

9.5.07

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

↑ Vielteilchenzustände
des Systems

$$H_{SB} = \sum_{ik} V_{kdi} c_{kd}^\dagger \hat{S}_i + \text{h.c.}$$
$$\hat{S}_i = |0\rangle\langle i|$$

Dank Herleitung von

$$\frac{d}{dt} \tilde{S}(t) = - \sum_{kd=L/R} \int_0^t dt' g_{kd} (t-t') \times$$

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

$$= \sum_k$$

$$= \sum_k$$

hier $g_{kd}(\tau) = |V_{kd}|^2 f_d(\epsilon_k) e^{i\epsilon_k \tau}$

Die k -Summen umwandeln:

$$\sum_k |V_{kd}|^2 f_d(\epsilon_k) e^{i\epsilon_k(t-t')} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \nu_d(\epsilon) f_d(\epsilon) e^{i\epsilon(t-t')}$$

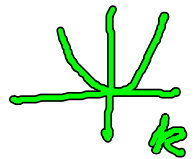
$$\nu_d(\epsilon) = \sum_k |V_{kd}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_k)$$

„Tunnel-Zustanddichte“

Zustanddichte: $\nu_d(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k)$

ÜA: Berechnen in $d=1,2,\dots$ Dimensionen für $\epsilon_k = k^2$

($2m = \hbar = 1$)

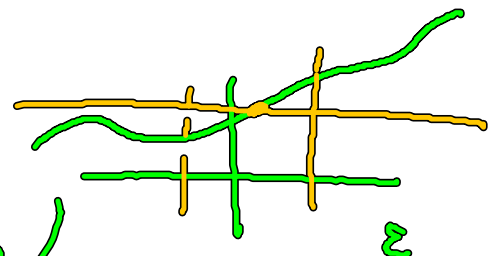


• Jetzt z.B. Annahmen über $\nu_d(\epsilon)$,

z.B. $\nu_d(\epsilon) = \nu_d = \Gamma_d / 2\pi$

mit konstanten Tunnelraten

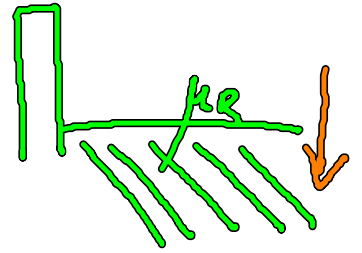
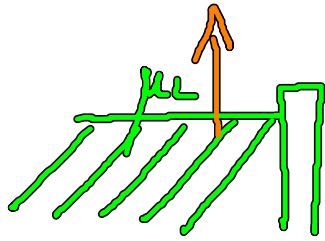
$$\Gamma_d = 2\pi \sum_k |V_{kd}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_k)$$



- „Infinite Bias Limit“

$$\mu_L \rightarrow +\infty$$

$$\mu_R \rightarrow -\infty$$



Damit

$$f_L(\epsilon) = 1$$

$$f_R(\epsilon) = 0$$

Dann

$$\sum_k N_{kL} |2 f_L(\epsilon_k)| e^{i\epsilon_k(t-t')}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \underbrace{v_L(\epsilon)}_{\Gamma_L/2\pi} \underbrace{f_L(\epsilon)}_1 e^{i\epsilon(t-t')}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \Gamma_L \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon e^{i\epsilon(t-t')} = \Gamma_L \delta(t-t')$$

Folgt

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) = - \int_0^t dt' \delta(t-t') \dots$$

Beachte:

$$\int_0^t dt' f(t') \delta(t-t') = \frac{1}{2} f(t)$$

(Zeigen mittels Delta-Folge)

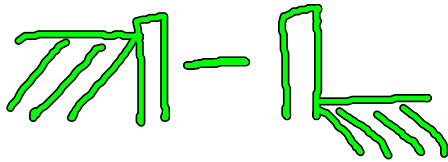


Damit

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) = - \frac{\Gamma_L}{2} \{ \tilde{S}(t) \tilde{\sigma}^\dagger(t) \tilde{\rho}(t) -$$

$$2 \tilde{S}(t) \{ \tilde{P}(t) \tilde{S}(t) + \tilde{P}(t) \tilde{S}(t) \tilde{S}^\dagger(t) \} - \frac{\tilde{R}}{2} \{ \quad \},$$

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



1.5 NEMS (Nano-mechanische Systeme)

- Beispiele:
- Elektronischer Transport mit mechanischen Freiheitsgrade.
 - „Molekularelektronik“



Model - Hamiltonian
Zustände

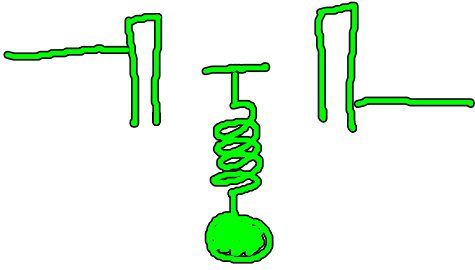
$|i\rangle \otimes |n\rangle$
 ↑ elektronische
 ↙ vibronische Zustände

Einfachtes Systemkanonisation $\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_e + \hbar\Omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$

$$[a, a^\dagger] = 1;$$

$$a|0\rangle_{ph} = 0 \quad + \mathcal{H}_{eph}$$

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



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

Setzt in die Gleichung; $\mathcal{H}_V = \sum_{k,d} V_{k,d} a^\dagger_{k,d} \hat{S} + h.c.$

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

$$\frac{1}{i\hbar} \ddot{\phi}(t) = - \sum_{k,d} \int_0^t dt' g_{k,d}(t-t') \{ \tilde{S}(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{S}(t) \dots \}$$

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

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

\nearrow \uparrow
 andere Zustände Dst.-Zustand

- 2) ^{Dot} Explizite Zeitentwicklung der $\tilde{S}(t), \tilde{S}(t)$ einsetzen
- 3) Rück-Trafo ins Schrödingerbild

$$\rightarrow \left[\frac{d}{dt} - i(\epsilon_{0n1} - \epsilon_{0n}) \right] \langle \underline{0n} | \rho(t) | \underline{0n'} \rangle =$$

$$= - \sum_{\substack{m, m' \\ \text{d}}} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \gamma_2(\epsilon) \int_0^t dt' \times$$

ÜA $f_2(\epsilon) \langle \underline{0n'} | \rho(t') | \underline{0n'} \rangle \langle \underline{0n} | \underline{1m} \rangle \langle \underline{1m} | \underline{0m'} \rangle$

$$= \sum \dots \quad \text{s. Skript.}$$

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

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

Franck-Condon Prinzip:

