Transportna i optička svojstva Diracovih polumetala

Kordić, Josip

Master's thesis / Diplomski rad

2022

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://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:643516

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2025-03-23**

Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Josip Kordić

TRANSPORTNA I OPTIČKA SVOJSTVA DIRACOVIH POLUMETALA

Diplomski rad

Zagreb, 2022.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ
FIZIKA; SMJER ISTRAŽIVAČKI

Josip Kordić

Diplomski rad

Transportna i optička svojstva Diracovih polumetala

Voditelj diplomskog rada: dr. sc. Ivan Kupčić

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2022.

Zahvaljujem mentoru dr. sc. Ivanu Kupčiću na strpljivosti, ustrajnosti i pomoći tijekom izrade ovog rada. Zahvaljujem na pruženim savjetima i objašnjenjima koji su bitno oblikovali ovaj rad.

Zahvaljujem roditeljima, sestrama i braći na velikoj podršci i savjetu.

Sažetak

2D i 3D Diracovi materijali klase su materijala koje se intenzivno istražuju posljednjih 15 godina, a koje karakterizira činjenica da disperzije vodljivih elektrona nalikuju disperziji relativističkih Diracovih elektrona. Od otkrića prvih Diracovih materijala, velika je pažnja posvećena objašnjenju njihovih transportnih i optičkih svojstava. U ovom diplomskom radu uspoređuju se ta svojstva u 2D i 3D Diracovim sustavima. Heksagonalni borov nitrid primjer je 2D sustava s konačnom Diracovom masom, a Bi_2Se_3 tipični je 3D Diracov polumetal. Za ta dva primjera načinjen je račun elemenata tenzora vodljivosti u aproksimaciji relaksacijskih vremena. Određene su ovisnosti tenzora vodljivosti o raznim parametrima, o dopiranju, o međuvrpčanom procjepu i o relaksacijskim vremenima.

U tipičnim Diracovim polumetalima niskoenergetska optička vodljivost sastoji se od unutarvrpčanih i međuvrpčanih doprinosa. Unutarvrpčani doprinosi izračunati u ovom radu imaju očekivano jednostavne ovisnosti o dopiranju i o međuvrpčanom procjepu. Izračunati međuvrpčani doprinosi, s druge strane, imaju ovisnosti o parametrima modela koje se dobro slažu s rezultatima mjerenja na različitim 3D Diracovim materijalima. Pokazano je da se i temperaturna ovisnost optičke vodljivosti iz eksperimenata može lako razumjeti, ili koristeći račun na konačnim temperaturama, ili pomoću efektivnog modela u kojem međuvrpčana mjera relaksacija ovisi o temperaturi. Primijećena je velika razlika u strukturi transportnih koeficijenata između 2D i 3D Diracovih sustava. U 2D sustavima primijećena je značajna komponenta efektivnog broja nosioca naboja međuvrpčanog porijekla. U 3D sustavima ta je komponenta zanemariva. Porijeklo te razlike jest u dodatnom faktoru k u $\mathrm{d}\mathbf{k}$ u 3D integralima s obzirom na $\mathrm{d}\mathbf{k}$ u 2D integralima.

Ključne riječi: Diracovi polumetali, grafen, heksagonalni borov nitrid, optička svojstva, transportna svojstva, dinamička vodljivost

Transport and optical properties of Dirac semimetals

Abstract

2D and 3D Dirac materials have been intensively studied for the last 15 years. They are characterized by the fact that the dispersions of conduction electrons resemble the dispersion of relativistic Dirac electrons. Since the discovery of the first Dirac materials, great attention has been devoted to the explanation of their transport and optical properties. In this thesis, the optical properties of 2D and 3D Dirac systems are studied in detail. Hexagonal boron nitride is an example of a 2D system with finite Dirac mass, and Bi_2Se_3 is a typical 3D Dirac semimetal. For those two examples, the calculation of the elements of the conductivity tensor is performed by using the relaxation time approximation. The dependences of the conductivity tensor on various parameters, on doping, on the interband gap and on relaxation times, are determined.

In typical Dirac semimetals, the low-energy optical conductivity consists of intraband and interband contributions. The intraband contributions are found to have simple dependences on the doping level and on the value of the interband gap. The interband contributions, on the other hand, have dependences on the model parameters that agree well with the results of measurements on different 3D Dirac materials. In this thesis, it is shown that the temperature dependence of the interband optical conductivity found in experiments can be easily understood, either by using the finite temperature approach, or by using an effective model in which the interband relaxation rate is temperature dependent. A large difference between transport coefficients in 2D and 3D Dirac systems is found. In 2D systems, there is a significant interband contribution to the effective number of charge carriers. In 3D systems, this component is negligible. The origin of this difference is in the additional factor k in $\mathrm{d}\mathbf{k}$ in 3D integrals with respect to $\mathrm{d}\mathbf{k}$ in 2D integrals.

Keywords: Dirac semimetals, graphene, hexagonal boron nitride, optical properties, transport properties, dynamical conductivity

Sadržaj

1 Uvod **1**

1.1 Diracova relativistička jednadžba - Diracovi elektroni 2

1.1.1 Skraćeni zapis Diracovog hamiltonijana 4

1.1.2 Disperzija Diracovih elektrona 4

1.2 Diracovi elektroni u kristalnim sustavima 5

1.3 2D Diracovi elektroni 5

2 Heksagonalni borov nitrid (hBN) **8**

2.1 Bravaisova i recipročna rešetka u hBN-u 8

2.2 Blochove energije vodljivih elektrona u hBN-u 9

2.2.1 Diracov režim 13

2.3 Blochove funkcije valentnih elektrona u hBN-u 14

3 Optička svojstva hBN-a **16**

3.1 Strujne vršne funkcije 16

3.2 Strujne vršne funkcije u hBN kristalu 17

3.3 Račun induciranih struja 18

3.4 Dinamički tenzor vodljivosti 20

3.4.1 Unutarvrpčani doprinos u nedopiranom hBN-u 20

3.4.2 Unutarvrpčani doprinosi u dopiranom hBN-u 21

3.4.3 Koncentracija elektrona/šupljina 22

3.5 Međuvrpčani doprinos u nedopiranom hBN-u 23

3.5.1 Međuvrpčani doprinos u dopiranom hBN-u 23

3.6 Ukupna vodljivost u grafenu i u hBN-u 25

4 Diracovi polumetali **30**

4.1 Elementi hamiltonijana anizotropnog 3D Diracovog modela 30

4.1.1 Elementi hamiltonijana anizotropnog 3D Diracovog modela u skraćenom zapisu 32

4.2 Blochove energije 33

4.3 Blochove funkcije valentnih elektrona 33

5 Optička i transportna svojstva Diracovih polumetala **36**
5.1 Strujne vršne funkcije u 3D Diracovom modelu 37
5.2 Dinamički tenzor vodljivosti u 3D Diracovom modelu 39
5.3 Unutarvrpčani doprinos u nedopiranom Diracovom polumetalu 39
5.3.1 Unutarvrpčani doprinos u dopiranom Diracovom polumetalu . 40
5.3.2 Koncentracija nosioca naboja 42
5.4 Međuvrpčani doprinos u Diracovom polumetalu 42
5.4.1 Dopirani Diracovi polumetali 44
5.4.2 Izotropni slučaj 44
5.5 Ukupna vodljivost u izotropnom Diracovom polumetalu 45

6 Zaključak **51**

Dodaci **53**

A Transformacija iz reprezentacije delokaliziranih atomskih orbitala u reprezentaciju Blochovih funkcija **53**
A.1 Unitarne transformacije 53
A.2 Prikaz operatora u proširenoj matričnoj reprezentaciji 55

B Minimalna supstitucija u modelu čvrsto vezanih elektrona **57**
B.1 Peierlsova minimalna supstitucija za slobodne elektrone 57
B.2 Čvrsto vezani elektroni u vanjskom elektromagnetskom polju 58

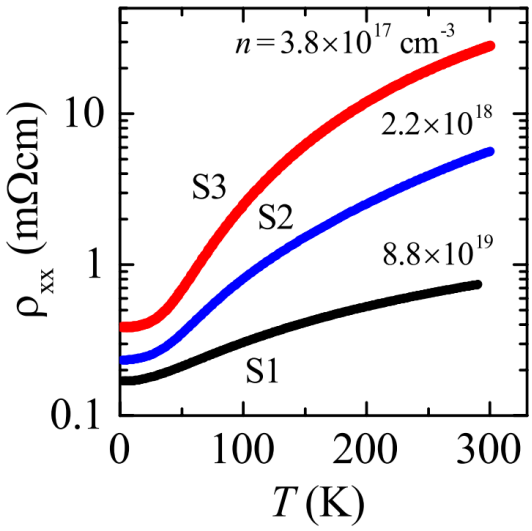
C Transportne jednadžbe gibanja: račun tenzora vodljivosti **60**
C.1 Neravnotežna funkcija raspodjele 60
C.2 Boltzmannova transportna jednadžba 60
C.3 Ohmov zakon 62
C.4 Kvantne transportne jednadžbe 63
C.5 Modeli s više vrpci 64

D Blochove funkcije u anizotropnom 3D Diracovom modelu **65**
D.1 Slučaj $M = 0$ 65
D.2 Pomoćna reprezentacija $\{m\mathbf{k}\}$ 66
D.3 Slučaj $M \neq 0$ 68

Literatura **70**

1 Uvod

Transportna svojstva poluvodičkih sustava ovise o svojstvima vodljivih i valentnih elektrona koja su često komplicirana. Rezultat su komplicirane ovisnosti transportnih koeficijenata o temperaturi i o parametrima modela. Diracovi polumetali u ovome nisu iznimka. Dapače, kod njih su te ovisnosti još složenije, jer disperzije elektrona nisu kvadratne u valnom vektoru, kao što je to u običnim poluvodičima a procjep između valentne i vodljive vrpce je obično mali i usporediv s temperaturom. Slika 1.1 prikazuje tipične rezultate za otpornost u $TlBi(S_{1-x}Se_x)_2$ sustavima [1]. Ovakvu

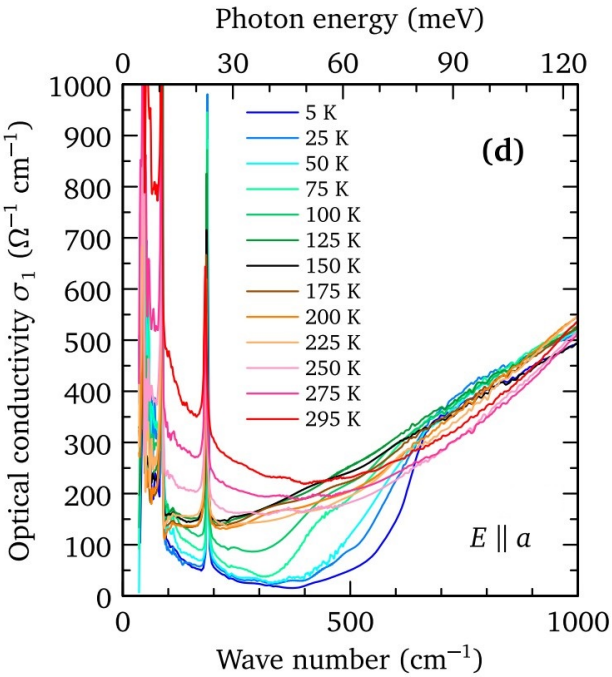


Slika 1.1: Mjerenje ovisnosti električne otpornosti o temperaturi u tri $TlBi(S_{1-x}Se_x)_2$ sustava s različitom koncentracijom elektrona [1].

ovisnost o temperaturi moguće je razumjeti jedino u modelu u kojem o temperaturi ovise, ne samo relaksacijska vremena elektrona, već i efektivni brojevi nosioca naboja.

Efektivne brojeve nosioca naboja možemo proučavati i mjereći optička svojstva materijala. Slika 1.2 prikazuje mjerenja optičke vodljivosti $ZrTe_5$ sustava za niz temperatura u rasponu od $5\,\mathrm{K}$ do sobne temperature [2]. Ovisnost o temperaturi ponovno je komplicirana, djelomično od temperaturne ovisnosti relaksacijskih vremena, a djelomično zbog složene međuigre termalne energije i energetskih skala u elektronskom modelu koji opisuje vodljive i valentne elektrone u tom 3D Diracovom sustavu. Slične ovisnosti $\rho_{xx}(T)$ i $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega, T)$ izmjerene su i u ostalim 3D Diracovim sustavima [3].

U ovom radu glavna pozornost dana je optičkim svojstvima 2D i 3D Diracovih sustava u granici $T \to 0\,\mathrm{K}$. Rezultati koje ćemo dobiti moći će se primijeniti i na



Slika 1.2: Ovisnost realnog dijela optičke vodljivosti $\sigma_1(\omega)$ o frekvenciji u $ZrTe_5$ sustavima za niz temperatura. [2].

analizu transportnih svojstava. Naime, sve formule koje ćemo izvesti bit će dane za konačne temperature i omogućit će pažljivu kvantitativnu analizu efektivnih brojeva nosioca naboja. Pitanje koje ćemo ovdje ostaviti po strani jest kako relaksacijska vremena ovise o temperaturi budući da ćemo koristiti fenomenološku aproksimaciju relaksacijskih vremena. U duhu toga, slike će prikazivati rezultate numeričkih računa dobivenih za $T = 0\,\mathrm{K}$.

1.1 Diracova relativistička jednadžba - Diracovi elektroni

Schrödingerova jednadžba

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) \tag{1.1}$$

predstavlja kvantnu valnu jednadžbu koja opisuje gibanje slobodnog elektrona čija je brzina nerelativistička. Ta jednadžba je diferencijalna jednadžba 2. reda u prostornoj i 1. reda u vremenskoj koordinati. Ona je invarijantna na Galilejeve transformacije, no nije invarijantna na Lorentzove transformacije. Ovdje je Ψ dvokomponentni spinor. Veza energije slobodnog elektrona i njegovog impulsa je oblika $\varepsilon(\mathbf{k}) = (\hbar\mathbf{k})^2/2m$.

Dirac je načinio relativističko poopćenje kvantne valne jednadžbe za slobodni elektron spina $1/2$ koji se giba brzinom koja je blizu brzine svjetlosti. Da bi ta jed-

nadžba bila relativistička ona mora biti invarijantna na Lorentzove transformacije. To znači da mora ovisiti o derivacijama po prostornoj i vremenskoj koordinati na simetričan način. On je pokazao da ta jednadžba (Diracova relativistička jednadžba) ima oblik

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \big(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta m_D c^2\big)\Psi(\mathbf{r},t). \tag{1.2}$$

Ψ je sada četverokomponentan spinor, a $\boldsymbol{\alpha}$ i β su četiri 4×4 matrice koje ne ovise ni o jednoj od veličina $\mathbf{r}$, t, $\mathbf{p}$, ε. Matrice α_x, α_y, α_z i β (Diracove matrice) međusobno antikomutiraju a njihov je kvadrat jedinična matrica. Postoje različiti načini da se izaberu takve matrice. Originalni Diracov izbor (zvat ćemo ga $\alpha_1\alpha_2$-reprezentacija Diracovih matrica) su matrice

$$\begin{aligned}
\alpha_x = \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \\
\alpha_z = \alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{1.3}$$

Ovdje su σ_α tri Paulijeve matrice, a u izrazima na desnoj strani jednakosti I i 0 su 2×2 jedinična i nul matrica.

Ako se u ovim matricama zamijene 2. i 3. redak i 2. i 3. stupac dolazimo do $\alpha_1\gamma_1$-reprezentacije Diracovih matrica

$$\begin{aligned}
\alpha_x \equiv \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \qquad \alpha_y \equiv \gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_x \\ i\sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \\
\alpha_z \equiv \delta_1 &= \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, \qquad \beta \equiv \sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{1.4}$$

U ovom radu koristit ćemo $\alpha_1\alpha_2$-reprezentaciju. Da olakšamo usporedbu s literaturom na nekim mjestima ćemo koristiti i $\alpha_1\gamma_1$-reprezentaciju.

1.1.1 Skraćeni zapis Diracovog hamiltonijana

Da bismo maksimalno pojednostavnili zapis računa koji slijede uvodimo sljedeće kratice

$$K_\alpha = c\hbar k_\alpha, \qquad \alpha = x, y, z, \qquad M = m_D c^2. \tag{1.5}$$

Diracov hamiltonijan prikazan u $\alpha_1\alpha_2$-reprezentaciji sada možemo zapisati na način

$$H_D = \begin{pmatrix} MI & \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -MI \end{pmatrix}. \tag{1.6}$$

Ovdje ponovno I označava 2×2 jediničnu matricu. Veličinu M zvat ćemo parametar Diracove mase a $\mathbf{K}$ reskalirani impuls (ili valni vektor).

1.1.2 Disperzija Diracovih elektrona

Kao što je spomenuto, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ je četverokomponentni spinor

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_3(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \tag{1.7}$$

Da bismo riješili Diracovu jednadžbu pretpostavljamo za svaku od četiriju komponenti $\Psi_i(\mathbf{r}, t)$ oblik

$$\Psi_i(\mathbf{r}, t) = u_i e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon t/\hbar)}, \qquad i = 1, 2, 3, 4. \tag{1.8}$$

Dobivamo sustav od četiri linearne homogene jednadžbe za amplitude u_i. Uvjet rješivosti tog sustava daje četiri rješenja s po dvije dva puta degenerirane energije

$$\varepsilon_{P,M}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + m_D^2 c^4} \equiv \pm\sqrt{\mathbf{K}^2 + M^2}. \tag{1.9}$$

Detaljni račun dan je u poglavlju 4.

1.2 Diracovi elektroni u kristalnim sustavima

Vodljivi elektroni u kristalima nisu slobodni. Unatoč tome, njihove disperzije u okolicama točaka visoke simetrije u prvoj Brillouinovoj zoni nalikuju disperziji nerelativističkih ili relativističkih slobodnih elektrona. U jednostavnim vodljivim sustavima u blizini Γ točke ($\mathbf{k} = 0$ točka u prvoj Brillouinovoj zoni) disperzija je oblika

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2m_{\alpha\alpha}}, \tag{1.10}$$

gdje su $m_{\alpha\alpha}$ elementi tenzora efektivne mase.

Diracovi polumetali su kristalni sustavi čija je simetrija takva da se disperzija u okolici Diracovih točaka može aproksimirati sa

$$\varepsilon_{P,M}(\mathbf{k}) \approx \pm\sqrt{\mathbf{K}^2 + \mathcal{M}^2(\mathbf{k})}. \tag{1.11}$$

Prva razlika u odnosu na relativistički slobodni elektron je u tome da je brzina u izrazu za $K_\alpha = v_{F\alpha}\hbar k_\alpha$ grupna brzina elektrona u Diracovoj točki. Ona može biti anizotropna. Druga razlika je ta da se parametar Diracove mase sastoji od dva doprinosa. Prvi ne ovisi o $\mathbf{k}$ i on je analogan masi relativističkog elektrona, a drugi je disperzivan doprinos ($\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M + \Delta M(\mathbf{k})$ u poglavlju 4). Slika 1.3 prikazuje rezultate *ab initio* računa za tipičan sustav u kojem imamo jednu Diracovu točku smještenu u Γ točki prve Brillouinove zone [4]. U pojasu od $\varepsilon_D - 1\,\mathrm{eV}$ do $\varepsilon_D + 1\,\mathrm{eV}$ disperziju elektrona možemo dobro opisati formulom (1.11). ε_D je energija elektrona u Diracovoj točki.

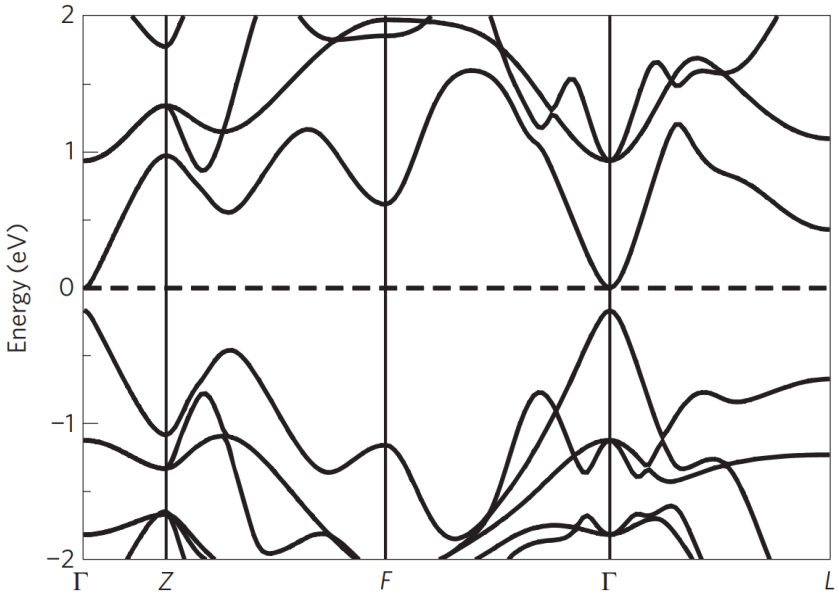
1.3 2D Diracovi elektroni

Postoji široka klasa 2D kristala kod kojih vodljivi elektroni imaju disperziju sličnu disperziji relativističkog slobodnog elektrona. Disperzija ponovno ima oblik

$$\varepsilon_{P,M}(\mathbf{k}) \approx \pm\sqrt{\mathbf{K}^2 + M^2}, \qquad \mathbf{K}^2 = K_x^2 + K_y^2, \tag{1.12}$$

u blizini Diracovih točaka. Grafen, koji je prvi otkriveni 2D sustav, karakteriziran je sa $M = 0$, što vodi do disperzije

$$\varepsilon_{P,M}(\mathbf{k}) \approx \pm v_F \hbar |\tilde{\mathbf{k}}| \tag{1.13}$$



Slika 1.3: *Ab initio* izračun disperzije elektrona u tipičnom sustavu s jednom Diracovom točkom u Γ točki prve Brillouinove zone (Bi_2Se_3). Nedopirani materijal ima Fermijev nivo ($E_F = 0$) smješten u energetskom procjepu vodljive i valentne vrpce. Energija u Diracovoj točki ε_D je u procjepu između tih vrpci, a energetski procjep jednak je $2\mathcal{M}(\mathbf{k} = 0)$ [4].

u okolici dvije Diracove točke (točke K i K' u prvoj Brillouinovoj zoni). Slika 1.4 prikazuje rezultate *ab initio* računa [5], a slika 1.5 prikazuje rezultate mjerenja kutno razlučive fotoemisijske spektroskopije [6]. S obadvije slike vidimo da je ovisnost linearna o $|\tilde{\mathbf{k}}|$ u pojasu od $\varepsilon_D - 1\,\mathrm{eV}$ do $\varepsilon_D + 1\,\mathrm{eV}$. Ovdje je $\tilde{\mathbf{k}}$ valni vektor mjeren prema valnom vektoru Diracove točke (detalji su dani u poglavlju 2).

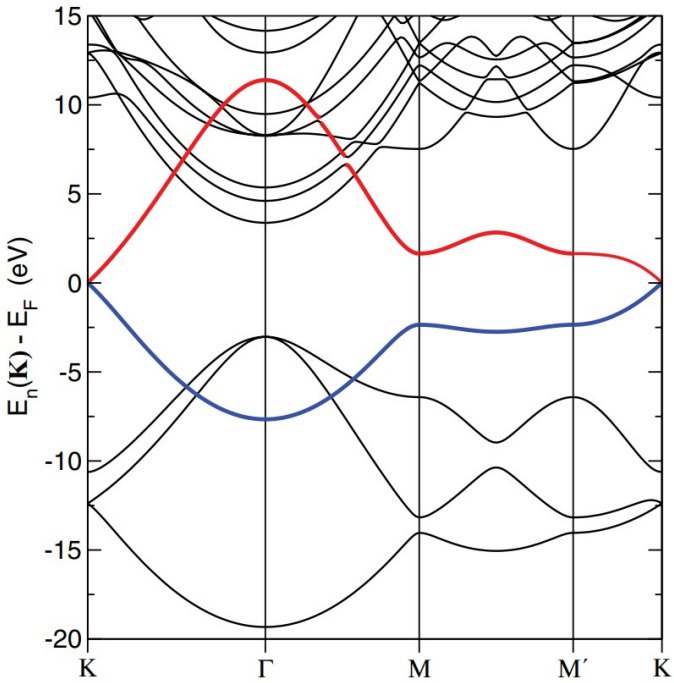
Lako se vidi da su 2D Diracovi elektroni rješenje Schrödingerove jednadžbe

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = (v_F\hbar\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\sigma} + M\sigma_z)\Psi(\mathbf{r},t), \tag{1.14}$$

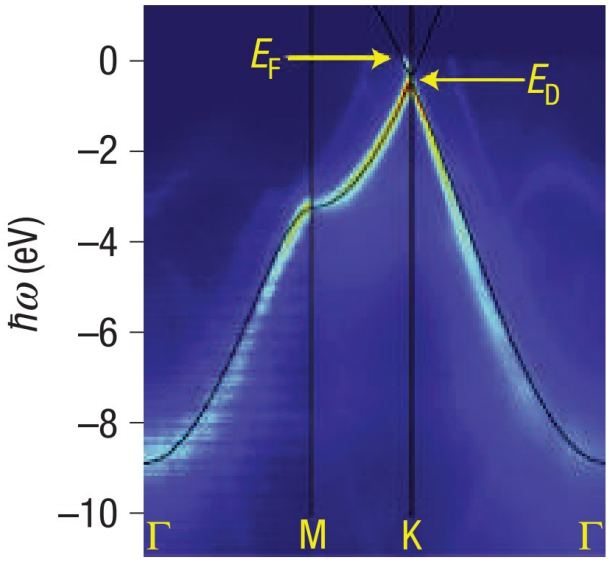
gdje je $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. U ovom slučaju hamiltonijan možemo prikazati pomoću 2×2 matrice

$$H_D = \begin{pmatrix} M & K_- \\ K_+ & -M \end{pmatrix}, \qquad K_\pm = v_F\hbar(k_x \pm ik_y). \tag{1.15}$$

Ψ je dvokomponentan spinor. Vidimo da je 2D problem formalno ekvivalentan $M = 0$ inačici 3D problema u kojem je naknadno načinjena zamjena $K_z \to M$.



Slika 1.4: *Ab initio* izračun disperzije elektrona za grafen. Plava crta označava π vrpcu, a crvena označava π^* vrpcu u grafenu. Elektronska disperzija je linearna u K točki u području od $E_D - 1\,\mathrm{eV}$ do $E_D + 1\,\mathrm{eV}$. Elektronska struktura grafena detaljno je objašnjena u poglavlju 2 [5].



Slika 1.5: Mjerenje kutno razlučive fotoemisijske spektroskopije (ARPES) u jednoslojnom grafenu. Slika prikazuje disperziju elektrona u području energija $\hbar\omega < E_F$. Oko valnih vektora u blizini točke K javlja se linearna disperzija. Disperzija je linearna u području energija od $E_D - 1\,\mathrm{eV}$ do E_F. Diracova točka označena je sa E_D, a Fermijev nivo sa E_F [6].

2 Heksagonalni borov nitrid (hBN)

2.1 Bravaisova i recipročna rešetka u hBN-u

Heksagonalni borov nitrid (hBN) kristalizira u formi 2D heksagonalne Bravaisove rešetke, slično kristalu grafena. U grafenu u primitivnoj ćeliji imamo dva atoma ugljika, dok u hBN-u imamo jedan borov i jedan dušikov atom. Elektronska konfiguracija atoma N ($1s^1 2s^2 2p^3$) i B ($1s^1 2s^2 2p^1$) vodi do sp^2 hibridizacije σ orbitala kao i u grafenu. Hibridne orbitale zaslužne su za snažne σ kovalentne veze i veliku energiju kohezije. Preostale $2p_z$ orbitale vežu se π vezama i odgovorne su za niskoenergetska optička i transportna svojstva ovih materijala. Budući da imamo dva atoma s po četiri orbitale ($2s$ i tri $2p_x$) imat ćemo šest σ vrpci i dvije π vrpce. π vrpce označavat ćemo indeksima π^* i π i zvat ćemo ih vodljive vrpce.

Slika 2.1 prikazuje raspored atoma u saćastoj rešetci. Kao što vidimo, riječ je o 2D heksagonalnoj Bravaisovoj rešetci s dva atoma u bazi. Primitivne vektore možemo izabrati na način

$$\mathbf{a_1} = a(1,0), \quad \mathbf{a_2} = \frac{a}{2}(1,\sqrt{3}), \tag{2.1}$$

gdje je a konstanta rešetke. Položaji atoma u bazi jesu:

$$\mathbf{r_B} = \mathbf{r_1} = \vec{0}, \quad \mathbf{r_N} = \mathbf{r_2} = \frac{1}{3}(\mathbf{a_1} + \mathbf{a_2}). \tag{2.2}$$

Volumen primitivne ćelije u dvije dimenzije definiran je sa $V = \mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \hat{k})$. U ovom je slučaju rezultat

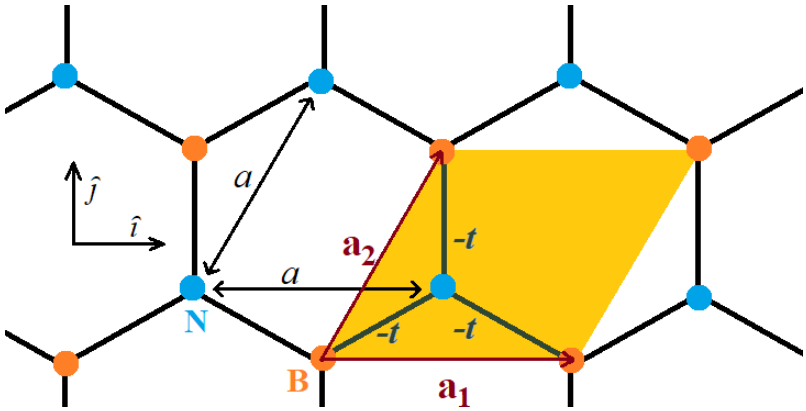
$$V = \mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \hat{k}) = \mathbf{a_2} \cdot (\hat{k} \times \mathbf{a_1}) = \mathbf{a_2} \cdot (a\hat{j}) = \frac{\sqrt{3}a^2}{2}. \tag{2.3}$$

To predstavlja površinu romba primitivne ćelije.

Primitivne vektore recipročne rešetke računamo pomoću primitivnih vektora Bravaisove rešetke. Iz definicijskih relacija dobivamo:

$$\mathbf{b_1} = \frac{2\pi}{V}(\mathbf{a_2} \times \hat{k}) = a^*(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}), \quad \mathbf{b_2} = \frac{2\pi}{V}(\hat{k} \times \mathbf{a_1}) = a^*(0,1), \tag{2.4}$$

gdje je $a^* = (4\pi/\sqrt{3}a)$ duljina primitivnih vektora recipročne rešetke. Vektori $\mathbf{b}_1$ i $\mathbf{b}_2$ prikazani su na slici 2.2.



Slika 2.1: Primitivna ćelija (žuto) i primitivni vektori 2D heksagonalne Bravaisove rešetke. U hBN-u imamo dva različita atoma u bazi, B i N, a u grafenu dva ugljikova atoma. Koordinatni sustav koji će se koristiti u računima također je označen. Matrični elementi preskoka između prvih susjeda označeni su na slici sa $-t$, $t > 0$.

2.2 Blochove energije vodljivih elektrona u hBN-u

U ovom nas poglavlju zanima opis vodljivih elektrona u hBN-u, u vrpcama koje su izgrađene od $2p_z$ orbitala na borovom i dušikovom atomu. Te vrpce označavat ćemo indeksima π^* i π. Problem možemo prikazati u tri različite reprezentacije: (1) lokaliziranih atomskih orbitala $\psi_l(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n) = \langle \mathbf{r}|l\mathbf{R}_n\rangle$, $l = a, b$, (2) delokaliziranih atomskih orbitala $\psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|l\mathbf{k}\rangle$, (3) reprezentaciji Blochovih valnih funkcija $\Psi_{L\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|L\mathbf{k}\rangle$. Vektori $|l\mathbf{R}_n\rangle$ i $|l\mathbf{k}\rangle$ vezani su standardnim relacijama za čvrsto vezane elektrone

$$|l\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} |l\mathbf{R}_n\rangle, \tag{2.5}$$

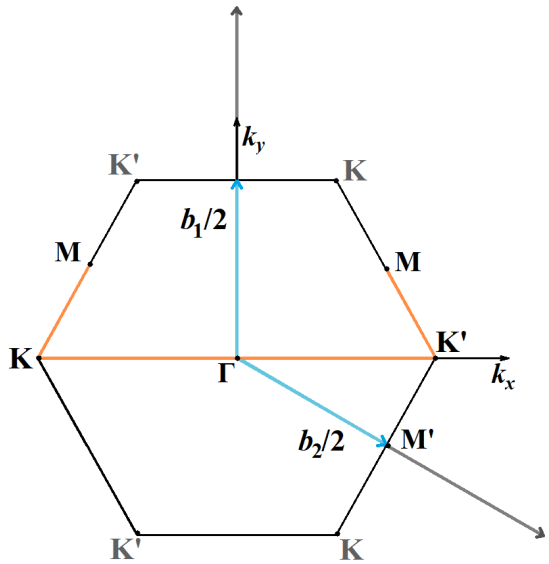
$$|l\mathbf{R}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} |l\mathbf{k}\rangle. \tag{2.6}$$

Vektori $|l\mathbf{k}\rangle$ i $|L\mathbf{k}\rangle$ vezani su unitarnim transformacijama koje su detaljno objašnjene u Dodatku A,

$$|l\mathbf{k}\rangle = \sum_L U_{\mathbf{k}}(l, L)|L\mathbf{k}\rangle, \tag{2.7}$$

$$|L\mathbf{k}\rangle = \sum_L U^*_{\mathbf{k}}(l, L)|l\mathbf{k}\rangle. \tag{2.8}$$

Budući da su energije $2p_z$ orbitala na atomima B i N različite, minimalni model čvrsto vezanih elektrona uključuje matrični element preskoka između prvih susjeda, $-t$, $t > 0$, te razliku energija $2\Delta = E_B - E_N$. Sve matrične elemente koji opisuju preskoke



Slika 2.2: Prva Brillouinova zona 2D heksagonalne Bravaisove rešetke, s označenim točkama visoke simetrije. Linija $M - K - \Gamma - K' - M$ uzduž koje će se kasnije crtati disperzije elektrona također je označena (narančasto).

između prvih susjednih orbitala možemo u reprezentaciji lokaliziranih atomskih orbitala kompaktno zapisati na način (indeksi $l = a$ i b odnose se na orbitale na B i N atomima)

$$\langle b\mathbf{R_{n'}}|V|a\mathbf{R_n}\rangle = -t(\delta_{\mathbf{R_{n'}},\mathbf{R_n}} + \delta_{\mathbf{R_{n'}},\mathbf{R_n}+\mathbf{a_1}} + \delta_{\mathbf{R_{n'}},\mathbf{R_n}+\mathbf{a_2}}), \tag{2.9}$$

gdje je V kristalni potencijal. Ti matrični elementi su prikazani na slici 2.1.

Lako se vidi da ukupni hamiltonijan možemo prikazati u reprezentaciji delokaliziranih atomskih orbitala, u kojoj su vektori baze delokalizirane atomske orbitale $|l\mathbf{k}\sigma\rangle$, l=a, b, na način

$$H = \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}\sigma} H_0^{ll'}(\mathbf{k})|l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l'\mathbf{k}\sigma|. \tag{2.10}$$

Ovdje su $H_0^{ll'}(\mathbf{k})$ elementi matrice

$$\left(H_0^{ll'}(\mathbf{k})\right) = \begin{pmatrix} E_B & -te^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r_2}}(1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_1}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_2}}) \\ -te^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r_2}}(1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_1}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_2}}) & E_N \end{pmatrix}. \tag{2.11}$$

Radi jednostavnosti matrične elemente pišemo pomoću kratica $t(\mathbf{k})$ i Δ na način

$$\begin{aligned} &H_0^{aa}(\mathbf{k}) = \Delta, \quad H_0^{bb}(\mathbf{k}) = -\Delta, \\ &H_0^{ba}(\mathbf{k}) = \left(H_0^{ab}(\mathbf{k})\right)^* \equiv t(\mathbf{k}) = -te^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r_2}}(1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_1}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_2}}), \end{aligned} \tag{2.12}$$

(tu smo izabrali da je $E_B + E_N = 0$). Da bismo odredili disperzije vodljivih elektrona krećemo od Schrödingerove jednadžbe

$$[H - E]|L\mathbf{k}\sigma\rangle = 0. \tag{2.13}$$

Koristimo relaciju (A.5) iz Dodatka A,

$$|L\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_l \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)|l\mathbf{k}\sigma\rangle, \quad l = a, b, \tag{2.14}$$

u kojoj je $\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)$ matrični element matrice koja je hermitski konjugirana matrici $\hat{U}_{\mathbf{k}}$. U Dodatku A pokazali smo da te matrice možemo pisati na način

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \big(U_{\mathbf{k}}(l,L)\big), \quad \hat{U}^{\dagger}_{\mathbf{k}} = \big(\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)\big), \tag{2.15}$$

uz $\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l) = U^*_{\mathbf{k}}(l,L)$. U hBN-u je $l = a, b$ te $L = P, M$.

Množenjem ove Schödingerove jednadžbe sa $\langle l\mathbf{k}\sigma|$ slijeva dobivamo

$$\sum_{l'} \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l')[H_0^{ll'}(\mathbf{k}) - E\delta_{l,l'}] = 0, \tag{2.16}$$

ili

$$\sum_{l'} U^*_{\mathbf{k}}(l',L)[H_0^{ll'}(\mathbf{k}) - E\delta_{l,l'}] = 0. \tag{2.17}$$

Netrivijalno rješenje ovog 2×2 sustava homogenih jednadžbi postoji ako pripadna determinanta iščezava. To se događa za energije

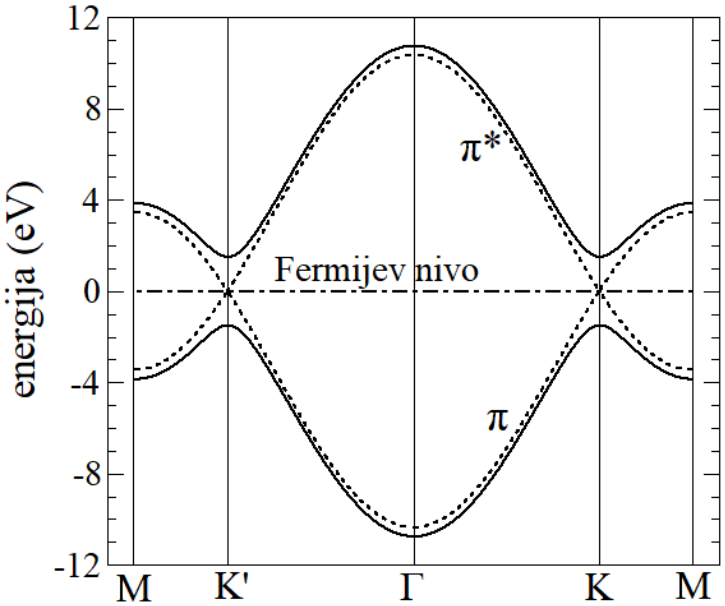
$$E = E_{P,M}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\Delta^2 + |t(\mathbf{k})|^2} \equiv \pm\sqrt{\Delta^2 + t^2 F(\mathbf{k})}. \tag{2.18}$$

Ovdje smo definirali funkciju $F(\mathbf{k})$ na način $F(\mathbf{k}) = |t(\mathbf{k})|^2/t^2 = 3 + 2\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_1}) + 2\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_2}) + 2\cos(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a_2} - \mathbf{a_1}))$. Direktnim uvrštavanjem dobivamo

$$F(k_x, k_y) = 3 + 2\cos(ak_x) + 4\cos(\frac{a}{2}k_x)\cos(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y). \tag{2.19}$$

U grafenu, gdje je $\Delta = 0$, disperzije vodljivih elektrona imaju oblik $E_{P,M}(\mathbf{k}) = \pm t\sqrt{F(\mathbf{k})}$, a u hBN-u $E_{P,M}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\Delta^2 + t^2 F(\mathbf{k})}$.

U 3D kristalima, gdje su Blochove energije funkcije od tri komponente valnog



Slika 2.3: Disperzije (2.18) vodljivih elektrona u hBN-u (pune crte), te grafenu (isprekidane crte), po liniji $M - K' - \Gamma - K - M$ prikazanoj na slici 1.2. Razlika između disperzija hBN-a i grafena najizraženija je u Diracovim točkama K' i K, gdje se u grafenu π i π^* vrpce dodiruju.

vektora, te energije crtamo uzduž linija visoke simetrije. Linije visoke simetrije jesu one koje spajaju točke visoke simetrije u prvoj Brillouinovoj zoni. U 2D kristalima je takav prikaz također pregledniji od 3D slika koje prikazuju funkcije $E_L(k_x, k_y)$. U 2D heksagonalnoj Bravaisovoj rešetki točke visoke simetrije u prvoj Brillouinovoj zoni jesu Γ točka koja se nalazi u centru zone te K, K', M i M' na rubovima zone. Na primjer, za tri K' točke na slici 2.2 vrijedi

$$\mathbf{k}_{K'} = \frac{1}{a}\left(\frac{4\pi}{3}, 0\right), \quad \frac{1}{a}\left(-\frac{2\pi}{3}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right), \quad \frac{1}{a}\left(-\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right). \tag{2.20}$$

Slika 2.3 prikazuje disperziju dviju vodljivih vrpci u hBN-u za tipične vrijednosti parametara t i Δ te slične disperzije dobivene u slučaju kada je procjep u Diracovim točkama zatvoren. Iznos matričnog elementa t izabran je na način da je

$$\frac{1}{m_{xx}(\mathbf{k}=0)} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_M(\mathbf{k})}{\partial k_x^2}\Big|_{\mathbf{k}=0} = \frac{1}{m}. \tag{2.21}$$

U slučaju grafena i hBN-a s međuvrpčanim procjepom od $2\Delta = 3\,\mathrm{eV}$ to se dobiva za $t \approx 3.5\,\mathrm{eV}$. Ovdje je m masa slobodnog elektrona.

2.2.1 Diracov režim

U nedopiranom hBN-u vrpca niže energije je popunjena, a viša je prazna. Stanja najbliža Fermijevoj energiji u okolici su Diracovih točaka K i K'. Stoga je za modeliranje niskoenergetskih svojstava dovoljno promatrati elektrone blizu tih točaka. Ako uvedemo kraticu $\tilde{\mathbf{k}}$ da označava razliku $\mathbf{k} - \mathbf{k}_K$ i ako pretpostavimo da je $a|\tilde{\mathbf{k}}| \ll 1$, tada možemo pisati

$$E_{P,M}(\tilde{\mathbf{k}}) = \pm\sqrt{\Delta^2 + t^2\frac{3a^2}{4}|\tilde{\mathbf{k}}|^2} = \pm\sqrt{\Delta^2 + v_F^2|\tilde{\mathbf{p}}|^2}, \tag{2.22}$$

gdje je $\tilde{\mathbf{p}} = \hbar\tilde{\mathbf{k}}$. Ovaj se rezultat u slučaju $\Delta = 0$ svodi na linearnu disperziju $E_{P,M}(\tilde{\mathbf{k}}) = \pm v_F|\tilde{\mathbf{p}}|$.

U najnižem redu razvoja po $\tilde{\mathbf{k}}$ funkcije $F(\mathbf{k})$ i $t(\mathbf{k})$ poprimaju oblik $F(\tilde{\mathbf{k}}) = (3a^2/4)|\tilde{\mathbf{k}}|^2$, odnosno $t(\tilde{\mathbf{k}}) = -v_F\hbar(\tilde{k}_x + i\tilde{k}_y)$. Nakon uvrštavanja kratica (2.12) u izraz (2.11) dobivamo sljedeći skraćeni zapis hamiltonijana

$$\left(H_0^{ll'}(\mathbf{k})\right) = \begin{pmatrix} \Delta & |t(\mathbf{k})|e^{-i\phi(\mathbf{k})} \\ |t(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})} & -\Delta \end{pmatrix}. \tag{2.23}$$

Ovdje smo kompleksnu funkciju $t(\mathbf{k})$ zapisali u formama $t(\mathbf{k}) \equiv t_r(\mathbf{k}) + it_i(\mathbf{k}) = |t(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})}$, gdje je pomoćna faza $\phi(\mathbf{k})$ definirana na način $\tan\phi(\mathbf{k}) = t_i(\mathbf{k})/t_r(\mathbf{k})$.

U blizini Diracovih točaka razvoj po malom $\tilde{\mathbf{k}}$ daje

$$\left(H_0^{ll'}(\tilde{\mathbf{k}})\right) = \begin{pmatrix} \Delta & v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|e^{-i\phi(\tilde{\mathbf{k}})} \\ v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|e^{i\phi(\tilde{\mathbf{k}})} & -\Delta \end{pmatrix}, \quad a|\tilde{\mathbf{k}}| \ll 1, \tag{2.24}$$

gdje je sada $\tan\phi(\tilde{\mathbf{k}}) = \tilde{k}_y/\tilde{k}_x$. Taj se izraz može također zapisati i na način

$$\left(H_0^{ll'}(\tilde{\mathbf{k}})\right) = \begin{pmatrix} \Delta & v_F\hbar(\tilde{k}_x - i\tilde{k}_y) \\ v_F\hbar(\tilde{k}_x + i\tilde{k}_y) & -\Delta \end{pmatrix} = v_F(p_x\sigma_x + p_y\sigma_y + \Delta\sigma_z), \tag{2.25}$$

gdje su $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ Paulijeve matrice.

2.3 Blochove funkcije valentnih elektrona u hBN-u

U potpoglavlju 2.2 odredili smo Blochove energije valentnih elektrona u hBN-u. Sada ćemo odrediti i Blochove funkcije. Elementi matrice transformacije zadovoljavaju po dva para homogenih linearnih jednadžbi. Jedna od te dvije jednadžbe linearno je zavisna o drugoj. Za $L = P$ jednadžbe dobivamo uvrštavanjem energije $E_P(\mathbf{k})$ umjesto E,

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,a)[\Delta - E_P(\mathbf{k})] + \tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,b)|t(\mathbf{k})|e^{-i\phi(\mathbf{k})} = 0, \tag{2.26a}$$

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,a)|t(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})} + \tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,b)[-\Delta - E_P(\mathbf{k})] = 0. \tag{2.26b}$$

Slično, za $L = M$ dobivamo

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,a)[\Delta - E_M(\mathbf{k})] + \tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,b)|t(\mathbf{k})|e^{-i\phi(\mathbf{k})} = 0, \tag{2.27a}$$

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,a)|t(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})} + \tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,b)[-\Delta - E_M(\mathbf{k})] = 0. \tag{2.27b}$$

Da bismo dobili sve elemente matrice transformacije $\hat{U}^{\dagger}_{\mathbf{k}}$ korisno je uvesti kraticu $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\Delta^2 + |t(\mathbf{k})|^2}$ te riješiti sustav od dvije jednadžbe koji čini homogena jednadžba iz dva gornja para jednadžbi i jednadžba koja vodi brigu o normiranosti Blochovih funkcija. Dakle, za $L = P$ rješavamo jednadžbe

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,a)|t(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})} + \tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,b)[-\Delta - E(\mathbf{k})] = 0 \tag{2.28}$$

$$\sum_l |\tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,l)|^2 = 1, \tag{2.29}$$

a za $L = M$ jednadžbe

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,a)[\Delta + E(\mathbf{k})] + \tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,b)|t(\mathbf{k})|e^{-i\phi(\mathbf{k})} = 0 \tag{2.30}$$

$$\sum_l |\tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,l)|^2 = 1. \tag{2.31}$$

Rješenje je

$$\begin{pmatrix} \tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,a) & \tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,b) \\ \tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,a) & \tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,b) \end{pmatrix} = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} \Delta + E(\mathbf{k}) & |t(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})} \\ |t(\mathbf{k})| & -(\Delta + E(\mathbf{k}))e^{i\phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix}, \tag{2.32}$$

gdje je norma ovih Blochovih funkcija $N = \sqrt{|t(\mathbf{k})|^2 + (\Delta + E(\mathbf{k}))^2}$. Zapis matrice transformacije $\hat{U}^\dagger_{\mathbf{k}}$ možemo pojednostavniti definiranjem dviju pomoćnih faza. Krećemo od opće forme koju ima 2×2 unitarna matrica

$$\hat{U}^\dagger_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha\, e^{i\gamma} \\ \sin\alpha & -\cos\alpha\, e^{i\gamma} \end{pmatrix}, \tag{2.33}$$

gdje obje faze α i γ po pretpostavci ovise o $\mathbf{k}$. Usporedba s izrazom (2.32) neposredno daje $\gamma(\mathbf{k}) = \phi(\mathbf{k})$. Kako bismo odredili fazu $\alpha(\mathbf{k})$ uspoređujemo omjere

$$\frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} = \frac{\tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,a)}{\tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,a)} = \frac{|t(\mathbf{k})|}{\Delta + E(\mathbf{k})} \tag{2.34}$$

i prevodimo ih na oblik

$$\frac{\sin 2\alpha}{\cos 2\alpha + 1} = \frac{|t(\mathbf{k})|/E(\mathbf{k})}{\Delta/E(\mathbf{k}) + 1}, \tag{2.35}$$

što neposredno daje $\tan 2\alpha = |t(\mathbf{k})|/\Delta$. Rezultat svega jesu matrice transformacije $\hat{U}^\dagger_{\mathbf{k}}$ i $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ čiji su elementi funkcije dviju faza $\theta(\mathbf{k}) = 2\alpha(\mathbf{k})$ i $\phi(\mathbf{k})$,

$$\begin{pmatrix} \tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,a) & \tilde{U}_{\mathbf{k}}(P,b) \\ \tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,a) & \tilde{U}_{\mathbf{k}}(M,b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^*_{\mathbf{k}}(a,P) & U^*_{\mathbf{k}}(b,P) \\ U^*_{\mathbf{k}}(a,M) & U^*_{\mathbf{k}}(b,M) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} & \sin\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} e^{i\phi(\mathbf{k})} \\ \sin\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} & -\cos\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} e^{i\phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix}. \tag{2.36}$$

Dvije faze zadovoljavaju relacije

$$\tan\theta(\mathbf{k}) = \frac{|t(\mathbf{k})|}{\Delta} \quad \text{i} \quad \tan\phi(\mathbf{k}) = \frac{t_i(\mathbf{k})}{t_r(\mathbf{k})}. \tag{2.37}$$

3 Optička svojstva hBN-a

3.1 Strujne vršne funkcije

Kao što je pokazano u Dodatku B, vanjska makroskopska elektromagnetska polja vežu se na sustav vodljivih elektrona na način opisan minimalnom supstitucijom. U modelu čvrsto vezanih elektrona originalni izraz (B.18), koji opisuje vezanje vanjskog vektorskog potencijala na gustoću struje, prelazi u

$$H_1^{ext} = \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{kq}\sigma} \delta H_0^{ll'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) |l\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma\rangle\langle l'\mathbf{k}\sigma|, \tag{3.1}$$

gdje je

$$\delta H_0^{ll'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \approx -\frac{q}{\hbar c} \sum_{\alpha} \frac{\partial H_0^{ll'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} A_\alpha(\mathbf{q}). \tag{3.2}$$

Koristeći oznaku $j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k})$ za strujnu vršnu funkciju,

$$j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k}) = \frac{q}{\hbar} \frac{\partial H_0^{ll'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}, \tag{3.3}$$

hamiltonijan vezanja (3.1) možemo zapisati na način

$$H_1^{ext} = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_\alpha(\mathbf{q}) \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}} j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k}) |l\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma\rangle\langle l'\mathbf{k}\sigma|. \tag{3.4}$$

Ovo predstavlja zapis hamiltonijana vezanja u $\{l\mathbf{k}\sigma\}$ reprezentaciji delokaliziranih atomskih orbitala. Tu treba primijetiti da $j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k})$ predstavlja vodeći član u razvoju po malom $\mathbf{q}$. Ta aproksimacija je u redu zato što promatramo vezanje na vanjska makroskopska elektromagnetska polja za koje je $\mathbf{q} \approx 0$.

Da bismo mogli provesti račun unutarvrpčanih i međuvrpčanih doprinosa vodljivosti potrebno je naći strujne vršne funkcije u Blochovoj $\{L\mathbf{k}\sigma\}$ reprezentaciji. Koristeći transformaciju (A.24) i izraz za matricu transformacije $\hat{U}_\mathbf{k}^\dagger$ dobivamo

$$J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) = \sum_{ll'} U_\mathbf{k}(l,L) U_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^*(l',L') j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k}). \tag{3.5}$$

Hamiltonijan vezanja sada poprima oblik

$$H_1^{ext} = -\frac{1}{c}\sum_{\mathbf{q}\alpha} A_\alpha(\mathbf{q}) \sum_{LL'} \sum_{\mathbf{kq}} J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) |L\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma\rangle\langle L'\mathbf{k}\sigma|. \tag{3.6}$$

U izrazu (3.5) i dalje imamo ovisnost o $\mathbf{q}$ u $U^*_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(l',L')$. Budući da je $\mathbf{q} \approx 0$, strujne vršne funkcije $J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{q})$ aproksimiramo s vodećim članom u razvoju po malom $\mathbf{q}$,

$$J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \approx J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}) = \sum_{ll'} U_{\mathbf{k}}(l,L) U^*_{\mathbf{k}}(l',L') j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k}). \tag{3.7}$$

3.2 Strujne vršne funkcije u hBN kristalu

U hBN-u goli hamiltonijan prikazan u $\{l\mathbf{k}\sigma\}$ reprezentaciji dan je izrazom (2.23). Shodno tome gole strujne vršne funkcije $j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k})$ možemo izračunati koristeći formulu (3.3)

$$j_\alpha^{ba}(\mathbf{k}) = \left(j_\alpha^{ab}(\mathbf{k})\right)^* = \frac{q}{\hbar}\frac{\partial t(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}, \quad j_\alpha^{aa}(\mathbf{k}) = j_\alpha^{bb}(\mathbf{k}) = 0. \tag{3.8}$$

Strujne vršne funkcije prikazane u $\{L\mathbf{k}\sigma\}$ reprezentaciji, $L = P, M$, računamo pomoću elemenata matrice transformacije $\hat{U}^\dagger_{\mathbf{k}}$ za hBN. Direktnim uvrštavanjem u (3.7) dobivamo

$$J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}) = \frac{q}{\hbar}\left[\frac{\partial t(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} U_{\mathbf{k}}(b,L) U^*_{\mathbf{k}}(a,L') + \frac{\partial t^*(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} U_{\mathbf{k}}(a,L) U^*_{\mathbf{k}}(b,L')\right], \tag{3.9}$$

gdje su elementi matrice transformacije dani sa (2.36). U računu se pojavljuju sljedeće kombinacije matričnih elemenata:

$$\frac{1}{2|t(\mathbf{k})|}\left[\frac{\partial t(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} t^*(\mathbf{k}) + \frac{\partial t^*(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} t(\mathbf{k})\right] = \frac{\partial |t(\mathbf{k})|}{\partial k_\alpha}, \tag{3.10}$$

$$\frac{1}{2|t(\mathbf{k})|}\left[\frac{\partial t(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} t^*(\mathbf{k}) - \frac{\partial t^*(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} t(\mathbf{k})\right] = i|t(\mathbf{k})|\frac{\partial \phi(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}, \tag{3.11}$$

gdje je ponovno $t(\mathbf{k}) = |t(\mathbf{k})|e^{i\phi(\mathbf{k})}$. Unutarvrpčani doprinosi, $L = L'$, imaju oblik

$$J_\alpha^{PP}(\mathbf{k}) = -J_\alpha^{MM}(\mathbf{k}) = \frac{q}{\hbar}\frac{\partial |t(\mathbf{k})|}{\partial k_\alpha}\sin\theta(\mathbf{k}), \tag{3.12}$$

dok za međuvrpčane doprinose, $L \neq L'$, imamo

$$J_\alpha^{MP}(\mathbf{k}) = \left(J_\alpha^{PM}(\mathbf{k})\right)^* = -\frac{q}{\hbar}\frac{\partial|t(\mathbf{k})|}{\partial k_\alpha}\cos\theta(\mathbf{k}) - i\frac{q}{\hbar}|t(\mathbf{k})|\frac{\partial\phi(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}. \tag{3.13}$$

U grafenu, gdje je $\Delta = 0$, pomoćna je faza jednostavno jednaka $\theta(\mathbf{k}) = \pi/2$. Izrazi za $L = L'$ svode se na

$$J_\alpha^{PP}(\mathbf{k}) = -J_\alpha^{MM}(\mathbf{k}) = \frac{q}{\hbar}\frac{\partial|t(\mathbf{k})|}{\partial k_\alpha} = \frac{q}{\hbar}\frac{\partial E_P(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} \equiv q v_\alpha^P(\mathbf{k}), \tag{3.14}$$

gdje je $v_\alpha^L(\mathbf{k}) = \partial E_L(\mathbf{k})/\partial p_\alpha$ grupna brzina elektrona. Za $L \neq L'$ rezultat je

$$J_\alpha^{MP}(\mathbf{k}) = \left(J_\alpha^{PM}(\mathbf{k})\right)^* = -i\frac{q}{\hbar}|t(\mathbf{k})|\frac{\partial\phi(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}. \tag{3.15}$$

S druge strane za konačni Δ, ali u blizini K točke izrazi se također mogu pojednostavniti. Budući da u Diracovom režimu vrijedi $|t(\tilde{\mathbf{k}})| = v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|$ i $\phi(\tilde{\mathbf{k}}) = \tan^{-1}\tilde{k}_y/\tilde{k}_x$, sa $\mathbf{k} = \mathbf{k}_K + \tilde{\mathbf{k}}$, strujne vršne funkcije poprimaju oblik

$$J_\alpha^{PP}(\tilde{\mathbf{k}}) = -J_\alpha^{MM}(\tilde{\mathbf{k}}) \approx q v_F \frac{\tilde{k}_\alpha}{|\tilde{\mathbf{k}}|}\sin\theta(\mathbf{k}) \tag{3.16}$$

za unutarvrpčane doprinose, te

$$J_x^{MP}(\tilde{\mathbf{k}}) = \left(J_x^{PM}(\tilde{\mathbf{k}})\right)^* \approx -q v_F \frac{\tilde{k}_x}{|\tilde{\mathbf{k}}|}\cos\theta(\mathbf{k}) + i q v_F \frac{\tilde{k}_y}{|\tilde{\mathbf{k}}|}, \tag{3.17}$$

$$J_y^{MP}(\tilde{\mathbf{k}}) = \left(J_y^{PM}(\tilde{\mathbf{k}})\right)^* \approx -q v_F \frac{\tilde{k}_y}{|\tilde{\mathbf{k}}|}\cos\theta(\mathbf{k}) - i q v_F \frac{\tilde{k}_x}{|\tilde{\mathbf{k}}|}, \tag{3.18}$$

za međuvrpčane doprinose.

3.3 Račun induciranih struja

Ohmov zakon govori o tome da u teoriji linearnog odziva inducirana struja predstavlja odziv sustava na smetnju koja je u ovom slučaju makroskopsko električno polje. Tenzor vodljivosti odzivna je funkcija koja povezuje te dvije veličine. U sustavima

koji su invarijantni na translacije u prostoru i vremenu ta veza ima oblik

$$J_\alpha^{ind}(\mathbf{q},\omega) = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) E_\beta(\mathbf{q},\omega). \tag{3.19}$$

Da bismo odredili $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)$, možemo koristiti semiklasične Boltzmannove jednadžbe ili standardne kvantnomehaničke jednadžbe.

U modelima s jednom vrpcom u oba slučaja možemo induciranu struju zapisati na način (Dodatak C)

$$J_\alpha^{ind}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} q v_\alpha(\mathbf{k}) \delta f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega), \tag{3.20}$$

ovdje je q naboj kvazičestica koje nose struju, a $v_\alpha(\mathbf{k})$ je grupna brzina tih kvazičestica. U ovom je izrazu $\delta f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega) = f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega) - f_0(\mathbf{k})$ neravnotežni dio neravnotežne funkcije raspodjele, $f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega)$ je neravnotežna funkcija raspodjele, a $f_0(\mathbf{k})$ je Fermi-Diracova funkcija raspodijele. Kao što smo vidjeli u potpoglavlju 3.2, produkt $qv_\alpha(\mathbf{k}) \equiv J_\alpha(\mathbf{k})$ predstavlja unutarvrpčanu strujnu vršnu funkciju.

Generalizacija na modele s više vrpci objašnjena je u Dodatku C.4. Induciranu struju sada možemo pisati na način

$$J_\alpha^{ind}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{V}\sum_{LL'}\sum_{\mathbf{k}\sigma} J^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)\delta f^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega). \tag{3.21}$$

Ovdje $J^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)$ predstavlja unutarvrpčane i međuvrpčane strujne vršne funkcije iz potpoglavlja 3.2, a $\delta f^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega)$ poopćena je neravnotežna funkcija raspodjele.

Kao što je objašnjeno u Dodatku C, funkcija $\delta f^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega)$ zadovoljava (kvantnu) transportnu jednadžbu

$$(\hbar\omega + \varepsilon_{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma^{LL'})\delta f^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega) = -(f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}_+))\mathbf{P}^{L'L}(\mathbf{k}_+,\mathbf{k})\cdot\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega). \tag{3.22}$$

Ovdje se pojavljuje poopćenje relaksacijskog vremena $\Gamma^{LL'}$ i dipolna vršna funkcija $\mathbf{P}^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) = i\hbar\mathbf{J}^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)/\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}_+,\mathbf{k})$. U ovim izrazima koristimo pokrate $\mathbf{k}_+ = \mathbf{k}+\mathbf{q}$, $f_L(\mathbf{k}) = f_0(\varepsilon_L(\mathbf{k}))$ te $\varepsilon_{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) = \varepsilon_L(\mathbf{k}) - \varepsilon_{L'}(\mathbf{k}_+)$. Budući da je $J_\alpha^{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) =$

$qv_\alpha^L(\mathbf{k}) = q[\partial\varepsilon^L(\mathbf{k})/\partial p_\alpha]$, vidimo da

$$P_\alpha^{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) \approx \frac{i\hbar q v_\alpha^L(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon_L(\mathbf{k})/\partial p_\alpha \hbar q_\alpha} = \frac{iq}{q_\alpha} \tag{3.23}$$

predstavlja unutarvrpčanu dipolnu vršnu funkciju, koja je direktno vezana s unutarvrpčanom nabojnom funkcijom $q^{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) \approx q$ i sa strujnom vršnom funkcijom $J_\alpha^{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) = qv_\alpha^L(\mathbf{k})$.

3.4 Dinamički tenzor vodljivosti

Uvrštavanjem izraza za $\delta f^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega)$ iz transportne jednadžbe (3.22) u izraz za induciranu struju (3.21) nalazimo dinamički tenzor vodljivosti

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q},\omega) = \sum_{LL'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{i\hbar|J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)|^2}{\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}_+,\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}_+)}{\hbar\omega + \varepsilon_{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma^{LL'}}. \tag{3.24}$$

Ta odzivna funkcija zbroj je dvaju doprinosa – unutarvrpčanog doprinosa ($L = L'$) i međuvrpčanog doprinosa ($L \neq L'$):

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q},\omega) = \sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q},\omega) + \sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q},\omega). \tag{3.25}$$

U hBN-u imamo dvije vrpce, $L = P, M$, što daje dva unutarvrpčana i dva međuvrpčana doprinosa.

3.4.1 Unutarvrpčani doprinos u nedopiranom hBN-u

U hBN-u unutarvrpčani doprinos dan je sa $L = L' = P, M$ članovima,

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q},\omega) = \sum_{L} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{i\hbar|J_\alpha^{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)|^2}{\varepsilon_{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)} \frac{f_L(\mathbf{k}_+) - f_L(\mathbf{k})}{\hbar\omega + \varepsilon_{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma^{LL}}. \tag{3.26}$$

Disperzije elektrona u dvije vrpce dane su sa (2.22),

$$\varepsilon_{P,M}(\mathbf{k}) = \pm\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\Delta^2 + (v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|)^2} = \pm v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|\frac{\sqrt{\Delta^2 + (v_F\hbar\tilde{\mathbf{k}})^2}}{v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|} = \pm\frac{v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|}{\sin\theta(\mathbf{k})}. \tag{3.27}$$

Ovdje smo u zadnjoj jednakosti iskoristili pomoćnu fazu $\theta(\mathbf{k})$ danu u (2.37). U nedopiranom slučaju i niskim temperaturama Fermijeva energija leži u procjepu između

dviju vrpci, pa su oba doprinosa važna.

U dugovalnoj granici, $\mathbf{q} \to 0$, izraz za $\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)$ se pojednostavnjuje. Doprinos $\varepsilon_{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+)$ u nazivniku jest zanemariv, a razliku dviju Fermi-Diracovih funkcija raspodjele u brojniku možemo razviti do vodećega člana u q_α. Rezultat je

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \sum_L \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{i\hbar |J_\alpha^{LL}(\mathbf{k})|^2}{\hbar\omega + i\hbar/\tau} \left(-\frac{\partial f_L(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_L(\mathbf{k})} \right). \tag{3.28}$$

Ovdje je ponovno $J_\alpha^{LL}(\mathbf{k}) = e v_\alpha^L(\mathbf{k})$ ($q = e < 0$) strujna vršna funkcija te $\Gamma_{LL} = 1/\tau$.

Ako definiramo efektivni broj nosioca naboja na način

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \sum_L \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} m |v_\alpha^L(\mathbf{k})|^2 \left(-\frac{\partial f_L(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_L(\mathbf{k})} \right), \tag{3.29}$$

unutarvrpčanu vodljivost možemo zapisati u formi

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{i\hbar}{\hbar\omega + i\hbar/\tau} n_{\alpha\alpha}^{eff}. \tag{3.30}$$

3.4.2 Unutarvrpčani doprinosi u dopiranom hBN-u

Fizikalno je puno zanimljiviji slučaj kada je hBN dopiran elektronima ili šupljinama. U tom je slučaju Fermijev nivo u gornjoj ili u donjoj vrpci. Na primjer, kod dopiranja šupljinama doprinos od termalno pobuđenih elektrona iz gornje vrpce možemo zanemariti, pa dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{i\hbar e^2 |v_\alpha^M(\mathbf{k})|^2}{\hbar\omega + i\hbar/\tau} \left(-\frac{\partial f_M(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_M(\mathbf{k})} \right). \tag{3.31}$$

Sumu u tom izrazu možemo prevesti na integral. Ako je dopiranje malo, Fermijeva površina bit će u blizini Diracovih točaka K i K'. U tom slučaju zamjena ima oblik $\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} \to \sum_\nu \sum_\sigma \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} |\tilde{\mathbf{k}}| d\tilde{\mathbf{k}} d\varphi$. Ovdje jedan faktor 2 dolazi od dvije Diracove točke ($\sum_\nu = 2$), a drugi od $\sum_\sigma$. Granicu smo u radijalnom smjeru pustili u ∞ radi jednostavnosti. Kako bismo izvrijednili ovaj integral primjećujemo da kvadrat grupnih brzina $v_\alpha^M(\mathbf{k})$, koji je jednak $v_F^2 \sin^2\theta(\mathbf{k}) \tilde{k}_\alpha^2 / |\tilde{\mathbf{k}}|^2$, ovisi o kutu φ jer je $\tilde{k}_x = |\tilde{\mathbf{k}}| \cos\varphi$, $\tilde{k}_y = |\tilde{\mathbf{k}}| \sin\varphi$. Kutni doprinos stoga je jednak $\int_0^{2\pi} \cos^2\varphi = \int_0^{2\pi} \sin^2\varphi = \pi$. U

granici $T \to 0$ K dobivamo

$$-\frac{\partial f_M(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_M(\mathbf{k})} \approx \delta(\varepsilon_M(\mathbf{k}) - E_F) = \frac{\delta(|\tilde{\mathbf{k}}| - k_F)}{v_F \hbar \sin\theta(\mathbf{k})}, \tag{3.32}$$

gdje je $E_F = -\sqrt{\Delta^2 + (v_F \hbar \tilde{k}_F)^2}$ Fermijeva energija u slučaju hBN-a dopiranog šupljinama. Direktno uvrštavanje sada daje

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{1}{\pi}\frac{m}{\hbar} v_F \int_0^\infty \sin\theta(\mathbf{k}) |\tilde{\mathbf{k}}| d|\tilde{\mathbf{k}}| \delta(k_F - |\tilde{\mathbf{k}}|), \tag{3.33}$$

odnosno

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{\tilde{E}_F}{\pi}\frac{m}{\hbar^2}\sin\theta_F. \tag{3.34}$$

Ovdje smo definirali pomoćne veličine $\tilde{E}_F = v_F \hbar \tilde{k}_F$ i $\sin\theta_F = \sin\theta(k_F)$.

Realni dio unutarvrpčane vodljivosti (3.30) jest

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)\} = \frac{e^2}{m}\frac{1/\tau}{\omega^2 + (1/\tau)^2} n_{\alpha\alpha}^{eff}. \tag{3.35}$$

Uvrštavajući (3.34) u taj izraz dobivamo

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)\} = \frac{\pi e^2}{2h}\frac{4\tilde{E}_F}{\pi}\frac{\hbar/\tau}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau)^2}\sin\theta_F. \tag{3.36}$$

Iz definicije pomoćne faze $\tan\theta(\mathbf{k}) = v_F \hbar |\tilde{\mathbf{k}}|/\Delta$ vidimo da je za razliku energija $2p_z$ orbitala $\Delta = (E_B - E_N)/2 = 0$ ona jednaka $\theta(\mathbf{k}) = \pi/2$. U tom je slučaju $\sin\theta_F = 1$ te $\tilde{E}_F = E_F$. To je dobro poznati rezultat za grafen. U hBN-u je $\sin\theta_F < 1$ te $E_F = -\sqrt{\Delta^2 + \tilde{E}_F^2}$.

3.4.3 Koncentracija elektrona/šupljina

U dopiranom hBN-u za dovoljno male $\tilde{E}_F$ vrijedi (3.27). Dakle, koncentraciju nosioca naboja računamo pomoću izraza

$$n = \frac{1}{V}\sum_{\nu\tilde{\mathbf{k}}\sigma} \theta(k_F - |\tilde{\mathbf{k}}|). \tag{3.37}$$

Rezultat je

$$n = \frac{\tilde{E}_F^2}{\pi \hbar^2 v_F^2} \tag{3.38}$$

za obje vrste dopiranja ($\tilde{E}_F > 0$ i $\tilde{E}_F < 0$). Vidimo da n u Diracovom režimu ne ovisi o Diracovoj masi. Dakle, pomoćna energetska skala $|\tilde{E}_F|$ direktno mjeri koncentraciju nosioca naboja. Za isti $|\tilde{E}_F|$ koncentracija će biti ista u grafenu i u hBN-u.

3.5 Međuvrpčani doprinos u nedopiranom hBN-u

Međuvrpčani doprinos vodljivosti ($L \neq L'$) ima oblik

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q},\omega) = \sum_{L\neq L'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{i\hbar |J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)|^2}{\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}_+,\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}_+)}{\hbar\omega + \varepsilon_{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma^{LL'}}. \tag{3.39}$$

U dugovalnoj granici razlika energija $\varepsilon_{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) \approx \varepsilon_{LL'}(\mathbf{k})$ ne iščezava kao u unutarvrpčanom slučaju. Ovdje imamo $\varepsilon_{PM}(\mathbf{k}) = -\varepsilon_{MP}(\mathbf{k}) = 2\varepsilon(\mathbf{k})$. Budući da je $|J_\alpha^{MP}(\mathbf{k})|^2 = |J_\alpha^{PM}(\mathbf{k})|^2$, dobivamo

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} & \frac{i\hbar |J_\alpha^{MP}(\mathbf{k})|^2}{2\varepsilon(\mathbf{k})} \\ & \times \left\{ \frac{f_M(\mathbf{k}) - f_P(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2\varepsilon(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} - \frac{f_P(\mathbf{k}) - f_M(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\varepsilon(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\}.\end{aligned} \tag{3.40}$$

Ovdje smo sa Γ_2 označili međuvrpčane mjere relaksacija $\Gamma_2 = \Gamma^{PM} = \Gamma^{MP}$.

3.5.1 Međuvrpčani doprinos u dopiranom hBN-u

Ponovno biramo slučaj dopiranja šupljinama, te se ograničavamo na Diracov režim. U tom je slučaju ($\sum_\nu = 2$ za dvije Diracove točke, K i K')

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \to \sum_{\nu\tilde{\mathbf{k}}\sigma}, \quad f_P(\tilde{\mathbf{k}}) \approx 0 \tag{3.41}$$

te

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sqrt{\Delta^2 + (v_F\hbar\tilde{\mathbf{k}})^2} = \frac{v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|}{\sin\theta(\mathbf{k})}. \tag{3.42}$$

Dakle, rezultat je oblika

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{1}{V} \sum_{\nu\tilde{\mathbf{k}}\sigma} & \frac{i\hbar |J_\alpha^{MP}(\mathbf{k})|^2}{2\varepsilon(\mathbf{k})} \\ & \times \left\{ \frac{f_M(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2\varepsilon(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_M(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\varepsilon(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\},\end{aligned} \tag{3.43}$$

odnosno

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{1}{V}\sum_{\nu\tilde{\mathbf{k}}\sigma} \frac{i\hbar|J_\alpha^{MP}(\mathbf{k})|^2}{2v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|/\sin\theta(\mathbf{k})} \times \left\{ \frac{f_M(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|/\sin\theta(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_M(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|/\sin\theta(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\}. \tag{3.44}$$

U skladu sa (3.17) i (3.18) možemo pisati

$$|J_\alpha^{MP}(\mathbf{k})|^2 = e^2 v_F^2 \left(\frac{\tilde{k}_\alpha^2}{|\tilde{\mathbf{k}}|^2}\cos^2\theta(\mathbf{k}) + \frac{\tilde{k}_{\underline{\alpha}}^2}{|\tilde{\mathbf{k}}|^2} \right), \tag{3.45}$$

gdje je $\underline{\alpha} = y, x$ za $\alpha = x, y$. Slično unutarvrpčanom slučaju, sumu u (3.44) možemo zamijeniti integralom. Nakon toga možemo jednostavno izračunati kutni dio integrala.

Alternativno možemo primijetiti da je

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{1}{2}\big(\sigma_{xx}^{inter}(\omega) + \sigma_{yy}^{inter}(\omega)\big), \tag{3.46}$$

što nam omogućava da kvadrat strujnih vršnih funkcija računamo na način

$$\frac{1}{2}\left(|J_x^{MP}(\mathbf{k})|^2 + |J_y^{MP}(\mathbf{k})|^2\right) = \frac{1}{2}e^2 v_F^2\big(1 + \cos^2\theta(\mathbf{k})\big). \tag{3.47}$$

Rezultat je isti. Možemo ga napisati na nekoliko načina. Na primjer,

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{i}{2\pi}e^2 v_F \int_0^\infty d|\tilde{\mathbf{k}}|\big(1 + \cos^2\theta(\mathbf{k})\big)\sin\theta(\mathbf{k}) \times \left\{ \frac{f_M(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|/\sin\theta(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_M(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|/\sin\theta(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\}. \tag{3.48}$$

Ako koristimo supstituciju $X = v_F\hbar|\tilde{\mathbf{k}}|$ dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = i\frac{\pi e^2}{2h}\frac{1}{\pi}\int_0^\infty dX 2X \frac{1 + \cos^2 X}{\varepsilon(X)} \left\{ \frac{f(X)}{\hbar\omega - 2\varepsilon(X) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f(X)}{\hbar\omega + 2\varepsilon(X) + i\hbar\Gamma_2} \right\}, \tag{3.49}$$

gdje je $\varepsilon(X) = \sqrt{\Delta^2 + X^2}$, $f(X) = f(-\varepsilon(X))$ te $\cos X = \Delta/\varepsilon(X)$. Ako pak koristimo

supstituciju $Z = 2\varepsilon(\mathbf{k})$ dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = i\frac{\pi e^2}{2h}\frac{1}{\pi}\int_{2M}^{\infty} dZ \left(1 + \left(\frac{2\Delta}{Z}\right)^2\right) \times \left\{\frac{f(Z)}{\hbar\omega - Z + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f(Z)}{\hbar\omega + Z + i\hbar\Gamma_2}\right\}. \tag{3.50}$$

Treba primijetiti da u grafenu, gdje je $\Delta = 0$, dobivamo $Z = 2X = 2\varepsilon(\mathbf{k})$ te $\cos X = 0$. U tom slučaju, za $\hbar\omega > 0$, $T \to 0\,\mathrm{K}$ i $i\hbar\Gamma_2 \to i\eta$ dobivamo

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\} = \frac{\pi e^2}{2h}\theta(\hbar\omega - 2E_F). \tag{3.51}$$

Dakle, $\pi e^2/2h$ predstavlja zgodnu skalu za prikaz funkcije $Re\{\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)\}$ u 2D Diracovim sustavima.

U numeričkim računima funkcije $Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\}$ za međuvrpčani dio možemo koristiti izraz (3.50), ili ga možemo prevesti na oblik

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\} \approx \frac{\pi e^2}{2h}\frac{\hbar\omega}{\pi}\int_{2E_F}^{\infty}\frac{dZ}{Z}\left(1 + \left(\frac{2\Delta}{Z}\right)^2\right) \times \left\{\frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - Z)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} - \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + Z)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2}\right\}, \tag{3.52}$$

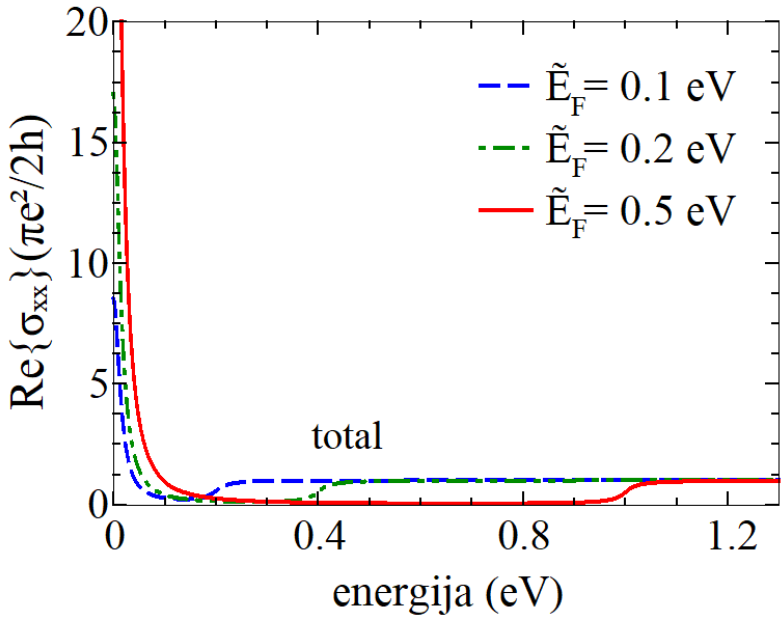
koji je dobiven tako što smo primijetili da najveći doprinos integralu potječe od područja gdje je $\hbar\omega \approx Z$ ili gdje je $\hbar\omega \approx -Z$, što je dobra aproksimacija za mali $\hbar\Gamma_2$.

3.6 Ukupna vodljivost u grafenu i u hBN-u

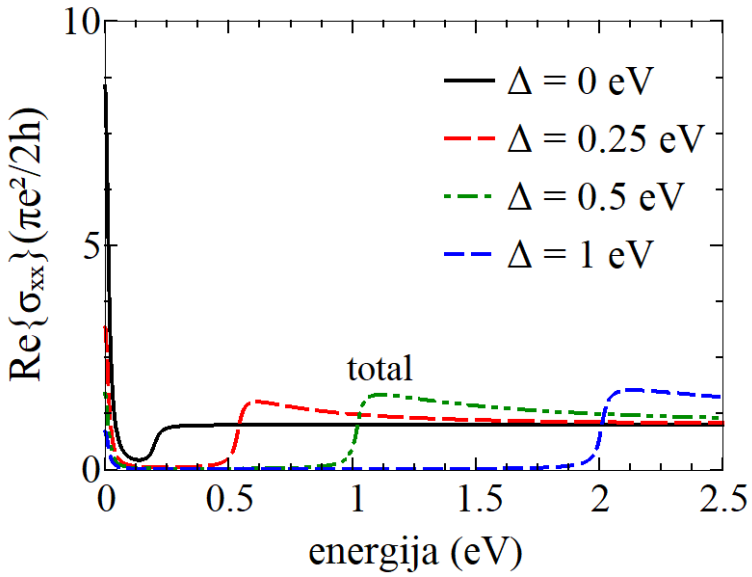
Slika 3.1 prikazuje funkciju

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)\} = \frac{\pi e^2}{2h}\frac{4\tilde{E}_F}{\pi}\frac{\hbar/\tau}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau)^2}\sin\theta_F + \frac{\pi e^2}{2h}\frac{1}{\pi}\int_{2E_F}^{\infty} dZ\left(1 + \left(\frac{2\Delta}{Z}\right)^2\right) \times \left\{\frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - Z)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} + \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + Z)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2}\right\} \tag{3.53}$$

u grafenu ($\Delta = 0$) za slučajeve $E_F = \tilde{E}_F = 0.1$, 0.2 i $0.5\,\mathrm{eV}$ te $\hbar\Gamma_1 = \hbar/\tau = 15\,\mathrm{meV}$ i $\hbar\Gamma_2 = 20\,\mathrm{meV}$.

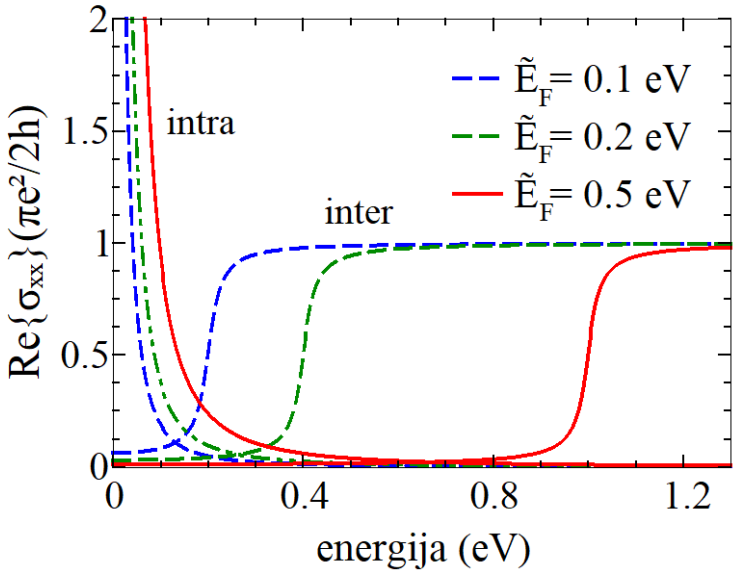


Slika 3.1: Vodljivost dopiranog grafena za dopiranja $E_F = \tilde{E}_F = 0.1$, 0.2 i $0.5\,\mathrm{eV}$. U vodljivosti dominira unutarvrpčani doprinos za energije $\hbar\omega < 2\tilde{E}_F$, a međuvrpčani doprinos za energije $\hbar\omega > 2\tilde{E}_F$.

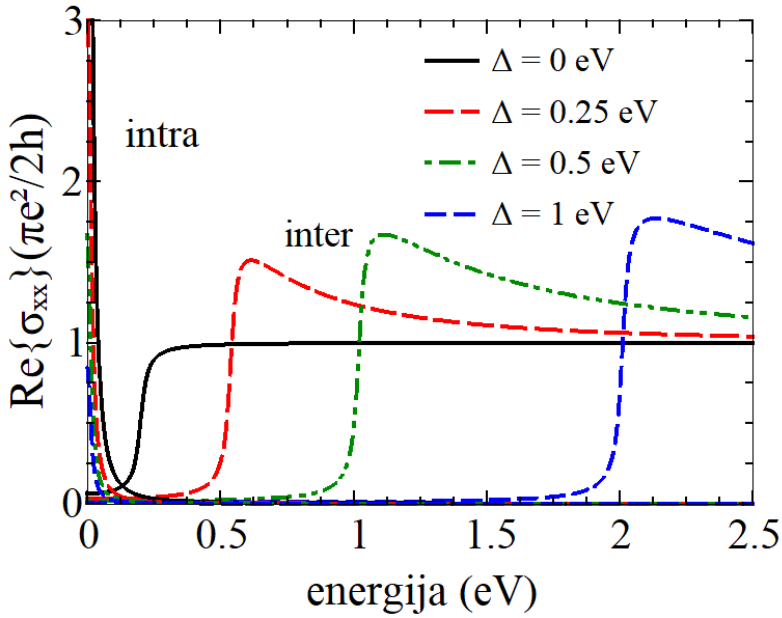


Slika 3.2: Vodljivost dopiranog hBN-a i dopiranog grafena za $\tilde{E}_F = 0.1\,\mathrm{eV}$. Radi preglednosti, prikazani su rezultati u hBN-u za različite vrijednosti procjepa 2Δ (0.5, 1 i $2\,\mathrm{eV}$). Unutarvrpčani doprinosi dominiraju za energije $\hbar\omega < E_F$ i umanjeni su za faktor $\sin\theta_F = \tilde{E}_F/E_F$ u odnosu na grafen. Međuvrpčani doprinosi dominiraju za energije $\hbar\omega > E_F$, s izraženim maksimumom oko energija $\hbar\omega = 2E_F$.

Slično, slika 3.2 prikazuje tu funkciju za konačnu vrijednost Diracove mase za $\tilde{E}_F = 0.1\,\mathrm{eV}$ te $\Delta = 0.25$, 0.5 i $1\,\mathrm{eV}$. Slike 3.3 i 3.4 prikazuju iste rezultate, pri čemu su unutarvrpčani i međuvrpčani doprinosi razdvojeni.



Slika 3.3: Odvojeni unutarvrpčani i međuvrpčani doprinosi vodljivosti grafena prikazani na slici 3.1.



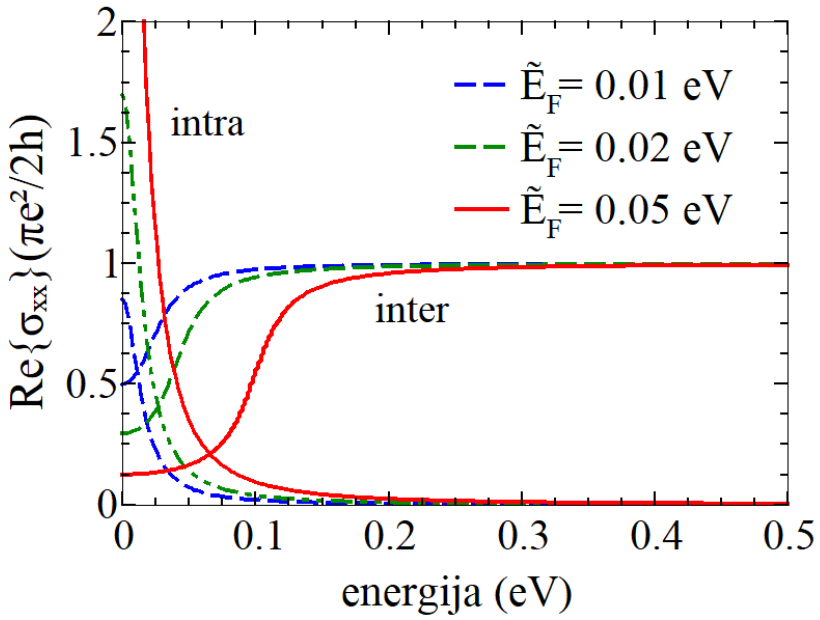
Slika 3.4: Odvojeni unutarvrpčani i međuvrpčani doprinosi vodljivosti hBN-a prikazani na slici 3.2. Međuvrpčani doprinos hBN-a ima izraženi maksimum koji nadmašuje procjenu u izrazu (3.51), dok je za $\hbar\omega > 0$ ovisnost u grafenu monotona rastuća funkcija.

Formula (3.53) krije u sebi različite efekte, od kojih su neki važni i za razmatranje vodljivosti i transportnih svojstava (3D) Diracovih polumetala. Slike 3.5 i 3.6 prikazuju dva najvažnija netrivijalna efekta. U grafenu u granici $\tilde{E}_F = E_F \to 0$ vodljivost je primarno međuvrpčanog porijekla. Izraz (3.34) predstavlja samo unutarvrpčani

doprinos efektivnoj koncentraciji. Dakle, generalno vrijedi

$$
\begin{aligned}
Re\{\sigma_{\alpha\alpha}(0)\} &= \frac{e^2\tau}{m} n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{e^2\tau}{m}(n_{\alpha\alpha}^{intra} + n_{\alpha\alpha}^{inter}), \\
n_{\alpha\alpha}^{intra} &= \frac{\tilde{E}_F}{\pi}\frac{m}{\hbar^2}\sin\theta_F.
\end{aligned}
\tag{3.54}
$$

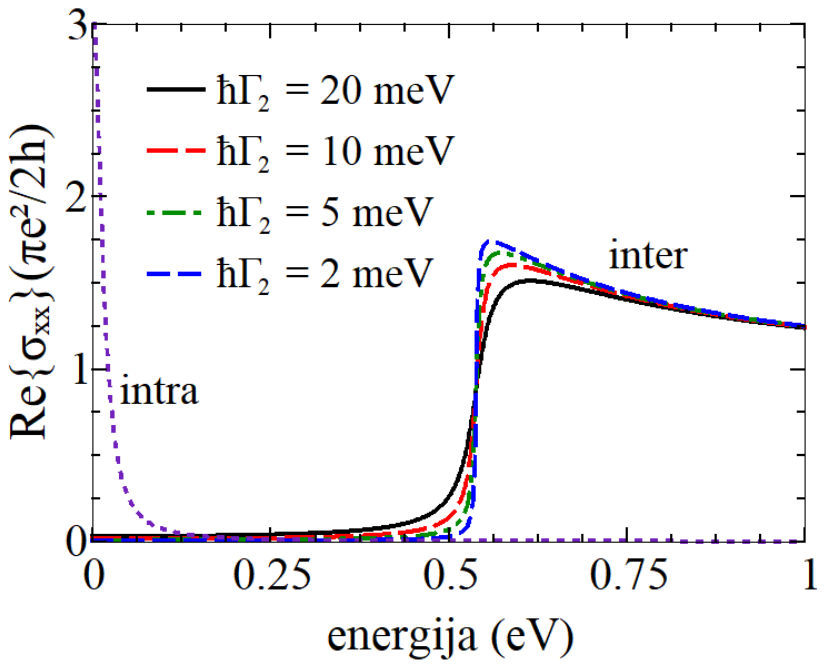
U hBN-u, s porastom parametra Diracove mase 2Δ udio $n_{\alpha\alpha}^{inter}$ u $n_{\alpha\alpha}^{eff}$ postaje sve manji, pa u tom slučaju izraz (3.34) predstavlja ukupan efektivni broj.



Slika 3.5: Vodljivost slabo dopiranog grafena. Za $\tilde{E}_F = E_F \to 0$ međuvrpčani udio značajan je i za $\hbar\omega \to 0$, te dominira u području $\hbar\omega > 2E_F$.

Slika 3.6 prikazuje kako se u hBN-u prag za međuvrpčane doprinose izoštrava kako smanjujemo $\hbar\Gamma_2$. Za jako mali $\hbar\Gamma_2$ dobivamo ponašanje koje je poznato iz razmatranja Q1D sustava s uređenjem tipa val gustoće naboja, gdje $Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\}$ pokazuje korijenski singularitet za $\hbar\omega \approx 2\Delta$ [7].

U poglavlju 5 vidjet ćemo na koji se način ova dva efekta promijene pri prijelazu iz 2D režima u 3D režim.

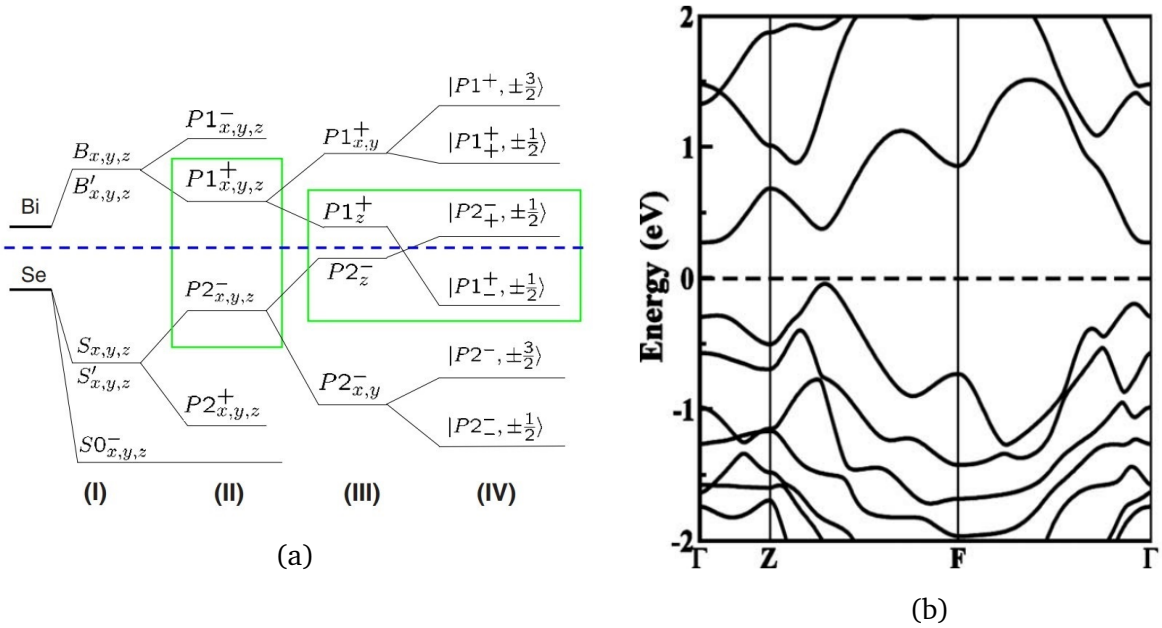


Slika 3.6: Izoštravanje praga međuvrpčane vodljivosti smanjivanjem međuvrpčane mjere relaksacija Γ_2.

4 Diracovi polumetali

4.1 Elementi hamiltonijana anizotropnog 3D Diracovog modela

Postoje različiti 3D kristalni sustavi u kojima elektroni pokazuju svojstva slična (3D) Diracovim relativističkim elektronima. $TlBi(S_{1-x}Se_x)_2$ je jedan primjer [8], a Bi_2Se_3 drugi primjer [4]. U uvodnom smo se poglavlju uvjerili da u Bi_2Se_3 elektroni imaju disperziju u blizini Γ točke koja se može opisati hamiltonijanom (1.6) u kojem je parametar Diracove mase zamijenjen sa $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M + \Delta M(\mathbf{k})$. Na slici 1.1 prikazani su rezultati *ab initio* računa u slučaju kada su zanemareni spin-orbit efekti. Slika 4.1(b) prikazuje rezultate poboljšanih računa gdje su uključeni i spin-orbit efekti. U člancima iz kojih su slike 1.1 i 4.1 [4] [9] načinjena je i detaljna analiza koja objašnjava na koji način kristalni potencijal, hibridizacija orbitala i spin-orbit vezanje utječu na strukturu vrpci u blizini Fermijevog nivoa. Slika 4.1(a) pokazuje što se događa s vanjskim orbitalama atoma Bi i Se kad se ti efekti postepeno uključuju. Četiri koraka uključuju: (I) hibridizaciju Bi i Se orbitala, (II) formiranje bonding i antibonding orbitala, (III) cijepanje orbitala kristalnim poljem i (IV) uključivanje spin-orbit vezanja. Zaključak je da su vodljiva i valentna vrpca izrađene primarno o složenih molekularnih orbitala koje se obično označavaju sa $|P1^+_-, \pm\frac{1}{2}\rangle$ i $|P2^-_+, \pm\frac{1}{2}\rangle$. Detalji u ovim oznakama nisu bitni za analizu koja slijedi, osim što treba naglasiti da $+\frac{1}{2}$ i $-\frac{1}{2}$ označavaju dvije vrijednosti angularnog momenta j, a ne spina σ. Svaka od ove dvije molekularne orbitale nalazi se u nekoj primitivnoj ćeliji, pa je puna oznaka $|P1^+_-, \mathbf{R}_n, \pm\frac{1}{2}\rangle$ i $|P2^-_+, \mathbf{R}_n, \pm\frac{1}{2}\rangle$. Standardnom transformacijom dolazimo do delokaliziranih molekularnih orbitala $|P1^+_-, \mathbf{k}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ i $|P2^-_+, \mathbf{k}, \pm\frac{1}{2}\rangle$. Autori tih članaka pokazali su da disperzije u blizini Diracove točke možemo dobiti rješavanjem 3D Diracove jednadžbe s minimalnim brojem parametara. Mi ovdje uvodimo skraćeni zapis delokaliziranih molekularnih orbitala. Indeksi a i b označavat će nam dvije vrste orbitale na način $|a\mathbf{k}{+}\frac{1}{2}\rangle \equiv |P2^-_+, \mathbf{k}, +\frac{1}{2}\rangle$, $|b\mathbf{k}{+}\frac{1}{2}\rangle \equiv |P1^+_-, \mathbf{k}, +\frac{1}{2}\rangle$, $|a\mathbf{k}{-}\frac{1}{2}\rangle \equiv |P2^-_+, \mathbf{k}, -\frac{1}{2}\rangle$, $|b\mathbf{k}{-}\frac{1}{2}\rangle \equiv |P1^+_-, \mathbf{k}, -\frac{1}{2}\rangle$. Dakle, naše je polazište efektivni Diracov hamiltonijan prika-



(a) (b)

Slika 4.1: (a) Evolucija relevantnih orbitala u tipičnom 3D sustavu hibridizacijom i spin-orbit cijepanjem u četiri koraka [9]. (b) *Ab initio* račun disperzije elektrona u Bi_2Se_3 u slučaju kad su uključeni spin-orbit efekti. Valentnu vrpcu pretežno sačinjavaju orbitale $|P1^+_-, \pm\frac{1}{2}\rangle$, a vodljivu orbitale $|P2^-_+, \pm\frac{1}{2}\rangle$ [9].

zan u $\alpha_1\gamma_1$-reprezentaciji iz uvodnog poglavlja, čiji je oblik

$$\big(H(\mathbf{k})\big) = \varepsilon_0(\mathbf{k})I_{4\times4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\mathbf{k}) & \mathcal{A}_1(k_z)k_z & 0 & \mathcal{A}_2(k_\perp)k_- \\ \mathcal{A}_1(k_z)k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) & \mathcal{A}_2(k_\perp)k_- & 0 \\ 0 & \mathcal{A}_2(k_\perp)k_+ & \mathcal{M}(\mathbf{k}) & -\mathcal{A}_1(k_z)k_z \\ \mathcal{A}_2(k_\perp)k_+ & 0 & -\mathcal{A}_1(k_z)k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} + o(\mathbf{k^2}). \tag{4.1}$$

Ovdje je $k_\pm = k_x \pm ik_y$, $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$. Parametri modela u hamiltonijanu jesu $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = C + D_1k_z^2 + D_2k_\perp^2$, $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M + M_1k_z^2 + M_2k_\perp^2$ i $\mathcal{A}_{1,2}(\mathbf{k}) = A_{1,2} + B_{1,2}k_{z,\perp}^2$ [4]. Oni sadrže disperzivne i nedisperzivne doprinose.

U prvom pojednostavljenju koje činimo zadržavamo samo doprinose linearne u valnom vektoru. Novi hamiltonijan poprima oblik

$$\big(H(\mathbf{k})\big) = CI_{4\times4} + \begin{pmatrix} M & A_1k_z & 0 & A_2k_- \\ A_1k_z & -M & A_2k_- & 0 \\ 0 & A_2k_+ & M & -A_1k_z \\ A_2k_+ & 0 & -A_1k_z & -M \end{pmatrix}. \tag{4.2}$$

Energije orbitala E_a, E_b i grupne brzine $v_{F\alpha}$ pojavljuju se u parametrima modela

na način $C = (E_a + E_b)/2$, $M = (E_a - E_b)/2$ i $A_{1,2} = v_{Fxy,z}\hbar$. Prvi član u (4.2) izjednačit ćemo s nulom zbog jednostavnosti, $(E_a + E_b)/2 = 0$. Također, za nedijagonalne elemente koristit ćemo reskalirani valni vektor $K_\alpha = v_{F\alpha}\hbar k_\alpha$, gdje smo dopustili i mogućnost da je grupna brzina anizotropna, $A_\alpha = v_{F\alpha}\hbar$, $\alpha = x, y, z$. Sustav $TlBi(S_{1-x}Se_x)_2$ zanimljiv je jer u njemu, promjenom udjela sumpora i selena u parametru $\mathcal{M}(\mathbf{k})$, dolazi do promjene predznaka s promjenom valnog vektora [8]. To se pokazalo da je indikator prijelaza iz Diracovog polumetalnog stanja u stanje topološkog izolatora. U skladu s time, u modelu (4.2) mi smo se usredotočili na Diracov polumetalni režim tako što smo uzeli da je $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M$. Dakle, $\mathcal{M}(\mathbf{k})$ ima isti predznak za sve valne vektore od interesa.

4.1.1 Elementi hamiltonijana anizotropnog 3D Diracovog modela u skraćenom zapisu

Konačna promjena na originalnom hamiltonijanu dodatna je zamjena u redoslijedu vektora baze. Ovo odgovara promjeni iz $\alpha_1\gamma_1$-reprezentacije u $\alpha_1\alpha_2$-reprezentaciju koja je objašnjena u potpoglavlju 1.1. Znači, bit će korištena baza s četiri orbitale $l = A, B, C, D$: $|A\mathbf{k}\rangle \equiv |a\mathbf{k}{+}\frac{1}{2}\rangle$, $|B\mathbf{k}\rangle \equiv |a\mathbf{k}{-}\frac{1}{2}\rangle$, $|C\mathbf{k}\rangle \equiv |b\mathbf{k}{+}\frac{1}{2}\rangle$, $|D\mathbf{k}\rangle \equiv |b\mathbf{k}{-}\frac{1}{2}\rangle$. Ovo nam daje konačni oblik hamiltonijana

$$H_0 = \sum_{ll'\mathbf{k}} H_0^{ll'}(\mathbf{k})|l\mathbf{k}\rangle\langle l'\mathbf{k}|, \tag{4.3}$$

gdje su $H_0^{ll'}(\mathbf{k})$ elementi matrice

$$\left(H_0^{ll'}(\mathbf{k})\right) = \begin{pmatrix} M & 0 & K_z & K_- \\ 0 & M & K_+ & -K_z \\ K_z & K_- & -M & 0 \\ K_+ & -K_z & 0 & -M \end{pmatrix}. \tag{4.4}$$

Koristeći standardne Paulijeve matrice $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ te oznaku $\mathbf{K} = (K_x, K_y, K_z)$, možemo pisati i kraće

$$\left(H_0^{ll'}(\mathbf{k})\right) = \begin{pmatrix} MI & \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -MI \end{pmatrix}, \tag{4.5}$$

kao što je pokazano i u potpoglavlju 1.1.1. Ovdje također koristimo oznaku I za jediničnu 2×2 matricu.

4.2 Blochove energije

Kao i u hBN-u, zanimaju nas disperzije vodljivih elektrona. Na isti način krećemo od Schrödingerove jednadžbe

$$[H - E]|L\mathbf{k}\sigma\rangle = 0, \tag{4.6}$$

gdje su Blochove valne funkcije dane sa

$$|L\mathbf{k}\rangle = \sum_l \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)|l\mathbf{k}\rangle, \quad l = A, B, C, D. \tag{4.7}$$

Ovdje su $\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)$ elementi matrice transformacije između reprezentacije delokaliziranih molekularnih orbitala $\{l\mathbf{k}\}$ i reprezentacije Blochovim funkcijama $\{L\mathbf{k}\}$.

Množenjem ove Schödingerove jednadžbe sa $\langle l\mathbf{k}|$ slijeva dobivamo

$$\sum_{l'} \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l')[H_0^{ll'}(\mathbf{k}) - E\delta_{l,l'}] = 0, \tag{4.8}$$

gdje dobivamo sustav homogenih linearnih jednadžbi. Determinanta sustava daje uvjet za netrivijalno rješenje. Koristeći kraći zapis (4.5) imamo

$$\begin{vmatrix} (M-E)I & \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -(M+E)I \end{vmatrix} = E^2 I - M^2 I - (\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = 0, \tag{4.9}$$

što daje energije

$$E_L(\mathbf{k}) = \varepsilon_L(\mathbf{k}) = s_L \varepsilon(\mathbf{k}) = s_L\sqrt{K^2 + M^2}, \tag{4.10}$$

gdje je $s_1 = s_2 = -s_3 = -s_4 = 1$, $K = \sqrt{\sum_\alpha K_\alpha^2}$. Sustav ima četiri vrpce, $L = 1, 2, 3, 4$. Dvije više vrpce $L = 1, 2$ i dvije niže $L = 3, 4$ vrpce degenerirane su u energiji.

4.3 Blochove funkcije valentnih elektrona

Kao što je pokazano u Dodatku A, korisno je uvesti oznake $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ i $\hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger$ za matrice transformacije između Blochovih funkcija i delokaliziranih molekularnih orbitala na način

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \big(U_{\mathbf{k}}(l,L)\big), \quad \hat{U}^{\dagger}_{\mathbf{k}} = \big(\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)\big). \tag{4.11}$$

To će nam značajno skratiti zapise, posebno u dijelu gdje računamo strujne vršne funkcije (poglavlje 5).

Elemente matrice transformacije određujemo rješavanjem jednadžbe (4.8). Sustavno rješavanje jednadžbi prikazano je u Dodatku D. U postupku je korištena pomoćna reprezentacija $\{m\mathbf{k}\}$, $m = a, b, c, d$, što rezultira faktorizacijom (D.14) matrice transformacije, $\hat{U}_{\mathbf{k}} = \hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}\hat{U}^{mL}_{\mathbf{k}}$. Konačnu matricu pišemo u faktoriziranom obliku

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}\hat{U}^{mL}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ 0 & 0 & -v^*_{\mathbf{k}} & u^*_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}} & 0 & V_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & U_{\mathbf{k}} & 0 & V_{\mathbf{k}} \\ V_{\mathbf{k}} & 0 & -U_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & V_{\mathbf{k}} & 0 & -U_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \tag{4.12}$$

gdje su uvedene pokrate

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{K_z + K_+}{\sqrt{2}K}, \quad v_{\mathbf{k}} = \frac{K_z - K_+}{\sqrt{2}K}, \quad K_{\pm} = K_x \pm iK_y, \tag{4.13}$$

i pomoćna faza

$$\tan\phi(\mathbf{k}) = \frac{K}{M} \tag{4.14}$$

koja je sadržana u pokratama $U_{\mathbf{k}} = \cos\dfrac{\phi(\mathbf{k})}{2}$ i $V_{\mathbf{k}} = \sin\dfrac{\phi(\mathbf{k})}{2}$.

Treba primijetiti da prva transformacija, $\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}$, ne ovisi o parametru Diracove mase M. Dijagonalni elementi hamiltonijana ostaju nepromijenjeni tom transformacijom. U drugoj transformaciji $\hat{U}^{mL}_{\mathbf{k}}$, pomoćna faza $\phi(\mathbf{k})$ ovisi o parametru M i modulu valnog vektora $|\mathbf{K}| \equiv K$. Jednaku je ulogu imala i pomoćna faza $\theta(\mathbf{k})$ u slučaju hBN-a.

Konačno, matrice transformacije pišemo kao

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} U_{Aa} & 0 \\ 0 & U_{Cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}}I & V_{\mathbf{k}}I \\ V_{\mathbf{k}}I & -U_{\mathbf{k}}I \end{pmatrix}, \tag{4.15}$$

gdje je

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \equiv U_{Aa}, \quad \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v^*_{\mathbf{k}} & u^*_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \equiv U_{Cc}. \tag{4.16}$$

Prva primjena ovih matrica transformacije jest provjera dijagonalnosti hamilto-

nijana u Blochovoj aproksimaciji, $H_0 = \sum_{L\mathbf{k}} E_L(\mathbf{k})|L\mathbf{k}\rangle\langle L\mathbf{k}|$. Račun tih matričnih elemenata daje željeni rezultat, četiri vrpce s disperzijama (4.10). U Dodatku D pokazano je da postupak dijagonalizacije obuhvaća matrični račun oblika

$$H_0^{LL'}(\mathbf{k}) = \left(\hat{U}_{\mathbf{k}}^T \hat{H}_0(\mathbf{k}) \hat{U}_{\mathbf{k}'}^*\right)_{LL'}. \tag{4.17}$$

Sada slijedi primjena tih matrica transformacije na račun konstanti elektron-foton vezanja. To će nam omogućiti generalizaciju izraza za tenzor vodljivosti iz poglavlja 3 na 3D slučaj.

5 Optička i transportna svojstva Diracovih polumetala

U poglavlju 3 razmotrili smo vezanje vanjskog elektromagnetskog polja na elektronski podsustav u hBN-u. Ovdje primjenjujemo isti račun na vodljive elektrone u Diracovim polumetalima. Član vezanja u hamiltonijanu ima oblik

$$H_1^{ext} = -\frac{1}{c}\sum_{\mathbf{q}\alpha} A_\alpha(\mathbf{q}) \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}} j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k}) |l\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle\langle l'\mathbf{k}|. \tag{5.1}$$

Tu smo rezultat napisali u $\{l\mathbf{k}\}$ reprezentaciji. Treba primijetiti da ovdje nema sume po spinu. U Blochovoj reprezentaciji taj član vezanja poprima oblik

$$H_1^{ext} = -\frac{1}{c}\sum_{\mathbf{q}\alpha} A_\alpha(\mathbf{q}) \sum_{LL'} \sum_{\mathbf{kq}} J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) |L\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle\langle L'\mathbf{k}|, \tag{5.2}$$

gdje

$$J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \approx J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}) = \sum_{ll'} U_{\mathbf{k}}(l,L) U_{\mathbf{k}}^*(l',L') j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k}) \tag{5.3}$$

predstavlja strujne vršne funkcije u Blochovoj reprezentaciji.

Da bismo dobili strukturu tenzora vodljivosti ponovit ćemo postupak iz poglavlja 3. Glavna komplikacija ovdje jest u činjenici da imamo 4×4 matrični problem. To značajno komplicira račun strujnih vršnih funkcija (5.3). Da bismo olakšali račun, umjesto direktnog uvrštavanja elemenata matrice transformacije $U_{\mathbf{k}}(l,L)$ u definicijsku relaciju (5.3) koristit ćemo sažeti matrični zapis. Drugo pojednostavljenje je da ćemo prijelaz iz $\{l\mathbf{k}\}$ reprezentacije načiniti u dva koraka, preko pomoćne $\{m\mathbf{k}\}$ reprezentacije. Dakle, naš račun strujnih vršnih funkcija obuhvaća račun elemenata matrica $\left(j_\alpha^{mm'}(\mathbf{k})\right)$ i $\left(J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k})\right)$ koje računamo na način

$$\left(j^{mm'}(\mathbf{k})\right) = \left(\hat{U}_{\mathbf{k}}^{lm}\right)^T \left(j^{ll'}(\mathbf{k})\right) \left(\hat{U}_{\mathbf{k}}^{lm}\right)^*, \tag{5.4}$$

$$\left(J^{LL'}(\mathbf{k})\right) = \left(\hat{U}_{\mathbf{k}}^{mL}\right)^T \left(j^{mm'}(\mathbf{k})\right) \left(\hat{U}_{\mathbf{k}}^{mL}\right)^*. \tag{5.5}$$

Prvi korak u računu jest određivanje golih strujnih vršnih funkcija $j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k})$.

U $\{l\mathbf{k}\}$ reprezentaciji hamiltonijan 3D Diracovog modela dan je izrazom (4.5). Kao i u slučaju hBN-a, gole strujne vršne funkcije dobivamo koristeći formulu (3.3).

Rezultat je

$$\left(j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k})\right) = ev_{F\alpha}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_\alpha \\ \sigma_\alpha & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.6}$$

5.1 Strujne vršne funkcije u 3D Diracovom modelu

Relacije (5.4) i (5.5) predstavljaju dva primjera generalnog izraza (A.24) koji je izveden u Dodatku A. Strukturu dviju matrica transformacije odredili smo u poglavlju 4 (izraz (4.12)),

$$\hat{U}_{\mathbf{k}}^{lm} = \begin{pmatrix} U_{Aa} & 0 \\ 0 & U_{Cc} \end{pmatrix}, \tag{5.7}$$

$$\hat{U}_{\mathbf{k}}^{mL} = \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}}I & V_{\mathbf{k}}I \\ V_{\mathbf{k}}I & -U_{\mathbf{k}}I \end{pmatrix}. \tag{5.8}$$

Direktno uvrštavanje izraza (5.6) i (5.7) u (5.4) daje strujne vršne funkcije u $\{m\mathbf{k}\}$ reprezentaciji,

$$\left(j_\alpha^{mm'}(\mathbf{k})\right) = ev_{F\alpha}\begin{pmatrix} 0 & M_\alpha^\dagger \\ M_\alpha & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.9}$$

Budući da niti gole strujne vršne funkcije niti elementi matrice transformacije (5.7) ne ovise o Diracovoj masi M, ni elementi ove matrice neće ovisiti o M. U ovom izrazu $M_\alpha = U_{Cc}^T\sigma_\alpha U_{Aa}^*$ i $M_\alpha^\dagger = U_{Aa}^T\sigma_\alpha U_{Cc}^*$ jesu 2×2 matrice. Direktni račun daje

$$M_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* & -u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* \\ u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* - v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \frac{1}{K}\begin{pmatrix} K_x & -K_z - iK_y \\ K_z - iK_y & K_x \end{pmatrix}, \tag{5.10a}$$

$$M_y = \frac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* \\ u_{\mathbf{k}}^* - v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \frac{i}{K}\begin{pmatrix} -K_z - iK_y & K_x \\ K_x & K_z - iK_y \end{pmatrix}, \tag{5.10b}$$

$$M_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* \\ -u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \frac{1}{K}\begin{pmatrix} K_z + iK_y & K_x \\ -K_x & K_z - iK_y \end{pmatrix}. \tag{5.10c}$$

Blochove strujne vršne funkcije dobivamo uvrštavanjem izraza (5.8) i (5.9) u (5.5). Rezultat su nekakve funkcije pomoćne faze $\phi(\mathbf{k})$, koja je funkcija Diracove mase M. U računu koristimo trigonometrijske relacije $U_{\mathbf{k}}^2, V_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2}(1 \pm C)$, sa $S =$

$\sin\phi(\mathbf{k})$ i $C = \cos\phi(\mathbf{k})$, pa dobivamo

$$\left(J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k})\right) = \frac{ev_{F\alpha}}{2}\begin{pmatrix} SM_{\alpha+} & M_{\alpha-} - CM_{\alpha+} \\ -M_{\alpha-} - CM_{\alpha+} & -SM_{\alpha+} \end{pmatrix}, \tag{5.11}$$

uz $M_{\alpha\pm} = M_\alpha \pm M_\alpha^\dagger$. Taj kompaktni zapis možemo raspisati te dobivamo matrične elemente strujnih vršnih funkcija u Blochovoj reprezentaciji čiji je oblik

$$\left(J_x^{LL'}(\mathbf{k})\right) = \frac{ev_{Fx}}{K}\begin{pmatrix} K_xS & 0 & -K_xC & -K_{x+} \\ 0 & K_xS & K_{x-} & -K_xC \\ -K_xC & K_{x+} & -K_xS & 0 \\ -K_{x-} & -K_xC & 0 & -K_xS \end{pmatrix}, \tag{5.12a}$$

$$\left(J_y^{LL'}(\mathbf{k})\right) = \frac{ev_{Fy}}{K}\begin{pmatrix} K_yS & 0 & K_{y-} & iK_x \\ 0 & K_yS & iK_x & K_{y+} \\ K_{y+} & -iK_x & -K_yS & 0 \\ -iK_x & K_{y-} & 0 & -K_yS \end{pmatrix}, \tag{5.12b}$$

$$\left(J_z^{LL'}(\mathbf{k})\right) = \frac{ev_{Fz}}{K}\begin{pmatrix} K_zS & 0 & K_{z+} & K_x \\ 0 & K_zS & -K_x & K_{z-} \\ K_{z-} & -K_x & -K_zS & 0 \\ K_x & K_{z+} & 0 & -K_zS \end{pmatrix}, \tag{5.12c}$$

s pokratama: $K_{x\pm} = K_z \pm iK_y$, $K_{y\pm} = \pm iK_z - K_yC$ i $K_{z\pm} = \pm iK_y - K_zC$. U hBN-u su matrice $\left(J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k})\right)$ bile 2×2 matrice. Ovdje imamo 4×4 matrice što će malo zakomplicirati račun tenzora vodljivosti. No, i ovdje primjećujemo dva generalna zaključka koja smo izveli u hBN-u. Prvo, unutarvrpčane vršne funkcije povezane su s grupnom brzinom elektrona,

$$J_\alpha^{LL}(\mathbf{k}) = ev_\alpha^L(\mathbf{k}) = s_L ev_{F\alpha}\sin\phi(\mathbf{k})\frac{K_\alpha}{K} = s_L ev_{F\alpha}\frac{K_\alpha}{\sqrt{M^2+K^2}}. \tag{5.13}$$

Drugo, međuvrpčane strujne vršne funkcije među energetski degeneriranim vrpcama su jednake nuli,

$$J_\alpha^{12}(\mathbf{k}) = J_\alpha^{21}(\mathbf{k}) = J_\alpha^{34}(\mathbf{k}) = J_\alpha^{43}(\mathbf{k}) = 0. \tag{5.14}$$

U slučaju da ovaj drugi zaključak nije ispunjen imali bismo singularno ponašanje

međuvrpčanog doprinosa tenzora vodljivosti jer bi pripadna dipolna vršna funkcija bila singularna.

5.2 Dinamički tenzor vodljivosti u 3D Diracovom modelu

U Dodatku C i potpoglavlju 2.4 izveden je općeniti izraz za dinamički tenzor vodljivosti u viševrpčanim sustavima,

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q},\omega) = \sum_{LL'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{i\hbar |J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)|^2}{\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}_+,\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}_+)}{\hbar\omega + \varepsilon_{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma^{LL'}}. \tag{5.15}$$

3D Diracov model razlikuje se od 2D Diracovog modela po dimenziji volumena, $[V] = \mathrm{m}^3$, te po tome što je $\sum_\sigma = 1$ (nemamo sume po spinu). Sustav ima četiri vrpce, $L = 1,2,3,4$ s po dvije dva puta degenerirane disperzije, $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \varepsilon_2(\mathbf{k}) = -\varepsilon_3(\mathbf{k}) = -\varepsilon_4(\mathbf{k}) = s_L\varepsilon(\mathbf{k})$. Ovdje je

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sqrt{M^2+K^2} = K\frac{\sqrt{M^2+K^2}}{K} = \frac{K}{\sin\phi(\mathbf{k})}. \tag{5.16}$$

Ta je odzivna funkcija zbroj dvaju doprinosa, unutarvrpčanog doprinosa ($L = L'$) i međuvrpčanog doprinosa ($L \neq L'$),

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q},\omega) = \sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q},\omega) + \sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q},\omega). \tag{5.17}$$

Kako su međuvrpčane strujne vršne funkcije između vrpci koje su degenerirane u energiji jednaki nuli, postoje četiri unutarvrpčana doprinosa i osam međuvrpčanih doprinosa vodljivosti.

5.3 Unutarvrpčani doprinos u nedopiranom Diracovom polumetalu

Unutarvrpčani doprinos dolazi od članova $L = L' = 1,2,3,4$, te iznosi

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q},\omega) = \sum_{L} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |J_\alpha^{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)|^2}{\varepsilon_{LL}(\mathbf{k}_+,\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k}_+)}{\hbar\omega + \varepsilon_{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma^{LL}}. \tag{5.18}$$

Ovaj općeniti rezultat možemo nadalje pojednostavniti koristeći dugovalnu granicu $\mathbf{q} \to 0$. U toj je granici $\varepsilon_{LL}(\mathbf{k},\mathbf{k}_+)$ zanemariv, te razliku Fermi-Diracovih funkcija

raspodjele možemo razviti do vodećeg člana u q_α. Rezultat je (uzimamo da je $\Gamma^{LL} = \Gamma_1$ zbog jednostavnosti)

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \sum_L \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |J_\alpha^{LL}(\mathbf{k})|^2}{\hbar\omega + i\hbar\Gamma_1} \left(-\frac{\partial f_L(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_L(\mathbf{k})} \right). \tag{5.19}$$

Ovaj se izraz razlikuje od hBN-a po tome što nema sume po spinu. Odabir $\Gamma^{LL} = \Gamma_1$ za $L = 1, 2, 3, 4$ pretpostavlja da su sve unutarvrpčane mjere relaksacija približno jednake.

U ovom primjeru imamo disperzije $\varepsilon_L(\mathbf{k}) = s_L \varepsilon(\mathbf{k}) = s_L K / \sin\phi(\mathbf{k})$, te unutarvrpčane strujne vršne funkcije $J_\alpha^{LL}(\mathbf{k}) = s_L e v_{F\alpha} \sin\phi(\mathbf{k}) K_\alpha / K = e v_\alpha^L(\mathbf{k})$, te

$$|J_\alpha^{LL}(\mathbf{k})|^2 = e^2 |v_\alpha^L(\mathbf{k})|^2 = (e v_{F\alpha})^2 \sin^2\phi(\mathbf{k}) \frac{K_\alpha^2}{K^2} = (e v_{F\alpha})^2 \frac{K^2}{M^2 + K^2}. \tag{5.20}$$

Prema tome rezultat za nedopirani 3D Diracov polumetal izgleda ovako:

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \frac{i\hbar e^2 |v_\alpha^L(\mathbf{k})|^2}{\hbar\omega + i\hbar\Gamma_1} \left(-\frac{\partial f_L(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_L(\mathbf{k})} \right). \tag{5.21}$$

Ovdje možemo opet definirati efektivnu koncentraciju nosioca naboja sa

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} m |v_\alpha^L(\mathbf{k})|^2 \left(-\frac{\partial f_L(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_L(\mathbf{k})} \right), \tag{5.22}$$

pa unutarvrpčanu vodljivost možemo zapisati u formi

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{i\hbar}{\hbar\omega + i\hbar\Gamma_1} n_{\alpha\alpha}^{eff}. \tag{5.23}$$

5.3.1 Unutarvrpčani doprinos u dopiranom Diracovom polumetalu

Dopiranje šupljinama, na primjer, rezultira pomicanjem Fermijevog nivoa prema nižim energijama te je doprinos termalno pobuđenih elektrona u višim vrpcama zanemariv. Kako je $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \varepsilon_2(\mathbf{k})$, pišemo $f_1(\mathbf{k}) = f(\varepsilon(\mathbf{k}))$, te sukladno tome $f_3(\mathbf{k}) = f(-\varepsilon(\mathbf{k}))$. Slijedi izraz

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{1}{V} \sum_{\nu\mathbf{k}} m |v_\alpha^3(\mathbf{k})|^2 \left(-\frac{\partial f_3(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon_3(\mathbf{k})} \right) \tag{5.24}$$

gdje je sa $\sum_\nu = 2$ označena degeneracija vrpci. Ovaj ćemo izraz izvrijedniti u granici $T \to 0\,\mathrm{K}$, kada je $(-\partial f_3(\mathbf{k})/\partial\varepsilon_3(\mathbf{k})) \approx \delta(\varepsilon_3(\mathbf{k}) - E_F)$. Pri tome koristimo zamjenu

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} \to \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{v_{Fx}v_{Fy}v_{Fz}}\int dK_x dK_y dK_z \tag{5.25}$$

i uzimamo u obzir da je

$$|v_\alpha^3(\mathbf{K})|^2 = \big(v_\alpha(\mathbf{K})\big)^2 = v_{F\alpha}^2\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}. \tag{5.26}$$

Dakle, izraz koji izvrijednjujemo je sljedeći,

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3}\frac{v_{F\alpha}^2}{v_{Fx}v_{Fy}v_{Fz}}\int d\mathbf{K}\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}\delta(-\sqrt{M^2+K^2}-E_F). \tag{5.27}$$

Možemo ga dodatno pojednostavniti ako uzmemo u obzir da je $E_F = -\sqrt{M^2+K_F^2}$ te

$$\delta(-\sqrt{M^2+K^2}-E_F) = \frac{\sqrt{M^2+K_F^2}}{K_F}\delta(K-K_F). \tag{5.28}$$

Dakle,

$$\begin{aligned} n_{\alpha\alpha}^{eff} &\approx \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3}\frac{v_{F\alpha}^2}{v_{Fx}v_{Fy}v_{Fz}}\int d\Omega\int_0^\infty K^2 dK\frac{K_\alpha^2}{K}\frac{\delta(K-K_F)}{\sqrt{M^2+K_F^2}} \\ &= \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3}\frac{v_{F\alpha}^2}{v_{Fx}v_{Fy}v_{Fz}}\int d\Omega\frac{K_{F\alpha}^2}{K_F^2}\frac{K_F^3}{\sqrt{M^2+K_F^2}}. \end{aligned} \tag{5.29}$$

Kutni dio integrala daje

$$\int d\Omega\frac{K_{F\alpha}^2}{K_F^2} = \frac{1}{3}\sum_\alpha\int d\Omega\frac{K_{F\alpha}^2}{K_F^2} = \frac{4\pi}{3}. \tag{5.30}$$

U izotropnom je režimu $v_{F\alpha} = v_F$, $K_F = v_F\hbar k_F$, pa dobivamo

$$n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{1}{\pi^2}\frac{k_F^3}{3}\frac{mv_F^2}{|E_F|}. \tag{5.31}$$

Realni dio vodljivosti ponovno je dan Drudeovom formulom (3.35) ($1/\tau = \Gamma_1$),

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)\} = \frac{e^2}{m}\frac{1/\tau}{\omega^2+(1/\tau)^2}n_{\alpha\alpha}^{eff}. \tag{5.32}$$

U općenitom slučaju izraz za $Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)\}$ je isti, samo se malo modificira formula za $n_{\alpha\alpha}^{eff}$. Korisno je pored kratice $|E_F| = \sqrt{M^2+K_F^2}$ uvesti i kratice k_F i v_F za

”prosječni” Fermijev valni vektor i ”prosječnu” Fermijevu brzinu, na primjer, na način

$$v_F^2 = \frac{1}{3}\sum_\alpha v_{F\alpha}^2, \qquad K_F = v_F \hbar k_F. \tag{5.33}$$

U toj notaciji dobivamo

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{v_{F\alpha}^2 v_F}{v_{Fx} v_{Fy} v_{Fz}} \frac{1}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3} \frac{m v_F^2}{|E_F|}. \tag{5.34}$$

5.3.2 Koncentracija nosioca naboja

Koncentraciju nosioca naboja n računamo pomoću (3.37) s ispuštenom sumom $\sum_\sigma$. Zamjena sume integralom (5.25) sada daje

$$n = \frac{\sum_\nu}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi}{v_{Fx} v_{Fy} v_{Fz}} \int_0^{K_F} K^2 dK = \frac{1}{3\pi^2} \frac{K_F^3}{v_{Fx} v_{Fy} v_{Fz} \hbar^3} \tag{5.35}$$

u oba slučaja dopiranja. Vidimo da kao i u hBN-u n ne ovisi o Diracovoj masi. Ovdje je K_F nova oznaka za energiju $|\tilde{E}_F|$ iz poglavlja 3. U potpoglavlju 5.5, gdje ćemo prikazati ovisnost optičke vodljivosti o dopiranju, uporabit ćemo ovaj izraz za koncentraciju nosioca naboja da odredimo realistične vrijednosti za energiju K_F koje su u skladu s koncentracijama elektrona na slici 1.1.

5.4 Međuvrpčani doprinos u Diracovom polumetalu

Međuvrpčani doprinos vodljivost ($L \neq L'$) ima oblik ($\Gamma^{LL'} = \Gamma_2$ zbog jednostavnosti)

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{L \neq L'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+)|^2}{\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}_+, \mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}_+)}{\hbar\omega + \varepsilon_{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma_2}. \tag{5.36}$$

Budući da imamo po dva para vrpci koje su degenerirane u energiji, faktor

$$\frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k}_+)}{\hbar\omega + \varepsilon_{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_+) + i\hbar\Gamma_2} \frac{1}{\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}_+, \mathbf{k})} \tag{5.37}$$

isti je za sve kombinacije $LL' = 13, 14, 23$ i 24. Kada izlučimo taj faktor u ta četiri doprinosa ostatak (kvadrate modula strujnih vršnih funkcija) možemo zbrojiti i izraziti pomoću efektivnih vršnih funkcija $J_\alpha^{-+}(\mathbf{k})$ i $J_\alpha^{+-}(\mathbf{k})$ koje su dane sa

$$2 J_\alpha^{-+}(\mathbf{k}) J_\beta^{+-}(\mathbf{k}) = \sum_{L<L'} J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}) J_\beta^{L'L}(\mathbf{k}). \tag{5.38}$$

Za $\alpha = \beta$ rezultat je

$$|J_\alpha^{-+}(\mathbf{k})|^2 = (ev_{F\alpha})^2 \left[1 - \frac{K_\alpha^2}{K^2}\sin^2\phi(\mathbf{k})\right] = (ev_{F\alpha})^2 \left(1 - \frac{K_\alpha^2}{M^2 + K^2}\right). \tag{5.39}$$

Usporedba s izrazom (3.45) koji smo dobili u hBN-u pokazuje da je

$$|J_\alpha^{MP}(\mathbf{k})|^2 \equiv |J_\alpha^{-+}(\mathbf{k})|^2. \tag{5.40}$$

Izraz za međuvrpčanu vodljivost će prema tome imati istu strukturu kao i u hBN-u. Potrebno je samo $\sum_\sigma$ zamijeniti sa $\sum_\nu = 2$, 2D sumaciju $\sum_{\mathbf{k}}$ s 3D sumacijom te $|J_\alpha^{MP}(\mathbf{k})|^2$ sa $|J_\alpha^{-+}(\mathbf{k})|^2$. Rezultat je međuvrpčana vodljivost čiji je oblik

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega, \mathbf{q}) = \sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{1}{V}\sum_{\nu\mathbf{k}} \frac{i\hbar|J_\alpha^{-+}(\mathbf{k})|^2}{2\varepsilon(\mathbf{k})} \\ \times \left\{\frac{f_3(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\varepsilon(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_3(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2\varepsilon(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2}\right\}.\end{aligned} \tag{5.41}$$

Ovaj je izraz zapisan u dugovalnoj granici na način da smo ispustili u (5.36) valni vektor $\mathbf{q}$ na svim mjestima gdje se pojavljuje. Ovaj izraz možemo prevesti na još jednostavnije forme, kao što smo to učinili s izrazom (3.44). Na primjer, možemo ga zapisati u formi

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = 2(ev_{F\alpha})^2 \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} i\hbar \frac{1 - K_\alpha^2/K^2\sin^2\phi(\mathbf{k})}{2K/\sin\phi(\mathbf{k})} \\ \times \left\{\frac{f_3(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2K/\sin\phi(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_3(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2K/\sin\phi(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2}\right\}.\end{aligned} \tag{5.42}$$

Za numeričke je račune ipak potrebno koristiti slijed pojednostavljenja koji smo načinili s izrazom (5.24).

5.4.1 Dopirani Diracovi polumetali

Ograničimo se ponovno na slučaj dopiranja šupljinama. Budući da je $f_1(\mathbf{k}) \approx 0$, $\varepsilon(\mathbf{k}) = \sqrt{M^2+K^2}$ te $|J_\alpha^{-+}(\mathbf{k})|^2 = (ev_{F\alpha})^2\left(1-\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}\right)$, dobivamo

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) &= \frac{1}{V}\sum_{\nu\mathbf{k}}\frac{i\hbar(ev_{F\alpha})^2}{2\sqrt{M^2+K^2}}\left(1-\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}\right)\\ &\quad\times\left\{\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega-2\sqrt{M^2+K^2}+i\hbar\Gamma_2}+\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega+2\sqrt{M^2+K^2}+i\hbar\Gamma_2}\right\}\\ &= \frac{2}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{v_{Fx}v_{Fy}v_{Fz}}\int dK_x dK_y dK_z\frac{i\hbar(ev_{F\alpha})^2}{2\sqrt{M^2+K^2}}\left(1-\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}\right)\\ &\quad\times\left\{\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega-2\sqrt{M^2+K^2}+i\hbar\Gamma_2}+\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega+2\sqrt{M^2+K^2}+i\hbar\Gamma_2}\right\}.\end{aligned} \tag{5.43}$$

Ovo je generalni izraz za međuvrpčanu vodljivost u anizotropnom 3D Diracovom modelu s konačnom masom. Kad ga zbrojimo s izrazom (5.23) dobivamo $\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$.

5.4.2 Izotropni slučaj

Da bismo olakšali usporedbu s rezultatima dobivenim u hBN-u sada ćemo izraze (5.32) i (5.43) izvrijedniti u izotropnom slučaju. Unutarvrpčani doprinos vodljivosti dan je sa (5.23) gdje je $n_{\alpha\alpha}^{eff}$ dan sa (5.31). S druge strane, kad uzmemo u obzir da je $v_{F\alpha} = v_F$, izraz (5.43) prelazi u

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) &= \frac{i\hbar e^2}{(2\pi\hbar)^3 v_F}\int K^2 dK\int d\Omega\frac{1}{\sqrt{M^2+K^2}}\left(1-\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}\right)\\ &\quad\times\left\{\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega-2\sqrt{M^2+K^2}+i\hbar\Gamma_2}+\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega+2\sqrt{M^2+K^2}+i\hbar\Gamma_2}\right\}.\end{aligned} \tag{5.44}$$

Kutni dio integrala lako izvrijednimo koristeći činjenicu da je

$$\begin{aligned}\int d\Omega\left(1-\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}\right) &= \frac{1}{3}\sum_\alpha\int d\Omega\left(1-\frac{K_\alpha^2}{K^2}\frac{K^2}{M^2+K^2}\right)\\ &= \frac{4\pi}{3}\left(3-\frac{K_\alpha^2}{M^2+K^2}\right).\end{aligned} \tag{5.45}$$

Rezultat je

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) &= \frac{ie^2}{6\pi^2\hbar^2 v_F}\int_0^\infty\frac{K^2 dK}{\sqrt{M^2+K^2}}\left(3-\frac{K^2}{M^2+K^2}\right)\\ &\quad\times\left\{\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega+2K/\sin\phi(\mathbf{k})+i\hbar\Gamma_2}+\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega-2K/\sin\phi(\mathbf{k})+i\hbar\Gamma_2}\right\}.\end{aligned} \tag{5.46}$$

Ponovno možemo načiniti supstituciju varijabli na način $X = 2\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\sqrt{M^2 + K^2}$. Rezultat je

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{ie^2}{12\pi^2\hbar^2 v_F}\int_{2M}^{\infty} dX\sqrt{X^2 - 4M^2}\left(1 + 2\frac{M^2}{X^2}\right) \\ \times\left\{\frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2K/\sin\phi(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2K/\sin\phi(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2}\right\}.\end{aligned} \tag{5.47}$$

Realni dio te funkcije ima oblik

$$\begin{aligned}Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\} = \frac{e^2}{12\pi^2\hbar^2 v_F}\int_{2M}^{\infty} dX\sqrt{X^2 - 4M^2}\left(1 + 2\frac{M^2}{X^2}\right) \\ \times\left\{\frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} + \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2}\right\} f_3(X).\end{aligned} \tag{5.48}$$

Da bismo lakše napravili numerički račun provjerit ćemo rezultat za nedopirani $M = 0\,\mathrm{eV}$ slučaj na temperaturi $T = 0\,\mathrm{K}$. U tom je režimu $f_3(X) \approx 1$, pa je vodljivost jednaka

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\} \approx \frac{e^2}{12\pi^2\hbar^2 v_F}\hbar\omega\pi = \frac{e^2}{12\pi\hbar^2 v_F}\hbar\omega. \tag{5.49}$$

Ovdje smo upotrijebili aproksimaciju korištenu u izrazu (3.52) za međuvrpčanu vodljivost hBN-a. Aproksimacija vrijedi jer dominantni doprinos integralu dolazi od $\hbar\omega \approx \pm X$.

5.5 Ukupna vodljivost u izotropnom Diracovom polumetalu

U 3D sustavima dinamička vodljivost ima drugačiju dimenziju nego u 2D sustavima. Zbog toga $\pi e^2/2h$ više nije dobra pomoćna skala. Mi ćemo sada prikazati rezultate za tipični izotropni Diracov polumetal. Da bi slike izgledale maksimalno pojednostavljeno uvest ćemo pomoćnu skalu σ^0 na sljedeći način. Drudeov izraz za $\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)$ prevodimo na formu

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \frac{\hbar e^2}{mV_0 1\,\mathrm{eV}}\frac{(i\hbar\omega + \hbar\Gamma_1)1\,\mathrm{eV}}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_1)^2}V_0 n_{\alpha\alpha}^{eff}. \tag{5.50}$$

Sada je $\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)$ umnožak skale

$$\sigma^0 = \frac{\hbar e^2}{mV_0 1\,\mathrm{eV}} \tag{5.51}$$

i dva bezdimenzionalna faktora. Dakle,

$$Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)\} = \sigma^0 \frac{\hbar\Gamma_1 1\,\mathrm{eV}}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_1)^2} V_0 n_{\alpha\alpha}^{eff}. \tag{5.52}$$

Na isti način pišemo i međuvrpčani dio,

$$\begin{aligned} Re\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\} \approx \sigma^0 \frac{mV_0 1\,\mathrm{eV}}{12\pi^2 v_F \hbar^3} \hbar\omega \int_{2M}^{\infty} \frac{dX}{X} \sqrt{X^2 - 4M^2} \left(1 + 2\frac{M^2}{X^2}\right) \\ \times \left\{ \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} - \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} \right\} f_3(X). \end{aligned} \tag{5.53}$$

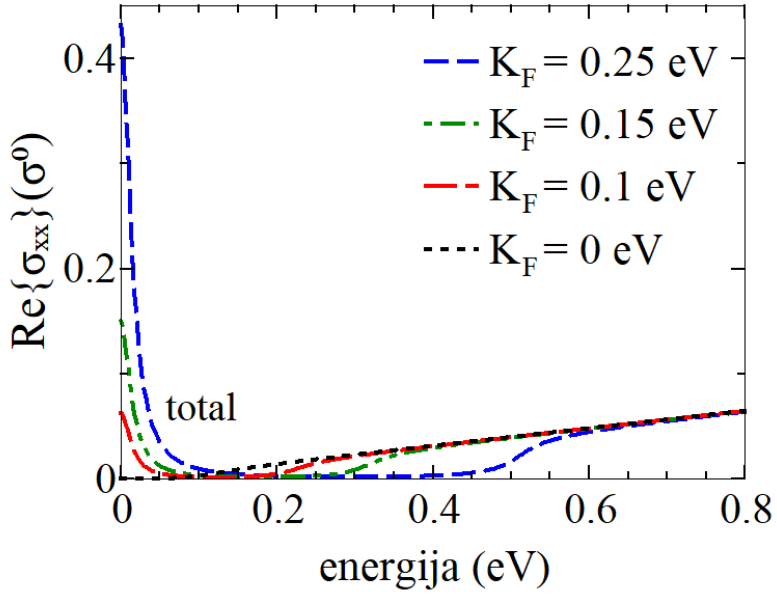
Zbrajanjem izraza za unutarvrpčanu i međuvrpčanu realnu vodljivost dobivamo ukupnu realnu optičku vodljivost za 3D Diracov sustav. Za $T \to 0\,\mathrm{K}$ i $f_3(K) \to \theta(K - K_F)$ rezultat jest

$$\begin{aligned} Re\{\sigma_{\alpha\alpha}(\omega)\} \approx \sigma^0 \frac{V_0 1\,\mathrm{eV}}{3\pi^2} \frac{mv_F^2}{(\hbar v_F)^3} \frac{K_F^3}{\sqrt{M^2 + K_F^2}} \frac{\hbar\Gamma_1}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_1)^2} \\ + \sigma^0 \frac{V_0 1\,\mathrm{eV}}{12\pi^2} \frac{mv_F^2}{(\hbar v_F)^3} \hbar\omega \int_{2E_F}^{\infty} dX \sqrt{1 - \frac{(2M)^2}{X^2}} \left(1 + 2\frac{M^2}{X^2}\right) \\ \times \left\{ \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} - \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} \right\}. \end{aligned} \tag{5.54}$$

Ovdje radi jednostavnosti uzimamo $V_0 = 100\,\text{Å}$ i $v_F = 6 \times 10^5\,\mathrm{m\,s^{-1}}$, što predstavlja realističnu procjenu za većinu tipičnih 3D Diracovih sustava. Također, biramo $\hbar/\tau = \hbar\Gamma_1 = 15\,\mathrm{meV}$ i $\hbar\Gamma_2 = 30\,\mathrm{meV}$.

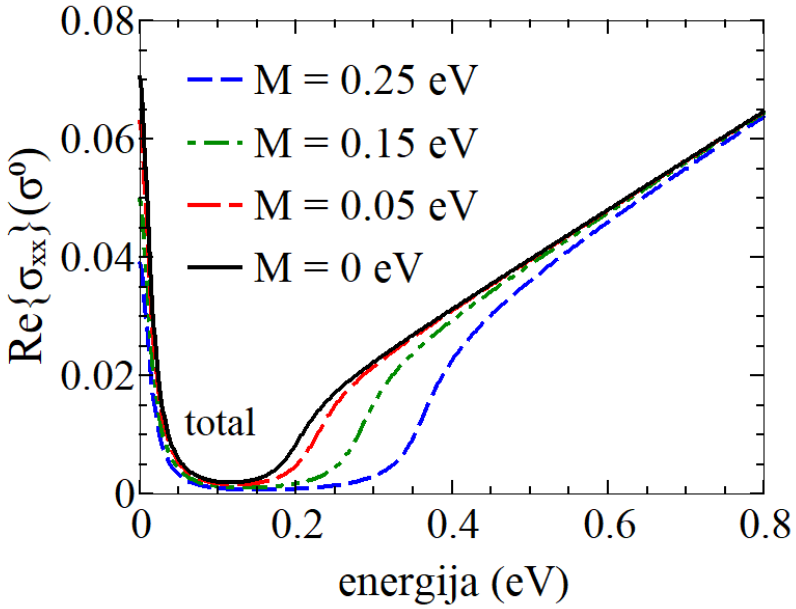
Još dvije procjene koje možemo napraviti su procjene realističnih parametara K_F i M. U uvodnom je poglavlju na slici 1.1 prikazana električna vodljivost za koncentraciju nosioca naboja $n = 8.8 \times 10^{19}\,\mathrm{cm^{-3}}$. Iz nje možemo odrediti realističnu vrijednost dopiranja od $K_F \approx 0.1\,\mathrm{eV}$. Druga je procjena iz slike 1.2 gdje vidimo nagli porast optičke vodljivosti na energiji $\hbar\omega \approx 2\sqrt{M^2 + K_F^2}$. Ovakvo ponašanje možemo vidjeti i na primjeru hBN-a u poglavlju 3. Iz ovoga možemo procijeniti $M \approx 0.05\,\mathrm{eV}$.

Slika 5.1 prikazuje ukupnu optičku vodljivost za slučajeve $K_F = 0.25$, 0.15 i $0.1\,\mathrm{eV}$ te za nedopirani $K_F = 0\,\mathrm{eV}$ sustav s međuvrpčanim procjepom od $2M = 0.1\,\mathrm{eV}$.



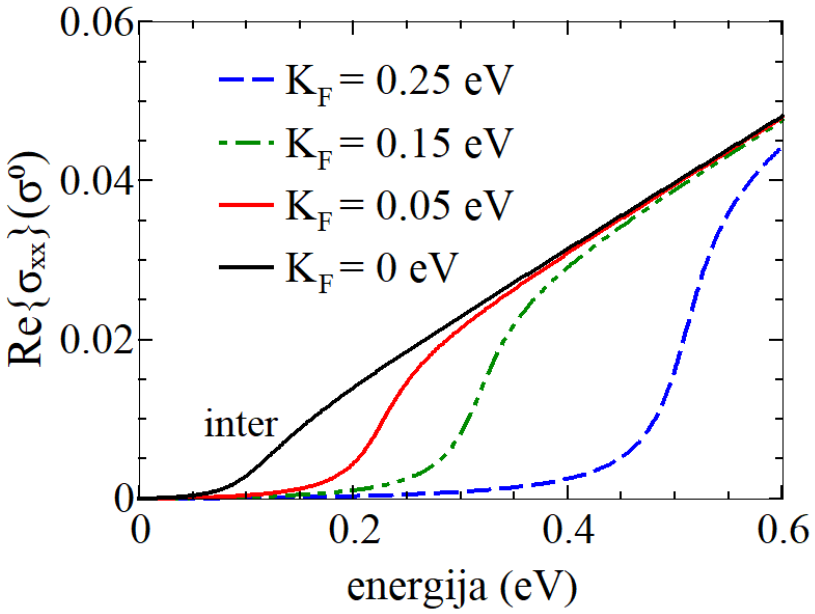
Slika 5.1: Vodljivost dopiranog 3D Diracovog polumetala za dopiranja $K_F = 0.25$, 0.15, 0.1 i $0\,\mathrm{eV}$ i $M = 0.05\,\mathrm{eV}$. Unutarvrpčani doprinos dominira na energijama $\hbar\omega < 2E_F$. U slučaju nedopiranog sustava unutarvrpčani doprinos jednak je nuli. Jasniji prikaz međuvrpčanih doprinosa nalazi se na slici 5.3.

Slično, slika 5.2 prikazuje ovisnost optičke vodljivosti o međuvrpčanom procjepu za $M = 0.15$, 0.1 i $0.05\,\mathrm{eV}$ te za sustav bez procjepa $M = 0\,\mathrm{eV}$.



Slika 5.2: Vodljivost dopiranog 3D Diracovog polumetala za Diracove mase $M = 0.15$, 0.1, 0.05 i $0\,\mathrm{eV}$ i $K_F = 0.1\,\mathrm{eV}$. Manji međuvrpčani procjep uzrokuje veću ukupnu vodljivost. Jasniji prikaz međuvrpčanih doprinosa nalazi se na slici 5.4.

Slike 5.3 i 5.4 prikazuju međuvrpčane doprinose za oba slučaja. S ovih prikaza



Slika 5.3: Izdvojeni međuvrpčani doprinosi vodljivosti 3D Diracovog polumetala prikazani na slici 5.1. Međuvrpčani doprinos iščezava za $\hbar\omega \to 0$, što je razlika u odnosu na 2D slučaj.

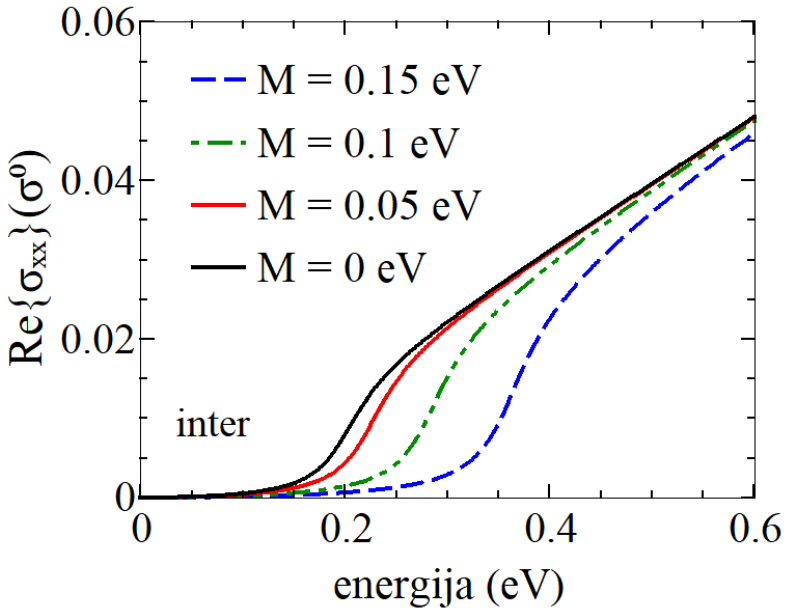
optičke vodljivosti vidi se da za mala dopiranja $K_F \approx 0$ vodljivost ima gotovo linearnu ovisnost što je rezultat koji smo vidjeli u izrazu (5.49). Za male međuvrpčane procjepe $2M \to 0$ vidimo povećanje međuvrpčane vodljivosti. Međutim, u granici $\hbar\omega \to 0$ svi međuvrpčani doprinosi su zanemarivi. To razlikuje ovaj slučaj od 2D hBN slučaja. Ovdje u izrazu (5.48) imamo dodatni faktor $K = \sqrt{X^2 - 4M^2}/2$ pod integralom u odnosu na izraz (3.53) gdje je međuvrpčana vodljivost konačna za sve energije.

U izrazu (3.54) za hBN dali smo izraz za vodljivost u granici $\hbar\omega \to 0$ koji možemo pisati i za 3D Diracov sustav

$$\begin{aligned} Re\{\sigma_{\alpha\alpha}(0)\} &= \frac{e^2\tau}{m} n_{\alpha\alpha}^{eff} = \frac{e^2\tau}{m}(n_{\alpha\alpha}^{intra} + n_{\alpha\alpha}^{inter}), \\ n_{\alpha\alpha}^{intra} &= \frac{1}{\pi^2}\frac{k_F^3}{3}\frac{mv_F^2}{|E_F|}. \end{aligned} \tag{5.55}$$

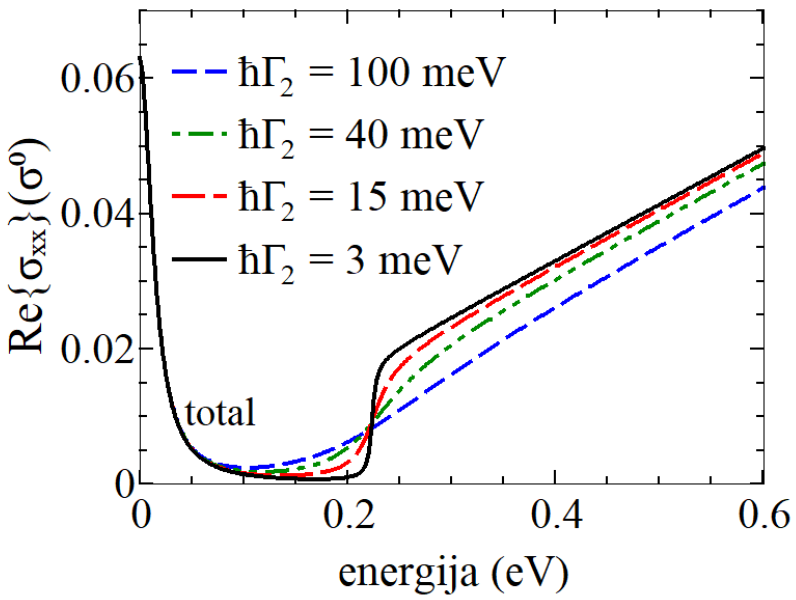
Efektivni broj međuvrpčanih nosioca naboja u ovoj je granici jednak nuli, te konačni broj nosioca naboja $n_{\alpha\alpha}^{eff}$ proizlazi iz $n_{\alpha\alpha}^{intra}$.

Slika 5.5 prikazuje ovisnost optičke vodljivosti o međuvrpčanoj mjeri relaksacija Γ_2. Ovisnost je prikazana za vrijednosti $\hbar\Gamma_2 = 100$, 40, 15 i $3\,\mathrm{meV}$. Izoštravanje praga sa smanjivanjem Γ_2 efekt je koji smo primijetili i na optičkoj vodljivosti hBN-a. Jednaki efekt, osim na određenim diskretnim energijama, pokazuje i optička vodlji-



Slika 5.4: Izdvojeni međuvrpčani doprinosi vodljivosti 3D Diracovog polumetala prikazani na slici 5.2.

vost za različite temperature na mjerenjima u $ZrTe_5$ sustavima na slici 1.2. Doprinos termalnih elektrona koji bismo razmatrali na konačnim temperaturama potječe od Fermi-Diracove raspodjele $f_3(\mathbf{k})$ za konačne temperature. Glatka Fermi-Diracova funkcija za konačne temperature efektivno mijenja širinu lorencijana u izrazu (5.54), što znači da promjenom širine lorencijana $2\hbar\Gamma_2$ u modelu možemo simulirati konačne temperature i simulirati neke rezultate realnih mjerenja na Diracovim polumetalima.



Slika 5.5: Izoštravanje praga ukupne vodljivosti smanjivanjem međuvrpčane mjere relaksacija za vrijednosti $\hbar\Gamma_2 = 100$, 40, 15 i $3\,\mathrm{meV}$. Veća vrijednost Γ_2 simulira više temperature sustava.

6 Zaključak

Promatrali smo optička i transportna svojstva Diracovih sustava. Koristili smo generalni izraz za tenzor dinamičke vodljivosti. Primijenili smo ga odvojeno na 2D i 3D Diracove sustave.

Na udžbeničkom primjeru 2D Diracovih sustava, grafenu i heksagonalnom borovom nitridu (hBN), pokazali smo kako se računaju elementi tenzora vodljivosti te njihove vrijednosti na $\omega = 0$. Koristili smo najjednostavniji niskoenergetski efektivni hamiltonijan dobiven u modelu čvrsto vezanih elektrona. Rezultati na $\omega = 0$ ukazuju na promjenu porijekla efektivnog broja nosioca naboja kada se mijenja međuvrpčani procjep 2Δ i kada se mijenja razina dopiranja n. Pokazalo se da je međuvrpčani doprinos efektivnom broju nosioca naboja značajan za $T \to 0\,\mathrm{K}$ i $n \to 0$, dok unutarvrpčani doprinos dominira u standardnom režimu gdje n nije mali, ili za $n \to 0$ ako je 2Δ dovoljno velik.

Optička vodljivost hBN-a za jako male međuvrpčane mjere relaksacija Γ_2 uspoređena je s Q1D vodljivosti u sustavima s uređenjem tipa val gustoće naboja. Međuvrpčani doprinos realnoj vodljivosti pokazuje znatno pojačanje na energiji praga $\hbar\omega \approx 2\Delta$ kada se Γ_2 smanjuje.

Svojstva 3D Diracovih polumetala analizirana su u modelu koji ima simetriju tipičnih 3D Diracovih sustava. Pokazano je da dobiveni efektivni niskoenergetski hamiltonijan predstavlja jednostavno proširenje 2D Diracovog modela. U dobivenim rezultatima najveća je razlika redukcija međuvrpčanog doprinosa efektivnom broju nosioca naboja.

Dobiveni numerički rezultati za optičku vodljivost pokazuju kvalitativno dobro slaganje s eksperimentima. Analitički izrazi, s druge strane, puno su općenitiji i omogućuju analize na konačnim temperaturama i u anizotropnom režimu.

Svi računi napravljeni u ovom radu temelje se na sustavnoj analizi 2D i 3D Schödingerovih jednadžbi. Pri tome su određene Blochove energije i Blochove funkcije. Detaljno su objašnjene i relevantne transformacije i njihove matrične reprezentacije u 2D i u anizotropnom 3D Diracovom modelu. Određene su i strujne vršne funkcije u dva modela.

U ovom su radu postavljeni temelji za kvantitativnu analizu optičkih i transportnih svojstava različitih Diracovih polumetala. Na prvoj razini poopćenja, treba numeričke

račune provesti na konačnim temperaturama. To će pokazati na koji se način energija $k_B T$ natječe s ostalim važnim malim energetskim skalama u modelu, $\tilde{E}_F$, E_F, M i Γ_2. Na drugoj razini poopćenja, treba odrediti strukturu mjera relaksacija Γ_1 i Γ_2 te uzeti u račun i ovisnosti energija $\hbar\Gamma_1$ i $\hbar\Gamma_2$ o temperaturi.

Dodaci

Dodatak A Transformacija iz reprezentacije delokaliziranih atomskih orbitala u reprezentaciju Blochovih funkcija

A.1 Unitarne transformacije

Neko kvantno stanje u Hilbertovom prostoru opisano vektorom $|\Psi\rangle$ možemo zapisati u različitim reprezentacijama. U nekoj reprezentaciji $\{a_i\}$, za ortonormirane vektore baze $|a_i\rangle$, vrijedi $\langle a_j|a_k\rangle = \delta_{j,k}$. Vektor stanja $|\Psi\rangle$ u toj reprezentaciji prikazujemo na način

$$|\Psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\Psi\rangle = \sum_i c_i|a_i\rangle. \tag{A.1}$$

Ovdje smo umetnuli jedinični projektor

$$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = I \tag{A.2}$$

s lijeve strane vektora $|\Psi\rangle$ te potom prepoznali da je $c_i = \langle a_i|\Psi\rangle$. Iz relacija (A.1) slijedi da dualni vektor $\langle\Psi|$, koji je bra vektor pridružen ket vektoru $|\Psi\rangle$, možemo pisati na način

$$\langle\Psi| = \sum_i \langle\Psi|a_i\rangle\langle a_i| = \sum_i c_i^*\langle a_i|. \tag{A.3}$$

Tu smo jedinični projektor umetnuli s desne strane vektora $\langle\Psi|$. Normiranje valnih funkcija $\mathbf{\Psi}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\Psi\rangle$ pridruženih vektorima $|\Psi\rangle$ na jedinicu možemo zapisati na način

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{ij} c_i c_j^*\langle a_i|a_j\rangle = \sum_{ij} c_i c_j^*\delta_{i,j} = \sum_i c_i c_i^* = 1. \tag{A.4}$$

Analiza Schrödingerove jednadžbe za vodljive elektrone u dvije vrpce u hBN-u pokazala je da možemo koristiti dvije reprezentacije: reprezentaciju delokaliziranih atomskih orbitala $\{l\mathbf{k}\sigma\}$ te reprezentaciju Blochovih funkcija $\{L\mathbf{k}\sigma\}$. Da bismo si olakšali prijelaz iz jedne reprezentacije u drugu primijenit ćemo gornje izraze na dva načina. Prvi put $|\Psi\rangle = |L\mathbf{k}\sigma\rangle$ i $|a_i\rangle = |l\mathbf{k}\sigma\rangle$, te drugi put $|\Psi\rangle = |l\mathbf{k}\sigma\rangle$ i $|a_i\rangle = |L\mathbf{k}\sigma\rangle$.

U prvom slučaju dobivamo

$$|L\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_l |l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l\mathbf{k}\sigma|L\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_l \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)|l\mathbf{k}\sigma\rangle, \tag{A.5}$$

$$\langle L\mathbf{k}\sigma| = \sum_l \langle L\mathbf{k}\sigma|l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l\mathbf{k}\sigma| = \sum_l \tilde{U}^*_{\mathbf{k}}(L,l)\langle l\mathbf{k}\sigma|, \tag{A.6}$$

gdje smo uveli matricu transformacije $U^\dagger_{\mathbf{k}}$ čiji su elementi $\big(\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)\big) = \big(\langle l\mathbf{k}\sigma|L\mathbf{k}\sigma\rangle\big)$. Indeks vrpce L opisuje retke u toj matrici, a indeks orbitale l stupce. U drugom slučaju dobivamo

$$|l\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_L |L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L\mathbf{k}\sigma|l\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_L U_{\mathbf{k}}(l,L)|L\mathbf{k}\sigma\rangle, \tag{A.7}$$

$$\langle l\mathbf{k}\sigma| = \sum_L \langle l\mathbf{k}\sigma|L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L\mathbf{k}\sigma| = \sum_L U^*_{\mathbf{k}}(l,L)\langle L\mathbf{k}\sigma|. \tag{A.8}$$

Ovdje smo uveli drugu matricu transformacije $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ čiji su elementi $U_{\mathbf{k}}(l,L)$. Matricu možemo pisati na način

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \big(U_{\mathbf{k}}(l,L)\big) = \big(\langle L\mathbf{k}\sigma|l\mathbf{k}\sigma\rangle\big). \tag{A.9}$$

Ovdje se indeksi l i L odnose na retke i stupce.

Normiranje vektora baze u obje reprezentacije vodi do

$$\langle L\mathbf{k}\sigma|L'\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_l \tilde{U}^*_{\mathbf{k}}(L,l)\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L',l) = \delta_{L,L'}, \tag{A.10}$$

$$\langle l\mathbf{k}\sigma|l'\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_L U^*_{\mathbf{k}}(l,L)U_{\mathbf{k}}(l',L) = \delta_{l,l'}. \tag{A.11}$$

Te relacije predstavljaju standardne relacije ortonormiranosti i kompletnosti.

Iz zapisa dviju matrica transformacija vidimo da je

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l) = U^*_{\mathbf{k}}(l,L), \tag{A.12}$$

što znači da je prva matrica transformacije hermitski konjugirana drugoj. Koristeći oznake $\big(|l\mathbf{k}\sigma\rangle\big)$ i $\big(|L\mathbf{k}\sigma\rangle\big)$ za $n \times 1$ matrice (u hNB slučaju je $n = 2$) možemo relacije

(A.7) i (A.5) pisati u matričnom obliku,

$$\big(|l\mathbf{k}\sigma\rangle\big) = \hat{U}_{\mathbf{k}}\big(|L\mathbf{k}\sigma\rangle\big), \quad \big(|L\mathbf{k}\sigma\rangle\big) = \hat{U}^{\dagger}_{\mathbf{k}}\big(|l\mathbf{k}\sigma\rangle\big). \tag{A.13}$$

Slično, relacije (A.10) i (A.11) možemo zapisati u matričnom obliku na način

$$\hat{U}^{\dagger}_{\mathbf{k}}\hat{U}_{\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}}\hat{U}^{\dagger}_{\mathbf{k}} = \hat{U}^{T}_{\mathbf{k}}\hat{U}^{*}_{\mathbf{k}} = \hat{U}^{*}_{\mathbf{k}}\hat{U}^{T}_{\mathbf{k}} = I, \tag{A.14}$$

gdje je I jedinična $n \times n$ matrica (2×2 u hBN slučaju).

A.2 Prikaz operatora u proširenoj matričnoj reprezentaciji

Izraz (2.10) dobili smo na taj način da smo hamiltonijanu $\hat{H}_0$ prikazanom u apstraktnoj reprezentaciji umetnuli jedinični projektor $\sum_{l\mathbf{k}\sigma} |l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l\mathbf{k}\sigma| = I$ s lijeve i s desne strane,

$$H = \sum_{l\mathbf{k}\sigma}\sum_{l'\mathbf{k}'\sigma'} \langle l\mathbf{k}\sigma|\hat{H}_0|l'\mathbf{k}'\sigma'\rangle|l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l'\mathbf{k}'\sigma'|, \tag{A.15}$$

i uzeli u obzir da je

$$\langle l\mathbf{k}\sigma|\hat{H}_0|l'\mathbf{k}'\sigma'\rangle = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}H_0^{ll'}(\mathbf{k}). \tag{A.16}$$

Istu stvar možemo učiniti i s jediničnim projektorom $\sum_{L\mathbf{k}\sigma} |L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L\mathbf{k}\sigma| = I$. Budući da je hamiltonijan dijagonalan u Blochovoj reprezentaciji, vrijedi

$$\langle L\mathbf{k}\sigma|\hat{H}_0|L'\mathbf{k}'\sigma'\rangle = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{L,L'}E_L(\mathbf{k}), \tag{A.17}$$

te

$$H = \sum_{L\mathbf{k}\sigma} E_L(\mathbf{k})|L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L\mathbf{k}\sigma|. \tag{A.18}$$

Za bilo koji drugi operator $\hat{O}$ možemo učiniti isto. Ako on ima svojstvo da je

$$\langle l\mathbf{k}\sigma|\hat{O}|l'\mathbf{k}'\sigma'\rangle = \delta_{\sigma,\sigma'}O^{ll'}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \tag{A.19}$$

dobivamo

$$O = \sum_{ll'}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} O^{ll'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')|l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l'\mathbf{k}'\sigma|. \tag{A.20}$$

Slično, u Blochovoj reprezentaciji dobivamo

$$O = \sum_{LL'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} O^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') |L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L'\mathbf{k}'\sigma|. \tag{A.21}$$

Prijelaz iz jedne reprezentacije operatora u drugu je jednostavan. Treba samo umetnuti jedinične projektore s lijeve i s desne strane jednog ili drugog izraza. Na primjer,

$$\begin{aligned} O &= \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} O^{ll'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \sum_{LL'} |L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L\mathbf{k}\sigma|l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l'\mathbf{k}'\sigma|L'\mathbf{k}'\sigma\rangle\langle L'\mathbf{k}'\sigma| \\ &= \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \sum_{LL'} U^*_{\mathbf{k}'}(l', L') O^{ll'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') U_{\mathbf{k}}(l, L) |L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L'\mathbf{k}'\sigma|. \end{aligned} \tag{A.22}$$

Ovo možemo prevesti na oblik

$$O = \sum_{LL'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} O^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') |L\mathbf{k}\sigma\rangle\langle L'\mathbf{k}'\sigma|, \tag{A.23}$$

gdje je

$$\begin{aligned} O^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ll'} U_{\mathbf{k}}(l, L) O^{ll'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') U^*_{\mathbf{k}'}(l', L') \\ &= \left(\hat{U}^T_{\mathbf{k}} \hat{O}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \hat{U}^*_{\mathbf{k}'}\right)_{LL'}. \end{aligned} \tag{A.24}$$

Ovdje je $\hat{U}^T_{\mathbf{k}}$ matrica transponirana matrici $\hat{U}_{\mathbf{k}}$. Koristeći relacije (A.11) lako se pokaže da je inverzna transformacija oblika

$$\begin{aligned} O^{ll'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{LL'} U^*_{\mathbf{k}}(l, L) O^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') U_{\mathbf{k}'}(l', L') \\ &= \left(\hat{U}^*_{\mathbf{k}} \hat{O}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \hat{U}^T_{\mathbf{k}'}\right)_{ll'}. \end{aligned} \tag{A.25}$$

Dodatak B Minimalna supstitucija u modelu čvrsto vezanih elektrona

B.1 Peierlsova minimalna supstitucija za slobodne elektrone

Schrödingerova jednadžba slobodnih elektrona ima oblik

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}_e|\psi\rangle. \tag{B.1}$$

Hamiltonijan uključuje samo kinetički doprinos

$$\hat{H}_e = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2, \tag{B.2}$$

gdje je $\hat{\mathbf{p}}$ kanonski operator impulsa elektrona.

Hamiltonijan za slobodne elektrone u prisustvu vanjskih elektromagnetskih polja dobiva se zamjenom operatora impulsa $\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}$ na svim mjestima gdje se impuls pojavljuje u hamiltonijanu ($e < 0$). Električna i magnetska komponenta polja dane su uobičajenim izrazima,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t}, \tag{B.3}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r},t). \tag{B.4}$$

Zanemarujući spinske efekte, novi je hamiltonijan dan sa

$$\hat{H}_e = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)^2. \tag{B.5}$$

Vektorski potencijal $\mathbf{A}$ određen je do na skalarno polje $f(\mathbf{r})$. Zamjena $\mathbf{A} \to \mathbf{A}'$ gdje je

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r}) \tag{B.6}$$

ne utječe niti na električnu niti na magnetsku komponentu polja. Ova baždarna transformacija također transformira vektor stanja elektrona $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle$ gdje je

$$|\psi'\rangle = e^{-i(e/\hbar c)f(\mathbf{r})}|\psi\rangle. \tag{B.7}$$

Novi vektor stanja zadovoljava jednadžbu

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi'\rangle = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}'\right)^2|\psi'\rangle. \tag{B.8}$$

Nova Schrödingerova jednadžba, izražena pomoću $\hat{\mathbf{A}}'$ i $|\psi'\rangle$, ima istu formu kao i jednadžba izražena pomoću $\hat{\mathbf{A}}$ i $|\psi\rangle$, te vodi na isti fizikalni rezultat. Tvrdnja je da i za čvrsto vezane elektrone možemo definirati minimalnu supstituciju koja će opisivati njihovo vezanje na vanjska elektromagnetska polja. To možemo ostvariti zamjenom u TBA hamiltonijanu bra i ket vektora s transformiranim bra i ket vektorima,

$$|l\mathbf{R}_n\sigma\rangle \to |\tilde{l}\mathbf{R}_n\sigma\rangle = e^{i(e/\hbar c)\mathbf{A}(\mathbf{R}_n+\mathbf{r}_l)\cdot(\mathbf{R}_n+\mathbf{r}_l)}|l\mathbf{R}_n\sigma\rangle. \tag{B.9}$$

Transformirani bra i ket vektori imaju dodatnu fazu koja ovisi o vrijednosti vektorskog potencijala na poziciji promatranog atoma.

Očekujemo da će ova procedura primijenjena na stanja iz centra prve Brillouinove zone u donjoj vrpci u hBN-u dati isti rezultat kao i u slučaju slobodnih elektrona. Naime, kao što vidimo na slici 2.3, u tom režimu energije elektrona ovise o valnom vektoru na isti način kao i kod slobodnih elektrona.

B.2 Čvrsto vezani elektroni u vanjskom elektromagnetskom polju

Promatramo goli hamiltonijan (A.16) prikazan u reprezentaciji lokaliziranih molekularnih orbitala,

$$H_0 = \sum_{ll'}\sum_{n\delta}\sum_{\sigma} t^{ll'}(\mathbf{R}_\delta)|l\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_\delta\sigma\rangle\langle l'\mathbf{R}_n\sigma|. \tag{B.10}$$

Ovdje je $t^{ll'}(\mathbf{R}_\delta) = \langle l\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_\delta\sigma|V|l'\mathbf{R}_n\sigma\rangle$ matrični element preskoka s orbitale označene indeksom l u primitivnoj ćeliji $\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_\delta$ na orbitalu l' u primitivnoj ćeliji $\mathbf{R}_n$. Transformacija (2.5),

$$|l\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}|l\mathbf{R}_n\rangle, \tag{B.11}$$

vodi do

$$H_0 = \sum_{ll'}\sum_{\mathbf{k}\sigma} H_0^{ll'}(\mathbf{k})|l\mathbf{k}\sigma\rangle\langle l'\mathbf{k}\sigma|, \tag{B.12}$$

gdje je

$$H_0^{ll'}(\mathbf{k}) = \sum_\delta t^{ll'}(\mathbf{R}_\delta)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta}. \tag{B.13}$$

Vezanje ovih elektrona na vanjska elektromagnetska polja možemo opisati pomoću supstitucije (B.9). Goli hamiltonijan H_0 sada se transformira u

$$\begin{aligned}\tilde{H}_0 &= \sum_{ll'}\sum_{n\delta}\sum_{\sigma} t^{ll'}(\mathbf{R}_\delta)|\tilde{l}\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_\delta\sigma\rangle\langle\tilde{l}'\mathbf{R}_n\sigma| \\ &\approx \sum_{ll'}\sum_{n\delta}\sum_{\sigma} t^{ll'}(\mathbf{R}_\delta)e^{i(e/\hbar c)\mathbf{A}(\mathbf{R}_n)\cdot\mathbf{R}_\delta}|l\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_\delta\sigma\rangle\langle l'\mathbf{R}_n\sigma|.\end{aligned} \tag{B.14}$$

Razvoj po malom $\mathbf{A}(\mathbf{R}_n)$ ovog izraza daje

$$\tilde{H}_0 = H_0 + H_1^{ext} + ..., \tag{B.15}$$

gdje je

$$H_1^{ext} = \sum_{ll'}\sum_{n\delta}\sum_{\sigma} t^{ll'}(\mathbf{R}_\delta)\frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{R}_n)\cdot\mathbf{R}_\delta|l\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_\delta\sigma\rangle\langle l'\mathbf{R}_n\sigma|. \tag{B.16}$$

Koristeći transformacije (2.5) i činjenicu da je

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} = i\mathbf{R}_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \tag{B.17}$$

možemo H_1^{ext} prevesti na oblik

$$H_1^{ext} \approx \sum_{ll'}\sum_{\mathbf{kq}} \delta H_0^{ll'}(\mathbf{k},\mathbf{q})|l\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle\langle l'\mathbf{k}|, \tag{B.18}$$

gdje je

$$\delta H_0^{ll'}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \approx -\frac{e}{\hbar c}\sum_{\alpha}\frac{\partial H_0^{ll'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}A_\alpha(\mathbf{q}). \tag{B.19}$$

Ovdje je

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \sum_n e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}\mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \tag{B.20}$$

Fourierov transformat vektorskog potencijala.

Dodatak C Transportne jednadžbe gibanja: račun tenzora vodljivosti

C.1 Neravnotežna funkcija raspodjele

U slučaju kada imamo samo jednu vrpcu u kojoj elektroni imaju disperziju $\varepsilon(\mathbf{k})$, a cijeli se kristal nalazi u kontaktu s termalnim rezervoarom koji je na temperaturi T, vjerojatnost zaposjednuća stanja valnog vektora $\mathbf{k}$ dana je Fermi-Diracovom funkcijom raspodjele

$$f_0(\varepsilon(\mathbf{k})) = \frac{1}{exp\{(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)/kT)\} + 1} \equiv f_0(\mathbf{k}). \tag{C.1}$$

Ako su prisutna i vanjska elektromagnetska polja vjerojatnost zaposjednuća se promijeni. Nova funkcija raspodjele $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ razlikuje se od Fermi-Diracove funkcije raspodjele $f_0(\mathbf{k})$. Razliku pišemo kao neravnotežni dio te funkcije $\delta f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) - f_0(\mathbf{k})$. Da bismo riješili problem potrebno je riješiti jednadžbu koju zadovoljava $\delta f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. Tu jednadžbu nazivamo transportna jednadžba. Njezinu strukturu možemo odrediti koristeći semiklasični pristup ili kvantni pristup. U prvom slučaju jednadžbu nazivamo Boltzmannova transportna jednadžba, a u drugom kvantna transportna jednadžba. Te se jednadžbe mogu riješiti u specijalnim slučajevima. Najvažnije pojednostavljenje jest da se ograničimo na monokromatska vanjska električna polja

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} + c.c., \tag{C.2}$$

gdje je ω frekvencija polja, a $\mathbf{q}$ je valni vektor. Neravnotežni dio funkcije raspodjele ima u tom slučaju oblik

$$\delta f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{t}) = \delta f(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} + c.c. \tag{C.3}$$

U režimu linearnog odziva vrijedi $\delta f(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) \propto \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega)$.

C.2 Boltzmannova transportna jednadžba

U semiklasičnoj Boltzmannovoj transportnoj jednadžbi svaki je elektron opisan s kvaziimpulsom $\mathbf{k}$ i s položajem $\mathbf{r}$. Vremenska promjena funkcije raspodjele ovisi o

raspršenjima elektrona na nečistoćama, na fononima i na drugim elektronima. Te procese možemo predstaviti integralom kolizije $I(f(\mathbf{k},\mathbf{r},t))$, a promjenu u jedinici vremena možemo zapisati na način

$$\frac{\mathrm{d}f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\mathrm{d}t} = I(f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)). \tag{C.4}$$

Raspišemo li derivaciju $\mathrm{d}f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)/\mathrm{d}t$ u tom izrazu, dobivamo

$$\frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} = I(f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)). \tag{C.5}$$

U ovom izrazu brzinu elektrona $\dot{\mathbf{r}}$ zamjenjujemo s njegovom grupnom brzinom, a promjenu $\dot{\mathbf{k}}$ opisujemo pomoću Lorentzove sile. Naime, jednadžba gibanja elektrona u vanjskom elektromagnetskom polju ima oblik

$$\dot{\mathbf{p}} = \hbar\dot{\mathbf{k}} = e\left(\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right). \tag{C.6}$$

Direktnim uvrštavanjem dobivamo

$$\frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + e\left(\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right)\frac{\partial f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{p}} = I(f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)). \tag{C.7}$$

U ovoj jednadžbi ravnotežni dio funkcije raspodjele, $f_0(\mathbf{k})$, ne ovisi o $\mathbf{r}$ i t, što omogućava značajna pojednostavljenja. Također vidimo da je $(\partial f_0/\partial \mathbf{p}) = \mathbf{v}(\partial f_0/\partial \varepsilon)$, što vodi do zaključka da je

$$\frac{e}{c}(\mathbf{v} \times \mathbf{H}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \propto (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{v} = 0. \tag{C.8}$$

Na koncu ova jednadžba poprima oblik

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{c}(\mathbf{v} \times \mathbf{H})\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} = I(f). \tag{C.9}$$

Ovisnosti o $\mathbf{r}$, $\mathbf{k}$ i t su implicitne. Integral kolizije $I(f)$ nekakva je složena funkcija od ukupne funkcije $f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$ tako da je ova jednadžba u generalnom slučaju integralno-diferencijalna jednadžba. Osnovno pojednostavljenje pri rješavanju jednadžbe to je da relaksacijske procese i integral kolizije opišemo na fenomenološki način, koristeći aproksimaciju relaksacijskog vremena. Relaksacijsko vrijeme sustava τ definiramo na

način

$$I(f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)) = -\frac{\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\tau}. \tag{C.10}$$

Ako stavimo da je $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0$, vidimo da jednadžbe (C.4) i (C.10) opisuju brzinu povratka sustava u ravnotežno stanje. U ovoj aproksimaciji Boltzmannova transportna jednadžba poprima oblik

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{e}{c}(\mathbf{v} \times \mathbf{H})\frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}{\tau}, \tag{C.11}$$

gdje su ovisnosti o $\mathbf{k}$, $\mathbf{r}$ i t oblika $\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$, $\mathbf{v}(\mathbf{k})$, $f_0(\mathbf{k})$ te $\tau(\mathbf{k})$.

C.3 Ohmov zakon

Inducirane gustoće različitih opservabli u semiklasičnoj transportnoj teoriji računamo na isti način, pomoću funkcije raspodjele $f(\mathbf{k},\mathbf{r},t)$. Na primjer, gustoća naboja prosječna je vrijednost naboja elektrona e, gustoća struje naboja prosječna je vrijednost struje elektrona $e\mathbf{v}(\mathbf{k})$,

$$\rho(\mathbf{r},t) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} e f(\mathbf{k},\mathbf{r},t), \tag{C.12}$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} e\mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k},\mathbf{r},t). \tag{C.13}$$

Odavde slijedi da su inducirane gustoće definirane na način

$$\rho^{ind}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} e\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t), \tag{C.14}$$

$$\mathbf{J}^{ind}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} e\mathbf{v}(\mathbf{k})\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t). \tag{C.15}$$

U translacijski invarijantnim sustavima definicijska relacija za tenzor vodljivost reducira se na

$$J_\alpha^{ind}(\mathbf{q},\omega) \equiv J_\alpha(\mathbf{q},\omega) = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) E_\beta(\mathbf{q},\omega). \tag{C.16}$$

Za monokromatska polja transportnu jednadžbu lako riješimo jer direktno uvrštavanje

daje

$$i(\omega - \mathbf{q}\cdot\mathbf{v}(\mathbf{k}) + i/\tau)\delta f(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = e\mathbf{v}(\mathbf{k})\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon(\mathbf{k})}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega). \tag{C.17}$$

Uvrštavanje ovog izraza za $\delta f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega)$ u $\mathbf{J}^{ind}(\mathbf{q},\omega)$ na kraju daje $J_\alpha(\mathbf{q},\omega) \approx J_\alpha(\omega)$, gdje je

$$J_\alpha(\omega) \approx \frac{ie^2}{\omega + i/\tau}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} v_\alpha^2(\mathbf{k})\left(-\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon(\mathbf{k})}\right)E_\alpha(\mathbf{q},\omega). \tag{C.18}$$

Ovo predstavlja Ohmov zakon u slučaju jedne vodljive vrpce. Vidimo da je u odsustvu statičkog magnetskog polja tenzor $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)$ dijagonalan, te da je

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) \approx \delta_{\alpha,\beta}\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{ie^2}{\omega + i/\tau}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} v_\alpha^2(\mathbf{k})\left(-\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon(\mathbf{k})}\right). \tag{C.19}$$

C.4 Kvantne transportne jednadžbe

Aproksimacija slučajnih faza predstavlja najjednostavniji račun odziva sustava na longitudinalna makroskopska električna polja $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\nabla\Phi^{tot}(\mathbf{r},t)$. Račun daje udžbenički rezultat [10]

$$\rho^{ind}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma} e\frac{f_0(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\hbar\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\eta}\Phi^{tot}(\mathbf{q},\omega). \tag{C.20}$$

Usporedba ovoga izraza s relacijom (C.14) daje da kvantna inačica funkcije $\delta f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega)$ zadovoljava jednadžbu

$$(\hbar\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\eta)\delta f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega) = -\frac{ie}{q_\alpha}\big(f_0(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}+\mathbf{q})\big)E_\alpha(\mathbf{q},\omega). \tag{C.21}$$

Ovdje smo uzeli u obzir da je $E_\alpha(\mathbf{q},\omega) = iq_\alpha\Phi^{tot}(\mathbf{q},\omega)$. Veličina ie/q_α predstavlja dipolnu vršnu funkciju slobodnih elektrona koju možemo označiti sa $P_\alpha(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})$. U toj notaciji na koncu dobivamo (vršimo zamjenu $\eta \to \hbar/\tau$)

$$(\hbar\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\hbar/\tau)\delta f(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega) = -(f_0(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}+\mathbf{q}))\mathbf{P}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k})\cdot\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega). \tag{C.22}$$

Ovaj oblik jednadžbi važan je jer ga možemo lako proširiti na modele s više vrpci. Potrebno je samo uvesti indeks vrpce (označavat ćemo ih sa L i L') i načiniti zamjene $\mathbf{k} \to \mathbf{k}L$ i $\mathbf{k}+\mathbf{q} \to \mathbf{k}+\mathbf{q}L'$.

C.5 Modeli s više vrpci

U modelima s više vrpci relacije (C.14) i (C.15) generaliziraju se na način

$$\rho^{ind}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{V}\sum_{LL'}\sum_{\mathbf{k}\sigma} q^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})\delta f^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega), \tag{C.23}$$

$$J_\alpha^{ind}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{V}\sum_{LL'}\sum_{\mathbf{k}\sigma} J_\alpha^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})\delta f^{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega), \tag{C.24}$$

gdje sada neravnotežna funkcija raspodjele zadovoljava jednadžbu

$$(\hbar\omega+\varepsilon_L(\mathbf{k})-\varepsilon_{L'}(\mathbf{k}+\mathbf{q})+i\hbar/\tau)\delta f_{L'L}(\mathbf{k},\mathbf{q},\omega) = -\big(f_L(\mathbf{k})-f_{L'}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\big)\mathbf{P}^{L'L}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k})\cdot\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega). \tag{C.25}$$

U ovom su izrazu $P^{L'L}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k})$ dipolne vršne funkcije čiju strukturu trebamo odrediti.

Ako sa $\rho^{tot}(\mathbf{r},t)$, $\mathbf{J}^{tot}(\mathbf{r},t)$ i $\mathbf{P}^{tot}(\mathbf{r},t)$ označimo ukupne mikroskopske gustoće naboja, struja i dipolnih momenata porijeklom od slobodnih i od vezanih elektrona, tada možemo pisati

$$\begin{aligned}&\rho^{tot}(\mathbf{r},t) \equiv \rho^c(\mathbf{r},t) - \nabla\cdot\mathbf{P}^b(\mathbf{r},t) \equiv -\nabla\cdot\mathbf{P}^{tot}(\mathbf{r},t),\\ &\nabla\cdot\mathbf{J}^{tot}(\mathbf{r},t) + \frac{\partial}{\partial t}\rho^{tot}(\mathbf{r},t) = 0.\end{aligned} \tag{C.26}$$

Druga od te dvije relacije jest jednadžba kontinuiteta pomoću koje možemo povezati vršne funkcije $q^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})$ i $J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})$. Iz prve relacije pak dobivamo vezu između $q^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})$ i $P_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})$. Rezultat je

$$P_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}) = \frac{i\hbar J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k})}. \tag{C.27}$$

Rezultat svega jest izraz za dinamičku vodljivost

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{V}\sum_{LL'}\sum_{\mathbf{k}\sigma}\frac{i\hbar|J_\alpha^{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})|^2}{\varepsilon_{L'L}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k})}\frac{f_L(\mathbf{k})-f_{L'}(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\hbar\omega+\varepsilon_{LL'}(\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q})+i\hbar\Gamma^{LL'}}, \tag{C.28}$$

koji predstavlja proširenje Ohmovog zakona na sustave s više vrpci. Dodatna rasprava ovog izraza nalazi se u glavnom tekstu u potpoglavlju 3.4.

Dodatak D Blochove funkcije u anizotropnom 3D Diracovom modelu

U potpoglavlju 5.2 uvjerili smo se da su rješenje Schrödingerove jednadžbe anizotropnog 3D Diracovog modela četiri vrpce čije su disperzije opisane Blochovim energijama (4.10). U slučaju $M = 0$ te se energije dodatno pojednostavne,

$$\varepsilon_L(\mathbf{k}) \equiv E_L = s_L K = s_L \hbar \sqrt{v_{Fx}^2 k_x^2 + v_{Fy}^2 k_y^2 + v_{Fz}^2 k_z^2}, \tag{D.1}$$

gdje je $s_1 = s_2 = -s_3 = -s_4 = 1$. Ovdje ćemo odrediti i Blochove funkcije u oba slučaja $M = 0$ i $M \neq 0$. Vidjet ćemo da je u oba slučaja korisno podijeliti transformaciju valnih funkcija iz $\{l\mathbf{k}\}$ reprezentacije u $\{L\mathbf{k}\}$ reprezentaciju u dva koraka, preko pomoćne $\{m\mathbf{k}\}$ reprezentacije.

D.1 Slučaj $M = 0$

Elementi M=0 hamiltonijana u reprezentaciji delokaliziranih molekularnih orbitala su

$$\left(H_0^{ll'}(\mathbf{k})\right) = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \tag{D.2}$$

a elementi matrice transformacije $\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)$ rješenja su Schrödingerove jednadžbe (4.8),

$$\sum_{l'} \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l')[H_0^{ll'}(\mathbf{k}) - E\delta_{l,l'}] = 0. \tag{D.3}$$

Ti elementi moraju zadovoljavati relacije ortonormiranosti

$$\sum_{l} \tilde{U}_{\mathbf{k}}^*(L,l)\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L',l) = \delta_{L,L'}. \tag{D.4}$$

Dvije od četiri jednadžbe (D.3) linearno su nezavisne, pa nakon zamjene E sa E_L dobivamo

$$E_L\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,C) = K_z\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,A) + K_-\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,B), \tag{D.5}$$

$$E_L\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,D) = K_+\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,A) - K_z\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,B). \tag{D.6}$$

Zbrajanjem i oduzimanjem ovih izraza dobivamo

$$E_L\left(\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,C)\pm\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,D)\right)=(K_z\pm K_+)\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,A)+(K_-\mp K_z)\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,B). \tag{D.7}$$

Dakle, za dovoljno jednostavan izbor koeficijenata $\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,A)$ i $\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,B)$ možemo lako odrediti i preostala dva za svaki L. Najjednostavniji izbor je sljedeći,

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,A)=\frac{1}{2},\quad L=1,2,3,4, \tag{D.8}$$

te

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}}(1,B)=\tilde{U}_{\mathbf{k}}(3,B)=-\tilde{U}_{\mathbf{k}}(2,B)=-\tilde{U}_{\mathbf{k}}(4,B)=\frac{1}{2}. \tag{D.9}$$

Lako vidimo da su elementi matrice $\hat{U}^\dagger_{\mathbf{k}}=\left(\tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l)\right)$ sljedeći,

$$\hat{U}^\dagger_{\mathbf{k}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & u^*_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & v^*_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -u^*_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -v^*_{\mathbf{k}} & -u_{\mathbf{k}}\end{pmatrix}. \tag{D.10}$$

Ovdje su uvedene pokrate

$$u_{\mathbf{k}}=\frac{K_z+K_+}{\sqrt{2}K},\quad v_{\mathbf{k}}=\frac{K_z-K_+}{\sqrt{2}K},\quad K_\pm=K_x\pm iK_y. \tag{D.11}$$

Matrica transformacije $\hat{U}_{\mathbf{k}}=\left(U_{\mathbf{k}}(l,L)\right)$ ima oblik

$$\hat{U}_{\mathbf{k}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} & -u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}\\ -v^*_{\mathbf{k}} & u^*_{\mathbf{k}} & v^*_{\mathbf{k}} & -u^*_{\mathbf{k}}\end{pmatrix}. \tag{D.12}$$

D.2 Pomoćna reprezentacija $\{m\mathbf{k}\}$

Ako uvedemo pomoćnu reprezentaciju $\{m\mathbf{k}\}$, $m=a,b,c,d$, i matrice transformacije $\left(\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}\right)^\dagger=\left(\tilde{U}_{\mathbf{k}}(m,l)\right)$, $\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}=\left(U_{\mathbf{k}}(l,m)\right)$, gdje je

$$|l\mathbf{k}\rangle=\sum_m U_{\mathbf{k}}(l,m)|m\mathbf{k}\rangle,\quad |m\mathbf{k}\rangle=\sum_l \tilde{U}_{\mathbf{k}}(m,l)|l\mathbf{k}\rangle, \tag{D.13}$$

matrica $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ faktorizira se na način

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}} \hat{U}^{mL}_{\mathbf{k}}, \quad \hat{U}^{\dagger}_{\mathbf{k}} = \left(\hat{U}^{mL}_{\mathbf{k}}\right)^{\dagger} \left(\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}\right)^{\dagger}. \tag{D.14}$$

Pomoćnu reprezentaciju biramo na način da matrica $\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}$ ima najjednostavniji oblik. Želimo je povezati s rotacijom za $\pi/4$ u prostoru razapetom vektorima $|A\mathbf{k}\rangle$ i $|B\mathbf{k}\rangle$. Dakle, prva dva vektora, $|a\mathbf{k}\rangle$ i $|b\mathbf{k}\rangle$, biramo na način

$$|A\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\mathbf{k}\rangle + |b\mathbf{k}\rangle) = \frac{1}{2}(|1\mathbf{k}\rangle + |2\mathbf{k}\rangle + |3\mathbf{k}\rangle + |4\mathbf{k}\rangle), \tag{D.15a}$$

$$|B\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\mathbf{k}\rangle - |b\mathbf{k}\rangle) = \frac{1}{2}(|1\mathbf{k}\rangle - |2\mathbf{k}\rangle + |3\mathbf{k}\rangle - |4\mathbf{k}\rangle). \tag{D.15b}$$

Taj izbor neposredno vodi do relacija

$$|a\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\mathbf{k}\rangle + |3\mathbf{k}\rangle), \tag{D.16}$$

$$|b\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\mathbf{k}\rangle + |4\mathbf{k}\rangle). \tag{D.17}$$

Ako na isti način raspišemo $|C\mathbf{k}\rangle$ i $|D\mathbf{k}\rangle$ preko $|L\mathbf{k}\rangle$ i preko $|m\mathbf{k}\rangle$ vektora vidimo da je

$$|C\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{\mathbf{k}}|1\mathbf{k}\rangle + v_{\mathbf{k}}|2\mathbf{k}\rangle - u_{\mathbf{k}}|3\mathbf{k}\rangle - v_{\mathbf{k}}|4\mathbf{k}\rangle) = u_{\mathbf{k}}|c\mathbf{k}\rangle + v_{\mathbf{k}}|d\mathbf{k}\rangle, \tag{D.18a}$$

$$|D\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-v^*_{\mathbf{k}}|1\mathbf{k}\rangle + u^*_{\mathbf{k}}|2\mathbf{k}\rangle + v^*_{\mathbf{k}}|3\mathbf{k}\rangle - u^*_{\mathbf{k}}|4\mathbf{k}\rangle) = -v^*_{\mathbf{k}}|c\mathbf{k}\rangle + u^*_{\mathbf{k}}|d\mathbf{k}\rangle. \tag{D.18b}$$

To daje

$$|c\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\mathbf{k}\rangle - |3\mathbf{k}\rangle), \tag{D.19}$$

$$|d\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\mathbf{k}\rangle - |4\mathbf{k}\rangle). \tag{D.20}$$

Dakle, dvije matrice transformacije koje povezuju pomoćnu $\{m\mathbf{k}\}$ reprezentaciju sa $\{l\mathbf{k}\}$ i $\{L\mathbf{k}\}$ za $M = 0$ oblika su

$$\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ 0 & 0 & -v^*_{\mathbf{k}} & u^*_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad \hat{U}^{mL}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{D.21}$$

U računima strujnih vršnih funkcija ove matrice pisat ćemo u skraćenom obliku

$$\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} U_{Aa} & 0 \\ 0 & U_{Cc} \end{pmatrix}, \quad \hat{U}^{mL}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix}, \tag{D.22}$$

gdje je

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \equiv U_{Aa}, \quad \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v^*_{\mathbf{k}} & u^*_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \equiv U_{Cc}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv I. \tag{D.23}$$

D.3 Slučaj $M \neq 0$

Pomoćna nam reprezentacija omogućava jednostavno određivanje Blochovih funkcija u slučaju $M \neq 0$. Naime, prvi korak prilikom dijagonalizacije ostaje isti te matrica $\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}$ ima isti oblik kao i za $M = 0$. Ako pogledamo djelovanje pomoćne transformacije na Hamiltonijan (4.4) dobivamo

$$H^{mm'}(\mathbf{k}) = \left(\left(\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}\right)^T \hat{H}(\mathbf{k}) \left(\hat{U}^{lm}_{\mathbf{k}}\right)^* \right)_{mm'}. \tag{D.24}$$

Direktno uvrštavanje daje

$$\left(H^{mm'}(\mathbf{k})\right) = \begin{pmatrix} U^T_{Aa} & 0 \\ 0 & U^T_{Cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} MI & \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -MI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^*_{Aa} & 0 \\ 0 & U^*_{Cc} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} MI & KI \\ KI & -MI \end{pmatrix}. \tag{D.25}$$

Zaključak je da dijagonalni elementi ostaju isti u $\{m\mathbf{k}\}$ reprezentaciji.

Drugi korak u reprezentaciju Blochovim funkcijama $\{L\mathbf{k}\}$ najlakše je načiniti primijetimo li sličnost hamiltonijana (D.25) s hBN-om u potpoglavlju 2.3. U hBN-u smo

hamiltonijan

$$\left(H_0^{ll'}(\mathbf{k})\right)_{\text{hBN}} = \begin{pmatrix} \Delta & v_F\hbar|\mathbf{k}| \\ v_F\hbar|\mathbf{k}| & -\Delta \end{pmatrix} \tag{D.26}$$

dijagonalizirali transformacijom čiji je oblik

$$\left(\hat{U}_{\mathbf{k}}\right)_{\text{hBN}} = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} & \sin\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} \\ \\ \sin\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} & -\cos\dfrac{\theta(\mathbf{k})}{2} \end{pmatrix}. \tag{D.27}$$

Ako primijetimo $MI_{2\times2} \sim \Delta$, $KI_{2\times2} \sim v_F\hbar|\mathbf{k}|$ i definiramo pomoćnu fazu $\phi(\mathbf{k}) = \tan^{-1}\dfrac{K}{M} \sim \theta(\mathbf{k})$, dobivamo

$$\hat{U}_{\mathbf{k}}^{mL} = \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}}I & V_{\mathbf{k}}I \\ V_{\mathbf{k}}I & -U_{\mathbf{k}}I \end{pmatrix}, \tag{D.28}$$

gdje su uvedene pokrate

$$U_{\mathbf{k}} = \cos\frac{\phi(\mathbf{k})}{2}, \quad V_{\mathbf{k}} = \sin\frac{\phi(\mathbf{k})}{2}. \tag{D.29}$$

Veza transformacija $\hat{U}_{\mathbf{k}}^{lm} = \left(U_{\mathbf{k}}^{lm}(l,m)\right)$ i $\hat{U}_{\mathbf{k}}^{mL} = \left(U_{\mathbf{k}}^{mL}(m,L)\right)$ s ukupnom matricom transformacije $\hat{U}_{\mathbf{k}} = \left(U_{\mathbf{k}}(l,L)\right)$ je

$$U_{\mathbf{k}}(l,L) = \sum_m U_{\mathbf{k}}(l,m)U_{\mathbf{k}}(m,L), \quad \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,l) = \sum_m \tilde{U}_{\mathbf{k}}(L,m)\tilde{U}_{\mathbf{k}}(m,l), \tag{D.30}$$

ili možemo pisati kraće

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}}^{lm}\hat{U}_{\mathbf{k}}^{mL}, \quad \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \left(\hat{U}_{\mathbf{k}}^{mL}\right)^{\dagger}\left(\hat{U}_{\mathbf{k}}^{lm}\right)^{\dagger}. \tag{D.31}$$

Bibliography

[1] Novak, M.; Sasaki, S.; Segawa, K.; Ando, Y. Large linear magnetoresistance in the Dirac semimetal TlBiSSe. // Physical Review B. Vol. 91, 4(2015), str. 041203.

[2] Martino, E.; Crassee, I.; Eguchi, G.; Santos-Cottin, D.; Zhong, R. D.; Gu, G. D.; Berger, H.; Rukelj, Z.; Orlita, M.; Homes, C. C.; Akrap, A. Two-dimensional conical dispersion in $ZrTe_5$ evidenced by optical spectroscopy. // Physical review letters. Vol. 122, 21(2019), str. 217402.

[3] Neubauer, D.; Carbotte, J. P.; Nateprov, A. A.; Löhle, A.; Dressel, M.; Pronin, A. V. Interband optical conductivity of the [001]-oriented Dirac semimetal Cd_3As_2. // Physical Review B. Vol. 93, 12(2016), str. 121202.

[4] Zhang, H.; Liu C. X.; Qi, X. L.; Dai, X.; Fang, Z.; Zhang, S. C. Topological insulators in Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. // Nature physics. Vol. 5, 6(2009), str. 438-442.

[5] Despoja, V.; Novko, D.; Dekanić, K.; Šunjić, M.; Marušić, L. Two-dimensional and π plasmon spectra in pristine and doped graphene. // Physical Review B. Vol. 87, 7(2013), str. 075447.

[6] Bostwick, A.; Ohta, T.; Seyller, T.; Horn, K.; Rotenberg, E. Quasiparticle dynamics in graphene. // Nature physics. Vol. 3, 1(2007), str. 36-40.

[7] Kupčić, I. Incoherent optical conductivity and breakdown of the generalized Drude formula in quasi-one-dimensional bad metallic systems. // Physical Review B, Vol. 79, 23(2009), str. 235104.

[8] Xu, S. Y.; Xia, Y.; Wray, L. A.; Jia, S.; Meier, F.; Dil, J. H.; Osterwalder, J.; Slomski, B.; Bansil, A.; Lin, H.; Cava, R. J. Topological phase transition and texture inversion in a tunable topological insulator. // Science, Vol. 332, 6029(2011), str. 560-564.

[9] Liu, C. X.; Qi, X. L.; Zhang, H.; Dai, X.; Fang, Z.; Zhang, S. C. Model Hamiltonian for topological insulators. // Physical Review B. Vol. 82, 4(2010), str. 045122.

[10] Ziman, J. M. Principles of the Theory of Solids. Cambridge university press, 1972.