UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

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

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2019 **Matúš Jenča**

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

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

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program:	Fyzika
Študijný odbor:	17827 Fyzika
Školiace pracovisko:	Katedra experimentálnej fyziky
Vedúci práce:	Doc. RNDr. Martin Moško, DrSc.
Konzultant:	RNDr. Antónia Mošková, CSc.

Bratislava 2019

Matúš Jenča

30382791

Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta:	Bc. Matúš Jenča
Študijný program:	fyzika tuhých látok (Jednoodborové štúdium, magisterský II. st., denná forma)
Študijný odbor:	fyzika
Typ záverečnej práce:	diplomová
Jazyk záverečnej práce:	slovenský
Sekundárny jazyk:	anglický

Názov: Hustota elektrónových stavov v kove so slabým disorderom a slabou elektrón-elektrónovou interakciou: Jav Altshulera-Aronova
Density of electron states in metal with weak disorder and weak electron-electron interaction: Altshuler-Aronov effect

Anotácia: Elektrón-elektrónová interakcia v kombinácii s disorderom spôsobuje v kovoch potlačenie hustoty elektrónových stavov v blízkom okolí Fermiho energie.
Toto zmenšenie hustoty stavov blízko Fermiho energie, známe ako jav Altshulera-Aronova, je pozorovateľné metódami tunelovej spektroskopie a fotoelektrónovej spektroskopie. Cieľom tejto diplomovej práce bude teoretický výpočet hustoty stavov. Diplomant sa naučí ako počítať hustotu stavov v elektrónovom plyne, v ktorom elektróny interagujú cez slabú Hartree-Fockovou interakciu a zároveň sú vystavené pôsobeniu slabého náhodného potenciálu disorderu. Diplomant najprv zreprodukuje pre rôzne dimenzionality výsledok Altshulera Aronova platný v blízkom okolí Fermiho energie. Potom sa pokúsi AA výsledok zobecniť aj mimo blízke okolie Fermiho energie a zobecnený výsledok porovnať s nedávnymi experimentami.

Vedúci:	doc. RNDr. Martin Moško, DrSc.
Konzultant:	RNDr. Antónia Mošková, PhD.
Katedra:	FMFI.KEF - Katedra experimentálnej fyziky
Vedúci katedry:	prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc.
Dátum zadania:	18.11.2019
Dátum schválenia:	10.12.2019

prof. RNDr. Peter Kúš, DrSc.
garant študijného programu

....

študent vedúci práce

Čestne prehlasujem, že som túto prácu - *Hustota elektrónových stavov v kove so slabým disorderom a slabou elektrón-elektrónovou interakciou: Jav Altshulera-Aronova* - vypracoval samostatne, na základe konzultácii a použitej literatúry.

Neporušil som autorský zákon, a zoznam použitej literatúry som uviedol na príslušnom mieste.

V Bratislave, dňa 15. februára 2022

Matúš Jenča

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

Moja vďaka patrí najmä môjmu školiteľovi, 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.

Abstrakt v štátnom jazyku

Sample Text

Kľúčové slová: Sample Keyword

Abstract

Sample Text

Keywords: Sample Keyword

Obsah

Úvod

Úvod

1 Elektróny v kovovej mriežke s disorderom : Altshuler-Aronovova aproximácia

V tejto kapitole si zavedieme základné pojmy týkajúce sa problému elektrónov v kove s disorderom.

Elektrón v kovovej mriežke popisujeme vlnovou funkciou $\phi(\vec{r}, t)$. Hamiltonián problému rozdelíme na tri časti:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} + \hat{H}_{dis}, \tag{1}$$

kde $H_0 = \frac{-\hbar}{2m}\Delta$ je hamiltonián voľnej častice, H_{int} popisuje interakciu z iónmi v mriežke, ako aj elektrón elektrónovú (ee) interakciu a H_{dis} popisuje disorder.

Ak uvažujeme elektrón ako voľnú časticu H_0, dostaneme najhrubšiu aproximáciu, kde vieme nájsť bázové funkcie $\phi(\vec{r})$. Použitím Born von Karmanovej periodickej okrajovej podmienky (PBC) dostávame

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \frac{\mathcal{E}(k)t}{\hbar})}, \tag{2}$$

kde V je Born von Karmanov objem. Energia takejto vlnovej funkcie je

$$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{3}$$

Použitím PBC dostávame diskrétne hodnoty vektora $\vec{k}$ (vektory recipročnej mriežky). Elektróny sú fermióny, a v recipročnom priestore tvoria guľu. Polomer tejto gule nazývame Fermiho polomerom. Ak poznáme elektrónovú koncentráciu, vieme určiť Fermiho Polomer

$$k_F = (3\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}}. \tag{4}$$

Energia elektrónov na Fermiho polomeri nazývame Fermiho energiou

$$\mathcal{E}_F = \frac{\hbar k_F^2}{2m} \tag{5}$$

Pri integrovaní cez Fermiho guľu vieme zameniť súradnicu polomeru k za energiu. Jakobián takejto zámeny súradníc dáva dôležitú veličinu: hustotu stavov.

Vzťah pre hustotu stavov všeobecného systému budeme v ďalšom písať ako

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi^2}\frac{dk}{dE}k^2 \ . \tag{6}$$

Druhý člen v (1) popisuje Hartree-Fockova teória, ktorá je štandartne pokrytá v učebniciach, preto ju v tejto práci nebudeme rozoberať. Uvedieme len toľko, že výpočet hustoty stavov nám pre interakciu cez Coulombovský potenciál $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_\infty|\vec{r}-\vec{r'}|}$ nám na fermiho hladine dá nulovú hustotu stavov, čo je v rozpore s realitou. Preto musíme použiť Yukkavov tienený potenciál.

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_\infty|\vec{r}-\vec{r'}|}exp^{-k_s r}, \tag{7}$$

kde k_s je recipročná tieniaca dĺžka. Pre náš výpočet je dôležitá jeho Fourierova transformácia

$$V_3(\vec{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{4\pi e^2}{q^2+k_s^2} \tag{8}$$

Posledný člen popisuje disorder, náhodný potenciál od prímesí. Práve jemu sa budeme podrobne venovať. Bez ee interakcie máme Schrödingerovu rovnicu

$$\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{dis}(\vec{r})\big)\phi_m(\vec{r}) = \mathcal{E}_m\phi_m(\vec{r}). \tag{9}$$

Altschuler a Aronov (AA) riešili problém pomocou Greenových funkcii, ktoré sú nad rámec magisterského štúdia. Preto použijeme štandardný formalizmus vlnových funkcii.

Problém AA budeme riešiť poruchovou metódou, kde (9)bude neporušený problém a porucha zapríčinená interakciou bude

$$\hat{H}' = \sum_{\forall m'}\int d\vec{r'}\ \phi^*_{m'}(\vec{r})\phi_m(\vec{r'})V(|\vec{r}-\vec{r'}|)\phi'_m(\vec{r}). \tag{10}$$

Riešime teda $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ v nultom ráde poruchovej teórie, takže dosádzame rovno vlnové funkcie neporušeného problému $\phi_m(r)$, $\phi'_m(r)$ a ich vlastné hodnoty $\mathcal{E}_m$. V poruchovo člene (10) je vhodné urobiť Fourierovu transformáciu a zaviesť $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$. Po algebraických úpravách dostávame

$$E_m = \mathcal{E}_m - \sum_{\forall m'}\int d\vec{q}\ V(|\vec{q}|)| < \phi_m|e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}|\phi_{m'} > |^2. \tag{11}$$

Samotný charakter $V_{dis}(\vec{r})$ naznačuje že úloha nie je analyticky riešiteľná. Ide náhodný potenciál závisiaci od porúch v kryštalickej mriežke. Pre každú mriežku môžme mať iné

$V_{dis}(\vec{r})$, preto aj iné vlastné vektory $\phi_m(r)$, $\phi'_m(r)$ a vlastné hodnoty $\mathcal{E}_m$. Je teda vhodné zaviesť štatistický súbor disorderov a hodnôt kvantového čísla m.

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \sum_{\forall m'} \int d\vec{q}\, V(|\vec{q}|)\overline{| < \phi_m | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi_{m'} > |^2}. \tag{12}$$

Maticový element vieme vypočítať aj bez znalosti vlnových funkcii pomocou aproximácie elektrónu vlnovým balíkom.

Elektrón považujeme za klasickú časticu. Disorder vieme aproximovať náhodnými bodmi na ktoré bude častica elasticky narážať. Ide teda o Brownov pohyb, a pravdepodobnosť výskytu častice popisuje difúzna rovnica

$$P(\vec{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}, \tag{13}$$

kde D je difúzny koeficient úmerný Fermiho energii.

Z vyššie uvedenej úvahy vyplýva, že môžme postulovať

$$\psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) \simeq \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}, \tag{14}$$

kde $\psi(\vec{r}, t)$ je vlnový balík častice, ktorý vieme vyjadriť v báze vlastných funkcii nášho skúmaného systému

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m \phi^*_m(\vec{r}_0)\phi_m(\vec{r}) e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}. \tag{15}$$

Postulát (14) platí len za určitých predpokladov. Prísne vzaté, rovnosť (14) nemôže platiť, pretože porovnáva klasickú časticu s ostrou hodnotou energie s vlnovým balíkom (preto je v rovnici znak $\simeq$). Preto sa v sume (15) obmedzíme na také stavt ϕ_m pre ktoré platí $E = \mathcal{E}_F + \Delta E$ kde ΔE je rozumne malé.

Dosadíme teda rozklad (15) do (14)

$$\frac{1}{N} \sum_m \sum_{m'} \phi^*_m(\vec{r}_0)\phi^*_{m'}(\vec{r})\phi_m(\vec{r})\phi_{m'}(\vec{r}_0) e^{-i\frac{E_m - E_{m'}}{\hbar}t} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}, \tag{16}$$

kde vydelením počtom členov sumy N sme dostali stednú hodnotu cez m. Z rovnice (16) vyjadriť z nej maticový element .

Úpravy sú však netriviálne, preto ich uvedieme detailnejšie. Pre väčšiu prehľadnosť textu budeme riešiť ľavú a pravú stranu rovnice osobitne.

Vezmime najprv ľavú stranu rovnice (16). Násobime ju výrazom $e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}_0)}$, integrujeme cez $\int d\vec{r}$ a $\int d\vec{r}_0$, a ešte násobíme $\frac{1}{V}$, kde V je integračný objem. Stredovaciu čiaru na chvíľu vynecháme a upravujeme.

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{NV}\sum_m\sum_{m'}\int d\vec{r}_0\phi^*_m(\vec{r}_0)\phi_{m'}(\vec{r}_0)e^{i\vec{q}\vec{r}_0}\int d\vec{r}e^{-i\vec{q}\vec{r}}\phi_m(\vec{r})\phi_{m'}(\vec{r})e^{-i\frac{\mathcal{E}_m-\mathcal{E}_{m'}}{\hbar}t}\\
=&\frac{1}{NV}\sum_m\sum_{m'}|\int d\vec{r}e^{-i\vec{q}\vec{r}}\phi_m(\vec{r})\phi_{m'}(\vec{r})|^2e^{-i\frac{\mathcal{E}_m-\mathcal{E}_{m'}}{\hbar}t}\\
=&\frac{1}{NV}\sum_m\sum_{m'}|M_{mm'}|^2e^{-i\frac{\mathcal{E}_m-\mathcal{E}_{m'}}{\hbar}t}.
\end{aligned}
$$

kde nám už vznikol štvorec maticového elementu $|M_{mm'}|^2$, ktorý chceme vypočítať. Teraz ešte na posledný riadok aplikujme Fourierovu transformáciu v tvare $Re(\int_0^\infty dte^{i\omega t})$. Dostaneme

$$
\frac{1}{NV}\sum_m\sum_{m'}|M_{mm'}|^2Re(\int_0^\infty dte^{-i\frac{\mathcal{E}_m-\mathcal{E}_{m'}}{\hbar}t}e^{i\omega t}). \tag{17}
$$

Upravíme si výraz $Re(\int_0^\infty dte^{-i\frac{\mathcal{E}_m-\mathcal{E}_{m'}}{\hbar}t}e^{i\omega t})$:

$$
Re(\int_0^\infty dte^{-i\omega_{mm'}t}e^{i\omega t}) =
$$

$$
\frac{1}{2}(\int_0^\infty dte^{-i(\omega_{mm'}-\omega)t}+\int_0^\infty dte^{i(\omega_{mm'}-\omega)t}) = \frac{1}{2}(\int_0^\infty dte^{-i(\omega_{mm'}-\omega)t}+\int_{-\infty}^0 dte^{-i(\omega_{mm'}-\omega)t}) =
$$

$$
\frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty dte^{-i(\omega_{mm'}-\omega)t} = \pi\delta(\omega_{mm'}-\omega),
$$

kde $\omega_{mm'} = \frac{\mathcal{E}_m-\mathcal{E}_{m'}}{\hbar}$. Výraz (17) tak nadobudne tvar

$$
\frac{1}{NV}\sum_m\sum_{m'}\overline{|M_{mm'}|^2\pi\delta(\omega_{mm'}-\omega)}, \tag{18}
$$

kde sme už vrátili stredovanie cez disorder. Tento výraz môžeme ľahko integrovať vďaka prítomnosti delta funkcie. Integrujeme cez $\mathcal{E}_{m'}$ tak že prejdeme od sumy k integrálu. Dostaneme

$$
\frac{\pi\hbar}{N}\sum_m\overline{\int d\mathcal{E}_{m'}\rho(\mathcal{E}_{m'})\delta(\mathcal{E}_m-\mathcal{E}_{m'}+\hbar\omega)|M_{mm'}|^2} = \frac{\pi\hbar}{N}\sum_m\rho(\mathcal{E}_m+\hbar\omega)\overline{|M_{(\mathcal{E}_m)(\mathcal{E}_m+\hbar\omega)}|^2}, \tag{19}
$$

kde $\rho(\mathcal{E})$ je hustota stavov, ktorú pre slabý disorder môžeme približne považovať za hustotu stavov voľných elektrónov a vyňať ju zo stredovania. Konečne, sumu $N^{-1}\sum_m$ môžeme chápať ako stredovanie cez stavy m a dostávame záverečný výsledok

$$
\pi\hbar\rho(\mathcal{E}_m+\hbar\omega)\overline{|M_{(\mathcal{E}_m)(\mathcal{E}_m+\hbar\omega)}|^2}, \tag{20}
$$

ktorý chápeme ako vystredovaný cez m.

Teraz tým istým spôsobom upravíme pravú stranu rovnice (16). Násobime ju výrazom $e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}_0)}$, integrujeme cez $\int d\vec{r}$ a $\int d\vec{r}_0$, a násobíme $\frac{1}{V}$. Dostaneme

$$\frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}}\frac{1}{V}\int d\vec{r}\int d\vec{r}_0 e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}_0)} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}}\int d\vec{r'}e^{-\frac{|\vec{r'}|^2}{4Dt}}e^{-i\vec{q}\vec{r'}}, \qquad (21)$$

pravú stranu môžeme faktorizovať na súčin troch rovnakých integrálov v premenných x,y,z a každý vypočítať. Napr. integrál cez x dá

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{4Dt}}e^{-iq_x x} =$$
$$\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{(x-2iq_x t)^2}{4Dt}-q_x^2 Dt} =$$
$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-s^2}e^{-q_x^2 Dt} = e^{-q_x^2 Dt}.$$

a analogicky pre y a z. Týmto sa pravá strana rovnice (16) pretransformovala na tvar $e^{-q^2 Dt}$, ktorý ešte stransformujeme Fourierovou transformáciou cez čas:

$$Re\int_0^{\infty} dt\ e^{i\omega t}e^{-q^2 Dt} = Re(\frac{1}{-i\omega + q^2 D}) = \frac{q^2 D}{\omega^2 + q^4 D^2}. \qquad (22)$$

Posledný výsledok je rovný výrazu (20), odkiaľ nachádzame hľadaný výsledok

$$\overline{|M_{mm'}|^2} = \frac{\hbar D q^2}{\rho(E'_m)(E_m - E_{m'})^2 + (\hbar D q^2)^2}. \qquad (23)$$

Vezmime vzťah (12) a vystredujme ho cez všetky energie $\mathcal{E}_m = \mathcal{E}$. Dostaneme

$$\tilde{E}(E) = \overline{\mathcal{E}} + E_{self}(E), \qquad (24)$$

kde $\overline{\mathcal{E}}$ je rovné energii voľnej častice selfenergia má tvar

$$E_{self} = -\int_0^{E_F} dE' \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^3}V(q)\frac{\rho(E)\hbar D q^2}{(\hbar D q^2) + (E - E')}, \qquad (25)$$

v ktorom sme prešli od sumy cez m' k integrálu cez energiu ako $dm' = \rho(E')dE'$.

Hustotu stavov vyjadríme z (24). Celú rovnicu pre energiu derivujeme podľa počtu stavov n.

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{E}(E)}{dn} &= \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(E)}{dn} \\ \frac{d\tilde{E}(E)}{dn} &= \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(E)}{dE}\frac{dE}{dn} \\ \frac{d\tilde{E}(E)}{dn} &= \frac{d\mathcal{E}}{dn}(1 + \frac{dE_{self}(E)}{dE}).\end{aligned} \qquad (26)$$

Keďže hustota stavov je derivácia počtu stavov podľa energie, pre hustotu stavov dostávame

$$\rho(E) = \rho_0(E)\frac{1}{1+\frac{dE_{self}(E)}{dE}}, \tag{27}$$

kde $\rho_0(E)$ je hustota stavov pre voľný elektrón (6). Pre malé $\frac{dE_{self}(E)}{dE}$ urobíme Taylorov rozvoj:

$$\rho(E) \doteq \rho_0(E_F)[1 - \frac{dE_{self}(E)}{dE}], \tag{28}$$

Zavedením jednoduchých substitúcii integrál (29) prejde na

$$E_{self} = \int_0^{\epsilon} d\epsilon' \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^4} V(\vec{q}) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon')^2}. \tag{29}$$

Teraz urobíme takzvanú aproximáciu nekonečného pásu, čiže dno energetického pásu presunieme do $-\infty$. Po ďalších substitúciách sa táto aproximácia prejaví ako

$$E_{self} = \int_{\epsilon}^{\infty} d\epsilon' \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^4} V(\vec{q}) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon')^2}. \tag{30}$$

Z definície derivácie potom vieme vyjadriť deriváciu self energie ako

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^3} V(\vec{q}) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon)^2}. \tag{31}$$

Týmto sme vyriešili jeden integrál, ostáva nám integrovať cez $d\vec{q}$. Prejdeme do sférických súradnic:

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{4\pi}{8\pi^3} \int_0^{\infty} dq q^2 V(q) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon)^2}. \tag{32}$$

$$\rho(E) = \rho_0(E_F)[1 - \frac{4U_i}{\pi^2 U_{co} l k_s} + \frac{2U_i}{\pi U_{co}\sqrt{2\hbar D k_s^2}}\sqrt{\epsilon}]. \tag{33}$$

Keďže sme substituovali $\epsilon = E - E_F$, vieme že na Fermiho energii bude $\epsilon = 0$, teda hustota stavov bude:

$$\rho(E_F) = \rho_0(E_F)[1 - \frac{4U_i}{\pi^2 U_{co} l k_s}]. \tag{34}$$

Hustotu stavov potom možno skrátene písať ako:

$$\rho(E) = \rho(E_F) + \rho_0(E_F)\frac{2U_i}{\pi U_{co}\sqrt{2\hbar D k_s^2}}\sqrt{\epsilon}. \tag{35}$$

Zostáva nám už len vyjadriť si substituované členy. Po dosadení za substituvané premenné a za $k_s = \sqrt{\frac{e^2\rho_0(E_F)}{\epsilon_0}}$ dostaneme finálny Altshuler-Aronovovov vzťah pre hustotu stavov

$$\rho_3(E) = \rho(E_F) + \frac{\sqrt{|E - E_F|}}{4\sqrt{2}\pi^2(\hbar D)^{3/2}}. \tag{36}$$

Vypočítali sme hustotu stavov v disorderovanom systéme v 3D priestore. V nasledujúcich kapitolách budeme potrebovať aj 2D a 1D prípady.

Aproximácia cez difúznu rovnicu a maticový element, na základe ktorého sme vypočítali 3D prípad platí aj v iných dimenziách. Jeden rozdiel vo výpočtoch hustoty stavov 2D a 1D však bude v integračných súradniciach a jakobiánoch. Druhý rozdiel bude vo fourierových transformáciach Yukkavovského potenciálu. Tieto transformácie, vzhľadom na zdĺhavosť výpočtov nebudeme odvodzovať, iba ich uvedieme: [1]

$$V_2(\vec{q}) = \frac{1}{2\epsilon_0}\frac{e^2}{|q|+|k_2|} \tag{37}$$

$$V_1(q) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{e^2\rho_0 + ln^{-1}(\frac{1}{q^2a^2})} \tag{38}$$

Kde $k_2 = 2\pi e^2\rho_0$ je recipro4n8 tieniaca dĺžka v 2D.

V oboch prípadoch môžme pri dostatočne malom ohraničení intehrálu cez $d\vec{q}$ uvažovať limitu $q \to 0$, čo dáva vo všetkých prípadochako konštantný potenciál

$$V(q) = \frac{1}{\rho_0}. \tag{39}$$

Teraz nám už zostáva iba riešiť rovnicu (45) dosadením potenciálu (39) za $V(\vec{q})$. Najskôr počítame pre 2D

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{\hbar D}{2\pi^2}\frac{1}{\rho_0}\int_0^{\frac{\sqrt{2}}{l}} dq \frac{q^3}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon)^2}. \tag{40}$$

Tento integrál je ľahko vyčísliteľný , stačí použiť substitúciu $x = \hbar^2 D^2 q^4$. Dostaneme výsledok

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{1}{8\pi^2\rho_0\hbar D} ln(\frac{1+(\frac{\epsilon}{\epsilon_0})^2}{(\frac{\epsilon}{\epsilon_0})^2}), \tag{41}$$

kde $\epsilon_0 = \hbar D\frac{\sqrt{2}}{l}$. Pre malé ϵ, teda pre energie v okolí Fermiho energie, môžme člen $(\frac{\epsilon}{\epsilon_0})^2$ v čitateli (41) zanedbať. Potom vieme exponent vyňať pred logaritmu a dostaneme

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = -\frac{1}{4\pi^2\rho_0\hbar D} ln(\frac{\epsilon}{\epsilon_0}). \tag{42}$$

Teraz nám stačí len dosadiť za ϵ_0 a následne upraviť (42) pomocou vzťahov $l = v_F\tau$ a $D = \frac{1}{2}v_F l$. Dostaneme finálny vzťah

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = -\frac{1}{4\pi^2\rho_0\hbar D} ln(\frac{\tau\epsilon}{\hbar}). \tag{43}$$

Hustota stavov podľa rovnice (28) bude

$$\rho_2(E) = \rho_{02}(E_F)[1 - \frac{1}{4\pi^2\rho_0\hbar D} ln(\frac{\tau(|E-E_F|)}{\hbar})] \tag{44}$$

Na rozdiel od 3D prípadu (36), kde sme dostali odmocninovú závislosť, v 2D prípade (43) máme logaritmickú závislosť.

V 1D prípade nemusíme zamieňať súradnice, integrujeme rovno cez jednorozmernú premennú q.

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{\hbar D}{2\pi}\int_0^\infty dq \frac{q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon)^2}. \tag{45}$$

Tento integrál nieje až tak triviálny ako v 2D prípade. Vieme ho upraviť do tvaru:

$$\frac{1}{2\pi^2\epsilon_0 q_0 \rho_0}\int_0^1 dx \frac{x^2}{x^4+\alpha^2} \tag{46}$$

kde $\epsilon_0 = \sqrt{\frac{\hbar D}{\epsilon}}$ a $\alpha = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$. Určíme primitívnu funkciu

$$P(x) = \frac{1}{2\pi^2\epsilon_0 q_0 \rho_0}\frac{1}{4\sqrt{2\alpha}}[F(x) - G_1(x) + G_2(x)], \tag{47}$$

kde

$$F(x) = \ln(\frac{x^2+\alpha-\sqrt{2\alpha}x}{x^2+\alpha+\sqrt{2\alpha}x}) \tag{48}$$

$$G_1(x) = 2\arctan(1+\sqrt{\frac{2}{\alpha}}x) \tag{49}$$

$$G_1(x) = 2\arctan(1-\sqrt{\frac{2}{\alpha}}x). \tag{50}$$

Teraz vyhodnotíme primitívnu funkciu (47).

Vidíme, že $P(0) = 0$ pretože funkcia F má nulovú hodnotu a G_1 a G_2 sa odčítajú na nulu.

Pre $P(1)$ môžme urobiť nasledovnú aproximáciu. Stále sme v oblasti v okolí Fermiho energie, teda $\epsilon << 1$ a taktiež $\alpha << 1$. Môžme preto predpokladať $F(1) = 0$. Zostáva teda vyčísliť funkcie G_1 a G_2. Tie môžme pre α idúce do nuly napísať ako $G_1 = 2\pi$ a $G_2 = -2\pi$. Z toho dostávame

$$P(1) = \frac{1}{2\pi^2\epsilon_0 q_0 \rho_0}\frac{1}{4\sqrt{2\alpha}}4\pi \tag{51}$$

Po aritmetických úpravách a dosadeniach dostávame.

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi\sqrt{\hbar D\epsilon}} \tag{52}$$

Znova dosadíme do (28) a dostaneme

$$\rho_1(E) = \rho_{01}[1 - \frac{1}{2\sqrt{2}\pi\sqrt{\hbar D|E - E_F|}}] \tag{53}$$

2 Experimentálne meranie hustoty stavov v disorderovanom kove

V tejto kapitole predstavíme experimentálnu metódu merania hustoty stavov Táto metóda využíva efekt tunelovania elektrónu cez potenciálovú bariéru.

Experimentálna sústava pozostáva z dvoch kovov odelených izolantom. Naľavo máme čistý kov, ktorého hustotu poznáme - *známy kov*. Napravo máme disorderovaný kov, ktorého hustotu stavov budeme merať - *skúmaný kov*. Izolant tvorí potenciálovú bariéru. Na sústavu priložíme napätie U a budeme merať prúd.

Bez priloženého napätia ($U = 0$) popisuje Hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(x), \tag{54}$$

kde

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{pre } 0 < x < b \\ 0, & \text{inak} \end{cases}, \tag{55}$$

kde b je šírka bariéry,

Hladanie vlastných stavov Hamiltoniánu (54) je učebnicový problém, ktorý sa štandartne rieši nájdením vlnových funkcii v troch oblastiach a následným „zošívaním” pomocou podmienky spojitosti vlnovej funkcie a jej derivácie.

Štandartný spôsob riešenia však zlyhá po priložení napätia na experimentálnu sústavu. Preto predstavíme iný spôsob.

Majme teraz dve nekonečne široké bariéry z ľava:

$$V_l(x) = \begin{cases} V_0, & \text{pre } 0 < x \\ 0, & \text{inak} \end{cases}, \tag{56}$$

a podobne sprava

$$V_r(x) = \begin{cases} V_0, & \text{pre } b > x \\ 0, & \text{inak} \end{cases}. \tag{57}$$

Pre obe bariéry (56) a (57) vieme určiť vlastné stavy $\psi_l(x)$ a $\psi_r(x)$. Tieto stavy sú očividne dobrou aproximáciou stavov naľavo a napravo od konečnej bariéry (55). Nie sú to však vlastné stavy hamiltoniánu (54), preto musíme riešiť časovú SchR

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t). \tag{58}$$

Časticu je v čase $t = 0$ na ľavo od bariéry teda v stave $\psi_l(x)$, teda máme počiatočnú podmienku

$$\psi(x,0) = \psi_l(x). \tag{59}$$

Riešenie časovej SchR (58) hľadáme v tvare:

$$\psi(x,t) = c_l(t)\psi_l(x)e^{-\frac{iE_lt}{\hbar}} + \sum_{\forall r} c_r(t)\psi_l(x)e^{-\frac{iE_rt}{\hbar}}, \tag{60}$$

kde s počiatočných podmienok (59) dostávame:

$$c_l(0) = 1, c_r(0) = 0. \tag{61}$$

Pre slabo preniknuteľnú bariéru vieme koeficienty aproximovať ako:

$$c_l(t) \doteq 1, c_l'(t) \doteq 1, c_r(t) \doteq 0. \tag{62}$$

Dosadením (60) do (58) a použitím (62) a následnými úpravami dostávame

$$w_{r\to l} = \frac{2\pi}{\hbar} < \psi_l|H - E_l|\psi_r > \delta(E_l - E_r). \tag{63}$$

Dostali sme vzťah podobný Fermiho zlatému pravidlu, ktorý popisuje pravdepodobnost prechod zo stavu ψ_l do stavu ψ_r.

V ďalšom zavedieme označenie

$$t_{k_l\to k_r} =< \psi_l|H - E_l|\psi_r > \tag{64}$$

Teraz priložíme na sústavu napätie U, čo spôsobí zmenu dna energetického pásu na pravej strane bariéry ΔE_c. Potenciálová bariéra má teraz tvar lineárnej funkcie. Obsadzovacie čísla jednotlivých elektrónových stavov budú na ľavo dané Fermi-Diracovým rozdelením:

$$f_l(k_l) = \frac{1}{e^{\frac{E_{k_l}-\mu_l}{k_bT}} + 1}, \tag{65}$$

podobne pre stavy na pravo:

$$f_r(k_r) = \frac{1}{e^{\frac{E_{k_r}-\mu_r}{k_b T}} + 1}. \tag{66}$$

Počet elektrónov ktoré prejdu zľava do prava, resp sprava do ľava.

$$\Gamma^+(\Delta E) = \sum_{k_l} \sum_{k_r} w_{k_l \to k_r} f_l(k_l)[1 - f_r(k_r)] \tag{67}$$

$$\Gamma^-(\Delta E) = \sum_{k_l} \sum_{k_r} w_{k_r \to k_l} f_r(k_r)[1 - f_l(k_l)] \tag{68}$$

Kde ΔE je rozdiel energii medzi stavmi naľavo a napravo, pozri obrázok. Celkový prúd je teda

$$I = \Gamma^+(\Delta E) - \Gamma^-(\Delta E) \tag{69}$$

V roviniciach (67) a (68) prejdeme od sumy k integrálu a dosadíme Zlaté pravidlo (63). Nakoniec prejdeme k integrálu cez energiu, kde musíme násobiť hustotu stavov.

$$\begin{aligned}\Gamma^+(\Delta E) = \frac{2\pi}{\hbar} 2 \sum_{k_l} \sum_{k_r} |t_{k_l \to k_r}|^2 f_l(k_l)[1 - f_r(k_r)]\delta(E_l - E_r) = \\ \frac{2\pi}{\hbar} 2 \int_0^\infty \frac{L}{\pi} dk_r \int_0^\infty \frac{L}{\pi} dl_l |t_{k_l \to k_r}|^2 f_l(k_l)[1 - f_r(k_r)]\delta(E_l - E_r) \simeq \\ \frac{2\pi}{\hbar} 2|t|^2 \int_{E_{c,l}}^\infty \frac{L}{\pi} \rho_r(E_r) dE_r \int_{E_{c,r}}^\infty \frac{L}{\pi} N_r(E_r) dE_r f_l(k_l)[1 - f_r(k_r)]\delta(E_l - E_r),\end{aligned}$$

kde sme v poslednom riadku zanedbali závislosť transmisného koeficientu $t(k_l, k_r)$. Podobným spôsobom vieme upraviť aj vzťah (68). Takto upravené vzťahy dosadíme do rovnice pre celkový prúd prechádzajúci sústavou (69) a dostaneme

$$I = e\frac{4\pi|t^2|}{\hbar} \int_{E_{cl}}^\infty dE_l \rho_l(E_l) \rho_r(E_l)(f_l(E_l) - f_r(E_l)), \tag{70}$$

kde sme navyše využili δ-funkciu a zbavili sa integrovania cez E_r.

V limite nízkych teplôt $T \simeq 0$ Fermi-Diracove funkcie prejdú na Θ-funkcie. Preto dostávame

3 Odvodenie Kubovej Formuly

V tejto kapitole odvodíme Kubovu Formulu pre optickú vodivosť, ktorú neskôr použijeme na ďalšie výpočty. Narozdiel od štandartne používanej Boltzmanovej Kinetickej rovnice (BKR), ktorá využiva semiklasický formalizmus vlnových balíkov, v Kubovej formule uvažujeme čisto kvantový prístup. V tejto kapitole ukážeme, že v istom priblížení výsledok pre vodivosť z Kubovej formuly korešponduje s Drudeho formulou:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m*}, \tag{71}$$

kde n je číslo pásu, τ je relaxačný čas a $m*$ je efektívna hmotnosť. Drudeho formula je odvodená z BKR, teda je semiklasická, z Kubovej formuly vieme dostať jej kvantovú analógiu. Uvažujme disorderovaný kov napojený na zdroj napätia s periodickou časovou závislosťou

$$V(t) = V\cos\omega t = -eEx\cos\omega t. \tag{72}$$

Predpokladajme, že v čase $t = t_0$ je pole nulové. Platí bezčasová Schrödingerova Rovnica

$$\hat{H}\Phi_j(\vec{r}) = \epsilon_j\Phi_j(\vec{r}), \tag{73}$$

ktorej Hamiltoníán

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\vec{r} + V_{dis}(\vec{r}), \tag{74}$$

kde $V_{dis}(\vec{r})$ je náhodný potenciál disorderu. Pre vlnovú funkciu $\Psi(\vec{r},t)$ v iných časoch platí.

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = (\hat{H} + V(t))\Psi(\vec{r},t). \tag{75}$$

Rovnicu (75) riešime pomocou časovej poruchovej teórie. Funkciu $\Psi(\vec{r},t)$ rozvinieme do stacionárnych stavov $\phi_j(\vec{r})$.

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_j c_{ji}(t)\Phi_j(\vec{r})e^{-\frac{i\epsilon_j}{\hbar}}, \tag{76}$$

kde $c_{ji}(t)$ je koeficient prechodu, prenásobením komplexne združeným $c_{ji}*(t)$ dostaneme pravdepodobnosť prechodu $|c_{ji}(t)|^2$ z počiatočného stavu i do nového stavu j. Je zrejmé, že v čase $t = t_0$ je tento koeficient rovný Kronekerovmu symbolu

$$c_{ji}(t_0) = \delta_{ji} \tag{77}$$

V ďalších výpočtoch budeme potrebovať koeficient prechodu medzi počiatočným stavom i a finálnym stavom f. Ten dostaneme nasledovným spôsobom:

Rozvoj (76) dosadíme do (75) obe strany prenásobíme $\Phi_f(\vec{r})e^{\frac{i\epsilon_f}{\hbar}}$ - kde $\Phi_f(\vec{r})$ a ϵ_f sú vlnová funkcia a energia finálneho stavu f - a integrujeme cez normovaný objem Ω. Po dosadení bude ľavá strana rovnice (75)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_j c_{ij}(t)\int_\Omega d\vec{r}\Phi_f^*(\vec{r})\Phi_j(\vec{r})e^{\frac{i(\epsilon_f-\epsilon_j}{)}\hbar}, \tag{78}$$

kde využijúc ortogonalitu bázy $\{\Phi_j(\vec{r})\}$ môžeme ľavú stranu vysumovať. Rovnica (75) prejde na

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_{fi}(t) = \sum_j c_{ji}V_{fi}(t)e^{\frac{-i\epsilon_{fi}t}{\hbar}}, \tag{79}$$

kde sme zaviedli nasledovné označenia:

$$V_{fi}(t) \equiv \int_\Omega d\vec{r}\Phi_f(\vec{r})V(t)\Phi_i(\vec{r}) \tag{80}$$

$$\epsilon_{fi} \equiv \epsilon_f - \epsilon_i. \tag{81}$$

Teraz použijeme Bornovu aproximáciu $c_{ij}(t) = ij(t_0)$, čo je podľa (77) Kronekerov symbol, teda (79) prejde na

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_{fi}(t) = V_{fi}e^{\frac{-i\epsilon_{fi}t}{\hbar}}. \tag{82}$$

Túto diferenciálnu rovnicu vieme narozdiel od (75) a (79) riešiť jednoducho integrovaním:

$$c_{fi}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'V_{fi}(t')e^{\frac{-i\epsilon_{fi}t'}{\hbar}}. \tag{83}$$

.

Maticový element $V_{fi}(t)$ prepíšeme ako

$$V_{fi}(t) = V_{fi}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \tag{84}$$

$$V_{fi} \equiv \int_\Omega d\vec{r}\Phi_f^*(\vec{r})(\frac{-eEx}{2})\Phi_i(\vec{r}). \tag{85}$$

V rovinici (83) vykonáme integrál cez čas dostaneme

$$c_{fi}(t) = V_{fi}[\frac{e^{\frac{\epsilon_{fi}-\hbar\omega}{\hbar}} - 1}{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{fi} - \hbar\omega)} + \frac{e^{\frac{\epsilon_{fi}+\hbar\omega}{\hbar}} - 1}{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{fi} + \hbar\omega)}]. \tag{86}$$

Dostali sme koeficient $c_{fi}(t)$ rozvoja stavu $\Psi(t, \vec{r})$ do ortonormálnej bázy $\{\Phi_j(\vec{r})\}$ s počiatočnou podmienkou $\Psi(t_0, \vec{r}) = \Phi_i(\vec{r})$ pre jeden konkrétny vektor $\Phi_f(\vec{r})$. Modul tohoto koeficientu je pravdepodobnosť prechodu z *iniciálneho* stavu $\Phi_i(\vec{r})$ do *finálneho* stavu $\Phi_f(\vec{r})$.

Prenásobením (86) komplexne združeným dostaneme

$$\begin{aligned} |c_{fi}(t)|^2 = c_{fi}(t)c^*_{fi}(t) = {} & [\mathrm{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} - \hbar\omega}{\hbar}t) + \mathrm{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} + \hbar\omega}{\hbar}t) \\ & + 2\cos(\omega t)\mathrm{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} - \hbar\omega}{\hbar}t)\mathrm{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} + \hbar\omega}{\hbar}t)], \end{aligned} \tag{87}$$

kde sme zaviedli označenie

$$\mathrm{sinc}(x) = \frac{\sin(x)}{x}. \tag{88}$$

V nasledujúcich výpočtoch budeme potrebovať Bornovskú pravdepodobnosť prechodu za jednotku času $\frac{|c_{fi}(t)|^2}{t}$, ktorá nás zaujíma v limite nekonečného času.

$$W_{fi} = \lim_{t\to\infty} \frac{|c_{fi}(t)|^2}{t}. \tag{89}$$

Dosadíme (87) do (89). Tretí člen bude v limite nulový, na prvé dva použijeme nasledujúci vzťah:

$$\delta(x) = \lim_{t\to\infty} t\ \mathrm{sinc}(tx). \tag{90}$$

Dostávame nasledujúce vzťahy

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2[\delta(\epsilon_{fi} - \hbar\omega) + \delta(\epsilon_{fi} + \hbar\omega)] \tag{91}$$

$$W^{\mathrm{ABS}}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\delta(\epsilon_{fi} - \hbar\omega) \tag{92}$$

$$W^{\mathrm{EMIS}}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\delta(\epsilon_{fi} + \hbar\omega), \tag{93}$$

kde sme zadefinovali pravdepodobnosti zvlášť pre absorbciu a emisiu W^{ABS}_{fi} a W^{EMIS}_{fi}.

Odvodili sme kvantovú pravdepodobnosť prechodu medzi stavmi, z ktorej vieme určiť prenesený výkon, ako rozdiel absorbovaného a emitovaného výkonu vysumovaný cez všetky počiatočné a konečné stavy

$$A = 2[\sum_{f,i} \hbar\omega W^{\mathrm{ABS}}_{fi} f(\epsilon_i)(1 - f(\epsilon_f)) - \sum_{f,i} \hbar\omega W^{\mathrm{EMIS}}_{fi} f(\epsilon_i)(1 - f(\epsilon_f))] \tag{94}$$

Kde $f(\epsilon_i)$ sú Fermi-Diracove distribúcie a faktor 2 je kvôli spinu. Výraz (94) zjednodušíme nasledovnými úpravami

$$A = \frac{4\pi}{\hbar}[\sum_{f,i}\hbar\omega|V_{fi}|^2\delta(\epsilon_{fi}-\hbar\omega)f(\epsilon_i)(1-f(\epsilon_f)) - \sum_{f,i}\hbar\omega|V_{fi}|^2\delta(\epsilon_{fi}+\hbar\omega)f(\epsilon_i)(1-f(\epsilon_f))] \tag{95}$$

$$A = \frac{4\pi}{\hbar}[\sum_{f,i}\hbar\omega|V_{fi}|^2\delta(\epsilon_f-\epsilon_i-\hbar\omega)f(\epsilon_i)(1-f(\epsilon_f)) - \sum_{i,f}\hbar\omega|V_{if}|^2\delta(\epsilon_i-\epsilon_f+\hbar\omega)f(\epsilon_f)(1-f(\epsilon_i))] \tag{96}$$

$$A = \frac{4\pi}{\hbar}\sum_{f,i}\hbar\omega|V_{fi}|^2\delta(\epsilon_f-\epsilon_i-\hbar\omega)(f(\epsilon_i)-f(\epsilon_f)) \tag{97}$$

Kde v druhom riadku sme vymenili sčítacie indexy v druhej sume a v treťom riadku využili symetriu maticového elementu $|V_{fi}| = |V_{if}|$ a párnosť delta funkcie $\delta(x) = \delta(-x)$. Kvantový vzťah pre prenesený výkon (97) porovnám s klasickým

$$A = \frac{1}{T}\int_0^T \sigma(\omega)E^2\cos^2(\omega t)dt = \frac{1}{2}\sigma(\omega)E^2\omega, \tag{98}$$

kde $\sigma(\omega)$ je optická vodivosť. Po dosadení za maticový element podľa (85) môžme optickú vodivosť vyjadriť ako

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar\Omega}\sum_{f,i}\hbar\omega|v_{fi}|^2\delta(\epsilon_f-\epsilon_i-h\omega)(f(\epsilon_i)-f(\epsilon_f)) \tag{99}$$

$$v_{fi} \equiv \int_\Omega d\vec{r}\Phi_f^*(\vec{r})x\Phi_i(\vec{r}) \tag{100}$$

Nový maticový element je lepšie prepísať využitím komutačného vzťahu $[x,H] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p_x}$ ako

$$v_{fi} = -\frac{\hbar}{m(\epsilon_f-\epsilon_i)}D_{fi} \tag{101}$$

$$D_{fi} \equiv \int_\Omega d\vec{r}\Phi_f^*(\vec{r})\frac{d}{dx}\Phi_i(\vec{r}), \tag{102}$$

Vzťah (99) bude teda

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2\Omega}\sum_{f,i}\frac{\hbar\omega}{(\epsilon_f-\epsilon_i)^2}|D_{fi}|^2\delta(\epsilon_f-\epsilon_i-\hbar\omega)(f(\epsilon_i)-f(\epsilon_f)). \tag{103}$$

Teraz potrebujeme vypočítať maticový elemnt $|D_{fi}|^2$ na ktorý ale potrebujeme vlnové funkcie $\Phi_i(\vec{r})$. Preto musíme riešiť Schrödingerovu rovnicu pre elektrón v kove s disorderom

$$(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}} + V_{dis}(\vec{r}))\Phi_i(\vec{r}) = \mathcal{E}_i\Phi(\vec{r}). \tag{104}$$

Túto rovnicu budeme riešiť poruchovou teóriou, neporušenými stavmi budú rovinné vlny

$$\Phi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} a^i_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{105}$$

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}}. \tag{106}$$

Ešte predtým však dosadím rozvoj (105) do maticového elementu (102). Modul maticového elementu potom bude

$$|D_{fi}|^2 = \int_\Omega d\vec{r} \sum_{\vec{k}_1} a^f_{\vec{k}_1} \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}) \frac{d}{dx} \sum_{\vec{k}_2} a^{i*}_{\vec{k}_2} \phi^*_{\vec{k}_2}(\vec{r}) \int_\Omega d\vec{r}\,' \sum_{\vec{k}_3} a^{f*}_{\vec{k}_3} \phi^*_{\vec{k}_3}(\vec{r}\,') \frac{d}{dx'} \sum_{\vec{k}_4} a^i_{\vec{k}_4} \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}\,') \tag{107}$$

Teraz využijeme nasledovné vzťahy:

$$\frac{d}{dx} \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) = -ik_{2x} \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) \tag{108}$$

$$\frac{d}{dx'} \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}\,') = -ik_{4x} \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}\,') \tag{109}$$

$$\int_\Omega d\vec{r} \phi^*_{\vec{k}_1}(\vec{r}) \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) = \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \tag{110}$$

$$\int_\Omega d\vec{r}\,' \phi^*_{\vec{k}_3}(\vec{r}\,') \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}\,') = \delta_{\vec{k}_3 \vec{k}_4}. \tag{111}$$

Vysumujeme cez Kroneckerove symboly, a dostaneme

$$|D_{fi}|^2 = \sum_{\vec{k}\vec{k}\,'} a^{f*}_{\vec{k}\,'} a^f_{\vec{k}} a^{*i}_{\vec{k}} a^i_{\vec{k}\,'} k_x k'_x, \tag{112}$$

kde sme preznačili sumačné indexy $\vec{k} \equiv \vec{k}_1$ a $\vec{k}\,' \equiv \vec{k}_2$.

Doteraz sme v tejto kapitole prezentovali presné výsledky. Teraz urobíme prvé aproximácie. Maticový element $|D_{fi}|^2$ je pre jeden konkrétny disorder, teda jedno náhodné usporiadanie porúch v kryštáli. V reálnom prípade nás zaujíma maticový element pre *stredný disorder*, ktorý dostaneme ako strednú hodnotu všetkých možných disorderov.

$$\overline{|D_{fi}|^2} = \sum_{\vec{k}\vec{k}\,'} \overline{a^{f*}_{\vec{k}\,'} a^f_{\vec{k}} a^{*i}_{\vec{k}} a^i_{\vec{k}\,'}} k_x k'_x. \tag{113}$$

Predpokladáme, že disorder je *slabý*, preto môžme urobiť aj druhú aproximáciu, ktorá predpokladá nekorelovanosť stavov i a f, preto môžme písať.

$$\overline{|D_{fi}|^2} = \sum_{\vec{k}\vec{k}\,'} \overline{a^{f*}_{\vec{k}\,'} a^f_{\vec{k}}}\,\overline{a^{*i}_{\vec{k}} a^i_{\vec{k}\,'}} k_x k'_x \tag{114}$$

Nakoniec predpokladáme, že stavy $\vec{k}$ a $\vec{k}\,'$ sú nekorelované, teda

$$\overline{|D_{fi}|^2} = \sum_{\vec{k}\vec{k}\,'} \overline{a^{f*}_{\vec{k}\,'} a^{f}_{\vec{k}}} \overline{a^{*i}_{\vec{k}} a^{i}_{\vec{k}\,'}} k_x k'_x \delta_{kk'} = \sum_{\vec{k}} \overline{a^{f*}_{\vec{k}} a^{f}_{\vec{k}}} \overline{a^{*i}_{\vec{k}} a^{i}_{\vec{k}}} k_x^2. \tag{115}$$

Koeficienty $a^f_{\vec{k}}$,$a^i_{\vec{k}}$ získame riešením (104) stacionárnou poruchovou metódou do 1 rádu. Pre $\Phi_i(\vec{r})$ dostávame

$$\Phi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}\vec{k}\,'}}{\epsilon_{\vec{k}_i} - \epsilon_{\vec{k}_f}} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}), \tag{116}$$

čo sú presne koeficienty $a^i_{\vec{k}}$, preto dostávame

$$\overline{a^{*i}_{\vec{k}} a^{i}_{\vec{k}}} = \frac{|V_{\vec{k}\vec{k}_i}|^2}{(\epsilon_{\vec{k}_i} - \epsilon_{\vec{k}})^2}. \tag{117}$$

Vráťme sa teraz k BKR.

$$\dot{\vec{k}} \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}) =< \frac{\partial f}{\partial t} >_{coll} = \frac{-f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau_{\vec{k}}} \tag{118}$$

kde $f_0(\vec{k})$ je Fermi-Diracova distribúcia a $\tau_{\vec{k}}$ je relaxačný čas. Použitím Fermiho Zlatého Pravidla dostávame

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \sum_{\vec{k}} W_{\vec{k}_i\vec{k}} (1 - \frac{k_x}{k_{ix}}) = \sum_{\vec{k}} \frac{2\pi}{\hbar} | < \vec{k}|V_{dis}(\vec{r})|\vec{k}_i > |^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_{\vec{k}})(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}), \tag{119}$$

kde $\vec{k}_i$ je iniciálny stav. Stavy $|\vec{k}>$, $|\vec{k}_i>$ sú rovinné vlny (106).

Do (119) dosadíme bodový model disorderu.

$$V_{dis}(\vec{r}) = \sum_{j=1} \gamma \delta(\vec{r} - \vec{R}^{imp}_j), \tag{120}$$

kde N_{imp} je počet bodových porúch v kryštáli, a $\vec{R}^{imp}_j$ sú náhodné polohy daných bodov. Takýto model je pre *slabý* disorder postačujúci. (120) dosadíme do (119). Pre prehľadnosť textu sa venujeme len časti $< \vec{k}|V_{dis}(\vec{r})|\vec{k}_i > 2$

$$< \vec{k}|V_{dis}(\vec{r})|\vec{k}_i > = \sum_{j=1}^{N_{imp}} \gamma < \vec{k}|\delta(\vec{r} - \vec{R}^{imp}_j)|\vec{k}_i > \tag{121}$$

$$< \vec{k}|V_{dis}(\vec{r})|\vec{k}_i > = \frac{1}{\Omega^2} \sum_{j=1}^{N_{imp}} \gamma \int_\Omega d\vec{r} \delta(\vec{r} - \vec{R}^{imp}_j) e^{i(\vec{k} - \vec{k}_i)} \tag{122}$$

$$< \vec{k}|V_{dis}(\vec{r})|\vec{k}_i > = \frac{1}{\Omega^2} \sum_{j=1}^{N_{imp}} \gamma e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}) R^{imp}_j}, \tag{123}$$

kde v poslednom riadku sme využili Fourierovu transformáciu delta funkcie. Výsledok (123) dosadíme do (119)

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \frac{2\pi}{\Omega^2\hbar}\gamma^2 \sum_{j=1}^{N_{imp}} \sum_{j'=1}^{N_{imp}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_i)(\vec{R}_j^{imp}-\vec{R}_{j'}^{imp})} \delta(\epsilon_i - \epsilon_{\vec{k}})(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}). \tag{124}$$

V (124) napíšeme osobitne sumu pre členy, kde $j = j'$. V tejto sume dostaneme v exponente nulu, teda celý výsledok je rovný jednej. Po vysumovaní takýchto členov dostanem N_{imp}.

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \frac{2\pi}{\Omega^2\hbar}\gamma^2 [N_{imp} + \sum_{j\neq j'=1}^{N_{imp}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_i)(\vec{R}_j^{imp}-\vec{R}_{j'}^{imp})}] \delta(\epsilon_i - \epsilon_{\vec{k}})(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}). \tag{125}$$

Sumu $\sum_{j\neq j'=1}^{N_{imp}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_i)(\vec{R}_j^{imp}-\vec{R}_{j'}^{imp})}$ môžme interpretovať ako náhodnú chôdzu v komplexonom priestore. Po vysčítaní dostanem

$$\sum_{j\neq j'=1}^{N_{imp}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_i)(\vec{R}_j^{imp}-\vec{R}_{j'}^{imp})} = N_{imp} e^{i\alpha}, \tag{126}$$

kde α je náhodná fáza. Teraz znova uvedieme výpočet pre stredný disorder, pri stredovaní dostanem

$$\overline{N_{imp} e^{i\alpha}} = 0, \tag{127}$$

po dosadení do (125) a vystredovaní teda dostaneme

$$\frac{1}{\overline{\tau_{\vec{k}_i}}} = \frac{2\pi}{\Omega^2\hbar}\gamma^2 \sum_{\vec{k}} N_{imp} \delta(\epsilon_{\vec{k}_i} - \epsilon_{\vec{k}})(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}). \tag{128}$$

Teraz vysumujeme (128). Delta funkcia je párna a druhý člen v zátvorke je nepárny. Ich súčin bude tiež nepárny, a teda po vysumovaní cez párny interval všetkých $\vec{k}$ dostaneme nulu. Ostáva nám sumovať $\sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon_{\vec{k}_i} - \epsilon_{\vec{k}})$ čo je z definície hustota stavov $\rho(\epsilon_{\vec{k}_i})$. Finálny výsledok pre relaxačný čas teda bude

$$\frac{1}{\overline{\tau_{\vec{k}_i}}} = \frac{2\pi}{\Omega\hbar}\gamma^2 n_{imp} \rho(\epsilon_{\vec{k}_i}), \tag{129}$$

kde sme zaviedli pojem hustoty bodového disorderu $n_{imp} = \frac{N_{imp}}{\Omega}$. Z rovníc (129) a (117) dostaneme

$$\overline{a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}}^{i}} = \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2}. \tag{130}$$

Dostali sme vzťah (130), ktorý je však divergentný, teda nespĺňa normalizačnú podmienku. Navrheneme teda korekciu, extra člen v menovateli $(\frac{\hbar}{2\tau})^2$, a dostaneme Lorenzián

$$\overline{a^{i*}_{\vec{k}} a^{i}_{\vec{k}}} = \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2}. \tag{131}$$

Túto korekciu vysvetlíme neskôr, teraz ju dosadíme do (103).

$$\begin{aligned}\sigma(\omega) =& \frac{2\pi e^2\hbar^3}{m^2\Omega} \sum_{f,i} \frac{\hbar\omega}{(\epsilon_f - \epsilon_i)} \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega)(f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)) \\ & \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_f)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} k_x^2\end{aligned} \tag{132}$$

Prejdeme od sumy cez $\vec{k}$ k integrálu

$$\begin{aligned}\sigma(\omega) =& \frac{2\pi e^2\hbar^3}{m^2(2\pi)^3} \sum_{f,i} \frac{\hbar\omega}{(\epsilon_f - \epsilon_i)} \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega)(f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)) \\ & \int_\Omega d\vec{k} \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_f)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} k_x^2,\end{aligned} \tag{133}$$

Kvôli prehladnosti sa ideme venvať len integrálu cez $\vec{k}$. Prejdeme do sférických súradníc, dostaneme

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \frac{\sin(\theta) cos^2(\theta)\sin^2(\theta)}{4\pi} \frac{\Omega}{2\pi} \int_0^\infty dk k^2 \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_f)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{1}{\pi\rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \tag{134}$$

Výsledok prvých dvoch integrálov je $\frac{1}{3}$. V poslednom integráli vieme prejsť do energetických súradníc. Napíšeme ho nasledovne

$$\frac{1}{3}\frac{1}{\pi^2\rho(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)} \int_0^\infty d\epsilon_k \rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_k)k(\epsilon_k)\rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_k)k(\epsilon_k) \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2}. \tag{135}$$

Teraz využijeme rovnosť $\rho(\epsilon_k)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_k) = \rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i) = \rho(\epsilon_f)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_f)$. Integrál teda bude

$$\begin{aligned}&\frac{1}{3}\frac{\rho(\epsilon_f)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)}{\pi\rho(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)} \int_0^\infty d\epsilon_k \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \approx \\ & \qquad \frac{1}{3}\frac{\rho(\epsilon_f)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)(\frac{\hbar}{2\tau})^2}{\pi\rho(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)} \frac{4\pi(\frac{\tau}{\hbar})^3}{1+\tau^2(\frac{\epsilon_f-\epsilon_i}{2})^2}.\end{aligned} \tag{136}$$

Tento približný výsledok platí za nasledovných predpokladov

$$\frac{\epsilon_i}{\frac{\hbar}{\tau}} >> 1 \tag{137}$$

$$\frac{\epsilon_f}{\frac{\hbar}{\tau}} >> 1. \tag{138}$$

Teraz sa vrátime k rovnici pre optickú vodivosť (133) a za integrál cez $\vec{k}$ dosadíme približný výsledok (136)

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar}\frac{1}{3}\frac{\hbar^2}{m^2}\tau\hbar^2\frac{2\pi}{\hbar}4\pi\sum_{f,i}\frac{1}{3}\frac{\rho(\epsilon_f)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)}{\pi\rho(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)}\frac{\hbar}{\epsilon_f-\epsilon_i}\delta(\epsilon_f-\epsilon_i-\hbar\omega)(f(\epsilon_i)-f(\epsilon_f)) \tag{139}$$

$$\frac{1}{1+\tau^2(\frac{\epsilon_f-\epsilon_i}{2})^2}.$$

Znova prejdeme od sumy k integrálu cez energie pre f a i. Jeden z integrálov vieme vykonať hneď kvôli delta funkcii.

$$\sigma(\omega) = e^2\frac{1}{3}(\frac{\hbar^2}{m^2}\tau)\frac{1}{1+\tau^2\omega^2}\int_0^\infty d\epsilon_i\rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_i)k(\epsilon_i)\rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_i+\hbar\omega)k(\epsilon_i+\hbar\omega)(f(\epsilon_i)-f(\epsilon_i+\hbar\omega)). \tag{140}$$

Pri výpočte uvažujeme nulovú teplotu, Fermi-Diracove rozdelenia budú Θ funkcie, ktoré obmedzia integračné hranice. Dostávame finálny výsledok, Kubovu Formulu

$$\sigma(\omega) = e^2\frac{1}{3}\frac{\hbar^2k_F^2}{m^2}\tau 2\rho(E_F)\frac{1}{1+\tau^2\omega^2}F(\omega) \tag{141}$$

$$F(\omega) \equiv \frac{1}{\hbar\omega}\int_{EF-\hbar\omega}^{E_F} d\epsilon_i\frac{\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)\rho(\epsilon_i+\hbar\omega)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i+\hbar\omega)}{\rho(E_F)k_F^2} \tag{142}$$

kde dvojka pred hustotou stavov je kvôli spinu. Pre $\omega = 0$ platí $F(0) = 1$. To znamená, že pre nulovú frekvenciu dostávame Drudeho formulu

$$\sigma(0) = e^2\rho(E_F)D(E_F) = \sigma_{drude}, \tag{143}$$

kde $D(E_F)$ je difúzny koeficient

$$D(E_F) = \frac{1}{3}v_F^2\tau \tag{144}$$

Odvodili sme Kubovu formulu a z nej Drudeho formulu. Naše odvodenia boli rýdzo kvantové, bez semiklasického prístupu BKR. Ostáva nám už len zdôvodniť korekciu, ktorú sme urobili pri prechode z divergentného vzťahu (130) na lorenzián (131).

Výsledok (130) sme dostali riešením (104) stacionárnou poruchovou teóriou, teraz ideme riešiť rovnaký problém nestacionárne.

$$(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}} + V_{dis}(\vec{r}))\Phi_i(\vec{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\vec{r}). \tag{145}$$

Podobne, ako sme riešili (75), do rovnice (145) dosadíme rozvoj

$$\Phi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\vec{k}_i}(t)\phi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}t}{\hbar}}, \tag{146}$$

po úpravách dostaneme

$$\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_{\vec{k}_f}^{\vec{k}_i} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\vec{k}_i}(t)\phi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{\frac{(\epsilon_{\vec{k}}-\epsilon_{\vec{k}_i})t}{\hbar}}V_{fi}, \tag{147}$$

použijeme Bornovu aproximáciu a výsledok je

$$a_{\vec{k}_f}^{\vec{k}_i} = \frac{-V_{fi}}{(\epsilon_f - \epsilon_i)}(e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_i-\epsilon_f)t} - 1). \tag{148}$$

V tomto vzťahu spoznávame koeficient z nestacionárnej teórie.Finálny výsledok bude identícký, pretože náš problém nie je časovo závislý. Teraz zakomponujeme časovú závislosť

$$V_{dis}(t) = V_{dis}e^{\frac{-t}{\tau}}. \tag{149}$$

Do rovnice sme vložili konečné zapínanie poruchy v čase τ. Pre koeficienty dostaneme

$$a_{\vec{k}_f}^{\vec{k}_i} = \frac{-V_{fi}}{(\epsilon_f - \epsilon_i) - \frac{i\hbar}{2\tau}}(e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_i-\epsilon_f-\frac{\hbar}{2\tau})t}) - 1. \tag{150}$$

z čoho po prenásobení komplexne združeným dostaneme lorenzián (131).

Záver

Zaver

Zoznam použitej literatúry

[1] B. L. Altshuler and A. G. Aronov, "Electron-electron interactions in disordered systems," p. 1, Elsevier, 1985.