9.5.07

$$H_S = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$$

Vielteilchenzustände des Systems

$$\mathcal{H}_{SB} = \sum_{ik} V_{k\alpha i}\, c^\dagger_{k\alpha}\, \hat{s}_i + h.c.$$

$$\hat{s}_i = |0\rangle\langle i|$$

Damit Herleitung von

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = -\sum_{k\alpha = L/R} \int_0^t dt'\, g_{k\alpha}(t-t') \times$$

$$\times \left\{ \tilde{s}(t)\,\tilde{s}^{\dagger}(t')\,\tilde{\rho}(t') - \tilde{s}(t')\,\tilde{\rho}(t')\,\tilde{s}(t) \right\}$$

$$= \sum$$

$$= \sum$$

$$= \sum$$

hier $\quad g_{k\alpha}(\tau) \equiv |V_{k\alpha}|^2 f_\alpha(\varepsilon_k)\, e^{i\varepsilon_k \tau}$

Die k-Summen umwandeln:

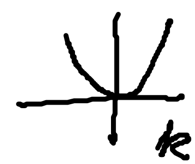
$$\sum_k |V_{k\alpha}|^2 f_\alpha(\varepsilon_k)\, e^{i\varepsilon_k (t-t')} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, \nu_\alpha(\varepsilon)\, f_\alpha(\varepsilon)\, e^{i\varepsilon(t-t')}$$

$$\nu_\alpha(\varepsilon) \equiv \sum_k |V_{k\alpha}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

„Tunnel-Zustandsdichte"

Zustandsdichte: $\quad \nu_Z(\varepsilon) \equiv \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$

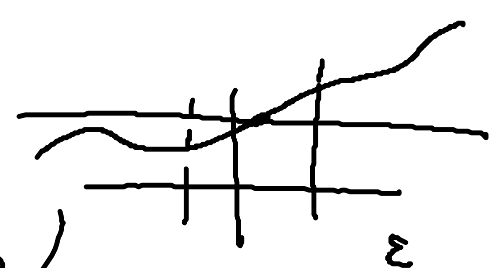


ÜA: Berechnen in $d = 1, 2, \ldots D$ Dimensionen für $\varepsilon_k = k^2$

$(2m = \hbar = 1)$

• Jetzt z.B. Annahmen über $\nu_\alpha(\varepsilon)$,

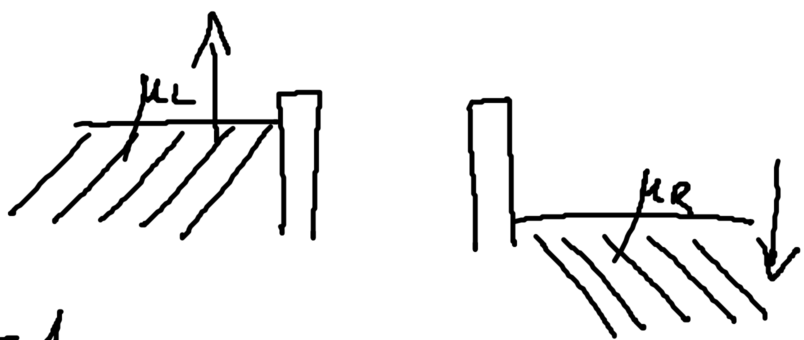
z.B. $\quad \nu_\alpha(\varepsilon) = \nu_\alpha \equiv \Gamma_\alpha / 2\pi$



mit konstanten Tunnelraten

$$\Gamma_\alpha \equiv 2\pi \sum_k |V_{k\alpha}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k).$$

- „Infinite Bias Limit"



$\mu_L \to +\infty$

$\mu_R \to -\infty$

Damit $f_L(\varepsilon) = 1$

$f_R(\varepsilon) = 0$

Dann
$$\sum_{L\,k} |V_{kL}|^2 f^L(\varepsilon_k)\, e^{i\varepsilon_k(t-t')}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \underbrace{\nu_L(\varepsilon)}_{\Gamma_L/2\pi} \underbrace{f^L(\varepsilon)}_{1} e^{i\varepsilon(t-t')}$$
$$= \frac{1}{2\pi}\Gamma_L \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, e^{i\varepsilon(t-t')} = \underline{\Gamma_L\, \delta(t-t')}$$

Jetzt
$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = - \underbrace{\int_0^t dt'\, \delta(t-t')}\ \cdots$$

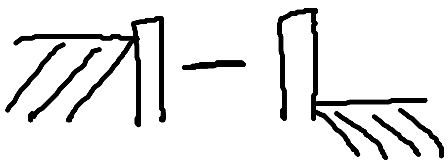
<u>Beachte:</u>
$$\int_0^t dt'\, f(t')\, \delta(t-t') = \frac{1}{2} f(t)$$
(Zeigen mittels Delta-Folge) ÜA

Damit
$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = -\frac{\Gamma_L}{2} \left\{ \tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}(t) - \right.$$

$$2\tilde{s}(t)^{\dagger}\tilde{\rho}(t)\tilde{s}(t) + \tilde{\rho}(t)\tilde{s}(t)\tilde{s}^{\dagger}(t)\}$$

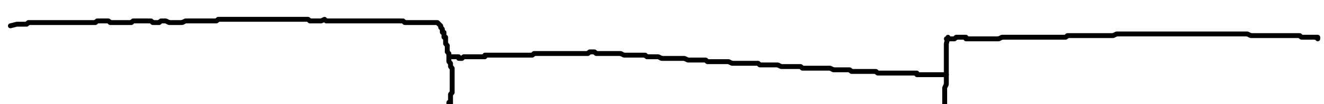
$$-\frac{\Gamma_R}{2}\{ \qquad \},$$

d.h. Master-Gleichung in Lindblad-Form.
(Markov-Näherung hier exakt)



1.5 NEMS (Nano-elastomechanische Systeme)

Beispiele: – Elektronischer Transport mit mechanischen Freiheitsgraden.
– „Molekularelektronik"
– „



Carbon-Nanotubes

$$\left(\frac{m}{M}\right)^{1/4}$$

Moleküle – Born-Oppenheimer
– Franck-Condon

Model-Hamiltonian

Zustände

vibronische Zustände

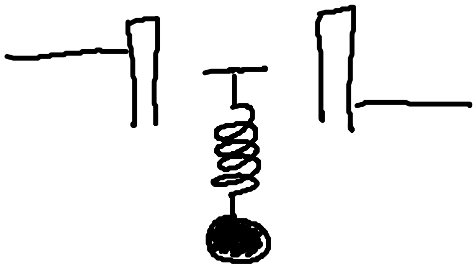
$$|i\rangle \otimes |n\rangle$$

elektronische

Einfachster Systemhamiltonian $\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_e + \hbar\Omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) + \mathcal{H}_{eph}$

$[a, a^\dagger] = 1$; $\quad a|0\rangle_{ph} = 0$

$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$



Damit $\mathcal{H}_S = \sum_{i,n} \varepsilon_{in} |in\rangle\langle in|$

Jetzt Mastergleichung; $\mathcal{H}_V = \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}\, c^\dagger_{k\alpha}\, \hat{s} + h.c.$

Betrachte allgemeinen Ausdruck $\quad \hat{s} = |0\rangle\langle 1|$

$$d/dt\, \tilde{\rho}(t) = -\sum_{k\alpha} \int_0^t dt'\, g_{k\alpha}(t-t') \left\{ \tilde{s}(t)\tilde{s}^\dagger(t')\tilde{\rho}(t') - \dots \right\} - \dots$$

1) Nimm Matrix-Elemente dieser Gleichung, z.B.

$$\langle 0, n| \dots |0, n'\rangle$$

unbesetzter $\quad$ Osz.-Zustand

2) Explizite Zeitentwicklung der Dot $\tilde{s}(t), \tilde{s}(t)$ einsetzen

3) Rück-Trafo ins Schrödingerbild

$$\Rightarrow \left[\frac{d}{dt} - i(\varepsilon_{0n'} - \varepsilon_{0n})\right]\langle \underline{0n}|\rho(t)|\underline{0n'}\rangle =$$

$$= -\sum_{mm'\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, \gamma_\alpha(\varepsilon)\int_0^t dt' \times$$

ÜA $\quad f_\alpha(\varepsilon)\langle 0m'|\rho(t')|\underline{0n'}\rangle\langle \underline{0n}|1m\rangle\langle 1m|0m'\rangle$

$$= \sum\sum\sum \dots$$

s. Skript.

Hier treten die sog. Franck-Condon-Faktoren auf,

$\langle 0n|1m\rangle$ = Überlapp der vibronischen Wellenfunktionen vor und nach dem Tunneln der Elektronen.

Franck-Condon Prinzip: