Optička vodljivost dvodimenzionalnih izolatora s inverzijom valentnih vrpci

Lemac, Karla

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:217:641678

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

Karla Lemac

OPTIČKA VODLJIVOST DVODIMENZIONALNIH IZOLATORA S INVERZIJOM VALENTNIH VRPCI

Diplomski rad

Zagreb, 2022.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ
FIZIKA; SMJER: ISTRAŽIVAČKI

Karla Lemac

Diplomski rad

Optička vodljivost dvodimenzionalnih izolatora s inverzijom valentnih vrpci

Voditelj diplomskog rada: doc. dr. sc. Zoran Rukelj

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2022.

mojoj mami i tati

Zahvale

Ovaj je rad napisan pod vodstvom mentora doc. dr. sc. Zorana Rukelja. Zahvaljujem mu se na svakoj ispravci, sugestiji i kritici. Zahvaljujem se na pomoći i podršci mojih najboljih prijatelja. Također, zahvaljujem se i najboljem bratu u ovom dijelu prostor-vremena na beskonačnim lekturama ovog rada.

Sažetak

Na temelju izmjerenih transportnih veličina, poput električne vodljivosti, možemo dobiti nekoliko informacija o elektronskim vrpcama. U ovom radu razmatramo obrnuti proces: polazeći od mikroskoposkog modela dvodimenzionalnog materijala s inverzijom valentnih vrpci računamo odzivne funkcije poput istosmjerne i optičke vodljivosti. Pod materijalima s inverzijom valentnih vrpci smatramo posebnu klasu dvodimenzionalnih polumetala čije valentne vrpce posjeduju elektron-šupljina simetriju i oblikom podsjećaju na meksički šešir.

Da bismo pobliže proučili transportna svojstva takvih materijala, definirali smo minimalni elektronski efektivni hamiltonijan s dvama slobodnim parametrima. Dijagonalizacijom takvog hamiltonijana dobivene su vrpce oblika meksičkog šešira i mogućnost opisa dviju različitih osnovnih elektronskih faza. To su faza s energetskim procijepom i faza čvorne petlje.

Cijeli je rad usmjeren k tom da na temelju općeg oblika tenzora vodljivosti, kojeg smo izveli u formalizmu jednadžbi gibanja za neravnotežnu Landauovu funkciju distribucije, te kojeg smo podijelili na unutarvpčane i međuvrpčane doprinose, pokažemo jedinstveni otisak dviju navedenih elektronskih faza; u istosmjernom i optičkom odzivu.

U istosmjernoj vodljivosti, u kojoj glavni doprinosi dolaze od unutarvrpčanih procesa na temelju ovisnosti efektivne koncentracije elektrona o dopiranju, moguće je utvrditi razliku između faze s procijepom i faze čvorne petlje. Ta je razlika među fazama očita i na primjeru gustoće elektronskih stanja, koja za slučaj faze s procijepom ima korijenski singularitet, dok je gustoća stanja u fazi čvorne petlje konstantna funkcija energije. Konačna potvrda u identifikaciji faza dolazi iz međuvrpčane tj. optičke vodljivosti jer je pokazano da optički odziv faze s čvornom petljom iščezava.

Ključne riječi: dvodimenzionalni polumetali, dvovrpčani hamiltonijan, optička vodljivost, istosmjerna vodljivost.

Optical conductivity of a two-dimensional insulator with valence band inversion

Abstract

Based on the measured transport quantities, such as electrical conductivity, we can obtain some information about electronic bands. In this paper, we consider the reverse process, starting from a microscopic model of a two-dimensional material with inversed valence bands, we calculate response functions such as DC (*direct current*) and optical conductivity. Under the inversion of the valence bands we consider a special class of two-dimensional semimetals valence bands that have electron-hole symmetry and are shaped like a Mexican hat.

In order to study the transport properties of such materials in more detail, we defined minimal electronic effective Hamiltonian with two free parameters. Diagonalization of such a Hamiltonian, Mexican hat-shaped bands were obtained and the possibility to describe two different basic electronic phases. These are the gapped phase and the nodal surface semimetal phase. The entire paper is aimed at the fact that, based on the general form of the conductivity tensor, which we derived in the formalism the equations of motion for the non-equilibrium Landau distribution function, and which we have divided into intraband and interband excitation, we will show the unique footprint of the two mentioned electronic phases; in DC and optical response.

In DC conduction, where the main excitations come from intraband processes based on the dependence of the effective electron concentration on doping, it is possible to determine the difference between the gapped phase and the nodal surface phase. This difference between phases can also be seen in the example of the density of electronic states, which for the case of a gapped phase has a root singularity, while the density of states in the nodal surface phase is a constant function of energy. The final confirmation in the identification of phases comes from interband, i.e. optical conductivity because it was shown that the optical response of the phase with the nodal surface vanishes.

Keywords: two-dimensional semimetals, two-band Hamiltonian, optical conductivity, DC conductivity

Sadržaj

1 Materijali s neobičnim elektronskim vrpcama **3**

2 Nabojne gustoće u kristalima **5**

2.1 Blochov hamiltonijan i druga kvantizacija 5

2.1.1 Operatori nabojnih gustoća 6

2.2 Hamiltonijan vanjske smetnje 8

3 Linearni odziv **10**

3.1 Neravnotežna funkcija distribucije 10

3.2 Inducirane veličine i Heisenbergova jednadžba 11

3.3 Heisenbergova jednadžba za $\delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(\omega)$ 12

3.3.1 Konačni oblik tenzora vodljivosti 15

4 Tenzor vodljivosti **17**

4.1 Unutarvrpčana vodljivost - Drudeova formula 17

4.2 Međuvrpčana vodljivost - optička vodljivost 18

5 Elektronski hamiltonijan **21**

5.1 Dvovrpčani hamiltonijan 21

5.2 Gustoća energetskih stanja 23

5.2.1 Gustoća energetskih stanja u fazi čvorne petlje 25

5.2.2 Gustoća energetskih stanja faze s procijepom 25

6 Unutarvrpčana vodljivost **27**

6.1 Ukupna koncentracija 27

6.2 Efektivna koncentracija 29

6.3 Veza između ukupne i efektivne koncentracije 31

7 Optička vodljivost **33**

7.1 Strujni matrični elementi 33

7.2 Optička vodljivost faze s procijepom 34

7.3 Karakteristike optičke vodljivosti faze s procijepom 34

A Strujni matrični elementi **40**

Literatura **42**

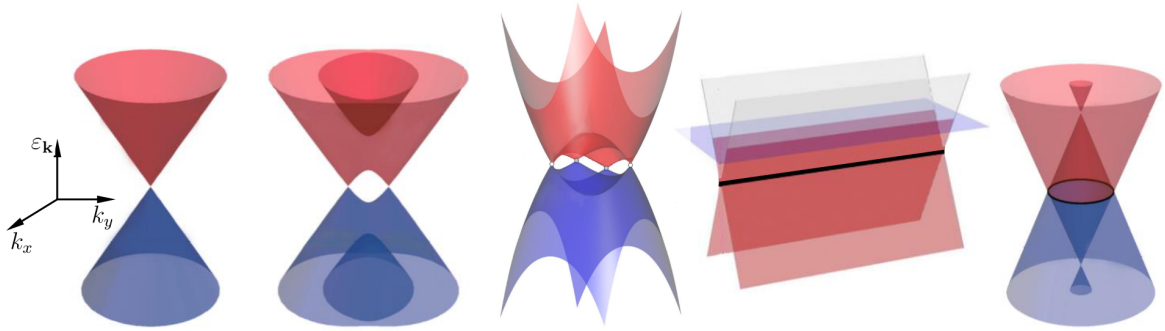
Poglavlje 1

Materijali s neobičnim elektronskim vrpcama

Nakon što je F. Bloch postavio teoriju elektronskih vrpci za kristale, odnosno, materijale čiji su konstituenti poredani u strukturu rešetke, prirodno se ponudilo objašnjenje za elektrodinamička svojstva dvaju glavnih klasa kristala: izolatora i metala. Izolatori su definirani kao oni materijali čije su vodljiva i valentna vrpca prazna, odnosno, puna na $T = 0$ i međusobno odijeljene energetskim procijepom. Metali, pak, obuhvaćaju slučaj kristala koji ima polupopunjene vrpce ili zadovoljava poseban slučaj kada je energetski procijep nula. Takva su obrazloženja preko elektronskih vrpci bila dovoljna kako bi ponudila odgovore na glavna pitanja poput: zašto su metali dobri vodiči struje i topline te zašto su sjajne površine i neprozirni kao npr. bakar i zlato. S druge strane, izolatori ne provode električnu struju i slabo provode toplinu te su ponekad i prozirni poput dijamanta i kvarca.

Eksperimentalno se pokazalo da su mnoga fizikalna svojstva direktno povezana s oblikom vrpci koje su najbliže Fermijevu nivou. Najbolja je ilustracija te tvrdnje slučaj *dvodimenzionalnih materijala* koji su prvi put sintetizirani početkom ovog stoljeća. Takvi materijali, konačne su površine, ali debljine usporedive s dimenzijom atoma od kojih je zacijelo najstariji i napoznatiji grafen [1]. Ovaj materijal duguje mnoga fizikalna svojstva linearnoj ovisnosti energije i Blochova valnog vektora svojih valentnih vrpci koje se dotiču u dvije točke (čvorovima) u Brillouinovoj zoni, a na Slici 1.1 (a) prikazan je izgled valentnih vrpci u blizini jednog takvog čvora. Linearne vrpce itekako su drukčije od paraboličnih kakve najčešće susrećemo u fizici kristala.

Novi dvodimenzionalni materijali bili su sintetizirani ubrzo nakon grafena, s još egzotičnijim vrpcama i sukladno tome elektrodinamičkim svojstvima. Primjer su takve klase materijala oni u kojima se valentna i vodljiva vrpca dodiruju u više točaka. Generalno, takvi se materijali nazivaju Weylovi polumetali i prikazani su na Slici 1.1 (b) i (c). Ukoliko se pak valentna i vodljiva vrpca dodiruju duž neke linije konačne duljine, takve materijale nazivat ćemo polumetalima s čvornim linijama (eng. *nodal-*



(a) (b) (c) (d) (e)

Slika 1.1: Nekoliko primjera vrpčanih struktura spomenutih u ovome poglavlju. Slike su preuzete iz [2, 3, 4].

line semimetals) 1.1 (d). Ta linija može biti i zatvorena, stoga, postoje polumetali s čvornim petljama (Slika 1.1 (e)) [5].

U ovom radu analizirat će se dvodimenzionalni sustav koji posjeduje inverziju valentnih vrpci. Upravo zbog te inverzije, valentne vrpce izgledom podsjećaju na meksički šešir [6, 7]. Pritom su dvije mogućnosti za osnovno stanje elektronskog podsustava koje ćemo dalje u tekstu nazivati fazama. To su faza s procijepom, u kojoj su elektronske valentne vrpce odvojene energetskim procijepom i faza čvorne petlje u kojoj se valentne vrpce dodiruju po kružnici.

Neobični oblik valentnih vrpci zasigurno će utjecati na elektronski transport poput istosmjerne i optičke vodljivosti. Pritom, pokušat ćemo dati odgovor na pitanje može li se pomoću eksperimenta odgovoriti o kojoj se fazi radi: fazi s procijepom, ili fazi čvorne petlje? Postavljeno pitanje povezano je s glavnim problemom ovakvih materijala, a to je da se spomenute karakteristike valentnih vrpci najčešće protežu na energetskim skalama reda veličine milielektronvolta. Upravo u finoći niskoenergetskih mjerenja leži eksperimentalni izazov, ne bi li se iz podataka mogao razlučiti oblik valentnih vrpci, a potom i osnovno stanje elektronskog sustava.

Slijed izlaganja glavnih ciljeva ovog rada sastoji se od više kategorija. Prvo, upoznajemo se s glavnim nabojnim veličinama u kristalu, poput gustoće elektronske polarizacije i struje. Potom, opisujemo inducirane veličine sustava na kojeg je narinuta slaba vanjska smetnja, tj. metodu linearnog odziva. Glavni rezultat, poput tenzora vodljivosti izračunat ćemo u formalizmu jednadžbi gibanja za neravnotežni dio neravnotežne Landauove funkcije distribucije. Razdvojit ćemo unutarvpčane od međuvrpčanih doprinosa u tenzoru vodljivosti i zasebno ih analizirati. Pokazat ćemo koje su glavne karakteristike dviju faza (s procijepom i čvorne petlje) u istosmjernoj vodljivosti te kako ih možemo razlikovati u eksperimentu. Sličnu analizu primjenjujemo i na međuvrpčanu vodljivost koju nazivamo i optičkom vodljivošću. Pokazat ćemo da jedino faza s procijepom ima konačni optički odziv, dok će optički odziv faze čvorne petlje, u modelu koji će biti korišten u ovom radu, iščezavati.

Poglavlje 2

Nabojne gustoće u kristalima

Cilj je ovog poglavlja definirati i prikazati operatore poput elektronskog hamiltonijana, gustoće elektrona, dipolne gustoće te gustoće struje u formalizmu druge kvantizacije. Navedene ćemo operatore prikazati i u impulsnoj reprezentaciji primjenom Fourierovih transformata te definirati interakciju dipolnih gustoća s električnim poljem.

2.1 Blochov hamiltonijan i druga kvantizacija

Prisjetit ćemo se Diracove *braket notacije* i operatora projekcije u Hilbertovu prostoru [17]. Za Hilbertov prostor razapetim bazom čiji su vektori $|\nu\rangle$ određeni kvatnim brojem ν, definiramo relacije potpunosti za diskretna i kontinuirana stanja

$$\sum_{\nu} |\nu\rangle\langle\nu| = 1, \qquad \int d\mathbf{r}\, |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = 1 \tag{2.1.1}$$

gdje je $|\mathbf{r}\rangle$ baza prostorne reprezentacije. Pritom, uvodimo i uvjet ortonormiranosti baze u Hilbertovu prostoru. Za diskretna stanja vrijedi $\langle\nu|\mu\rangle = \delta_{\nu,\mu}$, gdje je $\delta_{\nu,\mu}$ Kroneckerov simbol, dok za kontinuirana stanja $\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, gdje je $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ Diracova δ-funkcija. Po definiciji, $\langle\mathbf{r}|\nu\rangle = \psi_\nu(\mathbf{r})$ je valna funkcija koja zadovoljava stacionarnu Schrödingerovu jednadžbu $\hat{H}(\mathbf{r})\psi_\nu(\mathbf{r}) = \varepsilon_\nu\psi_\nu(\mathbf{r})$. Također, po definiciji, za matrične elemente $\hat{H}$ u prostornoj bazi vrijedi $\langle\mathbf{r}|\hat{H}|\mathbf{r}'\rangle = \hat{H}(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$.

Definiramo operator stvaranja fermiona u stanju ν, kao $|\nu\rangle = c_\nu^\dagger|0\rangle$, gdje je $|0\rangle$ stanje koje nazivamo vakumom. Tako, primjerice, definiramo operator stvaranja fermiona u stanju $|\mathbf{r}\rangle$, što odgovara stvaranju fermiona na prostornoj koordinati $\mathbf{r}$

$$c_{\mathbf{r}}^\dagger = \sum_{\nu} \psi_\nu^*(\mathbf{r}) c_\nu^\dagger. \tag{2.1.2}$$

Sad možemo zapisati hamiltonijan u drugoj kvantizaciji. To je vrlo jednostavno koristeći projektore (2.1.1), ortonormiranost vektora i gore spomenitu Schrödingerovu

jednadžbu. Rezultat je

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\nu}\sum_{\mu}|\nu\rangle\langle\mu|\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\,\langle\nu|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\hat{H}|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\mu\rangle \\ &= \sum_{\nu}\sum_{\mu}|\nu\rangle\langle\mu|\,\varepsilon_{\mu}\delta_{\mu,\nu} \equiv \sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}c_{\nu}^{\dagger}c_{\nu}. \end{aligned} \tag{2.1.3}$$

U opisu kristala koristimo Blochove valne funkcije koje su pak opisane s tri kvantna broja: indeks vrpce s, Blochov valni vektor $\mathbf{k}$ i spin σ. U ovom radu spinski kvantni broj degeneriranih spinskih stanja nećemo pisati eksplicitno, nego će se dodati u završnim izrazima kao faktor 2. Za zapis hamiltonijana elektronskog podsustava u kristalu u drugoj kvantizaciji, potrebno je zamijeniti stanja u (2.1.3) na način $|\nu\rangle \to |s\mathbf{k}\rangle$, odnosno $c_{\nu} \to c_{s\mathbf{k}}$, što vodi na

$$\hat{H}_{el}^{0} = \sum_{s}\sum_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}}^{s}c_{s\mathbf{k}}^{\dagger}c_{s\mathbf{k}}. \tag{2.1.4}$$

Valnu funkciju elektrona u kristalu, $\langle\mathbf{r}|s\mathbf{k}\rangle = \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, nazivamo Blochovom funkcijom. Zbog periodičke strukture kristala ona zadovoljava uvjet $\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ za bilo koji vektor $\mathbf{R}$ Bravaisove rešetke [8].

2.1.1 Operatori nabojnih gustoća

Definirajmo operatore u Blochovoj bazi s kojima ćemo se susretati u daljnjoj analizi. Prvi je operator gustoće elektrona

$$\hat{\varrho}(\mathbf{r}) \equiv c_{\mathbf{r}}^{\dagger}c_{\mathbf{r}} = \sum_{s,s'}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\psi_{s\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r})\psi_{s'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})c_{s\mathbf{k}}^{\dagger}c_{s'\mathbf{k}'}, \tag{2.1.5}$$

gdje smo koristili (2.1.2). U konkretnim računima pogodnije je raditi u impulsnoj reprezentaciji. Stoga, više nas zanimaju Fourierove komponente operatora gustoće. Po definiciji je

$$\hat{\varrho}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\hat{\varrho}(\mathbf{q}), \tag{2.1.6}$$

što znači da je inverzna Fourierova transformacija jednaka

$$\begin{aligned}\hat{\varrho}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{V}\sum_{s,s'}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\int d^3\mathbf{r}\,e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\psi_{s\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r})\psi_{s'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\,c_{s\mathbf{k}}^{\dagger}c_{s'\mathbf{k}'} \\ &= \frac{1}{V}\sum_{s,s'}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}G_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{ss'}\,c_{s\mathbf{k}}^{\dagger}c_{s'\mathbf{k}'}. \end{aligned} \tag{2.1.7}$$

Integral u gornjemu izrazu obuhvaća cijeli volumen kristala V. Obično ga nazivamo nabojnim matričnim elementom i označavamo s $G_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{ss'}$. Spomenimo nakratko srednju vrijednost operatora $\hat{\varrho}(\mathbf{q})$ u osnovnom stanju sustava, odnosno u ravnoteži. Usrednjenje po ravnotežnom stanju, odnosno po ansamblu sustava u ravnoteži, označavat ćemo sa

šiljatim zagradama $\langle\rangle_0$

$$\langle\hat{\varrho}(\mathbf{q})\rangle_0 \;=\; \frac{1}{V}\sum_{s,s'}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\psi^*_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi_{s'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\,\langle c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}'}\rangle_0. \tag{2.1.8}$$

Iz statističke fizike znamo da usrednjenje fermionskih operatora vodi na Fermi-Diracovu raspodjelu

$$\langle c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}'}\rangle_0 = f^s_{\mathbf{k}}\,\delta_{s,s'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \tag{2.1.9}$$

Iskoristimo li temeljno svojstvo Blochovih funkcija te zamijenimo varijablu integracije $\mathbf{r}$ po cijelom prostoru s onom po primitivnoj ćeliji $\mathbf{r}_{pc}$ na način $\mathbf{r} \to \sum_{\mathbf{R}}(\mathbf{R}+\mathbf{r}_{pc})$, (2.1.8) je

$$\langle\hat{\varrho}(\mathbf{q})\rangle_0 \;=\; \frac{1}{V}\sum_{s}\sum_{\mathbf{k}} f^s_{\mathbf{k}}\underbrace{\sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}}_{N\delta_{\mathbf{q},0}}\underbrace{\int d^3\mathbf{r}_{pc}\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{pc}}|\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{pc})|^2}_{(v_{pc}/V)\delta_{\mathbf{q},0}}. \tag{2.1.10}$$

Rezultat (2.1.10) pokazuje da je samo usrednjena $\mathbf{q}=0$ komponenta operatora gustoće elektrona konačna i iznosi

$$\langle\hat{\varrho}(\mathbf{q}=0)\rangle_0 = \frac{1}{V}\sum_{s,\mathbf{k}} f_s(\mathbf{k}) = n, \tag{2.1.11}$$

gdje je s n označena ukupna koncentracija elektrona u kristalu. Ponovimo temeljni zaključak ove analize, a to je da su u osnovnom stanju, u ravnoteži, sve $\mathbf{q}>0$ Fourierove komponente operatora gustoće jednake nuli. Ako se vratimo nazad na relaciju (2.1.6), to implicira da je $\langle\hat{\varrho}(\mathbf{r})\rangle_0$ konstanta neovisna o $\mathbf{r}$. Dakle, u termodinamičkoj ravnoteži, gustoća elektrona u kristalu je uniformna.

Na potpuno analogan način definiramo operator gustoće polarizacije, točnije, njegovu α-tu kartezijsku komponentu $\hat{P}_\alpha(\mathbf{r}) = ec^\dagger_{\mathbf{r}}r_\alpha c_{\mathbf{r}}$. I ovdje je od značaja $\mathbf{q}$-ta komponetna u Fourierovu razvoju operatora dipolne gustoće

$$\hat{P}_\alpha(\mathbf{q}) = \frac{1}{V}\sum_{s,s'}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} P^{ss'}_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}\, c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}'}, \tag{2.1.12}$$

kojeg smo zapisali preko dipolnog matričnog elementa $P^{ss'}_{\alpha,\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}$ po uzoru na (2.1.7). No, za razliku od (2.1.8), usrednjimo li operator (2.1.12), možemo pokazati, koristeći slične korake kao u primjeru (2.1.10), da je

$$\langle\hat{P}_\alpha(\mathbf{q})\rangle_0 = 0, \quad \forall\,\mathbf{q}\geq 0 \tag{2.1.13}$$

Ovo je očigledno jer, ako je gustoća elektrona uniformna kako smo pokazali, tada zasigurno nema ni konačne polarizacije koja upravo zahtijeva neuniformnu gustoću elektrona.

Preostaje još analizirati operator gustoće struje elektrona $\hat{J}_\alpha(\mathbf{r})$. Iako je zapis operatora $\hat{J}_\alpha(\mathbf{r})$ u koordinatnoj reprezentaciji, za razliku od $\hat{\varrho}(\mathbf{r})$ i $\hat{P}_\alpha(\mathbf{r})$, ponešto složeniji, pretpostavljamo da se Fourierova komponenta operatora gustoće struje elektrona, s prostornom komponentom α može zapisati slično kao i (2.1.7) i (2.1.12)

$$\hat{J}_\alpha(\mathbf{q}) = \frac{1}{V}\sum_{s,s'}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} J^{ss'}_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}\, c^\dagger_{s\mathbf{k}} c_{s'\mathbf{k}'}, \tag{2.1.14}$$

s pripadnim strujnim matričnim elementom $J^{ss'}_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}$. Kako ne znamo $J^{ss'}_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}$, teško nam je provesti analizu usrednjenja te pokazati koliko je $\langle \hat{J}_\alpha(\mathbf{q})\rangle_0$. No, zadovoljit ćemo se s već gotovim rezultatom usrednjenja $\mathbf{q} = 0$ vrijednost operatora $\langle \hat{J}_\alpha(\mathbf{q})\rangle_0$ [9]

$$\langle \hat{J}_\alpha(\mathbf{q}=0)\rangle_0 = \frac{1}{V}\sum_{s,\mathbf{k}} e v^s_{\alpha\mathbf{k}} f^s_{\mathbf{k}}. \tag{2.1.15}$$

Veličina $v^s_{\alpha\mathbf{k}}$ je α-komponenta elektronske grupne brzine u vrpci s i jednaka je

$$v^s_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon^s_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha}, \tag{2.1.16}$$

a e je naboj elektrona. Kako su $\varepsilon^s_{\mathbf{k}}$ i $f^s_{\mathbf{k}}$ parne funkcija od $\mathbf{k}$, slijedi da je $v^s_{\alpha\mathbf{k}}$ neparna funkcija od $\mathbf{k}$. Dakle sumacija $\sum_{\mathbf{k}}$ izvršena po svim zasposjednutim stanjima u Brillouinovoj zoni će iščeznuti. Time smo pokazali: kristalom, u termodinamičkoj ravnoteži, elektroni se ne gibaju usmjereno i pritom ne generiraju struju naboja.

Zaključak je ove analize da u termodinamičkoj ravnoteži nema induciranih veličina poput struje i polarizacije. Kako bismo generirali struju naboja, potrebno je sustav rinuti izvan ravnoteže. O tome koliko je sustav u neravnoteži ili ne, signalizirat će konačne vrijednosti $\mathbf{q}$ komponenti operatora gustoće struje i polarizacije. Kako se to radi, vidjet ćemo u sljedećem poglavlju.

2.2 Hamiltonijan vanjske smetnje

Na izolirani kristal narinemo vanjsku smetnju u obliku elektromagnetskog polja. Cilj je definirati hamiltonijan interakcije nabojnih gustoća s elektromagnetskim poljem. Tu interakciju najednostavnije možemo opisati preko elektromagnetskih potencijala koji generiraju vanjsko elektromagnetsko polje koje se pak veže na adekvatne inducirane gustoće naboja. Primjeri su takvih interakcija: vezanje gustoće naboja na skalarni potencijal i vezanje gustoće struje naboja na vektorski potencijal [10]. U ovom ćemo radu, kako nam je krajnji cilj račun tenzora električne vodljivosti, odmah primjeniti oblik interakcije u kojoj se prirodno pojavljuje prostor-vremenski ovisno makroskopsko električno polje $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, a pripadna je gustoća naboja koja se veže na to makroskopsko polje dipolna gustoća, odnosno, polarizacija (2.1.12).

Hamiltonijan smetnje vremenski je ovisan ukoliko je i vanjska smetnja vremenski ovisna

$$\hat{H}_{int}(t) = -\int d\mathbf{r}\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \cdot \hat{\mathbf{P}}^{ind}(\mathbf{r},t) = -\sum_{\alpha} \int d\mathbf{r}\, E_{\alpha}(\mathbf{r},t) \hat{P}_{\alpha}^{ind}(\mathbf{r},t) \tag{2.2.1}$$

Ovdje valja biti oprezan. Unutar hamiltonijana (2.2.1) nalazi se makroskopsko električno polje, tj. ukupno električno polje kako ga osjeća neki elektron unutar kristala, a ne vanjsko električno polje koje je porijeklom primjerice od kondenzatora unutar kojeg se nalazi naš uzorak kristala. Postoje, doduše, geometrije uzorka za koje su makroskopsko i vanjsko električno polje identični [11]. Radi jednostavnosti, u daljnoj analizi, perturbativno električno polje $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ zvati ćemo *vanjskim* poljem. Drugo, kao što smo pokazali u prošlom poglavlju, srednja je veličina operatora polarizacije nula u ravnotežnom (nesmetanom) stanju (2.1.13). No, pod djelovanjem vanjske smetnje, u ovom slučaju električnog polja, inducira se polarizacija unutar kristala $\hat{P}_{\alpha}^{ind}(\mathbf{r},t)$ na koju se električno polje veže! To najbolje možemo vidjeti na primjeru Fourier transformiranog hamiltonijana (2.2.1)

$$\hat{H}_{int}(t) = -\sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{q}} E_{\alpha}(\mathbf{q},t) \hat{P}_{\alpha}^{ind}(-\mathbf{q},t). \tag{2.2.2}$$

Očito je $\hat{P}_{\alpha}^{ind}(-\mathbf{q},t) \neq 0$ za razliku od (2.1.13). Obrazloženje ćemo potražiti u poopćenju usrednjenja fermionskih operatora poput (2.1.9) na slučaj sustava koji je malo pomaknut iz termodinamičke ravnoteže djelovanjem vanjske smetnje.

Pretpostavit ćemo također da vanjska smetnja narinuta na kristal poput gore spomenutog električnog polja $E_{\alpha}(\mathbf{q},t)$ sporo varira na skalama dimenzije uzorka kojeg mjerimo. Kako pretpostavljamo da je $1/q \sim L$, gdje je L duljina uzorka, u konačnici ćemo staviti $\mathbf{q} \to 0$ u svim našim analitički dobivenim rezultatima.

Poglavlje 3

Linearni odziv

U ovom poglavlju kratko ćemo se upoznati s osnovama poopćenog Landauova pristupa prema izgradnji formalizma elektronskog transporta. Definirat ćemo postupak usrednjenja fermionskih operatora u neravnotežnom stanju te, koristeći Heisenbergovu jednadžbu za operatore, izračunati induciranu gustoću elektronske struje pod djelovanjem vanjskog električnog polja.

3.1 Neravnotežna funkcija distribucije

U osnovnom (nesmetanom) stanju elektronskog podsustava, srednja vrijednost operatora broja čestica u stanju $(s, \mathbf{k})$ opisana je Fermi-Diracovom raspodjelom. Također, srednje vrijednosti gustoće polarizacije i struje u nesmetanom slučaju iščezavaju. To nije tako u perturbiranom slučaju. Kako bi opisao utjecaj prostor-vremenski ovisne vanjske smetnje, primjerice električnog polja $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ na elektronski podsustav, Landau uvodi veličinu koju nazivamo neravnotežna funkcija raspodjele impulsa i rezultat je usrednjivanja fermionskog operatora broja čestica u neravnotežnom stanju [12]. Originalno je Landauova funkcija bila primijenjena za opis unutarvrpčanih procesa, no mi ćemo u ovom radu poopćiti Landauovu neravnotežnu raspodjelu impulsa na viševrpčani sustav, te ćemo spomenutu funkciju označavati s $f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t)$. Dakle, $f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t)$ mjeri broj elektrona u prijelazu iz početnog stanja $(s, \mathbf{k})$ u konačno stanje $(s', \mathbf{k}')$, a da se pritom nalaze u prostor-vremenskoj točki $(\mathbf{r}, t)$ unutar kristala u smetenom stanju [13]. Ukoliko je vanjska smetnja slaba, u najnižoj aproksimaciji $f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t)$ možemo zapisati kao

$$f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t) \approx f^{s}_{\mathbf{k}}\, \delta_{s,s'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} + \delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t). \tag{3.1.1}$$

U gornjem izrazu $f^{s}_{\mathbf{k}}$ je Fermi-Diracova raspodjela, a $\delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t)$ je neravnotežni dio neravnotežne funkcije raspodjele koji je proporcionalan vanjskoj smetnji ili u ovom slučaju polju $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. U konstrukciju $\delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t)$ uvodimo dva uvjeta.

Prvi je uvjet da je smetnja adijabatski uključena. To postižemo tako da u vremen-

sku ovisnost polja dodamo infinitezimalni faktor $\eta \to 0$. Perturbativno polje u tom slučaju je

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q},t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t + \eta t}, \tag{3.1.2}$$

te vidimo da u davnoj prošlosti $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t = -\infty) = 0$. No kako je $\delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r},t) \propto \mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ slijedi $\delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t = -\infty) = 0$.

Drugi je uvjet očuvanje impulsa. Perturbativno polje (3.1.2) nosi impuls $\mathbf{q}$, te se početni $\mathbf{k}$ i konačni $\mathbf{k}'$ impuls elektrona moraju razlikovati upravo za $\mathbf{q}$, dakle $\mathbf{k}' = \mathbf{k}+\mathbf{q}$.

Fourierova transformacija izraza (3.1.1) daje

$$f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{q},t) \approx f^{s}_{\mathbf{k}}\, \delta_{s,s'} \delta_{\mathbf{q},0} + \delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(t), \tag{3.1.3}$$

gdje smo drugi član u izrazu (3.1.3) notacijski skratili u $\delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{q},t)\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} \equiv \delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(t)$. Zapisano pomoću fermionskih operatora (3.1.3) glasi

$$\langle c^{\dagger}_{s\mathbf{k}} c_{s'\mathbf{k}'} \rangle_{\emptyset}(t) \approx \langle c^{\dagger}_{s\mathbf{k}} c_{s'\mathbf{k}'} \rangle_{0} + \langle c^{\dagger}_{s\mathbf{k}} c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle_{\emptyset}(t), \tag{3.1.4}$$

gdje smo s kutnim zagradama $\langle\rangle_{\emptyset}$ označili usrednjenje po ansamblu jednako pripremljenih sustava na koje je narinuta vanjska smetnja, odnosno ansamblu neravnotežnih sustava. Iz (3.1.2) i (3.1.4) vidimo da je $\langle c^{\dagger}_{s\mathbf{k}} c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle_{\emptyset}(t) \sim e^{-i\omega t + \eta t}$.

3.2 Inducirane veličine i Heisenbergova jednadžba

U Poglavlju 2 definirali smo srednje vrijednosti operatora u termodinamičkoj ravnoteži. Te srednje vrijednosti po definiciji su vremenski neovisne i za neke operatore poput gustoće polarizacije i struje iščezavaju. Ovdje definiramo srednje vrijednosti operatora induciranih u smetanom stanju. Intuitivno, za neki operator $\hat{A}$ očekujemo

$$\hat{A}^{ind}_{\alpha}(\mathbf{q},t) = \langle \hat{A}_{\alpha}(\mathbf{q},t) \rangle_{\emptyset} - \langle \hat{A}_{\alpha}(\mathbf{q},t) \rangle_{0}, \tag{3.2.1}$$

gdje je po definiciji

$$\langle \hat{A}_{\alpha}(\mathbf{q},t) \rangle_{\emptyset} = \sum_{s,s'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} A^{ss'}_{\alpha,\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\, f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{q},t). \tag{3.2.2}$$

Uvrstimo li (3.1.1) u (3.2.2) te (3.2.2) nazad u (3.2.1) slijedi

$$\hat{A}^{ind}_{\alpha}(\mathbf{q},t) = \sum_{s,s'} \sum_{\mathbf{k}} A^{ss'}_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}\, \langle c^{\dagger}_{s\mathbf{k}} c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle_{\emptyset}(t). \tag{3.2.3}$$

Dakle, inducirane veličine određene su neravnotežnim dijelom Landauove neravnotežne raspodjele. Kako smo pokazali da se potonja može zapisati pomoću fermionskih ope-

ratora koji zadovoljavaju Heisenbergovu jednadžbu slijedi

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rangle_\emptyset(t) = \langle[c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \hat{H}_{tot}]\rangle_\emptyset(t), \tag{3.2.4}$$

gdje je $\hat{H}_{tot} = \hat{H}^0_{el} + \hat{H}_{int}$ ukupni Hamiltnijan elektronskog podsustava koji se sastoji od hamiltonijana osnovnog stanja elektronskog podsustava $\hat{H}^0_{el}$ (2.1.4) i hamiltonijana interakcije s vanjskim poljem $\hat{H}_{int}$ (2.2.2).

Sada se već nadzire put k izračunu tenzora vodljivosti kojeg ćemo označiti s $\sigma_\alpha(\mathbf{q},\omega)$. Operator inducirane struje, po uzoru na (3.2.3) nakon što smo ga Fourier transformirali iz vremenskog u frekventni prostor $t \to \omega$ je

$$\hat{J}^{ind}_\alpha(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{V}\sum_{s,s'}\sum_{\mathbf{k}} J^{ss'}_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}\langle c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rangle_\emptyset(\omega). \tag{3.2.5}$$

Budući da je $\langle c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rangle_\emptyset(\omega) \propto E_\alpha(\mathbf{q},\omega)$, očigledno je da ukoliko smo pronašli $\langle c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rangle_\emptyset(\omega)$, pronašli smo i izraz za tenzor vodljivosti $\sigma_\alpha(\mathbf{q},\omega)$ definiran

$$\hat{J}^{ind}_\alpha(\mathbf{q},\omega) = \sigma_\alpha(\mathbf{q},\omega)E_\alpha(\mathbf{q},\omega). \tag{3.2.6}$$

Relacija (3.2.6) posljedica je linearnog odziva koji smo zapravo i pretpostavili pri definiciji Landauove raspodjele (3.1.1). U biti teorije linearnoga odziva stoji kako je odziv sustava na narinutu smetnju proporcionalan samoj smetnji koja je pak *dovoljno slaba*. Preostaje nam odrediti $\langle c^\dagger_{s\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rangle_\emptyset(\omega)$ koristeći Heisenbergovu jednadžbu.

3.3 Heisenbergova jednadžba za $\delta f^{ss'}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(\omega)$

Isključivo zbog preglednosti uvodimo nove oznake $\mathbf{p}$ i $\boldsymbol{\kappa}$ u operatoru $c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}$ umjesto postojećih $\mathbf{k}$ i $\mathbf{q}$ zbog lakšeg razlikovanja tijekom postupka izvrednjavanja. Prvo rješavamo Heisenbergovu jednadžbu za operatore $c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}$, a potom vršimo usrednjenje $\langle\rangle_\emptyset$. Vremenska derivacija na lijevoj strani spušta $-i\omega + \eta$ faktor iz eksponenta, dok na desnoj strani preostaje [15, 17]

$$(\hbar\omega + i\eta)c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} = \Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, \hat{H}^0_{el} + \hat{H}_{int}\Big]. \tag{3.3.1}$$

Koristimo distributivna svojstva komutatora, i prvo određujemo komutator s $\hat{H}^0_{el}$ u punom zapisu (2.1.4)

$$\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, \hat{H}^0_{el}\Big] = \sum_\nu\sum_{\mathbf{k}}\varepsilon^\nu_{\mathbf{k}}\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, c^\dagger_{\nu\mathbf{k}}c_{\nu\mathbf{k}}\Big]. \tag{3.3.2}$$

Kako su operacije među fermionskim operatorima definirane pomoću antikomutatora, potrebno je komutator u (3.3.2) zapisati pomoću antikomutatora. Lako se pokaže da vrijedi sljedeća relacija:

$$\Big[AB, CD\Big] = A\Big\{B, C\Big\}D - AC\Big\{B, D\Big\}D + \Big\{A, C\Big\}DB - C\Big\{A, D\Big\}B, \tag{3.3.3}$$

pomoću koje komutator u (3.3.2) glasi

$$\begin{aligned}\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, c^\dagger_{\nu\mathbf{k}}c_{\nu\mathbf{k}}\Big] &= c^\dagger_{s\mathbf{p}}\Big\{c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, c^\dagger_{\nu\mathbf{k}}\Big\}c_{\nu\mathbf{k}} - c^\dagger_{\nu\mathbf{k}}\Big\{c^\dagger_{s\mathbf{p}}, c_{\nu\mathbf{k}}\Big\}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} \\ &= c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{\nu\mathbf{k}}\delta_{s',\nu}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} - c^\dagger_{\nu\mathbf{k}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}\delta_{s,\nu}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}}.\end{aligned} \tag{3.3.4}$$

Zaključno,

$$\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, \hat{H}^0_{el}\Big] = \Big(\varepsilon^{s'}_{\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} - \varepsilon^s_{\mathbf{p}}\Big)c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}. \tag{3.3.5}$$

Sličnim postupkom određujemo i komutator s $\hat{H}_{int}$ (2.2.2). Slijedi

$$\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, \hat{H}_{int}\Big] = \sum_{\nu,\nu'}\sum_{\mathbf{q}} E_\alpha(\mathbf{q},\omega)\sum_{\mathbf{k}} P^{\nu\nu'}_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, c^\dagger_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}}c_{\nu'\mathbf{k}}\Big]. \tag{3.3.6}$$

Primjenom istog postupka (3.3.3) na komutator u (3.3.6) slijedi

$$\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, c^\dagger_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}}c_{\nu'\mathbf{k}}\Big] = c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{\nu'\mathbf{k}}\delta_{\nu,s'}\delta_{\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa},\mathbf{k}+\mathbf{q}} - c^\dagger_{\nu\mathbf{k}+\mathbf{q}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}\delta_{s,\nu'}\delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}}, \tag{3.3.7}$$

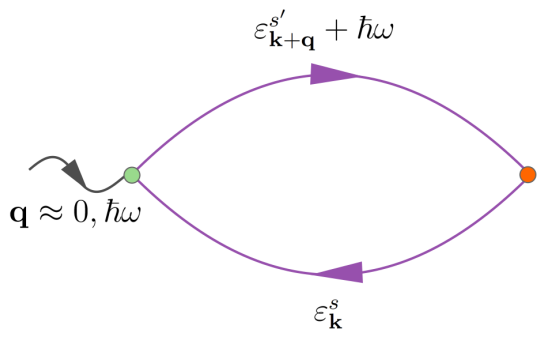
odnosno:

$$\begin{aligned}&\Big[c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}, \hat{H}_{int}\Big] = \\ &\sum_{\mathbf{q}} E_\alpha(\mathbf{q},\omega)\left(\sum_{\nu'} P^{s'\nu'}_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa},\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{q}}c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{\nu'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{q}} - \sum_{\nu} P^{\nu s}_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{p}}c^\dagger_{\nu\mathbf{p}+\mathbf{q}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}\right).\end{aligned} \tag{3.3.8}$$

Izraze (3.3.8) i (3.3.5) vratimo u jednadžbu (3.3.1) i usrednjimo operatore po neravnotežnom ansamblu $\langle\rangle_\emptyset$. Slijedi

$$\begin{aligned}&\langle c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}\rangle_\emptyset = \\ &\sum_{\mathbf{q}} E_\alpha(\mathbf{q},\omega)\frac{\sum_{\nu'} P^{s'\nu'}_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa},\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{q}}\langle c^\dagger_{s\mathbf{p}}c_{\nu'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{q}}\rangle_\emptyset - \sum_{\nu} P^{\nu s}_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{p}}\langle c^\dagger_{\nu\mathbf{p}+\mathbf{q}}c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}\rangle_\emptyset}{\hbar\omega + \varepsilon^s_{\mathbf{p}} - \varepsilon^{s'}_{\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} + i\eta}.\end{aligned} \tag{3.3.9}$$

Kako bismo izbjegli daljnu evaluaciju operatora u brojniku (3.3.9) ponovnom primjenom Heisenbergove jednadžbe (3.3.1) i tako unedogled, aproksimiramo neravnotežne



Slika 3.1: Feynmanov dijagram za izraz (3.3.12) Fermionski operatori prikazani su ljubičastom linijom, dok su matrični strujni i dipolni element prikazani zelenim odnosno narančastim kružićem. Siva valovita linija označava upadni foton.

srednje vrijednosti onima u ravnoteži:

$$\begin{aligned} \langle c^\dagger_{s\mathbf{p}} c_{\nu'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{q}} \rangle_\emptyset &\approx \langle c^\dagger_{s\mathbf{p}} c_{\nu'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{q}} \rangle_0 = f^s_{\mathbf{p}}\, \delta_{s,\nu'} \delta_{\mathbf{q},\boldsymbol{\kappa}}, \\ \langle c^\dagger_{\nu\mathbf{p}+\mathbf{q}} c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} \rangle_\emptyset &\approx \langle c^\dagger_{\nu\mathbf{p}+\mathbf{q}} c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} \rangle_0 = f^{s'}_{\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}\, \delta_{\nu,s} \delta_{\mathbf{q},\boldsymbol{\kappa}}. \end{aligned} \tag{3.3.10}$$

Iz povijesnih se razloga ta aproksimacija naziva *aproksimacija nasumičnih faza*. Stoga, pokazali smo da (3.3.9) nakon aproksimacija (3.3.10) postaje

$$\langle c^\dagger_{s\mathbf{p}} c_{s'\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} \rangle_\emptyset \approx P^{s's}_{\alpha,-\boldsymbol{\kappa},\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa},\mathbf{p}} \frac{f^s_{\mathbf{p}} - f^{s'}_{\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}}}{\hbar\omega + \varepsilon^s_{\mathbf{p}} - \varepsilon^{s'}_{\mathbf{p}+\boldsymbol{\kappa}} + i\eta} E_\alpha(\boldsymbol{\kappa}, \omega). \tag{3.3.11}$$

Ukoliko vratimo varijable $\mathbf{p} \to \mathbf{k}$ i $\boldsymbol{\kappa} \to \mathbf{q}$ u gornjemu izrazu i uvrstimo ga u (3.2.5), po definiciji slijedi (3.2.6) da je tenzor električne vodljivosti jednak

$$\sigma_\alpha(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s,s'} J^{ss'}_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} P^{s's}_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}} \frac{f^s_{\mathbf{k}} - f^{s'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\hbar\omega + \varepsilon^s_{\mathbf{k}} - \varepsilon^{s'}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\eta}. \tag{3.3.12}$$

U gornjem je izrazu sve poznato osim matričnih strujnih i polarizacijskih elemenata. No, vidjet ćemo kako ih možemo povezati.

Spomenimo i to da se izraz (3.3.12) može predočiti i pomoću Feynmanova dijagrama prikazanim na Slici 3.1. Općenito se takav tip dijagrama s jednom fermionskom petljom naziva *bubble* dijagram [15] jer izgledom podsjeća na mjehurić. U takvoj dijagramatskoj reprezentaciji fermionski operatori stvaranja i poništenja elektrona u raznim stanjima predočeni su ljubičastom linijom, matrični strujni elementi predočen je zelenim kružićem, dok je matrični dipolni element predočen narančastim kružićem. Sivom valovitom linijom označen je upadni foton s pripadnom energijom i impulsom.

3.3.1 Konačni oblik tenzora vodljivosti

Po uzoru na relacije iz klasične elektrodinamike koja povezuje inducirane gustoće struje i dipola [10]

$$\mathbf{J}^{ind} = \frac{\partial \mathbf{P}^{ind}}{\partial t}, \tag{3.3.13}$$

definiramo sličnu povezanost između $\mathbf{q}$-te komponente induciranih operatora struje i polarizacije [9]:

$$i\hbar \hat{J}_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}) = i\hbar \frac{\partial \hat{P}_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q})}{\partial t} \approx \left[\hat{P}_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}), \hat{H}_{el}^{0}\right], \tag{3.3.14}$$

gdje smo vremensku derivaciju operatora polarizacije zapisali pomoći Heisenbergove jednadžbe (3.2.4) u kojoj smo zadržali samo osnovni doprinos hamiltonijanu $\hat{H}_{el}^{0}$ elektronskog podsustava. Uvrstivši puni zapis operatora gustoće struje (2.1.14) i polarizacije (2.1.12) u (3.3.14) i koristeći rezultat (3.2.3) , slijedi

$$\begin{aligned} i\hbar \hat{J}_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, t) &= \sum_{s,s'} \sum_{\mathbf{k}} i\hbar J_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{ss'} \left\langle c_{s\mathbf{k}}^{\dagger} c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right\rangle_{\emptyset} \\ &= \sum_{s,s'} \sum_{\mathbf{k}} P_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{ss'} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{s}\right) \left\langle c_{s\mathbf{k}}^{\dagger} c_{s'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right\rangle_{\emptyset}. \end{aligned} \tag{3.3.15}$$

Izrazi pod sumama u (3.3.15) su jednaki pod uvjetom

$$P_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{ss'} = \frac{i\hbar J_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{ss'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{s}}. \tag{3.3.16}$$

No, u izrazu (3.3.12) se pojavljuje $P_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{s's}$ koji je, po uzoru na (3.3.16) jednak

$$P_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{s's} = \frac{i\hbar J_{\alpha,-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{s's}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{s'}} = \frac{i\hbar \left(J_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{ss'}\right)^{*}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{s'}} \tag{3.3.17}$$

Uvrstivši (3.3.17) nazad u (3.3.12) u konačnici slijedi

$$\sigma_{\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2i\hbar}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s,s'} \frac{|J_{\alpha,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{ss'}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^{s'}} \frac{f_{\mathbf{k}}^{s} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s'}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}^{s} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s'} + i\eta}. \tag{3.3.18}$$

Tako smo uspjeli opisati tenzor vodljivost preko Fermi-Diracove distribucije koja je pak funkcija elektronskih energija $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Pritom, još moramo staviti $\mathbf{q} \to 0$. Tim postupkom prirodno dolazi do podjele gornjeg tenzora na unutarvrpčane ($s = s'$) i međuvrpčane ($s \neq s'$) doprinose vodljivosti. Adijabatski parametar η može se poopćiti u fenomenološku konstantu relaksacije $\eta \to \hbar\gamma^{ss'}$ koja ima različite vrijednosti u unutarvrpčanom i međuvrpčanom kanalu. Jedini su parametari, koji ostaju za definirati, strujni matrični elementi. No, oni se prirodno definiraju u nedijagonalnoj reprezentaciji Blochova hamiltonijana osnovnog elektronskog sustava. U takvoj nedijagonalnoj reprezentaciji,

u Poglavlju 5, definirat ćemo efektivni hamiltonijan koji će opisivati sustav kojem računamo optičku vodljivost.

Sada promatrajmo zasebno unutarvrpčane i međuvrpčane doprinose vodljivosti.

Poglavlje 4

Tenzor vodljivosti

U ovom poglavlju razdvajamo opći oblik tenzora vodljivosti na unutarvrpčane i međuvrpčane doprinose. Unutarvrpčani dio tenzora vodljivosti reproducirat će Drudeovu formulu za vodljivost kristala. Međuvrpčani dio tenzora vodljivosti dodatno ćemo razmatrati za slučaj niskih temperatura i elektron-šupljina simetrije valentnih vrpci. Također, istražit ćemo implikacije $\mathbf{q} \to 0$ aproksimacije u vidu međuvrpčanih prijelaza.

4.1 Unutarvrpčana vodljivost - Drudeova formula

Zadržimo $s = s'$ doprinose u izrazu (3.3.18) te pustimo $\mathbf{q} \to 0$. Za ovaj slučaj već smo spomenuli u potpoglavlju 2.1.1 da je unutarvrpčani strujni matrični element $J^{ss}_{\alpha,\mathbf{q}\approx 0,\mathbf{k},\mathbf{k}} = ev^s_{\alpha\mathbf{k}}$ jednak grupnoj brzini elektrona u vrpci s. Elektronske energije, a slično i Fermi-Diracove raspodjele razvijamo na način

$$\begin{aligned} \varepsilon^s_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} &\approx \varepsilon^s_{\mathbf{k}} + \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon^s_{\mathbf{k}}, \\ f^s_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} &\approx f^s_{\mathbf{k}} + \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}} f^s_{\mathbf{k}} = f^s_{\mathbf{k}} + \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon^s_{\mathbf{k}}\,\frac{\partial f^s_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon^s_{\mathbf{k}}}. \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

Uvrštavajući (4.1.1) u (3.3.18) dobivamo Drudeovu formulu za vodljivost [8, 16]

$$\sigma_\alpha(\mathbf{q}=0,\omega) = \sigma_\alpha(\omega) = \frac{ie^2}{m_e}\frac{n_\alpha}{\omega + i\gamma}, \tag{4.1.2}$$

gdje smo uveli masu elektrona u vakuumu, m_e, te efektivnu koncentraciju vodljivih elektrona

$$n_\alpha = \frac{2}{V}\sum_{s,\mathbf{k}} m_e (v^s_{\alpha\mathbf{k}})^2 (-\frac{\partial f^s_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon^s_{\mathbf{k}}}). \tag{4.1.3}$$

Drudeova formula (4.1.2) jedna je od najčešće mjerenih funkcija u eksperimentalnoj fizici kondenzirane materije. Fenomenološka konstanta γ u jedinicama 1/s, piše se kao $1/t_r$, gdje je t_r vrijeme relaksacije vodljivih elektrona ili srednje vrijeme između sudara

elektrona u kristalu. Štoviše, pretpostavit ćemo da je t_r zaista konstanta neovisna o Fermijevoj energiji i temperaturi. Efektivna koncentracija vodljivih elektrona (4.1.3) generalno nije jednaka ukupnoj koncentraciji elektrona (2.1.11)

$$n = \frac{2}{V} \sum_{s,\mathbf{k}} f^s_{\mathbf{k}}. \tag{4.1.4}$$

Za razliku od n, n_α temperaturno je ovisna veličina. Na niskim temperaturama, pri kojima možemo aproksimirati $\partial f^s_{\mathbf{k}}/\partial \varepsilon^s_{\mathbf{k}} = -\delta(\varepsilon^s_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F)$, gdje je ε_F Fermijeva energija, ima značenje srednje kinetičke energije elektrona na Fermijevom nivou. U limesu $T \to 0$, samo za slučaj parabolične disperzije elektrona opisane s $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/(2m^*)$, gdje je m^* efektivna masa elektrona, može se pokazati usporedbom parcijalnih integracija izraza (4.1.4) i (4.1.3) da vrijedi

$$\frac{n_\alpha}{m_e} = \frac{n}{m^*}. \tag{4.1.5}$$

Spomenimo i najjednostavniji slučaj Drudeove formule, a to je statički slučaj $\omega = 0$ odnosno istosmjerna vodljivost

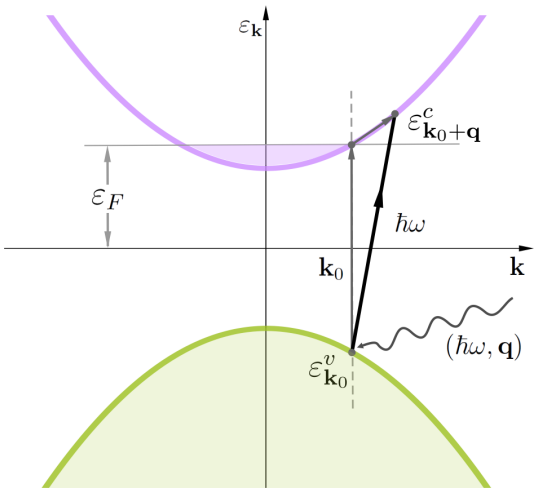
$$\sigma_\alpha(0) = e^2 t_r \frac{n_\alpha}{m_e}. \tag{4.1.6}$$

4.2 Međuvrpčana vodljivost - optička vodljivost

Ovdje razmatramo realni dio međuvrpčane $s \neq s'$ vodljivosti. Sustav koji razmatramo posjeduje dvije elektronske vrpce i prikazan je na Slici 4.1. Donju nazivamo valentnom i označavamo je indeksom v. Gornju vrpcu nazivamo vodljivom i označavamo je s c. Proces međuvrpčanog pobuđenja, koji ćemo nazivati i optičko pobuđenje kako je opisan formulom (3.3.18), prikazan je na Slici 4.1. Upadno elektromagnetsko polje (vanjska smetnja) na kristal s energijom $\hbar\omega$ i impulsom $\mathbf{q}$ je absorbirano od elektrona u v-vrpci u stanju $\mathbf{k}_0$ što uzrokuje optički prijelaz u stanje $\varepsilon^c_{\mathbf{k}_0+\mathbf{q}}$. Kako su energija i impuls upadnog elektromagnetskog zračenja povezani disperzijskom relacijom $\omega = \mathscr{C}|\mathbf{q}|$ gdje je $\mathscr{C}$ brzina svjetlosti, za tipične vrijednosti energije $\hbar\omega \lesssim 1$ eV je $|\mathbf{q}| \lesssim 10^6$ m^{-1}. S druge strane Blochov valni vektor omeđen je duljinom primitivne ćelije $|\mathbf{k}_{max}| \sim 1/a \sim$ Å^{-1} $\sim 10^{10}$ m^{-1}. Kako je evidentno $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{k}_{max}|$, međuvrpčani prijelaz skiciran na Slici 4.1 toliko je strm da ga možemo smatrati vertikalnim prijelazom. U nastavku, pretpostavimo $\gamma^{cv} = \gamma^{vc} = \gamma$ i stavimo $\mathbf{q} \to 0$ u izraz (3.3.18) . Slijedi

$$\sigma_\alpha(\omega) = \frac{2i\hbar}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|J^{cv}_{\alpha\mathbf{k}}|^2}{\varepsilon^c_{\mathbf{k}} - \varepsilon^v_{\mathbf{k}}} \frac{f^v_{\mathbf{k}} - f^c_{\mathbf{k}}}{\hbar\omega - \varepsilon^c_{\mathbf{k}} + \varepsilon^v_{\mathbf{k}} + i\hbar\gamma} + c \rightleftarrows v, \tag{4.2.1}$$

gdje smo s $c \rightleftarrows v$ označili izraz identičan prvome u relaciji (4.2.1) sa zamijenjenim oznakama c i v. Relacija (4.2.1) podložna je daljnim pojednostavljenjima uz dodatne



Slika 4.1: Shematski prikaz međuvrpčanog pobuđenja opisanog izrazom (3.3.18) pri čemu je puna valentna vrpca zelene, a vodljiva vrpca, popunjena do Fermijeve energije ε_F, ljubičaste boje. Upadno elektromagnetsko polje na kristal s energijom $\hbar\omega$ i impulsom $\mathbf{q}$ označeno je sivom valovitom linijom.

pretpostavke. Prva je takva pretpostavka da je fenomenološka konstanta relaksacije $\gamma \to 0$. U tom slučaju koristimo identitet

$$\lim_{\gamma\to 0} \frac{1}{x+i\gamma} = \frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \tag{4.2.2}$$

gdje je $\delta(x)$ Diracova δ-funkcija koja je definirana na sljedeći način:

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases} .$$

Time smo odredili realni dio tenzora vodljivosti

$$\Re\sigma_\alpha(\omega) = \frac{2\pi\hbar}{V} \sum_{\mathbf{k}} |J^{cv}_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \frac{f^v_{\mathbf{k}} - f^c_{\mathbf{k}}}{\varepsilon^c_{\mathbf{k}} - \varepsilon^v_{\mathbf{k}}} \delta(\hbar\omega - \varepsilon^c_{\mathbf{k}} + \varepsilon^v_{\mathbf{k}}) + c \rightleftarrows v. \tag{4.2.3}$$

Iz gornjeg se izraza vidi da je realni dio vodljivosti parna funkcija frekvencije električnog polja ω, dakle $\Re\sigma_\alpha(\omega) = \Re\sigma_\alpha(-\omega)$. Očigledno, dovoljno je zadržati se na prvom članu u relaciji (4.2.3) ukoliko nas zanima odziv na frekvencije $\omega > 0$. Uvedimo i drugu pretpostavku potrebnu za pojednostavljenje izraza (4.2.3). Pretpostavimo da valentna i vodljiva vrpca posjeduju elektron-šupljina simetriju. Ukratko, to znači da je $\varepsilon^c_{\mathbf{k}} = -\varepsilon^v_{\mathbf{k}}$. U tom slučaju δ-funkcija u (4.2.3) postaje konačna za $\hbar\omega = 2\varepsilon^c_{\mathbf{k}}$ što dodatno povlači da je $\varepsilon^c_{\mathbf{k}} = \hbar\omega/2$ i $\varepsilon^v_{\mathbf{k}} = -\hbar\omega/2$. Uvrstivši te vrijednosti za valentne vrpce u pripadne

Fermi-Diracove raspodjele možemo pokazati da je

$$\mathscr{F}(\hbar\omega) = f^v_{\mathbf{k}} - f^c_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta(-\hbar\omega/2-\mu)}+1} - \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega/2-\mu)}+1} = \frac{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}{\cosh(\beta\mu)+\cosh(\beta\hbar\omega/2)}, \tag{4.2.4}$$

gdje je μ elektronski kemijski potencijal. Izraz (4.2.4) općenito vodi računa o zaposjednutosti elektronskih stanja i restrikciji međuvrpčanih pobuđenja zbog Paulijeva principa isključenja. Upravo zato izraz (4.2.4) nazivat ćemo Paulijevim elementom u optičkoj vodljivosti. Svojstva Paulijeva elementa najbolje možemo prikazati u aproksimaciji niskih temperatura $T \approx 0$. Tada je $\mu = \varepsilon_F$ te se izraz (4.2.4) reducira na

$$\mathscr{F}(\hbar\omega) = \Theta(\hbar\omega - 2\varepsilon_F), \tag{4.2.5}$$

gdje je $\Theta(x)$ Heavisideova funkcija. Ukoliko je, primjerice, uz punu vrpcu v, vrpca c popunjena do energije ε_F, zbog simetrije vrpci potrebno je prijeći prag energije upadnog elektromagnetskog zračenja od $\hbar\omega = 2\varepsilon_F$ kako bi se elektron iz zaposjednutog stanja u vrpci v nakon što je apsorbirao foton energije $\hbar\omega$ mogao pobuditi u prazno stanje u vrpci c, kao što je i prikazano na Slici 4.1.

Zaključno, realni dio međuvrpčane vodljivosti postaje

$$\Re\sigma_\alpha(\omega) = \frac{\mathscr{F}(\hbar\omega)}{\hbar\omega}\frac{2\pi\hbar}{V}\sum_{\mathbf{k}} |J^{cv}_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \delta(\hbar\omega - 2\varepsilon^c_{\mathbf{k}}). \tag{4.2.6}$$

To je izraz pomoću koji ćemo izračunati optički odziv materijala u ovom radu. Međuvrpčani strujni elementi $|J^{cv}_{\alpha\mathbf{k}}|^2$ definirani su pomoću hamiltonijana konkretnog fizikalnog sustava te se njihov opći zapis, kao i za konkretni model, u ovom radu nalazi u Dodatku A.

Poglavlje 5

Elektronski hamiltonijan

U ovom poglavlju definiramo efektivni hamiltonijan, svojstvene vrijednosti hamiltonijana, odnosno, elektronske disperzije (vrpce) te njihovu pripadnu gustoću energetskih stanja. Pokazat ćemo da je moguće pomoću tako definirane 2×2 matrice hamiltonijana opisati fazu čvorne petlje i fazu s procijepom.

5.1 Dvovrpčani hamiltonijan

Polazimo od definicije 2×2 matrice hamiltonijana koju ćemo zapisati pomoću Paulijevih matrica. Taj opći oblik matrice hamiltonijana bit će dovoljna za opis faze čvorne petlje i faze s procijepom [7]. U kratkom zapisu, tako definirani hamiltonijan je

$$\hat{H} = (A - Bk^2)\sigma_z + C\sigma_x \tag{5.1.1}$$

gdje su σ_x i σ_z Paulijeve matrice

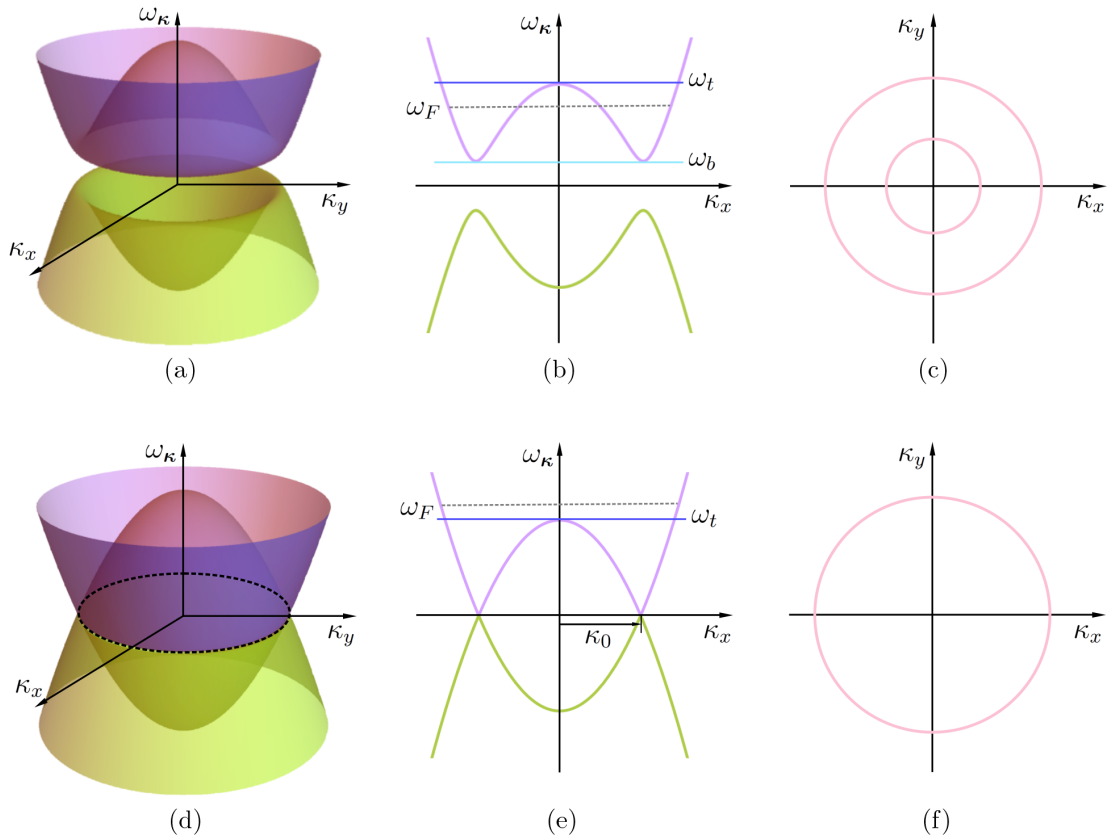
$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.1.2}$$

a mjerne jedinice pozitivnih konstanti su: $[A] = \mathrm{J}$, $[C] = \mathrm{J}$ i $[B] = \mathrm{Jm}^2$. Upravo je član $A - Bk^2$ dio koji će opisivati ispupčenost vrpce, odnosno, dat će joj upečatljiv izgled meksičkog šešira. U (5.1.1) $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ kvadrat je ukupnog Blochova valnog vektora, a parametar B možemo zapisati koristeći efektivnu masu elektrona m^* kao $B = \hbar^2/2m^*$.

Izravnom dijagonalizacijom hamiltonijana (5.1.1) dobivamo svojstvene energije, odnosno, elektronske vrpce

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{c,v} = \pm\sqrt{(A - Bk^2)^2 + C^2}. \tag{5.1.3}$$

Indeks c označava vodljivu vrpcu (plus predznak), a v valentnu vrpcu (minus predznak). Pokazat će se izuzetno korisno skalirati svojstvene vrijednosti (5.1.3) parametrom A i



Slika 5.1: (a) i (d) Valentna (zelena) i vodljiva (ljubičasta) vrpca faze s procijepom $\Delta > 0$ i faze čvorne petlje $\Delta = 0$. (b) i (e) $\kappa_y = 0$ presjek valentnih vrpci obiju faza s prikazom položaja karakterističnih energija ω_b i ω_t. S κ_0 označen je radijus čvora u čvornoj fazi, a s crtkanim linijama položaj Fermijeve energije ω_F. (c) i (f) Fermijeva površina za vrijednosti Fermijeve energije prikazane na slikama (b) i (e).

uvesti bezdimenzionalne veličine poput parametra $\Delta = C/A$ i varijable $\kappa^2 = k^2 B/A$. Tada su elektronske disperzije (5.1.3) u bezdimenzionalnoj formi

$$\omega_{\boldsymbol{\kappa}}^{c,v} = \pm\sqrt{(1-\kappa^2)^2 + \Delta^2}, \tag{5.1.4}$$

gdje je $\omega_{\boldsymbol{\kappa}}^{c,v} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{c,v}/A$.

Disperzije (5.1.4) prikazane su na Slici 5.1 u ovisnosti o parametru Δ kao funkcije $\boldsymbol{\kappa}$. Uočavamo da su c (ljubičasto) i v (zeleno) vrpca zrcalno simetrične u odnosu na ravninu koja ih dijeli. Takav tip simetrije nazivamo elektron-šipljina simetrijom. Izgledom pak, kao što vidimo na primjeru vrpce c, podsjećaju na meksički šešir, posebice u fazi s procijepom koja je definirana kada je parametar $\Delta > 0$. Tada su valentne vrpce odvojene energetskim procijepom od 2Δ (Slika 5.1(a)). Fazu u kojoj je parametar $\Delta = 0$ nazivamo fazom čvorne petlje i kako je vidljivo na Slici 5.1(d), vrpce se dodiruju po petlji (kružnici). Radijus te kružnice lako se može odrediti iz (5.1.4) uvrsti li se $\omega_{\boldsymbol{\kappa}_0} = \sqrt{(1-\kappa_0^2)^2} = 0$, slijedi da je $\kappa_0 = 1$. U fazi s procijepom, na položaju κ_0, nalazi

se minimum (maksimum) vodljive (valentne) vrpce (Slika 5.1(b)).

Za daljnu analizu definirat ćemo dvije ključne vrijednosti, ω_b i ω_t pomoću parametra Δ. To su

$$\omega_b = \Delta, \quad \omega_t = \sqrt{1+\Delta^2} \tag{5.1.5}$$

Energiju, koja pripada dnu vrpce, nazivamo ω_b. Kao što smo vidjeli u fazi s procijepom, ona ima konačnu vrijednost, dok u fazi čvorne petlje, $\omega_b = 0$ (Slika 5.1(e)). Energija ω_t pak odgovara vrhu centralnog invertiranog dijela vrpce (Slika 5.1(b)). Iz (5.1.5) za vrpcu c primjerice, slijedi $\omega_t = \omega^c_{\boldsymbol{\kappa}=0}$. U fazi čvorne petlje očito je $\omega_t = 1$.

Ukoliko je vrijednost Fermijeve energije $\omega_F = \varepsilon_F/A$ unutar granica $\omega_b < \omega_F < \omega_t$, tada Fermijevu površinu čine dvije koncentrične kružnice (Slika 5.1(c)), a ako je $\omega_F > \omega_t$, Fermijeva površina sastoji se od jedne kružnice (Slika 5.1(f)).

Analizu nastavljamo računom gustoće energetskih stanja elektrona za obje faze.

5.2 Gustoća energetskih stanja

Ovdje izvodimo gustoću energetskih stanja elektrona (često se koristi naziv DOS, eng. *density of states*) po jedinici volumena za disperziju (5.1.3) opisanu u potpoglavlju 5.1. Pritom koristimo pravilo za dekompoziciju Diracove δ-funkcije koja za argument ima neku drugu funkciju g na način:

$$\delta(g(x)) = \sum_{x_0} \frac{\delta(x-x_0)}{\left|\frac{\partial g(x)}{\partial x}\Big|_{x_0}\right|}, \quad g(x_0) = 0. \tag{5.2.1}$$

Jedna od posljedica gornje relacije je $\delta(ag(x)) = \delta(g(x))/|a|$, gdje je a neka konstanta. Prema definiciji [8] gustoća je elektronskih stanja po jedinici volumena funkcija koja ovisi o energiji ε, a izračunava se direktno iz vrpce općeg oblika $\varepsilon_{\mathbf{k}}$

$$N(\varepsilon) = \frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \tag{5.2.2}$$

Zbog elektron-šupljinske simetrije vrpci (5.1.3), dovoljno je izvrijedniti gustoću elektronskih stanja za vrpcu c. Promjenom sume u (5.2.2) u integral slijedi

$$N(\varepsilon) = \frac{V}{(2\pi)^2} 2\frac{1}{V}\int k dk 2\pi \frac{1}{A}\,\delta\left(\frac{\varepsilon}{A} - \sqrt{\left(1-\frac{B}{A}k^2\right)^2 + \frac{C^2}{A^2}}\right), \tag{5.2.3}$$

što se znatno pojednostavljuje uvođenjem bezdimenzionalnih veličina definiranih u prethodnom potglavlju

$$N(\omega) = \frac{2}{(2\pi)^2} 2\pi \frac{1}{A}\frac{A}{B}\int \kappa d\kappa\, \delta\left(\omega - \sqrt{(1-\kappa^2)^2 + \Delta^2}\right). \tag{5.2.4}$$

Koristeći pravilo (5.2.1) dobivamo

$$N(\omega) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{B}\int \kappa d\kappa \sum_{\kappa_0} \frac{\delta\left(\kappa - \kappa_0\right)}{\left|\dfrac{2\left(1-\kappa_0^2\right)2\kappa_0}{2\sqrt{\left(1-\kappa_0^2\right)^2+\Delta^2}}\right|}, \tag{5.2.5}$$

što se nakon skraćivanja razlomka svede se na

$$N\left(\omega\right) = \frac{\omega}{2\pi B}\sum_{\kappa_0}\frac{\kappa_0}{\left|\kappa_0\left(1-\kappa_0^2\right)\right|}. \tag{5.2.6}$$

U (5.2.6) κ_0 su svi pozitivni korijeni argumenta δ-funkcije iz (5.2.5).

$$\kappa_0^{\pm} = \sqrt{1 \pm \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}. \tag{5.2.7}$$

Želimo li da su κ_0 realni korijeni, podkorijenska funkcija u izrazu (5.2.7) mora biti pozitivna. To ovisi o vrijednosti ω. Lako je provjeriti da, ako je $\Delta < \omega < \omega_t$, tada su oba κ_0^+ i κ_0^- realni te ih možemo koristiti u sumi (5.2.6) budući da je za te vrijednosti ω podkorijenska fukcija uvijek pozitivna. S druge strane, za $\omega > \omega_t$, jedino je κ_0^+ realan.

Koji κ_0 koristiti i u kojem dozvoljenom intervalu vrijednosti ω za općenit oblik $\sum_{\kappa_0} f(\kappa_0)$, gdje je f neka funkcija od κ_0, možemo zapisati pomoću postupka koji se sastoji od Heavisideove funkcije $\Theta(x)$ za koju vrijedi

$$\Theta(x-a) = \begin{cases} 1, & x > a \\ 0, & x < a \end{cases} \tag{5.2.8}$$

gdje je a pozitivna konstanta. Također, spomenimo i još jedno svojstvo koje proizlazi iz (5.2.8), a to je

$$\Theta(x-y) = 1 - \Theta(y-x). \tag{5.2.9}$$

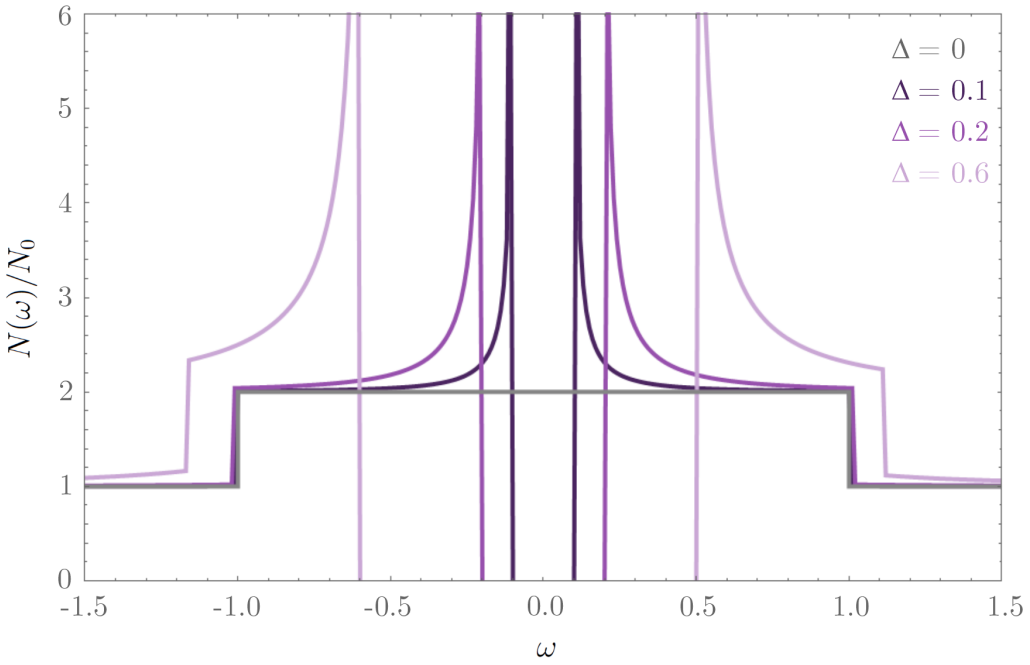
Koristeći svojstva Heavisideove funkcije (5.2.8) i (5.2.9), $\sum_{\kappa_0} f(\kappa_0)$ zapisujemo kao

$$\sum_{\kappa_0} f(\kappa_0) = \Theta(\omega-\omega_b)\,\Theta(\omega_t-\omega)[f(\kappa_0^+) + f(\kappa_0^-)] + \Theta(\omega-\omega_t)f(\kappa_0^+), \tag{5.2.10}$$

gdje smo uveli veličine (5.1.5). Primijenimo li (5.2.10) na (5.2.6), dobivamo

$$N\left(\omega\right) = \frac{1}{2\pi B}\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2-\omega_b^2}}\left\{2\Theta\left(\omega-\omega_b\right)\left(\omega_t-\omega\right) + \Theta\left(\omega-\omega_t\right)\right\}. \tag{5.2.11}$$

Prisjetimo se da je gornji izraz gustoće stanja dobiven za vrpcu c te, ukoliko želimo u istome izrazu uključiti i gustoću stanja v vrpce, tada konačni oblik gustoće stanja



Slika 5.2: Gustoća stanja 2D sustava opisanog relacijom (5.1.3) kao funkcija ω za različite parametre procijepa Δ. Za fazu čvorne petlje ($\Delta = 0$), gustoća stanja ima *step* oblik (siva linija), dok se za fazu s procijepom ($\Delta > 0$) pojavljuju divergencije pri $\omega_b = \Delta$.

postaje, uz konstantu dimenzionalnosti $N_0 = 1/2\pi B$,

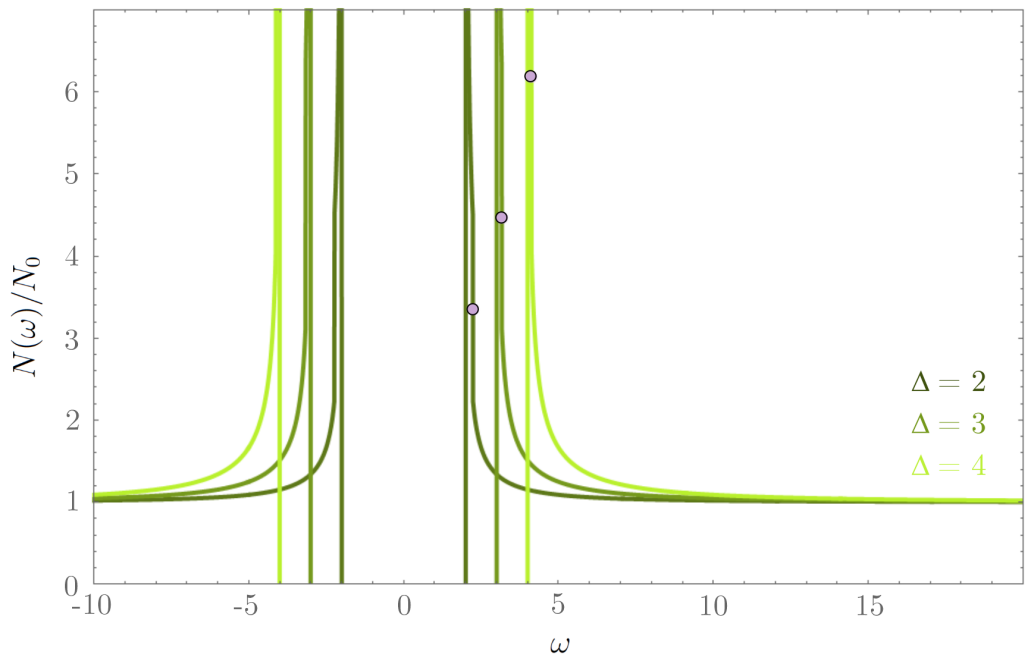
$$N(\omega) = N_0 \frac{|\omega|}{\sqrt{\omega^2 - \omega_b^2}} \Theta(|\omega| - \omega_b)\,[1 + \Theta(\omega_t - |\omega|)]. \tag{5.2.12}$$

5.2.1 Gustoća energetskih stanja u fazi čvorne petlje

Gustoća stanja (5.2.12) prikazana je na Slici 5.2 i 5.3 za različite vrijednosti parametra Δ u jedinicama $N_0 = 1/2\pi B$. Promotrimo najprije gustoću stanja faze čvorne petlje definiranu s $\omega_b = \Delta = 0$ kao funkciju energije ω, koja, kako je vidljivo na Slici5.2, ima izgled stepenice. Unutar intervala $\omega \in (-1, 1)$ gustoća je stanja $N(\omega) = 2N_0$, a za vrijednosti ω izvan navedenog intervala $N(\omega) = N_0$. Takvu vrijednost gustoće stanja faze čvorne petlje lako možemo objasniti preko gustoće stanja slobodnih dvodimenzionalnih elektrona čija je gustoća stanja također jednaka konstanti. Kako unutar intervala $\omega \in (-1, 1)$ efektivno imamo dvije parabole, a izvan toga intervala efektivno jednu (Slika 5.1(e)), jasno je da je i gustoća stanja faze čvorne petlje dvostruko veća untar navedenog inetrvala u odnosu na gustoću stanja izvan toga intervala.

5.2.2 Gustoća energetskih stanja faze s procijepom

Analizirajmo sada gustoću stanja faze s procijepom koja je prikazana na Slikama 5.2 i 5.3 za nekoliko vrijednosti parametra Δ. Najupečatljivije je svojstvo divergencija gustoće stanja na energiji dna vrpce $\omega = \omega_b$, isto kao i diskontinuitet u gustoći stanja



Slika 5.3: Gustoća stanja 2D sustava opisanog relacijom (5.1.3) kao funkcija ω za različite parametre procijepa Δ. Ljubičasti kružići označavaju $N(\omega_t)$ gdje se nalazi diskontinuitet. Za $\omega \gg \Delta$ gustoća stanja je konstantna.

za energije $\omega = \omega_t$. Kako bismo pobliže istražili prirodu divrgencije, razvijmo izraz (5.2.11) za $\omega \gtrapprox \omega_b$. Slijedi

$$N(\omega) \approx N_0 \sqrt{\frac{2\omega_b}{\omega - \omega_b}}. \tag{5.2.13}$$

Divergencija je, dakle, korijenskog tipa i karakteristična je za sustave s procijepom s vrpcama u obliku meksičkog šešira u dvije i tri dimenzije [7, 6]. U slučaju visokih energija, kada je $\omega \gg \omega_t$, gustoća stanja je konstantna

$$N(\omega) \approx N_0, \tag{5.2.14}$$

kako i vidimo na Slici 5.3. Na istoj Slici 5.3 ljubičastim je kružićima prikazana vrijednost $N(\omega_t)$ koja se nalazi na polovici diskontinuiteta u gustoći stanja kako se Δ povećava.

Poglavlje 6

Unutarvrpčana vodljivost

U ovom poglavlju pretpostavljamo da je vodljiva vrpca djelomično popunjena elektronima te da je broj elektrona u vrpci, odnosno Fermijeva energija, parametar koji možemo mijenjati bilo kemijskim ili elektrostatskim dopiranjem. U takvim okolnostima određujemo kako ukupna i efektivna koncentracija elektrona ovise o Fermijevoj energiji. Pokazat ćemo da se spomenute koncentracije uvelike razlikuju te njihove implikacije na Drudeovu (unutavrvrpčanu) vodljivost.

6.1 Ukupna koncentracija

U ovom potpoglavlju računamo ukupnu koncentraciju vodljivih elektrona n za obje elektronske faze. Tek na kraju računa pokazat ćemo glavne karakteristike dviju već spomenutih faza. Ukupna se koncentracija nosioca naboja, n, može izravno izračunati iz gustoće stanja (5.2.12) te postaje funkcija Fermijeve energije ω_F

$$n(\omega_F) = A \int_0^{\omega_F} N(\omega) d\omega. \tag{6.1.1}$$

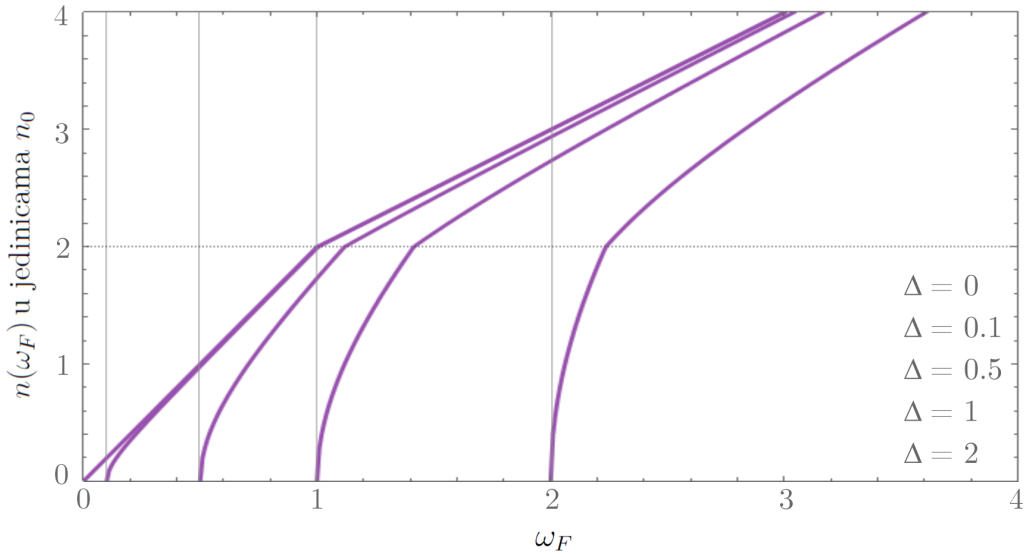
Kako je gustoća stanja (5.2.12) razlomljena funkcija, koja ima drukčije ponašanje na intervalima omeđenim s ω_b i ω_t, $n(\omega_F)$ bit će definirana po segmentima na način:

Za $\omega_F < \omega_b$:

$$n(\omega_F) = A \int_{\omega_b}^{\omega_F} \frac{1}{2\pi B} - 2\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \omega_b^2}} = \frac{A}{2\pi B} 2\sqrt{\omega^2 - \omega_b^2}\Big|_{\omega_b}^{\omega_F} = 2\frac{A}{2\pi B}\sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2}, \tag{6.1.2}$$

a za $\omega_F > \omega_t$:

$$\begin{aligned} n(\omega_F) &= A \int_{\omega_b}^{\omega_t} \frac{2\omega d\omega}{2\pi B\sqrt{\omega^2 - \omega_b^2}} + A \int_{\omega_t}^{\omega_F} \frac{1}{2\pi B} \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \omega_b^2}} d\omega \\ &= 2\frac{A}{2\pi B}\left(\sqrt{\omega_t^2 - \omega_b^2}\right) + \frac{A}{2\pi B}\left(\sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2} - \sqrt{\omega_t^2 - \omega_b^2}\right) = \frac{A}{2\pi B}\left(\sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2} + 1\right). \end{aligned} \tag{6.1.3}$$



Slika 6.1: Ukupna koncentracija, n, izraz (6.1.5) kao funkcija Fermijeve energije ω_F, u jedinicama n_0 za slučaj $m_e = m^*$. Spomenuti je izraz prikazan za nekoliko vrijednosti $\omega_b = \Delta$ čije su pozicije označene sivim vertikalnim linijama. Ukupna koncentracija ima diskontinuitet prve derivacije u ω_t. Točkastom linijom označena ukupna koncentracija $n(\omega_t) = 2n_0$.

Korisno je uvesti konstantu koncentracije $n_0 = A/(2\pi B)$ dimenzije $[n_0]$ =m^{-2}, a ukupnu koncentraciju $n(\omega_F)$ zapisat ćemo pomoću Heavisidove funkcije (5.2.8)

$$n(\omega_F) = n_0\Theta\left(\omega_F - \omega_b\right)\left(2\sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2}\,\Theta\left(\omega_t - \omega_F\right) + \left(1 + \sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2}\right)\Theta\left(\omega_F - \omega_t\right)\right), \tag{6.1.4}$$

ili na još kompaktniji način koristeći svojstvo (5.2.9)

$$n(\omega_F) = n_0\,\Theta(\omega_F - \omega_b)\left(1 + \sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2} - \left(1 - \sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2}\right)\Theta\left(\omega_t - \omega_F\right)\right). \tag{6.1.5}$$

Ukupna je koncentracija u ovisnosti o ω_F grafički prikazana na Slici 6.1 za nekoliko vrijednosti parametra Δ, odnosno, ω_b čiji su položaji označeni sivim okomitim linijama. Ono što odmah uočavamo je, neovisno radi li se o fazi s procijepom ili fazi čvorne petlje, $n(\omega_F = \omega_t)$ ima diskontinuitet u prvoj derivaciji. Također, koncentracija elektrona potrebna da se vrpca popuni do energije $\omega_F = \omega_t$, a prisjetimo se da je ω_t energija koja pripada vrhu ispupčenog centralnog dijela vrpce, ista je za obje faze i iznosi $n(\omega_F = \omega_t) = 2n_0$, što je označeno točkastom sivom linijom na Slici 6.1. Izraz (6.1.5) ima još nekoliko zanimljivih karakteristika koje najbolje možemo prikazati u odgovarajućim graničnim vrijednostima Fermijeve energije ω_F

$$\begin{aligned} n(\omega_F < \omega_t) &= 2n_0\omega_F, \quad \omega_b = 0, \\ n(\omega_F > \omega_t) &= n_0\omega_F, \quad \omega_b = 0, \\ n(\omega_F) &\approx 2n_0\sqrt{2\omega_b(\omega_F - \omega_b)}, \quad \omega_F \gtrapprox \omega_b, \\ n(\omega_F) &\approx n_0\omega_F, \quad \omega_F \gg \omega_b. \end{aligned} \tag{6.1.6}$$

U fazi čvorne petlje, $n \propto \omega_F$ ispod i iznad $\omega_F = 1$, no s drukčijim nagibom pravca. U fazi s procijepom ukupna koncentracija tik iznad ω_b korijenski ovisi o Fermijevoj energiji, dok se za velike vrijednosti ω_F asimptotski približava vrijednosti faze čvorne petlje.

6.2 Efektivna koncentracija

Koncentracija elektrona koja se prirodno pojavljuje unutar Drudeove formule za vodljivost (4.1.2) efektivna je koncentracija elektrona $n_\alpha(\omega_F)$. Efektivna će koncentracija, kao i ukupna koncentracija n, ovisiti o Fermijevoj energiji ω_F. U ovom potpogljavlju izvodimo $n_\alpha(\omega_F)$ za temperaturu $T = 0$. U tom slučaju, kao što smo spomenuli u (4.1.3), efektivna koncentracija dana je izrazom [16]

$$n_\alpha(\varepsilon_F) = \frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}} m_e v_{\alpha\mathbf{k}}^2 \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \tag{6.2.1}$$

gdje je α, kako smo spomenuli, komponenta efektivne koncentacije koja je povezana s odgovarajućom komponentom narinutog električnog polja. Kako su vrpce (5.1.3) izotropne, možemo uzeti na primjer $\alpha = x$ iako i $\alpha = y$ slučaj daje isti rezultat. Opet gledamo slučaj vodljive vrpce (5.1.3). Tada je grupna brzina elektrona

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{2Bk_x \cdot (A - Bk^2)}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}. \tag{6.2.2}$$

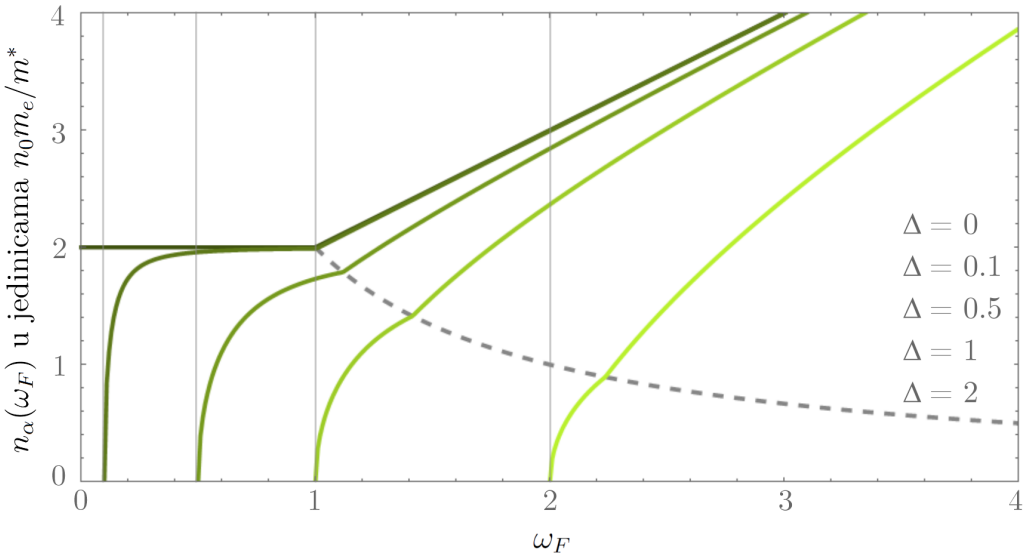
Uvrstimo li gornju relaciju u (6.2.1) te sa sumacije prijeđemo na integral, slijedi

$$n_\alpha = \frac{1}{V}\frac{2V}{(2\pi)^2}\frac{4B^2 m_e}{\hbar^2}\int k dk d\varphi \frac{k^2\cos^2\varphi\,(A - Bk^2)^2}{\varepsilon^2}\delta\left(\varepsilon - \varepsilon_k\right). \tag{6.2.3}$$

Ukoliko varijable integracije u gornjm izrazu zamijenimo onima bezdimenzionalnim κ i ω, dobivamo

$$\begin{aligned} n_\alpha\left(\omega_F\right) &= \frac{2}{(2\pi)^2}\frac{4B^2}{\hbar^2}m_e\frac{A^2}{B^2}\frac{\pi}{A}\int \kappa\, d\kappa\, \kappa^2 \frac{A^2\left(1-\kappa^2\right)^2}{A^2\omega_F^2}\delta\left(\omega_F - \sqrt{\left(1-\kappa^2\right)^2 + \Delta^2}\right) \\ &= \frac{4}{2\pi}\frac{m_e}{\hbar^2}A\frac{1}{\omega_F^2}\frac{\omega_F}{2}\sum_{\kappa_0}\frac{\kappa_0^3\left(1-\kappa_0^2\right)^2}{\left|\kappa_0\left(1-\kappa_0^2\right)\right|}, \end{aligned} \tag{6.2.4}$$

gdje smo izvrijednili integral koji sadrži Diracovu δ-funkciju po postupku iz poglavlja 5.1 te koristili definiciju efektivne mase m^* s početka Poglavlja 5. Uvrstivši nultočke



Slika 6.2: Efektivna koncentracija, n_α, izraz (6.2.6) kao funkcija Fermijeve energije ω_F, u jedinicama $n_0 m_e/m^*$. Spomenuti je izraz prikazan za nekoliko vrijednosti $\omega_b = \Delta$ čije su pozicije označene sivim vertikalnim linijama. Efektivna koncentracija ima diskontinuitet prve derivacije u ω_t. Siva crtkana linija označava vrijednost efektivne koncentracije $n_\alpha(\omega_t)$.

κ_0 (5.2.7) u gornji izraz slijedi

$$n_\alpha(\omega_F) = n_0 \frac{m_e}{m^*} \frac{\sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2}}{\omega_F} \left(2\,\Theta(\omega_F - \omega_b)\,\Theta(\omega_t - \omega_F) + \left(1 + \sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2}\right) \Theta(\omega_F - \omega_t) \right). \tag{6.2.5}$$

Kao i u potpoglavlju 5.1, možemo koristiti svojstvo Heavisideove $\Theta(x)$ funkcije (5.2.8) i konačni izraz zapisati na sljedeći način

$$n_\alpha(\omega_F) = n_0 \frac{m_e}{m^*} \frac{\sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2}}{\omega_F} \Theta(\omega_F - \omega_b) \left(1 + \sqrt{\omega_F^2 - \omega_b^2} + \left(1 - \sqrt{\omega^2 - \omega_b^2}\right) \Theta(\omega_t - \omega_F) \right). \tag{6.2.6}$$

Efektivna koncentracija $n_\alpha(\omega_F)$ prikazana je na Slici 6.2 kao funkcija Fermijeve energije za nekoliko vrijednosti parametra Δ odnosno ω_b u jedinicama $n_0 m_e/m^*$. Primjećujemo da kao i n, tako i n_α ima dikontinuitet u prvoj derivaciji za Fermijeve energije koje odgovaraju $\omega_F = \omega_t$. Vrijednost efektivne koncentracije tim točkama je $n_\alpha(\omega_F = \omega_t) = (1/\omega_t) 2 n_0 m_e/m^*$ kako je i prikazano crtkanom linijom što uvelike odstupa od ponašanja ukupne koncentracije koja uvijek ima istu vrijednost u tim točkama $n = 2n_0$ neovisno o parametru Δ.

U slučaju faze čvorne petlje ($\Delta = 0$) efektivna koncentracija je konstantna za vrijednosti $\omega_F < \omega_t$, dok za fazu s procijepom, za Fermijevu energiju odmah iznad ω_b, efektivna koncentracija ima korijensku ovisnost o ω_F. Sve to možemo potkrijepiti na

primjeru nekolicine zanimljivih limesa efektivne koncentracije (6.2.6):

$$\begin{aligned} n_\alpha(\omega_F < \omega_t) &= 2n_0 \frac{m_e}{m^*}, \quad \omega_b = 0, \\ n_\alpha(\omega_F) &\approx 2n_0 \frac{m_e}{m^*} \sqrt{2(\omega_F - \omega_b)/\omega_b}, \quad \omega_F \gtrapprox \omega_b, \\ n_\alpha(\omega_F) &\approx n_0 \frac{m_e}{m^*} \omega_F, \quad \omega_F \gg \omega_b. \end{aligned} \tag{6.2.7}$$

U limesu velikih ω_F vrijednost efektivne koncentracije u fazi s procijepom asimptotski se približava vrijednosti faze čvorne petlje (Slika 6.2). Općenito, usporedimo li vrijednosti za ukupnu i efektivnu koncentraciju za velike ω_F (6.1.5) i (6.2.6) slijedi

$$\frac{n_\alpha}{m_e} = \frac{n}{m^*}. \tag{6.2.8}$$

Preostaje povezati n_α i n na još jedan način. To ćemo pokazati u potpoglavlju 6.3.

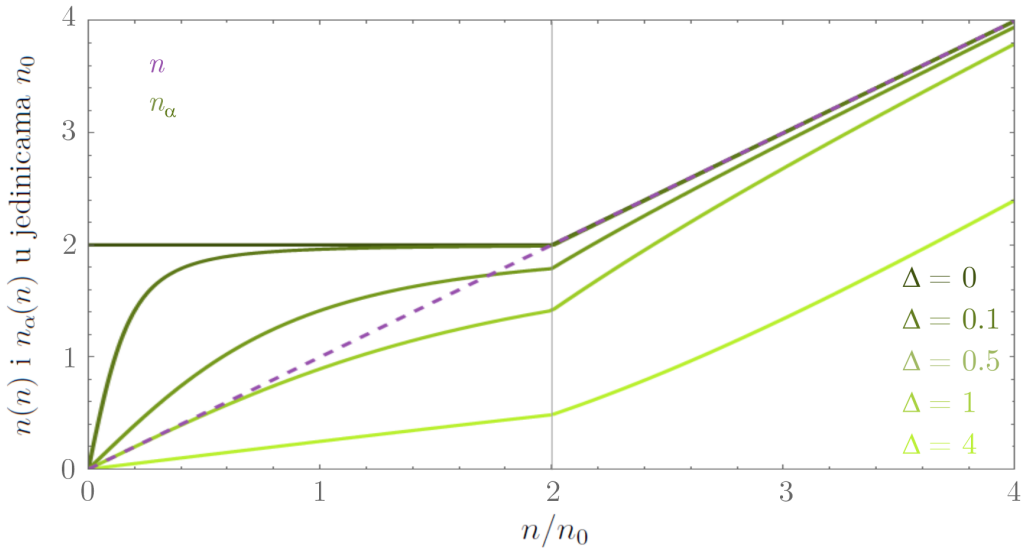
6.3 Veza između ukupne i efektivne koncentracije

Razliku između efektivne i ukupne koncentracije elektrona možemo prikazati na još jedan način, preko ukupne koncentracije n. Često se u fizici kondenzirane materije može kontrolirati ukupna koncentracija vodljivih elektrona n, a ne, kako smo do sada pretpostavljali, Fermijeva energija ω_F. Za dvodimenzionalne sustave, kao što je i ovaj kojeg razmatramo u ovom radu, najednostavniji način kako možemo kontrolirati n je primjenom efekta električnog polja. U biti, od 2D materijala i podloge napravimo kondenzator na koji narinemo razliku potencijala. Kao što znamo, količna naboja koja se tada nakupi u 2D materijalu proporcionalna je kapacitetu, konstanti koja ovisi o geometriji uzorka, pomnoženog s razlikom potencijala.

Ovdje nam je cilj izraziti n_α pomoću n. Da bismo odredili kako n_α ovisi o n, potrebno je prvo izraziti Fermijevu energiju ω_F kao funkciju ukupne koncentracije n iz izraza (6.1.4), a potom $\omega_F(n)$ uvrstiti u izraz za efektivnu koncentraciju (6.2.6). Pritom, vodimo računa da je $n(\omega_F = \omega_b) = 0$ te $n(\omega_F = \omega_t) = 2n_0$. Rezultat je

$$n_\alpha(n) = \frac{m_e}{m^*} \left[\frac{n}{\sqrt{[n/(2n_0)]^2 + \omega_b^2}} \Theta(2n_0 - n) + \frac{n(n/n_0 - 1)}{\sqrt{(n/n_0 - 1)^2 + \omega_b^2}} \Theta(n - 2n_0) \right]. \tag{6.3.1}$$

Ovisnost je ukupne i efektivne koncentracije o n prikazana na Slici 6.3. Jasno je da je $n(n)$ pravac nagiba 1 prikazan kao crtkana linija na Slici 6.3 neovisno o elektroskoj fazi. Mjereći primjerice istosmjernu vodljivost (4.1.6) $\sigma^{DC} \propto n_\alpha(n)$, kao funkciju ukupne koncentracije n, jasno možemo razlučiti radi li se o fazi s procijepom ili fazi čvorne linije. Za koncentracije manje od $2n_0$, istosmjerna vodljivost neće se mijenjati povećanjem n u fazi čvorne petlje, dok će u fazi s procijepom ovisiti o n. Također, za posebni slučaj



Slika 6.3: Ukupna koncentracija označena je ljubičastom crtkanom linijom, a efektivna koncentracija (6.3.1) kao funkcija n u jedinicama n_0, za slučaj $m_e = m*$ zelenom bojom. Obje su koncentracije prikazane za nekoliko vrijednosti $\omega_b = \Delta$. Za razliku od n, efektivna je koncentracija, n_α, eksplicite ovisna o ω_b. Vertikalna siva linija označava $2n_0$ što je upravo koncentracija potrebna za popunjenje sustava do vrha meksičkog šeširа (Slika 5.1).

kada je $m_e = m^*$, $n > n_\alpha(n)$ za $n > 2n_0$, dok za $n < 2n_0$ to nije slučaj. Postoji kritična vrijednost parametra $\Delta > 1$ kad uvijek vrijedi da je $n_\alpha < n$ kao što vidimo na Slici 6.3.

Poglavlje 7

Optička vodljivost

U ovom poglavlju analiziramo realni dio međuvrpčane odnosno optičke vodljivosti dvodimenzionalnog sustava čija smo elektronska svojstva opisali u Poglavlju 5. Pokazat ćemo da je u modelu iz Poglavlja 5 vrlo jednostavno na temelju optičke vodljivosti odrediti radi li se o sustavu faze s procijepom ili faze čvorne petlje, jer optička vodljivost u fazi čvorne petlje iščezava. Optička vodljivost faze s procijepom bit će izračunata koristeći izraze iz Poglavlja 4 za slučaj konačne popunjenosti vodljive vrpce, kao i za slučaj konačnih temperatura.

7.1 Strujni matrični elementi

U Poglavlju 4 spomenuli smo (4.2.6) da je jedan od sastavnih elemenata izraza za realni dio međuvrpčane vodljivosti funkcija koju smo nazvali međuvrpčani strujni matrični element $J^{cv}_{\alpha\mathbf{k}}$. U atomskoj fizici, pri razmatranju interakcije atoma i elektromagnetskog zračenja energije $\mathscr{E} = \hbar\omega$, elektronski su prijelazi između atomskih nivoa bili određeni dipolnim matričnim elementom. Taj je element, između ostalog, govorio koji je prijelaz dozvoljen (ovisno o tome je li dipolni matrični element bio nula ili konačan) [14, 18]. Sličnu ulogu u optičkoj vodljivosti kristala (4.2.6) imaju strujni matrični elementi uz adekvatnu zamjenu diskretnih energija atomskih nivoa s elektronskim vrpcama. U modelu opisanim u Poglavlju 5, međuvrpčani je strujni matrični element izveden u Dodatku A i iznosi

$$J^{cv}_{x\mathbf{k}} = \frac{e}{\hbar}\frac{2Bk_xC}{|\varepsilon_{\mathbf{k}}|}. \tag{7.1.1}$$

Vidimo da je (7.1.1) realna veličina proporcionalna parametru procijepa ($\Delta = C/A$) i obrnuto proporcionalna elektronskoj energiji (5.1.3). U slučaju kad je $\Delta = 0$, što definira fazu čvorne petlje, slijedi i da je matrični element (7.1.1) jednak nuli. Sve to implicira da u modelu iz Poglavlja 5, u fazi čvorne petlje, nema mađuvrpčane vodljivosti. Preostaje nam razmatranje optičke vodljivosti faze s procijepom.

7.2 Optička vodljivost faze s procijepom

Polazište je izraz (4.2.6) u koji smo uvrstili strujni matrični element (7.1.1) te prešli sa sume na integral u polarnim koordinatama. Slično kao u računu efektivne koncentracije, uzimamo da je komponenta $\alpha = x$ iako je rezultat isti i za y komponentu. U cijelosti, realni dio međuvrpčane vodljivosti je

$$\Re\sigma\left(\mathscr{E}\right) = \frac{\hbar\pi}{V}\frac{\mathscr{F}\left(\mathscr{E}\right)}{\mathscr{E}}\frac{2V}{\left(2\pi\right)^2}\int kdkd\varphi\frac{e^2}{\hbar^2}\frac{4B^2C^2k^2\cos^2\varphi}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}\delta\left(\mathscr{E} - 2\sqrt{\left(A - Bk^2\right)^2 + C^2}\right). \tag{7.2.1}$$

No, s ovakvim tipom integrala susreli smo se već u Poglavljima 5 i 6. Postupak je izvrijednjivanja isti. Uvodimo standardnu bezdimenzionalnu varijablu κ te novu varijablu $\Omega = \mathscr{E}/2A$, koja je zapravo energija upadnog fotona (elektromagnetskog zračenja) skalirana parametrom vrpce $2A$. Ovakvim izborom, varijabla Ω također je bezdimenzionalna, a kako iz δ-funkcije u (5.2.1) proizlazi da je gornji izraz konačan samo ako je $\mathscr{E} = 2\varepsilon_{\mathbf{k}}$, usporedbom (5.1.4) slijedi $\Omega \equiv \omega$. To sugerira da će pri izvrjednjavanju izraza (7.2.1) opet važnu ulogu imati konstante ω_b i ω_t (5.1.5), koje za potrebe razmatranja međuvrpčane vodljivosti preimenujemo u Ω_b i Ω_t. Uz takve zamjene (7.2.1) postaje

$$\Re\sigma(\Omega) = \frac{\hbar\pi\mathscr{F}\left(\mathscr{E}\right)}{\left(2\pi\right)^2}\frac{2\pi}{(2A\Omega)}\frac{4B^2C^2e^2}{\hbar^2}\frac{1}{2A}\frac{A^2}{B^2}\frac{1}{A^2\Omega^2}\int \kappa^3 d\kappa\, \delta\left(\Omega - \sqrt{\left(1-\kappa^2\right)^2 + \Delta^2}\right). \tag{7.2.2}$$

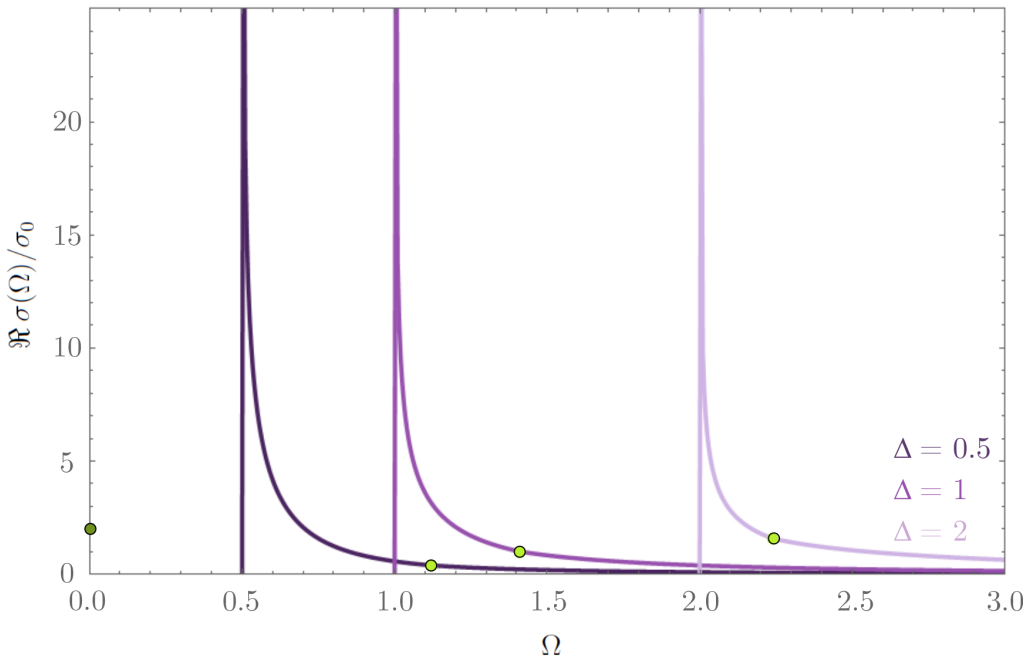
Potonji izraz izvrjednjujemo metodom dekompozicije δ-funkcije opisanom u Poglavlju 5 uz zamjenu $\Delta^2 = \Omega_b^2$ i novog zapisa nultočki $\kappa_0^2 = 1 \pm \sqrt{\Omega^2 - \Omega_b^2}$. Konačni izraz za realni dio optičke vodljivosti

$$\Re\sigma(\Omega) = \sigma_0\frac{\Omega_b^2}{\Omega^2}\frac{\mathscr{F}\left(\Omega\right)}{\sqrt{\Omega^2 - \Omega_b^2}}\,\Theta\left(\Omega - \Omega_b\right)\left[1 + \sqrt{\Omega^2 - \Omega_b^2} + \left(1 - \sqrt{\Omega^2 - \Omega_b^2}\right)\Theta\left(\Omega_t - \Omega\right)\right], \tag{7.2.3}$$

sadrži konstantu vodljivosti $\sigma_0 = e^2/4\hbar$ dvodimenzionalnog sustava u jedinicama $[\sigma_0] = \mathrm{Ohm}^{-1}$. Primjetimo da (7.2.3) kaže $\Re\sigma(\Omega) \propto \Omega_b^2 = \Delta^2$ što još jednom potvrđuje zaključak iz prethodnog potpoglavlja da nema međuvrpčane vodljivost u fazi čvorne petlje ($\Delta = 0$). U daljnjem tekstu analiziramo izraz (7.2.3), te promatramo slučaj intrističnog (Fermijev je nivo nula) i dopiranog (Fermijeva je energija konačna) sustava na termodinamičkoj nuli i pri konačnoj temperaturi.

7.3 Karakteristike optičke vodljivosti faze s procijepom

Karakteristike realnog dijela međuvrpčane vodljvosti (7.2.3) faze s procijepom promotrit ćemo za nekoliko slučajeva. Prvo, razmatramo nedopirani slučaj na termodinamič-



Slika 7.1: Realni dio optičke vodljivosti 2D sustava u fazi s procijepom, opisanog dvovrpčanim modelom (5.1.1) u jedinicama σ_0 na $T = 0$. Graf $\Re\sigma(\Omega)$ (7.2.3) predočen je za nekoliko vrijednosti parametra Δ kao funkcija $\Omega = \mathscr{E}/(2A)$ za intrinsični slučaj ($\mathscr{F}(\Omega) = 1$). Pri energiji Ω_b, $\Re\sigma(\Omega)$ ima divergenciju korijenskoga tipa (7.3.1). Zelenim kružićima označeno je $\Re\sigma(\Omega_t)$ koji u limesu $\Delta \to \infty$ dostižu vrijednost $2\sigma_0$ (tamnozeleni kružić).

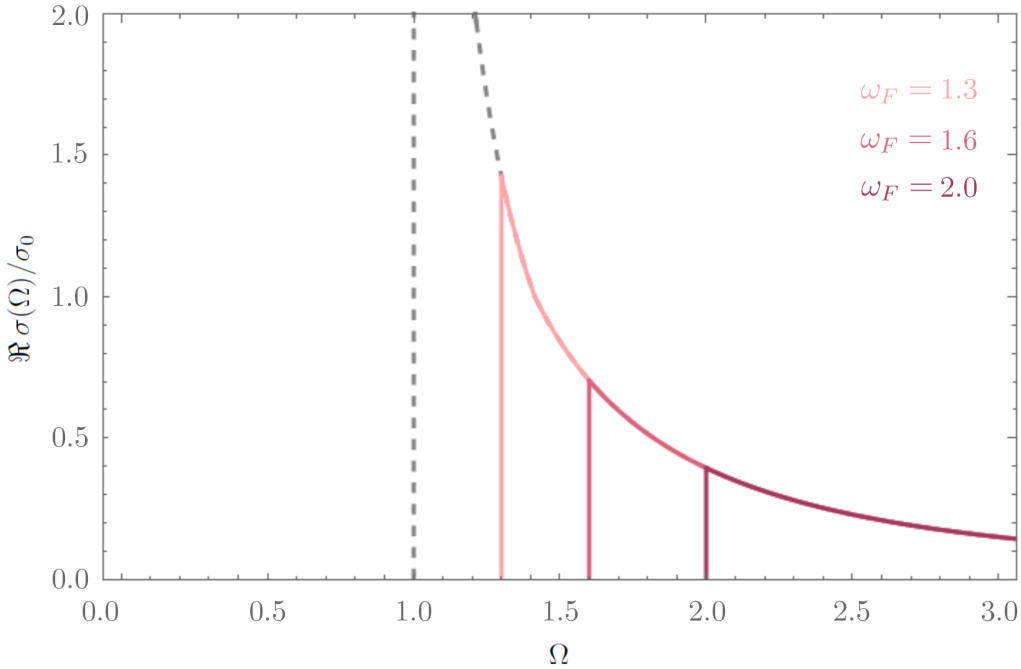
koj nuli. U tom je slučaju Fermijev nivo jednak nuli i nalazi se na sredini procijepa. Paulijev element (4.2.4) iz Poglavlja 4 u tom slučaju postaje $\mathscr{F}(\Omega) = \Theta(\Omega)$, odnosno, jednak je 1 za sve pozitivne vrijednosti varijable Ω što odgovara izrazu (7.2.3). Sam izraz (7.2.3) prikazan je za više vrijednosti parametra $\Omega_b = \Delta$ u slučaju $(T = 0, \omega_F = 0)$ na Slici 7.1 kao funkcija Ω u jedinicima σ_0. Pritom je glavna značajka realnog dijela optičke vodljivosti divergencija pri energiji Ω_b. Divergencija je to korijenskoga tipa, što se vidi iz razvoja izraza (7.2.3). Za $\Omega \gtrapprox \Omega_b$

$$\Re\sigma(\Omega) \approx \frac{2\sigma_0}{\sqrt{2\Omega_b(\Omega - \Omega_b)}}, \tag{7.3.1}$$

dok za $\Omega \gg \Omega_b$ dobivamo brzotrnući rep

$$\Re\sigma(\Omega) \approx \sigma_0 \frac{\Omega_b^2}{\Omega^2}. \tag{7.3.2}$$

Iako korijenska divergencija u $\Re\sigma(\Omega)$ implicira dublju vezu s gustoćom stanja (5.2.12), sličnosti prestaju na tome. U izrazu (7.2.3) nedostaje oblik koji bi bio povezan sa stepenicom koja je vidljiva u gustoći stanja na Slici 5.2. Tako primjerice, dok za vrijednosti ω_t gustoća stanja ima diskontinuitet, $\Re\sigma(\Omega)$ u točkama Ω_t kontinuirana je funkcija, a sama vrijednost $\Re\sigma(\Omega_t)$ prikazana je zelenim kružićima na Slici 7.1 te u limesu kada Δ teži u beskonačno, dostiže vrijednost $2\sigma_0$ označenu tamnozelenim



Slika 7.2: Realni dio optičke vodljivosti 2D sustava u fazi s procijepom opisanog dvovrpčanim modelom (5.1.1) u jedinicama σ_0 kao funkcija Ω predočen je za nekoliko vrijednosti Fermijeve energije $\omega_F > \omega_b$ za slučaj kad je $\Delta = \Omega_b = 1$. Intrinsični slučaj ($\omega_F = 0 \to \mathscr{F}(\Omega) = 1$) prikazan je crtkanom linijom.

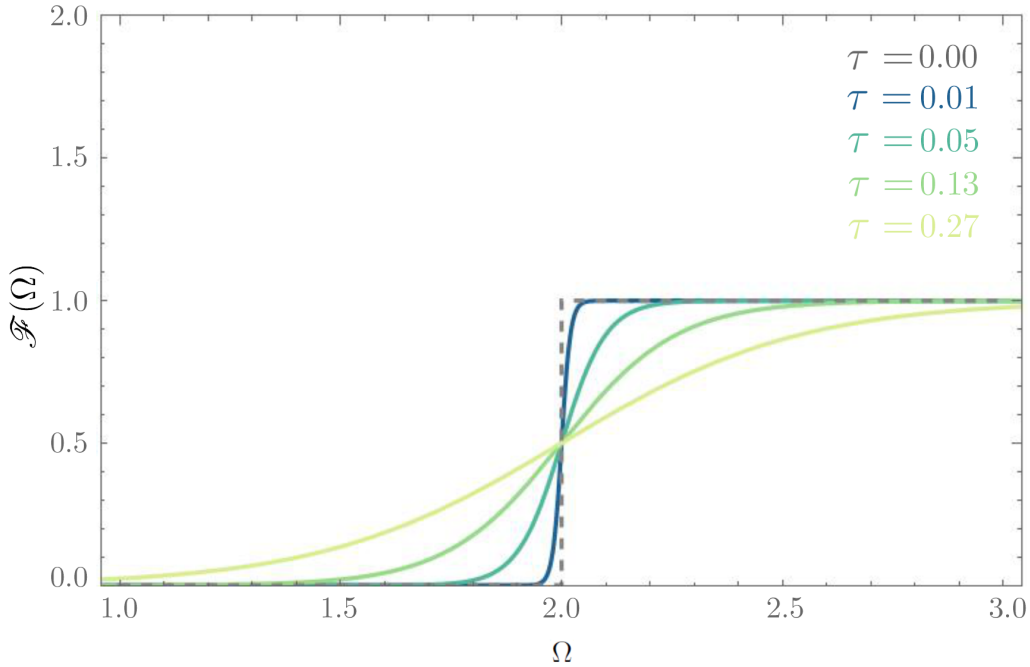
kružićem.

Drugi je slučaj, pod kojim promatramo realni dio optičke vodljivosti (7.2.3) onaj konačno popunjene vodljive vrpce, dakle $\omega_F > \omega_b$ na $T = 0$. Želeći pokazati kako konačna vrijednost Fermijeve energije utječe na izgled realnog dijela optičke vodljivosti, uzet ćemo jednu vrijednost parametra procijepa Δ i na istoj Slici 7.2 nacrtati više slučajeva (7.2.3) u ovisnosti o ω_F. Glavna je značajka da Paulijev element (4.2.5), koji je u ovom slučaju jednak $\mathscr{F}(\mathscr{E}) = \Theta(\mathscr{E}/(2A) - 2\varepsilon_F/(2A)) = \Theta(\Omega - \omega_F) = \mathscr{F}(\Omega)$ ostavi vidljive samo one segmente $\Re\sigma(\Omega)$ za $\Omega > \omega_F$.

Posljednji slučaj (7.2.3) koji promatramo onaj je za konačnu vrijednost Fermijeve energije i konačne temperature T. U tu svrhu prisjetimo se potpune definicije Paulijeva elementa iz Poglavlja 4 (4.2.4) u kojem smo kemijski potencijal elektrona aproksimirali Fermijevom energijom $\mu \approx \varepsilon_F$ te termalnu energiju k_BT skalirali parametrom vrpce A (5.1.3)

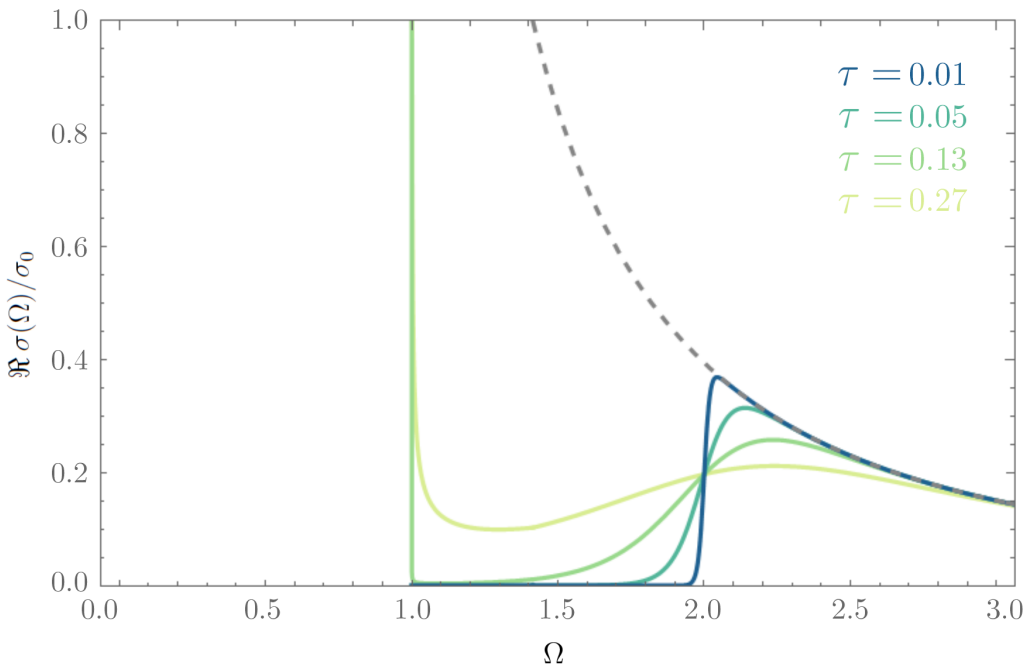
$$\mathscr{F}(\mathscr{E}) = \frac{\sinh\left(\frac{\mathscr{E}A}{2Ak_BT}\right)}{\cosh\left(\frac{\varepsilon_F A}{Ak_BT}\right) + \cosh\left(\frac{\mathscr{E}A}{2Ak_BT}\right)} \to \mathscr{F}(\Omega) = \frac{\sinh(\Omega/\tau)}{\cosh(\omega_F/\tau) + \cosh(\Omega/\tau)}, \tag{7.3.3}$$

gdje je $\tau = k_BT/A$ bezdimenzionalni parametar temperature. Paulijev element (7.3.3) prikazan je na slici 7.3 za nekoliko vrijednosti parametra τ u ovisnosti o Ω te se jasno vidi zaglađivanje stepenice Heavisidove funkcije (crtkana linija) kako se τ povećava.



Slika 7.3: Paulijev element (7.3.3) u ovisnosti o Ω prikazan je za razne vrijednosti parametra τ za Fermijevu energiju $\omega_F = 2$. Povećanjem parametra τ, stepenica Heavisideove funkcije postupno se zaglađuje.

Na Slici 7.4 prikazana je $\Re\sigma(\Omega)$ kao funkcija Ω u jedinicama σ_0 za par određenih vrijednosti $(\Delta = 1, \omega_F = 2)$ te za nekoliko vrijednosti parametra τ. Za $\tau \to 0$ dobili bismo situaciju sa slike 7.2 što je bio $T = 0$ slučaj obrađen u prošlom primjeru. No, povećanjem parametra τ uočavamo različite promjene. Prva je da se s povećanjem parametra τ, skok u $\Re\sigma(\Omega = \omega_F)$ polako zaglađuje (Slika 7.4). Stanja ispod ω_F koja su na $T = 0$ puna, povećanjem temperature se prazne te postaju dostupna u procesu međuvrpčanog pobuđenja i posljedično $\Re\sigma(\Omega)$ raste. To se lijepo vidi na primjeru korijenske divergencije za vrijednosti $\Omega \approx \Omega_b$ (Slika 7.4), koja je sve izraženija kako se τ povećeva, dok u slučaju $\tau = 0$ nije bila prisutna. Slično vrijedi i za stanja koja su u energiji iznad ω_F. Na $T = 0$ ona su bila prazna te se povećanjem temperature pune što pak smanjuje njihovu dostupnost u procesu međuvrpčanog pobuđenja te $\Re\sigma(\Omega)$ pada.



Slika 7.4: Realni dio optičke vodljivosti 2D sustava opisanog dvovrpčanim modelom (5.1.1) u jedinicama σ_0 u slučaju djelomično popunjene vodljive vrpce ($\omega_F > \omega_b$) za slučaj $\Delta = 1$ i $\omega_F = 2$. $\Re\sigma(\Omega)$ (7.2.3) predočen je za nekoliko vrijednosti parametra τ kao funkcija Ω za $\mathscr{F}(\Omega)$ (7.3.3). S povećanjem parametra τ, korijenska je divergencija za vrijednosti $\Omega \approx \Omega_b$ više izraženija.

Zaključak

U ovom radu analizirali smo neke od najbitnijih nabojnih transportnih karakteristika dvodimenzionalnih materijala koji posjeduju poseban tip invertiranih vodljivih vrpci koje oblikom podsjećaju na meksički šešir.

U toj nakani, dali smo kratak osvrt na temeljne nabojne veličine, koje se proučavaju u fizici kondenzirane materije, poput gustoća naboja, polarizacije i struje. Pokazali smo kako generalizirati usrednjenje navedenih veličina po ansamblima u neravnoteži te, koristeći Landauov pristup teoriji linearnog odziva u formalizmu jednadžbi gibanja za fermionske operatore, definirati odzivne funkcije na vanjsko narinuto električno polje.

Tako dobivenu odzivnu funkciju, odnosno tenzor vodljivosti, podijelili smo na unutarvrpčani i međuvrpčani kanal. U unutarvrpčanom kanalu rezultat je bio Drudeova formula za vodljivost u kojoj je najbitnija veličina efektivna gustoća nosioca naboja. U međuvrpčanom slučaju ograničili smo se na vrpce, koje posjeduju elektron-šupljina simetriju sa zanemarivo malom međuvrpčanom konstantom relaksacije, te dobili konačni izraz za realni dio međuvrpčane vodljivosti koju nazivamo i optičkom vodljivosti.

S razrađenom metodom za transportne veličine, krenuli smo u analizu 2×2 realne matrice hamiltonijana s dvama slobodnim parametrima, čije su svojstvene vrijednosti vrpce oblika meksičkog šešira. Također, tako definiranim hamiltonijanom opisali smo dvije različite elektronske faze koje smo nazvali fazom čvorne petlje i fazom s procijepom. Detaljno smo analizirali svojstva valentnih vrpci kao i pripadnu gustoću energetskih stanja za obje faze.

U Poglavlju 6 jasno smo pokazali razliku između ukupne i efektivne koncetracije elektrona za obje faze zadanog hamiltonijana. Također, pokazano je da mijenjanjem količine naboja (dopiranjem) i mjerenjem istosmjerne vodljivosti, možemo razaznati u kojoj se osnovnoj elektronskoj fazi sustav nalazi, je li u onoj s procijepom ili u čvornoj petlji.

Konačno, u zadnjem smo poglavlju prikazali kako realni dio međuvrpčane vodljivosti ovisi o parametrima vrpce, vrijednosti Fermijeve energije te o temperaturi. Glavna je karakteristika bila da je realni dio optičke vodljivosti nula, u slučaju faze čvorne petlje. U fazi s procijepom, realni dio vodljivosti, u slučaju kad je Fermijeva energije jednaka nuli, korijenski divergira za energije upadnog fotona koje odgovaraju energiji procijepa.

Dodatak A

Strujni matrični elementi

U ovom poglavlju izvodimo strujne matrične elemente koji ulaze u definiciju tenzora vodljivosti (3.3.18). Polazimo od općeg zapisa 2×2 matrice hamiltonijana s koeficijentima koji mogu biti kompleksne funkcije Blochova valnog vektora $\mathbf{k}$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}} & a_{\mathbf{k}} \\ a^*_{\mathbf{k}} & d_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \tag{A.0.1}$$

Matrične elemente matrice (A.0.1) označavamo s $H_{\mathbf{k}}(\ell, \ell')$ gdje su (ℓ, ℓ') indeksi retka i stupca. Kako matrica (A.0.1) mora biti hermitska, koeficijenti $H_{\mathbf{k}}(1,1) = b_{\mathbf{k}}$ i $H_{\mathbf{k}}(2,2) = d_{\mathbf{k}}$ su realni.

Ako uvedemo oznake $(s, s') = (c, v)$ za dijagonalizirane (Blochove) energije, možemo definirati α-tu komponentu strujnog matričnog elementa

$$J^{ss'}_{\alpha\mathbf{k}} = \sum_{\ell\ell'} \frac{e}{\hbar} \frac{\partial H_{\mathbf{k}}(\ell, \ell')}{\partial k_\alpha} U_{\mathbf{k}}(\ell, s) U^*_{\mathbf{k}}(\ell', s'), \tag{A.0.2}$$

gdje su $U_{\mathbf{k}}(\ell, s)$ elementi unitarne matrice transformacije koja dijagonalizira hamiltoniajan (A.0.1) na način

$$\mathbf{U}\mathbf{H}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{E}. \tag{A.0.3}$$

Matrica $\mathbf{E}$ je dijagonalna matrica svojstvenih energija

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \varepsilon^c_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \varepsilon^v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \tag{A.0.4}$$

Nakon poduljeg računa može pokazati da je $\mathbf{U}$ jednaka

$$U_{\mathbf{k}}(\ell, s) = \begin{pmatrix} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \cos(\vartheta_{\mathbf{k}}/2) & e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \sin(\vartheta_{\mathbf{k}}/2) \\ -\sin(\vartheta_{\mathbf{k}}/2) & \cos(\vartheta_{\mathbf{k}}/2) \end{pmatrix}, \tag{A.0.5}$$

gdje su

$$a_{\mathbf{k}} = |a_{\mathbf{k}}|e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}, \;\; \tan\varphi_{\mathbf{k}} = \frac{\operatorname{Im} a_{\mathbf{k}}}{\operatorname{Re} a_{\mathbf{k}}}, \;\; \tan\vartheta_{\mathbf{k}} = \frac{2|a_{\mathbf{k}}|}{d_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}}. \tag{A.0.6}$$

Dakle, nakon deriviranja elemenata hamiltonijana (A.0.1) i njihova uvrštavanja u (A.0.2) te uz definiciju matrice (A.0.5), slijedi za unutarvrpčani ($s = s' = c$) strujni matrični element

$$\frac{\hbar}{e} J^{cc}_{\alpha\mathbf{k}} = \cos\vartheta_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} \frac{\partial(b_{\mathbf{k}} - d_{\mathbf{k}})}{\partial k_\alpha} + \sin\vartheta_{\mathbf{k}} \frac{\partial|a_{\mathbf{k}}|}{\partial k_\alpha}. \tag{A.0.7}$$

Sličnim postupkom određujemo i međuvrpčani ($c = s \neq s' = v$) strujni matrični element

$$\frac{\hbar}{e} J^{vc}_{\alpha\mathbf{k}} = \sin\vartheta_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} \frac{\partial(b_{\mathbf{k}} - d_{\mathbf{k}})}{\partial k_\alpha} + i|a_{\mathbf{k}}| \frac{\partial\varphi_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} + \cos\vartheta_{\mathbf{k}} \frac{\partial|a_{\mathbf{k}}|}{\partial k_\alpha}. \tag{A.0.8}$$

Primijenimo formule (A.0.8) i (A.0.6) na hamiltonijan (5.1.1) iz Poglavlja 5. U tom slučaju koeficijenti matrice hamiltonijana su $b_{\mathbf{k}} = -d_{\mathbf{k}} = (A - Bk^2)$ i $a_{\mathbf{k}} = C$. Također, iz (A.0.6) slijedi $\tan\varphi_{\mathbf{k}} = 0$ što daje

$$\frac{\partial|a_{\mathbf{k}}|}{\partial k_\alpha} = 0, \qquad \frac{\partial\varphi_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} = 0. \tag{A.0.9}$$

Dakle, vidimo da su jedini neiščezavajući dijelovi unutarvrpčanog (A.0.7) i međuvrpčanog (A.0.8) strujnog matričnog elementa oni koji sadržavaju član

$$\frac{\partial(b_{\mathbf{k}} - d_{\mathbf{k}})}{\partial k_\alpha} = -2Bk_\alpha. \tag{A.0.10}$$

Sada konačno možemo zapisati vrijednosti strujnih matričnih elemenata, primjerice za $\alpha = x$ komponentu. Analogni izvod slijedi i za y komponentu. Za unutarvrpčani slučaj

$$J^{cc}_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{e}{\hbar} 2B \frac{(A - Bk^2)k_x}{\sqrt{(A - Bk^2)^2 + C^2}} = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial\varepsilon^c_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}, \tag{A.0.11}$$

i za međuvrpčani slučaj

$$J^{vc}_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{e}{\hbar} 2BC \frac{k_\alpha}{\sqrt{(A - Bk^2)^2 + C^2}} = \frac{e}{\hbar} 2BC \frac{k_\alpha}{|\varepsilon_{\mathbf{k}}|}. \tag{A.0.12}$$

Bibliografija

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Graphene

[2] N. P. Armitage, E. J. Mele, A. Vishwanath, *Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids*, Rev. Mod. Phys. **90**, 015001, (2018)

[3] S. Polatkan, et al., *Magneto-Optics of Weyl Semimetal beyond the Conical Band Approximation: Case Study of TaP*, Phys. Rev. Lett. **124**, 176402 (2020)

[4] Y. Shao, et al., *Optical signatures of Dirac nodal lines in* $NbAs_2$, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **116**, 1168 (2019)

[5] J.P. Carbotte, *Optical response of a nodal line semimetal*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 045301 (2016)

[6] N. M. R. Peres, J. E. Santos, *Strong light-matter interaction in systems described by a modified Dirac equation*, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 305801 (2013)

[7] Z. Rukelj, A. Akrap, *Carrier concentrations and optical conductivity of a band-inverted semimetal in two and three dimensions*, Phys. Rev. B **104**, 075108 (2021)

[8] N. W. Ashcroft, N. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, (1976)

[9] I. Kupčić, Z. Rukelj, S. Barišić, *Quantum transport equations for low-dimensional multiband electronic systems: I*, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 145602 (2013)

[10] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, Cambridge University Press, (2017)

[11] I. Kupčić, *Elektrodinamika kontinuuma*, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (2002)

[12] D. Pines, P. Nozieres, *Theory of Quantum Liquids: Normal Fermi Liquids*, Avalon Publishing (1994)

[13] Z. Rukelj, *Međuvrpčana pobuđenja u heksagonalnim dvodimenzionalnim vodljivim sustavima*, doktorska disertacija, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu (2017)

[14] D. J. Griffiths, D. F. Schroeter, *Introduction to Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, (2017)

[15] M. Šunjić, *Kvantna fizika mnoštva čestica*, Školska knjiga, Zagreb (2002)

[16] Z. Rukelj, C.C. Homes, M. Orlita, A. Akrap, *Distinguishing the gapped and Weyl semimetal scenario in $ZrTe_5$: Insights from an effective two-band model*, Phys. Rev. B **102**, 125201 (2020)

[17] H. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, Oxford University Press, (2004)

[18] I. Supek, *Teorijska fizika II*, Školska knjiga, Zagreb, (1980)