



ERNST MORITZ ARNDT UNIVERSITÄT GREIFSWALD  
INSTITUT FÜR PHYSIK

## Transport durch Graphen Quantenpunkte

MASTERARBEIT

vorgelegt von: Christian Schulz  
geboren am 26. Oktober 1989 in Neubrandenburg

erster Gutachter: Prof. Dr. Holger Fehske  
zweiter Gutachter: PD Dr. Berndt Bruhn

Greifswald, 02. September 2014



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Dirac-Gleichung . . . . .	5
2.2	Dirac-Elektronen und Quantenpunkte in Graphen . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Formale Beschreibung der Elektronenstreuung an Graphen Quantenpunkten</b>	<b>13</b>
3.1	Lösungen der Dirac-Gleichung . . . . .	13
3.1.1	Lösung der zeitabhängigen Dirac-Gleichung . . . . .	13
3.1.2	Lösung der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung . . . . .	15
3.2	Aufstellen der Wellenfunktionen . . . . .	18
3.3	Stetigkeitsbedingung und Berechnung der Streukoeffizienten . . . . .	22
3.4	Analyse der Streukoeffizienten . . . . .	26
3.4.1	Stationäre Grenzfälle . . . . .	26
3.4.2	Analytische Eigenschaften . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Berechnung von Streugrößen</b>	<b>35</b>
4.1	Wahrscheinlichkeitsstromdichte und Streueffizienz . . . . .	35
4.1.1	Wahrscheinlichkeitsstromdichte . . . . .	35
4.1.2	Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle . . . . .	39
4.1.3	Streueffizienz . . . . .	41
4.2	Wahrscheinlichkeitsdichte . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Diskussion der Ergebnisse</b>	<b>45</b>
5.1	Ergebnisse im stationären Grenzfall . . . . .	45
5.1.1	Streueffizienz und Resonanzstruktur . . . . .	45
5.1.2	Winkelverteilung und Nahfeld . . . . .	55
5.2	Symmetrisch oszillierender Quantenpunkt . . . . .	59
5.2.1	Streueffizienz und Resonanzstruktur . . . . .	60
5.2.2	Winkelverteilung und Nahfeld . . . . .	66

5.3	Asymmetrisch oszillierender Quantenpunkt . . . . .	72
5.3.1	Streueffizienz und Resonanzstruktur . . . . .	72
5.3.2	Winkelverteilung . . . . .	78
5.3.3	Adiabatischer Grenzfall . . . . .	80
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>86</b>
	<b>Anhang - Fall symmetrischer Streukoeffizienten</b>	<b>89</b>
	<b>Literatur</b>	<b>91</b>

# 1 Einleitung

Ein nicht intuitiver Streueffekt relativistischer Teilchen ist die verstärkte Transmission durch hohe und breite Potentialbarrieren. Bereits 1928 wurde dies durch Oskar Klein am Beispiel der Streuung eines Dirac-Elektrons an einem Potentialsprung gezeigt [1–3]. Ursache dieses Klein-Tunnel-Effektes sind die von Dirac vorhergesagten oszillierenden Zustände negativer Energie, die eng mit dem Begriff des Antiteilchens verknüpft sind [4]. Damit verbunden ist das Auftreten negativer Brechungsindizes, die mit der Antiparallelität von Phasen- und Gruppengeschwindigkeit einhergehen [1]. Im Gegensatz dazu steht der Tunneleffekt eines nicht-relativistischen Schrödinger-Teilchens, welches für negative Energien evaneszente Wellenlösungen aufweist, die für unendlich breite oder hohe Potentialbarrieren letztlich zum Verschwinden der Transmission führen [5–7]. Der experimentelle Nachweis des Klein-Tunnelns erweist sich als schwierig, da zur Beobachtung eine Potentialänderung der Größenordnung  $\approx mc^2$  über die Compton-Wellenlänge des Elektrons notwendig ist [8].

In Graphen - einer zweidimensionalen Schicht aus Kohlenstoffatomen - kann das Klein-Tunneln in Folge der besonderen Beschaffenheit von Band- und Gitterstruktur realisiert werden. Dies wurde bereits experimentell bestätigt [9–12]. Niederenergetische Leitungs-Elektronen weisen in der Nähe der Dirac-Punkte eine lineare Dispersion auf und besitzen zudem eine Pseudospin-Quantenzahl, welche die Zugehörigkeit zu einem der Untergitter des hexagonalen Bienenwabengitters angibt [13]. Dieses pseudorelativistische Verhalten legt die Beschreibung der Elektronen mittels einer masselosen Dirac-Gleichung (Weyl-Gleichung) nahe, mit der auch die Streuung an (stückweise konstanten) Potentialen untersucht werden kann [3, 8, 14–17]. Bei senkrechtem Einfall der Elektronenwelle äußert sich das Klein-Tunneln in einer perfekten Transmission des Elektrons, die auf die Erhaltung des Pseudospins zurückzuführen ist. Diese Abwesenheit der Rückstreuung tritt auch bei nicht senkrechtem Einfall auf Potentialbarrieren auf, die durch die Ausbildung stehender Wellen wie ein Fabry-Pérot-Interferometer fungiert. Bei Berücksichtigung des intrinsischen Spins (quantenmechanischer Eigendrehimpuls des Elektrons) ergeben sich in Folge der Spin-Bahn-Kopplung (Rashba-Effekt) neue Streueffekte ähnlich denen in doppelschichtigem Graphen, die sich

unter anderem in einem Ausbleiben des Klein-Tunneleffektes bei senkrechtem Einfall (Spin-Hall-Ablenkung) aufgrund der Erhaltung des intrinsischen Spins äußern [3, 18–20]. Der Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung ist für Energien kleiner als die Rashba-Sprung-Amplitude wesentlich, während für höhere Energien der intrinsische Spin vernachlässigt werden kann.

Das Klein-Tunneln durch ebene Stufenpotentiale verhindert einen elektrostatischen Einfang delocalisierter  $\pi$ -Bindungs-Elektronen. Bei der Streuung an nicht-ebenen Stufenpotentialen wie einem kreisförmigen Quantenpunkt können jedoch quasigebundene Zustände auftreten. Wie anhand verschiedener Geometrien von Quantenpunkten gezeigt wurde, ist dieser Einfang des Elektrons möglich, solange die klassische Elektronendynamik integrierbar und die korrespondierende quantenmechanische Bewegungsgleichung separierbar ist [21]. Gebundene Zustände sind bei Vorliegen einer chaotischen Dynamik hingegen nicht erlaubt. Eine Folge des Elektroneneinfangs durch kreisförmige Quantenpunkte sind Resonanzen in der Streueffizienz des Elektrons, sowie eine empfindliche Winkelabhängigkeit der Stromdichte [22–25]. Der Streuprozess weist dabei aufgrund der linearen Dispersion des Elektrons eine formale Ähnlichkeit zur optischen Mie-Streuung an kleinen Partikeln auf [26], wobei jedoch die Chiralität des Elektrons zu subtilen Unterschieden führt. Durch Variation der Energie des Elektrons, sowie der Höhe und Breite des Quantenpunkts wird die Streucharakteristik des Elektrons beeinflusst, wobei das Klein-Tunneln in Folge einer Fano-Resonanz zwischen nicht-resonanten und resonanten Partialwellen nahezu vollständig unterdrückt werden kann [23, 27]. Während für kleine Abmessungen des Quantenpunkts Welleneigenschaften des Elektrons zum Tragen kommen, treten für größere Quantenpunkte strahlenoptische Phänomene wie Kaustiken auf (Veselago-Linse [28]), die Ähnlichkeit mit denen aus der Strahlenoptik bekannten Linseneffekten haben.

Da die Energie des Elektrons und die Höhe des Quantenpunkts wesentlichen Einfluss auf die Streucharakteristik des Elektrons haben, entsteht die Frage, ob der Transport von Dirac-Elektronen durch Quantenpunkte, deren Höhe zeitabhängig variiert, maßgeblich beeinflusst werden kann. Inelastische Streuprozesse in Graphen wurden bereits an periodisch oszillierenden, ebenen Potentialen untersucht [29–33]. Wesentliche Ergebnisse sind hier die Ausbildung Josephson-artiger Ströme senkrecht zur Bewegung des Elektrons [31] und das Auftreten von Fabry-Pérot-Resonanzen in Folge der Quantisierung der Energien [30]. Eine perfekte Transmission bei senkrechtem Einfall (Klein-Tunneln), sowie die stark anisotropische Winkelabhängigkeit der Transmission durch Potentialbarrieren sind auch hier vorzufinden.

In dieser Arbeit untersuchen wir Transport- und Streuprozesse einer ebenen Elek-

---

tronenwelle an kreisförmigen (oszillierenden) Quantenpunkten in Graphen. In Abschnitt 2 werden die für diese Arbeit wichtigsten Eigenschaften der Dirac-Gleichung rekapituliert und festkörperphysikalische Eigenschaften der Elektronen, sowie die Realisierung von Quantenpunkten in Graphen durch äußere Potentiale diskutiert. In Abschnitt 3 erfolgt die Beschreibung der Elektronenstreuung an Graphen-Quantenpunkten. Dazu werden mit Hilfe der Dirac-Gleichung die orts- und zeitabhängigen Wellenfunktionen des Streuproblems formuliert und über die Forderung nach Stetigkeit Bestimmungsgleichungen für die Streukoeffizienten abgeleitet. Ausgehend von der Kontinuitätsgleichung führen wir in Abschnitt 4 Transport- und Streugrößen ein, mit denen das Streuverhalten des Elektrons charakterisiert werden kann. In Abschnitt 5 folgt eine Diskussion dieser Streugrößen. Wir geben hier zunächst einen detaillierten Überblick der Streueffekte an einem zeitunabhängigen Quantenpunkt. Anschließend untersuchen wir das Streuverhalten an einem oszillierenden Quantenpunkt in Hinblick auf die Modifikationen der Streueffekte des zeitunabhängigen Falls. Von besonderem Interesse wird dabei die Rolle der Energiequantisierung in Folge der periodischen Oszillation des Quantenpunkts und ihre Auswirkung auf die Streucharakteristik des Elektrons sein. Abschnitt 6 stellt die wesentlichen Ergebnisse der Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick auf mögliche Erweiterungen der theoretischen Betrachtungen.



# 2 Theoretische Grundlagen

In dieser Arbeit werden wir Transportprozesse von Elektronen durch Graphen Quantenpunkte untersuchen. Dazu müssen zunächst die Dirac-Gleichung und einige ihrer Eigenschaften rekapituliert werden [4, 34]. Im Anschluss werden wir festkörperphysikalische Eigenschaften niederenergetischer Elektronen, sowie die Realisierung von Quantenpunkten in Graphen diskutieren [8, 13, 14, 35].

## 2.1 Dirac-Gleichung

Die zeitabhängige Dirac-Gleichung lautet unter Verwendung von Heaviside-Lorentz-Einheiten ( $\hbar \equiv c \equiv 1$ ) [4]

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi. \quad (2.1)$$

Sie stellt die Grundgleichung zur quantenmechanischen Beschreibung der Dynamik eines relativistischen Elektrons dar, wobei die Zeitentwicklung des Zustandes  $\psi$  durch den Hamilton-Operator  $H$  bestimmt wird. Für ein freies Elektron mit Ruhemasse  $m$  lautet der Hamilton-Operator

$$H = -i \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\nabla} + \beta m. \quad (2.2)$$

Die vierdimensionalen, hermiteschen Matrizen  $\boldsymbol{\alpha}$  und  $\beta$  genügen den Relationen

$$\alpha_k^2 = 1, \quad \{\alpha_k, \alpha_l\} = 0 \quad \text{für } k \neq l, \quad \{\alpha_k, \beta\} = 0, \quad \beta^2 = 1, \quad (2.3)$$

wobei  $\{a, b\} = ab + ba$  der Antikommutator ist. Man kann unter Berücksichtigung der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung  $H\psi = E\psi$  zeigen, dass durch (2.3) die Energie-Impuls-Beziehung eines relativistischen Teilchens

$$E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2 \quad (2.4)$$

erfüllt wird. Da die Dirac-Gleichung (2.1) wie die Schrödinger-Gleichung eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit ist, ist die Linearität des

Impulsoperators  $\mathbf{p} = -i\nabla$  in Gleichung (2.2) eine notwendige Forderung, um die Kovarianz unter Lorentz-Transformationen zu gewährleisten.

In Hinblick auf die besondere Beschaffenheit von Graphen ist es notwendig, die Dirac-Gleichung für zwei Dimensionen zu formulieren. Bei Beschränkung der Bewegung in der  $x$ - $y$ -Ebene werden 3 Matrizen  $\alpha_x, \alpha_y$  und  $\beta$  benötigt, die die Relationen (2.3) erfüllen. Diese können durch die Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

dargestellt werden [36], sodass der Hamilton-Operator aus Gleichung (2.2) geschrieben werden kann als

$$H = \sigma_x p_x + \sigma_y p_y + m\sigma_z. \quad (2.6)$$

Die Beschreibung eines relativistischen Elektrons in zwei Dimensionen verringert die Anzahl der Freiheitsgrade um 2, da die Pauli-Matrizen (2.5) im Gegensatz zu den vierdimensionalen Matrizen  $\alpha$  und  $\beta$  nur zweidimensional sind. Der Zustand  $\psi$  aus Gleichung (2.1) ist entsprechend ein Spinor der Form  $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$ .

### Kontinuitätsgleichung

Wir definieren die  $\gamma$ -Matrizen  $\gamma^0 = \beta$  und  $\gamma^k = \beta\alpha_k$  mit  $k = 1, 2, 3$ , die in Übereinstimmung mit Gleichung (2.3) die Dirac-Algebra

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}, \quad (\eta^{\mu\nu}) = \text{diag}(1, -1, -1, -1) \quad (2.7)$$

erfüllen. Mit den  $\gamma$ -Matrizen können wir die Dirac-Gleichung (2.1) in die kovariante Form

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0, \quad \mu = 0, 1, 2, 3 \quad (2.8)$$

überführen. Dabei ist  $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$  und über doppelt auftretende Indizes wird summiert (Einstein-Summenkonvention). Wir definieren die Viererstromdichte

$$j^\mu = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi, \quad (2.9)$$

in der  $j^0 = \psi^\dagger \psi$  die Wahrscheinlichkeitsdichte und  $j^k = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^k \psi$  die Komponenten der Wahrscheinlichkeitsstromdichte darstellen. Die Viererstromdichte (2.9)

erfüllt die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad (2.10)$$

wie sich unter Ausnutzung der Dirac-Algebra (2.7) und der Dirac-Gleichung (2.8) leicht zeigen lässt [34]: Multiplizieren wir die Dirac-Gleichung (2.8) mit  $\psi^\dagger \gamma^0$  von links und bilden das Adjungierte der erhaltenen Gleichung, ergibt die Subtraktion beider Gleichungen den Ausdruck  $\partial_\mu \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi + \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0$ . Das gleiche Ergebnis erhält man jedoch auch nach Einsetzen der Viererstromdichte (2.9) in Gleichung (2.10) und Ausführen der Produktregel.

Im zweidimensionalen Fall folgt mit der Ersetzung  $\beta = \sigma_z$  und  $\alpha_k = \sigma_k$  mit  $k = 1, 2$  für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\mathbf{j} = \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi. \quad (2.11)$$

### Drehimpulserhaltung

Wir betrachten ein relativistisches Elektron, welches durch den zweidimensionalen Hamilton-Operator (2.6) beschrieben wird. Es lässt sich zeigen, dass der Gesamtdrehimpuls  $J = L_z + \frac{1}{2}\sigma_z$ , welcher sich aus dem Bahndrehimpuls  $L_z$  und dem Spin  $\sigma_z$  des Elektrons zusammensetzt, eine Erhaltungsgröße darstellt [34]. Dazu berechnen wir zunächst den Kommutator von  $L_z$  und  $H$  mit Hilfe der fundamentalen Vertauschungsrelation  $[x_i, p_j] = i\delta_{ij}$  und erhalten

$$\begin{aligned} [L_z, H] &= [xp_y - yp_x, p_x \sigma_x + p_y \sigma_y] \\ &= i(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \neq 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Der Bahndrehimpuls allein ist also noch keine Erhaltungsgröße. Für den Kommutator von  $\sigma_z$  und  $H$  ergibt sich  $[\sigma_z, H] = [\sigma_z, \sigma_x] p_x + [\sigma_z, \sigma_y] p_y$ , und nach Ausnutzen der Beziehung  $[\sigma_i, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l$  mit  $\varepsilon_{ikl}$  als Levi-Cevita-Tensor folgt

$$[\sigma_z, H] = -2i(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (2.13)$$

Mit den Ergebnissen (2.12) und (2.13) erhalten wir schließlich

$$[J, H] = \left[ L_z + \frac{1}{2}\sigma_z, H \right] = 0. \quad (2.14)$$

Aus dem Noether-Theorem der klassischen Mechanik ist bekannt, dass die Rotationsinvarianz der Wirkung die Drehimpulserhaltung zur Folge hat [34, 37]. Bei Anwesenheit eines drehinvarianten Potentials im Hamilton-Operator (2.6) ist

demnach der Gesamtdrehimpuls  $J$  immer noch erhalten.

## 2.2 Dirac-Elektronen und Quantenpunkte in Graphen

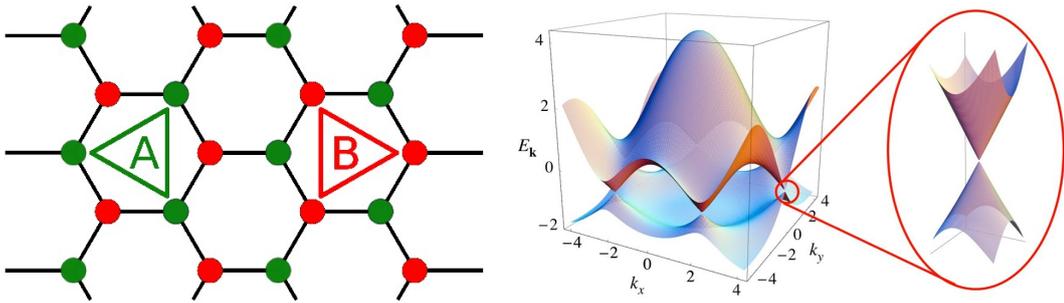
Wir geben nun eine effektive Beschreibung niederenergetischer Elektronen in Graphen durch die Dirac-Gleichung, indem wir auf festkörperphysikalische Eigenschaften zurückgreifen [13, 35, 38–41]. Zudem werden wir erläutern, was wir unter Quantenpunkte in Graphen verstehen wollen. Dies ist die Basis zur Beschreibung von Transportprozessen durch Graphen-Quantenpunkte.

### Gitterstruktur und Dispersionsrelation

Graphen bezeichnet eine zweidimensionale Schicht aus Kohlenstoffatomen, die in einem hexagonalen Gitter angeordnet sind. Es besitzt eine zweiatomige Basis und kann in zwei Untergitter A und B zerlegt werden, wobei jedes Atom des einen Untergitters von drei Atomen des anderen Untergitters umgeben ist (siehe *Abbildung 2.1*). Das  $2s$ - und zwei der drei  $2p$ -Orbitale eines jeden Kohlenstoffatoms hybridisieren zu  $sp^2$ -Orbitalen, die in der Graphen-Schicht liegen und untereinander eine  $\sigma$ -Bindung ausbilden. Das verbleibende dritte  $2p_z$ -Orbital wird nicht hybridisiert und bildet stattdessen eine delokalisierte, zur Gitterebene senkrecht stehende  $\pi$ -Bindung aus. Die  $\pi$ -Bindungs-Orbitale entsprechen den Leitungselektronen, deren Transporteigenschaften wir in dieser Arbeit untersuchen wollen. Die Delokalisation der  $\pi$ -Bindung, sowie die Existenz der Untergitter führen dazu, dass ein  $\pi$ -Bindungs-Elektron sowohl dem Untergitter A als auch dem Untergitter B zugehörig sein kann. Die Charakterisierung dieses zusätzlichen Freiheitsgrades gelingt durch die Einführung einer Pseudospin-Quantenzahl  $\sigma$ . Dieser ist nicht mit dem intrinsischen Spin des Elektrons zu verwechseln, der im Folgenden vernachlässigt wird.

Zum Auffinden der Bandstruktur von Graphen bietet sich das *tight-binding-model* an [35], wobei in Folge der Delokalisation der  $\pi$ -Bindung die Leitungselektronen von einem  $2p_z$ -Orbital eines Kohlenstoffatoms zu einem der nächsten Nachbarn mit der Sprungamplitude  $\gamma \approx 3\text{eV}$  springen können. Damit ergibt sich die Dispersionsrelation [14]

$$E = \alpha\gamma\sqrt{1 + 4\cos^2(k_y a) + 4\cos(k_y a)\cos(k_x\sqrt{3}a)}, \quad (2.15)$$



**Abbildung 2.1:** Atomgitter von Graphen. Das Gitter besteht aus 2 Untergittern A und B. **Abbildung 2.2:** Bandstruktur von Graphen. Vergrößert dargestellt ist die lineare Dispersion am Dirac-Punkt.

wobei  $a = 2.46\text{\AA}$  den Abstand zweier benachbarter Atome eines Untergitters bezeichnet. Dementsprechend ist der Abstand zweier benachbarter Kohlenstoffatome durch  $a/\sqrt{3}$  gegeben. Der Bandindex  $\alpha$  nimmt die Werte  $\pm 1$  an und korrespondiert damit zu einer positiven (Leitungsband) oder negativen Energie (Valenzband). Zur Veranschaulichung von Gleichung (2.15) ist in *Abbildung 2.2* die erste Brillouin-Zone der Bandstruktur von Graphen dargestellt [13]. Zu erkennen sind sechs Verbindungsstellen von Leitungs- und Valenzband, die als Dirac-Punkte bezeichnet werden. Wegen der Existenz der Untergitter A und B liegen zwei inäquivalente Dirac-Punkte K und K' vor. Die Fermi-Energie  $E_F$  befindet sich bei undotiertem Graphen auf Höhe der Dirac-Punkte, also bei  $E = 0$ .

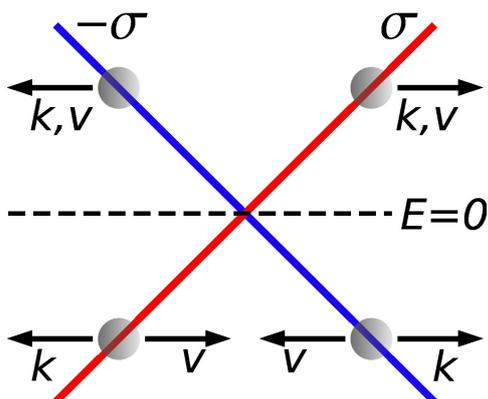
### Pseudorelativistisches Verhalten niederenergetischer Elektronen

Unser Ziel ist die Beschreibung der niederenergetischen Elektronen in Graphen. Dazu soll die Dispersionsrelation (2.15) in der Nähe eines Dirac-Punktes, also für  $E \rightarrow 0$  betrachtet werden. Nach Entwicklung erhalten wir

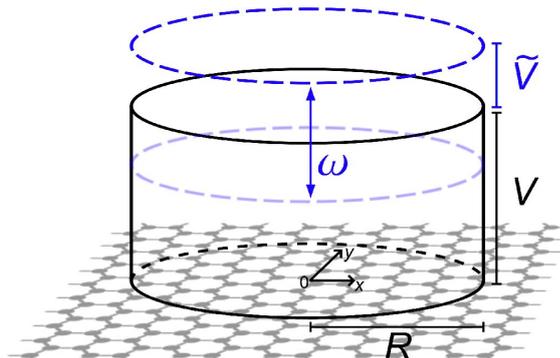
$$E = \alpha v_F k, \quad v_F = \frac{\sqrt{3}at}{2}, \quad (2.16)$$

wobei wir im Folgenden  $v_F \equiv 1$  setzen. Wir sehen anhand von Gleichung (2.16), dass die Energie der Elektronen am Dirac-Punkt linear von der Wellenzahl abhängig ist. Der zugehörige Dirac-Kegel ist in *Abbildung 2.2* vergrößert dargestellt. Die in der Festkörperphysik übliche Definition der effektiven Masse lautet

$$m^* = \frac{1}{\partial^2 E / \partial k^2}, \quad (2.17)$$



**Abbildung 2.3:** Querschnitt des Dirac-Kegels. Die Zugehörigkeit des Elektrons zu einem der Untergitter A und B korrespondiert zu der Pseudospin-Quantenzahl  $\sigma$ .



**Abbildung 2.4:** Quantenpunkt in Graphen. Das Potential ist zusammengesetzt aus einem konstanten Anteil  $V$  und einem Schwingungsanteil  $\tilde{V}$  (blau).

wobei der Herleitung von Gleichung (2.17) die Annahme einer parabolischen Energie-Dispersion zugrunde liegt und daher nach Einsetzen von Gleichung (2.16) eine Divergenz aufweist [40]. Tatsächlich sind die Elektronen am Dirac-Punkt als masselos zu betrachten, da das Verschwinden der Masse bei linearer Dispersion in Zusammenhang mit Gleichung (2.4) steht, aus der für  $m = 0$  die Dispersion  $E = \alpha p$  folgt. Weiterhin besitzen die Elektronen in Graphen eine Pseudospin-Quantenzahl  $\sigma$ , sodass in der Nähe des Dirac-Punktes insgesamt ein pseudorelativistisches Verhalten der Elektronen vorliegt. Deren effektive Beschreibung muss daher durch die Dirac-Gleichung erfolgen. Ausgehend von Gleichung (2.6) erhalten wir mit  $m = 0$  die zeitunabhängige, freie Dirac-Gleichung in der Form

$$H\psi = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{k}\psi = E\psi, \quad (2.18)$$

die auch als Weyl-Gleichung bezeichnet wird. Wegen der Existenz der Untergitter besitzt die Wellenfunktion die Spinorstruktur  $\psi = (\psi_A, \psi_B)$ , in der A und B die Untergitter repräsentieren.

In Hinblick auf spätere Argumentationen hinsichtlich der Lösungen der Dirac-Gleichung ist es sinnvoll, die Wellenzahl und Gruppengeschwindigkeit eines Weyl-Elektrons für  $E > 0$  und  $E < 0$  zu untersuchen. Es zeigt sich [34], dass für positive Energien der Wellenzahlvektor  $\mathbf{k}$  der Gruppengeschwindigkeit  $\langle \mathbf{v} \rangle$  des Elektrons gleichgerichtet ist, während für negative Energien beide Größen unterschiedliche Vorzeichen besitzen. Die Richtung der Gruppengeschwindigkeit stimmt dabei mit dem Vorzeichen des Pseudospins überein. In *Abbildung 2.3* ist dieser Sachverhalt nochmals verdeutlicht. Klar wird dies auch unter Verwendung der ebenen Wellen-

lösung (3.26) der freien Dirac-Gleichung (siehe Abschnitt 3.2), mit der sich nach einer kurzen Rechnung  $\langle \mathbf{v} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \alpha \mathbf{k} / k$  ergibt [14].

### Quantenpunkte in Graphen

Als Quantenpunkt wollen wir im Folgenden ein schwingendes, kreisförmiges Stufenpotential der Form

$$U(r, t) = \left[ V + \tilde{V} \cos(\omega t + \delta) \right] \theta(r - R) \quad (2.19)$$

verstehen, welches beispielsweise durch eine externe Spannungsquelle erzeugt werden kann. Der Mittelpunkt des Kreispotentials soll dabei im Ursprung unseres Koordinatensystems liegen (siehe *Abbildung 2.4*). Das Potential  $U(r, t)$  ist unterteilt in einen konstanten Anteil  $V$  und einem Schwingungsanteil  $\tilde{V} \cos(\omega t + \delta)$ , wobei  $\omega$  die Kreisfrequenz,  $\tilde{V}$  die Amplitude und  $\delta$  eine beliebige Phasenverschiebung darstellen.

Da wir Transportprozesse niederenergetischer Elektronen untersuchen wollen, können wir die Streueffekte zwischen den Dirac-Punkten  $K$  und  $K'$  (*intervalley scattering*) vernachlässigen und uns bei unserer Analyse auf einen Dirac-Punkt beschränken (*intravalley scattering*) [41]. Das Vernachlässigen dieser Streueffekte ist auch bei Einbezug eines externen, zeitunabhängigen Potentials  $U(\mathbf{r})$  zulässig, falls dieses schwach über die Gitterkonstante variiert [14]. In diesem Fall wirkt  $U(\mathbf{r})$  gleichermaßen auf  $\psi_A$  und  $\psi_B$  und ist im Untergitterraum diagonal. Unter der Annahme, dass auch das zeitabhängige Potential (2.19) diese Voraussetzungen erfüllt, schreibt sich die zeitabhängige Dirac-Gleichung unter Berücksichtigung des Potentials  $U(r, t)$  als

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi = [\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} + U(r, t)] \psi. \quad (2.20)$$

Die Gleichungen (2.19) und (2.20) sind der Ausgangspunkt für die Untersuchung von Transportprozessen durch Graphen-Quantenpunkte. Inwiefern das Vernachlässigen der Streueffekte auch unter Einbezug des zeitabhängigen Potentials  $U(r, t)$  gerechtfertigt ist, wird sich an späterer Stelle zeigen.



# 3 Formale Beschreibung der Elektronenstreuung an Graphen Quantenpunkten

Im Folgenden wollen wir die Streuung eines masselosen Dirac-Elektrons an einem Quantenpunkt in Graphen beschreiben. Das einfallende Elektron soll sich im Leitungsband befinden und hat gemäß Gleichung (2.16) die Energie  $E = k > 0$ . Der Quantenpunkt werde durch ein schwingendes, kreisförmiges Stufenpotential der Form (2.19) beschrieben. Wir werden mit Hilfe der Dirac-Gleichung (2.20) die Wellenfunktionen in denen durch das Potential (2.19) abgegrenzten Raumbereichen formulieren, auf Stetigkeit untersuchen und schließlich die das Streuproblem charakterisierenden Reflexions- und Transmissionskoeffizienten bestimmen [29–33, 42].

## 3.1 Lösungen der Dirac-Gleichung

Bevor wir die Wellenfunktionen formulieren können, müssen zunächst die Lösungen der Dirac-Gleichung (2.20) in den jeweiligen Raumbereichen gefunden werden.

### 3.1.1 Lösung der zeitabhängigen Dirac-Gleichung

#### Seperationsansatz

Wir beschränken uns zunächst auf den Raumbereich  $r < R$ . Die zeitabhängige Dirac-Gleichung (2.20) lautet hier unter Berücksichtigung des Potentials (2.19)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \psi + V \psi + \tilde{V} \cos(\omega t + \delta) \psi. \quad (3.1)$$

Diese Differentialgleichung lässt sich mit einem Separationsansatz  $\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \chi(t)$  lösen [5, 29, 42]. Es folgt nach Einsetzen

$$i \frac{\chi'(t)}{\chi(t)} - \tilde{V} \cos(\omega t + \delta) = \frac{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \phi(\mathbf{r})}{\phi(\mathbf{r})} + V. \quad (3.2)$$

Da beide Seiten dieser Gleichung von verschiedenen Variablen abhängen, gelten die beiden separaten Differentialgleichungen

$$i \frac{\chi'(t)}{\chi(t)} - \tilde{V} \cos(\omega t + \delta) = c_1 \quad (3.3)$$

und

$$\underbrace{\frac{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \phi(\mathbf{r})}{\phi(\mathbf{r})}}_{\text{kinetischer Anteil } E_{\text{kin}}} + V = c_1 \quad (3.4)$$

mit  $c_1 = \text{const}$ . Wir können Gleichung (3.4) als zeitunabhängige Dirac-Gleichung auffassen und identifizieren demnach  $c_1 = E$ . Die Integration von Gleichung (3.3) liefert uns den zeitabhängigen Anteil der Wellenfunktion

$$\chi(t) = c_2 \cdot \exp(-iEt) \cdot \exp\left(-i \frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t + \delta)\right) \quad (3.5)$$

mit  $c_2 = \text{const}$ . Wir setzen im Folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $c_2 = 1$ . Im Raumbereich  $r > R$  gelten die Gleichungen (3.4) und (3.5) in analoger Art und Weise, in denen lediglich  $\tilde{V} = V = 0$  zu setzen ist.

### Superpositionsprinzip

Während im schwingungsfreien Fall der Zeitanteil von  $\psi$  durch (3.5) mit  $\tilde{V} = 0$  gegeben ist und der Eigenwert  $E$  von Gleichung (3.4) wegen  $\partial H / \partial t = 0$  eine Erhaltungsgröße darstellt, wird im Fall  $\tilde{V} \neq 0$  aufgrund der Zeitabhängigkeit des Hamilton-Operators aus Gleichung (3.1) die Energie nicht erhalten sein. Aus diesem Grund ist es notwendig die Wellenfunktion als Superposition von Energieeigenfunktionen darzustellen, was wegen der Linearität der Dirac-Gleichung (2.1) stets möglich ist. Bei Beschränkung auf diskrete Energieeigenwerte schreibt sich dann die Wellenfunktion als

$$\psi \sim \sum_n \phi_n(\mathbf{r}) \exp(-iE_n t). \quad (3.6)$$

Damit können wir die Lösung der zeitabhängigen Dirac-Gleichung für  $r > R$  (Raumbereich I) angeben als

$$\psi^{\text{I}}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \phi_n^{\text{I}}(\mathbf{r}) \chi_n^{\text{I}}(t), \quad \chi_n^{\text{I}}(t) = \exp(-iE_n t) \quad (3.7)$$

mit der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \phi_n^{\text{I}}(\mathbf{r}) = E_n \phi_n^{\text{I}}(\mathbf{r}). \quad (3.8)$$

Für  $r < R$  (Raumbereich II) schreiben wir

$$\psi^{\text{II}}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \phi_n^{\text{II}}(\mathbf{r}) \chi_n^{\text{II}}(t), \quad \chi_n^{\text{II}}(t) = \exp(-iE_n t) \exp\left(-i \frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t + \delta)\right) \quad (3.9)$$

mit der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \phi_n^{\text{II}}(\mathbf{r}) = (E_n - V) \phi_n^{\text{II}}(\mathbf{r}). \quad (3.10)$$

Der abseparierte Zeitanteil in Gleichung (3.9) ist offensichtlich von  $V$  unabhängig. Wie wir jedoch anhand von Gleichung (3.10) sehen können, wird sich in den Wellenzahlen  $q \sim E_{\text{kin}}$  das Potential  $V$  wegen  $E_{n,\text{kin}} = E_n - V$  bemerkbar machen.

### 3.1.2 Lösung der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung

Um die Lösung der Dirac-Gleichung (2.20) für das Streuproblem angeben zu können, müssen noch die Lösungen der Gleichungen (3.8) und (3.10) gefunden werden [22, 43]. Dazu betrachten wir zunächst die zeitunabhängige Dirac-Gleichung eines freien Elektrons

$$H\phi(r, \varphi) = E\phi(r, \varphi), \quad (3.11)$$

die wir wegen der Symmetrie des Streuproblems (siehe *Abbildung 2.4*) in Polarkoordinaten angeben haben. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\varphi) \left(-i \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) \\ \exp(i\varphi) \left(-i \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Hierbei wurden die Pauli-Matrizen aus Gleichung (2.5) und  $\mathbf{p} = -i\nabla$  benutzt. Zum Auffinden der Lösung von Gleichung (3.11) benötigen wir einen vollständigen Satz kommutierender Observablen. Dieser ist für ein zweidimensionales Zentralfeldproblem eines relativistischen Elektrons gegeben durch die Energie  $E$  und dem Gesamtdrehimpuls  $J = L_z + \frac{1}{2}\sigma_z$ , da beide Größen Erhaltungsgrößen darstellen (siehe Abschnitt 2.1). Da  $H$  und  $J$  aufgrund von Gleichung (2.14) ein gemeinsames Eigenfunktionensystem besitzen, können wir die Eigenfunktionen  $\phi(r, \varphi)$  von Gleichung (3.11) in einen Radial- und Winkelanteil separieren. Dazu müssen zunächst die Eigenfunktionen des Gesamtdrehimpulses  $J$  bestimmt werden.

### Eigenfunktionen von $J$

Es gilt  $[J, L_z] = [J, \sigma_z] = 0$ , sodass sich die Eigenfunktionen von  $J$  als Produktzustände aus den Eigenfunktionen von  $L_z$  und  $\sigma_z$  bilden lassen. Die entsprechenden Eigenwertgleichungen lauten

$$\frac{1}{2}\sigma_z |\uparrow\downarrow\rangle = s |\uparrow\downarrow\rangle, \quad L_z \chi_m(\varphi) = m \chi_m(\varphi), \quad (3.13)$$

wobei  $L_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$ . Die normierten Eigenfunktionen und Eigenwerte von Gleichung (3.13) ergeben sich zu

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

mit  $s = \pm 1/2$  und

$$\chi_m(\varphi) = \langle \mathbf{r} | \chi_m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (3.15)$$

mit  $m \in \mathbb{Z}$ . Das Produkt der Zustände  $|\chi_m\rangle$  und  $|\uparrow\downarrow\rangle$  ist nun Eigenfunktion von  $J$  zur Gesamtdrehimpuls-Quantenzahl  $j$ ,

$$J |\chi_m\rangle |\uparrow\downarrow\rangle = \underbrace{(m + s)}_{=j} |\chi_m\rangle |\uparrow\downarrow\rangle, \quad \text{mit } j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots \quad (3.16)$$

Unter Beachtung der Tatsache, dass sich die Quantenzahl  $j$  auf zwei verschiedene Arten realisieren lässt, ergibt sich der allgemeinste Eigenzustand von  $J$  aus der Linearkombination der Produktzustände  $|\xi_m^+\rangle = |\chi_m\rangle |\uparrow\rangle$  und  $|\xi_{m+1}^-\rangle = |\chi_{m+1}\rangle |\downarrow\rangle$  mit komplexen Koeffizienten  $f_m^+$  und  $f_{m+1}^-$ . Die Eigenwertgleichung von  $J$  lautet

schließlich

$$J|j\rangle = J(f_m^+|\xi_m^+\rangle + f_{m+1}^-|\xi_{m+1}^-\rangle) = j|j\rangle, \quad \text{mit } j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots \quad (3.17)$$

### Eigenfunktionen von $H$

Wegen Gleichung (2.14) ist der Eigenzustand von  $J$  aus Gleichung (3.17) gleichzeitig auch Eigenzustand von  $H$ . Da die Produktzustände  $\langle \mathbf{r} | \xi_m^\pm \rangle = \xi_m^\pm(\varphi)$  nur eine Winkelabhängigkeit besitzen, identifizieren wir  $f_m^+$  und  $f_{m+1}^-$  als Radialanteile der Eigenfunktionen von  $H$ , die mit der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung (3.11) bestimmt werden können. Das Einsetzen der Eigenfunktion

$$\langle \mathbf{r} | j \rangle = \phi_m(r, \varphi) \quad (3.18)$$

in Gleichung (3.11) liefert unter Ausnutzung von

$$H f_m^\pm(r) \xi_m^\pm(\varphi) = \left( -i \frac{\partial}{\partial r} f_m^\pm(r) \pm \frac{im}{r} f_m^\pm(r) \right) \xi_{m\pm 1}^\mp \quad (3.19)$$

und der Orthogonalität der Winkelanteile  $\xi_m^\pm(\varphi)$  die Bestimmungsgleichungen der Radialanteile  $f_m^+(r)$  und  $f_{m+1}^-(r)$ :

$$-i \frac{\partial}{\partial r} f_m^+(r) + i \frac{m}{r} f_m^+(r) = E f_{m+1}^-(r), \quad (3.20)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial r} f_{m+1}^-(r) - i \frac{m+1}{r} f_{m+1}^-(r) = E f_m^+(r). \quad (3.21)$$

Die Substitutionen  $f_{m+1}^-(z) = \alpha Z_{m+1}(z)$ ,  $i f_m^+(z) = Z_m(z)$  und  $z = kr = \alpha E r$  mit  $\alpha = \text{sgn}(E)$  als Bandindex (siehe Abschnitt 2.2), führen schließlich auf die Rekursionsbeziehungen der Bessel-Funktionen  $Z_m(z)$  [44]

$$\frac{m}{z} Z_m(z) - \frac{\partial}{\partial z} Z_m(z) = Z_{m+1}(z), \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} Z_{m+1}(z) + \frac{m+1}{z} Z_{m+1}(z) = Z_m(z), \quad (3.23)$$

sodass die Eigenfunktionen von  $H$  letztlich durch

$$\phi_m(r, \varphi) = -i Z_m(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha Z_{m+1}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

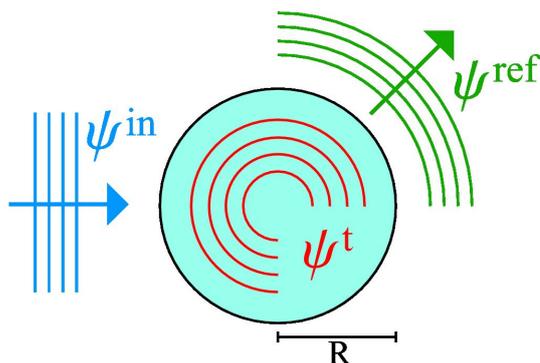
gegeben sind.

Es gibt vier linear unabhängige Arten der Bessel-Funktionen  $Z_m(kr)$  [44]. Die

Bessel-Funktionen erster Art werden wir mit  $J_n(kr)$  bezeichnen, die Bessel-Funktionen zweiter Art (Neumann-Funktionen) mit  $Y_n(kr)$ . Die letzten beiden Arten stellen die Hankel-Funktionen  $H_n^{(1)}(kr)$  und  $H_n^{(2)}(kr)$  dar, die sich aus den Bessel-Funktionen erster und zweiter Art gemäß  $H_n^{(1/2)}(kr) = J_n(kr) \pm iY_n(kr)$  ergeben.

## 3.2 Aufstellen der Wellenfunktionen

Nachdem wir die Lösungen (3.24) der Dirac-Gleichung gefunden haben (siehe Abschnitt 3.1.2), sind wir in der Lage, die Wellenfunktionen in denen durch das Potential (2.19) abgegrenzten Raumbereichen I ( $r > R$ ) und II ( $r < R$ ) aufzustellen (siehe *Abbildung 3.1*). Über die Stetigkeit der Wellenfunktionen an den Grenzflächen des Potentials können dann die in den Wellenfunktionen enthaltenen komplexen Streuamplituden bestimmt werden.



**Abbildung 3.1:** Schematische Darstellung von einfallender (blau), reflektierter (grün) und transmittierter Welle (rot) am Quantenpunkt.

### Einfallende Wellenfunktion

Wir suchen zunächst die Wellenfunktion eines aus unendlicher Entfernung einfallenden Elektrons der Energie  $E > 0$ . Bei dieser Präparation können wir annehmen, dass der Wellenzahlvektor des Elektrons nur eine  $x$ -Komponente besitzt, also  $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_x$  (siehe *Abbildung 3.1*). Dann schreibt sich die freie, zeitunabhängige Dirac-Gleichung als

$$\begin{pmatrix} 0 & k \\ k & 0 \end{pmatrix} \phi = E\phi. \quad (3.25)$$

Der Ansatz einer ebenen, harmonischen Welle  $\phi = \exp(ikx) \cdot (u, v)^T$  liefert schließlich den normierten Eigenzustand des einfallenden Elektrons

$$\phi^{\text{in}} = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Im Folgenden wird  $A = 1$  gesetzt, da wir die Normierung der Wellenfunktionen auf ein Einheitsgebiet vornehmen. Unter Verwendung von Polarkoordinaten  $x = r \cos \varphi$  und der Jacobi-Anger-Identität [44]

$$e^{ia \cos b} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(a) e^{imb} \quad (3.27)$$

lässt sich Gleichung (3.26) nach kurzer Rechnung umschreiben zu

$$\phi^{\text{in}}(r, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} i^{m+1} \phi_m^{\text{in}}(r, \varphi) \quad (3.28)$$

mit

$$\phi_m^{\text{in}}(r, \varphi) = -i J_m(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + J_{m+1}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Obwohl die einfallende Wellenfunktion einen präparierten Zustand darstellt, werden wir im Hinblick auf spätere Rechnungen eine Superposition von Energieeigenfunktionen  $\phi_n$  vornehmen. Mit  $E_{n=0} = E$  folgt

$$\begin{aligned} \psi^{\text{in}}(r, \varphi) &= \sum_n \phi_n^{\text{in}}(r, \varphi) \exp(-iE_n t) \\ &= \sum_n \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} i^{m+1} \phi_{m,n}^{\text{in}}(r, \varphi) \exp(-iE_n t) \end{aligned} \quad (3.30)$$

mit der zur Drehimpulsquantenzahl  $m$  und Energiequantenzahl  $n$  zugehörigen Eigenfunktion

$$\phi_{m,n}^{\text{in}}(r, \varphi) = a_{m,n} \left[ -i J_m(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + J_{m+1}(kr) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (3.31)$$

Dabei ist die Streuamplitude der einfallenden Welle gegeben durch  $a_{m,n} = \delta_{n0}$ . Im Folgenden bezeichnet in  $\phi_{m,n}$  der erste Index  $m$  stets die Drehimpulsquantenzahl,

der zweite Index  $n$  die Energiequantenzahl.

Die Gleichungen (3.28) und (3.29) zeigen, dass  $\psi^{\text{in}}$  als Partialwellenentwicklung verstanden werden kann [45]. Wir werden die reflektierte und transmittierte Wellenfunktion analog durch eine Linearkombination aller möglichen Partialwellenbeiträge mit komplexen Streuamplituden ansetzen. Das asymptotische Verhalten der Bessel-Funktionen entscheidet dabei darüber, welche Art der Bessel-Funktionen in der jeweiligen Wellenfunktion verwendet wird.

### Reflektierte Wellenfunktion

Die reflektierte Wellenfunktion  $\psi^{\text{ref}}$  schreibt sich als

$$\begin{aligned}\psi^{\text{ref}}(r, \varphi) &= \sum_n \phi_n^{\text{ref}}(r, \varphi) \exp(-iE_n t) \\ &= \sum_n \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} i^{m+1} \phi_{m,n}^{\text{ref}}(r, \varphi) \exp(-iE_n t),\end{aligned}\quad (3.32)$$

wobei gemäß Gleichung (3.8) die  $\phi_n^{\text{ref}}(r, \varphi)$  die Eigenwertgleichung

$$\boldsymbol{\sigma p} \phi_n^{\text{ref}}(r, \varphi) = E_n \phi_n^{\text{ref}}(r, \varphi) \quad (3.33)$$

erfüllen. Bei der Wahl der Bessel-Funktionen in den  $\phi_{m,n}^{\text{ref}}(r, \varphi)$  ist zu beachten, dass nur die Hankel-Funktionen  $H_m^{(1)/(2)}(kr)$  für  $r \rightarrow \infty$  das für eine auslaufende Welle charakteristische asymptotische Verhalten  $\sim e^{\pm ikr}$  besitzen [45]. Dementsprechend lauten die Partialwellenbeiträge mit den komplexen Reflexionskoeffizienten  $r_{m,n}$

$$\begin{aligned}\phi_{m,n}^{\text{ref}}(r, \varphi) &= r_{m,n} \left[ -i H_m(k_n r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \alpha_n H_{m+1}(k_n r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]\end{aligned}\quad (3.34)$$

mit

$$\alpha_n = \text{sgn}(E_n), \quad k_n = \alpha_n E_n. \quad (3.35)$$

Schon bei der Diskussion des Streuprozesses eines Dirac-Elektrons der Masse  $m$  und Energie  $E$  an einer Potentialstufe der Höhe  $V$  muss beachtet werden, dass für  $E - V < -m$  der Wellenzahlvektor  $q$  des Elektrons seiner Gruppengeschwindigkeit entgegengesetzt ist (siehe Abschnitt 2.2). Ignoriert man diese Tatsache

und setzt die Wellenfunktion eines in positiver  $x$ -Achse propagierendes Elektron naiv mit  $\psi \sim \exp(iqx)$  an, resultiert ein unphysikalischer Reflexionskoeffizient  $R > 1$  [1, 3]. Aus diesem Grund wurden in Gleichung (3.34) die oberen Indizes (1) und (2) an den Hankel-Funktionen weggelassen, da die Wahl der Hankel-Funktion von dem Vorzeichen der Energie  $E_n$  abhängt: Für negative Energien ist der Wellenzahlvektor des Dirac-Elektrons seiner Gruppengeschwindigkeit (und damit auch seiner Wahrscheinlichkeitsstromdichte) entgegengesetzt. Damit die reflektierte Wellenfunktion stets eine auslaufende Welle beschreibt, sollte für negative Energien  $E_n < 0$  die Hankel-Funktion [44]

$$H_m^{(2)}(k_n r) \underset{k_n r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi k_n r}} e^{-ik_n r} \quad (3.36)$$

verwendet werden, während die Verwendung von  $H_m^{(1)}(k_n r) = H_m^{(2)*}(k_n r)$  nur für positive Energien gerechtfertigt ist. Wir haben also

$$H_m(k_n r) = \begin{cases} H_m^{(1)}(k_n r) & \text{für } E_n > 0 \\ H_m^{(2)}(k_n r) & \text{für } E_n < 0 \end{cases}. \quad (3.37)$$

Wegen  $H_m = J_m \pm iY_m$  lässt sich Gleichung (3.37) auch schreiben als

$$H_m(k_n r) = J_m(k_n r) + i\alpha_n Y_m(k_n r). \quad (3.38)$$

### Transmittierte Wellenfunktion

Die transmittierte Wellenfunktion schreibt sich als

$$\begin{aligned} \psi^t(r, \varphi) &= \sum_n \phi_n^t(r, \varphi) \exp(-iE_n t) \exp\left(-i\frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t + \delta)\right) \\ &= \sum_n \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} i^{m+1} \phi_{m,n}^t(r, \varphi) \exp(-iE_n t) \exp\left(-i\frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t + \delta)\right), \end{aligned} \quad (3.39)$$

wobei gemäß Gleichung (3.10) die  $\phi_n^t(r, \varphi)$  die Eigenwertgleichung

$$\boldsymbol{\sigma p} \phi_n^t(r, \varphi) = (E_n - V) \phi_n^t(r, \varphi) \quad (3.40)$$

erfüllen. Da für  $r \rightarrow 0$  nur die Bessel-Funktionen erster Art  $J_m(kr)$  wohldefiniert sind, schreiben sich die Partialwellenbeiträge mit den komplexen Transmissions-

koeffizienten  $t_{m,n}$  als

$$\begin{aligned} \phi_{m,n}^t(r, \varphi) = & t_{m,n} \left[ -iJ_m(q_n r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ & \left. + \alpha'_n J_{m+1}(q_n r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

mit

$$\alpha'_n = \text{sgn}(E_n - V), \quad q_n = \alpha'_n (E_n - V). \quad (3.42)$$

### 3.3 Stetigkeitsbedingung und Berechnung der Streukoeffizienten

Bevor wir die Streukoeffizienten  $r_{m,n}$  und  $t_{m,n}$  über die Stetigkeit der Wellenfunktionen an der Übergangsstelle  $r = R$  berechnen, schreiben wir die transmittierte Wellenfunktion aus Gleichung (3.39) um. Mit Hilfe der Jacobi-Anger-Identität (3.27) ergibt sich der zeitabhängige Phasenfaktor unter Ausnutzung der Relation [44]

$$i^m Z_m = i^{-m} Z_{-m} \quad (3.43)$$

als

$$\exp\left(-i\frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t + \delta)\right) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{ip\delta} (-1)^p J_p(\tilde{V}/\omega) e^{ip\omega t}, \quad (3.44)$$

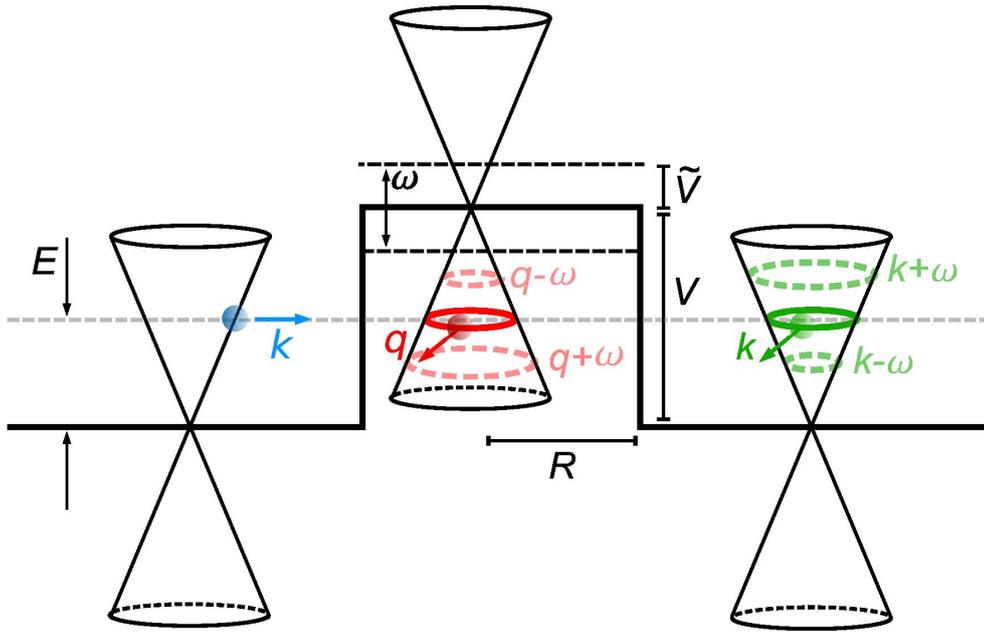
sodass die transmittierte Wellenfunktion

$$\psi^t(r, \varphi) = \sum_n \sum_{p=-\infty}^{\infty} \phi_n^t(r, \varphi) e^{ip\delta} (-1)^p J_p(\tilde{V}/\omega) \exp(-i(E_n - p\omega)t) \quad (3.45)$$

lautet. Das Einsetzen der Wellenfunktionen (3.30), (3.32) und (3.45) in die Stetigkeitsbedingung

$$\psi^{\text{in}}|_{r=R} + \psi^{\text{ref}}|_{r=R} = \psi^t|_{r=R} \quad (3.46)$$

zeigt, dass wegen Gleichung (3.44) die zeitabhängigen Phasenfaktoren nur übereinstimmen, wenn  $E_n = E_k + p\omega$  mit  $p \in \mathbb{Z}$  gilt. Wegen  $E_{p=0} = E$  ist dies erfüllt,



**Abbildung 3.2:** Schematische Darstellung der Energieverhältnisse bei der Streuung am oszillierenden Quantenpunkt nach Gleichung (2.19). Eingezeichnet sind die Wellenzahlen in den jeweiligen Raumbereichen. Während das einfallende Elektron (blau) mit  $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_x$  einen präparierten Zustand darstellt, sind die Wellenzahlen der reflektierten (grün) und der transmittierten Wellenfunktion (rot) gemäß Gleichung (3.47) in ganzzahligen Vielfachen von  $\omega$  quantisiert und besitzen Komponenten in jede Raumrichtung. Dargestellt sind exemplarisch die ersten Wellenzahlen  $q_n$  und  $k_n$  mit  $n = 0, \pm 1$ .

wenn

$$E_n = E + n\omega \quad \forall n \in \mathbb{Z}. \quad (3.47)$$

Die Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktionen führt auf die Quantisierung der Energien und Wellenzahlen in Form ganzzahliger Vielfache der Kreisfrequenz  $\omega$ . Zur besseren Veranschaulichung sind die Energieverhältnisse bei der Streuung am Quantenpunkt in *Abbildung 3.2* dargestellt.

An dieser Stelle wird auch die Notwendigkeit der Superposition von Energieeigenfunktionen bei Formulierung der Wellenfunktionen (siehe Abschnitt 3.2) deutlich: Hätten wir diese nicht vorgenommen, würden die zeitabhängigen Phasenfaktoren lediglich für das Energieniveau  $E_0$  übereinstimmen. Diese Einschränkung würde jedoch die durch Abseparation erhaltene Zeitabhängigkeit der transmittierten Welle  $\psi^t \sim \exp\left(-i\frac{V}{\omega} \sin(\omega t + \delta)\right)$  zerstören.

Aus Gleichung (3.46) folgen unter Ausnutzung der Orthogonalität von Drehimpuls-

und Energieeigenfunktionen die beiden Gleichungen

$$\delta_{n0}J_m(k_n R) + r_{m,n}H_m(k_n R) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} t_{m,p}J_m(q_p R) e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) \quad (3.48)$$

und

$$\delta_{n0}J_{m+1}(k_n R) + \alpha_n r_{m,n}H_{m+1}(k_n R) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \alpha'_p t_{m,p}J_{m+1}(q_p R) e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) \quad (3.49)$$

zur Bestimmung der Streukoeffizienten. Die Gleichungen (3.48) und (3.49) lassen sich in Form einer Matrixgleichung schreiben. Dazu multiplizieren wir Gleichung (3.48) mit  $\alpha_n H_{m+1}(k_n R)$  und Gleichung (3.49) mit  $H_m(k_n R)$  und subtrahieren beide Gleichungen voneinander:

$$\begin{aligned} & \sum_{p=-\infty}^{\infty} t_{m,p} e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) \left\{ \alpha_n J_m(q_p R) H_{m+1}(k_n R) - \alpha'_p J_{m+1}(q_p R) H_m(k_n R) \right\} \\ & = \delta_{n0} \left\{ \alpha_n J_m(k_n R) H_{m+1}(k_n R) - J_{m+1}(k_n R) H_m(k_n R) \right\}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Mit den Abkürzungen

$$f_m^{(n,p)} = H_{m+1}(k_n R) J_m(q_p R) - \alpha_n \alpha'_p H_m(k_n R) J_{m+1}(q_p R), \quad (3.51)$$

$$g_m^{(n)} = J_m(k_n R) H_{m+1}(k_n R) - \alpha_n J_{m+1}(k_n R) H_m(k_n R) \quad (3.52)$$

ergibt sich schließlich die Gleichung zur Bestimmung der Transmissionskoeffizienten  $t_{m,n}$ :

$$\sum_{p=-\infty}^{\infty} t_{m,p} e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) f_m^{(n,p)} = \delta_{n0} g_m^{(n)} \quad \forall n. \quad (3.53)$$

In Matrixform lautet Gleichung (3.53)

$$M_m \mathbf{t}_m = \mathbf{g}_m \quad (3.54)$$

mit

$$\mathbf{t}_m = (t_{m,-\infty}, \dots, t_{m,0}, \dots, t_{m,\infty})^T, \quad \mathbf{g}_m = (0, \dots, g_m^{(0)}, \dots, 0)^T \quad (3.55)$$

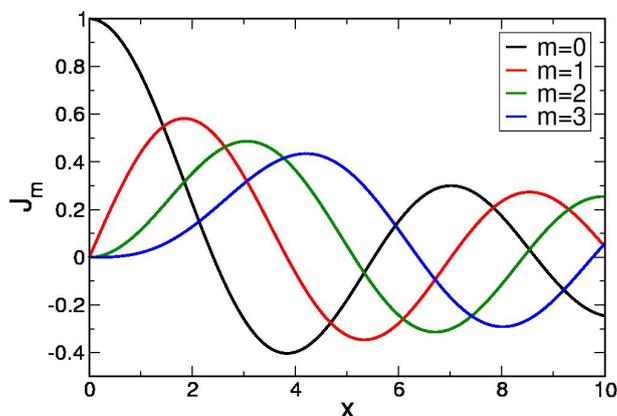
und der quadratischen, unendlich-dimensionalen Matrix

$$M_m = \begin{pmatrix} \vdots & & & & \\ \dots & J_0 f_m^{(-1,-1)} & e^{i\delta} J_{-1} f_m^{(-1,0)} & e^{2i\delta} J_{-2} f_m^{(-1,1)} & \\ & e^{-i\delta} J_1 f_m^{(0,-1)} & J_0 f_m^{(0,0)} & e^{i\delta} J_{-1} f_m^{(0,1)} & \dots \\ & e^{-2i\delta} J_2 f_m^{(1,-1)} & e^{-i\delta} J_1 f_m^{(1,0)} & J_0 f_m^{(1,1)} & \\ & & \vdots & & \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

wobei wir der Übersichtlichkeit wegen in der Matrix  $M_m$  ab sofort  $J_k(\tilde{V}/\omega) \equiv J_k$  setzen werden. Die Reflexionskoeffizienten ergeben sich nach Gleichung (3.48) zu

$$r_{m,n} = \sum_{p=-\infty}^{\infty} t_{m,p} \frac{J_m(q_p R)}{H_m(k_n R)} e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}(\tilde{V}/\omega) - \delta_{n0} \frac{J_m(k_n R)}{H_m(k_n R)}. \quad (3.57)$$

Zur Berechnung der Streukoeffizienten muss das lineare Gleichungssystem (3.54) numerisch gelöst werden. Dazu ist eine Abbruchbedingung notwendig, die eine ausreichende Konvergenz der Streukoeffizienten für endliche Dimensionen der Matrix  $M_m$  garantiert. Wie wir *Abbildung 3.3* entnehmen können, wird diese Abbruchbedingung im Wesentlichen durch das Verhältnis  $\tilde{V}/\omega$  bestimmt: Für kleine Werte von  $\tilde{V}/\omega$  wird die Matrix durch die niedrigsten Ordnungen von  $J_k(\tilde{V}/\omega)$  dominiert, während mit größerer werdenden Werten von  $\tilde{V}/\omega$  die höheren Ordnungen von  $J_k(\tilde{V}/\omega)$  hinzukommen. Für größere Werte von  $\tilde{V}$  bzw. kleinere Werte von  $\omega$  werden wir dementsprechend die numerische Auswertung für größere Dimensionen der Matrix  $M_m$  vornehmen müssen. In der numerischen Umsetzung wird dabei die Dimension der Matrix sukzessive erhöht, bis die gewünschte Konvergenz der Streukoeffizienten erreicht ist. In Abschnitt 5, in dem wir die Streuung des Elektrons am Quantenpunkt diskutieren wollen, werden wir die Parameter  $\tilde{V}$  und  $\omega$  variieren. Dabei wird  $\omega$  nur bis zu einem unteren Grenzwert aufgetragen, da



**Abbildung 3.3:** Bessel-Funktionen  $J_m(x)$  für  $m = 0, 1, 2, 3$ .

für kleine Werte von  $\omega$  der Quotient  $\tilde{V}/\omega$  groß wird und somit die Matrix  $M_m$  aus Gleichung (3.56) für große Dimensionen ausgewertet werden muss. Problematisch ist dabei, dass für große Werte von  $\tilde{V}/\omega$  alle Ordnungen der Bessel-Funktionen in  $M_m$  einen wesentlichen Beitrag leisten, sich andererseits jedoch dem Wert 0 annähern, wie man *Abbildung 3.3* entnehmen kann. Zusammen mit denen in der Matrix eingehenden Funktionen  $f^{(n,p)}$  aus Gleichung (3.51) können dabei wiederholt Zahlen entstehen, die sich außerhalb des in der numerischen Umsetzung genutzten Zahlenbereichs der Gleitkommazahlen *double precision* befinden. Deshalb ist es schwierig für große Werte von  $\tilde{V}/\omega$  Konvergenz in den Streukoeffizienten zu erreichen.

Die Lösung des linearen Gleichungssystems (3.54) geschieht mittels einer Lösungsroutine aus *Lapack95*. Die Berechnung der Bessel-Funktionen erfolgt wie in [46] beschrieben.

## 3.4 Analyse der Streukoeffizienten

In diesem Abschnitt wollen wir die Bestimmungsgleichungen der Streukoeffizienten und ihre Eigenschaften genauer analysieren. Dazu werden wir zunächst stationäre Grenzfälle untersuchen, für die sich die Bestimmungsgleichungen der Streukoeffizienten auf eine besonders einfache Form reduzieren (unter bestimmten Bedingungen können sogar explizite Ausdrücke angegeben werden). Im Anschluss werden wir die analytische Struktur der Streukoeffizienten diskutieren.

### 3.4.1 Stationäre Grenzfälle

#### Entwicklung für kleine $\tilde{V}$

Für kleine Argumente  $x \ll 1$  folgt für die Bessel-Funktion 1. Art die Asymptotik  $J_n(x) \sim \frac{1}{\Gamma(n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^n$  mit  $n \geq 0$  [44]. Im stationären Grenzfall  $\tilde{V} \rightarrow 0$  werden daher bei der Bestimmung der Streukoeffizienten nur die niedrigsten Ordnungen der Bessel-Funktion  $J_n(\tilde{V}/\omega)$  eine Rolle spielen. Um eine explizite Lösung der Streukoeffizienten für kleine  $\tilde{V}$  angeben zu können, werden wir im Folgenden die Bessel-Funktionen  $J_n(\tilde{V}/\omega)$  mit  $n \geq 2$  vernachlässigen.

Die Matrix aus Gleichung (3.56) schreibt sich unter den oben genannten Voraus-

setzungen als

$$M_m = \begin{pmatrix} \vdots & & & & \\ \dots & J_0 f_m^{(-1,-1)} & e^{i\delta} J_{-1} f_m^{(-1,0)} & 0 & \\ \dots & e^{-i\delta} J_1 f_m^{(0,-1)} & J_0 f_m^{(0,0)} & e^{i\delta} J_{-1} f_m^{(0,1)} & \dots \\ & 0 & e^{-i\delta} J_1 f_m^{(1,0)} & J_0 f_m^{(1,1)} & \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

Die Lösung des entsprechenden Gleichungssystems (3.54) führt auf die Transmissionskoeffizienten

$$t_{m,0} = J_0 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) \xi_m^{-1}, \quad t_{m,\pm 1} = \mp e^{\mp i\delta} J_1 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) \frac{f_m^{(\pm 1,0)}}{f_m^{(\pm 1,\pm 1)}} \xi_m^{-1} \quad (3.59)$$

mit

$$\xi_m = g_{m,0}^{-1} \cdot \left[ J_1 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right)^2 \left( f_m^{(0,-1)} \frac{f_m^{(-1,0)}}{f_m^{(-1,-1)}} + f_m^{(0,1)} \frac{f_m^{(1,0)}}{f_m^{(1,1)}} \right) + J_0 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right)^2 f_m^{(0,0)} \right]. \quad (3.60)$$

Dabei haben wir die Relation (3.43) genutzt. Für die Reflexionskoeffizienten ergeben sich nach Gleichung (3.57) die Ausdrücke ( $k_0 \equiv k$ ,  $q_0 \equiv q$ )

$$r_{m,0} = \frac{\xi_m^{-1}}{H_m(kR)} \left\{ J_1 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right)^2 \left( J_m(q_{-1}R) \frac{f_m^{(-1,0)}}{f_m^{(-1,-1)}} + J_m(q_1R) \frac{f_m^{(1,0)}}{f_m^{(1,1)}} \right) + J_0 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right)^2 J_m(qR) \right\} - \frac{J_m(kR)}{H_m(kR)},$$

$$r_{m,\pm 1} = \frac{\xi_m^{-1}}{H_m(k_{\pm 1}R)} e^{\mp i\delta} J_1 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) J_2 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) \left\{ \pm J_m(qR) \mp J_m(q_{\pm 1}R) \frac{f_m^{(\pm 1,0)}}{f_m^{(\pm 1,\pm 1)}} \right\}. \quad (3.61)$$

Wir sehen anhand der Gleichungen (3.59)-(3.61), dass die Streukoeffizienten für  $n \pm 1$  von der Phasenverschiebung  $\delta$  abhängen. Für die Betragsquadrate der Streukoeffizienten verschwindet diese Phasenabhängigkeit. Selbiges Verhalten sollte sich auch für höhere Ordnungen in  $\tilde{V}$  ergeben.

Im stationären Grenzfall  $\tilde{V} = 0$  gilt  $J_n(0) = \delta_{n0}$  und die Streukoeffizienten (3.59)

und (3.61) reduzieren sich auf

$$t_m^{\text{st}} = \frac{J_m(kR) H_{m+1}^{(1)}(kR) - J_{m+1}(kR) H_m^{(1)}(kR)}{H_{m+1}^{(1)}(kR) J_m(qR) - \alpha' H_m^{(1)}(kR) J_{m+1}(qR)}, \quad t_{m,n} = 0 \quad \forall n \neq 0 \quad (3.62)$$

und

$$r_m^{\text{st}} = -\frac{J_m(kR) J_{m+1}(qR) - \alpha' J_{m+1}(kR) J_m(qR)}{H_m^{(1)}(kR) J_{m+1}(qR) - \alpha' H_{m+1}^{(1)}(kR) J_m(qR)}, \quad r_{m,n} = 0 \quad \forall n \neq 0. \quad (3.63)$$

### Quasistatischer Grenzfall

Der quasistatische Grenzfall entspricht dem Fall  $\omega \rightarrow \infty$ , für den  $J_n(\tilde{V}/\omega) = \delta_{n0}$  gilt (siehe Abbildung 3.3). Die Funktionen  $f_m^{(n,p)}$  aus Gleichung (3.51) verschwinden dabei für  $n \neq 0$  und/oder  $p \neq 0$ , da für große  $\omega$  auch die Wellenzahlen  $k_n$  und  $q_p$  gemäß Gleichung (3.47) sehr groß werden und die Bessel-Funktionen  $H_m(k_n R)$  und  $J_m(q_p R)$  schließlich asymptotisch gegen 0 konvergieren, siehe Gleichung (3.36) und (3.73). Die Matrix aus Gleichung (3.56) schreibt sich im quasistatischen Grenzfall als

$$M_m = \begin{pmatrix} & & \vdots & & \\ & 0 & 0 & 0 & \\ \cdots & 0 & f_m^{(0,0)} & 0 & \cdots \\ & 0 & 0 & 0 & \\ & & \vdots & & \end{pmatrix} \quad (3.64)$$

und reproduziert somit die Streukoeffizienten (3.62) und (3.63) des stationären Grenzfalls  $\tilde{V} = 0$ . Die unendlich schnelle Bewegung des Potentials wirkt offensichtlich wie ein statischer Quantenpunkt mit Mittelwert  $V$ , da die Zustände nicht mehr auf die Änderungen des Potentials reagieren können.

### Statischer Grenzfall

Wir untersuchen jetzt den statischen Grenzfall  $\omega \rightarrow 0$ . Anhand von Gleichung (2.19) sehen wir, dass für  $\omega = 0$  das konstante Potential  $V$  eine Verschiebung um  $\tilde{V} \cos \delta$  erfährt. Dementsprechend erwarten wir zunächst, dass sich für  $\omega \rightarrow 0$  die Streukoeffizienten analog dem stationären Grenzfall  $\tilde{V} \rightarrow 0$  auf die Gleichungen (3.62) und (3.63) reduzieren, wobei die Wellenzahl  $q$  durch die Verschiebung  $\tilde{V} \cos \delta$  modifiziert wird.

Für  $\omega \rightarrow 0$  wird  $\tilde{V}/\omega$  sehr groß, sodass alle Bessel-Funktionen  $J_k(\tilde{V}/\omega)$  in der Matrix (3.56) berücksichtigt werden müssen. Es gilt  $E_n = E$  und die Wellen-

zahlen reduzieren sich auf  $k_n = k_0 = E$  und  $q_n = q_0 = \alpha'(E - V)$ . Weiter gilt  $f_m^{(n,p)} = f_m^{(0,0)}$ , sodass sich die Matrix  $M_m$  schreiben lässt als

$$M_m(\omega \rightarrow 0) = f_m^{(0,0)} \begin{pmatrix} & & \vdots & & & \\ & & J_0 & e^{i\delta} J_{-1} & e^{2i\delta} J_{-2} & \\ \cdots & e^{-i\delta} J_1 & J_0 & e^{i\delta} J_{-1} & \cdots & \\ & e^{-2i\delta} J_2 & e^{-i\delta} J_1 & J_0 & & \\ & & \vdots & & & \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

Wegen der Struktur dieser Matrix ist klar, dass neben  $t_{m,0}$  auch andere Koeffizienten  $t_{m,n}$  ungleich von 0 sein werden, da sonst nur triviale Lösungen resultieren würden. Die Streukoeffizienten reduzieren sich damit nicht auf die Gleichungen (3.62) und (3.63), wie wir eingangs erwartet haben. Damit dennoch das stationäre Streuproblem reproduziert wird, sollten sich wenigstens die Wellenfunktionen auf die des stationären Falls reduzieren.

Die stationäre transmittierte Wellenfunktion lautet

$$\psi_{\text{st}}^t(r, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} i^{m+1} \phi_{m,\text{st}}^t(r, \varphi) e^{-iEt} \quad (3.66)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi_{m,\text{st}}^t(r, \varphi) = & \tilde{t}_m^{\text{st}} \left[ -iJ_m(\tilde{q}R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ & \left. + \tilde{\alpha}' J_{m+1}(\tilde{q}R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right], \end{aligned} \quad (3.67)$$

wobei  $\tilde{\alpha}' = \text{sgn}(E - V - \tilde{V} \cos \delta)$  den modifizierten Bandindex und  $\tilde{q} = \tilde{\alpha}'(E - V - \tilde{V} \cos \delta)$  die modifizierte Wellenzahl darstellen. In Gleichung (3.66) wurde keine Superposition von Energieeigenfunktionen vorgenommen, da bei Zeitunabhängigkeit des Hamilton-Operators die Energie eine Erhaltungsgröße ist. Dementsprechend existiert auch nur ein Transmissionskoeffizient  $\tilde{t}_m^{\text{st}}$ , der durch Gleichung (3.62) mit  $q \rightarrow \tilde{q}$  und  $\alpha \rightarrow \tilde{\alpha}$  gegeben ist. Die transmittierte Wellenfunktion aus Gleichung (3.45) schreibt sich als

$$\psi^t(r, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n,p=-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} i^{m+1} \phi_{m,n}^t(r, \varphi) e^{ip\delta} (-1)^p J_p \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right) e^{-iEt} \quad (3.68)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi_{m,n}^t(r, \varphi) = & t_{m,n} \left[ -i J_m(q_0 R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ & \left. + \alpha' J_{m+1}(q_0 R) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right], \end{aligned} \quad (3.69)$$

wobei es sich hier um die Wellenfunktionen und Streukoeffizienten für  $\omega \rightarrow 0$  handelt. Die Forderung  $\psi_{\text{st}}^t(r, \varphi) \stackrel{!}{=} \psi^t(r, \varphi)$  führt schließlich auf die beiden Gleichungen

$$\sum_{n,p} t_{m,n} e^{ip\delta} (-1)^p J_p\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) \stackrel{!}{=} \tilde{t}_m^{\text{st}} \frac{J_m(\tilde{q}R)}{J_m(q_0R)}, \quad (3.70)$$

$$\sum_{n,p} t_{m,n} e^{ip\delta} (-1)^p J_p\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) \stackrel{!}{=} \tilde{t}_m^{\text{st}} \frac{\tilde{\alpha}' J_{m+1}(\tilde{q}R)}{\alpha' J_{m+1}(q_0R)}. \quad (3.71)$$

Für den Spezialfall  $\delta = -\frac{\pi}{2}$ , d.h.  $U = V$ , gilt  $\tilde{q} = q_0$  und die Gleichungen (3.70) und (3.71) reduzieren sich auf die Bedingung

$$\sum_{n,p} t_{m,n} i^p J_p\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) \stackrel{!}{=} t_m^{\text{st}}. \quad (3.72)$$

*Beweis von Gleichung (3.72):*

Für  $\omega \rightarrow 0$  können wir die asymptotische Darstellung der Bessel-Funktionen

$$J_k\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) \underset{\omega \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\frac{2\omega}{\pi\tilde{V}}} \cos\left(\frac{\tilde{V}}{\omega} - k\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.73)$$

benutzen [44]. Aus ihr folgt die Rekursionsrelation

$$J_{2k}\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) = (-1)^k J_0\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right), \quad J_{2k+1}\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right) = (-1)^k J_1\left(\frac{\tilde{V}}{\omega}\right), \quad (3.74)$$

die wir an späterer Stelle noch gebrauchen werden. Wir wählen die Dimension der Matrix aus Gleichung (3.65) als  $\dim M_m = 2s + 1$  mit  $s \rightarrow \infty$  und bekommen schließlich das lineare Gleichungssystem

$$J_0 t_{m,-s} + i^{-1} J_{-1} t_{m,-s+1} + \dots + i^{-s} J_{-s} t_{m,0} + \dots + i^{-2s} J_{-2s} t_{m,s} = 0,$$

$$\begin{aligned}
 & \vdots \\
 i^s J_s t_{m,-s} + i^{s-1} J_{s-1} t_{m,-s+1} + \dots + J_0 t_{m,0} + \dots + i^{-s} J_{-s} t_{m,s} &= \frac{g_m^{(0)}}{f_m^{(0,0)}}, \\
 & \vdots \\
 i^{2s} J_{2s} t_{m,-s} + i^{2s-1} J_{2s-1} t_{m,-s+1} + \dots + i^s J_s t_{m,0} + \dots + J_0 t_{m,s} &= 0. \tag{3.75}
 \end{aligned}$$

Die Addition aller Gleichungen aus diesem Gleichungssystem ergibt

$$\begin{aligned}
 \frac{g_m^{(0)}}{f_m^{(0,0)}} &= t_{m,-s} (J_0 + \dots + i^{2s} J_{2s}) + \dots + t_{m,0} (i^{-s} J_{-s} + \dots + i^s J_s) + \dots \\
 &+ t_{m,s} (i^{-2s} J_{-2s} + \dots + J_0). \tag{3.76}
 \end{aligned}$$

Wegen der Rekursionsformel (3.74), der Relation (3.43) und unter Beachtung der Tatsache, dass  $s$  in jeder Klammer aus Gleichung (3.76) den gleichen Wert besitzt, können wir uns für die Klammern folgendes Schema denken:

$$t_{m,-s} (J_0 + iJ_1 + J_0 + \dots + iJ_1) + t_{m,-s+1} (iJ_1 + J_0 + iJ_1 + \dots + J_0) + \dots = \frac{g_m^{(0)}}{f_m^{(0,0)}}. \tag{3.77}$$

Wir erhalten demnach für  $s \rightarrow \infty$  für jede Klammer die Summe  $\sum_{p=-\infty}^{\infty} i^p J_p (\tilde{V}/\omega)$ . Identifizieren wir schließlich noch die rechte Seite von Gleichung (3.77) mit dem Transmissionskoeffizienten (3.62) des stationären Grenzfalls  $\tilde{V} \rightarrow 0$ , ist Gleichung (3.72) bewiesen.

### 3.4.2 Analytische Eigenschaften

Im Folgenden diskutieren wir einige analytische Eigenschaften der Streukoeffizienten, wobei wir unter anderem auf die Ergebnisse des stationären Grenzfalls  $\tilde{V} \rightarrow 0$  (siehe Abschnitt 3.4.1) zurückgreifen werden.

#### Wellenfunktionen

Wir substituieren in den Bestimmungsgleichungen der Streukoeffizienten (3.48) und (3.49)  $n \rightarrow n - 1$  und erhalten

$$a_{m-1,n} J_{m-1}(k_n R) + r_{m-1,n} H_{m-1}(k_n R) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} t_{m-1,n} J_{m-1}(q_p R) e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}, \tag{3.78}$$

$$a_{m-1,n}J_m(k_n R) + \alpha_n r_{m-1,n}H_m(k_n R) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \alpha'_p t_{m-1,n}J_m(q_p R) e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}, \quad (3.79)$$

wobei wir  $J_k(\tilde{V}/\omega) \equiv J_k$  verwendet haben. Die Substitution  $n \rightarrow -n$  in den Gleichungen (3.48) und (3.49) führt unter Verwendung von Gleichung (3.43) auf

$$a_{-m,n}J_m(k_n R) + r_{-m,n}H_m(k_n R) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} t_{-m,n}J_m(q_p R) e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}, \quad (3.80)$$

$$a_{-m,n}J_{m-1}(k_n R) + \alpha_n r_{-m,n}H_{m-1}(k_n R) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \alpha'_p t_{-m,n}J_{m-1}(q_p R) e^{-i(n-p)\delta} J_{n-p}. \quad (3.81)$$

Der Vergleich von Gleichung (3.78) mit (3.81) und (3.79) mit (3.80) zeigt uns die Gültigkeit der Relationen

$$r_{-m,n} = \alpha_n r_{m-1,n}, \quad t_{-m,n} = \alpha'_n t_{m-1,n}. \quad (3.82)$$

Damit sind wir in der Lage, die Wellenfunktionen in eine für spätere Rechnungen zweckmäßigere Form zu bringen. Wir betrachten zunächst den zeitunabhängigen Anteil der reflektierten Wellenfunktion  $\phi_n^{\text{ref}}(r, \varphi)$  aus Gleichung (3.32)

$$\begin{aligned} \phi_n^{\text{ref}}(r, \varphi) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{m+1} r_{n,m} \left[ -iH_m(k_n r) e^{im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \alpha_n H_{m+1}(k_n r) e^{i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (3.83)$$

und zerlegen diesen in zwei Anteile  $\phi_{n,(1)}^{\text{ref}}(r, \varphi)$  und  $\phi_{n,(2)}^{\text{ref}}(r, \varphi)$ . Dazu läuft der Summationsindex  $m$  in  $\phi_{n,(1)}^{\text{ref}}(r, \varphi)$  von 0 nach  $\infty$  und in  $\phi_{n,(2)}^{\text{ref}}(r, \varphi)$  von  $-\infty$  nach 0. Der 2. Anteil lässt sich nach Substitution  $n \rightarrow -n$  mit den Gleichungen (3.82) und (3.43) umschreiben zu

$$\begin{aligned} \phi_{n,(2)}^{\text{ref}}(r, \varphi) &= \sum_{m=1}^{\infty} i^{m+1} \alpha_n r_{m-1,n} \left[ -iH_m(k_n r) e^{-im\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. - \alpha_n H_{m-1}(k_n r) e^{i(-m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (3.84)$$

bzw. nach Erniedrigung des Summationsindizes

$$\begin{aligned} \phi_{n,(2)}^{\text{ref}}(r, \varphi) &= \sum_{m=0}^{\infty} i^{m+1} r_{m,n} \left[ -i H_m(k_n r) e^{-im\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \alpha_n H_{m+1}(k_n r) e^{-i(m+1)\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Die Addition beider Anteile ergibt schließlich für die reflektierte Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi^{\text{ref}}(r, \varphi) &= \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} i^{m+1} r_{m,n} \left[ -i H_m(k_n r) \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \alpha_n H_{m+1}(k_n r) \begin{pmatrix} e^{-i(m+1)\varphi} \\ e^{i(m+1)\varphi} \end{pmatrix} \right] \exp(-iE_n t). \end{aligned} \quad (3.86)$$

Da die transmittierte Wellenfunktion die gleiche Struktur besitzt, führt eine analoge Rechnung auf

$$\begin{aligned} \psi^{\text{t}}(r, \varphi) &= \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} i^{m+1} t_{m,n} \left[ -i J_m(k_n r) \begin{pmatrix} e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \alpha'_n J_{m+1}(k_n r) \begin{pmatrix} e^{-i(m+1)\varphi} \\ e^{i(m+1)\varphi} \end{pmatrix} \right] \exp\left(-iE_n t - i\frac{\tilde{V}}{\omega} \sin(\omega t + \delta)\right). \end{aligned} \quad (3.87)$$

### Fall symmetrischer Streukoeffizienten

Im Folgenden untersuchen wir die Streukoeffizienten für den speziellen Fall, dass die Energie  $E$  und das Potential  $V$  verschwindend klein sind. Dabei werden wir auf die in Abschnitt 3.4.1 entwickelten Streukoeffizienten für  $\tilde{V} \rightarrow 0$  zurückgreifen.

Wir nehmen an, dass  $E \rightarrow 0^\pm$ ,  $V = 0$ . Dies entspricht einer symmetrisierten Situation, in der sich die Energien als  $E_n = n\omega = E_n - V$  schreiben, woraus sich für die Wellenzahlen

$$k_n = k_{-n} = q_n = q_{-n} = |n|\omega, \quad k_0 = q_0 = 0 \quad (3.88)$$

ergibt. Unter Ausnutzung der asymptotischen Entwicklungen der Bessel-Funktionen für  $k_0 R \rightarrow 0$  lassen sich die Funktionen  $f_m^{(n,p)}$  und  $g_m^{(0)}$  aus den Gleichungen (3.51) und (3.52) entwickeln (siehe Anhang). Durch die daraus resultierenden Beziehun-

gen (A.6) gilt für die Transmissionskoeffizienten  $t_{m,\pm 1}$  aus Gleichung (3.59)

$$t_{m,\pm 1}^* = -t_{m,\mp 1}, \quad |t_{m,1}| = |t_{m,-1}|. \quad (3.89)$$

Für die Reflexionskoeffizienten aus Gleichung (3.61) bekommen wir analog

$$r_{m,\pm 1}^* = -r_{m,\mp 1}, \quad |r_{m,1}| = |r_{m,-1}|. \quad (3.90)$$

Offensichtlich unterscheiden sich die Streukoeffizienten mit entgegengesetzten Energieindizes lediglich in einem Phasenfaktor. Es ist klar, dass sich diese Ergebnisse auch für höhere Entwicklungen in  $\tilde{V}$  weiterführen lassen, da dann dieselbe symmetrische Situation vorliegt. Demnach geben wir allgemein die Beziehung

$$|t_{m,n}| = |t_{m,-n}|, \quad |r_{m,n}| = |r_{m,-n}|, \quad \text{für } E, V \rightarrow 0 \quad (3.91)$$

an.

Ferner lassen sich für die Streukoeffizienten mit Hilfe der Entwicklungen der Bessel-Funktionen für  $k_0 R \rightarrow 0$  explizite Ausdrücke finden (siehe Anhang). Dabei zeigt sich anhand der Gleichungen (A.9) und (A.10), dass

$$r_{0,0} = 0, \quad r_{0,n \neq 0} \neq 0, \quad r_{m \neq 0,n} = 0, \quad (3.92)$$

wobei wir auch hier die Verallgemeinerung für höhere Entwicklungen in  $\tilde{V}$  vorgenommen haben. Offenbar sind im symmetrischen Fall  $E, V \rightarrow 0$  nur die Reflexionskoeffizienten mit Drehimpulsquantenzahl  $m = 0$  und Energiekanälen  $n \neq 0$  verschieden von Null. Für die Transmissionskoeffizienten ergibt sich

$$t_{0,n} \neq 0, \quad t_{m \neq 0,0} \neq 0, \quad t_{m \neq 0,n \neq 0} = 0. \quad (3.93)$$

Für die Transmissionskoeffizienten existieren im Gegensatz zu den Reflexionskoeffizienten auch Anteile mit  $m \neq 0$ .

# 4 Berechnung von Streugrößen

Nachdem wir in Abschnitt 3 die Wellenfunktionen des Streuproblems gefunden haben, können wir nun die Berechnung der das Streuverhalten charakterisierenden Streugrößen vornehmen. Den Ausgangspunkt unserer Berechnungen werden dabei die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j}$  und die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho$  darstellen, welche die Kontinuitätsgleichung (2.10) erfüllen.

## 4.1 Wahrscheinlichkeitsstromdichte und Streueffizienz

Aufgrund der Beschaffenheit unseres Streuproblems (siehe *Abbildung 3.1*) ist die Beschreibung des Streuverhaltens wie an ebenen Stufenpotentialen mit Hilfe von Transmissions- und Reflexionskoeffizienten nicht möglich. Stattdessen wenden wir uns zunächst der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j}$  zu, mit der wir schließlich die wichtigen Streugrößen radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $j_r^{\text{ref}}$  und Streueffizienz  $Q$  einführen können.

### 4.1.1 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte berechnet sich gemäß Gleichung (2.11), wobei wir die beiden Raumbereiche  $r > R$  (I) und  $r < R$  (II) mit den entsprechenden Wellenfunktionen (3.7) und (3.9) gesondert untersuchen müssen. Am einfachsten gelingt dies, indem das Skalarprodukt von  $\sigma\psi$  und  $\psi^\dagger$  in beiden Raumbereichen numerisch ausgewertet wird. Für die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsstromdichte werden jedoch explizite Ausdrücke benötigt, die wir im Folgenden herleiten.

#### Raumbereich I

Wir beschränken uns zunächst auf den Raumbereich I, in dem die Wellenfunktion durch  $\psi^I = \psi^{\text{in}} + \psi^{\text{ref}}$  gegeben ist. Für die  $i$ -te Komponente des Wahrscheinlich-

keitsstromes ergibt sich

$$j_i^{\text{I}} = (\psi^{\text{in}\dagger} + \psi^{\text{ref}\dagger}) \sigma_i (\psi^{\text{in}} + \psi^{\text{ref}}) = j_i^{\text{I, in}} + j_i^{\text{I, ref}} + j_i^{\text{I, int}} \quad (4.1)$$

mit

$$j_i^{\text{I, in}} = \delta_{i0}, \quad j_i^{\text{I, ref}} = \psi^{\text{ref}\dagger} \sigma_i \psi^{\text{ref}}, \quad j_i^{\text{I, int}} = 2\text{Re} \{ \psi^{\text{in}\dagger} \sigma_i \psi^{\text{ref}} \}, \quad (4.2)$$

wobei wir Gleichung (3.26) genutzt haben und  $j_i^{\text{I, int}}$  den Interferenzanteil darstellt. Anwenden von  $\sigma_i$  auf  $\psi^{\text{ref}}$  ergibt unter Verwendung der Gleichung (3.86)

$$\begin{aligned} \sigma_i \psi^{\text{ref}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2}} i^{m+1} r_{m,n} \left[ -i H_m(k_n r) \begin{pmatrix} \vartheta_i e^{-im\varphi} \\ \vartheta_i^* e^{im\varphi} \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \alpha_n H_{m+1}(k_n r) \begin{pmatrix} \vartheta_i e^{-i(m+1)\varphi} \\ \vartheta_i^* e^{i(m+1)\varphi} \end{pmatrix} \right] \exp(-iE_n t) \end{aligned} \quad (4.3)$$

mit  $\vartheta_i = \delta_{i0} - i\delta_{i1}$ . Nach Multiplikation von Gleichung (4.3) mit  $\psi^{\text{ref}\dagger}$ , anschließender Ausmultiplikation und Zeitmittelung erhalten wir schließlich für die  $x$ -Komponente der zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\bar{j}_x^{\text{I, ref}} = \bar{j}_{x,(1)}^{\text{I, ref}} + \bar{j}_{x,(2)}^{\text{I, ref}} \quad (4.4)$$

mit

$$\begin{aligned} \bar{j}_{x,(1)}^{\text{I, ref}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |r_{m,n}|^2 \left\{ |H_m(k_n r)|^2 \cos(2m\varphi) \right. \\ &\quad \left. + |H_{m+1}(k_n r)|^2 \cos(2(m+1)\varphi) \right. \\ &\quad \left. + 2[Y_m(k_n r) J_{m+1}(k_n r) - Y_{m+1}(k_n r) J_m(k_n r)] \cos\varphi \right\} \end{aligned} \quad (4.5)$$

und

$$\begin{aligned} \bar{j}_{x,(2)}^{\text{I, ref}} &= 2\text{Re} \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m < l} i^{m-l} r_{l,n}^* r_{m,n} [H_l^*(k_n r) H_m(k_n r) \cos((l+m)\varphi) \right. \\ &\quad \left. + H_{l+1}^*(k_n r) H_{m+1}(k_n r) \cos((l+m+2)\varphi) \right. \\ &\quad \left. + i\alpha_n H_l^*(k_n r) H_{m+1}(k_n r) \cos((l-m-1)\varphi) \right. \\ &\quad \left. - i\alpha_n H_{l+1}^*(k_n r) H_m(k_n r) \cos((l-m+1)\varphi) \right\}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Dabei haben wir genutzt, dass bei einer Zeitmittelung

$$\bar{j} = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} j \, dt \quad (4.7)$$

über die Periode  $T = 2\pi/\omega$  die Relation

$$\frac{1}{T} \int_t^{t+T} \exp(-i(E_n - E_p)t) \, dt = \delta_{np} \quad (4.8)$$

gilt. In analoger Art und Weise folgt für die  $y$ -Komponente

$$\bar{j}_y^{\text{I, ref}} = \bar{j}_{y,(1)}^{\text{I, ref}} + \bar{j}_{y,(2)}^{\text{I, ref}} \quad (4.9)$$

mit

$$\begin{aligned} \bar{j}_{y,(1)}^{\text{I, ref}} = & \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |r_{m,n}|^2 \left\{ -|H_m(k_n r)|^2 \sin(2m\varphi) \right. \\ & + |H_{m+1}(k_n r)|^2 \sin(2(m+1)\varphi) \\ & \left. + 2[Y_m(k_n r) J_{m+1}(k_n r) - Y_{m+1}(k_n r) J_m(k_n r)] \sin\varphi \right\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

und

$$\begin{aligned} \bar{j}_{x,(2)}^{\text{I, ref}} = & 2\text{Re} \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m < l} i^{m-l} r_{l,n}^* r_{m,n} [-H_l^*(k_n r) H_m(k_n r) \sin((l+m)\varphi) \right. \\ & + H_{l+1}^*(k_n r) H_{m+1}(k_n r) \sin((l+m+2)\varphi) \\ & - i\alpha_n H_l^*(k_n r) H_{m+1}(k_n r) \sin((l-m-1)\varphi) \\ & \left. - i\alpha_n H_{l+1}^*(k_n r) H_m(k_n r) \sin((l-m+1)\varphi) \right\}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Für die Interferenzterme bekommen wir nach Ausmultiplikation und anschließender Zeitmittelung ( $k_0 \equiv k$ )

$$\begin{aligned} \bar{j}_x^{\text{I, int}} = & 2\text{Re} \left\{ \exp(-ikr \cos\varphi) \sum_{m=0}^{\infty} i^{m+1} r_{m,0} \right. \\ & \left. \times \left[ -iH_m^{(1)}(kr) \cos(m\varphi) + H_{m+1}^{(1)}(kr) \cos((m+1)\varphi) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.12)$$

und

$$\begin{aligned} \vec{j}_y^{\text{I, int}} &= 2\text{Re} \left\{ \exp(-ikr \cos \varphi) \sum_{m=0}^{\infty} i^{m+1} r_{m,0} \right. \\ &\quad \left. \times \left[ iH_m^{(1)}(kr) \sin(m\varphi) + H_{m+1}^{(1)}(kr) \sin((m+1)\varphi) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

## Raubereich II

Nach einer analogen Rechnung wie in Raumbereich I gelangen wir mit der transmittierten Wellenfunktion (3.87) auf die Komponenten des zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsstromes

$$\vec{j}_i^{\text{II}} = \vec{j}_{i,(1)}^{\text{II}} + \vec{j}_{i,(2)}^{\text{II}}. \quad (4.14)$$

Die  $x$ -Komponenten lauten

$$\begin{aligned} \vec{j}_{x,(1)}^{\text{II}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |t_{m,n}|^2 \left\{ J_m(q_n r)^2 \cos(2m\varphi) \right. \\ &\quad \left. + J_{m+1}(q_n r)^2 \cos(2(m+1)\varphi) \right\} \end{aligned} \quad (4.15)$$

und

$$\begin{aligned} \vec{j}_{x,(2)}^{\text{II}} &= 2\text{Re} \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m < l} i^{m-l} t_{l,n}^* t_{m,n} \left[ J_l(q_n r) J_m(q_n r) \cos((l+m)\varphi) \right. \right. \\ &\quad + J_{l+1}(q_n r) J_{m+1}(q_n r) \cos((l+m+2)\varphi) \\ &\quad + i\alpha'_n J_l(q_n r) J_{m+1}(q_n r) \cos((l-m-1)\varphi) \\ &\quad \left. \left. - i\alpha'_n J_{l+1}(q_n r) J_m(q_n r) \cos((l-m+1)\varphi) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die  $y$ -Komponenten lauten

$$\begin{aligned} \vec{j}_{y,(1)}^{\text{II}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} |t_{m,n}|^2 \left\{ -J_m(q_n r)^2 \sin(2m\varphi) \right. \\ &\quad \left. + J_{m+1}(q_n r)^2 \sin(2(m+1)\varphi) \right\} \end{aligned} \quad (4.17)$$

und

$$\begin{aligned} \bar{j}_{y,(2)}^{\text{II}} = & 2\text{Re} \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m < l} i^{m-l} t_{l,n}^* t_{m,n} [J_l(q_n r) J_m(q_n r) \sin((l+m)\varphi) \right. \\ & + J_{l+1}(k_n r) J_{m+1}(q_n r) \sin((l+m+2)\varphi) \\ & + i\alpha'_n J_l(q_n r) J_{m+1}(q_n r) \sin((l-m-1)\varphi) \\ & \left. - i\alpha'_n J_{l+1}(q_n r) J_m(q_n r) \sin((l-m+1)\varphi) \right\}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

### 4.1.2 Radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle

Als nächstes wollen wir die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $j_r^{\text{ref}}$  berechnen. Mit ihr werden wir schließlich in der Lage sein, in Abschnitt 4.1.3 die Streueffizienz als weitere Streugröße einzuführen.

Um zu  $j_r^{\text{ref}}$  zu gelangen, benötigen wir zunächst den Operator der radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\hat{j}_r = \hat{j} e_r$ . Für diesen ergibt sich

$$\hat{j}_r = \sigma_x \cos \varphi + \sigma_y \sin \varphi, \quad (4.19)$$

sodass wir nach Anwenden von  $\hat{j}_r$  auf  $\psi^{\text{ref}}$  aus Gleichung (3.86) und anschließender Skalarmultiplikation mit  $\psi^{\text{ref}\dagger}$  die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle

$$\begin{aligned} j_r^{\text{ref}} = & \sum_{n,p=-\infty}^{\infty} \sum_{l,m=0}^{\infty} i^{l-m} r_{l,n} r_{m,p}^* \exp(-i(E_n - E_p)t) \\ & \times \left\{ [\alpha_n \alpha_p H_{l+1}(k_n r) H_{m+1}^*(k_p r) + H_l(k_n r) H_m^*(k_p r)] \cos((m+l+1)\varphi) \right. \\ & \left. - i\alpha_p [\alpha_n \alpha_p H_{l+1}(k_n r) H_m^*(k_p r) - H_l(k_n r) H_{m+1}^*(k_p r)] \cos((m-l)\varphi) \right\} \end{aligned} \quad (4.20)$$

erhalten. Es bietet sich an, Gleichung (4.20) in Fernfeldnäherung auszuwerten. Dazu setzen wir die asymptotische Entwicklung der Hankel-Funktionen [44]

$$H_m(k_n r) \underset{k_n r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi k_n r}} \exp\left(\alpha_n i \left(k_n r - m \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\right) \quad (4.21)$$

ein und erhalten nach einigen Umformungen

$$j_r^{\text{ref}} = j_{r,(1)}^{\text{ref}} + j_{r,(2)}^{\text{ref}} \quad (4.22)$$

mit

$$j_{r,(1)}^{\text{ref}} = \sum_{n,p=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2}{\pi r \sqrt{k_n k_p}} \exp\left(i(E_n - E_p)(r - t)\right) (1 - \alpha_n i)(1 + \alpha_p i) \\ \times r_{m,n} r_{m,p}^* i^{(\alpha_p - \alpha_n)m} [\cos((2m + 1)\varphi) + 1] \quad (4.23)$$

und

$$j_{r,(2)}^{\text{ref}} = \sum_{n,p=-\infty}^{\infty} \sum_{m < l}^{\infty} \frac{4}{\pi r \sqrt{k_n k_p}} \exp\left(i(E_n - E_p)(r - t)\right) (1 - \alpha_n i)(1 + \alpha_p i) \\ \times \text{Re} \left\{ i^{(1-\alpha_n)m} i^{(\alpha_p-1)l} r_{m,n} r_{l,p}^* \right\} [\cos((l - m)\varphi) + \cos((l + m + 1)\varphi)]. \quad (4.24)$$

Die Bedeutung der radialen, fernfeldgenäherten Wahrscheinlichkeitsstromdichte wird klarer, wenn wir auch für die reflektierte Wellenfunktion (3.86) die asymptotische Entwicklung (4.21) verwenden. Dies ergibt

$$\psi_r^{\text{ref}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} e^{iE_n(r-t)} i^{(1-\alpha_n)m} \frac{1 - \alpha_n i}{\sqrt{2\pi k_n r}} r_{m,n} \begin{pmatrix} e^{im\varphi} + e^{-i(m+1)\varphi} \\ e^{-im\varphi} + e^{i(m+1)\varphi} \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Anwenden von  $\hat{j}_r$  auf  $\psi_r^{\text{ref}}$  führt auf  $\hat{j}_r \psi_r^{\text{ref}} = \psi_r^{\text{ref}}$ , sodass im Fernfeld offenbar

$$j_r^{\text{ref}} = \psi_r^{\text{ref} \dagger} \hat{j}_r \psi_r^{\text{ref}} = \psi_r^{\text{ref} \dagger} \psi_r^{\text{ref}} = \rho^{\text{ref}} \quad (4.26)$$

gilt. Im Fernfeld stimmen radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte und Wahrscheinlichkeitsdichte der reflektierten Welle überein.

Wir berechnen schließlich noch die zeitgemittelte, fernfeldgenäherte Stromdichte  $\bar{j}_r^{\text{ref}}$ . Mit den Gleichungen (4.7) und (4.8) folgt

$$\bar{j}_r^{\text{ref}} = \bar{j}_{r,(1)}^{\text{ref}} + \bar{j}_{r,(2)}^{\text{ref}} \quad (4.27)$$

mit

$$\bar{j}_{r,(1)}^{\text{ref}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4}{\pi k_n r} |r_{m,n}|^2 [\cos((2m + 1)\varphi) + 1] \quad (4.28)$$

und

$$\bar{j}_{r,(2)}^{\text{ref}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m < l}^{\infty} \frac{8}{\pi k_n r} \text{Re} \left\{ i^{(1-\alpha_n)(m-l)} r_{m,n} r_{m,n}^* \right\} \\ \times [\cos((l - m)\varphi) + \cos((l + m + 1)\varphi)]. \quad (4.29)$$

### 4.1.3 Streueffizienz

Mit Hilfe der in Abschnitt 4.1.2 gefundenen Wahrscheinlichkeitsstromdichten der reflektierten Welle können wir nun die Streueffizienz berechnen.

Eine charakteristische Größe zur Beschreibung des Streuverhaltens ist der Streuquerschnitt  $\sigma$  [45], der gemäß

$$\sigma = \frac{I^{\text{ref}}}{I^{\text{in}}/A} \quad (4.30)$$

das Verhältnis von reflektiertem zu einfallenden totalem Wahrscheinlichkeitsstrom pro Einheitsfläche darstellt. Der totale Wahrscheinlichkeitsstrom der reflektierten Welle berechnet sich zu

$$I^{\text{ref}} = \int \mathbf{j}^{\text{ref}} \cdot d\mathbf{s} = \int_0^{2\pi} j_r^{\text{ref}} r \, d\varphi, \quad (4.31)$$

während wir für den einfallenden Strom pro Einheitsfläche unter Verwendung von Gleichung (3.26) den konstanten Wert  $I^{\text{in}}/A = 1$  erhalten. Um das Streuverhalten an Quantenpunkten unterschiedlicher Ausdehnung zu beschreiben, bietet sich die Einführung der Streueffizienz an, die wir definieren als

$$Q = \frac{\sigma}{2R}. \quad (4.32)$$

Mit der radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte der gestreuten Welle aus Gleichung (4.20) ergibt sich unter Ausnutzung von Gleichung (3.82) und der Relation

$$\int_0^{2\pi} \cos((l-m)\varphi) \, d\varphi = 2\pi\delta_{lm} \quad (4.33)$$

nach einigen Umformungen der Ausdruck

$$Q(r, t) = \sum_{n,p=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} 4\pi r i r_{m,n} r_{m,p}^* \exp(-i(E_n - E_p)t) \times [\alpha_n H_{m+1}(k_n r) H_m^*(k_p r) - \alpha_p H_m(k_n r) H_{m+1}^*(k_p r)]. \quad (4.34)$$

Für die zeitgemittelte Streueffizienz erhalten wir

$$\begin{aligned} \bar{Q}(r) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} 4\pi r i |r_{m,n}|^2 \alpha_n \\ &\quad \times [H_{m+1}(k_n r) H_m^*(k_n r) - H_m(k_n r) H_{m+1}^*(k_n r)]. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Im stationären Grenzfall  $\tilde{V} \rightarrow 0$  reduziert sich die Streueffizienz (4.34) wegen Gleichung (3.63) auf ( $k_0 \equiv k > 0$ )

$$Q^{\text{st}}(r) = \sum_{m=0}^{\infty} 4\pi r i |r_m^{\text{stat}}|^2 [H_{m+1}^{(1)}(kr) H_m^{(1)*}(kr) - H_m^{(1)}(kr) H_{m+1}^{(1)*}(kr)]. \quad (4.36)$$

Unter Verwendung der Rekursionsbeziehungen der Besselfunktionen (3.22) und (3.23) zeigt sich nach einer kurzen Rechnung, dass die Streueffizienz  $Q^{\text{st}}$  unabhängig von  $r$  ist, also

$$\frac{\partial}{\partial r} Q^{\text{st}}(r) = 0 \quad (4.37)$$

gilt. Dementsprechend können wir in Gleichung (4.36) für die Hankel-Funktionen die asymptotische Darstellung (4.21) einsetzen, ohne das Ergebnis zu verändern. Wir erhalten

$$Q^{\text{st}}(r) = \frac{4}{kR} \sum_{m=0}^{\infty} |r_m^{\text{stat}}|^2. \quad (4.38)$$

Es zeigt sich nach einer analogen Rechnung, dass Gleichung (4.37) auch für  $\bar{Q}(r)$  erfüllt ist. Obwohl dies wegen der Zeitabhängigkeit des Streuproblems jedoch nicht für die Streueffizienz  $Q(r, t)$  aus Gleichung (4.34) zutrifft, ist es dennoch sinnvoll auch  $Q(r, t)$  für  $r \rightarrow \infty$  auszudrücken. Es ergibt sich schließlich die Streueffizienz in Fernfeldnäherung

$$Q(r, t) = \bar{Q}(r) + \tilde{Q}(r, t) \quad (4.39)$$

mit dem zeitabhängigen Anteil

$$\begin{aligned} \tilde{Q}(r, t) &= \sum_{n < p} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4}{R \sqrt{k_n k_p}} \\ &\quad \times \operatorname{Re} \left\{ \exp(i(E_n - E_p)(r - t)) i^{(\alpha_p - \alpha_n)m} (1 - \alpha_n i) (1 + \alpha_p i) r_{m,n} r_{m,p}^* \right\} \end{aligned} \quad (4.40)$$

und der zeitgemittelten Streueffizienz in Fernfeldnäherung

$$\bar{Q}(r) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4}{k_n R} |r_{m,n}|^2. \quad (4.41)$$

Die Streueffizienz in Fernfeldnäherung (4.39)-(4.41) wird bei der Diskussion des Streuverhaltens eine zentrale Rolle spielen.

## 4.2 Wahrscheinlichkeitsdichte

Die Wahrscheinlichkeitsdichte berechnet sich gemäß der Formel

$$\rho = \psi^\dagger \psi, \quad (4.42)$$

wobei wir die beiden Raumbereiche I und II wie schon bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte (siehe Abschnitt 4.1) gesondert untersuchen. Die nicht-zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsdichte wird dabei wieder durch numerische Auswertung des Skalarproduktes von  $\psi^\dagger$  und  $\psi$  berechnet. Für die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsdichte werden wir explizite Ausdrücke angeben.

### Raumbereich I

In Raumbereich I lautet die Wellenfunktion  $\psi^I = \psi^{\text{in}} + \psi^{\text{ref}}$  und die Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich zu

$$\rho^I = \rho^{\text{I, in}} + \rho^{\text{I, ref}} + \rho^{\text{I, int}} \quad (4.43)$$

mit

$$\rho^{\text{I, in}} = \psi^{\text{in} \dagger} \psi^{\text{in}} = 1, \quad \rho^{\text{I, ref}} = \psi^{\text{ref} \dagger} \psi^{\text{ref}}, \quad \rho^{\text{I, int}} = 2\text{Re} \{ \psi^{\text{in} \dagger} \psi^{\text{ref}} \}, \quad (4.44)$$

wobei wir Gleichung (3.26) genutzt haben und  $\rho^{\text{I, int}}$  den Interferenzanteil beschreibt. Für den reflektierten Anteil erhalten wir nach Ausführen des Skalarproduktes mit der reflektierten Wellenfunktion (3.86) und anschließender Zeitmitte-

lung

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}^{\text{I, ref}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m,l=0}^{\infty} i^{m-l} r_{m,n} r_{l,n}^* \\
 &\times \left\{ [H_m(k_n r) H_l^*(k_n r) + H_{m+1}(k_n r) H_{l+1}^*(k_n r)] \cos((l-m)\varphi) \right. \\
 &\left. + \alpha_n i [H_{m+1}(k_n r) H_l^*(k_n r) - H_m(k_n r) H_{l+1}^*(k_n r)] \cos((l+m+1)\varphi) \right\}. \quad (4.45)
 \end{aligned}$$

Für den Interferenzanteil bekommen wir nach Zeitmittelung den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}^{\text{I, int}} &= 2\text{Re} \left\{ \exp(-ikx) \sum_{m=0}^{\infty} i^{m+1} r_{m,0} \right. \\
 &\left. \times [-iH_m^{(1)}(kr) \cos(m\varphi) + H_{m+1}^{(1)}(kr) \cos((m+1)\varphi)] \right\}. \quad (4.46)
 \end{aligned}$$

## Raubereich II

In Raumbereich II bekommen wir mit der transmittierten Wellenfunktion (3.87) nach Zeitmittelung

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}^{\text{II}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m,l=0}^{\infty} i^{m-l} t_{m,n} t_{l,n}^* \\
 &\times \left\{ [J_m(k_n r) J_l(k_n r) + J_{m+1}(k_n r) J_{l+1}(k_n r)] \cos((l-m)\varphi) \right. \\
 &\left. + \alpha'_n i [J_{m+1}(k_n r) J_l(k_n r) - J_m(k_n r) J_{l+1}(k_n r)] \cos((l+m+1)\varphi) \right\}. \quad (4.47)
 \end{aligned}$$

# 5 Diskussion der Ergebnisse

In Abschnitt 3 haben wir die einfallende, reflektierte und transmittierte Wellenfunktion aufgestellt und über deren Stetigkeit an der Übergangsstelle  $r = R$  die Bestimmungsgleichung der Streukoeffizienten  $r_{m,n}$  und  $t_{m,n}$  abgeleitet. Anschließend führten wir in Abschnitt 4 diverse Streugrößen ein, wobei wir für die radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j_r^{\text{ref}}$ , die Streueffizienz  $Q$ , sowie die zeitgemittelten Größen  $\bar{\rho}$  und  $\bar{j}$  explizite Ausdrücke hergeleitet haben. Mit diesen Ergebnissen können wir nun das Streuverhalten des Elektrons am Quantenpunkt diskutieren. Die dabei zu variierenden Parameter sind die Energie  $E$ , der Radius  $R$  und die Höhe  $V$  des Quantenpunkts, sowie die Parameter des Schwingungsanteils  $\tilde{V}$ ,  $\omega$ ,  $t$  und  $\delta$ .

## 5.1 Ergebnisse im stationären Grenzfall

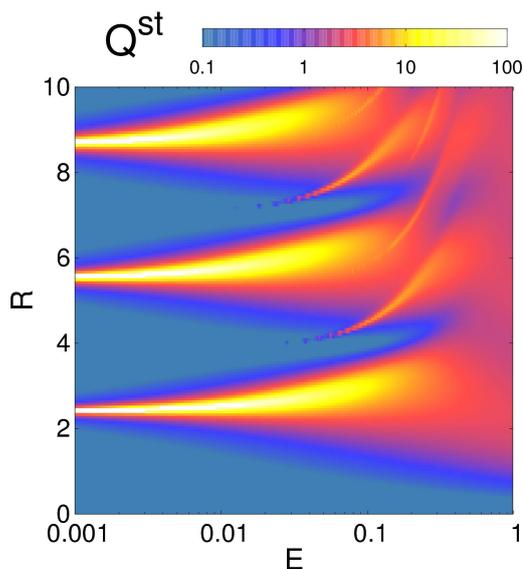
Um eine Vorstellung über das Streuverhalten an einem Quantenpunkt zu bekommen, untersuchen wir zunächst das zeitunabhängige Streuverhalten des Elektrons im stationären Grenzfall  $\tilde{V} = 0$ . Die zu variierenden Parameter reduzieren sich damit auf  $E$ ,  $R$  und  $V$ .

### 5.1.1 Streueffizienz und Resonanzstruktur

#### Übersicht auftretender Streueffekte

Die zentrale Größe zur Beschreibung des Streuverhaltens am Quantenpunkt ist die Streueffizienz, die im stationären Fall gegeben ist durch Gleichung (4.38) mit den dazugehörigen stationären Reflexionskoeffizienten nach Gleichung (3.63). Wir werden diese im Folgenden in Abhängigkeit der Parameter  $E$  und  $R$  untersuchen und setzen zunächst  $V = 1$ .

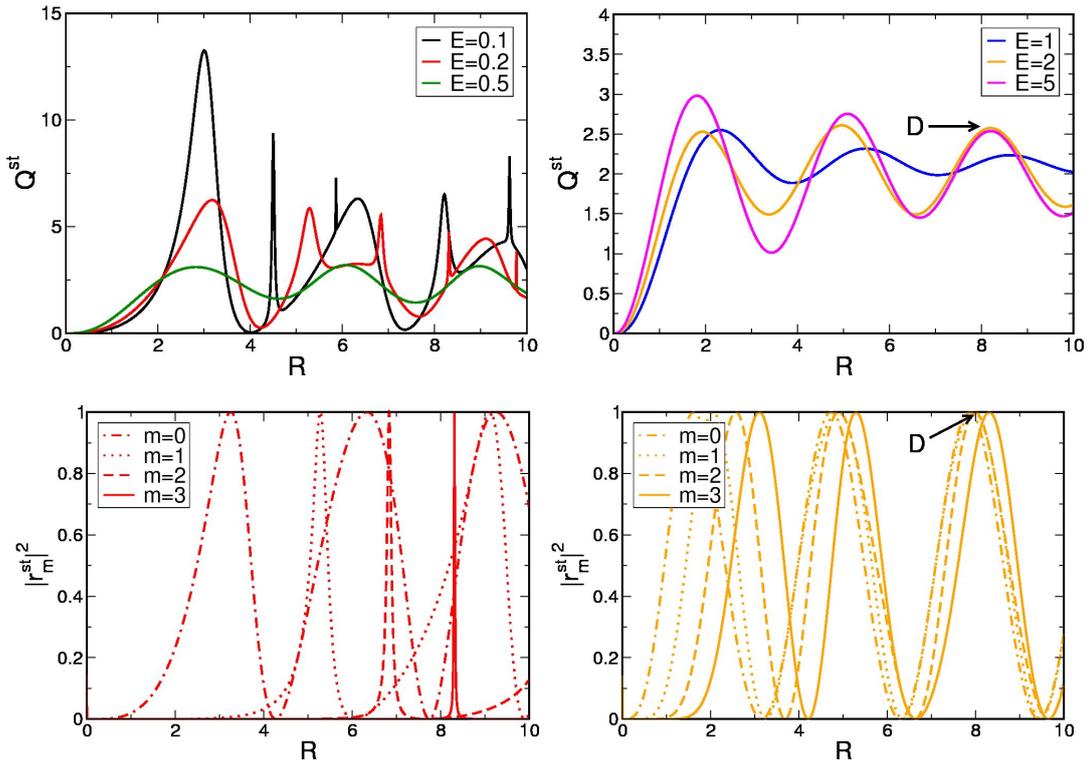
In *Abbildung 5.1* ist die stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}$  in Abhängigkeit von der Energie  $E$  und dem Radius  $R$  des Quantenpunkts für  $V = 1$  dargestellt. Um die auftretenden Strukturen besser zu veranschaulichen, wurde die Streueffizienz logarithmisch zur Basis 10 über der Energie aufgetragen. Wir sehen, dass die Streueffizienz entsprechend unserer Erwartung für  $R = 0$  verschwindet. Weiter



**Abbildung 5.1:** Stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(E, R)$  für  $V = 1$ . Um den Einfluss einzelner Partialwellenbeiträge sichtbar zu machen, verwenden wir die logarithmische Darstellung über  $E$ .

zeigt sie eine reichhaltige Struktur in Form von Resonanzen für bestimmte Werte von  $R$  und  $E$  auf, wobei diese in ihrer Breite stark variieren können. Für kleine Energien liegt für die breiteren Resonanzen eine periodische Wiederkehr in  $R$  vor. Erst für höhere Energien  $E$  beobachten wir das Hinzukommen schmalerer Resonanzen und ihre periodische Wiederkehr in  $R$ . Allgemein ist festzuhalten, dass mit steigendem  $E$  oder  $R$  die Resonanzen stark verbreitern und aufweichen. Des Weiteren lässt sich erkennen, dass sich die auftretenden Resonanzen für größere Werte von  $E$  in Richtung größerer Radien  $R$  verschieben, was auf eine direkte Korrelation zwischen der Wellenlänge des Elektrons und der Ausdehnung des Quantenpunkts schließen lässt.

Zur genaueren Auflösung und Lokalisierung der Resonanzen betrachten wir *Abbildung 5.2*, in der  $Q^{\text{st}}(R)$  für verschiedene Werte von  $E < V$  und  $E > V$  (obere Diagramme) dargestellt ist. Da sich die stationäre Streueffizienz gemäß Gleichung (4.36) im Wesentlichen durch die stationären Reflexionskoeffizienten  $|r_m^{\text{st}}|^2$  zusammensetzt, sind zudem die ersten vier Reflexionskoeffizienten  $|r_0^{\text{st}}|^2$  bis  $|r_3^{\text{st}}|^2$  für ausgewählte Energien dargestellt (untere Diagramme). Die Farbe der Kurven kennzeichnet dabei die Zugehörigkeit zu der Energie. Wir betrachten zunächst den Fall  $\alpha = -1$ , bei dem für kleinere Energien (siehe schwarze und rote Kurve) eine ausgeprägte Detailstruktur in Form eines oszillierenden Verhaltens mit Ausbildung schmaler Peaks zu erkennen ist. Der Vergleich mit den Reflexionskoeff-



**Abbildung 5.2:** Oben: Stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(R)$  für verschiedene Werte von  $E < V$  (links) und  $E > V$  (rechts) mit  $V = 1$ . Unten: Die ersten vier stationären Partialwellenbeiträge  $|r_m^{\text{st}}(R)|^2$  für  $E = 0.2$  (links) und  $E = 2$  (rechts) mit  $V = 1$ . Auf die mit D gekennzeichneten Stellen wird im Weiteren Bezug genommen.

fizienten im unteren Diagramm bezüglich der Energie  $E = 0.2$  (rote Kurve) zeigt, dass diese Peaks auf die Dominanz einzelner Partialwellenbeiträge  $|r_m^{\text{st}}|^2$  zurückzuführen sind, die den wesentlichen Beitrag zur Streueffizienz leisten. Die Breite dieser Resonanzen hängt dabei insbesondere von der angeregten Partialwelle ab: Je höher die Drehimpulsquantenzahl  $m$  der Partialwelle, desto schmalere Resonanzen sind zu erwarten. Anhand von *Abbildung 5.1* sehen wir, dass für größere Energien mehrere, verbreiterte Partialwellenbeiträge einen gleichwertigen Beitrag zur Streueffizienz leisten. Wie sich mit Hilfe der grünen Kurve in *Abbildung 5.2* sehen lässt, resultiert dies in ein sanftes oszillierendes Verhalten ohne Ausbildung von scharfen Resonanzen. Für den Fall  $\alpha = 1$  ist für alle Kurven ein homogenes oszillierendes Verhalten ohne Ausbildung scharfer Resonanzen zu beobachten, wobei die Amplitude dieser Oszillation mit der Energie  $E$  ansteigt. Während für kleine Werte von  $R$  lediglich die unterste Partialwelle einen Beitrag zur Streueffizienz leistet, werden mit steigendem  $R$  immer höhere Partialwellen angeregt. Die homogene Oszillation ist daher wieder auf die gleichwertige Beteiligung mehrerer

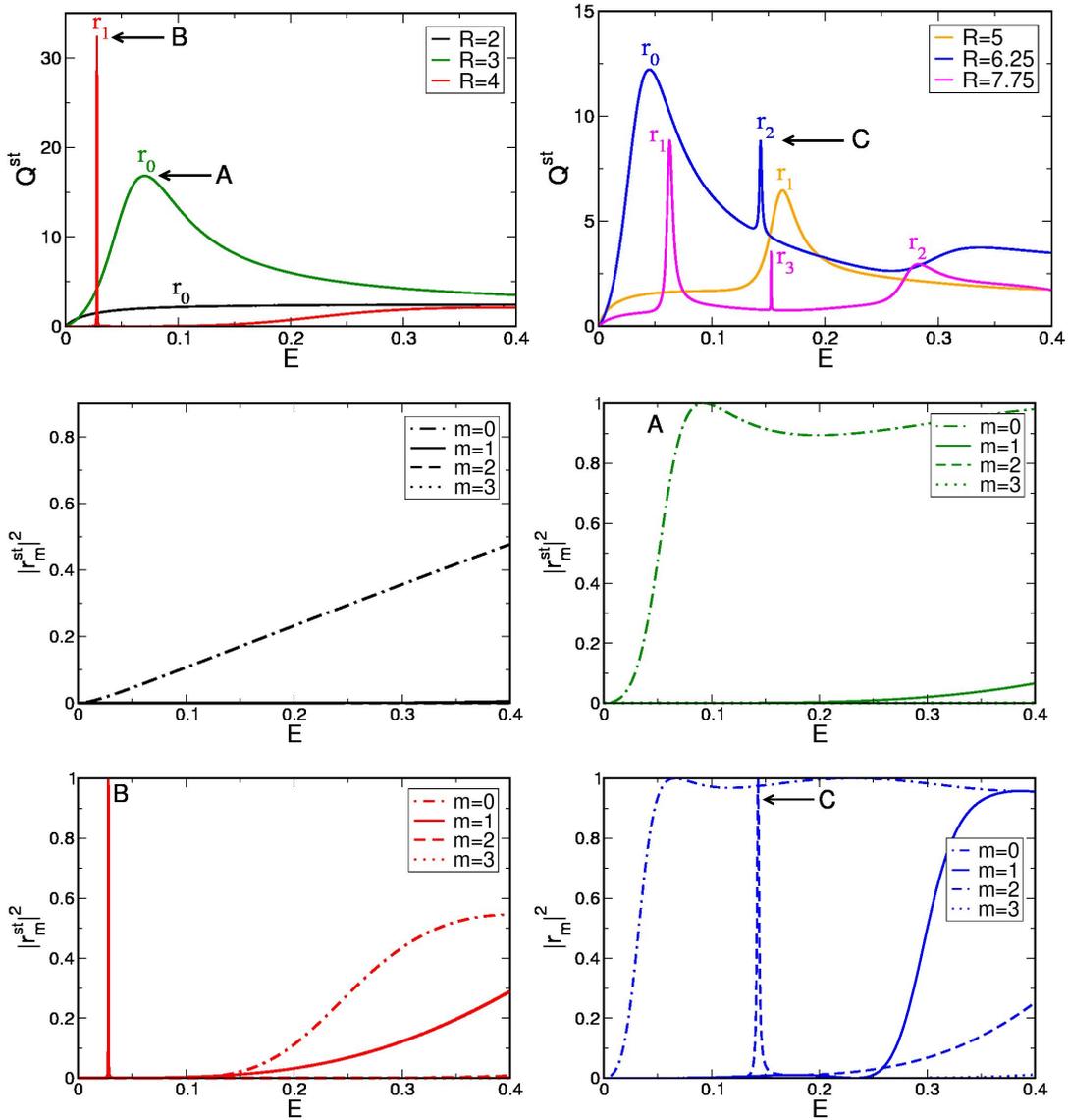
Partialwellenbeiträge an der Streueffizienz zurückzuführen, wie sich auch im unteren Diagramm am Beispiel der orangen Kurve ( $E = 2$ ) erkennen lässt: Die Reflexionskoeffizienten  $|r_m^{\text{st}}|^2$  weisen für größere Energien einen harmonischen Verlauf auf, wobei sich die einzelnen Partialwellenbeiträge mit Drehimpulsquantenzahl  $m$  für größere  $R$  einander annähern. Besser verstehen lässt sich dieses Verhalten, wenn wir die stationären Reflexionskoeffizienten für  $R \rightarrow \infty$  entwickeln. Unter Benutzung der asymptotischen Näherungsformeln der Bessel-Funktionen [44] und der Additionstheoreme für trigonometrische Funktionen, ergibt sich

$$|r_m^{\text{st}}|^2 \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \sin^2((k + \alpha'q)R), \quad (5.1)$$

also ein von der Drehimpulsquantenzahl  $m$  unabhängiger Ausdruck. Es sei angemerkt, dass Gleichung (5.1) auch für den Grenzfall  $E \rightarrow \infty$  gültig ist. In den Diagrammen eingezeichnet ist ein spezieller Punkt D mit  $E = 2$  und  $R = 8$ , auf den an späterer Stelle eingegangen wird.

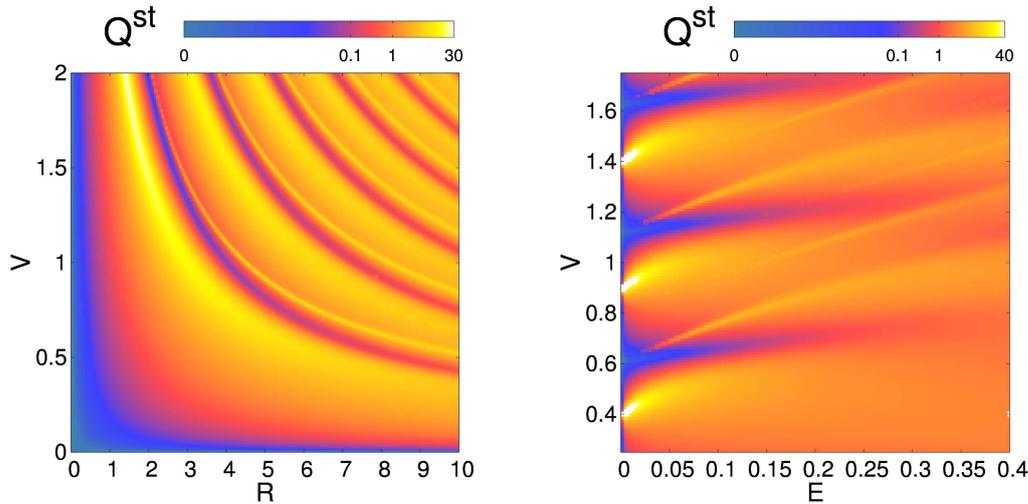
Zur weiteren Untersuchung der auftretenden Resonanzen ist in *Abbildung 5.3* die stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(E)$  für verschiedene Werte von  $R$  (obere Diagramme) dargestellt. Auch in dieser Abbildung sind wieder die ersten vier Partialwellenbeiträge  $|r_m^{\text{st}}|^2$  für verschiedene Werte von  $R$  dargestellt (untere Diagramme), wobei jede Farbe einem Wert von  $R$  zugeordnet ist. Wir sehen, dass für  $E \rightarrow 0$  die Streueffizienz verschwindet, so wie es zu erwarten ist. Mit zunehmender Energie sinkt die Wellenlänge des Elektrons und es werden nach und nach mehr Partialwellen im Quantenpunkt angeregt (siehe untere Diagramme), was letztlich in einem stetigen Anstieg der Streueffizienz resultiert. Für bestimmte Werte der Energie können jedoch scharfe Resonanzen ausgebildet werden. An den Maxima der Resonanzen in  $Q^{\text{st}}$  in den oberen Diagrammen sind die Partialwellenbeiträge eingezeichnet, die für die Ausbildung der Resonanz verantwortlich sind. In den Diagrammen sind bestimmte Resonanzstellen mit den Buchstaben A ( $E = 0.07$ ,  $R = 3$ ), B ( $E = 0.02813$ ,  $R = 4$ ) und C ( $E = 0.1432$ ,  $R = 6.25$ ) gekennzeichnet, auf die an späterer Stelle Bezug genommen wird. Wir sehen wie schon in *Abbildung 5.2*, dass die Breite der Resonanzkurven von der Drehimpulsquantenzahl  $m$  der angeregten Partialwelle, sowie der Resonanzstelle abhängt.

Weiterhin ist es von Interesse - insbesondere in Hinblick auf die Analyse des zeitabhängigen Streuverhaltens am oszillierenden Quantenpunkt - die stationäre Streueffizienz in Abhängigkeit vom Potential  $V$  zu untersuchen. In *Abbildung 5.4* ist die stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}$  in Abhängigkeit von  $R$  und  $V$  für  $E = 0.1$  (links) und in Abhängigkeit von  $E$  und  $V$  für  $R = 6.25$  (rechts) dargestellt. Wir sehen anhand der linken Abbildung, dass für ein verschwindendes Potential  $V = 0$



**Abbildung 5.3:** Oben: Stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(E)$  für verschiedene Werte von  $R$  mit  $V = 1$ ; eingezeichnet sind die stationären Partialwellenbeiträge  $r_m^{\text{st}}$ , die den größten Beitrag an  $Q^{\text{st}}$  leisten. Unten: Die ersten vier stationären Partialwellenbeiträge  $|r_m^{\text{st}}(E)|^2$  für verschiedene Werte von  $R$ ; jede Farbe ist einem Wert von  $R$  zugeordnet. Auf die mit den Buchstaben gekennzeichneten Resonanzstellen wird im Weiteren Bezug genommen.

auch die Streueffizienz verschwindet, so wie man es erwartet. Für Werte  $V > 0$  können jedoch für bestimmte Werte von  $R$  Resonanzen auftreten, die periodisch in  $R$  wiederkehren. Die Breite dieser Resonanzen nimmt dabei mit steigendem  $V$  ab, sodass für große Werte von  $V$  die Resonanzen in kleineren Abständen von  $R$  wiederkehren. Dieses Verhalten ist darauf zurückzuführen, dass mit steigendem  $V$



**Abbildung 5.4:** Stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(R, V)$  für  $E = 0.1$  (links) und  $Q^{\text{st}}(E, V)$  für  $R = 6.25$  (rechts). Um den Einfluss einzelner Partialwellenbeiträge sichtbar zu machen, verwenden wir die logarithmische Darstellung zur Basis 10.

die kinetische Energie unterhalb des Quantenpunkts zunimmt und die Wellenlänge des Elektrons entsprechend abnimmt. Die Folge ist, dass höhere Partialwellen bereits für kleinere Werte von  $R$  angeregt werden können. In der rechten Abbildung sehen wir, dass für größere Energien die Streueffizienz eine weitgehend homogene Struktur aufweist, die jedoch von schmalen Resonanzen der höheren Partialwellen gestört wird. Für kleine Werte von  $E$  erkennen wir hingegen die Dominanz von Resonanzen der niedrigeren Partialwellen, während mit steigender Energie weitere Resonanzen höherer Partialwellen hinzukommen und verbreitern. Für kleine Energien ist insbesondere eine periodische Wiederkehr der Resonanzen erkennbar. Diese ist wieder darauf zurückzuführen, dass mit steigendem  $V$  die kinetische Energie des Elektrons unterhalb des Quantenpunkts anwächst und daher für bestimmte Wellenlängen in wohldefinierten Abständen  $\Delta V$  die Partialwellen wiederholt angeregt werden.

### Lokalisierung und Form der Resonanzen

Wir hatten mit Hilfe von *Abbildung 5.1-5.4* gesehen, dass für kleine Energien und Radien scharfe Resonanzen in der Streueffizienz auftreten können, für die bestimmte Partialwellenbeiträge den Wert 1 annehmen. Es ist möglich, Näherungsformeln für die Reflexionskoeffizienten  $|r_m^{\text{st}}(E, R)|^2$  für kleine Werte von  $ER$  zu finden, um damit schließlich die Resonanzstellen zu lokalisieren [43]. Dazu bringen

wir die stationären Reflexionskoeffizienten aus Gleichung (3.63) in die Form

$$r_m^{\text{st}} = -\frac{F_n}{F_n + iG_n} \quad (5.2)$$

mit

$$F_m = J_{m+1}(qR) J_m(kR) - \alpha' J_m(qR) J_{m+1}(kR) \quad (5.3)$$

und

$$G_m = J_{m+1}(qR) Y_m(kR) - \alpha' J_m(qR) Y_{m+1}(kR). \quad (5.4)$$

Die Resonanzbedingung  $r_m^{\text{st}} \stackrel{!}{=} 1$  ist gleichbedeutend mit der Bedingung  $G_m \stackrel{!}{=} 0$ . Unter Verwendung der asymptotischen Reihenentwicklungen der Bessel-Funktionen für kleine Werte von  $ER$  [44] lassen sich die Nullstellen von  $G_m$  finden [43]. Wir erhalten schließlich in 2. Ordnung die Bestimmungsgleichung

$$qR = j_{m,s} - \begin{cases} ER \left( \gamma + \ln \frac{ER}{2} \right) & \text{für } m = 0 \\ -\frac{1}{m} \frac{ER}{2} & \text{für } m > 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

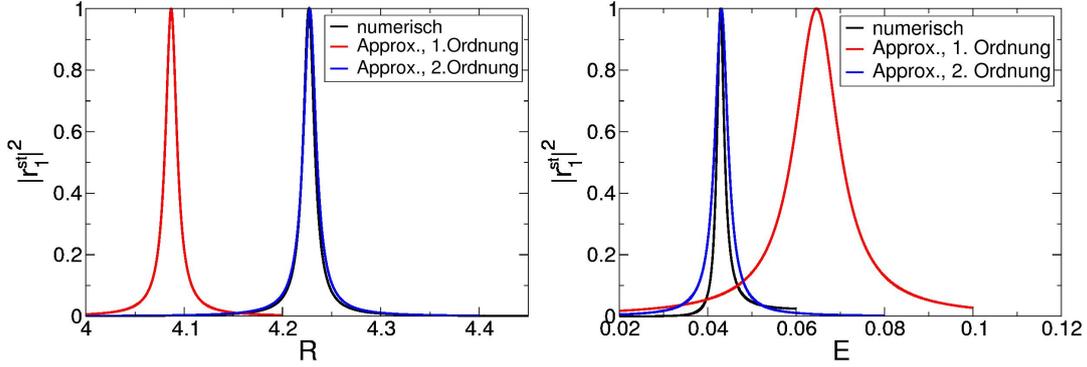
zur Lokalisierung der Resonanzstellen. Dabei stellen  $j_{m,s}$  die Nullstellen der Bessel-Funktion  $J_m$  und  $\gamma \approx 0.577215$  die Eulersche Zahl dar. Wir sehen, dass in 1. Ordnung die Resonanzstellen durch die Nullstellen der Bessel-Funktionen bestimmt werden. Weiter können wir die Reflexionskoeffizienten  $|r_m^{\text{st}}(E, R)|^2$  um die Resonanzstelle nach Gleichung (5.5) in 1. Ordnung entwickeln. Wir erhalten [43]

$$|r_m^{\text{st}}(R)|^2 = \left[ 1 + \frac{(R - R_0)}{\gamma_R^2} \right]^{-1}, \quad \gamma_R = \frac{\pi}{(m!)^2 (V - E)} \left( \frac{ER_0}{2} \right)^{2m+1} \quad (5.6)$$

bzw.

$$|r_m^{\text{st}}(E)|^2 = \left[ 1 + \frac{(E - E_0)}{\gamma_E^2} \right]^{-1}, \quad \gamma_E = \frac{\pi}{(m!)^2 R} \left( \frac{E_0 R}{2} \right)^{2m+1}. \quad (5.7)$$

Wie wir anhand der Gleichungen (5.6) und (5.7) sehen können, entspricht die Form der Resonanzkurve die einer Lorentz-Kurve um die Resonanzstelle herum. Die Halbwertsbreite der Kurve hängt dabei wesentlich von den Faktoren  $\gamma_R$  bzw.  $\gamma_E$  ab. Sind diese Faktoren klein, erwarten wir schmale Resonanzkurven. Den Gleichungen (5.6) oder (5.7) können wir entnehmen, dass diese Resonanzkurven umso schmaler ausfallen, je kleiner die Energien  $E$  und Radien  $R$  sind, und je grö-



**Abbildung 5.5:** Stationärer Reflexionskoeffizient  $|r_1^{\text{st}}|^2$  nach numerischer Berechnung (schwarz) und nach Approximation in 1. Ordnung (rot) und 2. Ordnung (blau) gemäß den Gleichungen (5.5)-(5.7). Links:  $V = 1, E = 0.0625$ , rechts:  $V = 1, R = 7.5$

ßer die Drehimpulsquantenzahl  $m$  ist. Dies erklärt die Form der Resonanzkurven in *Abbildung 5.1-5.4*. Um die Güte unserer Approximationen zu überprüfen, ist in *Abbildung 5.5* der stationäre Reflexionskoeffizient  $|r_1^{\text{st}}|^2$  nach numerischer Berechnung (schwarze Kurve) und nach Approximation in 1. Ordnung (rote Kurve) und 2. Ordnung (blau) gemäß den Gleichungen (5.5)-(5.7) dargestellt. Für die linke Abbildung gilt  $V = 1, E = 0.0625$  und für die rechte  $V = 1, R = 7.5$ . Wir sehen, dass die Approximation in 2. Ordnung in exzellenter Übereinstimmung mit dem numerischen Resultat ist. Zur groben Lokalisierung der Resonanzstellen genügt die Approximation 1. Ordnung.

Als weiteres Anwendungsbeispiel der Gleichungen (5.5)-(5.7) betrachten wir nun die stationäre Streueffizienz im Grenzfall eines unendlich hohen Potentials. Die Wellenzahl  $q$  wird in diesem Fall im Wesentlichen durch  $V$  bestimmt. Unter Verwendung der Reihenentwicklungen der Bessel-Funktionen für große Argumente [44] und unter Beachtung von  $E < V$  schreiben sich die Reflexionskoeffizienten als

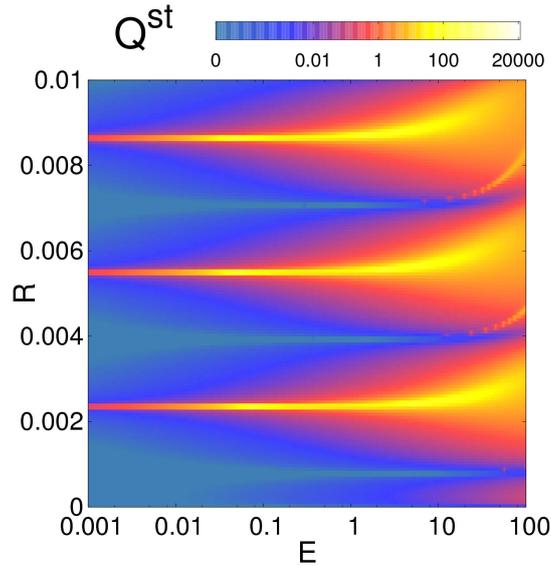
$$r_m^{\text{st}} = -\frac{\tilde{F}_m}{\tilde{F}_m + i\tilde{G}_m} \quad (5.8)$$

mit

$$\tilde{F}_m = J_{m+1}(kR) - J_m(kR) \tan\left(qR - m\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (5.9)$$

und

$$\tilde{G}_m = Y_{m+1}(kR) - Y_m(kR) \tan\left(qR - m\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (5.10)$$

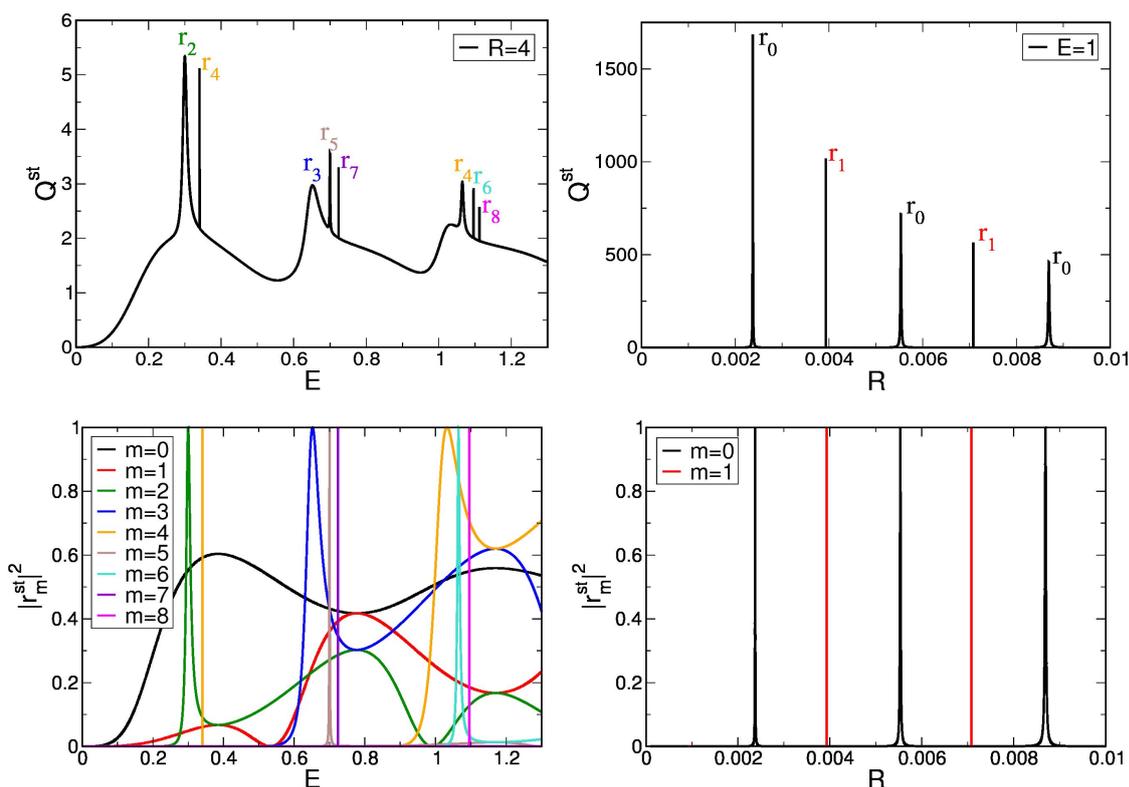


**Abbildung 5.6:** Stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(E, R)$  unter Ausnutzung der entwickelten stationären Reflexionskoeffizienten nach den Gleichungen (5.8)-(5.10) für  $V = 1000$ . Um den Einfluss einzelner Partialwellenbeiträge sichtbar zu machen, verwenden wir die logarithmische Darstellung über  $E$ .

In *Abbildung 5.6* ist die stationäre Streueffizienz in Abhängigkeit von  $E$  und  $R$  nach den Gleichungen (4.38) und (5.8)-(5.10) für  $V = 1000$  dargestellt. Wir erkennen eine qualitativ ähnliche Struktur der Streueffizienz wie in *Abbildung 5.1*, wobei die Resonanzstellen nun wegen  $V = 1000$  für viel kleinere Werte von  $R$  auftreten, siehe dazu auch *Abbildung 5.4*. Das Hinzukommen von Resonanzen höherer Partialwellen beobachten wir entsprechend erst für höhere Energien. Wir können die Lokalisierung der Resonanzstellen in *Abbildung 5.1* mit Hilfe von Gleichung (5.5) für  $V = 1000$  vornehmen. In diesem Fall ist die Energie auf der linken Seite der Gleichung vernachlässigbar und es gilt

$$R = j_{m,s}/V. \quad (5.11)$$

In *Abbildung 3.3* sind die ersten vier Bessel-Funktionen  $J_m(x)$  dargestellt. Wir lesen beispielsweise für die Bessel-Funktion  $J_0$  die Nullstellen ab, faktorisieren diese mit  $1/V$  und erhalten die Resonanzstellen  $R$ . Die Resonanzstellen höherer Partialwellen können ebenso ermittelt werden, sind aber in *Abbildung 5.6* wegen des geringen Auflösungsvermögens nur zu erahnen. Zur weiteren Untersuchung der Resonanzstruktur im Grenzfall  $V \rightarrow \infty$  ist in *Abbildung 5.7* die stationäre Streueffizienz in Abhängigkeit von  $E$  für  $R = 4$  und in Abhängigkeit von  $R$  für  $E = 1$  mit  $V = 1000$  dargestellt (obere Diagramme). Zum Vergleich sind die ers-



**Abbildung 5.7:** Oben: Stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(E)$  für  $R = 4$  (links) und  $Q^{\text{st}}(R)$  für  $E = 1$  (rechts) mit  $V = 1$ ; farblich eingezeichnet sind die stationären Partialwellenbeiträge  $r_m^{\text{st}}$ , die den größten Beitrag an  $Q^{\text{st}}$  leisten. Unten: Die ersten vier stationären Partialwellenbeiträge  $|r_m^{\text{st}}(E)|^2$  für  $R = 4$  (links) und  $|r_m^{\text{st}}(R)|^2$  für  $E = 1$  (rechts) mit  $V = 1$ ; die farblichen Markierungen in  $|r_m^{\text{st}}(E)|^2$  bzw.  $|r_m^{\text{st}}(R)|^2$  korrespondieren zu den farblichen Kennzeichnungen in  $Q^{\text{st}}(E)$  bzw.  $Q^{\text{st}}(R)$ .

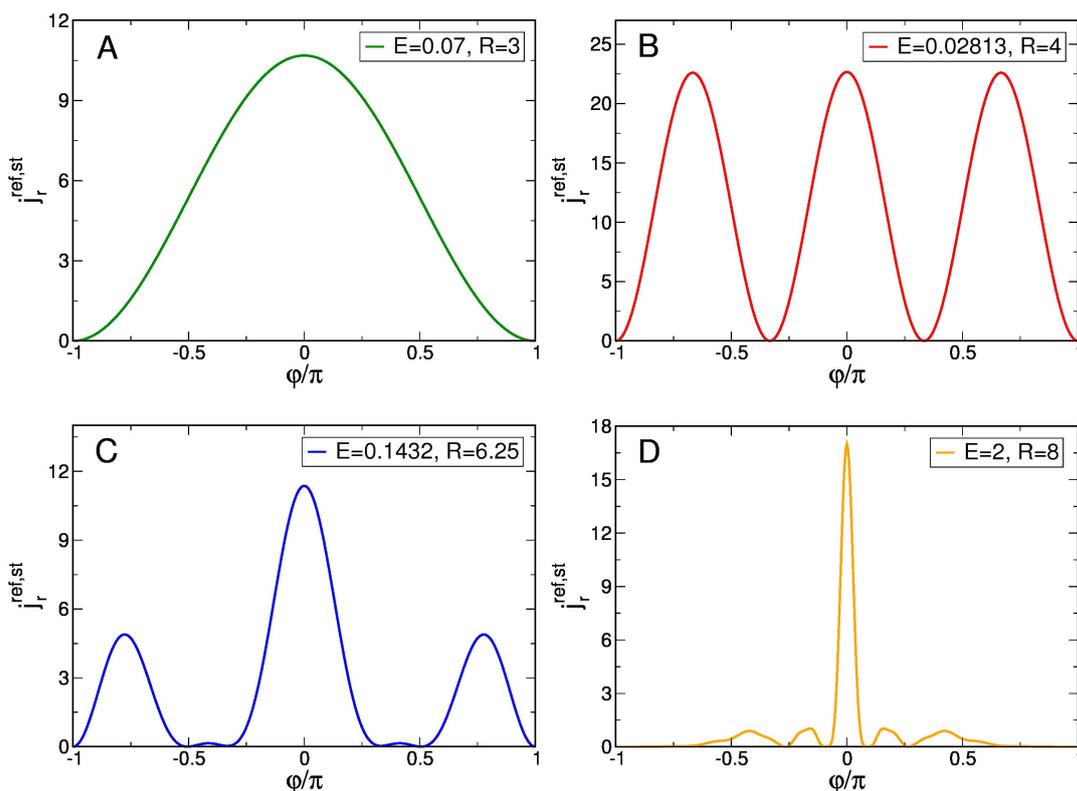
ten stationären Reflexionskoeffizienten dargestellt (untere Diagramme). An den Kurven der Streueffizienz sind die Reflexionskoeffizienten eingezeichnet, die für die entsprechende Resonanz verantwortlich sind. Die farblichen Markierungen in  $|r_m^{\text{st}}(E)|^2$  bzw.  $|r_m^{\text{st}}(R)|^2$  korrespondieren dabei zu den farblichen Kennzeichnungen in  $Q^{\text{st}}(E)$  bzw.  $Q^{\text{st}}(R)$ . Wir sehen, dass die Streueffizienz in Abhängigkeit von der Energie (linkes Diagramm) ein periodisches Verhalten mit abklingender Amplitude aufweist, wobei für bestimmte Energien scharfe Resonanzen auftreten. An diesen Resonanzen sind die Partialwellen beteiligt, die entweder nur ungerade oder gerade Werte von  $m$  aufweisen. Die Resonanzen werden dabei mit größer werdender Energie durch Partialwellen mit größeren Werten von  $m$  hervorgerufen, da die Partialwellen mit niedrigeren Werten von  $m$  in einen harmonischen Verlauf übergehen (siehe Diagramm unten links). Im rechten, oberen Diagramm ist zu sehen, dass die Streueffizienz in Abhängigkeit vom Radius für bestimmte Werte von  $R$  starke Resonanzen ausbildet, deren Lokalisation durch Gleichung

(5.11) vorgenommen werden kann. Aufgrund des begrenzten Auflösungsvermögens sind dabei nur die Resonanzen der untersten Partialwellen  $m = 0$  und  $m = 1$  dargestellt. Alle auftretenden Resonanzen in *Abbildung 5.7* weisen die typische Form einer Lorentz-Verteilung auf, deren Breite mit zunehmenden  $E$  und  $R$ , sowie größer werdenden Werten der Drehimpulsquantenzahl  $m$  zunimmt.

### 5.1.2 Winkelverteilung und Nahfeld

Um das Streuverhalten des Elektrons am Quantenpunkt weiter zu charakterisieren, untersuchen wir nun die stationäre, radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $j_r^{\text{ref, st}}$  nach den Gleichungen (4.22)-(4.24) und das Nahfeld der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j}^{\text{st}}$  sowie der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{st}}$ , wie sie in Abschnitt 4.1.1 und 4.2 eingeführt wurden. Dabei ist zu beachten, dass in den entsprechenden Gleichungen wegen  $\tilde{V} = 0$  die Streukoeffizienten aus den Gleichungen (3.62) und (3.63) zu benutzen sind.

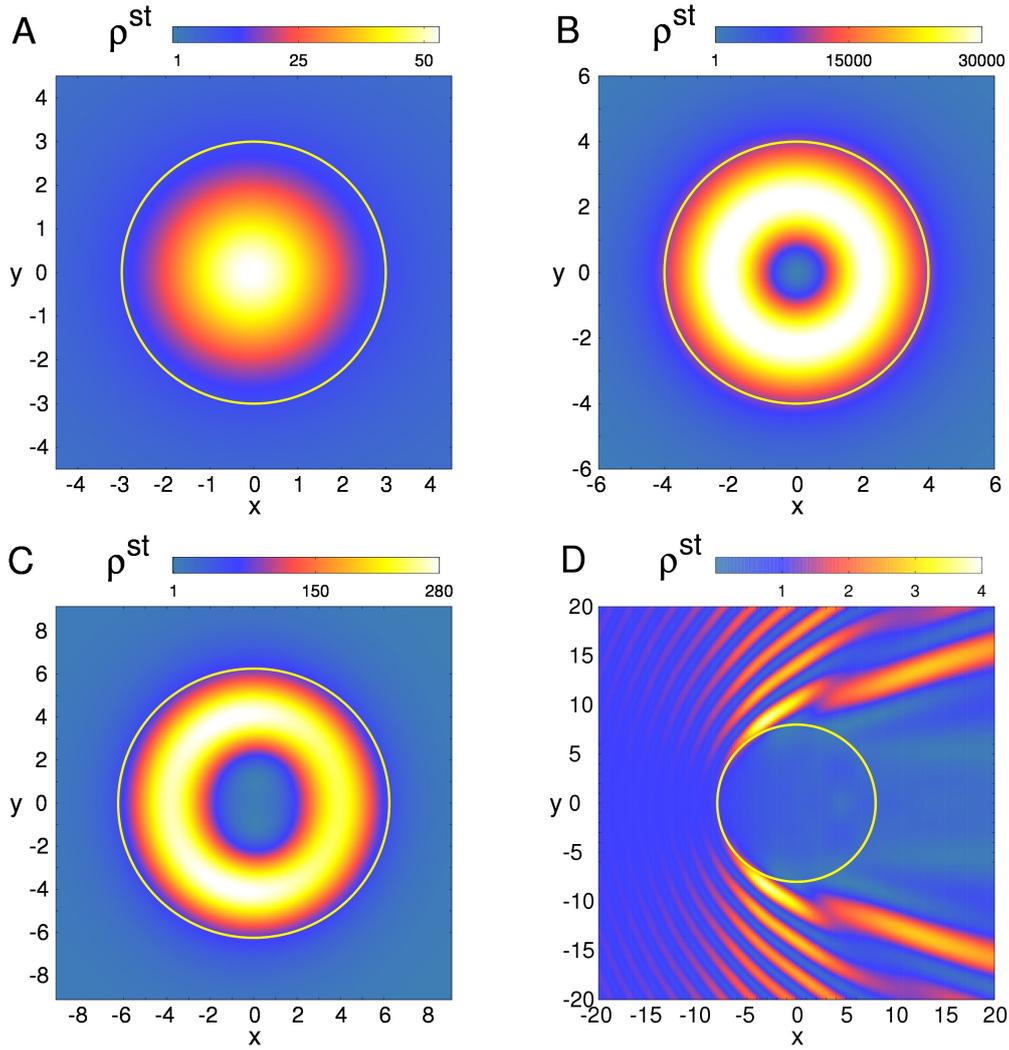
In *Abbildung 5.8* ist die stationäre, radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j_r^{\text{ref, st}}(\varphi)$  für die in *Abbildung 5.2, 5.3* mit den Buchstaben A, B, C und D gekennzeichneten Fälle dargestellt. Wir haben dabei  $r = R$  gesetzt, da wir uns lediglich für den qualitativen Verlauf der Kurven interessieren. In jedem Diagramm verschwindet die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte für  $\varphi = \pi$ . Dies ist auf den Effekt der Abwesenheit von Rückstreuung zurückzuführen, der stets bei senkrechtem Einfall der Elektronenwelle auf ein beliebig geformtes Potential auftritt und auf die Erhaltung des Pseudospins  $\sigma$  zurückzuführen ist [8, 14]. In diesem Zusammenhang wurde bereits das Streuverhalten von Elektronen in Graphen an ebenen Stufenpotentialen diskutiert, bei denen sich dieser auch als Klein-Tunneln bezeichneter Effekt für senkrechten Einfall auf das Potential in perfekter Transmission äußert und seine Ursache in der Existenz oszillierender Wellenlösungen negativer Energie hat. Wir halten fest, dass die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte stets einen Anteil in Vorwärtsrichtung  $\varphi = 0$  besitzen wird. Weiter sehen wir, dass sich für den Fall A (Resonanz der  $r_0^{\text{st}}$ -Mode) ein Stromdichteprofil mit der Vorzugsrichtung  $\varphi = 0$  ausbildet, während sich im Fall B (Resonanz der  $r_1^{\text{st}}$ -Mode) 3 Vorzugsrichtungen  $\varphi = 0$  und  $\varphi = \pm 3/2\pi$  ausbilden. Die Ausbildung dieser Vorzugsrichtungen lässt sich verstehen, wenn wir annehmen, dass in den Fällen A und B lediglich die resonante Partialwelle  $|r_m^{\text{st}}|^2$  in  $j_r^{\text{ref, st}}(\varphi)$  berücksichtigt wird. Dann reduzieren sich die Gleichungen (4.22)-(4.24) auf die einfache Form  $j_r^{\text{ref, st}}(\varphi) = 4/\pi kR \cdot |r_m^{\text{st}}|^2 [\cos((2m+1)\varphi) + 1]$ , was die Erklärung für das charakteristische Profil in den Fällen A und B liefert. Wie in *Abbildung 5.3* zu sehen, liegt im Fall C keine alleinige Resonanz der Partial-



**Abbildung 5.8:** Stationäre radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $j_r^{\text{ref,st}}(\varphi)$  für die Fälle A, B, C und D mit  $V = 1$  und  $r = R$ .

welle  $|r_2^{\text{st}}|^2$  vor, da auch die Partialwelle  $|r_0^{\text{st}}|^2$  einen entscheidenden Beitrag zur Streueffizienz leistet. Die Interferenz beider Anteile sorgt schließlich für die Abweichung von dem zu erwartenden kosinusförmigen Verlauf mit einer Ausbildung von 5 Vorzugsrichtungen. Für die Winkelverteilung  $j_r^{\text{ref,st}}(\varphi)$  im Fall D, bei dem die Energie des Elektrons im Vergleich zu den restlichen Fällen deutlich höher ist, erkennen wir eine ausgeprägte Streuung in Vorwärtsrichtung, während die Streuung in andere Raumbereiche vergleichsweise gering ausfällt. Wie wir in *Abbildung 5.2* sehen können, ist dies auf die Interferenz mehrerer angeregter Partialwellen zurückzuführen.

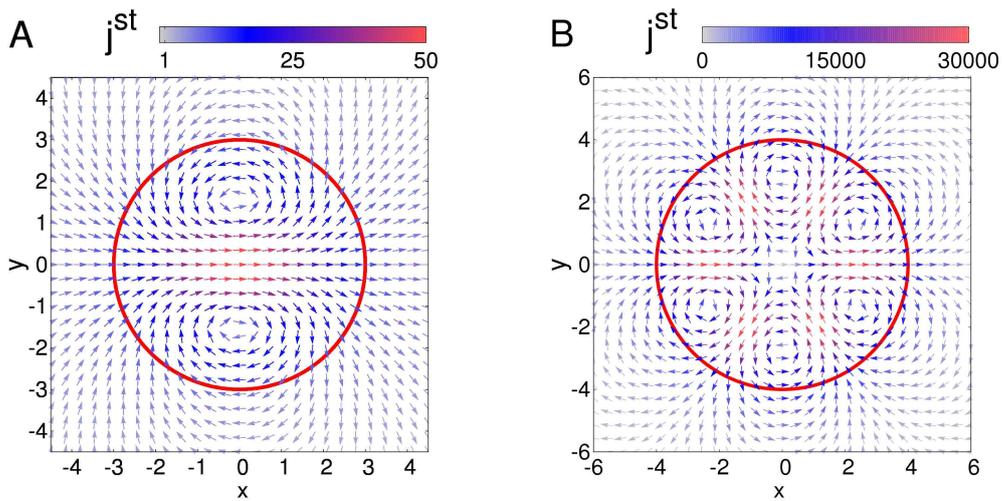
Um weitere Besonderheiten der Resonanzen zu untersuchen, betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{st}}$  für die Fälle A,B,C und D in *Abbildung 5.9*. Wir sehen, dass im Resonanzfall (Fall A,B,C und D) eine starke Lokalisierung des Elektrons innerhalb des Quantenpunkts resultiert. Die resonante Anregung einzelner Partialwellen hat offenbar quasi-gebundene Zustände des Elektrons im Quantenpunkt zur Folge, die sich entweder in einer Lokalisierung um  $r = 0$  (Resonanz der  $r_0^{\text{st}}$ -Mode, Fall A) oder in Form einer Ringstruktur (Resonanz der



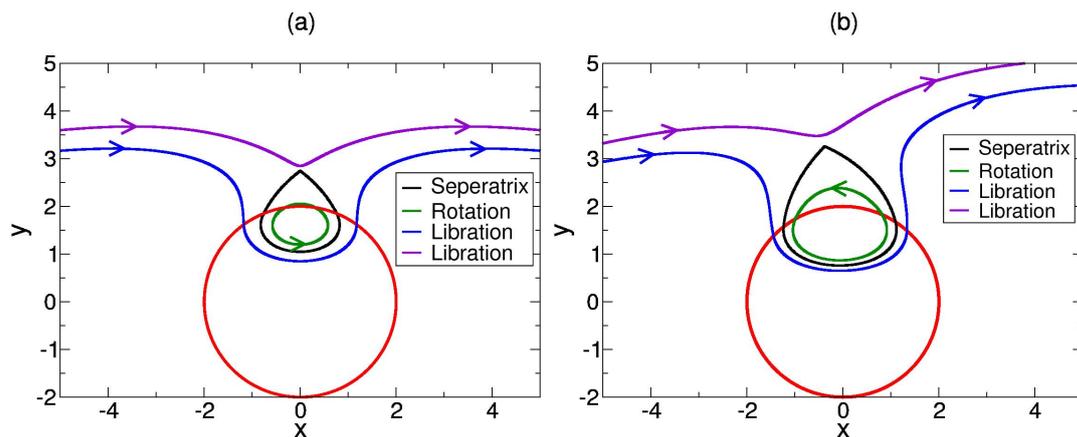
**Abbildung 5.9:** Stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{\text{st}}(x, y)$  für die Fälle A ( $E = 0.07$ ,  $R = 3$ ), B ( $E = 0.02813$ ,  $R = 4$ ), C ( $E = 0.1432$ ,  $R = 6.25$ ) und D ( $E = 2$ ,  $R = 8$ ) mit  $V = 1$ . Der gelbe Kreis kennzeichnet den Quantenpunkt.

$r_{1,2}^{\text{st}}$ -Mode, Fall B und C) äußern. Berücksichtigen wir in Gleichung (4.47) lediglich die resonante Partialwelle  $t_m^{\text{st}}$ , ergibt sich für  $r < R$  der einfache Ausdruck  $\rho^{\text{st}} \sim |t_m^{\text{st}}|^2 (J_m(qr)^2 + J_{m+1}(qR)^2)$ , was in Verbindung mit *Abbildung 3.3* die verschiedenen Formen der Wahrscheinlichkeitsdichte verständlich macht. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Fall D zeigt hingegen keine quasi-gebundenen Zustände auf, da hier die Partialwellen miteinander interferieren und für eine Beugung der einfallenden Elektronenwelle um den Quantenpunkt sorgen. Diese führt außerdem zur Entstehung eines Schattenbereiches hinter dem Quantenpunkt, bei dem das Elektron mit niedrigerer Wahrscheinlichkeit anzutreffen ist.

Als letztes untersuchen wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j}^{\text{st}}$  für die Fälle



**Abbildung 5.10:** Stationäre Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j^{\text{st}}(x, y)$  für die Fälle A ( $E = 0.07$ ,  $R = 3$ ) und B ( $E = 0.02813$ ,  $R = 4$ ) mit  $V = 1$ . Der rote Kreis kennzeichnet den Quantenpunkt.



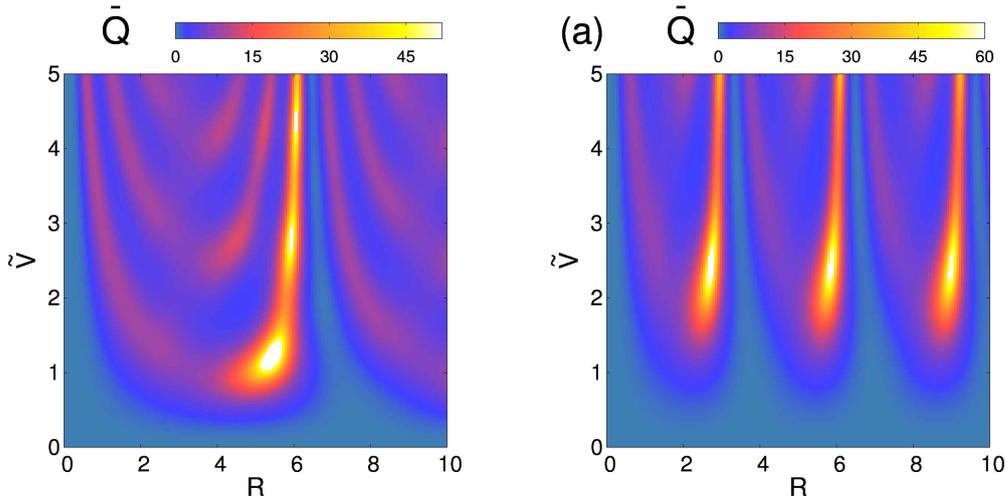
**Abbildung 5.11:** Verlauf der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichtelinien für  $R = 2$ ,  $E = 0.1$  und  $V = 1$  bei alleiniger Berücksichtigung der resonanten Partialwelle  $|r_0^{\text{st}}|^2$  (a) und bei Berücksichtigung aller beteiligten Partialwellen (b). Die Stromdichtelinien sind klassifiziert in Librationen (ungebundene Lösungen), Rotationen (gebundene Lösungen) und der Separatrix, die die Grenzlinie zwischen den beiden unterschiedlichen Lösungstypen darstellt; der rote Kreis kennzeichnet den Quantenpunkt.

A und B in *Abbildung 5.10*. Der senkrecht einfallende Anteil der Elektronenwelle kann den Quantenpunkt ungehindert durchdringen, wobei dies wieder auf den Effekt der Abwesenheit von Rückstreuung zurückzuführen ist. Im Inneren des Quantenpunkts erkennen wir starke Erhöhungen der Stromdichte und die Ausbildung von Wirbelfeldern, die ihre Ursache in der resonanten Anregung einer Partialwelle

haben. Die Form der Wirbelstruktur korrespondiert dabei direkt mit dem Profil der Winkelverteilung aus *Abbildung 5.8*: Für den Fall A (Resonanz der  $r_0^{\text{st}}$ -Mode) befindet sich das Wirbelzentrum bei  $\varphi = \pm\pi/2$  und sorgt für die Streuung in Vorwärtsrichtung, während sich im Fall B (Resonanz der  $r_1^{\text{st}}$ -Mode) die Wirbelzentren bei  $\varphi = \pm 1/6, 1/2, 5/6$  befinden und für die Ausbildung der drei Vorzugsrichtungen  $\varphi = \pm 0, 2/3$  verantwortlich sind. Im Wirbelzentrum selbst verschwindet die Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Bei alleiniger Berücksichtigung der resonanten Partialwelle  $|t_m^{\text{st}}|^2$  ermitteln wir ausgehend von der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j}^{\text{st}}$  in den Gleichungen (4.14)-(4.18) mit  $\tilde{V} = 0$  die Position des  $l$ 'ten Wirbelzentrums zu  $\phi_l = (2l + 1) / (2m + 1) \cdot \pi/2$  mit  $l = 0, \dots, 2m$ . Wir können das Stromdichteprofil und die Wirbel im Nahfeld weiter untersuchen, in dem wir einzelne Wahrscheinlichkeitsstromdichtelinien verfolgen und in unterschiedliche Lösungstypen klassifizieren. In *Abbildung 5.11* ist der Verlauf der stationären Wahrscheinlichkeitsstromdichtelinien für  $R = 2$ ,  $E = 0.1$  und  $V = 1$  dargestellt. Für diese Parameter-Wahl liegt eine Resonanz der  $r_0^{\text{st}}$ -Mode vor, wie man auch der *Abbildung 5.3* entnehmen kann. Im Bild (a) ist das Linienprofil bei alleiniger Berücksichtigung der resonanten Partialwelle  $|r_0^{\text{st}}|^2$  dargestellt. Wir erkennen die unterschiedlichen Lösungstypen der Librationen außerhalb des Wirbels, der Rotationen innerhalb des Wirbels und die Separatrix, die die Begrenzung des Wirbels darstellt und zwischen den beiden Lösungstypen unterscheidet. Im Bild (b) ist das Linienprofil bei Berücksichtigung aller beteiligten Partialwellen dargestellt. Da nun neben der  $r_0^{\text{st}}$ -Mode auch andere Partialwellen zur Stromdichte beitragen, ist das Stromlinienbild im Gegensatz zum Bild (a) nicht mehr symmetrisch zur  $y$ -Achse, wie sich anhand der Deformation der Lösungstypen erkennen lässt.

## 5.2 Symmetrisch oszillierender Quantenpunkt

In diesem Abschnitt wollen wir das Streuverhalten des Elektrons an einem symmetrisch oszillierenden Quantenpunkt untersuchen. Dazu betrachten wir in Gleichung (2.19) nur den harmonischen Anteil  $\tilde{V} \cos(\omega t + \delta)$  der Schwingung, der von der Kreisfrequenz  $\omega$ , dem Zeitparameter  $t$  und der beliebigen Phasenverschiebung  $\delta$  abhängt. Zudem wollen wir eine verschwindend kleine Energie  $E$  des einfallenden Elektrons annehmen, um eine noch höhere Symmetrie des Streuproblems zu erreichen. In der folgenden Diskussion setzen wir daher  $E = 10^{-8}$  und  $V = 10^{-9}$ .



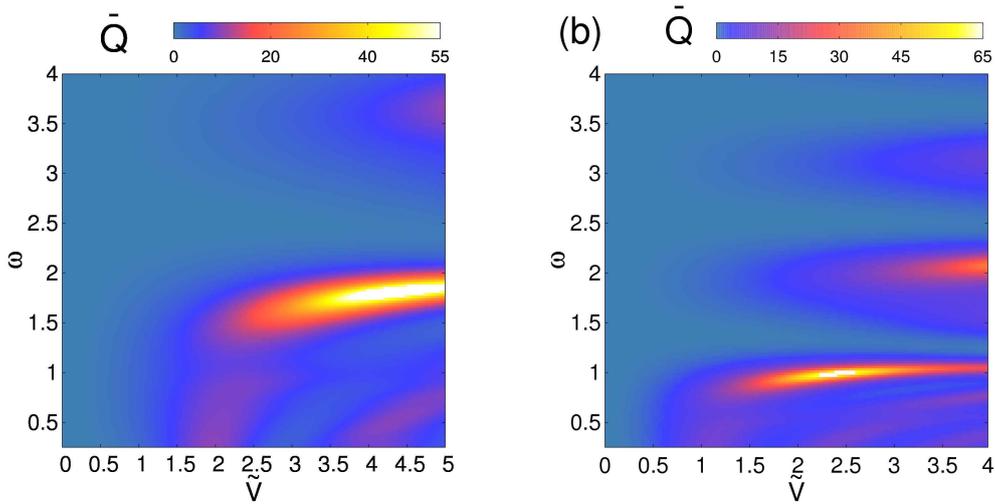
**Abbildung 5.12:** Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\tilde{V}, R)$  für  $\omega = 0.5$  (links) und  $\omega = 1$  (rechts) mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$ .

### 5.2.1 Streueffizienz und Resonanzstruktur

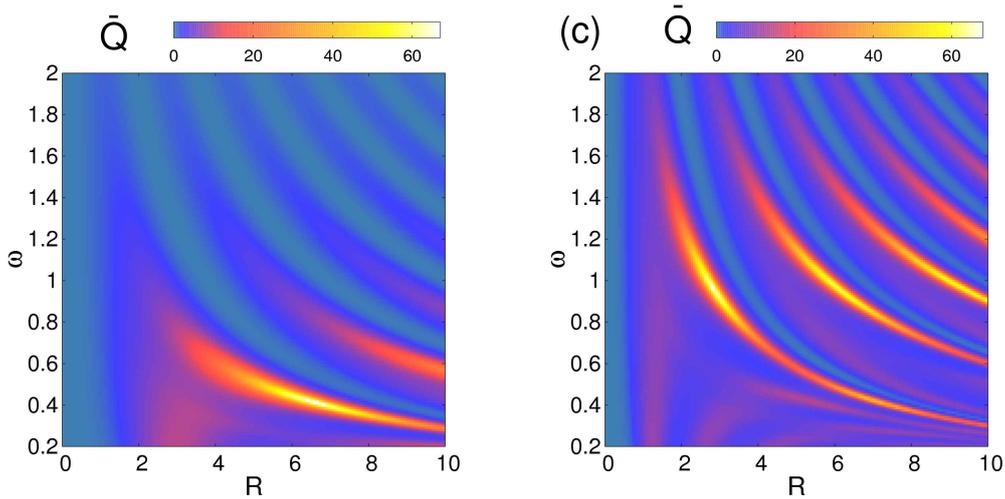
Grundlage unserer Untersuchungen stellt wieder die Streueffizienz  $Q$  dar, die wir in zeitgemittelter und nicht-zeitgemittelter Form gemäß den Gleichungen (4.39)–(4.41) vorliegen haben. Wir werden uns zunächst auf die zeitgemittelte Streueffizienz beschränken und bemerken, dass in  $\bar{Q}$  nach Gleichung (4.41) die Streukoeffizienten lediglich in ihren Betragsquadraten erscheinen. Wie bereits erläutert (siehe Abschnitt 3.4.1), wird dadurch die Abhängigkeit der Phase  $\delta$  eliminiert. In *Abbildung 5.12* ist die zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}$  in Abhängigkeit von  $\tilde{V}$  und  $R$  für  $\omega = 0.5$  (links) und  $\omega = 1$  (rechts) dargestellt. Wir sehen, dass für  $\tilde{V}, R \rightarrow 0$  die Streueffizienz verschwindet, da dann das Elektron nicht mehr am Quantenpunkt gestreut wird. Für endliche Werte von  $\tilde{V} > 0$  bildet sich jedoch eine Resonanzstruktur aus. Während im stationären Grenzfall  $\tilde{V} = 0$  die Streueffizienz für  $E \rightarrow 0$  verschwindet, finden wir hier aufgrund der Zeitabhängigkeit des Quantenpunktes teilweise große Werte der Streueffizienz vor: Das einfallende Elektron, welches zuvor eine verschwindend geringe Energie aufweist, wird durch die Oszillation des Quantenpunktes auf höhere Energieniveaus in ganzzahligen Vielfachen von  $n\omega$  gehoben, was letztlich zu der Ausbildung von größeren Werten der Streueffizienz führt. Weiter erkennen wir im linken Bild für  $\omega = 0.5$ , dass bei festem  $\tilde{V}$  die zeitgemittelte Streueffizienz eine Periodizität in  $R$  aufweist, wobei für bestimmte Werte von  $R$  starke Resonanzen auftreten können, während für andere Werte von  $R$  die Streueffizienz sogar verschwindet. Im rechten Bild für  $\omega = 1$  ist diese periodische Struktur ebenfalls zu erkennen, wobei die Periode al-

lerdings halbiert ist. Offenbar hängt die Periode des oszillierenden Verhaltens von  $\bar{Q}(R)$  invers mit der Kreisfrequenz  $\omega$  zusammen. Zum besseren Verständnis sind in *Abbildung 5.15* die Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=0,n=1}|^2$  bis  $|r_{m=0,n=5}|^2$  in Abhängigkeit von  $R$  dargestellt, siehe Bild (a). Dabei haben wir  $\omega = 1$  und  $\tilde{V} = 2.32$  festgelegt, da für diese Parameter in *Abbildung 5.12* (a) eine starke Erhöhung der Streueffizienz vorzufinden ist. Wie in Abschnitt 3.4.2 erläutert, liegen bei der Streuung am symmetrisch oszillierenden Quantenpunkt lediglich Reflexionskoeffizienten mit Drehimpulsquantenzahl  $m = 0$  und Energiequantenzahlen  $n \neq 0$  vor. Außerdem gilt wegen der Symmetrie des Streuproblems  $|r_{m=0,n}| = |r_{m=0,-n}|$ , weshalb in *Abbildung 5.15* lediglich die Streukoeffizienten mit  $m = 0$  und  $n > 0$  dargestellt sind. Wir können der *Abbildung 5.15* (a) entnehmen, dass das oszillierende Verhalten von  $\bar{Q}(R)$  in *Abbildung 5.12* direkt auf den periodischen Verlauf der Reflexionskoeffizienten zurückzuführen ist, wobei der Reflexionskoeffizient mit Energiequantenzahl  $n = 2$  (rote Kurve) den dominierenden Beitrag zur Streueffizienz leistet und in seiner Größe mit steigendem  $R$  zunimmt. Weiterhin sehen wir, dass für  $R \approx n\pi$  die Reflexionskoeffizienten gegen 0 gehen. In *Abbildung 5.12* (a) ist dies in Form einer starken Abschwächung der Streueffizienz zu erkennen. Diese Abschwächung und die Periodizität des Verlaufs lässt sich folgendermaßen erklären: Durch die Oszillation des Quantenpunkts existieren in den Wellenfunktionen, sowie auch in der Streueffizienz, Beiträge mit verschiedenen Energieniveaus in Form ganzzahliger Vielfache von  $\omega$ . Für  $\omega = 1$  und  $E = V = 0$  liegen daher inner- und außerhalb des Quantenpunkts quantisierte Wellenzahlen  $q_n = 2\pi/\lambda_n = n$  vor. Die Elektronenwelle interferiert innerhalb des Quantenpunkts mit sich selbst und kann aufgrund der resonanten Anregung der Partialwelle  $r_{m=0,n>0}$  für eine Erhöhung der Streueffizienz sorgen. Für die Radien  $R = k\pi$  mit  $k = 1, 2, 3, \dots$  bilden sich jedoch unterhalb des Quantenpunktes stehende Wellen aus und sorgen für das Verschwinden der Streueffizienz. Ein ganz analoger Effekt tritt beim Tunneleffekt eines Elektrons in Graphen an ebenen Potentialbarrieren auf, bei dem für bestimmte Abmessungen der Barriere stehende Wellen in Form von Fabry-Pérot-Resonanzen entstehen können und zur perfekten Transmission des Elektrons führen [14]. Da das Verhältnis  $\tilde{V}/\omega$  entscheidend für die Anzahl der eingehenden Energieniveaus  $n$  ist (siehe Abschnitt 3.3), wächst die Anzahl der in der reflektierten Wellenfunktion und Streueffizienz beteiligten Energieanteile mit steigendem  $\tilde{V}$ . Dies hat das gleichzeitige Auftreten mehrerer quantisierter Wellenzahlen  $q_n$  und die Anregung von Partialwellen mit höherer Energiequantenzahl  $n$  innerhalb der Quantenpunkts zur Folge. Da mit steigender Wellenzahl die Wellenlänge des Elektrons sinkt, kann es daher für Radien zwischen den Fabry-Pérot-Stellen  $R_F^{k,n=1} = k\pi/\omega$  und  $R_F^{k+1,n=1} = (k+1)\pi/\omega$  zu

neuen stehenden Wellen der oberen Energiebeiträge kommen. Bei der Beteiligung von  $n$  Energieanteilen zur Streueffizienz entstehen so  $n - 1$  Zwischenstellen mit Abstand  $\Delta R_{\text{F}}^n = \pi / (\omega \cdot n)$ , bei denen der Wert der Streueffizienz absinkt. Die Folge ist, dass für größere Werte von  $\tilde{V}$  die resonante Anregung der Partialwelle  $r_{m=0, n>0}$  in immer kleineren Abständen von  $R$  wahrgenommen wird, während zu Beginn zwischen den Fabry-Pérot-Stellen lediglich eine resonante Anregung vorliegt, siehe dazu *Abbildung 5.12* (links). Wir erkennen weiter durch den Vergleich der beiden Bilder in *Abbildung 5.12*, dass für größere Kreisfrequenzen  $\omega$  auch erst für größere  $\tilde{V}$  die resonante Anregung der Partialwellen auftritt. Dies ist wieder darauf zurückzuführen, dass das Verhältnis  $\tilde{V}/\omega$  entscheidend für die Anzahl der eingehenden Energieniveaus  $n$  ist und für  $\tilde{V} \rightarrow 0$  lediglich der verschwindend kleine Partialwellenbeitrag  $r_{m=0, n=0}$  vorhanden ist. Wir stellen jedoch fest, dass die maximalen Werte, die die zeitgemittelte Streueffizienz erreichen kann, für  $\omega = 1$  größer sind als für  $\omega = 0.5$ . Der Grund hierfür liegt in der Beschaffenheit des Streuproblems: Im statischen Grenzfall  $\omega \rightarrow 0$  (siehe Abschnitt 3.4) gehen die Wellenfunktionen in die des stationären Problems über. Da wir  $E = 10^{-8}$  gesetzt haben und für solch kleine Energien die stationäre Streueffizienz verschwindet (siehe Abschnitt 5.1.1), erwarten wir umso kleinere Maxima der zeitgemittelten Streueffizienz, je kleiner der Wert von  $\omega$  ist. Aus dem Gleichen Grund können wir festhalten, dass auch im quasistationären Grenzfall  $\omega \rightarrow \infty$  (siehe Abschnitt 3.4) die Streueffizienz verschwindet, ohne dass dies in *Abbildung 5.12* ersichtlich ist. Zur weiteren Untersuchung ist in *Abbildung 5.13* die zeitgemittelte Streueffizienz in Abhängigkeit von  $\omega$  und  $\tilde{V}$  für  $R = 1.5$  (links) und  $R = 2.75$  (rechts) mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  dargestellt. Dabei wurde  $\omega$  nur bis zu einem unteren Grenzwert aufgetragen, da für sehr kleine Werte von  $\omega$  das Verhältnis  $\tilde{V}/\omega$  sehr groß wird und schließlich für die Streukoeffizienten keine Konvergenz mehr erreicht werden konnte. Für kleine Werte von  $\tilde{V}$  oder große Werte von  $\omega$  verschwindet die zeitgemittelte Streueffizienz gemäß dem stationären bzw. quasistatischen Grenzfall. Wir sehen auch, dass bei festem  $\omega$  die Streueffizienz mit steigendem  $\tilde{V}$  zunächst zunimmt, solange wir nicht eine Fabry-Pérot-Stelle betrachten. Die Ursache hierfür liegt in der Zunahme der beteiligten Partialwellen höherer Energiequantenzahlen  $n$ . Im Bereich niedriger Kreisfrequenzen  $\omega$  unterhalb der ersten Fabry-Pérot-Stelle können wir jedoch erkennen, dass die Zunahme der Streueffizienz mit  $\tilde{V}$  nicht andauernd ist: Für einige Werte von  $\tilde{V}$  entstehen Abschwächungen und Verstärkungen in der Streueffizienz, die wieder durch die Fabry-Pérot-Resonanzen einzelner Oberschwingungen zu erklären sind. Diese Abschwächungen und Verstärkungen treten dabei mit sinkendem  $\omega$  für immer kleinere Werte und in kleineren Abständen von  $\tilde{V}$  auf. Die Ursache hierfür ist das



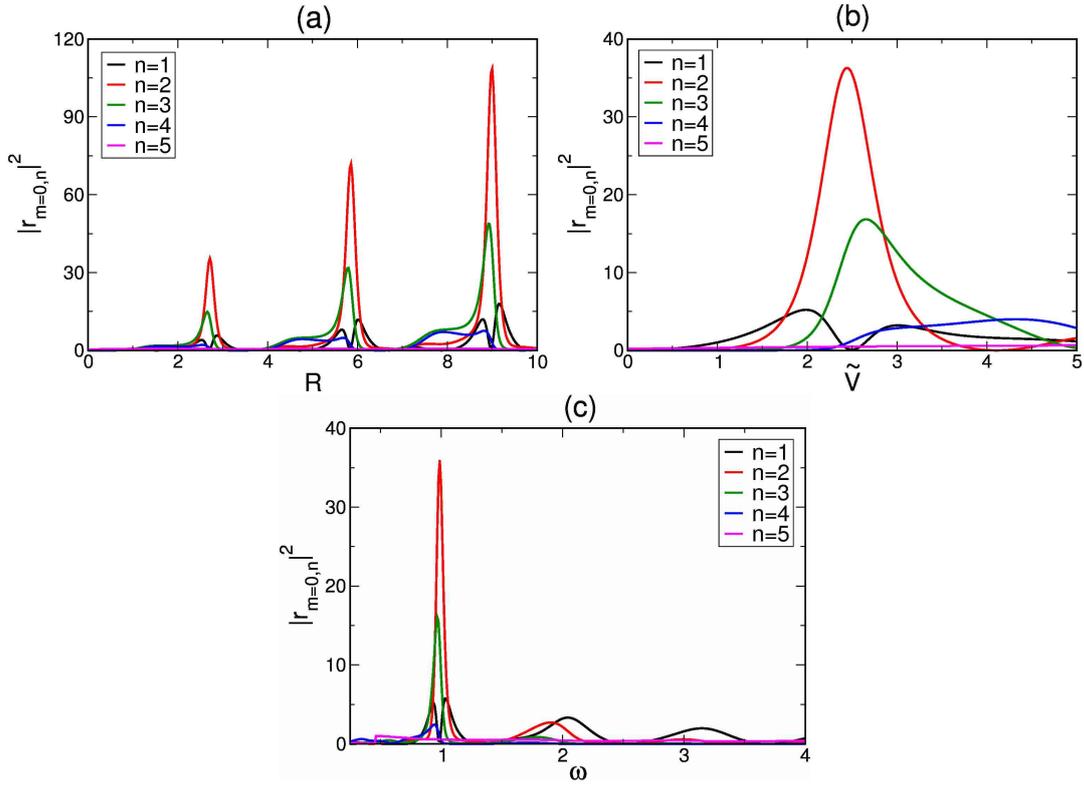
**Abbildung 5.13:** Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\omega, \tilde{V})$  für  $R = 1.5$  (links) und  $R = 2.75$  (rechts) mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$ .



**Abbildung 5.14:** Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\omega, R)$  für  $\tilde{V} = 1$  (links) und  $\tilde{V} = 2.32$  (rechts) mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$ .

Verhältnis  $\tilde{V}/\omega$ , dass bei Anregung einer bestimmten Anzahl an Energieniveaus als annähernd konstant zu betrachten ist (siehe Abschnitt 3.3). In *Abbildung 5.15* (b) ist zum Vergleich noch einmal der Verlauf der Reflexionskoeffizienten in Abhängigkeit von  $\tilde{V}$  für  $R = 2.75$  und  $\omega = 1$  gezeigt, wobei die Wahl der Parameter durch die in *Abbildung 5.13* (b) markante Resonanz motiviert wurde.

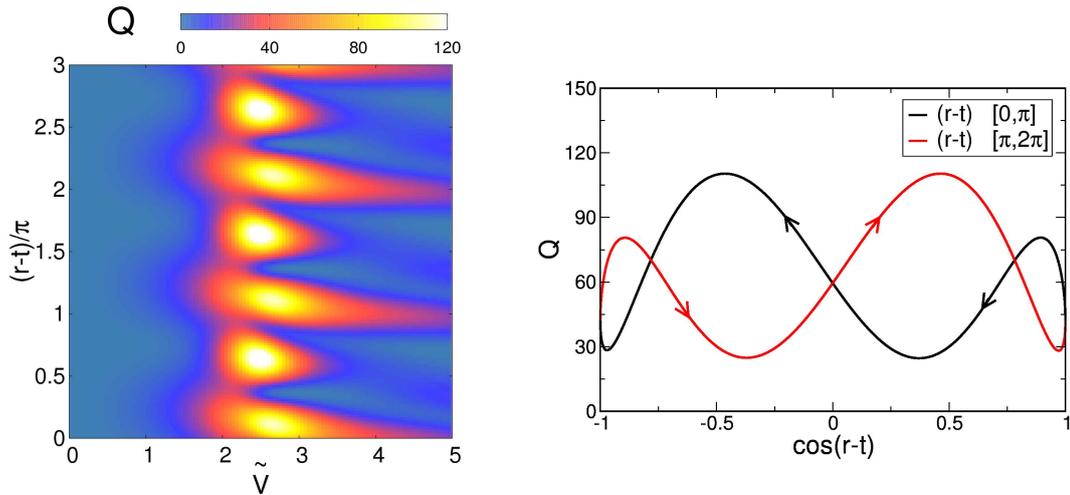
Auch in *Abbildung 5.14*, in der die zeitgemittelte Streueffizienz in Abhängigkeit von  $R$  und  $\omega$  für  $\tilde{V} = 1$  (links) und  $\tilde{V} = 2.32$  (rechts) dargestellt ist, zeigen sich die bereits diskutierten Effekte. Die Bedingung für die Fabry-Pérot-



**Abbildung 5.15:** Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=0,n>0}|^2(R)$  für  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $R = 2.75$  (a),  $|r_{m=0,n>0}|^2(\tilde{V})$  für  $\omega = 1$ ,  $R = 2.75$  (b) und  $|r_{m=0,n>0}|^2(\omega)$  für  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $R = 2.75$  (c) mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$ .

Resonanz aller Partialwellenbeiträge ist  $R\omega = \text{const.}$ , was den typischen Verlauf der Verstärkungs- und Abschwächungskurven der Streueffizienz erklärt. Weiter sehen wir, dass für  $\omega \approx 1$  die auftretenden Resonanzen in der Streueffizienz am größten sind, während sie für größere oder kleinere Werte von  $\omega$  schwächer ausfallen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass für  $\omega \approx 1$  das Elektron durch den Quantenpunkt am stärksten gestreut wird, während für größere  $\omega$  der quasistatische Grenzfall und für kleinere  $\omega$  der statische Grenzfall eintritt. Dieses Verhalten wird auch durch die Abhängigkeit der Reflexionskoeffizienten von  $\omega$  für  $\tilde{V} = 2.32$  und  $R = 2.75$  verdeutlicht, siehe *Abbildung 5.15* (c). Für größere Werte von  $\omega$  nähern wir uns dem quasistatischen Grenzfall, was dazu führt, dass lediglich die Partialwelle mit  $n = 1$  einen entscheidenden Beitrag zur Streueffizienz leistet, während die restlichen Partialwellenbeiträge verschwindend klein sind.

Abschließend untersuchen wir das zeitabhängige Verhalten der Streueffizienz, indem wir den Zeitanteil  $\tilde{Q}$  aus Gleichung (4.40) in der Streueffizienz berücksichtigen. Es sei angemerkt, dass die zeitabhängige Streueffizienz wegen  $\partial Q/\partial r \neq 0$  eine vom Ort  $r$  abhängige Größe ist, auch wenn wir die Größen in Fernfeldnäherung



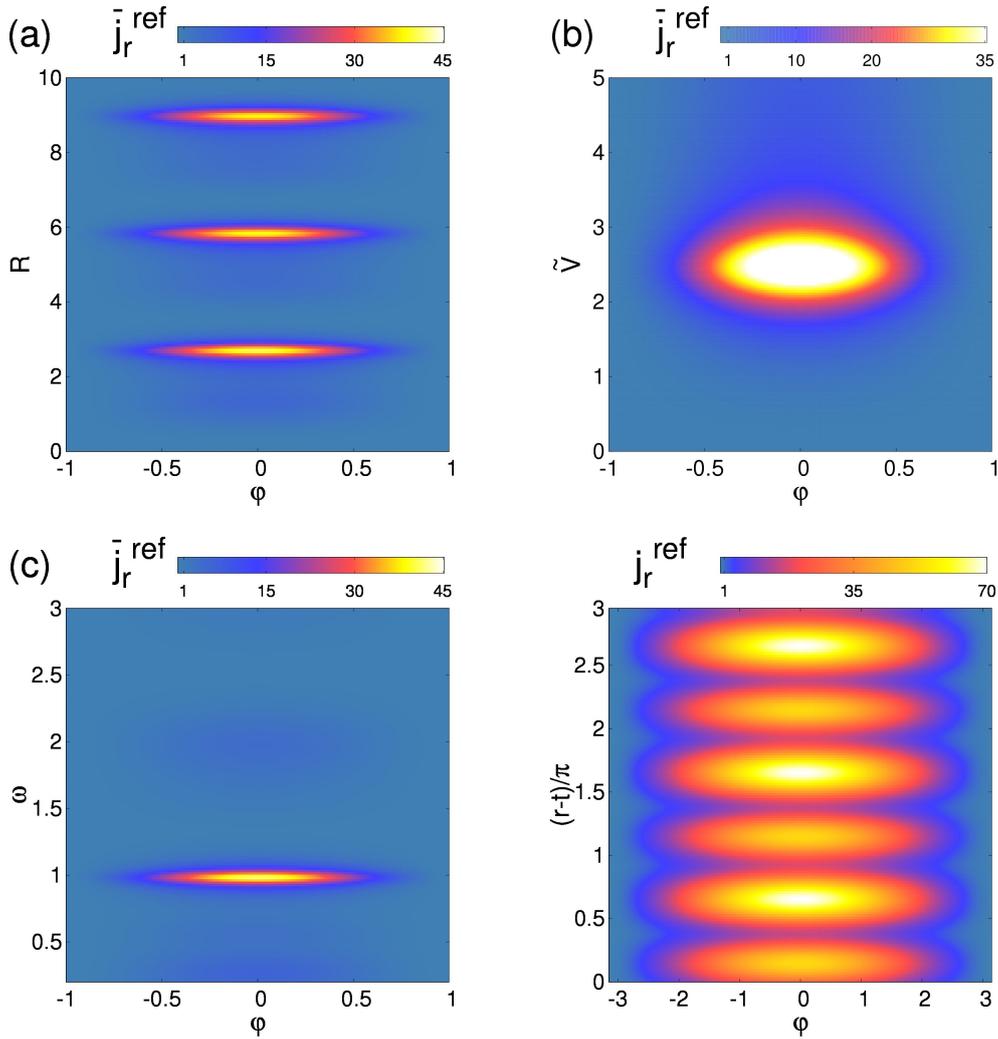
**Abbildung 5.16:** Links: Zeitabhängige Streueffizienz  $Q(\tilde{V}, r-t)$  für  $R = 2.75$ ,  $\omega = 1$  mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  und  $\delta = 0$ ; die Zeitachsen sind in ganzzahligen Vielfachen der halben Periode  $T/2 = \pi$  skaliert. Rechts: Zeitabhängige Streueffizienz  $Q(\cos(r-t))$  mit  $R = 2.75$ ,  $\omega = 1$ ,  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  und  $\delta = 0$  für  $(r-t) \in [0, \pi]$  und  $(r-t) \in [\pi, 2\pi]$

ausdrücken, siehe Abschnitt 4.1.3. Der Grund hierfür liegt in der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit des Elektrons und der der Potentialänderungen durch die es beeinflusst wird ( $c = v_F = 1$ ): Während bei  $r = 0$  das Potential instantan auf die Elektronenwelle einwirkt, wird im Abstand  $r$  vom Zentrum des Quantenpunktes diese Information erst zur Zeit  $t$  durch das retardierte Potential  $U(r-t)$  vermittelt. Aufgrund der Periodizität der Bewegung des Quantenpunktes erwarten wir daher ein in  $r-t$  periodisches Verhalten der Streueffizienz, das sich auch anhand von Gleichung (4.40) erkennen lässt. In *Abbildung 5.16* ist die zeitabhängige Streueffizienz  $Q(r-t)$  in Abhängigkeit von  $\tilde{V}$  für  $R = 2.75$ ,  $\omega = 1$  mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  dargestellt (links). Wir werden im Folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Phase  $\delta = 0$  setzen, da diese lediglich eine konstante raum-zeitliche Verschiebung in  $r-t$  zur Folge hat. In *Abbildung 5.16* ist im linken Bild das erwartete periodische Verhalten in  $r-t$  zu beobachten. Da sich die Periodizität des Quantenpunktes direkt auf die Elektronenwelle auswirkt, erwarten wir in der zeitabhängigen Streueffizienz die Periode von  $T = 2\pi/\omega$ . Wir lesen jedoch in *Abbildung 5.16* eine Periode von  $T = \pi$  ab, also genau die Hälfte des erwarteten Wertes. Der Grund hierfür liegt in der Symmetrie der Streukoeffizienten bzgl. der Energiequantenzahlen  $n$  (siehe Abschnitt 3.4.2): Aufgrund der Symmetrie des Streuproblems ist der Einfluss des Potentials auf die Zeitabhängigkeit der Streueffizienz für  $(r-t) \in [0, \pi]$  dieselbe wie für  $(r-t) \in [\pi, 2\pi]$ , da in den jewei-

ligen Hälften der Periode dieselbe Bewegung des Potentials mit nur umgekehrten Vorzeichen vorliegt. Die Umkehrung der Vorzeichen wirkt sich jedoch wegen der Symmetrie der Wellenzahlen gemäß Gleichung (3.88) nicht auf die Streueffizienz aus. Zum besseren Verständnis ist dieser Sachverhalt nochmals im rechten Bild von *Abbildung 5.16* verdeutlicht. Hier ist die zeitliche Veränderung der Streueffizienz in Abhängigkeit von  $\cos(r - t)$  für  $R = 2.75$ ,  $\omega = 1$ ,  $\tilde{V}$  mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  dargestellt und mit entsprechenden Zeitpfeilen gekennzeichnet. Wir sehen, dass die Streueffizienz nach einer halben Periode (rote Kurve) dasselbe oszillierende Verhalten aufweist wie zuvor (schwarze Kurve). Im Gegensatz dazu können wir feststellen, dass innerhalb einer halben Periode das Vorzeichen des Potentials unterschiedliche Ergebnisse der Streueffizienz zur Folge hat, wie sich beispielsweise anhand der schwarzen Kurve mit  $(r - t) \in [0, \pi]$  sehen lässt.

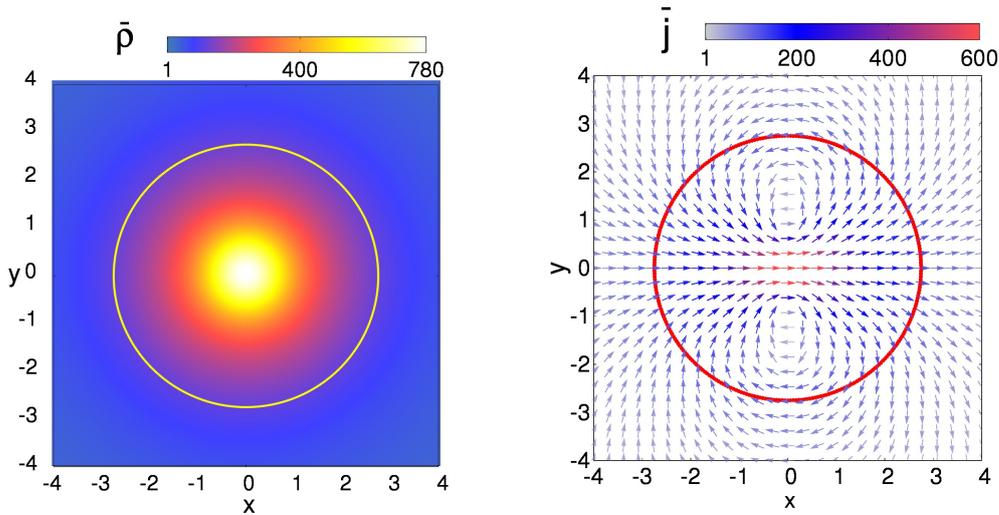
### 5.2.2 Winkelverteilung und Nahfeld

Für die weitere Beschreibung des Streuverhaltens untersuchen wir die radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j_r^{\text{ref}}$  nach den Gleichungen (4.22)-(4.24) und (4.27)-(4.29). In *Abbildung 5.17* ist die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi)$  für die Parameter der starken Resonanz kurz vor der ersten Fabry-Pérot-Stelle  $R = 2.75$ ,  $\omega = 1$ ,  $\tilde{V} = 2.32$  jeweils in Abhängigkeit von  $R$ ,  $\omega$  und  $\tilde{V}$  für  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  dargestellt, siehe die Bilder (a)-(c). Allen Bildern können wir entnehmen, dass das Elektron im Wesentlichen eine Streuung in Vorwärtsrichtung  $\varphi = 0$  erfährt. Dies war zu erwarten, da nach Gleichung (3.93) nur die Partialwellen mit Drehimpulsquantenzahl  $m = 0$  angeregt sind. Wie wir in Abschnitt 5.1.2 gesehen haben, bewirkt dies die Ausbildung einer Vorzugsrichtung  $\varphi = 0$ . Da sich die Streueffizienz im Wesentlichen aus dem Integral der radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte über den Raumwinkel  $\varphi$  errechnet, siehe die Gleichungen (4.30) und (4.31), lassen sich die Bilder (a)-(c) aus *Abbildung 5.17* mit denen aus *Abbildung 5.12-5.14*, sowie der Darstellung der Reflexionskoeffizienten in *Abbildung 5.15*, in Einklang bringen. Selbiges gilt für die in *Abbildung 5.17* dargestellte zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsstromdichte (unten rechts), die zu der in *Abbildung 5.16* dargestellten Streueffizienz korrespondiert. Die Besonderheiten der zeitabhängigen Streuung des Elektrons zeigen sich auch im Nahfeld des symmetrisch oszillierenden Quantenpunkts. In *Abbildung 5.19* ist die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte für die erste halbe Periode  $t \in [0, \pi]$  von (1) bis (6) in Zeitschritten  $t = \pi/6$  für die starke Resonanz kurz vor der ersten Fabry-Pérot-Stelle  $R = 2.75$ ,  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $\omega = 1$  mit  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  und  $\delta = 0$  dargestellt. Wir erkennen, dass zu Beginn (1) eine Lokalisierung des Elektrons um  $r = 0$  vorliegt, die sich in den nächsten Zeitschritten (2)-(4) in



**Abbildung 5.17:** Zeitgemittelte radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, R)$  für  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $\omega = 1$  (a),  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, \tilde{V})$  für  $R = 2.75$ ,  $\omega = 1$  (b) und  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, \omega)$  für  $R = 2.75$ ,  $\tilde{V} = 2.32$  (c). Unten rechts: Zeitabhängige radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $j_r^{\text{ref}}(\varphi, r-t)$  für  $R = 2.75$ ,  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $\omega = 1$  und  $\delta = 0$ . In allen Bildern ist  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$ .

eine ringförmige Struktur, und schließlich in den Zeitschritten (5) und (6) wieder in eine Lokalisierung um  $r = 0$  umwandelt. In den darauf folgenden Zeitschritten beginnt der Prozess von Neuem. Bei genauerer Betrachtung von *Abbildung 5.19* ist zu sehen, dass sich im Bereich kurz hinter dem Quantenpunkt durch die Umwandlung der Ringstruktur eine typische Abstrahlcharakteristik mit Vorzugsrichtung  $\varphi = 0$  ausbildet, siehe insbesondere Bild (4) und (5). Das einfallende Elektron wird durch den oszillierenden Quantenpunkt eingefangen und schließ-

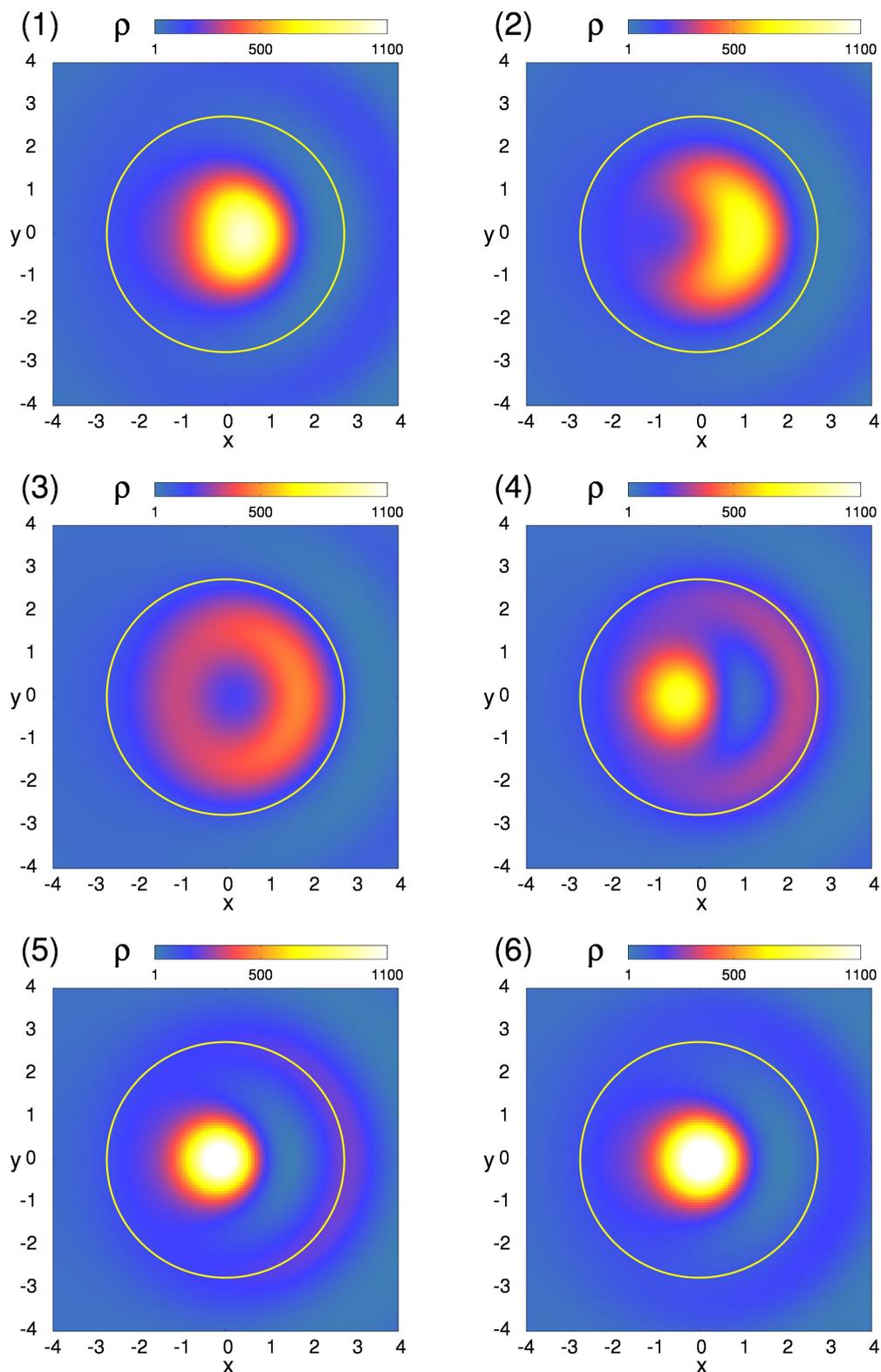


**Abbildung 5.18:** Zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsdichte  $\bar{\rho}(x, y)$  (links) und zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\bar{\mathbf{j}}(x, y)$  (rechts) für  $R = 2.75$ ,  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $\omega = 1$ ,  $E = 10^{-8}$  und  $V = 10^{-9}$ . Der gelbe Kreis kennzeichnet den Quantenpunkt.

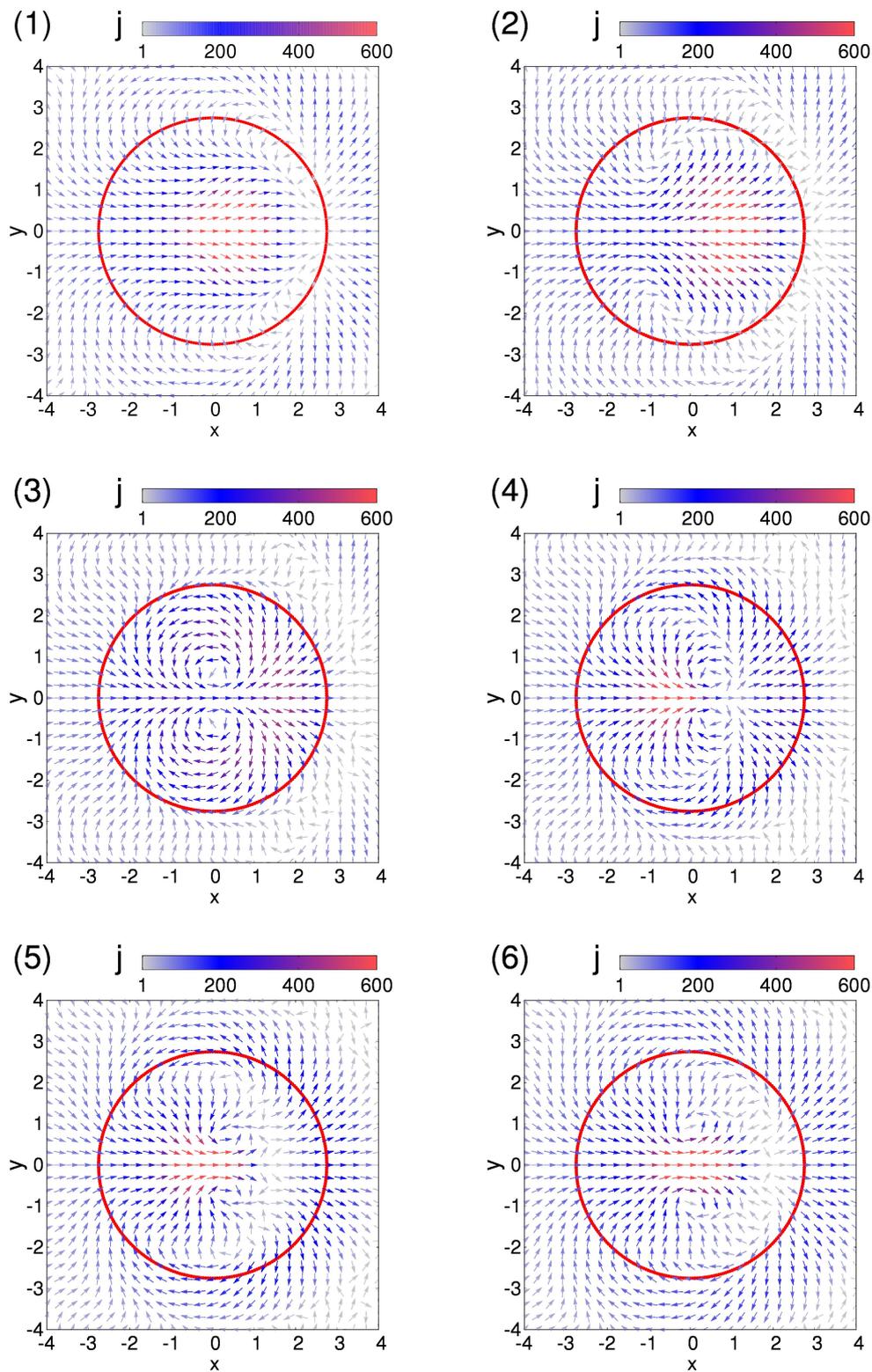
lich in Vorwärtsrichtung gestreut, wobei die Intensität mit größerer Entfernung vom Quantenpunkt abnimmt. Zwischen den einzelnen Fronten befindet sich ein Schattenbereich, der, wie in Bild (4) deutlich zu sehen ist, durch den Übergang der Ringstruktur in die Lokalisierung um  $r = 0$  entsteht. Wir hatten in Abschnitt 4.2 gesehen, dass im Fernfeld die Wahrscheinlichkeitsdichte und die radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte der gestreuten Welle übereinstimmen, siehe Gleichung (4.26). Diese Abstrahlcharakteristik spiegelt somit direkt die zeitabhängige, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j_r^{\text{ref}}(\varphi, r - t)$  aus *Abbildung 5.17* wieder. In *Abbildung 5.18* ist die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsdichte für den betrachteten Fall dargestellt (links). Im zeitgemittelten Fall liegt eine Lokalisierung des Elektrons um  $r = 0$  vor, wie sich auch mit Gleichung (4.47) zeigen lässt: Bei alleiniger Berücksichtigung der resonanten Partialwelle  $t_{m=0,n}$  ergibt sich der einfache Ausdruck  $\bar{\rho} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |t_{m=0,n}|^2 [J_0^2(q_n r) + J_1^2(q_n r)]$ , der zusammen mit *Abbildung 3.3* die Lokalisierung erklärt, siehe auch *Abbildung 5.9 A*. Die Auswertung der Partialwellenbeiträge  $t_{m>0,n=0}$  zeigt, dass diese bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte keine Rolle spielen.

Abschließend untersuchen wir für dieselben Parameter wie auch bei der Wahrscheinlichkeitsdichte in *Abbildung 5.19* die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsstromdichte für die erste halbe Periode  $t \in [0, \pi]$  von (1) bis (6) in Zeitschritten  $t = \pi/6$ , siehe *Abbildung 5.20*. Zu Beginn, siehe Bild (1), ist im Zentrum des Quantenpunkts eine starke Erhöhung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte zu erkennen,

die mit der Wahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons um  $r = 0$  aus korrespondiert. Des Weiteren erkennen wir eine fortlaufende Wirbelbildung am Rand des Quantenpunkts, die für den in *Abbildung 5.19* (1) auftretenden Schattenbereich verantwortlich ist. In den Bildern (2) und (3) dringt ein Teil dieser Wirbelfront in den Quantenpunkt ein und resultiert schließlich in zwei einzelne Wirbel. Dieser Prozess sorgt letztlich für die Ausbildung der Ringstruktur in *Abbildung 5.19* (3). Durch das einfallende Elektron werden schließlich die beiden Wirbel zum Rand des Quantenpunktes transportiert, bis sie eine weitere Wirbelfront mit verschwindender Wahrscheinlichkeitsstromdichte ausbilden, während zugleich die Lokalisation um  $r = 0$  zunimmt, siehe die Bilder (4)-(6). Der Abstrahlungsprozess beginnt von Neuem. In *Abbildung 5.18* ist die zeitgemittelte Wahrscheinlichkeitsstromdichte für den betrachteten Fall dargestellt (rechts). In Einklang mit der zeitgemittelten Wahrscheinlichkeitsdichte (links) zeigt sie das typische Stromlinienprofil einer Resonanz der  $r_{m=0,n}$ -Mode auf, wie wir es auch schon in Abschnitt 5.1 vorgefunden haben, siehe *Abbildung 5.10*.



**Abbildung 5.19:** Zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x, y, t)$  für eine halbe Periode  $t \in [0, \pi]$  von (1) bis (6) in Zeitschritten  $t_i = i \cdot \pi/6$  für  $R = 2.75$ ,  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $\omega = 1$ ,  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  und  $\delta = 0$ . Der gelbe Kreis kennzeichnet den Quantenpunkt.



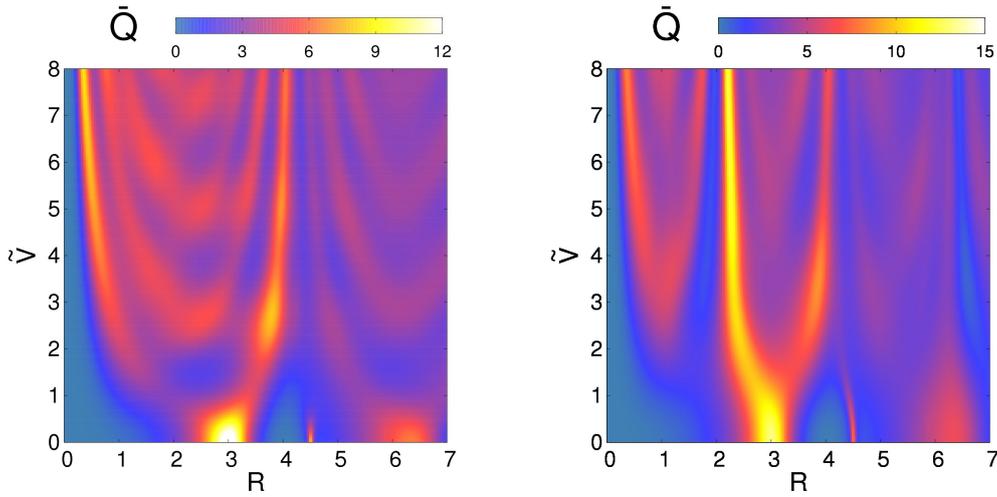
**Abbildung 5.20:** Zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j}(x, y, t)$  für eine halbe Periode  $t \in [0, \pi]$  von (1) bis (6) in Zeitschritten  $t_i = i \cdot \pi/6$  für  $R = 2.75$ ,  $\tilde{V} = 2.32$ ,  $\omega = 1$ ,  $E = 10^{-8}$ ,  $V = 10^{-9}$  und  $\delta = 0$ . Der gelbe Kreis kennzeichnet den Quantenpunkt.

## 5.3 Asymmetrisch oszillierender Quantenpunkt

Wir untersuchen nun das Streuverhalten des Elektrons an einem asymmetrisch oszillierenden Quantenpunkt. Dazu werden wir neben dem harmonischen Anteil in Gleichung (2.19) das konstante Potential  $V$  berücksichtigen und endliche Werte der Energie  $E$  des Elektrons zulassen. Da unser Interesse hauptsächlich den Modifikationen der Resonanzstrukturen des stationären Grenzfalls  $\tilde{V} = 0$  (siehe Abschnitt 5.1) gilt, setzen wir im Folgenden  $V = 1$ .

### 5.3.1 Streueffizienz und Resonanzstruktur

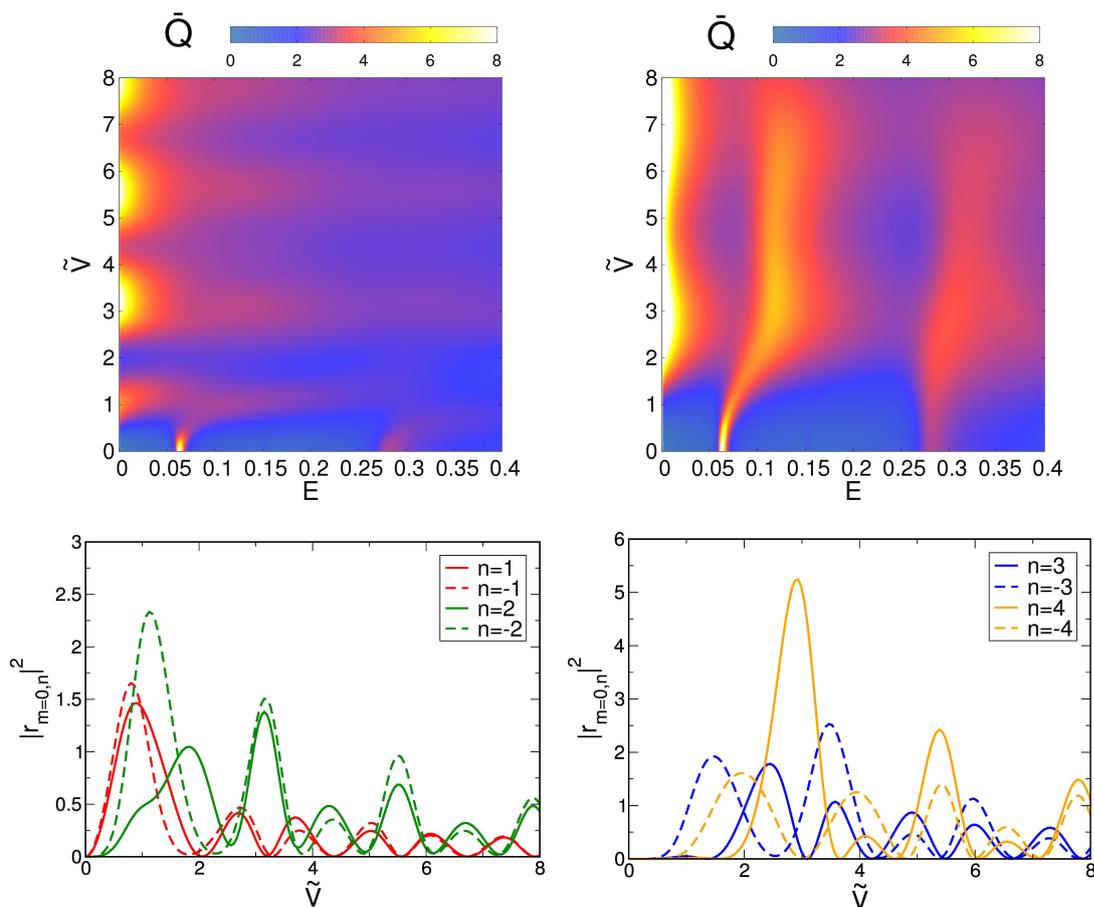
Zunächst untersuchen wir die zeitgemittelte und nicht-zeitgemittelte Streueffizienz gemäß den Gleichungen (4.39)-(4.41), um uns einen Überblick über die auftretenden Streueffekte zu verschaffen. Dazu betrachten wir als erstes die Modifikation der Resonanzen infolge der Erhöhung von  $\tilde{V}$ . In *Abbildung 5.21* ist die zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\tilde{V}, R)$  für  $\omega = 0.75$  (links) und  $\omega = 1.5$  (rechts) für  $E = 0.1$ ,  $V = 1$  dargestellt. Für  $\tilde{V} = 0$  ergeben sich mit Ausnahme der Resonanz der Partialwelle mit  $m = 2$  (begrenzte Auflösung) die Resonanzen, wie sie auch in *Abbildung 5.2* auftreten. In der Nähe von  $R = 3.5$  beginnt ein Schattenbereich, der auf die erste Fabry-Pérot-Resonanz der Energie  $E_0 = E$  mit der Fabry-Pérot-Stelle  $R_{\text{F}}^{k=1, n=0} = \frac{\pi}{V-E}$  zurückzuführen ist. Für Werte  $\tilde{V} > 0$  beobachten wir eine Verbreiterung und anschließende Aufspaltung der Resonanzen der Partialwellen mit  $m = 0$  ( $R \approx 3$  und  $R \approx 6.5$ ), während die Resonanz der Partialwelle mit  $m = 1$  ( $R \approx 4.5$ ) lediglich verbreitert und abgeschwächt wird. Daraus können wir schließen, dass für größer werdende Werte von  $\tilde{V}$  die Partialwellen mit  $m = 0$  den dominierenden Beitrag zur Streueffizienz leisten. Die entstehende Resonanzstruktur ähnelt stark die der aus *Abbildung 5.12*, siehe Abschnitt 5.2.1. Die dort auftretende Struktur konnten wir mit den hinzukommenden Fabry-Pérot-Resonanzen der höheren Energieniveaus erklären. Auch die hier auftretende Resonanzstruktur lässt sich auf die mit wachsendem  $\tilde{V}$  hinzukommenden Fabry-Pérot-Resonanzen mit den Fabry-Pérot-Stellen  $R_{\text{F}}^{k, n} = k\pi/\alpha'_n(E \pm n\omega - V)$  zurückführen, wobei jedoch wegen  $V = 1$  und  $E = 0.1$  keine symmetrische Anregung von Energieniveaus vorliegt. Die Folge ist, dass bei den Fabry-Pérot-Stellen  $R_{\text{F}}^{k, n}$  die Streueffizienz nicht gänzlich verschwindet, da andere Energieniveaus  $l \neq n$  nicht an der betrachteten Fabry-Pérot-Resonanz beteiligt sind und einen nicht-verschwindenden Beitrag zur Streueffizienz leisten. Die Fabry-Pérot-Stellen des ersten angeregten Energieniveaus sind  $R_{\text{F}}^{k=1, n=1} = k\pi/\alpha'_n(E + \omega - V) \approx 1.9 \cdot k$  und können der *Abbildung* bei  $\tilde{V} \approx 1$  für  $k = 1, 2, 3$  entnommen werden. Sie sind unter anderem verantwortlich für die Aufspaltung der Resonanzen. Wie wir in



**Abbildung 5.21:** Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\tilde{V}, R)$  für  $\omega = 0.75$  (links) und  $\omega = 1.5$  (rechts) mit  $E = 0.1$ ,  $V = 1$ .

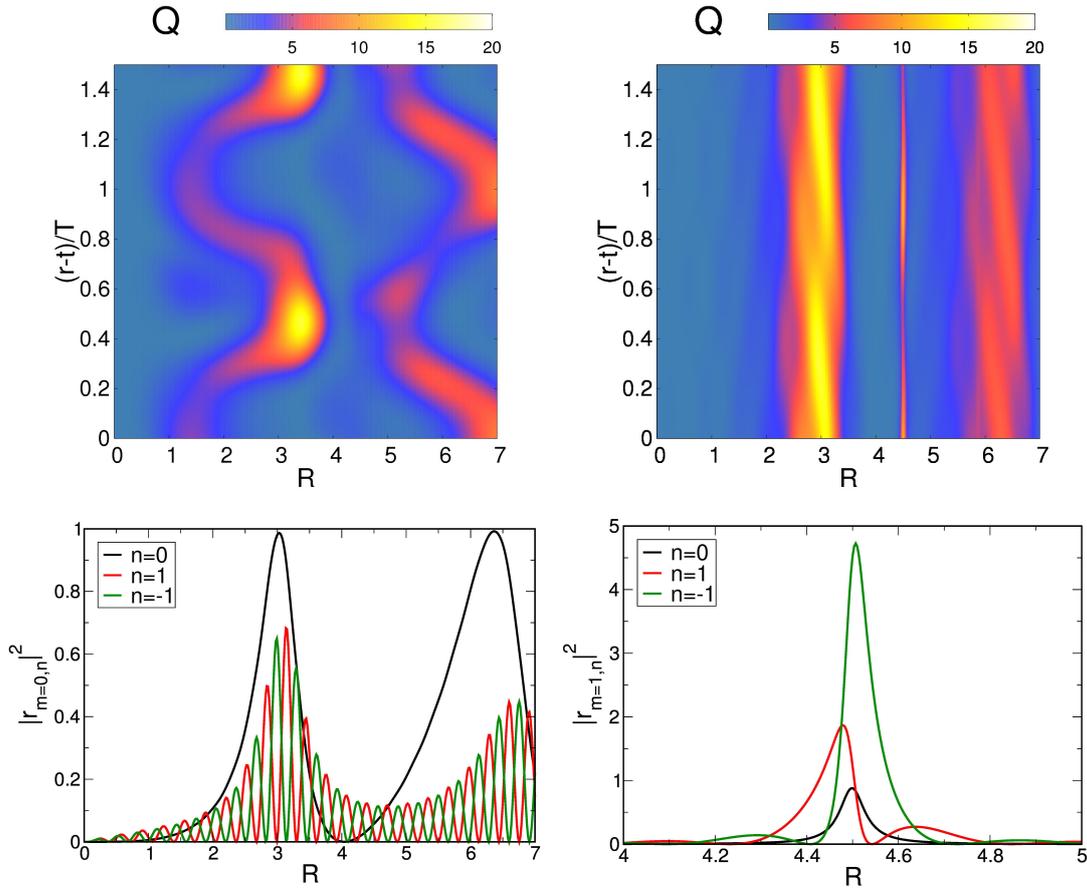
Abbildung 5.21 (rechts) sehen können, treten für größere Werte von  $\omega$  die Fabry-Pérot-Resonanzen höherer Energieniveaus erst für größere Werte von  $\tilde{V}$  ein, so wie es zu erwarten ist. Wir erkennen neben der Aufspaltung der ersten Resonanz das Hinzukommen weiterer Fabry-Pérot-Resonanzen für kleinere Werte von  $R$ , die wir im Fall  $\omega = 0.75$  nicht beobachten. Dies liegt daran, dass für  $\omega = 1.5$  die Fabry-Pérot-Stellen des ersten angeregten Energieniveaus  $R_F^{k,n=1} \approx 1.26 \cdot k$  lauten. Die erste auftretende Fabry-Pérot-Stelle mit  $k = 1$  liegt bei einem so kleinen Wert von  $R$ , dass sie nicht für die Aufspaltung der ersten Resonanz verantwortlich sein kann und führt schließlich auf die neu hinzukommende Resonanzstruktur.

Zur weiteren Untersuchung ist in *Abbildung 5.22* die zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\tilde{V}, E)$  für  $\omega = 0.5$  (links) und  $\omega = 1.25$  (rechts) mit  $R = 7.75$  und  $V = 1$  dargestellt. Für  $\tilde{V} = 0$  ergibt sich ein Verlauf der Streueffizienz, wie wir ihn auch in *Abbildung 5.3* vorfinden, wobei die Resonanz der Partialwelle  $m = 3$  wegen der begrenzten Auflösung nur ansatzweise zu erkennen ist. Wir sehen, dass für  $\tilde{V} > 0$  die Resonanzen stark verbreitern, da eine Anregung von Partialwellen höherer Energieniveaus erfolgt, die mit der resonanten Partialwelle interferieren. Diese Interferenz tritt dabei für umso größere Werte von  $\tilde{V}$  ein, je größer  $\omega$  ist, wie sich durch den Vergleich der beiden dargestellten Fälle erkennen lässt. Während für  $\tilde{V} = 0$  die Streueffizienz für  $E \rightarrow 0$  verschwindet, kann für  $\tilde{V} > 0$  aufgrund der Anregung höherer Energieniveaus eine endliche Streueffizienz  $\bar{Q} > 0$  resultieren. Diese zeigt ein periodisches Verhalten in  $E$  auf, wobei die Periode in  $\tilde{V}$  um so größer ist, je größer  $\omega$  gewählt wird. Um dieses Verhalten besser zu verstehen, sind in *Abbildung 5.22* die Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=0,n}|^2(\tilde{V})$  für die ersten an-



**Abbildung 5.22:** Oben: Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\tilde{V}, E)$  für  $\omega = 0.5$  (links) und  $\omega = 1.25$  (rechts) mit  $R = 7.75$ ,  $V = 1$ . Unten: Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=0,n}|^2(\tilde{V})$  für  $|n| = 1, 2$  (links) und  $|n| = 3, 4$  (rechts) mit  $E = 10^{-5}$ ,  $R = 7.75$ ,  $V = 1$ ,  $\omega = 0.5$ .

geregten Energieniveaus mit  $E = 10^{-5}$ ,  $R = 7.75$ ,  $V = 1$ ,  $\omega = 0.5$  dargestellt. Der Reflexionskoeffizient  $|r_{m=0,n=0}|^2$  ist nicht aufgeführt, da dieser für  $E \rightarrow 0$  verschwindet. Des Weiteren sind nur die Reflexionskoeffizienten für  $m = 0$  dargestellt, da die Beiträge mit  $m \neq 0$  verschwindend gering sind. Wir sehen, dass die Reflexionskoeffizienten nach einem anfänglichen Ansteigen in eine periodische Oszillation mit abklingender Amplitude übergehen, wobei die Reflexionskoeffizienten höherer Energieniveaus erst für größere Werte von  $\tilde{V}$  einsetzen. Wir können die Ausbildung der Maxima in der Streueffizienz für  $E \rightarrow 0$  auf die Dominanz einzelner Streukoeffizienten zurückführen (siehe die Kurven mit  $n = 2, -2, 4$ ), deren Überlagerung den periodischen Verlauf der Streueffizienz erklärt. Für die Reflexionskoeffizienten höherer Energieniveaus sind dabei im Vergleich zu den Reflexionskoeffizienten niedrigerer Energieniveaus höhere Werte zu erwarten, da



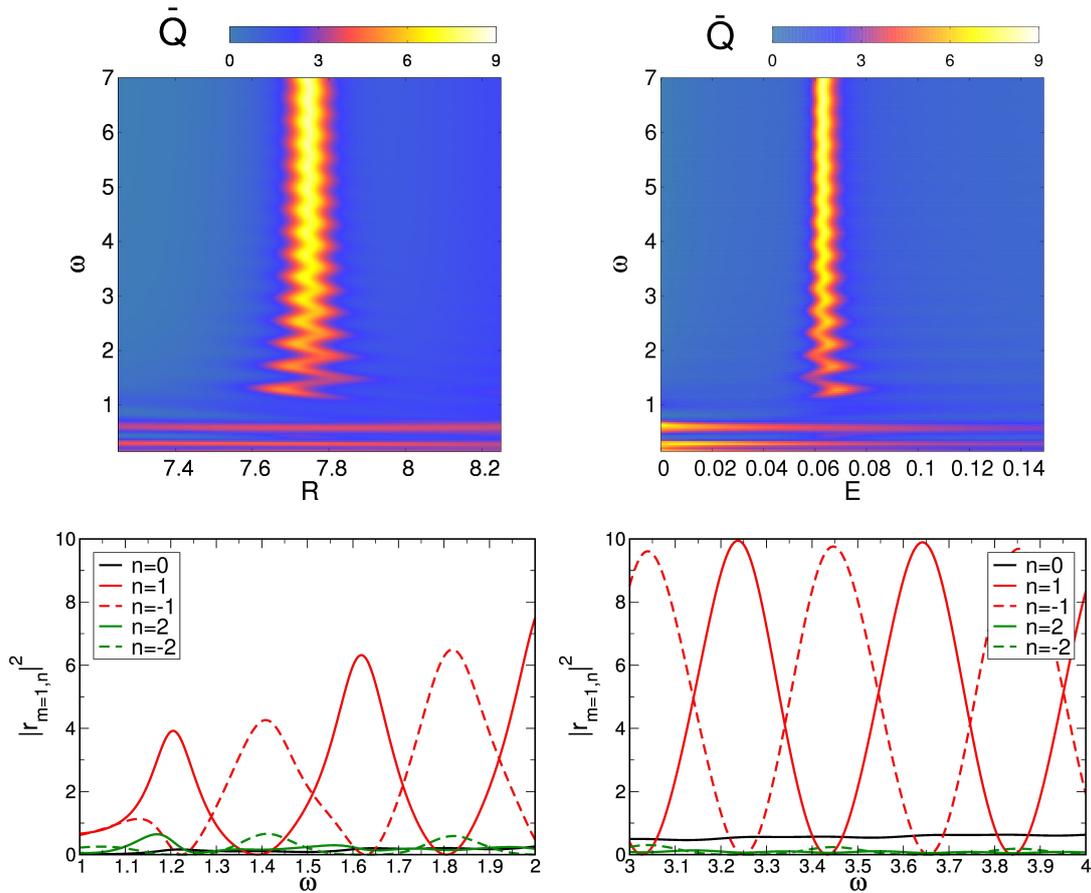
**Abbildung 5.23:** Oben: Zeitabhängige Streueffizienz  $Q(r-t, R)$  für  $\omega = 0.75$  (links) und  $\omega = 10$  (rechts) mit  $E = 0.1$ ,  $V = 1$ ,  $\tilde{V} = 1$ ,  $\delta = 0$ . Unten: Reflexionskoeffizienten  $|r_{m,n}|^2(R)$  für  $m = 0$  (links) und  $m = 1$  (rechts) mit  $\omega = 10$ ,  $E = 0.1$ ,  $V = 1$ ,  $\tilde{V} = 1$ .

gemäß Gleichung (4.41) der Vorfaktor  $1/k_n$  den Beitrag der Streukoeffizienten abschwächt (Vgl. Kurven mit  $n = 2$  und  $n = 4$ ).

Als Nächstes wollen wir das Streuverhalten des Elektrons mit Hilfe der zeitabhängigen Streueffizienz für ein ausgewähltes Beispiel untersuchen. Dazu ist in *Abbildung 5.23*  $Q(r-t, R)$  für  $\omega = 0.75$  (oben links) mit  $E = 0.1$ ,  $V = 1$ ,  $\tilde{V} = 1$  und  $\delta = 0$  dargestellt. Dieser Fall korrespondiert zu der zeitgemittelten Streueffizienz aus *Abbildung 5.21* für  $\tilde{V} = 1$ , für die wir durch die Anregung des ersten angeregten Energieniveaus eine Aufspaltung der Resonanzen beobachten. Die Aufspaltung der Resonanz mit  $m = 0$  schlägt sich in der zeitabhängigen Streueffizienz in Form einer Oszillation nieder, die periodisch mit  $T = 2\pi/\omega$  wiederkehrt. Die Resonanz der Partialwelle mit  $m = 1$  ( $R \approx 4.5$ ) ist für  $\tilde{V} = 1$  stark verbreitert und abgeschwächt. Wir wollen zum Vergleich noch die zeitabhängige Streueffizienz für  $\omega = 10$  diskutieren, siehe *Abbildung 5.23* (oben rechts).

Da für  $\omega = 10$  der Quotient  $\tilde{V}/\omega$  klein wird, erwarten wir den Übergang zum quasistatischen Grenzfall. Die zeitabhängige Streueffizienz sollte demnach die Resonanzstruktur des stationären Grenzfalls  $\tilde{V} = 0$  aufweisen. Die Abbildung zeigt das erwartete Verhalten auf, wobei jedoch leichte Modifikationen zu erkennen sind. Um diese Modifikationen zu verstehen, sind in *Abbildung 5.23* die zugehörigen Reflexionskoeffizienten  $|r_{m,n}|^2(R)$  für  $m = 0$  (unten links) und  $m = 1$  (unten rechts) dargestellt. Wegen der Wahl von  $\omega$  sind die Reflexionskoeffizienten der Energieniveaus  $|n| > 1$  verschwindend klein und daher nicht aufgeführt. Wir sehen, dass die Reflexionskoeffizienten zum Energieniveau  $n = 0$  die für die Resonanz typische Form einer Lorentz-Kurve aufweisen und ihren maximalen Wert 1 an der Resonanzstelle fast erreichen. Sie leisten den dominierenden Beitrag zur Streueffizienz und sorgen für die Ausbildung der Resonanzstruktur des stationären Grenzfalls. Die Reflexionskoeffizienten des ersten angeregten Energieniveaus  $|n| = 1$  führen lediglich zu leichten Abweichungen in der Streueffizienz, da der Vorfaktor  $1/k_1$  in Gleichung (4.41) den Beitrag der Streukoeffizienten stark abschwächt. Wir erkennen für  $m = 0$  Oszillationen in den Reflexionskoeffizienten für  $|n| = 1$ , deren Maxima und Minima einen konstanten Abstand  $\Delta R_{\text{F}}^{n=1}$  zueinander besitzen. Die Ursache hierfür sind Fabry-Pérot-Resonanzen, die in kleinen Abständen  $\Delta R_{\text{F}}^{n=1}$  auftreten, da wegen des hohen Wertes von  $\omega$  die Wellenlängen der angeregten Zustände klein sind. Die erste Fabry-Pérot-Resonanz tritt dabei für den Reflexionskoeffizient mit  $n = -1$  auf, da  $R_{\text{F}}^{k=1,n=-1} = \pi/(V - E + \omega) \approx 0.288 < R_{\text{F}}^{k=1,n=1} = \pi/(E + \omega - V) \approx 0.35$ .

Abschließend wollen wir die Modifikation der Resonanzstruktur des stationären Grenzfalls bei Variation der Kreisfrequenz  $\omega$  untersuchen. Dazu ist in *Abbildung 5.24* die zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\omega, R)$  (oben links) mit  $E = 0.0629$  und  $\bar{Q}(\omega, E)$  (oben rechts) mit  $R = 7.75$  für  $\tilde{V} = 0.75$ ,  $V = 1$  dargestellt. Wir erkennen für größere Werte von  $\omega$  bei  $R \approx 7.75$  bzw.  $E \approx 0.0629$  eine starke Erhöhung der Streueffizienz. Diese Erhöhung ist im quasistatischen Grenzfall  $\omega \rightarrow \infty$  auf die Resonanz der Partialwelle mit  $m = 1$  zurückzuführen, siehe auch *Abbildung 5.3*. Für endliche Werte von  $\omega$  treten jedoch Oszillationen in  $R$  bzw.  $E$  auf, die mit sinkendem  $\omega$  immer stärker werden. Die Erklärung hierfür liefern uns die Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=1,n}|^2(\omega)$ , die in *Abbildung 5.24* für  $\omega \in [1, 2]$  (unten links) und  $\omega \in [3, 4]$  (unten rechts) mit  $R = 7.75$ ,  $E = 0.0629$ ,  $V = 1$ ,  $\tilde{V} = 0.75$  dargestellt sind. Der Vergleich der Kurven zeigt, dass die Reflexionskoeffizienten des ersten angeregten Energieniveaus  $|n| = 1$  den wesentlichen Beitrag zur Streueffizienz leisten. Sie zeigen einen periodischen Verlauf auf, wobei die Maxima und Minima einen festen Abstand  $\Delta\omega$  zueinander einnehmen. Das Auftreten der Minima hat stehende Wellen als Ursache, sodass sich der Abstand  $\Delta\omega$  über die



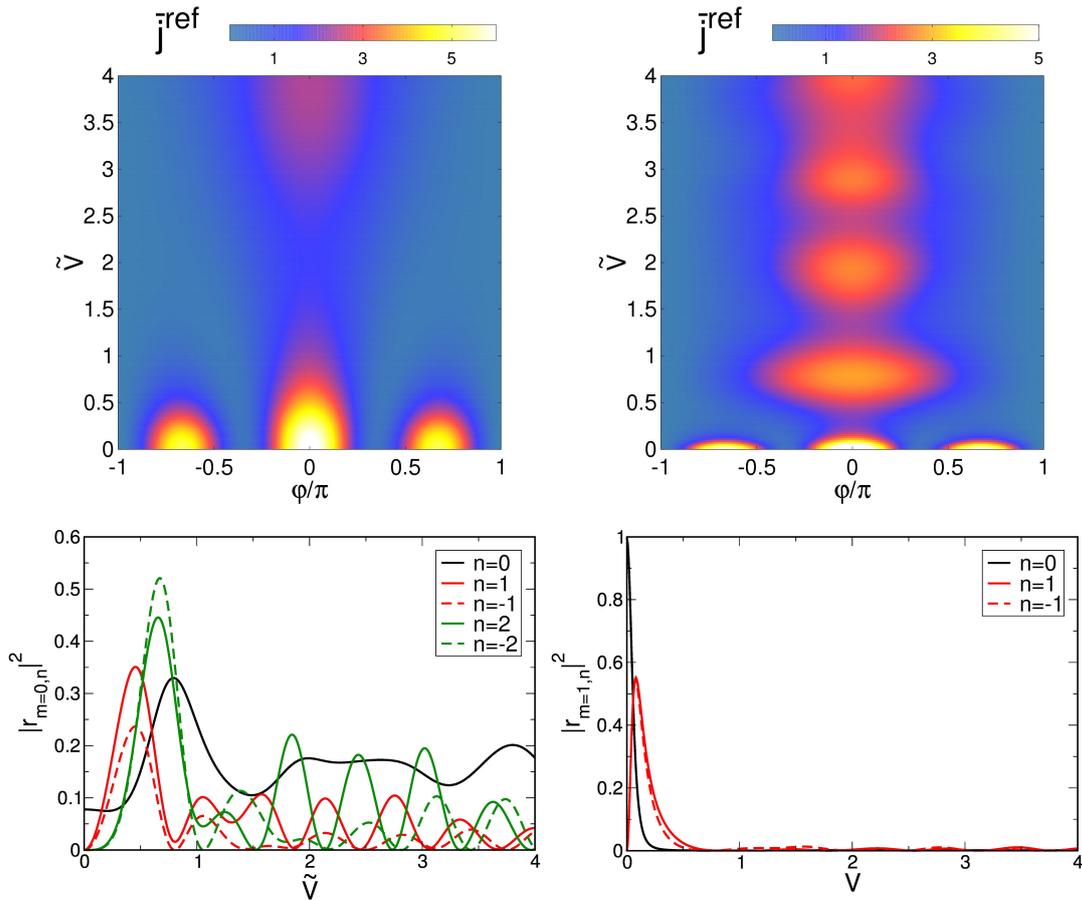
**Abbildung 5.24:** Oben: Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(\omega, R)$  (links) für  $E = 0.0629$  und  $\bar{Q}(\omega, E)$  (rechts) für  $R = 7.75$  mit  $\tilde{V} = 0.75$ ,  $V = 1$ . Unten: Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=1,n}|^2(\omega)$  für  $\omega \in [1, 2]$  (links) und  $\omega \in [3, 4]$  (rechts) mit  $R = 7.75$ ,  $E = 0.0629$ ,  $V = 1$ ,  $\tilde{V} = 0.75$ .

Bedingung einer Fabry-Pérot-Resonanz bestimmen lässt zu  $\Delta\omega = \frac{\pi}{R} \approx 0.405$ . Die Fabry-Pérot-Stellen sind für  $n = 1$  und  $n = -1$  jedoch verschieden, sodass die Kurven gegeneinander verschoben sind. Diese Verschiebung ist gerade so groß, dass die durch Überlagerung der Kurven mit  $n = 1$  und  $n = -1$  entstehenden Knotenpunkte etwa den Abstand  $\Delta\omega/2$  zueinander besitzen. Die Dominanz des Reflexionskoeffizienten mit  $n = 1$  sorgt nun für eine Verschiebung der Resonanz in Richtung positiver Radien bzw. negativer Energien, während die Dominanz des Energieniveaus  $n = -1$  den umgekehrten Effekt hat. So entsteht die in der Streueffizienz auftretende Oszillation, die wegen der Verschiebung der Kurven  $n = 1$  und  $n = -1$  um etwa  $\Delta\omega/2$  eine gerade Form besitzt. Die Verschiebung der Resonanz ist umso größer, je größer der Einfluss der Reflexionskoeffizienten ist. Unter Berücksichtigung des Vorfaktors  $1/k_n$  in Gleichung (4.41) stellen wir fest, dass der Einfluss der Reflexionskoeffizienten im Bereich  $\omega \in [1, 2]$  größer ist als

in  $\omega \in [3, 4]$ . Dies ist die Ursache für die Verstärkung der Oszillation für kleinere Werte von  $\omega$ . Wir erkennen weiter, dass im Bereich  $\omega \in [1, 2]$  der Einfluss des Reflexionskoeffizienten mit  $n = -2$  größer wird, was die Verbiegung der Oszillation in  $\bar{Q}$  in Richtung negativer Radien bzw. positiver Energien erklärt. Für sehr kleine Werte von  $\omega$  werden weitere Energieniveaus verschiedener Partialwellen angeregt, die zum Verschwinden der Resonanz führen.

### 5.3.2 Winkelverteilung

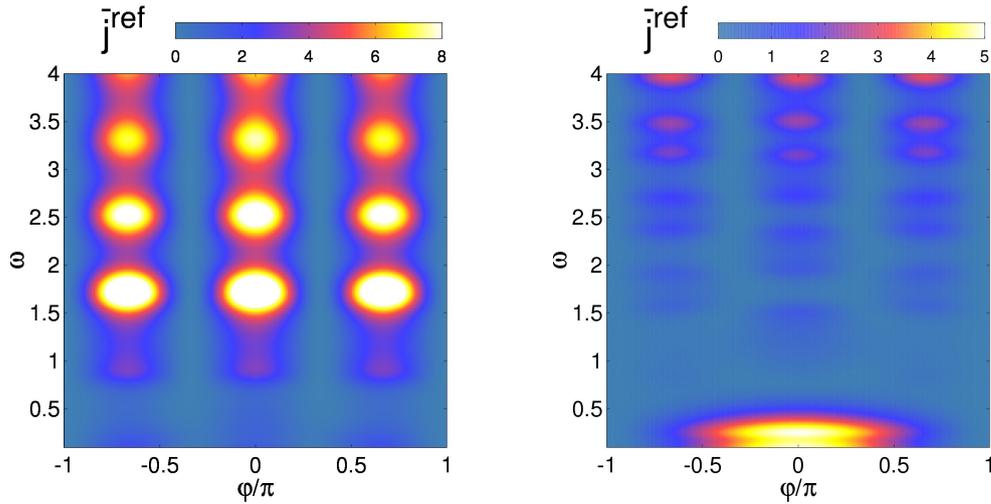
Für die weitere Beschreibung des Streuverhaltens untersuchen wir die radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j_r^{\text{ref}}$  nach den Gleichungen (4.27)-(4.29). Wir betrachten zunächst die Modifikation der Winkelverteilung des stationären Grenzfalles durch die Variation von  $\tilde{V}$ . Dazu ist in *Abbildung 5.25*  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, \tilde{V})$  für  $\omega = 0.3$  (oben links) und  $\omega = 1.5$  (oben rechts) mit  $E = 0.0629$ ,  $R = 7.75$ ,  $V = 1$  dargestellt. Die Abbildungen korrespondieren zu der in *Abbildung 5.22* dargestellten Streueffizienz mit  $E = 0.069$ . Obwohl wir dort andere Werte für  $\omega$  verwendet haben, können wir einen qualitativen Vergleich beider Abbildungen vornehmen. Für  $\tilde{V} = 0$  weist die Streueffizienz eine Erhöhung auf, die auf die Resonanz der Partialwelle mit Drehimpulsquantenzahl  $m = 1$  zurückzuführen ist, siehe auch *Abbildung 5.2*. Dementsprechend finden wir für  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, \tilde{V} = 0)$  die typische Winkelverteilung mit der Ausbildung von drei Vorzugsrichtungen vor. Für Werte  $\tilde{V} > 0$  werden Partialwellen höherer Energieniveaus angeregt, wobei die Interferenz der Partialwellen zu einer Abschwächung der Resonanz führt. Die Folge ist die Auflösung der entsprechenden Winkelverteilung, die schließlich das Profil einer Resonanz der Partialwelle  $m = 0$  mit Vorzugsrichtung  $\varphi = 0$  annimmt. Dieser Übergang tritt dabei für umso kleinere Werte von  $\tilde{V}$  auf, je kleiner  $\omega$  gewählt wird. Wir sehen für den Fall  $\omega = 1.5$  eine periodische Erhöhung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte, die mit der periodischen Erhöhung der Streueffizienz in *Abbildung 5.22* in Verbindung gebracht werden kann. Zum besseren Verständnis sind in *Abbildung 5.25* die zugehörigen Reflexionskoeffizienten  $|r_{m,n}|^2(\tilde{V})$  mit  $m = 0$  (unten links) und  $m = 1$  (unten rechts) dargestellt. Der Übersichtlichkeit wegen sind für  $m = 0$  nur die Reflexionskoeffizienten der ersten angeregten Energieniveaus  $|n| \leq 2$  aufgeführt. Wir sehen, dass für  $\tilde{V} = 0$  die Resonanzbedingung  $|r_{m=1,n=0}|^2 = 1$  erfüllt ist, während die Reflexionskoeffizienten höherer Energieniveaus  $|n| > 0$  verschwinden. Für Werte  $\tilde{V} > 0$  werden höhere Energieniveaus angeregt, wobei dies vorrangig für die Partialwellen mit  $m = 0$  geschieht, während die Reflexionskoeffizienten  $r_{m=1,n}$  für größere Werte von  $\tilde{V}$  verschwindend klein sind. Dies erklärt die Ausbildung der Winkelverteilung für  $\tilde{V} > 0$ . Die periodischen Erhöhungen in der Winkel-



**Abbildung 5.25:** Oben: Zeitgemittelte radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, \tilde{V})$  für  $\omega = 0.3$  (links) und  $\omega = 1.5$  (rechts) mit  $E = 0.0629$ ,  $R = 7.75$ ,  $V = 1$ . Unten: Reflexionskoeffizienten  $|r_{m,n}|^2(\tilde{V})$  für  $m = 0$  (links) und  $m = 1$  (rechts) mit  $R = 7.75$ ,  $E = 0.0629$ ,  $V = 1$ ,  $\omega = 0.3$ .

verteilung sind auf den periodischen Verlauf der Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=0,n}|^2$  zurückzuführen. Diese Oszillation geht zunehmend in einen homogenen Verlauf über, da für steigende Werte von  $\tilde{V}$  stetig mehr Reflexionskoeffizienten höherer Energieniveaus hinzukommen und sich in ihrer Amplitude angleichen.

Abschließend wollen wir die Modifikation der Winkelverteilung des stationären Grenzfalles bei Variation von  $\omega$  untersuchen. Dazu ist in *Abbildung 5.26* die zeitgemittelte radiale Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, \omega)$  mit  $\tilde{V} = 0.1$  (oben links) und  $\tilde{V} = 0.5$  (oben rechts) für  $E = 0.0283$ ,  $R = 4$ ,  $V = 1$  dargestellt. Im quasistatischen Grenzfalle  $\omega \rightarrow \infty$  ergibt sich die Winkelverteilung einer Resonanz der Partialwelle mit  $m = 1$ , siehe auch *Abbildung 5.3*. Für endliche Werte von  $\omega$  treten jedoch Oszillationen auf, die für umso größere Werte von  $\omega$  eintreten, je größer der Wert von  $\tilde{V}$  ist. Das Auftreten der Oszillationen und ihre Ursache



**Abbildung 5.26:** Oben: Zeitgemittelte radiale, fernfeldgenäherte Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle  $\bar{j}_r^{\text{ref}}(\varphi, \omega)$  für  $\tilde{V} = 0.1$  (links) und  $\tilde{V} = 0.5$  (rechts) mit  $E = 0.0283$ ,  $R = 4$ ,  $V = 1$ .

wurde bereits anhand der zeitgemittelten Streueffizienz aus *Abbildung 5.24* diskutiert. Wir sehen weiter, dass für sehr kleine Werte von  $\omega$  die Winkelverteilung im Fall  $\tilde{V} = 0.1$  noch das charakteristische Profil einer Partialwellen-Resonanz mit  $m = 1$  aufzeigt, während dies für  $\tilde{V} = 0.75$  nicht mehr der Fall ist. Die durch den Übergang zum statischen Grenzfall auftretenden Abweichungen von der Resonanzstruktur des quasistatischen Grenzfalls sind offenbar umso größer, je größer der Wert von  $\tilde{V}$  ist. Eine Erklärung hierfür liefert Abschnitt 5.3.3, in der die zeitgemittelten Streugrößen für  $\omega \rightarrow 0$  ausgewertet werden.

### 5.3.3 Adiabatischer Grenzfall

Wie schon in Abschnitt 3.3 erläutert, wurden in einigen Abbildungen die zeitgemittelten Streugrößen nur bis zu einem unteren Grenzwert der Kreisfrequenz  $\omega$  dargestellt, da für zu große Werte von  $\tilde{V}/\omega$  keine numerische Konvergenz in den Streukoeffizienten erreicht werden konnte. Es stellt sich daher die Frage, wie sich die Streugrößen für den Grenzübergang  $\omega \rightarrow 0$  verhalten.

Wir hatten in Abschnitt 3.4 gesehen, dass im statischen Grenzfall  $\omega = 0$  die Wellenfunktionen in die des stationären Grenzfalls  $\tilde{V} = 0$  übergehen. Unter Verwendung dieser Wellenfunktionen erhalten wir schließlich für die Streueffizienz den stationären Ausdruck nach Gleichung (4.38), für den es wegen der fehlenden Zeitabhängigkeit unwesentlich ist, ob eine Zeitmittelung durchgeführt wird oder nicht. Anders verhält es sich, wenn wir erst eine Zeitmittelung der Streueffizienz

vornehmen und anschließend den Grenzübergang  $\omega \rightarrow 0$  durchführen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Grenzwert- und Integralbildung im Allgemeinen nicht vertauschbar sind:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} Q(t) dt \neq \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \lim_{\omega \rightarrow 0} Q(t) dt. \quad (5.12)$$

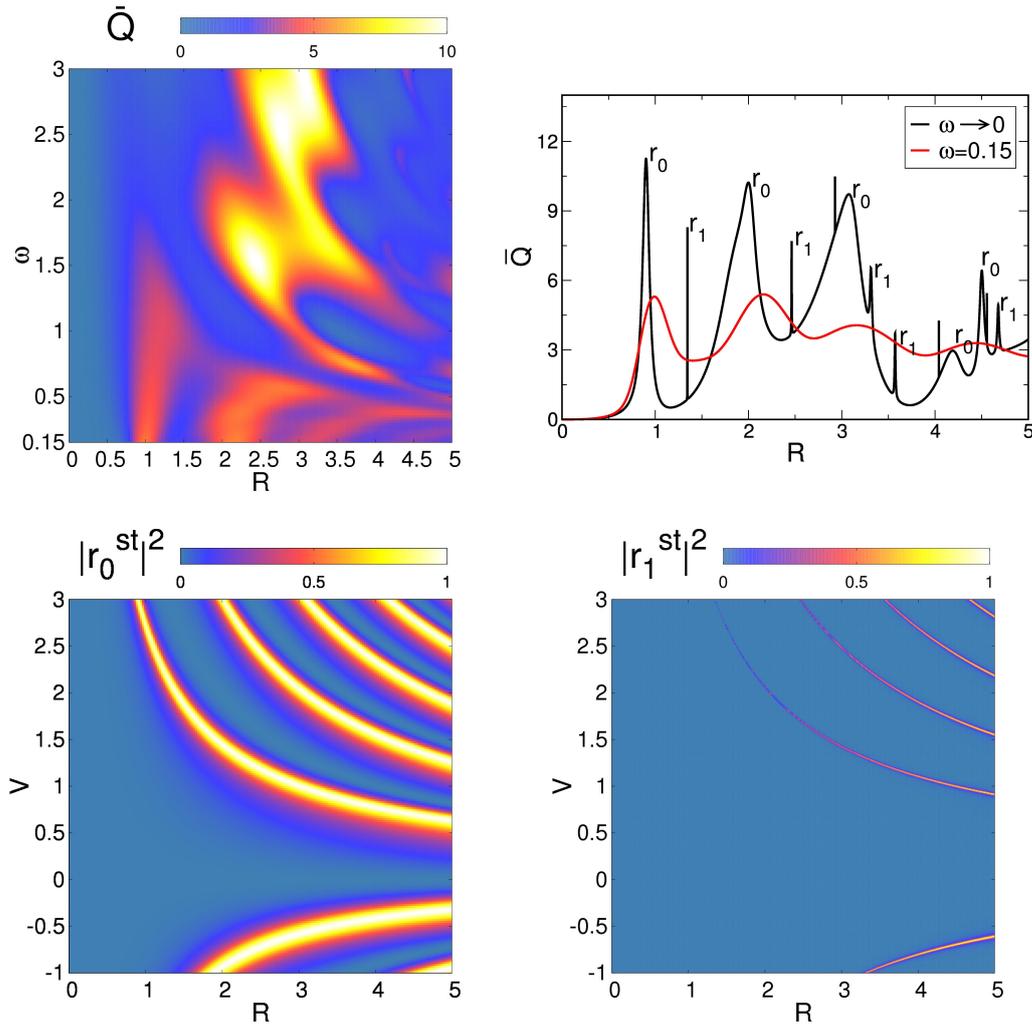
Wir halten also fest, dass

$$\bar{Q}(\omega \rightarrow 0) \neq Q^{\text{st}}, \quad (5.13)$$

wobei dies damit einhergeht, dass im statischen Grenzfall  $\omega \rightarrow 0$  nicht die stationären Streukoeffizienten reproduziert werden (siehe Abschnitt 3.4). Die Streuung des Elektrons am oszillierenden Quantenpunkt kann als ein adiabatischer Prozess verstanden werden, bei dem wegen  $\omega \rightarrow 0$  die Streuvorgänge so ablaufen, als wenn zu jedem Zeitpunkt  $t = t_0$  ein statischer Quantenpunkt mit  $U = V + \tilde{V} \cos(\omega t_0 + \delta)$  vorliegt. Zur Berechnung von  $\bar{Q}(\omega \rightarrow 0)$  müssen demnach alle Beiträge  $Q^{\text{st}}(t)$  über eine Periode  $t \in [0, T]$  mit  $T \rightarrow \infty$  berücksichtigt werden. Wir können also schreiben

$$\bar{Q}(\omega \rightarrow 0) = \frac{1}{2\tilde{V}} \int_{V-\tilde{V}}^{V+\tilde{V}} Q^{\text{st}}(U) dU. \quad (5.14)$$

Zur Überprüfung dieses Resultats ist in *Abbildung 5.27* die zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(R, \omega)$  für  $E = 0.1$ ,  $V = 1$ ,  $\tilde{V} = 2$  bis zu einem unteren Grenzwert  $\omega = 0.15$  (oben links) und die zeitgemittelte Streueffizienz für  $\omega = 0.15$  sowie im adiabatischen Grenzfall  $\bar{Q}(\omega \rightarrow 0, R)$  nach Gleichung (5.14) (oben rechts) dargestellt. Wir sehen, dass mit sinkendem  $\omega$  durch die Anregung höherer Energieniveaus die Resonanz der  $r_0$ -Mode des stationären Grenzfalls aufweicht, bis in der zeitgemittelten Streueffizienz ab  $\omega \lesssim 1$  ein neue Struktur entsteht. Diese ist im Wesentlichen durch drei starke Erhöhungen ausgezeichnet, die mit weiter sinkendem  $\omega$  zu kleineren Werten von  $R$  wandern, in ihrer Breite abnehmen und größere Werte von  $\bar{Q}$  aufweisen. Dieser Verlauf stimmt qualitativ mit dem Verlauf der Streueffizienz für  $\omega \rightarrow 0$  nach Gleichung (5.14) überein, siehe *Abbildung 5.27* oben rechts. Die Resonanzen wurden weiter verstärkt, in ihrer Breite vermindert und sind zu kleineren Werten von  $R$  gewandert. Zu sehen sind noch weitere, stark ausgeprägte Resonanzen, die vorher nicht vorhanden waren. Um den Kurvenverlauf und das Auftreten der Resonanzen zu verstehen, sind in *Abbildung 5.27* die

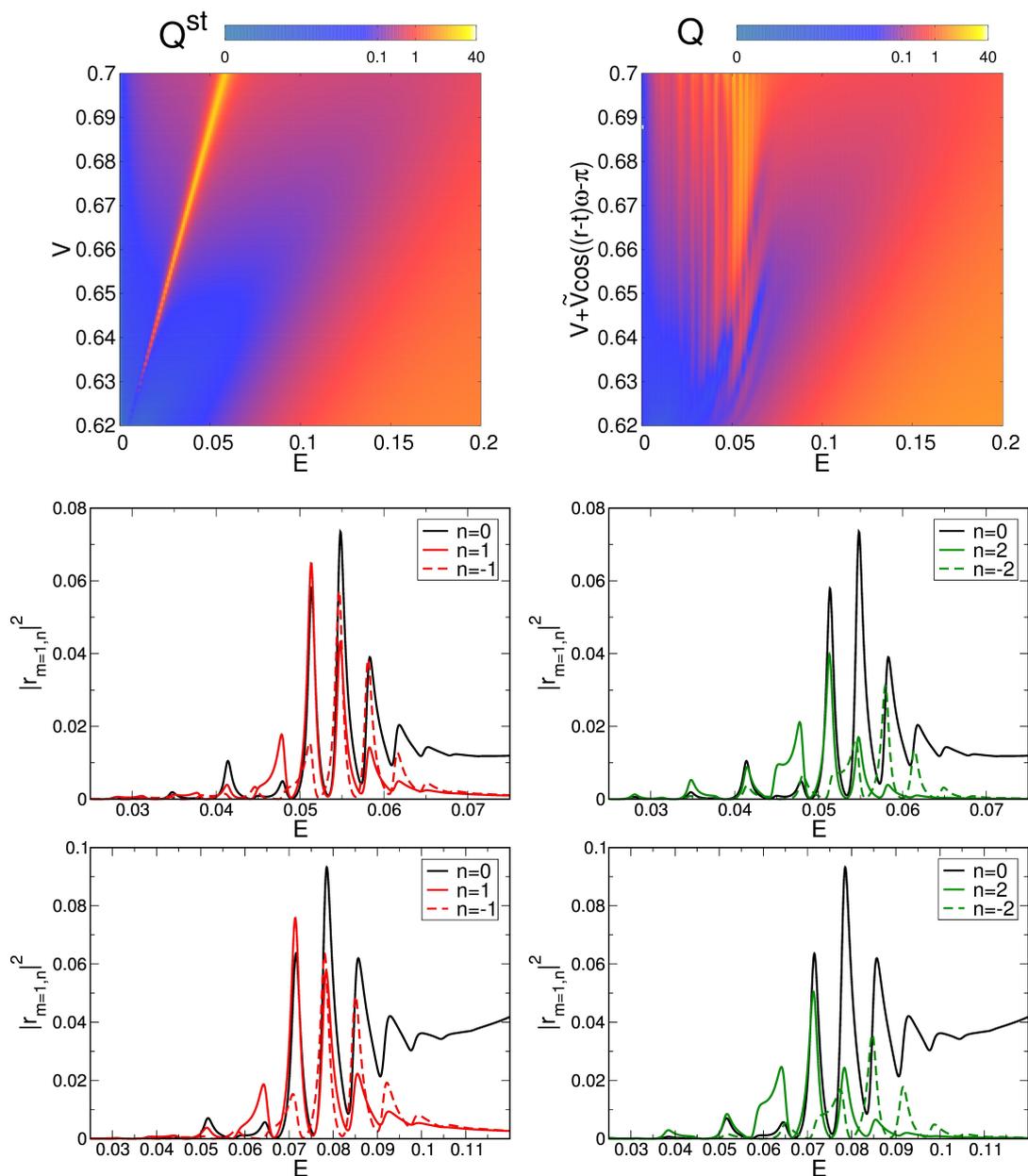


**Abbildung 5.27:** Oben links: Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(R, \omega)$  für  $E = 0.1$ ,  $V = 1$  und  $\tilde{V} = 2$ . Oben rechts: Zeitgemittelte Streueffizienz  $\bar{Q}(R)$  für  $\omega = 0.15$  (rot) und im adiabatischen Grenzfall  $\omega \rightarrow 0$  nach Gleichung (5.14) (schwarz) mit  $E = 0.1$ ,  $V = 1$  und  $\tilde{V} = 2$ ; eingezeichnet sind die Reflexionskoeffizienten, die für die entsprechende Resonanz verantwortlich sind. Unten: Stationäre Reflexionskoeffizienten  $|r_m^{\text{st}}(R, V)|^2$  mit  $m = 0$  (links) und  $m = 1$  (rechts) für  $E = 0.1$ .

ersten beiden stationären Reflexionskoeffizienten  $|r_m^{\text{st}}(R, V)|^2$  mit  $m = 0$  (unten links) und  $m = 1$  (unten rechts) für  $E = 0.1$  dargestellt. Die Kurvenverläufe der Reflexionskoeffizienten folgen der Bedingung  $VR = \text{const.}$ , die mit der Gleichung zur Lokalisierung der Resonanzstellen (5.5) zu erklären ist. Da sich die stationäre Streueffizienz in Gleichung (5.14) gemäß Gleichung (4.38) aus den Reflexionskoeffizienten zusammensetzt, ist eine eindeutige Zuordnung der auftretenden Resonanzen in  $\bar{Q}(\omega \rightarrow 0, R)$  mit dem Verlauf der Reflexionskoeffizienten möglich.

Einige Resonanzen rühren dabei von Partialwellen mit Drehimpulsquantenzahlen  $m > 1$  her, die der Übersichtlichkeit wegen nicht aufgeführt sind.

Um das Verhalten der Streueffizienz im adiabatischen Grenzfall weiter zu untersuchen, ist in *Abbildung 5.28* die stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(E, V)$  für  $R = 6.25$  der Streueffizienz  $Q(E)$  in Abhängigkeit von  $V + \tilde{V} \cos((r - t)\omega + \delta)$  mit  $R = 6.25$ ,  $V = 0.66$ ,  $\tilde{V} = 0.04$ ,  $\omega = 0.00333$  und  $\delta = -\pi$  gegenübergestellt. Im adiabatischen Grenzfall erwarten wir, dass für die Phase  $r_0 - t_0$  die zeitabhängige Streueffizienz den Wert der stationären Streueffizienz für  $V + \tilde{V} \cos((r_0 - t_0)\omega + \delta)$  aufweist. Daher wurde die Phase  $(r - t) \in [0, T]$  gewählt, um einen Vergleich der beiden Streueffizienzen anstellen zu können. Das linke Bild entspricht einem Ausschnitt von *Abbildung 5.4*, in dem die Resonanz der  $r_1$ -Mode als schmale Linie zu erkennen ist, während der homogene Bereich die Resonanz der  $r_0$ -Mode repräsentiert. Die Resonanzstruktur der zeitabhängigen Streueffizienz weist wie erwartet ein qualitativ ähnliches Verhalten auf, wobei jedoch wegen  $\omega > 0$  eine Modifikation der  $r_1$ -Mode entsteht. Um das Auftreten der Nebenresonanzen zu verstehen, sind in *Abbildung 5.28* die zugehörigen Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=1,n}(E)|^2$  für die Energiequantenzahlen  $n = 0, 1, -1$  und  $n = 0, 2, -2$  dargestellt (mittlere Bilder). Wir sehen, dass neben dem Energieniveau  $n = 0$  auch Reflexionskoeffizienten höherer Energieniveaus einen entscheidenden Beitrag zur Streueffizienz leisten, da  $\omega$  sehr klein gewählt wurde. Im adiabatischen Grenzfall werden alle Energieniveaus  $n \in [-\infty, \infty]$  gleichermaßen beteiligt sein, da dann der Quotient  $\tilde{V}/\omega$  divergiert. Die Kurven weisen ein oszillierendes Verhalten auf. Wir stellen dabei fest, dass die Maxima und Minima der einzelnen Kurven in einem bestimmten Energiebereich am größten sind und zudem einen konstanten Abstand zueinander besitzen. Nach Ablesen können wir diesen Abstand zu  $\Delta E \approx \omega$  bestimmen. Weiter stellt sich heraus, dass die Kurven zu entgegengesetzten Energieniveaus  $n \leftrightarrow -n$  ein qualitativ ähnlichen Verlauf zeigen und gegeneinander um  $\Delta E^{|n|} \approx n\omega$  verschoben sind, wobei jedoch kleine Abweichungen zu kleineren Werten der Energie auftreten. Diese Abweichungen sind umso größer, je größer das betrachtete Energieniveau  $|n|$  ist. Zum besseren Verständnis sind in *Abbildung 5.28* die Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=1,n}(E)|^2$  für die Werte  $\tilde{V} = 0.08$ ,  $\omega = 0.00666$  dargestellt (untere Bilder). Da der Quotient  $\tilde{V}/\omega$  gleich geblieben ist, ist etwa die gleiche Anzahl an Energieniveaus im gleichen Ausmaß an der Ausbildung der Resonanzen beteiligt. Wir können den oben beschriebenen Verlauf der Reflexionskoeffizienten auch in diesem Fall wiederfinden. Durch die Verdopplung der Kreisfrequenz wurde jedoch der Abstand der Maxima und Minima einer Kurve, sowie die Verschiebung der Reflexionskoeffizienten entgegengesetzter Energieniveaus verdoppelt. Außerdem ist der dominante Bereich der Reflexionskoeffizienten im Vergleich zu den oben



**Abbildung 5.28:** Oben: Stationäre Streueffizienz  $Q^{\text{st}}(V, E)$  (links) und zeitabhängige Streueffizienz  $Q(E)$  in Abhängigkeit von  $V + \tilde{V} \cos((r-t)\omega + \delta)$  mit  $\delta = -\pi$  (rechts) für  $R = 6.25$ . Mitte: Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=1,n}(E)|^2$  für Energiequantenzahlen  $n = 0, 1, -1$  (links) und  $n = 0, 2, -2$  (rechts) mit  $R = 6.25$ ,  $V = 0.66$ ,  $\tilde{V} = 0.04$  und  $\omega = 0.00333$ . Unten: Reflexionskoeffizienten  $|r_{m=1,n}(E)|^2$  für Energiequantenzahlen  $n = 0, 1, -1$  (links) und  $n = 0, 2, -2$  (rechts) mit  $R = 6.25$ ,  $V = 0.66$ ,  $\tilde{V} = 0.08$  und  $\omega = 0.00666$ .

betrachteten Fall zu höheren Energien verschoben, da ein größerer Wert für  $\tilde{V}$  vorliegt. Die Verschiebung der Resonanzkurven entgegengesetzter Energieniveaus

können wir mit Hilfe der Gleichung zur Lokalisierung der Resonanzstellen (5.5) verstehen. Aus ihr folgt bei vorgegebenem Radius  $R$  und Potential  $V$  für die Resonanz der Partialwelle mit  $m = 1$  in 2. Ordnung für die erste Nullstelle der Bessel-Funktion  $s = 0$  die Gleichung  $E_{\text{R}}^{\pm n} = \frac{2}{3} \left( V \mp n\omega - \frac{j_{1,0}}{R} \right)$ . Diese Gleichung liefert uns nicht die Resonanzstellen der Reflexionskoeffizienten aus *Abbildung 5.28*, da diese wegen der Oszillation des Quantenpunktes zu verschiedenen Potentialen korrespondieren. Allerdings kann mit ihr die Verschiebung der Resonanzstellen  $\Delta E_{\text{R}}^{|n|} = |E_{\text{R}}^n - E_{\text{R}}^{-n}|$  ermittelt werden. Es ergibt sich  $\Delta E_{\text{R}}^{|n|} = \frac{4}{3}n\omega$ , was uns eine Erklärung für den Abstand der Maxima der Reflexionskoeffizienten entgegengesetzter Energieniveaus liefert. Die sich bei der Überlagerung der Streukoeffizienten ausbildenden gröberen und feineren Nebenresonanzen in  $\bar{Q}$  können damit direkt mit der Quantisierung der Energie in Verbindung gebracht werden. Im adiabatischen Grenzfall  $\omega \rightarrow 0$  ist  $\Delta E_{\text{R}}^{|n|} = 0$  und die Maxima der Kurven rücken so weit zusammen, dass ein kontinuierlicher Verlauf für die Reflexionskoeffizienten resultiert. Dies entspricht dem Übergang von quantisierten Energieniveaus in ein Energiekontinuum, der für die Reproduktion der stationären Streueffizienz sorgt.

## 6 Zusammenfassung

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die theoretische Beschreibung von Streuung und Transmission relativistischer Elektronen durch statische und oszillierende Quantenpunkte in Graphen.

Aufgrund der besonderen Gitter- und Bandstruktur weisen Leitungs-Elektronen in Graphen in der Nähe eines Dirac-Punktes eine lineare Dispersion auf, die zu einer verschwindenden effektiven Masse führt. Zudem besitzt das  $\pi$ -Bindungs-Elektron eine Pseudospin-Quantenzahl, die die Zugehörigkeit zu einem der Untergitter des zweidimensionalen Bienenwabengitters angibt. Aufgrund dieses pseudorelativistischen Verhaltens können die niederenergetischen Elektronen durch eine masselose Dirac-Gleichung (Weyl-Gleichung) beschrieben werden, wobei der reale Spin des Elektrons zunächst vernachlässigt wird. Somit bildet die Weyl-Gleichung unter Einbezug eines (oszillierenden) kreisförmigen Stufenpotentials die Grundlage zur Beschreibung von Transportprozessen durch Graphen Quantenpunkte.

Für die Analyse der Streuung einer einfallenden ebenen Elektronenwelle am Quantenpunkt wurden die Wellenfunktionen in denen durch das Potential abgegrenzten Raumbereichen formuliert. Dazu lösten wir die zeitunabhängige Dirac-Gleichung in Polarkoordinaten und entwickelten einfallende, reflektierte und transmittierte Wellenfunktion in Partialwellen. Da die Streuung am oszillierenden Quantenpunkt inelastisch ist, führten wir nach Abseparation des Zeitanteils der zeitabhängigen Dirac-Gleichung eine Superposition von Energieeigenzuständen durch. Die Forderung nach Stetigkeit der zeitabhängigen Wellenfunktionen lieferte uns schließlich die Bestimmungsgleichung der in den Wellenfunktionen enthaltenen komplexen Streuamplituden und hat zudem eine Quantisierung der Energien zur Folge. Die zentralen Größen zur Charakterisierung des Streuverhaltens sind die Streueffizienz und die Winkelverteilung der radialen Wahrscheinlichkeitsstromdichte der reflektierten Welle, die wir ausgehend von der Kontinuitätsgleichung berechneten.

Bei der Streuung am statischen Quantenpunkt kann es wegen der Zustände negativer Energie zur resonanten Anregung einzelner Partialwellen kommen, die zu starken Erhöhungen in der Streueffizienz führen. Die Lokalisierung der Reso-

---

nanzstellen gelingt mit der Entwicklung der Streukoeffizienten für kleine Energien und Radian, wobei die Streukoeffizienten um die Resonanzstelle herum die Form einer Lorentz-Kurve aufweisen. Resonanzen einzelner Partialwellen haben quasigebundene Zustände im Quantenpunkt zur Folge und zeigen sich in einer kosinusförmigen Abstrahlcharakteristik, die mit einer Wirbelbildung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte im Quantenpunkt korreliert. Bei Überlagerung mehrerer Partialwellen sind keine quasigebundenen Zustände zu beobachten. Senkrecht einfallende Anteile der Elektronenwelle können den Quantenpunkt ungehindert durchdringen (Klein-Tunneln).

Die Oszillation des Quantenpunkts führt zur periodischen Zeitabhängigkeit der Streugrößen und hat die Anregung von Partialwellen höherer Energieniveaus in Form ganzzahliger Vielfache der Kreisfrequenz zur Folge. Die Anzahl beteiligter Energieniveaus wird dabei im Wesentlichen durch das Verhältnis von Schwingungsamplitude zu Kreisfrequenz bestimmt. Während für sehr kleine Energien und Potentialhöhen die Streueffizienz am statischen Quantenpunkt verschwindet, kann ein zum Dirac-Punkt symmetrisch oszillierender Quantenpunkt durch Anregung höherer Energieniveaus endliche Werte der Streueffizienz verursachen. Dabei ist stets eine Vorwärtsstreuung mit Ausbildung quasigebundener Zustände im Quantenpunkt vorzufinden, da nur die Partialwelle des niedrigsten Drehimpulseigenwertes  $m = 0$  resonant ist. Weiter treten für bestimmte Kreisfrequenzen Fabry-Pérot-Resonanzen auf, die auf stehende Wellen angeregter Energieniveaus zurückzuführen sind und zum Verschwinden der Streueffizienz führen. Die Resonanzstrukturen der Streugrößen, die für den statischen Quantenpunkt vorzufinden sind, werden für genügend kleine Schwingungsamplituden (stationärer Grenzfall) oder genügend große Kreisfrequenzen (quasistatischer Grenzfall) des Quantenpunkts reproduziert. Außerhalb dieser Grenzfälle findet durch die Interferenz von Partialwellen höherer Energieniveaus eine Modifikation der Resonanzstrukturen statt, die sich in einer Verbreiterung und Abschwächung der Resonanzen, sowie der Auflösung der kosinusförmigen Abstrahlcharakteristik äußert. Die Streuung an einem oszillierenden Quantenpunkt mit verschwindender Kreisfrequenz kann als ein adiabatischer Prozess verstanden werden, bei dem zu jedem Zeitschritt die Streuvorgänge wie an einem statischen Quantenpunkt ablaufen. Klein-Tunneln ist auch für oszillierende Quantenpunkte präsent.

Die Annahme des Kontinuumsmodells mit linearer Dispersion ist für hohe Energien bzw. hohe Anregungsenergien durch den Quantenpunkt nicht mehr gerechtfertigt. Der Einbezug der Streueffekte zwischen den Dirac-Punkten (*intervalley-scattering*) in das theoretische Modell ist daher notwendig. Des Weiteren wurde der intrinsische Spin des Elektrons bisher vernachlässigt. Für kleine Energien soll-

te jedoch die Spin-Bahn-Kopplung einen merklichen Effekt auf das Streuverhalten haben und daher mitberücksichtigt werden. In diesem Zusammenhang ist auch eine Ausweitung der Problemstellung auf doppelschichtiges Graphen naheliegend. Hinsichtlich der Bedeutung für Graphen-basierte Nano-Elektronik, Plasmonen und Photonik ist eine Fortführung dieser Arbeit lohnenswert.

# Anhang - Fall symmetrischer Streukoeffizienten

Wir werden im Folgenden mit Hilfe der asymptotischen Darstellungen der Bessel-Funktionen (Referenz)

$$J_m(kR) \underset{kR \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{m!} \left(\frac{kR}{2}\right)^m, \quad Y_m(kR) \underset{kR \rightarrow 0}{\sim} \begin{cases} \frac{2}{\pi} [\ln(\frac{kR}{2}) + \gamma] & m = 0 \\ -\frac{(m-1)!}{\pi} \left(\frac{2}{kR}\right)^m & m > 0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

die Streukoeffizienten des stationären Grenzfalls (3.59) und (3.61) für  $E \rightarrow 0, V \rightarrow 0$  entwickeln.

Für die Funktionen  $f_m^{(n,p)}$  und  $g_m^{(0)}$  aus Abschnitt 3.3 bekommen wir wegen Gleichung (3.88)

$$f_m^{(n,p)} = H_{m+1}(k_n R) J_m(k_p R) - \alpha_n \alpha'_p H_m(k_n R) J_{m+1}(k_p R), \quad (\text{A.2})$$

$$g_m^{(0)} = J_m(k_0 R) H_{m+1}(k_0 R) - \alpha J_{m+1}(k_0 R) H_m(k_0 R). \quad (\text{A.3})$$

Nach Einsetzen der Asymptotik aus Gleichung (A.1) in Gleichung (A.3) und (A.2) ergibt sich in führender Ordnung

$$g_m^{(0)} \underset{k_0 R \rightarrow 0}{\sim} -\text{sgn}(k_0) \frac{i}{\pi} \frac{2}{k_0 R} \quad (\text{A.4})$$

und

$$f_m^{(0,p)} \sim -\text{sgn}(k_0) i \frac{m!}{\pi} \left(\frac{2}{k_0 R}\right)^{m+1} J_m(k_p R), \quad f_m^{(n,0)} \sim H_{m+1}(k_n R) \frac{1}{m!} \left(\frac{k_0 R}{2}\right)^m. \quad (\text{A.5})$$

für  $p \neq 0$  bzw.  $n \neq 0$ . Die Funktionen  $f_m^{(n,p)}$  erfüllen wegen den Gleichungen (A.2) und (A.5) die Eigenschaften

$$f_m^{(-n,0)} = f_m^{(n,0)*}, \quad f_m^{(-n,-n)} = f_m^{(n,n)*} \quad \forall n \neq 0 \quad (\text{A.6})$$

und

$$f_m^{(0,-p)} = f_m^{(0,p)} \quad \forall p. \quad (\text{A.7})$$

Die Funktion  $\xi_m$  aus Gleichung (3.60) schreibt sich nach Ausnutzen der Gleichungen (A.4) und (A.5) als

$$\xi_m = 2\text{Re} \left\{ \frac{H_{m+1}(k_1 R)}{f_m^{(1,1)}} \right\} J_m(k_1 R) J_1 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right)^2 + J_0 \left( \frac{\tilde{V}}{\omega} \right)^2. \quad (\text{A.8})$$

Mit den Gleichungen (A.5) und (A.8) haben wir schließlich die Streukoeffizienten entwickelt. Wir erkennen, dass

$$t_{m,0} \sim \xi_m^{-1}, \quad t_{m,\pm 1} \sim \left( \frac{k_0 R}{2} \right)^m \xi_m^{-1} \quad (\text{A.9})$$

und

$$r_{m,0} \sim \frac{J_m(k_0 R)}{H_m(k_0 R)} \sim \begin{cases} [\ln(\frac{k_0 R}{2}) + \gamma]^{-1} & \text{für } m = 0 \\ (\frac{k_0 R}{2})^{2m} & \text{für } m > 0 \end{cases}, \quad r_{m,\pm 1} \sim \left( \frac{k_0 R}{2} \right)^m \xi_m^{-1}. \quad (\text{A.10})$$

# Literaturverzeichnis

- [1] O. KLEIN, *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
- [2] N. D. A. CALOGERACOS, *Contemp.Phys.* **40**, 313 (1999).
- [3] T. TUDOROVSKIY, K. J. A. REIJNDERS, and M. I. KATSNELSON, *Phys. Scr.* **T146**, 014010 (2012).
- [4] P. A. M. DIRAC, *Proceedings of the Royal Society of London* **117**, 610 (1928).
- [5] F. SCHWABL, *Quantenmechanik*, Springer, 1993.
- [6] L. D. LANDAU, *Quantenmechanik*, Akademie-Verlag, 1965.
- [7] S. GASIOROWICZ, *Quantenphysik*, Oldenburg, 2005.
- [8] M. I. KATSNELSON, K. S. NOVOSELOV, and A. K. GEIM, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [9] B. H. ET AL., *Phys. Rev. Lett.* **98**, 236803 (2007).
- [10] R. V. GORBACHEV, A. S. MAYOROV, A. K. SAVCHENKO, D. W. HORSELL, and F. GUINEA, *Nano Lett.* **8**, 1995 (2008).
- [11] N. S. ET AL., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026807 (2009).
- [12] A. F. YOUNG and P. KIM, *Nat. Phys.* **5**, 222 (2009).
- [13] A. H. C. NETO, F. GUINEA, N. M. R. PERES, K. S. NOVOSELOV, and A. K. GEIM, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [14] P. E. ALLAIN and J. FUCHS, *Eur. Phys. J. B* **83**, 301 (2011).
- [15] V. V. CHEIANOV and V. I. FAL'KO, *Physical Review B* **74**, 045424 (2006).
- [16] C. W. J. BEENAKKER, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1337 (2008).

- [17] V. M. F. M. P. J. MILTON PEREIRA, JR. and P. VASILOPOULOS, *Physical Review B* **74**, 041403 (2006).
- [18] M. M. ASMAR and S. E. ULLOA, *Physical Review B* **87**, 075420 (2013).
- [19] C. L. KANE and E. J. MELE, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [20] J. B. MING-HAO LIU and K. RICHTER, *Physical Review B* **85**, 085406 (2012).
- [21] M. T. J. H. BARDARSON and P. W. BROUWER, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 226803 (2009).
- [22] C. SCHULZ, *Klein-Tunneln in Graphen*, Bachelorarbeit, Greifswald, 2012.
- [23] F. X. B. R. L. HEINISCH and H. FEHSKE, *Physical Review B* **87**, 155409 (2013).
- [24] R. L. H. A. PIEPER and H. FEHSKE, *Europhys. Lett.* **104**, 47010 (2013).
- [25] G. W. A. PIEPER, R. L. HEINISCH and H. FEHSKE, *Physical Review B* **89**, 165121 (2014).
- [26] G. MIE, *Ann. Phys. (Leipzig)* **25**, 377 (1908).
- [27] U. FANO, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [28] V. G. VESELAGO, *Sov. Phys. Usp.* **10**, 509 (1968).
- [29] Y. M. B. B. TRAUZETTEL and A. F. MORPURGO, *Physical Review B* **75**, 035305 (2007).
- [30] M. T. M. AHSAN ZEB, K. SABEEH, *Physical Review B* **78**, 165420 (2008).
- [31] W. H. SERGEY E. SAVEL'EV and P. HÄNGGI, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 226602 (2012).
- [32] H. S. PABLO SAN-JOSE, ELSA PRADA and S. KOHLER, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 153506 (2012).
- [33] H. P. OJEDA-COLLADO and C. RODRIGUEZ-CASTELLANOS, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 033110 (2013).
- [34] F. SCHWABL, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*, Springer, 1997.
- [35] P. R. WALLACE, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).

- [36] W. PAULI, *The European physical journ.* **43**, 601 (1927).
- [37] E. NOETHER, *Gött. Nachr.* , 235 (1918).
- [38] A. GEIM and P. KIM, *Scientific American* **298**, 90 (2008).
- [39] J. N. FUCHS and M. O. GOERBIG, *Pour la Science* **367**, 36 (2008).
- [40] V. ARIEL and A. NATAN, *arXiv* **1206.6100v2** (2012).
- [41] R. S. T. ANDO, T. NAKANISHI, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 2857 (1998).
- [42] A. C. LÓRÁNT ZS. SZABÓ, MIHÁLY G. BENEDICT and P. FÖLDI, *Phys. Rev.* **B 88**, 075438 (2013).
- [43] R. HEINISCH, *Persönliche Mitteilungen*.
- [44] W. MAGNUS and F. OBERHETTINGER, *Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der mathematischen Physik*, Springer, 1948.
- [45] J. A. STRATTON, *Electromagnetic Theory*, IEEE Press, 2007.
- [46] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING, and B. P. FLANNERY, *Numerical Recipes in Fortran 77*, Cambridge University Press, 1996.



# Danksagung

Ich bedanke mich abschließend bei allen Personen, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben. Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Fehske, der mich unermüdlich mit seinen Ratschlägen und Hinweisen unterstützte. Auch danke ich Rafael Heinisch, der mir in der Frühphase der Arbeit stets zur Seite stand. Ich bedanke mich auch bei meinen Mitarbeitern Bernd Zenker und Mathias Pamperin, die mir bei vielen kleineren Problemen geholfen haben.

Den größten Dank schulde ich jedoch meinen Eltern, ohne die diese Arbeit niemals entstanden wäre.



# Erklärung

Ich, Christian Schulz, versichere, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbständig verfasst und keine anderen Hilfsmittel als die angegebenen verwendet habe. Die Stellen, die anderen Werken dem Wortlaut oder dem Sinne nach entnommen sind, habe ich in jedem Falle durch Angaben der Quelle, auch der Sekundärliteratur, als Entlehnung kenntlich gemacht.

Greifswald, \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_  
Unterschrift