

Figurerne på forsiden er beskrevet i afsnittet om output.

Indhold

1	Indledning	3
2	Om graphen	3
3	Teori om transmission	6
3.1	Transmissionskoefficienter	6
3.2	Landauer-Büttiker-formalismen	8
3.3	Greensformalismen	9
3.4	Matrixapproximationen	12
3.5	Implementering	15
3.6	Sammenfatning	16
4	Regneeksempel	17
5	Output	18
6	Konklusion og efterskrift	21
A	Appendiks med figurer	22
B	Appendiks om båndstruktur	25
C	Appendiks om Landauerformlen	29
D	Appendiks om Greensfunktioner	30
E	Appendiks om selvenergi	31
F	Appendiks om kompleks energi og konturintegration	34
G	Appendiks om programmet	38
H	Appendiks med kildekoden	39
I	Kildeoversigt	54

Dette dokument er den skriftlige del af et bachelorprojekt, skrevet og indleveret af Hjalte Frellesvig i håb om at opnå en bachelorgrad i fysik ved Københavns Universitet.

Resumé

Formålet med projektet er at konstruere et computerprogram, der kan simulere den elektriske strøm gennem et stykke graphen. Efter en kort indledning følger i opgavebesvarelsen et teorigennemgang om graphen og forskellige aspekter af dets struktur, blandt andet en beskrivelse af dets båndstruktur, samt en indførelse af et koordinatsystem, nyttigt i den forbindelse. Dernæst følger endnu et teorigennemgang, der vil udgøre størstedelen af opgaven, og som vil beskrive en metode til udregning af strømmen gennem et vilkårligt stof på basis af dets atomstruktur. Metoden anvender den såkaldte Landauer-Büttiker-formalisme, kombineret med en teknik, der benytter en matrixapproximation af graphenprøvens Hamiltonoperators Greensfunktion. Efter et simpelt regneeksempel vil følge en beskrivelse af outputtet af programmet, hvortil koden findes i et appendiks. Konklusion og efterskrift følges af et antal appendices, der, udover kildekoden, vil indeholde noget ekstra teori, oversprungne mellemregninger, samt en form for manual til programmet.

Abstract

The aim of this project is to make a computer program which is able to simulate the electrical current through a piece of graphene. The thesis begins with an introduction, followed by a theoretical section about graphene and various aspects of its structure, such as its band structure, and with an introduction of a coordinate system which is relevant in that context. Then follows another theoretical section (which constitutes the major part of the paper) describing a method of calculating the current through an arbitrary substance on the basis of its atomic structure. This method is the so-called Landauer-Büttiker formalism, combined with a matrix approximation of the Green's function to the Hamiltonian to the sample. After a simple example follows a description of the output of the program (whose source code is given in an appendix). After the conclusion and a short postscript follows the appendices, which in addition to the source code contain additional theory, calculations, and a kind of manual for the program.

1 Indledning

Formålet med dette projekt er at konstruere et computerprogram, der kan udregne den elektriske strømstyrke gennem et stykke graphen¹ med en (stort set) vilkårlig form. En grund til at studere dette er, at mange af de nye nanomaterialer, såsom nanorør og fullerener, kan beskrives som et graphenark, der er klippet, foldet og rullet på forskellige måder. En forståelse af de elektriske egenskaber af graphen forventes derfor at kunne kaste yderligere lys over de elektriske egenskaber af disse nanomaterialer.

En teoretisk model af graphen har eksisteret de seneste halvtreds år, og længe troede man ikke, at det var muligt at isolere graphen i praksis, da det forventedes at være meget reaktivt². Imidlertid har teknologiens udvikling gjort det muligt at overskride alle forhindringer, og i år 2004 lykkedes det for første gang at isolere stoffet og studere det i praksis. Noget, der fra et rent teoretisk synspunkt gør graphen interessant, er dens båndstruktur³, idet der visse steder i graphengitteret ikke er noget båndgab, og at der i disse punkter er en lineær sammenhæng mellem impuls og energi⁴, frem for en kvadratisk. Relativistiske partikler udviser ligeledes en sådan lineær sammenhæng, idet der for $v \approx c$ gælder, at $E \approx cp$. Derfor kan graphen bruges til at studere relativistisk kvantemekanik, hvilket hidtil har krævet en partikelaccelerator. Denne relativistiske analogi er dog på ingen måde emnet for opgaven og vil kun blive nævnt i forbigående.

Når der i opgaven refereres til en kilde, bruges en trebogstavsforkortelse af kildens navn; hvilke kilder, der gemmer sig bag forkortelserne, ses i den vedlagte kildeliste.

Jeg vil gerne her benytte lejligheden til at takke min vejleder Karsten Flensberg for vejledning, sparring og hjælp til materialevalg.

2 Om graphen

Kulstof er det grundstof, der har flest kendte muligheder for at indgå i kemiske forbindelser. Kulstof er basis for hele den organiske kemi, der igen er grundlaget for livet. Men også med sig selv kan kulstof danne mange forskellige forbindelser (allotroper). I den forbindelse er kulstof atypisk blandt ikke-metallerne, idet de forskellige kulstofmolekyler ikke består af 2-3 atomer som O_2 , O_3 eller N_2 , men af mange flere. Det laveste antal⁵ er 60, og flere kulstofallotroper kan i princippet udvides til

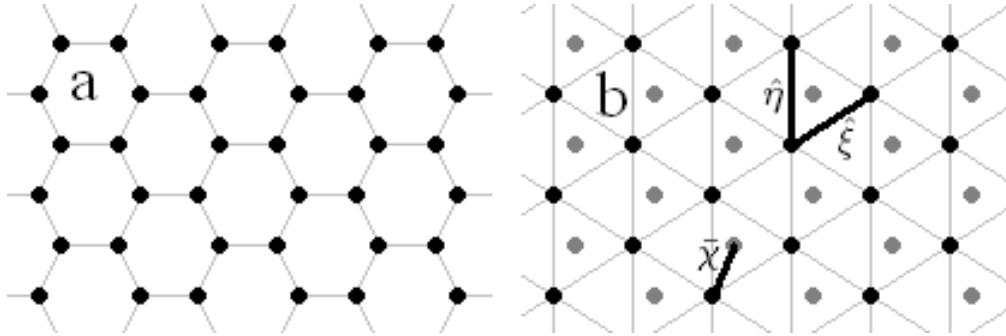
¹Det engelske navn for graphen er graphene. Grafit hedder på engelsk graphite, så man kunne derfra generalisere at "graphene" på dansk måtte hedde "grafen". Men på grund af ligheden med den bestemte form af ordet "en graf", vil denne opgave benytte betegnelsen graphen som en form for kompromis.

²Dette, og andet information om graphen i dette afsnit, stammer fra ECF.

³I faste stoffer kaldes energiniveauerne energibånd, da de ikke er diskrete men kontinuerte. Strukturen af disse energibånd kaldes stoffets båndstruktur. Se (4)

⁴Se (5) og tilhørende diskussion.

⁵De 60 atomer i buckminsterfullereneen er det laveste antal, forfatteren har hørt om. Man kan godt forestille sig lavere antal i andre polyederstrukturer, men det er, så vidt forfatteren ved, ikke



Figur 1: Til venstre ses graphens atomstruktur, det såkaldte bikagegitter. Til højre ses et hexagonalt gitter lagt ned over, med de tre vektorer $\hat{\xi}$, $\hat{\eta}$ og $\bar{\chi}$ defineret i (2), markeret.

uendeligt mange atomer. Fra oldtiden er kendt to former, diamant og grafit. Diamant har en kompliceret tredimensional struktur⁶, mens grafit består af en stabel af todimensionale lag, hvor lagene sidder fast til hinanden med Van-der-Walls bindinger. De enkelte lag består af kulstofatomer, sat sammen i et såkaldt bikagegitter⁷. Et stof bestående af et enkelt af disse lag, kaldes graphen, og netop dette er det centrale emne for denne opgave. Udover diamant, grafit og graphen kendes nu et utal af andre strukturer, såsom buckyballs og nanorør, men mange af disse kan betragtes som graphenark, der er rullet eller foldet på forskellige måder. En øget forståelse af graphen antages derfor at kunne øge forståelsen af den hurtigt voksende mængde af nye kulstofallotroper.

Det er ofte nyttigt at udtrykke en krystalstruktur som et Bravaisgitter⁸. Graphens Bravaisgitter, det såkaldte bikagegitter, er et heksagonalt gitter med to atomer i basis, som ses på fig. 1a. Nærmere bestemt betyder dette, at positionen af ethvert atom i et graphenstykke kan skrives som

$$\bar{r} = n\hat{\xi} + m\hat{\eta} + \delta\bar{\chi} \quad (1)$$

hvor n og m er heltal, og δ er enten 0 eller 1. De tre vektorer, hvor $\hat{\xi}$ og $\hat{\eta}$ kaldes gittervektorer, og $\bar{\chi}$ kaldes en basisvektor, er indtegnet på fig. 1b. Lægges man graphengitteret som på fig. 1, kan disse vektorer kan udregnes til

$$\hat{\xi} \equiv \frac{3}{2}a\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} \quad \hat{\eta} \equiv \sqrt{3}a\hat{y} \quad \bar{\chi} \equiv \frac{1}{2}a\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} \quad (2)$$

hvor $a = 0.1415$ nm er afstanden mellem to atomer, der er nærmeste naboer i graphengitteret.

blevet observeret i praksis.

⁶Et "cubic close-packed" gitter med fire atomer i basis. Se PCS afsnit 2.2.5

⁷Se fig. 1

⁸Et Bravaisgitter er et gitter, hvor hvert gitterpunkt på en entydig måde kan skrives som en sum af et heltalligt antal enhedsvektorer, svarende til stoffets dimension (2 i tilfældet graphen). Et gitterpunkt kan bestå af et eller flere atomer, den såkaldte basis. Se PCS afsnit 2.1

Kulstof har atomnummer 6, og dermed 6 elektroner i kredsløb om kernen. I grundtilstanden har to af dem hovedkvantetal $n = 1$, mens de fire andre har $n = 2$. De to elektroner med $n = 1$ er meget tæt bundet til kernen, og der vil blive set bort fra dem i det følgende, da de ikke bidrager til kulstofs egenskaber⁹. De fire $n = 2$ elektroner vil i langt de fleste¹⁰ kulstofforbindelser kombinere til en såkaldt sp^3 -orbital, hvor kulstof danner fire bindinger i en tetraederstruktur. I graphen er det imidlertid anderledes. Tre af elektronerne kombinerer til en sp^2 -orbital, hvor de tre bindinger ligger i et plan (xy-planet), med præcis 120° imellem sig, hvilket ses på fig. 1. De tre elektroner i sp^2 -orbitalen er så stærkt bundet, at heller ikke de vil bidrage til strømmen. Da sp^2 -orbitalen er en superposition af orbitalerne $2s$, $2p_x$ og $2p_y$ vil den sjette og sidste elektron befinde sig i orbitalen $2p_z$. Formen af denne orbital er¹¹

$$\psi_{2p_z}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_c}\right)^{\frac{5}{2}} r \exp\left(-\frac{r}{2a_c}\right) \cos(\theta) \quad (3)$$

hvor a_c er en Bohrradius, der er modificeret til kulstof, altså $a_c = a_0 \frac{m+M}{MZ} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \frac{m+M}{MZ}$, hvor M er massen, og Z er ladningen af "det som elektronen kredser om", altså atomkernen samt de inderste elektroner. På grund af elektronens spin er der reelt dobbelt så mange tilstande, således at der i sp^2 -orbitalerne er seks tilstande i stedet for tre. Alle disse seks tilstande er fyldte, idet atomet selv bidrager med tre elektroner, og de tre naboatomer bidrager med en hver. I $2p_z$ -orbitalen er imidlertid kun en ud af to tilstande fyldt. Mange af et materiales egenskaber afhænger af, hvorvidt der er et båndgab mellem to sådanne tilstande.

Båndstrukturen for graphen kan findes til¹²

$$E = E_0 + \alpha \pm \beta \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{3}{2}ak_x\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right)} \quad (4)$$

hvor E_0 , α og β kan udregnes, men til dette formål er det nok at vide, at $\beta \approx 3eV$. Af fig. 15 i "Appendiks om båndstruktur" ses, at i visse punkter i k -rummet¹³ er der intet båndgab, men en tilsyneladende lineær sammenhæng mellem E og k . Et af disse punkter er $\bar{k} = \frac{\pi}{a} \frac{4\sqrt{3}}{9} \hat{y}$, og Taylorudvikler man omkring dette punkt, fås, at det lineære led er $\frac{3}{2}\beta ak$. Sammenlignes dette med med det superrelativistiske udtryk $E = cp$, under brug af $p = \hbar k$, fås en "ny c ", kaldet v :

$$E = vp = \frac{3}{2}\beta ak \Leftrightarrow v = \frac{3\beta a}{2\hbar} \approx 970000 \text{ m/s} \quad (5)$$

⁹Med egenskaber menes her egenskaber udadtil, altså for eksempel de kemiske egenskaber og strømmen. De nævnte elektroner vil bidrage til andre, kvantemekaniske egenskaber.

¹⁰Blandt andet i alle organiske forbindelser med kun enkeltbindinger, samt i diamant.

¹¹Se PAM afsnit 3.3

¹²Se "Appendiks om båndstruktur"

¹³ k -rummet er et rum af samme dimension som real-rummet, hvori de forskellige punkter svarer til forskellige værdier af vektoren \bar{k} frem for af vektoren \bar{r} . K -rummet kan beskrives som Fourier-rummet til real-rummet. Se PCS afsnit 2.4.1.

hvor talværdierne for de forskellige konstanter er sat ind.

Som nævnt i indledningen, kan denne lighed med den relativistiske kvantemekanik bruges til at studere denne, men det er ikke formålet med denne opgave. For at opnå det egentlige formål, at blive istand til at udregne strømmen gennem et generelt graphenstykke, vil fokus nu skifte fra graphen til en mere generel metodik, der kan benyttes til at studere strømmen gennem et vilkårligt stof på basis af dettes atomstruktur.

3 Teori om transmission

3.1 Transmissionskoefficienter

Formålet med dette afsnit er at udlede et udtryk for transmissionskoefficienten for transmission gennem et generelt potential. Bølgefunktionen for en partikel, der bevæger sig frit i en uendelig lang, men smal, todimensional ledning parallel med x-aksen, og som har bredden b , så $y \in [0; b]$, er

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n A_n \exp(ik_n x) \sin(n\pi y/b) \quad (6)$$

hvor $n \in \mathbb{N}$. De tilstande, der er udtrykt ved de enkelte led i summen, kaldes "modi"¹⁴.

Ud fra Schrödingerligningen $\mathcal{H}\psi = E\psi$ kan man nu udregne energien for de forskellige modi og får da

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k_n^2 + \frac{n^2\pi^2}{b^2} \right) \quad (7)$$

Fra (7) ser man, at partikler med en given energi kun kan eksistere i et endeligt antal modi med sammenhørende værdier for k og n . Antallet af modi kaldes $M(E)$. Det konkrete udtryk for E vil ændres, hvis man tilføjer den tredje dimension, da det så også vil afhænge af ledningens tværsnit og lignende. Dog vil essensen være den samme, idet energien stadig vil være proportional med k^2 plus et kvantiseret udtryk, så $M(E)$ vil altså stadig være endelig for alle E .

Vi betragter nu en anden opstilling, hvor partiklen på dens vej møder en endelig potentialbarriere $V(x, y)$, der har en begrænset rumlig udstrækning mellem x_{\min} og x_{\max} . Der vil nu ske det, at nogle af partiklerne vil reflekteres fra potentialbarrieren, mens andre transmitteres igennem. Betragtes kun en enkelt indgående tilstand, vil bølgefunktionen ændres til

$$\psi_{n_0}(x, y) = \begin{cases} A_{n_0} \exp(ik_{n_0}x) \sin(n_0\pi y/b) + \\ \sum_n B_{nn_0} \exp(-ik_n x) \sin(n\pi y/b) & |x < x_{\min} \\ \psi(x, y, V(x, y)) & |x_{\min} < x < x_{\max} \\ \sum_{n'} C_{n'n_0} \exp(ik_{n'}x) \sin(n'\pi y/b) & |x > x_{\max} \end{cases} \quad (8)$$

¹⁴ "Modus" og "modi" er dansk for "mode" og "modes". I opgaven bruges "modi" om de transverse tilstande og "tilstande" som fællesbetegnelse for alle tilstande.

idet ledningen på den anden side af potentialet kan have en anden bredde, så $y \in [0; b']$. Ledningsstykkerne til venstre og til højre for potentialet kaldes henholdsvis ledning 1 og ledning 2. Amplituderne af de udgående bølger i (8) vil være proportionale med amplituden af denne indgående bølge¹⁵ A_{n_0} , eventuelt med en kompleks proportionalitetskonstant på grund af faseforskydning. Altså

$$D_z = c_{zn} A_n \quad (9)$$

hvor D står for enten B eller C og z står for enten et n eller et n' . Man kan nu beregne sandsynlighedsstrømmen på hver side af barrieren med formlen

$$j = \frac{i\hbar}{2m} ((\bar{\nabla}\psi^*) \psi - \psi^* \bar{\nabla}\psi) \quad (10)$$

idet der stadig kun ses på én af de indkommende modi. Efter at have taget gennemsnittet over et større område for at udglatte y -afhængigheden og de cosinusbølger, der skabes af resonans mellem de forskellige udgående modi, får man for den enkelte modus

$$j_{n_0}(x) = \begin{cases} \frac{\hbar}{2m} (k_{n_0}|A_{n_0}|^2 - \sum_n k_n |B_{nn_0}|^2) & | \quad x < x_{\min} \\ \frac{\hbar}{2m} \sum_{n'} k_{n'} |C_{n'n_0}|^2 & | \quad x > x_{\max} \end{cases} \quad (11)$$

Da ingen partikler forsvinder eller bliver dannet, må j have samme værdi før som efter potentialbarrieren. Altså fås, at

$$\begin{aligned} k_{n_0}|A_{n_0}|^2 - \sum_n k_n |B_{nn_0}|^2 &= \sum_{n'} k_{n'} |C_{n'n_0}|^2 \Leftrightarrow \\ 1 &= \frac{\sum_n k_n |B_{nn_0}|^2}{k_{n_0}|A_{n_0}|^2} + \frac{\sum_{n'} k_{n'} |C_{n'n_0}|^2}{k_{n_0}|A_{n_0}|^2} \Leftrightarrow R_{n_0} + T_{n_0} = 1 \end{aligned} \quad (12)$$

hvor

$$R_{n_0} \equiv \frac{\sum_n k_n |B_{nn_0}|^2}{k_{n_0}|A_{n_0}|^2} \quad \text{og} \quad T_{n_0} \equiv \frac{\sum_{n'} k_{n'} |C_{n'n_0}|^2}{k_{n_0}|A_{n_0}|^2} \quad (13)$$

Størrelserne R og T kaldes henholdsvis reflektionskoefficienten og transmissionskoefficienten, og de svarer til den brøkdelen af partiklerne, der bliver henholdsvis reflekteret og transmitteret. Indsættes (9) i (13), fås

$$T_n \equiv \sum_{n'} \frac{k_{n'} |c_{n'n} A_n|^2}{k_n |A_n|^2} = \sum_{n'} \frac{k_{n'} |c_{n'n}|^2}{k_n} = \sum_{n'} |s_{n'n}|^2 \quad (14)$$

hvor

$$s_{n'n} \equiv \sqrt{\frac{k_{n'}}{k_n}} c_{n'n} \quad (15)$$

De $N' \times N$ forskellige værdier for $s_{n'n}$ kan sammenfattes i en $N' \times N$ -matrix, den såkaldte spredningsmatrix, ofte forkortet S-matrix. Det konkrete udtryk for denne S-matrix, og dermed for transmissionskoefficienterne, vil afhænge af formen på potentialet. For videre diskussion af S-matricen, se afsnittet om Greensformalismen.

¹⁵Dette kan ses ved en enhedsbetragtning

3.2 Landauer-Büttiker-formalismen

Indtil videre er kun en partikel med kendt energi, der bevæger sig gennem et kvantemekanisk potentiallandskab, blevet behandlet. Men i en virkelig ledning er energien ikke kendt, det eneste, der er kendt, er forskellen mellem de kemiske potentialer i hver ende af ledningen, idet de er relateret til spændingsforskellen U ved

$$\mu_1 - \mu_2 = -eU \quad (16)$$

μ_1 er det kemiske potential for de partikler, der starter ved leder 1, og tilsvarende for μ_2 . Kender man det kemiske potential, kan man udregne sandsynligheden for, at en bestemt energitilstand er optaget. Da partiklerne i dette tilfælde er elektroner og dermed fermioner, er sandsynlighedsfordelingen givet ved Fermis fordelingsfunktion

$$f_\nu(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu_\nu}{k_B T}\right) + 1} \quad (17)$$

hvor ν er nummeret på ledningen. Den elektriske strøm er givet ved ladningen gange partikelstrømmen, altså $I = qj$, og partikelstrømmen kan findes udtrykt ved transmissionskoefficienterne. Først må der dog findes et udtryk for amplituden A_n , hvilket gøres ved at normalisere (6) over et stykke ledning med længden L . Gør man det, finder man, at $A = \frac{2}{L}$, og så kan partikelstrømmen beregnes ud fra (11) og (13). Resultatet bliver

$$j_n(E) = \frac{\hbar k}{Lm} T_n(E) \quad (18)$$

Nu er alt parat til at beregne et udtryk for den elektriske strøm fra leder 1 mod leder 2. Idet der summeres over alle tilstande, fås

$$I_1 = -e \sum_{k,n} j_n(E) f_1(E) \quad (19)$$

idet elektroner har ladningen $q = -e$. Men hvilke værdier for k er der så? I en endimensional leder med længden L er der en tæthed af k -tilstande givet ved¹⁶

$$\sum_k X(k) \approx 2 \frac{L}{2\pi} \int_0^\infty X(k) dk \quad (20)$$

hvor det første total stammer fra elektronens spin. Indsættes dette i (19) sammen med (18), fås

$$I_1 = -e \sum_n \frac{L}{\pi} \int_0^\infty f_1(E) \frac{\hbar k}{Lm} T_n(E) dk \quad (21)$$

¹⁶ Kan udledes ved samme metode som er brugt i det tredimensionale tilfælde i afsnit 4.1.2 og 5.1.2 i PCS

Af (7) ses at $dk = \frac{m}{\hbar^2 k} dE$, og indsættes dette i (21) fås

$$\begin{aligned} I_1 &= -e \sum_n \frac{L}{\pi} \int_0^\infty f_1(E) \frac{\hbar k}{Lm} T_n(E) \frac{m}{\hbar^2 k} dE \\ &= -\frac{2e}{h} \int_0^\infty f_1(E) \mathcal{T}(E) dE \end{aligned} \quad (22)$$

hvor $\mathcal{T}(E)$, der betegnes transmissionsfunktionen, er defineret som

$$\mathcal{T}(E) \equiv \sum_n T_n(E) = \sum_{n,n'} |s_{n'n}|^2 \quad (23)$$

hvor (14) er indsat ved andet lighedstegn. Et udtryk svarende til (22) gælder for strømmen fra leder 2 til 1. Den resulterende strøm fra 1 til 2 er så $I = I_1 - I_2$ altså

$$\begin{aligned} I &= -\frac{2e}{h} \int_0^\infty \left(f_1(E) \mathcal{T}_1(E) - f_2(E) \mathcal{T}_2(E) \right) dE \Leftrightarrow \\ I &= \frac{2e}{h} \int_0^\infty \left(f_2(E) - f_1(E) \right) \mathcal{T}(E) dE \end{aligned} \quad (24)$$

idet man kan vise, at $\mathcal{T}_1 = \mathcal{T}_2$.¹⁷ (24) er netop den ønskede sammenhæng mellem I og \mathcal{T} . For yderligere diskussion af (24) og dens konsekvenser, se "Appendiks om Landauerformlen".

3.3 Greensformalismen

Konklusionen på afsnittet om Landauer-Büttiker-formalismen er, at man kan finde strømmen gennem et materiale, hvis man kender transmissionsfunktionen for dette materiale. Målet med dette afsnit er at udlede en formel, der kan relatere transmissionsfunktionen \mathcal{T} til størrelser, der kan findes, hvis man kender stoffets form, art og egenskaber.

Første skridt på vejen tages ved at betragte Hamiltonoperatorens Greensfunktion¹⁸. Greensfunktionen til en differentialoperator \mathcal{L} skal (ifølge (80) i "Appendiks om Greensfunktioner") opfylde $\mathcal{L}_{\bar{r}} G(\bar{r}, \bar{r}_0) = \delta(\bar{r} - \bar{r}_0)$. Hvis $\mathcal{L} \equiv E - \mathcal{H}$, hvor \mathcal{H} er Hamiltonoperatoren, vil det sige, at

$$\left(E - V(\bar{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) G(\bar{r}, \bar{r}_0) = \delta(\bar{r} - \bar{r}_0) \quad (25)$$

altså en såkaldt inhomogen, andenordens partiel differentiaalligning af formen $\mathcal{L}_{\bar{r}} g(\bar{r}) = f(\bar{r})$. Den generelle løsning til en sådan kan skrives som¹⁹ $g(\bar{r}) = g_0(\bar{r}) + g_f(\bar{r})$, hvor

¹⁷ Se afsnit 2.5 og 2.6 i ETM

¹⁸ For mere om Greensfunktioner, se "Appendiks om Greensfunktioner". For endnu mere om Greensfunktioner, se MMP afsnit 17.6.

¹⁹ Se MMP afsnit 18.3.2 og 18.3.3

$g_0(\bar{r})$ er den generelle løsning til den homogene ligning $\mathcal{L}_{\bar{r}}g_0(\bar{r}) = 0$, og $g_f(\bar{r})$ er en enkelt løsning til det inhomogene tilfælde. Ud fra Schrödingerligningenes lighed med (25) kan man se, at $g_0(\bar{r}) = \psi(\bar{r})$, så det vil sige, at den samlede Greensfunktion $G(\bar{r})$ svarer til bølgefunktionen samt resultatet af en "enhedsforstyrrelse"²⁰ i $\bar{r} = \bar{r}_0$. Imidlertid er det ikke nødvendigt at finde den generelle løsning²¹, og vi vil nu finde en løsning til (25) i tilfældet, hvor grænsebetingelserne er givet af en smal, todimensional ledning magen til den, der er diskuteret ved (6). Potentialet $V(x, y)$ regnes konstant og sættes til 0. Resultatet af en sådan enhedsforstyrrelse kan i dette tilfælde være en bølge, der bevæger sig langs ledningen væk fra $\bar{r} = \bar{r}_0$. Det vil sige, at

$$G_0(x, y) = \sum_n^N A_n \exp(ik_n|x - x_0|) \sin(n\pi y/b) \quad (26)$$

hvor sammenhængen mellem E for den enkelte modus, k og n er givet ved (7). Ved indsættelse af (26) i (25) ses, at denne er opfyldt for alle $x \neq x_0$. Imidlertid skal den gælde i ethvert punkt, så målet er nu at finde hvilke værdier for A , der opfylder (25) i $\bar{r} = \bar{r}_0$. Integrerer man (25) fra $x = x_0 - \epsilon$ til $x = x_0 + \epsilon$, hvor ϵ er lille, får man

$$\begin{aligned} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta(\bar{r} - \bar{r}_0) dx &= \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) G(\bar{r}) dx \Leftrightarrow \\ \delta(y - y_0) &= \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) G(\bar{r}) dx \Leftrightarrow \\ \delta(y - y_0) &\approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2\epsilon G(x_0, y) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial G(\bar{r})}{\partial x} \Big|_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \Leftrightarrow \\ \frac{2m}{\hbar^2} \delta(y - y_0) &\approx \sum_n^N A_n (2ik_n) \sin(n\pi y/b) \end{aligned} \quad (27)$$

idet vi undervejs har ladet ϵ gået mod 0, og indsat udtrykket for $G_0(\bar{r})$ givet ved (26). Multipliceres nu begge sider af (27) med $\sin(n_0\pi y/b)$, hvor n_0 er en fastholdt værdi for n , og integreres fra $y = 0$ til $y = b$, fås

$$\begin{aligned} \int_0^b \sin(n_0\pi y/b) \frac{2m}{\hbar^2} \delta(y - y_0) dy &= \\ \int_0^b \sin(n_0\pi y/b) \sum_n^N A_n (2ik_n) \sin(n\pi y/b) dy &\Leftrightarrow \\ \sin(n_0\pi y_0/b) \frac{2m}{\hbar^2} &= A_{n_0} \frac{b}{2} (2ik_{n_0}) \end{aligned} \quad (28)$$

²⁰Engelsk: "unit excitation". Se ETM afsnit 3.3.

²¹En generel løsning til en forsimplet udgave af (25), kan findes i "Appendiks om kompleks energi og konturintegration".

hvor det undervejs er brugt, at funktionerne $\sin(nx)$ er indbyrdes ortogonale. Efter et variabelskift fra $n_0 \rightarrow n$ kan man isolere A_n og få

$$A_n = \frac{-2im}{\hbar^2 k_n b} \sin(n\pi y_0/b) \quad (29)$$

Det resultat kan sættes ind i (26), og da fås det fulde udtryk for Greensfunktionen²²:

$$G_0(x, y) = \sum_n^N \frac{-2im}{\hbar^2 k_n b} \exp(ik_n|x - x_0|) \sin(n\pi y_0/b) \sin(n\pi y/b) \quad (30)$$

Nu ændres opstillingen således, at der midt på ledningen indføres en potentialbarriere, og der gives mulighed for, at ledningen kan have forskellig tykkelse på hver side af barrieren. Da gælder (9), der relaterer amplituderne af de forskellige modi i de to ledninger. For nemheds skyld indføres nu en separat x-koordinat i hver af de to ledninger²³. Det antages, at enhedsforstyrrelsen foregår i $x_1 = x_0$. Den del af Greensfunktionen, der når igennem til ledning 2, vil være

$$G_2(y) = \sum_n \sum_{n'} c_{n'n} A_n \sin(n'\pi y/b) \quad (31)$$

Indsætter man amplituderne fra (29) fås

$$G_2(y, y_0) = \sum_n \sum_{n'} c_{n'n} \frac{-2im}{\hbar^2 k_n b} \sin(n\pi y_0/b) \sin(n'\pi y/b) \quad (32)$$

Indsætter man (15), der udtrykker $c_{n'n}$ og $s_{n'n}$ ved hinanden, ganger begge sider med $\sin(n_0\pi y_0/b) \sin(n'_0\pi y/b)$ og integrerer fra $y_0 = 0$ til $y_0 = b$ og fra $y = 0$ til $y = b$, så får man

$$\int_0^b \int_0^b G_2(y, y_0) \sin(n_0\pi y_0/b) \sin(n'_0\pi y/b) dy dy_0 = c_{n'_0 n_0} \frac{-2im}{\hbar^2 k_{n_0} b} \frac{b^2}{4} = s_{n'_0 n_0} \sqrt{\frac{k_{n_0}}{k_{n'_0}}} \frac{-imb}{2\hbar^2 k_{n_0}} = s_{n'_0 n_0} \frac{-imb}{2\hbar^2 \sqrt{k_{n_0} k_{n'_0}}} \quad (33)$$

²²Det bør bemærkes, at der, matematisk set, er en anden løsning til (25), kaldet G^A , der består af bølger, som bevæger sig hen imod $\bar{r} = \bar{r}_0$. Tilsvarende udregninger vil give $G^A = G^{R*}$, hvor G^R er den Greensfunktion, der er fundet i (30). A og R står for henholdsvis "avanceret" og "retarderet", hvilket henviser til bølgens gang henholdsvis tilbage fra $\bar{r} = \bar{r}_0$ (retarderet = tilbage), og frem imod $\bar{r} = \bar{r}_0$ (avanceret = fremme). Den præcise definition af G^R og G^A findes i "Appendiks om kompleks energi og konturintegration", hvori der også ses en anden udledning af (30)

²³ x_1 og x_2 er x-koordinaten i henholdsvis ledning nummer 1 og 2. Årsagen til, at koordinaterne regnes forskellige, er, at bredden af potentialet ikke er kendt, og at der derfor meget vel kan opstå en faseforskydning af de udgående bølger i ledning 2. For at være mere præcis er x_1 defineret sådan, at $x_1 = 0$ i $x = x_{min}$, og x_2 er defineret sådan, at $\exp(ik(x_2 - x_0)) = 1$ for alle k .



Figur 2: Denne figur viser opstillingen, med forskellige længder indtegnet.

Efter variabelskift fra y til y_2 , fra y_0 til y_1 , fra n_0 til n , fra n'_0 til n' og fra $G_2(y, y_0)$ til $G(y_1, y_2)$, kan man isolere $s_{n'n}$ og få

$$s_{n'n} = \frac{2i\hbar^2}{mb} \sqrt{k_n k_{n'}} \int_0^b \int_0^b G(y_1, y_2) \sin(n\pi y_1/b) \sin(n'\pi y_2/b) dy_2 dy_1 \quad (34)$$

hvilket er den såkaldte Fisher-Lee-relation.

3.4 Matrixapproximationen

Den potentialbarriere, der er blevet diskuteret i de forgående afsnit, svarer i det aktuelle tilfælde til det stykke graphen, der ønskes målt på. Så $G(y_1, y_2)$ i (34) vil altså være Greensfunktionen for graphenstykket samt de to ledninger. I (30) er Greensfunktionen fundet for en uendelig lang ledning, men hvorledes vil den se ud for et system, bestående af et stykke graphen med med en diskret atomar struktur samt to ledninger? Det er det spørgsmål, som dette afsnit vil besvare. Den tilgang, der her vil blive benyttet, er, at lade Greensfunktionen gå fra at være en kontinuert funktion, til at være diskret og kun defineret i graphengitterets gitterpunkter. I et gitter med en afstand mellem gitterpunkterne på a vil deltafunktionen transformere som $\delta(x_i - x_j) \rightarrow A\delta_{ij}$. A kan findes ved at betragte transformationen af integralet over deltafunktionen.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x_i - x_j) dx_i = 1 \rightarrow \sum_i a A \delta_{ij} = 1 \Leftrightarrow A = \frac{1}{a} \quad (35)$$

så det vil sige, at

$$\delta(x_i - x_j) \rightarrow \frac{1}{a} \bar{\delta}_{ij} \quad (36)$$

Indsættes dette i (25), vil der indgå et a i det endelige udtryk. Dette er uønsket og kan undgås, hvis man diskretiserer Greensfunktionen som

$$G(x_i, x_j) \rightarrow \frac{1}{a} \bar{G}_{ij} \quad (37)$$

Så nu kan (25) omskrives til

$$\begin{aligned}\bar{I} &= \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}} \right] \bar{G} \Leftrightarrow \\ \bar{G} &= \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}} \right]^{-1}\end{aligned}\quad (38)$$

Matrixinverteringen i (38) kan virke svær at udføre i praksis, idet matricen $\bar{\mathcal{H}}$ er uendelig stor, fordi to uendeligt lange ledninger er en del af systemet. Men hvis man nummererer matricelementerne på en hensigtsmæssig måde, kan man skrive (38) om, således at de dele af $\left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}} \right]$, der hører til de to ledninger l , og de dele, der hører til prøven p , står adskilt:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} \bar{G}_l & \bar{G}_{lp} \\ \bar{G}_{pl} & \bar{G}_p \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l & -\bar{\mathcal{H}}_{lp} \\ -\bar{\mathcal{H}}_{pl} & E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_p \end{bmatrix}^{-1} \Leftrightarrow \\ \begin{bmatrix} E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l & -\bar{\mathcal{H}}_{lp} \\ -\bar{\mathcal{H}}_{pl} & E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{G}_l & \bar{G}_{lp} \\ \bar{G}_{pl} & \bar{G}_p \end{bmatrix} &= \bar{I}\end{aligned}\quad (39)$$

En sådan 2×2 -matrixligning kan separeres til fire enkelte ligninger. To af disse er

$$\left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l \right] \bar{G}_{lp} - \bar{\mathcal{H}}_{lp} \bar{G}_p = \bar{0} \quad (40)$$

$$\left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_p \right] \bar{G}_p - \bar{\mathcal{H}}_{pl} \bar{G}_{lp} = \bar{I} \quad (41)$$

Isolerer man \bar{G}_{lp} i de to udtryk, sætter dem lig hinanden, for derefter at isolere \bar{G}_p , får man

$$\begin{aligned}\left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l \right]^{-1} \bar{\mathcal{H}}_{lp} \bar{G}_p &= \bar{\mathcal{H}}_{pl}^{-1} \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_p \right] \bar{G}_p - \bar{\mathcal{H}}_{pl}^{-1} \Leftrightarrow \\ \bar{\mathcal{H}}_{pl}^{-1} &= \bar{\mathcal{H}}_{pl}^{-1} \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_p \right] \bar{G}_p - \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l \right]^{-1} \bar{\mathcal{H}}_{lp} \bar{G}_p \Leftrightarrow \\ \bar{I} &= \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_p - \bar{\mathcal{H}}_{pl} \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l \right]^{-1} \bar{\mathcal{H}}_{lp} \right] \bar{G}_p \Leftrightarrow \\ \bar{G}_p &= \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_p - \bar{\Sigma} \right]^{-1}\end{aligned}\quad (42)$$

idet $\bar{\Sigma}$, kaldet selvenergien, er defineret som

$$\bar{\Sigma} \equiv \bar{\mathcal{H}}_{pl} \left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l \right]^{-1} \bar{\mathcal{H}}_{lp} \quad (43)$$

\bar{G}_p er den eneste komponent af den samlede Greensfunktion, der er interessant, idet det er den del, der omhandler prøven, som vi ønsker at måle på. Vi forventer ikke, at strømmen gennem prøven ændrer sig, hvis man ser bort fra effekter skabt i ledningerne, så derfor kan dette udtryk for \bar{G}_p til vores formål bruges i stedet for

Greensfunktionen \bar{G} for hele systemet. Man ser tydeligt ligheden mellem formen på (42) og (38). Den eneste forskel er introduktionen af selvenergien $\bar{\Sigma}$, der kan ses som et ekstra led i Hamiltonoperatoren, stammende fra den effekt, som de to ledninger har på prøven. For i praksis at kunne bruge (42) til at finde Greensfunktionen, er man nødt til at finde udtryk for $\bar{\Sigma}$ og $\bar{\mathcal{H}}_p$. Udtrykket for $\bar{\Sigma}$ kan findes helt generelt, og fås til²⁴.

$$\bar{\Sigma}_{(ij)} = \frac{-\hbar^2}{mab} \sum_n \sin(n\pi y_i/b) \sin(n\pi y_{j'}/b) \exp(ik_n a) \quad (44)$$

hvor i og j er atomer i prøven, der grænser op til atomerne i' og j' i ledningen. Udtrykket for $\bar{\mathcal{H}}_p$ afhænger af graphens krystalstruktur og formen på graphenprøven, men her følger nogle forholdsvis generelle overvejelser. Hamiltonoperatoren kan skrives $\mathcal{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)$. $\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ er en kontinuert differentialoperator, og målet er nu at omskrive denne til en diskret "differensoperator". Befinder man sig midt mellem to punkter i gitteret x_i og x_{i+1} , kan $\frac{\partial}{\partial x}$ approksimeres med

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)_{x_{i+0.5}} \approx \frac{F_{i+1} - F_i}{a} \quad (45)$$

hvor F_i er den diskretiserede udgave af en generel funktion $F(x)$. På samme vis kan $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ approksimeres med

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \right)_{x_i} \approx \frac{(\frac{\partial F}{\partial x})_{i+0.5} - (\frac{\partial F}{\partial x})_{i-0.5}}{a} \approx \frac{1}{a^2} (F_{i+1} + F_{i-1} - 2F_i) \quad (46)$$

Altså vil en diskretiseret endimensional Hamiltonoperator kunne skrives

$$\bar{\mathcal{H}}_i F = V(x_i) F_i + \frac{2\hbar^2}{2m_p a_p^2} F_i - \frac{\hbar^2}{2m_p a_p^2} F_{i+1} - \frac{\hbar^2}{2m_p a_p^2} F_{i-1} \quad (47)$$

hvor m_p er atommassen i prøven, og a_p er den interatomare afstand i prøven. Generaliseres dette til flere dimensioner, kan det enkelte element i matricen $\bar{\mathcal{H}}$ skrives

$$\bar{\mathcal{H}}_{(ij)} = \begin{cases} V_i + \frac{z_i \hbar^2}{2m_p a_p^2} & \text{hvis } i = j \\ \frac{-\hbar^2}{2m_p a_p^2} & \text{hvis } i \text{ og } j \text{ er nærmeste naboer} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (48)$$

hvor z_i er antallet af i 's nærmeste naboer.

²⁴Se "Appendiks om selvenergi"

3.5 Implementering

På dette sted i opgaven er det i princippet muligt at udregne strømmen ved brug af den teori, der er beskrevet i de forgående afsnit. Formålet med dette afsnit er at lave et antal omskrivninger, der er med til at gøre det endelige resultat mere præcist samt udregningerne simple.

Udledningen af (48) brugte den antagelse, at atomerne i det materiale, der undersøges, ligger i et kubisk gitter, således at a_p er en konstant, og at det giver mening at diskretisere langs de kartesiske akser. Dette passer ikke i tilfældet graphen, så man kunne gentage hele udledningen fra (45) til (48) for graphens koordinatsystem, men i praksis bliver det lige så præcist at benytte målte værdier i stedet for de teoretisk udregnede, så Hamiltonoperatoren i graphen kan skrives

$$\bar{\mathcal{H}}_{(ij)} = \begin{cases} V_i + \varepsilon & \text{hvis } i = j \\ -\gamma & \text{hvis } i \text{ og } j \text{ er nærmeste naboer} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (49)$$

Sammenlignes udledningen af (48) og udledningen af båndstrukturen (4) i "Appendiks om båndstruktur" ses, at $\varepsilon = E_0 + \alpha = E_F$ og $\gamma = -\beta$. Men i udledningen af båndstrukturen blev der ikke taget højde for de to ledninger, der er tilsluttet prøven, og da de er meget større end graphenstykket, vil de trække Fermienergien i graphenprøven op til samme niveau som deres egen Fermienergi, så i praksis er $E_F \neq E_0 + \alpha$, og der vil så gælde, at $\varepsilon = E_F$.

En anden forsimpning fås ved at konstruere et komprimeret udtryk for transmissionsfunktionen. Indsættes (34) i (23), fås

$$\mathcal{T} = \sum_{n,n'} \frac{4\hbar^4 k_n k_{n'}}{b^2 m^2} \sum_{i,j,i',j'} \bar{G}_{(ij)}^R \sin(n\pi y_i/b) \sin(n'\pi y_j/b) \bar{G}_{(j'i')}^A \sin(n\pi y_{i'}/b) \sin(n'\pi y_{j'}/b) \quad (50)$$

idet det er brugt, at²⁵ $G^R \equiv G$ og $G^A \equiv G^\dagger$. Defineres størrelserne Γ_1 og Γ_2 som

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_{1(i'i)} &\equiv \sum_n \frac{2\hbar^2 k_n}{bm} \sin(n\pi y_i/b) \sin(n\pi y_{i'}/b) \\ \bar{\Gamma}_{2(jj')} &\equiv \sum_{n'} \frac{2\hbar^2 k_{n'}}{bm} \sin(n'\pi y_j/b) \sin(n'\pi y_{j'}/b) \end{aligned} \quad (51)$$

og indsættes de i (50), fås²⁶

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(E) &= \sum_{i,j,i',j'} \bar{G}_{(ij)}^R \bar{\Gamma}_{2(jj')} \bar{G}_{(j'i')}^A \bar{\Gamma}_{1(i'i)} \Leftrightarrow \\ \mathcal{T}(E) &= \text{Tr}[\bar{G}^R \bar{\Gamma}_2 \bar{G}^A \bar{\Gamma}_1] \end{aligned} \quad (52)$$

²⁵Se fodnoten ved (30). Også efter matrixapproximationen er G^A en løsning, hvilket kan ses ved at tage den Hermiteske konjugerede på begge sider af lighedstegnet i (38), og bruge at $\bar{\mathcal{H}}$ er en Hermitesk operator.

²⁶ Γ kaldes energiudbredningen (energy broadening) og har mange anvendelser ud over at indgå i (52), se ETM afsnit 3.5 og 3.6

hvor $\text{Tr}[\bar{X}]$ betegner sporet af matricen \bar{X} .

Man kan vise, at²⁷ Γ er relateret til selvenergien med formlen

$$\Gamma_\nu = i(\Sigma_\nu^R - \Sigma_\nu^A) \quad (53)$$

hvor Σ_ν^R er den del af den Σ , der indgår i (42), som stammer fra ledning nummer ν . Σ_ν^A spiller en tilsvarende rolle i et lignende udtryk for Γ^A , og er givet ved $\Sigma_\nu^A = \Sigma_\nu^{R\dagger}$. Udregner man $\bar{\Gamma}$ med (53) ud fra Σ , som den er givet i (44), fås

$$\begin{aligned} \Gamma_\nu &= i(\Sigma_\nu^R - \Sigma_\nu^A) \\ &= i \frac{-\hbar^2}{mab} \sum_n \sin(n\pi y_{i'}/b) \sin(n\pi y_{j'}/b) (\exp(ik_n a) - \exp(-ik_n a)) \\ &= \frac{2\hbar^2}{mab} \sum_n \sin(n\pi y_{i'}/b) \sin(n\pi y_{j'}/b) \sin(k_n a) \end{aligned} \quad (54)$$

Laver man approksimationen $\sin(k_n a) \approx k_n a$ bliver (54) til (51), og det viser sig²⁸ at (54) giver det mest præcise resultat.

3.6 Sammenfatning

Målet med hele denne opgave er at finde størrelsen på strømmen gennem graphenprøven. På dette sted i opgaven er al teknikken udviklet, så lad os opsummere: Først findes Greensfunktionen \bar{G} med

$$\bar{G}^R = [E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}} - \bar{\Sigma}]^{-1} \quad (\text{samme som (42)})$$

ud fra selvenergien $\bar{\Sigma}$ som findes med

$$\bar{\Sigma}_{(ij)} = \frac{-\hbar^2}{mab} \sum_n \sin(n\pi y_{i'}/b) \sin(n\pi y_{j'}/b) \exp(ik_n a) \quad (\text{samme som (44)})$$

og Hamiltonoperatoren $\bar{\mathcal{H}}$ som findes med

$$\bar{\mathcal{H}}_{(ij)} = \begin{cases} V_i + \varepsilon & \text{hvis } i = j \\ -\gamma & \text{hvis } i \text{ og } j \text{ er nærmeste naboer} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (\text{samme som (49)})$$

Ud fra Greensfunktionen findes da et udtryk for transmissionsfunktionen ved hjælp af

$$\mathcal{T}(E) = \text{Tr}[\bar{G}^R \bar{\Gamma}_2 \bar{G}^A \bar{\Gamma}_1] \quad (\text{samme som (52)})$$

²⁷Se ETM afsnit 3.6

²⁸Dette viser sig ikke kun eksperimentelt. Teoretisk kan denne omskrivning retfærdiggøres ved overvejelser magen til dem, gjort ved (94) og (95) i "Appendiks om selvenergi". (95) er faktisk ensbetydende med $\sin(k_n a) \approx k_n a$.

hvor Γ findes ved brug af

$$\Gamma_{\nu_i(i'i')} = \frac{2\hbar^2}{mab} \sum_n \sin(n\pi y_i/b) \sin(n\pi y_{i'}/b) \sin(k_n a) \quad (\text{samme som (54)})$$

til slut findes strømmen ud fra transmissionsfunktionen med

$$I = \frac{2e}{h} \int_0^\infty (f_2(E) - f_1(E)) \mathcal{T}(E) dE \quad (\text{samme som (24)})$$

4 Regneeksempel

Inden det forholdsvis komplicerede graphen gennemgås i detaljer, vil vi gennemgå et simple eksempl, hvor prøven består af et enkelt atom, placeret udfor midten af de to ledninger, hvis bredder er ens. Har man kun et atom, vil de matricer, der bruges til udregningen af transmissionskoefficienterne, være 1×1 -matricer, altså skalarer. For yderligere simplifikation medtages kun ét led i summerne i (44) og (51). Disse simplifikationer gør, at alle udregninger (på nær integralet i (24)) uden problemer kan udføres analytisk.

(49) giver nu en værdi for Hamiltonoperatoren på

$$\bar{\mathcal{H}} = V + \varepsilon \quad (55)$$

og selvenergien bliver ifølge (44) til

$$\bar{\Sigma} = -\frac{\hbar^2}{mab} \sin^2\left(\frac{1\pi \frac{b}{2}}{b}\right) \exp(ika) - \frac{\hbar^2}{mab} \sin^2\left(\frac{1\pi \frac{b}{2}}{b}\right) \exp(ika) = -\frac{2\hbar^2}{mab} \exp(ika) \quad (56)$$

Indsættes disse to i (42) fås

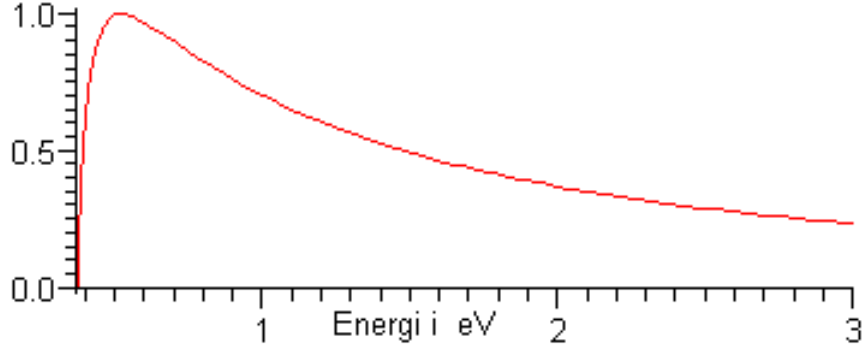
$$\bar{G}^R = \frac{1}{E - V - \varepsilon + \frac{2\hbar^2}{mab} \exp(ika)} \quad (57)$$

\bar{G}^A kan nu findes med $\bar{G}^A = \bar{G}^{R\dagger}$, og fås til

$$\bar{G}^R = \frac{1}{E - V - \varepsilon + \frac{2\hbar^2}{mab} \exp(-ika)} \quad (58)$$

Γ findes med (51) til

$$\bar{\Gamma}_1 = \bar{\Gamma}_2 = \frac{2\hbar^2 k}{bm} \sin^2\left(\frac{1\pi \frac{b}{2}}{b}\right) \sin(ka) = \frac{2\hbar^2 k}{bm} \sin(ka) \quad (59)$$



Figur 3: Plot af transmissionsfunktionen (60) med indsatte værdier $a = 1 \text{ \AA}$, $b = 1 \text{ nm}$, $V = 0 \text{ eV}$ og $\varepsilon = 2 \text{ eV}$.

Nu kan transmissionsfunktionen findes med (52):

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}(E) &= \text{Tr}[\bar{\bar{G}}^R \bar{\bar{\Gamma}}_2 \bar{\bar{G}}^A \bar{\bar{\Gamma}}_1] \\
 &= \frac{\left(\frac{2\hbar^2}{mab} \sin(ka)\right) \left(\frac{2\hbar^2}{mab} \sin(ka)\right)}{\left(E - V - \varepsilon + \frac{2\hbar^2}{mab} \exp(ika)\right) \left(E - V - \varepsilon + \frac{2\hbar^2}{mab} \exp(-ika)\right)} \\
 &= \frac{\left(\frac{2\hbar^2}{mab}\right)^2 \sin^2\left(a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E - V - \frac{\pi^2}{b^2}}\right)}{\left(E - V - \varepsilon\right)^2 + \left(\frac{2\hbar^2}{mab}\right)^2 + 2\frac{2\hbar^2}{mab}(E - V - \varepsilon) \cos\left(a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E - V - \frac{\pi^2}{b^2}}\right)} \quad (60)
 \end{aligned}$$

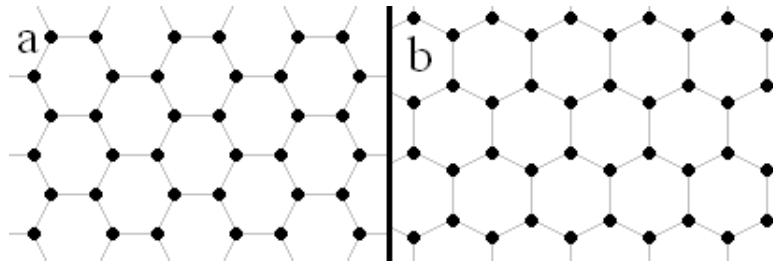
Transmissionsfunktionen ses plottet på fig. 3. Indsætter man værdier $a = 1 \text{ \AA}$, $b = 1 \text{ nm}$, $V = 0 \text{ eV}$, $\varepsilon = 2 \text{ eV}$, $U = 0.1 \text{ V}$ og $T = 5 \text{ }^\circ\text{K}$, og bruges en Fermienergi midt mellem de kemiske potentialer i ledningerne, kan strømmen findes med (24), og fås til²⁹

$$I = 2.81 \text{ mA} \quad (61)$$

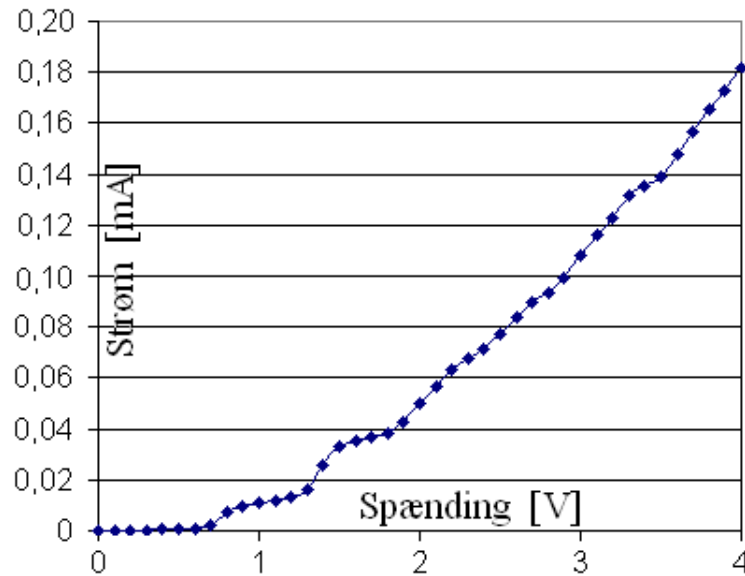
5 Output

Det ønskede program, der kan simulere strømmen gennem et vilkårligt formet stykke graphen, kan laves på basis af den teori, der er resumeret i afsnit 3.6. Kildekoden til dette program kan ses i "Appendiks med kildekoden", og en beskrivelse af det med en form for manual kan findes i "Appendiks om programmet". Mange af de figurer, der henvises til i dette afsnit, og flere endnu, findes i "Appendiks med figurer". En første test af programmet er at forsøge at eftergøre resultatet i regneeksemplet. Plottes transmissionsfunktionen, fås en graf, identisk med den udregnet i eksemplet,

²⁹Bruger man den simple, men mindre præcise Landauerformel ((75) i "Appendiks om Landauerformlen"), fås en værdi på $I = 2.83 \text{ mA}$



Figur 4: a og b viser graphen lagt på de to måder, som programmet kan regne på. a viser en "zig-zag"-placering, mens b viser en "armchair"-placering.



Figur 5: Plot af strømmen som funktion af spændingen, gennem et rektangulært graphenstykke på $5 \cdot 2.5$ nm, som det, tegnet på fig. 8.

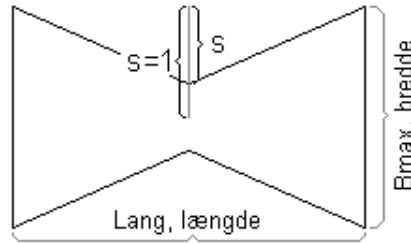
fig. 3. Udregnes strømmen, fås $I = 2.82$ mA, altså næsten præcis det samme som i regneeksemplet.

For yderligere at teste programmet følger her beskrivelser af et par yderligere eksperimenter³⁰. To parametre varieres, dels spændingsforskellen U , og dels formen på graphenstykket. Konstante holdes temperaturen $T = 5$ °K, det interne potential $V = 0$ eV, bredden af ledningen $b = 3$ nm, den interatomare afstand i ledningen $a = 2.5$ Å, bredden af graphenstykket 2.5 nm, længden af graphenstykket 5 nm og Fermienergien i ledningen $EF = 5$ eV. Desuden holdes graphenstykket i "zigzag-position"³¹.

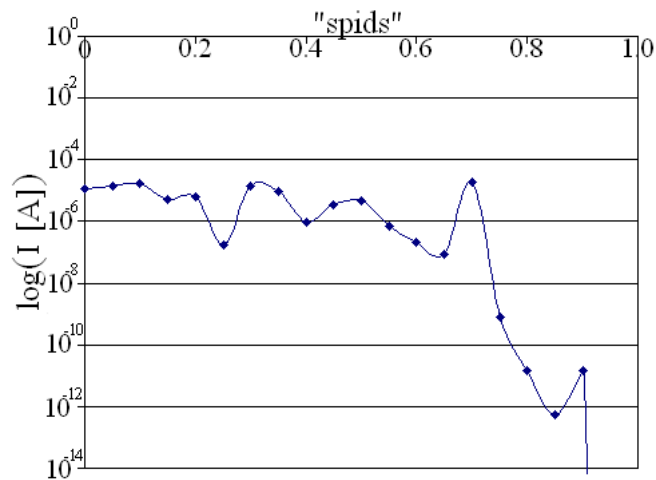
I første eksperiment holdes formen på graphenstykket konstant, mens spændingsforskellen varieres. Et plot af resultaterne ses i fig. 5. Ved første øjekast virker

³⁰"Eksperiment" er her ment som virtuelt eksperiment, altså kørsler af programmet.

³¹Se fig. 4



Figur 6: Betydningen af "spids". "s" på figuren står for "spids".



Figur 7: Plot af logaritmen til strømmen, som funktion af "spids", for $U = 1$ V. For "spids" = 0.95 og "spids" = 1, går der en strøm på $I = 0$ A og derfor er $\log(I) = -\infty$ og ikke med på plottet.

sammehængen lineær som forudset af Ohms lov, men ser man nærmere efter, anes en form for trappefunktion, hvor hvert trappetrin svarer til en ny resonans i graphenstykket. Især de to første trin er synlige.

Et andet forsøg gik på at holde strømmen konstant, men variere formen på graphenstykket ved at lave en spids, som beskrevet på fig. 6. Plots af sammenhængen mellem strømmen og størrelsen af denne spids, ses på fig. 7. Det ses, at strømmen som tendens falder med størrelsen af spidsen, men dog med enkelte gevaldige afvigelser. Kvalitativt kan dette fald forklares med at færre modi kan propagere gennem graphenstykket, der hvor det bliver smallere, men en mere kvantitativ beregning af størrelsen af dette fald kan ikke umiddelbart foretages. Plots af form og transmissionsfunktion for "spids" = 0.5, ses på opgavens forside, og plots af form og transmissionsfunktion for "spids" = 0.0 og "spids" = 0.9 kan ses i "Appendiks med figurer".

6 Konklusion og efterskrift

Formålet med denne opgave var at lave et computerprogram, der kunne simulere strømmen gennem et stykke graphen med vilkårlig form. Som det fremgår af foregående afsnit, er dette formål blevet opfyldt til fulde.

Man kunne argumentere for, at en optimal opgave også ville indeholde beskrivelser³² af rigtige fysiske eksperimenter, lavet på graphen. Formålet med dette skulle selvfølgelig være at kontrollere om fremgangsmåden i denne opgave har været korrekt, idet en uoverensstemmelse mellem teori og praksis ikke i første omgang ville falsificere hele teorien, men snarere sætte spørgsmålstejn ved de approksimationer, der er benyttet under vejs. Men hvor sundt et sådant "realitycheck" end ville være, er det over målet med denne opgave. Som det er nu, findes programmet, og det må være op til andre at udføre eksperimenterne.

Man kan også komme med andre indvendinger. For eksempel er det kun en relativ lille del af opgaven, der går med outputanalyse, for med alle de parametre, det er muligt at variere, er der uanede muligheder for at udføre virtuelle eksperimenter. Og det er der ganske rigtigt, men da dette er en teoretisk opgave, har fokus været på udviklingen af teorien, og ikke på brug af programmet.

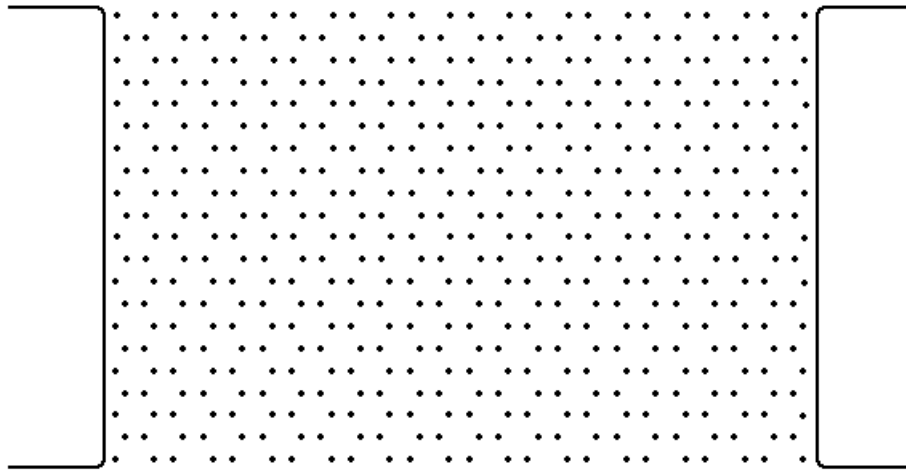
En tredje indvending, som kan fremkomme efter en kørsel af programmet og en gennemgang af kildekoden, er, at kildekoden ikke er så optimeret, som den måske kunne være. Dette gør, at store graphenstykker tager uforholdsmæssigt lang tid at beregne, især hvis man vil plote transmissionsfunktionen og ikke blot udregne strømmen. En mulig optimering kan være at bruge algoritmer til matrixinverteringen, der fungerer mere effektivt på matricer med mange nuller³³. Dette ville hjælpe meget, idet det meste af den tid, det tager at køre programmet, går med matrixinvertering. En anden potentiel forbedring af programmeringen, kunne være at bruge en bedre og/eller hurtigere integrationsalgoritme end den primitive "Eulers metode" der bruges af "strom.h".

En sidste indvending kan være, at programmet ikke er specielt brugervenligt. For at ændre startparametrene skal man indtaste ændringer i selve kildekoden (i "konstant.m"), og desuden er det en betingelse for at bruge programmet, at man har matlab installeret på sin computer. Det var da også den oprindelige plan at lave et mere brugervenligt program med mere grafik, men det blev ændret hen ad vejen, da de komplikationer, som dette ville medføre, begyndte at fremgå. Skulle man lave et tilsvarende program til udgivelse, skulle disse detaljer naturligvis være i orden, men til brug for en opgave som denne, ville det være at skyde over målet.

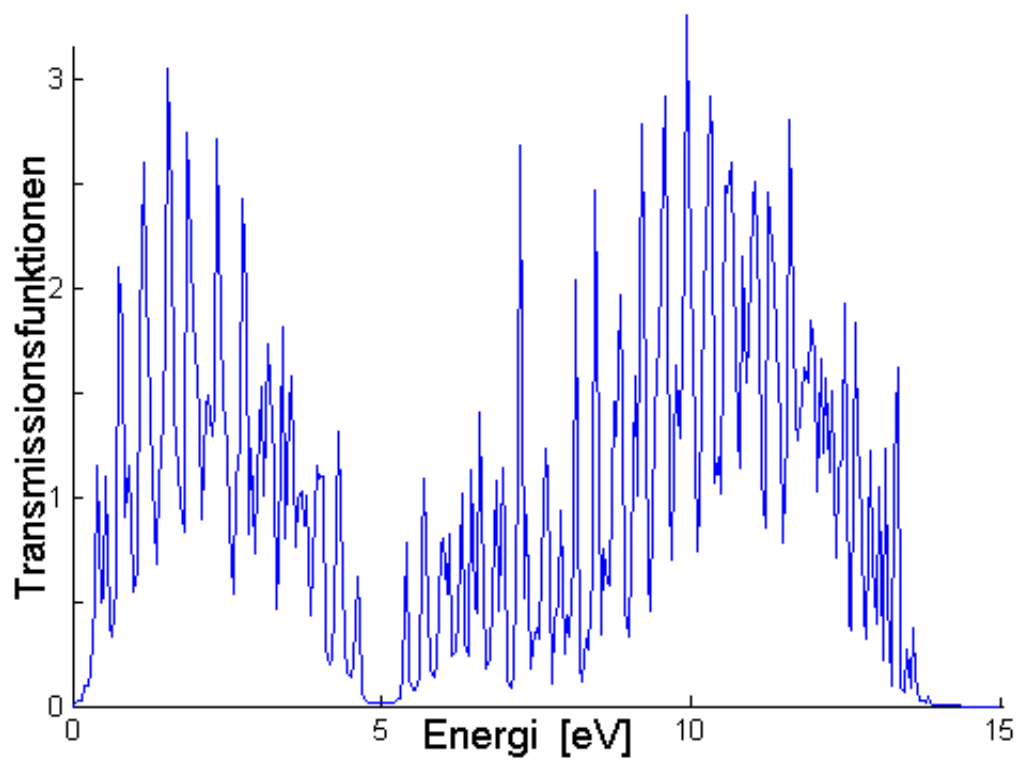
³²Enten henvisninger til forsøg lavet af andre, eller ligefrem resultater af eksperimenter lavet specielt til denne opgave

³³Er der 100 atomer i graphenstykket, vil der være 10000 matricielementer i $[\bar{G}^R]^{-1}$, men kun ca. 600 matricielementer forskellige fra nul

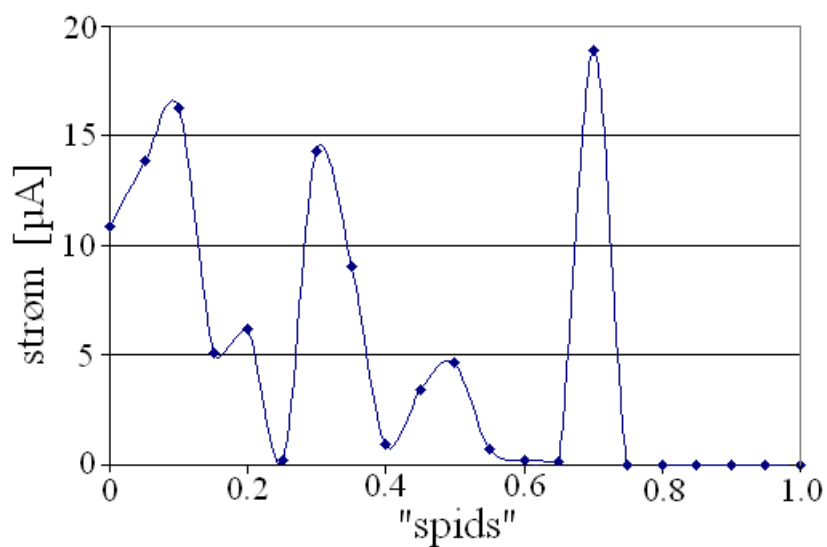
A Appendiks med figurer



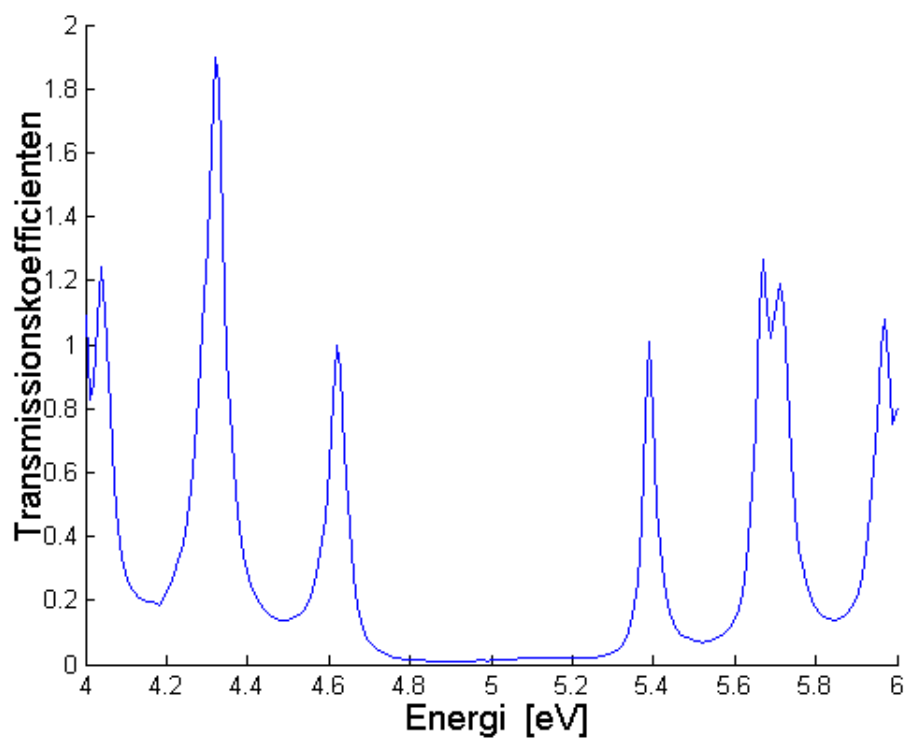
Figur 8: Det rektangulære graphenstykke på $5 \cdot 2.5$ nm, med ledningerne antydet.



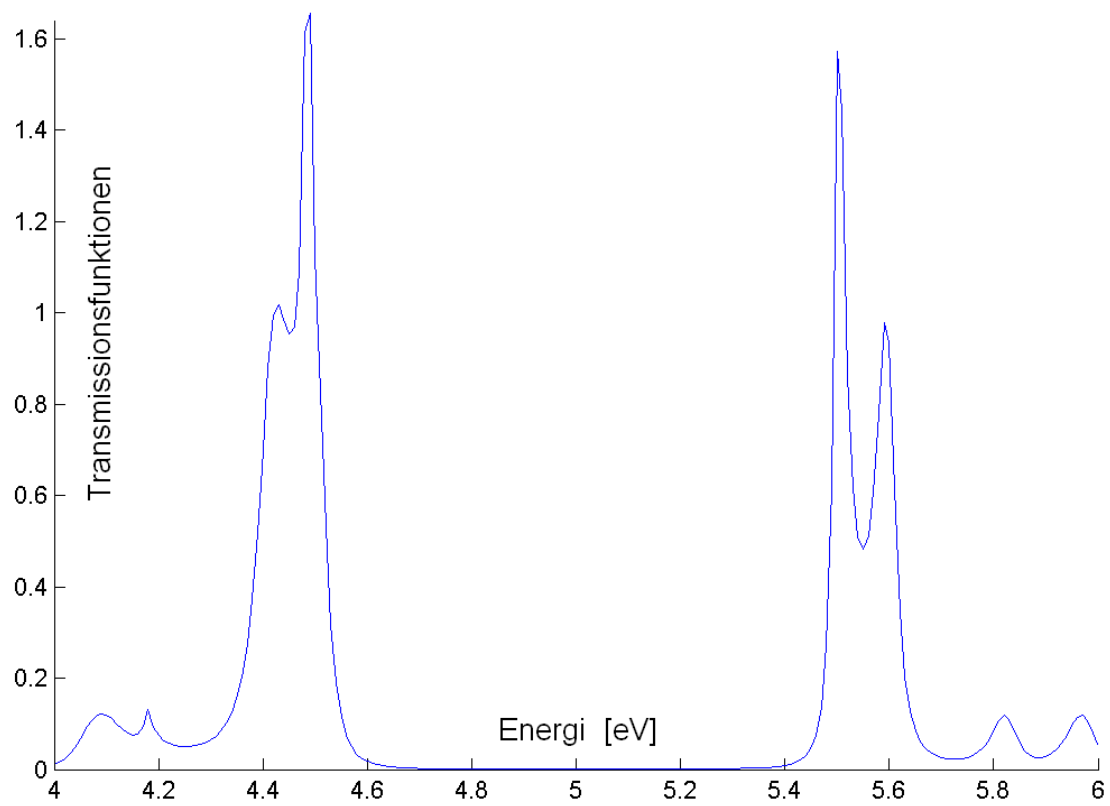
Figur 9: Transmissionsfunktion gennem et rektangulært graphenstykke på $5 \cdot 2.5$ nm.



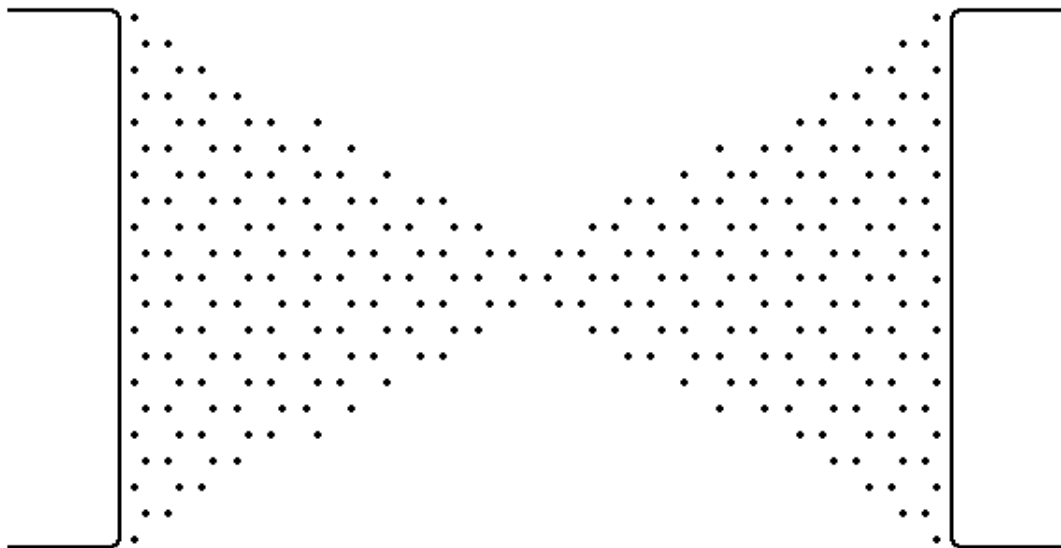
Figur 10: Plot af strømmen, som funktion af "spids", for $U = 1$ V. Modsat fig. 7 er skalaerne på akserne her lineære.



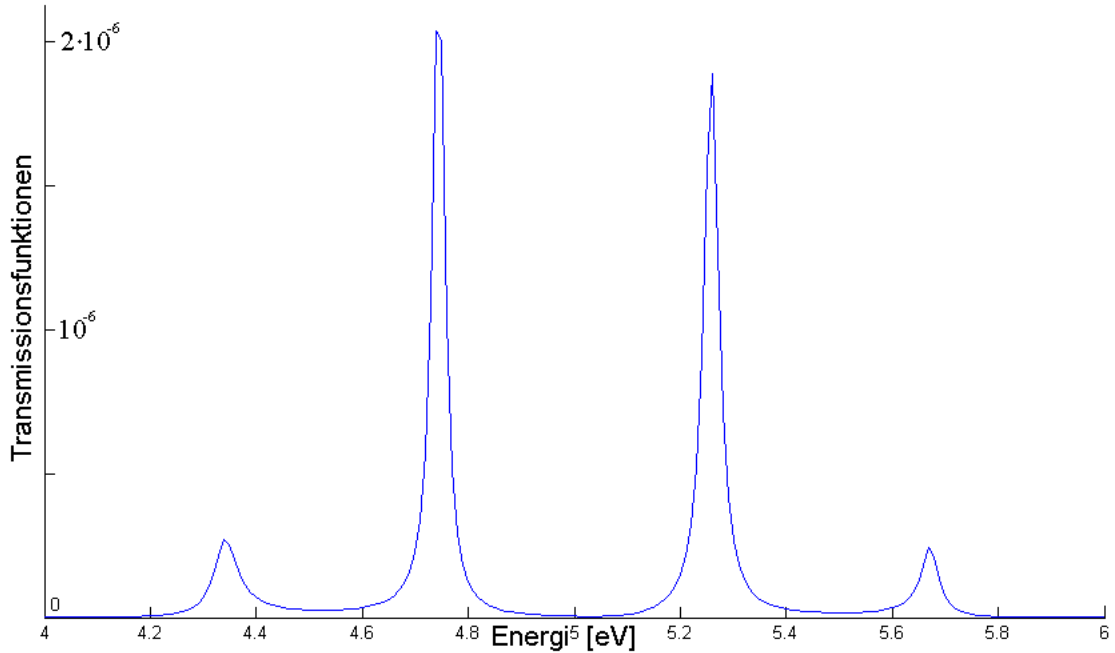
Figur 11: Plot af transmissionsfunktion gennem et rektangulært graphenstykke på $5 \cdot 2.5$ nm, zoomet ind om $E = E_F$.



Figur 12: Plot af transmissionsfunktionen gennem et graphenstykke med "spids" = 0.5, zoomet ind om $E = E_F$.



Figur 13: Et graphenstykke med "spids" = 0.9, med ledningerne antydet.



Figur 14: Plot af transmissionsfunktionen gennem et graphenstykke med ”spids” = 0.9, zoomet ind om $E = E_F$.

B Appendiks om båndstruktur

Hamiltonoperatoren for et atom i et krystalgitter kan skrives som

$$\mathcal{H}_r = \mathcal{H}_0 + v(\bar{r} - \bar{r}_0) \quad (62)$$

hvor \mathcal{H}_0 er Hamiltonoperatoren for et ’enligt’ atom, og $v(\bar{r} - \bar{r}_0)$ er potentialet, stammende fra alle andre atomer i gitteret, altså $v(\bar{r} - \bar{r}_0) = \sum_{j \neq j_0} V(\bar{r} - \bar{r}_j)$. Vi antager³⁴, at bølgefunktionen ψ kan skrives som en linearkombination af bølgefunktionerne for de enkelte atomer, altså $\psi = \sum_j c_j \psi_j$, hvor ψ_j er bølgefunktionen for den³⁵ ledende elektron i atom nr. j . Atomerne nummereres således, at de atomer, for hvilke $\delta = 0$ i (1), får en lige værdi for j , og de atomer, for hvilke $\delta = 1$, tildeles en ulige værdi for j . Ser man bort fra grænseeffekter, vil det, på grund af periodiciteten i gitteret, gælde, at $\psi(\bar{r}) = \psi(\bar{r} - \bar{R}_e)$, hvor $\bar{R}_e = n\hat{\xi} + m\hat{\eta}$, hvor $\hat{\xi}$ og $\hat{\eta}$ er defineret i (2). Det krav kan opfyldes, hvis man vælger $c_j = C_0 \exp(i\bar{k} \cdot \bar{R}_j)$ for lige værdier af δ og $c_j = C_1 \exp(i\bar{k} \cdot (\bar{R}_j - \bar{\chi}))$ for ulige, idet ψ så vil have form som en Fourierrække, der netop har denne egenskab. C_1 og C_2 er to konstanter, der senere vil blive elimineret.

³⁴Antagelsen kaldes ”linearkombination af atomorbitaler”, og kendes også under den engelske forkortelse LCAO. For diskussion af LCAO, se PSC afsnit 5.3.1

³⁵I tilfældet graphen er der kun én elektron, der bidrager til strømmen, jævnfør diskussionen ved (3). Havde der været flere, havde matematikken været lidt mere kompliceret.

Bølgefunktionen bliver nu

$$\begin{aligned}\psi_k(\vec{r}) &= \sum_e (C_0 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_e) \psi(\vec{r} - \vec{R}_e) + C_1 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_e) \psi(\vec{r} - \vec{R}_e - \vec{\chi})) \\ &= C_0 \varphi_0(\vec{r}) + C_1 \varphi_1(\vec{r})\end{aligned}\quad (63)$$

hvor \sum_e går over alle enhedsceller i prøven. Antages her, at de forskellige bølgefunktioner ikke overlapper³⁶, ses, at $\psi_k(\vec{r})$ er normaliseret, hvis $C_0^* C_0 + C_1^* C_1 = 1$, hvis $\varphi_0(\vec{r})$ og $\varphi_1(\vec{r})$ defineres som

$$\begin{aligned}\varphi_0(\vec{r}) &\equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_e \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_e) \psi(\vec{r} - \vec{R}_e) \\ \varphi_1(\vec{r}) &\equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_e \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_e) \psi(\vec{r} - \vec{R}_e - \vec{\chi})\end{aligned}\quad (64)$$

Skrevet med Dirac-notation, bliver (63) $|\psi_k\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$. Indsættes dette og (62) i Schrödingerligningen, fås

$$E|\psi_k\rangle = \mathcal{H}|\psi_k\rangle \Leftrightarrow E|\psi_k\rangle = \mathcal{H}_0|\psi_k\rangle + v|\psi_k\rangle \Leftrightarrow (E - E_0)|\psi_k\rangle = v|\psi_k\rangle \quad (65)$$

Hvor E_0 er energien af en elektron i et enligt atom. Målet er nu, at finde et udtryk for E ved at eliminere C_0 og C_1 . Multipliceres (65) med $\langle 0|$, fås

$$\begin{aligned}\langle 0|\mathcal{E}|\psi_k\rangle &= \langle 0|v|\psi_k\rangle \Leftrightarrow \\ \mathcal{E}(C_0\langle 0|0\rangle + C_1\langle 0|1\rangle) &= C_0\langle 0|v|0\rangle + C_1\langle 0|v|1\rangle \Leftrightarrow \\ C_0(\mathcal{E}\langle 0|0\rangle - \langle 0|v|0\rangle) &= C_1(\langle 0|v|1\rangle - \mathcal{E}\langle 0|1\rangle) \Leftrightarrow \\ C_0 &= C_1 \frac{\langle 0|v|1\rangle - \mathcal{E}\langle 0|1\rangle}{\mathcal{E}\langle 0|0\rangle - \langle 0|v|0\rangle}\end{aligned}\quad (66)$$

hvor $\mathcal{E} \equiv (E - E_0)$. Gøres tilsvarende med $\langle 1|$ fås

$$C_0 = C_1 \frac{\langle 1|v|1\rangle - \mathcal{E}\langle 1|1\rangle}{\mathcal{E}\langle 1|0\rangle - \langle 1|v|0\rangle} \quad (67)$$

Sættes disse to lig hinanden, fås

$$\begin{aligned}\frac{\langle 0|v|1\rangle - \mathcal{E}\langle 0|1\rangle}{\mathcal{E}\langle 0|0\rangle - \langle 0|v|0\rangle} &= \frac{\langle 1|v|1\rangle - \mathcal{E}\langle 1|1\rangle}{\mathcal{E}\langle 1|0\rangle - \langle 1|v|0\rangle} \Leftrightarrow \\ \mathcal{E}\langle 0|v|1\rangle\langle 1|0\rangle - \langle 0|v|1\rangle\langle 1|v|0\rangle - \mathcal{E}^2\langle 0|1\rangle\langle 1|0\rangle + \mathcal{E}\langle 0|1\rangle\langle 1|v|0\rangle &= \\ \mathcal{E}\langle 1|v|1\rangle\langle 0|0\rangle - \langle 1|v|1\rangle\langle 0|v|0\rangle - \mathcal{E}^2\langle 1|1\rangle\langle 0|0\rangle + \mathcal{E}\langle 1|1\rangle\langle 0|v|0\rangle &\Leftrightarrow \\ 0 = \mathcal{E}(\langle 0|v|1\rangle\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle\langle 1|v|0\rangle - \langle 1|v|1\rangle\langle 0|0\rangle - \langle 1|1\rangle\langle 0|v|0\rangle) + \\ \mathcal{E}^2(\langle 1|1\rangle\langle 0|0\rangle - \langle 0|1\rangle\langle 1|0\rangle) + (\langle 1|v|1\rangle\langle 0|v|0\rangle - \langle 0|v|1\rangle\langle 1|v|0\rangle)\end{aligned}\quad (68)$$

³⁶Senere antages nøjagtigt det modsatte for de atomer, der er nærmeste naboer.

Inden der regnes videre på (68), vil vi finde udtryk for de konstanter, der indgår i den. Antages igen, at orbitaler fra atomer, der ikke er ens, ikke overlapper, giver $\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$. Da (3) er normaliseret, giver $\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$. Defineres

$$\alpha \equiv \int \psi^*(\bar{r})v(\bar{r})\psi(\bar{r})d\bar{r} \quad (69)$$

ses, at $\langle 0|v|0\rangle = \langle 1|v|1\rangle = \alpha$, idet der ses bort fra grænseeffekter. Defineres

$$\beta \equiv \int \psi^*(\bar{r})v(\bar{r})\psi(\bar{r} + \bar{\chi})d\bar{r} \quad (70)$$

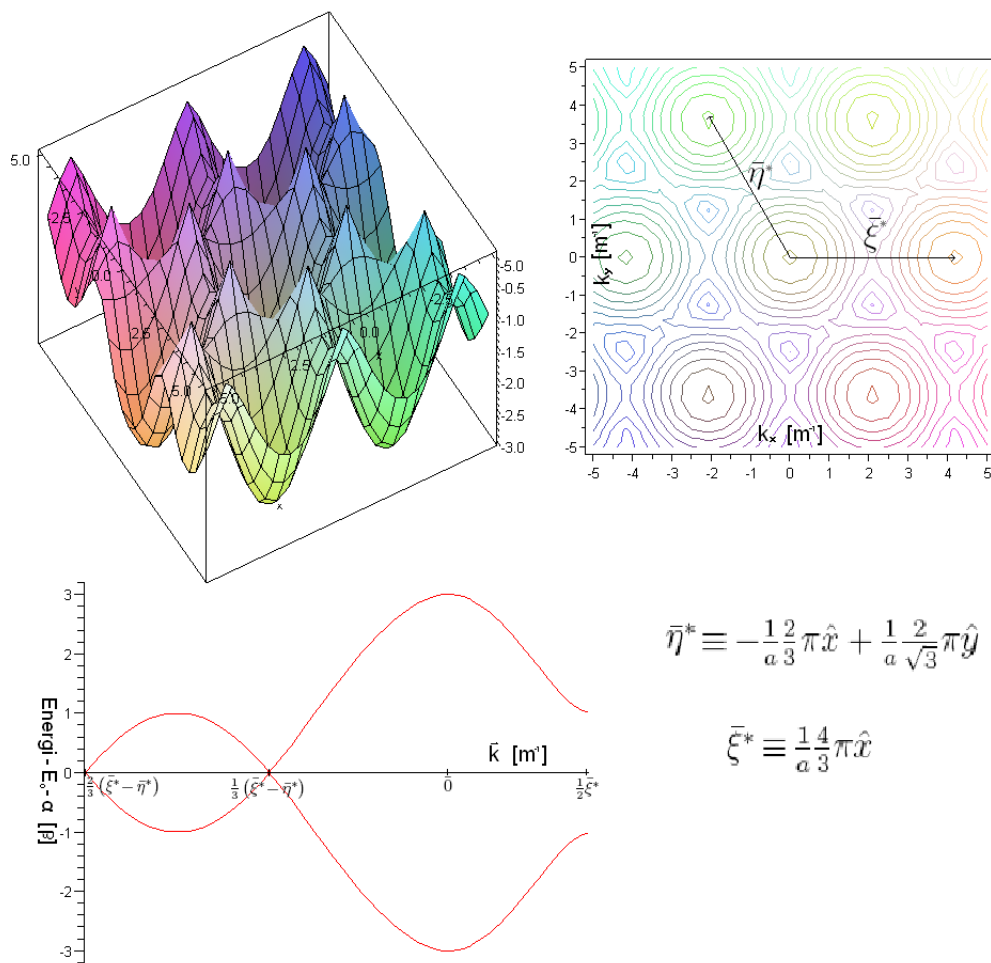
findes nu et udtryk for $\langle 0|v|1\rangle$ og $\langle 1|v|0\rangle$, idet det antages, at overlappet mellem to atomer, der er nærmeste naboer, ikke helt er nul, men blot lille.

$$\begin{aligned} \langle 0|v|1\rangle &= \int \varphi_0^*(\bar{r})v(\bar{r})\varphi_1(\bar{r})d\bar{r} \\ &= \frac{1}{N} \sum_e \int \exp(-i\bar{k}\bar{R}_e)\psi^*(\bar{r} - \bar{R}_e)v(\bar{r}) \left(\exp(i\bar{k}\bar{R}_e)\psi(\bar{r} - \bar{R}_e - \bar{\chi}) \right. \\ &\quad \left. + \exp(i\bar{k}(\bar{R}_e - \hat{\xi}))\psi(\bar{r} - \bar{R}_e + \hat{\xi} - \bar{\chi}) + \exp(i\bar{k}(\bar{R}_e - \hat{\eta}))\psi(\bar{r} - \bar{R}_e + \hat{\eta} - \bar{\chi}) \right) \\ &= (1 + \exp(-i\bar{k}\bar{\xi}) + \exp(-i\bar{k}\bar{\eta})) \int \psi^*(\bar{r})v(\bar{r})\psi(\bar{r} - \bar{\chi})d\bar{r} \\ &= \beta (1 + \exp(-i\bar{k}\bar{\xi}) + \exp(-i\bar{k}\bar{\eta})) \end{aligned} \quad (71)$$

Ved andet lighedstegn er (64) indsat. Ved tredje lighedstegn er brugt periodiciteten af gitteret samt det faktum, at (3) ikke er afhængig af retningen i xy-planet (altså af ϕ), og at integralet over to nærmeste naboer derfor vil være uafhængigt af disses gensidige placering.

En tilsvarende udregning giver

$$\langle 1|v|0\rangle = \beta (1 + \exp(i\bar{k}\bar{\xi}) + \exp(i\bar{k}\bar{\eta})) \quad (72)$$



Figur 15: Diverse plot af båndstrukturen, som fundet i (73). De to vektorer $\bar{\xi}^*$ og $\bar{\eta}^*$ er de reciproke gittervektorer til graphengitteret. Reciproke gittervektorer er enhedsvektorer for det reciproke rum, også kaldet k -rummet. Disse emner vil ikke blive berørt yderligere i denne opgave. Se PSC afsnit 2.4

Indsættes alt dette i (68), fås

$$\begin{aligned}
& \mathcal{E}^2 - 2\alpha\mathcal{E} + \left(\alpha^2 - \beta^2 \left(1 + e^{-i\bar{k}\bar{\xi}} + e^{-i\bar{k}\bar{\eta}} \right) \left(1 + e^{i\bar{k}\bar{\xi}} + e^{i\bar{k}\bar{\eta}} \right) \right) = 0 \Leftrightarrow \\
\mathcal{E} &= \frac{1}{2} \left(2\alpha \pm \sqrt{(2\alpha)^2 - 4 \cdot 1 \cdot (\alpha^2 - \beta^2 (1 + e^{-i\bar{k}\bar{\xi}} + e^{-i\bar{k}\bar{\eta}}) (1 + e^{i\bar{k}\bar{\xi}} + e^{i\bar{k}\bar{\eta}}))} \right) \\
&= \alpha \pm \beta \sqrt{(1 + e^{-i\bar{k}\bar{\xi}} + e^{-i\bar{k}\bar{\eta}}) (1 + e^{i\bar{k}\bar{\xi}} + e^{i\bar{k}\bar{\eta}})} \\
&= \alpha \pm \beta \sqrt{3 + 2 \cos \left(\frac{3}{2}ak_x + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y \right) + 2 \cos(\sqrt{3}ak_y) + 2 \cos \left(\frac{3}{2}ak_x - \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y \right)} \\
&= \alpha \pm \beta \sqrt{3 + 4 \cos \left(\frac{3}{2}ak_x \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y \right) + 2 \cos(\sqrt{3}ak_y)} \Leftrightarrow \\
E &= E_0 + \alpha \pm \beta \sqrt{1 + 4 \cos \left(\frac{3}{2}ak_x \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y \right) + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y \right)} \quad (73)
\end{aligned}$$

Båndstrukturen kan ses plottet på fig. 15.

C Appendiks om Landauerformlen

Dette appendiks bygger videre på diskussionen om (24) i afsnittet om Landauer-Büttiker-formalismen.

$$I = \frac{2e}{h} \int_0^\infty (f_2(E) - f_1(E)) \mathcal{T}(E) dE \quad (\text{samme som (24)})$$

Det defineres nu, at $\mu_2 > \mu_1$. Det svarer ifølge (16) til, at spændingsforskellen U mellem lederne er positiv³⁷. Ved lave temperaturer³⁸ reducerer Fermifunktionen (17) til

$$f(E) = \begin{cases} 1 & \text{hvis } E < \mu \\ 0 & \text{hvis } E > \mu \end{cases} \quad (74)$$

og indsættes dette i (24) fås

$$I = \frac{2e}{h} \int_{\mu_1}^{\mu_2} (-\mathcal{T}(E)) dE = \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) TM = \frac{2e^2}{h} TMU \quad (75)$$

Ved andet lighedstegn er antaget, at transmissionsfunktionen $\mathcal{T}(E) = TM$. I det ligger to antagelser, nemlig at \mathcal{T} er konstant i intervallet mellem μ_1 og μ_2 , og desuden

³⁷Grunden til, at man kan definere, er, at man selv må om, hvordan man nummererer ledningerne.

³⁸Lave temperaturer er en nødvendig antagelse for (74), men faktisk ikke for slutresultatet i (75). For diskussion, se ETM afsnit 2.5

at T_m er uafhængig af modusnummeret.³⁹ Ved det tredje lighedstegn i (75) er brugt (16). Man kan nu regne modstanden ud med formlen $R^{-1} \equiv \frac{\partial I}{\partial U}$, og så får man:

$$R^{-1} = \frac{2e^2}{h} TM \quad (76)$$

den såkaldte Landauerformel. Ud fra (76) og (75) ses den lineære sammenhæng, der er givet ved Ohms lov

$$U = RI \quad (77)$$

Desuden kan det vises⁴⁰ at (76), under yderligere approksimationer, reducerer til det velkendte udtryk for modstanden i en todimensional leder,

$$R = \frac{L}{\sigma W} \quad (78)$$

hvor L er længden i strømmens retning, W er størrelsen af tværsnittet, og σ er konduktiviteten, der er en materialekonstant.

D Appendiks om Greensfunktioner

Greensfunktioner kan bruges til at løse differentiaalligninger af formen

$$\mathcal{L}u(x) = f(x) \quad (79)$$

hvor \mathcal{L} er en lineær operator, der opererer på variabelen x , og $u(x)$ og $f(x)$ er funktioner. For en Greensfunktion $G(x, s)$ til operatoren \mathcal{L} gælder, at

$$\mathcal{L}G(x, s) = \delta(x - s) \quad (80)$$

Med det in mente studerer vi nu integralet

$$\int \mathcal{L}G(x, s)f(s)ds = \int \delta(x - s)f(s)ds = f(x) \quad (81)$$

hvor (80) er brugt ved første lighedstegn. Sammenligner man (79) og (81) får man

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u(x) &= \int \mathcal{L}G(x, s)f(s)ds \Leftrightarrow \\ u(x) &= \int G(x, s)f(s)ds \end{aligned} \quad (82)$$

hvor der er brugt, at \mathcal{L} kun opererer på x og derfor kan sættes uden for integraltegnet. Hvordan man generelt finder et udtryk for $G(x, s)$ er en længere historie⁴¹, men fra (82) ses dog, at G er afhængig af grænsebetingelser, idet biimplikationspilen i (82) kun gælder op til en konstant.

³⁹For en diskussion af disse antagelser, se ETM afsnit 2.5

⁴⁰Se ETM afsnit 2.2 og 1.7

⁴¹Se MMP afsnit 17.6

E Appendiks om selvenergi

Målet med dette appendiks er at udlede udtrykket (44) for selvenergien

$$\bar{\bar{\Sigma}}_{(i,j)} = \frac{-\hbar^2}{mab} \sum_n \sin(n\pi y_{i'}/b) \sin(n\pi y_{j'}/b) \exp(ik_n a) \quad (83)$$

hvor a her er afstanden mellem atomerne i ledningen. Inden diskussionen når til selvenergi, vil vi først udlede et generelt udtryk for sammenhængen mellem Greensfunktionen og bølgefunktionen. På grund af ortogonaliteten af mængden af mulige bølgefunktioner i et givet potential gælder, at enhver funktion kan skrives som en linearkombination af bølgefunktioner. Dette gælder også for Greensfunktionen, altså

$$G(\bar{r}, \bar{r}_0) = \sum_{\alpha} C_{\bar{r}_0, \alpha} \psi_{\alpha}(\bar{r}) \quad (84)$$

hvor α går over alle tilstande, altså både k -er og n -er i (7). Indsættes (84) i (25), kan man isolere $C_{\bar{r}_0, \alpha}$ og få

$$\begin{aligned} \delta(\bar{r} - \bar{r}_0) &= (E - \mathcal{H}) G(\bar{r}, \bar{r}_0) \\ &= (E - \mathcal{H}) \sum_{\alpha} C_{\bar{r}_0, \alpha} \psi_{\alpha}(\bar{r}) \\ &= \sum_{\alpha} (E - E_{\alpha}) C_{\bar{r}_0, \alpha} \psi_{\alpha}(\bar{r}) \Leftrightarrow \\ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\alpha'}^*(\bar{r}) \delta(\bar{r} - \bar{r}_0) d\bar{r} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\alpha'}^*(\bar{r}) \sum_{\alpha} (E - E_{\alpha}) C_{\bar{r}_0, \alpha} \psi_{\alpha}(\bar{r}) d\bar{r} \Leftrightarrow \\ \psi_{\alpha'}^*(\bar{r}_0) &= (E - E_{\alpha'}) C_{\bar{r}_0, \alpha'} \Leftrightarrow \\ C_{\bar{r}_0, \alpha} &= \frac{\psi_{\alpha}^*(\bar{r}_0)}{E - E_{\alpha}} \end{aligned} \quad (85)$$

Indsættes dette i (84), fås det ønskede udtryk for sammenhængen mellem Greensfunktionen og bølgefunktionerne

$$G(\bar{r}, \bar{r}_0) = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\bar{r}) \psi_{\alpha}^*(\bar{r}_0)}{E - E_{\alpha}} \quad (86)$$

Nu er vi klar til at diskutere selvenergien. Selvenergien er ifølge (43) defineret som

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Sigma}} &\equiv \bar{\bar{\mathcal{H}}}_{pl} \left[E\bar{I} - \bar{\bar{\mathcal{H}}}_l \right]^{-1} \bar{\bar{\mathcal{H}}}_{lp} \Leftrightarrow \\ \bar{\bar{\Sigma}}_{(ij)} &= \sum_{bc} \bar{\bar{\mathcal{H}}}_{pl(ib)} \left[\left[E\bar{I} - \bar{\bar{\mathcal{H}}}_l \right]^{-1} \right]_{(bc)} \bar{\bar{\mathcal{H}}}_{lp(cj)} \end{aligned} \quad (87)$$

Hamiltonoperatoren kan ifølge (48)⁴² skrives

$$\bar{\mathcal{H}}_{(ij)} = \begin{cases} V_i + \frac{z_i \hbar^2}{2ma^2} & \text{hvis } i = j \\ \frac{-\hbar^2}{2ma^2} & \text{hvis } i \text{ og } j \text{ er nærmeste naboer} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (88)$$

hvor z_i er antallet af i -s nærmeste naboer. $\bar{\mathcal{H}}_{pl}$ og $\bar{\mathcal{H}}_p$ er Hamiltonoperatoren for overgangene mellem henholdsvis leder og prøve og prøve og leder, så derfor kan det ikke lade sig gøre, at $i = j$ i dem, da i i $\bar{\mathcal{H}}_{pl(ij)}$ er et atom i prøven og j et atom i lederen, og omvendt for $\bar{\mathcal{H}}_p$. i og j vil kun være nærmeste naboer til de atomer i lederen, der netop er inde at røre ved prøven. Det vil sige, at det kun er i disse punkter, at de to koblingshamiltonoperatorer vil have en værdi forskellig fra 0. Indsætter man det i (87), kan den omskrives til

$$\bar{\Sigma}_{(ij)} = \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2} \right)^2 \left[\left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l \right]^{-1} \right]_{(i'j')} \quad (89)$$

hvor der gælder, at i' er nærmeste nabo til i og tilsvarende med j . For at (89) skal være sand, skal gælde, at i' og j' er punkter i prøven, der grænser op til lederne. Udtrykket $\left[E\bar{I} - \bar{\mathcal{H}}_l \right]^{-1}$ kan (jævnfør (25) og tilhørende diskussion) ses som en Greensfunktion for en enkelt leder, der ikke er forbundet til en prøve. Ifølge (86) kan en sådan Greensfunktion bestemmes, hvis man kender bølgefunktionerne, så de skal findes. I en sådan "halvuendelig" ledning er bølgefunktionen givet ved en afart af (26) med den forskel, at $\exp(i\kappa x) \rightarrow \sin(\kappa x)$ på grund af den ekstra betingelse, at $\psi(x=0) = 0$. Resultatet bliver

$$\psi_{\kappa,n}(\bar{r}) = \frac{2}{\sqrt{Lb}} \sin(\kappa x) \sin(n\pi y/b) \quad (90)$$

hvilket er $\psi_{\kappa,n}(\bar{r}) = A \sin(\kappa x) \sin(n\pi y/b)$ normaliseret over bredden og en normaliseringslængde L . Den tilsvarende energi fås til

$$E_{\kappa,n} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\kappa^2 + \frac{\pi^2 n^2}{b^2} \right) \quad (91)$$

⁴²Grunden til, at vi kan bruge (48) i stedet for et udtryk af form som (49), er, at tætheden af de frie elektroner i enhver leder vil være så høj, at formen på gitteret bliver uden betydning.

(90) og (91) kan nu sættes ind i (86) for at finde et udtryk for Greensfunktionen.

$$\begin{aligned}
G(\bar{r}, \bar{r}_0) &= \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\bar{r})\psi_{\alpha}^*(\bar{r}_0)}{E - E_{\alpha}} \\
&= \frac{4}{Lb} \sum_{\kappa, n} \frac{\sin(\kappa x) \sin(\kappa x_0) \sin(n\pi y/b) \sin(n\pi y_0/b)}{E - \frac{\hbar^2}{2m} (\kappa^2 + \frac{\pi^2 n^2}{b^2})} \\
&= \frac{4}{Lb} \frac{2L}{2\pi} \int_0^{\infty} \sum_n \frac{\sin^2(\kappa x) \sin(n\pi y/b) \sin(n\pi y_0/b)}{\frac{\hbar^2}{2m} (k_n^2 + \frac{\pi^2 n^2}{b^2}) - \frac{\hbar^2}{2m} (\kappa^2 + \frac{\pi^2 n^2}{b^2})} d\kappa \\
&= \frac{4}{\pi b} \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n \sin(n\pi y/b) \sin(n\pi y_0/b) \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(\kappa x)}{k_n^2 - \kappa^2} d\kappa \quad (92)
\end{aligned}$$

Ved tredje lighedstegn er indsat (7) for E , (20) for \sum_{κ} og det faktum, at $x = x_0$, idet vi kun betragter grænsen mellem ledningerne og prøven. Ved hjælp af nogle tricks beskrevet i "Appendiks om kompleks energi og konturintegration" kan integralet i (92) udregnes, og løsningen bliver

$$G(\bar{r}, \bar{r}_0) = 4 \sum_n \sin(n\pi y/b) \sin(n\pi y_0/b) \frac{-m}{\hbar^2 k_n b} \sin(k_n |x|) \exp(ik_n |x|) \quad (93)$$

(93) beskriver Greensfunktionen for en partikel i en halvuendelig leder som en kontinuert funktion. Men (83) er en matrixligning, så for at opnå (83) skal (93) skrives om til matrixform. For at kunne det skal vi sætte $|x| = a$, da (89) kun gælder for atomer lige op ad lederen, som slutter i $x = 0$. Desuden skal vi omskrive k_m til det tilsvarende diskrete udtryk. For at kunne det, vil vi bruge Schrödingerligningen sammen med den omskrivning af Hamiltonoperatoren, der er givet ved (48).

$$\begin{aligned}
E\psi_j &= \bar{\mathcal{H}}\psi_j \Leftrightarrow \\
E\psi(ja) &= V\psi(ja) + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(2\psi(ja) - \psi((j+1)a) - \psi((j-1)a) \right) \Leftrightarrow \\
E &= V + \frac{\hbar^2}{2ma^2} (2 - \exp(ika) - \exp(-ika)) \Leftrightarrow \\
E &= V + \frac{\hbar^2}{ma^2} (1 - \cos(ka)) \quad (94)
\end{aligned}$$

idet $\psi(ja) = A \exp(ikja)$ er indsat ved tredje lighedstegn. Differentierer man, og lader man bagefter $a \rightarrow 0$, fås

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{\partial}{\partial k} (1 - \cos(ka)) = \frac{\hbar^2}{ma} \sin(ka) \approx \frac{\hbar^2 k}{m} \quad (95)$$

Indsættes $\frac{m}{\hbar^2 k} \rightarrow \frac{ma}{\hbar^2 \sin(ka)}$ i (93) sammen med førnævnte $|x| = a$ og diskretiseres med (37) to gange, en for hver dimension af prøven, fås

$$\bar{G}_{(i'j')} = \frac{-2ma^3}{\hbar^2 b} \sum_n 2 \sin(n\pi y_i/b) \sin(n\pi y_{j'}/b) \exp(ik_n a) \quad (96)$$

Indsættes (96) i (89) fås

$$\bar{\Sigma}_{(ij)} = -\frac{\hbar^2}{mab} \sum_n \sin(n\pi y_{i'}/b) \sin(n\pi y_{j'}/b) \exp(ik_n a) \quad (97)$$

hvilket er (83), det ønskede resultat.

F Appendiks om kompleks energi og konturintegration

På det sted i opgaven, hvor (26) blev fundet som løsning til (25), blev der brugt et fysisk argument, nemlig det, at løsningen måtte bestå af bølger, der bevæger sig væk fra $\bar{r} = \bar{r}_0$. Vi vil her istedet prøve at løse (25) matematisk ved hjælp af Fouriertransformation. I stedet vil der dog blive lavet en anden approksimation, idet der vil blive set bort fra y-retningen og fra potentialet $V(x)$. Først vil vi imidlertid finde den fouriertransformerede af den dobbelt afledte af en vilkårlig funktion $f(x)$.

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) f''(x) dx \\ &= \exp(-i\kappa x) f'(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - i\kappa \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) f'(x) dx \\ &= \exp(-i\kappa x) f'(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - i\kappa \exp(-i\kappa x) f(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \kappa^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) f(x) dx \\ &= -\kappa^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) f(x) dx \end{aligned} \quad (98)$$

idet det ved sidste lighedstegn er antaget⁴³, at $f(x)$ samt alle dens afledte går mod nul, når $x \rightarrow \pm\infty$.

En Fouriertransformation af (25) giver nu

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) \left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) G(x, x_0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) \delta(x - x_0) dx \Leftrightarrow \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) E G(x, x_0) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 G(x, x_0) dx = \exp(-i\kappa x_0) \Leftrightarrow \\ & E \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) G(x, x_0) dx - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\kappa x) G(x, x_0) dx = \exp(-i\kappa x_0) \Leftrightarrow \\ & \tilde{G}(\kappa, x_0) = \frac{\exp(-i\kappa x_0)}{\left(E - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \right)} = \frac{2m \exp(-i\kappa x_0)}{\hbar^2 (k^2 - \kappa^2)} \end{aligned} \quad (99)$$

⁴³Senere, ved (107), bliver denne antagelse retfærdiggjort for det konkrete eksempel med Greensfunktionen.

idet $\tilde{G}(\kappa, x_0)$ er den Fouriertransformerede af $G(x, x_0)$ og $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, hvilket er, hvad (7) vil give, hvis man ser bort fra den transverse del. Vi vil nu Fouriertransformere tilbage for at finde et udtryk for $G(x, x_0)$.

$$\begin{aligned} G(x, x_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\kappa x) \tilde{G}(\kappa, x_0) d\kappa \\ &= \frac{m}{\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\kappa(x-x_0))}{(k^2 - \kappa^2)} d\kappa \end{aligned} \quad (100)$$

På grund af singulariteten i $\kappa = \pm k$ har (100) ikke en løsning. Imidlertid indføres her et trick, nemlig at lade k have en lille kompleks del, altså $k \rightarrow k + i\epsilon$, hvor ϵ går mod nul. Det vil sige at

$$G(x, x_0) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\kappa(x-x_0))}{((k+i\epsilon)^2 - \kappa^2)} d\kappa \quad (101)$$

$G(x, x_0)$ vil antage forskellige værdier alt efter fortegnet på ϵ . Integralet løses ved hjælp af konturintegration⁴⁴. Essensen af konturintegration ligger i residueformlen

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_j R_j \quad (102)$$

Hvor R_j er $f(z)$'s residuer⁴⁵ indenfor konturen C . Et integral fra $-\infty$ til ∞ kan omskrives til et konturintegral ved at lukke kurven med en halvcirkelbue i enten den positive eller negative del af den komplekse plan, hvorefter man lader $r \rightarrow \infty$. Det ses af (101), at funktionen har singulariteter i $\kappa = \pm(k+i\epsilon)$. Residuerne i disse punkter findes til

$$R \left(\frac{\exp(i\kappa(x-x_0))}{((k+i\epsilon)^2 - \kappa^2)} \right) = \begin{cases} \frac{-\exp(ik(x-x_0))}{2(k+i\epsilon) \exp((x-x_0)\epsilon)} & \text{i } \kappa = k+i\epsilon \\ \frac{\exp(-ik(x-x_0))}{2(k+i\epsilon) \exp(-(x-x_0)\epsilon)} & \text{i } \kappa = -k-i\epsilon \end{cases} \quad (103)$$

Det ses, at der ligger et enkelt residuum i hvert halvplan, så man kan se bort fra summen i (102)

Konturintegration kan kun benyttes, hvis den integrerede funktion går imod 0 hurtigere end $\frac{1}{r}$, da integralet over cirkelbuen ellers vil blive uendeligt. Hvis $(x-x_0) > 0$, skal cirkelbuen gå gennem det positive komplekse plan, og ellers skal den gå

⁴⁴Se MMP afsnit 20.14 til 20.18

⁴⁵Et residuum for en funktion er det led i Laurent-rækken, der har orden -1 . Residuer er kun forskellige fra nul i singulariteter. Se MMP afsnit 20.13

gennem det negative. For $(x - x_0) > 0$ gælder at

$$\begin{aligned}
G(x, x_0) &= \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\kappa(x - x_0))}{((k + i\epsilon)^2 - \kappa^2)} d\kappa \\
&= \frac{m}{\pi \hbar^2} \left(\oint_{C^+} \frac{\exp(i\kappa(x - x_0))}{((k + i\epsilon)^2 - \kappa^2)} d\kappa - \int_0^\pi r \frac{\exp(ir(\cos \theta + i \sin \theta)(x - x_0))}{((k + i\epsilon)^2 - r^2(\cos \theta + i \sin \theta)^2)} d\theta \right) \\
&= \frac{m}{\pi \hbar^2} (2\pi i R - 0) \\
&= \frac{2im}{\hbar^2} R
\end{aligned} \tag{104}$$

og for $(x - x_0) < 0$ gælder, at

$$\begin{aligned}
G(x, x_0) &= \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\kappa(x - x_0))}{((k + i\epsilon)^2 - \kappa^2)} d\kappa \\
&= \frac{m}{\pi \hbar^2} \left(- \oint_{C^-} \frac{\exp(i\kappa(x - x_0))}{((k + i\epsilon)^2 - \kappa^2)} d\kappa + \int_\pi^{2\pi} r \frac{\exp(ir(\cos \theta + i \sin \theta)(x - x_0))}{((k + i\epsilon)^2 - r^2(\cos \theta + i \sin \theta)^2)} d\theta \right) \\
&= \frac{m}{\pi \hbar^2} (-2\pi i R - 0) \\
&= \frac{-2im}{\hbar^2} R
\end{aligned} \tag{105}$$

hvor man ved andet lighedstegn har substitueret $\kappa = r(\cos(\theta) + i \sin(\theta))$ og ved tredje lighedstegn har ladet $r \rightarrow \infty$.

Men hvilke af de to residuer skal indsættes hvor? Hvis $\epsilon > 0$ og $(x - x_0) > 0$, eller hvis $\epsilon < 0$ og $(x - x_0) < 0$, er det residuet i $\kappa = k + i\epsilon$, og hvis $\epsilon < 0$ og $(x - x_0) > 0$, eller hvis $\epsilon > 0$ og $(x - x_0) < 0$, er det det i $\kappa = -k - i\epsilon$. Disse residuer kan nu sættes ind i (104) og (105), og så fås

$$G(x, x_0) = \begin{cases} \frac{im}{\hbar^2} \frac{-\exp(ik(x-x_0))}{(k+i\epsilon) \exp((x-x_0)\epsilon)} & \text{hvis } (x - x_0) > 0 \text{ og } \epsilon > 0 \\ \frac{im}{\hbar^2} \frac{-\exp(-ik(x-x_0))}{(k+i\epsilon) \exp(-(x-x_0)\epsilon)} & \text{hvis } (x - x_0) < 0 \text{ og } \epsilon > 0 \\ \frac{im}{\hbar^2} \frac{\exp(-ik(x-x_0))}{(k+i\epsilon) \exp(-(x-x_0)\epsilon)} & \text{hvis } (x - x_0) > 0 \text{ og } \epsilon < 0 \\ \frac{im}{\hbar^2} \frac{\exp(ik(x-x_0))}{(k+i\epsilon) \exp((x-x_0)\epsilon)} & \text{hvis } (x - x_0) < 0 \text{ og } \epsilon < 0 \end{cases} \tag{106}$$

hvilket kan forkortes til

$$G(x, x_0) = \begin{cases} \frac{im}{\hbar^2} \frac{-\exp(ik|x-x_0|)}{(k+i\epsilon) \exp(|x-x_0|\epsilon)} & \text{hvis } \epsilon > 0 \\ \frac{im}{\hbar^2} \frac{\exp(-ik|x-x_0|)}{(k+i\epsilon) \exp(-|x-x_0|\epsilon)} & \text{hvis } \epsilon < 0 \end{cases} \tag{107}$$

Det ses, at kun den øverste af disse to funktioner opfylder kravet i (98) om, at $G(x) \rightarrow 0$ for $x \rightarrow \pm\infty$, men det er imidlertid også kun den, der bruges, hvilket vil blive klart straks.

Lader man $\epsilon \rightarrow 0$ bliver Greensfunktionen til

$$G(x, x_0) = \begin{cases} -\frac{im}{\hbar^2 k} \exp(ik(x - x_0)) & \text{hvis } \epsilon = 0^+ \\ \frac{im}{\hbar^2 k} \exp(-ik(x - x_0)) & \text{hvis } \epsilon = 0^- \end{cases} \quad (108)$$

Den Greensfunktion, der blev fundet i (30), svarer, hvis man, som her, ser bort fra den transverse del $\frac{2}{b} \sin(n\pi y_0/b) \sin(n\pi y/b)$, til den Greensfunktion, der hører til $\epsilon = 0^+$. Det vil sige, at

$$G^R \leftrightarrow (\epsilon > 0) \quad \text{og} \quad G^A \leftrightarrow (\epsilon < 0) \quad (109)$$

jævnfør den notation⁴⁶, der blev nævnt i fodnoten til (30). At kun den retarderede Greensfunktion opfylder grænsebetingelserne afspejler netop, at det er den af de to Greensfunktioner, der afspejler den fysiske virkelighed.

Det vil altså sige, at den funktion, der gennem det meste af opgaven er kaldt $G(\bar{r})$, men som er den retarderede Greensfunktion, i virkeligheden har en "skjult" positiv, men uendeligt lille imaginærdel i k . Ikke ofte er der brug for denne, derfor er den ikke nævnt i selve opgaven, men i integralet i ligning (92) i "Appendiks om selvenergi", har man brug for denne imaginærdel igen. Indfører man $k \rightarrow k + i\epsilon$ lyder dette integral

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \frac{\sin^2(\kappa x)}{(k + i\epsilon)^2 - \kappa^2} d\kappa \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty \frac{2 \cos(2\kappa x) - 2}{-4 \cdot ((k + i\epsilon)^2 - \kappa^2)} d\kappa \\ &= -\frac{1}{4} \left(\int_{-\infty}^\infty \frac{\exp(2i\kappa x)}{(k + i\epsilon)^2 - \kappa^2} d\kappa - \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{(k + i\epsilon)^2 - \kappa^2} d\kappa \right) \end{aligned} \quad (110)$$

Begge disse integraler kan nu løses med konturintegration ligesom (101). Residuerne kan findes til

$$R \left(\frac{\exp(2i\kappa x)}{(k + i\epsilon)^2 - \kappa^2} \right) = \begin{cases} \frac{-\exp(2i\kappa x)}{2(k+i\epsilon)\exp(2x\epsilon)} & \text{i } \kappa = k + i\epsilon \\ \frac{\exp(-2i\kappa x)}{2(k+i\epsilon)\exp(-2x\epsilon)} & \text{i } \kappa = -k - i\epsilon \end{cases} \quad (111)$$

$$R \left(\frac{1}{(k + i\epsilon)^2 - \kappa^2} \right) = \begin{cases} \frac{-1}{2(k+i\epsilon)} & \text{i } \kappa = k + i\epsilon \\ \frac{1}{2(k+i\epsilon)} & \text{i } \kappa = -k - i\epsilon \end{cases} \quad (112)$$

Integralet i (111) kan nu udregnes ved brug af residueformlen (102). Hvis x er positiv, skal halvcirkelbuen gå gennem den positive halvplan, og ellers gennem den negative.

⁴⁶Faktisk er det dette, der er definitionerne af den retarderede og avancerede Greensfunktion.

Bruges nu residueformlen (102), og lader man $\epsilon \rightarrow 0$, kan integralet for hvert tilfælde, udregnes til

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{\sin^2(\kappa x)}{(k+i\epsilon)^2 - \kappa^2} d\kappa &= -\frac{1}{4} \left(2\pi i \frac{-\exp(2ikx)}{2k} - 2\pi i \frac{-1}{2k} \right) \\ &= \frac{\pi i}{4k} (\exp(2ikx) - 1) \\ &= \frac{-\pi}{2k} \exp(ikx) \sin(kx) \end{aligned} \quad (113)$$

hvis $x > 0$, og til

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{\sin^2(\kappa x)}{(k+i\epsilon)^2 - \kappa^2} d\kappa &= -\frac{1}{4} \left(-2\pi i \frac{\exp(-2ikx)}{2k} + 2\pi i \frac{1}{2k} \right) \\ &= \frac{\pi i}{4k} (\exp(-2ikx) - 1) \\ &= \frac{-\pi}{2k} \exp(-ikx) \sin(-kx) \end{aligned} \quad (114)$$

hvis $x < 0$. Disse to kan sammenkobles i det generelle udtryk

$$\int_0^\infty \frac{\sin^2(\kappa x)}{(k+i\epsilon)^2 - \kappa^2} d\kappa = \frac{-\pi}{2k} \exp(ik|x|) \sin(k|x|) \quad (115)$$

Indsættes dette i (92), fås netop (93), præcis som postuleret i "Appendiks om sel-venergi".

G Appendiks om programmet

Koden til det program, der kan udregne den elektriske strømstyrke, findes i "Appendiks med kildekoden". Her vil der blive givet en overfladisk beskrivelse af det, der skal fungere som manual, og også kunne give læseren en forståelse af dets opbygning.

Programmet er lavet i matematikprogrammet matlab, og det kan ikke køre, uden at matlab er installeret. Programmet startes ved at aktivere den fil, der hedder "strom.m", hvilket kan gøres ved at lægge alle programfilerne i undermappen "work" i matlabs mappe og skrive "strom" i matlabs prompt. Programmet består af et antal såkaldte M-filer. M-filer er filer, der indeholder matlabkode, og de findes i to former: kodefiler og funktionsfiler⁴⁷. Kodefiler indeholder matlabkode, der vil blive kørt når M-filens navn skrives i prompten, mens funktionsfiler indeholder erklæringer af funktioner. Dette program består af en kodefil og et antal funktionsfiler. Kodefilen hedder konstant.m, og i den er erklæret alle konstanter og parametre til brug i programmet. Konstanterne, såsom \hbar og k_B bør der ikke ændres på, mens parametrene

⁴⁷Script M-files og function M-files

U , T , b , a , $Bmax$, $Lang$, EF , ryk , $mmax$, $grattal$ og $ligger$ kan varieres efter behov. U og T er henholdsvis den eksterne spænding og temperaturen. b og a er bredden af ledningen og den interatomare afstand i ledningen. $Bmax$ og $Lang$ er den maksimale bredde af prøven, og længden af prøven. EF er Fermienergien i ledningen og ryk er positioneringen af μ_1 og μ_2 i forhold til E_F , således at $\mu_2 = E_F + e \cdot ryk \cdot U$. $mmax$ er det maksimale antal modi, der regnes med i summerne i (44) og (51); man kan sætte den så højt man lyster, men størrelsen har stor indflydelse på den tid, det tager at eksekvere programmet. $grattal$ er det antal punkter der tages med i integrationen; har man flere punkter får man en præcisere integration, men tiden det tager at eksekvere programmet er proportional med $grattal$. $ligger$ er en parameter, der skal sættes til 1, hvis grænsen mellem graphenstykket og ledningerne er "zig-zag", og til 2 hvis den er "armchair"⁴⁸. Desuden kan man ændre i funktionsfilerne "Gmin.m", "Gmax.m" og "V.m". De definerer henholdsvis den nedre og den øvre grænse for prøven samt det interne potential i prøven. De fleste af de øvrige M-filer udfører de store og små udregninger, der skal til for at finde strømmen. Ikke alle disse M-filer vil blive beskrevet her, men de vigtigste vil blive gennemgået i korte træk. De to filer "konverter.m" og "konverterb.m" omregner graphenens struktur til et endimensionalt array, som skal bruges til udregning af matricerne i (42). "konverter.m" bruges, hvis graphenen har zig-zag-placering, og "konverterb.m" bruges, hvis den har armchair-placering⁴⁹. Al matrixregningen udføres af filen "regne.m", der på basis af ovennævnte endimensionale array, udregner transmissionsfunktionen. Funktionen "indmad.m" ganger fermifunktionerne fra (24) på, og endelig udfører "strom.m" integralet ved hjælp af "Eulers metode" for til slut at udregne strømmen.

Til slut skal nævnes nogle hjælpefunktioner, som ikke direkte indgår i programmet, men som er nyttige. Det drejer sig om funktionerne "kontrol.m", "tegn.m" og "trans.m". "kontrol.m" kontrollerer, om "Gmin.m", "Gmax.m", "V.m" samt parametre i "konstant.m" er defineret korrekt. "tegn.m" tegner det graphenstykke, der arbejdes på, og "trans.m" giver transmissionsfunktionen i en form, der kan plottes med matlabs plotfunktion.

H Appendiks med kildekoden

fermi.m

```
function ud = fermi(E,mu)
```

```
konstant;
```

```
z = 1/(1 + exp((E-mu)/(kB*T)));
```

⁴⁸De to placeringer ses på figur 4

⁴⁹Sådan set kan de fleste dele af programmet også bruges til at regne på andre materialer end graphen med kun små ændringer. Undtagelsen er netop "konverter.m" og "konverterb.m", der implementerer graphens struktur.

```
ud = z;
```

FRA.m

```
function r = FRA(X, Y, Z)
% Denne funktion kan omregne fra graphens koordinatsystem
% til kartetiske koordinater ved zig-zag-struktur

konstant;          % Inkluderer konstanterne

r(1,1) = ap*((3/2)*X + (1/2)*Z);
r(1,2) = ap*((sqrt(3)/2)*X + sqrt(3)*Y + (sqrt(3)/2)*Z);
```

FRAb.m

```
function r = FRAb(X, Y, Z)
% Denne funktion kan omregne fra graphens koordinatsystem
% til kartetiske koordinater ved armchair-struktur

konstant;          % Inkluderer konstanterne

r(1,1) = ap*(sqrt(3)*X + (sqrt(3)/2)*Y + (sqrt(3)/2)*Z );
r(1,2) = ap*( (3/2)*Y + (1/2)*Z );
```

Gmax.m

```
function ud = Gmax(X)
% Dette er den funktion, der markerer den øvre grænse for prøven.

konstant;          % Inkluderer konstanterne
x = X/Lang;        % skalerer x-aksen

if x<0.5
    y = 1 - spids*2*x;
else
    y = spids*2*x + 1 - 2*spids;
end

% Dette er funktionen. Den skal defineres således at
% den holder sig mellem x=0 og x=1 og y=-1 og y=1.
% Det er den øvre grænse, så den bør nok have
% positive værdier i hele intervallet.
```



```
Y = 0.5 * Bmax * y; % Skalerer y-aksen
```

```
ud = Y;
```

Gmin.m

```
function Y = Gmin(X)
```

```
% Dette er den funktion, der markerer den nedre grænse for prøven.
```

```
konstant; % Inkluderer konstanterne
```

```
x = X/Lang; % skalerer x-aksen
```

```
if x<0.5
```

```
    y = spids*2*x - 1;
```

```
else
```

```
    y = -spids*2*x - 1 + 2*spids;
```

```
end
```

```
    % Dette er funktionen. Den skal defineres således at
```

```
    % den holder sig mellem x=0 og x=1 og y=-1 og y=1.
```

```
    % Det er den nedre grænse, så den bør nok have
```

```
    % negative værdier i hele intervallet.
```

```
Y = 0.5 * Bmax * y; % Skalerer y-aksen
```

indmad.m

```
function ud = indmad(E)
```

```
konstant;
```

```
z = size(E);
```

```
for n = 1:z(1)
```

```
    for m = 1:z(2)
```

```
        tra(n,m) = (fermi(E(n,m),muto)-fermi(E(n,m),muet))*regne(E(n,m));
```

```
    end
```

```
end
```

```
ud = tra;
```

ken.m

```
function ud = ken(E,n)

konstant;

k = sqrt( (2*me*E)/(hbar^2) - (n^2 * pi^2)/(b^2) );

ud = k;
```

konstant.m

```
%I denne fil er listet alle konstanter til brug i opgaven, både
%naturkonstanter og parametre. Alle værdier er i SI-enheder.
```

```
%Først kommer parametrene som man frit kan variere:
```

```
    U = 1;           % Pålagt spænding. Må gerne være negativ
    T = 5;           % Temperatur i *Kelvin
    b = 3*10^(-9);   % Bredden af ledningen
    a = 2.5*10^(-10); % Den interatomare afstand i ledningen
    Bmax = 2.5*10^(-9); % Maximal bredde af prøven
    Lang = 5*10^(-9); % Længde af prøven

    EF = 5*1.6*10^(-19); % Fermienergien i ledningen, også epsilon

    ryk = 0.5;       % Muet = EF - e*(1-ryk)*U
    mmax = 50;       % Antal af modi der maksimalt medregnes
    grattal = 100;   % Antallet af punkter i integrationen.
    ligger = 1;      % Skal være 1 hvis graphenstykket ligger zigzag,
                    % og 2 hvis det ligger armchair.

    spids = 0.2;
% spids er længden af spidsen ind i graphenstykket (en bonusvariabel)
```

```
% Desuden kan man frit variere udtrykkene for Gmin, Gmax og V der
% er defineret som funktioner andetsteds.
```

```
% Så følger naturkonstanterne der ikke bør pilles ved:
```

```
    h = 6.62606*10^(-34); % Plancks konstant
    hbar = 1.05457*10^(-34); % h-streg
```

```

me = 9.10939*10^(-31); % Elektronens masse
e = 1.60218*10^(-19); % Elementarladningen
kB = 1.38066*10^(-23); % Boltzmanns konstant

ap = 1.415*10^(-10); % Den interatomare afstand i graphen
Kgam = 3*1.6*10^(-19); % Værdien af 'gamma'

%til slut følger de afledte konstanter. Udtrykkene for dem bør der heller
%ikke ændres på.

muet = EF - (1-ryk)*e*U; % Pot_e ved den første leder
muto = EF + ryk*e*U; % Pot_e ved den anden leder
Emax = muto + 10*kB*T; % Den energi, hvorover ff ca. = nul.
Emin = muet - 10*kB*T; % Den energi, hvorunder ff ca. = en.

```

kontrol.m

```

function z = kontrol(nada)
% Denne funktion kontrollerer Gmin og Gmax

konstant; % Inkluderer konstanterne

rekke = 0:0.001*Lang:Lang;

for n=1:1001 % Kontrol af Gmin og Gmax
    gamma = rekke(n);
    alfa = Gmin(gamma);
    beta = Gmax(gamma);
    if alfa > beta
        z = -1;
        'Nej nej, Gmin skal være mindre end Gmax i alle punkter'
        return
    end
    if alfa < -0.5*Bmax
        z = -1;
        'Nej nej, Gmin skal være større end -1 i alle punkter'
        return
    end
    if beta > 0.5*Bmax
        z = -1;
        'Nej nej, Gmax skal være mindre end 1 i alle punkter'
        return
    end
end

```

```

        end
    end

    rak = 0:0.1*Lang:Lang;
    soj = -0.5*Bmax:0.1*Bmax:0.5*Bmax;
    for n=1:11          % Kontrol af V
        for m=1:11
            pot = V(rak(n),soj(m));
            if pot - Re(pot) ~= 0
                'Nej nej, V skal være reel i hele intervallet'
                return
            end
        end
    end

    end
end

if ligger ~= 0
    if ligger == 1
        'Nej nej, ligger skal være enten 0 eller 1'
    end
end

if ryk < 0
    'Nej nej, ryk skal ligge mellem 0 og 1'
end
if ryk > 1
    'Nej nej, ryk skal ligge mellem 0 og 1'
end
end

```

konverter.m

```

function z = konverter(nada)
% Denne funktion udvælger de punkter på graphengitteret der ligger på
% prøven, når den ligger som zig-zag

konstant;          % Inkluderer konstanterne

OV = TIL(0,0.5*Bmax);
NH = TIL(Lang,-0.5*Bmax);

Xmin = -2;
Xmax = round(NH(1)+2.5);
Ymin = round(NH(2)-2.5);
Ymax = round(OV(2)+2.5);

```

```

rykX = -Xmin + 1;
rykY = -Ymin + 1;

NYXmax = Xmax + rykX;
NYYmax = Ymax + rykY;

for n = 1:NYXmax      % Finder de punkter, der ligger på prøven.
    for m = 1:NYYmax
        her1 = FRA((n-rykX),(m-rykY),0);
        if her1(1) < 0
            git(n,m,1)=0;
        elseif her1(1) > Lang
            git(n,m,1)=0;
        elseif her1(2) < Gmin(her1(1))
            git(n,m,1)=0;
        elseif her1(2) > Gmax(her1(1))
            git(n,m,1)=0;
        else
            git(n,m,1)=1;
        end
        her2 = FRA((n-rykX),(m-rykY),1);
        if her2(1) < 0
            git(n,m,2)=0;
        elseif her2(1) > Lang
            git(n,m,2)=0;
        elseif her2(2) < Gmin(her2(1))
            git(n,m,2)=0;
        elseif her2(2) > Gmax(her2(1))
            git(n,m,2)=0;
        else
            git(n,m,2)=1;
        end
    end
end

J = 0;
for n = 1:NYXmax      % Omskriver til graphenkoordinater
    for m = 1:NYYmax
        if git(n,m,1) == 1
            J = J+1;
            rit = FRA((n-rykX),(m-rykY),0);
            outp(J,1) = rit(1);
        end
    end
end

```

```

        outp(J,2) = rit(2);
        outp(J,3) = git(n,m,2) + git((n-1),m,2) + git(n,(m-1),2);
    end
    if git(n,m,2) == 1
        J = J+1;
        rit = FRA((n-rykX),(m-rykY),1);
        outp(J,1) = rit(1);
        outp(J,2) = rit(2);
        outp(J,3) = git(n,m,1) + git((n+1),m,1) + git(n,(m+1),1);
    end
end
end
end

z = outp;

```

konverterb.m

```

function z = konverterb(nada)
% Denne funktion udvælger de punkter på graphengitteret, der ligger på
% prøven, når den ligger som armchair.

```

```

konstant;          % Inkluderer konstanterne

```

```

OV = TILb(0,0.5*Bmax);
NH = TILb(Lang,-0.5*Bmax);

```

```

Xmin = round(OV(1)-2.5);
Xmax = round(NH(1)+2.5);
Ymin = round(NH(2)-2.5);
Ymax = round(OV(2)+2.5);

```

```

rykX = -Xmin + 1;
rykY = -Ymin + 1;

```

```

NYXmax = Xmax + rykX;
NYYmax = Ymax + rykY;

```

```

for n = 1:NYXmax          % Finder de punkter, der ligger på prøven.
    for m = 1:NYYmax
        her1 = FRAb((n-rykX),(m-rykY),0);
        if her1(1) < 0
            git(n,m,1)=0;
        elseif her1(1) > Lang

```

```

        git(n,m,1)=0;
elseif her1(2) < Gmin(her1(1))
        git(n,m,1)=0;
elseif her1(2) > Gmax(her1(1))
        git(n,m,1)=0;
else
        git(n,m,1)=1;
end
her2 = FRAb((n-rykX),(m-rykY),1);
if her2(1) < 0
        git(n,m,2)=0;
elseif her2(1) > Lang
        git(n,m,2)=0;
elseif her2(2) < Gmin(her2(1))
        git(n,m,2)=0;
elseif her2(2) > Gmax(her2(1))
        git(n,m,2)=0;
else
        git(n,m,2)=1;
end
end
end

J = 0;
for n = 1:NYXmax          % Omskriver til graphenkoordinater
    for m = 1:NYYmax
        if git(n,m,1) == 1
            J = J+1;
            rit = FRAb((n-rykX),(m-rykY),0);
            outp(J,1) = rit(1);
            outp(J,2) = rit(2);
            outp(J,3) = git(n,m,2) + git((n-1),m,2) + git(n,(m-1),2);
        end
        if git(n,m,2) == 1
            J = J+1;
            rit = FRAb((n-rykX),(m-rykY),1);
            outp(J,1) = rit(1);
            outp(J,2) = rit(2);
            outp(J,3) = git(n,m,1) + git((n+1),m,1) + git(n,(m+1),1);
        end
    end
end
end
end

```

```
z = outp;
```

re.m

```
function y = re(x)
```

```
a = (x+x')/2;
```

```
y = a;
```

regne.m

```
function ud = regne(E)
```

```
konstant;
```

```
if ligger == 1
```

```
    liste = konverter;
```

```
elseif ligger == 2
```

```
    liste = konverterb;
```

```
else
```

```
    'variablen "liste" skal være enten en eller to.'
```

```
    return
```

```
end
```

```
stor = size(liste);
```

```
z = stor(1);
```

```
XMIN = liste(1,1);
```

```
XMAX = liste(1,2);
```

```
for n = 1:z % Dette her finder den største og mindste værdi for x
```

```
    if liste(n,1) < XMIN
```

```
        XMIN = liste(n,1);
```

```
    elseif liste(n,1) > XMAX
```

```
        XMAX = liste(n,1);
```

```
    end
```

```
end
```

```
K = (hbar^2 * pi^2)/(2*me*b^2); %Energien af den første modus
```

```
if (K*(mmax+1)^2) < E
```

```
    'Pas på, ikke alle modi er medregnet'
```

```
    % Ser, om mmax er høj nok (eller om energien er for høj)
```

```
end
```



```

end
if liste(n,1) > (XMAX - 0.1*ap)      % Dette her er fra ledning 2
    if liste(m,1) > (XMAX - 0.1*ap)
        yledn = liste(n,2) + 0.5*b;
        yledm = liste(m,2) + 0.5*b;
        if yledn > 0
            if yledn < b
                if yledm > 0
                    if yledm < b
                        for o = 1:mmax
SelvR(n,m) = SelvR(n,m)-med(o)*(hbar^2)/(me*a*b)*sin((o*pi*yledn)/b)*
sin((o*pi*yledm)/b) * exp(i * a * ken(E,o)); %selvenergien
Gamma2(n,m) = Gamma2(n,m)+med(o)*(2*hbar^2)/(me*a*b)*sin((o*pi*yledn)/b)*
sin((o*pi*yledm)/b) * sin(a*ken(E,o)); %Gamma2
                        end
                    end
                end
            end
        end
    end
end
end
end
end
end
end
end
end
end
end

Energ = E*eye(z,z);
GRI = Energ - H - SelvR;
GR = inv(GRI);
GA = GR';
Mat = GR*Gamma2*GA*Gamma1;

trans = 0;
for n = 1:z      % tager sporet
    trans = trans + Mat(n,n);
end

ud = re(trans);

```

strom.m

```
function ud = gration
```

```
konstant;
```

```

ant = grattal;

dx = (U*e)/ant;
tal = (Emin+0.5*dx):dx:Emax;

vald = indmad(tal);
gral = dx*sum(vald);

z = (2*e/h)*gral;

ud = z;

```

tegne.m

```

function ud = tegn(nada)

K = 0;

konstant;

if ligger == 1
    liste = konverter;
elseif ligger == 2
    liste = konverterb;
else
    'variablen "liste" skal være enten en eller to.'
    return
end

Z = size(liste);

xx(1)=0;
yy(1)=0;

for n = 1:Z(1)
    K = K+1;
    xx(K) = liste(n,1);
    yy(K) = liste(n,2);
end

plot(xx,yy, '. ')

```

TIL.m

```
function r = TIL(x, y)
% Denne funktion kan omregne fra kartetiske koordinater til graphens
% koordinatsystem ved zig-zag-struktur
```

```
konstant;          % Inkluderer konstanterne
```

```
r(1,1) = (1/ap)*(2/3)*x;
r(1,2) = (1/ap)*((1/sqrt(3))*y - (1/3)*x);
```

TILb.m

```
function r = TILb(x, y)
% Denne funktion kan omregne fra kartetiske koordinater til graphens
% koordinatsystem ved armchair-struktur
```

```
konstant;          % Inkluderer konstanterne
```

```
r(1,1) = (1/ap)*((1/sqrt(3))*x - (1/3)*y );
r(1,2) = (1/ap)*((2/3)*y );
```

trans.m

```
function ud = trans(E)
```

```
z = size(E);
```

```
for n = 1:z(1)
    for m = 1:z(2)
        tra(n,m) = regne(E(n,m));
    end
end
```

```
ud = tra;
```

V.m

```
function ud = V(X,Y)
% Dette er funktionen, der giver værdien af potentialet
% V på graphengitteret.
```

```
konstant;          % Inkluderer konstanterne
```

```
x = X/Lang;          % skalerer x-aksen
y = (2*Y)/Bmax;     % skalerer y-aksen

z = 0;
% Dette er funktionen for potentialet. Angives i elektronvolt.
% Intervallet mellem x=0 og x=1 og y=-1 og y=1 svarer til
% intervallet mellem X=0 og X=Lang og Y=-0.5*Bmax og Y=0.5*Bmax.

ud = e*z;
```

I Kildeoversigt

ETM

Supriyo Datta

Electronic Transport in Mesoscopic Systems

Cambridge university press

ISBN 0 521 59943

PCS

Stephen Elliott

The Physics and Chemistry of Solids

John Wiley & Sons

ISBN-13: 978-0-471-98195-4

MMP

K.F. Riley, M.P. Hobson & S.J. Bence

Mathematical Methods for Physics and Ingeneering

Cambridge university press

ISBN 0 521 89067 5

PAM

B.H. Brandsen & C.J. Joachain

Physics of Atoms and Molecules

Prentice Hall

ISBN-13: 978-0-582-35692-4

ECF

Andrey K. Geim & Allan H. MacDonald

Graphene: Exploring carbon flatland

Physics Today: Aug. 2007

http://onnes.ph.man.ac.uk/nano/Publications/Phystoday_2007.pdf

CDM

Anders Mathias Lunde

Coulomb Drag in Multiwall Carbon Nanotubes

<http://www.fys.ku.dk/flensberg/students/AMLspeciale.pdf>