Töltéshordozók fénnyel kontrollált dinamikája

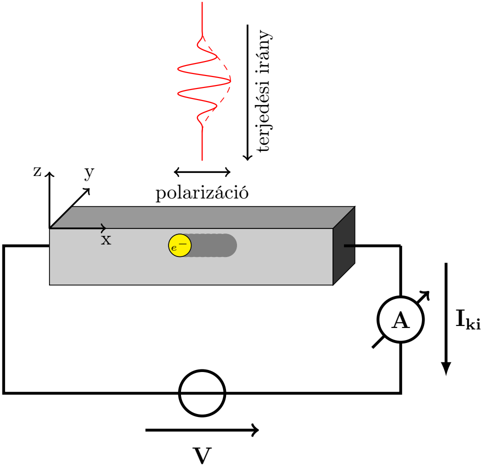
Készítette: Magashegyi István
Témavezető: Dr. Földi Péter

Szegedi Tudományegyetem,
Természettudományi és Informatikai Kar,
Elméleti Fizikai Tanszék

2018. október 25.

„Az Emberi Erőforrások Minisztériuma UNKP-18-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült”

A sematikus kísérleti elrendezés



Alapfeltevések

- az elektronok mozgását csak egydimenzióban (x irány) vizsgáljuk
- a lézerimpulzus hatására létrejövő külső elektromos tér vektorpotenciáljának is csak az x irányú komponensét vesszük figyelembe.
- a külső lézertér megfelelően gyenge
- sávátmenetektől eltekintünk
- rácsrezgésektől eltekintünk
- a gerjesző impulzus és az indukált áram kapcsolatát vizsgáljuk.

Kváziszabad-elektron közelítés

- szabad elektrongáz
- a periodikus potenciált perturbációként kezeljük
- nulladik közelítés az üres rács modell
- az alapállapot síkhullám

$$\Psi_{\underline{\mathbf{k}}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\underline{\mathbf{kr}}}$$

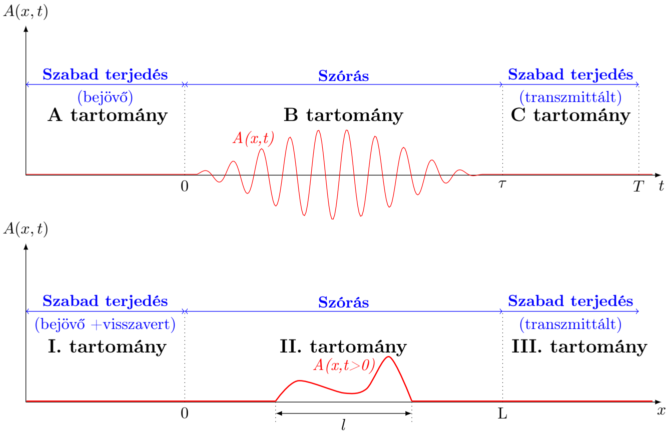
- a diszperziós reláció

$$\epsilon_{\underline{\mathbf{k}}} = \frac{\hbar^2 \underline{\mathbf{k}}^2}{2m}, \tag{1}$$

- Az vezetési sáv aljára koncentrálunk, ahol ez a közelítés megfelelő.

Peremfeltételek

A modellben szereplő tartományok, illetve a lézerimpulzus vektorpotenciál tér- és időfüggésének sematikus ábrája.



A külső lézerimpulzus

Vektorpotenciál:

$$A(x,t) = A_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{\tau}t\right)\sin\left(\omega_0 t\right), \tag{2}$$

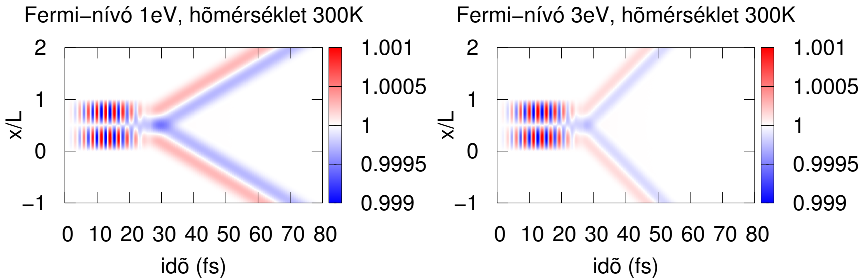
ahol τ a lézerimpulzus időbeli hossza, l pedig a térbeli kiterjedése.
A szimulációk folyamán a lézerimpulzus

- időbeli hossza $\tau = 26,7 fs$ (10 teljes ciklus)
- központi körfrekvenciája $\lambda_0 = 800 nm$
- térbeli kiterjedése $l = 160 nm$

Numerikus szimulációs eredmények

A Fermi-eloszlás szerint felösszegzett valószínűségi sűrűségek különböző ferminívok esetén [1].

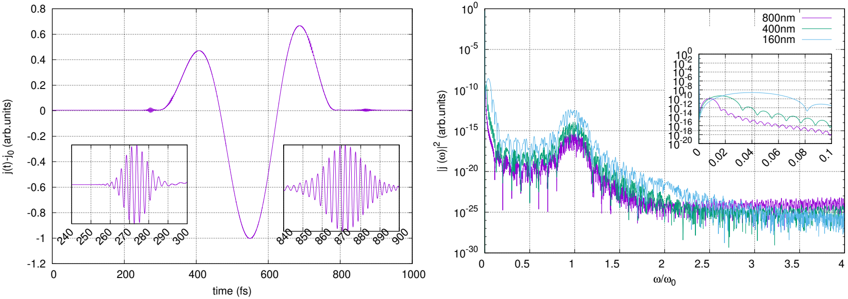
$$\varrho(T) = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| f(E(\mathbf{k}), T, \mu_F). \tag{3}$$



[1] I. Magashegyi, L. Zs. Szabó, P. Földi, *J. Opt. Soc. Am. B* **35**, A116-A125 (2018.)

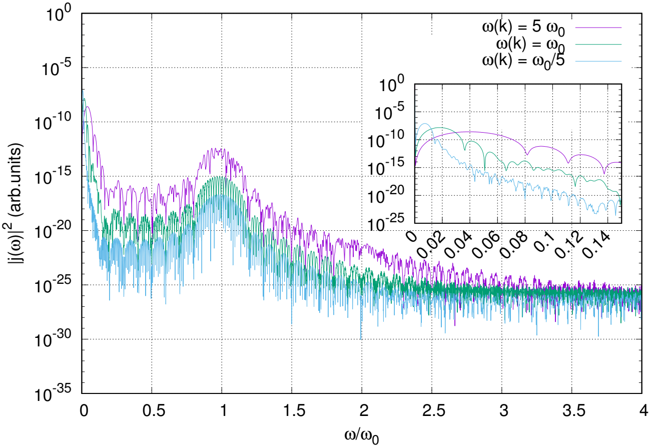
Indukált áramok

A keltett áram tipikus időbeli lefolyása és spektruma különböző szélességű kivilágítások esetén [1].



[1] I. Magashegyi, L. Zs. Szabó, P. Földi, *J. Opt. Soc. Am. B* **35**, A116-A125 (2018.)

A keltett áram tipikus időbeli spektruma különböző síkhullám energiák esetén [1].



[1] I. Magashegyi, L. Zs. Szabó, P. Földi, *J. Opt. Soc. Am. B* **35**, A116-A125 (2018.)

Kiáramló össztöltés számítása

Az indukált áramokat időskálájuk miatt nehéz mérni.
Kézenfekvő továbblépési irány az impulzus és az indukált töltések kapcsolatának vizsgálata.
A szimulációs eredményeim azt mutatják, hogy kiáramló össztöltés meghatározása a valószínűségi áramok időintegráljával nehézkes:

- a gerjesztő impulzus és a töltés kifutási idejének nagyságrendi eltérése
- apró oszcillációk
- paraméter optimalizáció
- rendkívüli számítási igény

Alapötlet: A dinamikát a külső tér hatása alatt a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásával határozzuk meg, majd a kiáramló ösztöltést a végállapot spekturm alapján számítjuk ki.

A töltés számításának analitikus megközelítése

- Az egyszerűség kedvéért a lézerimpulzus lefutásának végére választjuk a $t = 0$ időpillanatot.
- A kiindulás kvantummechanikai állapot legyen $\Psi(x, t = 0) = \Psi(x)$ amely impulzus reprezentációját jelölje $\tilde{\Psi}(p)$.
- Az állapotot a későbbi időpontokban jelölje $\Psi(x, t)$.
- A $\Psi(x, t)$ állapotfüggvényéről válasszunk le egy

$$\Psi_0(x, t) = \exp\left[i\left(\frac{p}{\hbar}x - \omega(p)t\right)\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right]$$

síkhullám tagot a következőképp:

$$\Psi(x, t) = \Psi_0(x, t) + \Psi_1(x, t).$$

- Külső tér távollétében a valószínűségi áram

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im} \left\{ \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right\}.$$

- Behelyettesítve a $\Psi(x,t) = \Psi_0(x,t) + \Psi_1(x,t)$ felbontást

$$\begin{aligned} j(x,t) &= \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im} \left\{ \Psi_0^*(x,t) \frac{\partial \Psi_0(x,t)}{\partial x} \right\} + \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im} \left\{ \Psi_1^*(x,t) \frac{\partial \Psi_1(x,t)}{\partial x} \right\} \\ &\quad + \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im} \left\{ \Psi_0^*(x,t) \frac{\partial \Psi_1(x,t)}{\partial x} + \Psi_1^*(x,t) \frac{\partial \Psi_0(x,t)}{\partial x} \right\} \\ &= j_0(x,t) + j_1(x,t) + j_c(x,t) \end{aligned}$$

- $j_0(x,t) = j_0 = \hbar k/m$ a síkhullám rész árama, amely konstans térben és időben.
- $j_1(x,t)$ a $\Psi_1(x,t)$ valószínűségi árama.
- $j_c(x,t)$ a síkhullám és az additív $\Psi_1(x,t)$ tag kölcsönhatását tartalmazó "kereszt" tag.

A valószínűségi áram integrálja

- A valószínűségi áram integrálját szeretnénk meghatározni
- A síkhullám által szállított töltések $Q_0 = \hbar kt/m$ a Fermi statisztika szerinti felösszegzésnél kiejtik egymást
- Csak a síkhullám által szállított töltésen felüli részre koncentrálunk mert az hordozza a dinamikát. Jelölése: Q_d

$$
\begin{aligned}
Q_d(x, t \to \infty) = Q_d(x) &= \int_0^\infty j(x,t) - j_0(x,t)\,\mathrm{d}t \\
&= \underbrace{\int_0^\infty j_1(x,t)\,\mathrm{d}t}_{Q_1(x)} + \underbrace{\int_0^\infty j_c(x,t)\,\mathrm{d}t}_{Q_c(x)}\,.
\end{aligned}
$$

Szabad terjedés

Külső tér távollétében egy tetszőleges kvantummechanikai állapot időfejlődése meghatározható az állapot impulzus reprezentációjának ismeretében a következőképpen:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} e^{-i\omega(p)t} \, \mathrm{d}p,$$

ahol $\tilde{\psi}(p)$ a $\psi(x, t = 0)$ Fourier transzformáltja ami a szabad terjedés időtartama alatt állandó.

Ezt felhasználva a $Q_1(x)$ és a $Q_c(x)$-re vonatkozó kifejezésekben:

$$\begin{aligned}
Q_1(x) &= \frac{1}{2\pi m}\mathrm{Im}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ip_2}{\hbar}\tilde{\Psi}_1^*(p_1)\tilde{\Psi}_1(p_2)e^{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)x}\right. \\
&\qquad \left.\left[\int_0^{\infty}e^{-i[\omega(p_2)-\omega(p_1)]t}\mathrm{d}t\right]\,\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\right\} \\
Q_c(x) &= \frac{1}{m\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{Im}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}ip\tilde{\Psi}_1(p)e^{\frac{i}{\hbar}(p-p_0)x}\left[\int_0^{\infty}e^{-i(\omega(p)-\omega_0(p_0))t}\mathrm{d}t\right]\,\mathrm{d}p\right. \\
&\qquad \left.+\int_{-\infty}^{\infty}ip_0\tilde{\Psi}_1^*(p)e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x}\left[\int_0^{\infty}e^{i(\omega(p)-\omega_0(p_0))t}\,\mathrm{d}t\right]\,\mathrm{d}p\right\}
\end{aligned}$$

Q_1 meghatározása

$$\int_0^\infty e^{-i[\omega(p_2)-\omega(p_1)]t}\mathrm{d}t = \pi\delta(\omega(p_2)-\omega(p_1)) - \frac{i}{\omega(p_2)-\omega(p_1)}.$$

Az idő szerinti integrál kiszámolásával Q_1-re a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} Q_1(x) = \operatorname{Im}\Bigg\{ & \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} i\frac{p_1}{|p_1|}\tilde{\Psi}_1^*(p_1)\tilde{\Psi}_1(p_1)\,\mathrm{d}p_1 \\ & -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} i\frac{p_1}{|p_1|}\tilde{\Psi}_1^*(p_1)\tilde{\Psi}_1(-p_1)e^{-\frac{i}{\hbar}2p_1x}\,\mathrm{d}p_1 \\ & +\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{p_2}{p_2^2-p_1^2}\tilde{\Psi}_1^*(p_1)\tilde{\Psi}_1(p_2)e^{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)x}\,\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\Bigg\} \end{aligned}$$

A képzetes rész vételével és az integrálokban szereplő törtek $p_2 - p_1$ ill. $p_2 + p_1$ nevezőjű tagokra történő szétbontásával valamint az egyik $p_2 + p_1$ nevezőjű integrálban a $p1 \leftrightarrow p2$ változócserével a következő kifejezésre jutunk

$$\begin{aligned} Q_1(x) &= \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{p_1}{|p_1|}\tilde{\Psi}_1^*(p_1)\tilde{\Psi}_1(p_1)\,\mathrm{d}p_1 \\ &+\frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)x}}{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)}\tilde{\Psi}_1^*(p_1)\tilde{\Psi}_1(p_2)\,\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2. \qquad (4) \end{aligned}$$

Felhasználva azt, hogy az első integrálban megjelenik a $\tilde{\Psi}_1^*(p_1)\tilde{\Psi}_1(p_1) = \tilde{\rho}(p_1)$ spektrális valószínűségi sűrűség ill. azt, hogy a második integrálban szereplő tört felírható egy integrál segítségével a következőképpen

$$\int_{-\infty}^{x} e^{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)s}\,\mathrm{d}s = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)x}}{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)} - \underbrace{\lim_{s\to-\infty}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)s}}{\frac{i}{\hbar}(p_2-p_1)}}_{L_e(p_2,p_1)}, \tag{5}$$

ahol az $L_e(p_2,p_1)$ korlátos, a $Q_1(x)$-re vonatkozó kifejezés tovább egyszerűsíthető:

$$Q_1(x) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{sign}(p)\tilde{\rho}(p)\,\mathrm{d}p + \int_{-\infty}^{x} \rho(s)\,\mathrm{d}s + I_{2,1} \tag{6}$$

Q_c meghatározása

A korábbi időintegrál eredményét felhasználva a $Q_c(x)$-re vonatkozó kifejezésben a következőre juthatunk:

$$\begin{aligned}
Q_c(x) &= \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{Im} \left\{ i\pi \frac{p_0}{|p_0|} \left[\tilde{\Psi}_1(p_0) + \tilde{\Psi}_1^*(p_0) \right] \right. && (7) \\
&\quad - i\pi \frac{p_0}{|p_0|} \left[\tilde{\Psi}_1(-p_0) e^{-\frac{i}{\hbar} 2p_0 x} - \tilde{\Psi}_1^*(-p_0) e^{\frac{i}{\hbar} 2p_0 x} \right] \\
&\quad + 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p}{p^2 - p_0^2} \tilde{\Psi}_1(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p-p_0)x} \, \mathrm{d}p && (8) \\
&\quad \left. - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p_0}{p^2 - p_0^2} \tilde{\Psi}_1^*(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p_0)x} \, \mathrm{d}p \right\} && (9)
\end{aligned}$$

A képzetes rész képzést végrehajtva és az előbbihez hasonló törtekre bontást és változócserét végrehajtva a következő kifejezésre jutunk

$$Q_c(x) = \sqrt{2\pi\hbar}\frac{p_0}{|p_0|}\mathrm{Re}\left\{\tilde{\Psi}_1(p_0)\right\} + \frac{2}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{Re}\left\{\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p-p_0)x}}{\frac{i}{\hbar}(p-p_0)}\tilde{\Psi}_1(p)\,\mathrm{d}p\right\}, \tag{10}$$

amely tovább egyszerűsíthető az exponens integráljának felhasználásával:

$$Q_c(x) = \sqrt{2\pi\hbar}\frac{p_0}{|p_0|}\mathrm{Re}\left\{\tilde{\Psi}_1(p_0)\right\} + 2\mathrm{Re}\left\{\int\limits_{-\infty}^{x} \Psi_1(s)e^{-\frac{i}{\hbar}p_0 s}\,\mathrm{d}s\right\} + I_1, \tag{11}$$

Töltés különbségek vizsgálata

- A kapott kifejezésekben található I_1 és $I_{2,1}$ tagok függetlenek a tér koordinátától.
- Két különböző pont közötti töltéskülönbség vizsgálata esetén kiesnek.
- Az így kapott eredmény is releváns kísérletileg továbbá felhasználható az összefüggések vizsgálatára.

$$Q_d(x_2) - Q_d(x_1) = \frac{1}{2}\int_{x_1}^{x_2} \rho_1(x)\,\mathrm{d}x + 2\mathrm{Re}\left\{\int_{x_1}^{x_2} \Psi_1(x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_0 x}\,\mathrm{d}x\right\} \quad (12)$$

A formulák ellenőrzése

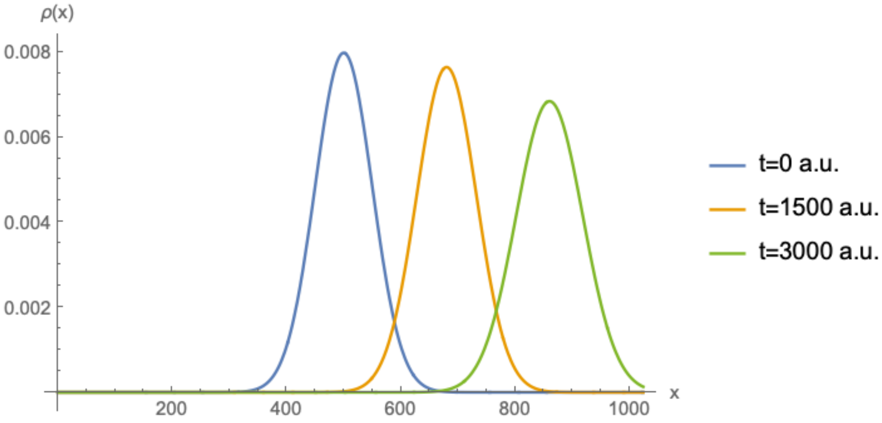
- A kapott formulák helyességét egy analitikusan is jól kezelhető Ψ_1 segítségével tudjuk vizsgálni.
- A p_G impulzusú és σ_p spektrális félérték szélességű x_0-ba centrált

$$\tilde{\Psi}_1(p) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_p}} \exp\left(-\frac{(p-p_G)^2}{4\sigma_p^2} - \frac{i}{\hbar}px_0\right), \tag{13}$$

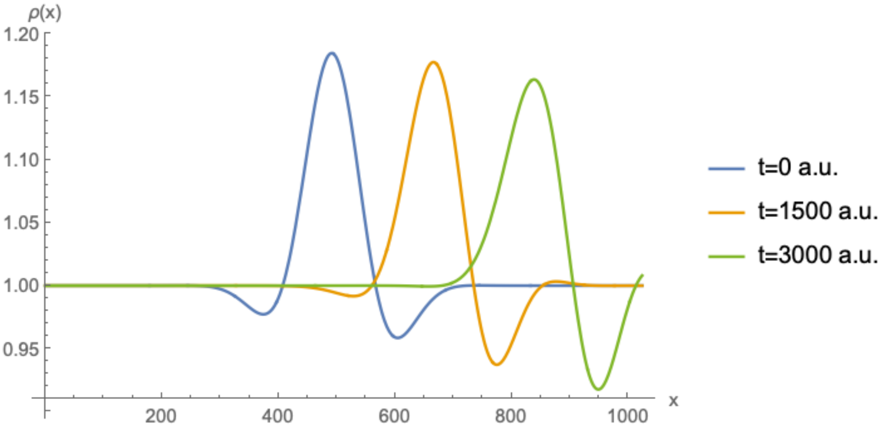
Gauss csomag megfelel erre a feladatra.

Valószínűségi sűrűségek

A Gauss hullám csomag valószínűségi sűrűsége.



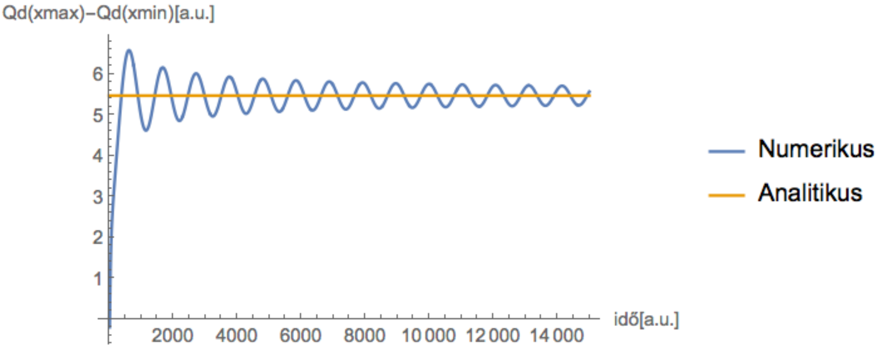
A teljes állapot valószínűségi sűrűsége



A töltéskülönbségre kapott analitikus formula:

$$
\begin{aligned}
Q_d(x_2) - Q_d(x_1) \quad = \quad & \frac{1}{2}\left[\operatorname{erf}\left(\frac{x_2 - x_0}{\sqrt{2}\sigma_x}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x_1 - x_0}{\sqrt{2}\sigma_x}\right)\right] \\
& + \frac{2\sqrt{\pi}\sigma_x}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_x}} \exp\left(-\frac{(p_G - p_0)^2}{4\sigma_p^2}\right) \\
& \mathrm{Re}\left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}p_0 x_0} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x_2 - x_0}{2\sigma_x} + i\frac{p_0 - p_G}{2\sigma_p}\right)\right.\right. \\
& \left.\left. -\operatorname{erf}\left(\frac{x_1 - x_0}{2\sigma_x} + i\frac{p_0 - p_G}{2\sigma_p}\right)\right]\right\} \qquad (14)
\end{aligned}
$$

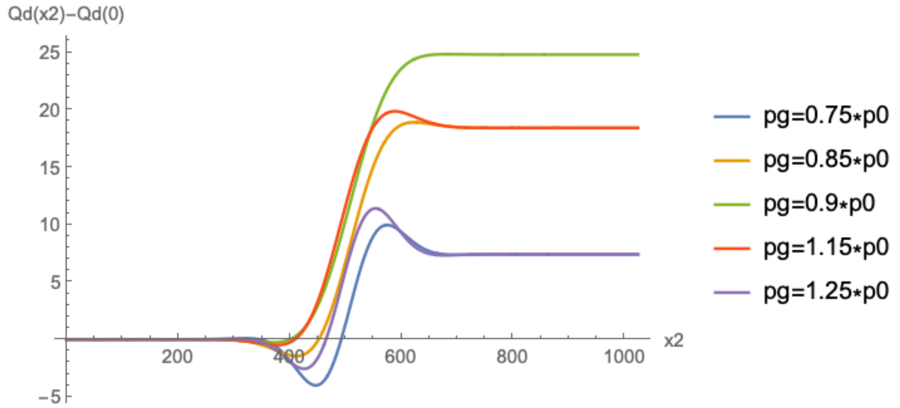
Konvergencia vizsgálat



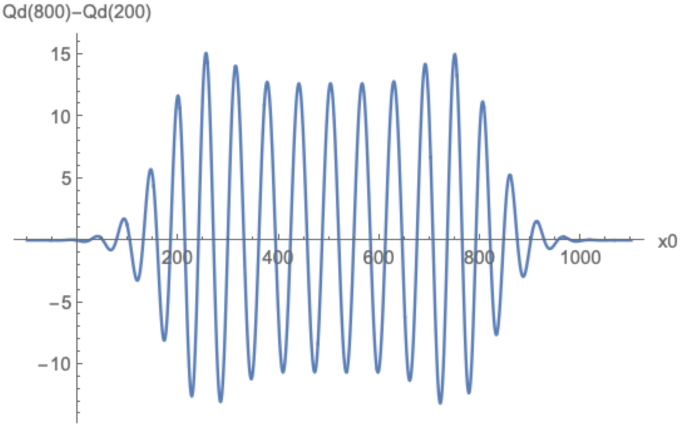
ábra: A numerikusan és az analitikusan számolt töltéskülönbség az idő függvényében.

Töltéskülönbségek különböző paraméterek esetén

Töltéskülönbségek az x_2 függvényében.



Töltéskülönbségek az x_0 függvényében.



Összefoglalás

- Kváziszabad-elektron közelítésen alapuló szilárdtestfizikai modell.
- Lézerimpulzus és az indukált áramok kapcsolatának vizsgálata.
- A transzportált össztöltés meghatározásának nehézségei.
- Az össztöltés meghatározásának újszerű megközelítése.
- Gauss-os eset vizsgálata.

Összefoglalás

- Kváziszabad-elektron közelítésen alapuló szilárdtestfizikai modell.
- Lézerimpulzus és az indukált áramok kapcsolatának vizsgálata.
- A transzportált össztöltés meghatározásának nehézségei.
- Az össztöltés meghatározásának újszerű megközelítése.
- Gauss-os eset vizsgálata.

Köszönöm a megtisztelő figyelmet!