

# 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 25, 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

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

- Po integrovaní cez  $\phi$  a  $\theta$  a zámene premenných za energiu 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 je hustota stavov

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

- maximálne obsadené stavy neinteragujúcich elektrónov pri  $T=0$  budú na Fermiho Sfére s polomerom

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

- energia na Fermiho sfére (Fermiho Energia) je

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

- po započítaní vzájomnej interakcie elektrónov (e-e interakcie) a interakcie s iónmi dostaneme mnohočasticový Hamiltonián

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

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

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

- vlnové funkcie  $\Psi$  hľadáme 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 členy

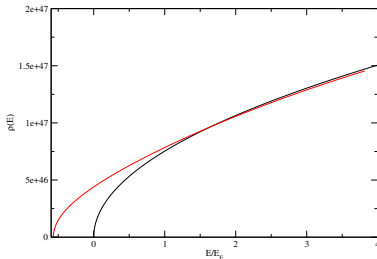
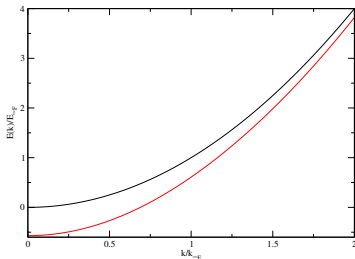
$$U^{el}(\vec{r}) = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \rho_{el}(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad \text{a} \quad U^{ion}(\vec{r}) = -\sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_j|} \quad (11)$$

- Problém riešime v modeli žele, teda členy  $U^{el}(\vec{r})$  a  $U^{ion}(\vec{r})$  vypadnú, dostaneme Fockove rovnice

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

Do Fockových rovníc dosadíme fourierovu transformáciu tieneneho potenciálu  $e^2/\epsilon_0(|\vec{k}' - \vec{k}|^2 + k_s^2)$ , kde  $k_s$  je reciproká tieniaca dĺžka. Pre energiu dostávame

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{(2\pi)^2 \epsilon_0} \left( \frac{k_F^2 - k^2 + k_s^2}{4k} \ln \frac{(k_F + k)^2 + k_s^2}{(k_F - k)^2 + k_s^2} - k_s \left( \arctan \frac{k_F + k}{k_s} + \arctan \frac{k_F - k}{k_s} \right) + k_F \right). \quad (13)$$



Vľavo energia podľa rovnice (13). Vpravo hustota stavov prislúchajúca (13). Čierne čiary zobrazujú energiu resp. hustotu stavov bez e-e interakcie, červené čiary zobrazujú výsledky podľa. (13) Naša teória zahŕňa aj výmenný aj korelačný efekt.

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

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{dis}(\vec{r})\right)\phi_m^{(0)}(\vec{r}) = \mathcal{E}_m\phi_m^{(0)}(\vec{r}), \quad (14)$$

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{dis}(\vec{r})\right)\phi_m(\vec{r}) - \sum_{\forall m'} \int d\vec{r}' \phi_{m'}^*(\vec{r}')\phi_m(\vec{r}')V(\vec{r}-\vec{r}')\phi_{m'}(\vec{r}) = E_m\phi_m(\vec{r}). \quad (15)$$

- Problém (15) riešime v prvom ráde poruchovej teórie.  $\phi_m(\vec{r}) \simeq \phi_m^{(0)}(\vec{r})$
- Pre stredný disorder dostaneme

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(q) \overline{|\langle \phi_m | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|^2}. \quad (16)$$

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



- Pre výpočet energie nám stačí maticový element.

$$|\overline{M_{mm'}}|^2 = |\overline{\langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle}|^2. \quad (17)$$

- Difúzna aproximácia spočíva v postulovaní rovnice

$$\overline{\psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}, \quad (18)$$

- vlnovú funkciu častice z rovnice (18) rozvineme do stacionárnych stavov  $\phi_m(\vec{r})$

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{\sqrt{V}}{\sqrt{N}} \sum_m \phi_m^*(\vec{r}_0) \phi_m(\vec{r}) e^{-i\frac{\mathcal{E}_m}{\hbar} t}, \quad (19)$$

- Difúzna aproximácia platí len za predpokladu  $|\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_{m'}| \ll \hbar/\tau$
- Z difúznej aproximácie vieme dostať maticový element, ktorý dosadíme do rovnice pre energiu (16)

$$\overline{E(\mathcal{E})} = \overline{\mathcal{E}} - \int_0^{\mathcal{E}_F} d\mathcal{E}' \rho(\mathcal{E}') \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(q) \overline{|\langle \phi_{\mathcal{E}} | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{\mathcal{E}'} \rangle|^2}. \quad (20)$$

- rovnicu (20) zapíšeme v tvare  $\overline{E(\mathcal{E})} = \overline{\mathcal{E}} + E_{self}(\mathcal{E})$
- derivujeme podľa počtu stavov a dostaneme

$$\frac{dE(\mathcal{E})}{dn} = \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{dn} = \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} \frac{d\mathcal{E}}{dn} = \frac{d\mathcal{E}}{dn} \left(1 + \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}\right). \quad (21)$$

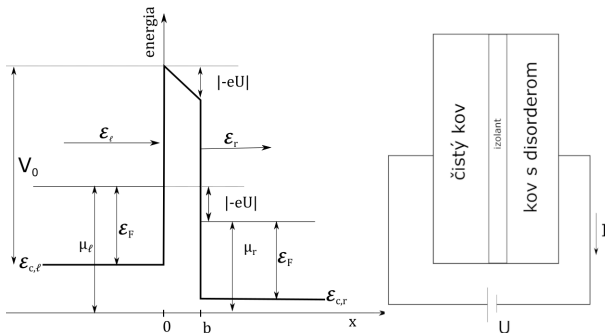
- otočením oboch strán dostaneme hustotu stavov, ktorú počítame ako Taylorov rozvoj do prvého rádu

$$\rho(\mathcal{E}) \simeq \rho_0(\mathcal{E}) \left[1 - \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}\right] \simeq \rho_0(\mathcal{E}_F) \left[1 - \frac{dE_{self}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}\right]. \quad (22)$$

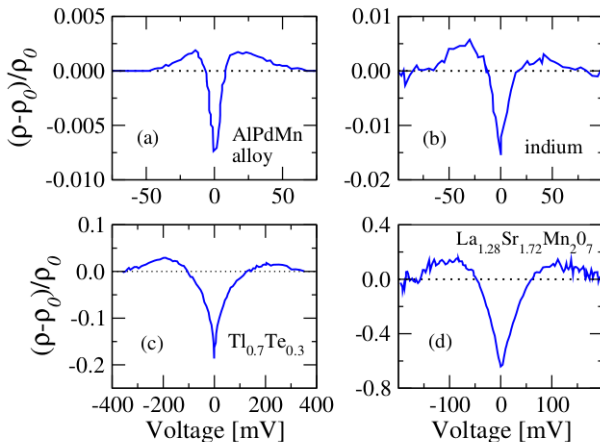
- Dosadením self energie dostaneme Altschuler-Aronovov výsledok

$$\rho(\mathcal{E}) = \rho_0(\mathcal{E}_F) - \frac{q_{max}}{2\pi^3 \hbar D} + \frac{1}{2\pi^2 (2\hbar D)^{3/2}} \sqrt{|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|}. \quad (23)$$

# Meranie hustoty stavov v kove s disorderom metódou tunelovej spektroskopie



Hustotu stavov určíme meraním diferenciálnej vodivosti dvoch kovov oddelených tenkou vrstvou izolantu, ako vidíme na obrázku. Dá sa ukázať, že pre diferenciálnu vodivosť platí  $G(U) = e^2 \frac{4\pi |t|^2}{\hbar} \rho_l(\mathcal{E}_F) \rho_r(\mathcal{E} = \mathcal{E}_F - eU)$ , z čoho určíme hustotu stavov.



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  $\rho_0$  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  $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| = U_{co}$ ,

$$U_{co} = \frac{8}{3\pi^2} q_{max}^2 \rho \frac{\hbar}{\tau}. \quad (24)$$

je tzv. 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  $\rho_0$  najprv prevýši a až potom k nej konverguje zhora) nemá oporu v dostupných teóriach.
- Teóriu sa pokúsime rozšíriť do oblastí  $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \gtrsim U_{co}$

- vychádzame z rovnice

$$\overline{E}_m = \overline{\mathcal{E}}_m - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(q) |\langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|^2. \quad (25)$$

kde  $V(q) = e^2/\varepsilon_0(q^2 + k_s^2)$ .

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

$$\begin{aligned} \overline{E}_m = & \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m} - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(q) |\langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|^2 \\ & - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| > q_{max}} d\vec{q} V(q) |\langle k_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | k_{m'} \rangle|^2. \end{aligned} \quad (26)$$

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

- Rovnicu (26) prepíšeme do tvaru

$$\overline{E_m} = \mathcal{E}_m + E_{self}^{AA}(m) - E_{self}^{free}(m), \quad (27)$$

kde

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

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

$$E_{self}^{AA}(m) = - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(q) | \langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle |^2 \quad (29)$$

je Altschuler Aronovova self energia

$$E_{self}^{free}(m) = - \sum_{\forall m'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(q) | \langle k_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | k_{m'} \rangle |^2, \quad (30)$$

je self-energia pochádzajúca z Fockovho príspevku od rovinných vln

- Počítame (29). Altschuler a Aronov počítali v difúznej aproximácii, my zvolíme iný postup.

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

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

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{(2\pi)^3 \Omega^2} \times \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} \, V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_3} \int d\vec{r} c_{\vec{k}_1}^{m*} c_{\vec{k}_3}^{m'} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{k}_3\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{k}_4} \int d\vec{r}' c_{\vec{k}_4}^{m'*} c_{\vec{k}_2}^m e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} e^{-i\vec{k}_4\cdot\vec{r}'} e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}'} . \quad (31)$$

- Využijeme vzťahy

$$\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{i(\vec{k}_1 + \vec{q} - \vec{k}_3)\vec{r}} = \delta_{\vec{k}_3, \vec{k}_1 + \vec{q}} \quad , \quad \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}' e^{i(\vec{k}_2 - \vec{q} - \vec{k}_4)\vec{r}'} = \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_4 + \vec{q}} . \quad (32)$$



- Po vysumovaní s pomocou Kroneckerových symbolov dostaneme

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \overline{c_{\vec{k}+\vec{q}}^{*m} c_{\vec{k}'+\vec{q}}^m} c_{\vec{k}}^{*m'} c_{\vec{k}}^{m'}. \quad (33)$$

- Začínáme robiť aproximácie. Stav  $m$  a  $m'$  považujeme za nekorelované.
- Navyše predpokladáme, že aj stavy  $\vec{k}$  a  $\vec{k}'$  sú nekorelované.
- rovniciu (33) pomocou aproximácií zjednodušíme na

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}} \overline{c_{\vec{k}+\vec{q}}^{*m} c_{\vec{k}+\vec{q}}^m} \overline{c_{\vec{k}}^{*m'} c_{\vec{k}}^{m'}}. \quad (34)$$

- Využijeme Thoulessov Ansatz

$$\overline{c_k^{m*}} \overline{c_k^m} = \frac{1}{\pi \rho(\varepsilon_m)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\varepsilon_m - \varepsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2}. \quad (35)$$

- Thouless [22] použil aproximáciu (35) pri opise vlnových funkcií neusporiadaného elektrónového systému v kvantovej vodivosti Kuba - Greenwooda
- Ukázal, že aproximácia (35) 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

$$E_{self}^{AA}(\varepsilon_m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) \int d\varepsilon_k \rho(\varepsilon_k) \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon_{m'} \rho(\varepsilon_{m'}) \frac{1}{\pi \rho(\varepsilon_m)} \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_m - \varepsilon_k)^2 + \varepsilon_\tau^2} \frac{1}{\pi \rho(\varepsilon_{m'})} \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_{m'} - \varepsilon_{|\vec{k}+\vec{q}|})^2 + \varepsilon_\tau^2}. \quad (36)$$

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

$$E_{self}^{AA}(\varepsilon_m) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\pi^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{q_{max}} dq q^2 V(q) \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon_{m'} \int_0^\infty d\varepsilon_k \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_m - \varepsilon_k)^2 + \varepsilon_\tau^2} \frac{\varepsilon_\tau}{(\varepsilon_k + \varepsilon_q + 2\sqrt{\varepsilon_k \varepsilon_q} \cos(\theta) - \varepsilon_{m'})^2 + \varepsilon_\tau^2}. \quad (37)$$

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

- po formálnom vystredovaní (27) cez  $\frac{1}{\rho(\varepsilon)} \sum_{\forall m} \delta(\varepsilon - \varepsilon_m)$  rovnica prejde na tvar

$$\bar{E} = \mathcal{E}(\varepsilon) + E_{self}^{AA}(\varepsilon) - E_{self}^{free}(\varepsilon). \quad (38)$$

- rovnicu (38) derivujeme podľa počtu stavov a prevrátime. Následne po Taylorovom rozvoji a úpravách dostaneme.

$$\rho(\mathcal{E}) = \rho_0(\mathcal{E}) \left( 1 - \frac{dE_{self}^{AA}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} + \frac{dE_{self}^{free}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} \right), \quad (39)$$

kde sme urobili aproximáciu  $\frac{d\varepsilon}{d\mathcal{E}} \simeq 1$  čo znamená aj aproximáciu  $\varepsilon \simeq \mathcal{E}$ .

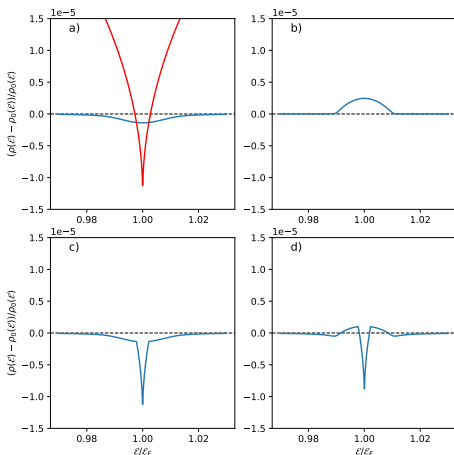
- hustotu stavov plotujeme v tvare relatívnej odchýlky, kde  $\mathcal{E}(\varepsilon)$  je disperzný zákon interagujúcich elektrónov.

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})} = - \frac{dE_{self}^{AA}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} + \frac{dE_{self}^{free}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}, \quad (40)$$

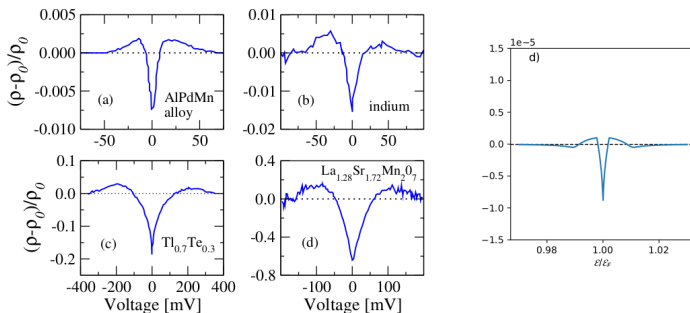
- v tomto tvare prepíšeme aj pôvodný vzťah Altschulera a Aronova

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})} = - \frac{e^2}{\varepsilon_0 k_s^2} \frac{q_{max}}{2\pi^3 \hbar D} + \frac{e^2}{\varepsilon_0 k_s^2} \frac{1}{2\pi^2 (2\hbar D)^{3/2}} \sqrt{|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F|}, \quad (41)$$

# Výsledky a ich diskusia



Panel (a): Krivka ukázaná červenou farbou je pôvodná závislosť Altshulera - Aronova (41). krivka ukázaná modrou farbou ukazuje prvý člen numerického výpočtu (40). 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 (40). 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.

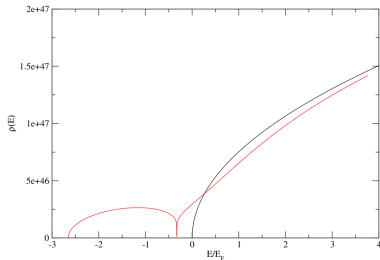
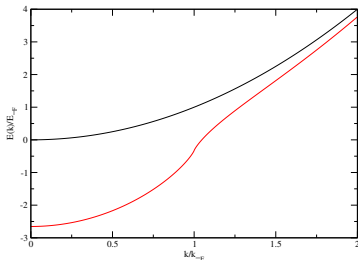
# Pod'akovanie

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.

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

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_f}{4\pi^2 \epsilon_0} F\left(\frac{k}{k_f}\right) \quad \text{kde} \quad F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|. \quad (42)$$



Vľavo je energia podľa rovnice (42). V pravo hustota stavov prislúchajúca (42). 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:

$$w = \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_\tau}, \quad u = \frac{\varepsilon_{m'}}{\varepsilon_\tau}, \quad x = \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_\tau}, \quad y = \frac{\varepsilon_q}{\varepsilon_\tau}, \quad \bar{y} = \frac{q}{k_s}, \quad \bar{y}_{max} = \frac{q_{max}}{k_s}, \quad u_{EF} = \frac{\mathcal{E}_F}{\varepsilon_\tau}. \quad (43)$$

- Po vykonaní analytických integrálov dostaneme

$$E_{self}^{AA}(\varepsilon_m) = -\frac{e^2}{4\pi^4 \varepsilon_0 k_s^{-1}} \int_0^{\bar{y}_{max}} d\bar{y} \frac{\bar{y}^2}{1 + \bar{y}^2} \int_0^\infty dx \frac{1}{(w-x)^2 + 1} F(x, y), \quad (44)$$

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 (44) počítame numericky obdĺžnikovou metódou