

└ 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

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{1}{V}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}, \quad (1)$$

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

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

Najprv definujeme základné pojmy na probléme neinteragujúcich elektrónov. Pre neinteragujúci elektrón máme Schrödingerovu rovnicu voľnej častice, ktorej riešením je DeBroglieho rovinná vlna (1). Energia neinteragujúceho elektrónu je daná parabolickým disperzným zákonom. Pre koncentráciu elektrónov platí vzťah (2)

Diplomová práca

- Po integrovaní cez ϕ a θ a zámene premenných za energiu definujeme hustotu stavov $\rho(E)$

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

- 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 Sfere s polomerom

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

- energia na Fermiho sfere (Fermiho Energia) je

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{2/3}}{2m_e}. \quad (6)$$

Po integrovaní cez ϕ a θ a zámene premenných za energiu definujeme hustotu stavov $\rho(E)$. Pre konkrétny prípad voľnej častice je hustota stavov úmerná odmocnине z energie. Maximálne obsadené stavy neinteragujúcich elektrónov pri $T=0$ budú na Fermiho Sfere s polomerom k_f a Fermiho energiou E_f

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

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

$$E[\Psi] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (8)$$

- vlnové funkcie Ψ hľadáme v tvare Slaterovho determinantu

$$\Psi(r_1, s_1, \dots, r_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1, s_1) & \dots & \phi_1(r_N, s_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(r_1, s_1) & \dots & \phi_N(r_N, s_N) \end{vmatrix} \quad (9)$$

Po započítaní vzájomnej interakcie elektrónov (e-e interakciu) a interakciu s iónmi dostaneme mnohočasticový Hamiltonián. Sch. R. s hamiltoniánom (7) sa nedá exaktne riešiť ani analyticky, ani numericky, riešime ju teda v Hartree-Fockovom priblížení variačnou metódou, kde vlnové funkcie Ψ hľadáme v tvare Slaterovho determinantu (9). Slaterov determinant zahŕňa výmenný efekt.

- Variačnou metódou dostaneme Hartree-Fockove rovnice

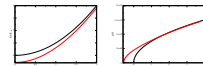
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \psi(r) = E \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} |\psi(r')|^2 \psi(r) + E_{ex} \psi(r), \quad (10)$$
 kde členy

$$U^e(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \rho_e(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad \text{a} \quad U^{ion}(\vec{r}) = -\sum_I \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_I|} \quad (11)$$
- Problém riešime v modeli žele, teda členy $U^e(\vec{r})$ a $U^{ion}(\vec{r})$ vypadnú, dostaneme Fockove rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \frac{1}{\sqrt{V}} \phi^{\vec{k},\vec{\lambda}} = \frac{e^2}{V^{5/2} 4\pi\epsilon_0} \sum_{\vec{k}'} \int d^3r' \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \phi^{\vec{k}',\vec{\lambda}'} \phi^{\vec{k},\vec{\lambda}} = E(\vec{k}) \frac{1}{\sqrt{V}} \phi^{\vec{k},\vec{\lambda}} \quad (12)$$

Variačnou metódou dostaneme Hartree-Fockove rovnice (10), kde definujeme Hartreeho člen medzielektónovej interakcie U^e a interakciu s iónmi U^{ion} . Problém riešime v modeli žele, čo znamená, že potenciál od iónov považujem za spojitý. členy $U^e(\vec{r})$ a $U^{ion}(\vec{r})$ vypadnú, dostaneme Fockove rovnice (12). Tieto rovnice je vhodné fourierovsky pretransformovať.

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



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.

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

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

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

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

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

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

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

$$\bar{\epsilon}_m = \bar{\epsilon}_m - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) < \phi_m(\vec{r}) \phi_m^*(\vec{r}+\vec{q}) >^2. \quad (16)$$

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

Elektrón v disorderovanom kove bez e-e interakcie je popísaný Sch. R. (14). Započítaním e-e interakcie v modeli žele dostaneme Fockovu rovnicu (15). Problém (15) riešime v prvom ráde poruchovej teórie. $\phi_m(\vec{r}) \simeq \phi_m^{(0)}(\vec{r})$. Problém (15) je pre jeden konkrétny disorder. Náš výsledok je stredovaný cez súbor mikroskopicky rôznych ale makroskopicky rovnakých disorderov. Pre stredný disorder dostaneme (16). Poruchové riešenie $\phi_m(\vec{r}) \simeq \phi_m^{(0)}(\vec{r})$ môžeme na rovnicu (15) aplikovať len vtedy, keď je interakcia $V(\vec{r}-\vec{r}')$ slabá v porovnaní s interakciou s disorderom. To je pravda pre medzielektrónové vzdialenosti $|\vec{r}-\vec{r}'| \gtrsim l$, pretože na vzdialenostiach $> l$ sa už interakcia s disorderom uplatňuje, zatiaľčo interakcia $V(\vec{r}-\vec{r}')$ je exponenciálne zatienená už na vzdialenosti $|\vec{r}-\vec{r}'| \simeq k_s^{-1} \simeq k_F^{-1} \ll l$. Keď však dva elektróny navzájom interagujú vo vzdialenosti $|\vec{r}-\vec{r}'| \lesssim l$, interakcia s disorderom sa nestihne uplatniť. To znamená že interakcia $V(\vec{r}-\vec{r}')$ na vzdialenostiach $|\vec{r}-\vec{r}'| \lesssim l$ nie je v porovnaní s disorderom slabá porucha. Intuitívne je jasné že správny poruchový ansatz v tomto prípade musí byť

Diplomová práca

- Pre výpočet energie nám stačí maticový element.

$$|M_{\text{diss}}|^2 = |\langle \phi_m | e^{i\mathcal{E}_m \tau} | \phi_m \rangle|^2. \quad (17)$$
- Difúzna aproximácia spočíva v postulovaní rovnice

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

$$\overline{E(\vec{r})} = \overline{E} - \int_0^{\tau} dt' \rho(t') \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \, V(\vec{q}) |\langle \phi_{\vec{r}} | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_{\vec{r}'} \rangle|^2. \quad (20)$$

Pre výpočet energie nám stačí maticový element (17). Počítame difúznou aproximáciou, podobne ako AA. Difúzna aproximácia spočíva v postulovaní rovnice (18), teda že elektrón sa správa ako brownovská častica. Vlnovú funkciu častice z rovnice (18) rozvineme do stacionárnych stavov $\phi_m(\vec{r})$. 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)

Diplomová práca

- rovnicu (20) zapíšeme v tvare $\overline{E(\mathcal{E})} = \overline{\mathcal{E}} + E_{self}(\mathcal{E})$

- derivujeme podľa počtu stavov a dostaneme

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

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

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

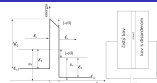
- Dosadením self energie dostaneme Altschuler-Aronovov výsledok

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

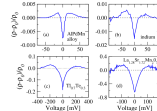
rovniciu (20) zapíšeme v tvare $\overline{E(\mathcal{E})} = \overline{\mathcal{E}} + E_{self}(\mathcal{E})$. derivujeme podľa počtu stavov a dostaneme otočením oboch strán dostaneme hustotu stavov, ktorú počítame ako Taylorov rozvoj do prvého rádu (21). Otočením oboch strán dostaneme hustotu stavov, ktorú počítame ako Taylorov rozvoj do prvého rádu. Dosadením self energie dostaneme Altschuler-Aronovov výsledok (23), kde vidíme potlačenie hustoty v okolí Fermiho energie.

Meranie hustoty stavov v kove s disorderom metódou tunelovej spektroskopie

Hustotu stavov meriame podľa obrázka. Vľavo máme čistý kov, ktorého hustotu stavov poznáme. Vpravo máme kov s disorderom. Oddelené sú tenkou vrstvou izolantu = bariery. Elektróny tunelujú cez bariery ako popisuje pásový diagram na obrázku. Meraním diferenciálnej vodivosti sústavy vieme určiť hustotu stavov.



Hustotu stavov určíme meraním diferenciálnej vodivosti dvoch kovov oddelených tenkou vrstvou izolantu, ako vidíme na obrázku. Dá sa ukázať, že pre diferenciálnu vodivosť platí $G(U) = e^2 \frac{dI}{dU} = \frac{e^2}{4} D(E_F) D(E_F + eU)$, 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 $\rho(|\epsilon - \epsilon_F|) = \sqrt{|\epsilon - \epsilon_F|}$. Ďaleko od Fermiho energie už Altshuler-Aronovova závislosť $\rho(|\epsilon - \epsilon_F|) = \sqrt{|\epsilon - \epsilon_F|}$ očividne neplatí a pre dostatočne veľké hodnoty $|\epsilon - \epsilon_F|$ vidno, že $\rho(|\epsilon - \epsilon_F|)$ s rastúcim $|\epsilon - \epsilon_F|$ klesá k ρ_0 zhora.

Výsledky merania hustoty stavov tunelovou spektroskopiou pre rôzne kovy V blízkom okolí Fermiho energie všetky ukázané spektrá vykazujú Altshuler-Aronovov jav pokles úmerný odmocnine. Ďaleko od Fermiho energie už Altshuler-Aronovova závislosť očividne neplatí a pre dostatočne veľké hodnoty vidno, že hustota stavov klesá k ρ_0 zhora.

Altshuler - Aronov jav, rozšírenie teórie na energie $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| \gtrsim \hbar/\tau$

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

$$U_{co} = \frac{8}{3\pi^2} \epsilon_{co}^2 \frac{\hbar}{\tau} \quad (24)$$

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 ρ_0 najver prevyší a až potom k nej konverguje zhora) nemá oporu v dostupných teóriách.
- Teóriu sa pokúsime rozšíriť do oblasti $|E - E_F| \gtrsim U_{co}$.

Altshuler-Aronovov výsledok platí len pre energie $< \hbar/\tau$. Z AA výsledku vidno že hustota stavov sa pretne s neporušenou pre $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_F| = U_{co}$ tzv. korelačná energia. Pre energie oveľa väčšie ako kondenzačná experiment ukazuje, že stavy vytlačené z oblasti pod kondenzačnou energiou majú tendenciu sa nakopiť tesne nad energiou ňou v oblasti veľkosti dva a až tri krát kondenzačná energia, čo AA vôbec nepopisuje. Teóriu sa pokúsime rozšíriť do oblastí nad korelačnú energiu.

$$\overline{\epsilon_m} = \overline{\epsilon_m} - \sum_{\vec{q}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} V(\vec{q}) |< \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_m >|^2, \quad (25)$$

kde $V(\vec{q}) = e^2 / \epsilon_0 (\vec{q}^2 + k_D^2)$.

- pre $q > q_{max} \simeq 1/l$ je treba vlnové funkcie $\phi_m(\vec{r})$ aproximovať rovinovými 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

$$\overline{\epsilon_m} = \frac{k_D^2 k_0^2}{2m} - \sum_{\vec{q}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| < q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) |< \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_m >|^2 - \sum_{\vec{q}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{q}| > q_{max}} d\vec{q} V(\vec{q}) |< \phi_m | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \phi_m >|^2, \quad (26)$$

kde $|k_m| = \frac{1}{\sqrt{V}} |\vec{k}_m|^2$

Vychádzame z rovnice (25). Pre $q > q_{max} \simeq 1/l$ je treba vlnové funkcie $\phi_m(\vec{r})$ aproximovať rovinovými 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.

Diplomová práca

- Rovnicu (26) prepíšeme do tvaru

$$\tilde{\epsilon}_{\alpha} = \epsilon_{\alpha} + E_{\alpha\alpha}^{AA}(m) - E_{\alpha\alpha}^{ee}(m), \quad (27)$$

kde

$$\epsilon_{\alpha} = \frac{\hbar^2 k_{\alpha}^2}{2m} - \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} V(\mathbf{q}) |< k_{\alpha} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | k_{\alpha'} >|^2 \quad (28)$$

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

$$E_{\alpha\alpha}^{AA}(m) = - \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{q}| < q_{\text{max}}} d\mathbf{q} V(\mathbf{q}) |< \Phi_{\alpha} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \Phi_{\alpha'} >|^2 \quad (29)$$

je Altschuler Aronovova self energia

$$E_{\alpha\alpha}^{ee}(m) = - \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{q}| < q_{\text{max}}} d\mathbf{q} V(\mathbf{q}) |< k_{\alpha} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | k_{\alpha'} >|^2, \quad (30)$$

je self-energia pochádzajúca z Fockovho príspevku od rovinných vln

Rovnicu prepíšeme do tvaru (27).

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

je Altschuler Aronovova self energia, ktorú AA počítali difúznou aproximáciou

je self-energia pochádzajúca z Fockovho príspevku od rovinných vln, túto self energiu aa nezapočítali

- Počítame (29). Altschuler a Aronov počítali v difúznej aproximácii, my zvolíme iný postup.
- vlnové funkcie $\phi_m(\vec{r})$ rozviníme do úplného systému rovinných vln $\phi_m(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_k \sum_q e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$

$$\rho^{(2)}(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \int_{\Omega} d\vec{r}_1 \int_{\Omega} d\vec{r}_2 \rho^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (31)$$

- Využijeme vzťahy

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

Počítame (29). Altschuler a Aronov počítali v difúznej aproximácii, my zvolíme iný postup. vlnové funkcie $\phi_m(\vec{r})$ rozviníme do úplného systému rovinných vln. Využijeme ortogonalitu, čo nám umožní sumovať cez Kroneckerove symboly.

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

- 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

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

Po vysumovaní s pomocou Kroneckerových symbolov dostaneme (33)

Začíname 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 (34)

Nekorelované sú preto, lebo cčka sú komplexné čísla. 2 stavy sa líšia iba o náhodnú fazu, ktorú vyberám nezávisle. Preto sú nekorelované aj k aj m .

$$\frac{C_{\alpha\beta}^{(0)} C_{\alpha\beta}^{(0)}}{4} = \frac{1}{2\pi p(k_{\alpha})} \frac{\frac{\hbar}{2m}}{(k_{\alpha} - k_0)^2 + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2} \quad (35)$$

- 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

Využijeme Thoulessov Ansatz (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

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{2\pi^2} \int_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{m}} \langle \mathbf{m} | \mathbf{H} | \mathbf{m} \rangle \left[\sum_{\mathbf{m}'} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{m}} - \epsilon_{\mathbf{m}'}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{m}} - \epsilon_{\mathbf{m}'}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{m}} - \epsilon_{\mathbf{m}'}} \right] \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{m}} - \epsilon_{\mathbf{m}'}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{m}} - \epsilon_{\mathbf{m}'}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{m}} - \epsilon_{\mathbf{m}'}} \quad (36)$$

kde $\epsilon_{\mathbf{m}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ a $\epsilon_{\mathbf{m}'} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m}$

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

$$E_{self}^{AA}(m) = -\frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta \int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta \int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta \int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta \quad (37)$$
- Integrál cez $d\phi$ je 2π , integrály cez $d\epsilon_m$ a $d\theta$ vieme vypočítať analyticky, a zvyšné dva budeme rátať numericky

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

kde sme zaviedli pomocné označenia.

Hustota stavov $\rho(\epsilon'_m)$ sa vykrátí, ale ostatné nie. Napriek tomu ich kvôli jednoduchosti približne vykrátíme.

po prechode do sférických súradníc pri integrovaní cez $d\mathbf{q}$ dostávame (37)

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

Diplomová práca

- po formálnom vystredovaní (27) cez $\frac{1}{p(\mathcal{E})} \sum_{i=1}^n \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{i0})$ rovnica prejde na tvar

$$\bar{\mathcal{E}} = \mathcal{E}(\mathcal{E}) + E_{\text{stat}}^{\text{AA}}(\mathcal{E}) - E_{\text{stat}}^{\text{BB}}(\mathcal{E}). \quad (38)$$
- rovnicu (38) derivujeme podľa počtu stavov a prevrátime. Následne po Taylorovom rozvoji a úpravách dostaneme.

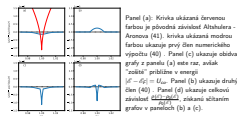
$$\rho(\mathcal{E}) = \rho_0(\mathcal{E}) \left(1 - \frac{dE_{\text{stat}}^{\text{AA}}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} + \frac{dE_{\text{stat}}^{\text{BB}}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} \right), \quad (39)$$
 kde sme urobili aproximáciu $\frac{d\mathcal{E}}{d\mathcal{E}} \simeq 1$ čo znamená aj aproximáciu $\mathcal{E} \simeq \mathcal{E}$.
- hustotu stavov plotujeme v tvare relatívnej odchýlky

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})} = - \frac{dE_{\text{stat}}^{\text{AA}}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} + \frac{dE_{\text{stat}}^{\text{BB}}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}, \quad (40)$$
- v tomto tvare prepíšeme aj pôvodný vzťah Altschulera a Aronova

$$\frac{\rho(\mathcal{E}) - \rho_0(\mathcal{E})}{\rho_0(\mathcal{E})} = - \frac{e^2}{\epsilon_0 \kappa_L^2} \frac{q_{\text{stat}}}{2\pi^2 B D} + \frac{e^2}{\epsilon_0 \kappa_L^2} \frac{1}{2\kappa^2 (2BD)^{1/2}} \sqrt{|\mathcal{E} - \mathcal{E}_Z|}. \quad (41)$$

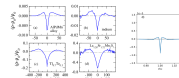
po formálnom vystredovaní (27) rovnica prejde na tvar (38) rovnicu (38) derivujeme podľa počtu stavov a prevrátime. Následne po Taylorovom rozvoji a úpravách dostaneme (39). kde sme urobili aproximáciu $\frac{d\mathcal{E}}{d\mathcal{E}} \simeq 1$ čo znamená aj aproximáciu $\mathcal{E} \simeq \mathcal{E}$. hustotu stavov plotujeme v tvare relatívnej odchýlky, v tomto tvare prepíšeme aj pôvodný vzťah Altschulera a Aronova. V tomto tvare sa hustota stavov meria v experimentoch.

└ 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).

Diplomová práca



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

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