

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

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.



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-Fockovú 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 konzultácií a použitej literatúry.

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

V Bratislave, dňa 13. apríla 2022

Matúš Jenča

Podakovanie 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.

Abstrakt v štátnom jazyku

Sample Text

Kľúčové slová: Sample Keyword

Abstract

Sample Text

Keywords: Sample Keyword

Obsah

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------|----|
| Úvod | 8 |
| 1 Elektróny v kovovej mriežke ako voľné neinteragujúce častice | 8 |
| 2 Hartree-Fockova aproximácia , netienená Coulombovská interakcia v modeli žele | 11 |
| 3 Tienenie Coulombovskej interakcie, vplyv na Fockovu self-energiu | 15 |
| 4 Interagujúce elektróny v kove s disorderom : Altshuler-Aronovova aproximácia | 18 |
| 5 Experimentálne meranie hustoty stavov v disorderovanom kove | 26 |
| 6 Odvodenie Kubovej Formuly | 29 |
| 7 Fyzikálne odvodenie Thoulessovho ansatzu pre kov s disorderom | 36 |
| 8 Výpočet hustoty stavov Thoulesovým ansatzom | 39 |
| Záver | 43 |
| Zoznam použitej literatúry | 44 |

Úvod

Úvod

1 Elektróny v kovovej mriežke ako voľné neinteragujúce častice

Najjednoduchšou aproximáciou pre vodivostné elektróny v kove je aproximácia voľných neinteragujúcich elektrónov, ktorú teraz predstavíme s dôrazom na fakty, na ktoré sa budeme neskôr odvolávať. Stav častice v kvantovej mechanike popisuje vlnová funkcia $\Psi(\vec{r}, t)$. Pomocou vlnovej funkcie je definovaná hustota pravdepodobnosti výskytu častice

$$\rho(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t)\Psi^*(\vec{r}, t). \quad (1)$$

Táto hustota pravdepodobnosti musí spĺňať normalizačnú podmienku

$$\int_V d\vec{r} \rho(\vec{r}, t) = 1, \quad (2)$$

kde V je objem priestoru, v ktorom sa častica s istotou nachádza. Vlnová funkcia pre voľnú časticu má tvar

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{E(k)t}{\hbar})}, \quad (3)$$

kde A je normovacia konštanta, $\hbar\vec{k} = \vec{p} = m\vec{v}$ je hybnosť voľnej častice, a

$$E(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (4)$$

je energia voľnej častice. Pre voľnú časticu dostaneme z rovníc (3), (1) a (2) rovnicu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz AA^* = 1, \quad (5)$$

ktorá určuje normováciu konštantu A . V tejto rovnici je objem V z definície nekonečný, nakoľko sa jedná o voľnú časticu. Preto sa rovnica dá splniť len pre nulové A , čím sa vlnová funkcia triviálne vynuluje. Tomuto problému sa dá vyhnúť použitím Born von Karmanových podmienok. Uvažujeme priestor rozdelený na kvádre so stranami L_x , L_y a L_z a predpokladáme, že v každom kvádri sa nachádza elektrón s tou istou vlnovou funkciou

ako v tých ostatných. Tento predpoklad vyjadrujú Born von Karmanove podmienky

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x + L_x, y, z, t)$$

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y + L_y, z, t)$$

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z + L_z, t).$$

Vďaka nim sa normovacia podmienka (5) zmení na

$$\int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} dx dy dz A A^* = 1. \quad (6)$$

Z poslednej rovnice dostaneme

$$A = \sqrt{\frac{1}{L_x L_y L_z}} e^{i\phi}, \quad (7)$$

kde $\phi \in [0, 2\pi)$ je ľubovoľná fáza. Pred použitím Born von Karmanových podmienok mohla hybnosť častice $\hbar \vec{k}$ vo vlnovej funkcii (3) nadobúdať spojité hodnoty. Ak vlnovú funkciu (3) dosadíme do Born von Karmanových podmienok, vidíme, že sú splnené len pre diskkrétne hodnoty \vec{k} ,

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi}{L_x} n_x, & n_x &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ k_y &= \frac{2\pi}{L_y} n_y, & n_y &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ k_z &= \frac{2\pi}{L_z} n_z, & n_z &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned}$$

Tieto diskkrétne hodnoty sú kvantové čísla priestorovej časti vlnovej funkcie a daná trojica k_x, k_y, k_z predstavuje jeden dostupný kvantový stav. Tento stav je vektor v trojrozmernom kartézskom \vec{k} priestore. Je vidno, že na jeden takýto stav pripadá objem

$$\Delta = \frac{8\pi^3}{L_x L_y L_z}. \quad (8)$$

Otočením posledného vzťahu získame dôležitú veličinu, hustotu stavov v \vec{k} priestore,

$$1/\Delta = \frac{L_x L_y L_z}{8\pi^3}. \quad (9)$$

Uvažujme kovovú vzorku veľkosti Born von Karmanovho kvádra, v ktorej sa nachádza N vodivostných elektrónov. Elektrón má okrem orbitálneho pohybu aj spin, ktorého priemet s_z na vybranú os z môže nadobúdať dve možné hodnoty, $s_z = \pm \hbar/2$. Elektrón je

teda fermión a platí preň Pauliho princíp, podľa ktorého orbitál (k_x, k_y, k_z, s_z) môže byť obsadený nanajvýš jedným elektrónom. Stredný počet elektrónov, ktorý sa nachádza na orbitáli k_x, k_y, k_z, s_z v termodynamickej rovnováhe, je daný Fermiho Diracovou funkciou $f(\vec{k}, s_z)$. Musí platiť, že

$$N = 2 \sum_{\vec{k}} f(\vec{k}), \quad (10)$$

kde sa sumuje cez všetky možné hodnoty k_x, k_y, k_z dané vyššie a suma cez s_z sa redukuje na násobenie faktorom 2. Pre dostatočne veľké L_x, L_y, L_z môžeme sumovanie cez k_x, k_y, k_z nahradiť integrálom

$$N = 2 \frac{L_x L_y L_z}{8\pi^3} \int d\vec{k} f(\vec{k}), \quad (11)$$

v ktorom je zohľadnené, že počet stavov v Newtonovom diferenciálnom objeme $d\vec{k}$ je daný ako hustota stavov $\frac{L_x L_y L_z}{8\pi^3}$ krát $d\vec{k}$. Prejdeme od kartézskych súradníc k_x, k_y, k_z k sférickým súradniciam k, ϕ, θ . Dostaneme vzťah,

$$n_e \equiv \frac{N}{L_x L_y L_z} = 2 \frac{1}{8\pi^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^\infty dk k^2 f(k), \quad (12)$$

kde n_e je elektrónová koncentrácia. Vzťah (12) po preintegrovaní cez premenné ϕ a θ prejde na vzťah

$$n_e = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 f(k). \quad (13)$$

a po zámene premennej k energiou E na vzťah

$$n_e = \int_0^\infty dE \frac{1}{\pi^2} \frac{dk}{dE} k^2 f(E). \quad (14)$$

V poslednej rovnici identifikujeme hustotu energetických hladín $\rho(E)$ danú vzťahom

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi^2} \frac{dk}{dE} k^2, \quad (15)$$

ktorá platí nielen pre parabolický disperzný zákon $E = k^2/2m$, ale aj pre ľubovoľný iný izotropný disperzný zákon $E(k)$. Častejšie ako hustota energetických hladín sa pre $\rho(E)$ používa termín hustota stavov, ktorý ďalej požívame aj my. Pre $E = k^2/2m$ dostaneme z rovnice (15) dobre známu hustotu stavov pre voľné neinteragujúce častice,

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} (2m_e/\hbar^2)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (16)$$

Vráťme sa k rovnici (13) a predpokladajme teplotu absolútnej nuly. Vtedy $f(k) = 1$ pre $k \leq k_F$ a $f(k) = 0$ pre $k > k_F$, kde k_F je polomer Fermiho gule. V tomto prípade sa

rovnica (13) zjednoduší na

$$n_e = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_F} dk k^2 = \frac{1}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3}. \quad (17)$$

Posledná rovnica nám umožňuje vyjadriť k_F ako funkciu koncentrácie n_e ,

$$k_F = (3\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}}. \quad (18)$$

Posledný vzťah platí nielen pre parabolický disperzný zákon $E = k^2/2m$, ale aj pre ľubovoľný iný izotropný disperzný zákon $E = E(k)$. Fermiho energia $E_F = E(k_F)$ je energia elektrónov, ktoré obsadzujú stavy na povrchu Fermiho gule. Pre $E = k^2/2m$ dostávame

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{\frac{2}{3}}}{2m_e}. \quad (19)$$

2 Hartree-Fockova aproximácia , netienená Coulombovská interakcia v modeli žele

Model voľných neinteragujúcich elektrónov z predchádzajúcej časti je užitočné ale hrubé priblíženie. V skutočnosti, elektróny v kryštalickej mriežke kovu nie sú ani voľné ani neinteragujúce, pretože v mriežke sa nachádzajú ióny a ostatné elektróny. Najväčším problémom je práve e-e interakcia, vďaka ktorej máme namiesto jednočasticového problému problém mnohočasticový. Uvažujme N -časticový Hamiltonián

$$\hat{H} = \sum_i \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + U^{ion}(\vec{r}_i) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \quad (20)$$

kde posledný člen na pravej strane popisuje Coulombovskú interakciu medzi i -tým elektrónom a ostatnými $N - 1$ elektrónmi a

$$U^{ion}(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} \quad (21)$$

popisuje Coulombovskú interakciu elektrónu s nehybnými iónmi (pre jednoduchosť uvažujeme N jednonásobne ionizovaných iónov a N valenčných elektrónov). Úloha je nájsť riešenie mnohočasticovej Schrodingerovej rovnice $\hat{H}\Psi = E\Psi$, kde E je vlastná hodnota energie všetkých N elektrónov a $\Psi(\vec{r}_1, s_1, \dots, \vec{r}_N, s_N)$ je N -elektrónová vlnová funkcia, ktorá je funkciou polôh (\vec{r}) všetkých N elektrónov a vo všeobecnosti aj funkciou N spinových

súradníc (s). Cieľom Hartree-Fockovej aproximácie je nahradiť mnohočasticovú Schrodingerovu rovnicu jednočasticovým priblížením.

Najjednoduchšie je Hartreeho jednočasticové priblíženie, ktoré najprv sformulujeme kvalitatívne. Potenciál iónov, $U^{ion}(\vec{r})$, je jednočasticový, pretože v ňom vystupuje jediná premenná \vec{r} a polohy iónov sú fixované parametre. Aproximovať treba e-e interakciu (posledný člen v rovnici 20), ktorá závisí od N premenných \vec{r} . V tom prípade bude na elektrón pôsobiť efektívny jednočasticový potenciál $U(\vec{r}) = U^{ion}(\vec{r}) + U^{el}(\vec{r})$, kde $U^{el}(\vec{r})$ je efektívny potenciál e-e interakcie, ktorý treba navrhnúť. Označíme (hľadanú) jednoelektrónovú vlnovú funkciu j -tého elektrónu ako $\phi_j(\vec{r})$ a vyjadríme hustotu náboja všetkých elektrónov v bode \vec{r} ako

$$\rho_{el}(\vec{r}) = -e \sum_j |\phi_j(\vec{r})|^2, \quad (22)$$

kde sumujeme cez všetky elektróny. Efektívny potenciál $U^{el}(\vec{r})$ tak môžeme zvoliť v tvare

$$U^{el} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \rho_{el}(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (23)$$

známom z elektrostatiky. Tým sa N -elektrónový problém redukuje na sústavu jednoelektrónových rovníc

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi_i(\vec{r}) + U^{ion}(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \int d\vec{r}' |\phi_j(\vec{r}')|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \phi_i(\vec{r}) = E \phi_i(\vec{r}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (24)$$

známu ako Hartreeho rovnice. Potenciál (23) s nábojovou hustotou (22) sa nazýva Hartreeho potenciál. Zdôraznime, že suma cez j zahrňuje elektróny oboch spinových orientácií.

Teraz sa venujme Hartree-Fockovej aproximácii. Hľadáme znovu N -elektrónovú vlnovú funkciu $\Psi(\vec{r}_1, s_1, \dots, \vec{r}_n, s_n)$ a N -elektrónovú energiu E . Ak sa obmedzíme na základný stav, tak hľadáme minimum funkcionálu

$$E[\Psi^*] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (25)$$

kde \hat{H} je mnohočasticový Hamiltonián (20). Najjednoduchšie je navrhnúť $\Psi(\vec{r}_1, s_1, \dots, \vec{r}_n, s_n)$ ako jednoduchý súčin N jednoelektrónových vlnových funkcií $\phi_i(\vec{r}_i, s_i)$,

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1, \dots, \vec{r}_n, s_n) = \phi_1(\vec{r}_1, s_1) \phi_2(\vec{r}_2, s_2) \dots \phi_n(\vec{r}_n, s_n). \quad (26)$$

Tento návrh však nespĺňa požiadavku antisymetrie, ktorú na mnohoelektrónovú vlnovú funkciu kladie Pauliho princíp. Presnejšie, vlnová funkcia $\Psi(\vec{r}_1, s_1, \dots, \vec{r}_n, s_n)$ musí zmeniť

znamienko, ak v nej vzájomne vymeníme ľubovoľnú dvojicu elektrónových súradníc. Túto vlastnosť splňuje aproximácia

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1, \dots, \vec{r}_n, s_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1, s_1) & \dots & \phi_1(\vec{r}_N, s_N) \\ \dots & \phi_i(\vec{r}_j, s_j) & \dots \\ \phi_N(\vec{r}_1, s_1) & \dots & \phi_N(\vec{r}_N, s_N) \end{vmatrix}, \quad (27)$$

kde objekt na pravej strane je Slaterov determinant. Keď do funkcionálu (25) dosadíme aproximáciu (27) a funkcionál minimalizujeme variačnou metódou, dostaneme známe Hartree-Fockovu rovnice

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U^{ion}(\vec{r}) + U^{el}(\vec{r}) - \sum_j \int d\vec{r}' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}-\vec{r}'|} \phi_j^*(\vec{r}') \phi_i(\vec{r}') \frac{\phi_j(\vec{r})}{\phi_i(\vec{r})}\right) \phi_i(\vec{r}) = E_i \phi_i(\vec{r}), \quad (28)$$

kde potenciály $U^{ion}(\vec{r})$ a $U^{el}(\vec{r})$ sú totožné $U^{ion}(\vec{r})$ a $U^{el}(\vec{r})$ v Hartreeho rovnici (24) a posledný člen na ľavej strane je tzv. Fockov člen. Zdôraznime, že sumácia vo Fockovom člene zahŕňa len elektróny jednej spinovovej orientácie, čo znázorňuje čiarka nad symbolom sumy.

Keďže Hartree-Fockove rovnice idú nad rámec bakalárskeho štúdia, v dodatku B demonštrujeme naše porozumenie ich variačného odvodenia pre prípad dvoch elektrónov. Poznamenajme, že keď sa to isté variačné odvodenie urobí pre jednoduchšiu vlnovú funkciu (26), dostaneme namiesto Hartree-Fockových rovníc (28) Hartreeho rovnice (24).

Na tomto mieste je vhodné zaviesť model *želé*. Predpokladajme, že nabité ióny generujú nábojovú hustotu $\rho_{ion}(\vec{r})$ ako spojitú funkciu \vec{r} a vyjadrieme $U^{ion}(\vec{r})$ ako

$$U^{ion}(\vec{r}) = \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \frac{\rho_{ion}(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}. \quad (29)$$

Model *želé* dostaneme, ak $\rho_{ion}(\vec{r})$, aproximujeme priestorovo homogénnou hustotou náboja $\rho_{ion} = Ne/V$, kde V je objem Born von Karmánovej vzorky. Ak v modeli *želé* dosadíme do Hartreeho rovníc (24) vlnovú funkciu voľnej častice, $\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, vidíme, že $\rho_{el} = -Ne/V$. To znamená, že potenciály $U^{ion}(\vec{r})$ a $U^{el}(\vec{r})$ sú až na znamienko rovnaké a vzájomne sa nulujú. Vidíme teda, že Hartreeho rovnice (24) sú v modeli *želé* totožné so Schrodigerovou rovnicou pre voľnú časticu. Keď to isté urobíme v Hartree-Fockových rovniciach (28), členy $U^{ion}(\vec{r})$ a $U^{el}(\vec{r})$ sa vzájomne vynulujú ale Fockov člen prežije. Zostane nám rovnica

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{e^2}{V^{3/2}4\pi\epsilon_0} \sum_{\vec{k}'} \int d\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} = E(\vec{k}) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (30)$$

kde suma cez \vec{k}' beží cez všetky stavy \vec{k}' obsadené elektrónmi s jednou spinovou orientáciou. Po využití Laplaceovho operátora a jednoduchých úpravách dostávame vzťah pre energiu elektrónu v stave \vec{k} v tvare,

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{8\pi^3} \int_{k' < k_f} d\vec{k}' \int d\vec{r}' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}' - \vec{r}|} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{r}' - \vec{r})}. \quad (31)$$

kde suma cez \vec{k}' je už zamenená integrálom a predpokladá sa, že sú obsadené len stavy $|\vec{k}| < |\vec{k}_F|$. Člen $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ je energia voľného elektrónu a druhý člen je príspevok od e-e interakcie, self-energie vo Fockovej aproximácii.

Všimnime si ďalej, že integrál cez \vec{r}' je vlastne Fourierová transformácia Coulombovho potenciálu. Výpočet integrálu je jednoduchý, výsledok transformácie je $e^2/\epsilon_0 |\vec{k}' - \vec{k}|^2$. Tak dostávame

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{8\pi^3} \frac{e^2}{\epsilon_0} \int_{k' < k_f} d\vec{k}' \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2}. \quad (32)$$

Na pravej strane poslednej rovnice zostal trojný integrál, ktorý sa ale dá ľahko integrovať. Prichádzame k výsledku [?]

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_f}{4\pi^2 \epsilon_0} F\left(\frac{k}{k_f}\right), \quad (33)$$

kde

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|. \quad (34)$$

Na obrázku ?? je disperzný zákon (33) porovnaný s disperzným zákonom voľnej častice, $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, pre parametre $m = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ a $k_F = 9.07 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$. Energia je normovaná na Fermiho energiu voľnej častice a k je normované na k_F . Je vidno, že Fockova self-energia spôsobuje významný posun celého disperzného zákona smerom k nižším hodnotám energie a zároveň významne mení tvar disperzného zákona. Napríklad, Fermiho energia resp. šírka pásu, definovaná ako $E(k_F) - E(0)$, sa e-e interakciou zväčšila viac ako dvojnásobne. Všimnime si tiež, že funkcia $F(x)$ má singulárne chovanie v bode $x = 1$. Na výslednej závislosti $E(k)$ sa toto singulárne chovanie prejavuje len ako jemné zvlnenie s inflexným bodom v $k = k_F$, významne sa však prejaví na hustote stavov, ktorú ukazujeme na nasledujúcom obrázku.

Ako sme uviedli v kapitole 1, hustotu stavov $\rho(E)$ môžeme pre ľubovoľný izotrópny disperzný zákon $E = E(k)$ vypočítať zo vťahu $\rho(E) = \frac{1}{\pi^2} \frac{dk}{dE} k^2$. Potrebujeme len invertovať disperzný zákon (nájsť k ako funkciu E) a vypočítať dk/dE . V prípade disperzného

zákona (33) musíme k ako funkciu E hľadať numericky, dk/dE sa však dá ľahko vypočítať analyticky aj bez znalosti funkcie $k(E)$. Výslednú numericky vypočítanú hustotu stavov pre disperzný zákon (33) ukazujeme na obrázku ??, kde ju zároveň porovnávame s obyčajnou hustotou stavov pre parabolický disperzný zákon. Vidno, že e-e interakcia mení hustotu stavov dramaticky. Konkrétne, už spomínané singulárne chovanie funkcie $F(x)$ pre $x = 1$ sa prejaví tak, že hustota stavov pre disperzný zákon (33) poklesne pri energii $E = E(k_F)$ až na nulu,

Na obrázku ?? ukazujeme obe hustoty stavov z obrázku ?? znovu, ibaže hustota stavov pre disperzný zákon (33) je teraz posunutá tak, aby jej Fermiho hladina bola na tej istej energia ako Fermiho hladina pre parabolický disperzný zákon. Takto je pekne vidno, že e-e interakcia vlastne spôsobila presunutie veľkej časti stavov pod dno parabolického pásu. Podotýkame, že keď obe hustoty stavov zintegrujeme od dna pásu až po Fermiho hladinu, dostaneme v oboch prípadoch rovnakú plochu rovnú elektrónovej koncentrácii. Rovnakosť plôch demonštruje zachovanie stavov. Počet stavov spočítaný od najnižšej energie po Fermiho hladinu sa musí zachovávať aj keď pôsobí e-e interakcia. Na obrázku ?? ukazujeme rozdiel oboch hustôt. Keby sme tento rozdiel integrovali od najnižšej energie po Fermiho hladinu, výsledok by bol nula kvôli už spomenutému zachovaniu stavov.

3 Tienenie Coulombovskej interakcie, vplyv na Fockovu self-energiu

V predchádzajúcej kapitole sme videli, že Coulombovská e-e interakcia vo Fockovej aproximácii má na disperzný zákon a hustotu stavov výrazný vplyv. Zistenie, že hustota stavov na Fermiho hladine je vďaka e-e interakcii nulová, však ukazuje, že získaný výsledok pre Fockovu self-energiu je v rozpore s realitou. Vodivosť kovu je totiž úmerná hustote stavov na Fermiho hladine, takže nulová hustota stavov na Fermiho hladine by znamenala, že kov s interagujúcimi elektrónmi je izolant. To samozrejme nie je pravda. Ukazuje sa, že Fockova aproximácia dá oveľa rozumnejší výsledok, ak vezmeme do úvahy, že Coulombova interakcia medzi elektrónmi je v skutočnosti tienená.

Vložme do elektrónového plynu externý náboj s nábojovou hustotou $\rho_{ext}(\vec{r})$. Keby nebolo elektrónového plynu, externý náboj by vytváral len potenciál $\Phi_{ext}(\vec{r})$ daný Poissono-

vou rovnicou $\Delta\Phi_{ext}(\vec{r}) = -\rho_{ext}(\vec{r})/\epsilon_0$. Externý náboj však svojim elektrickým poľom zmení koncentráciu elektrónového plynu z pôvodnej konštantnej hodnoty n_0 na hodnotu $n(\vec{r})$. Tým spôsobí vznik indukovaného náboja s nábojovou hustotou $\rho_{ind}(\vec{r}) = -e(n(\vec{r}) - n_0)$, ktorá k externému potenciálu pridá svoj vlastný. Vznikne tak celkový potenciál $\Phi_{tot}(\vec{r})$, ktorý je daný Poissonovou rovnicou

$$\Delta\Phi_{tot}(\vec{r}) = -\frac{\rho_{ext}(\vec{r}) + \rho_{ind}(\vec{r})}{\epsilon_0}. \quad (35)$$

Hľadáme $\rho_{ind}(\vec{r})$. Pôvodnú koncentráciu voľného elektrónového plynu, n_0 , vyjadríme vzťahom

$$n_0 = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \frac{1}{e^{\left(\frac{E(\vec{k}) - E_F}{k_B T}\right)} + 1}, \quad (36)$$

kde E_F je chemický potenciál elektrónového plynu (aproximovaný ako Fermiho energia) predtým ako bol vložený externý náboj. V aproximácii Thomasa-Fermiho predpokladáme, že vložením externého náboja sa chemický potenciál zmení z hodnoty E_F na hodnotu $E_F - e\Phi_{tot}(\vec{r})$. Zmenenú elektrónovú koncentráciu $n(\vec{r})$ dostaneme tak, že vo vzťahu (36) zmeníme E_F na $E_F - e\Phi_{tot}(\vec{r})$. Ak potom využijeme limitu

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{e^{\left(\frac{E(\vec{k}) - E_F}{k_B T}\right)} + 1} = \Theta(E(\vec{k}) - E_F), \quad (37)$$

kde $\Theta(x)$ je Θ funkcia, a prejdeme od integrovania cez \vec{k} k integrovaniu cez E , dostaneme

$$n(\vec{r}) = \int_0^{E_F - e\Phi_{tot}(\vec{r})} dE \rho(E) = \int_0^{E_F} dE \rho(E) + \int_{E_F}^{E_F - e\Phi_{tot}(\vec{r})} dE \rho(E), \quad (38)$$

kde $\rho(E)$ je hustota stavov (16). Na pravej strane poslednej rovnice je výsledok zapísaný ako súčet dvoch členov. Prvý z týchto dvoch členov je očividne n_0 a druhý sa v limite $E_F \gg |-e\Phi_{tot}|$ zjednoduší na tvar $-e\Phi_{tot}(\vec{r})\rho(E_F)$. Tak dostaneme indukovaný náboj

$$\rho_{ind}(\vec{r}) = -e(n(\vec{r}) - n_0) = e^2\Phi_{tot}(\vec{r})\rho(E_F), \quad (39)$$

ktorý dosadíme do Poissonovej rovnice (35) spolu s externým nábojom $\rho_{ext}(\vec{r}) = -e\delta(\vec{r})$. Poissonova rovnica tak získa tvar

$$\Delta\Phi_{tot}(\vec{r}) = -\frac{e^2\rho(E_F)\Phi_{tot}(\vec{r}) - e\delta(\vec{r})}{\epsilon_0}. \quad (40)$$

ktorý sa dá vyriešiť pomocou Fourierovej transformácie. Dosadíme za funkcie $\Phi_{tot}(\vec{r})$ a $\delta(\vec{r})$ príslušné Fourierove integrály a dostaneme

$$\Delta \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \Phi_{tot}(\vec{q}) e^{i(\vec{r}\vec{q})} = -\frac{e^2\rho(E_F)\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \Phi_{tot}(\vec{q}) e^{i(\vec{r}\vec{q})} - e\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} e^{i(\vec{r}\vec{q})}}{\epsilon_0}. \quad (41)$$

Po aplikácii Laplaceovho operátora a ďalších jednoduchých výpočtoch dostaneme

$$\Phi_{tot}(\vec{q}) = \frac{-e}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)}, \quad (42)$$

kde $k_s^2 = \frac{e^2 \rho(E_f)}{\epsilon_0}$. Pre typické kovy nájdeme, že $k_s \simeq k_F$. Do reálneho priestoru sa dá vrátiť spätnou transformáciou

$$\Phi_{tot}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \frac{-e}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)} e^{i(\vec{r}\vec{q})}, \quad (43)$$

ktorá dá po jednoduchých výpočtoch exponenciálne tieneny Coulombov potenciál

$$\phi_{tot}(\vec{r}) = \frac{-e}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|} e^{-k_s r}. \quad (44)$$

Teraz sa vrátime k Fockovej aproximácii z predchádzajúcej kapitoly a holý Coulombov potenciál v nej nahradíme tienеным Coulombovým potenciálom, ktorý sme diskutovali vyššie. Konkrétne, stačí, keď sa Fourierov obraz holej Coulombovej interakcie, $e^2/\epsilon_0|\vec{k}' - \vec{k}|^2$, nahradí vo výsledku (32) Fourierovým obrazom tienenej Coulombovej interakcie, $e^2/\epsilon_0(|\vec{k}' - \vec{k}|^2 + k_s^2)$. Výsledná elektrónová energia vo Fockovej aproximácii tak nadobudne tvar

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{8\pi^3} \frac{e^2}{\epsilon_0} \int d\vec{k}' \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + k_s^2}, \quad (45)$$

ktorý sa dá upraviť až na konečnú analytickú formulu

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{(2\pi)^2 \epsilon_0} \left(\frac{k_F^2 - k^2 + k_s^2}{4k} \ln \frac{(k_F + k)^2 + k_s^2}{(k_F - k)^2 + k_s^2} - k_s \left(\arctan \frac{k_F + k}{k_s} + \arctan \frac{k_F - k}{k_s} \right) + k_F \right). \quad (46)$$

Ak v poslednom výsledku položíme $k_s = 0$, dostaneme naspäť formulu (33).

Na obrázku ?? je disperzný zákon (46) porovnaný s disperzným zákonom voľnej častice, $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, pre parametre $m = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ a $k_F = 9.07 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$, a $k_s = k_F$. Vidno že tienená Fockova self-energia (druhý člen na pravej strane rovnice 46) stále hrá nezanedbateľnú úlohu, avšak jej kvantitatívny vplyv na energiu častice je oveľa menší ako v prípade bez tienenia na obrázku ??.

Hustotu stavov pre disperzný zákon (46) sme vypočítali numericky tým istým spôsobom ako sme to robili pre netienenú Fockovu self-energiu v kapitole 2. Získaný výsledok je ukázaný na obrázku ??, kde je porovnaný s hustotou stavov pre voľné neinteragujúce elektróny. Keď výsledky na obrázku ?? porovnáme s výsledkami pre netienenú Coulombovskú

interakciu na obrázku ??, vidíme, že tienenie úplne odstránilo nefyzikálne vynulovanie hustoty stavov na Fermiho hladine, pozorované v netienenom prípade.

Výsledky pre hustotu stavov z obrázku ?? ukazujeme ešte raz na obrázku ??, ibaže na obrázku ?? je hustota stavov pre disperzný zákon (46) posunutá tak, aby jej Fermiho hladina bola na tej istej energii ako Fermiho hladina pre voľnú časticu. Vidno, že aj tienená e-e interakcia spôsobuje presunutie určitej časti stavov pod dno parabolického pásu, avšak oveľa menej ako netienená. Konečne, na obrázku ?? sú ukázané data z obrázku ?? po ich vzájomnom odčítaní (červená krivka mínus čierna krivka). Keby sme krivku na obrázku ?? zintegrovali od najnižšej energie po Fermiho hladinu, výsledok by bol nula kvôli zachovaniu stavov.

4 Interagujúce elektróny v kove s disorderom : Altshuler-Aronovova aproximácia

Doteraz sme sa zaoberali elektrónmi v ideálnej kryštalickej mriežke v rámci modelu *želé*, v rámci ktorého boli náboje iónov mriežky aproximované priestorovo homogénnym nábojom. V reálnom kove však existujú aj rôzne odchýlky od ideálnej kryštalickej mriežky, ktoré sa zvyknú nazývať disorder. Vo veľkých 3D vzorkách ide najmä o náhodne rozmiestnené atómy prímiesí. Tie vytvárajú náhodný potenciál $V_{dis}(\vec{r})$, ktorý elektróny rozptyľuje. V zhode s AA aproximáciou budeme predpokladať tzv. slabý disorder, pre ktorý platí, že $k_F l \gg 1$, kde l je elektrónová stredná voľná dráha, spôsobená elektrónovými zrážkami s disorderom. Ak neuvažujeme e-e interakciu, elektrón interagujúci s disorderom je v rámci modelu *želé* popísaný Schrodingerovou rovnicou

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{dis}(\vec{r})\right)\phi_m^{(0)}(\vec{r}) = \mathcal{E}_m\phi_m^{(0)}(\vec{r}), \quad (47)$$

kde index (0) na vlnovej funkcii $\phi_m^{(0)}(\vec{r})$ zdôrazňuje absenciu e-e interakcie. Posledná rovnica je exaktne riešiteľná len numericky, aj to len pre jeden špecifický náhodný potenciál $V_{dis}(\vec{r})$. Keď do rovnice (47) zahrnieme e-e interakciu v Hartree-Fockovej aproximácii a Hartreeho interakciu vynecháme, dostaneme sústavu Fockových rovníc v tvare

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{dis}(\vec{r})\right)\phi_m(\vec{r}) - \sum_{m'} \int d\vec{r}' \phi_{m'}^*(\vec{r})\phi_m(\vec{r}')V(\vec{r}-\vec{r}')\phi_m'(\vec{r}) = E_m\phi_m(\vec{r}). \quad (48)$$

v ktorej $\phi_m(\vec{r})$ a E_m sú vlnové funkcie a vlastné energie elektrónov vo Fockovej aproximácii a $V(\vec{r} - \vec{r}')$ je potenciálna energia e-e interakcie. Poznamenajme, že na rozdiel od modelu *želé* bez disorderu, teraz sa Hartreeho člen nenuluje presne, takže jeho zanedbanie je aproximácia. V článkoch Alshulera a Aronova je ukázané, že Hartreeho príspevok k interakcii je v porovnaní s Fockovým príspevkom naozaj malý. Opäť, presné riešenie Fockových rovníc (48) je možné len numericky. V zhode s AA aproximáciou ich tu budeme riešiť v prvom ráde poruchovej teórie za predpokladu, že interakcia $V(\vec{r} - \vec{r}')$ je slabá.

Najprv vynásobíme Fockovu rovnicu (48) zľava vlnovou funkciou $\phi_{m'}^*(\vec{r})$, potom na obe strany rovnice aplikujeme integrál $\int d\vec{r}'$ a zintegrujeme cez celý priestor. Takto získaná rovnica (nepíšeme ju explicitne) je ešte stále presná vo Fockovej aproximácii. Keď v tejto rovnici nahradíme všetky vlnové funkcie v prvom ráde poruchovej teórie aproximáciou $\phi_m(\vec{r}) \simeq \phi_m^{(0)}(\vec{r})$, rovnica po jednoduchšej úprave nadobudne tvar

$$E_m = \mathcal{E}_m - \sum_{\forall m'} \int d\vec{r}' \int d\vec{r} \phi_{m'}^*(\vec{r}') \phi_m(\vec{r}') \phi_{m'}^*(\vec{r}) \phi_m(\vec{r}) V(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (49)$$

ktorý vyjadruje Fockovu energiu E_m ako energiu \mathcal{E}_m neinteragujúceho problému (47) plus Fockova oprava v prvom ráde poruchovej teórie. Zdôraznime, že funkcie $\phi_m^{(0)}(\vec{r})$ sú v rovnici (49) kvôli jednoduchosti preznačené na $\phi_m(\vec{r})$. Odteraz už teda symbol $\phi_m(\vec{r})$ označuje presné riešenie neinteragujúceho problému (47). Keď do rovnice (49) dosadíme Fourierovu transformáciu

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) e^{i(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{q}}, \quad (50)$$

dostaneme rovnicu

$$E_m = \mathcal{E}_m - \sum_{\forall m'} \int d\vec{q} V(\vec{q}) | \langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle |^2. \quad (51)$$

Posledná rovnica platí pre jednu vzorku s jednou konkrétnou konfiguráciou disorderu. Vystredujeme túto rovnicu cez štatistický súbor vzoriek, z ktorých každá má makroskopický rovnaký ale mikroskopický rôzny disorder. Dostaneme

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \sum_{\forall m'} \int d\vec{q} V(|\vec{q}|) \overline{|\langle \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|^2}. \quad (52)$$

kde $\overline{X_m}$ označuje strednú hodnotu veličiny X_m , získanú vyššie spomenutým vystredovaním. Pre slabý disorder je rozumné predpokladať, že približne platí $\overline{\mathcal{E}_m} = \hbar^2 \vec{k}_m^2 / 2m$. Vzťah (52) obsahuje však aj vlnové funkcie $\phi_m(\vec{r})$, ktoré nepoznáme. Našťastie, ani ich poznať

nemusíme, pretože nám stačí vypočítať strednú hodnotu štvorca maticového elementu $M_{mm'}$,

$$\overline{|M_{mm'}|^2} = \overline{|\langle \phi_m | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|^2}. \quad (53)$$

Výpočet urobíme v semiklasickej difúznej aproximácii, na ktorú sa spolieha aj AA teória.

Analýza vodivosti kovov so slabým disorderom ukazuje, že k vodivosti kovu prispievajú najmä elektróny z Fermiho hladiny a jej blízkeho okolia veľkosti $k_B T$, pričom tieto elektróny sa pohybujú podobne ako difundujúce klasické častice. Konkrétne, elektrón sa pohybuje rýchlosťou blízkou Fermiho rýchlosti $v_F = \sqrt{\frac{2\mathcal{E}_F}{m}}$ a v priemere raz za čas τ sa elasticky rozptýli v náhodnom smere. Taký elektrón má strednú voľnú dráhu $l = v_F \tau$ a na jeho pohyb sa dá nazerať ako na difúziu klasickej Brownovskej časti, teda náhodné kráčanie s dĺžkou kroku l . Ak sa taká Brownovská častica v čase $t = 0$ nachádza v polohe $\vec{r} = \vec{r}_0$, potom pravdepodobnosť, že časticu nájdeme v čase t v polohe \vec{r} , je daná známym vzťahom

$$P(\vec{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}, \quad (54)$$

kde $D = \frac{1}{3}v_F l$ je difúzny koeficient častice. Nech $\psi(\vec{r}, t)$ je nestacionárna vlnová funkcia častice, ktorá difunduje v jednom špecifickom disorderi. Ako sme uviedli v kapitole 1, kvantovomechanická pravdepodobnosť výskytu kvantovomechanickej častice v čase t v bode \vec{r} , je

$$P(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t). \quad (55)$$

Semiklasická difúzna aproximácia spočíva v postulovaní rovnice

$$\overline{\psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}}, \quad (56)$$

kde na ľavej strane je $\psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)$ vystredované cez disorder. Ako ešte upresníme, aproximácia (56) platí rozumne pre dostatočne dlhý čas t . Nestacionárny stav $\psi(\vec{r}, t)$ sa dá rozvinúť do stacionárnych stavov $\phi_m(\vec{r})$ ako

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m \phi_m^*(\vec{r}_0) \phi_m(\vec{r}) e^{-i\frac{\mathcal{E}_m}{\hbar}t}, \quad (57)$$

kde N je počet stavov cez ktoré sa sumuje a sumovanie beží iba cez stavy m , ktorých energie \mathcal{E}_m sa nachádzajú v intervale $\Delta\mathcal{E}$ okolo energie, ktorú má zodpovedajúca klasická častica. Keďže častica začína náhodné kráčanie počnúc prvou zrážkou, vlnový balík (57)

môže popisovať difúziu iba ak $t > \tau$. Energia častice popísanej vlnovým balíkom s dobou života t má neurčitost \hbar/t , takže maximálna neurčitost počas difúzie je $\Delta\mathcal{E} = \hbar/\tau$.

Rozvoj (57) dosadíme do postulátu (56). Dostaneme

$$\frac{1}{N} \sum_m \sum_{m'} \overline{\phi_m^*(\vec{r}_0) \phi_{m'}^*(\vec{r}) \phi_m(\vec{r}) \phi_{m'}(\vec{r}_0)} e^{-i \frac{\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_{m'}}{\hbar} t} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2}{4Dt}}. \quad (58)$$

Vezmime najprv ľavú stranu rovnice (58). Násobíme 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.

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

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

Dostaneme

$$\frac{1}{NV} \sum_m \sum_{m'} |M_{mm'}|^2 Re\left(\int_0^\infty dt e^{-i \frac{\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_{m'}}{\hbar} t} e^{i\omega t}\right). \quad (59)$$

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

$$\begin{aligned} & Re\left(\int_0^\infty dt e^{-i\omega_{mm'} t} e^{i\omega t}\right) = \\ & \frac{1}{2} \left(\int_0^\infty dt e^{-i(\omega_{mm'} - \omega)t} + \int_0^\infty dt e^{i(\omega_{mm'} - \omega)t} \right) = \frac{1}{2} \left(\int_0^\infty dt e^{-i(\omega_{mm'} - \omega)t} + \int_{-\infty}^0 dt e^{-i(\omega_{mm'} - \omega)t} \right) = \\ & \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dt e^{-i(\omega_{mm'} - \omega)t} = \pi \delta(\omega_{mm'} - \omega), \end{aligned}$$

kde $\omega_{mm'} = \frac{\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_{m'}}{\hbar}$. Výraz (59) tak nadobudne tvar

$$\frac{1}{NV} \sum_m \sum_{m'} |M_{mm'}|^2 \pi \delta(\omega_{mm'} - \omega), \quad (60)$$

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

$$\frac{\pi \hbar}{N} \sum_m \int d\mathcal{E}_{m'} \rho(\mathcal{E}_{m'}) \delta(\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_{m'} + \hbar\omega) |M_{mm'}|^2 = \frac{\pi \hbar}{N} \sum_m \rho(\mathcal{E}_m + \hbar\omega) \overline{|M_{(\mathcal{E}_m)(\mathcal{E}_m + \hbar\omega)}|^2}, \quad (61)$$

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

$$\pi \hbar \rho(\mathcal{E}_m + \hbar \omega) |\overline{M_{(\mathcal{E}_m)(\mathcal{E}_m + \hbar \omega)}}|^2, \quad (62)$$

ktorý chápeme ako vystredovaný cez m .

Teraz tým istým spôsobom upravíme pravú stranu rovnice (58). Násobíme 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

$$\frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \frac{1}{V} \int d\vec{r} \int d\vec{r}_0 e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|^2}{4Dt}} e^{-i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}_0)} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \int d\vec{r}' e^{-\frac{|\vec{r}'|^2}{4Dt}} e^{-i\vec{q}\vec{r}'}, \quad (63)$$

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

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

a analogicky pre y a z . Týmto sa pravá strana rovnice (58) pretransformovala na tvar $e^{-q^2 Dt}$, ktorý ešte transformujeme Fourierovou transformáciou cez čas:

$$Re \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-q^2 Dt} = Re \left(\frac{1}{-i\omega + q^2 D} \right) = \frac{q^2 D}{\omega^2 + q^4 D^2}. \quad (64)$$

Posledný výsledok je rovný výrazu (62), odkiaľ nachádzame hľadaný výsledok

$$|\overline{M_{mm'}}|^2 = \frac{\hbar D q^2}{\rho(E'_m)(E_m - E_{m'})^2 + (\hbar D q^2)^2}. \quad (65)$$

Vezmime vzťah (52) a vystredujme ho cez všetky energie $\mathcal{E}_m = \mathcal{E}$. Dostaneme

$$\tilde{E}(E) = \bar{\mathcal{E}} + E_{self}(E), \quad (66)$$

kde $\bar{\mathcal{E}}$ je rovné energii voľnej častice podľa kapitoly 1 a self=energia má tvar

$$E_{self} = - \int_0^{E_F} dE' \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^3} V(q) \frac{\rho(E) \hbar D q^2}{(\hbar D q^2) + (E - E')}, \quad (67)$$

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

Hustotu stavov vyjadríme z (66). Celú rovnicu pre energiu derivujeme podľa počtu stavov n .

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{E}(E)}{dn} &= \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(E)}{dn} \\ \frac{d\tilde{E}(E)}{dn} &= \frac{d\mathcal{E}}{dn} + \frac{dE_{self}(E)}{dE} \frac{dE}{dn} \\ \frac{d\tilde{E}(E)}{dn} &= \frac{d\mathcal{E}}{dn} \left(1 + \frac{dE_{self}(E)}{dE}\right).\end{aligned}\tag{68}$$

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

$$\rho(E) = \rho_0(E) \frac{1}{1 + \frac{dE_{self}(E)}{dE}},\tag{69}$$

kde $\rho_0(E)$ je hustota stavov pre voľný elektrón (16). Pre malé $\frac{dE_{self}(E)}{dE}$ urobíme Taylorov rozvoj:

$$\rho(E) \doteq \rho_0(E_F) \left[1 - \frac{dE_{self}(E)}{dE}\right],\tag{70}$$

Zavedením jednoduchých substitúcií integrál (71) prejde na

$$E_{self} = \int_0^\epsilon d\epsilon' \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^4} V(\vec{q}) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon')^2}.\tag{71}$$

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

$$E_{self} = \int_\epsilon^\infty d\epsilon' \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^4} V(\vec{q}) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon')^2}.\tag{72}$$

Z definície derivácie potom vieme vyjadriť deriváciu self energie ako

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \int \frac{d\vec{q}}{8\pi^3} V(\vec{q}) \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon)^2}.\tag{73}$$

Týmto sme vyriešili jeden integrál, ostáva nám integrovať cez $d\vec{q}$. Za potenciál $V(q)$ dosadíme tienový Coulombov potenciál z kapitoly 3 a prejdeme do sférických súradníc:

$$\frac{dE_{self}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{4\pi}{8\pi^3} \int_0^\infty dq q^2 \frac{e^2}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)} \frac{\hbar D q^2}{(\hbar D q^2)^2 + (\epsilon)^2}.\tag{74}$$

Zavedieme substitúcie substitúciou $x = \frac{q}{k_s}$ a $a = \sqrt{\frac{|\epsilon|}{\hbar D k_s^2}}$, a pravú stranu poslednej rovnice rozložíme na zlomky:

$$\frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon_0 \hbar D k_s^{-1}} \left[1 + \frac{|\epsilon|^2}{\hbar^2 D^2 k_s^4}\right] \frac{2}{\pi} \int dx \left(\frac{1}{1+x^2} - \frac{1}{1+(\frac{x}{a})^4} + \frac{x^2}{1+(\frac{x}{a})^4}\right).\tag{75}$$

Jednotlivé integrály vieme vypočítať napríklad prechodom do komplexnej roviny. Pre prvý integrál dostaneme

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{1+x^2} = 1, \quad (76)$$

pre druhý

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{1+(\frac{x}{a})^4} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{|\epsilon|}{\hbar D k_s^2}} \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (77)$$

a napokon pre tretí

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{x^2}{1+(\frac{x}{a})^4} = \frac{a^3}{\sqrt{2}}. \quad (78)$$

Integrály však nemôžeme rátať s nekonečnou hornou hranicou. Dôvodom je semiklasický postulát (56) použitý na výpočet maticového elementu (65), vďaka ktorému je maticový element (65) platný len pre $q < 1/l$. Hornú hranicu integrovania cez q preto musíme obmedziť na $q_{max} = \frac{1}{l}$.

Po substitúcii $x = \frac{q}{k_s}$ hranica prejde na $x_{max} = \frac{1}{k_s l}$ a teda prvý integrál prejde na:

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{(lk_s)^{-1}} dx \frac{1}{1+x^2} = \frac{2}{\pi} \arctan((lk_s)^{-1}) \doteq \frac{2}{\pi k_s l}, \quad (79)$$

kde sme v poslednom kroku sme využili Taylorov rozvoj $\arctan x \doteq x$ pre $x \ll 1$.

Pri počítaní druhého integrálu je vhodné urobiť substitúciu $y = \frac{x}{a}$, hranica prejde na $y_{max} = \frac{1}{k_s l a}$. Pripomeňme vzťahy pre difúzny koeficient, $D = \frac{1}{3} v_F^2 \tau$, a pre strednú voľnú dráhu, $l = v_F \tau$. Hornú hranicu potom vieme prepísať na $y_{max} = \sqrt{\frac{\hbar}{3\tau\epsilon}}$. Druhý integrál je teda:

$$\frac{2}{\pi} a \int_0^{\sqrt{\frac{\hbar}{3\tau\epsilon}}} dy \frac{1}{1+y^4} = a F(\sqrt{\frac{\hbar}{3\tau\epsilon}}) = a F(y_{max}), \quad (80)$$

kde $F(y)$ je primitívna funkcia:

$$F(y) = \frac{1}{4\sqrt{2}} [\ln(y^2 + \sqrt{2}y + 1) - \ln(y^2 - \sqrt{2}y + 1) + 2 \arctan(1 + \sqrt{2}y) - 2 \arctan(1 - \sqrt{2}y)]. \quad (81)$$

Funkciu $F(y)$ rozvineme do Taylorovho radu v nekonečne. Pre jednotlivé členy dostaneme:

$$\begin{aligned}\arctan(\sqrt{2}y + 1) &= \frac{\pi}{2} - \frac{1}{\sqrt{2}y} + \frac{1}{2y^2} - \frac{1}{3\sqrt{2}y^3} \dots \\ \arctan(\sqrt{2}y - 1) &= -\frac{\pi}{2} + \frac{1}{\sqrt{2}y} + \frac{1}{2y^2} + \frac{1}{3\sqrt{2}y^3} \dots \\ \ln(y^2 + \sqrt{2}y + 1) &= 2 \ln y + \frac{\sqrt{2}}{y} - \frac{\sqrt{2}}{3y^3} \dots \\ \ln(y^2 - \sqrt{2}y + 1) &= 2 \ln y - \frac{\sqrt{2}}{y} + \frac{\sqrt{2}}{3y^3} \dots\end{aligned}$$

Pre celý rozvoj $F(y)$ dostávame:

$$F(y) \doteq \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} - \frac{1}{3y^3}. \quad (82)$$

Za y dosadíme $y_{max} = \sqrt{\frac{\hbar}{3\tau\epsilon}}$ v našom prípade uvažujeme ϵ len do prvého rádu, teda členy $\frac{1}{3y^3}$ a vyššie zanedbáme.

Pre (80) sme dostali rovnaký výsledok ako pre (77):

$$\frac{2}{\pi} a \int_0^{\sqrt{\frac{\hbar}{3\tau\epsilon}}} dy \frac{1}{1+y^4} = \sqrt{\frac{|\epsilon|}{\hbar D k_s^2}} \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (83)$$

Pre tretí integrál dostaneme:

$$\frac{2a^3}{\pi} \int_0^{(k_s l)^{-1}} \frac{y^2}{1+y^4} = a^3 G(x). \quad (84)$$

Primitívnu funkciu $G(x)$ vieme vypočítať podobne ako (81). Prenásobením a^3 však dostaneme všetky členy rádu $\epsilon^{\frac{3}{2}}$ a vyššie, teda celý tretí integrál zanedbáme.

Po zavedení ďalších substitúcií pre $U_{co} = 2\hbar D k_s^2$ a $U_i = \frac{\epsilon^2}{4\pi\epsilon_0 k_s^{-1}}$ vzťah (75) prejde na:

$$\frac{dE_{self}}{d\epsilon} = \frac{2U_i}{\pi U_{co}} \left[1 + \frac{4\epsilon^2}{U_{co}^2}\right]^{-1} \frac{2}{\pi l k_s} \left[1 - l k_s \frac{\pi\sqrt{\epsilon}}{2\sqrt{2\hbar D k_s^2}}\right], \quad (85)$$

kde členy vyššieho rádu ako $\epsilon^{\frac{1}{2}}$ zanedbáme, teda platí

$$\frac{dE_{self}}{d\epsilon} = \frac{2U_i}{\pi U_{co}} \frac{2}{\pi l k_s} \left[1 - l k_s \frac{\pi\sqrt{\epsilon}}{2\sqrt{2\hbar D k_s^2}}\right]. \quad (86)$$

Výraz (86) dosadíme do rovnice pre hustotu stavov (70).

$$\rho(E) = \rho_0(E_F) \left[1 - \frac{4U_i}{\pi^2 U_{co} l k_s} + \frac{2U_i}{\pi U_{co} \sqrt{2\hbar D k_s^2}} \sqrt{\epsilon}\right]. \quad (87)$$

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

$$\rho(E_F) = \rho_0(E_F) \left[1 - \frac{4U_i}{\pi^2 U_{co} l k_s} \right]. \quad (88)$$

Hustotu stavov potom možno skrátene písať ako:

$$\rho(E) = \rho(E_F) + \rho_0(E_F) \frac{2U_i}{\pi U_{co} \sqrt{2\hbar D k_s^2}} \sqrt{\epsilon}. \quad (89)$$

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

$$\rho(E) = \rho(E_F) + \frac{\sqrt{|E - E_F|}}{4\sqrt{2}\pi^2 (\hbar D)^{3/2}}. \quad (90)$$

5 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

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(x), \quad (91)$$

kde

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{pre } 0 < x < b \\ 0, & \text{inak} \end{cases}, \quad (92)$$

kde b je šírka bariéry,

Hľadanie vlastných stavov Hamiltoniánu (91) je učebnicový problém, ktorý sa štandardne rieši nájdením vlnových funkcií v troch oblastiach a následným „zošíváním” pomocou podmienky spojitosti vlnovej funkcie a jej derivácie.

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

Majme teraz dve nekonečne široké bariéry z ľava:

$$V_l(x) = \begin{cases} V_0, & \text{pre } 0 < x \\ 0, & \text{inak} \end{cases}, \quad (93)$$

a podobne sprava

$$V_r(x) = \begin{cases} V_0, & \text{pre } b > x \\ 0, & \text{inak} \end{cases}. \quad (94)$$

Pre obe bariéry (93) a (94) vieme určiť vlastné stavy $\psi_l(x)$ a $\psi_r(x)$. Tieto stavy sú očividne dobrou aproximáciou stavov naľavo a napravo od konečnej bariéry (92). Nie sú to však vlastné stavy hamiltoniánu (91), preto musíme riešiť časovú SchR

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t). \quad (95)$$

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

$$\psi(x, 0) = \psi_l(x). \quad (96)$$

Riešenie časovej SchR (95) hľadáme v tvare:

$$\psi(x, t) = c_l(t) \psi_l(x) e^{-\frac{iE_l t}{\hbar}} + \sum_{\forall r} c_r(t) \psi_r(x) e^{-\frac{iE_r t}{\hbar}}, \quad (97)$$

kde s počiatočných podmienok (96) dostávame:

$$c_l(0) = 1, c_r(0) = 0. \quad (98)$$

Pre slabo preniknuteľnú bariéru vieme koeficienty aproximovať ako:

$$c_l(t) \doteq 1, c'_l(t) \doteq 1, c_r(t) \doteq 0. \quad (99)$$

Dosadením (97) do (95) a použitím (99) a následnými úpravami dostávame

$$w_{r \rightarrow l} = \frac{2\pi}{\hbar} < \psi_l | H - E_l | \psi_r > \delta(E_l - E_r). \quad (100)$$

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

V ďalšom zavedieme označenie

$$t_{k_l \rightarrow k_r} = \langle \psi_l | H - E_l | \psi_r \rangle \quad (101)$$

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:

$$f_l(k_l) = \frac{1}{e^{\frac{E_{k_l} - \mu_l}{k_b T}} + 1}, \quad (102)$$

podobne pre stavy na pravo:

$$f_r(k_r) = \frac{1}{e^{\frac{E_{k_r} - \mu_r}{k_b T}} + 1}. \quad (103)$$

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

$$\Gamma^+(\Delta E) = \sum_{k_l} \sum_{k_r} w_{k_l \rightarrow k_r} f_l(k_l) [1 - f_r(k_r)] \quad (104)$$

$$\Gamma^-(\Delta E) = \sum_{k_l} \sum_{k_r} w_{k_r \rightarrow k_l} f_r(k_r) [1 - f_l(k_l)] \quad (105)$$

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

$$I = \Gamma^+(\Delta E) - \Gamma^-(\Delta E) \quad (106)$$

V roviniciach (104) a (105) prejdeme od sumy k integrálu a dosadíme Zlaté pravidlo (100). Nakoniec prejdeme k integrálu cez energiu, kde musíme násobiť hustotu stavov.

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

kde sme v poslednom riadku zanedbali závislosť transmisného koeficientu $t(k_l, k_r)$. Podobným spôsobom vieme upraviť aj vzťah (105). Takto upravené vzťahy dosadíme do

rovnice pre celkový prúd prechádzajúci sústavou (106) a dostaneme

$$I = e \frac{4\pi|t^2|}{\hbar} \int_{E_{cl}}^{\infty} dE_l \rho_l(E_l) \rho_r(E_l) (f_l(E_l) - f_r(E_l)), \quad (107)$$

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

6 Odvodenie Kubovej Formuly

V tejto kapitole odvodíme Kubovu Formulu pre optickú vodivosť, ktorú neskôr použijeme na ďalšie výpočty. Narozdiel od štandardne používanej Boltzmanovej Kinetickej rovnice (BKR), ktorá využíva 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:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}, \quad (108)$$

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

$$V(t) = V \cos \omega t = -eEx \cos \omega t. \quad (109)$$

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

$$\hat{H}\Phi_j(\vec{r}) = \epsilon_j\Phi_j(\vec{r}), \quad (110)$$

ktorej Hamiltonián

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\vec{r} + V_{dis}(\vec{r}), \quad (111)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = (\hat{H} + V(t))\Psi(\vec{r}, t). \quad (112)$$

Rovnicu (112) riešime pomocou časovej poruchovej teórie. Funkciu $\Psi(\vec{r}, t)$ rozvineme do stacionárnych stavov $\phi_j(\vec{r})$.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_j c_{ji}(t) \Phi_j(\vec{r}) e^{-\frac{i\epsilon_j}{\hbar} t}, \quad (113)$$

kde $c_{ji}(t)$ je koeficient prechodu, pre násobením 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

$$c_{ji}(t_0) = \delta_{ji} \quad (114)$$

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

Rozvoj (113) dosadíme do (112) obe strany pre násobíme $\Phi_f(\vec{r}) e^{\frac{i\epsilon_f}{\hbar} t}$ - 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 (112)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_j c_{ij}(t) \int_{\Omega} d\vec{r} \Phi_f^*(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r}) e^{\frac{i(\epsilon_f - \epsilon_j)}{\hbar} t}, \quad (115)$$

kde využijúc ortogonalitu bázy $\{\Phi_j(\vec{r})\}$ môžeme ľavú stranu vysumovať. Rovnica (112) prejde na

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{fi}(t) = \sum_j c_{ji} V_{fi}(t) e^{\frac{-i\epsilon_{fi} t}{\hbar}}, \quad (116)$$

kde sme zaviedli nasledovné označenia:

$$V_{fi}(t) \equiv \int_{\Omega} d\vec{r} \Phi_f(\vec{r}) V(t) \Phi_i(\vec{r}) \quad (117)$$

$$\epsilon_{fi} \equiv \epsilon_f - \epsilon_i. \quad (118)$$

Teraz použijeme Bornovu aproximáciu $c_{ij}(t) = \delta_{ij}(t_0)$, čo je podľa (114) Kronekerov symbol, teda (116) prejde na

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{fi}(t) = V_{fi} e^{\frac{-i\epsilon_{fi} t}{\hbar}}. \quad (119)$$

Túto diferenciálnu rovnicu vieme narozdiel od (112) a (116) riešiť jednoducho integrovaním:

$$c_{fi}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V_{fi}(t') e^{\frac{-i\epsilon_{fi} t'}{\hbar}}. \quad (120)$$

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

$$V_{fi}(t) = V_{fi}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (121)$$

$$V_{fi} \equiv \int_{\Omega} d\vec{r} \Phi_f^*(\vec{r}) \left(\frac{-eEx}{2} \right) \Phi_i(\vec{r}). \quad (122)$$

V rovnici (120) vykonáme integrál cez čas dostaneme

$$c_{fi}(t) = V_{fi} \left[\frac{e^{\frac{\epsilon_{fi} - \hbar\omega}{\hbar}} - 1}{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{fi} - \hbar\omega)} + \frac{e^{\frac{\epsilon_{fi} + \hbar\omega}{\hbar}} - 1}{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_{fi} + \hbar\omega)} \right]. \quad (123)$$

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 (123) komplexne združeným dostaneme

$$\begin{aligned} |c_{fi}(t)|^2 = c_{fi}(t)c_{fi}^*(t) &= [\text{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} - \hbar\omega}{\hbar}t) + \text{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} + \hbar\omega}{\hbar}t) \\ &+ 2 \cos(\omega t) \text{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} - \hbar\omega}{\hbar}t) \text{sinc}(\frac{\epsilon_{fi} + \hbar\omega}{\hbar}t)], \end{aligned} \quad (124)$$

kde sme zaviedli označenie

$$\text{sinc}(x) = \frac{\sin(x)}{x}. \quad (125)$$

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

$$W_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|c_{fi}(t)|^2}{t}. \quad (126)$$

Dosadíme (124) do (126). Tretí člen bude v limite nulový, na prvé dva použijeme nasledujúci vzťah:

$$\delta(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} t \text{sinc}(tx). \quad (127)$$

Dostávame nasledujúce vzťahy

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 [\delta(\epsilon_{fi} - \hbar\omega) + \delta(\epsilon_{fi} + \hbar\omega)] \quad (128)$$

$$W_{fi}^{\text{ABS}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(\epsilon_{fi} - \hbar\omega) \quad (129)$$

$$W_{fi}^{\text{EMIS}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(\epsilon_{fi} + \hbar\omega), \quad (130)$$

kde sme zdefinovali pravdepodobnosti zvlášť pre absorpciu a emisiu W_{fi}^{ABS} a W_{fi}^{EMIS} .

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

$$A = 2 \left[\sum_{f,i} \hbar \omega W_{fi}^{\text{ABS}} f(\epsilon_i)(1 - f(\epsilon_f)) - \sum_{f,i} \hbar \omega W_{fi}^{\text{EMIS}} f(\epsilon_i)(1 - f(\epsilon_f)) \right] \quad (131)$$

Kde $f(\epsilon_i)$ sú Fermi-Diracove distribúcie a faktor 2 je kvôli spinu. Výraz (131) zjednodušíme nasledovnými úpravami

$$\begin{aligned} A &= \frac{4\pi}{\hbar} \left[\sum_{f,i} \hbar \omega |V_{fi}|^2 \delta(\epsilon_{fi} - \hbar \omega) f(\epsilon_i)(1 - f(\epsilon_f)) - \sum_{f,i} \hbar \omega |V_{fi}|^2 \delta(\epsilon_{fi} + \hbar \omega) f(\epsilon_i)(1 - f(\epsilon_f)) \right] \\ A &= \frac{4\pi}{\hbar} \left[\sum_{f,i} \hbar \omega |V_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega) f(\epsilon_i)(1 - f(\epsilon_f)) - \sum_{i,f} \hbar \omega |V_{if}|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_f + \hbar \omega) f(\epsilon_f)(1 - f(\epsilon_i)) \right] \\ A &= \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{f,i} \hbar \omega |V_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega) (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)) \end{aligned} \quad (132)$$

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 (132) porovnáme s klasickým

$$A = \frac{1}{T} \int_0^T \sigma(\omega) E^2 \cos^2(\omega t) dt = \frac{1}{2} \sigma(\omega) E^2 \omega, \quad (133)$$

kde $\sigma(\omega)$ je optická vodivosť. Po dosadení za maticový element podľa (122) môžeme optickú vodivosť vyjadriť ako

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar \Omega} \sum_{f,i} \hbar \omega |v_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega) (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)) \quad (134)$$

$$v_{fi} \equiv \int_{\Omega} d\vec{r} \Phi_f^*(\vec{r}) x \Phi_i(\vec{r}) \quad (135)$$

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

$$v_{fi} = -\frac{\hbar}{m(\epsilon_f - \epsilon_i)} D_{fi} \quad (136)$$

$$D_{fi} \equiv \int_{\Omega} d\vec{r} \Phi_f^*(\vec{r}) \frac{d}{dx} \Phi_i(\vec{r}), \quad (137)$$

Vzťah (134) bude teda

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi \hbar e^2}{m^2 \Omega} \sum_{f,i} \frac{\hbar \omega}{(\epsilon_f - \epsilon_i)^2} |D_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega) (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)). \quad (138)$$

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

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}} + V_{dis}(\vec{r})\right)\Phi_i(\vec{r}) = \mathcal{E}_i\Phi_i(\vec{r}). \quad (139)$$

Urobíme rozvoj do úplneho systému rovinných vln

$$\Phi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^i \phi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (140)$$

$$(141)$$

kde

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (142)$$

ktorý (140) do maticového elementu (137). Modul maticového elementu potom bude

$$|D_{fi}|^2 = \int_{\Omega} d\vec{r} \sum_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_1}^f \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}) \frac{d}{dx} \sum_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2}^{i*} \phi_{\vec{k}_2}^*(\vec{r}) \int_{\Omega} d\vec{r}' \sum_{\vec{k}_3} a_{\vec{k}_3}^{f*} \phi_{\vec{k}_3}^*(\vec{r}') \frac{d}{dx'} \sum_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_4}^i \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}') \quad (143)$$

Využijeme nasledovné vzťahy:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) &= -ik_{2x} \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}), \\ \frac{d}{dx'} \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}') &= -ik_{4x} \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}'), \\ \int_{\Omega} d\vec{r} \phi_{\vec{k}_1}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) &= \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2}, \\ \int_{\Omega} d\vec{r}' \phi_{\vec{k}_3}^*(\vec{r}') \phi_{\vec{k}_4}(\vec{r}') &= \delta_{\vec{k}_3 \vec{k}_4}. \end{aligned}$$

Vysumujeme cez Kroneckerove symboly, a dostaneme

$$|D_{fi}|^2 = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}}^{f*} a_{\vec{k}}^f a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}'}^i k_x k'_x, \quad (144)$$

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.

$$\overline{|D_{fi}|^2} = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \overline{a_{\vec{k}}^{f*} a_{\vec{k}}^f a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}'}^i} k_x k'_x. \quad (145)$$

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

$$|\overline{D_{fi}}|^2 = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \overline{a_{\vec{k}}^{f*} a_{\vec{k}}^f a_{\vec{k}}^{*i} a_{\vec{k}}^i} k_x k'_x \quad (146)$$

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

$$|\overline{D_{fi}}|^2 = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \overline{a_{\vec{k}}^{f*} a_{\vec{k}}^f a_{\vec{k}}^{*i} a_{\vec{k}}^i} k_x k'_x \delta_{\vec{k}\vec{k}'} = \sum_{\vec{k}} \overline{a_{\vec{k}}^{f*} a_{\vec{k}}^f a_{\vec{k}}^{*i} a_{\vec{k}}^i} k_x^2. \quad (147)$$

Koeficienty $\overline{a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}}^i}$ sú Thoulessov ansatz

$$\overline{a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}}^i} = \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2}. \quad (148)$$

V pôvodnom článku výsledok nie je odvodený, my ho odvodíme v nasledujúcej kapitole. Teraz ho považujeme za správny, a dosadíme ho do (138).

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) = & \frac{2\pi e^2 \hbar^3}{m^2 \Omega} \sum_{f,i} \frac{\hbar \omega}{(\epsilon_f - \epsilon_i)} \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega) (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)) \\ & \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_f)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} k_x^2 \end{aligned} \quad (149)$$

Prejdeme od sumy cez \vec{k} k integrálu

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) = & \frac{2\pi e^2 \hbar^3}{m^2 (2\pi)^3} \sum_{f,i} \frac{\hbar \omega}{(\epsilon_f - \epsilon_i)} \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega) (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)) \\ & \int_{\Omega} d\vec{k} \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_f)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} k_x^2, \end{aligned} \quad (150)$$

Kvôli prehľadnosti sa ideme venovať len integrálu cez \vec{k} . Prejdeme do sférických súradníc, dostaneme

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \frac{\sin(\theta) \cos^2(\theta) \sin^2(\theta)}{4\pi} \frac{\Omega}{2\pi} \int_0^\infty dk k^2 \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_f)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \quad (151)$$

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

$$\frac{1}{3} \frac{1}{\pi^2 \rho(\epsilon_f) \rho(\epsilon_i)} \int_0^\infty d\epsilon_k \rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_k) k(\epsilon_k) \rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_k) k(\epsilon_k) \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2}. \quad (152)$$

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

$$\frac{1}{3} \frac{\rho(\epsilon_f)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)}{\pi\rho(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)} \int_0^\infty d\epsilon_k \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_f - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \approx \quad (153)$$

$$\frac{1}{3} \frac{\rho(\epsilon_f)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)(\frac{\hbar}{2\tau})^2}{\pi\rho(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)} \frac{4\pi(\frac{\tau}{\hbar})^3}{1 + \tau^2(\frac{\epsilon_f - \epsilon_i}{2})^2}.$$

Tento približný výsledok platí za predpokladov

$$\frac{\epsilon_i}{\frac{\hbar}{\tau}} \gg 1$$

$$\frac{\epsilon_f}{\frac{\hbar}{\tau}} \gg 1.$$

Teraz sa vrátime k rovnici pre optickú vodivosť (150) a za integrál cez \vec{k} dosadíme približný výsledok (153):

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m^2} \tau \hbar^2 \frac{2\pi}{\hbar} 4\pi$$

$$\sum_{f,i} \frac{1}{3} \frac{\rho(\epsilon_f)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)}{\pi\rho(\epsilon_f)\rho(\epsilon_i)} \frac{\hbar}{\epsilon_f - \epsilon_i} \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega) (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_f)) \frac{1}{1 + \tau^2(\frac{\epsilon_f - \epsilon_i}{2})^2}. \quad (154)$$

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

$$\sigma(\omega) = e^2 \frac{1}{3} \left(\frac{\hbar^2}{m^2} \tau \right) \frac{1}{1 + \tau^2 \omega^2} \int_0^\infty d\epsilon_i \rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_i) k(\epsilon_i) \rho^{\frac{1}{2}}(\epsilon_i + \hbar\omega) k(\epsilon_i + \hbar\omega) (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_i + \hbar\omega)). \quad (155)$$

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

$$\sigma(\omega) = e^2 \frac{1}{3} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m^2} \tau 2\rho(E_F) \frac{1}{1 + \tau^2 \omega^2} F(\omega) \quad (156)$$

$$F(\omega) \equiv \frac{1}{\hbar\omega} \int_{EF-\hbar\omega}^{EF} d\epsilon_i \frac{\rho(\epsilon_i)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i)\rho(\epsilon_i + \hbar\omega)^{\frac{1}{2}}k(\epsilon_i + \hbar\omega)}{\rho(E_F)k_F^2} \quad (157)$$

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

$$\sigma(0) = e^2 \rho(E_F) D(E_F) = \sigma_{drude}, \quad (158)$$

kde $D(E_F)$ je difúzny koeficient

$$D(E_F) = \frac{1}{3}v_F^2\tau \quad (159)$$

Odvodili sme Kubovu formulu a z nej Drudeho formulu. Naše odvodenia boli rýdzo kvantové, bez semiklasického prístupu BKR.

7 Fyzikálne odvodenie Thoulessovho ansatzu pre kov s disorderom

V tejto kapitole odvodíme Thoulessov ansatz. Spočiatku sa o to pokúsime čisto matematicky, kde narazíme na problém. Neskôr urobíme aj fyzikálne úvahy, s ktorých vyplynie korekcia, ktorá nám dá výsledok (148). Koeficienty $a_{\vec{k}}^f, a_{\vec{k}}^i$ získame riešením (139) stacionárnou poruchovou metódou do 1 rádu. Pre $\Phi_i(\vec{r})$ dostávame

$$\Phi_i(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) + \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}\vec{k}_i}}{\epsilon_{\vec{k}_i} - \epsilon_{\vec{k}}} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (160)$$

odkiaľ dostaneme koeficienty $a_{\vec{k}}^i$

$$\overline{a_{\vec{k}}^{*i} a_{\vec{k}}^i} = \frac{|V_{\vec{k}\vec{k}_i}|^2}{(\epsilon_{\vec{k}_i} - \epsilon_{\vec{k}})^2}. \quad (161)$$

Napíšme teraz BKR v aproximácii relaxačného času

$$\vec{k} \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}) = \frac{-f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau_{\vec{k}}} \quad (162)$$

kde $f_0(\vec{k})$ je Fermi-Diracova distribúcia a $f(\vec{k})$ je nerovnovážna distribučná funkcia. Relaxačný čas $\tau_{\vec{k}}$ je definovaný

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \sum_{\vec{k}} W_{\vec{k}_i\vec{k}} \left(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}\right) = \sum_{\vec{k}} \frac{2\pi}{\hbar} |<\vec{k}|V_{dis}(\vec{r})|\vec{k}_i>|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_{\vec{k}}) \left(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}\right), \quad (163)$$

kde \vec{k}_i je iniciálny stav. Stav $|\vec{k}>$, $|\vec{k}_i>$ sú rovinné vlny (142).

Do (163) dosadíme bodový model disorderu.

$$V_{dis}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N_{imp}} \gamma \delta(\vec{r} - \vec{R}_j^{imp}), \quad (164)$$

kde N_{imp} je počet bodových porúch v kryštáli s objemom Ω , a \vec{R}_j^{imp} sú náhodné polohy bodových porúch. (164) dosadíme do (163). Pre prehľadnosť textu sa venujeme len časti $\langle \vec{k} | V_{dis}(\vec{r}) | \vec{k}_i \rangle > 2$

$$\begin{aligned} \langle \vec{k} | V_{dis}(\vec{r}) | \vec{k}_i \rangle &= \sum_{j=1}^{N_{imp}} \gamma \langle \vec{k} | \delta(\vec{r} - \vec{R}_j^{imp}) | \vec{k}_i \rangle \\ &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{j=1}^{N_{imp}} \gamma \int_{\Omega} d\vec{r} \delta(\vec{r} - \vec{R}_j^{imp}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}_i) \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{j=1}^{N_{imp}} \gamma e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}) \cdot \vec{R}_j^{imp}}, \end{aligned} \quad (165)$$

kde v poslednom riadku sme využili Fourierovu transformáciu delta funkcie. Výsledok (165) dosadíme do (163)

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \frac{2\pi}{\Omega^2 \hbar} \gamma^2 \sum_{j=1}^{N_{imp}} \sum_{j'=1}^{N_{imp}} e^{i(\vec{k} - \vec{k}_i) \cdot (\vec{R}_j^{imp} - \vec{R}_{j'}^{imp})} \delta(\epsilon_i - \epsilon_{\vec{k}}) \left(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}\right). \quad (166)$$

V (166) 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 dostaneme N_{imp} .

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \frac{2\pi}{\Omega^2 \hbar} \gamma^2 [N_{imp} + \sum_{j \neq j'=1}^{N_{imp}} e^{i(\vec{k} - \vec{k}_i) \cdot (\vec{R}_j^{imp} - \vec{R}_{j'}^{imp})}] \delta(\epsilon_i - \epsilon_{\vec{k}}) \left(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}\right). \quad (167)$$

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

$$\sum_{j \neq j'=1}^{N_{imp}} e^{i(\vec{k} - \vec{k}_i) \cdot (\vec{R}_j^{imp} - \vec{R}_{j'}^{imp})} = N_{imp} e^{i\alpha}, \quad (168)$$

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

$$\overline{N_{imp} e^{i\alpha}} = 0, \quad (169)$$

po dosadení do (167) a vystredovaní teda dostaneme

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \frac{2\pi}{\Omega^2 \hbar} \gamma^2 \sum_{\vec{k}} N_{imp} \delta(\epsilon_{\vec{k}_i} - \epsilon_{\vec{k}}) \left(1 - \frac{k_x}{k_{ix}}\right). \quad (170)$$

Teraz vysumujeme (170). Delta funkcia je párna a druhý člen v zátvorke je nepárny. Ich súčin bude tiež nepárny, a teda po vysumovaní cez páry 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

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}_i}} = \frac{2\pi}{\Omega\hbar} \gamma^2 n_{imp} \rho(\epsilon_{\vec{k}_i}), \quad (171)$$

kde sme zaviedli pojem hustoty bodového disorderu $n_{imp} = \frac{N_{imp}}{\Omega}$. Z rovníc (171) a (161) dostaneme

$$\overline{a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}}^i} = \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2}. \quad (172)$$

Tento výsledok ale nemôže byť správny, pretože nespĺňa normalizačnú podmienku

$$\overline{|a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}}^i|^2} = 1. \quad (173)$$

Je však podobný Thoulessovmu lorenziánu

$$\overline{a_{\vec{k}}^{i*} a_{\vec{k}}^i} = \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_i)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_i - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2}, \quad (174)$$

až na korekciu v menovateli $(\frac{\hbar}{2\tau})^2$, ktorú teraz odvodíme.

Výsledok (172) sme dostali riešením (139) stacionárnou poruchovou teóriou, teraz ideme riešiť rovnaký problém nestacionárne.

$$(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + V_{dis}(\vec{r})) \Phi_i(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{r}). \quad (175)$$

Podobne, ako sme riešili (112), do rovnice (175) dosadíme rozvoj

$$\Phi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\vec{k}_i}(t) \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}} t}{\hbar}}, \quad (176)$$

po úpravách dostaneme

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_{\vec{k}_f}^{\vec{k}_i} = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\vec{k}_i}(t) \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{\frac{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}_i})t}{\hbar}} V_{fi}, \quad (177)$$

použijeme Bornovu aproximáciu a výsledok je

$$a_{\vec{k}_f}^{\vec{k}_i} = \frac{-V_{fi}}{(\epsilon_f - \epsilon_i)} (e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_i - \epsilon_f)t} - 1). \quad (178)$$

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

$$V_{dis}(t) = V_{dis} e^{\frac{-t}{\tau}}. \quad (179)$$

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

$$a_{\vec{k}_f}^{\vec{k}_i} = \frac{-V_{fi}}{(\epsilon_f - \epsilon_i) - \frac{i\hbar}{2\tau}} (e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_i - \epsilon_f - \frac{\hbar}{2\tau})t}) - 1. \quad (180)$$

z čoho po prenásobení komplexne združeným dostaneme lorenzián (174).

8 Výpočet hustoty stavov Thoulesovým ansatzom

V tejto kapitole vypočítame hustotu stavov pomocou Thoulesovho ansatzu. Self energiu, narozdiel od AA, nie je možné vyjadriť analyticky, preto použijeme jednoduchú obdĺžnikovú metódu integrovania. Výsledok porovnáme s AA a experimentom. Vychádzame z pre energiu elektronov v kove s disorderom a e-e interakciou (??)

$$E_m = \mathcal{E}_m - \sum_{\forall m'} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \phi_{m'}^*(\vec{r}) \phi_m^*(\vec{r}') V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \phi_{m'}(\vec{r}) \phi_m(\vec{r}'), \quad (181)$$

kde \mathcal{E}_m, ϕ_m sú riešenia (??)

$$[\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{dis}(\vec{r})] \phi_m(\vec{r}) = \mathcal{E}_m \phi_m(\vec{r}), \quad (182)$$

a $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ je Yukkavov potenciál (??), resp. jeho Fourierova transformácia

$$V(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) e^{i|\vec{r} - \vec{r}'| \cdot \vec{q}}. \quad (183)$$

$$V(\vec{q}) \equiv \frac{e^2 q^2}{\epsilon_0 (q^2 + k_s^2)}$$

Do (181) dosadíme (183) za $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$. Pre energiu stredného disorderu dostávame

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(q) \sum_{\forall m'} \overline{|\langle \phi_m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \phi_{m'} \rangle|} \quad (184)$$

Vlnovú funkciu $\phi_m(\vec{r})$ rozvineme do systému rovinných vln

$$\phi_m(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^m e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (185)$$

a dosadíme do (184)

$$\begin{aligned} \overline{E_m} = \mathcal{E}_m - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) \overline{\sum_{m'} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_3} \int d\vec{r} c_{\vec{k}_1}^{m*} c_{\vec{k}_3}^{m'} e^{i\vec{q}\vec{r}} e^{i\vec{k}_1\vec{r}} e^{-i\vec{k}_3\vec{r}}} \\ \overline{\sum_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{k}_4} \int d\vec{r} c_{\vec{k}_4}^{m'*} c_{\vec{k}_2}^m e^{-i\vec{q}\vec{r}} e^{-i\vec{k}_4\vec{r}} e^{i\vec{k}_2\vec{r}}}. \end{aligned} \quad (186)$$

Podobne ako v kapitole 6 pre vzťah (143) vieme využiť nasledovné vzťahy Využijeme nasledovné vzťahy:

$$\int d\vec{r} e^{i(\vec{k}+\vec{q}-\vec{k})\vec{r}} = \delta(\vec{k}_3 - \vec{k}_1 - \vec{q}) \int d\vec{r} e^{i(\vec{k}_2+\vec{q}-\vec{k}_4)\vec{r}} = \delta(\vec{k}_3 - \vec{k}_1 - \vec{q})$$

Vysumujeme cez Kroneckerove symboly, a dostaneme

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \overline{c_{\vec{k}+\vec{q}}^{*m} c_{\vec{k}}^m c_{\vec{k}'+\vec{q}}^{*m'} c_{\vec{k}'}^{m'}}. \quad (187)$$

Uvažujeme *slabý* disorder, koeficienty s rôznym m a s rôznym \vec{k} sú nekorelované - viď. kapitolu 6, kde sme urobili to isté pri prechode z (145) na (147). Dostaneme výraz pre energiu

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}} \overline{c_{\vec{k}+\vec{q}}^{*m} c_{\vec{k}+\vec{q}}^m c_{\vec{k}}^{*m'} c_{\vec{k}}^{m'}}. \quad (188)$$

Teraz môžeme aplikovať Thoulessov ansatz:

$$\overline{c_{\vec{k}}^{*m} c_{\vec{k}}^m} = \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_m)} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(\epsilon_m - \epsilon_k)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \quad (189)$$

Zavedieme nasledovné označenia

$$\begin{aligned} \epsilon_\tau &\equiv \frac{\hbar}{2\tau} \\ \epsilon_{|\vec{k}+\vec{q}|} &\equiv \frac{\hbar^2 |\vec{k} + v\vec{q}|^2}{2m} \end{aligned}$$

Po dosadení Thoulessovho ansatzu (189) do (188) dostaneme

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) \sum_{m'} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_m)} \frac{\epsilon_\tau}{(\epsilon_m - \epsilon_k)^2 - \epsilon_\tau^2} \frac{1}{\pi \rho(\epsilon_{m'})} \frac{\epsilon_\tau}{(\epsilon_{m'} - \epsilon_{|\vec{k}+\vec{q}|})^2 - \epsilon_\tau^2}. \quad (190)$$

Prejdeme od súm cez m a \vec{k} k integrálom cez energie. Zároveň prepíšeme q do sférických súradníc.

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \frac{1}{8\pi^2 \rho(\epsilon_m)} \int dq q^2 V(q) \int_0^{E_F} d\epsilon_{m'} \int_0^\infty \rho(\epsilon_k) d\epsilon_k \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{\epsilon_\tau}{(\epsilon_m - \epsilon_k)^2 - \epsilon_\tau^2} \frac{\epsilon_\tau}{(\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{q}} + 2\sqrt{\epsilon_{\vec{k}}\epsilon_{\vec{q}}} \cos(\theta) - \epsilon_{m'})^2 - \epsilon_\tau^2}. \quad (191)$$

Podobne ako v kapitole 7, použijeme aproximáciu $\rho(\epsilon_m) \approx \rho(\epsilon_k)$, čo nám umožňuje vykrátiť dané členy, finálny integrál bude

$$\overline{E_m} = \overline{\mathcal{E}_m} - \frac{1}{8\pi^2} \int dq q^2 V(q) \int_0^{E_F} d\epsilon_{m'} \int_0^\infty d\epsilon_k \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{\epsilon_\tau}{(\epsilon_m - \epsilon_k)^2 - \epsilon_\tau^2} \frac{\epsilon_\tau}{(\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{q}} + 2\sqrt{\epsilon_{\vec{k}}\epsilon_{\vec{q}}} \cos(\theta) - \epsilon_{m'})^2 - \epsilon_\tau^2}. \quad (192)$$

Integrály cez $d\epsilon_m$ a $d\theta$ vieme vypočítať analyticky. Zvyšné dva budeme musieť rátať numericky, preto zavedieme bezrozmerné premenné:

$$\begin{aligned} w &= \frac{\epsilon_m}{\epsilon_\tau} \\ u &= \frac{\epsilon_{m'}}{\epsilon_\tau} \\ x &= \frac{\epsilon_k}{\epsilon_\tau} \\ y &= \frac{\epsilon_q}{\epsilon_\tau} \end{aligned}$$

Po vykonaní oboch analytických integrálov dostaneme vzťah pre selfenergiu

$$\Sigma(w) = \frac{e^2}{8\pi^4 \epsilon_0 k_s^{-1}} \int_0^{\bar{y}_{max}} d\bar{y} \frac{\bar{y}^2}{1 + \bar{y}^2} \int_0^\infty dx \frac{1}{(x - w)^2 + 1} \sqrt{\frac{\epsilon_\tau}{E_F}} F(x, y), \quad (193)$$

kde $k_s \approx k_F$ je recipročná tieniaca dĺžka, $\bar{y} = \frac{q}{k_s}$ a $F(x, y)$ je výsledok analytických integrálov

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

kde $u_{EF} = \frac{E_F}{\epsilon_\tau}$ je normovaná Fermiho Energia.

Numerické riešenie (193) zjednodušíme poslednou aproximáciou. Integrál cez dx môžeme považovať za δ funkciu.

$$\delta(x - w) = \int_0^\infty dx \frac{1}{(x - w)^2 + 1} \quad (194)$$

Finálny vzťah pre energiu, ktorý budeme počítat numericky, bude nasledovný

$$\Sigma(w) = \frac{e^2}{8\pi^4 \epsilon_0 k_s^{-1}} \int_0^{\bar{y}_{max}} d\bar{y} \frac{\bar{y}^2}{1 + \bar{y}^2} \sqrt{\frac{\epsilon_\tau}{E_F}} F(w, y), \quad (195)$$

Záver

Záver

Zoznam použitej literatúry

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