

Simetrija supravodljivog parametra uređenja u naddopiranim kupratima

Sutlić, Hrvoje

Master's thesis / Diplomski rad

2016

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:374671>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-12-18**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Hrvoje Sutlić

SIMETRIJA SUPRAVODLJIVOG
PARAMETRA UREĐENJA U
NADDOPIRANIM KUPRATIMA

Diplomski rad

Zagreb, 2016.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: ISTRAŽIVAČKI

Hrvoje Sutlić

Diplomski rad

**Simetrija supravodljivog parametra
uređenja u naddopiranim kupratima**

Voditelj diplomskog rada: doc. dr. sc. Ivan Kupčić

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2016.

Zahvala

Ovo nije pjesma. Tekst ovog rada je suh, tvrd i dosadan; točno onakav kakav znanstveni tekst mora biti. On nigdje ne naslućuje muku svog stvaranja, niti štetu koju je pritom počinio.

Od srca zahvaljujem doc. dr. sc. Ivanu Kupčiču na velikom strpljenju, toleranciji, ohrabrenju i poduci. Sram me uopće pomisliti što bi ovaj rad bio bez njega.

Ovaj rad posvećujem svom noniću. Requiescat.

Sadržaj

1	Uvod	1
1.1	Kuprati i visokotemperaturna supravodljivost	1
1.2	Elektrodinamička svojstva kuprata	2
1.3	Efektivan model s jednom vrpcom	6
1.4	Pregled rada	9
2	Drudeova formula za tenzor vodljivosti	10
2.1	Drudeov model	10
2.2	Boltzmannove jednačbe	11
2.3	Drudeova formula	13
2.3.1	Raspršenje elektrona na nečistoćama	14
2.4	Nedostaci Drudeove formule	15
3	Vežanje vodljivih elektrona i elektromagnetskog polja	16
3.1	Baždarna invarijantnost električne komponente EM polja	16
3.2	Tenzor recipročne efektivne mase	17
3.3	Vežanje sa skalarnim potencijalom	18
3.4	Vežanje s vektorskim potencijalom	19
3.4.1	Aproksimacija prvih susjeda	19
3.4.2	Preskok na druge susjede	20
3.5	Vršne funkcije	21
3.6	Vršne funkcije u dugovalnoj granici	21
4	Formalizam jednačbi gibanja	23
4.1	Dielektrična funkcija u aproksimaciji nasumičnih faza	23
4.2	Kubo formula za tenzor vodljivosti	25
4.3	Jednačba kontinuiteta i transportna jednačba	27
4.4	Alternativni izvod tenzora vodljivosti	29
4.5	Fenomenološka memorijska funkcija	30
4.5.1	Struja-struja korelacijska funkcija i memorijska funkcija	32

5	Memorijska funkcija	33
5.1	Struja-struja korelacijska funkcija u režimu idealne vodljivosti	33
5.2	Raspršenje na statičkom neredu	34
5.3	Račun efektivne strujne vršne funkcije	36
5.4	Sila-sila korelacijska funkcija	38
6	Dinamička vodljivost BCS supravodiča	41
6.1	BCS hamiltonijan u aproksimaciji srednjeg polja	41
6.2	BCS jednačba samosuglasnosti	43
6.3	Minimalna supstitucija	44
6.4	Mattis-Bardeen model vodljivosti	45
6.4.1	Vodljivost u BCS supravodičima s simetrije u visokoenerget- skom režimu	47
7	Naddopirani kuprati	50
7.1	Supravodljivo uređeno stanje naddopiranih kuprata	50
7.2	Jednačba samosuglasnosti za parametar uređenja $d_{x^2-y^2}$ simetrije . .	52
7.3	Dinamička vodljivost u supravodljivom uređenom stanju naddopiranih kuprata	53
	Zaključak	54
	Dodaci	55
A	Izvodi nekih važnih relacija	55
A.1	Linearizirana samosuglasna Boltzmanova jednačba	55
A.2	"Parcijalna integracija" efektivne koncentracije vodljivih elektrona . .	56
A.3	Susceptibilnost u aproksimaciji nasumičnih faza	57
A.4	Općenite Kubo formule	59
B	Vežanje vodljivih elektrona i elektromagnetskog polja	61
B.1	Vežanje s vektorskim potencijalom	61
B.2	Veza nabojne i strujne vršne funkcije	63
C	Račun vodljivosti preko sila-sila korelacijske funkcije	64
C.1	Izvod sila-sila korelacijske funkcije	64
C.2	Doprinos koji sadrži vlastitu energiju elektrona	67
D	Izvodi za supravodljivo stanje	68
D.1	Bogoljubovljeve transformacije i matrica transformacije	68
D.2	Izvod BCS jednačbe samosuglasnosti preko anomalne Greenove funk- cije	70

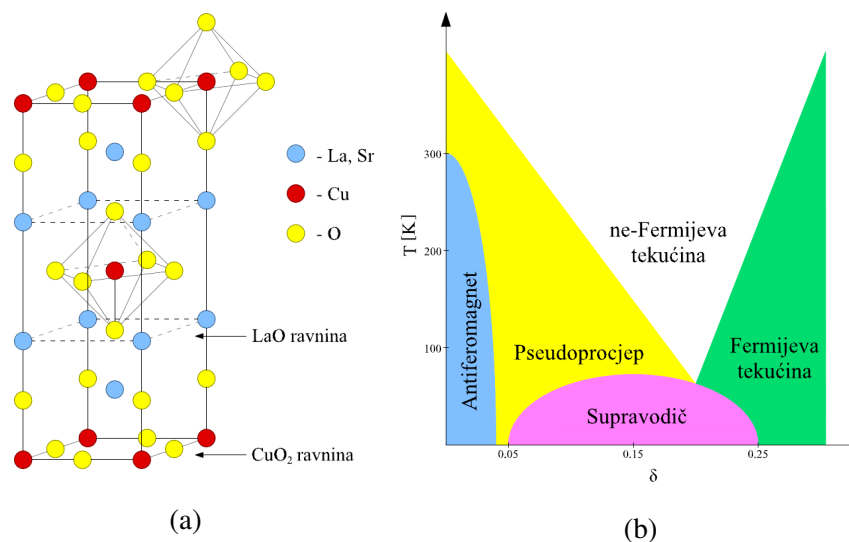
D.3	Primjeri BCS jednadžbe samosuglasnosti	71
D.3.1	Primjer 1: Niskotemperaturni supravodiči	71
D.3.2	Primjer 2: Faktorizirani $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	72
D.4	Korelacijska funkcija u dvovrpčanom sustavu u Matsubarinom formalizmu	72

Poglavlje 1

Uvod

1.1 Kuprati i visokotemperaturna supravodljivost

Kuprati su vodljivi sustavi slojevite perovskitne strukture. Na Slici 1.1(a) prikazana je jedinična ćelija materijala $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Ovdje CuO_2 ravnine alterniraju sa (La,Sr)O ravninama. Svojstva kuprata određena su prije svega ponašanjem vodljivih elektrona u CuO_2 ravninama. Ona jako ovise o broju dopiranih šupljina, kao što se vidi na Slici 1.1(b).



Slika 1.1: (a) Kristalna struktura $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ kristala. (b) Shematski prikaz faznog dijagrama kuprata dopiranih šupljina.

Stehiometrijski uzorci u svim kupratima su Mottovi antiferomagnetski izolatori i to ostaju do dopiranja $\delta \approx 0.04$. Između $\delta \approx 0.05$ i $\delta \approx 0.25$ pojavljuje se supravodljivo uređenje. Krićna temperatura T_c ovisi o dopiranju na naćin ilustriran na slici. Optimalnom dopiranju odgovara $\delta_{op} \approx 0.15$ i karakterizira ga maksimalna krićna

temperatura T_c . Za dopiranja manja od optimalnog dopiranja govorimo o poddopiranim kupratima. Za $T > T_c$, njih karakterizira jako raspršenje vodljivih elektrona na AFM fluktuacijama. U području $T^* > T > T_c$ pojavljuje se pseudoprocjep u gustoći stanja. Za $\delta > \delta_{op}$ govorimo o naddopiranim kupratima. Za $T > T_c$, normalno stanje vodljivih elektrona je slično svojstvima običnih Fermijevih tekućina.

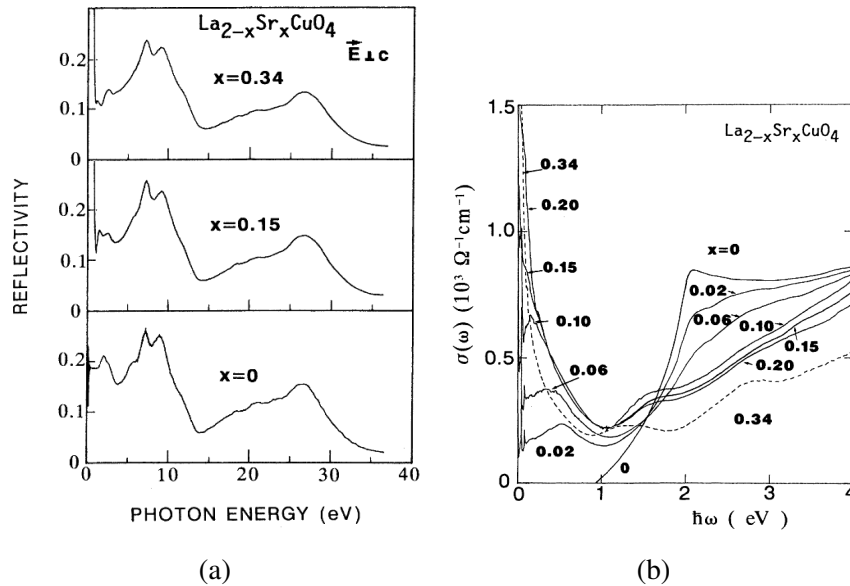
Parametar supravodljivog uređenja je $d_{x^2-y^2}$ simetrije. To je eksperimentalno dokazano pomoću raznih tehnika (npr. ARPES [1]). Zajedno s gotovo zanemarivim izotopnim efektom, $d_{x^2-y^2}$ simetrija parametra uređenja ukazuje na nekonvencionalno porijeklo supravodljivosti u kupratima.

U stehiometrijskim uzorcima sa zanemarenom hibridizacijom imamo Cu^{2+} ione u vodljivim ravninama što odgovara $3d^9$ konfiguraciji. To znači da ionu bakra nedostaje jedan elektron kako bi svih pet $3d$ orbitala bilo popunjeno. Stoga je $3d_{x^2-y^2}$ orbitala, čija je orbitalna energija najviša, u ovom slučaju polupopunjena. S druge strane, O^{2-} ioni imaju zatvorenu ionsku konfiguraciju. Pritom matrični elementi preskoka sa $3d_{x^2-y^2}$ orbitale na bakru na $2p_z$ i na jednu od $2p_\sigma$ orbitala na kisicima iščezavaju zbog simetrije. Unatoč polupopunjenoj vrpci, $\delta = 0$ sustavi nisu dobri vodiči. Naime, jake elektronske korelacije otvaraju AFM procjep u elektronskoj gustoći stanja, te se $\delta \approx 0$ uzorci ponašaju kao antiferomagnetski Mottovi izolatori [Slika 1.1(b)].

Područje između CuO_2 ravnina služi kao rezervoar naboja. Na primjer, svaka zamjena atoma La s atomom Sr u La_2CuO_4 na koncu vodi do dodavanja jedne šupljine u vodljivu ravninu (to slijedi iz činjenice da su ioni sa zatvorenom ionskom konfiguracijom u ta dva slučaja La^{3+} i Sr^{2+}). Stoga će u sustavu $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ broj nosioca naboja δ , mjereno relativno prema polupopunjenju, biti jednak broju x .

1.2 Elektrodinamička svojstva kuprata

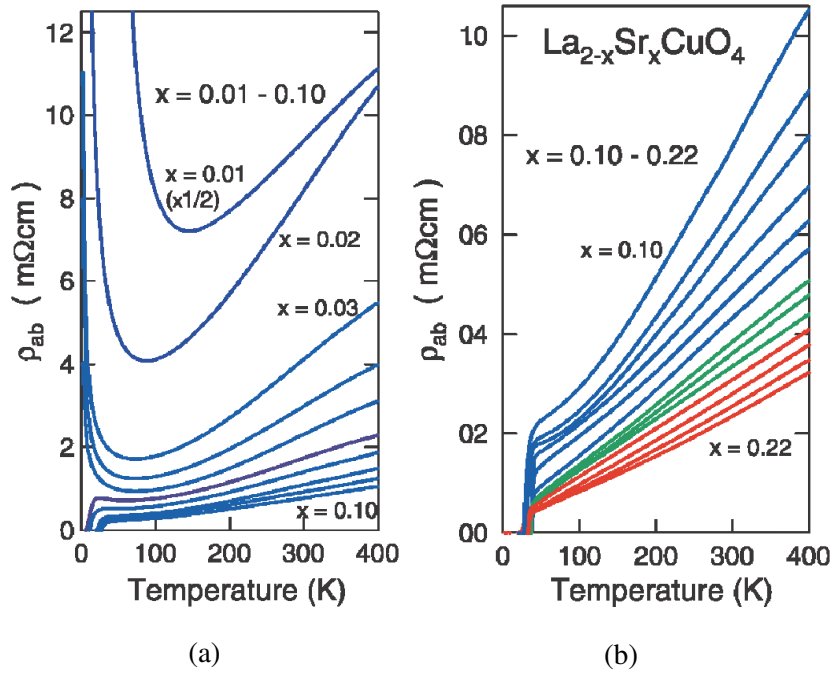
Fazni dijagram kuprata prikazuje kako se svojstva elektronskog podsustava mijenjaju s promjenom dopiranja i temperature. Najveći dio informacija na tom faznom dijagramu možemo prikupiti mjerenjem elektrodinamičkih i transportnih svojstava. Naravno, promjena elektronskih svojstava ne događa se na svim energetske skalama. Na Slici 1.2(a) prikazana su mjerenja koeficijenta refleksije na sobnoj temperaturi za tri različita nivoa dopiranja. Značajne promjene u spektru s promjenom dopiranja nalazimo samo u području $\hbar\omega \lesssim 4$ eV. To se još bolje vidi na Slici 1.2(b), gdje je prikazana dinamička vodljivost $\sigma(\omega)$ koja je dobivena iz izmjerenog koeficijenta refleksije pomoću Kramers-Kronigove analize. U nisko-energetskom režimu ($\hbar\omega < 1$ eV) uočavamo pojavu Drudeovog vrha s porastom dopiranja. Međutim, ovisnost vodljivosti o frekvenciji je sporija od obične ω^{-2} Drudeove ovisnosti. Također, jasno se vidi struktura na energijama reda 0.5 eV te međuvrpčani doprinosi na energijama većim od 1.5 eV.



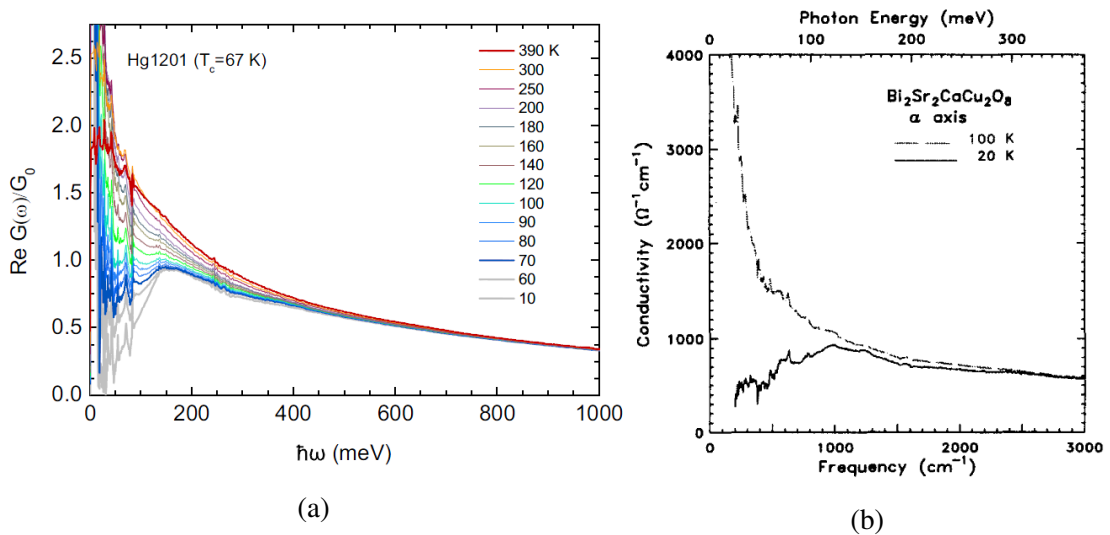
Slika 1.2: (a) Izmjereni koeficijent refleksije u $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ za tri različita dopiranja ($x = 0, 0.15, 0.34$) [2]. (b) Dinamička vodljivost $\sigma(\omega)$ u području energija do 4 eV (dobiveno Kramers-Kronigovom transformacijom izmjerenog koeficijenta refleksije [2]).

Slika 1.3 prikazuje ovisnost otpornosti o temperaturi u $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ uzorcima za različite vrijednosti dopiranja ($\delta = x$). Na Slici 1.3(a) razlikujemo izolatorsku i vodljivu fazu, dok Slika 1.3(b) prikazuje temperaturnu ovisnost za dopiranja kod kojih se pojavljuje supravodljivo uređenje. U poddopiranom režimu (plave linije) imamo kompliciranu temperaturnu ovisnost za koju je odgovorno parcijalno uništenje Fermijeve plohe koje je posljedica otvaranja AFM pseudoprocjepa u elektronskoj gustoći stanja. U optimalnom režimu (zelene linije) otpornost je linearna u temperaturi i ne dolazi do njene saturacije na visokim temperaturama. U naddopiranom režimu (crvene linije) otpornost ima ovisnost $\sim T^\alpha$ za $\alpha > 1$.

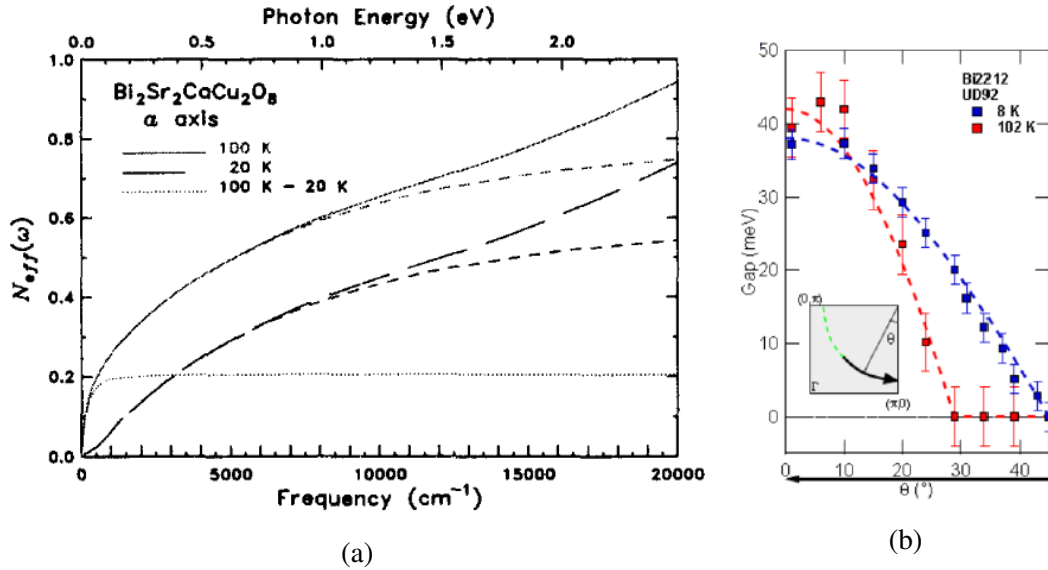
Slika 1.4 prikazuje dinamičku vodljivost $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ i $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ kuprata. Poddopirani slučaj prikazan je na Slici 1.4(a). U normalnom stanju ($T > T_c$) za najviše temperature ponašanje vodljivosti slično običnom Drudeovom modelu. Kako temperaturu smanjujemo do T_c (sive linije), uočavamo potiskivanje vodljivosti za energije ispod 140 meV. To potiskivanje odgovara pojavi AFM pseudoprocjepa te je popraćeno promjenom spektralne težine $\omega \approx 0$ doprinosa, koja raste s padom temperature. Ako se nosioci naboja relaksiraju isključivo na nečistoćama, širina Drudeovog vrha koja odgovara mjeri relaksacije ($1/\tau$) je konstantna. Međutim, kada su izvor relaksacijskih procesa interakcije među nosiocima naboja mjera relaksacije ovisna je o frekvenciji, $1/\tau(\omega, T)$. To je upravo slučaj u poddopiranim kupratima. Naizgled istu sliku dinamičke vodljivosti dobivamo za optimalni i naddopirani slučaj [Slika 1.4(b)]. Međutim, ovdje nije riječ o postupnom gubitku vodljivosti oko $\omega \approx 0$, već o nagloj promjeni za



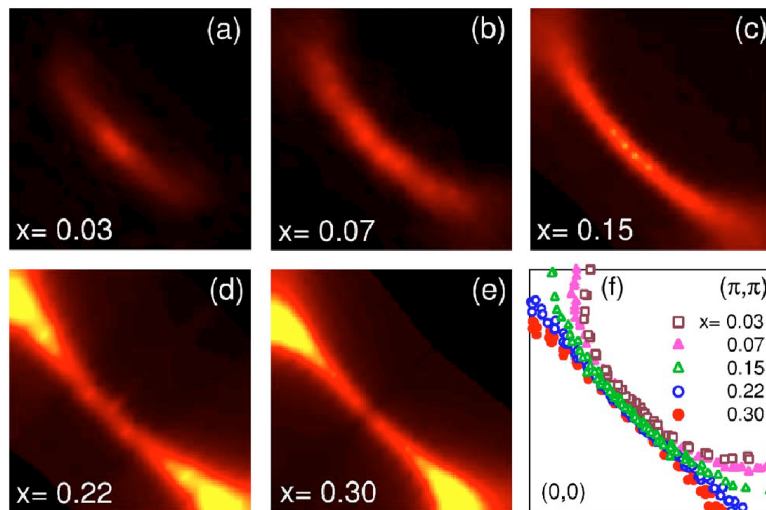
Slika 1.3: (a) Otpornost $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ uzoraka za $x = 0.01 - 0.10$ u 0.01 intervalima [3]. (b) Otpornost $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ uzoraka za dopiranja kod kojih se pojavljuje supravodljivo uređenje [3].



Slika 1.4: (a) Dinamička vodljivost $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ poddopiranih $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+x}$ kuprata u rasponu temperatura $10 < T < 390$ K. Sive linije označavaju mjerenja u supravodljivo uređenom stanju. 2D vodljivost definirana je sa $G(\omega) = d_c \sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$, gdje je d_c udaljenost između vodljivih ravnina. Kvant vodljivosti je $G_0 = 2e^2/h$ [4]. (b) Dinamička vodljivost $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ za optimalno dopirani uzorak $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ kuprata u normalnom i supravodljivom stanju [5].



Slika 1.5: (a) Transverzalno pravilo suma za dinamičku vodljivost sa Slike 1.4(b). Crtkane linije označavaju unutarvrpčane doprinose, a razlika između punih i crtanih linija međuvrpčane doprinose. Točkasta linija označava broj nosioca naboja koji sudjeluju u supravodljivom kondenzatu [5]. (b) ARPES mjerenja supravodljivog procjepa i AFM pseudoprocjepa za poddopirani $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ kuprat. Plava linija označava procjep u supravodljivom stanju. Procjep ima $d_{x^2-y^2}$ simetriju i iščezava za iznos Fermijevo kuta $\theta = 45^\circ$ koji odgovara točki (k_F, k_F) Fermijeve plohe. Crvena linija prikazuje ovisnost AFM pseudoprocjepa o kutu θ [6].



Slika 1.6: Evolucija Fermijeve plohe za različita dopiranja u $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ uzorcima. (a)-(e) Prikaz spektralne težine u \mathbf{k} prostoru na Fermijevoj energiji E_F . (f) Oblik Fermijevih ploha u istom slučaju kada je AFM pseudoprocjep zanemaren [7]. Za razliku od $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, za veliku većinu kuprata oblik Fermijeve plohe u naddopiranom slučaju ostaje zakrivljen [vidi Sliku 1.8(a)].

$T < T_c$.

U običnim BCS supravodičima svi nosioci naboja su kondenzirani na $T = 0$ K, ali za kuprate to nije slučaj. Naime, Slika 1.5(a) prikazuje efektivni broj nosioca naboja u normalnom i supravodljivom stanju za optimalno dopirani slučaj. Vidimo da pri $T = 20$ K samo $1/5$ dopiranih nosioca naboja sudjeluje u kondenzatu. Za poddopirani slučaj taj udio je još manji. Taj rezultat govori da postoje jake korelacije među nosiocima naboja u kupratima koje dovode do toga da je efektivan broj nosioca naboja $n_{\alpha\alpha}^{eff}$ mali u usporedbi s nominalnom koncentracijom n (to pitanje ćemo temeljito istražiti u Poglavlju 5).

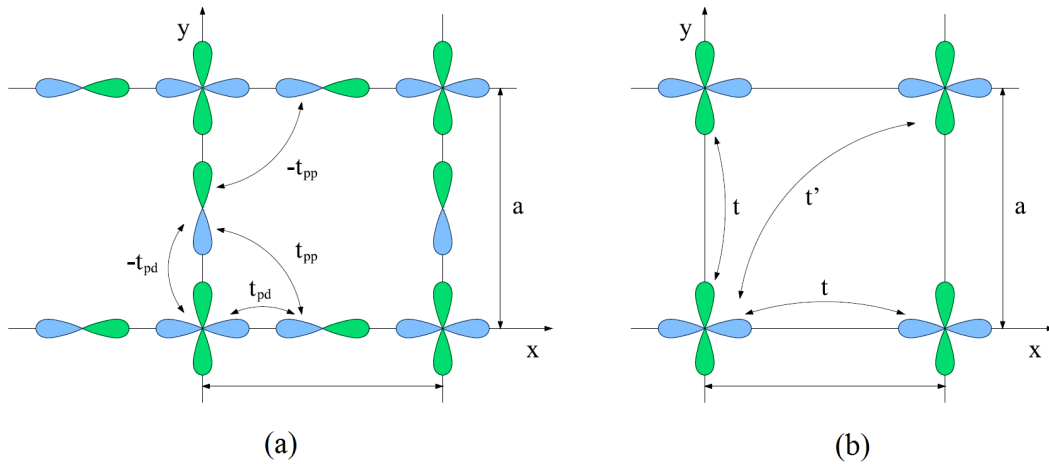
Kod razmatranja supravodljivog stanja u kupratima postavlja se pitanje prirode normalnog stanja iz kojeg ono nastaje. Možemo se pitati imamo li dobro definiranu Fermijevu plohu za dopiranja kod kojih se pojavljuje supravodljivo uređenje. Otvaranje pseudoprocjepa oko $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ [Slika 1.5(b)] rezultira ponašanjem vodljivih elektrona koje ne možemo opisati u modelu običnih Fermijevih tekućina. Na Slici 1.6 prikazane su eksperimentalne Fermijeve plohe za različita dopiranja $0.03 < x < 0.30$. U poddopiranom slučaju imamo pseudoprocjep centriran oko $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, pa Fermijeva ploha poprima oblik Fermijevog luka oko $\mathbf{k} \approx (\pi/2, \pi/2)$. Generalno, dužina Fermijevog luka se povećava s povećanjem temperature¹. Fermijev luk će se također širiti kada dopiramo sustav, sve dok u naddopiranom slučaju ne prijeđe u punu Fermijevu plohu.

1.3 Efektivan model s jednom vrpcom

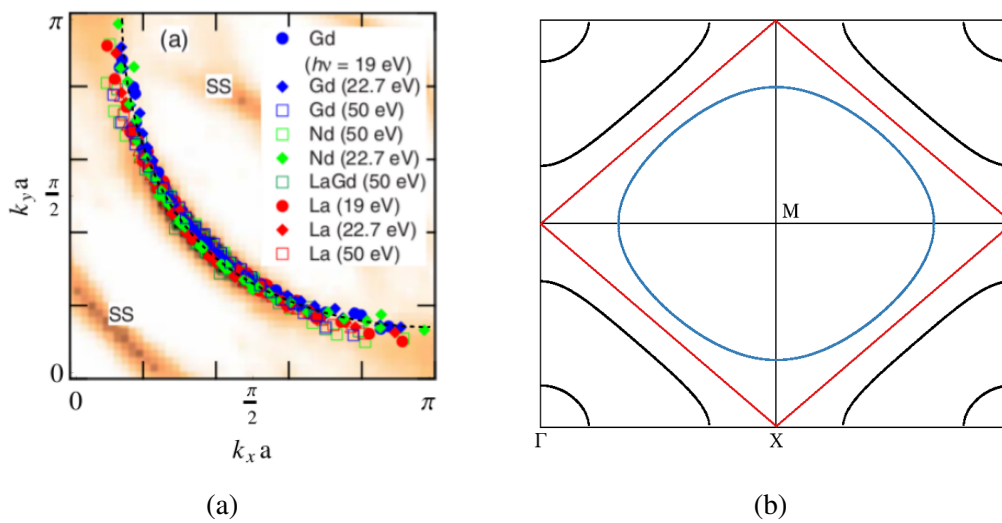
Kako u CuO_2 ravninama imamo tri orbitale po jediničnoj ćeliji koje su najbliže Fermijevoj energiji, sustav vodljivih elektrona će biti dobro opisan Emeryevim modelom tri vrpce [8,9]. To je arhetipski model kuprata u kojem elektroni mogu preskakati između susjednih $2p_\sigma$, te između susjednih $2p_\sigma$ i $3d_{x^2-y^2}$ orbitala [Slika 1.7(a)]. Matrični elementi preskoka su t_{pd} i t_{pp} . Model mora uključivati i jake interakcije na ionima bakra koji će dovesti do antiferomagnetskog uređenja polupopunjene vrpce.

Za mnoga razmatranja jednostavnije je koristiti efektivan model s jednom vrpcom koji odgovara Emeryevom modelu u granici uskih vrpca $t_{pp}, t_{pd} \ll \Delta_{pd}$, gdje je $\Delta_{pd} = E_p - E_d$ [10]. Model se sastoji od efektivnih $3d_{x^2-y^2}$ orbitala u kvadratnoj rešetci gdje su dozvoljeni prijelazi između prvih i drugih susjeda [parametri t i t' na Slici 1.7(b)]. Parametre t i t' možemo odrediti usporedbom s izmjerenim Fermijevim plohami. Kao što se vidi na Slici 1.8, u naddopiranim kupratima, koji su u centru interesa ovog rada, Fermijeva ploha je slična kružnici centriranoj oko točke $M = (\pi/a, \pi/a)$.

¹Na temperaturi T^* pseudoprocjep će potpuno iščeznuti. To je upravo definicija karakteristične temperature T^* .

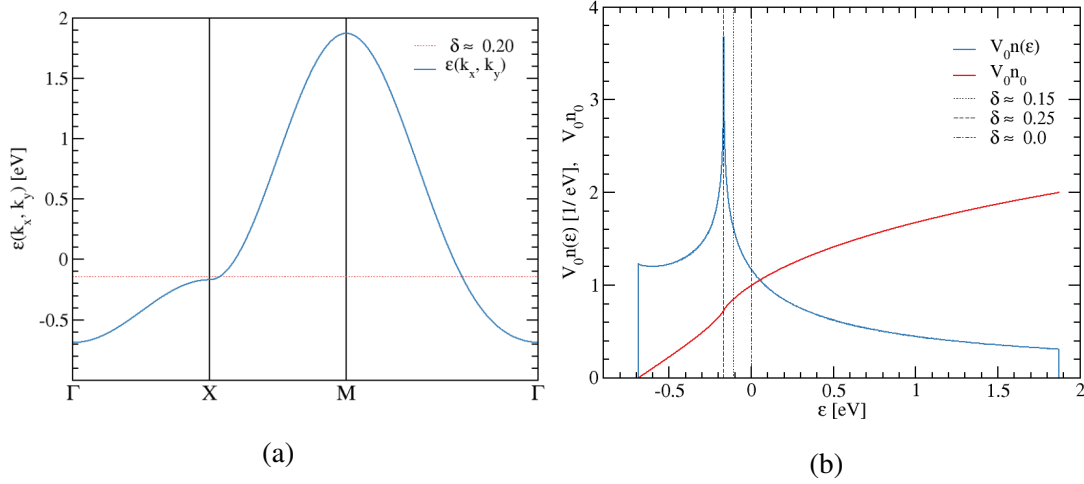


Slika 1.7: (a) Emeryjev model tri vrpce s prikazanim orbitalama i matričnim elementima preskoka. (b) Model jedne vrpce s efektivnim $3d_{x^2-y^2}$ orbitalama te matričnim elementima preskoka između prvih i drugih susjeda.



Slika 1.8: (a) Prilagodbe modela tri vrpce za uzorke $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+x}$ kuprata pri dopiranju $\delta = 0.24$ [11]. Za razliku od $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ slučaja, Fermijeva ploha ostaje zakrivljena. (b) Ekvienerske plohe za disperziju (1.3.1) u slučaju $t' = 0$. Ploha označena crvenom bojom je Fermijeva ploha za dopiranje $\delta = 0$ i definira AFM prvu Brillouinovu zonu. Plava ploha odgovara naddopiranom režimu.

Budući da imamo jednu orbitalu po jediničnoj ćeliji, Blochove energije dobivamo pomoću generalnog izraza $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + \sum_{\delta} J(\mathbf{r}_{\delta}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\delta}}$. Ovdje su $J(\mathbf{r}_{\delta})$ matrični elementi preskoka, a suma po indeksu δ obuhvaća prve i druge susjede. Direktnim uvr-



Slika 1.9: (a) Disperzija efektivnog jednovrpčanog modela dana izrazom (1.3.1). Crvena crtkana linija označava energiju koja odgovara naddopiranom režimu. (b) Gustoća stanja elektrona $V_0 n(\varepsilon)$ i koncentracija elektrona $V_0 n_0$ u vodljivoj vrpici za disperziju (1.3.1). V_0 označava volumen primitivne ćelije, a za parametar Γ iz (1.3.3) uzeta je vrijednost 0.002 eV. Koncentracija je izračunata preko $n_0 = \int_{-\infty}^{\varepsilon} n(\varepsilon) d\varepsilon$, te pritom $V_0 n_0 = 2$ odgovara punoj vrpici. Energija $\varepsilon = 0$ eV odgovara polupopunjenoj vrpici, $\varepsilon = -0.11$ eV optimalnom dopiranju i $\varepsilon = -0.169$ eV dopiranju $\delta \approx 0.25$.

štavanjem dobivamo [$\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = a(0, 1)$]

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + t \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \right] \\ + t' \left[e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} \right], \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + 2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a).$$

Ovdje je a konstanta rešetke, a $\varepsilon_0 = -\mu$ oznaka kemijskog potencijala pomoću kojeg kontroliramo dopiranje. Na Slici 1.9(a) prikazana je disperzija za parametre $t = -0.32$ eV, $t' = 0.095$ eV i $\varepsilon_0 = 0.212$ eV. Gustoću stanja definiramo sa

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})), \quad (1.3.2)$$

gdje delta funkciju aproksimiramo lorencijanom²

$$\begin{aligned} \delta(x - x_0) &= \frac{1}{\pi} \lim_{\Gamma \rightarrow 0^+} \frac{\Gamma}{(x - x_0)^2 + \Gamma^2} \\ &\approx \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(x - x_0)^2 + \Gamma^2}, \quad \Gamma \ll 1. \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

Na Slici 1.9(b) prikazana je gustoća stanja te pripadna koncentracija elektrona na $T = 0$ K kao funkcija energije. Parametri disperzije su izabrani tako da vrijednost $\varepsilon = 0$ eV

²Naravno, parametar Γ iz definicije lorencijana nema nikakve veze s mjerom relaksacije Γ iz kasnijih poglavlja.

odgovara polupopunjenoj vrpici, tj. slučaju $\delta = 0$. Infleksija u točki X u disperziji odgovara van Hoveovoj (vH) singularnosti na $\varepsilon = -0.169$ eV u gustoći stanja. To pak odgovara dopiranju $\delta = 0.25$, za koje Fermijeva energija prelazi vH singularitet. Na Slici 1.8 prikazane su Fermijeve plohe u naddopiranom režimu. One su otprilike kružnog oblika, gdje područje van kružnica odgovara elektronski popunjenim stanjima.

1.4 Pregled rada

Rad je podjeljen u dva dijela. U prvom dijelu razmatramo normalno stanje, te on obuhvaća Poglavlja 2, 3, 4 i 5. Cilj tog dijela je provođenje metode memorijske funkcije za tenzor vodljivosti u formalizmu jednadžbi gibanja i Matsubarinom formalizmu. U drugom dijelu razmatramo supravodljivo stanje, te on obuhvaća Poglavlja 6 i 7. U Poglavlju 6 uvodimo model s više vrpici, te izvodimo Mattis-Bardeenov rezultat za dinamičku vodljivost BCS supravodiča, dok u Poglavlju 7 razmatramo kako se izrazi za vodljivost iz prethodnog poglavlja modificiraju kod naddopiranih kuprata. Matsubarin formalizam koristi se u potpoglavlju 5.4, te dodacima C.1, C.2, D.2 i D.4. Budući da se sva pitanja koje analiziramo pomoću Matsubarinog formalizma raspravljaju i u formalizmu jednadžbi gibanja, ti dijelovi rada se mogu preskočiti u prvom čitanju.

Poglavlje 2

Drudeova formula za tenzor vodljivosti

Razumijevanje električnih fenomena u fizici čvrstog stanja sastoji se od razumijevanja kako određeni transportni koeficijenti koji nam daju informaciju o vodljivim elektronima sustava (istosmjerna vodljivost, Hallov koeficijent, magnetootpornost, itd.) ovise o mikroskopskim parametrima elektronskog podsustava, na primjer, o disperziji elektrona u vodljivoj vrpici, o različitim mehanizmima raspršenja vodljivih elektrona, te o različitim oblicima međudjelovanja elektrona. Obično, kako bismo istražili niskoenergetska pobuđenja sustava, prvo moramo primijeniti slabu perturbaciju, te potom mjeriti pripadni odgovor. Na primjer, za električne transportne koeficijente možemo primijeniti električno polje i mjeriti pripadnu elektronsku gustoću struje¹.

U ovom poglavlju ćemo dati pregled vodljivosti u metalima unutar Drudeovog i Boltzmannovog formalizma, te naglasiti nedostatke Drudeove formule. Nosioći naboja su elektroni/šupljine, tj. čestice. S druge strane, u teoriji Fermijevih tekućina imamo pobuđenja kvazičestica. Kasnije ćemo izvesti općenitiji oblik tenzora vodljivosti preko formalizma jednadžbi gibanja i Matsubarinog formalizma.

2.1 Drudeov model

Najjednostavniji mikroskopski model vodljivih elektrona koji daje dobar oblik električnih transportnih koeficijenata jednostavnih metala je onaj Drudeov. Drudeov model je specijalni slučaj modela želea u kojem se zanemaruju doprinosi dugodosežnih kulonskih interakcija, te centar fenomenologije postaju relaksacijski procesi vezani uz raspršenje vodljivih elektrona na nečistoćama, fononima i slično. Sam model svodi se na rješavanje jednadžbe gibanja vodljivih elektrona u dovoljno rijetkom elektronskom

¹Nasuprot električnim transportnim koeficijentima imamo one termalne, čija perturbacija odgovara gradijentu temperature, ∇T . U ovom radu se nećemo baviti termalnim transportom.

podstavu

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v} = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right), \quad (2.1.1)$$

gdje je $q = -e$ za elektrone. τ je vrijeme relaksacije koje predstavlja prosječno vrijeme između dva uzastopna procesa raspršenja vodljivog elektrona. Ono zajedno s koncentracijom elektrona n čini dva mikroskopska parametra modela. Za različite oblike \mathbf{E} i \mathbf{H} dobivamo različite odnose gustoće struje $\mathbf{J} = nq\mathbf{v}$ i polja. Uz pretpostavku $\mathbf{H} = 0$ i $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E} \exp\{-i\omega t\}$, iz izraza (2.1.1) dobivamo običnu Drudeovu formulu

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma^{dc}}{1 - i\omega\tau}, \quad (2.1.2)$$

gdje je $\sigma^{dc} = nq^2\tau/m$ istosmjerna vodljivost (Drudeov vrh).

2.2 Boltzmannove jednadžbe

Realističniji opis metala polazi od poluklasične slike vodljivih elektrona, a zapisan je preko Boltzmannovih jednadžbi. U toj slici transport elektrona dan je u terminima neravnotežnih funkcija raspodjele $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$, gdje su \mathbf{r} i $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ vektor položaja i kvaziimpuls čestice. Neravnotežna funkcija raspodjele mjeri vjerojatnost da se elektron u kvantnom stanju \mathbf{k} nalazi na položaju \mathbf{r} u trenutku t .

Općenito, postoje tri načina na koji neravnotežna funkcija raspodjele može evoluirati u vremenu. Prvi je kada elektroni ulaze i izlaze iz okoline \mathbf{r} , što po Liouvilleovom teoremu (očuvanje volumena u faznom prostoru) zapisujemo kao

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k})t, 0). \quad (2.2.1)$$

Dakle, promjena veličine $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ zbog difuzije je

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{difuzija}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}. \quad (2.2.2)$$

Druga je vremenska promjena kvaziimpulsa koja je određena vanjskim poljima (jednadžba gibanja nabijene čestice u prisustvu Lorentzove sile)

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right), \quad (2.2.3)$$

što odgovara \mathbf{p} -gradijentu funkcije raspodjele

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{polja}} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}. \quad (2.2.4)$$

Treći doprinos vremenskoj evoluciji funkcije raspodjele dolazi od relaksacijskih procesa, na primjer od raspršenja elektrona na nečistoćama ili fononima. Ako razmatramo

samo elastična raspršenja na nečistoćama, tj. slučaj kada ne postoje pobuđenja unutar-njih stupnjeva slobode, onda taj član standardno zapisujemo [12]

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sudari} = 2\pi n_{imp} \int d\mathbf{k}' \delta[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')] \times [f(\mathbf{k}')(1 - f(\mathbf{k})) - f(\mathbf{k})(1 - f(\mathbf{k}'))] W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (2.2.5)$$

gdje je $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ matrični element za raspršenje elektrona na nečistoćama iz stanja \mathbf{k} u stanje \mathbf{k}' , a n_{imp} koncentracija nečistoća. Razlike funkcija raspodjele u uglatoj zagradi su izrazi popunjenih stanja iz kojeg raspršenje započinje i slobodnih stanja u kojima raspršenje završava.

Rezultat svega je

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sudari}, \quad (2.2.6)$$

odnosno

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sudari}. \quad (2.2.7)$$

Izraz na lijevoj strani izraza (2.2.6) iščezava za istosmjernu vodljivost.

Osnovni problem kod rješavanja Boltzmannove jednadžbe (2.2.7) je određivanje člana raspršenja. Najjednostavnija aproksimacija koju možemo primijeniti je ona relaksacijskog vremena, koja pretpostavlja da je

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sudari} = -\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f_0(\mathbf{k})}{\tau_{tr}(\mathbf{k})}. \quad (2.2.8)$$

Ovdje je $f_0(\mathbf{k}) \equiv f_0[\varepsilon(\mathbf{k})] = [e^{\beta\xi(\mathbf{k})} + 1]^{-1}$ ravnotežna Fermi-Diracova funkcija raspodjele, $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$, a $\tau_{tr}(\mathbf{k})$ transportno relaksacijsko vrijeme. Sada, Boltzmannovu jednadžbu zapisujemo kao

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau_{tr}(\mathbf{k})}. \quad (2.2.9)$$

Rješenje gornje Boltzmannove jednadžbe nam daje neravnotežnu funkciju raspodjele. Ravnotežno stanje nastaje u odsustvu vanjskih polja za dovoljno veliki t (tada je $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f_0(\mathbf{k})$).

Da bismo riješili jednadžbu (2.2.9), longitudinalno monokromatsko električno polje zapisujemo kao

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t}, \quad (2.2.10)$$

gdje longitudinalna polarizacija znači $\mathbf{E} \parallel \mathbf{q}$ (\mathbf{q} treba razlikovati od naboja q). Budući da našu analizu radimo u okviru linearnog odziva, neravnotežna funkcija raspodjela ima oblik

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f_0(\mathbf{k}) + g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t}, \quad (2.2.11)$$

gdje je $f_0(\mathbf{k})$ ravnotežna raspodjela ($\mathbf{E} = \mathbf{H} = 0$), a $g(\mathbf{k}) \equiv g[\mathbf{v}(\mathbf{k})]$. Jednadžba (2.2.9) u ovakvim uvjetima prelazi u samosuglasnu Boltzmannovu jednadžbu za raspodjelu $g(\mathbf{k})$ (Dodatak A.1)

$$i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) + i\Gamma(\mathbf{k}))g(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha} qE_{\alpha}v_{\alpha}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} + \sum_{\alpha\beta} \frac{q}{cm_{\alpha\beta}(\mathbf{k})} (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H})_{\alpha} \frac{\partial g(\mathbf{k})}{\partial v_{\beta}(\mathbf{k})}, \quad (2.2.12)$$

gdje je veličina $v_{\alpha}(\mathbf{k}) = \partial \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial p_{\alpha}$ grupna brzina elektrona, $1/m_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \equiv \gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})/m = \partial^2 \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}$ tenzor recipročne efektivne mase, a $\Gamma(\mathbf{k}) = \tau_{tr}(\mathbf{k})^{-1}$ je mjera relaksacije. Ovaj oblik jednadžbi ne pretpostavlja istosmjernost struje, niti homogenost ili izotropnost sustava.

2.3 Drudeova formula

Gustoća struje $\mathbf{J}(\mathbf{q})$ je dana pomoću srednje vrijednosti $\langle \mathbf{j}(\mathbf{k}) \rangle$, gdje je $\mathbf{j}(\mathbf{k}) = e\mathbf{v}(\mathbf{k})$, a srednja vrijednost je definirana pomoću neravnotežne funkcije raspodjele $f(\mathbf{k})$

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} q\mathbf{v}(\mathbf{k})f(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} q\mathbf{v}(\mathbf{k})g(\mathbf{k}). \quad (2.3.1)$$

U najjednostavnijem slučaju, kada je $\Gamma(\mathbf{k}) \approx \Gamma = 1/\tau_{tr}$, dijagonalne elemente tenzora vodljivosti dobivamo uvrštavajući $\mathbf{H} = 0$, $\mathbf{E} = E_{\alpha}(\mathbf{k})\hat{e}_{\alpha}$, te puštajući $\mathbf{q} \rightarrow 0$ u izrazu (2.2.12)

$$i(\omega + i\Gamma)g(\mathbf{k}) = qE_{\alpha}v_{\alpha}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (2.3.2)$$

Množeći sa $(1/V)\sum_{\mathbf{k}\sigma} qv_{\alpha}(\mathbf{k})$, dobivamo

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} qv_{\alpha}(\mathbf{k})g(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{q^2 v_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \tau_{tr}}{1 - i\omega \tau_{tr}} \left(-\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \right) E_{\alpha}. \quad (2.3.3)$$

To je upravo izraz za α komponentu gustoće struje

$$J_{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{q^2 \tau_{tr} n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m} \frac{1}{1 - i\omega \tau_{tr}} E_{\alpha}, \quad (2.3.4)$$

a pripadni dijagonalni elementi tenzora vodljivosti su

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{q^2 \tau_{tr} n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m} \frac{1}{1 - i\omega \tau_{tr}}. \quad (2.3.5)$$

$n_{\alpha\alpha}^{eff}$ je efektivna koncentracija vodljivih elektrona, čiji je oblik

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} m v_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \left(-\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \right). \quad (2.3.6)$$

Parcijalnom integracijom gornji izraz postaje (Dodatak A.2)

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) f_0(\mathbf{k}). \quad (2.3.7)$$

Budući da za slobodni elektronski plin vrijedi $\gamma_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) = 1$, u tom slučaju veličina $n_{\alpha\alpha}^{eff}$ postaje jednaka koncentraciji n . Dakle, za slobodni elektronski plin rješenje Boltzmannovih jednadžbi je isto kao i rješenje Drudeove jednadžbe (2.1.1). Također, u Boltzmannovom formalizmu istosmjerna vodljivost ($\omega = 0$) dana je izrazom

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{dc} = \frac{q^2 \tau_{tr} n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m}, \quad (2.3.8)$$

koji je poopćenje Drudeovog izraza za σ^{dc} iz jednadžbe (2.1.2).

Promotrimo još izraz (2.3.6). Vidimo da je on uvijek pozitivan, jer je $\partial f_0(\mathbf{k})/\partial \varepsilon(\mathbf{k}) < 0$, $\forall \mathbf{k}$. Također, budući da je za metale ispunjeno $T \ll T_F$, vrijedi

$$\partial f_0(\mathbf{k})/\partial \varepsilon(\mathbf{k}) \sim \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F),$$

što znači da efektivna koncentracija vodljivih elektrona ima strukturu gustoće kinetičke energije na Fermijevom nivou, tj. možemo reći da je vodljivost svojstvo Fermijeve plohe.

2.3.1 Raspršenje elektrona na nečistoćama

Za $\mathbf{H} = 0$, neravnotežna funkcija raspodjele postaje

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + \mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \frac{q \tau_{tr}(\mathbf{k})}{m} \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (2.3.9)$$

Tada procjena Boltzmannovog izraza koji opisuje raspršenje elektrona na nečistoćama², (2.2.5), vodi na definiciju transportnog relaksacijskog vremena s kutnom ovisnošću [12]

$$\frac{1}{\tau_{tr}(\mathbf{k})} = 2\pi n_{imp} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')) |W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 (1 - \cos \theta'), \quad (2.3.10)$$

gdje je kutna ovisnost $1 - \cos \theta' = 1 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'/k^2$. Kako je gustoća struje proporcionalna transportnom relaksacijskom vremenu, kutni faktor nam govori da raspršenja elektrona za male kutove između stanja \mathbf{k} i \mathbf{k}' slabo utječu na otpornost ($1 - \cos \theta' \approx 0$), za razliku od raspršenja za velike kutove gdje faktor $1 - \cos \theta'$ postaje usporediv sa 2.

²U kasnijim poglavljima nećemo govoriti o nečistoćama, već o statičkom neredu.

2.4 Nedostaci Drudeove formule

Postoje dva nedostatka Drudeove formule. Prvi je da mjera relaksacije ne ovisi o frekvenciji, a u većini niskodimenzionalnih kvantnih sustava takva ovisnost postoji [13] [Slika 7.1(b)]. Drugi je da sama formula ne vrijedi u visokoenergetskom režimu, jer tu možemo imati i međuvrčane doprinose.

Ove nedostatke uspješno tretira metoda memorijske funkcije. Ona je prvi put uvedena kod razmatranja problema daleko od ravnoteže [14], a uspješno iskorištena za opis vodljivosti u [15]. Nedavno je korištena za opis transportnih svojstava raznih metalnih sustava u formalizmu AdS/CFT korespodencije³ [16, 17].

Memorijska funkcija omogućava izražavanje dinamičke vodljivosti i u visokoenergetskom režimu, te za nju možemo vršiti perturbativni razvoj. Definiira se pomoću korelacijske funkcije $\pi(z)$, $z \in \mathbb{C}$, ako je ispunjeno $\pi(z) \neq \pi_0, \forall z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ (u našem slučaju to je struja-struja korelacijska funkcija). Ovdje je π_0 statička granica od $\pi(z)$. Rezultat je [15]

$$M(z) = \frac{z\pi(z)}{\pi_0 - \pi(z)}. \quad (2.4.1)$$

U računu promatramo perturbativni razvoj korelacijske funkcije $\pi(z)$ po malom parametru $M(z)/z$, te na taj način dobivamo rezultat koji vrijedi u cijelom području frekvencija. Kao što je pojašnjeno u potpoglavlju 4.5, valjanost pretpostavki korištenih u računu memorijske funkcije provjeravamo usporedbom teorijskog predviđanja za $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ s mjerenjima dinamičke i istosmjerne vodljivosti.

³AdS/CFT korespodencija je teorija iz fizike visokih energija koja spaja anti-de Sitter prostore koji opisuju kvantnu gravitaciju u terminima teorije struna i konformalnu teoriju polja koja je kvantna teorija polja.

Poglavlje 3

Vežanje vodljivih elektrona i elektromagnetskog polja

U ovom poglavlju ćemo istražiti vežanje vodljivih elektrona s elektromagnetskim poljem u aproksimaciji čvrste veze. Zbog jednostavnosti promatrat ćemo disperziju (1.3.1) za kvadratnu rešetku s preskocima među prvim i drugim susjedima.

3.1 Baždarna invarijantnost električne komponente EM polja

Istražit ćemo promjene u sustavu uzrokovane vanjskim longitudinalnim i transverzalnim elektromagnetskim poljima. Njih definiramo kao [18, 19]

$$\nabla \times \mathbf{E}_L = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_T = 0. \quad (3.1.1)$$

Njihov zbroj jedinstveno određuje ukupno makroskopsko polje $\mathbf{E}(\mathbf{r})$. Baždarna transformacija

$$\begin{aligned} V &\rightarrow V' = V - \frac{1}{c} \frac{\partial \xi}{\partial t}, \\ \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \xi, \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

gdje je $\xi(\mathbf{r}, t)$ baždarna funkcija, utječe samo na longitudinalni dio vektorskog potencijala, tj. vrijedi

$$\begin{aligned} V &\rightarrow V' = V - \frac{1}{c} \frac{\partial \xi}{\partial t}, \\ \mathbf{A}_L &\rightarrow \mathbf{A}'_L = \mathbf{A}_L + \nabla \xi, \\ \mathbf{A}_T &\rightarrow \mathbf{A}'_T = \mathbf{A}_T. \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

Nakon Fourierove transformacije, veza električnog polja te skalarnog i vektorskog potencijala, $\mathbf{E} = -\partial V/\partial \mathbf{r} - (1/c) \partial \mathbf{A}/\partial t$, sveukupno daje

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_L(\mathbf{q}, \omega) &= -i\mathbf{q}V(\mathbf{q}, \omega) + \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}_L(\mathbf{q}, \omega), \\ \mathbf{E}_T &= \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}_T(\mathbf{q}, \omega).\end{aligned}\quad (3.1.4)$$

Iz ovoga zaključujemo da longitudinalno električno polje možemo predstaviti ili samo skalarnim potencijalom ili samo vektorskim potencijalom ili kombinacijom njih dvoje. Zbog baždarne invarijantnosti rezultat će uvijek biti isti. S druge strane, transverzalno polje moramo predstaviti vektorskim potencijalom. U sljedećem poglavlju ćemo vidjeti da u kristalima potencijali V i \mathbf{A} zapravo predstavljaju zasjenjene potencijale V^{tot} i \mathbf{A}^{tot} koji se razlikuju od vanjskih potencijala V^{ext} i \mathbf{A}^{ext} . Ovu distinkciju ćemo koristiti od potpoglavlja 3.3 nadalje.

Ova elementarna analiza navodi nas da vezanje vodljivih elektrona na vanjsko elektromagnetsko polje istražimo bilo kao vezanje operatora gustoće naboja na skalarni potencijal ili kao vezanje operatora gustoće struje na vektorski potencijal. Cilj ovog poglavlja je povezivanje konstanti vezanja elektrona i vanjskih polja s parametrima u transportnim koeficijentima iz Poglavlja 2. Osobitno nas zanima na koji način tenzor recipročne efektivne mase te grupna brzina elektrona ulaze u te konstante vezanja.

3.2 Tenzor recipročne efektivne mase

Kada disperzija elektrona nije parabolična, kao što nije u našem slučaju, trebamo generalizirati efektivnu masu elektrona u pripadni tenzor efektivne mase. Najjednostavnije se taj tenzor izvodi poluklasično, preko 2. Newtonovog zakona $\mathbf{a} = m^{-1}\mathbf{F}$, gdje je $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$ Lorentzova sila iz izraza (2.2.3). Za ubrzanje uzimamo promjenu grupne brzine

$$\mathbf{a} = \frac{d}{dt} \mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left[\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \right] = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \frac{d\varepsilon(\mathbf{k})}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \left[\frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \right]. \quad (3.2.1)$$

Rezultat je

$$\mathbf{a} = \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} \right) \hat{e}_\alpha F_\beta \equiv \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{m_{\alpha\beta}(\mathbf{k})} \hat{e}_\alpha F_\beta. \quad (3.2.2)$$

Dakle, u poluklasičnim transportnim jednadžbama tenzor recipročne efektivne mase definiramo kao

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}(\mathbf{k})} = \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial p_\alpha \partial p_\beta} \quad (3.2.3)$$

[vidi izraz (2.2.12)]. Analiza u potpoglavlju 3.4 predstavlja sustavnu definiciju tog tenzora.

3.3 Vezanje sa skalarnim potencijalom

U teoriji linarnog odziva, primjena vremenski ovisne vanjske perturbacije na sustav, odgovara dodavanju člana vezanja u ukupni hamiltonijan. Općenito će struktura tog člana biti $H^{ext} = \int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}, t) A(\mathbf{r})$, gdje je $f(\mathbf{r}, t)$ amplituda perturbacije, a $A(\mathbf{r})$ operator sustava na koji se perturbacija veže.

U prvom slučaju koji promatramo vanjska perturbacija je skalarni potencijal, a operator sustava je gustoća naboja. Stoga interakcijski član koji dodajemo nesmetanom hamiltonijanu zapisujemo kao

$$H^{ext} = \sum_{n\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_l(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l) eV^{ext}(\mathbf{r}, t) \psi_l(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l) c_{ln\sigma}^\dagger c_{ln\sigma}, \quad (3.3.1)$$

gdje su $\psi_l(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l)$ orbitale vrste l u primitivnoj ćeliji na položaju \mathbf{R}_n . U dugovalnoj granici¹ (gdje je $1/q\alpha$ puno veći od radijusa atoma), vanjski skalarni potencijal možemo pojednostaviti na način

$$\int d\mathbf{r} \psi_l(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l) V^{ext}(\mathbf{r}, t) \psi_l(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_l) \approx V^{ext}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_l, t). \quad (3.3.2)$$

Dakle, u slučaju opisanom s disperzijom (1.3.1) interakcijski hamiltonijan (3.3.1) pišemo na način

$$H^{ext} = \sum_{n\sigma} eV^{ext}(\mathbf{R}_n, t) c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma}. \quad (3.3.3)$$

Za zapis gornjeg izraza u inverznom prostoru potrebno je prijeći u reprezentaciju delokaliziranih orbitala

$$c_{n\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \quad (3.3.4)$$

$$V^{ext}(\mathbf{R}_n, t) = \sum_{\mathbf{q}} V^{ext}(\mathbf{q}, t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n}.$$

Dobivamo

$$H^{ext} = \sum_{n\sigma} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} eV^{ext}(\mathbf{q}, t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_n} c_{\mathbf{k}_1 \sigma}^\dagger e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_n} c_{\mathbf{k}_2 \sigma} \quad (3.3.5)$$

$$= \sum_{n\sigma} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} eV^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n} c_{\mathbf{k}_1 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma}.$$

U gornjem izrazu prepoznajemo $(1/N) \sum_n \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n\} = \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}}$. Stoga, uz zapis $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$ i $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, dobivamo

$$H^{ext} = \sum_{\mathbf{q}} eV^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.3.6)$$

Ovaj izraz opisuje vezanje vanjskog skalarnog potencijala na gustoću naboja vodljivih elektrona u sustavima s jednom vrpcom.

¹U ovom radu ćemo vrlo često gledati dugovalnu granicu, $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Aproximacije koje najčešće pod time podrazumijevamo su $f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \approx -\mathbf{q} \cdot (\partial \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial \mathbf{k}) (\partial f[\varepsilon(\mathbf{k})] / \partial \varepsilon(\mathbf{k}))$ i $\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \approx -\mathbf{q} \cdot (\partial \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial \mathbf{k})$.

3.4 Vezanje s vektorskim potencijalom

U ovom potpoglavlju istražiti ćemo odgovor vodljivih elektrona na vanjsku pobudu opisanu vremenski ovisnim vektorskim potencijalom. Na taj način možemo opisati odziv na longitudinalna i na transverzalna elektromagnetska polja.

3.4.1 Aproksimacija prvih susjeda

Zbog jednostavnosti prvo promatramo slučaj $t \neq 0$, $t' = 0$ u izrazu (1.3.1). Uvodimo pomoćne oznake za vektore položaja prvih susjeda

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{a}_2 = a\hat{y}, \quad \mathbf{r}_3 = -\mathbf{a}_1, \quad \mathbf{r}_4 = -\mathbf{a}_2. \quad (3.4.1)$$

U ovom slučaju neinteragirajući hamiltonijan ima oblik

$$\begin{aligned} H_0 &= -t \sum_{\langle n,m \rangle \sigma} c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} \\ &= -t \sum_{n\sigma} c_{n\sigma}^\dagger [c_{n+a_1\sigma} + c_{n+a_2\sigma} + c_{n-a_1\sigma} + c_{n-a_2\sigma}]. \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

Ovdje je $t > 0$, $\langle n,m \rangle$ označava sumaciju po prvim susjedima, n je indeks ćelije, a $n \pm a_i$ je oznaka za vektor položaja $\mathbf{R}_n \pm \mathbf{a}_i$. Ako gornji hamiltonijan zapišemo u reprezentaciji delokaliziranih orbitala, dobivamo

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} (-t) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left(\sum_{j=1}^4 e^{-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

Dakle, u promatranom slučaju disperzija elektrona je oblika

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -t \sum_{j=1}^4 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)], \quad (3.4.4)$$

što odgovara drugom članu disperzije (1.3.1).

U aproksimaciji čvrste veze vezanje vodljivih elektrona i vanjskog vektorskog potencijala opisano je općom formom minimalne supstitucije. U modelima s više vrpci, ona odgovara zamjeni

$$c_{ln\sigma}^\dagger \rightarrow \tilde{c}_{ln\sigma}^\dagger = c_{ln\sigma}^\dagger \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar c} (\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_l) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_l, t) \right\} \quad (3.4.5)$$

u neinteragirajućem hamiltonijanu. Ovom zamjenom dobivamo hamiltonijan

$$H_0 \rightarrow \tilde{H}_0 \approx H_0 + H_1^{ext} + H_2^{ext} + \dots, \quad (3.4.6)$$

gdje su H_1^{ext} i H_2^{ext} linearni i kvadratni član u hamiltonijanu vezanja. U Dodatku B.1 je detaljan izvod za oba člana. Linearni član dan je izrazom (B.1.9),

$$H_1^{ext} = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.4.7)$$

Ovdje je

$$J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{iqt}{\hbar} \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}_j} \quad (3.4.8)$$

strujna vršna funkcija² u operatoru gustoće struje. Kvadratni član dan je izrazom (B.1.14),

$$H_2^{ext} = \frac{q^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\alpha\beta} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q} - \mathbf{q}', t) A_{\beta}^{ext}(\mathbf{q}', t) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.4.9)$$

Ovdje je

$$\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{mt}{\hbar^2} \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} r_{j\beta} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}_j} \quad (3.4.10)$$

tenzor recipročne efektivne mase. On ima ulogu vršne funkcije u operatoru dijagramatske gustoće struje.

3.4.2 Preskok na druge susjede

Gornja analiza, koja je napravljena za slučaj $t \neq 0$ i $t' = 0$ u disperziji (1.3.1), može se provesti na isti način i za $t = 0$ i $t' \neq 0$. U tom slučaju imamo jedino preskoke po dijagonalama. Dovoljno je da zarotiramo kordinatni sustav za $\pi/4$, te reskaliramo $\mathbf{a}_1 \rightarrow \sqrt{2}\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2 \rightarrow \sqrt{2}\mathbf{a}_2$, uz $t \rightarrow t'$. Rezultat svega je

$$J'_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{iqt'}{\hbar} \sum_{j=1}^4 r'_{j\alpha} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}'_j}, \quad (3.4.11)$$

$$\gamma'_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{mt'}{\hbar^2} \sum_{j=1}^4 r'_{j\alpha} r'_{j\beta} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}'_j}. \quad (3.4.12)$$

U ova dva izraza vektori položaja prvih susjeda su

$$\mathbf{r}'_1 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{r}'_2 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{r}'_3 = -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{r}'_4 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_2. \quad (3.4.13)$$

Kada su oba matrična elementa preskoka konačna, rješenje je zbroj izraza (3.4.8), (3.4.10), (3.4.11) i (3.4.12).

²U dijagramatskom iskazu perturbativne teorije vršnim funkcijama opisujemo vezanje između elektrona/šupljine i bozona dalje od vodećeg reda.

3.5 Vršne funkcije

Razvoj do drugog reda u vektorskom potencijalu $A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}, t)$ možemo još kompaktnije zapisati kao

$$\begin{aligned} H_1^{ext} &= -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}, t) \hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q}) \\ H_2^{ext} &= \frac{q^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\alpha\beta} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}-\mathbf{q}', t) A_{\beta}^{ext}(\mathbf{q}', t) \hat{\gamma}_{\alpha\beta}(-\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (3.5.1)$$

Ovdje smo definirali operator gustoće struje

$$\hat{J}_{\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \quad (3.5.2)$$

i operator dijamagnetske gustoće

$$\hat{\gamma}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}. \quad (3.5.3)$$

S druge strane, hamiltonijan (3.3.6) možemo zapisati kao

$$H^{ext} = \sum_{\mathbf{q}} V^{ext}(\mathbf{q}, t) \hat{\rho}(-\mathbf{q}), \quad (3.5.4)$$

gdje je

$$\hat{\rho}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} eq(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \quad (3.5.5)$$

operator gustoće naboja.

Ova tri operatora su jedini operatori čiju strukturu treba odrediti da bismo razumijeli vezanje vodljivih elektrona na vanjska elektromagnetska polja. Formalno imaju istu strukturu, a razlikuju se samo po vršnim funkcijama $eq(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$, $J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ i $\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$. Njihovim termodinamičkim usrednjavanjem dobivamo inducirane makroskopske gustoće naboja, struje i dijamagnetske struje.

Veza između nabojne vršne funkcije $eq(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$ i strujne vršne funkcije $J_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$ je općeg oblika koji ne ovisi o definicijama neinteragirajućeg hamiltonijana (Dodatak B2, [20])

$$\frac{i\hbar J_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})}{\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})} = \frac{iq}{q_{\alpha}} q(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}). \quad (3.5.6)$$

Lako se vidi da ova relacija zapravo predstavlja alternativni način iskaza baždarne invarijantnosti promatranog računa smetnje.

3.6 Vršne funkcije u dugovalnoj granici

Za razumijevanje eksperimentalnih rezultata u jednovrpčanim sustavima najčešće je dovoljno promatrati vezanje $\mathbf{q} \approx 0$ fluktuacije naboja (struja) i vanjskih elektromagnetskih polja. U tu svrhu promotrimo gornje izraze za vršne funkcije u dugovalnoj

granici $\mathbf{q} \approx 0$.

Derivirajući disperziju $\varepsilon(\mathbf{k})$ po α komponenti valnog vektora dobivamo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} &= \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \left[-t \sum_{j=1}^4 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \right] = -t \sum_{j=1}^4 (-i) r_{j\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \\ &= it \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}. \end{aligned} \quad (3.6.1)$$

Usporedba s izrazom (3.4.8) u granici $\mathbf{q} \rightarrow 0$ daje

$$J_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx J_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{q}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} = ev_\alpha(\mathbf{k}). \quad (3.6.2)$$

Dakle, $\mathbf{q} \approx 0$ strujna vršna funkcija je direktno vezana s grupnom brzinom.

Derivirajući izraz (3.6.1) još jednom, dobivamo

$$\frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} = it \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} r_{j\beta} (-i) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} = t \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} r_{j\beta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}. \quad (3.6.3)$$

Usporedba s izrazom (3.4.10) u dugovalnoj granici daje

$$\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx \gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_\beta \partial k_\alpha}. \quad (3.6.4)$$

Na kraju, razmatrajući izraz (3.5.6), dobivamo i nabojnu vršnu funkciju u istoj aproksimaciji

$$\begin{aligned} q(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) &\approx q(\mathbf{k}) = qv_\alpha(\mathbf{k}) \frac{i\hbar}{iq} \lim_{q_\alpha \rightarrow 0} \frac{q_\alpha}{\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})} \\ &= qv_\alpha(\mathbf{k}) \frac{i\hbar}{iq} \frac{\partial k_\alpha}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \\ &= \frac{\hbar v_\alpha(\mathbf{k})}{\hbar v_\alpha(\mathbf{k})} \\ &= 1. \end{aligned} \quad (3.6.5)$$

Izrazi (3.6.2) i (3.6.4) nam govore da su u dugovalnoj granici konstante vezanja između vodljivih elektrona i vanjskih elektromagnetskih polja [vršne funkcije $J_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ i $\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$] opisane pomoću derivacija disperzijske relacije elektrona. Iste te veličine smo u Poglavlju 2 prepoznali kao važne elemente u definiciji efektivnog broja nositelja naboja $n_{\alpha\alpha}^{eff}$, a ovdje ih prepoznamo kao bitne dijagramatske sastavnice odgovarajućih operatora gustoća.

Poglavlje 4

Formalizam jednadžbi gibanja

Kao što smo napomenuli u prošlom poglavlju, za objašnjenje većine eksperimentalnih podataka u tipičnim jednovrpanim sustavima, obično je dovoljno opisati vezanje između $\mathbf{q} \approx 0$ nabojnih fluktuacija i vanjskog elektromagnetskog polja, te takav hamiltonijan povezati s običnim transportnim jednadžbama [20, 21]. U jako koreliranim sustavima takav pristup nije zadovoljavajući, jer eksperimenti pokazuju da odgovarajuće relaksacijske funkcije jako ovise o frekvenciji (kao i o valnom vektoru). U ovom poglavlju ćemo uvesti takvu frekventno ovisnu funkciju gušenja fenomenološki, a u sljedećem poglavlju ćemo ju izvesti u najjednostavnijem slučaju. Tu funkciju obično zovemo memorijska funkcija. Ona predstavlja vlastitu energiju elektron-šupljina para. No, prije nego li ugradimo tu funkciju u izraz za tenzor dinamičke vodljivosti, uvjerit ćemo se da je izraz za vodljivost koji koristimo korektan i da je u suglasju s temeljnim relacijama iz makroskopske elektrokinemike. U tu svrhu ćemo reizvesti izraz za RPA¹ dielektričnu funkciju, riješiti jednadžbu gibanja za $\chi(\mathbf{q}, t)$ u istoj aproksimaciji (Dodatak A.3), te riješiti jednadžbe gibanja za opservablu $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle$ po $\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$ (potpoglavlje 4.3) i po $J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$ (potpoglavlje 4.4). Rezultat je izraz za idealnu vodljivost u Drudeovom režimu koji će nam poslužiti kao osnova za fenomenološku zamjenu $i\eta \rightarrow i\Gamma$.

4.1 Dielektrična funkcija u aproksimaciji nasumičnih faza

Kulonska interakcija između dva proizvoljno odabrana elektrona je odbojna, pa se oko svakog elektrona formira područje u kojem je mala vjerojatnost nalaženja drugog elektrona. Pod pretpostavkom da je cijeli sustav (elektroni i ionski ostaci) u prosjeku neutralan, to područje odgovara distribuciji pozitivnog naboja koji kompenzira negativni elektronski naboj. Stoga elektroni u vodičima interagiraju efektivnom interakcijom

¹engl. *random phase approximation*.

koja je kratkog doseg. Promotrimo sada to pitanje detaljnije koristeći aproksimaciju nasumičnih faza (RPA).

U jednostavnom slučaju razmatramo translacijsko invarijantni elektronski plin opisan hamiltonijanom koji se sastoji od kinetičkog člana, izraz (3.4.3), i interakcijskog člana

$$H = H_0 + H_{int} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} \sum_{\sigma\sigma'} e^2 v_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (4.1.1)$$

Ovdje je $v_{\mathbf{q}} = 4\pi/\mathbf{q}^2$ Fourierov transformat kulonskog potencijala jediničnog naboja. Komponentu $\mathbf{q} = 0$ isključujemo, jer ona kompenzira pozitivno nabijenu pozadinu u modelu želea [22].

Strukturu dielektrične funkcije možemo odrediti iz definicije zasjenjenog potencijala. Inducirana gustoća naboja i vanjski skalarni potencijal vezani su relacijom

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \chi(\mathbf{q}, \omega) V^{ext}(\mathbf{q}, \omega). \quad (4.1.2)$$

Ovdje je $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ zasjenjena susceptibilnost. Inducirana gustoća naboja $\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$ izvor je skalarnog potencijala $V^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$, koji povratno utječe na nosioce naboja. Zbroj vanjskog potencijala i inducirano potencijala zapisujemo kao

$$V^{tot}(\mathbf{q}, \omega) = V^{ext}(\mathbf{q}, \omega) + V^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = V^{ext}(\mathbf{q}, \omega) + v_{\mathbf{q}} \rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega). \quad (4.1.3)$$

Aproksimacija nasumičnih faza govori da cijeli sustav možemo efektivno promatrati kao neinteragirajući elektronski plin u prisustvu ukupnog potencijala $V^{tot}(\mathbf{q}, \omega)$. Dakle, definicijsku relaciju (4.1.2) možemo alternativno pisati na način

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \chi_0(\mathbf{q}, \omega) V^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \quad (4.1.4)$$

Ovdje je $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ neinteragirajuća susceptibilnost koja se također naziva RPA-ireducibilna dielektrična susceptibilnost. U gornjem izrazu se jasno vidi samosuglasnost ovog pristupa. Naime, inducirana gustoća $\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$ je odgovor na inducirani potencijal $V^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$ koji sam ovisi o induciranoj gustoći. Kombinirajući gornja dva izraza inducirano gustoću možemo izraziti preko vanjskog skalarnog potencijala

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \chi^{RPA}(\mathbf{q}, \omega) eV^{ext}(\mathbf{q}, \omega), \quad (4.1.5)$$

gdje je susceptibilnost $\chi^{RPA}(\mathbf{q}, \omega)$ dana sa

$$\chi^{RPA}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - v_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (4.1.6)$$

Stoga je efektivna, zasjenjena kulonska interakcija među elektronima dana sa

$$V^{tot}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V^{ext}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - v_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (4.1.7)$$

Strukturu funkcije $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ u najnižem redu računa smetnje smo odredili u Dodatku A.3 koristeći formalizam jednadžbi gibanja za $\chi_0(\mathbf{q}, t)$.

Referirajući se na Poglavlje 3, povezat ćemo neinteragirajuću susceptibilnost $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ s vodljivošću $\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ za $\mathbf{q} = q_\alpha \hat{e}_\alpha$. Za to nam je potrebna relacija (4.1.4), Ohmov zakon za inducirane gustoće struje, $J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) E_\beta(\mathbf{q}, \omega)$, te izraz za longitudinalno električno polje (3.1.4) u baždarenju $E_\alpha(\mathbf{q}, \omega) = -iq_\alpha V^{tot}(\mathbf{q}, \omega)$. Uvrštavajući te izraze u jednadžbu kontinuiteta $\omega \rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega) - \mathbf{q} \cdot \mathbf{J}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = 0$ kao rezultat dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = i \frac{\omega}{q_\alpha^2} \chi_0(\mathbf{q}, \omega). \quad (4.1.8)$$

Ovdje treba podsjetiti da $\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ za $\mathbf{q} = q_\alpha \hat{e}_\alpha$ označava isključivo longitudinalnu vodljivost, budući da vezanje na skalarni potencijal ne može opisati utjecaje transversalnih polja.

Na kraju prepoznamo nazivnik u (4.1.7) kao longitudinalnu dielektričnu funkciju

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \chi_0(\mathbf{q}, \omega) \equiv 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega), \quad (4.1.9)$$

uz $\mathbf{q} = q_\alpha \hat{e}_\alpha$.

4.2 Kubo formula za tenzor vodljivosti

U mikroskopskoj baždarno-invarijantnoj analizi tenzora vodljivosti $\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ obično polazimo od općenite nezasjenjene korelacijske funkcije između elemenata četvero-komponentnog vektora struje ($\mu, \nu = 0, x, y, z$) [13]

$$\begin{aligned} V \pi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, t) &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}, t), \hat{J}_\nu(-\mathbf{q}, 0)] \rangle_{ired} \\ &\equiv \langle \langle \hat{J}_\mu(\mathbf{q}); \hat{J}_\nu(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_t^{ired} \\ &\equiv \theta(t) \Psi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, t). \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

Ovdje indeks *ired* označava nezasjenjene, tj. RPA-ireducibilne korelacijske funkcije. Nadalje, za operatore zapisane u Heisenbergovoj slici vrijedi $\hat{J}_\mu(\mathbf{q}, t) = e^{iHt/\hbar} \hat{J}_\mu(\mathbf{q}) e^{-iHt/\hbar}$ i $\hat{J}_\mu(\mathbf{q}, 0) = \hat{J}_\mu(\mathbf{q})$. Analiza zasjenjenog tenzora vodljivosti $\tilde{\sigma}_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ ide istim slijedom, ali uz korištenje zasjenjenih korelacijskih funkcija $\tilde{\pi}_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega)$.

Sukladno gornjem zapisu, operatore gustoće (3.5.2) i (3.5.5) sada zapisujemo kao

$$\hat{J}_\mu(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\mu(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \quad (4.2.2)$$

s općenitom vršnom funkcijom

$$J_\mu(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) = \begin{cases} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+), & \mu = \alpha = x, y, z \\ eq(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+), & \mu = 0 \end{cases}. \quad (4.2.3)$$

Ovdje $\mu = \alpha = x, y, z$ ponovo označava tri strujne vršne funkcije, a $\mu = 0$ nabojnu, te $\mathbf{k}_+ = \mathbf{k} + \mathbf{q}$.

Ako dvaput parcijalno integriramo Fourier-Laplaceov transformat funkcije odgovora $\Psi_{\mu\mu}(\mathbf{q}, t)$,

$$V\pi_{\mu\mu}(\mathbf{q}, \omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t - \eta t} \Psi_{\mu\mu}(\mathbf{q}, t), \quad (4.2.4)$$

dobivamo

$$V\pi_{\mu\mu}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{(\hbar\omega)^2} [\Phi_{\mu\mu}(\omega) - \Phi_{\mu\mu}(0)]. \quad (4.2.5)$$

Ovdje je

$$\Phi_{\mu\mu}(\omega) = \langle\langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), H]; [\hat{J}_\mu(-\mathbf{q}), H] \rangle\rangle_\omega^{ired}. \quad (4.2.6)$$

Izrazi (4.2.5) i (4.2.6) su Kubo formule za nezasjenjenu četverostrujnu korelacijsku funkciju $\pi_{\mu\mu}(\mathbf{q}, \omega)$. Njihov detaljni izvod dan je u Dodatku A.4.

Slučaj $\mu = 0$ očigledno predstavlja Kubov izraz za naboj-naboj korelacijsku funkciju $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ zapisanu pomoću veličine Φ_{00} , čije ćemo fizikalno značenje sada utvrditi. U ovom slučaju prvo računamo komutator iz izraza (4.2.6)

$$\begin{aligned} [\hat{J}_0(\mathbf{q}), H] &\approx [\hat{J}_0(\mathbf{q}), H_0] = \left[\sum_{\mathbf{k}\sigma} eq(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \varepsilon(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} eq(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \left(\varepsilon(\mathbf{k}') \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} - \varepsilon(\mathbf{k}') \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} eq(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) (\varepsilon(\mathbf{k}_+) - \varepsilon(\mathbf{k})) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \\ &= \sum_{\alpha} \hbar q_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} = \sum_{\alpha} \hbar q_{\alpha} \hat{J}_{\alpha}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Ovdje smo u zadnjem redu iskoristili relaciju (3.5.6) između nabojne i strujnih vršnih funkcija. Primijetimo da komutator operatora gustoće naboja i neinteragirajućeg hamiltonijana definira operator gustoće struje. To nije ništa drugo nego operatorski oblik jednadžbe kontinuiteta.

Dakle, veličina $\Phi_{00}(\mathbf{q}, \omega)$ je direktno vezana s nezasjenjenom strujna-strujna korelacijskom funkcijom

$$\begin{aligned} \Phi_{00}(\mathbf{q}, \omega) &= \langle\langle \sum_{\alpha} \hbar q_{\alpha} \hat{J}_{\alpha}(\mathbf{q}); -\sum_{\beta} \hbar q_{\beta} \hat{J}_{\beta}(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega} \\ &= -\sum_{\alpha\beta} \hbar^2 q_{\alpha} q_{\beta} \langle\langle \hat{J}_{\alpha}(\mathbf{q}); \hat{J}_{\beta}(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega} \\ &= -\hbar^2 V \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha} \pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) q_{\beta}. \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

Uvrštavajući taj izraz u Kubo formulu (4.2.5) dobivamo nezasjenjenu naboj-naboj korelacijsku funkciju (odnosno dielektričnu susceptibilnost)

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) \equiv \pi_{00}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega^2} \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha} [\pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) - \pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q})] q_{\beta}. \quad (4.2.9)$$

U općenitom slučaju, $\mathbf{q} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \hat{e}_{\alpha}$, veza između neinteragirajuće susceptibilnosti i elemenata tenzora vodljivosti je općenitija od izraza (4.1.8). Njezin oblik je

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{i\omega} \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) q_{\beta}. \quad (4.2.10)$$

Uspoređujući ovaj izraz s izrazom (4.2.9) dobivamo konačni rezultat, Kubo formulu za vodljivost

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i}{\omega} [\pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) - \pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q})]. \quad (4.2.11)$$

Ovu općenitu vezu tenzora vodljivosti i struja-struja korelacijske funkcije iskoristit ćemo na kraju ovog poglavlja, te u Poglavljima 5 i 6. Dielektričnu funkciju $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ dobivamo uvrštavanjem izraza (4.2.9) u (4.1.9).

Za slučaj $\mu = \alpha$, Kubo formule (4.2.5) i (4.2.6) daju osnovne izraze iz mikroskopske teorije memorijske funkcije koju ćemo koristiti u sljedećem poglavlju [13].

4.3 Jednadžba kontinuiteta i transportna jednadžba

Jednadžba gibanja za operator $(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})_t$ jest

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})_t = [c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, H]. \quad (4.3.1)$$

Pomoću nje izveli smo jednadžbu gibanja za odzivnu funkciju $\chi(\mathbf{q}, t)$ (Dodatak A.3). Alternativno možemo promatrati jednadžbe gibanja za srednju vrijednost $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_t$. Jednadžba je oblika

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_t = \langle [c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, H] \rangle_t. \quad (4.3.2)$$

Ona predstavlja polaznu jednadžbu u razmatranjima Fermijevih tekućina. Rezultati prezentirani u ovom i sljedećem potpoglavlju se mogu povezati sa standardnim udžbeničkim rezultatima kao i s Boltzmannovim jednadžbama iz Poglavlja 2. Veza su sljedeći zapisi za neravnotežnu funkciju raspodjele

$$\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_t e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \equiv \delta n(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \equiv f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t), \quad (4.3.3)$$

te definicijske relacije za inducirane gustoće naboja $\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$ i inducirane gustoće struje $J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e \delta n(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e \delta n_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega), \quad (4.3.4)$$

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e v_{\alpha}(\mathbf{k}) \delta n(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e v_{\alpha}(\mathbf{k}) \delta n_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega). \quad (4.3.5)$$

U ovim definicijskim relacijama smo zapisali neravnotežnu funkciju raspodjele kao zbroj dva doprinosa: $i = 0$ doprinos je parna funkcija varijable grupne brzine $v_\alpha(\mathbf{k})$, a $i = 1$ neparna funkcija grupne brzine,

$$\delta n(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \sum_{i=0}^1 \delta n_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t). \quad (4.3.6)$$

U slučaju koji nas ovdje zanima hamiltonijan je oblika

$$H = H_0 + H_{int} + H^{ext}. \quad (4.3.7)$$

Ovdje H_{int} opisuje dugodosežne elektron-elektron interakcije, međutim kao i u potpoglavlju 4.1 zadržat ćemo samo RPA doprinose. U H^{ext} , bez smanjenja općenitosti, promatramo samo jednu komponentnu valnog vektora \mathbf{q} , te uzimamo dugovalni limes nabojne vršne funkcije, $q(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \approx 1$. Iz relacija (3.5.4) i (3.5.5) sada slijedi

$$H^{ext} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} eV^{ext}(\mathbf{q}, t) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (4.3.8)$$

Rješavanje jednadžbi gibanja (4.3.1) i (4.3.2) svodi se na računanje komutatora. Komutatore koji uključuju neinteragirajući hamiltonijan H_0 i interakcijski dio H_{int} izračunali smo u Dodatku A.3. To su izrazi (A.3.5) i (A.3.8). Komutator koji uključuje vezanje vodljivih elektrona s vanjskim skalarnim potencijalom daje

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, H^{ext}] &= \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} eV^{ext}(\mathbf{q}, t) [c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} eV^{ext}(\mathbf{q}, t) [\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} - \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}] \\ &= eV^{ext}(\mathbf{q}, t) (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}). \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

Jednadžba gibanja (4.3.2) sada se reducira na

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \right] \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_t = \left[\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle \right] eV^{tot}(\mathbf{q}, t), \quad (4.3.10)$$

gdje je $V^{tot}(\mathbf{q}, t) = V^{ext}(\mathbf{q}, t) + v_{\mathbf{q}}(1/V) \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} e \langle c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} \rangle_t$ alternativni zapis izraza (4.1.3). U dugovalnoj aproksimaciji (bilješka na str. 18) koristeći (4.3.3) dobivamo

$$[\omega + i\eta - q_\alpha v_\alpha(\mathbf{k})] \delta n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = -e \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} q_\alpha v_\alpha(\mathbf{k}) V^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \quad (4.3.11)$$

Uvrštavajući (4.3.6) u (4.3.11) dobivamo niz doprinosa koje ćemo razvrstati po parnosti

$$\begin{aligned} \{(\omega + i\eta) \delta n_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) - q_\alpha v_\alpha(\mathbf{k}) \delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)\} &= \left\{ (\omega + i\eta) \delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) - q_\alpha v_\alpha(\mathbf{k}) \right. \\ &\quad \left. \times \delta n_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) + e \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} q_\alpha v_\alpha(\mathbf{k}) V^{tot}(\mathbf{q}, \omega) \right\}. \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

Primijetimo da obje strane moraju iščezavati za bilo koji $\delta n_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$ i bilo koji $\delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$.

Izraz na lijevoj strani predstavlja podintegralne funkcije u "jednadžbi kontinuiteta"

$$(\omega + i\eta)\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega) - q_\alpha J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = 0. \quad (4.3.13)$$

Ako desnu stranu pomnožimo sa $v_\alpha(\mathbf{k})$, te sumiramo po \mathbf{k} i σ , dobivamo transportnu jednadžbu za $\mathbf{H} = 0$, (2.2.12), u režimu idealne vodljivosti

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left\{ (\omega + i\eta)v_\alpha(\mathbf{k})\delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) - q_\alpha v_\alpha^2(\mathbf{k})\delta n_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) + e \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} q_\alpha v_\alpha^2(\mathbf{k}) V^{tot}(\mathbf{q}, \omega) \right\} = 0. \quad (4.3.14)$$

Sada eliminiramo $\delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$ iz

$$(\omega + i\eta)\delta n_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) - q_\alpha v_\alpha(\mathbf{k})\delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = 0 \quad (4.3.15)$$

i iz (4.3.14), te iskoristimo izraze za induciranu gustoću naboja (4.1.4) i (4.3.4). Dobivamo izraz za $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ koji je točan. Međutim, zamjena $i\eta \rightarrow i\Gamma$ u tom izrazu daje krivi rezultat. Razlog tome je što zamjena $i\eta \rightarrow i\Gamma$ u izrazu (4.3.15),

$$(\omega + i\Gamma)\delta n_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) - q_\alpha v_\alpha(\mathbf{k})\delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = 0, \quad (4.3.16)$$

vodi do očiglednog narušenja jednadžbe kontinuiteta

$$\omega\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega) - q_\alpha J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = 0. \quad (4.3.17)$$

Dakle, fenomenološko uključivanje relaksacijskih procesa je konzistentno s jednadžbom kontinuiteta jedino ako član $i\eta\delta n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$ u jednadžbi (4.3.11) zamijenimo sa $i\eta\delta n_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$. Dakle, jednadžba gibanja (4.3.2) se raspada na dvije jednadžbe: jednadžbu kontinuiteta [(4.3.15) s ispuštenim $i\eta$ članom] i transportnu jednadžbu [(4.3.14) sa $i\eta$ zamjenjenim sa $i\Gamma$]. Točan rezultat je

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = e^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{q_\alpha^2 v_\alpha^2(\mathbf{k})}{\omega} \frac{(-\partial f(\mathbf{k})/\partial \varepsilon(\mathbf{k}))}{\omega + i\Gamma - q_\alpha^2 v_\alpha^2(\mathbf{k})/\omega}, \quad (4.3.18)$$

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = ie^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{v_\alpha^2(\mathbf{k})(-\partial f(\mathbf{k})/\partial \varepsilon(\mathbf{k}))}{\omega + i\Gamma - q_\alpha^2 v_\alpha^2(\mathbf{k})/\omega}. \quad (4.3.19)$$

U Drudeovom režimu, $q_\alpha v_F \ll \omega$, dobivamo isti rezultat kao i u potpoglavlju 2.3,

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{ie^2}{m} \frac{n_{\alpha\alpha}^{eff}}{\omega + i\Gamma}. \quad (4.3.20)$$

4.4 Alternativni izvod tenzora vodljivosti

Korisno je uvjeriti se da isti izraz za tenzor vodljivosti u Drudeovom režimu možemo dobiti jednostavnije tako da u jednadžbi (4.3.11) potencijal $V^{tot}(\mathbf{q}, \omega)$ izrazimo preko

$E_\alpha(\mathbf{q}, \omega)$ te potom iskoristimo definiciju inducirane struje (4.3.5). Dobiveni rezultat ne daje dobar izraz za $\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ u Thomas-Fermijevoj granici, no za naša razmatranja to nije bitno, jer nas u ostatku ovog rada zanima samo Drudeov režim. Naravno, istu proceduru možemo primijeniti na par jednadžbi (4.3.14) i (4.3.17). U tom slučaju dobivam isti (točan) rezultat kao i u prošlom potpoglavlju.

Kao što smo gore spomenuli, induciranu struju možemo zapisati pomoću neravnotežne funkcije raspodjele $\delta n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) \equiv \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_\omega$ i grupne brzine $v_\alpha(\mathbf{k})$ na način

$$\begin{aligned} J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) &= \sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) E_\alpha(\mathbf{q}, \omega) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_\omega \\ &\approx \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e v_\alpha(\mathbf{k}) \delta n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

Strujna vršna funkcija je ponovno jednaka umnošku grupne brzine i naboja e [izraz (3.6.2)]. Koristimo baždarenje $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\partial V^{tot}(\mathbf{r}, t)/\partial \mathbf{r}$ [odnosno $E_\alpha(\mathbf{q}, \omega) = -iq_\alpha \times V^{tot}(\mathbf{q}, \omega)$], te prevodimo jednadžbu (4.3.11) u formu

$$[\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+)] \delta n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = i\hbar \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}_+)}{\varepsilon(\mathbf{k}_+, \mathbf{k})} v_\alpha(\mathbf{k}) E_\alpha(\mathbf{k}). \quad (4.4.2)$$

Direktnim uvrštavanjem $\delta n(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$ iz izraza (4.4.2) u definicijsku relaciju (4.4.1) dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} i\hbar |J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+)|^2 \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}_+)}{\varepsilon(\mathbf{k}_+, \mathbf{k})} \frac{1}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+)}. \quad (4.4.3)$$

Ovaj rezultat odgovara dijagonalnom dijelu tenzora idealne vodljivosti za jednovrščani sustav. Za $\mathbf{q} \approx 0$ on se reducira na izraz (4.3.19). Relaksacijske procese možemo ponovo fenomenološki uvesti zamjenivši adijabatski član η s mjerom relaksacije Γ koja ne ovisi o frekvenciji i valnom vektoru. Time dobivamo mikroskopski zapis obične aproksimacije relaksacijskog vremena iz Poglavlja 2 koji je u suglasju s jednadžbom kontinuiteta (4.3.17) u vodećem članu u razvoju po q_α/ω .

4.5 Fenomenološka memorijska funkcija

Osnovni problem ovako izračunate vodljivosti $\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ je da ona nije primjenjiva na niskodimenzionalne sustave sa značajnim interakcijama među elektronima i to zbog dva razloga [13]. Prvo i već spomenuto, eksperimentalni podaci pokazuju da mjera relaksacije Γ obično ovisi o frekvenciji i o indeksu polarizacije α . Drugo, princip kauzalnosti zahtjeva da je $\Gamma_\alpha(\omega)$ zapravo imaginarni dio kompleksne relaksacijske funkcije. Štoviše, u anizotropnim sustavima s jakim interakcijama između elektrona

ona mora ovisiti i o valnom vektoru. Dakle, potrebno je generalizirati izraz (4.4.3) barem na fenomenološkoj razini.

U tom smislu, za opis mnogih slabointeragirajućih elektronskih sustava uvodimo tzv. memorijsku funkciju $M(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$. Pomoću nje opisujemo makroskopsku funkciju odgovora (u našem slučaju dinamičku vodljivost). Dijagramatskim jezikom, memorijska funkcija je vlastita energija elektron-šupljina para u aproksimaciji memorijske funkcije [13]. U slučaju kada $M(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$ ne ovisi o ω , ona se reducira na mjeru relaksacije, tj. vrijedi $M(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \approx i\Gamma_\alpha(\mathbf{k})$. Ovdje je $\Gamma_\alpha(\mathbf{k})$ fenomenološki uvedena mjera relaksacije Γ iz prethodnih potpoglavlja koja može ovisiti o \mathbf{k} i o indeksu polarizacije α . Stoga, kako bismo izveli fenomenološki izraz za vodljivost preko memorijske funkcije, dovoljno je zamijeniti mjeru relaksacije Γ sa $M(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega)$ u gornjem izrazu za vodljivost

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} i\hbar |J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+)|^2 \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}_+)}{\varepsilon(\mathbf{k}_+, \mathbf{k})} \frac{1}{\hbar\omega + \hbar M(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) + \varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+)}. \quad (4.5.1)$$

Korisno je opet provjeriti dugovalni limes, $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Koristimo standardne aproksimacije, uz pojednostavljenje $M(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) \approx M_\alpha(\mathbf{k}, \omega)$, koje pretpostavlja ovisnost memorijske funkcije o smjeru $\mathbf{q} = q_\alpha \hat{e}_\alpha$, ali ne i o iznosu. Rezultat je

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{ie^2}{m} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(-\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \right) \frac{mv_\alpha^2(\mathbf{k})}{\omega + M_\alpha(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (4.5.2)$$

Glavna metoda za analizu izmjerenih spektara koeficijenta refleksije temelji se na generaliziranoj Drudeovoj formuli koja se dobiva zanemarivanjem ovisnosti $M_\alpha(\mathbf{k}, \omega)$ o \mathbf{k} , tj.

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) \approx \frac{ie^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}/m}{\omega + M_\alpha(\omega)} \approx \frac{ie^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m\omega} \left[1 - \frac{M_\alpha(\omega)}{\omega} + \dots \right]. \quad (4.5.3)$$

Ovdje smo zapisali razvoj u visokoenergetskom režimu, $\omega \gg M_\alpha''(0)$. U sljedećem koraku memorijsku funkciju pišemo na način $M_\alpha(\omega) = M_\alpha'(\omega) + iM_\alpha''(\omega)$, te dobivamo generaliziranu Drudeovu formulu

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) \approx \frac{e^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}(\omega)/m}{\tilde{\Gamma}_\alpha(\omega) - i\omega}. \quad (4.5.4)$$

Ovdje je $n_{\alpha\alpha}^{eff}(\omega) = n_{\alpha\alpha}^{eff}/[1 + \lambda_\alpha(\omega)]$ renormalizirani efektivni broj nosilaca naboja, a $\tilde{\Gamma}_\alpha(\omega) = \Gamma_\alpha(\omega)/[1 + \lambda_\alpha(\omega)]$ je renormalizirana mjera relaksacije. Koristimo oznake $\lambda_\alpha(\omega) = M_\alpha'(\omega)/\omega$ i $\Gamma_\alpha(\omega) = M_\alpha''(\omega)$. Važno je uočiti da izrazi za vodljivost zapisani preko memorijske funkcije, iako puno općenitiji, i dalje imaju strukturu vodljivosti iz obične transportne teorije (2.3.5). Nadalje, realni i imaginarni dijelovi memorijske funkcije mogu se direktno povezati s eksperimentalnim podacima za inverznu vodljivost. Iz gornjeg izraza slijedi

$$\Gamma_\alpha(\omega) = \frac{e^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m} \operatorname{Re} \frac{1}{\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)}, \quad 1 + \lambda_\alpha(\omega) = -\frac{e^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m\omega} \operatorname{Im} \frac{1}{\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)}. \quad (4.5.5)$$

4.5.1 Struja-struja korelacijska funkcija i memorijska funkcija

Uz pomoć Kubo formule za vodljivost, izraz (4.2.11), te izraza za vodljivost (4.5.2) možemo izraziti struja-struja korelacijsku funkciju na način ($\mathbf{q} \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}(\omega) &= \pi_{\alpha\alpha}(0) - i\omega\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) \equiv \sum_{\mathbf{k}\sigma} \pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, 0) + \frac{e^2}{m} \frac{1}{V} m v_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \left(-\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \right) \frac{\omega}{\omega + M_{\alpha}(\mathbf{k}, \omega)} \right] \\ &= \frac{e^2}{m} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} m v_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \left(-\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \right) \frac{M_{\alpha}(\mathbf{k}, \omega)}{\omega + M_{\alpha}(\mathbf{k}, \omega)}. \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

Ako u memorijskoj funkciji zanemarimo ovisnost o \mathbf{k} , u visokoenergetskom režimu, $\omega \gg M_{\alpha}''(0)$, dobivamo

$$\pi_{\alpha\alpha}(\omega) = -\frac{e^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m} \frac{M_{\alpha}(\omega)}{\omega + M_{\alpha}(\omega)} \approx -\frac{e^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m} \left[\frac{M_{\alpha}(\omega)}{\omega} - \left(\frac{M_{\alpha}(\omega)}{\omega} \right)^2 + \dots \right]. \quad (4.5.7)$$

Kao što ćemo vidjeti u sljedeća dva poglavlja, prvi član u razvoju (4.5.7) igra važnu ulogu u mikroskopskom opisu vodljivosti BCS supravodiča, u normalnom i u supravodljivom stanju.

Poglavlje 5

Memorijska funkcija

U dosadašnjem dijelu rada promatrali smo modele za opis vodljivosti u normalnom stanju elektronskog podsustava. Ovdje ćemo poopćiti formalizam računa, što će olakšati analizu u supravodljivom stanju. Jednadžbe koje ćemo dobiti su općenitiji oblik jednadžbi gibanja iz prethodnog poglavlja. U njima se preko efektivne strujne vršne funkcije uključuje raspršenje elektrona na statičkom neredu, na fononima, te na drugim elektronima, na razmjerno jednostavan način.

5.1 Struja-struja korelacijska funkcija u režimu idealne vodljivosti

U ovom poglavlju nas zanimaju doprinosi korelacijskoj funkciji $\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ porijeklom od raspršenja elektrona na statičkom neredu. Hamiltonijan je oblika

$$H = H_0 + H'_1 + H_{int} + H_1^{ext} + H_2^{ext}. \quad (5.1.1)$$

Ovdje je H_0 kinetički član (3.4.3), a H_1^{ext} i H_2^{ext} opisuju linearno i kvadratno vezanje elektrona s vektorskim potencijalom $\mathbf{A}^{ext}(\mathbf{q}, \omega)$ [izrazi (3.4.7) i (3.4.9)]. Raspršenje na statičkom neredu opisano je sa

$$H'_1 = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}, \quad (5.1.2)$$

a H_{int} je dugodosežni kulonski član. Radi lakše usporedbe s izrazima iz prošlog poglavlja korisno je organizirati račun tako da su doprinosi razvrstani po potencijama od $|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2$.

U prethodnom poglavlju koristili smo baždarenje preko skalarnog potencijala. Ovdje ćemo koristiti baždarenje preko vektorskog potencijala, $E_\alpha(\mathbf{q}, \omega) = (i\omega/c)A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega)$.

Ono nam omogućuje zapis inducirane struje kao

$$\begin{aligned} J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{i}{\omega} [\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) - \pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q})] \frac{i\omega}{c} A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega) \\ &= -\frac{1}{c} \pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega) + \dots \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

Bez smanjenja općenitosti uzimamo jednu komponentu \mathbf{q} u H_1^{ext} , te dugovalnu granicu za strujnu vršnu funkciju, $J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \approx ev_\alpha(\mathbf{k})$, te dobivamo

$$H_1^{ext} = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{k}\sigma} A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}, t) ev_\alpha(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}. \quad (5.1.4)$$

Treba naglasiti da $A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}, t)$ možemo koristiti za opis vezanja s elektromagnetskim poljem obje polarizacije. U longitudinalnom slučaju će H_{int} imati istu ulogu kao i u jednadžbi (4.3.10). $A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega)$ će dakle predstavljati longitudinalni zasjenjeni vektorski potencijal.

U ovom baždarenju jednadžbu gibanja za opservablu $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_t$ možemo dobiti iz izraza (4.3.10) zamjenom $V^{tot}(\mathbf{q}, t) \rightarrow -(v_\alpha(\mathbf{k})/c) A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, t)$. Rezultat je

$$\begin{aligned} [\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_\omega &= [\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle] \\ &\times \left(-\frac{1}{c} \right) ev_\alpha(\mathbf{k}) A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

Induciranu struju dobivamo uvrštavanjem izraza za $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_\omega$ u definicijsku relaciju (4.4.1),

$$\begin{aligned} J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} ev_\alpha(\mathbf{k}) \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \rangle_\omega \\ &= -\frac{1}{c} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e^2 v_\alpha^2(\mathbf{k}) \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})} A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (5.1.6)$$

Dakle, doprinos nultog reda u $|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2$ struja-struja korelacijskoj funkciji je

$$\pi_{\alpha\alpha}^{[0]}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e^2 v_\alpha^2(\mathbf{k}) \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})}. \quad (5.1.7)$$

Ovaj izraz nije prikladan za manipulaciju oblika $i\eta \rightarrow i\Gamma$ preko koje fenomenološki uključujemo relaksacijske procese. Na taj način u dugovalnoj granici dobivamo rezultat $\pi_{\alpha\alpha}^{[0]} \sim q_\alpha^2$. Kako je u Drudeovom režimu $q_\alpha v_F \ll \omega$, ovaj doprinos iščezava. Stoga, da bismo uključili raspršenje elektrona na statičkom neredu u ovom formalizmu, potrebno je procese raspršenja u H_1' tretirati eksplicitno, počevši od $|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2$ doprinosa.

5.2 Raspršenje na statičkom neredu

Član hamiltonijana H_1' kojeg smo uveli u izrazu (5.1.1), opisuje raspršenje na statičkom neredu. Budući da su on i član H_1^{ext} jednočestičnog oblika, procese vezane uz

raspršenje na statičkom neredu možemo efektivno uključiti u $\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$ tako da definiramo efektivno vezanje između vodljivih elektrona i polja $A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}, t)$ koje je linearno u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$,

$$\tilde{H}_1^{ext} = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}. \quad (5.2.1)$$

Efektivnu strujnu vršnu funkciju $j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ možemo odrediti na način izložen u potpoglavlju 5.3, gdje dobivamo

$$j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\hbar\omega} [J_{\alpha}(\mathbf{k}) - J_{\alpha}(\mathbf{k}')]. \quad (5.2.2)$$

Analogno definiciji operatora gustoće struje, izraz (3.5.2), definiramo operator efektivne gustoće struje,

$$\hat{j}_{\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}. \quad (5.2.3)$$

Zamjenom $\mathbf{k} + \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{k}'$ i $ev_{\alpha}(\mathbf{k}) \rightarrow j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ u jednadžbi gibanja (5.1.5) dobivamo

$$[\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')] \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle_{\omega} = [\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle] \left(-\frac{1}{c} \right) j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') A_{\alpha}^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \quad (5.2.4)$$

Direktnim uvrštavanjem izraza za $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle_{\omega}$ u definiciju inducirane efektivne struje dobivamo

$$\begin{aligned} j_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle_{\omega} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} j_{\alpha}^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')} A_{\alpha}^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

Doprinos struja-struja korelacijskoj funkciji koji je kvadratni u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ poprima dakle oblik

$$\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{(\hbar\omega)^2 V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} |V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')} [v_{\alpha}(\mathbf{k}) - v_{\alpha}(\mathbf{k}')]^2, \quad (5.2.6)$$

gdje je $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}'$. Ovdje smo iskoristili definiciju efektivne strujne vršne funkcije $j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ te činjenicu da je $J_{\alpha}(\mathbf{k}) = ev_{\alpha}(\mathbf{k})$.

Da bismo dobili željeni zapis vodljivosti koristimo u prvom koraku raspis

$$[v_{\alpha}(\mathbf{k}) - v_{\alpha}(\mathbf{k}')]^2 = v_{\alpha}(\mathbf{k})[v_{\alpha}(\mathbf{k}) - v_{\alpha}(\mathbf{k}')] + v_{\alpha}(\mathbf{k}')[v_{\alpha}(\mathbf{k}') - v_{\alpha}(\mathbf{k})]. \quad (5.2.7)$$

Nakon uvrštavanja u izraz (5.2.6) te zamjene $\mathbf{k} \rightleftharpoons \mathbf{k}'$ u drugom članu, kvadratni doprinos tenzoru vodljivosti postaje

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) &= \frac{i}{\omega} \pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) \\ &= \frac{e^2}{(\hbar\omega)^2 V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} |V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \frac{i}{\omega} [f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')] v_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \left(1 - \frac{v_{\alpha}(\mathbf{k}')}{v_{\alpha}(\mathbf{k})} \right) \\ &\quad \times \left(\frac{1}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')} + \frac{1}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k})} \right). \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

Ovaj doprinos možemo povezati s razvojem tenzora vodljivosti po $M_\alpha(\omega)/\omega$ iz prošlog poglavlja [izraz (4.5.3)],

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) &\approx -\frac{ie^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m\omega^2} M_\alpha^{[2]}(\omega) \\ &= -\frac{ie^2}{m\omega^2} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} m v_\alpha^2(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'} \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')}{\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k})} \left(-\frac{1}{\hbar}\right) |V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \left(1 - \frac{v_\alpha(\mathbf{k}')}{v_\alpha(\mathbf{k})}\right) \\ &\quad \times \sum_{s=\pm 1} \frac{1}{\hbar\omega + i\hbar\eta + s\varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}. \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

U izrazu u prvom retku su separirane sumacije po valnim vektorima \mathbf{k} i \mathbf{k}' . Da bismo postigli separiranu formu i u drugom retku potrebno je načiniti neka pojednostavljenja. Standardno se u izrazu $|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2$ \mathbf{k} zamijeni sa \mathbf{k}_F , sa sličnim pojednostavljenjima u ostalim faktorima. Sumacija po \mathbf{k} sada daje $n_{\alpha\alpha}^{eff}$, a sumacija po \mathbf{k}' memorijsku funkciju $M_\alpha^{[2]}(\mathbf{k}_F, \omega) \equiv M_\alpha^{[2]}(\omega)$. Rezultat je

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) &\approx -\frac{ie^2 n_{\alpha\alpha}^{eff}}{m\omega^2} \sum_{\mathbf{k}'} \left(-\frac{1}{\hbar}\right) |V(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}')|^2 \left(1 - \frac{v_\alpha(\mathbf{k}')}{v_\alpha(\mathbf{k}_F)}\right) \\ &\quad \times \sum_{s=\pm 1} \frac{1}{\hbar\omega + i\hbar\eta + s\varepsilon(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}')}, \end{aligned} \quad (5.2.10)$$

$$M_\alpha^{[2]}(\mathbf{k}_F, \omega) = -\sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\hbar} |V(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}')|^2 \left(1 - \frac{v_\alpha(\mathbf{k}')}{v_\alpha(\mathbf{k}_F)}\right) \sum_{s=\pm 1} \frac{1}{\hbar\omega + i\hbar\eta + s\varepsilon(\mathbf{k}_F, \mathbf{k}')}. \quad (5.2.11)$$

Budući da se u kupratima svojstva elektrona uzduž Fermijeve plohe jako mijenjaju s valnim vektorom, ova vrsta aproksimacije neće nužno biti dobra. No, mi možemo definirati memorijsku funkciju bez ikakvih pojednostavljenja u relaciji (5.2.9). Formalno rješenje je

$$\begin{aligned}M_\alpha^{[2]}(\omega) &= -\frac{1}{n_{\alpha\alpha}^{eff}} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} m v_\alpha^2(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'} \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')}{\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k})} \frac{1}{\hbar} |V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \left(1 - \frac{v_\alpha(\mathbf{k}')}{v_\alpha(\mathbf{k})}\right) \\ &\quad \times \sum_{s=\pm 1} \frac{1}{\hbar\omega + i\hbar\eta + s\varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}. \end{aligned} \quad (5.2.12)$$

Ovaj izraz je u osnovi modela koji zovemo generalizirani Drudeov model za tenzor vodljivosti. U njemu $M_\alpha(\omega)$ predstavlja $M_\alpha(\mathbf{k}, \omega)$ iz (5.2.11) koji je uprosječen preko Fermijeve plohe.

5.3 Račun efektivne strujne vršne funkcije

Jedan način da odredimo strukturu efektivne strujne vršne funkcije za raspršenje na statičkom neredu, na fononima ili drugim elektronima, je da iskoristimo Kubo formulu iz potpoglavlja 4.2 za slučaj $\mu = \alpha$. Za raspršenje na statičkom neredu prvi

relevantni doprinos struja-struja korelacijskoj funkciji očito je reda $(H'_1)^2$. U komutatoru $[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H]$ u Kubo formuli za nezasjenjenu struja-struja korelacijsku funkciju [izrazi (4.2.5) i (4.2.6)]

$$V\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{(\hbar\omega)^2} [\Phi_{\alpha\alpha}(\omega) - \Phi_{\alpha\alpha}(0)], \quad (5.3.1)$$

$$\Phi_{\alpha\alpha}(\omega) = \langle\langle [\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H]; [\hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}), H] \rangle\rangle_\omega^{ired}, \quad (5.3.2)$$

zadržavamo samo doprinose linearne u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$.

Koristeći pravila računa komutatora iz Dodatka A.3, dobivamo

$$\begin{aligned} [\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H'_1] &= \left[\sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} V(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}''\sigma'} \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} V(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \left(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} - \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}'} \left(V(\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} - V(\mathbf{k}', \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \right) \\ &\stackrel{\mathbf{q} \rightarrow 0}{\approx} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} - c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')] c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}. \end{aligned} \quad (5.3.3)$$

Ovdje smo u trećem i petom redu koristili činjenicu da je $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V(\mathbf{k}', \mathbf{k})$. Uvrštavanjem tog izraza u Kubo formule (5.3.1) i (5.3.2) dobivamo

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_1} \frac{1}{C^2} j_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}') j_\alpha(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1) \left[\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}; c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma} \rangle\rangle_\omega^{ired} \right. \\ &\quad \left. - \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}; c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma} \rangle\rangle_{\omega=0}^{ired} \right]. \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

Ovdje smo efektivnu strujnu vršnu funkciju $j_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ povezali sa $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ na način

$$j_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = C \frac{V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\hbar\omega} [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')]. \quad (5.3.5)$$

$\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}; c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma} \rangle\rangle_\omega^{ired}$ je Fourierov transformat retardirane korelacijske funkcije $\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}; c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma} \rangle\rangle_t^{ired}$,

$$\begin{aligned} \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}; c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma} \rangle\rangle_t^{ired} &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma})_t, (c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma})_0] \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega t} e^{\eta t} \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}; c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma} \rangle\rangle_\omega^{ired}. \end{aligned} \quad (5.3.6)$$

Da bismo odredili konstantu C u izrazu (5.3.5) potrebno je izračunati korelacijsku funkciju $\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}; c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'_1\sigma} \rangle\rangle_t^{ired}$ i usporediti dobiveni rezultat s izrazom (5.2.10). To se može napraviti na više načina, a rezultat je $C = 1$. Stoga je $j_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ dobro dan izrazom (5.2.2).

5.4 Sila-sila korelacijska funkcija

U prethodnim raspravama smo se uvjerali koje sve prednosti ima formalizam jednadžbi gibanja za opservablu $(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma})_t$ u opisu odzivnih funkcija elektronskih sustava sa slabim interakcijama. Dvije najvažnije su: (1) fizikalna transparentnost računa, (2) trivijalan način na koji se temperatura pojavljuje u računu, preko funkcije distribucije $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \approx f(\mathbf{k})$. Glavni nedostaci metode su: (1) nepreglednost razvrstavanja doprinosa višeg reda u smetnji H'_1 i/ili H'_2 , (2) relativno slaba zastupljenost ove metode u udžbeničkim raspravama.

Dakle, zanima li nas dinamička vodljivost u sustavima s jakim interakcijama te usporedba rezultata sa standardnim rezultatima potrebno je upotrijebiti temperaturno ovisni račun smetnje. U ovom potpoglavlju ćemo izvesti izraz za memorijsku funkciju na ovaj način. Zbog kompletnosti analize promotrit ćemo raspršenje elektrona na fononima. Treba naglasiti da se ova metoda obično naziva račun vodljivosti preko sila-sila korelacijske funkcije. Kao što ćemo vidjeti rezultat je isti kao i kod korištenja računa preko memorijske funkcije iz prethodnih potpoglavlja. Dakle, riječ je o istom računu za koji autori koriste dva različita imena [12, 15]. Detalji računa iz ovog potpoglavlja nalaze se u Dodatku C.

Polazimo dakle od ukupnog hamiltonijana koji uključuje elektrone i fonone, te vezanje među njima oblika¹

$$H'_1 = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}'\sigma\nu} \frac{V_\nu(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{\sqrt{N}} (a_{\nu\mathbf{q}'} + a_{\nu-\mathbf{q}'}^\dagger) c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (5.4.1)$$

Ovdje su $a_{\nu-\mathbf{q}'}^\dagger$ i $a_{\nu\mathbf{q}'}$ fononski operatori stvaranja i poništenja, dok indeks ν označava fononsku granu. Gornji hamiltonijan uključuje raspršenje na akustičnim i optičkim fononima, kao i kanal raspršenja koji odgovara statičkom neredu ($\nu = 0$). Radi jasnoće ograničit ćemo se na akustične fonone te ćemo indeks ν ispustiti iz daljnjih zapisa.

Dijagramatski doprinosi sila-sila korelacijskoj funkciji koji su drugog reda u H'_1 , izraz (C.1.9), tj. u formalizmu jednadžbi gibanja izraz (5.2.9), predstavljeni su na Slici 5.2. Oni čine vodeći član ukupne korelacijske funkcije prikazane na Slici 5.1. Promotrit ćemo doprinos $2A_1$ koji sadrži kao gradivni element vlastitu energiju elektrona (preostala tri doprinosa iz (5.2.9), tj. (C.1.9) dobivaju se na isti način). Za taj doprinos imamo

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(\mathbf{q}, i\omega_n) = & -\frac{1}{V} \frac{1}{(i\hbar\omega_n)^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_\alpha(\mathbf{k})^2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau (e^{i\omega_n\tau} - 1) \frac{|V(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2}{N} \\ & \times \langle T_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}(\tau) e^{\tau H} (a_{\mathbf{q}'}^\dagger + a_{-\mathbf{q}'}) e^{-\tau H} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} (a_{\mathbf{q}'} + a_{-\mathbf{q}'}^\dagger) \rangle. \end{aligned} \quad (5.4.2)$$

¹Primijetimo da smo član hamiltonijana koji opisuje raspršenje na statičkom neredu i pripadnu jakost vezanja, izraz (5.1.2), također označili s H'_1 i $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. U ostatku rada to neće voditi do zabuna.

Ovdje je $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}'$. Budući da elektronski i fononski operatori komutiraju, korištenje Wickovog teorema je znatno olakšano. Za fononski dio dobivamo

$$\begin{aligned} \langle T_\tau e^{\tau H} (a_{\mathbf{q}'}^\dagger + a_{-\mathbf{q}'}) e^{-\tau H} (a_{\mathbf{q}'} + a_{-\mathbf{q}'}^\dagger) \rangle &= \langle T_\tau A(-\mathbf{q}', \tau) A(\mathbf{q}', 0) \rangle \\ &= -\langle T_\tau A(\mathbf{q}', 0) A(-\mathbf{q}', \tau) \rangle \\ &= \mathcal{D}(\mathbf{q}', -\tau), \end{aligned} \quad (5.4.3)$$

a za elektronski dio

$$\begin{aligned} \langle T_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}\sigma}(0) \rangle &= \langle T_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}(0) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}^\dagger(0) \rangle \\ &= \mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau) \mathcal{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}', \tau). \end{aligned} \quad (5.4.4)$$

Ovdje smo iskoristili definiciju fononskog propagatora $\mathcal{D}(\mathbf{q}, \tau - \tau') = -\langle T_\tau A(\mathbf{q}, \tau) A(-\mathbf{q}', \tau') \rangle$ te definiciju elektronskog propagatora $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau - \tau') = -\langle T_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$. Dakle, doprinos vezan uz prvi od četiri člana sa Slike 5.2 možemo pisati na način

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(\mathbf{q}, i\omega_n) &= -\frac{1}{V} \frac{1}{(i\hbar\omega_n)^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_\alpha^2(\mathbf{k}) \int_0^{\beta\hbar} d\tau (e^{i\omega_n\tau} - 1) \frac{|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2}{N} \\ &\quad \times \mathcal{D}(\mathbf{q}', -\tau) \mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau) \mathcal{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}', \tau). \end{aligned} \quad (5.4.5)$$

Kao što je pokazano u Dodatku C.2, nakon Fourierovih transformacija taj izraz prelazi u

$$\pi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(\mathbf{q}, i\omega_n) \approx -\frac{1}{(i\hbar\omega_n)^2} \frac{1}{V} \left[\Phi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(i\omega_n) - \Phi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(0) \right], \quad (5.4.6)$$

gdje je

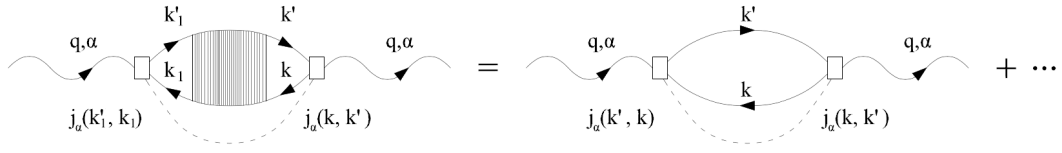
$$\Phi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_\alpha^2(\mathbf{k}) \frac{1}{\beta^2 \hbar^2} \sum_{i\nu_n} \sum_{i\omega_m} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\nu_n - i\omega_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\nu_n + i\omega_m) \mathcal{F}(\mathbf{q}', i\omega_m). \quad (5.4.7)$$

Propagator $\mathcal{F}(\mathbf{q}', i\omega_m) = (|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2/N) \mathcal{D}(\mathbf{q}', i\omega_m)$ se obično naziva sila-sila korelacijska funkcija. Za preostale dijagrame $2A_2$, $2B_1$ i $2B_2$ sa Slike 5.2 dobivamo tri preostala člana u (5.2.9), tj. (C.1.9). Također, raspršenje na statičkom neredu te na drugim elektronima vodi do iste forme za izraz $\Phi_{\alpha\alpha}(i\omega_n)$. Dakle, u generalnom slučaju dobivamo

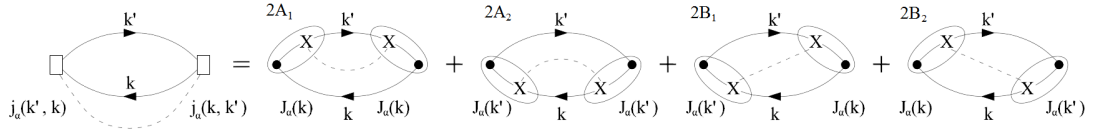
$$\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\mathbf{q}, i\omega_n) \approx -\frac{1}{(i\hbar\omega_n)^2} \frac{1}{V} \left[\Phi_{\alpha\alpha}^{[2]}(i\omega_n) - \Phi_{\alpha\alpha}^{[2]}(0) \right], \quad (5.4.8)$$

$$\Phi_{\alpha\alpha}^{[2]}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\nu} [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')]^2 \frac{1}{\beta^2 \hbar^2} \sum_{i\nu_n} \sum_{i\omega_m} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\nu_n - i\omega_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\nu_n + i\omega_m) \mathcal{F}_\nu(\mathbf{q}', i\omega_m). \quad (5.4.9)$$

Ovdje $\mathcal{F}_\nu(\mathbf{q}', i\omega_m)$ uključuje sve relevantne kanale raspršenja.



Slika 5.1: Dijagramatski prikaz ukupne korelacijske funkcije $\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ sa istaknutim vodećim članom $\sim (H'_1)^2$. Otvoreni kvadrati su efektivne strujne vršne funkcije (5.2.2), a crtkana linija sila-sila korelacijska funkcija, $\mathcal{F}(\mathbf{q}', i\omega_m)$.



Slika 5.2: Vodeći član u struja-struja korelacijskoj funkciji u formalizmu jednadžbi gibanja [izraz (5.2.9)] i u formalizmu sa sila-sila korelacijskom funkcijom [izraz (C.1.9)]. Zaokruženi dijelovi predstavljaju efektivne strujne vršne funkcije. Pune točke predstavljaju neinteragirajuće strujne vršne funkcije. Doprinos $2A_1$ predstavlja doprinos s vlastitom energijom elektrona, $2A_2$ doprinos s vlastitom energijom šupljine, a doprinos $2B = 2B_1 + 2B_2$ vršne popravke.

Na kraju, koristimo definiciju memorijske funkcije (izraz (2.4.1) i [15])

$$\pi_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{\pi_{\alpha\alpha}(0)M_{\alpha}(\omega)}{\omega + M_{\alpha}(\omega)} \approx \pi_{\alpha\alpha}(0) \left[\frac{M_{\alpha}(\omega)}{\omega} - \left(\frac{M_{\alpha}(\omega)}{\omega} \right)^2 + \dots \right], \quad (5.4.10)$$

$$\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) = -\frac{e^2 n_{\alpha\alpha}^{eff} M_{\alpha}^{[2]}(\omega)}{m \omega}.$$

Ovdje smo u prvom retku napravili visokoenergetski razvoj. Konačno, koristeći izraz (5.4.8) za struja-struja korelacijsku funkciju dobivamo memorijsku funkciju. Rezultat je

$$M_{\alpha}^{[2]}(\omega) = \frac{m}{n_{\alpha\alpha}^{eff} e^2 V \hbar^2 \omega} \left[\Phi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) - \Phi_{\alpha\alpha}^{[2]}(0) \right]. \quad (5.4.11)$$

Ovdje je funkcija $\Phi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega)$ dobivena analitičkim produljenjem funkcije $\Phi_{\alpha\alpha}^{[2]}(i\omega_n)$ ($i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$). Primijetimo da je razvoj (5.4.10) identičan razvoju (4.5.7). Razlika je što smo u Poglavlju 4 do struja-struja korelacijske funkcije došli koristeći formalizam jednadžbi gibanja, gdje je uvođenje memorijske funkcije fenomenološki opravdano njenom identifikacijom s vlastitom energijom elektron-šupljina para u dijagramatskom računu. S druge strane, ovdje je korišten Matsubarin formalizam, te je memorijska funkcija ušla egzaktno.

Poglavlje 6

Dinamička vodljivost BCS supravodiča

Bardeen-Cooper-Schriefferova teorija supravodljivosti opisuje kako privlačna efektivna interakcija među elektronima vodi do nestabilnosti sustava vodljivih elektrona prema supravodljivom uređenom stanju. Ta nestabilnost nastupa kada odgovarajuća amplituda raspršenja elektrona postane proizvoljno velika. U tom slučaju novo ravnotežno stanje se više ne može izvesti perturbativnim računom. Drugačije rečeno, novo ravnotežno stanje nije perturbacija normalnog stanja sustava vodljivih elektrona.

U ovom poglavlju uvjerit ćemo se da metodu jednadžbi gibanja iz prethodnog poglavlja možemo koristiti za opis jednočestičnih pobuđenja u uređenom BCS stanju. Prvo ćemo dijagonalizirati BCS hamiltonijan i uvesti Nambuovu reprezentaciju. Zatim ćemo odrediti strukturu hamiltonijana vezanja vodljivih elektrona s vanjskim elektromagnetskim poljem i na kraju izvesti Mattis-Bardeenov rezultat te komentirati pretpostavke njegovog izvoda.

6.1 BCS hamiltonijan u aproksimaciji srednjeg polja

U BCS teoriji elektronski dio hamiltonijana ima oblik

$$H_{el} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{N} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (6.1.1)$$

gdje $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ predstavlja efektivnu privlačnu interakciju između elektrona koja je odgovorna za sparivanje elektrona u Cooperove parove¹. U BCS teoriji $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ potječe od interakcije elektrona s fononima, no u generalnom slučaju može potjecati od bilo koje vrste bozonskih modova. Ako definiramo operatore

$$\hat{b}(\mathbf{k}) = c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) = c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (6.1.2)$$

¹Primijetimo da je $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ imao drugačije značenje u prethodna dva poglavlja.

i primijenimo aproksimaciju srednjeg polja² na $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k})\hat{b}(\mathbf{k}')$, dobivamo efektivni jednočestični BCS hamiltonijan

$$H_{el}^{MFA} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \left[c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] - \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta^*(\mathbf{k}) c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right] + \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon(\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k}) b^*(\mathbf{k})]. \quad (6.1.3)$$

Ovdje smo definirali pomoćnu veličinu $\Delta(\mathbf{k})$ koja ima dimenziju energije, na način

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{1}{N} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') b(\mathbf{k}'). \quad (6.1.4)$$

U prethodna dva izraza termodinamički prosjek operatora (6.1.2) označili smo na način $\langle \hat{b}(\mathbf{k}) \rangle \equiv b(\mathbf{k})$ i $\langle \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) \rangle \equiv b^*(\mathbf{k})$. Da bismo pojednostavili raspravu, u ostatku ovog rada pretpostavit ćemo da je $\Delta(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}$.

Gornji hamiltonijan je jednočestičan, tj. bilinearan u elektronskim operatorima. No, za razliku od većine ostalih efektivnih jednočestičnih hamiltonijana on sadrži članove oblika cc i $c^\dagger c^\dagger$ koji ne čuvaju broj elektrona. Nambu je predložio jednostavan trik da se taj hamiltonijan prevede u standardnu formu koju možemo lako dijagonalizirati. On je uveo dvije vrste kvazičestica koje predstavljaju elektrone opisane sa $\mathbf{k}\uparrow$ i šupljine opisane sa $-\mathbf{k}\downarrow$. U nedijagonalnoj $\{l\mathbf{k}\}$ reprezentaciji ($l \in \{c, \underline{c}\}$) možemo dakle pisati

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \equiv c_{c\mathbf{k}}^\dagger, \quad c_{-\mathbf{k}\downarrow} \equiv c_{\underline{c}\mathbf{k}}^\dagger, \quad \Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{c\mathbf{k}}^\dagger \\ c_{\underline{c}\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{c\mathbf{k}} \\ c_{\underline{c}\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{c\mathbf{k}}^\dagger \ c_{\underline{c}\mathbf{k}}^\dagger). \quad (6.1.5)$$

Veličine $\Psi_{\mathbf{k}}$ i $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger$ nazivamo Nambuovi spinori. Prvi dio u BCS hamiltonijanu (6.1.3) sada postaje

$$\begin{aligned} \Delta H_{el} &\approx \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) [c_{c\mathbf{k}}^\dagger c_{c\mathbf{k}} - c_{\underline{c}\mathbf{k}}^\dagger c_{\underline{c}\mathbf{k}}] - \sum_{\mathbf{k}} [\Delta(\mathbf{k}) c_{c\mathbf{k}}^\dagger c_{\underline{c}\mathbf{k}} + \Delta(\mathbf{k}) c_{\underline{c}\mathbf{k}}^\dagger c_{c\mathbf{k}}] \\ &= \sum_{l\mathbf{k}} \varepsilon_l(\mathbf{k}) c_{l\mathbf{k}}^\dagger c_{l\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} [\Delta(\mathbf{k}) c_{c\mathbf{k}}^\dagger c_{\underline{c}\mathbf{k}} + \Delta(\mathbf{k}) c_{\underline{c}\mathbf{k}}^\dagger c_{c\mathbf{k}}] \\ &= \sum_{l'l} \sum_{\mathbf{k}} \Delta H_{el}^{ll'}(\mathbf{k}) c_{l\mathbf{k}}^\dagger c_{l'\mathbf{k}} \\ &\equiv \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \Delta H_{el}(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (6.1.6)$$

U drugom redu smo definirali kratice $\varepsilon_l(\mathbf{k})$ na način: $\varepsilon_{\underline{c}}(\mathbf{k}) = -\varepsilon_c(\mathbf{k}) \equiv \varepsilon(\mathbf{k}) > 0$. U četvrtom redu zapisali smo hamiltonijan uz pomoć Nambuovih spinora, gdje je

$$\Delta H_{el}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}) & -\Delta(\mathbf{k}) \\ -\Delta(\mathbf{k}) & -\varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (6.1.7)$$

²Pod aproksimacijom srednjeg polja podrazumijevamo transformaciju $AB \rightarrow A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle$. Greška od ove transformacije je drugog reda u devijacijama A i B od njihovih prosječnih vrijednosti, tj. $AB - \langle A \rangle B - A \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle)$.

U Dodatku D.1 pokazano je da hamiltonijan (6.1.6) možemo dijagonalizirati kao i bilo koji efektivni problem s dvije vrste kvazičestica/čestica. Rezultat je

$$H_{el} = \sum_{L=C,\underline{C}} \sum_{\mathbf{k}} E_L(\mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}}. \quad (6.1.8)$$

Ovdje su sa $c_{L\mathbf{k}}^\dagger$ i $c_{L\mathbf{k}}$ označeni dijagonalizirani kvazičestični operatori u Nambuovoj reprezentaciji [izraz (D.1.4)]. Kvazičestična energija definirana je sa

$$E_{C,\underline{C}}(\mathbf{k}) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{[\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\underline{c}}(\mathbf{k})]^2 + 4\Delta^2(\mathbf{k})} = \pm \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2(\mathbf{k})} \equiv \pm E(\mathbf{k}). \quad (6.1.9)$$

Primijetimo da u generalnom slučaju disperzije $E_C(\mathbf{k})$ i $E_{\underline{C}}(\mathbf{k})$ nemaju jednostavnu ovisnost o valnom vektoru \mathbf{k} , jer osim u disperziji $\varepsilon(\mathbf{k})$ ona postoji i u parametaru uređenja $\Delta(\mathbf{k})$.

6.2 BCS jednadžba samosuglasnosti

Najjednostavniji način određivanja samosuglasne BCS jednadžbe podrazumijeva minimizaciju termodinamičkog potencijala po parametru uređenja. Alternativni način zahtjeva korištenje anomalnih Greenovih funkcija. On je dan u Dodatku D.2.

Ukupni hamiltonijan sastoji se od dijagonaliziranog dijela i dijela koji opisuje korekcije srednjeg polja

$$H = \sum_{L\mathbf{k}} E_L(\mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{N} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') b^*(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}') \right]. \quad (6.2.1)$$

Termodinamički potencijal je dan sa

$$\Omega(b, b^*) = -\frac{1}{\beta} \sum_{L\mathbf{k}'} \ln [1 + e^{\beta(\mu - E_L(\mathbf{k}))}] + \sum_{\mathbf{k}'} \varepsilon(\mathbf{k}') - \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \frac{1}{N} V(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') b^*(\mathbf{k}') b(\mathbf{k}''). \quad (6.2.2)$$

Minimizacijom gornjeg izraza po parametru $b^*(\mathbf{k})$ dobivamo

$$\frac{\partial \Omega(b, b^*)}{\partial b^*(\mathbf{k})} = -\frac{1}{\beta} \sum_{L\mathbf{k}'} \frac{e^{\beta(\mu - E_L(\mathbf{k}'))}}{1 + e^{\beta(\mu - E_L(\mathbf{k}'))}} (-\beta) \frac{\partial E_L(\mathbf{k}')}{\partial b^*(\mathbf{k})} - \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \frac{1}{N} V(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') b(\mathbf{k}'') \frac{\partial b^*(\mathbf{k}')}{\partial b^*(\mathbf{k})} = 0. \quad (6.2.3)$$

U drugom članu vrijedi $(\partial b^*(\mathbf{k}')/\partial b^*(\mathbf{k})) = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$, pa je on jednak $\Delta(\mathbf{k})$. Nakon izvrednjavanja derivacije $\partial E_L(\mathbf{k}')/\partial b^*(\mathbf{k})$ u prvom članu dobivamo BCS samosuglasnu jednadžbu,

$$\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{N} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \frac{f_{\underline{C}}(\mathbf{k}') - f_C(\mathbf{k}')}{E_{\underline{C}}(\mathbf{k}') - E_C(\mathbf{k}')}. \quad (6.2.4)$$

Ova jednadžba igra centralnu ulogu kod određivanja karakteristika supravodljivog stanja u slabo vezanim³ BCS supravodičima. Ona je općeg oblika u smislu da nikakav

³engl. "weak coupling"

uvjet nije postavljen na simetriju interakcije $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, te da vrijedi za arbitrarnu temperaturu. U Dodatku D.3 razmatramo samosuglasnu BCS jednadžbu za dva izbora interakcije $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$.

6.3 Minimalna supstitucija

U prethodnom poglavlju opisali smo raspršenje elektrona na statičkom neredu na efektivan način, uvodeći efektivno vezanje vodljivih elektrona i vektorskog potencijala. To nam je omogućilo korištenje jednadžbi gibanja koje znamo riješiti i u kojima imamo kontrolu nad zakonom sačuvanja energije. Sada ćemo pokazati da iste jednadžbe gibanja možemo koristiti za opis korelacijskih funkcija u modelima s dvije vrpce. Hamiltonijan (6.2.1) nam je ovdje od primarnog interesa.

Prvo promotrimo linearno vezanje elektrona i vektorskog potencijala u izrazima (3.4.7) i (5.2.1). Oni imaju istu strukturu; oba su umnožak vektorskog potencijala i operatora gustoće struje⁴. Tu strukturu možemo zapisati kao

$$H^{ext} = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}, t) \hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q}), \quad (6.3.1)$$

ako uvedemo pomoćni operator gustoće struje $\hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q}'')$ na način

$$\hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q}'') = \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k}) c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}''\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (6.3.2)$$

U izvornom hamiltonijanu vezanja, H_1^{ext} , gustoću $\hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q})$ dobivamo za $\hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q}'' \rightarrow -\mathbf{q})$, dok u efektivnom hamiltonijanu vezanja za $\hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{q}'} \hat{J}_{\alpha}(\mathbf{q}')$. U prvom slučaju je strujna vršna funkcija $J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k}) \approx ev_{\alpha}(\mathbf{k})$, a u drugom je $j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}')$.

Da bismo opisali vezanje Nambuovih kvazičestica i vektorskog potencijala u uređenom BCS stanju potrebno je odrediti strukturu pomoćnog operatora gustoće struje (6.3.2) u $\{L\mathbf{k}\}$ reprezentaciji. Koristimo vezu između operatora $c_{l\mathbf{k}}^{\dagger}$ i $c_{L\mathbf{k}}^{\dagger}$, te dobivamo ($\mathbf{k}'' = \mathbf{k} + \mathbf{q}''$)

$$\begin{aligned} \hat{J}_{\alpha}(-\mathbf{q}'') &= \sum_{\mathbf{k}} [J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}''\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}''\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} [J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}''\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} - J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}''\downarrow}^{\dagger}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} [J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}''\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + J_{\alpha}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}'') c_{-\mathbf{k}''\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} [J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) c_{c\mathbf{k}''}^{\dagger} c_{c\mathbf{k}} + J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) c_{\underline{c}\mathbf{k}''}^{\dagger} c_{\underline{c}\mathbf{k}}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) \sum_l c_{l\mathbf{k}''}^{\dagger} c_{l\mathbf{k}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_l J_{\alpha}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) \sum_{LL'} U_{\mathbf{k}''}(l, L') U_{\mathbf{k}}^*(l, L) c_{L\mathbf{k}''}^{\dagger} c_{L\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

⁴Izraz (3.5.1) je upravo takav eksplicitni zapis za H_1^{ext} .

Dakle,

$$\hat{f}_\alpha(-\mathbf{q}'') = \sum_{L'L} \sum_{\mathbf{k}} J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k}) c_{L'\mathbf{k} + \mathbf{q}''}^\dagger c_{L\mathbf{k}}. \quad (6.3.4)$$

U četvrtom redu izraza (6.3.3) koristili smo relaciju $J_\alpha(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}'') = J_\alpha(\mathbf{k}'', \mathbf{k})$, a u izrazu (6.3.4) definirali smo strujnu vršnu funkciju dvovrpčanog sustava,

$$J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) = J_\alpha(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) \sum_l U_{\mathbf{k}''}(l, L') U_{\mathbf{k}}^*(l, L). \quad (6.3.5)$$

Direktnim uvrštavanjem dobivamo

$$\begin{aligned} J_\alpha^{CC}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) &= J_\alpha^{CC}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) = J_\alpha(\mathbf{k}'', \mathbf{k})(u_{\mathbf{k}''} u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}}) = J_\alpha(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) l(\mathbf{k}'', \mathbf{k}), \\ J_\alpha^{CC}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) &= J_\alpha^{CC}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) = J_\alpha(\mathbf{k}'', \mathbf{k})(u_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}''} u_{\mathbf{k}}) = J_\alpha(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) p(\mathbf{k}'', \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (6.3.6)$$

$l(\mathbf{k}'', \mathbf{k})$ i $p(\mathbf{k}'', \mathbf{k})$ su standardni udžbenički BCS koherentni faktori vrste II [25]. Direktnom supstitucijom dobivamo

$$H_1^{ext} = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{L'L} \sum_{\mathbf{k}} J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{L'\mathbf{k} + \mathbf{q}}^\dagger c_{L\mathbf{k}}, \quad (6.3.7)$$

$$\tilde{H}_1^{ext} = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{L'L} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} j_\alpha^{L'L}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}') c_{L'\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}'}. \quad (6.3.8)$$

Ovdje strujne vršne funkcije odgovaraju onima iz izraza (6.4.7) odnosno (6.4.8).

6.4 Mattis-Bardeen model vodljivosti

Da bismo odredili tenzor vodljivosti u uređenom BCS stanju do drugog reda u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ potrebno je proširiti jednadžbe gibanja (5.1.5) i (5.2.4) u jednovrpčanim sustavima u jednadžbe gibanja za sustave s više vrpca. Poopćenje je trivijalno: zamjenjujemo kvantne brojeve \mathbf{k} i \mathbf{k}'' sa $L\mathbf{k}$ i $L'\mathbf{k}''$. Rezultat je

$$\begin{aligned} [\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L(\mathbf{k}) - E_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \langle c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L'\mathbf{k} + \mathbf{q}} \rangle_\omega &= [\langle c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}} \rangle - \langle c_{L'\mathbf{k} + \mathbf{q}}^\dagger c_{L'\mathbf{k} + \mathbf{q}} \rangle] \\ &\times \left(-\frac{1}{c} \right) J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega), \end{aligned} \quad (6.4.1)$$

$$\begin{aligned} [\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L(\mathbf{k}) - E_{L'}(\mathbf{k}')] \langle c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L'\mathbf{k}'} \rangle_\omega &= [\langle c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}} \rangle - \langle c_{L'\mathbf{k}'}^\dagger c_{L'\mathbf{k}'} \rangle] \\ &\times \left(-\frac{1}{c} \right) j_\alpha^{L'L}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') A_\alpha^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (6.4.2)$$

Prva jednadžba gibanja sadrži strujnu vršnu funkciju $J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$, dok druga, koja opisuje doprinos koji je kvadratan u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ sadrži efektivnu strujnu vršnu funkciju

$j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Doprinos nultog reda u induciranoj struji za dvovrpčani sustav dan je relacijom⁵

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{LL'} J_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \langle c_{L\mathbf{k}}^{\dagger} c_{L'\mathbf{k} + \mathbf{q}} \rangle_{\omega}. \quad (6.4.3)$$

S druge strane, kvadratni doprinos opisan je sa

$$j_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{LL'} j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{L\mathbf{k}}^{\dagger} c_{L'\mathbf{k}'} \rangle_{\omega}. \quad (6.4.4)$$

Direktnim uvrštavanjem iz jednadžbi gibanja dobivamo nulti i kvadratni doprinos strujastruja korelacijskoj funkciji. Rezultat je

$$\pi_{\alpha\alpha}^{[0]}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}LL'} |J_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2 \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L(\mathbf{k}) - E_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}, \quad (6.4.5)$$

$$\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{LL'} |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}')}{\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L(\mathbf{k}) - E_{L'}(\mathbf{k}')}. \quad (6.4.6)$$

Ovi doprinosi imaju sličnu strukturu kao i doprinosi za jednovrpčane sustave [izrazi (5.1.7) i (5.2.6)]. Međutim, sada uz unutarvrpčane doprinose tenzoru vodljivosti imamo i međuvrpčane doprinose. U različitim režimima će različiti doprinosi biti značajni. Nepromijenjen ostaje zaključak da u kvadratnom članu možemo stvarati realne parove elektrona i šupljina zahvaljujući relaksaciji impulsa na nečistoćama. U Dodatku D.3 dobiveni su prethodni rezultati, ali u Matsubarinom formalizmu.

Strujne vršne funkcije u $\pi_{\alpha\alpha}^{[0]}(\mathbf{q}, \omega)$ dobivamo pomoću zamjene $\mathbf{q}'' \rightarrow \mathbf{q}$ u (6.3.6),

$$\begin{aligned} J_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})(u_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}v_{\mathbf{k}}) \equiv J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})l(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}), \\ J_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})(u_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}v_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}u_{\mathbf{k}}) \equiv J_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})p(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (6.4.7)$$

Slično, efektivne strujne vršne funkcije iz (6.4.6) su oblika

$$\begin{aligned} j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')(u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}), \\ j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')(u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'} - v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}). \end{aligned} \quad (6.4.8)$$

U dugovalnoj granici ($\mathbf{q} \rightarrow 0$), efektivne strujne vršne funkcije u $\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\mathbf{q}, \omega)$ ostaju nepromijenjene. Strujne vršne funkcije u $\pi_{\alpha\alpha}^{[0]}(\mathbf{q}, \omega)$ možemo izvrijediti. Rezultat je

$$\begin{aligned} J_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k}) &\approx J_{\alpha}(\mathbf{k}), \\ J_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}) &\propto (u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}) = 0. \end{aligned} \quad (6.4.9)$$

To znači da međuvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti, $\sigma_{\alpha\alpha}^{[0]}(\mathbf{q}, \omega)$, iščezava, a unutarvrpčani doprinos će biti važan samo ako smo na dovoljno visokim temperaturama, jer

⁵Primijetimo da i u jednovrpčanom slučaju (Poglavlje 5) i u dvovrpčanom slučaju za inducirane struje i korelacijske funkcije koristimo iste oznake.

je taj doprinos proporcionalan broju termalno aktiviranih nosioca naboja. Stoga možemo zaključiti da u režimu $T \approx 0$, za $\omega \neq 0$, vodeći član u tenzoru vodljivosti potječe od $|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2$ doprinosa,

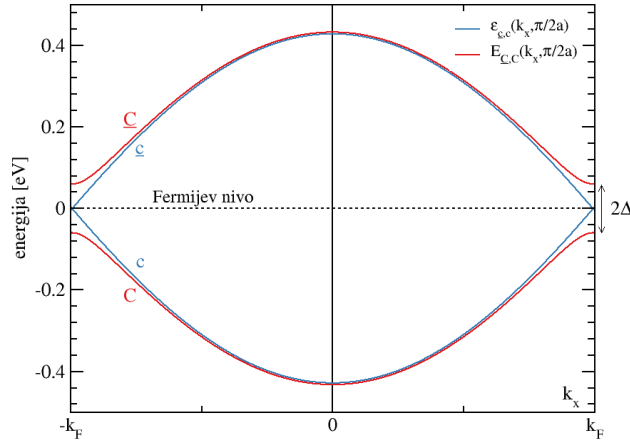
$$\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) \approx \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'LL'} |j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 c_{LL'}^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}')}{\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L(\mathbf{k}) - E_{L'}(\mathbf{k}')}. \quad (6.4.10)$$

Da bismo skratili zapis ovdje smo uveli oznaku $c_{LL'}^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ za dvije vrste koherentnih faktora vrste II,

$$c_{LL'}^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left| \frac{j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} \right|^2 \in \{l^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), p^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\}. \quad (6.4.11)$$

6.4.1 Vodljivost u BCS supravodičima s simetrije u visokoenergetskom režimu

Iako je analiza u ovom poglavlju bila općenita, sada ćemo se ograničiti na slučaj parametra uređenja s simetrije gdje je $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta$. U tom slučaju kvazičestična disperzija prikazana je na Slici 6.1.



Slika 6.1: Disperzije Nambuovih kvazičestica uzduž linije $(-k_F, \pi/2a)-(k_F, \pi/2a)$ za $T > T_c$ (vrpce označene sa c i \underline{c}) i $T < T_c$ (vrpce C i \underline{C}). Zbog ilustrativnosti izbor parametra procjepa je $\Delta = 0.06$ eV.

Iz Bogoljubovljevih transformacija BCS hamiltonijana, dobili smo da je (Dodatak D.1)

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right), \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right). \quad (6.4.12)$$

Primijetimo da oba elementa ovise o \mathbf{k} preko $\varepsilon(\mathbf{k})$. Množenje izraza (6.4.10) s identitetom

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \delta(\varepsilon' - \varepsilon(\mathbf{k}')), \quad (6.4.13)$$

omogućava nam značajno pojednostavljenje notacije. Koherentni faktori sada postaju

$$\begin{aligned}
p^2(\varepsilon, \varepsilon') &= (uv' - vu')^2 = \frac{1}{4} \left[\left(1 + \frac{\varepsilon}{E}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\varepsilon'}{E'}\right)^{\frac{1}{2}} - \left(1 - \frac{\varepsilon}{E}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\varepsilon'}{E'}\right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 \\
&= \frac{1}{4} \left[2\left(1 - \frac{\varepsilon\varepsilon'}{EE'}\right) - 2\left(1 - \frac{\varepsilon^2}{E^2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\varepsilon'^2}{E'^2}\right)^{\frac{1}{2}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon\varepsilon' + \Delta\Delta'}{EE'}\right),
\end{aligned} \tag{6.4.14}$$

gdje je $E = \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}$ i $E' = \sqrt{\varepsilon'^2 - \Delta'^2}$. Slično dobivamo

$$l^2(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon\varepsilon' + \Delta\Delta'}{EE'}\right). \tag{6.4.15}$$

Tenzor vodljivosti je dan relacijom $\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = (i/\omega)\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$, što vodi do

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) = \frac{2i}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') L_{\Delta}(\omega, \varepsilon, \varepsilon'). \tag{6.4.16}$$

Ovdje smo podintegralnu funkciju faktorizirali na

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})) \delta(\varepsilon' - \varepsilon(\mathbf{k}')), \\
L_{\Delta}(\omega, \varepsilon, \varepsilon') &= \sum_{LL'} \frac{c_{LL'}^2(\varepsilon, \varepsilon')}{2} \frac{f(E_L) - f(E_{L'})}{\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L - E_{L'}}.
\end{aligned} \tag{6.4.17}$$

Izraz (6.4.16) je rezultat za jednočestičnu $\omega \neq 0$ vodljivost u BCS supravodičima s simetrije. On ovisi o dva faktora. Prvi faktor, $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, sadrži informaciju o grupnoj brzini elektrona i o matričnom elementu raspršenja $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. On u potpunosti opisuje normalno stanje i ne ovisi o procjepu Δ . Njega možemo jednostavno aproksimirati: budući da su jednočestična pobuđenja značajna samo u blizini Fermijeve plohe, $\Delta \sim |\varepsilon - \varepsilon'| \ll (\hbar/\tau)$, vrijedi $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx D^2(E_F) \langle\langle (1/V) |j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \rangle\rangle_{FP}$ (ovdje je $D(E)$ gustoća stanja). Drugi faktor, $L_{\Delta}(\omega, \varepsilon, \varepsilon')$, opisuje efekte supravodljivog uređenja. Za $T \approx 0$ unutarvrpčani doprinos iščezava, dok međuvrpčani doprinos možemo prevesti na oblik

$$L_{\Delta}(\omega, \varepsilon, \varepsilon') = \frac{p^2(\varepsilon, \varepsilon')}{2} \left(\frac{1 - 2f(E')}{\hbar\omega + i\hbar\eta + E + E'} + \frac{1 - 2f(E)}{\hbar\omega + i\hbar\eta - E - E'} \right). \tag{6.4.18}$$

U slučaju $T \approx 0$ nemamo apsorpcije za $\hbar\omega < \Delta$, te vrijedi $f(E) = f(E') = 0$. Stoga realni dio vodljivosti zapisujemo kao

$$\begin{aligned}
\sigma_{1,s}(\omega) &= \frac{2\pi}{\omega} D^2(E_F) \langle\langle (1/V) |j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \rangle\rangle_{FP} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{p^2(\varepsilon, \varepsilon')}{2} \\
&\quad \times (\delta_{\hbar\omega, E+E'} + \delta_{\hbar\omega, -E-E'}).
\end{aligned} \tag{6.4.19}$$

Ovdje δ -funkcije dolaze iz izraza (6.4.18). Prelaskom na varijablu integracije E i E' dobivamo

$$\begin{aligned} \sigma_{1,s}(\omega) = & \frac{\pi}{\omega} D^2(E_F) \langle \langle (1/V) |j_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \rangle \rangle_{FP} \int_{\Delta}^{\infty} dE \frac{E \theta(E^2 - \Delta^2)}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \\ & \times \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{E' \theta(E'^2 - \Delta^2)}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2}} \left(1 - \frac{\Delta \Delta'}{EE'}\right) (\delta_{\hbar\omega, E+E'} + \delta_{\hbar\omega, -E-E'}). \end{aligned} \quad (6.4.20)$$

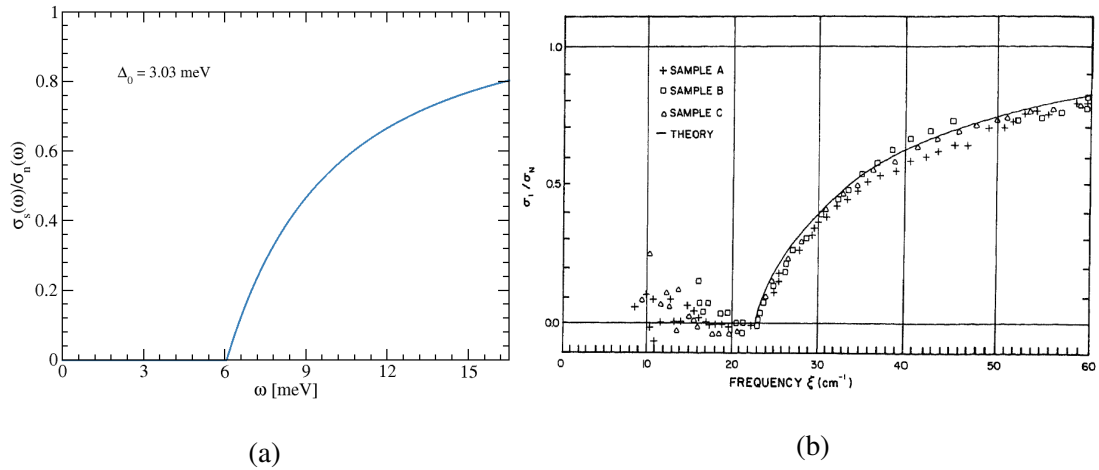
Ovdje smo u koherentnom faktoru $p^2(\varepsilon, \varepsilon')$ izostavili član sa $\varepsilon\varepsilon'$, jer on zbog parnosti iščezava nakon integracije u izrazu (6.4.19). U gornjem izrazu prva δ -funkcija daje uvjet $E' = \hbar\omega - E$, a θ -funkcija $\hbar\omega - \Delta > E$. To odgovara pobuđenju dviju kvazičestica energija E i E' . Druga δ -funkcija ne daje fizikalni rezultat. Za realni dio supravodljivosti konačno dobivamo

$$\sigma_{1,s}(\omega) = \frac{\pi}{\omega} D^2(E_F) \langle \langle (1/V) |j_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \rangle \rangle_{FP} \int_{\Delta}^{\hbar\omega - \Delta} dE \frac{E(\hbar\omega - E) - \Delta^2}{\sqrt{E^2 - \Delta^2} \sqrt{(\hbar\omega - E)^2 - \Delta^2}}. \quad (6.4.21)$$

U normalnom stanju vrijedi $\Delta = 0$, pa je omjer visokoenergetske dinamičke vodljivosti u normalnom i supravodljivom stanju s simetrije

$$\frac{\sigma_{1,s}(\omega)}{\sigma_{1,n}(\omega)} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{\Delta}^{\hbar\omega - \Delta} dE \frac{E(\hbar\omega - E) - \Delta^2}{\sqrt{E^2 - \Delta^2} \sqrt{(\hbar\omega - E)^2 - \Delta^2}}. \quad (6.4.22)$$

Ovaj rezultat prikazan je na Slici 6.2. U slučaju $T \neq 0$, Fermi-Diracove funkcije raspodjele neće biti nula te ćemo imati kvazičestična pobuđenja i za $\hbar\omega < \Delta$.



Slika 6.2: (a) Mattis-Bardeenov rezultat (6.4.22) za $\Delta = 3.03$ meV. Rezultat je dobiven zapisom izraza (6.4.22) preko potpunih eliptičkih integrala $E(\alpha)$ i $K(\alpha)$, gdje je $\alpha = (\omega - 2\Delta)/(\omega + 2\Delta)$ [12]. Primijetimo kako kvazičestična pobuđenja nemamo sve do $\omega = 2\Delta = 6.06$ meV, jer moramo stvoriti dvije kvazičestice. (b) Apsorpcija supravodljivog olova na $T = 2$ K. Puna linija je Mattis-Bardeenov rezultat, dok su točke eksperimentalne vrijednosti. [12, 26]

Poglavlje 7

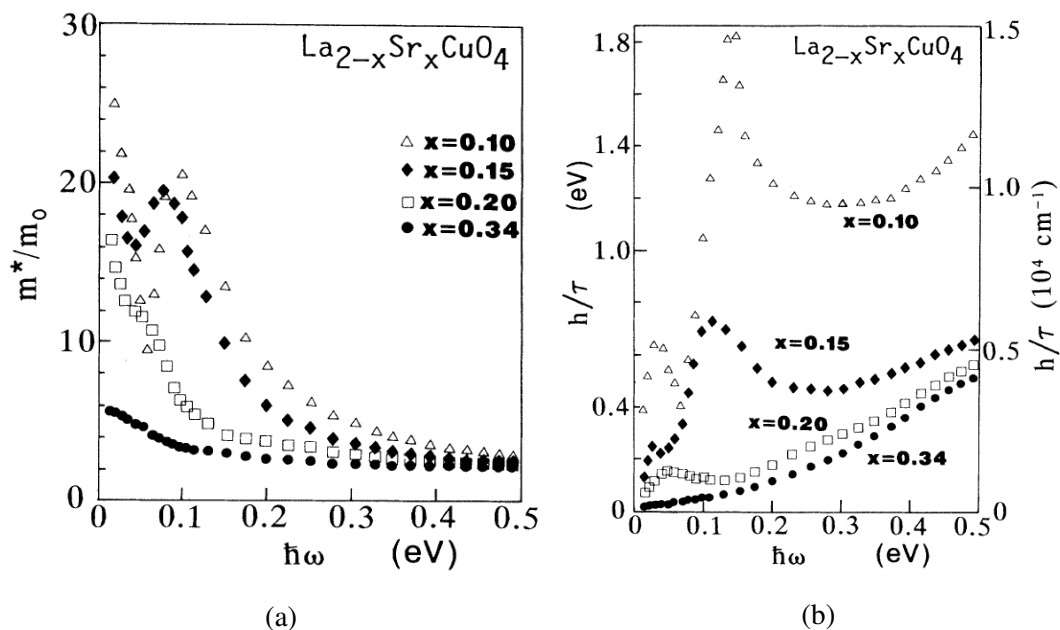
Naddopirani kuprati

U potpoglavlju 1.2 saželi smo eksperimentalne rezultate elektrodinamičkih svojstava supravodljivih kuprata. Uzimajući antiferomagnetsku fazu kao ishodišnu, mijenjajući temperaturu i dopiranje dobivamo četiri različite faze [Slika 1.1(b)]: (i) Fermijeva tekućina (desno od naddopiranog supravodljivo uređenog stanja) čije je glavno svojstvo puna Fermijeva ploha [Slike 1.6(e,f) i 1.8] (ii) usko područje iznad optimalno dopiranog supravodljivo uređenog stanja koje karakterizira otpornost proporcionalna sa T [Slika 1.3(b)] (iii) faza s AFM pseudoprocjepom koju karakterizira sužavanje Fermijevih lukova sa smanjivanjem dopiranja od $\delta \approx 0.15$ do $\delta \approx 0.05$ i sa snižavanjem temperature od T^* do T_c [Slike 1.5(b) i 1.6(a,b,f)] (iv) supravodljivo uređeno stanje koje karakterizira parametar uređenja $d_{x^2-y^2}$ simetrije [Slike 1.5(b), 7.2].

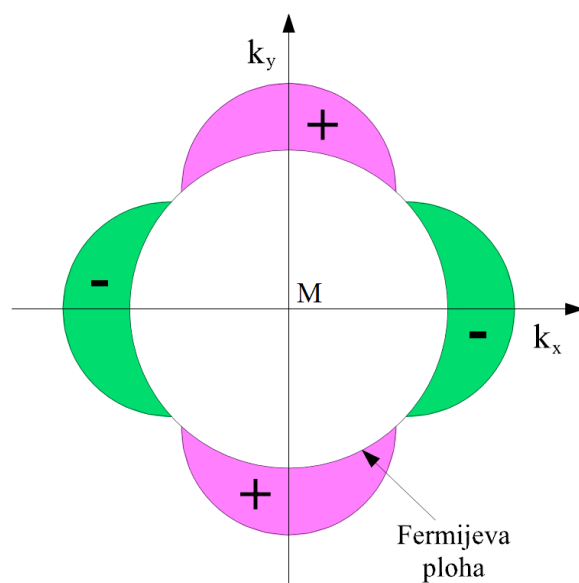
U ovom poglavlju ćemo opisati osnovne karakteristike supravodljivo uređenog stanje naddopiranih kuprata te istražiti u kojoj mjeri možemo u opisu tog dijela faznog dijagrama koristiti rezultate prethodnog poglavlja, tj. što treba učiniti da izraze za dinamičku vodljivost iz prethodnih poglavlja prevedemo u formu prikladnu za analizu naddopiranih kuprata.

7.1 Supravodljivo uređeno stanje naddopiranih kuprata

U naddopiranim kupratima razlikujemo temperaturne režime $T > T_c$ i $T < T_c$. Obični Drudeov model ne može objasniti vodljivost ni za $T > T_c$ niti za $T < T_c$. U prvom slučaju vodljivost ovisi o frekvenciji na način $\omega^{-\nu}$, gdje je $\nu < 2$ [Slika 1.2(b)], dok u drugom slučaju imamo značajnu redistribuciju spektralne težine na energijama manjima od $2\Delta(\mathbf{k})$ [Slika 1.4(b)]. U oba temperaturna režima imamo smanjenje efektivnog broja nosioca naboja s obzirom na nominalnu koncentraciju elektrona n [Slika 1.5(a)].



Slika 7.1: (a) Ovisnost efektivne mase elektrona o frekvenciji (b) Ovisnost relaksacijske funkcije o frekvenciji u $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ porodici kuprata [2]. Oba mjerenja su izvršena na sobnoj temperaturi.



Slika 7.2: Shematski prikaz parametra uređenja $d_{x^2-y^2}$ simetrije na kružnoj Fermijevoj plohi centriranoj oko točke $M = (\pi/a, \pi/a)$. Parametra uređenja je nula na $(\pm k_F, \pm k_F)$, gdje mijenja predznak. Eksperimentalna Fermijeva ploha prikazana je na Slici 1.8.

Na Slici 7.1(a) je prikazana ovisnost efektivne mase elektrona $m_{\alpha\alpha}^{eff}(\omega)$ u generaliziranom Drudeovom modelu o ω . Ona neovisno o dopiranju saturira na $m_{\alpha\alpha}^{eff} \approx 2m$.

To odgovara ukupnom broju nositelja naboja $n_{\alpha\alpha}^{eff} \approx 0.5$ u unutarvrpčanoj vodljivosti. S druge strane, $m_{\alpha\alpha}^{eff}(\omega = 0) \approx 5m$ u naddopiranom režimu govori da je $n_{\alpha\alpha}^{eff} \approx n/5$ efektivan broj nositelja naboja u Drudeovoj unutarvrpčanoj vodljivosti te da se smanjenje s dopiranjem približno na način $n_{\alpha\alpha}^{eff} \propto \delta$. Ti eksperimentalni rezultati govore da relaksacijska funkcija $\Gamma_{\alpha}(\omega)$ ovisi o frekvenciji, te da u analizi moramo koristiti barem jednokomponentni generalizirani Drudeov model¹ [izraz (4.5.4)]. Na Slici 7.1(b) vidimo da je ovisnost relaksacijske funkcije o ω neuobičajena za sva dopiranja osim za ona koja odgovaraju naddopiranom režimu. U tom slučaju je $\Gamma_{\alpha}(\omega) \propto \omega^2$, što je tipično za Fermijeve tekućine. To je konzistentno s oblikom Fermijeve plohe u naddopiranim kupratima prikazanim na Slici 1.8. Budući da je Fermijeva ploha zatvorena, te je gušenje $\hbar/\tau(\omega)$ razmjerno malo za $\hbar\omega < 100$ meV, moguće je prilagoditi običnu BCS teoriju za studiranje supravodljivog stanja naddopiranih kuprata. Tu nema nastanka AFM pseudoprocjepa i efekti redistribucije spektralne težine u $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ vide se tek na temperaturama blizu T_c (i ispod T_c -a). Mattis-Bardeenov rezultat (6.4.22) iz prethodnog poglavlja opisuje standardne supravodiče (Slika 6.2) sa supravodljivim parametrom uređenja s simetrije. Kod naddopiranih kuprata parametar uređenja ima $d_{x^2-y^2}$ simetriju što omogućava kvazičestična pobuđenja sve do $\omega = 0$ [pobuđenja za $\hbar\omega < 100$ meV na Slici 1.4(b)]. To znači da pretpostavka iz potpoglavlja 6.4.1 da je $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta$ ovdje ne vrijedi, te se moramo vratiti na opći izraz (6.4.10) koji opisuje vodeći član u tenzoru vodljivosti,

$$\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega) \approx \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |j_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 c_{LL'}^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}')}{\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L(\mathbf{k}) - E_{L'}(\mathbf{k}')}, \quad (7.1.1)$$

te naći način kako tu sumaciju po potencijama od $(H'_1)^2$ proširiti do beskonačnosti.

7.2 Jednadžba samosuglasnosti za parametar uređenja $d_{x^2-y^2}$ simetrije

U primjeru u Dodatku D.3.1 je pokazano kako BCS jednadžba samosuglasnosti (6.2.4) uz odabir privlačne interakcije koja ne ovisi o valnom vektoru ($V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_0 < 0$) vodi do parametra uređenja s simetrije ($\Delta(\mathbf{k}) = \Delta$). Kako bismo riješili BCS jednadžbu samosuglasnosti u općenitom slučaju, možemo pretpostaviti da je $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \lambda W(\mathbf{k})W(\mathbf{k}')$. Parametar uređenja je sada $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta W(\mathbf{k})$.

Najjednostavniji slučaj koji opisuje parametar uređenja $d_{x^2-y^2}$ simetrije je $W(\mathbf{k}) = \cos(k_x a) - \cos(k_y a)$, tj.

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_1 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)] [\cos(k'_x a) - \cos(k'_y a)], \quad (7.2.1)$$

¹Primijetimo da su veličine iz Poglavlja 4, $n_{\alpha\alpha}^{eff} = n_{\alpha\alpha}^{eff}/[1 + \lambda_{\alpha}(\omega)]$, $\Gamma_{\alpha}(\omega) = \tilde{\Gamma}_{\alpha}(\omega)[1 + \lambda_{\alpha}(\omega)]$ i $m_{\alpha\alpha}^{eff(\omega)} = [1 + \lambda_{\alpha}(\omega)]m_{\alpha\alpha}$ ekvivalentni načini za razmatranje efekata parametra $\lambda_{\alpha}(\omega)$.

što vodi do

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)], \quad (7.2.2)$$

te do jednadžbe samosuglasnosti (D.3.5),

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} W^2(\mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \frac{1 - 2f_C(\mathbf{k}')}{E(\mathbf{k}')}. \quad (7.2.3)$$

Rješenje jednadžbe će biti nešto složenije od rješenja prikazanog na Slici D.1.

7.3 Dinamička vodljivost u supravodljivom uređenom stanju naddopiranih kuprata

Ovaj diplomski rad se bavi razjašnjavanjem svih elemenata koji su potrebni da bismo razumijeli dinamičku vodljivost BCS supravodiča s simetrije na temperaturama iznad i ispod T_c . Rezultati su standardni izrazi (4.5.2) za $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ pri temperaturama $T > T_c$, te (6.4.21) za $\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)\}$ pri temperaturama $T < T_c$. U naddopiranim kupratima izraz (4.5.2) je i dalje valjan, te se račun vodljivosti $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ svodi na račun memorijske funkcije $M_\alpha(\mathbf{k}, \omega)$ što može biti prilično složeno, čak i u naddopiranom režimu (jer je $m_{\alpha\alpha}^{eff}(\omega = 0) \approx 5m$). No, da bismo dobili kvantitativni opis $\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)\}$ za $T < T_c$ potrebno je izračunati $\pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\omega)$ za \mathbf{k} ovisan parametar uređenja, numerički riješiti dobivene sume po \mathbf{k} i \mathbf{k}' , te potom načiniti resumaciju doprinosa u $\pi_{\alpha\alpha}(\omega)$ po potencijama od $(H_1')^2$ do beskonačnosti. To je potrebno učiniti zbog toga što sada prag za stvaranje jednočestičnih pobuđenja nije više 2Δ , nego ovisi o valnom vektoru \mathbf{k} na način $2\Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$ i u tom slučaju nije moguće načiniti standardna pojednostavljenja iz Mattis-Bardeen analize (potpoglavlje 6.4). Taj problem je vrlo složen i ostavljamo ga za buduća istraživanja. Potpuno analogno može se istražiti i ovisnost mikrovalne vodljivosti i elektronskih Ramanovih spektara o simetriji parametra supravodljivog uređenja.

Zaključak

U ovom radu smo temeljito istražili osnovne elemente potrebne za razumijevanje dinamičke vodljivosti BCS supravodiča s simetrije, te predložili način poopćenja Mattis-Bardeenove analize u slučaju s parametrom uređenja koji ovisi o valnom vektoru, ilustriravši to na primjeru naddopiranih kuprata.

Izveli smo izraze za električnu vodljivost u Drudeovom i Boltzmannovom formalizmu. Potom smo u aproksimaciji čvrste veze istražili vezanje vodljivih elektrona s elektromagnetskim poljem. Rezultat te analize su izrazi za vršne funkcije $J_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ i $\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$. Pokazali smo da u dugovalnoj granici ($\mathbf{q} \rightarrow 0$) te vršne funkcije možemo izraziti pomoću derivacija disperzije elektrona po komponentama valnog vektora.

Za baždarenje preko skalarnog potencijala uvjerali smo se kako je fenomenološko uključivanje relaksacijskih procesa ($i\eta \rightarrow i\Gamma$) u izraz za vodljivost (4.3.19) konzistentno s jednadžbom kontinuiteta. Međutim, kako relaksacijska funkcija u jako koreliranim sustavima ovisi o frekvenciji i valnom vektoru, fenomenološki smo uveli memorijsku funkciju $M_\alpha(\mathbf{k}, \omega)$ definiranu kao vlastitu energiju elektron-šupljina para. Pomoću nje smo formulirali generaliziranu Drudeovu formulu (4.5.2) koja dobro opisuje obične metale i naddopirane kuprate za $T > T_c$.

Za baždarenje preko vektorskog potencijala uključili smo raspršenje na statičkom neredu preko efektivnog vezanja vodljivih elektrona i polja $A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}, t)$ na način kako se to obično radi u Mattis-Bardeenovoj analizi normalnog stanja BCS supravodiča. Novi element tog pristupa je efektivna strujna vršna funkcija $j_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Odredili smo doprinos memorijskoj funkciji koji je kvadratan u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ [izraz (5.2.12)].

Jednadžbe gibanja operatora gustoće u normalnom stanju na prirodan su način proširene na uređeno BCS stanje koristeći u Nambuovu reprezentaciju. Struktura jednadžbi gibanja ostaje ista, i one daju nulti i kvadratni doprinos u struja-struja korelacijskoj funkciji. Zaključak je da u režimu $T \approx 0 < T_c$ vodeći član u tenzoru vodljivosti potječe od $|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2$ međuvrpanih doprinosa [izraz (6.4.10)]. Taj rezultat je općenit. Specijalno, za $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta$ reproducirali smo Mattis-Bardeenov rezultat (6.4.21). On vrijedi za supravodiče s simetrije i zabranjuje kvazičestična pobuđenja sve do $\hbar\omega = 2\Delta$. Na kraju kratko raspravljamo složeni problem kvantitativnog opisa dinamičke vodljivosti naddopiranih kuprata u režimu $T < T_c$, u kojima supravodljivi parametar uređenja ima $d_{x^2-y^2}$ simetriju.

Dodatak A

Izvodi nekih važnih relacija

A.1 Linearizirana samosuglasna Boltzmanova jednačnja

Derivacije funkcije raspodjele (2.2.11) po tri varijable su oblika

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} &= -i\omega g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}, \\ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} &= i\mathbf{q}g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}, \\ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} &= \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial g(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i\omega t},\end{aligned}\tag{A.1.1}$$

gdje derivacije po \mathbf{k} pišemo na način

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{p}} &= \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \\ \frac{\partial g(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{p}} &= \sum_{\beta} \frac{\partial v_{\beta}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial g(\mathbf{k})}{\partial v_{\beta}(\mathbf{k})}.\end{aligned}\tag{A.1.2}$$

Ovdje je $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \partial \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial \mathbf{p}$ grupna brzina elektrona. Uvrštavajući gornje elemente u Boltzmannovu jednačnju (2.2.9), dobivamo

$$\begin{aligned}i[\omega - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) + i\Gamma(\mathbf{k})]g(\mathbf{k}) &= q\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} + \sum_{\alpha\beta} \frac{q}{m_{\alpha\beta}(\mathbf{k})} E_{\beta} \frac{\partial g(\mathbf{k})}{\partial v_{\alpha}(\mathbf{k})} + \\ &+ \frac{q}{c} (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} + \sum_{\alpha\beta} \frac{q}{cm_{\alpha\beta}(\mathbf{k})} (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H})_{\alpha} \frac{\partial g(\mathbf{k})}{\partial v_{\beta}(\mathbf{k})}.\end{aligned}\tag{A.1.3}$$

Ovdje je $1/m_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \partial^2 \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}$ tenzor recipročne efektivne mase. Treći član na desnoj strani jednačnje (A.1.3) iščezava, jer je $(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) = 0$ po definiciji. Drugi član je parna funkcija od k_{α} , pa će njegov doprinos u induciranoj struji biti nula. Zapisom preostalih članova po komponentama, dobivamo

$$\begin{aligned}i[\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) + i\Gamma(\mathbf{k})]g(\mathbf{k}) &= \sum_{\alpha} qE_{\alpha} v_{\alpha}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} + \\ &+ \sum_{\alpha\beta} \frac{q}{cm_{\alpha\beta}(\mathbf{k})} (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H})_{\alpha} \frac{\partial g(\mathbf{k})}{\partial v_{\beta}(\mathbf{k})}.\end{aligned}\tag{A.1.4}$$

A.2 "Parcijalna integracija" efektivne koncentracije vodljivih elektrona

Izraz (2.3.6) za efektivnu koncentraciju elektrona možemo zapisati na način

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = -\frac{m}{\hbar^2} \sum_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}} \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}}. \quad (\text{A.2.1})$$

Očigledno vrijedi

$$\frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} \left\{ \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}} f_0(\mathbf{k}) \right\} = \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}^2} f_0(\mathbf{k}) + \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}} \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}}, \quad (\text{A.2.2})$$

što vodi do

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \sum_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{m}{\hbar^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial k_{\alpha}} \left[-\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}} f_0(\mathbf{k}) \right] + \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}^2} f_0(\mathbf{k}) \right\}. \quad (\text{A.2.3})$$

Za određivanje prvog člana u vitičastoj zagradi koristimo se trikom. Naime, za konačni \mathbf{q} , izraz (A.2.1) možemo zapisati kao

$$n_{\alpha\alpha}^{eff}(\mathbf{q}) = \lim_{q_{\alpha} \rightarrow 0} \frac{-m}{\hbar} \sum_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}} \frac{f_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - f_0(\mathbf{q})}{q_{\alpha}}. \quad (\text{A.2.4})$$

Ako u prvom pribrojniku podintegralne funkcije izvršimo zamjenu $\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}$, dobivamo

$$\begin{aligned} n_{\alpha\alpha}^{eff} &= \lim_{q_{\alpha} \rightarrow 0} \frac{-m}{\hbar} \sum_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \left[\frac{v_{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) f_0(\mathbf{k})}{q_{\alpha}} - \frac{v_{\alpha}(\mathbf{k}) f_0(\mathbf{k})}{q_{\alpha}} \right] \\ &= \lim_{q_{\alpha} \rightarrow 0} \frac{m}{\hbar} \sum_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} f_0(\mathbf{k}) \frac{v_{\alpha}(\mathbf{k}) - v_{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{q_{\alpha}} \\ &= \sum_{\sigma} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}^2} f_0(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (\text{A.2.5})$$

što znači da prvi član izraza (A.2.3) iščezava. Koristeći definiciju tenzora recipročne efektivne mase $\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = m \partial^2 \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial p_{\alpha} \partial p_{\beta}$, dobivamo izraz (2.3.7).

Primjećujemo da u 1D slučaju izraz (A.2.3) predstavlja rezultat standardne parcijalne integracije po k_{α} .

A.3 Susceptibilnost u aproksimaciji nasumičnih faza

U $T = 0$ formalizmu, zasjenjena dielektrična susceptibilnost (zasjenjena naboj-naboj korelacijska funkcija) definirana je na način [23]

$$\chi(\mathbf{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \frac{1}{V} \langle [\hat{\rho}(\mathbf{q}, t), \hat{\rho}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle, \quad (\text{A.3.1})$$

gdje je $\hat{\rho}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} e c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}$ operator gustoće naboja elektronskog podsustava, (3.5.5). Radi jednostavnosti, susceptibilnost zapisujemo kao $\chi(\mathbf{q}, t) = (1/V) \sum_{\mathbf{k}\sigma} e \chi(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$, gdje je

$$\chi(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})_t, \hat{\rho}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle. \quad (\text{A.3.2})$$

Ovdje, kao i u glavnom tekstu, podskript t označava zapis operatora u Heisenbergovoj slici $\hat{A}_t = e^{iHt/\hbar} \hat{A} e^{-iHt/\hbar}$.

Jedan način da odredimo $\chi(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t)$ je da promotrimo odgovarajuću jednadžbu gibanja. Kada kombiniramo tu jednadžbu s jednadžbom gibanja za operator $(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})_t$, izraz (4.3.1), dobivamo

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t) &= \delta(t) \langle [(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})_t, \hat{\rho}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, H)_t, \hat{\rho}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.3.3})$$

Gornju jednadžbu gibanja rješavamo računajući komutatore. Koristeći relacije $[c_1 c_2, c_3] = c_1 [c_2, c_3] + [c_1, c_3] c_2$ i $[c_1^\dagger c_2, c_3^\dagger c_4] = \delta_{23} c_1^\dagger c_4 - \delta_{14} c_3^\dagger c_2$ dobivamo

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \hat{\rho}(-\mathbf{q})] &= \sum_{\mathbf{k}'} [c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}] = \sum_{\mathbf{k}'} (\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \\ &= c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (\text{A.3.4})$$

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, H_0] &= \sum_{\mathbf{k}'} \varepsilon(\mathbf{k}') [c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'}] = -\sum_{\mathbf{k}'} \varepsilon(\mathbf{k}') (\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'}) \\ &= -[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})] c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (\text{A.3.5})$$

$$\begin{aligned}
\left[H_{int}, c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right] &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} \left[c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''}, c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} \left\{ c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \left[c_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''}, c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right] + \left[c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right] c_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''} \right\} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \left(\delta_{\mathbf{k}'',\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \delta_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''} \right) \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}''\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} \sum_{\mathbf{k}'} \left(\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \right) c_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} \left\{ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'} \right. \\
&\quad \left. - c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \right\}. \tag{A.3.6}
\end{aligned}$$

Uvrštavanjem gornja tri komutatora u jednadžbu gibanja (A.3.3) dobivamo šestoročestične članove u susceptibilnosti. Stoga koristimo aproksimaciju nasumičnih faza, koja je aproksimacija srednjeg polja u kojoj parove u dvočestičnim članovima izraza (A.3.6) zamjenjujemo njihovim prosječnim vrijednostima (bilješka na str. 42)

$$\begin{aligned}
\left[H_{int}, c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right] &\approx -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}' \neq 0} v_{\mathbf{q}'} \left[c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \right. \\
&\quad + \langle c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} + c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \rangle \\
&\quad - c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \rangle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \\
&\quad \left. - c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \rangle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + konst. \right]. \tag{A.3.7}
\end{aligned}$$

Koristeći relaciju $\langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} f(\mathbf{k})$, gdje je $f(\mathbf{k})$ ponovo Fermi-Diracova raspodjela, dobivamo da su drugi i treći član jednaki, kao i peti i osmi. Ostali članovi su nula. Stoga vrijedi

$$\left[H_{int}, c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right] \approx \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} v_{\mathbf{q}} \left[f(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - f(\mathbf{k}) \right] c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'}. \tag{A.3.8}$$

Uvrštavajući komutatore (A.3.4), (A.3.5) i (A.3.8) u jednadžbu gibanja (A.3.3), te prelaskom u inverzni prostor, dobivamo

$$(\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})) \chi(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = (f(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - f(\mathbf{k})) \left(1 + v_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \chi(\mathbf{k}', \mathbf{q}, \omega) \right). \tag{A.3.9}$$

Sumirajući po \mathbf{k} i po spinu dolazimo do jednadžbe za $\chi(\mathbf{q}, \omega)$

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \chi(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{f(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - f(\mathbf{k})}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})} (1 + v_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}, \omega)), \tag{A.3.10}$$

čije je rješenje

$$\chi^{RPA}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - v_{\mathbf{q}}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (\text{A.3.11})$$

Ovdje $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ označava neinteragirajuću susceptibilnost elektrona,

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{f(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - f(\mathbf{k})}{\hbar\omega + i\hbar\eta + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})}. \quad (\text{A.3.12})$$

A.4 Općenite Kubo formule

Kako bismo izveli općenite Kubo formule, prvo moramo izvesti jednu važnu relaciju. Parcijalno ćemo integrirati

$$\omega \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega} = -i\omega \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-\eta t} \langle [A_t, B_0] \rangle. \quad (\text{A.4.1})$$

Ovdje su A_t i B_0 operatori zapisani u Heisenbergovoj slici u vremenu t i u $t = 0$. Koristeći standardni izraz $\partial_t A_t = (1/i\hbar)[A, H]$, nakon integracije dobivamo

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega} &= -i \left\{ \frac{\omega}{i\omega - \eta} e^{(i\omega - \eta)t} \langle [A_t, B] \rangle \Big|_0^{\infty} - \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt \frac{\omega}{i\omega - \eta} e^{(i\omega - \eta)t} \langle [A, H], B \rangle \right\} \\ &= -i \left\{ -\frac{\omega}{i\omega - \eta} \langle [A, B] \rangle - \frac{1}{i\hbar} \frac{\omega}{i\omega - \eta} \int_0^{\infty} dt e^{(i\omega - \eta)t} \langle [A, H], B \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.4.2})$$

Puštajući adijabatski parametar η u nulu, te koristeći (A.4.1), konačno dobivamo

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega} &= \langle [A, B] \rangle + \frac{1}{\hbar} \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle_{\omega} \\ &= \langle [A, B] \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle \langle A; [B, H] \rangle \rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (\text{A.4.3})$$

Ovdje drugi red vrijedi zbog mogućnosti pomicanja vremenske varijable t unazad.

U našem slučaju, izraz (4.2.1), imamo

$$V\pi_{\mu\mu}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t - \eta t} \langle [\hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}, t), \hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle_{ired} = \langle \langle \hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}); \hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\omega}^{ired}. \quad (\text{A.4.4})$$

Koristeći prvi red izraza (A.4.3), za gornju korelacijsku funkciju dobivamo

$$\omega \langle \langle \hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}); \hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\omega}^{ired} = \langle [\hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}), \hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q})] \rangle + \frac{1}{\hbar} \langle \langle [\hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}), H]; \hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\omega}^{ired}. \quad (\text{A.4.5})$$

S druge strane, koristeći drugi red izraza (A.4.3) za drugi pribrojnik gornjeg izraza, dobivamo

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle [\hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}), H]; \hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\omega}^{ired} &= \langle [[\hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}), H], \hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q})] \rangle \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \langle \langle [\hat{J}_{\mu}(\mathbf{q}), H]; [\hat{J}_{\mu}(-\mathbf{q}), H] \rangle \rangle_{\omega}^{ired}. \end{aligned} \quad (\text{A.4.6})$$

Ovdje za $\omega = 0$ očito vrijedi

$$\langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), H], \hat{J}_\mu(-\mathbf{q}) \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), H]; [\hat{J}_\mu(-\mathbf{q}), H] \rangle \rangle_{\omega=0}^{ired}. \quad (\text{A.4.7})$$

Budući da je $\langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), \hat{J}_\mu(-\mathbf{q})] \rangle = 0$, konačno dobivamo

$$\begin{aligned} V\pi_{\mu\mu}(\mathbf{q}, \omega) &= \langle \langle \hat{J}_\mu(\mathbf{q}); \hat{J}_\mu(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\omega}^{ired} = \frac{1}{\omega} \langle \langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), H]; \hat{J}_\mu(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\omega}^{ired} \\ &= -\frac{1}{(\hbar\omega)^2} \left[\langle \langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), H]; [\hat{J}_\mu(-\mathbf{q}), H] \rangle \rangle_{\omega}^{ired} - \langle \langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), H]; [\hat{J}_\mu(-\mathbf{q}), H] \rangle \rangle_{\omega=0}^{ired} \right] \\ &= -\frac{1}{(\hbar\omega)^2} [\Phi_{\mu\mu}(\omega) - \Phi_{\mu\mu}(0)]. \end{aligned} \quad (\text{A.4.8})$$

Ovdje smo definirali

$$\Phi_{\mu\mu}(\omega) = \langle \langle [\hat{J}_\mu(\mathbf{q}), H]; [\hat{J}_\mu(-\mathbf{q}), H] \rangle \rangle_{\omega}^{ired}. \quad (\text{A.4.9})$$

Dodatak B

Vežanje vodljivih elektrona i elektromagnetskog polja

B.1 Vežanje s vektorskim potencijalom

Počinjemo od neinteragirajućeg hamiltonijana (3.4.2). Minimalnom supstitucijom (3.4.5) dobivamo

$$\tilde{H}_0 = -t \sum_{n\sigma} \sum_{j=1}^4 c_{n\sigma}^\dagger c_{n+r_j\sigma} e^{(iq/\hbar c) \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{A}^{\text{ext}}(\mathbf{R}_n, t)} e^{-(iq/\hbar c) (\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{A}^{\text{ext}}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j, t)}. \quad (\text{B.1.1})$$

Ovdje su \mathbf{r}_j definirani s izrazom (3.4.1). Nakon što se pokrate članovi sa \mathbf{R}_n ostaje nam

$$\tilde{H}_0 \approx -t \sum_{n\sigma} \sum_{j=1}^4 c_{n\sigma}^\dagger c_{n+r_j\sigma} e^{-(iq/\hbar c) \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{A}^{\text{ext}}(\bar{\mathbf{R}}, t)}, \quad (\text{B.1.2})$$

gdje je $\bar{\mathbf{R}} = \mathbf{R}_n + (1/2)\mathbf{r}_j$. Budući da tražimo linearni i kvadratni član u vektorskom potencijalu, razvijamo eksponencijalnu funkciju do kvadratnog člana te dobivamo

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 \simeq -t \sum_{n\sigma} \sum_{j=1}^4 c_{n\sigma}^\dagger c_{n+r_j\sigma} \left[1 + \left(\frac{-iq}{\hbar c} \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{A}^{\text{ext}}(\bar{\mathbf{R}}, t) \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{-iq}{\hbar c} \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{A}^{\text{ext}}(\bar{\mathbf{R}}, t) \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.1.3})$$

Prvi član u uglatoj zagradi očito odgovara neinteragirajućem hamiltonijanu, drugi linearnom vežanju, a treći kvadratnom vežanju. Linearni član zapisujemo kao

$$H_1^{\text{ext}} = \frac{-iqt}{\hbar c} \sum_{n\sigma} \sum_{j=1}^4 c_{n\sigma}^\dagger c_{n+r_j\sigma} \mathbf{r}_j \mathbf{A}^{\text{ext}}(\bar{\mathbf{R}}, t). \quad (\text{B.1.4})$$

U reprezentaciji delokaliziranih orbitala

$$\begin{aligned} c_{n+r_j\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \\ \mathbf{A}^{\text{ext}}(\bar{\mathbf{R}}, t) &= \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}^{\text{ext}}(\mathbf{q}, t) e^{i\mathbf{q} \cdot \bar{\mathbf{R}}}, \end{aligned} \quad (\text{B.1.5})$$

linearni član postaje

$$H_1^{ext} = \frac{-iqt}{\hbar c} \sum_{n\sigma} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sum_{j=1}^4 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j / 2 - i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_n + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_n + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}_1 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma} c_{\mathbf{r}_j}, \quad (\text{B.1.6})$$

odnosno

$$H_1^{ext} = \frac{-iqt}{\hbar c} \sum_n \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} \mathbf{A}^{ext}(\mathbf{q}) e^{-\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} c_{\mathbf{k}_1 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma} \sum_{j=1}^4 e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_j + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j / 2} \mathbf{r}_j. \quad (\text{B.1.7})$$

U gornjem izrazu prepoznavamo sumu $(1/N) \sum_n \exp\{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n\} = \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}}$, te stoga uz zapis $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$ i $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ dobivamo

$$\begin{aligned} H_1^{ext} &= -\frac{iqt}{\hbar c} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{q}} \mathbf{A}^{ext}(\mathbf{q}) \sum_{j=1}^4 \mathbf{r}_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j / 2} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} \sigma} \\ &= -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q} \alpha} A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k} \sigma} \left\{ \left(\frac{iqt}{\hbar} \right) \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} \sigma} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.1.8})$$

Konačni izraz za linearni član vezanja vodljivih elektrona na vektor potencijala možemo jezgrovito zapisati kao

$$\begin{aligned} H_1^{ext} &= -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q} \alpha} A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}, t) \sum_{\mathbf{k} \sigma} J_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{\mathbf{k} + \mathbf{q} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} \sigma} \\ J_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= \frac{iqt}{\hbar} \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) \cdot \mathbf{r}_j}, \end{aligned} \quad (\text{B.1.9})$$

gdje je $J_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ α komponenta strujnog verteksa.

S druge strane, skupljajući treće članove iz uglatih zagrada minimalno supstituiranog hamiltonijana (B.1.3) možemo izraziti kvadratni član u vezanju sa vektorskim potencijalom

$$\begin{aligned} H_2^{ext} &= -t \sum_{n\sigma} \sum_{j=1}^4 \frac{1}{2} \left[\frac{-ie}{\hbar c} \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{A}^{ext}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j, t) \right]^2 c_{n\sigma}^\dagger c_{n+r_j\sigma} \\ &= \frac{e^2 t}{2\hbar^2 c^2} \sum_{n\sigma} \sum_{j=1}^4 \left[\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{A}^{ext}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j, t) \right]^2 c_{n\sigma}^\dagger c_{n+r_j\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{B.1.10})$$

Kao i kod analize linearnog člana, prelazimo na reprezentaciju delokaliziranih orbitala (B.1.5), te kvadratni član postaje

$$\begin{aligned} H_2^{ext} &= \frac{e^2 t}{2\hbar^2 c^2} \sum_n \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^4 \left\{ \sum_{\alpha \beta \mathbf{q}' \mathbf{q}''} r_{j\alpha} r_{j\beta} A_\alpha^{ext}(\mathbf{q}'', t) A_\beta^{ext}(\mathbf{q}', t) \times \right. \\ &\quad \left. \times e^{i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j)} e^{i\mathbf{q}'' \cdot (\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j)} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_n + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}_1 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.1.11})$$

Znajući sumu $(1/N) \sum_n \exp\{i\mathbf{R}_n \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'')\} = \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}' - \mathbf{q}''}$, te stoga vršeći zamjenu $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$ i $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k} - \mathbf{q}' - \mathbf{q}''$, dobivamo

$$H_2^{ext} = \frac{e^2 t}{2\hbar^2 c^2} \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^4 \left\{ \sum_{\alpha\beta} r_{j\alpha} r_{j\beta} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q}'', t) A_{\beta}^{ext}(\mathbf{q}', t) \times \right. \\ \left. \times e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{q}'' \cdot \mathbf{r}_j} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} c_{-\mathbf{k} - \mathbf{q}' - \mathbf{q}'' \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k} \sigma} \right\}. \quad (\text{B.1.12})$$

Definirajući varijable kao $\mathbf{q} = \mathbf{q}' + \mathbf{q}''$, tj. $\mathbf{q}'' = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$, dobivamo

$$H_2^{ext} = \frac{e^2 t}{2\hbar^2 c^2} \sum_{j=1}^4 \sum_{\alpha\beta} r_{j\alpha} r_{j\beta} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q} - \mathbf{q}', t) A_{\beta}^{ext}(\mathbf{q}', t) \sum_{\mathbf{k}\sigma} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_j} c_{-(\mathbf{k} + \mathbf{q})\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\alpha\beta} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q} - \mathbf{q}', t) A_{\beta}^{ext}(\mathbf{q}', t) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{mt}{\hbar^2} \right) \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} r_{j\beta} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{B.1.13})$$

Na kraju, jezgroviti zapis kvadratnog člana vezanja sa vektorskim potencijalom postaje

$$H_2^{ext} = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\alpha\beta} A_{\alpha}^{ext}(\mathbf{q} - \mathbf{q}', t) A_{\beta}^{ext}(\mathbf{q}', t) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}, \\ \gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{mt}{\hbar^2} \sum_{j=1}^4 r_{j\alpha} r_{j\beta} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_j}. \quad (\text{B.1.14})$$

B.2 Veza nabojne i strujne vršne funkcije

Razmatrajući jednadžbu kontinuiteta

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{q}) \quad (\text{B.2.1})$$

možemo dobiti korisnu relaciju koja povezuje nabojne i strujne vršne funkcije. Budući da u formalizmu jednadžbi gibanja vrijedi $i\hbar \partial \hat{\rho}(\mathbf{q}) / \partial t = [\hat{\rho}(\mathbf{q}), H_0^{el}]$, za izbor $\mathbf{q} = q\alpha \hat{e}_{\alpha}$, rješavamo

$$\hbar q_{\alpha} \hat{J}_{\alpha}(\mathbf{q}) = [\hat{\rho}(\mathbf{q}), H_0^{el}], \quad (\text{B.2.2})$$

gdje je $H_0^{el} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}$ elektronski dio neinteragirajućeg hamiltonijana H_0 . Znajući oblik operatora gustoće naboja (3.5.5), komutator glasi

$$[c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}, H_0^{el}] = \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \varepsilon(\mathbf{k}') [c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}, c_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}] = [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})] c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}. \quad (\text{B.2.3})$$

Za sve komponente \mathbf{k} to znači

$$\hbar q_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} e q(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}, \quad (\text{B.2.4})$$

što daje izraz (3.5.6)

$$\frac{i\hbar J_{\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})}{\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})} = \frac{ie}{q_{\alpha}} q(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}). \quad (\text{B.2.5})$$

Dodatak C

Račun vodljivosti preko sila-sila korelacijske funkcije

C.1 Izvod sila-sila korelacijske funkcije

Izvest ćemo opći oblik sila-sila korelacijske funkcije, te je potom ilustrirati na primjeru raspršenja elektrona na fononima. Izvod sličan ovome može se naći u [12], a poopćenje metode sa sila-sila korelacijskom funkcijom u [24].

Slično kao i u izvodu Kubo formule, sila-sila korelacijske funkcije dobivamo nakon dvostruke parcijalne integracije struja-struja korelacijske funkcije

$$\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, i\omega) = -\frac{1}{V} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau) \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, 0) \rangle. \quad (\text{C.1.1})$$

Razlika je u tome da ovdje to činimo u temperaturno ovisnom formalizmu. U gornjem izrazu T_τ je operator vremenskog uređenja. Parcijalno integrirajući s obzirom na $\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau)$, dobivamo

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, i\omega_n) &= -\frac{1}{V} \frac{1}{i\omega_n} \langle \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \beta) \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, 0) - \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, 0) \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, 0) \rangle \\ &\quad + \frac{1}{V} \frac{1}{i\omega_n} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau \frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau)}{d\tau} \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, 0) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.1.2})$$

Prvi član u gornjem izrazu je konstanta integracije te za njega vrijedi,

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \beta) \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, 0) - \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, 0) \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, 0) \rangle &= \text{Tr}(\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}) e^{-\beta H} \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}) - e^{-\beta H} \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}) \hat{J}_\alpha(\mathbf{q})) \\ &= \text{Tr}[e^{-\beta H} (\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}) \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}) - \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}) \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}))] \\ &= -\langle [\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q})] \rangle \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{C.1.3})$$

Ovdje smo u prvom redu iskoristili svojstvo cikličnosti traga. Budući da korelacijska funkcija ovisi samo o razlici između vrijednosti τ varijable, izraz (C.1.2) možemo

pisati i na način

$$\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{1}{V} \frac{1}{i\omega_n} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau \left[\frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau')}{d\tau'} \right]_{\tau'=0} \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, -\tau) \rangle. \quad (\text{C.1.4})$$

Parcijalno integrirajući gornji izraz s obzirom na $\hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}, -\tau)$, dobivamo

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, i\omega_n) &= \frac{1}{V} \frac{1}{(i\omega_n)^2} \left\langle \left[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), \frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau')}{d\tau'} \right]_{\tau'=0} \right\rangle \\ &\quad - \frac{1}{V} \frac{1}{(i\omega_n)^2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \left\langle T_\tau \left[\frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau)}{d\tau} \right] \left[\frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau')}{d\tau'} \right]_{\tau'=0} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.1.5})$$

Prvi član je ponovo konstanta integracije. Drugi član ovisi o vremenskoj promjeni struje (količine gibanja), te ga stoga nazivamo sila-sila korelacijska funkcija. Budući da je sila proporcionalna jakosti vezanja $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, račun vodljivosti preko sila-sila korelacijske funkcije je izrazito koristan ako tražimo rješenje do kvadratnog doprinosa u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, jer je upravo on vodeći član. Pritom trebamo voditi računa da i konstanta integracija bude izražena do kvadratnog doprinosa.

Za sila-sila korelacijsku funkciju potrebno je odrediti $(d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau)/d\tau) = (1/i\hbar) \times [\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H]$. U slučaju hamiltonijana koji opisuje elektron-fononsko vezanje, izraz (5.4.1), to se svodi na račun komutatora $[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H_1]$. Sličnost strukture hamiltonijana raspršenja na statičkom neredu, izraz (5.1.2), sa spomenutim hamiltonijanom, te činjenica da elektronski i fononski operatori komutiraju, za rješenje daje isti izraz kao i (5.3.3), uz zamjenu $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rightarrow \hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv (V(\mathbf{k}', \mathbf{k})/\sqrt{N})(a_{\mathbf{q}'} + a_{-\mathbf{q}'})^\dagger$. Stoga vrijedi

$$[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H_1] = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')] c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}. \quad (\text{C.1.6})$$

Za konstantu integracije u izrazu (C.1.5) računamo pripadni komutator. Koristeći komutatorske relacije iz Dodatka A.3, dobivamo

$$\begin{aligned} &[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), [\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H_1]] = \\ &= \left[\sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}, \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\sigma'} \hat{V}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [J_\alpha(\mathbf{p}) - J_\alpha(\mathbf{p}')] c_{\mathbf{p}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}'\sigma'} \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\sigma'} \hat{V}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [J_\alpha(\mathbf{p}) - J_\alpha(\mathbf{p}')] [c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}, c_{\mathbf{p}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}'\sigma'}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\sigma'} \hat{V}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [J_\alpha(\mathbf{p}) - J_\alpha(\mathbf{p}')] \left\{ \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{p}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}'\sigma} - \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}'} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma} \right\} \\ &\stackrel{\mathbf{q} \rightarrow 0}{\approx} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}) \hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')] c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_\alpha(\mathbf{k}) \hat{V}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [J_\alpha(\mathbf{k}') - J_\alpha(\mathbf{k})] c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')]^2 c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{C.1.7})$$

Ovdje smo u dugovalnoj granici u drugom pribrojniku izvršili zamjenu $\mathbf{k} \rightleftharpoons \mathbf{k}'^1$.

Izraz (C.1.6) govori da je $(d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau)/d\tau) \sim V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, te stoga sila-sila korelacijska funkcija u izrazu (C.1.5) ima kvadratni doprinos u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ u vodećem članu. S druge strane, konstanta integracije u izrazu (C.1.5) je linearna u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, te zahtjeva razvoj do kvadratnog člana preko matrice

$$S(\beta) = T_\tau \exp \left\{ -i \int_0^{\beta\hbar} d\tau H'_1 \right\}.$$

Dobivamo,

$$\begin{aligned} \left\langle \left[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), \frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau')}{d\tau'} \Big|_{\tau'=0} \right] \right\rangle &= \text{Tr} \left[e^{-\beta H_0} S(\beta) \left[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), \frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau')}{d\tau'} \Big|_{\tau'=0} \right] \right] \\ &\approx - \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left\langle T_\tau H'_1(\tau) \left[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), \frac{d\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}, \tau')}{d\tau'} \Big|_{\tau'=0} \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.1.8})$$

Ovdje doprinos nultog reda u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ iščezava, te, budući da je $H'_1 \sim V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, ostaje samo kvadratni doprinos kao vodeći član. Doprinosi viših redova ne razmatramo.

Sada znamo vodeći član i u konstanti integracije, izraz (C.1.8), i u sila-sila korelacijskoj funkciji za struja-struja korelacijsku funkciju [izraz (C.1.5)]. Oba vodeća člana su kvadratna u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ i određena komutatorima (C.1.6) i (C.1.7). Stoga njihovim uvrštavanjem u izraz (C.1.5), dobivamo doprinos struja-struja korelacijskoj funkciji koji je kvadratan u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Rezultat je

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}^{[2]}(\mathbf{q}, i\omega_n) &= - \frac{1}{V} \frac{1}{(i\hbar\omega_n)^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')]^2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau (e^{i\omega_n\tau} - 1) \frac{|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2}{N} \\ &\quad \times \langle T_\tau (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} (a_{\mathbf{q}'}^\dagger + a_{-\mathbf{q}'}))_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma} (a_{\mathbf{q}'} + a_{-\mathbf{q}'})^\dagger \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.1.9})$$

Ovdje član sa $\exp\{i\omega_n\tau\}$ odgovara sila-sila korelacijskoj funkciji kako smo je zvali u izrazu (C.1.5), dok član s -1 odgovara konstanti integracije.

¹Ako promotrimo komutatore (C.1.6) i (C.1.7) primijecujemo da oni imaju istu strukturu. Svakom sljedećom parcijalnom integracijom dobivamo dodatni operator gustoće struje, $\hat{J}_\alpha(\mathbf{q})$, kao član komutatora. Njihov broj određuje potenciju razlike strujnih vršnih funkcija, $J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')$. Stoga općenito vrijedi

$$\underbrace{[\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), [\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), \dots [\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}), H'_1] \dots]]}_n \stackrel{\mathbf{q} \rightarrow 0}{\approx} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \hat{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [J_\alpha(\mathbf{k}) - J_\alpha(\mathbf{k}')]^n c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}.$$

C.2 Doprinis koji sadrži vlastitu energiju elektrona

Promotrimo primjer iz (C.1.9) koji u sebi sadrži vlastitu energiju elektrona kao gradivni element. On vodi do izraza (5.4.5). Fourierove razvoje propagatora

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau) &= \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{i\nu_n} e^{i\nu_n\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\nu_n) \\ \mathcal{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}', \tau) &= \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{i\nu_m} e^{-i\nu_m\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}', i\nu_m) \\ \mathcal{D}(\mathbf{q}', -\tau) &= \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{i\omega_m} e^{i\omega_m\tau} \mathcal{D}(\mathbf{q}', i\omega_m) \end{aligned} \quad (\text{C.2.1})$$

uvrštavamo u (5.4.5) te dobivamo

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(i\omega_n) &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \sum_{i\nu_n} \sum_{i\omega_m} \sum_{i\nu_m} \frac{1}{(\beta\hbar)^3} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{(i\omega_n+i\omega_m+i\nu_n-i\nu_m)\tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\nu_n) \\ &\quad \times \mathcal{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}', i\nu_m) \mathcal{F}(\mathbf{q}', i\omega_m). \end{aligned} \quad (\text{C.2.2})$$

Ovdje je ponovo $\mathcal{F}(\mathbf{q}', i\nu_m) = (|V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2/N) \mathcal{D}(\mathbf{q}', i\nu_m)$ kratica za sila-sila korelacijsku funkciju. Integracija po vremenu je trivijalna,

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{(i\omega_n+i\omega_m+i\nu_n-i\nu_m)\tau} &= \frac{1}{i(\omega_n + \omega_m + \nu_n - \nu_m)} \left[e^{i\beta\hbar(\omega_n + \omega_m + \nu_n - \nu_m)} - 1 \right] \\ &= \beta\hbar \delta_{i\omega_n+i\omega_m+i\nu_n, i\nu_m}, \end{aligned} \quad (\text{C.2.3})$$

te na koncu dobivamo

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha\alpha}^{[2A_1]}(i\omega_n) &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \frac{1}{(\beta\hbar)^2} \sum_{i\nu_n} \sum_{i\omega_m} \sum_{i\nu_m} \delta_{i\omega_n+i\omega_m+i\nu_n, i\nu_m} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\nu_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\nu_m) \mathcal{F}(\mathbf{q}', i\omega_m) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_{\alpha}^2(\mathbf{k}) \frac{1}{(\beta\hbar)^2} \sum_{i\nu_n} \sum_{i\omega_m} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\nu_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\nu_n + i\omega_m + i\omega_n) \mathcal{F}(\mathbf{q}', i\omega_m). \end{aligned} \quad (\text{C.2.4})$$

Budući da su $i\nu_n$ i $i\omega_m$ nijeme varijable, možemo ih lako redefinirati. Konačni rezultat je izraz (5.4.7). Na isti način se određuju doprinosi funkciji $\Phi_{\alpha\alpha}(i\omega_n)$ koji potječu od $2A_2$ i $2B$ dijagrama sa Slike 5.2.

Dodatak D

Izvodi za supravodljivo stanje

D.1 Bogoljubovljeve transformacije i matrica transformacije

Kako bismo hamiltonijan (6.1.6) prikazan u $\{l, \mathbf{k}\}$ reprezentaciji doveli u dijagonalni oblik, uvodimo nove fermionske kvazičestične operatore koji su linearna kombinacija elektronskih operatora stvaranja i poništenja,

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \equiv U_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (\text{D.1.1})$$

Ovo preslikavanje zovemo Bogoljubovljeva transformacija, a sa $U_{\mathbf{k}}$ označavamo matricu transformacije. Funkcije $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ su obično realne. Operatori γ zadovoljavaju antikomutacijske relacije za fermione,

$$\{\gamma_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad \{\gamma_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}\} = \{\gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = 0, \quad (\text{D.1.2})$$

ako je ispunjen uvjet normiranosti $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Uz ovaj uvjet dobivamo inverznu transformaciju od (D.1.1),

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{D.1.3})$$

Kao i elektronske operatore u izrazu (6.1.5), sada i kvazičestične operatore zapisujemo u Nambuovoj notaciji. Vrijedi

$$\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = c_{\underline{C}\mathbf{k}}^\dagger, \quad \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} = c_{\underline{C}\mathbf{k}}. \quad (\text{D.1.4})$$

Sa $L \in \{C, \underline{C}\}$ označavamo indekse kvazičestičnih vrpca u Nambuovoj $\{L\mathbf{k}\}$ reprezentaciji. Matrica transformacije $U_{\mathbf{k}}$ dijagonalizira problem ako je ispunjeno

$$U_{\mathbf{k}}^\dagger H_{el} U_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} E_C(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & E_{\underline{C}}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.1.5})$$

Trebamo odrediti disperzije $E_L(\mathbf{k})$ i matricu transformacije $U_{\mathbf{k}}$.

Matrični oblik Schroedingerove jednadžbe elektrona opisane hamiltonijanom (6.1.6) je

$$\sum_{l' \in \{c, \underline{c}\}} U_{\mathbf{k}}(L, l') \left[\Delta H_0^{l'}(\mathbf{k}) - E_L(\mathbf{k}) \delta_{ll'} \right] = 0. \quad (\text{D.1.6})$$

Analogno preslikavanju (D.1.1), definiramo

$$c_{L\mathbf{k}}^\dagger = \sum_l U_{\mathbf{k}}(L, l) c_{l\mathbf{k}}^\dagger. \quad (\text{D.1.7})$$

Ovdje su $U_{\mathbf{k}}(L, l)$ koeficijenti matrice transformacije. Iz matričnog oblika Schroedingerove jednadžbe (D.1.6), za $l = c$ i $l = \underline{c}$ dobivamo

$$U_{\mathbf{k}}(L, c) [\varepsilon_c(\mathbf{k}) - E_L(\mathbf{k})] + U_{\mathbf{k}}(L, \underline{c}) \Delta(\mathbf{k}) = 0, \quad (\text{D.1.8})$$

$$U_{\mathbf{k}}(L, c) \Delta^*(\mathbf{k}) + U_{\mathbf{k}}(L, \underline{c}) [\varepsilon_{\underline{c}}(\mathbf{k}) - E_L(\mathbf{k})] = 0. \quad (\text{D.1.9})$$

Ako podijelimo prethodne izraze dobivamo kvadratnu jednadžbu za $E_L(\mathbf{k})$,

$$E_L^2(\mathbf{k}) + (-\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\underline{c}}(\mathbf{k})) E_L(\mathbf{k}) + \varepsilon_c(\mathbf{k}) \varepsilon_{\underline{c}}(\mathbf{k}) - \Delta^2(\mathbf{k}) = 0. \quad (\text{D.1.10})$$

Rješenja gornje jednadžbe su upravo disperzije kvazičestica u Nambuovoj $\{L\mathbf{k}\}$ reprezentaciji [izraz (6.1.9)].

Uvrštavanjem $L = \underline{C}$ u izraz (D.1.8), uz oznaku $\varepsilon_{\underline{c}\underline{c}}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\underline{c}}(\mathbf{k}) - \varepsilon_c(\mathbf{k})$, dobivamo

$$U_{\mathbf{k}}(\underline{C}, c) \left[\varepsilon_c(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon_{\underline{c}\underline{c}}^2(\mathbf{k}) + 4\Delta^2(\mathbf{k})} \right] + U_{\mathbf{k}}(\underline{C}, \underline{c}) \Delta(\mathbf{k}) = 0. \quad (\text{D.1.11})$$

Zbog unitarnosti gornji izraz možemo zapisati kao

$$U_{\mathbf{k}}(c, \underline{C}) = \frac{2\Delta(\mathbf{k})}{\varepsilon_{\underline{c}\underline{c}}(\mathbf{k}) + \sqrt{\varepsilon_{\underline{c}\underline{c}}^2(\mathbf{k}) + 4\Delta^2(\mathbf{k})}} U_{\mathbf{k}}(\underline{c}, \underline{C}). \quad (\text{D.1.12})$$

Slično dobivamo i uvrštavanjem $L = C$ u (D.1.8). Elemente matrice transformacije u izrazu (D.1.3) možemo također pisati na način

$$U_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}}(l, L) & U_{\mathbf{k}}(l, \underline{L}) \\ U_{\mathbf{k}}(\underline{l}, L) & U_{\mathbf{k}}(\underline{l}, \underline{L}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} & \sin \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} \\ -\sin \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} & \cos \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.1.13})$$

Ovdje je ispunjen uvjet korespondencije s normalnim stanje, tj. $U_{\mathbf{k}}(c, C) \rightarrow 1$ kada $\Delta \rightarrow 0$. Kako bi se uvjerali da ovo jest matrica transformacije u našem slučaju, trebamo izraziti pomoćnu fazu $\theta(\mathbf{k})$ (u pomoćnoj fazi je sadržana cijela ovisnost o valnom vektoru). Iz izraza (D.1.12) dobivamo

$$\tan \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} = \frac{2\Delta(\mathbf{k})}{\varepsilon_{\underline{c}\underline{c}}(\mathbf{k}) + \sqrt{\varepsilon_{\underline{c}\underline{c}}^2(\mathbf{k}) + 4\Delta^2(\mathbf{k})}}. \quad (\text{D.1.14})$$

Ovdje vrijedi $\tan(\theta(\mathbf{k})/2) \in \mathbb{R}$ za svaki \mathbf{k} . Korištenjem trigonometrijskog identiteta

$$\tan \theta(\mathbf{k}) = \frac{2 \tan \frac{\theta(\mathbf{k})}{2}}{1 - \tan^2 \frac{\theta(\mathbf{k})}{2}}, \quad (\text{D.1.15})$$

za pomoćnu fazu $\theta(\mathbf{k})$ dobivamo

$$\begin{aligned} \tan \theta(\mathbf{k}) &= \frac{4\Delta(\mathbf{k})}{2(\varepsilon_{\underline{c}(\mathbf{k})} - \varepsilon_{\mathbf{k}})} \\ &= \frac{\Delta(\mathbf{k})}{\varepsilon(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (\text{D.1.16})$$

Konačno, uvrštavanjem matrice transformacije (D.1.13) u početni hamiltonijan (6.1.6), direktno dobivamo dijagonalni oblik hamiltonijana, izraz (6.1.8).

D.2 Izvod BCS jednadžbe samosuglasnosti preko anomalne Greenove funkcije

Iz definicije procjepa $\Delta(\mathbf{k})$, izraz (6.1.4), proizlazi da trebamo odrediti termodinamički prosjek operatora $\hat{b}(\mathbf{k})$. U tu svrhu uvodimo anomalnu Greenovu funkciju¹ $\overline{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \tau) = \langle T_{\tau} c_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}(0) \rangle$. Ona opisuje korelaciju između elektrona. U normalnom stanju ona je strogo nula. S druge strane, u supravodljivom stanju imamo sparivanje elektrona suprotnih valnih vektora i spinova, što znači da su takvi elektroni korelirani. Tu korelaciju opisujemo upravo anomalnom Greenovom funkcijom. Iz definicije operatora $\hat{b}(\mathbf{k})$, izraz (6.1.2), imamo

$$\begin{aligned} b(\mathbf{k}) &\equiv \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \equiv \langle c_{\underline{c}\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \rangle \equiv \overline{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \tau = 0) \\ &= \sum_{LL'} U_{\mathbf{k}}(c, L) U_{\mathbf{k}}^*(c, L') \langle c_{L\mathbf{k}}^{\dagger} c_{L'\mathbf{k}} \rangle \\ &\stackrel{L=L'}{=} \sum_L U_{\mathbf{k}}(c, L) U_{\mathbf{k}}^*(c, L) \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, \tau = 0) \\ &= \sum_L U_{\mathbf{k}}(c, L) U_{\mathbf{k}}^*(c, L) \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, i\omega_n) \end{aligned} \quad (\text{D.2.1})$$

Ovdje smo u drugom retku iskoristili transformaciju iz $\{l\mathbf{k}\}$ u $\{L\mathbf{k}\}$ reprezentaciju. Nadalje, u trećem retku smo izostavili anomalne doprinose u $\{L\mathbf{k}\}$, jer korelacije na razini kvazičestica ne postoje ($\{L\mathbf{k}\}$ je dijagonalna reprezentacija). Budući da su kvazičestice slobodne čestice, njihova Greenova funkcija je po definiciji

$$\mathcal{G}_L(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\hbar\omega_n - \xi_L(\mathbf{k})}. \quad (\text{D.2.2})$$

¹Obična elektronska Greenova funkcija je $G(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T_{\tau} c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(0) \rangle$, a druga anomalna Greenova funkcija je $\overline{\mathcal{G}}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau) = \langle T_{\tau} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}(0) \rangle$. U dijagonalnoj $\{L\mathbf{k}\}$ reprezentaciji kvazičestična Greenova funkcija je $\mathcal{G}_L(\mathbf{k}, \tau) = \langle T_{\tau} c_{L\mathbf{k}}(\tau) c_{L\mathbf{k}}^{\dagger}(0) \rangle$.

Ovdje je $\xi_L(\mathbf{k}) = E_L(\mathbf{k}) - \mu$, gdje je μ kemijski potencijal. Matsubarina suma $(1/\beta) \sum_{i\omega_n} G_L(\mathbf{k}, i\omega_n)$ je Fermi-Diracova raspodjela za kvazičestice, $f_L(\mathbf{k})$ [2]. Stoga, izraz (D.2.1) uz definiciju matrice transformacije (D.1.13) postaje

$$\begin{aligned} b(\mathbf{k}) &= -\cos \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} \sin \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} f_C(\mathbf{k}) + \cos \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} \sin \frac{\theta(\mathbf{k})}{2} f_{\underline{C}}(\mathbf{k}) \\ &= [f_{\underline{C}}(\mathbf{k}) - f_C(\mathbf{k})] \frac{1}{2} \sin \theta(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (\text{D.2.3})$$

Za određivanje $\sin \theta(\mathbf{k})$ koristimo trigonometrijsku relaciju

$$\sin \theta(\mathbf{k}) = \frac{1 - \cos \theta(\mathbf{k})}{\tan \frac{\theta(\mathbf{k})}{2}}. \quad (\text{D.2.4})$$

Uvrštavajući izraz (D.1.14) za $\tan(\theta(\mathbf{k})/2)$, te izraz (D.1.16) za $\cos \theta(\mathbf{k})$, dobivamo

$$\sin \theta(\mathbf{k}) = \frac{2\Delta(\mathbf{k})}{\sqrt{\varepsilon_{\underline{c}\underline{c}}^2 + 4\Delta^2(\mathbf{k})}} = \frac{2\Delta(\mathbf{k})}{E_{\underline{C}\underline{C}}(\mathbf{k})}. \quad (\text{D.2.5})$$

Iz definicije parametra supravodljivog uređenja (6.1.4), dobivamo BCS jednadžbu samosuglasnosti [izraz (6.2.5)].

D.3 Primjeri BCS jednadžbe samosuglasnosti

D.3.1 Primjer 1: Niskotemperaturni supravodiči

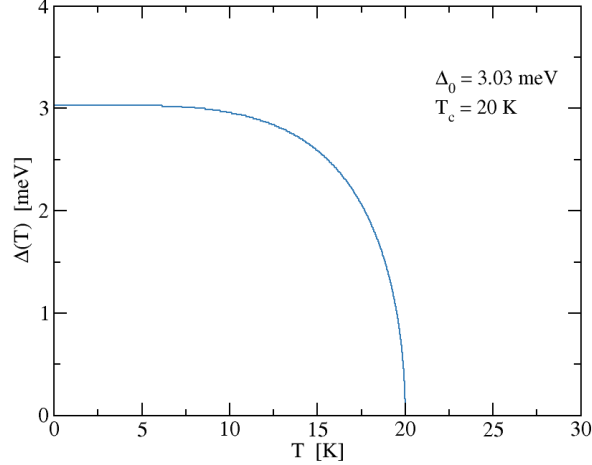
Najjednostavniji slučaj opisuje BCS niskotemperaturne supravodiče za koje je ispunjena granica slabog vezanja $kT_c \ll \omega_D$ (ω_D označava Debyeovu frekvenciju). On je definiran sa $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k}') = \Delta \neq 0$ i $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx -V_0$ u rasponu frekvencija $-\omega_D < \omega < \omega_D$. Samosuglasna jednadžba, izraz (6.2.4), nam daje

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V_0}{N} \frac{1 - 2f_{\underline{C}}(\mathbf{k}')}{2E} = \frac{D(E_F)V_0}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} \frac{e^{\beta\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} - 1}{e^{\beta\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} + 1} \\ &= V_0 D(E_F) \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} \tanh \left(\frac{\beta\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{D.3.1})$$

Ovdje je pretpostavljeno da je gustoća stanja u blizini Fermijevog nivoa konstanta, pa $D(E_F)$ stoji ispred integrala. Nadalje, u prvom redu iskoristili smo činjenicu da je $f_{\underline{C}}(\mathbf{k}') = 1 - f_C(\mathbf{k}') = [e^{\beta E} + 1]^{-1}$, gdje je $E = \sqrt{\omega^2 + \Delta^2}$. U drugom redu iskoristili smo parnost podintegralne funkcije. Ponašanje jednadžbe (D.3.1) analitički možemo izraziti u granicama $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$. Za ostale temperature prebacujemo integral u bezdimenzionalni oblik

$$\eta \approx \int_0^{\delta^{-1} \sinh \eta} \frac{dz}{\sqrt{1+z^2}} \tanh \left(\frac{1.76}{2} \frac{\delta}{\tau} \sqrt{1+z^2} \right). \quad (\text{D.3.2})$$

Ovdje definiramo parametre $\delta = \Delta(T)/\Delta_0$, $\tau = T/T_c$, $\eta = 1/(V_0D(E_F))$ i $\omega_D/\Delta_0 = \sinh \eta$. U slabo vezanom slučaju za jakost vezanja mora vrijediti $V_0D(E_F) \ll 1$ []. Izborom parametra η i korištenjem univerzalnog zakona za BCS supravodiče, $\Delta_0 \approx 1.76k_B T_c$, dobivamo rezultat (Slika D.1).



Slika D.1: Ovisnost parametra supravodljivog uređenja o temperaturi u slučaju supravodiča s simetrije.

D.3.2 Primjer 2: Faktorizirani $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$

Ako pretpostavimo faktorizaciju jakosti interakcije, $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \lambda W(\mathbf{k})W(\mathbf{k}')$, iz izraza (6.2.4) dobivamo

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{\lambda}{2N} W(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \frac{1 - 2f_{\underline{c}}(\mathbf{k}')}{E(\mathbf{k}')} \quad (\text{D.3.3})$$

Množeći obje strane sa faktorom $\sum_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k})(1 - 2f_{\underline{c}}(\mathbf{k})/E(\mathbf{k}))$, dobivamo

$$\sum_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k}) \Delta(\mathbf{k}) \frac{1 - 2f_{\underline{c}}(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} = \frac{\lambda}{2N} \left[\sum_{\mathbf{k}} W^2(\mathbf{k}) \Delta(\mathbf{k}) \frac{1 - 2f_{\underline{c}}(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right] \left[\sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \frac{1 - 2f_{\underline{c}}(\mathbf{k}')}{E(\mathbf{k}')} \right] \quad (\text{D.3.4})$$

Nakon kraćenja, za rezultat dobivamo

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} W^2(\mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') \frac{1 - 2f_{\underline{c}}(\mathbf{k}')}{E(\mathbf{k}')} \quad (\text{D.3.5})$$

D.4 Korelacijska funkcija u dvovrpčanom sustavu u Matsubarinom formalizmu

Cilj nam je izvesti nulti i kvadratni doprinos korelacijskoj funkciji za dvovrpčani sustav. U Poglavlju 6 to smo napravili preko formalizma jednadžbi gibanja, a ovdje ćemo

isti rezultat dobiti u Matsubarinom formalizmu.

Kao i u Dodatku C.1, krećemo od struja-struja korelacijske funkcije

$$\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}'', i\omega_n) = -\frac{1}{V} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}'', \tau) \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}'', 0) \rangle. \quad (\text{D.4.1})$$

Za operator gustoće struje uzimamo pomoćni operator gustoće struje za dvovrpčani sustav definiran u izrazu (6.3.4). Iz gornjeg izraza dobivamo

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}'', i\omega_n) &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \sum_{LL'} \sum_{L_1L'_1} J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k}) J_\alpha^{L_1L'_1}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}'', \mathbf{k}_1) \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \\ &\quad \times \langle T_\tau c_{L'\mathbf{k}+\mathbf{q}''}^\dagger(\tau) c_{L\mathbf{k}}(\tau) c_{L'_1\mathbf{k}_1-\mathbf{q}''}^\dagger(0) c_{L_1\mathbf{k}_1}(0) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.4.2})$$

Na termodinamički prosjek u gornjem izrazu primjenjujemo Wickov teorem,

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \dots \rangle &= -\langle T_\tau c_{L_1\mathbf{k}_1}(0) c_{L'\mathbf{k}+\mathbf{q}''}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau c_{L\mathbf{k}}(\tau) c_{L'_1\mathbf{k}_1-\mathbf{q}''}^\dagger(0) \rangle \\ &\quad + \langle T_\tau c_{L'\mathbf{k}+\mathbf{q}''}^\dagger(\tau) c_{L'_1\mathbf{k}_1-\mathbf{q}''}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau c_{L_1\mathbf{k}_1}(0) c_{L\mathbf{k}}(\tau) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.4.3})$$

Budući da korelacije na razini kvazičestica ne postoje, članovi $\langle cc \rangle$ i $\langle c^\dagger c^\dagger \rangle$ iščezavaju. Koristeći definiciju Greenovih funkcija za kvazičestice (bilješka na str. 70), izraz (D.4.2) postaje

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}'', i\omega_n) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \sum_{LL'} \sum_{L_1L'_1} J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k}) J_\alpha^{L_1L'_1}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}'', \mathbf{k}_1) \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \\ &\quad \times \delta_{L',L_1} \delta_{L,L'_1} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}''} \mathcal{G}_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', -\tau) \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, \tau) \\ &= \frac{1}{V} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{LL'} J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k}) J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}'') \\ &\quad \times \mathcal{G}_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', -\tau) \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, \tau). \end{aligned} \quad (\text{D.4.4})$$

Zbog izraza (6.3.4) vrijedi $J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}'') = J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k})$, pa stoga imamo

$$\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}'', i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{LL'} |J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', \mathbf{k})|^2 \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \mathcal{G}_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', -\tau) \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, \tau). \quad (\text{D.4.5})$$

Kako bismo izračunali gornji integral potrebno je izvršiti Fourierov razvoj propagatora [izraz (C.2.1)]. Dobivamo

$$\begin{aligned} I_{LL} &= \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\omega_n\tau} \frac{1}{\beta^2} \sum_{ip_n ip_m} e^{ip_n\tau} \mathcal{G}_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', ip_n) e^{-ip_m\tau} \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, ip_m) \\ &= \sum_{ip_n ip_m} \mathcal{G}_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', ip_n) \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, ip_m) \frac{1}{\beta^2} \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\tau(\omega_n + p_n - p_m)} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{ip_m} \mathcal{G}_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}'', ip_m - i\omega_n) \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, ip_m) \end{aligned} \quad (\text{D.4.6})$$

Ovdje je integral u drugom redu $\beta \delta(p_m - \omega_n - p_n)$. Nakon redefiniranja nijeme varijable izraz (D.4.5) postaje

$$\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}'', i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{LL'} |J_{\alpha}^{L'L}(\mathbf{k}'', \mathbf{k})|^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_m} \mathcal{G}_L(\mathbf{k}, ip_m) \mathcal{G}_{L'}(\mathbf{k}'', ip_m + i\omega_n). \quad (\text{D.4.7})$$

Budući da su kvazičestice slobodne čestice, Matsubarina suma za kvazičestične Greenove funkcije je jednaka Matsubarinoj sumi neinteragirajućih Greenovih funkcija. Rješenje takve sume je eksplicitno dano u većini prikaza Matsubarinog formalizma [12]. Konačno, struktura doprinosa korelacijskoj funkciji za dvovrpčani sustav je ($\mathbf{k}'' = \mathbf{k} + \mathbf{q}''$)

$$\pi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}'', \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{LL'} |J_{\alpha}^{L'L}(\mathbf{k}'', \mathbf{k})|^2 \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}'')}{\hbar\omega + i\hbar\eta + E_L(\mathbf{k}) - E_{L'}(\mathbf{k}'')}. \quad (\text{D.4.8})$$

Ovdje smo izvršili analitičko produljenje $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$. Iako u nazivniku kvazičestične Greenove funkcije imamo $\xi_L(\mathbf{k}) = E_L(\mathbf{k}) - \mu$, u izrazu (D.4.8) kemijski potencijali μ se pokrate.

Konačno, doprinos korelacijskoj funkciji u nultom redu u $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ možemo povratiti zamjenom $\mathbf{q}'' \rightarrow \mathbf{q}$ u gornjem izrazu. Dobivamo upravo doprinos (6.4.5). U tom slučaju strujne vršne funkcije u dugovalnoj granici postaju upravo $J_{\alpha}(\mathbf{k})$ iz izraza (6.4.7). Kvadratni doprinos dobivamo zamjenom $J_{\alpha}^{L'L}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) \rightarrow j_{\alpha}^{L'L}(\mathbf{k} - \mathbf{q}', \mathbf{k})$ i sumirajući po \mathbf{q}' . U tom slučaju dobivamo upravo doprinos (6.4.6).

Bibliografija

- [1] Z. X. Shen *et al.*, Anomalously large gap anisotropy in the a-b plane of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1553 1993.
- [2] S. Uchida *et al.*, Optical spectra of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$: Effect of carrier doping on the electronic structure of the CuO_2 plane, *Phys. Rev. B* **43**, 7942 1991.
- [3] Y. Ando *et al.*, Electronic phase diagram of high- T_c cuprate superconductors from a mapping of the in-plane resistivity curvature, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 267001 2004.
- [4] S. J. Mirzaei *et al.*, Spectroscopic evidence for fermi liquid-like energy and temperature dependence of the relaxation rate in the pseudogap phase of the cuprates, *PNAS* **110**, 5774 2013.
- [5] D. B. Tanner *et al.*, Superfluid and normal-fluid densities in the high- T_c superconductors, *Physica C* **341**, 2193 2000.
- [6] M. Hashimoto *et al.*, Energy gaps in high-transition temperature cuprate superconductors, *Nature Physics* **10**, 483 2014.
- [7] T. Yoshida *et al.*, Systematic doping evolution of the underlying fermi surface of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, *Phys. Rev. B* **74**, 224510 2006.
- [8] N. Plakida, High-temperature cuprate superconductors: Experiment, theory, and applications, Springer Series in Solid-State Sciences 166, Springer 2010.
- [9] I. Jedovnicki, Utjecaj spinskih fluktuacija na antiferomagnetsko uređenje u 2D Hubbardovom modelu, diplomski rad, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, 2013.
- [10] L. F. Feiner, J. H. Jefferson i R. Raimondi, Effective single-band models for the high- T_c cuprates, *Phys. Rev. B* **13**, 8751 1996.
- [11] G. Nikšić, Magnetska i nabojna uređenja u kupratnim supravodičima, doktorski rad, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, 2015.
- [12] G. D. Mahan, Many-particle physics, 3. izdanje, Kluwer/Plenum, New York, 2000.

- [13] I. Kupčić, Damping effects in doped graphene: The relaxation-time approximation, *Phys. Rev. B* **90**, 205426 2014.
- [14] H. Mori, Transport, collective motion, and brownian motion, *Progr. Theor. Phys.* **33**, 423 1965.
- [15] W. Goetze i P. Woelfle, Homogeneous dynamical conductivity of metals, *Phys. Rev. B* **6**, 1226 1972.
- [16] A. Lucas, Conductivity of a strange metal: from holography to memory functions, *Journal of High Energy Physics* **3**, 71 2015.
- [17] A. Lucas i S. Sachdev, Memory matrix theory of magnetotransport in strange metals, *Physical Review B* **91**, 195122 2015.
- [18] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, 3. izdanje, John Willey and Sons, New York, 1999.
- [19] L. D. Landau, E. M. Lifshitz i L. P. Pitaevski, *Electrodynamics of continuous media*, Oxford: Butterworth-Heinemann, 1995.
- [20] I. Kupčić, Z. Rukelj i S. Barišić, Quantum transport equations for low-dimensional multiband electronic systems I, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 145602 2013.
- [21] D. Pines i P. Nozieres, *The theory of quantum liquids* Benjamin, New York, 1966.
- [22] J. M. Ziman, *Principles of the theory of solids*, 2. izdanje, Cambridge University Press, 1972.
- [23] H. Bruus i K. Flensberg, *Many-body quantum theory in condensed matter physics*, 1. izdanje, Oxford University Press, 2004.
- [24] I. Kupčić, Incoherent optical conductivity and breakdown of the generalized Drude formula in quasi-one-dimensional bad metallic systems, *Phys. Rev. B* **79**, 235104 2009.
- [25] J. R. Schrieffer, *Theory of superconductivity*, 1. izdanje, W. A. Benjamin, New York, 1964.
- [26] L. H. Palmer i M. Tinkham, Far-infrared absorption in thin superconducting lead films, *Phys. Rev.* **165**, 588 1968.