusammengefasst lautet die komplette wechselwirkende Hamilton-Funktion für das Zwei-Band-Modell dann:

$$\begin{aligned}
H_2 = & \sum_{\sigma} \sum_j \sum_b \left[E_{jb\sigma} n_{jb\sigma} - \tau (d_{jb\sigma}^\dagger d_{(j+1)b\sigma} + h.c.) \right] \\
& + \sum_j \sum_b U_{jb}^0 n_{jb\uparrow} n_{jb\downarrow} + \sum_j \sum_{\sigma, \sigma'} U_j^1 n_{j1\sigma} n_{j2\sigma'}
\end{aligned} \tag{29}$$

mit $E_{jb\sigma} = \Delta E(b-1) + V_j - \frac{\sigma}{2}B$. Abbildung 4 stellt dieses Modell dar. Hier ist auch gezeigt, dass das Potential von der unteren Bandkante an gemessen wird, V_g entspricht daher dem Abstand von dieser Bandkante zum Maximum des Potentials in der Mitte des QPCs. Das chemische Potential wird dagegen relativ zur Bandmitte gemessen. $\mu = 0$ bezeichnet daher ein halbgefülltes Band.

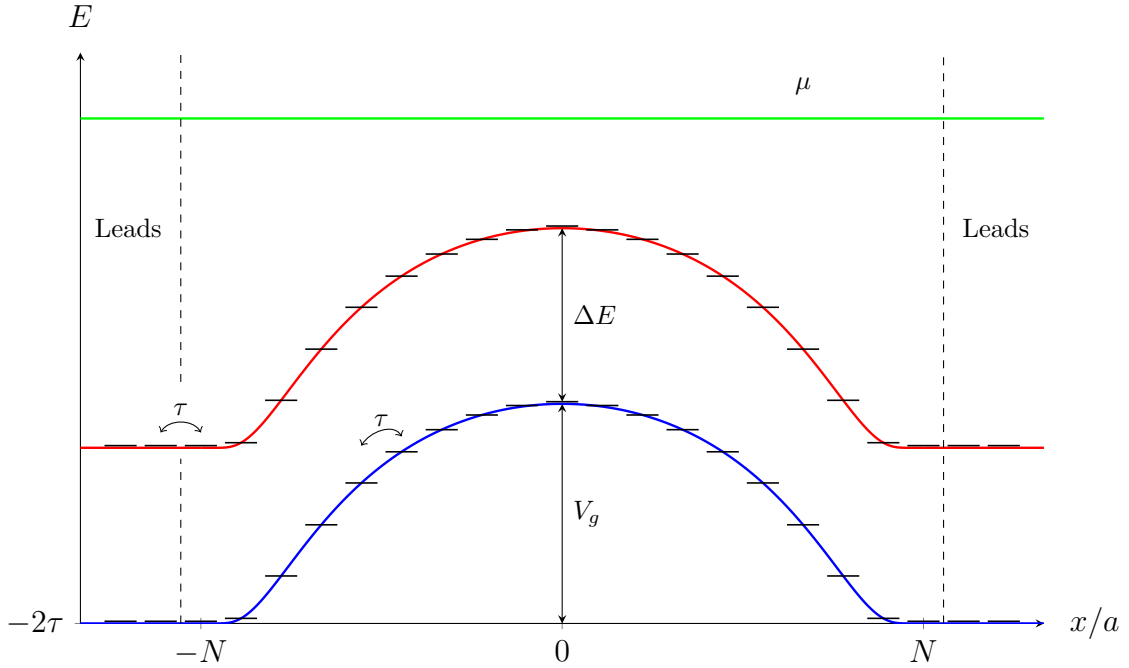


Abbildung 4: Hier verwendetes Zwei-Band-Modell mit Barriere der Höhe V_g relativ zur unteren Bandkante und einem Abstand von ΔE zwischen den Bändern. Pfeile zwischen den Sites deuten das Hopping an. In den Zuleitungen links und rechts gilt $V = 0$.

2.4.3 Integration der Leads

Die Elektronenreservoirs am linken und rechten Ende des QPCs werden durch Zuleitungen, sogenannte Leads, repräsentiert. Bei diesen handelt es sich um wechselwirkungs- und potentialfreie halb-unendliche Tight-Binding-Ketten, die die zentrale QPC-Kette auf beiden Seiten fortsetzen. Im Modell mit zwei Bändern ergeben sich

so vier Leads, nämlich jeweils zwei pro Seite und Band. Es existiert allerdings eine Möglichkeit, die Beschreibung auf die wechselwirkende zentrale Region mit $2N + 1$ Sites zu beschränken und den Einfluss der Leads trotzdem zu berücksichtigen. Es folgt eine kurze Beschreibung der relevanten Hamilton-Funktionen und der exakten Projektionsmethode, um diesen Einfluss auf den QPC zu beschreiben.

Die Ankopplung der Leads wird beschrieben durch

$$H_k = - \sum_b \sum_\sigma \tau (c_{0b\sigma L}^\dagger d_{-Nb\sigma} + c_{0b\sigma R}^\dagger d_{Nb\sigma} + h.c.). \quad (30)$$

Dabei bezeichnen $c_{mb\sigma s}^\dagger$ und $c_{mb\sigma s}$ den Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren eines Elektrons im linken ($s = L$) bzw. rechten ($s = R$) Lead des Bandes b mit Spin σ an der m -ten Stelle der halb-unendlichen Kette. m läuft dann von 0 bis ∞ , wobei $m = 0$ die Lead-Site direkt am QPC bezeichnet. Der Term erlaubt somit den Übergang von beiden Enden des QPCs in das entsprechende Lead der Seite.

Die nicht-wechselwirkenden Leads selbst lassen sich dann darstellen durch diese Hamilton-Funktion:

$$H_l = \sum_{s=L,R} \sum_m \sum_b \sum_\sigma \left[-\tau \left(c_{mb\sigma s}^\dagger c_{(m+1)b\sigma s} + h.c. \right) + \Delta E (b-1) n_{mb\sigma s} \right]. \quad (31)$$

Es folgt ein kurzer Überblick über die Projektionsmethode, die den Einfluss der Leads auf die Ränder der QPC-Kette projiziert. Dazu betrachten wir die nicht-wechselwirkende Ein-Teilchen-Hamilton-Funktion, die Methode lässt sich leicht auf den wechselwirkenden Fall erweitern.¹ Wir definieren die Projektoren P und Q , die den Hilbertraum aufteilen. P projiziert auf die zentralen Sites des QPCs, Q projiziert auf die Leads. In der so definierten Basis lässt sich die Hamilton-Funktion schreiben als

$$H = \begin{pmatrix} H_P & H_{PQ} \\ H_{QP} & H_Q \end{pmatrix}. \quad (32)$$

¹Eine ausführliche Behandlung findet sich z. B. bei Karrasch [9].

Mit den Definitionen $H_P = PHP$, $H_Q = QHQ$, $H_{PQ} = PHQ$, $H_{QP} = QHP$, $z_P = zP$ und $z_Q = zQ$ kann die Greensche Funktion $\mathcal{G} = \frac{1}{z-H+\mu}$ dann ausgedrückt werden durch folgenden Ausdruck, wobei μ implizit in H enthalten sein soll, sofern es nicht explizit erwähnt wird:

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_P & \mathcal{G}_{PQ} \\ \mathcal{G}_{QP} & \mathcal{G}_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_P - H_P & -H_{PQ} \\ -H_{QP} & z_Q - H_Q \end{pmatrix}^{-1}. \quad (33)$$

Durch Rechnung findet man für die einzelnen Elemente von \mathcal{G} :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_P &= [z_P - H_P - H_{PQ} \frac{1}{z_Q - H_Q} H_{QP}]^{-1} \\ \mathcal{G}_Q &= [z_Q - H_Q - H_{QP} \frac{1}{z_P - H_P} H_{PQ}]^{-1} \\ \mathcal{G}_{PQ} &= \mathcal{G}_P H_{PQ} \frac{1}{z_Q - H_Q} = \frac{1}{z_P - H_P} H_{PQ} \mathcal{G}_Q \\ \mathcal{G}_{QP} &= \mathcal{G}_Q H_{QP} \frac{1}{z_P - H_P} = \frac{1}{z_Q - H_Q} H_{QP} \mathcal{G}_P \end{aligned} \quad (34)$$

H_{PQ} und H_{QP} werden aus H_k gebildet, es ist:

$$\begin{aligned} H_{PQ} &= - \sum_b \sum_\sigma \tau (d_{-Nb\sigma}^\dagger c_{0b\sigma L} + d_{+Nb\sigma}^\dagger c_{0b\sigma R}) \\ H_{QP} &= H_{PQ}^\dagger \end{aligned} \quad (35)$$

Wir definieren eine Selbstenergie Σ , die den Einfluss der Leads beschreibt, über folgende Gleichung:

$$\mathcal{G}_P =: \frac{1}{z_P - H - \Sigma} \quad (36)$$

Wir führen $-N =: N_L$ und $+N =: N_R$ ein, um den folgenden Ausdruck kurz zu halten. In seiner Ein-Teilchen-Form lässt sich $H + \Sigma$ schreiben als

$$\begin{aligned}
H + \Sigma &= H_P + H_{PQ} \frac{1}{z_Q - H_Q} H_{QP} \\
&= H_P + \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{s, s'=L, R} \sum_{b, b'} \left(\tau^2 |N_s b \sigma\rangle \langle 0 b \sigma s| (z_Q - H_Q)^{-1} |0 b' \sigma' s'\rangle \langle N_{s'} b' \sigma'| \right) \\
&= H_P + \sum_{\sigma} \sum_{s=L, R} \sum_b \left(\tau^2 |N_{sb} \sigma\rangle \underbrace{\langle 0_b \sigma s| (z_Q - H_Q)^{-1} |0_b \sigma s\rangle}_{=: g_{sb}^\sigma(z)} \langle N_{sb} \sigma| \right).
\end{aligned} \tag{37}$$

Die Vereinfachungen im letzten Schritt ergeben sich, da die einzelnen Leads nicht direkt miteinander koppeln. Damit ist ein Ausdruck gefunden, der den Einfluss der halb-unendlichen Leads beschreibt, der Propagator $g_{sb}^\sigma(z)$. Für die linke Seite $s = L$ mit chemischem Potential μ gilt dann für das halb-unendliche Lead von ∞ bis zur Site m

$$g_L(z) = \langle m | (z - K + \mu)^{-1} | m \rangle. \tag{38}$$

K bezeichnet hier die Ein-Teilchen-Version von H_L , nämlich

$$K = - \sum_s \sum_{\sigma} \sum_m \sum_b \tau \left(|mb\sigma s\rangle \langle (m+1)b\sigma s| + |(m+1)b\sigma s\rangle \langle mb\sigma s| \right). \tag{39}$$

Um den Ausdruck auszuwerten, nutzt man die Tatsache, dass sich $g_L(z)$ nicht ändert, wenn eine Site von der halb-unendlichen Kette abgezogen wird. Wir verwenden nochmals die Projektion, um $g_L(z)$ aufzuteilen: P projiziert nun auf die letzte Site, Q projiziert auf die um eine Site kürzere halb-unendliche Kette. In diesem Ausdruck findet man also $g_P = g_L$ wieder:

$$g_L = \begin{pmatrix} g_P & g_{PQ} \\ g_{QP} & g_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_L & g_{PQ} \\ g_{QP} & g_Q \end{pmatrix}. \tag{40}$$

Gleichung (34) führt hier zu

$$\begin{aligned}
g_L &= \left[z_P - K_P - K_{PQ} \frac{1}{z_Q - K_Q} K_{QP} \right]^{-1} \\
&= \left[z + \mu - \tau \underbrace{\langle m | \frac{1}{z_Q - K_Q} | m \rangle}_{=g_L} \tau \right]^{-1} \\
&= [z + \mu - \tau^2 g_L]^{-1}.
\end{aligned}$$

Die Lösungen der quadratischen Gleichung, die sich hieraus ergibt,

$$\tau^2 g_L^2(z) - (z + \mu)g_L(z) + 1 = 0, \quad (41)$$

sind gegeben durch:

$$g_L(z) = \begin{cases} \frac{1}{2\tau^2}(z + \mu - i\sqrt{4\tau^2 - (z + \mu)^2}) & \text{falls } \text{Im}(z) > 0 \\ \frac{1}{2\tau^2}(z + \mu + i\sqrt{4\tau^2 - (z + \mu)^2}) & \text{falls } \text{Im}(z) < 0 \end{cases} \quad (42)$$

An diesem Ergebnis lassen sich physikalisch interessante Eigenschaften ablesen: Während sich durch Einbeziehen der Leads die Greensche Funktion im kompletten QPC ändert, führen die Leads nur an den Randstellen der Hamilton-Funktion des QPCs zu Korrekturen:

$$\Sigma = \tau^2 |-N\rangle g_L \langle -N| + \tau^2 |+N\rangle g_R \langle +N| \quad (43)$$

Die Korrektur führt zu einer endlichen Lebensdauer der Zustände am Rand. Dies spiegelt die Tatsache wider, dass Elektronen aus der QPC-Region in die Leads abwandern können. Dadurch findet man für das System auch nicht-diskrete Zustände als Lösungen (im Gegensatz zu Systemen mit festen Randbedingungen, dort wären lediglich Reflektionen an den Enden möglich) und es entsteht eine kontinuierliche Verteilung der Zustände innerhalb des Energiebandes.

2.5 Methode: Implementierung der zwei Ketten

Numerisch wird das hier beschriebene System mittels der funktionellen Renormierungsgruppe (fRG) innerhalb der extended Coupled-Ladder Approximation (eCLA) gelöst. Die fRG-Methode ist etabliert zur Behandlung wechselwirkender Viel-Teilchen-Systeme und führt diese auf numerisch zu lösende Differentialgleichungen zurück. Im Rahmen der eCLA werden zur Lösung der Fluss-Gleichungen Informationen benachbarter Sites berücksichtigt. Der Parameter L beschreibt, von bis zu wie vielen Nachbar-Sites dieses Feedback stammt, und wird als Feedbacklänge bezeichnet. Mit wachsendem L steigt auch die Zahl der zu lösenden Fluss-Gleichungen, für die Zahl der unabhängigen Parameter in diesen Gleichungen gilt $\mathcal{O}(L^2 N^2)$ [1].

Mehrere Ketten werden durch Ineinanderlegen implementiert. Dadurch wird eine effektive Kette gebildet. Diese besitzt dann $n_b(2N + 1)$ Sites², wobei n_b die Anzahl der Bänder bezeichnet. Hopping ist nur innerhalb eines Bandes erlaubt, in der effektiven Kette gibt es deshalb keinen Übergang zwischen benachbarten Sites, sondern zwischen übernächsten ($n_b = 2$) Nachbarn bzw. über-übernächsten ($n_b = 3$) Nachbarn usw. Für die Intrabandwechselwirkung – solange sie in allen Bändern gleich angenommen wird – ändert sich nichts, die Interbandwechselwirkung wird jedoch zu einer Wechselwirkung zwischen benachbarten Sites. Die Abbildungen 5 und 6 zeigen dieses Vorgehen anschaulich.

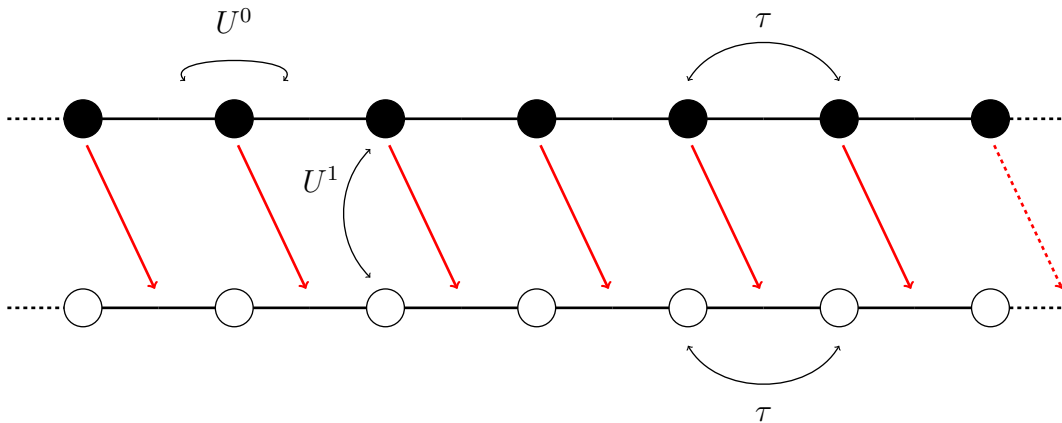


Abbildung 5: Darstellung der Implementierung der zwei Ketten im hier verwendeten Programm. Die roten Pfeile zeigen an, wie die Sites der zweiten Kette zwischen die der ersten gelegt werden. Dadurch ergibt sich effektiv eine Kette mit doppelter Länge. Die schwarzen Pfeile deuten Hopping- und Wechselwirkungsterme an.

²Da im Programm für die effektive Kette eine ungerade Gesamtzahl an Sites benötigt wird, ist es zum Beispiel für $n_b = 2$ nötig, eine zusätzliche künstliche Site am Ende der Kette einzufügen.

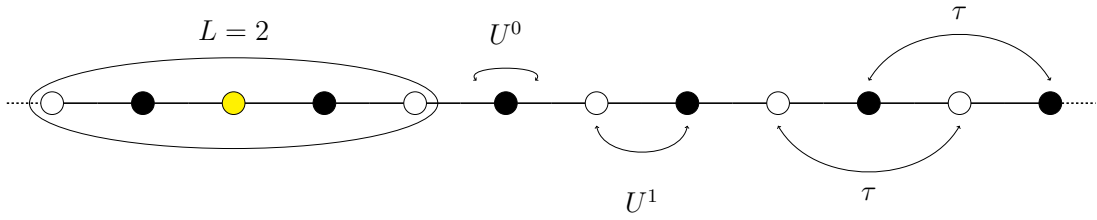


Abbildung 6: Effektive Kette mit doppelter Länge $2(2N + 1)$. Angedeutet ist das Feedback für die gelb markierte Site, falls $L = 2$ gewählt wird. Wie in der vorherigen Abbildung werden Hopping- und Wechselwirkungsterme angedeutet, wie sie in der effektiven Kette berücksichtigt werden müssen.

2.6 Die Observablen

Die Spektralfunktion ergibt sich aus dem Imaginärteil der retardierten Greenschen Funktion:

$$\mathcal{A}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathcal{G}(\omega)] \quad (44)$$

Der Diagonaleil der diskretisierten Spektralfunktion lautet dann

$$\mathcal{A}(\omega, j) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathcal{G}_{jj}(\omega)] \quad (45)$$

und wird als lokale Zustandsdichte bzw. Local Density of States (LDOS) bezeichnet. Sie dient als Maß für die erlaubten Elektronenzustände, egal ob diese besetzt sind oder nicht.

Für den hier betrachteten Fall bei einer Temperatur $T = 0$ erhält man die Dichte für die Site j , indem man die LDOS bis zum chemischen Potential integriert:

$$n(\mu, j) = \int_{-\infty}^{\mu} \mathcal{A}(\omega, j) d\omega. \quad (46)$$

Die andere wichtige Observable, die in dieser Arbeit untersucht wird, ist der Leitwert. Eine ausführliche Erklärung zur Berechnung findet sich zum Beispiel bei Karrasch [9]. Mit der Zustandsdichte in den Leads ρ_{Lead} gilt für den Leitwert:

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} |2\pi \rho_{\text{Lead}}(\mu) \tau^2 \mathcal{G}_{1,N}^{\sigma}(\mu)|^2. \quad (47)$$

3 Tests

3.1 Ein-Band-Tests mit und ohne Wechselwirkung

In diesem Abschnitt wird zwar mit dem Multi-Band-Programm gearbeitet, es wird aber $n_b = 1$ gewählt. Ziel ist es, die vom ursprünglichen Programm bekannten, für QPCs typische Eigenschaften reproduzieren zu können. Die Ergebnisse dieser Tests werden im Folgenden besprochen und dabei wird auf die wichtigsten Resultate eingegangen. Zunächst wird das Auftreten und die Struktur der Stufe im Leitwert mit und ohne Wechselwirkung untersucht.

Hier sowie im weiteren Verlauf der Arbeit wird zur Untersuchung der Observablen des Systems immer das chemische Potential μ variiert. Während in experimentellen Setups üblicherweise die Gate-Spannung V_g kontrolliert wird, um die Breite des Transportkanals und damit die effektive Barrierenhöhe zu verändern, wird hier μ verändert. Mit einer höheren Gate-Spannung steigt die Anzahl offener Kanäle. Dieses Verhalten wird auch mit einem steigenden chemischen Potential erreicht.

3.1.1 Auftauchen der Stufe für den Leitwert

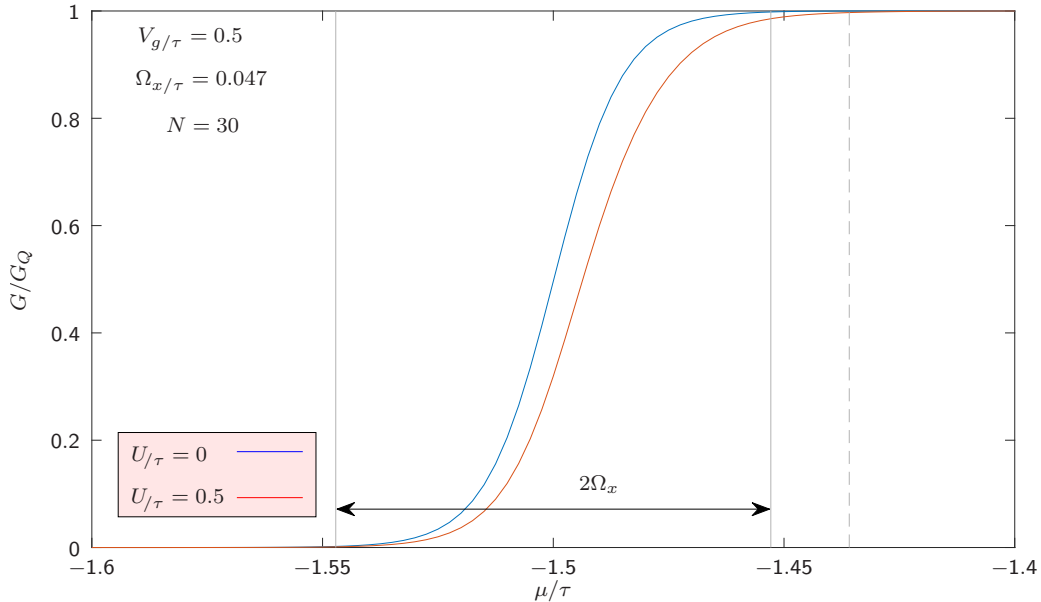


Abbildung 7: Leitwert-Stufe mit Ansteigen des Leitwerts von 0 auf das Leitwertquant G_Q . Die blaue Kurve zeigt den komplett symmetrischen Verlauf um $\mu_0 = -1.5\tau$ für den wechselwirkungsfreien Fall. Die rote Kurve zeigt den Leitwert berechnet mit denselben Parametern, aber mit einer Wechselwirkungsstärke $U \neq 0$. Die Stufe wird im Gegensatz zur wechselwirkungsfreien leicht verschoben und verbreitert.

Wie in Kapitel 2 erläutert, wird für den QPC ein parabolisches Potential der Höhe V_g modelliert. Im wechselwirkungsfreien Fall ist deshalb mit dem Auftreten der Stufe im Leitwert bei einem um V_g erhöhten Wert der unteren Bandkante des QPCs zu rechnen, also bei $\mu_0 = -2\tau + V_g$, da das chemische Potential von der Bandmitte aus gemessen wird.

Die blaue Kurve in Abbildung 7 zeigt den typischen Verlauf für den Leitwert. Die Stufe verläuft komplett symmetrisch um den Wert μ_0 . Die Form lässt sich beschreiben durch [4]

$$G(\mu) = \frac{1}{e^{2\pi(-2\tau+V_g-\mu)/\Omega_x} + 1} G_Q, \quad (48)$$

wobei Ω_x für die Krümmung des Potentials steht, es beschreibt aber auch die Breite der Stufe, es ist $\Delta\mu \propto \Omega_x$. In der Abbildung kann auch abgelesen werden, dass der Leitwert in einem Intervall von ungefähr $\Delta\mu \approx 2\Omega_x$ ansteigt.

3.1.2 Aufhebung der Spin-Entartung in Anwesenheit eines Magnetfeldes

Der Einfluss eines Magnetfeldes auf den Leitwert wurde in Kapitel 2.3 erläutert. Im einfachen wechselwirkungsfreien Fall führt dies zu einem symmetrischen Zeeman-Splitting, wie in Gleichung (49) beschrieben. Die Entartung für Spin-up- und Spin-down-Elektronen wird aufgehoben und die entsprechenden Leitwert-Stufen trennen sich.

$$G_B(\mu) = 0.5 G(\mu + B) + 0.5 G(\mu - B) \quad (49)$$

$$= \frac{0.5 G_Q}{e^{2\pi(-2\tau+V_g-(\mu+B))/\Omega_x} + 1} + \frac{0.5 G_Q}{e^{2\pi(-2\tau+V_g-(\mu-B))/\Omega_x} + 1} \quad (50)$$

Dies führt zu den in Abbildung 8 dargestellten Kurven, die völlig symmetrisch um den Mittelpunkt bei μ_0 mit $G(\mu_0) = 0.5 G_Q$ liegen. Hierbei wurden zur Berechnung Magnetfelder der Stärken $B = 0$, $B = 0.05 \tau$ und $B = 0.1 \tau$ verwendet. Ist das Magnetfeld deutlich größer als Ω_x , so sind zwei deutlich voneinander getrennte Stufen mit Plateau zwischen ihnen zu erkennen.

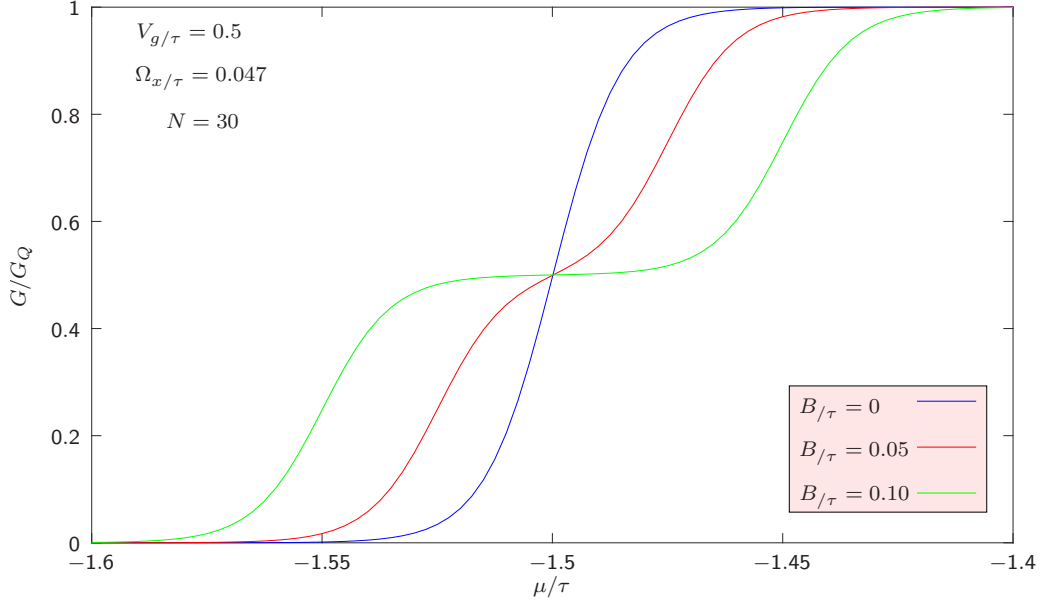


Abbildung 8: Leitwert-Stufen im wechselwirkungsfreien Fall ($U = 0$) in Anwesenheit eines Magnetfeldes. Während die Spin-up-Elektronen energetisch abgesenkt werden, wird die andere Spezies energetisch angehoben. Dadurch tritt für die \uparrow -Elektronen die Leitwertstufe früher auf. Für \downarrow -Elektronen verschiebt sich die Leitwertstufe zu höheren μ -Werten.

3.1.3 Unterschiede bei vorhandener Wechselwirkung

Wird eine endliche Wechselwirkungsstärke zwischen den Teilchen betrachtet, ergeben sich die in Abbildung 7 gezeigten Unterschiede zwischen den Leitwert-Stufen im nicht-wechselwirkenden und im wechselwirkenden Fall. Der Einfluss der Wechselwirkung macht sich auf mehrere Arten bemerkbar: Zum einen liegt die Stufe nicht mehr genau um den Wert μ_0 herum, sondern weicht zu einem leicht höheren Wert $\mu_0 + \delta\mu$ aus. Außerdem verläuft die Stufe nicht mehr symmetrisch und ihre Breite ändert sich: Sie steigt leicht an. Diese Veränderungen können auf die Wechselwirkung zurückgeführt werden, wodurch Elektronen mehr Energie benötigen, um denselben Wert für den Leitwert zu erreichen wie im nicht-wechselwirkenden Fall.

3.2 Zwei-Band-Tests ohne Wechselwirkung

Für den folgenden Teil wird das Multi-Band-Programm für Tests mit zwei Bändern verwendet, also $n_b = 2$. Verschiedene Tests mit vereinfachten Bedingungen sollen die Konsistenz des Programms zeigen. Zunächst wird dafür die Wechselwirkung zwischen den Bändern auf 0 gesetzt. Anschließend wird durch Modifikation der Wechselwirkungen ein effektives Ein-Band-Modell konstruiert und mit den Ergebnissen aus dem letzten Abschnitt verglichen.

3.2.1 Test, dass für $U^1 = 0$ Resultate für $n_b = 1$ und $n_b = 2$ übereinstimmen

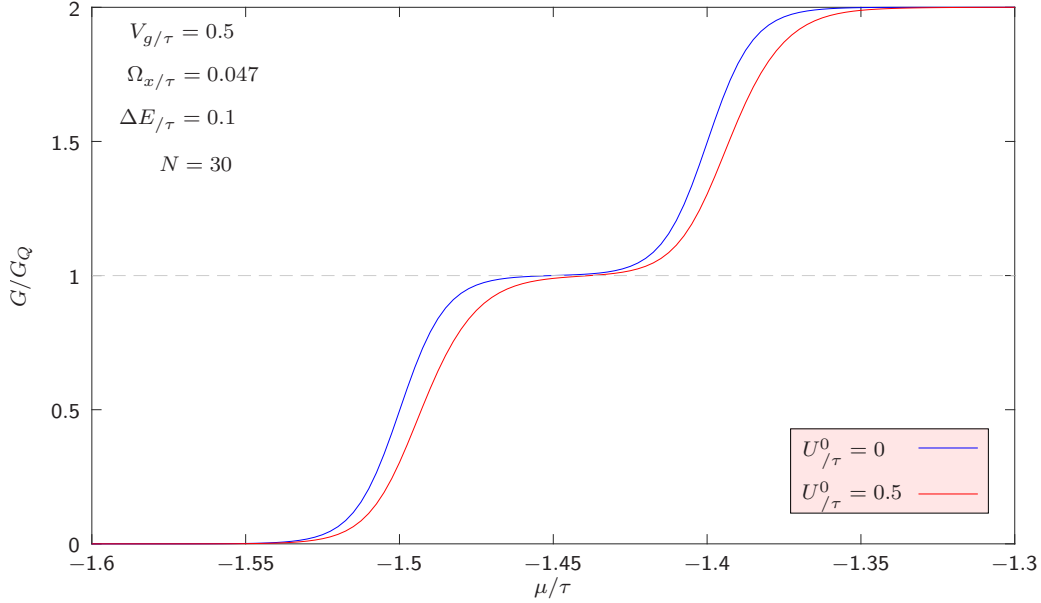


Abbildung 9: Leitwert-Stufen im Zwei-Band-Modell. Im Gegensatz zum Ein-Band-Modell treten zwei Stufen auf, der Leitwert steigt auf das doppelte Leitwertquant $2G_Q$. Im Falle von Wechselwirkungen, die sich auf die Bänder einzeln beschränken, treten analog zum Ein-Band-Modell zwei verbreiterte und leicht verschobene Stufen auf.

Bei diesem Test handelt es sich um ein simples Zwei-Band-Modell. Wechselwirkungen werden komplett vernachlässigt, die beiden Bänder unterscheiden sich nur um einen konstanten Energie-Offset ΔE , um den das zweite Band nach oben verschoben ist. Die blaue Kurve in Abbildung 9 zeigt das Ergebnis des Tests. Wie erwartet zeigen sich zwei Stufen im Leitwert: Leitet das erste Band, steigt der Leitwert auf $1G_Q$, ist auch der zweite Kanal geöffnet, dann beträgt der Leitwert $2G_Q$. Das Verhalten wird beschrieben durch

$$\begin{aligned}
 G_2(\mu) &= G(\mu) + G(\mu - \Delta E) \\
 &= \frac{G_Q}{e^{2\pi(-2\tau+V_g-\mu)/\Omega_x} + 1} + \frac{G_Q}{e^{2\pi(-2\tau+V_g-(\mu-\Delta E))/\Omega_x} + 1}. \quad (51)
 \end{aligned}$$

Mit $\Delta E \approx 2\Omega_x$ ist der Energie-Offset dabei so groß gewählt, dass die Stufen deutlich getrennt voneinander auftreten. Die Stufen sind jeweils symmetrisch um $\mu_0 = -2\tau + V_g$ bzw. $\mu_1 = -2\tau + V_g + \Delta E$ mit $G(\mu_0) = \frac{1}{2}G_Q$ und $G(\mu_1) = \frac{3}{2}G_Q$. Die gesamte Kurve ist symmetrisch um $\mu_0 + \frac{\Delta E}{2}$ und $G(\mu_0 + \frac{\Delta E}{2}) = G_Q$. Der Verlauf dieser

Kurve dient später als Vergleichswert, um quantitative und qualitative Unterschiede darzustellen, die bei vorhandener Wechselwirkung auftreten.

Analog treten zwei leicht verschobene und weniger steile Leitwert-Stufen auf, wenn die Wechselwirkung U^0 der Elektronen in jedem Band einzeln berücksichtigt werden. In Abbildung 9 werden diese beiden Fälle gezeigt, die rote Kurve stellt den Fall mit der so eingeschränkten Wechselwirkung dar.

3.2.2 Das Zwei-Band-Modell mit modifizierter Wechselwirkung als effektives Ein-Band-Modell

Um die Plausibilität des Programms für den Fall zu überprüfen, dass Wechselwirkungen zwischen den beiden Bändern berücksichtigt werden, wird in diesem Abschnitt aus dem Zwei-Band-Modell ein effektives Ein-Band-Modell konstruiert. Dazu werden die Wechselwirkungen auf gleiche Spin-Spezies reduziert, sowohl Magnetfeld als auch Band-Offset werden auf 0 gesetzt. Im Rahmen der hier betrachteten On-Site-Wechselwirkung entfällt damit eine Intraband-Wechselwirkung. Die Bänder liegen jetzt auf dem gleichen Energieniveau und zusammen mit der Interband-Wechselwirkung repräsentiert jedes von ihnen eine Spin-Art.

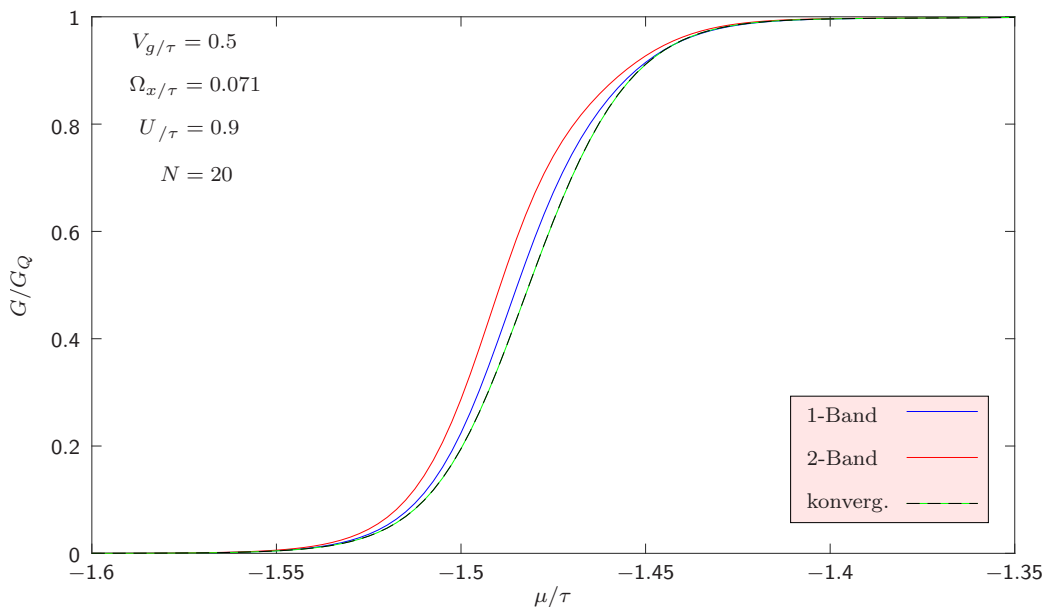


Abbildung 10: Vergleich der nicht auskonvergierten mit den konvergierten Ergebnissen für den Leitwert. Verglichen wird das Ein-Band-Modell als blaue Kurve ($L = 1$) mit dem modifizierten Zwei-Band-Modell als rote Kurve ($L = 2$), das zu Testzwecken als effektives Ein-Band-Modell dienen soll. Die konvergierten Kurven sind grün und schwarz, Ein- und Zwei-Band-Modell sind nicht zu unterscheiden. Auf die Bedeutung und das Konvergenzverhalten von L wird im nächsten Abschnitt eingegangen.

In Abbildung 10 wird das Ergebnis dem des Ein-Band-Modells mit voller Wechselwirkung aus Abschnitt 3.1.3 gegenübergestellt. Das Zwei-Band-Modell wurde dabei so ausgewertet, dass der volle Leitwert für beide Bänder auch lediglich auf $1 G_Q$ ansteigt.

Es zeigen sich leichte Abweichungen, die auf die unterschiedliche Implementierung der beiden Modelle zurückzuführen sind. Eine genauere Diskussion dieser Unterschiede wird in Abschnitt 3.3.2 gegeben, wenn die Konvergenz in der Feedbacklänge L besprochen wird.

3.3 Zwei-Band-Tests mit Wechselwirkung

In diesem Kapitel wird die Konvergenz in der Feedbacklänge L getestet. Auf den Ergebnissen des vorherigen Abschnitts aufbauend werden weitere Eigenschaften des Modells nun mit voller Wechselwirkung untersucht bzw. Vergleiche der Eigenschaften des Modells mit voller und eingeschränkter Wechselwirkung durchgeführt.

3.3.1 Konvergenz in der Feedbacklänge L

Im Modell werden nur On-Site-Wechselwirkungen berücksichtigt. Die Feedbacklänge L beschreibt die noch für die fRG-Gleichungen betrachteten Nachbar-Sites. Erhöht man L auf $L \rightarrow 2N$, so wird die komplette QPC-Kette für das Feedback betrachtet. Für das parabolische Potential innerhalb des QPCs wurde in Abschnitt 2.4 eine charakteristische Länge eingeführt:

$$l_x = a\sqrt{\tau/\Omega_x}, \quad (52)$$

wobei Ω_x nach Gleichung (21) unter anderem durch die Anzahl an Sites innerhalb des QPCs bestimmt wird. Mit den in diesen Tests verwendeten Parametern kann daraus die charakteristische Länge bestimmt werden als $l_x = 5a$ bzw. $l_x = 4a$ für $2N+1 = 61$ bzw. $2N+1 = 41$ Sites. Als erste Abschätzung ist mit einer Konvergenz in der Feedbacklänge L zu rechnen für $L \approx l_x/a$. Im Falle von $n_b = 2$ ist zusätzlich die Implementierung über die ineinandergelegten Ketten zu berücksichtigen, daher sollte für diesen Fall $L \approx 2l_x/a$ zur Konvergenz ausreichen.

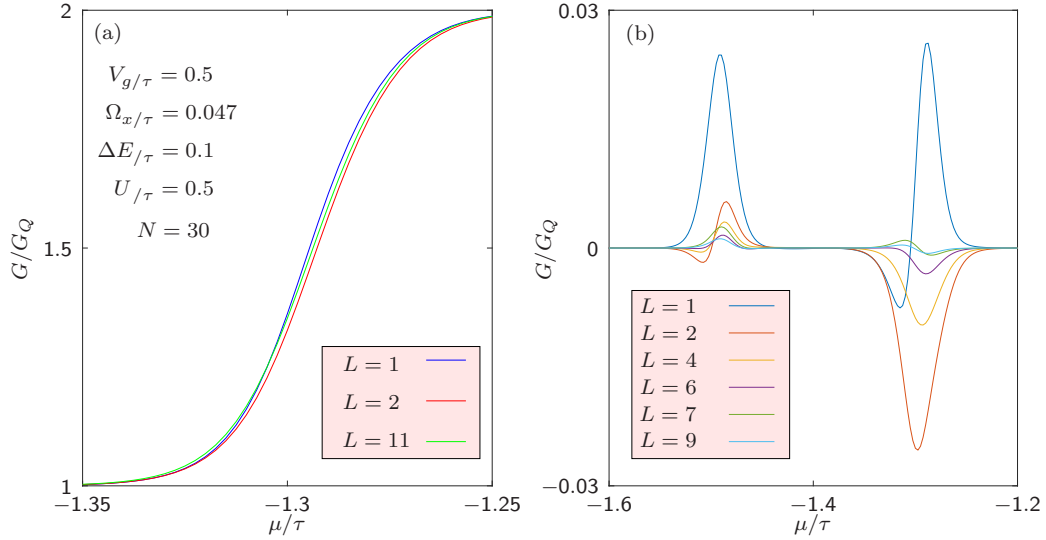


Abbildung 11: Konvergenz für das voll wechselwirkende Zwei-Band-Modell. In (a) ist ein Ausschnitt der zweiten Stufe für verschiedene Feedbacklängen L gezeigt. In (b) rechts werden Differenzen zu dem Leitwert mit maximalem L dargestellt.

Für die vorliegenden Daten, hier und im folgenden Unterkapitel, kann von $L = 5$ an von genügend auskonvergierten Ergebnissen gesprochen werden, die mit viel größerem Rechenaufwand verbundene weitere Erhöhung von L führt zu keinen sichtbaren Änderungen in der Observablen mehr. Dies wird sowohl für das normale Zwei-Band-Modell sowie auch für das modifizierte Zwei-Band-Modell im Vergleich mit dem Ein-Band-Modell erläutert.

Abbildung 11 zeigt einen Ausschnitt der zweiten Leitwert-Stufe für verschiedene L -Werte. Für $L = 1$ und $L = 2$ sind noch Unterschiede zu dem auskonvergierten Ergebnis mit $L = 11$ sichtbar. Für höhere L -Werte sind diese Unterschiede zu klein, um hier in einer Abbildung für den Leitwert dargestellt werden zu können. Die rechte Abbildung zeigt deshalb die Differenzen zwischen dem Leitwert bei einem konkreten L -Wert und $L_{\max} = 11$. Die zwei Bereiche, in denen Abweichungen auftreten, finden sich an den Stellen der Leitwertstufen.

3.3.2 Vergleich der Konvergenz – Ein-Band-Modell vs. Zwei-Band-Modell mit modifizierter Wechselwirkung

Für den sinnvollen Vergleich des in den Wechselwirkungen modifizierten Zwei-Band-Modells, wie es im Kapitel 3.2.2 eingeführt wurde, mit dem Ein-Band-Modell müssen ebenfalls die auskonvergierten Resultate betrachtet werden. Im Zwei-Band-Modell sind die QPC-Ketten bei der Implementierung ineinandergeschoben. Das heißt, es folgen abwechselnd Sites des ersten und zweiten Bandes aufeinander. Deshalb muss

die Feedbacklänge L doppelt so groß gewählt werden, um das gleiche effektive Feedback zu erhalten wie im Ein-Band-Modell.

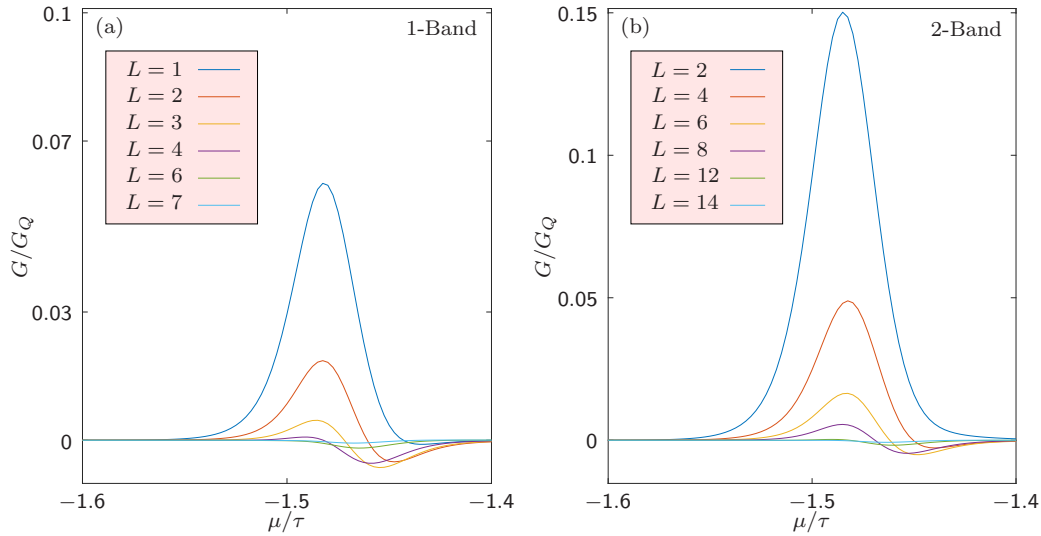


Abbildung 12: Betrachtet wird die Konvergenz in L . Die Differenz aus dem Leitwert für L und dem Leitwert für das maximal verwendete $L_{\max} = 8$ bzw. $L_{\max} = 16$ für das Ein-Band-Modell in (a) bzw. das modifizierte Zwei-Band-Modell in (b). Die Differenzen nehmen mit steigendem L schnell ab und werden so klein, dass die einzelnen Kurven im Plot des Leitwerts nicht mehr unterschieden werden können.

In Abbildung 12 werden für verschiedene L -Werte die Differenzen im Leitwert zu dem Leitwert mit maximalem L -Wert aufgetragen. Im Ein-Band-Modell ist der maximal verwendete Wert $L_{\max} = 8$, im Zwei-Band-Modell $L_{\max} = 16$. Für die kleinsten L -Werte ist die Differenz noch relativ groß und im Graphen für die Leitwerte unterschiedbar, wie in Abbildung 10 erkennbar. Schon für $L = 2$ bzw. $L = 4$ ist der Unterschied aber kaum noch sichtbar. Insbesondere konvergieren für steigende L -Werte auch die Leitwerte der beiden Modelle gegeneinander, dies ist in Abbildung 13 dargestellt. Dadurch sind für größere L -Werte im Ein-Band-Modell und im Zwei-Band-Modell mit modifizierter Wechselwirkung keine Unterschiede mehr im Leitwert zu erkennen, während die Leitwert-Kurven bei den Feedbacklängen $L = 1$ und $L = 2$, wie sie in Abbildung 14 verwendet wurden, noch deutlich voneinander abweichen.

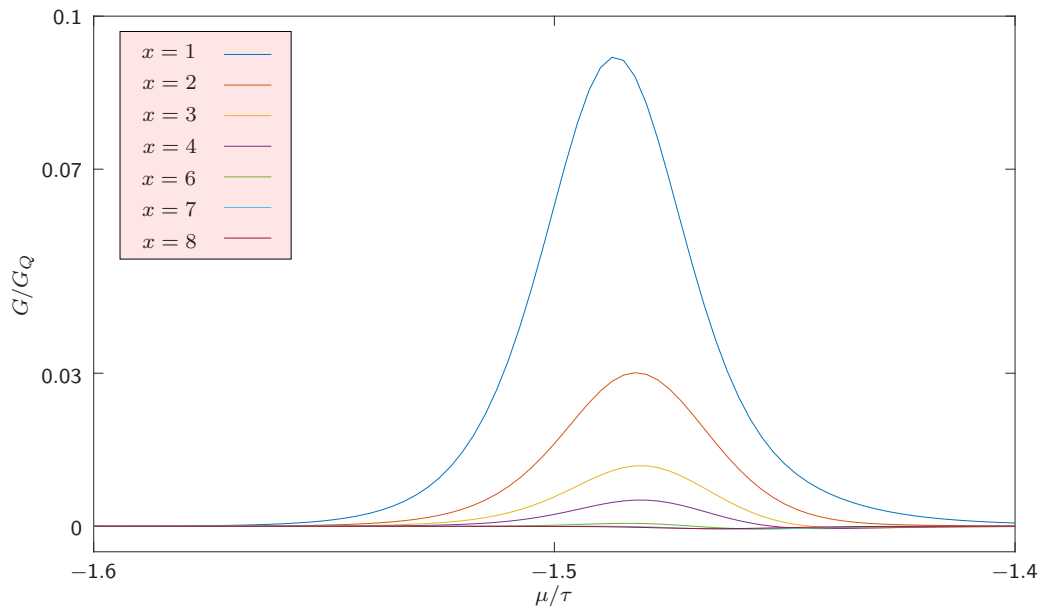


Abbildung 13: Betrachtet wird die Konvergenz in L zwischen den beiden Modellen. Hierfür wird die Differenz für den Leitwert bei $L = x$ des Ein-Band-Modells mit dem Leitwert bei $L = 2x$ des Zwei-Band-Modells aufgetragen. Die Differenz wird schnell so klein, dass die Leitwertkurven selbst für beide Modelle nicht mehr unterschieden werden können.

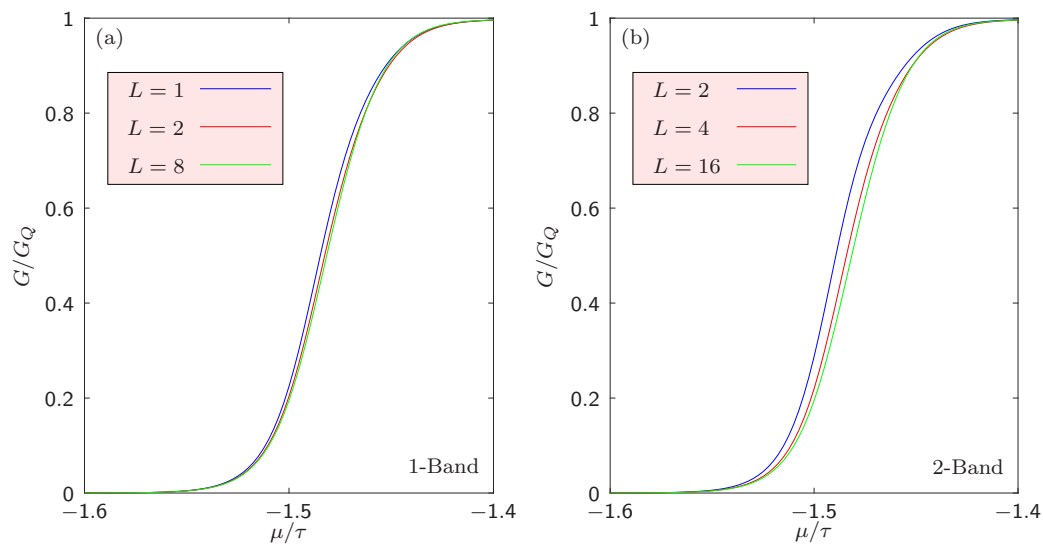


Abbildung 14: Vergleich der Leitwert-Stufen für verschiedene L -Werte im Ein-Band-Modell und im modifizierten Zwei-Band-Modell. Für kleine L -Werte sind noch Unterschiede zur Stufe bei maximalem L zu erkennen. Für höhere L -Werte sind graphisch keine Unterschiede mehr zu erkennen.

4 Breite der zweiten Stufe

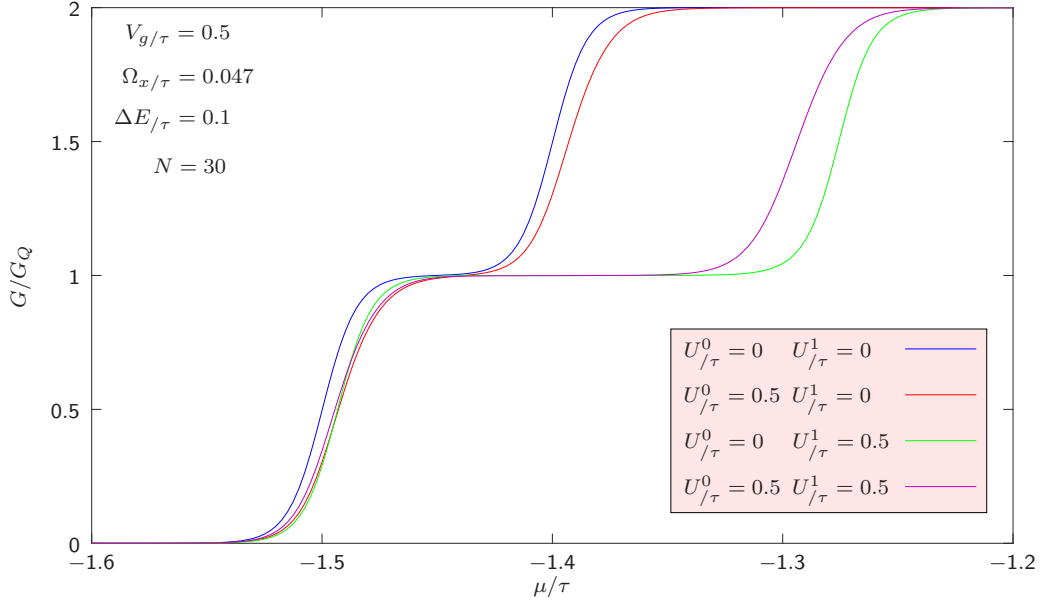


Abbildung 15: Vergleich der Leitwert-Stufen für alle Möglichkeiten: Keine Wechselwirkung (blaue Kurve), nur Intraband-Wechselwirkungen (rote Kurve), nur Interband-Wechselwirkungen (grüne Kurve) und volle Wechselwirkung (lila Kurve).

Dieser Abschnitt untersucht einen speziellen Aspekt des Modells genauer. Abbildung 15 zeigt den Unterschied zwischen nicht-wechselwirkenden, teilweise wechselwirkenden und voll wechselwirkenden Systemen. Als teilweise wechselwirkend wird der Fall bezeichnet, dass entweder nur Intraband- ($U^0 \neq 0$) oder nur Interband-Wechselwirkungen ($U^1 \neq 0$) berücksichtigt werden.

Analog zum Ein-Band-Modell tritt bei einer Wechselwirkung U^0 , die sich auf die einzelnen Bänder beschränkt, eine leicht verbreiterte Stufe auf, die außerdem auch noch leicht zu einer höheren Energie verschoben ist, bezogen auf die nicht-wechselwirkende Stufe. Im Vergleich dazu zeigen sich in den Leitwert-Kurven mit Interband-Wechselwirkung U^1 deutliche Unterschiede: Die erste Stufe entspricht ungefähr der für den Fall der Intraband-Wechselwirkung. Die zweite Stufe wird jedoch deutlich zu höheren Energien verschoben, im hier betrachteten Fall beträgt dieser zusätzliche Energiebetrag ca. $\Delta\mu = 0.1\tau$. Mittels einer einfachen Abschätzung als Hartree-Verschiebung kann die ungefähre Größe dieses Energiebetrags nachvollzogen werden: Im Bereich, in dem die zweite Stufe beginnt, beträgt die Teilchendichte in der Mitte des ersten Bandes $n_1(\mu = -1.33\tau) = 0.217$. Dies führt bei der verwendeten Wechselwirkungsstärke $U^1 = 0.5\tau$ zu einer zusätzlichen Energie von $E = U^1 n_1 = 0.107\tau$.

Im Falle der vollen Wechselwirkung zeigt sich eine deutlich breitere zweite Stufe als in allen anderen Fällen. Abbildung 16 zeigt die erste und zweite Leitwert-Stufe

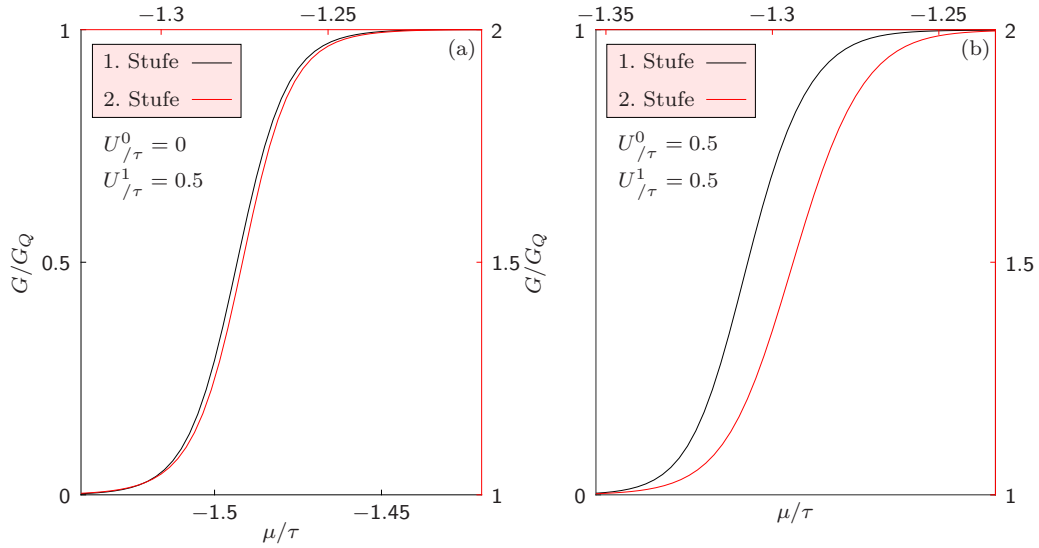


Abbildung 16: Vergleich der ersten und zweiten Leitwert-Stufe. In (a) für den eingeschränkt wechselwirkenden Fall, in (b) für den Fall voller Wechselwirkung, in dem eine deutlich breitere zweite Stufe erkennbar ist.

übereinandergelegt, jeweils für die volle und die eingeschränkte Wechselwirkung. Im eingeschränkt wechselwirkenden Fall links sind die Stufen fast identisch. Im rechts dargestellten Fall mit voller Wechselwirkung zeigt sich die zweite Stufe deutlich breiter. Für die hier gewählten Parameter beträgt die Breite der zweiten Stufe ungefähr 125 % der Breite der ersten Stufe.

Eine einfache Erklärung der Verbreiterung rein durch die Wechselwirkung zwischen den Bändern kann so nicht angenommen werden, da die Verbreiterung im Falle der vollen Wechselwirkung ($U_0 = U_1 \neq 0$) auftritt, in dem (artificialen) Fall, dass die Wechselwirkung auf eben diese Interband-Wechselwirkung ($U_0 = 0, U_1 \neq 0$) reduziert wird, nicht auftritt. Deshalb werden im Folgenden mehrere Daten für diese beiden Fälle betrachtet, um den Unterschied beider Modelle genauer herauszuarbeiten.

4.1 LDOS an ausgewählten Stellen

Abbildung 17 zeigt die LDOS an der mittleren Site $N = 0$ jeweils für beide Bänder für das Modell mit voller Wechselwirkung. Darunter ist der Leitwert abgebildet. Abbildung 18 zeigt dasselbe für die eingeschränkte Wechselwirkung. Dunkle Farben entsprechen einem geringen Wert der LDOS, helle Farben einem hohen Wert.

Die LDOS des ersten Bandes weist Besonderheiten an zwei Stellen auf: Im Bereich der ersten Stufe für den Leitwert zeigt sich ein leichter Knick des LDOS-Maximums,

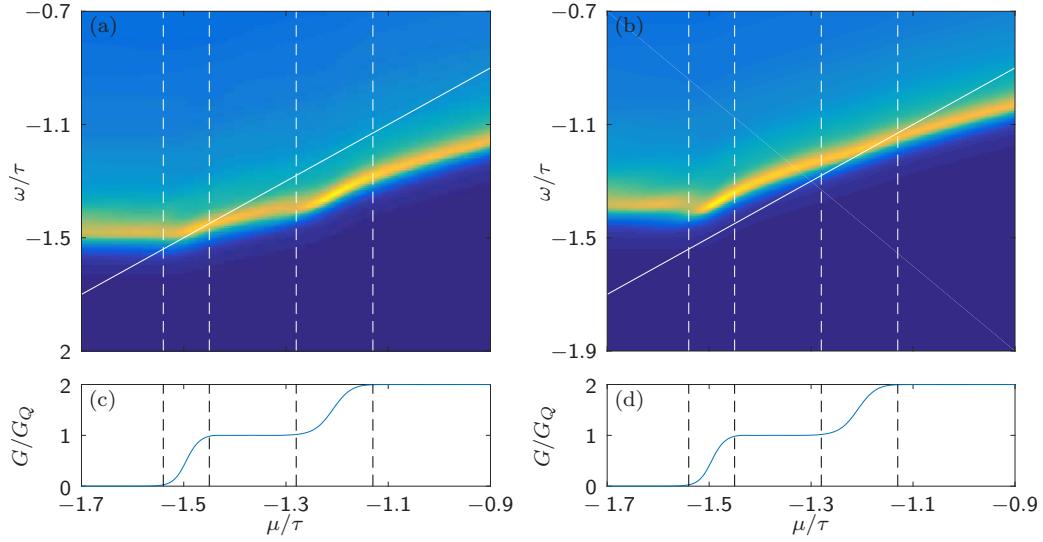


Abbildung 17: Farbplot der LDOS für die mittlere Site als Funktion von chemischem Potential μ und Energie ω für das Modell mit voller Wechselwirkung. Links für das erste Band, rechts für das zweite Band. Darunter ist jeweils der Leitwert abgebildet. Gestrichelte Linien deuten den Bereich der Stufen im Leitwert an. Die weiße durchgehende Linie zeigt den Verlauf des chemischen Potentials μ an. Die relevanten Parameter sind $V_g = 0.5\tau$, $\Omega_x = 0.071\tau$, $U^0 = U^1 = 0.9\tau$.

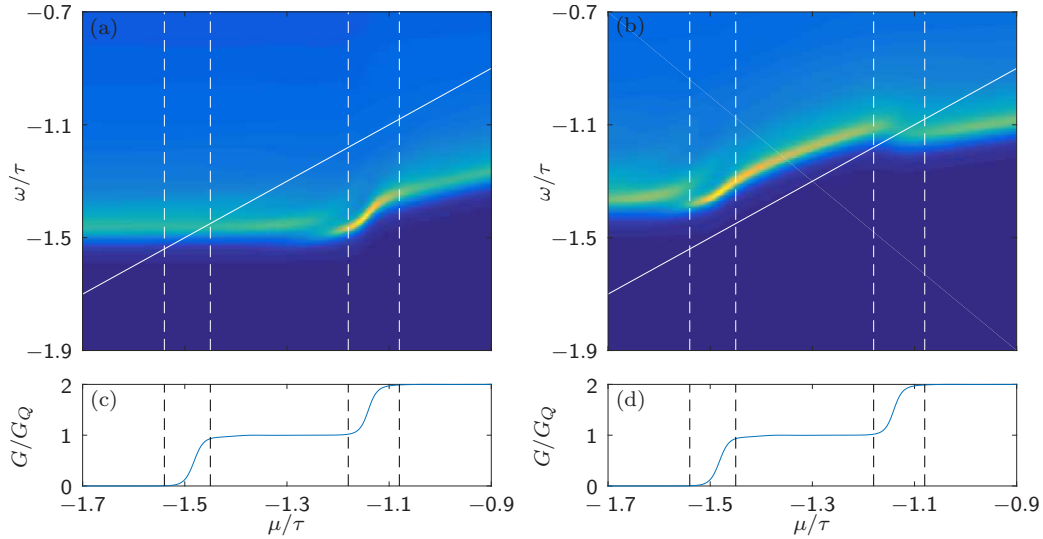


Abbildung 18: Farbplot der LDOS für die mittlere Site als Funktion von chemischem Potential μ und Energie ω für das Modell mit eingeschränkter Wechselwirkung. Links für das erste Band, rechts für das zweite Band. Darunter ist jeweils der Leitwert abgebildet. Gestrichelte Linien deuten den Bereich der Stufen im Leitwert an. Die weiße durchgehende Linie zeigt den Verlauf des chemischen Potentials μ an. Die relevanten Parameter sind $V_g = 0.5\tau$, $\Omega_x = 0.071\tau$, $U^1 = 0.9\tau$.

dieses steigt daraufhin und folgt so dem chemischen Potential μ , das in diesem Bereich den Wert des LDOS-Maximums erreicht. Dieses Anhaften des Maximums der LDOS an das chemische Potential wird als Pinning bezeichnet. Es kann als Folge der Tatsache verstanden werden, dass in diesem Bereich die Dichte im Band ansteigt, was sich auch im Anstieg des Leitwerts bemerkbar macht. Eine zweiter Knick wird im Bereich der zweiten Stufe sichtbar. Hier wird das zweite Band leitend und die ansteigende Elektronendichte im zweiten Band beeinflusst durch die Anwesenheit der Interband-Wechselwirkung U^1 die Energiestruktur im ersten Band und erhöht in diesem das LDOS-Maximum.

Für die LDOS des zweiten Bandes gilt Ähnliches in umgekehrter Reihenfolge. Im Bereich der ersten Leitwert-Stufe steigt das LDOS-Maximum im zweiten Band, da das erste Band gefüllt wird und durch Interband-Wechselwirkung das zweite beeinflusst. Im Bereich der zweiten Stufe durchquert das chemische Potential das LDOS-Maximum und es kann ein leichtes Pinning festgestellt werden.

Im Falle der eingeschränkten Wechselwirkung zeigt sich eine andere Struktur der LDOS. Für das erste Band ergibt sich im Bereich der ersten Stufe keine Auffälligkeit. Hierin zeigt sich die Tatsache, dass in diesem Modell die Elektronen im ersten Band nicht miteinander wechselwirken und das zweite Band bei dieser Energie noch unbesetzt ist. Im Bereich der zweiten Stufe kann ein Ansteigen des LDOS-Maximums beobachtet werden, da hier die steigende Dichte im zweiten Band durch die vorhandene Interband-Wechselwirkung Einfluss auf die LDOS-Struktur im ersten Band nimmt.

Im zweiten Band tritt bei der ersten Stufe ein deutlicher Knick im LDOS-Maximum auf. Dies zeigt den Einfluss der Interband-Wechselwirkung, die durch das zunehmend besetzte erste Band auftritt. Im Bereich der zweiten Stufe ist analog zum Bereich der ersten Stufe im ersten Band kein Pinning zu erwarten. Es ist erkennbar, dass der Verlauf des LDOS-Maximums ab hier wieder deutlich flacher wird.

Abbildung 19 zeigt die LDOS für den Fall der eingeschränkten Wechselwirkung als Funktion von der betrachteten Site j und der Energie ω bei verschiedenen konkreten μ -Werten. Dafür wurden Werte um den sichtbaren Sprung des LDOS-Maximums im ersten Band gewählt. Hierbei weicht die Form des LDOS-Maximums deutlich von dem parabolischen Verlauf der Barriere ab. Ein erhöhtes Plateau im zentralen Bereich weicht mit steigendem μ dabei zwei Plateaus entfernt vom Zentrum. Diese Resonanzstrukturen spiegeln sich als Sprung in der LDOS der zentralen Site wider. Im voll wechselwirkenden Fall zeigen sich keine solchen Strukturen und das LDOS-

Maximum folgt stärker dem parabolischen Verlauf der Barriere. Abbildung 20 zeigt beispielhaft die LDOS für diesen Fall.

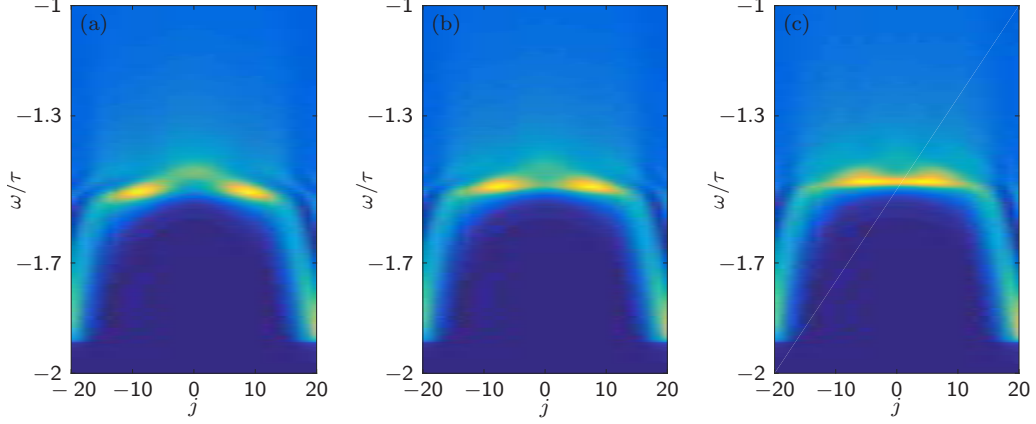


Abbildung 19: Farplots der LDOS des ersten Bandes als Funktion von Site-Index j und Energie ω für ausgewählte Werte des chemischen Potentials im eingeschränkt wechselwirkenden Modell. In (a) $\mu = -1.25\tau$, in (b) $\mu = -1.21\tau$ und in (c) $\mu = -1.18\tau$. Es zeigen sich Resonanzstrukturen und Abweichungen des LDOS-Maximums von der parabolischen Barrierenstruktur.

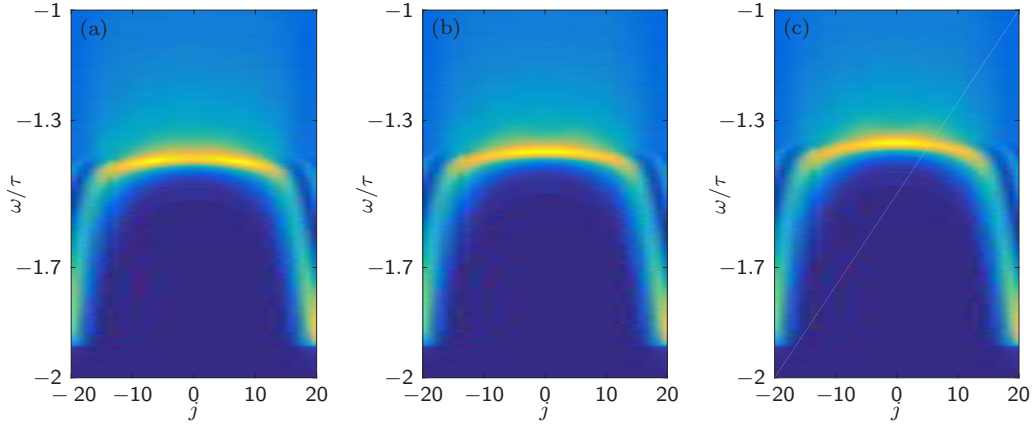


Abbildung 20: Farplots der LDOS des ersten Bandes für dieselben Werte des chemischen Potentials μ wie in der vorherigen Abbildung, allerdings für das voll wechselwirkende Modell. Das LDOS-Maximum behält hier die parabelförmige Struktur der Barriere.

Im Folgenden wird das Ergebnis des Versuchs gezeigt, das qualitative Verhalten der LDOS durch eine Hartree-Näherung zu reproduzieren. Dazu wird wie folgt vorgegangen: Ausgehend von der nicht-wechselwirkenden Hamilton-Funktion H_0 wird über die Greensche Funktion die LDOS $\mathcal{A}_j(\omega)$ und die Dichte n_j für jede QPC-Site berechnet. Zusammen mit den Wechselwirkungsstärken U_j^0 und U_j^1 kann so eine Site-abhängige Selbstenergie in erster Ordnung in der Wechselwirkung für jedes Band berechnet werden. Für das erste Band trägt dazu die Dichte des ersten Bandes mit der Intraband-Wechselwirkungsstärke U^0 bei, die Dichte im zweiten Band dagegen mit der Interband-Wechselwirkungsstärke U^1 und vice versa:

$$\begin{aligned}\Sigma_{j1} &= n_{j1}U_j^0 + n_{j2}U_j^1 \\ \Sigma_{j2} &= n_{j1}U_j^1 + n_{j2}U_j^0\end{aligned}\tag{53}$$

Ausgehend vom nicht-wechselwirkenden Fall zeigt Abbildung 21 das Ergebnis, wenn als effektive Hamilton-Funktion

$$H_{\text{eff}} = H_0 + \Sigma\tag{54}$$

verwendet wird. Abbildung 22 zeigt das Ergebnis, wenn die Hartree-Näherung iteriert wird. Dazu wird das oben beschriebene Verfahren wiederholt angewendet, bis weitere Iterationen keine Veränderungen mehr zeigen. Die dann gefundene Selbstenergie führt bei weiterer Iteration wieder zu derselben Selbstenergie, daher wird dies auch als selbstkonsistente Hartree-Näherung bezeichnet. Hier wird ein stabiles Ergebnis nach zehn Iterationen gezeigt.

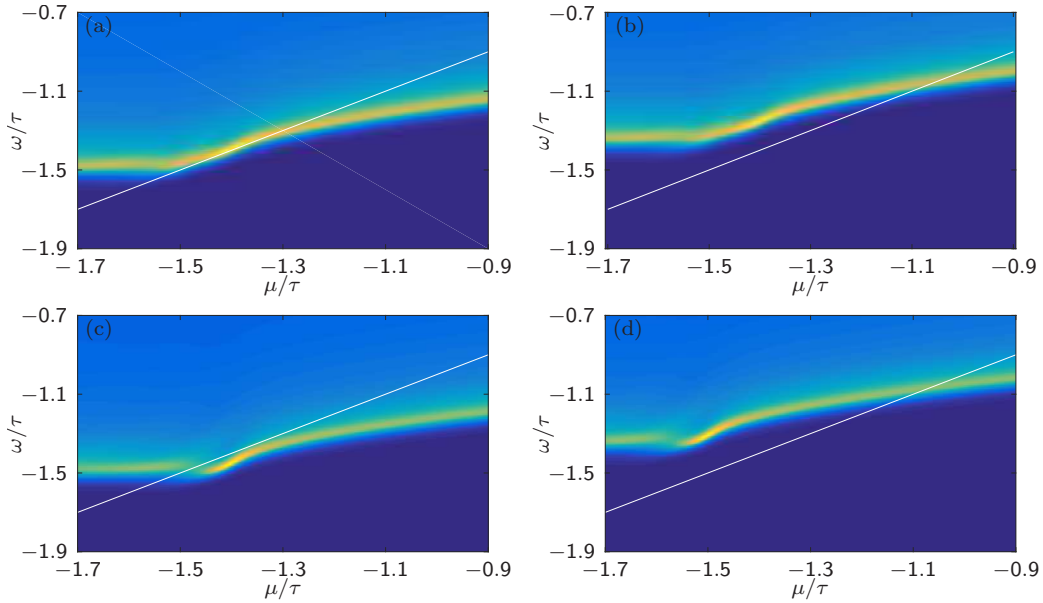


Abbildung 21: Ergebnis für die LDOS in Hartree-Näherung erster Ordnung, ausgehend vom nicht-wechselwirkenden Modell. (a) und (b): Erstes und zweites Band im voll wechselwirkenden Modell. (c) und (d): Erstes und zweites Band im eingeschränkt wechselwirkenden Modell.

In der selbstkonsistenten Näherung zeigen beide Fälle wesentliche Elemente der zuvor betrachteten LDOS: Im voll wechselwirkenden Fall werden die Knicke im LDOS-Maximum reproduziert, im eingeschränkt wechselwirkenden Fall zeigen sich die oben erwähnten Sprünge sowie das Abflachen des Verlaufs im LDOS-Maximum im zweiten Band im Bereich der zweiten Stufe.

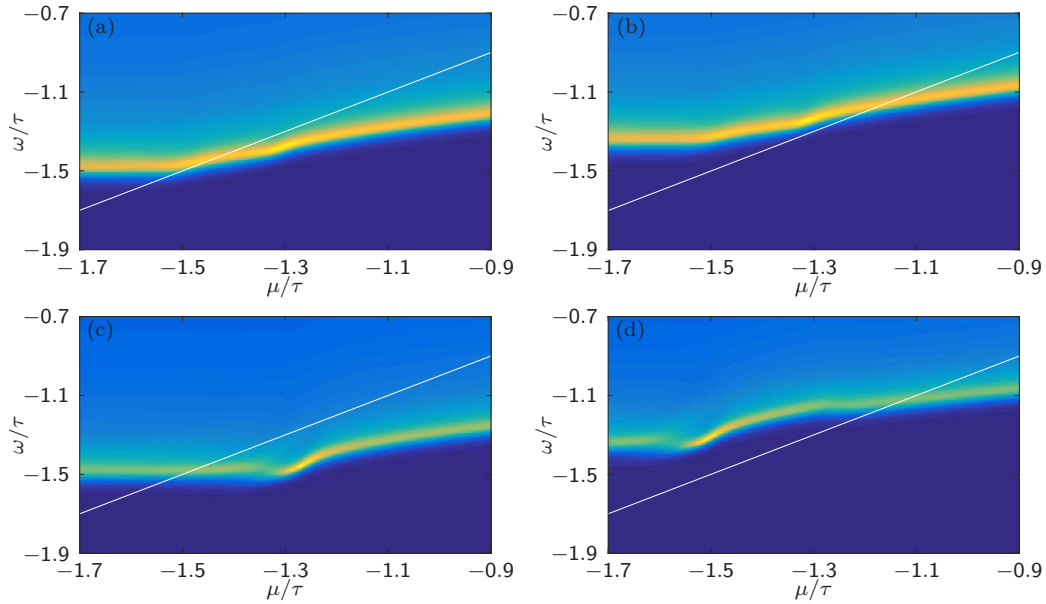


Abbildung 22: Ergebnis für die LDOS wie in der vorherigen Abbildung, allerdings nach mehrmaliger Iteration der Hartree-Näherung, bis sich keine Änderungen mehr ergaben. In beiden Fällen wurden zehn Iterationen verwendet.

4.2 „Dichteanomalie“

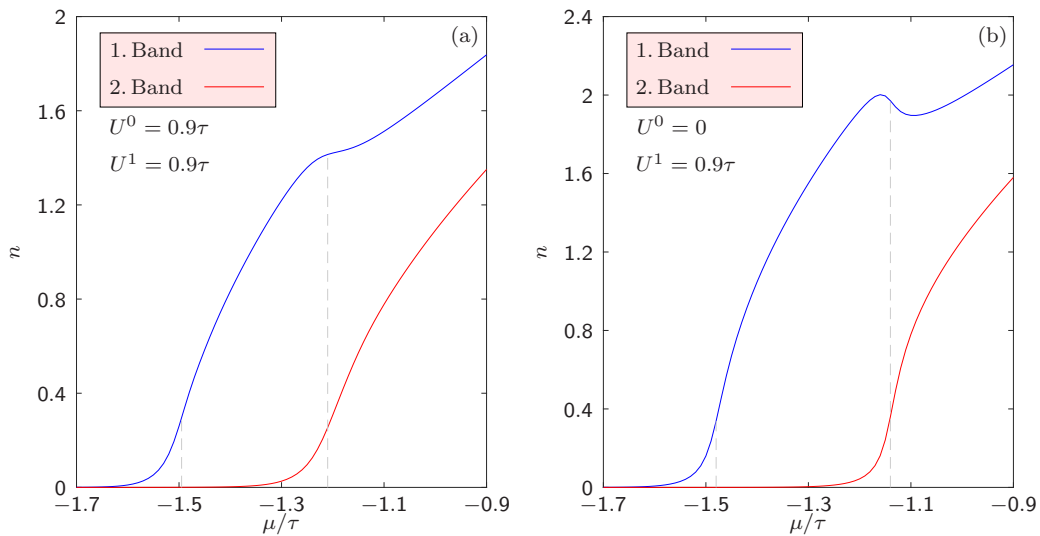


Abbildung 23: Dichte n im ersten und zweiten Band im Bereich der mittleren Sites als Funktion des chemischen Potentials μ . Links für volle Wechselwirkung, rechts bei eingeschränkter Wechselwirkung. Im Bereich der zweiten Stufe des Leitwerts sinkt rechts die Dichte im ersten Band ab. Bei den gestrichelten Linien treten die Leitwert-Stufen auf.

In Abbildung 23 wird die Dichte über die mittleren fünf Sites der QPC-Kette betrachtet, dies entspricht bei den hier gewählten Parametern der charakteristischen Länge l_x . Für die beiden Modelle zeigt sich dabei insbesondere im Bereich des Auftretens der zweiten Leitwert-Stufe ein Unterschied: Für das Modell mit voller Wechselwirkung beobachtet man hier neben einem Ansteigen der Dichte im zweiten

Band, dass die Dichte im ersten Band ungefähr in diesem Energiebereich weniger stark ansteigt als zuvor. Auch im eingeschränkt wechselwirkenden Modell ist das Ansteigen der Dichte im zweiten Band zu beobachten. Aufgrund der fehlenden Intraband-Wechselwirkung ist dieser Anstieg sogar noch schneller als im Modell mit voller Wechselwirkung. Dagegen verlangsamt sich der Anstieg in der Dichte im ersten Band nicht nur, die Dichte sinkt sogar im Bereich der zweiten Leitwert-Stufe. Der Effekt auf die Dichte im ersten Band kann in beiden Fällen auf die Interband-Wechselwirkung zurückgeführt werden. Für den Fall, der keine Intraband-Wechselwirkung beinhaltet, ist dieser Effekt jedoch viel stärker, er bremst nicht nur den Anstieg der Dichte, sondern kehrt ihn sogar um.

Eine Interband-Wechselwirkung führt also nicht automatisch zu einer Verbreiterung der zweiten Stufe. Im eingeschränkt wechselwirkenden Fall verringert die Interband-Wechselwirkung die Dichte im ersten Band, sodass die zweite Stufe ihre Breite beibehält. Nur im Falle der vollen Wechselwirkung, in dem die Intraband-Wechselwirkung einen schützenden Effekt auf die Form des LDOS-Maximums hat und ein Absinken der Dichte im ersten Band verhindert, verbreitert sich die zweite Stufe. Das bedeutet, dass nur hier beim Anstieg der Dichte im zweiten Band das erste Band weiter befüllt wird und dadurch μ einen größeren Bereich durchlaufen muss, um das LDOS-Maximum zu überwinden.

5 0.7-Anomalie und 0.7-Analog

In diesem Kapitel soll das Verhalten in Anwesenheit der vollen Wechselwirkung und eines Magnetfeldes gezeigt werden. Das prinzipielle Verhalten in Anwesenheit eines Magnetfeldes wurde in Kapitel 2.3 besprochen. Durch die vorhandene Wechselwirkung zeigen sich jedoch die Besonderheiten, die als 0.7-Anomalie bekannt sind.

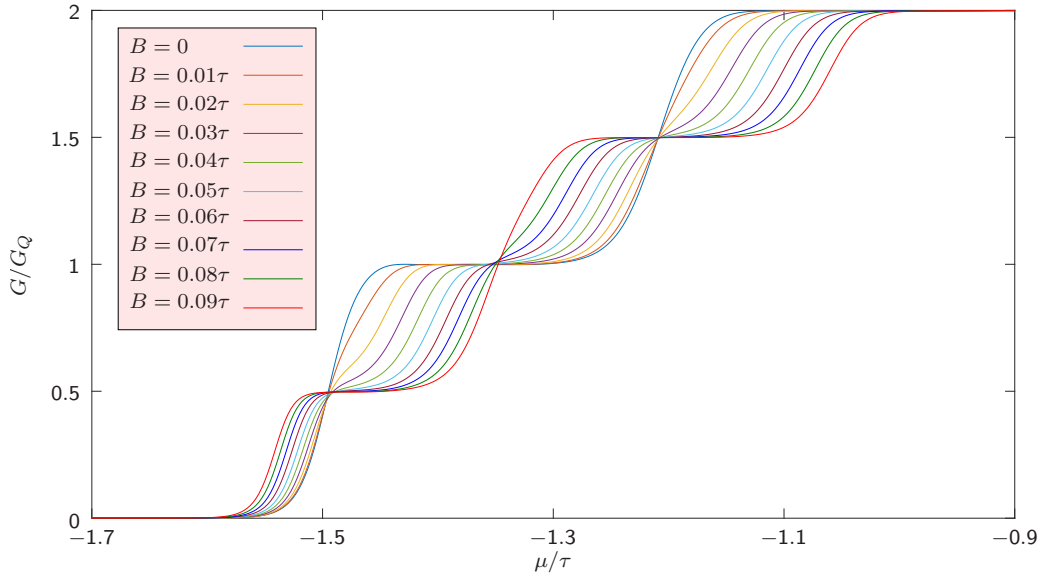


Abbildung 24: Verhalten des Leitwerts bei voller Wechselwirkung mit steigender Magnetfeldstärke. B steigt dabei bis auf einen Wert knapp unterhalb der Energiedifferenz zwischen den Bändern ΔE an, für den die ursprünglichen Stufen schon deutlich voneinander getrennt sind.

Abbildung 24 zeigt dieses anormale Verhalten für kleine Magnetfelder bis knapp unter $B = \Delta E$, also den Fall, für den das Magnetfeld gerade den Energieabstand der beiden Bänder ausgleicht. Im Gegensatz zum wechselwirkungsfreien Fall, wie er in Kapitel 3.1.2 mit den Tests in Abbildung 8 betrachtet wurde, ist die Aufspaltung der Bänder nicht mehr symmetrisch. Für den unteren Teil der Leitwert-Stufe, der durch die energetisch abgesenkten Elektronen verursacht wird, ist die Verschiebung zu geringeren Energien deutlich schwächer als erwartet. Im Gegensatz dazu scheint die Verschiebung des oberen Teils der Leitwert-Stufe durch die Teilchen mit umgekehrtem Spin deutlich breiter. Diese oft als Schulter bezeichnete Auffälligkeit spiegelt die 0.7-Anomalie im statischen fRG-Modell wider.

Das Magnetfeld wirkt auch auf die Elektronen im zweiten Band. Hier zeigt sich jedoch nur ein sehr schwaches unsymmetrisches Aufspalten. Dies stimmt mit den experimentellen Daten überein, dass die 0.7-Anomalie vor allem ein Phänomen der ersten Leitwert-Stufe ist, wie es auch in Abbildung 3 deutlich wird. Im zweiten Band sind die Wechselwirkungseffekte durch das Screening des ersten Bandes schwächer.

In Abbildung 25 wird das Auftreten der 0.7-Anomalie für das Ein-Band-Modell und das Zwei-Band-Modell verglichen. Durch das zweite Band werden auch die Leitwert-Stufen der 1_{\uparrow} - und 1_{\downarrow} -Sub-Bänder beeinflusst. Dies betrifft vor allem das Verhalten im Bereich der 0.7-Anomalie, die verstärkt erscheint.

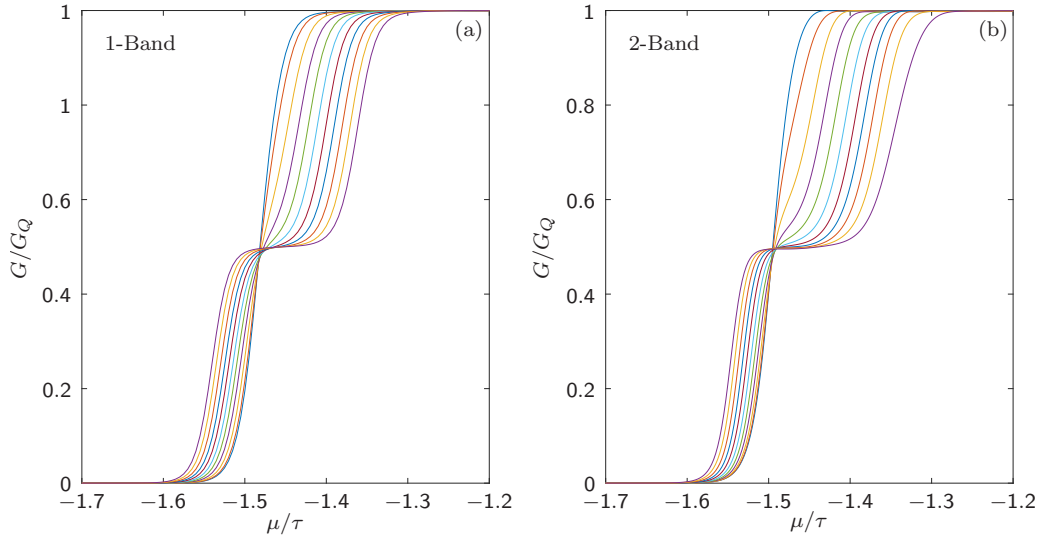


Abbildung 25: Vergleich der ersten Leitwert-Stufe im Ein- und im Zwei-Band-Modell mit ansonsten identischen Parametern. Diese sind $V_g = 0.5\tau$, $\Omega_x = 0.071\tau$, $N = 20$, $U = 0.9\tau$ sowie $\Delta E = 0.1$ für das Zwei-Band-Modell. Im Zwei-Band-Modell ist nur der Leitwert des ersten Bandes gezeigt. Die Magnetfeldstärken sind wie in Abbildung 24 gewählt.

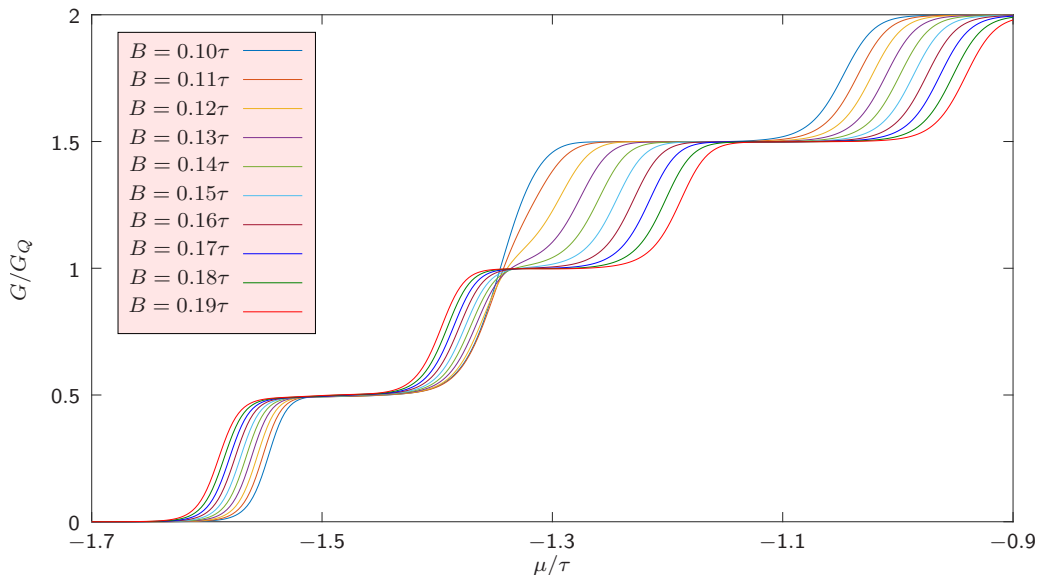


Abbildung 26: Verhalten des Leitwerts bei voller Wechselwirkung mit steigender Magnetfeldstärke für B -Werte ab einem Wert von ΔE . Die volle Leitwert-Stufe zwischen $0.5G_Q$ und $1.5G_Q$ trennt sich ähnlich wie die erste Leitwert-Stufe bei kleinen Magnetfeldern.

Abbildung 26 ist eine Fortsetzung von Abbildung 24 mit größeren Magnetfeldern. Für den Fall $B = \Delta E$, in dem das Magnetfeld für 1_{\downarrow} -Elektronen und 2_{\uparrow} -Elektronen genau den Energieunterschied zwischen den Bändern kompensiert, zeigen sich deut-

lich die erwarteten Leitwert-Stufen um $0.5G_Q$ durch 1_{\uparrow} , um $1G_Q$ durch 1_{\downarrow} -Elektronen und 2_{\uparrow} -Elektronen und noch einmal um $0.5G_Q$ durch die energetisch am weitesten oben liegenden 2_{\downarrow} -Elektronen. Eine weitere Erhöhung des Magnetfeldes über den Bereich $B = \Delta E$ führt für die untere und obere Halbstufe lediglich zu weiteren Verschiebungen zu noch niedrigeren bzw. höheren Energien. Die mittlere ganze Stufe zeigt jedoch ein sehr ähnliches Verhalten wie die erste Leitwert-Stufe bei kleinen Magnetfeldstärken. Das stärker werdende Magnetfeld bevorzugt das 2_{\uparrow} -Sub-Band energetisch weiter und rückt die Leitwert-Halbstufe zu niedrigeren μ -Werten und hebt gleichzeitig das 1_{\downarrow} -Sub-Band energetisch über eben dieses, sodass die Halbstufe zu höheren Energien verschoben wird. Wegen der Ähnlichkeit mit der ersten Stufe wird diese in experimentellen Daten beobachtete Struktur als 0.7-Analog bezeichnet.

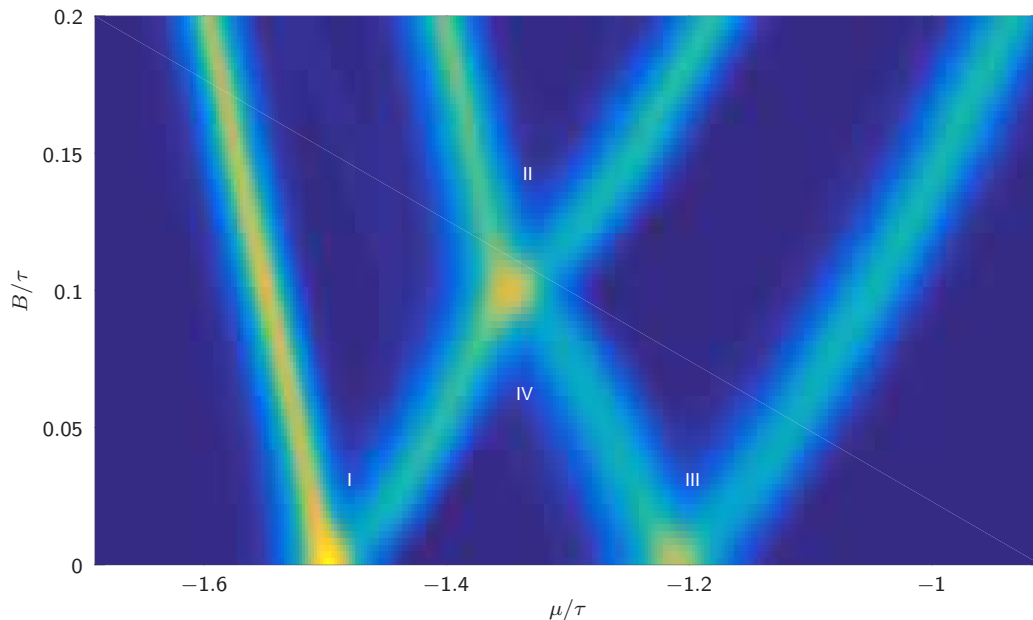


Abbildung 27: Farbplot der Ableitung des Leitwerts G nach dem chemischen Potential μ als Funktion von μ und Magnetfeldstärke B . Die Gabelungen I bis III der hellen Bereiche (große Steigung in G) zeigen die Aufspaltungen der Stufen an.

Das Verhalten des Leitwerts kann auch durch Betrachten der Steigung desselben analysiert werden. Dazu wird die (diskretisierte) Ableitung von G nach μ als Funktion von chemischem Potential und Magnetfeldstärke dargestellt, siehe Abbildung 27. Helle Farben zeigen eine große Steigung, dunkle Farben eine geringe Steigung an. Das unterschiedliche Verhalten der Stufen im Leitwert unter dem Einfluss eines Magnetfeldes zeigt sich hier im unterschiedlichen Aussehen der „Gabelungen“. Gabelung III ist breiter als Gabelung II und diese wiederum ist breiter als Gabelung I, die Aufspaltung der Stufen durch ein Magnetfeld erfolgt also bei den Bändern 2_{\downarrow} und 2_{\uparrow} leichter als bei den Bändern 1_{\downarrow} und 2_{\uparrow} . Die größten Magnetfelder zur Aufspaltung erfordert die Stufe der Bänder 1_{\downarrow} und 1_{\uparrow} .

Diese Aufspaltung kann durch Einführen eines effektiven g -Faktors quantifiziert werden. Dazu werden die Maxima der Ableitung $\frac{dG}{d\mu}$ bestimmt und so die Energiedifferenz zwischen diesen mit der dazugehörigen Magnetfeldstärke verglichen:

$$\Delta E \approx gB. \quad (55)$$

In [6] wird dieser Faktor für verschiedene Wechselwirkungsstärken bis $U = 0.6\tau$ bestimmt, aufgrund des Ein-Band-Modells allerdings nur für die Gabelung I. In diesem Fall liegt er bei ungefähr $g = 1.6$. Extrapoliert man das Verhalten naiv im dort gezeigten Bereich linear, erhielte man ca. $g_I = 1.9$ bei der hier verwendete Wechselwirkungsstärke von $U = 0.9\tau$.

Mit den hier verwendeten Parametern können für die vier Gabelungen folgende Werte ermittelt werden:

$$g_I = 1.75$$

$$g_{II} = 2.00$$

$$g_{III} = 2.65$$

$$g_{IV} = 2.44$$

Abbildung 28 zeigt zum Vergleich experimentelle Plots. Gabelung I ist mit „ α_0 “, Gabelung II mit „ α_1 “ bzw. „*“ bezeichnet. Im Gegensatz zu den berechneten Daten zeigt sich im Bereich des 0.7-Analogs eine diskontinuierliche Verschiebung.

5.1 Auswirkung der Feedbacklänge – Vergleich mit einer früheren fRG-Methode

In einer früheren Arbeit wurde ebenfalls ein Zwei-Band-Modell betrachtet, allerdings ohne die Feedbacklänge L zu berücksichtigen [10]. In Abbildung 29 sind mit denselben Parametern erzeugte Daten dargestellt, nur die Kettenlänge ist mit $N = 30$ kürzer gewählt. Einmal wurde dafür eine Feedbacklänge von $L = 1$ verwendet, daneben ist das Ergebnis für $L = 5$ abgebildet. Der Verhalten entspricht dem der früheren Veröffentlichung. Der auskonvergierte Fall zeigt jedoch sichtbare Unterschiede: Die

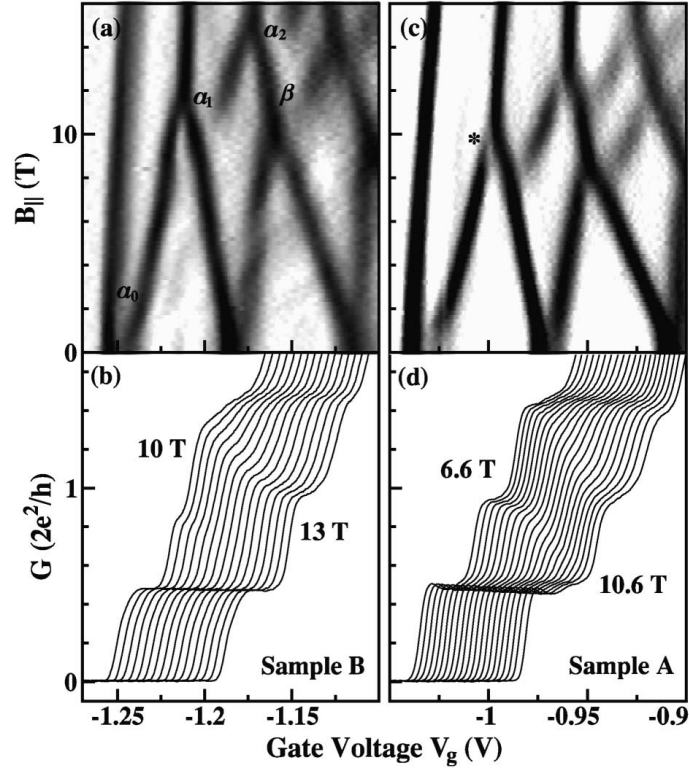


Abbildung 28: Experimentelle Plots der Ableitung von G nach μ für zwei verschiedene Proben. Darunter sind noch die relevanten Leitwert-Kurven für das erste 0.7-Analog dargestellt. Übernommen aus [7].

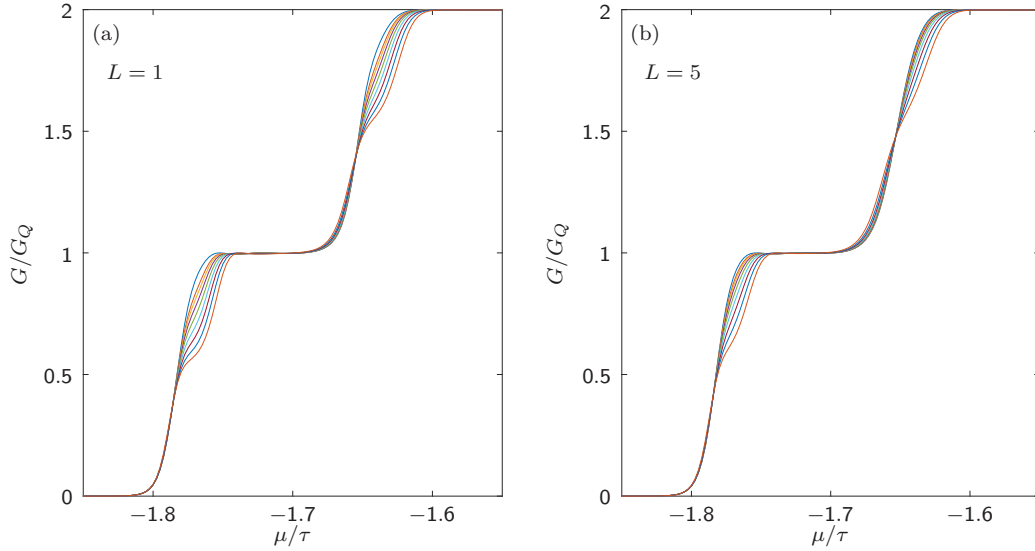


Abbildung 29: Verhalten der ersten und zweiten Leitwert-Stufe bei kleinen Magnetfeldstärken mit speziell gewählten Parametern. In (a) wurde die Feedbacklänge $L = 1$ gewählt, in (b) $L = 5$. Die zweite Stufe im Leitwert verändert dadurch ihre Form, sie wird deutlich symmetrischer. Die Parameter lauten $V_g = 0.2162\tau$, $\Omega_x = 0.31\tau$, $\Delta E = 0.0434\tau$, $U = 0.63\tau$ und $N = 30$. Als Magnetfeldstärken wurden $B = 0$, $B = 0.001643\tau$, $B = 0.002077\tau$, $B = 0.002604\tau$, $B = 0.003286\tau$, $B = 0.004154\tau$, $B = 0.005208\tau$, $B = 0.006572\tau$ und $B = 0.008277\tau$ verwendet.

erste Stufe ändert sich leicht und der Verlauf der zweiten Stufe mit steigendem Magnetfeld erscheint in den konvergierten Daten symmetrischer.

5.2 Verhalten im Bereich des 0.7-Analogs

In Abbildung 30 sind Leitwert-Kurven für verschiedene Magnetfeldstärken im Bereich von $B = \Delta E$ gezeigt. Der abgebildete Bereich beschränkt sich auf den Anstieg von $0.5 G_Q$ auf $1.5 G_Q$. Dabei macht es erkennbar einen Unterschied, ob das Magnetfeld von oben oder von unten an den Fall $B = \Delta E$ herangeführt wird. Während sich für $B > \Delta E$ das besprochene 0.7-Analog-Verhalten zeigt, ist das Aufspalten für Werte $B < \Delta E$ deutlich symmetrischer. Dieser Unterschied spiegelt sich auch in den unterschiedlichen Werten für g_{II} und g_{IV} dar: $g_{IV} > g_{II}$. In der Abbildung 30 (b) sind dieselben Parameter verwendet, der Energieabstand der Bänder wurde jedoch verdoppelt. Das Verhalten „von oben“ bzw. „von unten“ weicht immer noch voneinander ab, ist aber zueinander ähnlicher als im links betrachteten Fall. Hier sind größere Magnetfelder nötig, um die Energiedifferenz zu überwinden.

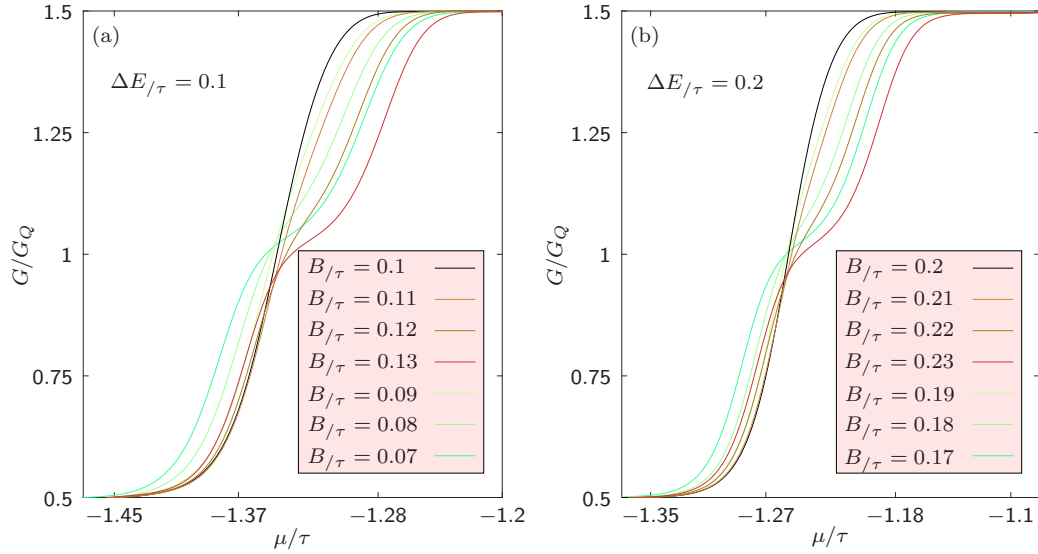


Abbildung 30: Ausschnitt aus den Leitwert-Kurven in der ganzen Stufe zwischen $0.5G_Q$ und $1.5G_Q$. (a) und (b) unterscheiden sich im Energie-Offset zwischen den Bändern. Die Magnetfeldstärken wurden im Bereich von $B = \Delta E$ gewählt. Die sonstigen relevanten Parameter sind $V_g = 0.5\tau$, $\Omega_x = 0.047\tau$, $U = 0.5\tau$ und $N = 20$.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In mehreren Arbeiten hat sich gezeigt, dass sich ein System, das einen QPC beschreibt, in dem angegebenen Modell mittels fRG geeignet beschreiben und lösen lässt, zum Beispiel in [6]. Durch das Einbeziehen der Wechselwirkung kann so im Ein-Band-Modell das charakteristische Verhalten der 0.7-Anomalie reproduziert werden. In dieser Arbeit wurde hingegen ein Zwei-Band-Modell verwendet. Dies ermöglicht es, über die 0.7-Anomalie als Effekt des ersten Bandes hinauszugehen. Für entsprechend große Magnetfeldstärken konnte hier auch das erste 0.7-Analog dargestellt werden.

Dies regt zu einer weiteren Beschäftigung mit dem Modell an. Die vorgestellten Ergebnisse wurden hauptsächlich zwei konkrete Zusammenstellungen von Parametern verwendet. Eine systematische Untersuchung, wie sich zum Beispiel der effektive g -Wert mit der Wechselwirkungsstärke verhält, ist damit nicht gegeben.

Im Zwei-Band-Modell können Inter- und Intrabandwechselwirkungen unterschieden werden. Hier wurde entweder einer der beiden Werte zu Testzwecken auf 0 gesetzt oder beide Wechselwirkungsstärken wurden auf den gleichen Wert gesetzt. Eine Diskussion und eventuelle Anpassung der Wechselwirkungsstärken zueinander sowie eine Analyse der sich daraus ergebenden Unterschiede wäre interessant, Ansätze dafür finden sich zum Beispiel bei [10].

Besonders das Verhalten im Bereich des 0.7-Analogs, wie es in Kapitel 5.2 beschrieben ist, lädt zu weiteren Untersuchungen ein: Welche Unterschiede zeigt die effektive Barriere überhalb und unterhalb von $B = \Delta E$ und wie wirkt sich das auf den Einfluss der Wechselwirkungen in diesem Bereich aus? Außerdem könnte das Modell um zusätzliche Bänder erweitert werden, damit die weiteren 0.7-Analoga in höheren Bändern untersucht werden können.

Literatur

- [1] L. Weidinger, F. Bauer und J. von Delft, „Functional Renormalization Group Approach for Inhomogeneous One-Dimensional Fermi Systems with Finite Ranged Interactions“, *Physical Review B*, vol. 95, 01 2017.
- [2] E. Schubert, *Transport and optical spectroscopy of a quantum point contact*. Doktorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, 2016.
- [3] M. Büttiker, „Quantized transmission of a saddle-point constriction“, *Physical Review B*, vol. 41, 04 1990.
- [4] F. Bauer, *Microscopic Origin of the 0.7-Anomaly in Quantum Point Contacts*. Doktorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, 2014.
- [5] K. J. Thomas, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, M. Pepper, D. R. Mace und D. A. Ritchie, „Possible Spin Polarization in a One-Dimensional Electron Gas“, *Physical Review Letters*, vol. 77, 07 1996.
- [6] F. Bauer, J. Heyder, E. Schubert, D. Borowsky, D. Taubert, B. Bruognolo, D. Schuh, W. Wegscheider, J. von Delft und S. Ludwig, „Microscopic origin of the '0.7-anomaly' in quantum point contacts“, *Nature*, vol. 501, 09 2013.
- [7] A. C. Graham, K. J. Thomas, M. Pepper, N. R. Cooper, M. Y. Simmons und D. A. Ritchie, „Interaction Effects at Crossings of Spin-Polarized One-Dimensional Subbands“, *Physical Review Letters*, vol. 91, 11 2003.
- [8] F. Bauer, J. Heyder und J. von Delft, „Functional Renormalization Group Approach for Inhomogeneous Interacting Fermi-Systems“, *Physical Review B*, vol. 89, 01 2014.
- [9] C. Karrasch, „Transport Through Correlated Quantum Dots – A Functional Renormalization Group Approach“, Diplomarbeit, Georg-August-Universität Göttingen, 2006.
- [10] K. Eissing, „Functional Renormalization Group Applied to a Multimode Quantum Point Contact“, Masterarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, 2013.

Danksagung

Ich möchte mich bei Prof. Dr. Jan von Delft für die Möglichkeit bedanken, meine Bachelorarbeit am Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik zu verfassen.

Mein besonderer Dank gilt Lukas Weidinger und Dennis Schimmel, die mir während der Arbeit beratend und geduldig erklärend stets zur Seite gestanden haben.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig verfasst zu haben und keine anderen als die in der Arbeit angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

München, den 30. August 2017