

Stark korrelierte Kunststoffe

Reinhold Egger

Institut für Theoretische Physik

Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Sascha Hügler, Boris Reusch

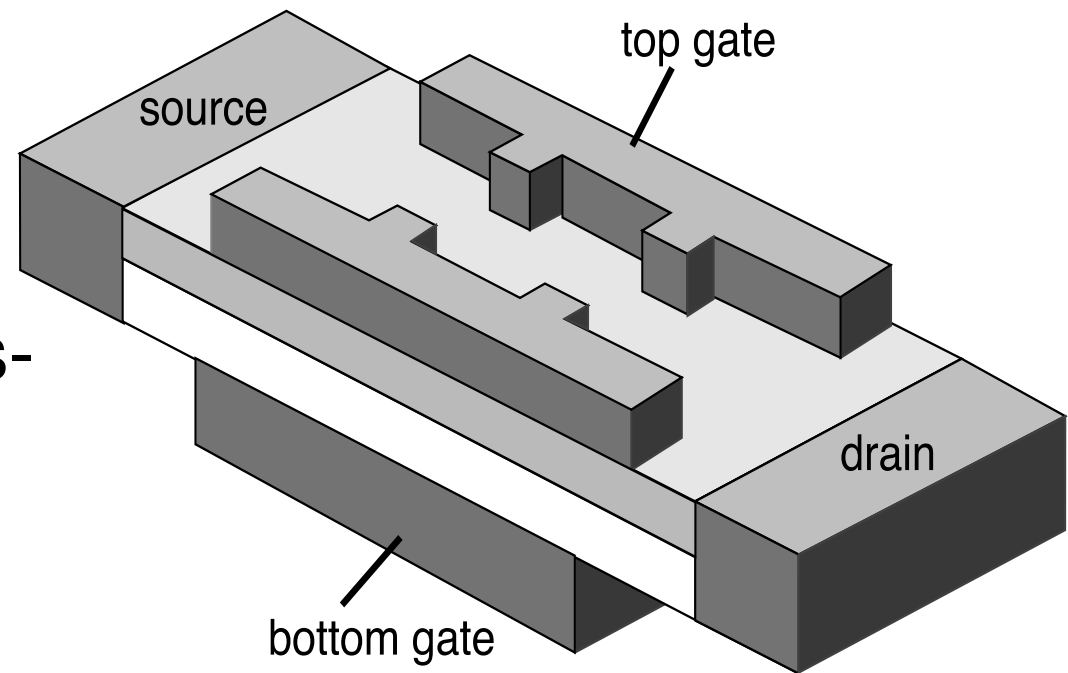
SFB 276 Abschlusskolloquium 5.-8.10.2003

Überblick

- Quantenpunkte sind Kunststatome mit durchstimmbaren Korrelationen
 - Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulationen und das Vorzeichenproblem
 - Wigner-Molekül und magische Zahlen
 - Spineffekte, Einfluß von Unordnung
 - Eindimensionale korrelierte Quantenpunkte: Tunnelmechanismen durch Kunststatome
-

Quantenpunkt in Halbleiterstrukturen

- Elektronen in 2D
Quantenpunkt bilden
Kunstatom
- Tunnelkontakte:
isolierter Quanten-
punkt, Gleichgewichts-
problem
- Starke Korrelationen
bei niedriger Dichte,
experimentell machbar



Modell für 2D Quantenpunkt

- N Elektronen im Oszillatorpotential

$$H = \sum_j \left[\frac{\vec{p}_j^2}{2m} + \frac{m \omega_0^2}{2} \vec{x}_j^2 + V_{imp}(\vec{x}_j) \right] + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$

- Längenskala: $l_0 = \sqrt{\hbar / m \omega_0}$
- Wechselwirkung: $\lambda = l_0 / a_B = e^2 / \hbar l_0 \omega_0$ oder $r_s = r_{n.n.} / a_B$
- Exakt lösbar nur für zwei Elektronen
- Numerischer Zugang für kleine N :
Pfadintegral Monte Carlo $k_B T / \hbar \omega_0 = 0.125$

Pfadintegral MC: Vorzeichenproblem

- Ziel: Exakte Berechnungen für Kunstatome mittels PIMC, z.B. Energie, Korrelationsfunktionen, Leitwert durch Quantenpunkt
 - PIMC = stochastische Auswertung des Pfadintegrals
 - Problemlos für positiv definites Gewicht. Hier: Interferenzen zwischen verschiedenen Pfaden, exponentiell kleines Signal-Rausch-Verhältnis, Instabilität für große N
 - Vorzeichenproblem, verursacht durch Interferenz von Feynmanpfaden (Pauliprinzip oder Realzeit)
-

Blockbildungs-Strategie

Egger & Mak, PRB 1994

Ausgehend von diskretisiertem Imaginärzeit-Pfadintegral, z.B. für (brute-force) PIMC:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle A[X] \Phi[X] \rangle_{W[X]}}{\langle \Phi[X] \rangle_{W[X]}}$$

Beobachtung: Vorzeichenproblem taucht in hinreichend kleinen Systemen nicht auf

➔ unterteile Konfigurationsraum $\{X\}$ in hinreichend kleine Blöcke $\{B\}$, summiere zunächst Interferenzen innerhalb Block

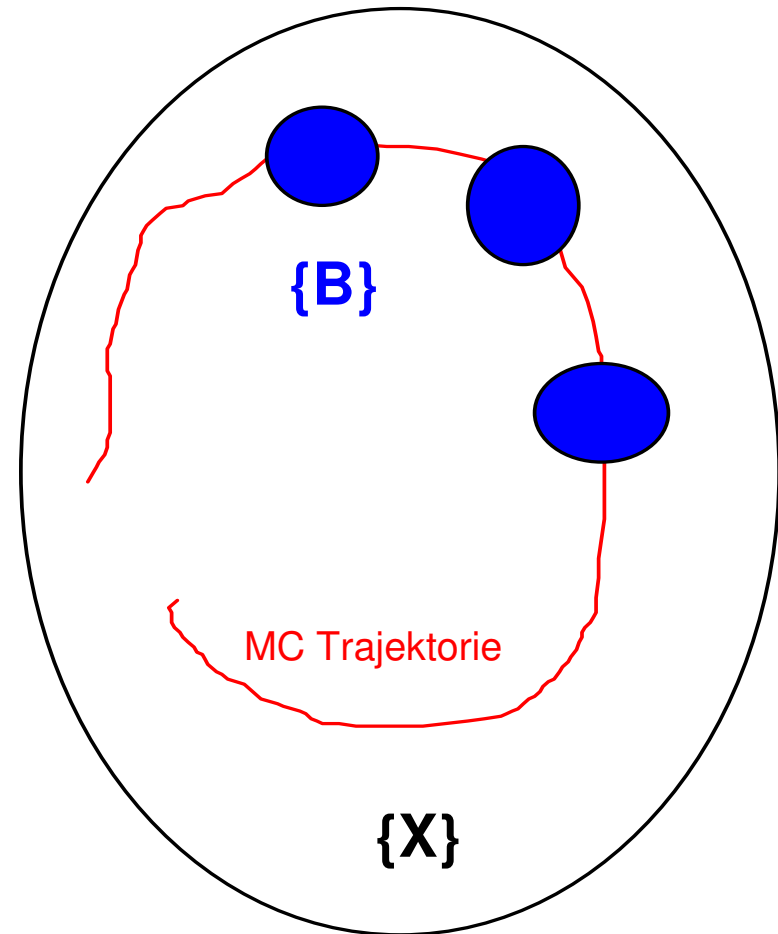
Blockbildung hilft (fast) immer...

- Neues MC Gewicht für Blöcke:

$$W'[B] = \left| \sum_{X \in B} W[X] \Phi[X] \right|$$

- Neuer Phasenfaktor $\Phi'[B]$ numerisch stabil!
- Dies macht Problem niemals schlimmer:


$$|\langle \Phi' \rangle| \geq |\langle \Phi \rangle|$$



Beweis:

$$\langle \Phi \rangle = \frac{\sum_X W[X] \Phi[X]}{\sum_X W[X]}$$

$$\langle \Phi' \rangle = \frac{\sum_B W'[B] \Phi'[B]}{\sum_B W'[B]} = \frac{\sum_X W[X] \Phi[X]}{\sum_B W'[B]}$$

 $\frac{|\langle \Phi' \rangle|}{|\langle \Phi \rangle|} = \frac{\sum_X W[X]}{\sum_B W'[B]} \geq 1$ da

$$\sum_B W'[B] = \sum_B \left| \sum_{X \in B} W[X] \Phi[X] \right| \leq \sum_B \sum_{X \in B} W[X] = \sum_X W[X]$$

„Multilevel Blocking“ Algorithmus

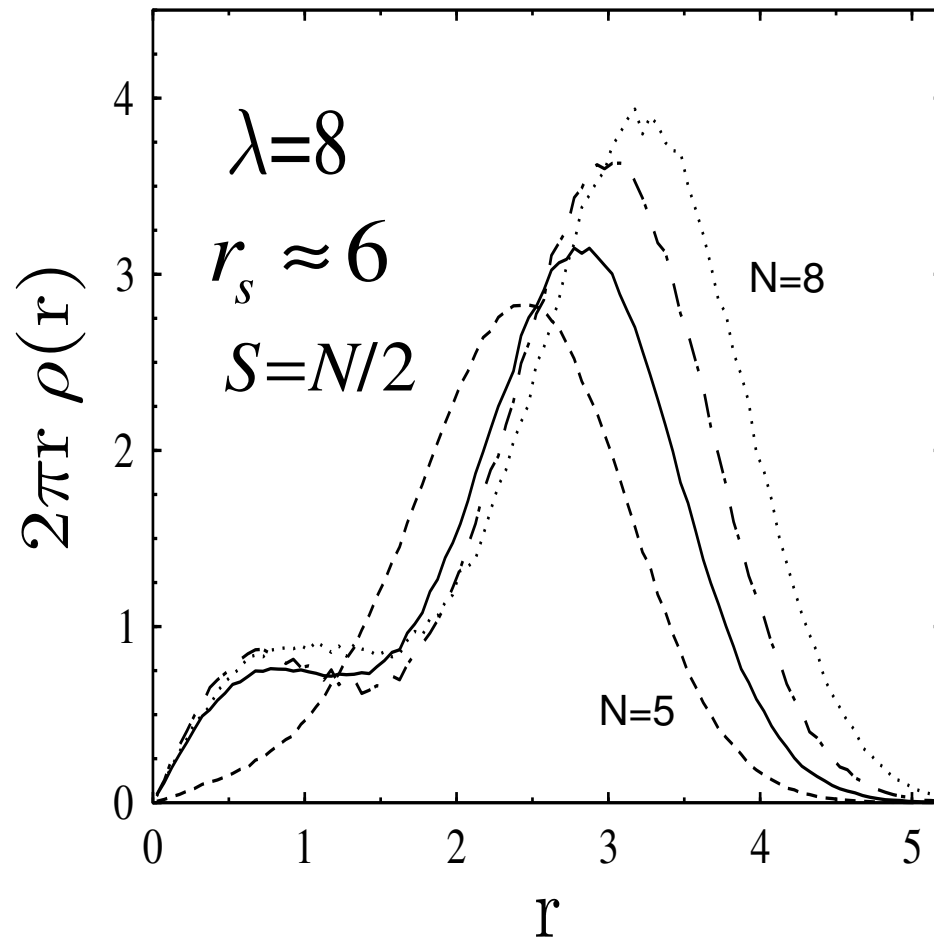
Mak, Egger & Weber-Gottschick, PRL 1998

- Für großes System: zu viele Blöcke, wieder exponentielles Vorzeichenproblem
- Systematische Implementierung der Blockbildungsstrategie, rekursiver Algorithmus
- Löse Problem auf verschiedenen Niveaus, Kontrolle über Interferenzen
- Implementierung auch für dissipative Quantendynamik (Realzeit) möglich

Egger, Mühlbacher & Mak, PRE 2000

PIMC für saubere 2D Quantenpunkte: Dichteprofil

Egger, Häusler, Mak & Grabert, PRL 1999



- **Räumliche Schalenstruktur** für starke Wechselwirkung, nicht vorhanden bei hoher Dichte
- Einteilchenbeschreibung bricht zusammen
- **Wigner-Kristallisation**, klassische Elektrostatik dominiert: **Wignermolekül**

Wigner-Molekül

- Hohe Dichte (schwache Korrelationen):
Fermiflüssigkeit, Einteilchenbild
 - Niedrige Dichte: Wignermolekül, klassisch
 - Skala für Crossover?
 - Abhängigkeit von N ?
 - Im sauberen 2DEG: Phasenübergang 1. Ordnung zum Wignerkristall vorhergesagt bei $r_s \approx 37$
 - Mit Unordnung: Wignerglas bei $r_s \approx 7.5$
 - Charakterisierung in endlichem System?
-

Spin-Sensitivität

- Günstige Grösse, normiert auf $\xi_N(0) = 1$

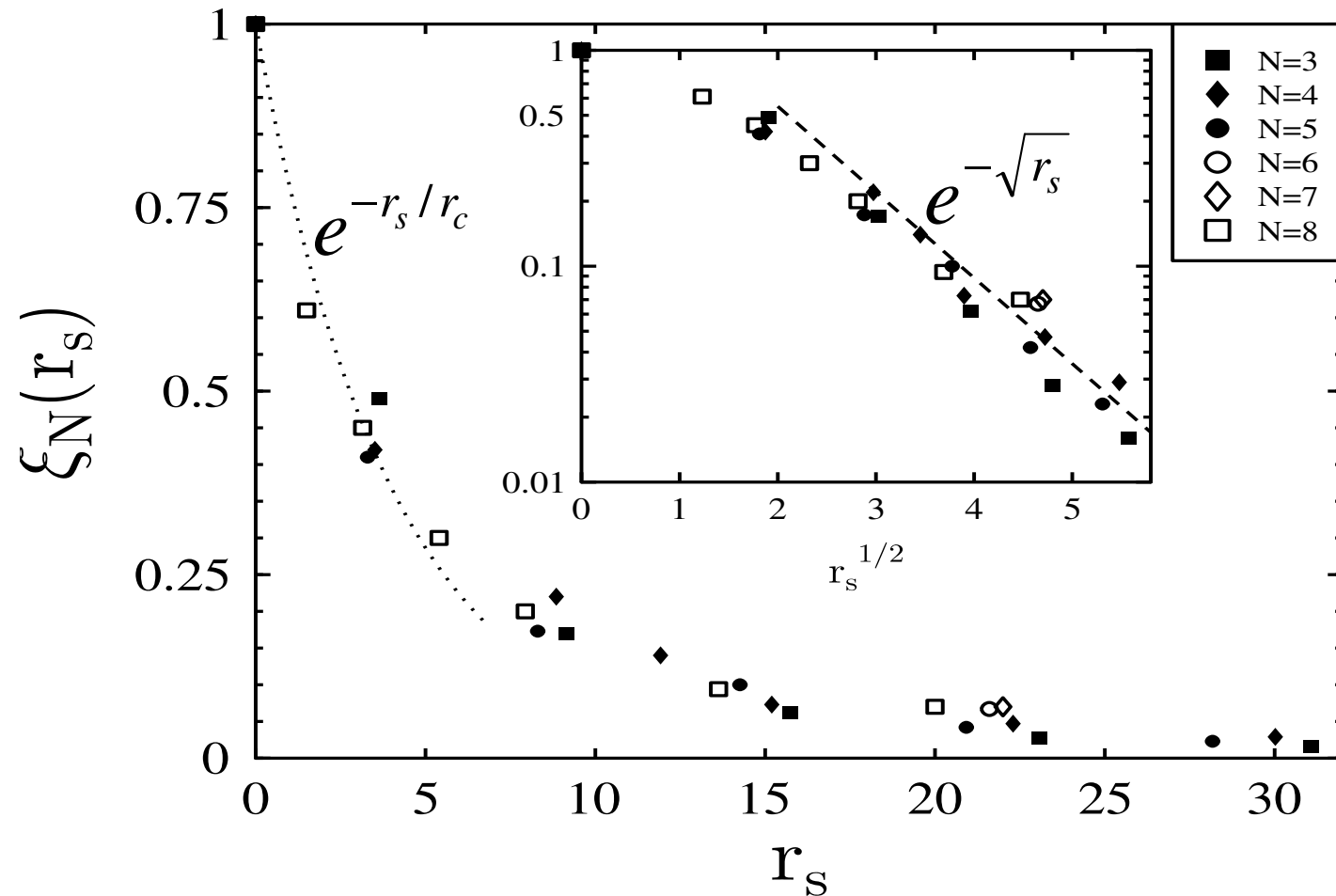
$$\xi_N(r_s) \propto \sum_{s,s'} \int_0^\infty y dy |g_s(y) - g_{s'}(y)|$$

- Zweiteilchen-Korrelationen, isotrop $\int_0^\infty y dy g_s(y) = 1$
$$g_s(\vec{x}) = \frac{2\pi l_0^2}{N(N-1)} \left\langle \sum_{i \neq j=1}^N \delta(\vec{x} - \vec{x}_i + \vec{x}_j) \right\rangle$$

 $y = r/l_0$

- Sensor für Fermistatistik, Korrelationsloch
- Für starke Korrelationen: $\xi_N(r_s \rightarrow \infty) \rightarrow 0$

PIMC Ergebnisse



Egger, Häusler, Mak & Grabert, PRL 1999

Korrelierte Kunstatome: Crossover

- Crossover hängt kaum von N ab, **universell**
- Überraschend hohe Crossoverdichte: $r_c \approx 2$
- Experimentell verifiziert: $r_c \approx 1.8$

Zhitenev et al., Science 1999

- PIMC-Spinanregungsenergien stimmen mit Semiklassik überein

Häusler, EPL 2000

- Benchmark-Rechnungen
- Vorhersagen für Transportexperimente (Spinblockade)

Unordnungseffekte

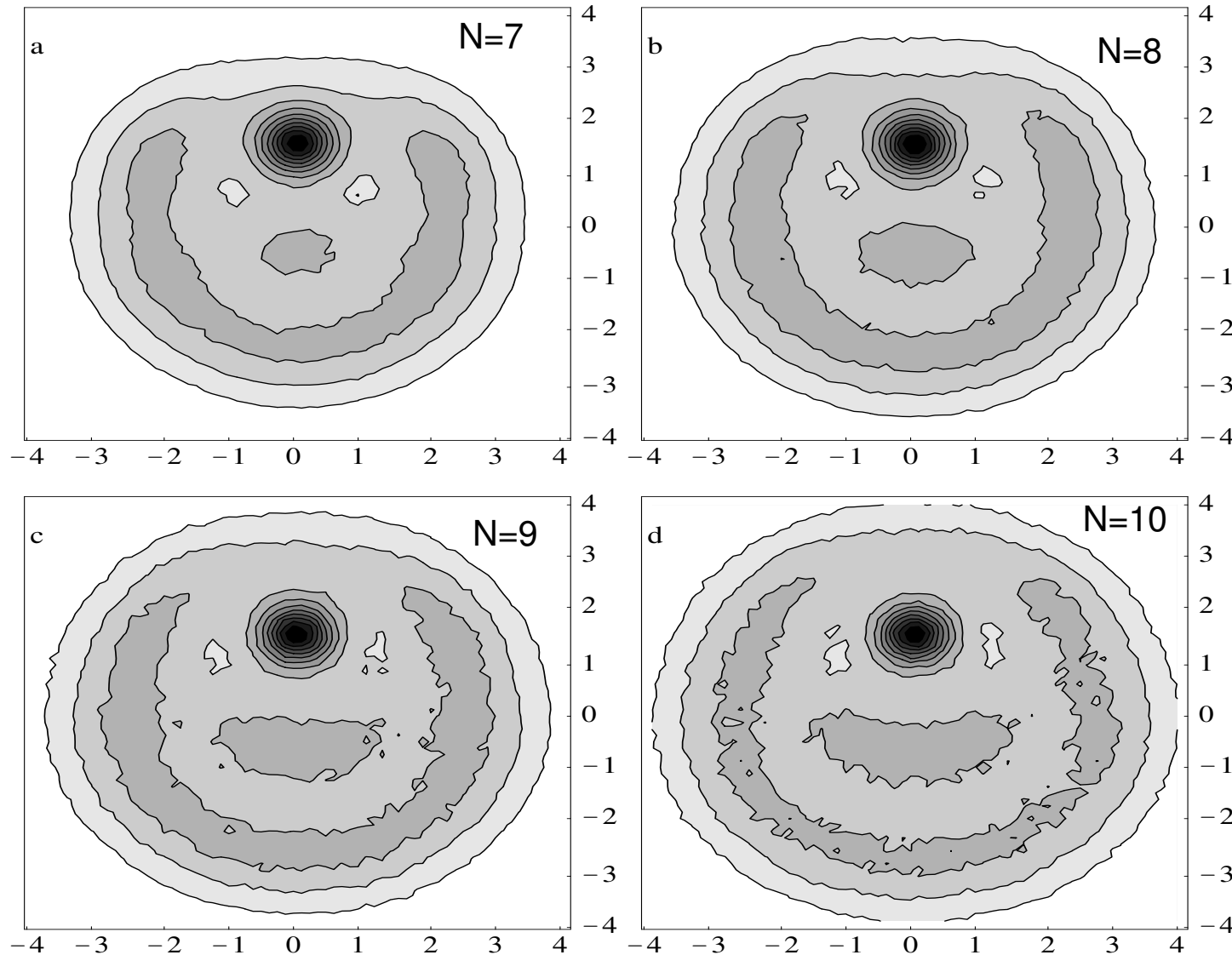
$$V_{imp}(\vec{r}) = -we^{-2(\vec{r}-\vec{x})^2/\sigma^2}$$

$$w = 4$$

$$\vec{x} = (0, 1.5)$$

$$\sigma = 0.75$$

$$\lambda = 4, r_s \approx 4$$

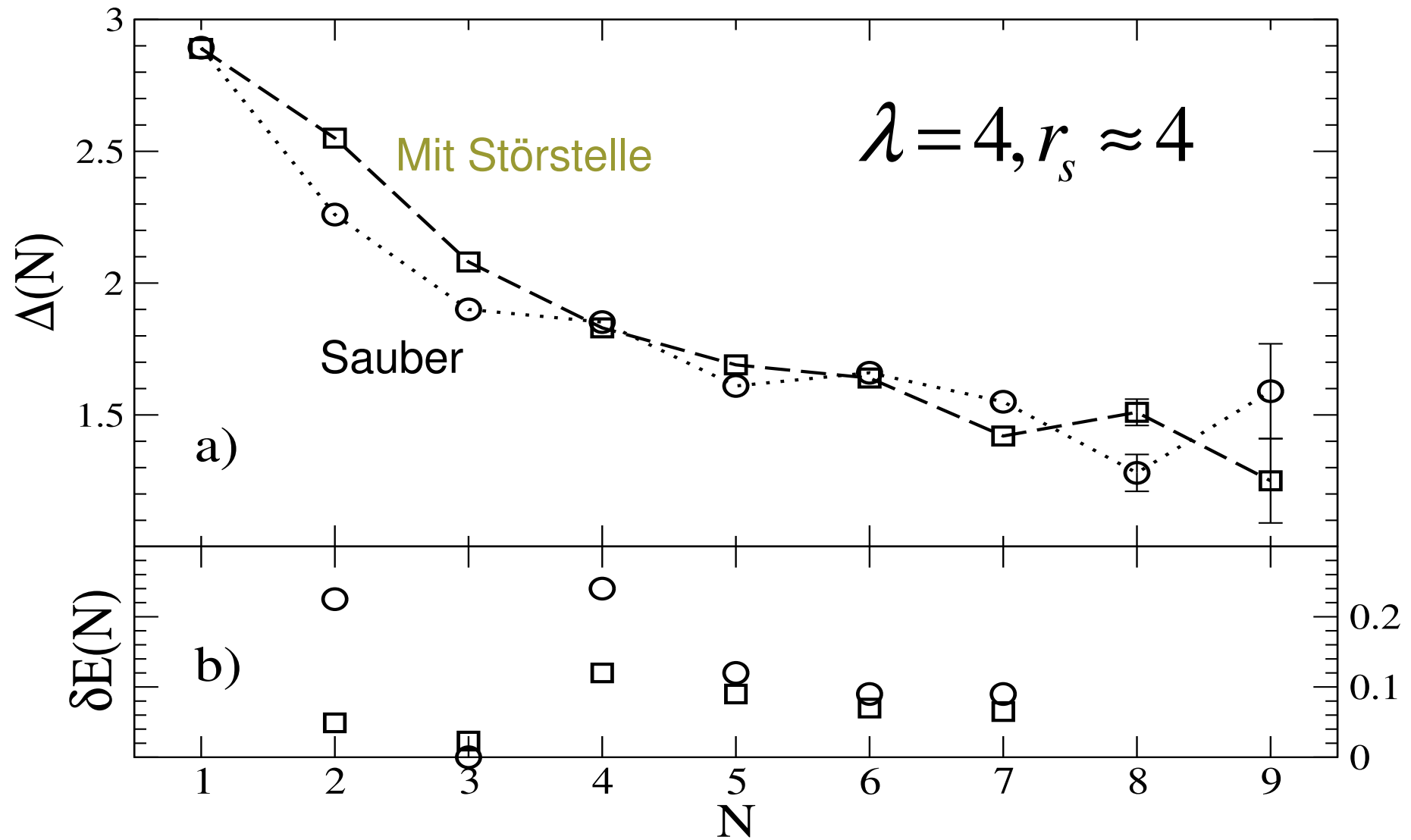


*Reusch & Egger,
Europhys.Lett.
(2003)*

Additionsenergie: Magische Zahlen

- Stabilität des N -Elektronensystems: **Peak** in
$$\Delta(N) = E(N+1) - 2E(N) + E(N-1)$$
 - Sauberer Fall: Magische Zahlen $N = 4, 6, 9$ bei schwacher Wechselwirkung (abgeschlossene Orbitale)
 - Magische Zahlen durch Korrelationen und/oder Störstelle beeinflusst?
 - Grundzustandsspin? Hundsche Regel?
-

PIMC: Ergebnisse



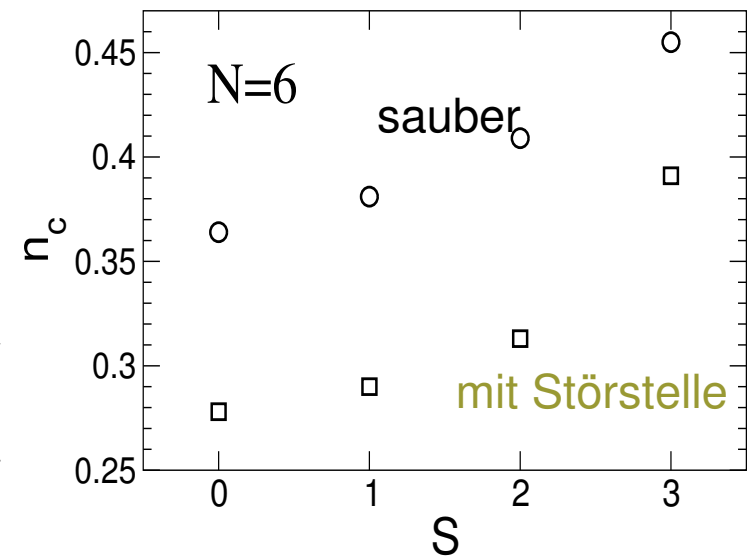
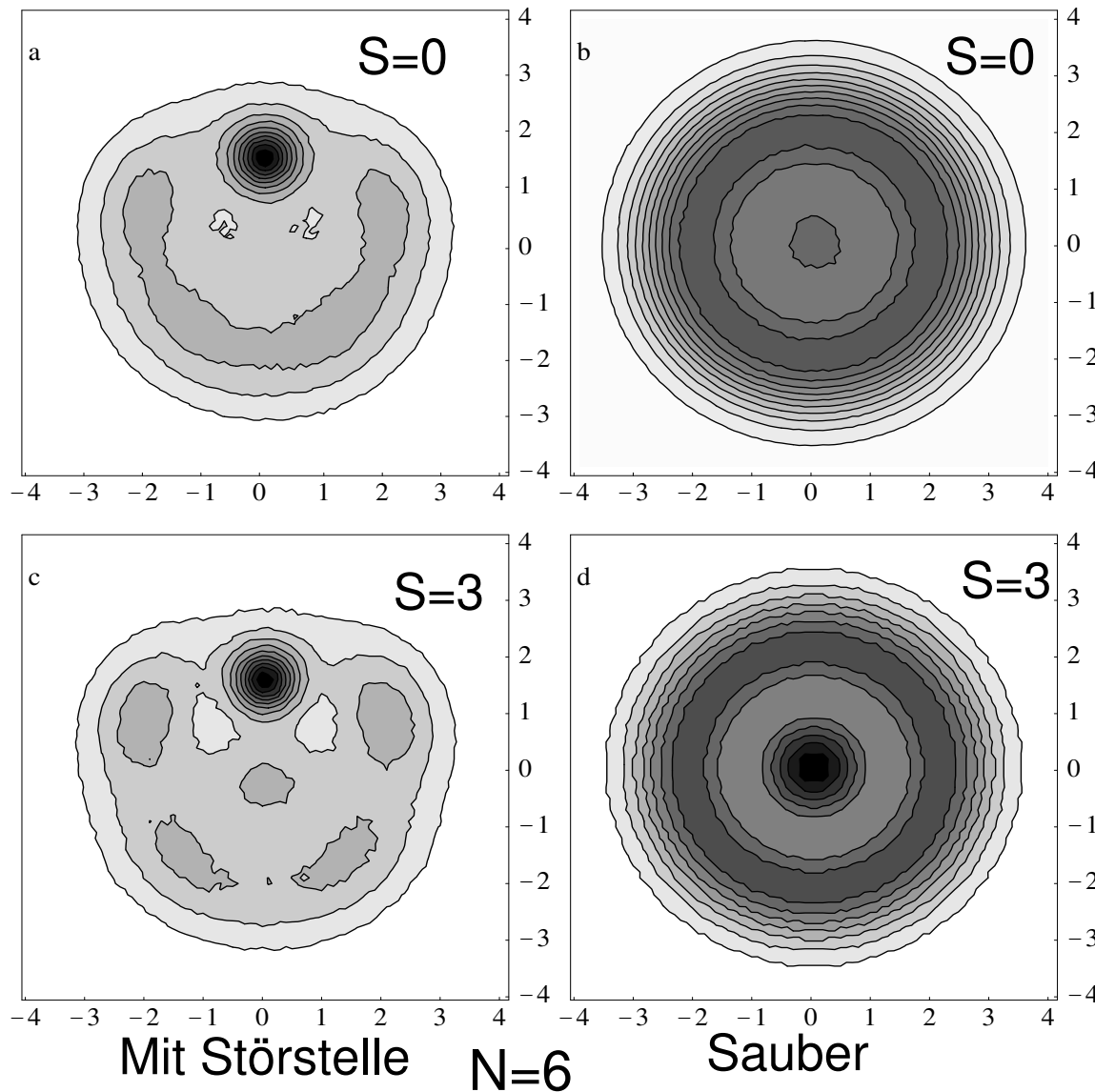
Additionsenergien: Wignermolekül

- Im sauberen Fall: Gleiche magische Zahlen wie bei schwacher Wechselwirkung
 - Wignermolekül noch nicht voll entwickelt (sonst andere magische Zahlen)
 - Abgeschlossene Orbitale bei $N=6$, halbgefüllte Schalen bei $N=4,9$
 - Mit Störstelle: energetische Schalenstruktur fast zerstört, neue magische Zahl: $N=8$
-

Spineffekte und Hundzsche Regel

- Störstelle beeinflusst Grundzustandsspin nur wenig, nicht systematisch (Ausnahme: $N=8$)
- Hundzsche Regel: $S=1$ bei $N=4$, $S=3/2$ bei $N=9$
- Bei niedrigerer Dichte: Hundzsche Regel modifiziert, noch höherer Spin möglich
- Für $N=8$ führt Störstelle zu Spin $S=0$:
Übergang von $S=1$ nach $S=0$ bei stärkeren Korrelationen!

Kopplung Spin und Ladungsordnung



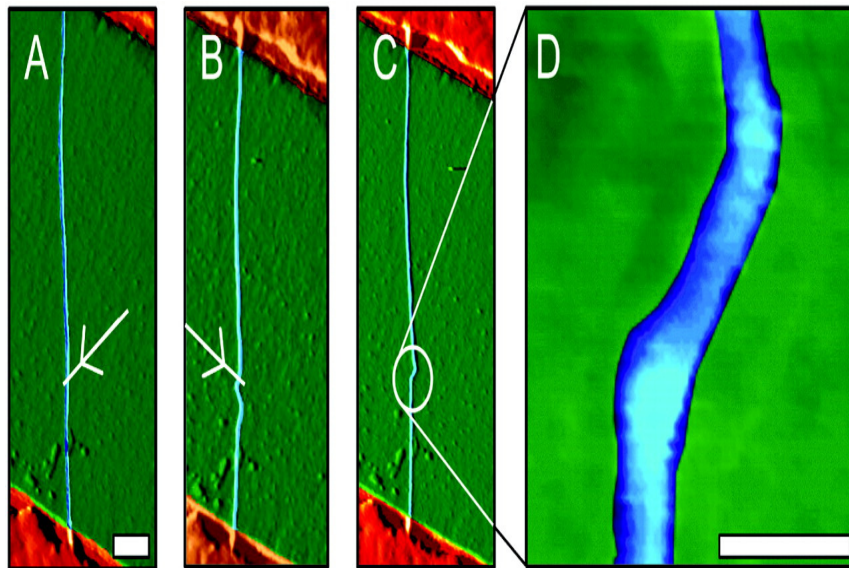
Räumliche Ladungsordnung hängt noch stark vom Spin ab, besonders mit Störstelle...

Transport durch 1D Quantenpunkte

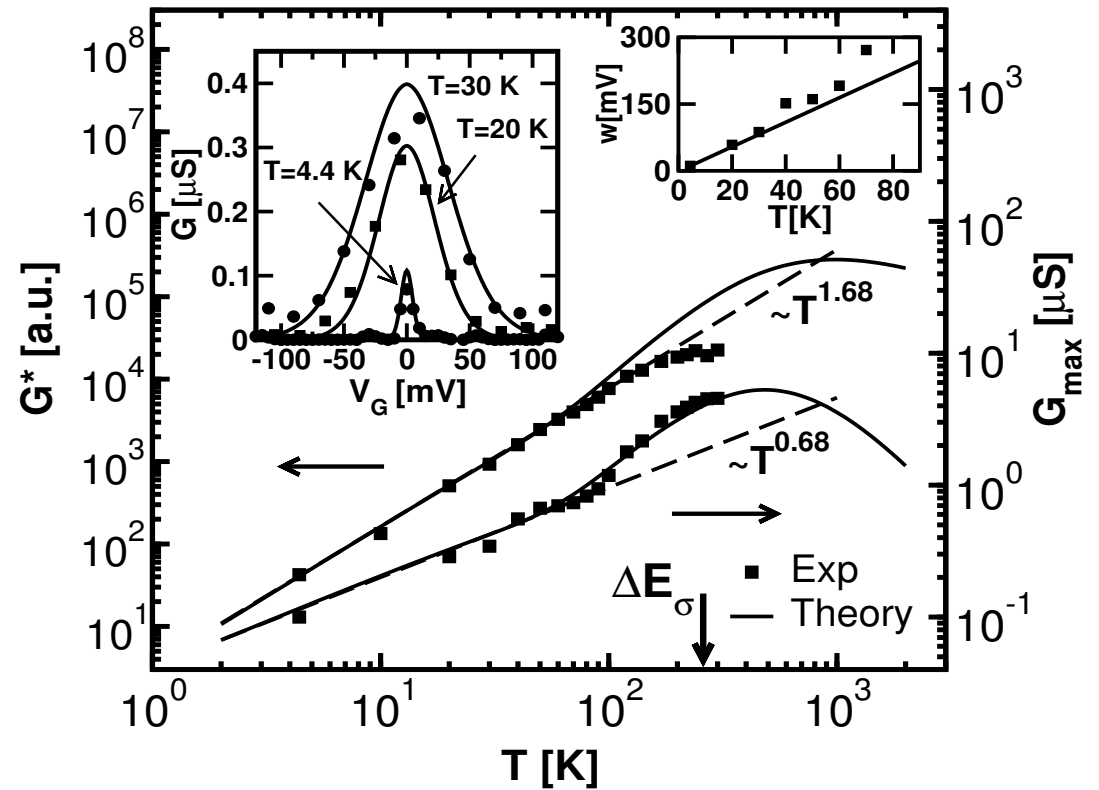
Hügle & Egger, cond-mat/0304158

- Tunnelmechanismen für Transport durch Doppelbarriere in wechselwirkendem 1D Elektronendraht (Luttingerflüssigkeit)
- Realisierung: Kohlenstoff-Nanoröhrchen
- Fast geschlossene Quantenpunkte: Neue Experimente stellen sequentielles Tunneln in Frage
Postma et al., Science 2001
- Fast offene Quantenpunkte: Fabry-Perot Resonanzen
Liang et al., Nature 2001

Fast isolierter Quantenpunkt: Experiment



Postma et al., Science 2001



aber

$$G_{peak}^{exp} \propto T^{-3+2/g}$$

$$G_{peak}^{seq} \propto T^{-2+1/g}$$

Luttinger-Flüssigkeit mit Doppelbarriere

Hamiltonoperator

$$H = \frac{v_F}{2} \int dx \{ \Pi^2 + g^{-2} (\nabla \vartheta)^2 \} + V_0 \sum_{\pm} \cos \{ \sqrt{4\pi} \vartheta(\pm d/2) + eVt \pm \pi N_0 \}$$

Strom-Spannungs-Charakteristik

$$I = G_0 V + \frac{e}{\sqrt{\pi}} \langle \partial_t \vartheta \rangle \quad \text{mit } G_0 = e^2 / h$$

Ziel: Berechne exakten linearen Leitwert via PIMC

$$G(T, N_0, V_0, g, d)$$

Abbildung auf dissipative Dynamik

Blockbildungsstrategie:

- Integration über alle Felder weg von Barrieren
- Effektive Wirkung für zwei gekoppelte Brownsche Teilchen im periodischen Potential
- Abbildung auf Coulomb-Gas
- Spektraldichte Coulomb-Gas-Wechselwirkung

$$J_{\pm}(\omega) = \pi g \omega \left[1 \pm \cos(\pi g^2 \omega / E_s) \right]$$

$$E_s = \pi v_F / d$$

- Spur über quasiklassische Ladungen (analytisch)
 - Realzeit-PIMC für Quantenfluktuations-Ladungen
-

Nichtwechselwirkender Fall ($g=1$)

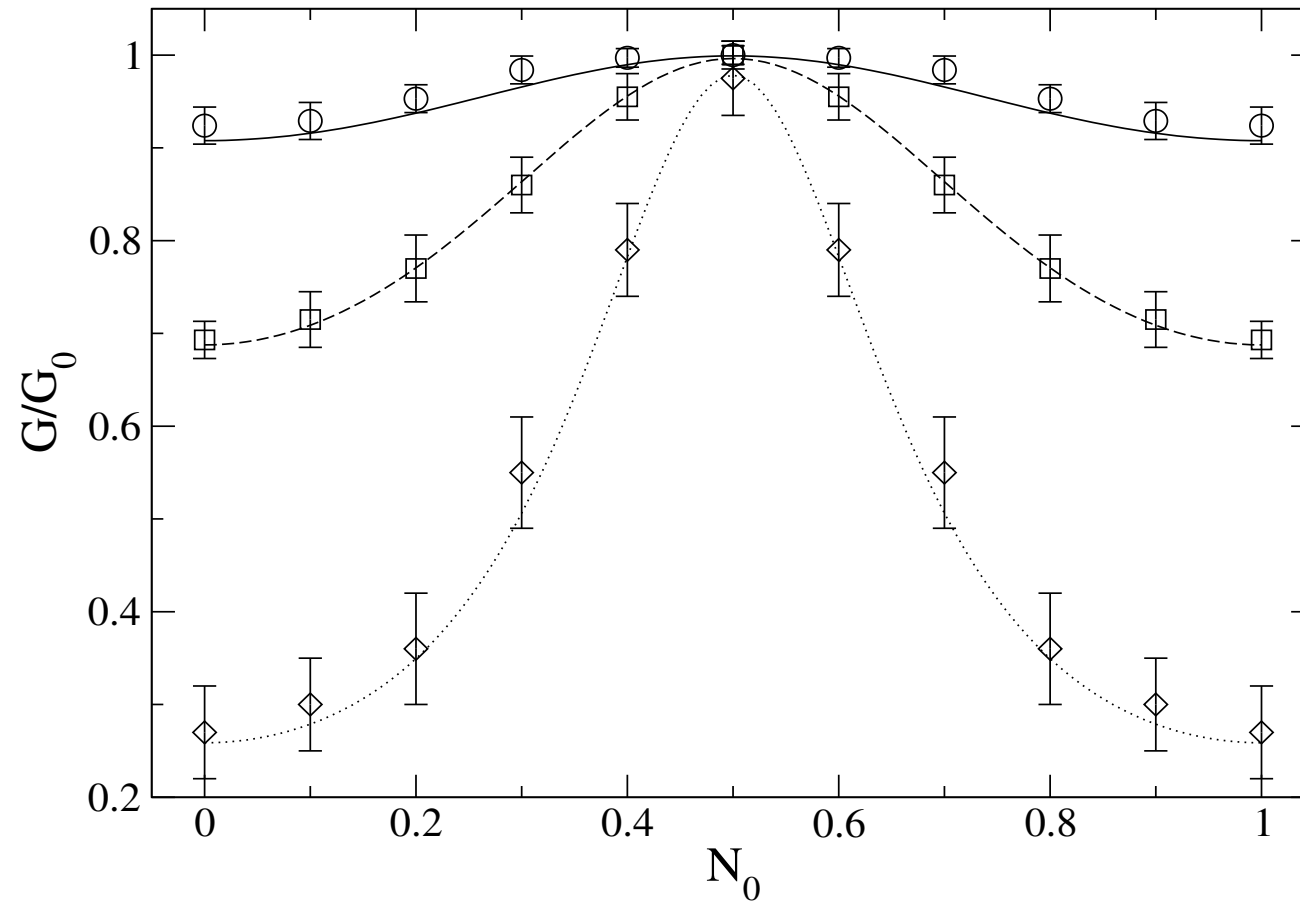
Refermionisierung gibt exakten Leitwert

$$G / G_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{4k_B T \cosh^2(E / 2k_B T)} \frac{w^2}{w^2 + \cos^2[\pi N_0 + \pi E / E_s]}$$

$$w = \frac{(4 - \lambda^2)^2}{8\lambda(4 + \lambda^2)}, \lambda = \pi V_0 / D \leq 2$$

Ermöglicht präzise Tests für Numerik

PIMC: Vergleich zum $g=1$ Resultat

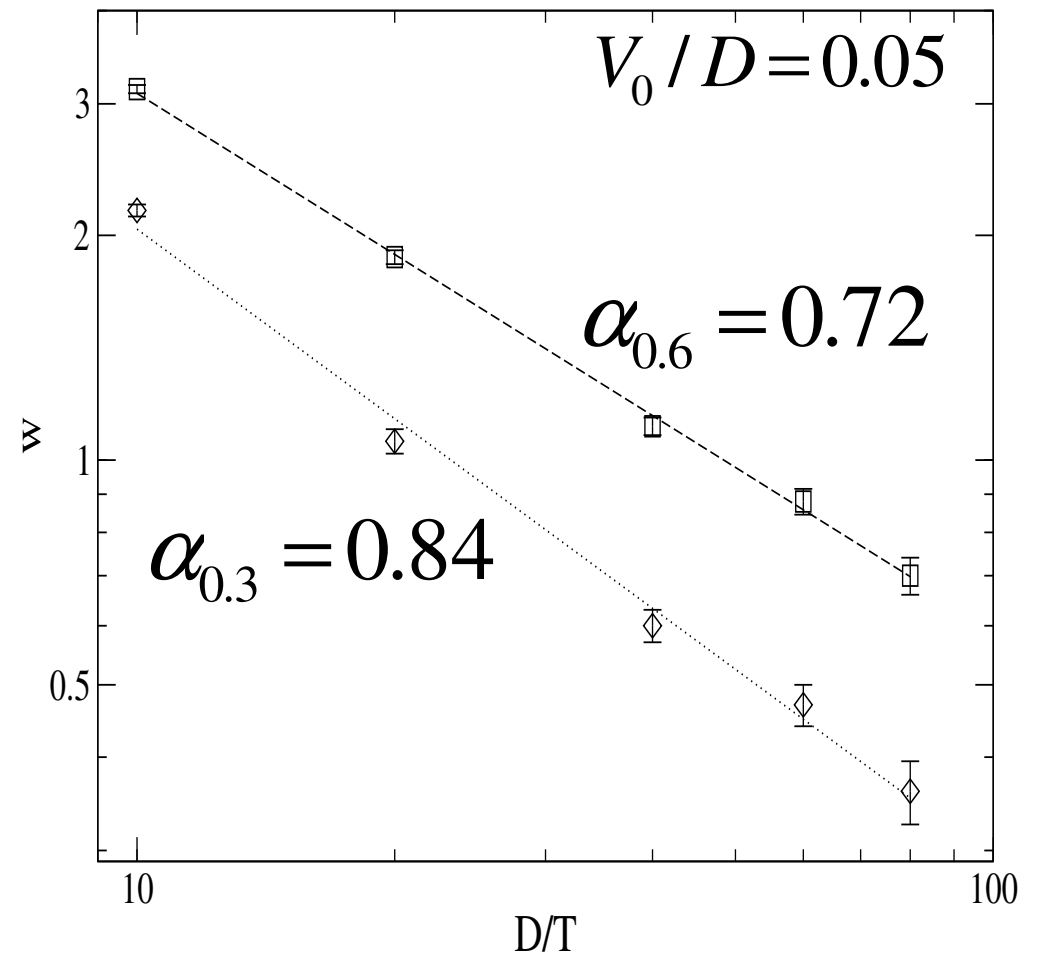


Fabry-Perot Regime

- Für $k_B T / D > 0.01$
 $g=1$ Linienform, mit

$$w = w_g(T) \propto T^{\alpha_g}$$

- **Fabry-Perot Regime**,
breite Resonanz
- Tiefere T : Kohärentes
resonantes Tunneln



Kohärentes resonantes Tunneln

Tiefe Temperatur, beliebige
Transmission: Universalität

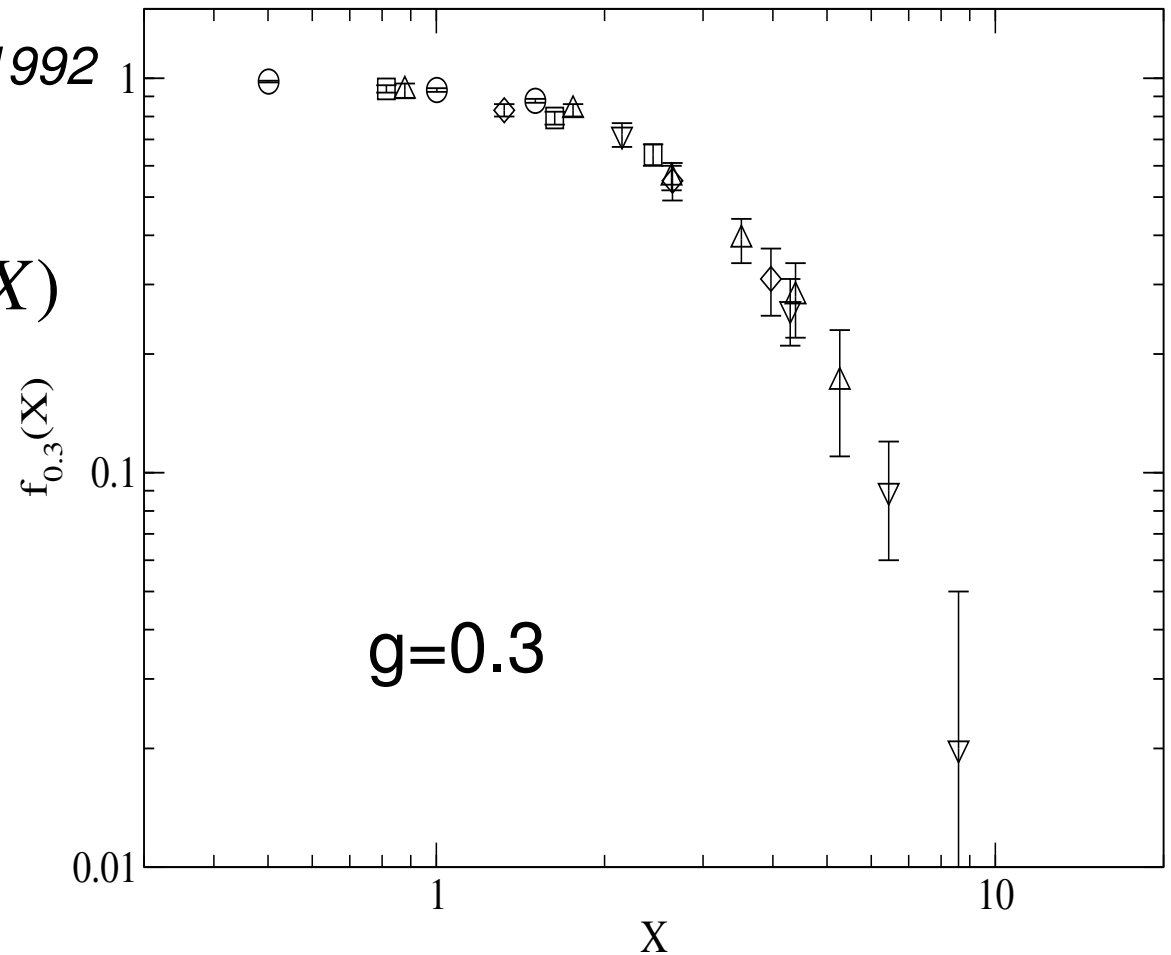
Kane & Fisher, PRB 1992

$$G(N_0, T, V_0, d, g) / G_0 = f_g(X)$$

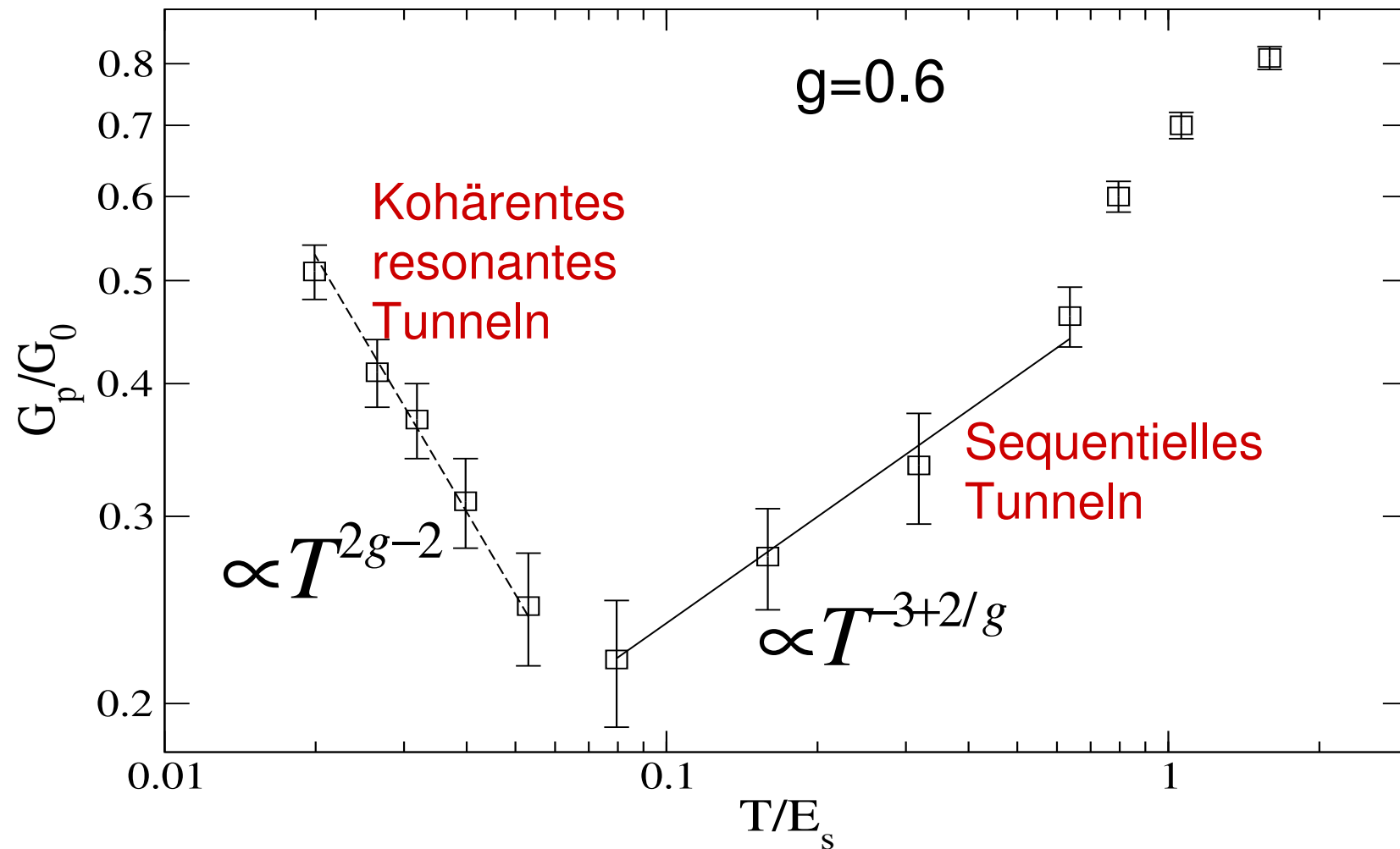
$$X = cT^{g-1} |N_0 - 1/2|$$

$$f(X \rightarrow 0) = 1 - X^2$$

$$f(X \rightarrow \infty) \propto X^{-2/g}$$



Fast geschlossener Quantenpunkt: Temperaturverhalten Leitwert-Maximum



Korreliertes sequentielles Tunneln

- PIMC Daten in Übereinstimmung mit Experiment, falsifizieren einfache sequentielle Theorien in diesem Bereich
- Mikroskopische Theorie: Korreliertes sequentielles Tunneln, aber unkontrollierte Näherungen!
Thorwart, Grifoni et al., PRL 2002
- Noch besseres theoretisches Verständnis erforderlich

Zusammenfassung

- Numerisch exakter Zugang zur Physik beliebig korrelierter Kunstatome über PIMC
 - 2D Quantenpunkte: Übergang zum Wignermolekül, magische Zahlen, Spineffekte, Hundsche Regeln
 - 1D Quantenpunkte in Luttingerflüssigkeiten: Fabry-Perot-Verhalten in fast offenen Systemen, korreliertes sequentielles Tunneln in fast geschlossenen Quantenpunkten
 - Dank an den SFB 276 für Förderung!
-