

Hustota elektrónových stavov v kove so slabým disorderom a slabou elektrón-elektrónovou interakciou: Jav Altshulera-Aronova

Diplomová Práca

Matúš Jenča

Fakulta matematiky, Fyziky a Informatiky

May 30, 2022

Vedúci práce: Doc. RNDr. Martin Moško, DrSc.
Konzultant: RNDr. Antónia Mošková, CSc.

- Interagujúce elektróny v čistom kove: Hartreeho - Fockova aproximácia pre model žele
- Elektrón-elektrónová interakcia v kove s disorderom : Jav Altshulera - Aronovova
- Meranie hustoty stavov v kove s disorderom metódou tunelovej spektroskopie
- Altshuler - Aronovov jav, rozšírenie teórie na energie $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \gtrsim \hbar/\tau$
- Výsledky a ich diskusia

Interagujúce elektróny v čistom kove: Hartreeho - Fockova aproximácia pre model žele

- Pre neinteragujúci elektrón máme Schrödingerovu rovnicu voľnej častice, ktorej riešením je DeBroglieho rovinná vlna

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{1}{V}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{E(k)t}{\hbar})}, \quad (1)$$

- Energia voľnej častice je $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- Pre koncentráciu elektrónov platí

$$n_e \equiv \frac{N}{L_x L_y L_z} = 2 \frac{1}{8\pi^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^\infty dk k^2 f(k), \quad (2)$$

kde $f(k)$ je Fermiho distribúcia.

- Po úpravách (2) definujeme hustotu stavov $\rho(E)$

$$n_e = \int_0^\infty dE \rho(E) f(E) \quad \text{kde} \quad \rho(E) = \frac{1}{\pi^2} \frac{dk}{dE} k^2, \quad (3)$$

- pre voľné častice

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} (2m_e/\hbar^2)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (4)$$

- pri $T = 0$ elektróny obsadzujú stavy vo vnútri Fermiho sféry. Polomer Fermiho sféry je Fermiho vlnový vektor

$$k_F = (3\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}}, \quad (5)$$

- energia na Fermiho sfére (Fermiho Energia) je

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{\frac{2}{3}}}{2m_e}. \quad (6)$$

- Mnohočasticový Hamiltonián elektrónov ktoré interagujú s mriežkou jednonásobne ionizovaných iónov a vzájomne cez Coulombovskú interakciu

$$\hat{H} = \sum_i \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i - \sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \quad (7)$$

- Riešenie Sch. R. s hamiltoniánom (7) v Hartree-Fockovom priblížení variačnou metódou

$$E[\Psi^*] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (8)$$

- vlnové funkcie Ψ v tvare Slaterovho determinantu

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1, \dots, \vec{r}_n, s_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1, s_1) & \dots & \phi_1(\vec{r}_N, s_N) \\ \dots & \phi_i(\vec{r}_j, s_j) & \dots \\ \phi_N(\vec{r}_1, s_1) & \dots & \phi_N(\vec{r}_N, s_N) \end{vmatrix}, \quad (9)$$

- Variačnou metódou dostaneme Hartree-Fockove rovnice

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U^{ion}(\vec{r}) + U^{el}(\vec{r}) - \sum_j' \int d\vec{r}' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}-\vec{r}'|} \phi_j^*(\vec{r}')\phi_i(\vec{r}') \frac{\phi_j(\vec{r}')}{\phi_i(\vec{r}')} \right] \phi_i(\vec{r}) = E_i \phi_i(\vec{r}), \quad (10)$$

kde

$$U^{el}(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \sum_j |\phi_j(\vec{r}')|^2 \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad \text{a} \quad U^{ion}(\vec{r}) = - \sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_j|} \quad (11)$$

- V modeli žele sa členy $U^{el}(\vec{r})$ a $U^{ion}(\vec{r})$ vzájomne nulujú a dostávame Fockove rovnice, ktorých riešeniami sú rovinné vlny:

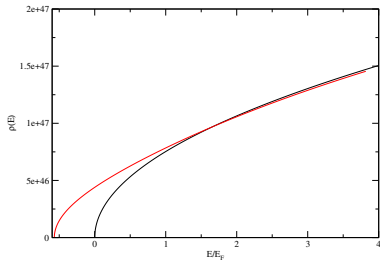
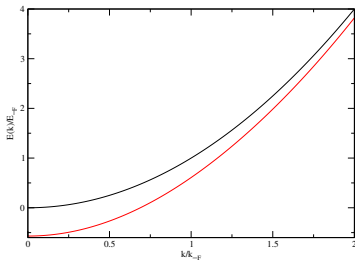
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{e^2}{V^{3/2}4\pi\epsilon_0} \sum_{\vec{k}'}' \int d\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} = E(\vec{k}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (12)$$

Fockova rovnica (12) neberie do úvahy coulombovské korelácie. Vezmeme ich do úvahy zámenou

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \rightarrow \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-k_s|\vec{r}-\vec{r}'|}, \quad (13)$$

kde $k_s^2 = e^2 \rho(E_F) / \varepsilon_0$ je tieniaci vektor. Dostávame disperzný zákon

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{(2\pi)^2 \varepsilon_0} \left(\frac{k_F^2 - k^2 + k_s^2}{4k} \ln \frac{(k_F + k)^2 + k_s^2}{(k_F - k)^2 + k_s^2} - k_s \left(\arctan \frac{k_F + k}{k_s} + \arctan \frac{k_F - k}{k_s} \right) + k_F \right). \quad (14)$$



Panel vľavo: červená čiara ukazuje disperzný zákon podľa rovnice (14), čierna čiara ukazuje parabolický disperzný zákon neinteragujúcich elektrónov. Panel vpravo: červená a čierna čiara zobrazujú zodpovedajúce hustoty stavov.

Elektrón-elektrónová interakcia v kove s disorderom : Jav Altshulera - Aronovova

- Elektrón v disorderovanom kove bez e-e interakcie je popísaný Sch. R.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{dis}(\vec{r})\right)\phi_m^{(0)}(\vec{r}) = \mathcal{E}_m\phi_m^{(0)}(\vec{r}), \quad (15)$$

- Započítaním e-e interakcie v modeli žele dostaneme Fockovu rovnicu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{dis}(\vec{r})\right)\phi_m(\vec{r}) - \sum_{\forall m'} \int d\vec{r}' \phi_{m'}^*(\vec{r}')\phi_m(\vec{r}')V(\vec{r}-\vec{r}')\phi_{m'}(\vec{r}) = E_m\phi_m(\vec{r}). \quad (16)$$

- Problém (16) riešime v prvom ráde poruchovej teórie. $\phi_m(\vec{r}) \simeq \phi_m^{(0)}(\vec{r})$
- Pre stredný disorder dostaneme

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(q) \overline{|\langle \phi_m | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|^2}. \quad (17)$$

- poruchová teória platí len pre $q < q_{max} = \frac{A}{l}$ kde $A \simeq 1$ a l je stredná voľná dráha elektrónu. Pre $q > q_{max}$ aproximujeme $\phi_m(\vec{r})$ rovinnými vlnami.

- Potrebujeme vypočítať maticový element

$$\overline{|M_{mm'}|^2} = \overline{|\langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|^2}. \quad (18)$$

- Altshuler a Aronov použili difúznú aproximáciu, ktorá spočíva v postulovaní rovnice

$$\overline{\psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}, \quad (19)$$

- vlnovú funkciu častice z rovnice (19) rozvineme do stacionárnych stavov $\phi_m(\vec{r})$

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{\sqrt{V}}{\sqrt{N}} \sum_m \phi_m^*(\vec{r}_0) \phi_m(\vec{r}) e^{-i\frac{\mathcal{E}_m}{\hbar} t}, \quad (20)$$

- Difúzna aproximácia platí len za predpokladu $|\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_{m'}| \ll \hbar/\tau$
- Z difúznej aproximácie sa dá pre maticový element odvodiť výsledok

$$\overline{|M_{\mathcal{E}, \mathcal{E}'}|^2} = \frac{1}{\pi \rho(\mathcal{E}')} \frac{\hbar D q^2}{(\mathcal{E} - \mathcal{E}')^2 + (\hbar D q^2)^2}, \quad (21)$$

- rovnicu (17) zapíšeme v tvare

$$E(\mathcal{E}) = \mathcal{E} + E_{self}(\mathcal{E}) \quad (22)$$

kde

$$E_{self} = - \int_0^{\mathcal{E}_F} d\mathcal{E}' \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^4} V(q) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2) + (\mathcal{E} - \mathcal{E}')} , \quad (23)$$

- Rovnicu (22) derivujeme podľa počtu stavov a dostaneme

$$\frac{dE(\mathcal{E})}{dn} = \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{dn} = \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} \frac{d\mathcal{E}}{dn} = \frac{d\mathcal{E}}{dn} \left(1 + \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}\right). \quad (24)$$

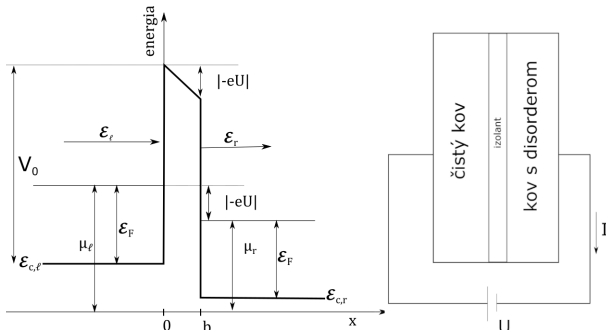
- otočením oboch strán poslednej rovnice dostaneme hustotu stavov

$$\rho(\mathcal{E}) \simeq \rho_0(\mathcal{E}) \left[1 - \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}\right] \simeq \rho_0(\mathcal{E}_F) \left[1 - \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}\right]. \quad (25)$$

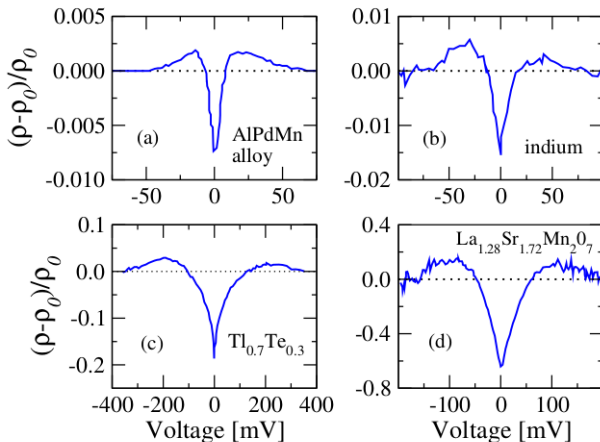
- Dosadením self energie dostaneme Altshulero-Aronovov výsledok

$$\rho(\mathcal{E}) = \rho_0(\mathcal{E}_F) - \frac{q_{max}}{2\pi^3 \hbar D} + \frac{1}{2\pi^2 (2\hbar D)^{3/2}} \sqrt{|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|}. \quad (26)$$

Meranie hustoty stavov v kove s disorderom metódou tunelovej spektroskopie



Hustotu stavov určíme meraním diferenciálnej vodivosti dvoch kovov oddelených tenkou vrstvou izolantu, ako je ukázané na obrázku. Dá sa ukázať, že pre diferenciálnu vodivosť platí vzťah $G(U) = e^2 \frac{4\pi |t|^2}{h} \rho_l(\mathcal{E}_F) \rho_r(\mathcal{E} = \mathcal{E}_F - eU)$, kde $\rho_r(\mathcal{E})$ je hľadaná hustota stavov, ktorú chceme odmerať.



Výsledky merania hustoty stavov tunelovou spektroskopiou pre rôzne kovy V blízkom okolí Fermiho energie všetky ukázané spektrá vykazujú Altshuler-Aronovov jav $\rho(|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|) \propto \sqrt{|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|}$. Ďaleko od Fermiho energie už Altshuler-Aronovova závislosť $\rho(|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|) \propto \sqrt{|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|}$ očividne neplatí a pre dostatočne veľké hodnoty $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|$ vidno, že $\rho(|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|)$ s rastúcim $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|$ klesá k ρ_0 zhora.

Altshuler - Aronovov jav, rozšírenie teórie na energie

$$|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \gtrsim \hbar/\tau$$

- Altschuler-Aronovov výsledok platí len pre energie $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| < \hbar/\tau$
- Z AA výsledku vidno že $\rho(\mathcal{E}) = \rho_0$ pre $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| = U_{co}$, kde

$$U_{co} = \frac{8}{3\pi^2} q_{max}^2 \rho^2 \frac{\hbar}{\tau} \quad (27)$$

je korelačná energia

- Pre $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \gtrsim U_{co}$ experiment ukazuje, že stavy vytlačené z oblasti $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \lesssim U_{co}$ majú tendenciu sa nakopiť tesne nad energiou $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| = U_{co}$ v oblasti veľkosti dva a až tri krát U_{co} .
- Pokiaľ je nám známe, tak tento experimentálny výsledok (najmä fakt, že pre $|E - E_F| > U_{co}$ hodnota $\rho(\mathcal{E})$ hodnotu ρ_0 najprv prevýši a až potom k nej konverguje zhora) nemá oporu v dostupných teóriach.
- preto sa pokúsime teóriu rozšíriť do oblasti $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \gtrsim U_{co}$

- vychádzame z Fockovej rovnice

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(q) |\overline{\langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle}|^2. \quad (28)$$

kde $V(q) = e^2 / \epsilon_0 (q^2 + k_s^2)$.

- pre $q > q_{max} \simeq 1/l$ aproximujeme vlnové funkcie $\phi_m(\vec{r})$ rovinnými vlnami $\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}}$, zatiaľčo pre $q < q_{max}$ aproximujeme $\phi_m(\vec{r})$ vlnovými funkciami elektrónov interagujúcich len s disorderom:

$$\begin{aligned} \overline{E_m} = & \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(q) |\overline{\langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle}|^2 \\ & - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| > q_{max}} d\vec{q} V(q) |\overline{\langle k_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | k_{m'} \rangle}|^2. \end{aligned} \quad (29)$$

kde $|k_m \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}}$

- Rovnicu (29) prepíšeme do tvaru

$$\overline{E_m} = \mathcal{E}_m + E_{self}^{AA}(m) - E_{self}^{free}(m), \quad (30)$$

kde

$$\mathcal{E}_m = \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(q) | \langle k_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | k_{m'} \rangle |^2 \quad (31)$$

je energia voľného elektrónu interagujúceho s ostatnými cez tienenu Fockovu e-e interakciu,

$$E_{self}^{AA}(m) = - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(q) | \langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle |^2 \quad (32)$$

je Altshuleroва-Aronovova self energia

$$E_{self}^{free}(m) = - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(q) | \langle k_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | k_{m'} \rangle |^2, \quad (33)$$

je self-energia pochádzajúca z Fockovho príspevku od rovinných vln

- Počítame (32). Altshuler a Aronov počítali v difúznej aproximácii, my zvolíme iný postup.

- vlnové funkcie $\phi_m(\vec{r})$ rozviníme do úplneho systému rovinných vln

$$\phi_m(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^m e^{i\vec{k}\vec{r}}.$$

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{(2\pi)^3 \Omega^2} \times \int_{|\vec{q}| < q_{max} d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_3} \int d\vec{r} c_{\vec{k}_1}^{m*} c_{\vec{k}_3}^{m'} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{k}_3\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{k}_4} \int d\vec{r}' c_{\vec{k}_4}^{m'*} c_{\vec{k}_2}^m e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} e^{-i\vec{k}_4\cdot\vec{r}'} e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}'} . \quad (34)$$

- Využijeme vzťahy

$$\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{i(\vec{k}_1 + \vec{q} - \vec{k}_3)\vec{r}} = \delta_{\vec{k}_3, \vec{k}_1 + \vec{q}} \quad , \quad \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}' e^{i(\vec{k}_2 - \vec{q} - \vec{k}_4)\vec{r}'} = \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_4 + \vec{q}} . \quad (35)$$

- Po vysumovaní dostaneme

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \overline{c_{\vec{k}+\vec{q}}^{*m} c_{\vec{k}'+\vec{q}}^m} c_{\vec{k}}^{*m'} c_{\vec{k}}^{m'}. \quad (36)$$

- Začínáme robiť aproximácie. Stav m a m' považujeme za nekorelované.
- Navyše predpokladáme, že aj stavy \vec{k} a \vec{k}' sú nekorelované.
- rovniciu (36) pomocou aproximácií zjednodušíme na

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}} \overline{c_{\vec{k}+\vec{q}}^{*m} c_{\vec{k}+\vec{q}}^m} \overline{c_{\vec{k}}^{*m'} c_{\vec{k}}^{m'}}. \quad (37)$$

- Využijeme Thoulessov Ansatz - tzv. self konzistentnú Bornovu aproximáciu

$$\overline{c_k^{m*}} c_k^m = \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_m)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_m - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2}, \quad (38)$$

kde τ je semiklasický elektrónový zrážkový čas pre rozptyl na prímesnom disorderi.

- Thouless [22] použil aproximáciu (38) pri opise vlnových funkcií neusporiadaného elektrónového systému v kvantovej vodivosti Kuba - Greenwooda
- Ukázal, že aproximácia (38) spôsobí, že kvantová vodivosť Kuba - Greenwooda prejde na klasickú Drudeho vodivosť
- Naše odvodenie self-energie $E_{self}^{AA}(m)$ sa opiera o tie isté aproximácie, ako použil Thouless

- do rovnice pre $E_{self}^{AA}(m)$ dosadíme Thoulessov ansatz a prejdeme od sumy k integrálu

$$E_{self}^{AA}(\varepsilon_m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) \int d\varepsilon_k \rho(\varepsilon_k) \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon_{m'} \rho(\varepsilon_{m'}) \frac{1}{\pi \rho(\varepsilon_m)} \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_m - \varepsilon_k)^2 + \varepsilon_\tau^2} \frac{1}{\pi \rho(\varepsilon_{m'})} \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_{m'} - \varepsilon_{|\vec{k}+\vec{q}|})^2 + \varepsilon_\tau^2}. \quad (39)$$

kde $\varepsilon_\tau \equiv \frac{\hbar}{2\tau}$ a $\varepsilon_{|\vec{k}+\vec{q}|} \equiv \frac{\hbar^2 |\vec{k}+\vec{q}|^2}{2m}$.

- Hustota stavov $\rho(\varepsilon'_m)$ sa vykrátí, ale hustoty stavov $\rho(\varepsilon_k)$ a $\rho(\varepsilon_m)$ nie. Napriek tomu ich kvôli jednoduchosti približne vykrátíme.
- po prechode do sférických súradníc pri integrovaní cez $d\vec{q}$ dostávame

$$E_{self}^{AA}(\varepsilon_m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\pi^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{q_{max}} dq q^2 V(q) \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon_{m'} \int_0^\infty d\varepsilon_k \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_m - \varepsilon_k)^2 + \varepsilon_\tau^2} \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_k + \varepsilon_q + 2\sqrt{\varepsilon_k \varepsilon_q} \cos(\theta) - \varepsilon_{m'})^2 + \varepsilon_\tau^2}. \quad (40)$$

- Integrál cez $d\phi$ je 2π , integrály cez $d\varepsilon_m$ a $d\theta$ vieme vypočítať analyticky, a zvyšné dva budeme rátať numericky

- po vystredovaní rovnice (30) $\frac{1}{\rho(\varepsilon)} \sum_{\forall m} \delta(\varepsilon - \varepsilon_m)$ rovnica (30) prejde na tvar

$$\bar{E} = \mathcal{E}(\varepsilon) + E_{self}^{AA}(\varepsilon) - E_{self}^{free}(\varepsilon). \quad (41)$$

- dostaneme hustotu stavov

$$\rho(\mathcal{E}) = \rho_0(\mathcal{E}) \left[1 - \frac{dE_{self}^{AA}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} + \frac{dE_{self}^{free}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} \right], \quad (42)$$

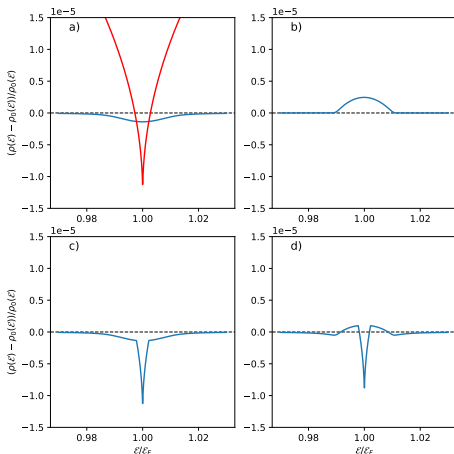
- hustotu stavov plotujeme v tvare relatívnej odchýlky

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})} = - \frac{dE_{self}^{AA}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} + \frac{dE_{self}^{free}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}, \quad (43)$$

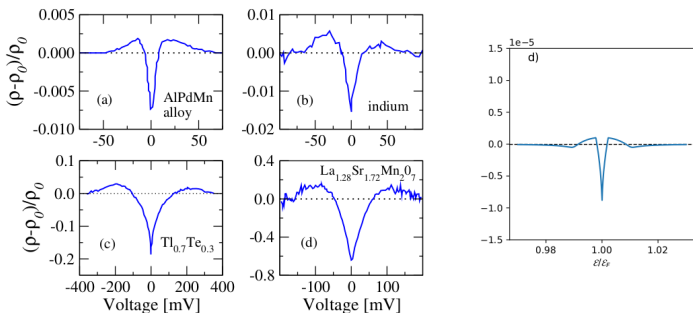
- v tomto tvare prepíšeme aj pôvodný vzťah Altschulera a Aronova

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})} = - \frac{e^2}{\varepsilon_0 k_s^2} \frac{q_{max}}{2\pi^3 \hbar D} + \frac{e^2}{\varepsilon_0 k_s^2} \frac{1}{2\pi^2 (2\hbar D)^{3/2}} \sqrt{|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|}, \quad (44)$$

Výsledky a ich diskusia



Panel (a): Krivka ukázaná červenou farbou je pôvodná závislosť Altshulera - Aronova (44). krivka ukázaná modrou farbou ukazuje prvý člen numerického výpočtu (43). Panel (c) ukazuje obidva grafy z panelu (a) este raz, avšak "zošité" približne v energii $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| = U_{co}$. Panel (b) ukazuje druhý člen (43). Panel (d) ukazuje celkovú závislosť $\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})}$, získanú sčítaním grafov v paneloch (b) a (c).



Porovnanie nášho teoretického výsledku s experimentálnymi výsledkami.
Na obrázku je vidieť kvalitatívnu podobnosť s experimentom.

- v tejto práci sme teoreticky študovali Altshulero-Aronovov jav.
- teóriu Altshulera-Aronova, ktorá platí pre energie $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \lesssim \hbar/\tau$ sme rozšírili na energie $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \gtrsim \hbar/\tau$ použitím self-konzistentnej Bornovej aproximácie.
- Získanú hustotu stavov sme normalizovali na hustotu stavov interagujúcich elektrónov v čistom kove
- Získané výsledky pre relatívnu zmenu hustoty stavov sme porovnali s experimentom sme porovnali s experimentom
- naša teória je s experimentom v rozumnej kvalitatívnej zhode, ceníme si najmä to, že naša teória ukazuje podobné nahromadenie stavov po oboch stranách pseudogapu, ako ukazuje experiment.

Pod'akovanie

Práca bola vypracovaná na Katedre experimentálnej fyziky FMFI UK a na Elektrotechnickom ústave SAV.

Moja vďaka patrí najmä môjmu školiťovi, Doc. RNDr. Martinovi Moškovi, DrSc. za podklady a ochotu konzultovať. Tak isto ďakujem aj mojej konzultantke RNDr. Antónii Moškovej, CSc. za odbornú pomoc. Napokon by som chcel poďakovať mojim rodičom za podporu počas celého vysokoškolského štúdia.

Predpokladám, že veličina ρ_0 vo výraze $(\rho - \rho_0)/\rho_0$ na obr. 8 je rovná hustote stavov pri pevne zvolenej energii \mathcal{E}_* , t.j. $\rho_0 = \rho(\mathcal{E}_*)$.

Odpoveď:

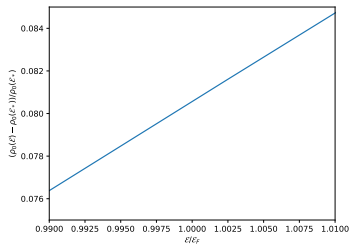
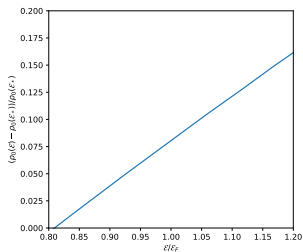
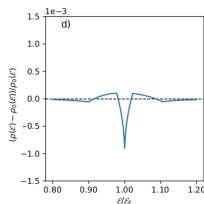
Nie, $\rho_0(\mathcal{E})$ na obrázku 8 nie je zobraťé pri konštantnej energii $\mathcal{E} = \mathcal{E}_*$. To čo sa naozaj meria je [Mazur, Phys. Rev. B, vol. 76 193102 1-4 (2007)]

$$\frac{G(U) - G_0(U)}{G_0(U)} = \frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})},$$

kde $G_0(U)$ je vodivosť bez AA efektu, ktorá väčšinou slabo závisí na U . Získať ju experimentálne nie je jednoduché [Mazur, PR B, 2007]

Tí experimentátori, ktorí chcú vidieť len AA pseudogap v blízkosti E_F , niekedy naozaj používajú normu $G(U)/G_0(U_*)$.

Na druhej strane, výsledky prezentované na obr. 10-12 sú vzťahnuté vzhľadom ku (v princípe) energeticky závislej funkcii $\rho_0(\mathcal{E})$. Možno na energetických škálach používaných v obr. 10-12 túto závislosť zanedbať. Inými slovami, ako vyzerajú grafy $[\rho_0(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E}_*)]/\rho_0(\mathcal{E}_*)$ pre \mathcal{E}_* rovné povedzme maximálnym energiám v obr. 10-12?



Ako by vyzerali výsledky prezentované na obr. 10-12, keby sme priamo vykresľovali experimentálne relevantnú veličinu $[\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E}_*)]/\rho_0(\mathcal{E}_*)$?

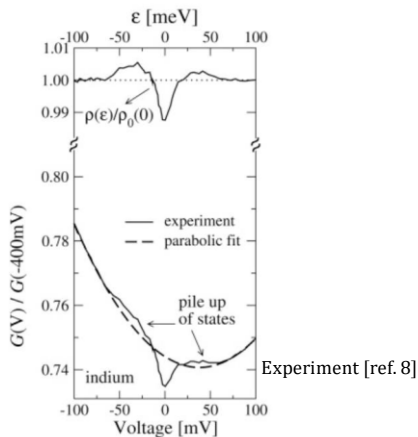
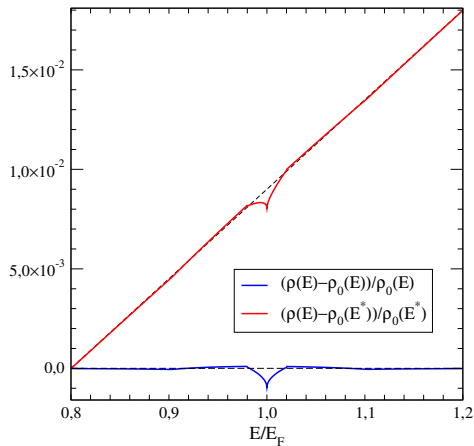
Odpoveď:

V práci som plotoval

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})} = f(\mathcal{E})$$

Oponent chce vidieť:

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E}_*)}{\rho_0(\mathcal{E}_*)} = f(\mathcal{E}) \frac{\rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E}_*)} + \frac{\rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E}_*)} - 1$$

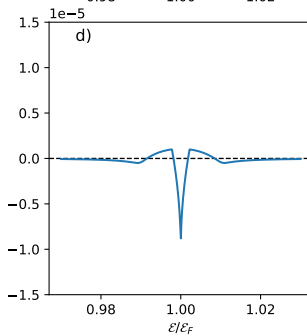
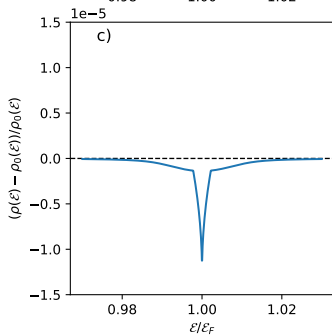
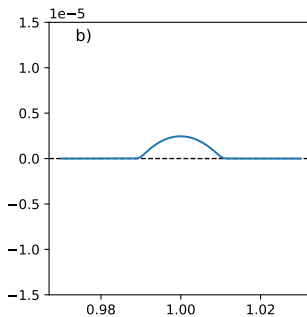
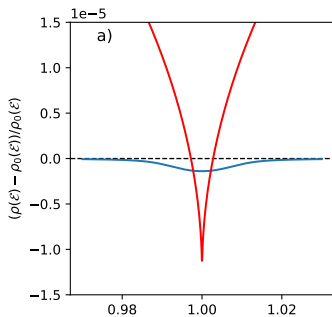


Je veličina $\rho_0(\mathcal{E})$, na ktorú sú normalizované výsledky v kapitole 4, totožná s normalizačnou hustotou stavov danou vzťahom (64) v kapitole 2? Ovplyvní táto skutočnosť konštrukciu sumárnych grafov 10c a 10d (a podobne pre obr. 11 a 12)?

Odpoveď:

Nie, veličina $\rho_0(\mathcal{E})$ v kapitole 4 obsahuje e-e interakciu, zatiaľ čo veličina $\rho_0(\mathcal{E})$ vo vzťahu (64) je hustota stavov neinteragujúcich elektrónov. Táto skutočnosť neovplyvní konštrukciu sumárnych grafov na obrázkoch 10, 11 a 12, pretože člen $\frac{dE_{\text{self}}^{\text{AA}}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}$ v rovnici (135) od normalizácie nezávisí.

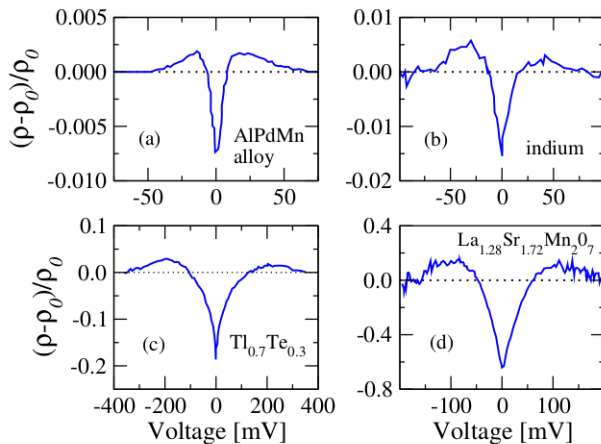
Náš spôsob normalizácie by sa dal do AA odvodenia v kapitole 2 ľahko dorobiť tak, že by sa do hranatej zátvorky rovnice (79) pridal člen $\frac{dE_{\text{self}}^{\text{free}}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}$. Tento člen by AA závislosť len rigidne posunul smerom hore, dá sa to vidieť aj na našich obrázkoch.



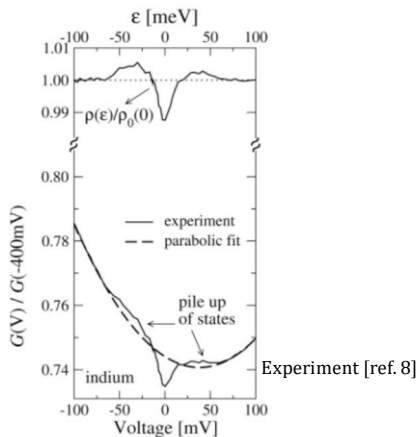
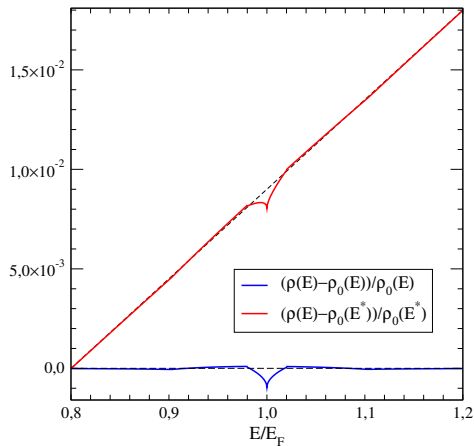
V staršej práci školiteľa a konzultantky [21] sa ukazuje, že celkový počet stavov v experimentálnych systémoch so singularitou Al'tšulera-Aronova sa zachováva už na škálach porovnateľných s \hbar/τ . Dá sa tento výsledok zdôvodniť v rámci navrhovaného prístupu?

Odpoveď:

Upresníme, že experimentálne merania, napríklad dáta v paneli d obrázku 8 neukazujú exaktné zachovanie stavov, ale len 80 %-né. Experimentátori ale veria, že za tých 80% môže byť zodpovedná nepresnosť merania [Mazur, PR B, 2007]. Práca [21] vychádzala z predpokladu, že stavy sa budú zachovávať presne. V našej práci nerobíme o zachovaní stavov žiadny predpoklad a nevieme povedať, či nám nakoniec výjde zachovanie stavov. V súčasnom štádiu výpočtov to tak nevyzerá, zatiaľ nás teší len kvalitatívna podobnosť vypočítaných a nameraných grafov.

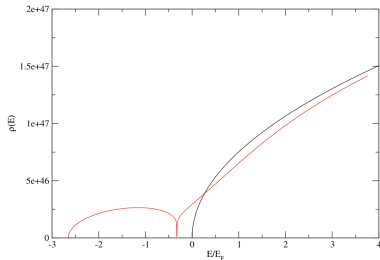
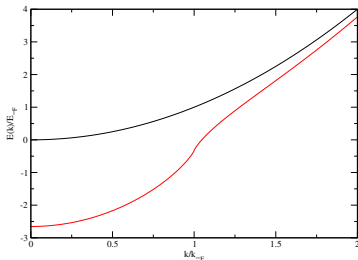


Ďakujem za pozornosť



Výsledná energia interagujúcich elektrónov v čistom kove v Hartree-Fockovom priblížení:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_f}{4\pi^2 \epsilon_0} F\left(\frac{k}{k_f}\right) \quad \text{kde} \quad F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|. \quad (45)$$



Vľavo je energia podľa rovnice (45). V pravo hustota stavov prislúchajúca (45). Na pravom obrázku vidíme singularitu v novej hodnoty Fermiho energie, čo znamená že HF aproximácia je v pre holý Coulombovský potenciál v rozpore s realitou. Hustota stavov na novej hodnote Fermiho energie je totiž nulová, v takomto prípade by bol každý kov izolant.

- Zavedieme bezrozmerné premenné a konštanty:

$$w = \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_\tau}, \quad u = \frac{\varepsilon_{m'}}{\varepsilon_\tau}, \quad x = \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_\tau}, \quad y = \frac{\varepsilon_q}{\varepsilon_\tau}, \quad \bar{y} = \frac{q}{k_s}, \quad \bar{y}_{max} = \frac{q_{max}}{k_s}, \quad u_{EF} = \frac{\mathcal{E}_F}{\varepsilon_\tau}. \quad (46)$$

- Po vykonaní analytických integrálov dostaneme

$$E_{self}^{AA}(\varepsilon_m) = -\frac{e^2}{4\pi^4 \varepsilon_0 k_s^{-1}} \int_0^{\bar{y}_{max}} d\bar{y} \frac{\bar{y}^2}{1 + \bar{y}^2} \int_0^\infty dx \frac{1}{(w-x)^2 + 1} F(x, y), \quad (47)$$

kde

$$\begin{aligned} F(x, y) = & \frac{1}{\sqrt{4xy}} \{ (x+y+2\sqrt{xy}-u_{EF}) \arctan(x+y+2\sqrt{xy}-u_{EF}) \\ & - (x+y-2\sqrt{xy}-u_{EF}) \arctan(x+y-2\sqrt{xy}-u_{EF}) \\ & - (x+y+2\sqrt{xy}) \arctan(x+y+2\sqrt{xy}) \\ & + (x+y-2\sqrt{xy}) \arctan(x+y-2\sqrt{xy}) \\ & - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{(x+y+2\sqrt{xy}-u_{EF})^2 + 1}{(x+y-2\sqrt{xy}-u_{EF})^2 + 1} \frac{(x+y+2\sqrt{xy})^2 + 1}{(x+y-2\sqrt{xy})^2 + 1} \right) \}. \end{aligned}$$

- Integrály (47) počítame numericky obdĺžnikovou metódou