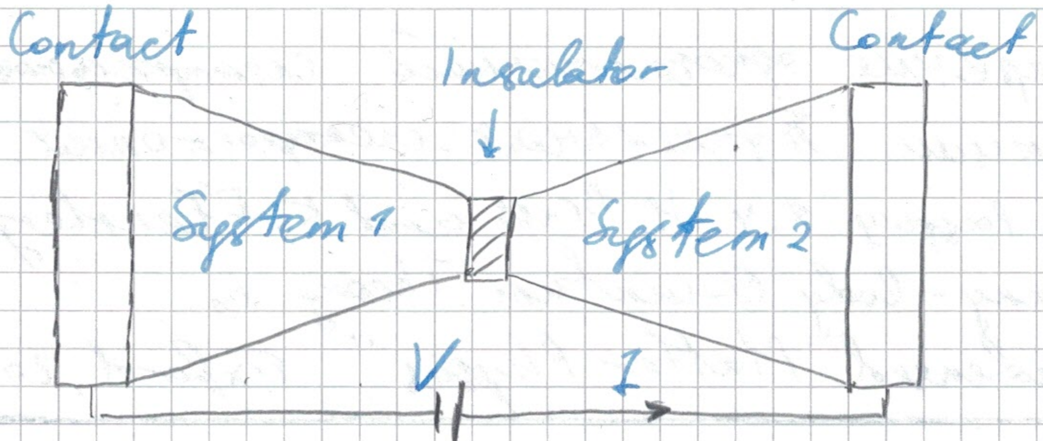
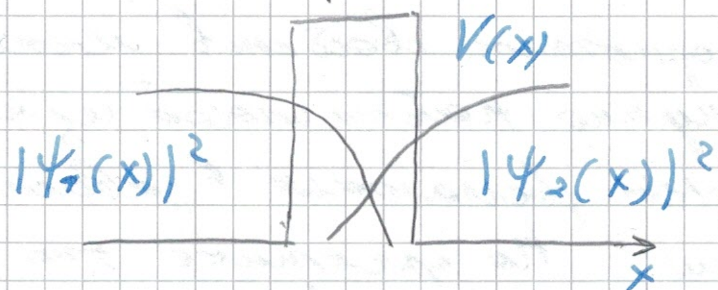
Измерение одночастичной спектральной функции. Туннельная спектроскопия.
[по разделу 8.4 H. Bruus and K. Flensberg „Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics", Oxford, 2004]

Для изуч. одночаст. свойств многочастичн. системы нужно найти способ измерить как электроны рассеиваются в зависимости от их энергии. На практике это означает удаление или добавление частицы с определённой энергией. Есть не так много способов это сделать, так как большинство проб двухчастичные: электр. ~~отклик~~, нейтроны.
Тем не менее, можно добавить/удалить одну частицу через туннельный переход.
Можно направлять поток электронов или фотонов — фотоэмиссия о котором я говорил.

Рассмотрим туннельную спектроскопию.

Имеем следующую конфигурацию.
Две системы в близком контакте, разделенные изолирующим материалом, оксидом или вакуумом.
В последнем случае это так наз. Сканирующая туннельная микроскопия (STM).





Поведение волн. ф-ии в 2х подсистемах.

Небольшое перекрытие В. ф. моделируется в туннельном гамильтониане матр. элементом $T_{\nu\mu'}$.

Традиционно туннелирование организовывалось при помощи контактной спектроскопии, когда острый зонд приводился в контакт с поверхностью и туннелир. происходило через слой оксида, кот. разделяет зонд и поверхность.

Изобретение сканирующего туннельного микроскопа в 1981 г.
Gerd Binnig and Heinrich Rohrer (IBM Zurich) (Nobel Prize 1986 г.) изменило эту область. Можно изучать спектр. ф-ю с точностью до 1Å вдоль пов-ти.

В приближении WKB амплитуда туннелир. между зондом и поверхностью

$$t(x_1, x_2) \sim \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[U(x)-E]}\,ds\right],$$

где интеграл вычисляется вдоль пути, кот. связывает точки перевала зонда и поверхн. Экспоненц. зависимость означает, что основной путь идёт от одного атома на конце зонда, что приводит к атомарному разрешению.

Мы видим эксп. зависимость от расстоян. Это позволяет получать топографию с высоким разрешением. Для этого сканируем поверхность, поддерживая постоянный туннельный ток при помощи цепи обратн. связи, кот. управляет высотой зонда. Типичн. расст. 1 nm.

Если хотим померять DOS, то обр. связь выключаем. Расстояние постоянное и меряем. тун. ток как ф-ю напряжения.

Итак, к формулам.

Пусть системы 1 и 2 описываются гамильтон. H_1 и H_2 в терминах электрон. операторов $c_{1\nu}$ и $c_{2\mu}$, где одночастичн. состояния $|\nu\rangle$ и $|\mu\rangle$ явл. полными наборами сост. для систем 1 и 2.

Связь между системами описывается

$$H_T = \sum_{\nu\mu} \left(T_{\nu\mu}\, c^+_{1\nu} c_{2\mu} + T^*_{\nu\mu}\, c^+_{2\mu} c_{1\nu} \right).$$

Это наиболее общий вид одночаст. оператора связывающего две системы. Тун. матр. элемент определ. так

$$T_{\nu\mu} = \int d\vec{r}\, \psi^*_\nu(\vec{r})\, H(\vec{r})\, \psi_\mu(\vec{r}),$$

где ψ – в.ф., а $H(\vec{r})$ одночаст. гермитов. гамильтониан.

Ток через переход определяется как скорость изменения числа частиц, $I_e = -e\langle I\rangle$, где $I = \dot{N}_1$ и, следовательно,

$$I = i[H, N_1] = i[H_T, N_1] =$$

$$H = H_1 + H_2 + H_T \quad (\hbar = 1!)$$

$$i\sum_{\nu\mu}\sum_{\nu'} \left[\left(T_{\nu\mu}\, c^+_{1\nu} c_{2\mu} + T^*_{\nu\mu}\, c^+_{2\mu} c_{1\nu} \right), c^+_{1\nu'} c_{1\nu'} \right]$$

$$= -i\sum_{\nu\mu} \left(T_{\nu\mu}\, c^+_{1\nu} c_{2\mu} - T^*_{\nu\mu}\, c^+_{2\mu} c_{1\nu} \right) \equiv$$

$$\equiv -i\left(L - L^+ \right).$$

Ток, идущий из 1 в 2 создаётся за счёт разности химич. потенциалов, $\mu_1 \neq \mu_2$.

Связь между подсистемами предполаг. очень слабой – видели экспон. малость t.

Поэтому находим ток в низшем порядке по $T_{\nu\mu}$.

Используем теорию линейн. отклика, ф-лу Кубо.

$$\delta\langle A(t)\rangle \equiv \langle A(t)\rangle - \langle A\rangle_0 =$$

$$= \int_{t_0}^{\infty} dt' C^R_{AH'}(t,t'), \text{ где}$$

$$C^R_{AH'}(t,t') = -i\theta(t-t')\left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{H}'(t')\right]\right\rangle_0.$$

По-сути изменение A в линейн. отклике на возмущение H'.

$$\langle I\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' C^R_{I_p H_T}(t,t'),$$

$$C^R_{I_p H_T}(t-t') = -i\theta(t-t')\langle[\hat{I}_p(t), \hat{H}_T(t')]\rangle_0,$$

где временная эволюция определяется $H = H_1 + H_2$. Коррел. ф-ю C_{IH_T} можно упростить

$$C^R_{I_p H_T}(t-t') = -\theta(t-t') \times$$

$$\times\left\langle\left[\hat{L}(t) - L^+(t), \hat{L}(t') + \hat{L}^+(t')\right]\right\rangle_0 =$$

$$= -\theta(t-t')\Big(\langle[\hat{L}(t), \hat{L}(t')]\rangle_0 -$$

$$- \langle[L^+(t), L(t')]\rangle_0 + c.c.\Big).$$

Комбинация $\langle[\hat{L}(t), \hat{L}(t')]\rangle$ включает члены вида

$$\langle (C^+_{1\nu} C_{2\mu})(t)(C^+_{1\nu} C_{2\mu})(t')\rangle_0 \text{ с}$$

2-мя электронами созд. в системе 1 и 2-мя уничтож. в системе 2 и, следовательно, не сохр. число частиц в каждой системе. Если не рассм. сверхпр., то такой член должен исчезать. (В СП он ведёт к эффекту Джозефсона.) Поэтому остаётся только член с L^+, L:

$$I_p(t) = 2\,\mathrm{Re}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\,\theta(t-t')\left\langle \left[L^+(t), L(t')\right]\right\rangle_0$$

$$= 2\,\mathrm{Re}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\,\theta(t-t') \sum_{\nu\mu}\sum_{\nu'\mu'} T^*_{\nu\mu} T_{\nu'\mu'} \times$$

$$\times \left\langle \left[C^+_{2\mu}(t)\, C_{1\nu}(t),\; C^+_{1\nu'}(t')\, C_{2\mu'}(t')\right]\right\rangle_0 =$$

$$= 2\,\mathrm{Re}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\,\theta(t-t') \sum_{\nu\mu}\sum_{\nu'\mu'} T^*_{\nu\mu} T_{\nu'\mu'} \times$$

$$\Big(\overset{G^>(-t)\ \ t'+t}{\langle C_{1\nu}(t)\, C^+_{1\nu'}(t')\rangle_0}\; \overset{G^<(t')\ \ t'+t}{\langle C^+_{2\mu}(t)\, C_{2\mu'}(t')\rangle_0} -$$

$$- \underset{G^<(-t)\ \ t'+t}{\langle C^+_{1\nu'}(t')\, C_{1\nu}(t)\rangle_0}\; \underset{G^>(t')\ \ t'+t}{\langle C_{2\mu'}(t')\, C^+_{2\mu}(t)\rangle_0} \Big).$$

Теперь учтём вклад сдвига энергии во временную зависимость:

$$C_1(t) = \tilde{C}_1(t)\, e^{-i(-e)V_1 t},$$

→ см 6'.

$$C_2(t) = \tilde{C}_2(t)\, e^{-i(-e)V_2 t},$$ где

временная зависимость $\tilde{C}$ задаётся гамильтонианом с общим хим. потенциалом μ.

Выбираем такой базис, где ФГ системы без П диагональна, т.е.

$$G^>_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'}\, G^>_\nu .$$

Из главы 11 „Функции Грина: Задачи и решения" А.С. Левитов, А.В. Шитов МЦНМО, 2016.

Состояние в котором химические потенциалы систем отличаются на $eV = eV_2 - eV_1$, где V – прилож. напряжение является неравновесным и такое усреднение нельзя выполнять с пом. равновесной диагр. техники.

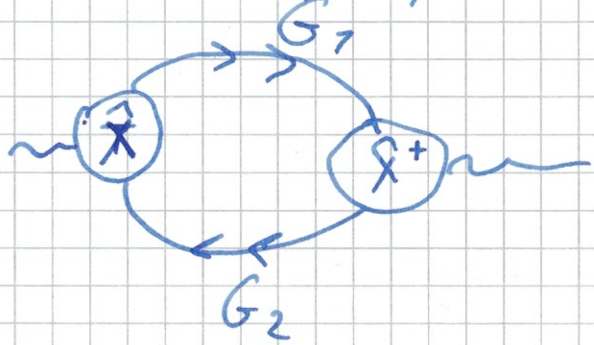
Вводя V_1 и V_2 мы, по сути сделали калибров. преобразование, сдвигающее уровни энергии и выравнивающее хим. потенциалы. Изменилась временная зависимость, но усреднение идет по равновесному состоянию!

$$H_T = \hat{X} e^{ieVt} + \hat{X}^+ e^{-ieVt}$$

$$\hat{X} = \sum_{\nu\mu} T_{\nu\mu} c^+_{1\nu} c_{2\mu}$$

$$\hat{I} = i \hat{X} e^{ieVt} - i \hat{X}^+ e^{-ieVt}.$$

В принципе, вычисление тока соотв. вычислению диаграммы



З-ча 68, 68(б)

Я тут использовал новый символ „>".
М.б. уже встречали? Вот определения:

$$G^R(\vec r\sigma t; \vec r'\sigma' t') = \Theta(t-t') \times$$
$$\times\left[G^>(\vec r\sigma t; \vec r'\sigma' t') - G^<(\vec r\sigma t; \vec r'\sigma' t')\right],$$

$$G^A(\vec r\sigma t; \vec r'\sigma' t') = \Theta(t'-t) \times$$
$$\times\left[G^<(\vec r\sigma t; \vec r'\sigma' t') - G^>(\vec r\sigma t; \vec r'\sigma' t')\right].$$

Можно так же перейти к базису $|\nu\rangle \Longrightarrow$ см. оборот

Связь со спектр. ф-ей такая:

$$A(\nu,\omega) = -2\cdot\left(\frac{1}{\pi}\right) \operatorname{Im} G^R(\nu,\omega)$$

ν − базис; у Flensb; мое

т.е. правило перехода $\times\frac{1}{2\pi}$!

$$iG^>(\nu,\omega) = 2\pi A(\nu,\omega)\left[1-n_F(\omega)\right]$$
$$-iG^<(\nu,\omega) = 2\pi A(\nu,\omega)\, n_F(\omega).$$

Через эти ФГ ток частиц имеет вид (сделана замена $t' \to t'+t$):

$$I_p = 2\,\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{0} dt' \sum_{\nu\mu} |T_{\nu\mu}|^2 e^{i(-e)(V_1-V_2)t'} \times$$

– – – – – – – –

$$e^{-i(-e)V_1 t}\, e^{i(-e)V_1 t'}\, e^{+i(-e)V_2 t}\, e^{-i(-e)V_2 t'} =$$
$$= e^{i(-e)(V_2-V_1)t - i(-e)(V_2-V_1)t'} \to$$
$$= e^{i(-e)(V_2-V_1)t - i(-e)(V_2-V_1)(t'+t)} = e^{i(-e)(V_1-V_2)t'}.$$

– – – – —

$$\times\left[G_1^>(\nu;-t')G_2^<(\mu;t') - G_1^<(\nu;-t')G_2^>(\mu;t')\right].$$

$$G^{>}(\nu; t, t') = -i\langle c_\nu(t) c_\nu^{+}(t')\rangle$$

$$G^{<}(\nu; t, t') = -i(\pm 1)\langle c_\nu^{+}(t') c_\nu(t)\rangle \qquad \begin{matrix} + \text{ бозе} \\ - \text{ ферми} \end{matrix}$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f_\omega e^{-i\omega t}, \quad f_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, f(t) e^{i\omega t}$$

$$G^{\gtrless}(-t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G^{\gtrless}(\omega) e^{i\omega t'}$$

$$G^{\lessgtr}(t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} G^{\lessgtr}(\omega') e^{-i\omega' t'}$$

$$\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{0} dt'\, e^{i(-e)\underbrace{(V_1 - V_2)}_{-V} t'} \cdot e^{\eta t'} e^{i\omega t'} e^{-i\omega' t'} =$$

$V \equiv V_2 - V_1$ (по-другому в ср. с Flensberg)

$$= \mathrm{Re}\int_{-\infty}^{0} dt'\, e^{t'(\eta + ieV + i\omega - i\omega')} =$$

$$= \mathrm{Re}\left.\frac{e^{t'(\eta + ieV + i\omega - i\omega')}}{\eta - ieV + i\omega - i\omega'}\right|_{-\infty}^{0} =$$

$$= \mathrm{Re}\frac{(-i)}{\omega - \omega' - eV - i\eta} = \pi\delta(\omega - \omega' + eV)$$

$$\omega' = \omega + eV$$

Итак, подставив $G^{\gtrless}(-t')$, $G^{\lessgtr}(t')$, взяв интеграл по t' с $e^{\eta t'}$, получив $\delta(\omega - \omega' + eV)$ и сняв δ-ф-ю $\int d\omega'$ получим:

$$I_p = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\nu\mu} |T_{\nu\mu}|^2 \Big[\overbrace{G_1^{>}(\nu;\omega) G_2^{<}(\mu;\omega + eV)}^{[1 - n_F(\omega)]\cdot n_F(\omega + eV)} -$$

$$\underbrace{G_1^{<}(\nu;\omega) G_2^{>}(\mu;\omega + eV)}_{n_F(\omega)[1 - n_F(\omega + eV)]}\Big].$$

$$iG^{>}(\omega) = 2\pi A(\omega)[1 - n_F(\omega)]$$

$$-iG^{<}(\omega) = 2\pi A(\omega)\, n_F(\omega).$$

В рез-те получаем

$$I_p = \int_{-\infty}^{\infty} 2\pi d\omega \sum_{\nu\mu} |T_{\nu\mu}|^2 A_1(\nu,\omega) A_2(\mu,\omega+eV) \times$$

$$\times [n_F(\omega+eV) - n_F(\omega)].$$

Видим, что ток определяется раснулностью состояний (определ. разн. $n_F(\ )\ \ )$ и плотностью сост.
Поэтому меняя V можно получить информ. о $A(\nu,\omega)$.

Туннельная спектроскопия заключается в том, что меняется V, что контролир. хим. потенциал, а при этом измеряется dI/dV.

Теперь предположим, что материал 2 — простой металл с постоянной DOS.

$$\sum_{\mu} A_2(\mu,\omega) = N(\omega) \approx N(0).$$

[μ, ν — м.б. и $\vec{k}$

Предположим также, что $T_{\mu\nu}$ не зав. от μ и ν, т.е.

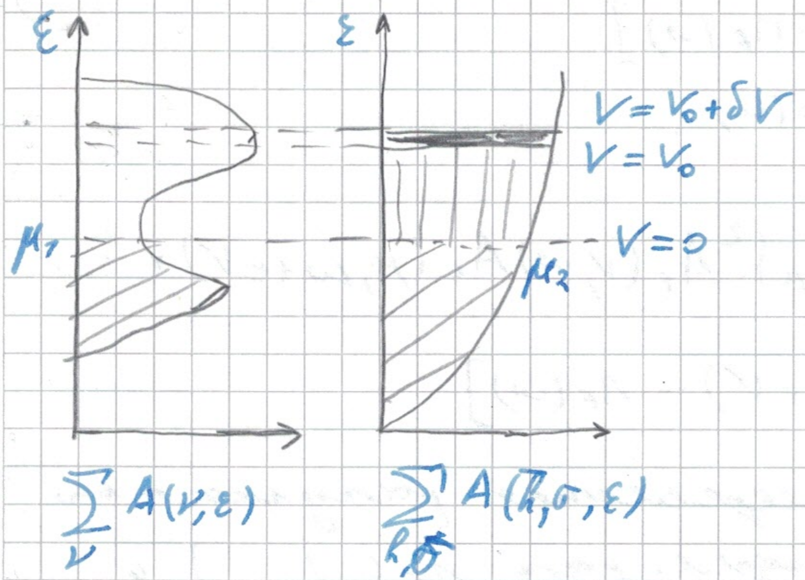
$$\sum_{\mu} |T_{\nu\mu}|^2 A_2(\mu,\omega+eV) \approx const.$$

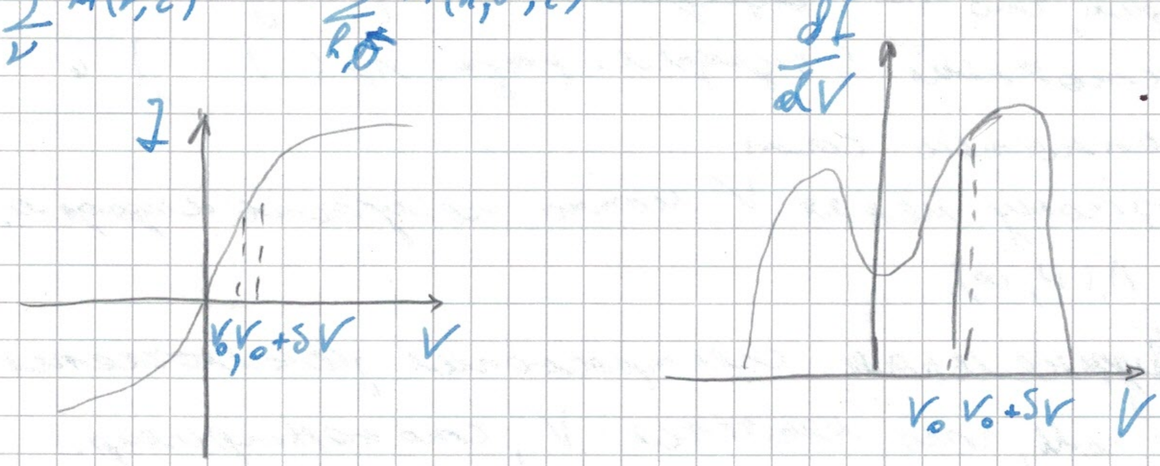
Тогда

$$G(V) = \frac{dI}{dV} \propto \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(-\frac{\partial n_F(\omega+eV)}{\partial\omega}\right) \sum_{\nu} A_1(\nu,\omega).$$

$T \to 0$ $\qquad \delta(\omega+eV)$

$$\frac{dI}{dV} \propto \sum_{\nu} A_1(\nu,-eV).$$





Величину

$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi}\sum_{\vec{p}} \mathrm{Im}\, G^R(\vec{p}, \varepsilon)$ ещё называют туннельной плотностью состояний.

Не путайте её с термодинам. плотн. сост.

$$\tilde{\nu}(\varepsilon) = \frac{\partial n}{\partial \mu}\Big|_{\mu=\varepsilon},$$ которая определяет сжимаемость системы.