

# Optička svojstva Diracovih polumetala

---

**Papac, Patrik**

**Master's thesis / Diplomski rad**

**2023**

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

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:184767>

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

*Download date / Datum preuzimanja:* **2025-02-22**



*Repository / Repozitorij:*

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



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

Patrik Papac

Optička svojstva Diracovih polumetala

Diplomski rad

Zagreb, 2023.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ  
FIZIKA; SMJER ISTRAŽIVAČKI

**Patrik Papac**

Diplomski rad

**Optička svojstva Diracovih  
polumetala**

Voditelj diplomskog rada: izv. prof. dr. sc. Ivan Kupčić

Ocjena diplomskog rada: \_\_\_\_\_

Povjerenstvo: 1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

Datum polaganja: \_\_\_\_\_

Zagreb, 2023.

Zahvaljujem se mentoru izv. prof. dr. sc. Ivanu Kupčiću na velikoj pomoći i strpljenju tijekom izrade ovog diplomskog rada.

## Sažetak

Trodimezionalni (3D) Diracovi polumetali su jedna od klasa 3D Diracovih materijala, u kojima se elektroni mogu opisati 3D Diracovim modelom. Zanimljiva optička i transportna svojstva ovakvih materijala su razlog njihovog intenzivnog eksperimentalnog i teorijskog istraživanja.

U ovom radu se teorijski istražuje dinamički tenzor vodljivosti u anizotropnom 3D Diracovom modelu u aproksimaciji relaksacijskih vremena i u jako dopiranom režimu. Izvedeni su izrazi za unutarvrpčane i međuvrpčane doprinose dinamičkoj vodljivosti koristeći minimalnu formu anizotropnog 3D Diracovog modela. Polazni hamiltonijan je preuzet iz literature, a dobiven je redukcijom *ab initio* rezultata za Diracov polumetal  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  na 4x4 efektivni Diracov model.

Analiza je podijeljena u tri dijela. Prvo je upotrebljena baždarno invarijantna minimalna supstitucija da bi se odredila struktura unutarvrpčanih i međuvrpčanih doprinosa tenzoru vodljivosti. Nakon toga je provedena numerička analiza u kojoj je kvantitativno istražena ovisnost dinamičke vodljivosti o temperaturi i o vrijednostima mjere relaksacije. Na kraju su rezultati kvalitativno uspoređeni s najnovijim mjerenjima optičke vodljivosti u Diracovim polumetalima  $\text{TlBiSSe}$ .

Ključne riječi: Diracovi polumetali, optička svojstva, transportna svojstva, dinamička vodljivost,  $\text{TlBiSSe}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$

# Optical properties of Dirac semimetals

## Abstract

Three-dimensional (3D) Dirac semimetals are a subclass of 3D Dirac materials, in which electrons can be described by a 3D Dirac model. Interesting optical and transport properties of such systems are the reason of their intensive experimental and theoretical research.

In this thesis, the dynamical conductivity tensor of the anisotropic 3D Dirac model is analyzed in relaxation time approximation, in a high doping regime. Analytical expressions for intraband and interband contributions to the dynamical conductivity tensor are derived. The model hamiltonian used in the calculation is taken from literature. It is obtained by reducing the *ab initio* result for the Dirac semimetal  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  to a 4x4 effective Dirac model.

The analysis is divided into three parts. First, a gauge-invariant minimal substitution is used to determine the structure of the intraband and interband contribution to the dynamical conductivity tensor. Second, a numerical analysis is done and the results are presented for different values of temperature and relaxation rates. Finally, the results are qualitatively compared to the recent measurements of optical conductivity in  $\text{TlBiSSe}$ .

Keywords: Dirac semimetals, optical properties, transport properties, dynamical conductivity,  $\text{TlBiSSe}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$

# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
1.1	3D Diracova jednađžba . . . . .	2
1.2	3D i 2D Diracovi elektroni u kristalima . . . . .	3
1.3	Hamiltonijan anizotropnog 3D Diracovog modela . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Optička svojstva Diracovih polumetala</b>	<b>9</b>
2.1	Blochove energije i Blochove funkcije u anizotropnom 3D Diracovom modelu . . . . .	9
2.2	Vežanje elektrona i vanjskih elektromagnetskih polja . . . . .	12
2.3	Struja-dipol Kubo formula u modelu jedne vrpce . . . . .	14
2.4	Kubo formula za dinamičku vodljivost . . . . .	16
2.5	Modeli s više vrpce . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Tenzor vodljivosti u Diracovim polumetalima</b>	<b>18</b>
3.1	Tenzor vodljivosti . . . . .	18
3.2	Unutarvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti . . . . .	18
3.3	Unutarvrpčani doprinos u dopiranom režimu . . . . .	19
3.4	Međuvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti . . . . .	21
3.5	Međuvrpčani doprinos u dopiranom režimu . . . . .	22
3.6	Koncentracija nositelja naboja i kemijski potencijal . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Rezultati i usporedba s eksperimentima</b>	<b>26</b>
4.1	Relativna i apsolutna skala za dinamičku vodljivost . . . . .	26
4.2	Numerička integracija - račun kemijskog potencijala . . . . .	26
4.3	T=0 K slučaj . . . . .	28
4.4	Konačne temperature . . . . .	29
4.5	Anizotropni slučaj . . . . .	33
<b>5</b>	<b>Zaključak</b>	<b>37</b>
	<b>Dodaci</b>	<b>38</b>
<b>A</b>		<b>38</b>
A.1	Efektivni TBA hamiltonijan u modelima s jednom vrpcom . . . . .	38

A.2	Vežanje elektrona s vanjskim elektromagnetskim poljima u modelima s jednom vrpcom . . . . .	39
A.3	Elektron-foton vežanje kod efektivnog hamiltonijana . . . . .	40
A.4	Druga kvantizacija . . . . .	42
<b>B</b>		<b>43</b>
B.1	Općeniti TBA model . . . . .	43
B.2	Elektron-foton vežanje kod efektivnog hamiltonijana u općenitom TBA modelu . . . . .	43
<b>C</b>		<b>46</b>
C.1	Strujne vršne funkcije anizotropnog 3D Diracovog modela . . . . .	46
<b>D</b>		<b>49</b>
D.1	Aproksimacija slučajnih faza . . . . .	49
D.2	Vremenski ovisan račun smetnje . . . . .	49
D.3	Unutarvrpčani doprinos induciranoj strujnoj gustoći . . . . .	51
D.4	Unutarvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti . . . . .	52
<b>E</b>		<b>54</b>
E.1	Python skripta za izračun i skiciranje vodljivosti za različite temperature	54
<b>Literatura</b>		<b>57</b>

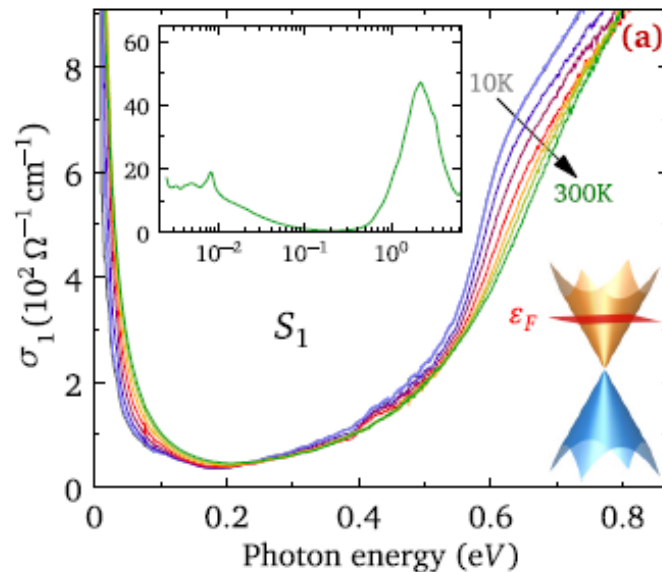


# 1 Uvod

Transportna i optička svojstva Diracovih polumetala su aktivno područje istraživanja zbog ponašanja vodljivih elektrona u tim sustavima sličnog relativističkim fermionima. Diracovi polumetali su vrsta trodimenzionalnih (3D) materijala u kojoj se u blizini Fermijevega nivoa disperzije energija elektrona i šupljina mogu opisati (3D) Diracovom jednačbom, što je uzrok njihovih neuobičajnih transportnih svojstava.

Postoji i široka klasa dvodimenzionalnih (2D) materijala u kojima elektroni imaju slične disperzije. Najpoznatiji primjer je grafen. U njemu su vodljive i valentne vrpce u blizini Fermijevega nivoa opisane linearnim disperzijama, te se dodiruju. To dodirivanje znači da je Diracova masa jednaka nuli.

Mi ćemo se u ovom radu baviti samo 3D Diracovim polumetalima. Promotrit ćemo dva takva sustava.  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  ćemo zbog jednostavne kristalne strukture iskoristiti u diskusiji osnovnog teorijskog modela, a  $\text{TlBiSSe}$  će nam biti zanimljiv zbog preciznih mjerenja optičke vodljivosti koja su nedavno napravljena.



Slika 1.1: Optička vodljivost  $\text{TlBiSSe}$  u jako dopiranom režimu.[1]

$\text{TlBiSSe}$  je anizotropni 3D Diracov polumetal. U članku [1] su izmjerene optičke vodljivosti  $\text{TlBiSSe}$  uzoraka za 3 različite koncentracije dopiranja, koje je kontrolirano mijenjajući omjer  $\text{Tl}:\text{Bi}$  u kristalu. Veći omjer odgovara slabijem dopiranju. Na slici 1.1 je prikazan rezultat optičke vodljivosti u jako dopiranom režimu u kojem je  $\text{Tl}:\text{Bi}=50:50$ . U ovom sustavu, procijenjena vrijednost Fermijeve energije je  $E_F \approx 290$  meV, a procijenjena koncentracija nositelja naboja je  $n = 5.6 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$ . Fermijeve

brzine su anizotropne,  $v_{Fxy} \approx 4 \cdot 10^5$  m/s u  $xy$  ravnini, te  $v_{Fz} \approx 1.8 \cdot 10^5$  m/s u smjeru okomitom na ravninu. Optička vodljivost je mjerena za više različitih temperatura. Ona ima nagli pad nakon  $\hbar\omega > \hbar/\tau \approx 20$  meV, te je relativno niska na energijama od 0.1 eV do 0.5 eV, nakon čega ima nagli porast. Na slici se također vidi da je za veće energije vodljivost veća za niže temperature. Ovakvo ponašanje optičke vodljivosti se može razumjeti analizirajući unutarvrpčane i međuvrpčane doprinose vodljivosti anizotropnog 3D Diracovog modela. U ovom radu će se ta analiza provesti izračunom tenzora dinamičke vodljivosti u aproksimaciji relaksacijskih vremena.

## 1.1 3D Diracova jednadžba

Schrödingerova jednadžba

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

opisuje vremensku evoluciju valne funkcije slobodne nerelativističke čestice mase  $m$  koja se giba u 3D prostoru. Energetska stanja se u tom slučaju mogu napisati kao  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ , gdje je  $\hbar \mathbf{k}$  impuls te čestice.

Jednadžba koja opisuje relativističke fermione u 3D prostoru se naziva Diracova jednadžba i glasi

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\beta m c^2 + c \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.2)$$

pri čemu su  $\beta \equiv \alpha_0$  i  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  4x4 Diracove matrice

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}.$$

Ovdje su  $\sigma_i$  standardne Paulijeve matrice, a  $I_2$  je jedinična 2x2 matrica. U ovom slučaju  $\psi$  je četverokomponentni vektor. U Schrödingerovoj jednadžbi  $\psi(\mathbf{r}, t)$  je neka

kompleksna funkcija.

Za Diracove matrice vrijedi da antikomutiraju, te

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{i,j} I. \quad (1.4)$$

Izbor Diracovih matrica nije jedinstven, već svaki skup matrica koji se može dobiti transformacijom

$$\alpha'_i = U \alpha_i U^{-1}, \quad (1.5)$$

pri čemu se valna funkcija transformira na način

$$\psi' = U \psi, \quad (1.6)$$

također zadovoljava (1.4) i Diracovu jednadžbu. U slučaju slobodnih relativističkih čestica rješavanjem jednadžbe (1.2) dobivamo disperzijske relacije

$$E(\mathbf{K}) = \pm \sqrt{M^2 + K^2}. \quad (1.7)$$

Ovdje smo uveli pokrate koje ćemo koristiti kroz cijeli ovaj rad,

$$M = mc^2, \quad (1.8)$$

$$K_\alpha = \hbar ck_\alpha. \quad (1.9)$$

One predstavljaju Diracovu masu i komponente valnog vektora prikazane u jedinicama energije. Pozitivne i negativne energije se mogu redom pridružiti česticama i anti-česticama koje se gibaju naprijed u vremenu.

## 1.2 3D i 2D Diracovi elektroni u kristalima

Kako bi opisali transportna i optička svojstva vodljivih elektrona u slabo dopiranim sustavima, obično promatramo samo vrh valentne ili dno vodljive vrpce. U jednostavnim kristalima možemo napraviti Taylorov razvoj energije  $E(\mathbf{k})$  oko dna ili vrha vrpce

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \sum_{\alpha} \frac{\partial E(\mathbf{k}_0)}{\partial k_{\alpha}} k_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k}_0)}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} k_{\alpha} k_{\beta} + \dots \quad (1.10)$$

Dakako, linearni član u tom razvoju iščezava. Ako definiramo tenzor recipročne efektivne mase i tenzor transportne mase na način

$$\frac{\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}, \quad (1.11)$$

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k}_0)}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}, \quad (1.12)$$

možemo pisati

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \sum_{\alpha\beta} \frac{\hbar^2 k_\alpha k_\beta}{2m_{\alpha\beta}}. \quad (1.13)$$

Drugim riječima, u izotropnom slučaju,  $m_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} m^*$ , nositelje naboja možemo opisati kao slobodne nerelativističke čestice čija je masa zamijenjena efektivnom masom  $m^*$ .

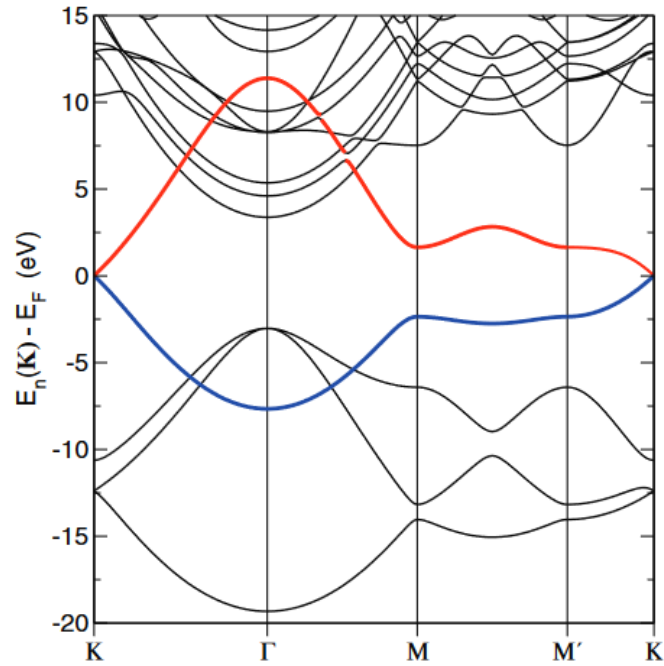
U Diracovim materijalima u kojima je Diracova masa dovoljno mala ova aproksimacija nije dobra. Disperzije nositelja naboja na vrhu valentne i dnu vodljive vrpce opisujemo relacijom (1.7), bez ikakvih dodatnih pojednostavljenja

$$E(\mathbf{K}) = \pm \sqrt{M^2 + K^2}. \quad (1.14)$$

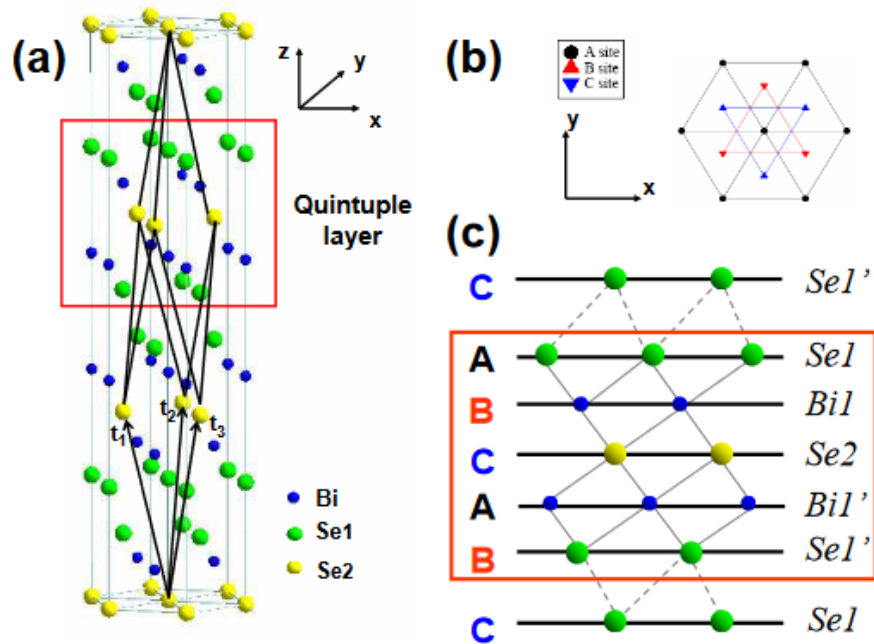
Tipičan 2D primjer ovakvog materijala je grafen. Struktura vrpce dobivena *ab initio* računima prikazana je na slici 1.2. Kod grafena parametar  $M$  iščezava te je disperzija linearna oko točke K. Lako se vidi da se ista disperzija dobije i u minimalnom modelu čvrsto vezanih elektrona (TBA - *tight binding approximation*),  $E_{\pi^*,\pi}(k) \approx \pm v_F \hbar k$ , gdje je  $v_F$  Fermijeva brzina elektrona. Aproksimacija u kojoj se točne disperzije dobivene *ab initio* računima, ili pomoću jednostavnog TBA modela, razvijaju oko Diracove točke po malom  $k$ , se obično naziva aproksimacija Diracovog konusa (ekvienigetske plohe  $\pm v_F \hbar k$  su konusi u 2D  $k$  prostoru, kao što se može vidjeti na umetku slike 1.1). U toj aproksimaciji donje vrpce nemaju dno, a gornje vrpce nemaju vrh.

### 1.3 Hamiltonijan anizotropnog 3D Diracovog modela

Postoje dvije klase 3D materijala u kojima se disperzije vodljivih elektrona mogu opisati s anizotropnim 3D Diracovim modelom. Prva klasa su takozvani topološki izolatori, a druga su Diracovi polumetali. U ovom radu ćemo promatrati ove druge

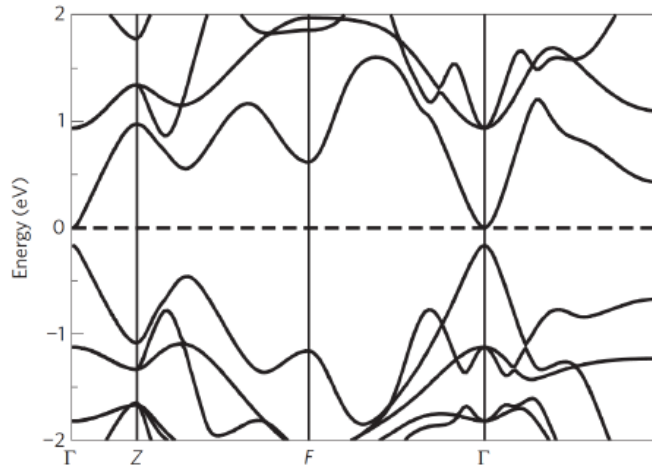


Slika 1.2: Disperzija elektrona u grafenu. Vodljiva vrpca (crveno) i valentna vrpca (plavo) imaju linearnu disperziju u blizini K točke.[3]



Slika 1.3: Struktura kristala  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [2].

sustave. Tipični Diracov polumetal je  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Kao što se vidi na slici 1.3[2], u njemu imamo pet slojeva atoma raspoređenih u 2D heksagonalnoj rešetci koji se ponavljaju u smjeru okomitom na 2D ravninu (A, B i C mjesta označena na b) dijelu slike). Ponavljanje slojeva je slično ponavljanju (111) slojeva u FCC rešetci. Slika 1.4 prika-



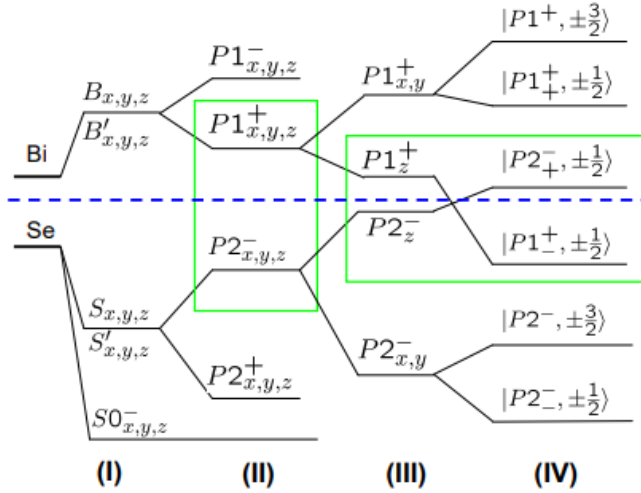
Slika 1.4: Disperzija elektrona u  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Diracova točka se nalazi u  $\Gamma$  točki prve Brillouinove zone.[2]

zuje strukturu vrpce koja je dobivena *ab initio* računima u slučaju kada su zanemareni efekti vezanja spina i orbitalnog momenta elektrona.

Kao što je prikazano u originalnoj referenci, disperzije u blizini Diracove točke ( $\Gamma$  točka na slici) mogu se dobiti analitički analizirajući simetrijska svojstva kristalne rešetke. Ovdje ćemo ukratko prikazati ideju. Konačna elektronska struktura  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  se može razumijeti kao rezultat nekoliko fizikalnih efekata koji se uzimaju korak po korak, počevši od svih vanjskih  $p_\alpha$  orbitala na 5 atoma u primitivnoj ćeliji. Na koncu nam ostaju samo četiri molekularne orbitale najbliže Fermijevoj energiji. Ti koraci su shematski prikazani na slici 1.5:

- I hibridizacija  $p_\alpha$  orbitala Bi i Se atoma,
- II formiranje bonding i anti-bonding orbitala,
- III cijepanje orbitala kristalnim poljem, i
- IV spin-orbit vezanje.

U najgrubljoj aproksimaciji se korak IV može preskočiti. To je razina razmatranja koju mi koristimo u ovom radu. Ta simetrijska analiza je pokazala da su četiri vrpce



Slika 1.5: Shematski prikaz atomskih i molekularnih orbitala u  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  koje su najbliže Fermijevom nivou.[6]

najbliže Fermijevom nivou izgrađene od po dvije molekularne orbitale na Bi i Se atomima angularnih momenata  $j = \pm 1/2$ . One su na slici 1.5 označene sa  $|P1_{-}^{\dagger}, \pm \frac{1}{2}\rangle$  i  $|P2_{+}^{-}, \pm \frac{1}{2}\rangle$ .

Za analizu koja slijedi detalji strukture tih orbitala nisu važni. Nama je ovdje važno da je redukcija *ab initio* disperzija na minimalni TBA model pokazala da je dovoljno zadržati samo ta četiri stanja. Odgovarajući matrični elementi u blizini  $\Gamma$  točke mogu se razviti u Taylorov red po  $\mathbf{k}$ , zadržavajući članove do drugog reda. Konačni oblik reduciranog 4x4 hamiltonijana je sljedeći[6]

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k})I + \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & A_1k_z & 0 & A_2k_{-} \\ A_1k_z & -M(\mathbf{k}) & A_2k_{-} & 0 \\ 0 & A_2k_{+} & M(\mathbf{k}) & -A_1k_z \\ A_2k_{+} & 0 & -A_1k_z & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix} + O(\mathbf{k}^2), \quad (1.15)$$

gdje je

$$\begin{aligned} k_{\pm} &= k_x \pm ik_y, \\ \epsilon_0(\mathbf{k}) &= C + C_1k_z^2 + C_2k_{\perp}^2, \\ M(\mathbf{k}) &= M + M_1k_z^2 + M_2k_{\perp}^2. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Pokazano je da je ovaj model dovoljno bogat da može poslužiti za analizu svojstava ne samo Diracovih polumetala nego i topoloških izolatora. Ako zadržimo samo linearne doprinose, konačni rezultat je hamiltonijan

$$H(\mathbf{k}) = CI + \begin{pmatrix} M & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -M & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & M & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -M \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Budući da sada na dijagonali imamo matricele elemente  $\pm M$  koji ne ovise o  $\mathbf{k}$ , ovaj model više ne može objasniti fiziku topoloških izolatora. Nama to nije važno jer nas zanimaju samo svojstva Diracovih polumetala. Energije promatranih molekularnih orbitala  $E_a$  i  $E_b$ , te grupne brzine  $v_{F\alpha}$  ulaze u ovaj hamiltonijan kroz parametre

$$\begin{aligned} C &= \frac{E_a + E_b}{2}, \\ M &= \frac{E_a - E_b}{2}, \\ A_{1,2} &= v_{Fxy,z} \hbar. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Hamiltonijan se prikladnom transformacijom može prevesti na oblik koji ćemo koristiti u ostatku ovog rada (zamjena 2. i 3. stupca i 2. i 3. retka u (1.17))

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M & 0 & K_z & K_- \\ 0 & M & K_+ & -K_z \\ K_z & K_- & -M & 0 \\ K_+ & -K_z & 0 & -M \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Ovdje smo izabrali energetske ishodište na način  $C = 0$ , te smo uveli pokratu  $K_\alpha = \hbar v_{F\alpha} k_\alpha$  koja je poopćenje kratice (1.9).



## 2 Optička svojstva Diracovih polumetala

U ovom i u sljedećem poglavlju ćemo izvesti analitičke izraze za dinamičku vodljivost anizotropnog 3D Diracovog modela. Numerička analiza slijedi u poglavlju 4.

### 2.1 Blochove energije i Blochove funkcije u anizotropnom 3D Diracovom modelu

Kao što je objašnjeno u prvom poglavlju, vodljivi elektroni u Diracovim polumetalima mogu se opisati u "spin-less" reprezentaciji anizotropnog proširenog Diracovog modela. Naime, vektori baze u toj reprezentaciji vezani su uz četiri molekularne orbitale u kojima spin nije dobar kvantni broj, nego je to angularni moment  $j$ . Ako nema spin-orbit vezanja, nema ni razlike između  $j$  i  $\sigma$ . U vodećoj aproksimaciji koju ćemo koristiti u ovom radu, gdje je  $\epsilon_0(\mathbf{k}) = 0$  i  $\Delta M(\mathbf{k}) = M(\mathbf{k}) - M = 0$ , goli hamiltonijan prikazan u drugoj kvantizaciji poprima oblik

$$H_0 = \sum_{l'\mathbf{k}} H_0^{l'l}(\mathbf{k}) c_{l\mathbf{k}}^\dagger c_{l'\mathbf{k}}, \quad (2.20)$$

gdje je

$$\left( H_0^{l'l}(\mathbf{k}) \right) = \begin{pmatrix} M & 0 & K_z & K_- \\ 0 & M & K_+ & -K_z \\ K_z & K_- & -M & 0 \\ K_+ & -K_z & 0 & -M \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Mi ovdje promatramo ponašanje 3D Diracovih elektrona u vanjskim elektromagnetskim poljima, pa smo u tom smislu oznaci matrice (2.20) dodali indeks 0.  $H_0^{l'l}(\mathbf{k})$  su elementi te matrice prikazani u reprezentaciji četiri molekularne orbitale iz poglavlja 1. Operatori  $c_{l\mathbf{k}}^\dagger$  su operatori stvaranja elektrona u tim molekularnim orbitalama, a  $c_{l\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle$  su vektori baze u toj reprezentaciji.

Kao što smo rekli ranije, pojednostavljenije  $\Delta M(\mathbf{k}) = M(\mathbf{k}) - M = 0$  automatski isključuje topološke izolatore iz analize koja slijedi.

Hamiltonijan ćemo dijagonalizirati pomoću transformacije

$$c_{l\mathbf{k}}^\dagger = \sum_L U_{\mathbf{k}}(l, L) c_{L\mathbf{k}}^\dagger, \quad (2.22)$$

gdje je  $c_{L\mathbf{k}}^\dagger$  operator stvaranja elektrona povezan s Blochovom funkcijom  $\psi_{L\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | c_{L\mathbf{k}}^\dagger | 0 \rangle$ . Uvrštavajući tu relaciju u hamiltonijan (2.20) dolazimo do

$$H_0 = \sum_{L\mathbf{k}} H_0^{LL}(\mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}}. \quad (2.23)$$

Kao što očekujemo za Blochovu reprezentaciju, matrični elementi

$$H_0^{LL}(\mathbf{k}) = \sum_{l'} U_{\mathbf{k}}^T(L, l) H_0^{ll'}(\mathbf{k}) U_{\mathbf{k}}^*(l', L) \quad (2.24)$$

su dijagonalni u indeksima vrpce  $L$  i  $L'$ . Te matrične elemente možemo napisati i u matričnom obliku

$$H_0^{LL}(\mathbf{k}) = (U_{\mathbf{k}}^T H_0 U_{\mathbf{k}}^*)_{LL}. \quad (2.25)$$

Ovdje je  $U_{\mathbf{k}}$  matrica transformacije čiji su matrični elementi  $U_{\mathbf{k}}(l, L)$ .

Da bismo odredili elemente matrice  $U_{\mathbf{k}}$ , matricu (2.21) ćemo napisati pomoću 2x2 blok matrice, na način

$$H_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\mathbf{M} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

U ovom zapisu je

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} K_z & K_- \\ K_+ & -K_z \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

gdje je  $K_{\pm} = K_x \pm iK_y$ .

Determinantu matrice možemo lako dobiti uzimajući u obzir da je  $(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = K^2 I_2$ . Naime, za neku svojstvenu vrijednost  $E_L$  imamo

$$\det(H_0 - E_L I_2) = -(\mathbf{M}^2 - E_L^2 I_2) - (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = 0, \quad (2.28)$$

odakle slijedi

$$E_L(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{M^2 + K^2}. \quad (2.29)$$

Ove svojstvene vrijednosti odgovaraju Blochovim energijama problema kojeg pro-matramo. Da bismo odredili matrične elemente  $U_{\mathbf{k}}(L, l)$  prvo ćemo uvesti matricu

$\lambda = \lambda I_2$ , gdje je  $\lambda = \sqrt{M^2 + K^2}$ . Dijagonalnu matricu čije vlastite vektore tražimo sada možemo zapisati na način

$$(H_0^{LL}(\mathbf{k})) = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Primijetimo da su stupci matrice  $H_0 - (H_0^{LL})$  ujedno i odgovarajuća svojstvena stanja problema kojeg promatramo. Lako se provjeri da ta četiri vektora

$$v_1 = \begin{pmatrix} K_z \\ K_+ \\ -M + \lambda \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} K_- \\ -K_z \\ 0 \\ -M + \lambda \end{pmatrix}, \quad v_3 = \begin{pmatrix} M - \lambda \\ 0 \\ K_z \\ K_+ \end{pmatrix}, \quad v_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ M - \lambda \\ K_- \\ -K_z \end{pmatrix},$$

čine ortogonalnu bazu svojstvenih stanja. Na primjer, za  $\langle v_1 | v_2 \rangle = K_z^* K_- - K_+^* K_z = K_z K_- - K_- K_z = 0$ . Također, lako se provjeri da je  $H_0 v_i = \lambda v_i$  za  $i = 1, 2$ , te  $H_0 v_i = -\lambda v_i$  za  $i = 3, 4$ . Na primjer, račun izraza  $H_0 v_1$  daje

$$H_0 v_1 = \begin{pmatrix} MK_z + K_z(-M + \lambda) \\ MK_+ + K_+(-M + \lambda) \\ K_z^2 + K_- K_+ - M(-M + \lambda) \\ K_+ K_- - K_z K_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda K_z \\ \lambda K_+ \\ \lambda^2 - \lambda M \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda v_1. \quad (2.31)$$

Norma svakog od tih vektora je jednaka  $|v_i| = \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\lambda - M)}}$ , pa ukupnu matricu transformacije možemo napisati kao

$$U_{\mathbf{k}}^\dagger = (U_{\mathbf{k}}^*(L, l)) = \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\lambda - M)}} \begin{pmatrix} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & \lambda - M \\ M - \lambda & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Ta matrica odgovara transformaciji iz baze delokaliziranih svojstvenih stanja  $|\mathbf{k}\rangle = c_{l\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle$  u bazu Blochovih stanja  $|L\mathbf{k}\rangle = c_{L\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle$ ,

$$c_{L\mathbf{k}}^\dagger = \sum_l U_{\mathbf{k}}^*(L, l) c_{l\mathbf{k}}^\dagger. \quad (2.33)$$

Budući da je  $(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})^\dagger = (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ , slijedi izraz za matricu  $U_{\mathbf{k}}$ ,

$$U_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\lambda - M)}} \begin{pmatrix} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & M - \lambda \\ \lambda - M & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

Direktno uvrštavanje izraza (2.32) u (2.24) daje

$$\left( H_0^{LL'} \right) = \frac{1}{2\lambda(\lambda - M)} \begin{pmatrix} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & \lambda - M \\ M - \lambda & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & M - \lambda \\ \lambda - M & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

Lako se provjeri da je rezultat dijagonalna matrica (2.30). Rezultat svega je goli hamiltonijan prikazan u Blochovoj reprezentaciji

$$H_0 = \sum_{L\mathbf{k}} E_L(\mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}}^\dagger c_{L\mathbf{k}}, \quad (2.36)$$

gdje su Blochove energije  $E_L(\mathbf{k})$  dane sa (2.29).

## 2.2 Vežanje elektrona i vanjskih elektromagnetskih polja

U dodatku B je detaljno objašnjen jedan od postupaka računanja vežanja vanjskih elektromagnetskih polja na gustoću struje i na gustoću dijamagnetske struje. Taj postupak je prilagođen onim problemima u kojima je polazni goli hamiltonijan prikazan u reprezentaciji delokaliziranih molekularnih orbitala, a gdje ne znamo točan oblik matričnih elemenata u reprezentaciji atomskih orbitala. Problem (2.21) je jedan takav primjer.

U spin-less reprezentaciji za elektrone u 3D Diracovom modelu moramo samo u izrazima (B.30) i (B.31) ispustiti sumu po spinu. Rezultat je

$$H_1 = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}\alpha} A_\alpha(\mathbf{q}) \hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}), \quad (2.37)$$

$$H_2 = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \sum_{\alpha\beta} A_\alpha(\mathbf{q}') A_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \hat{\gamma}_{\alpha\beta}(-\mathbf{q}; 2). \quad (2.38)$$

Ovdje je

$$\hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}) = \sum_{l'} \sum_{\mathbf{k}} j_\alpha^{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{l\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{l'\mathbf{k}}, \quad (2.39)$$

kvantni operator gustoće struje, dok je

$$\hat{\gamma}_{\alpha\beta}(-\mathbf{q}; 2) = \sum_{l'} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\alpha\beta}^{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}; 2) c_{l\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{l'\mathbf{k}}. \quad (2.40)$$

operator dijamagnetske gustoće struje.  $\mathbf{A}$  je vektorski potencijal. U ovim izrazima su

$$j_\alpha^{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx j_\alpha^{l'}(\mathbf{k}) = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial H_0^{l'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}, \quad (2.41)$$

$$\gamma_{\alpha\beta}^{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}; 2) \approx \gamma_{\alpha\beta}^{l'}(\mathbf{k}; 2) = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial^2 H_0^{l'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \quad (2.42)$$

pripadne vršne funkcije prikazane u reprezentaciji delokaliziranih molekulskih orbitala u granici  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ .

Strujne vršne funkcije možemo transformacijom (2.32) prebaciti u Blochovu reprezentaciju kao što je napravljeno u dodatku B. Konačni izrazi za operatore gustoća struja su

$$\hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}) = \sum_{LL'} \sum_{\mathbf{k}} j_\alpha^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{L'\mathbf{k}}, \quad (2.43)$$

$$\hat{\gamma}_{\alpha\beta}(-\mathbf{q}; 2) = \sum_{LL'} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\alpha\beta}^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}; 2) c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{L'\mathbf{k}}, \quad (2.44)$$

uz  $j_\alpha^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx j_\alpha^{LL'}(\mathbf{k})$ , te  $\gamma_{\alpha\beta}^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}; 2) \approx \gamma_{\alpha\beta}^{LL'}(\mathbf{k}; 2)$ . U Blochovoj reprezentaciji strujne vršne funkcije u Diracovom modelu su

$$|j_\alpha^{LL}(\mathbf{k})|^2 = e^2 v_{F\alpha}^2 \frac{K_\alpha^2}{M^2 + K^2} \quad (2.45)$$

za unutarvrpčane doprinose, te

$$j_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}) = 0 \quad \text{za } LL' = 12, 21, 34, 43, \quad (2.46)$$

$$2|j_\alpha^{-+}(\mathbf{k})|^2 = \sum_{L < L'} |j_\alpha^{LL'}(\mathbf{k})|^2 = 2e^2 v_{F\alpha}^2 \left( 1 - \frac{K_\alpha^2}{M^2 + K^2} \right), \quad (2.47)$$

$$2|j_{\alpha}^{+-}(\mathbf{k})|^2 = \sum_{L>L'} |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k})|^2 = 2e^2 v_{F\alpha}^2 \left( 1 - \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \right), \quad (2.48)$$

za međuvrpane doprinose. Ovdje smo definirali efektivne strujne vršne funkcije  $j_{\alpha}^{+-}(\mathbf{k})$  i  $j_{\alpha}^{-+}(\mathbf{k})$  koje će se pojaviti u izračunu tenzora vodljivosti u idućem poglavlju.  $\gamma_{\alpha\beta}^{LL'}(\mathbf{k}; 2)$  iščezava jer su matrični elementi  $\gamma_{\alpha\beta}^{ll'}(\mathbf{k}; 2)$  jednaki nuli, što je posljedica činjenice da su elementi matrice golog hamiltonijana Diracovog modela (2.21) linearni u  $\mathbf{k}$ .

### 2.3 Struja-dipol Kubo formula u modelu jedne vrpce

U poglavlju 3 ćemo započeti analizu dinamičke vodljivosti koristeći rezultat za tenzor vodljivosti u modelu s više vrpce koji je dobiven analizom kvantnih transportnih jednažbi. U tom izrazu su svi relaksacijski procesi opisani u aproksimaciji relaksacijskih vremena. Izvod tog izraza je vrlo složen ne samo na konačnim temperaturama, već i na  $T = 0 K$ , i on izlazi iz okvira standardnog dodiplomskog gradiva. Mi ćemo ovdje napraviti račun samo unutarvrpčanog doprinosa koristeći standardni RPA pristup na primjeru jedne vrpce s općenitom disperzijom. U toj analizi ćemo se upoznati s dva pojma, struja-dipol i struja-struja korelacijskom funkcijom, te ćemo odrediti vodeće doprinose u obje te funkcije. Na kraju ćemo samo zapisati rezultat za modele s više vrpce.

U drugoj kvantizaciji, vezanje vanjskih skalarnih polja na gustoće naboja može se pisati na način

$$H_1(t) = \sum_{\mathbf{q}} \Phi^{tot}(\mathbf{q}, t) \hat{\rho}(-\mathbf{q}). \quad (2.49)$$

Ovdje je

$$\hat{\rho}(-\mathbf{q}) = (-e) \sum_{L\mathbf{k}} c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{L\mathbf{k}} \equiv \sum_{L\mathbf{k}} \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{L\mathbf{k}} \quad (2.50)$$

operator gustoće naboja, a  $\rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = (-e) \langle L\mathbf{k} + \mathbf{q} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | L\mathbf{k} \rangle$  je pripadna nabojna vršna funkcija. Polje u tom izrazu

$$\Phi^{tot}(\mathbf{q}, t) = \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega) (e^{-i\omega t} e^{\eta t} + c.c.), \quad (2.51)$$

je zasjenjena smetnja čije je uključivanje opisano adijabatskim faktorom  $\exp\{\eta t\}$ .

Nama je cilj odrediti unutarvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti, koji je definiran Ohmovim zakonom. U translacijski invarijantnim sustavima Ohmov zakon ima oblik

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) E_{\beta}(\mathbf{q}, \omega). \quad (2.52)$$

$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$  je Fourierova komponenta inducirane gustoće struja

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{r}, t) = \sum_{L\mathbf{k}} j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \left( |\psi_{L\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{1}{V} \right) f_L(\mathbf{k}). \quad (2.53)$$

Kao što je pokazano u dodatku D, vremenski račun smetnje, gdje je  $H_1$  smetnja a  $\psi(\mathbf{r}, t)$  smetana valna funkcija, vodi u vodećoj aproksimaciji do izraza

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.54)$$

$$\equiv \Pi_{\alpha 0}^{intra(0)}(\mathbf{q}, \omega) \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \quad (2.55)$$

Odzivnu funkciju u ovom izrazu  $\Pi_{\alpha 0}^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$  zovemo gola struja-naboj korelacijska funkcija. Naziv je analogan goljoj RPA dielektričnoj susceptibilnosti  $\Pi_{00}^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$  koju također nazivamo gola naboj-naboj korelacijska funkcija. U ovim izrazima su  $\rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx (-e)$  i  $j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx (-e)v_{\alpha}^L(\mathbf{k})$  nabojne i strujne vršne funkcije.

U dodatku D je pokazano da je veza između  $\rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$  i  $j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$  određena (operatorskom) jednadžbom kontinuiteta. Ako iskoristimo rezultat (D.69) dobivamo

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\hbar}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \frac{|j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} q_{\alpha} \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \quad (2.56)$$

Ako nakon toga iskoristimo i standardnu relaciju za longitudinalna makroskopska elektromagnetska polja  $\mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) = -i\mathbf{q}\Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega)$ , dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i\hbar}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \frac{|j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta}, \quad (2.57)$$

te

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i}{q_\alpha} \Pi_{\alpha 0}^{intra(0)}(\mathbf{q}, \omega). \quad (2.58)$$

Pojam koji je blisko vezan s dvije vršne funkcije u  $\Pi_{\alpha 0}(\mathbf{q}, \omega)$  je dipolna vršna funkcija  $P_\alpha^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ . Iz operatorske forme klasičnoelektrodinamičke relacije  $\rho(\mathbf{q}, \omega) = -i\mathbf{q} \cdot \mathbf{P}(\mathbf{q}, \omega)$  slijedi

$$P_\alpha^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = -\frac{i}{q_\alpha} \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}). \quad (2.59)$$

Dakle, gornji izraz možemo zapisati i u formi

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} j_\alpha^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} P_\alpha^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}). \quad (2.60)$$

Ovaj izraz predstavlja голу struja-dipol korelacijsku funkciju. On predstavlja vodeći član u struja-dipol Kubo formuli za dinamičku vodljivost.

## 2.4 Kubo formula za dinamičku vodljivost

U svom udžbeniku[5], Kubo pod pojmom Kubo formula podrazumijeva struja-struja Kubo formulu. U udžbenicima ona se obično izvodi za model slobodnih elektrona. Mi ćemo je ovdje reizvesti u općenitom unutarvrpčanom modelu. Račun je trivijalan. U njemu izraz

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})} \cdot \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_L(\mathbf{k}) + i\eta} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega + i\eta} \left( \frac{1}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})} + \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_L(\mathbf{k}) + i\eta} \right) \end{aligned} \quad (2.61)$$

prikazujemo preko parcijalnih razlomaka. Rezultat je

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \frac{i}{\omega + i\eta} \left[ \Pi_{\alpha\alpha}^{intra(0)}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{e^2}{m} n_{\alpha\alpha}^{intra(0)}(\mathbf{q} \approx 0) \right]. \quad (2.62)$$

Ovdje je  $n_{\alpha\alpha}^{intra(0)}(\mathbf{q} \approx 0)$  efektivna koncentracija nositelja naboja koju ćemo detaljnije raspraviti u sljedećem poglavlju. Ona se podudara sa koncentracijom elektrona samo



u modelu slobodnih elektrona. Kao što ćemo vidjeti kasnije, u Diracovim polumetalima to nije slučaj.

## 2.5 Modeli s više vrpce

Generalni izraz za tenzor vodljivosti u sustavima s više vrpce u aproksimaciji relaksacijskog vremena može se dobiti ako dodamo sumaciju po različitim vrpce s indeksima  $L$  i  $L'$ , te napravimo zamjenu  $\eta \rightarrow \hbar\Gamma^{LL'}$ .

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{LL'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2}{\epsilon_{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\hbar\Gamma^{LL'}}. \quad (2.63)$$

Ovdje  $\Gamma^{LL'}$  predstavlja mjeru relaksacije za par vrpce  $L$  i  $L'$ .

### 3 Tenzor vodljivosti u Diracovim polumetalima

#### 3.1 Tenzor vodljivosti

Kao što je spomenuto u potpoglavlju 2.5, tenzor vodljivosti u sustavima s više vrpce može se u aproksimaciji relaksacijskih vremena pisati na način

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{LL'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{i\hbar |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})|^2}{\epsilon_{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_{L'L}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\hbar\Gamma^{LL'}}. \quad (3.64)$$

U ovom izrazu,  $f_L(\mathbf{k})$  predstavlja Fermi-Diracovu funkciju raspodjele,  $\Gamma^{LL'}$  je mjera relaksacije, a  $\epsilon_{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{L'}(\mathbf{k})$  je energija elektron-šupljina para.

Kao što smo se uvjerali u potpoglavlju 2.1, naš sustav ima dva para vrpce degeneriranih u energiji,  $\epsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = \sqrt{M^2 + K^2}$  i  $\epsilon_{3,4}(\mathbf{k}) = -\sqrt{M^2 + K^2}$ . U Diracovim polumetalima u modelu koji promatramo nema sume  $\sum_{\sigma}$  u izrazu (3.64). Strujni verteksi su dani izrazima (2.45-2.48), a njihov račun je detaljno objašnjen u dodatku C.

Račun tenzora vodljivosti ćemo provesti u dva dijela, računajući prvo unutarvrpčani doprinos ( $L = L'$ ), te nakon toga međuvrpčani doprinos ( $L \neq L'$ ), odnosno

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega) = \sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q}, \omega) + \sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q}, \omega). \quad (3.65)$$

Budući da  $\sigma_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, \omega)$  predstavlja odzivnu funkciju koja opisuje odziv sustava na makroskopska polja  $\mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega)$ , gdje je  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ , račun ćemo provesti u dugovalnoj aproksimaciji. Također ćemo pretpostaviti da je mjera relaksacije jednaka za sve unutarvrpčane doprinose ( $\Gamma^{LL} = \Gamma_1$ ) i jednaka za sve međuvrpčane doprinose ( $\Gamma^{LL'} = \Gamma_2$ ).

#### 3.2 Unutarvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti

Unutarvrpčani doprinos

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_L \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})|^2}{\epsilon_{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\hbar\Gamma_1}, \quad (3.66)$$

u dugovalnoj aproksimaciji postaje

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q}, \omega) \approx \sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega) = \sum_L \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k})|^2}{\hbar\omega + i\hbar\Gamma_1} \left( -\frac{\partial f_L(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_L(\mathbf{k})} \right). \quad (3.67)$$

Ovdje smo funkciju raspodjele  $f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})$  razvili u Taylorov red po  $\mathbf{q}$  oko  $\mathbf{k}$ , te uzeli u obzir da je  $\epsilon_{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$  zanemarivo mali. Primijetimo također da strujne vršne funkcije nemaju ovisnost o  $\mathbf{q}$ . Ako definiramo efektivnu koncentraciju nositelja naboja na način

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \frac{m |j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k})|^2}{e^2} \left( -\frac{\partial f_L(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_L(\mathbf{k})} \right), \quad (3.68)$$

unutarvrpčani doprinos možemo zapisati u obliku

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{e^2}{m} \frac{i\hbar}{\hbar\omega + i\hbar\Gamma_1} n_{\alpha\alpha}^{intra}. \quad (3.69)$$

Kao što smo već govorili u potpoglavlju 1.2, u aproksimaciji Diracovog konusa donja vrpca nema dna i gornja vrpca nema vrha. To znači da da bismo mogli primijeniti alternativnu definicijsku relaciju za  $n_{\alpha\alpha}^{intra}$  za naš 3D Diracov model moramo doprinos donje dvije vrpce zapisati u slici šupljina. Izraz (3.68) je dobro definiran i za donje dvije vrpce jer integral uključuje samo struje u termalnom prozoru oko Fermijeve energije. U računima koji slijede koristimo uglavnom relaciju (3.68). Alternativna forma za  $n_{\alpha\alpha}^{intra}$  je raspravljena u potpoglavlju 3.6 gdje gledamo njenu vezu s koncentracijom naboja  $n$ .

### 3.3 Unutarvrpčani doprinos u dopiranom režimu

Zbog jednostavnosti ćemo promatrati "jako" dopirani slučaj kod dopiranja šupljina. U skladu s informacijama danim u uvodu uvodnog poglavlja to odgovara koncentracijama  $n \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , što je otprilike dopiranje reda jednog promila. Naziv "jako" je ovdje odraz činjenice da je Fermijeva energija  $\sqrt{K_F^2 + M^2}$  reda ili veća od 0.1 eV.

Dopiranje šupljinama pomiče Fermijev nivo od energije Diracove točke prema dvije vrpce niže energije. U tom slučaju možemo zanemariti doprinose gornje dvije

vrpce. Efektivna koncentracija nositelja je tada

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{m|j_{\alpha}^{33}(\mathbf{k})|^2}{e^2} \left( -\frac{\partial f_3(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_3(\mathbf{k})} \right). \quad (3.70)$$

Prelazeći na integral dobivamo izraz

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{v_{Fx}v_{Fy}v_{Fz}} \int dK_x dK_y dK_z \frac{m|j_{\alpha}^{33}(\mathbf{k})|^2}{e^2} \left( -\frac{\partial f_3(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_3(\mathbf{k})} \right). \quad (3.71)$$

Unutarvrpčane strujne vršne funkcije su izračunate u dodatku C. One su jednake grupnim brzinama pomnoženim s nabojem elektrona ( $-e$ ). Dakle,

$$|j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k})|^2 = e^2 v_{F\alpha}^2 \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2}. \quad (3.72)$$

Uvrštavajući taj kvadrat verteksa u integral, uz oznaku  $\bar{v}_F^3 = v_{Fx}v_{Fy}v_{Fz}$ , dobivamo

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3} \frac{v_{F\alpha}^2}{\bar{v}_F^3} \int dK_x dK_y dK_z \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \left( -\frac{\partial f_3(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_3(\mathbf{k})} \right). \quad (3.73)$$

Iako imamo anizotropiju u Fermijevim brzinama, disperzije  $\epsilon_L(\mathbf{k})$  prikazane u  $K$  prostoru imaju sfernu simetriju, što nam omogućava da pišemo

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3} \frac{v_{F\alpha}^2}{\bar{v}_F^3} \int d\Omega \int K^2 dK \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \left( -\frac{\partial f_3(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_3(\mathbf{k})} \right). \quad (3.74)$$

Jedino faktor  $K_{\alpha}^2$  ima ovisnost o  $\Omega$ . Kutni dio integrala lako izvrijednimo

$$\int d\Omega K_{\alpha}^2 = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \int d\Omega K_{\alpha}^2 = \frac{4\pi K^2}{3}. \quad (3.75)$$

Na kraju preostaje radijalni dio integrala

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{8\pi}{3} \frac{m}{(2\pi\hbar)^3} \frac{v_{F\alpha}^2}{\bar{v}_F^3} \int_0^{K_{c.o.}} K^2 dK \frac{K^2}{M^2 + K^2} \left( -\frac{\partial f_3(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_3(\mathbf{k})} \right), \quad (3.76)$$

u kojem je  $K_{c.o.}$  gornja granica takva da je  $K_{c.o.} \gg K_F$ . Realni dio unutarvrpčane vodljivosti se sada lako izračuna,

$$\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}\} = \frac{e^2}{m} \frac{\Gamma_1}{\omega^2 + \Gamma_1^2} n_{\alpha\alpha}^{intra}. \quad (3.77)$$

U (3.73) smo uveli kraticu  $\bar{v}_F$  koja zapravo predstavlja prosječnu Fermijevu brzinu našeg anizotropnog problema. U izotropnoj granici je  $v_{F\alpha} = \bar{v}_F$ , pa je ovisnost o Fermijevim brzinama u (3.77) u tom slučaju  $1/\bar{v}_F$ , te  $v_{F\alpha}^2/\bar{v}_F^3$  u općem slučaju.

### 3.4 Međuvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti

Međuvrpčani doprinos možemo napisati kao

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{L \neq L'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})|^2}{\epsilon_{L'L}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\hbar\Gamma_2}. \quad (3.78)$$

U dugovalnoj aproksimaciji ovaj izraz prelazi u

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{L \neq L'} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k})|^2}{-2\epsilon_L(\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\epsilon_L(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2}. \quad (3.79)$$

U dodatku C pokazali smo da međuvrpčane strujne vršne funkcije između vrpce degeneriranih u energiji iščezavaju. Sumi stoga pridonose samo parovi  $LL' = 13, 14, 24, 34$  i odgovarajuće permutacije. Ako primijetimo da je faktor

$$\frac{i\hbar}{-2\epsilon_L(\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_{L'}(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\epsilon_L(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2}$$

jednak za sve parove  $L < L'$  i analogno jednak za sve parove  $L > L'$ , možemo vodljivost napisati na način

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\mathbf{q}, \omega) \approx \sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{i\hbar}{-2\epsilon_1(\mathbf{k})} \frac{f_1(\mathbf{k}) - f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\epsilon_1(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\} \sum_{L < L'} |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k})|^2 \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{i\hbar}{-2\epsilon_3(\mathbf{k})} \frac{f_3(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\epsilon_3(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\} \sum_{L > L'} |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k})|^2. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Sume

$$2|j_{\alpha}^{-+}(\mathbf{k})|^2 = \sum_{L < L'} |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k})|^2 = 2e^2 v_{F\alpha}^2 \left( 1 - \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \right), \quad (3.81)$$

$$2|j_{\alpha}^{+-}(\mathbf{k})|^2 = \sum_{L > L'} |j_{\alpha}^{LL'}(\mathbf{k})|^2 = 2e^2 v_{F\alpha}^2 \left( 1 - \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \right) \quad (3.82)$$

su efektivne strujne vršne funkcije i izračunate su u dodatku C. Na kraju dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{i\hbar |j_{\alpha}^{-+}(\mathbf{k})|^2}{2\epsilon_1(\mathbf{k})} \left\{ \frac{f_3(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\epsilon_1(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_3(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2\epsilon_1(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\}. \quad (3.83)$$

### 3.5 Međuvrpčani doprinos u dopiranom režimu

Promotrimo ponovno dopiranje šupljina. Kako se Fermijev nivo pomiče prema vrpcama niže energije, možemo staviti  $f_{1,2}(\mathbf{k}) = 0$ . Prelaskom na integral izraz se sveđe na

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\bar{v}_F^3} \int dK_x dK_y dK_z \frac{i\hbar}{2\epsilon_1(\mathbf{k})} e^2 v_{F\alpha}^2 \left( 1 - \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \right) \times \left\{ \frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\epsilon_1(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2\epsilon_1(\mathbf{k}) + i\hbar\Gamma_2} \right\}. \quad (3.84)$$

U sfernom  $\mathbf{K}$  koordinatnom sustavu dobivamo

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(ev_{F\alpha})^2}{\bar{v}_F^3} \int d\Omega \int K^2 dK \frac{1}{\sqrt{M^2 + K^2}} \left( 1 - \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \right) \times \left\{ \frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\sqrt{M^2 + K^2} + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2\sqrt{M^2 + K^2} + i\hbar\Gamma_2} \right\}. \quad (3.85)$$

Kutni dio integracije sada daje

$$\int d\Omega \left( 1 - \frac{K_{\alpha}^2}{M^2 + K^2} \right) = \frac{4\pi}{3} \left( 3 - \frac{K^2}{M^2 + K^2} \right) = \frac{4\pi}{3} \left( 2 + \frac{M^2}{M^2 + K^2} \right). \quad (3.86)$$

Konačno, izraz za međuvrpčanu vodljivost možemo napisati u obliku

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega) = \frac{ie^2}{6\pi^2\hbar^2} \frac{v_{F\alpha}^2}{\bar{v}_F^3} \int dK \frac{K^2}{\sqrt{M^2 + K^2}} \left( 2 + \frac{M^2}{M^2 + K^2} \right) \times \left\{ \frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega + 2\sqrt{M^2 + K^2} + i\hbar\Gamma_2} + \frac{f_3(\mathbf{k})}{\hbar\omega - 2\sqrt{M^2 + K^2} + i\hbar\Gamma_2} \right\}, \quad (3.87)$$

a realni dio je

$$\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}\} = \frac{e^2}{6\pi^2\hbar^2} \frac{v_{F\alpha}^2}{\bar{v}_F^3} \int_0^{K_{c.o.}} dK \frac{K^2}{\sqrt{M^2 + K^2}} \left( 2 + \frac{M^2}{M^2 + K^2} \right) \times \left\{ \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - 2\sqrt{M^2 + K^2})^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} + \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + 2\sqrt{M^2 + K^2})^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} \right\} f_3(\mathbf{k}). \quad (3.88)$$

### 3.6 Koncentracija nositelja naboja i kemijski potencijal

Vratimo se na izraz (3.66). Iz njega slijedi da je

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} m [v_{\alpha}^L(\mathbf{k})]^2 \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})}, \quad (3.89)$$

što nakon razvoja po malom  $\mathbf{q}$  daje (3.68). Tu je  $v_{\alpha}^L(\mathbf{k}) = j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k})/e = \partial\epsilon(\mathbf{k})/\partial p_{\alpha}$  grupna brzina elektrona. Vidimo da ovaj izraz možemo također zapisati na način

$$\begin{aligned} n_{\alpha\alpha}^{intra} &= \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} m v_{\alpha}^L(\mathbf{k}) \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar q_{\alpha}} \\ &\equiv \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} m (v_{\alpha}^L(\mathbf{k}) - v_{\alpha}^L(\mathbf{k} - \mathbf{q})) \frac{f_L(\mathbf{k})}{\hbar q_{\alpha}} \\ &\equiv \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \gamma_{\alpha\alpha}^{LL}(\mathbf{k}) f_L(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (3.90)$$

gdje je

$$\frac{\gamma_{\alpha\alpha}^{LL}(\mathbf{k})}{m} = \frac{\partial^2 \epsilon_L(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha}^2} \quad (3.91)$$

tenzor recipročne efektivne mase koji smo susreli ranije u potpoglavlju 1.2.

Da bismo zadnji izraz u (3.90) mogli primijeniti i na disperzije dobivene u aproksimaciji Diracovog konusa, potrebno je šupljine u donjim vrpcama prikazati u slici šupljina. To vodi do

$$n_{\alpha\alpha}^{intra} = \frac{1}{V} \sum_{L=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\alpha\alpha}^{LL}(\mathbf{k}) f(\epsilon_L(\mathbf{k})) + \frac{1}{V} \sum_{L=3,4} \sum_{\mathbf{k}} (-\gamma_{\alpha\alpha}^{LL}(\mathbf{k})) f(-\epsilon_L(\mathbf{k})). \quad (3.92)$$

Ta dekompozicija je još važnija kada računamo ukupnu koncentraciju nositelja naboja. Ona se dobije ako se u izraz (3.92) uvrsti  $\gamma_{\alpha\alpha}^{LL} = 1$  za  $L = 1, 2$  i  $\gamma_{\alpha\alpha}^{LL} = -1$  za  $L = 3, 4$ . Dakle, za proizvoljnu razinu dopiranja dobivamo

$$n(T) = \frac{1}{V} \sum_{L=1,2} \sum_{\mathbf{k}} f(\epsilon_L(\mathbf{k})) + \frac{1}{V} \sum_{L=3,4} \sum_{\mathbf{k}} f(-\epsilon_L(\mathbf{k})) \equiv n_h + n_e. \quad (3.93)$$

Na primjer, u slučaju dopiranja šupljinama, dobivamo koncentraciju nositelja naboja

na temperaturi  $T = 0 K$

$$n_0 = n_h = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \theta(K_F - K). \quad (3.94)$$

Prelaskom na integral u sfernom  $K$  prostoru dobivamo

$$n_0 = n_h^0 = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \frac{K_F^3}{v_F^3}. \quad (3.95)$$

Ovdje treba primijetiti da je  $T = 0 K$  koncentracija funkcija pomoćne Fermijeve energije  $K_F$ , a ne Fermijeve energije  $\epsilon_F = -\sqrt{K_F^2 + M^2}$ . Cijela numerička analiza koja slijedi vezana je za sustave kao što su  $\text{TlBi}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_2$ , u kojima se dopiranje vrpce ostvaruje kemijskim putem (udio Tl i Bi iona nije egzaktno jednak 50:50). To znači da je za bilo koliki  $K_F$  koncentracija  $n$  neovisna o temperaturi. Dakle u računima koji slijede, temperaturnu ovisnost kemijskog potencijala  $\mu(T)$  određujemo iz standardne relacije

$$n(T) = n(T = 0) \equiv n_0. \quad (3.96)$$

Dio računa možemo lako provesti koristeći analogiju s poluvodičkom fizikom razmatranom na dodiplomskim kolegijima, gdje gustoća stanja elektrona i šupljina ima važnu ulogu. Bez ikakva gubitka na općenitosti možemo pisati ukupnu koncentraciju nositelja naboja (elektrona i šupljina) na proizvoljnoj temperaturi na način

$$n_e = \int_M^\infty g_1(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (3.97)$$

$$n_h = \int_{-\infty}^{-M} g_3(\epsilon) (1 - f(\epsilon)) d\epsilon, \quad (3.98)$$

gdje su  $g_1(\epsilon)$  i  $g_3(\epsilon)$  gustoće stanja elektrona i šupljina u gornjim i donjim vrpcama.

Da bismo te izraze mogli koristiti u izrazima koji slijede, preostaje nam odrediti gustoću stanja u anizotropnom Diracovom 3D modelu. Gustoća stanja je definirana na način

$$g(\epsilon) = g_1(\epsilon) + g_3(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_L(\mathbf{k})). \quad (3.99)$$



Budući da znamo disperzije energije (2.29), integriranjem dobivamo

$$g_1(\epsilon) = g_3(\epsilon) = \frac{|\epsilon| \sqrt{\epsilon^2 - M^2}}{\pi^2 \hbar^3 v_F^3}. \quad (3.100)$$

U računima koji slijede za svaku temperaturu određujemo kemijski potencijal u Fermi-Diracovoj distribuciji pomoću relacije  $n_e + n_h \approx n(T) = n_0$ . Vidjet ćemo da nam je samo važno koliki je  $\mu(T)$ , a ne i informacija koliki su  $n_e(T)$  i  $n_h(T)$  za svaku pojedinu temperaturu.

## 4 Rezultati i usporedba s eksperimentima

### 4.1 Relativna i apsolutna skala za dinamičku vodljivost

Kako bismo prikaz rezultata pojednostavnili, uvest ćemo pomoćnu skalu  $\sigma^0$  na način

$$\sigma^0 = \frac{\hbar e^2}{mV_0 (1\text{eV})}. \quad (4.101)$$

Veličina  $V_0$  je pomoćna veličina povezana s volumenom primitivne ćelije. Zgodno je izabrati  $V_0 = 100 \text{ \AA}^3$ . Tada je

$$\sigma^0 \approx 1.85 \cdot 10^3 (\Omega \text{ cm})^{-1}. \quad (4.102)$$

Izraze (3.77) i (3.88) sada možemo zapisati na način

$$\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}\} = \sigma^0 \frac{\Gamma_1 (1\text{eV})}{\hbar\omega^2 + \hbar\Gamma_1^2} \frac{mV_0 v_{F\alpha}^2}{3\pi^2 \hbar^3 \bar{v}_F^3} \int_0^{K_{c.o.}} dK \frac{K^4}{M^2 + K^2} \left( -\frac{\partial f_3(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_3(\mathbf{k})} \right), \quad (4.103)$$

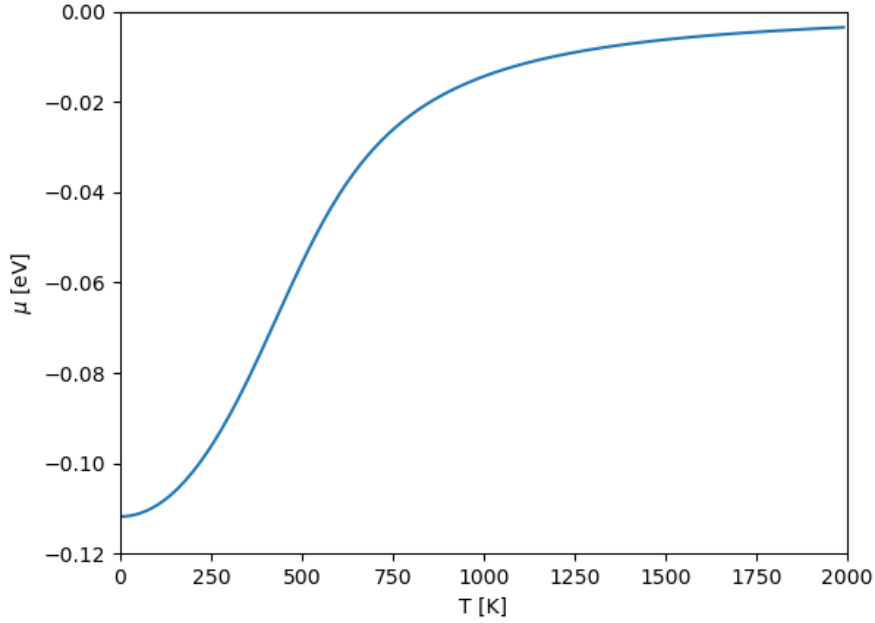
$$\begin{aligned} \text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}\} &= \sigma^0 (1\text{eV}) \frac{mV_0 v_{F\alpha}^2}{6\pi^2 \hbar^3 \bar{v}_F^3} \int_0^{K_{c.o.}} dK \frac{K^2}{\sqrt{M^2 + K^2}} \left( 2 + \frac{M^2}{M^2 + K^2} \right) \\ &\times \left\{ \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - 2\sqrt{M^2 + K^2})^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} + \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + 2\sqrt{M^2 + K^2})^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} \right\} f_3(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (4.104)$$

U numeričkim računima ćemo zbog jednostavnosti koristiti pretpostavku izotropnosti. U tom slučaju je  $v_{F\alpha} = \bar{v}_F$ .  $\bar{v}_F = 6 \cdot 10^5 \text{ m/s}$  predstavlja tipičnu vrijednost Fermijeve brzine za Diracove 3D sustave. Na zadnje tri slike promatramo i efekte anizotropnosti u slučaju anizotropije s obzirom na os  $z$ . Tu pretpostavljamo,  $\bar{v}_F = 5 \cdot 10^5 \text{ m/s}$  i  $v_{Fx} = v_{Fy} = 6 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ .

### 4.2 Numerička integracija - račun kemijskog potencijala

Struktura integrala (4.103) i (4.104) je takva da je zgodno uvesti supstituciju  $X = 2\sqrt{M^2 + K^2}$ . Ti izrazi sada postaju

$$\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}\} = \sigma^0 \frac{\Gamma_1 (1\text{eV})}{\hbar\omega^2 + \hbar\Gamma_1^2} \frac{mV_0 v_{F\alpha}^2}{3\pi^2 \hbar^3 \bar{v}_F^3} \int_{2M}^{X_{c.o.}} dX \frac{(X^2/4 - M^2)^{3/2}}{X} \left( -\frac{\partial f_3(X)}{\partial \epsilon_3(X)} \right), \quad (4.105)$$



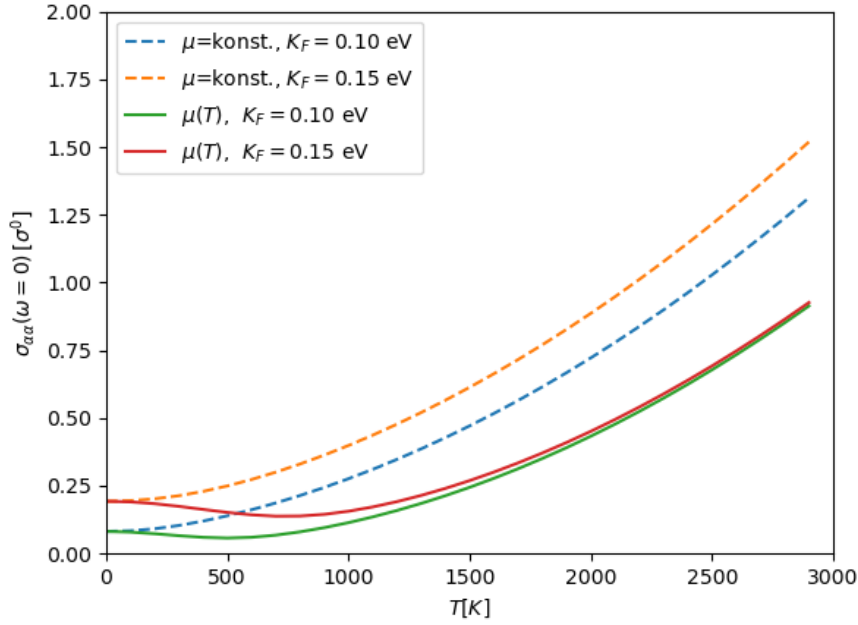
Slika 4.6: Ovisnost kemijskog potencijala o temperaturi za slučaj dopiranja šupljina. Ovdje je  $M = 0.05$  eV,  $\bar{v}_F = 6 \cdot 10^5$  m/s, i  $\mu(T = 0) \approx -0.112$  eV, te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .

$$\begin{aligned} \text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}\} &= \sigma^0 (1\text{eV}) \frac{mV_0 v_{F\alpha}^2}{12\pi^2 \hbar^3 \bar{v}_F^3} \int_{2M}^{X_{c.o.}} dX \sqrt{X^2 - 4M^2} \left(1 + \frac{2M^2}{X^2}\right) \\ &\quad \times \left\{ \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} + \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} \right\} f_3(X). \end{aligned} \quad (4.106)$$

U rješavanju integrala koristimo Python biblioteku Scipy[7], odnosno funkciju *quad*. Pri integriranju je potrebno pratiti točke u kojima podintegralna funkcija poprima najviše vrijednosti kako bi izbjegli zanemarivanje takvih uskih područja zbog postupka numeričke integracije. Temperatura ulazi u izraze za vodljivost kroz kemijski potencijal u Fermi-Diracovim funkcijama. Kako bi  $\mu(T)$  dobili za svaku temperaturu, potrebno je i numeričko rješavanje jednadžbe (3.96). U tu svrhu koristimo funkciju *fsolve*.

Prvo ćemo ukratko prokomentirati pojednostavljenje koje smo učinili u (3.76), gdje smo zanemarili doprinose gornje dvije vrpce. Ovisnost kemijskog potencijala o temperaturi u tipičnom režimu prikazana je na slici 4.6 u slučaju  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ , u području temperatura od  $0K$  do  $2000K$ . Na gornjoj granici,  $T = 2000K$ , temperatura  $k_B T$  je otprilike za faktor 2 veća od  $|\mu(T = 0)|$ . Za visoke temperature kemijski potencijal se približava nuli, te aproksimacija u (3.76) više nije dobra.

Nedostatak aproksimacije (3.76) možemo također ilustrirati tako da prikažemo



Slika 4.7: Ovisnost Drudeove vodljivosti o temperaturi za slučaj dopiranja šupljina. Ovdje je  $M = 0.05$  eV,  $\bar{v}_F = 6 \cdot 10^5$  m/s, i  $\mu(T = 0) = -\sqrt{M^2 + K_F^2}$ , te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .

dc dio unutarvrpčane vodljivosti (3.77) kao funkciju temperature u području gdje je gornja granica  $k_B T$  puno veća od  $\mu(T = 0)$ . Utjecaj promjene kemijskog potencijala na  $\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(0)\}$  je prikazan na slici 4.7 za dvije različite vrijednosti dopiranja  $K_F$  za dva različita režima. Vodljivost u slučaju konstantnog kemijskog potencijala monotonno raste, dok u slučaju mijenjajućeg kemijskog potencijala neko vrijeme pada dok ne postigne minimum, a zatim raste. Kao što smo već ranije spominjali, mi ćemo promatrati slučaj kemijskog dopiranja, gdje je  $n(T) = n_0$ , za temperature  $T < 300K$ . Ponašanje  $n_{\alpha\alpha}^{intra}$  s promjenom temperature slijedi pune linije na slici 4.7 u dijelu od  $T = 0K$  do  $200K$ .

Skripta s primjerom određivanja funkcije  $\mu(T)$  i računa  $\sigma_{\alpha\alpha}^{dc}$  se nalazi u dodatku E.

### 4.3 $T=0$ K slučaj

Integrale (4.105) i (4.106) možemo dodatno pojednostavniti kad je temperatura jednaka nuli. U tom slučaju je  $f_3(\mathbf{k}) = \theta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F)$  i  $(-\partial f_3(\mathbf{k})/\partial \epsilon_3(\mathbf{k})) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F)$ , pa

dobivamo

$$\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}\} = \sigma^0 \frac{\Gamma_1 (1\text{eV})}{\hbar\omega^2 + \hbar\Gamma_1^2} \frac{mV_0 v_{F\alpha}^2}{3\pi^2 \hbar^3 \bar{v}_F^3} \frac{K_F^3}{\sqrt{M^2 + K_F^2}}, \quad (4.107)$$

$$\begin{aligned} \text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}\} = \sigma^0 (1\text{eV}) & \frac{mV_0 v_{F\alpha}^2}{12\pi^2 \hbar^3 \bar{v}_F^3} \int_{2E_F}^{X_{c.o.}} dX \sqrt{X^2 - 4M^2} \left(1 + \frac{2M^2}{X^2}\right) \\ & \times \left\{ \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega - X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} + \frac{\hbar\Gamma_2}{(\hbar\omega + X)^2 + (\hbar\Gamma_2)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (4.108)$$

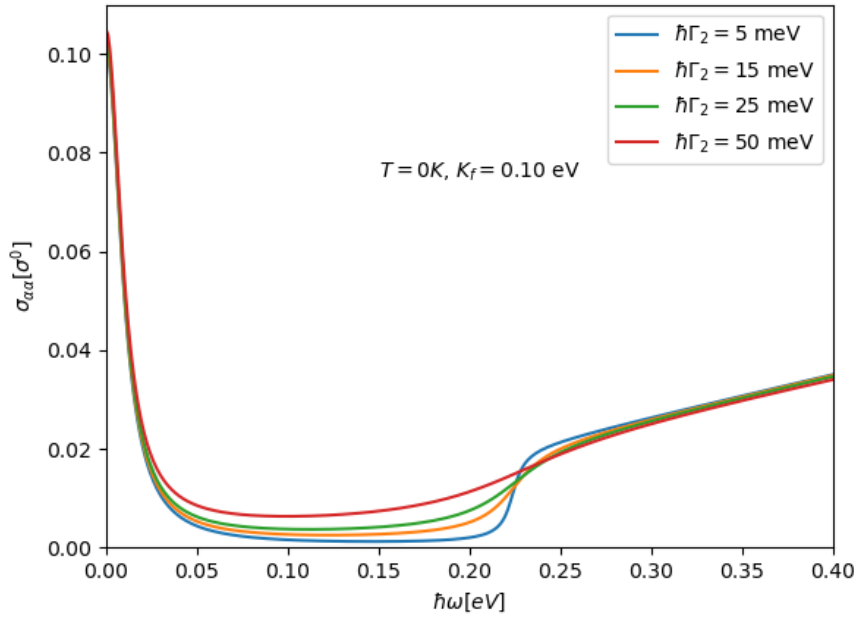
Realni dio ukupne vodljivosti prikazan je na slici 4.8 za parametre  $K_F = 0.1$  eV,  $M = 0.05$  eV, te  $\hbar\Gamma_1 = 10$  meV. Isti račun je proveden za međuvrščanu vodljivost na slici 4.9, te za ukupni doprinos za male  $\hbar\omega$  na slici 4.10. Unutarvrščani doprinos je dominantan za energije do  $\hbar\omega \approx 20$  meV (to odgovara približno energiji  $2\hbar\Gamma_1$ ), nakon čega naglo opada. Međuvrščani i unutarvrščani doprinosi za vrijednosti energije od  $\hbar\omega \approx 20$  meV do  $\hbar\omega \approx 200$  meV su jednako važni. Za  $\omega > X_F = 2\sqrt{K_F^2 + M^2}$  se može vidjeti nagli porast međuvrščane i ukupne vodljivosti, koji je posljedica porasta energije gušenja  $\hbar\Gamma_2$  u lorencijanu u izrazu (4.108). Naravna stvar, parametar koji opisuje taj efekt je  $\hbar\Gamma_2/2E_F$  gdje je  $2E_F$  energija praga za realna međuvrščana pobuđenja elektron-šupljina parova. Povećavanjem mjere relaksacije  $\hbar\Gamma_2$  se maksimum u  $\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)$  pri  $\hbar\omega \approx 2E_F$  spušta i širi te je ovaj prag manje izražen.

Zbog preglednosti je na slici 4.10 prikazana ukupna vodljivost na logaritamskoj skali za male vrijednosti  $\omega$ . Jasno se vidi porast Drudeove vodljivosti za veće parametre  $\hbar\Gamma_2$ . Taj efekt se jasno vidi i na slici 4.9. Udio međuvrščanog kanala dc vodljivosti nije nula, ali je vrlo mali. Za  $\hbar\Gamma_2 = 50$  meV, on iznosi oko 5%.

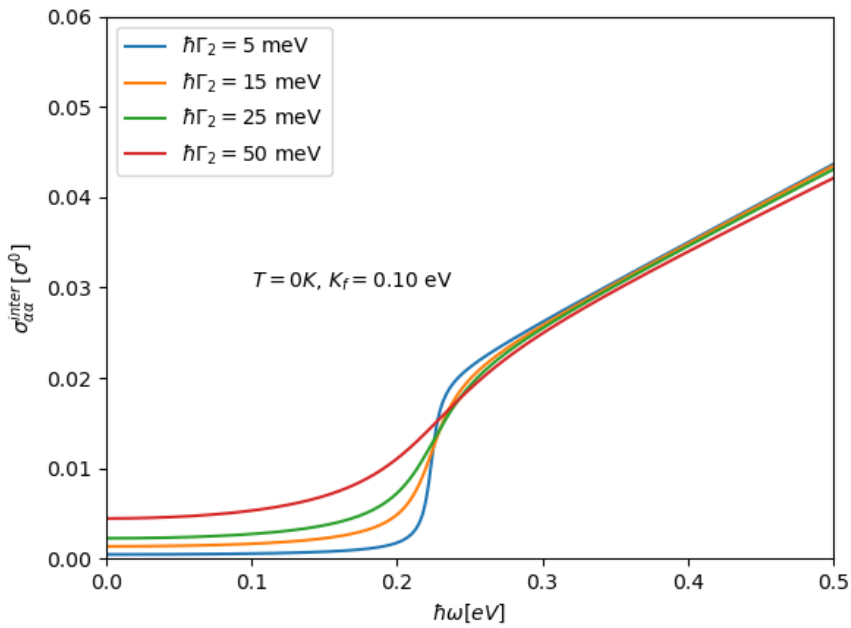
#### 4.4 Konačne temperature

Isti račun je ponovljen za konačne temperature. Ukupni rezultat je prikazan na slici 4.11, a međuvrščani doprinos na slici 4.12. Pritom smo rezultate prikazali za vrijednost parametra  $\hbar\Gamma_2 = 15$  meV, dok su ostali parametri isti kao prije. Izgled optičke vodljivosti se dobro slaže s provedenim mjerenjima koji su prikazani na slici 1.1.

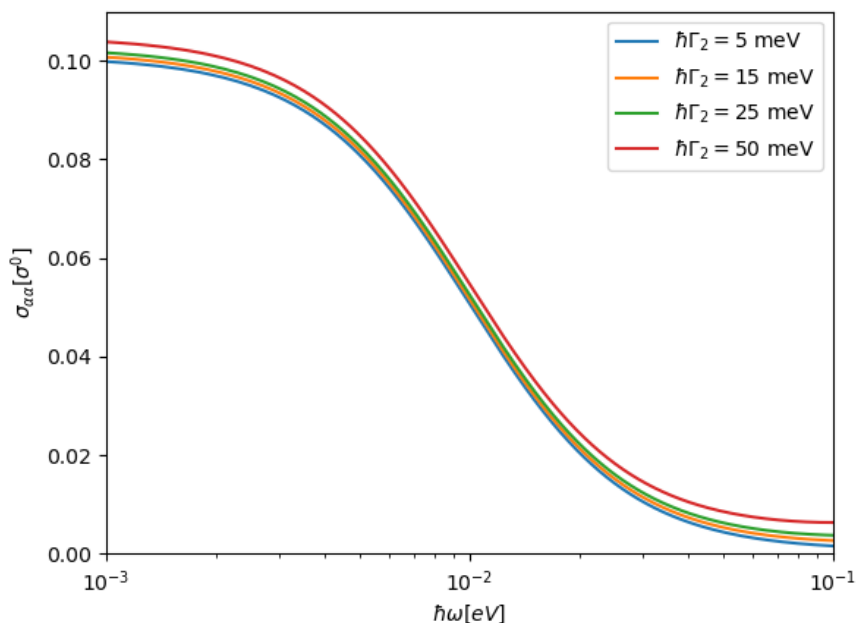
Za međuvrščani doprinos vidimo slično ponašanje krivulje kao na slici 4.8 uz nešto manje naglašen prag, koji se smanjuje s porastom temperature, slično kao što se



Slika 4.8: Ukupna vodljivost za različite vrijednosti parametra  $\hbar\Gamma_2$  i pri  $T = 0$ . Ovdje je  $M = 0.05$  eV,  $\bar{v}_F = 6 \cdot 10^5$  m/s,  $\mu(T = 0) \approx -0.112$  eV, i  $\hbar\Gamma_1 = 10$  meV, te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .



Slika 4.9: Međuvrpnčana vodljivost za različite vrijednosti parametra  $\hbar\Gamma_2$  i pri  $T = 0$ . Ovdje je  $M = 0.05$  eV,  $\bar{v}_F = 6 \cdot 10^5$  m/s,  $\mu(T = 0) \approx -0.112$  eV, i  $\hbar\Gamma_1 = 10$  meV, te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .



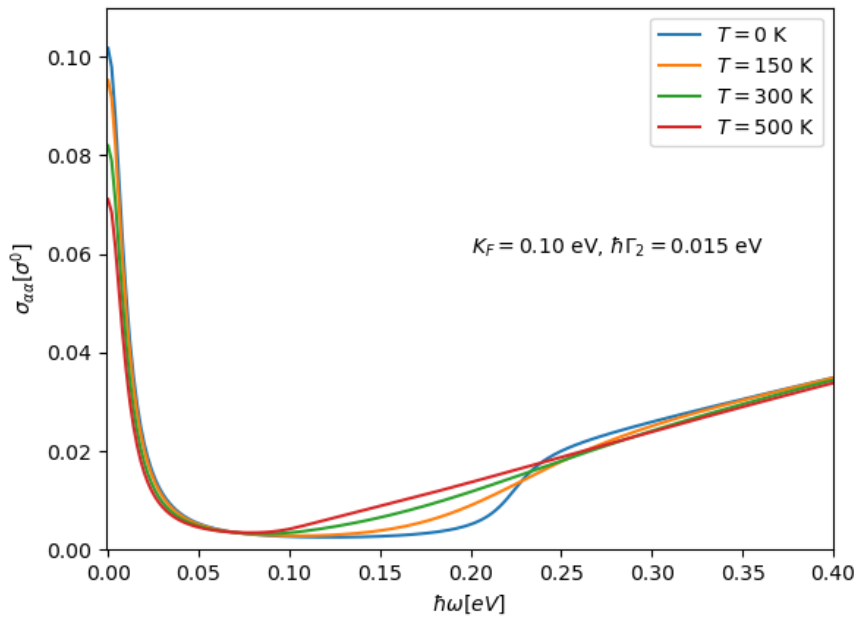
Slika 4.10: Ukupna vodljivost za različite vrijednosti parametra  $\hbar\Gamma_2$  i pri  $T = 0$ , prikazana na logaritamskoj skali. Na slici su prikazani rezultati za male vrijednosti  $\omega$ . Ovdje je  $M = 0.05$  eV,  $\bar{v}_F = 6 \cdot 10^5$  m/s,  $\mu(T = 0) \approx -0.112$  eV, i  $\hbar\Gamma_1 = 10$  meV, te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .

u slučaju  $T = 0$  smanjuje s porastom  $\hbar\Gamma_2$ . Razlog tome je Fermi-Diracova funkcija koja pojačava efekt širine lorencijana u izrazu (4.106) s porastom temperature. Na slici se također može vidjeti sličan pad međuvrpčane vodljivosti za više temperature kakav je naznačen na slici 1.1.

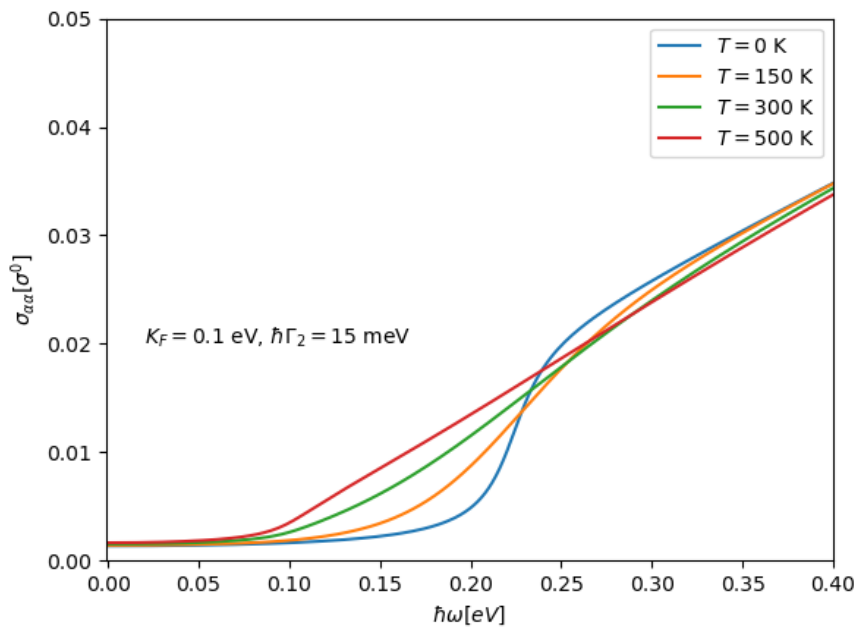
Dalje smo promatrali koliko se razlikuju doprinosi od povećanja temperature u odnosu na povećanje  $\hbar\Gamma_2$ . U tu svrhu su na slici 4.13 prikazana dva para izračuna međuvrpčane vodljivosti, od kojih u svakom paru uspoređujemo sustave s jednakim  $k_B T + \hbar\Gamma_2$ . U svakom od dva para je uspoređen izračun za  $T = 0$  (isprekidana linija) i  $T > 0$ . Ovdje su ostali parametri i dalje jednaki kao prije.

Slično, možemo promatrati i međuvrpčani doprinos za sustave koji imaju konstantni  $k_B T + \hbar\Gamma_2$ , za postupna povećanja temperature  $T$  i smanjivanje mjere relaksacije  $\hbar\Gamma_2$ , kao što je napravljeno na slici 4.14.

Slika 4.14 pokazuje da je moguće napraviti usporedbu mjerenja dinamičke vodljivosti na čistim i na prljavim uzorcima na način da se usporede temperaturne ovisnosti na energijama praga za međuvrpčane prijelaze, gdje je  $k_B T + \hbar\Gamma_2$  relevantna skala koja snižava intenzitet maksimuma na  $\hbar\omega \approx 2E_F$ , s  $\omega \approx 0$  dijelom spektra koji ne ovisi o

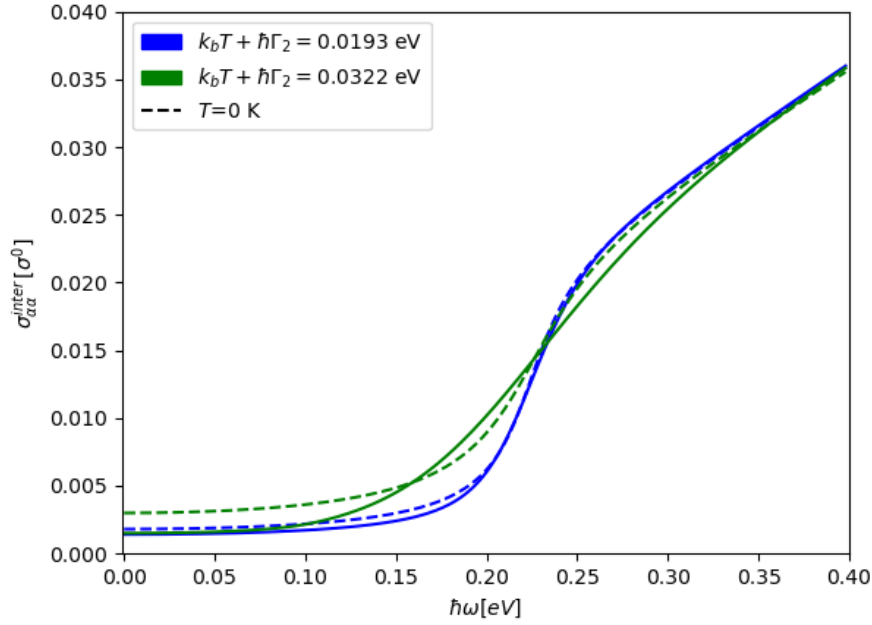


Slika 4.11: Ukupna vodljivost za različite temperature  $T$ , pri čemu je  $\hbar\Gamma_2 = 15 \text{ meV}$ . Ostali parametri su isti kao u  $T = 0$  slučaju.



Slika 4.12: Međuvrpnjena vodljivost za različite temperature  $T$ , pri čemu je  $\hbar\Gamma_2 = 15 \text{ meV}$ . Ostali parametri su isti kao u  $T = 0$  slučaju.





Slika 4.13: Usporedba vodljivosti za jednake  $k_B T + \hbar\Gamma_2$  (svaki uspoređeni par prikazan jednakom bojom). U svakom od dva para koja smo uspoređili, jedna krivulja (isprekidana) prikazuje rezultat za  $T = 0$ , a druga za  $T > 0$ . Ostali parametri su isti kao prije.

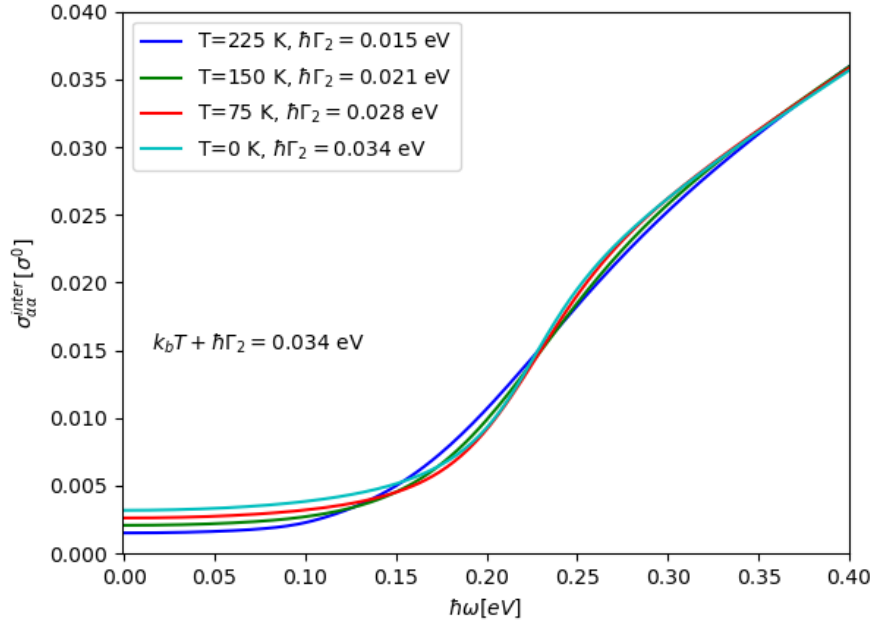
temperaturi, ali je jako osjetljiv na čistoću uzoraka (i na  $\hbar\Gamma_2$ ).

#### 4.5 Anizotropni slučaj

Na kraju ćemo se vratiti eksperimentalnim rezultatima sa slike 1.1. Tu je riječ o anizotropnom 3D Diracovom polumetalu TlBiSSe u kojem je razina dopiranja takva da je  $K_F$  otprilike 0.25 eV. Zbog jednostavnosti izabiremo okrugle vrijednosti za grupne brzine,  $v_{Fx} = v_{Fy} = 6 \cdot 10^5$  m/s i  $\bar{v}_F = 5 \cdot 10^5$  m/s. Ako ignoriramo anizotropnost mjere relaksacije, vodljivost možemo pisati u obliku

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{v_{F\alpha}^2}{\bar{v}_F^2} \sigma_{\alpha\alpha}^{iso}(\omega). \quad (4.109)$$

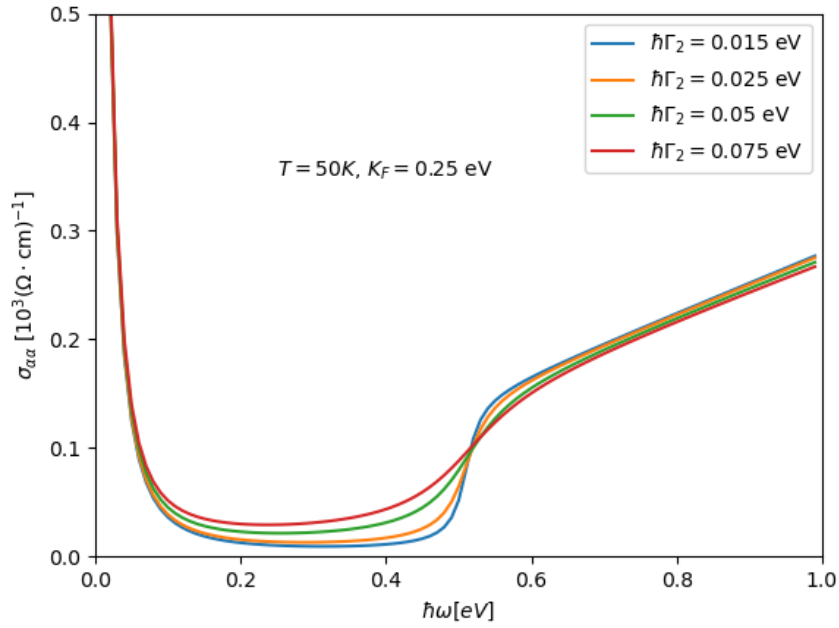
Ostali parametri su  $M = 0.05$  eV,  $K_F = 0.25$  eV i  $\hbar\Gamma_1 = 15$  meV. Za ilustraciju smo napravili račun za temperaturu  $T = 50K$  i promatrali ponašanje za različite  $\hbar\Gamma_2$ . Na slici 4.15 je prikazana ukupna vodljivost  $\sigma_{xx}(\omega)$ , a na slici 4.16 međuvrščani doprinos. Na 4.17 je prikazana vodljivost na logaritamskoj skali za male vrijednosti  $\hbar\omega$ . U ovom sustavu je pomoćna Fermijeva energija dovoljno velika ( $\mu(T) \approx -0.255$



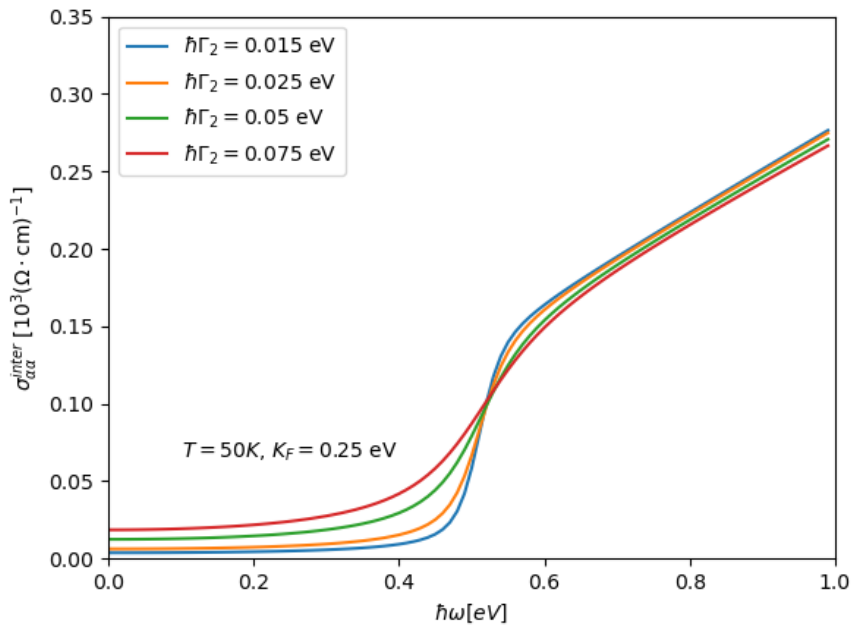
Slika 4.14: Međuvrščana vodljivost za više raličitih temperatura, pri čemu je  $k_B T + \hbar\Gamma_2 = konst.$  Ostali parametri su isti kao prije.

eV) tako da popunjenje stanja u gornjim vrpćama možemo zanemariti za  $T < 300K$  u svim veličinama koje smo računali,  $\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\omega)\}$  i  $\text{Re}\{\sigma_{\alpha\alpha}^{inter}(\omega)\}$ .

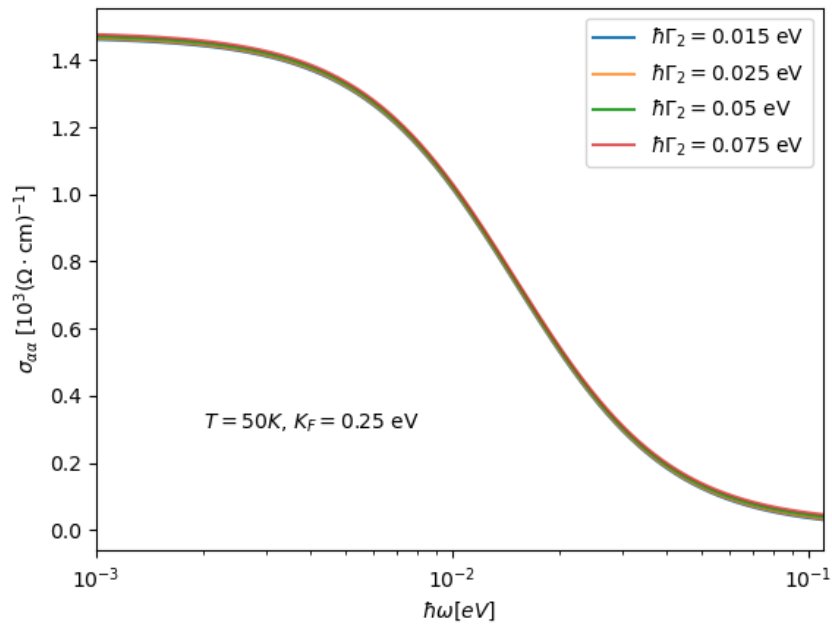
Vodljivost  $\sigma_{zz}(\omega)$  ima isti oblik kao i  $\sigma_{xx}(\omega)$ , samo je pomnožena faktorom  $v_{Fz}^2/v_{Fx}^2$ , gdje je  $v_{Fz}$  dana izrazom  $v_{Fz} = \bar{v}_F^3/v_{Fx}^2 \approx 3.47 \cdot 10^5$  m/s.



Slika 4.15: Ukupna vodljivost za više različitih vrijednosti  $\hbar\Gamma_2$ , pri temperaturi  $T = 50\text{K}$ . Ovdje je  $M = 0.05\text{ eV}$ ,  $\bar{v}_F = 5 \cdot 10^5\text{ m/s}$ ,  $v_{Fx} = 6 \cdot 10^5\text{ m/s}$ ,  $\mu(T = 0) \approx -0.255\text{ eV}$ , i  $\hbar\Gamma_1 = 15\text{ meV}$ , te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .



Slika 4.16: Međuvrščana vodljivost za više različitih vrijednosti  $\hbar\Gamma_2$ , pri temperaturi  $T = 50\text{K}$ . Ovdje je  $M = 0.05\text{ eV}$ ,  $\bar{v}_F = 5 \cdot 10^5\text{ m/s}$ ,  $v_{Fx} = 6 \cdot 10^5\text{ m/s}$ ,  $\mu(T = 0) \approx -0.255\text{ eV}$ , i  $\hbar\Gamma_1 = 15\text{ meV}$ , te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .



Slika 4.17: Ukupna vodljivost za više različitih vrijednosti  $\hbar\Gamma_2$ , pri temperaturi  $T = 50\text{K}$ , prikazana na logaritamskoj skali za male vrijednosti  $\hbar\omega$ . Ovdje je  $M = 0.05 \text{ eV}$ ,  $\bar{v}_F = 5 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ ,  $v_{Fx} = 6 \cdot 10^5 \text{ m/s}$ ,  $\mu(T = 0) \approx -0.255 \text{ eV}$ , i  $\hbar\Gamma_1 = 15 \text{ meV}$ , te  $n_h + n_e = n_0 = n_h^0$ .

## 5 Zaključak

U ovom radu smo teorijski istražili osnovna optička svojstva 3D Diracovih polumetala koristeći kao polazište minimalni anizotropni 3D Diracov model. Prvo smo provjerili kako se vodljivi elektroni u 3D Diracovom modelu vežu na vanjska elektromagnetska polja. U tom dijelu smo reizveli izraze za strujne vršne funkcije u polaznoj reprezentaciji delokaliziranih molekularnih orbitala, te potom i u Blochovoj reprezentaciji. Koristili smo modifikaciju standardne baždarno invarijantne minimalne supstitucije. Kratko smo prokomentirali vezu strukture vrpce dobivenih *ab initio* računima za  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  sustav, s minimalnim 3D Diracovim modelom. Nakon toga smo riješili goli problem bez vanjskih polja, dakle, odredili smo svojstvena stanja i svojstvene energije problema, te pripadne unutarvrpčane i međuvrpčane strujne vršne funkcije. Te informacije su nam, zajedno s općenitom struja-dipol Kubo formulom za modele s više vrpce, omogućile analizu dinamičkog tenzora vodljivosti.

Napravili smo jednostavni izvod unutarvrpčanog doprinosa tenzoru vodljivosti pomoću standardnog RPA računa. Kratko je raspravljena veza s odgovarajućim generalnim izrazom. Nakon toga smo detaljno proanalizirali strukturu ukupnog tenzora vodljivosti Diracovog 3D modela, posebno promatrajući unutarvrpčani doprinos i posebno međuvrpčani doprinos.

U završnom dijelu rada, napravljena je numerička analiza tenzora vodljivosti. Promatrali smo natjecanje različitih parametara u tenzoru vodljivosti: Na primjer, natjecanje temperature i mjera relaksacije u ukupnom i međuvrpčanom doprinosu vodljivosti. Rezultat je uspoređen s najnovijim mjerenjima koeficijenta refleksije u materijalu  $\text{TlBiSSe}$ .

# Dodaci

## Dodatak A

### A.1 Efektivni TBA hamiltonijan u modelima s jednom vrpcom

U najvećem broju jednostavnih vodiča vodljive elektrone možemo opisati TBA modelom s jednom vrpcom

$$H_0 = \sum_{nn'\sigma} |n\sigma\rangle \langle n\sigma| H_0 |n'\sigma\rangle \langle n'\sigma|. \quad (\text{A.1})$$

Ovaj hamiltonijan se transformacijom

$$|n\sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} |\mathbf{k}\sigma\rangle \quad (\text{A.2})$$

lako prevede na oblik

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} |\mathbf{k}\sigma\rangle \epsilon(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}\sigma|. \quad (\text{A.3})$$

Naime, direktnim uvrštavanjem (A.2) u (A.1), uz kratice  $\langle n\sigma|H_0|n'\sigma\rangle = H_\delta$ , gdje je  $\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_{n'} + \mathbf{R}_\delta$ , dobivamo

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} H_\delta e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta} \equiv \sum_{\delta} H_\delta e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta}. \quad (\text{A.4})$$

Ako uvedemo operator impulsa  $\hat{\mathbf{p}}_n = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}_n} \equiv \hbar\hat{\mathbf{k}}_n$  možemo napisati efektivni hamiltonijan

$$H_0 = \sum_{nn'\sigma} |n\sigma\rangle \delta_{n,n'} \epsilon(\hat{\mathbf{p}}_{n'}) \langle n'\sigma|. \quad (\text{A.5})$$

Pokažimo da ovaj hamiltonijan također vodi do izraza (A.3). Djelovanjem (A.5) na Blochov vektor dobivamo Schrödingerovu jednadžbu

$$H_0 |\mathbf{k}\sigma\rangle = \sum_{nn'\sigma} |n\sigma\rangle \delta_{nn'} \sum_{\delta} H_\delta e^{i\mathbf{R}_\delta\cdot\hat{\mathbf{k}}_{n'}} \langle n'\sigma|\mathbf{k}\sigma\rangle$$

Primijetimo da izraz u jednadžbi možemo napisati jednostavnije koristeći općeniti identitet koji se dobije raspisom Taylorovog razvoja  $e^{\mathbf{R}_\delta\cdot\nabla} f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_\delta)$ . Dakle,

prvo dobivamo

$$e^{i\mathbf{R}_\delta \cdot \hat{\mathbf{k}}_{n'}} \langle n' \sigma | \mathbf{k} \sigma \rangle = e^{\mathbf{R}_\delta \cdot \nabla_{n'}} \left( \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{n'}}}{\sqrt{N}} \right) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{n'} + \mathbf{R}_\delta)}}{\sqrt{N}},$$

te nakon toga

$$H_0 | \mathbf{k} \sigma \rangle = \sum_{nn'} | n \sigma \rangle \delta_{n,n'} \sum_{\delta} H_{\delta} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{n'} + \mathbf{R}_\delta)}}{\sqrt{N}} = \sum_n | n \sigma \rangle \sum_{\delta} H_{\delta} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_\delta)}}{\sqrt{N}}$$

$$H_0 | \mathbf{k} \rangle = \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} | n \sigma \rangle \sum_{\delta} H_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta}$$

Uspoređujući taj izraz s izrazima (A.2) i (A.4) dobivamo

$$H_0 | \mathbf{k} \sigma \rangle = \epsilon(\mathbf{k}) | \mathbf{k} \sigma \rangle.$$

Djelovanjem s lijeve strane sa  $\langle \mathbf{k}' \sigma |$ , te uzimajući u obzir da su delokalizirana stanja ortogonalna, dobivamo matrične elemente  $\langle \mathbf{k}' \sigma | H_0 | \mathbf{k} \sigma \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \epsilon(\mathbf{k})$ , iz čega slijedi izraz (A.3).

## A.2 *Vežanje elektrona s vanjskim elektromagnetskim poljima u modelima s jednom vrpcom*

Minimalna supstitucija potrebna za opis vezanja elektrona s vanjskim elektromagnetskim poljem dana je zamjenom

$$| \tilde{n} \sigma \rangle = \exp \left\{ i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_n \right\} | n \sigma \rangle. \quad (\text{A.6})$$

Uvrštavajući ovaj izraz u (A.1) i uz pretpostavku da su elektromagnetska polja makroskopska, dobivamo

$$\tilde{H} = \sum_{nn'\sigma} H_{nn'} \exp \left\{ i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) \right\} | n \sigma \rangle \langle n' \sigma |,$$

gdje je  $H_{nn'} = \langle n \sigma | H_0 | n' \sigma \rangle = H_{\delta}$  matrični element u (A.1). Ako pretpostavimo još da su polja slaba možemo napraviti razvoj do kvadratnog člana u  $\mathbf{A}(\mathbf{R}_n)$ ,  $H \approx$

$H_0 + H_1 + H_2$ . Linearni član u tom razvoju ima oblik

$$H_1 = i \frac{e}{\hbar c} \sum_{nn'\sigma} H_{nn'} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) |n\sigma\rangle \langle n'\sigma|$$

$$H_1 = i \frac{e}{\hbar c} \sum_{n'\sigma\delta} \sum_{\mathbf{q}} H_{\delta} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_{\delta} |n' + \delta\sigma\rangle \langle n'\sigma|.$$

Uzimajući u obzir relacije (A.2) i (A.4), te činjenicu da je

$$\frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = -i \sum_{\delta} H_{\delta} \mathbf{R}_{\delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{\delta}},$$

dobivamo

$$H_1 = -\frac{e}{\hbar c} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) |\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma\rangle \langle \mathbf{k}\sigma|. \quad (\text{A.7})$$

Ovdje smo  $\mathbf{A}(\mathbf{R}_n)$  razvili u Fourierov red s komponentama  $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ ,

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}_n) = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}.$$

Izraz (A.7) možemo zapisati na ljepši način

$$H_1 = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{j}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) |\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma\rangle \langle \mathbf{k}\sigma|, \quad (\text{A.8})$$

gdje je  $\mathbf{j}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx e\partial\epsilon(\mathbf{k})/\mathbf{p}$  strujna vršna funkcija.

### A.3 Elektron-foton vezanje kod efektivnog hamiltonijana

Vezanje elektrona na vanjsko elektromagnetsko polje se može uvesti Peierlsovom supstitucijom

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad (\text{A.9})$$

ako je riječ o slobodnim elektronima, dakle na isti način kako se to radi u kvantnoj fizici.

Sada ćemo se uvjeriti da ista supstitucija daje točan rezultat ako je primjenimo na efektivni hamiltonijan (A.5). Uvrštavajući ovaj izraz u (A.5) dobivamo



$$\tilde{H} = \sum_{nn'\sigma} |n\sigma\rangle \delta_{n,n'} \epsilon(\hat{\mathbf{p}}_{n'} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n)) \langle n'\sigma|. \quad (\text{A.10})$$

Treba primijetiti da argumenti u operatoru  $\epsilon(\hat{\mathbf{p}}_{n'} - (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{R}_n))$  ovise o koordinatama  $\mathbf{R}_{n'}$ , prvi dio, i  $\mathbf{R}_n$ , drugi dio, stoga u Taylorovom razvoju svi doprinosi oblika  $\hat{\mathbf{p}}_{n'} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_n)$  iščezavaju. Schrödingerova jednažba sada poprima oblik

$$\tilde{H} |k\sigma\rangle = \sum_{nn'} |n\sigma\rangle \delta_{n,n'} \sum_{\delta} H_{\delta} \exp\left\{ \mathbf{R}_{\delta} \cdot \nabla_{n'} - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta} \right\} \langle n'\sigma | k\sigma\rangle$$

$$\tilde{H} |k\sigma\rangle = \sum_n |n\sigma\rangle \sum_{\delta} H_{\delta} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\delta} + \mathbf{R}_n)}}{\sqrt{N}} \exp\left\{ -i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta} \right\}.$$

Opet uvodeći aproksimaciju  $\tilde{H} \approx H_0 + H_1 + H_2$  za slaba polja dobivamo

$$\tilde{H} |k\sigma\rangle = \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |n\sigma\rangle \sum_{\delta} H_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}} \left( 1 - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta} + \dots \right),$$

te

$$H_1 |k\sigma\rangle = -i \frac{e}{\hbar c} \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |n\sigma\rangle \sum_{\delta} H_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta}.$$

Fourierov razvoj vektorskog potencijala  $\mathbf{A}(\mathbf{R}_n)$  daje

$$H_1 |k\sigma\rangle = -\frac{e}{\hbar c} \sum_n \sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |n\sigma\rangle \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q})$$

$$H_1 |k\sigma\rangle = -\frac{e}{\hbar c} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) |k + \mathbf{q}\sigma\rangle.$$

Matrični element u ukupnom hamiltonijanu je sada jednak

$$\langle k'\sigma | H_1 | k\sigma\rangle = -\frac{e}{\hbar c} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}+\mathbf{q}},$$

što ponovno vodi do (A.7), te do istog izraza za strujnu vršnu funkciju  $\mathbf{j}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ .

Izraz

$$\hat{\mathbf{J}}(-\mathbf{q}) = \sum_{k\sigma} \mathbf{j}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) |k + \mathbf{q}\rangle \langle k| \quad (\text{A.11})$$

ne predstavlja ništa drugo nego operator gustoće struje. U toj notaciji dobivamo

$$H_1 = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}(\mathbf{q}) \hat{\mathbf{J}}(-\mathbf{q}), \quad (\text{A.12})$$

što je kvantno poopćenje klasičnoelektrodinamičkog izraza za vezanje vektorskog potencijala i gustoće struje. Ekvivalentnost izraza za  $H_1$  dobivenih na dva različita načina odraz je činjenice da vrijedi

$$\frac{\partial^m \epsilon(\hat{\mathbf{p}}_{n'})}{\partial \hat{\mathbf{p}}_n^m} |\mathbf{k}\sigma\rangle = \frac{1}{\hbar^m} \frac{\partial^m \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^m} |\mathbf{k}\sigma\rangle. \quad (\text{A.13})$$

#### A.4 Druga kvantizacija

Svi izrazi koje smo analizirali u A.1-A.3, a koji su bili zapisani u proširenoj matricnoj reprezentaciji, mogu se zapisati i u drugoj kvantizaciji preko operatora stvaranja i poništenja elektrona  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  i  $c_{\mathbf{k}\sigma}$ , budući da je

$$|\mathbf{k}\sigma\rangle = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad \langle \mathbf{k}\sigma| = \langle 0| c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{A.14})$$

gdje je  $|0\rangle$  stanje vakuuma.

U toj notaciji je

$$H_0 = \sum_{nn'\sigma} \langle n\sigma | H_0 | n'\sigma \rangle c_{n\sigma}^\dagger c_{n'\sigma}, \quad (\text{A.15})$$

$$c_{n\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \quad (\text{A.16})$$

$$H_1 = -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{j}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{A.17})$$

$$\hat{\mathbf{J}}(-\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{j}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{A.18})$$

## Dodatak B

### B.1 Općeniti TBA model

Promatramo općeniti TBA model u kojem je  $m$  vrpci izgrađeno od  $m$  orbitala. Hamiltonijan u ovom modelu je

$$H_0 = \sum_{l'} \sum_{nn'} \sum_{\sigma\sigma'} |ln\sigma\rangle \langle ln\sigma|H_0|l'n'\sigma'\rangle \langle l'n'\sigma'|. \quad (\text{B.19})$$

Ovdje je  $\langle r|ln\sigma\rangle$  orbitala vrste  $l$  na poziciji  $\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_l$ , a

$$|ln\sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} |l\mathbf{k}\sigma\rangle \quad (\text{B.20})$$

je pripadna lokalizirana orbitala. Uzimajući u obzir relaciju (B.20) i

$$\langle l\mathbf{k}\sigma|H_0|l'\mathbf{k}'\sigma'\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} H_0^{ll'}, \quad (\text{B.21})$$

hamiltonijan (B.19) se svede na

$$H_0 = \sum_{l'} \sum_{\mathbf{k}\sigma} |l\mathbf{k}\sigma\rangle H_0^{ll'}(\mathbf{k}) \langle l'\mathbf{k}\sigma|, \quad (\text{B.22})$$

pri čemu je uz kratice  $H_\delta^{ll'} = \langle ln\sigma|H_0|l'n'\sigma\rangle$ , slično kao i u izrazu (A.4)

$$H_0^{ll'}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} H_\delta^{ll'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta} \equiv \sum_{\delta} H_\delta^{ll'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta}. \quad (\text{B.23})$$

### B.2 Elektron-foton vezanje kod efektivnog hamiltonijana u općenitom TBA modelu

Efektivni hamiltonijan u općenitom TBA modelu je jednak

$$H_0 = \sum_{l'} \sum_{nn'\sigma} |ln\sigma\rangle \delta_{n,n'} H_0^{ll'}(\hat{\mathbf{p}}_{n'}) \langle l'n'\sigma|. \quad (\text{B.24})$$

Ponovit ćemo postupak iz poglavlja A.3. Napravimo zamjenu (A.9), odakle slijedi

$$\tilde{H} = \sum_{l'} \sum_{nn'\sigma} |ln\sigma\rangle \delta_{n,n'} H_0^{ll'}(\hat{\mathbf{p}}_{n'} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{R}_n)) \langle l'n'\sigma|. \quad (\text{B.25})$$

Djelovanjem na  $|l'k\sigma\rangle$  dobivamo Schrödingerovu jednadžbu

$$\tilde{H} |l'k\sigma\rangle = \sum_l \sum_{nn'} |ln\sigma\rangle \delta_{n,n'} \sum_{\delta} H_{\delta}^{ll'} \exp\left\{ \mathbf{R}_{\delta} \cdot \nabla_{n'} - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta} \right\} \langle l'n'\sigma | l'k\sigma \rangle$$

$$\tilde{H} |l'k\sigma\rangle = \sum_l \sum_n |ln\sigma\rangle \sum_{\delta} H_{\delta}^{ll'} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\delta} + \mathbf{R}_n)}}{\sqrt{N}} \exp\left\{ -i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta} \right\}.$$

Uz aproksimaciju slabog polja  $\tilde{H} \approx H_0 + H_1 + H_2$  imamo

$$\tilde{H} |l'k\sigma\rangle = \sum_l \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |ln\sigma\rangle \sum_{\delta} H_{\delta}^{ll'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}} \left( 1 - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta} - \frac{e^2}{2\hbar^2 c^2} (\mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta})^2 + \dots \right),$$

gdje linearni član ima oblik

$$H_1 |l'k\sigma\rangle = -i \frac{e}{\hbar c} \sum_l \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |ln\sigma\rangle \sum_{\delta} H_{\delta}^{ll'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}} \mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_{\delta}.$$

Razvoj vektorskog potencijala u Fourierov red daje

$$H_1 |l'k\sigma\rangle = -\frac{e}{\hbar c} \sum_l \sum_n \sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |ln\sigma\rangle \frac{\partial H_0^{ll'}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}),$$

$$H_1 |l'k\sigma\rangle = -\frac{e}{\hbar c} \sum_l \sum_{\mathbf{q}} \frac{\partial H_0^{ll'}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) |l\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma\rangle.$$

Matrični element u ukupnom hamiltonijanu je sada jednak

$$\langle l\mathbf{k}'\sigma | H_1 |l'k\sigma\rangle = -\frac{e}{\hbar c} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\partial H_0^{ll'}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k} + \mathbf{q}}.$$

Linearni član u ukupnom hamiltonijanu je stoga jednak

$$H_1 = -\frac{1}{c} \sum_{l'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{j}^{ll'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) |l\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma\rangle \langle l'k\sigma|. \quad (\text{B.26})$$

Ovdje je  $\mathbf{j}^{ll'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$  strujna vršna funkcija

$$\mathbf{j}^{ll'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{e}{\hbar} \frac{\partial H_0^{ll'}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (\text{B.27})$$

Nadalje, kvadratni član u Taylorovom razvoju ima oblik

$$H_2 |l'\mathbf{k}\sigma\rangle = -\frac{e^2}{2\hbar^2 c^2} \sum_l \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |ln\sigma\rangle \sum_\delta H_\delta^{ll'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta} (\mathbf{A}(\mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{R}_\delta)^2.$$

Nakon Fourierovog razvoja vektorskog potencijala dobivamo

$$H_2 |l'\mathbf{k}\sigma\rangle = -\frac{e^2}{2\hbar^2 c^2} \sum_l \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |ln\sigma\rangle \sum_\delta H_\delta^{ll'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2} (A_\alpha(\mathbf{q}_1) e^{i\mathbf{q}_1\cdot\mathbf{R}_n} R_{\alpha\delta}) (A_\beta(\mathbf{q}_2) e^{i\mathbf{q}_2\cdot\mathbf{R}_n} R_{\beta\delta}).$$

Zamjenom  $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{q}'$  i  $\mathbf{q}_2 \rightarrow \mathbf{q} - \mathbf{q}'$  izraz se pojednostavi na

$$H_2 |l'\mathbf{k}\sigma\rangle = -\frac{e^2}{2\hbar^2 c^2} \sum_l \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} |ln\sigma\rangle \sum_\delta H_\delta^{ll'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\delta} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} A_\alpha(\mathbf{q}') A_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} R_{\alpha\delta} R_{\beta\delta},$$

stoga možemo slično kao za izraz (B.26) zaključiti

$$H_2 |l'\mathbf{k}\sigma\rangle = \frac{e^2}{2\hbar^2 c^2} \sum_l \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \frac{\partial^2 H_0^{ll'}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} A_\alpha(\mathbf{q}') A_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') |l\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma\rangle,$$

te za matični element vrijedi

$$\langle l\mathbf{k}'\sigma | H_2 |l'\mathbf{k}\sigma\rangle = \frac{e^2}{2\hbar^2 c^2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \frac{\partial^2 H_0^{ll'}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} A_\alpha(\mathbf{q}') A_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}}.$$

Kvadratni član u ukupnom hamiltonijanu je dakle jednak

$$H_2 = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \sum_{\alpha\beta} A_\alpha(\mathbf{q}') A_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\alpha\beta}^{ll'}(\mathbf{k}; 2) |l\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma\rangle \langle l'\mathbf{k}\sigma|, \quad (\text{B.28})$$

gdje je

$$\gamma_{\alpha\beta}^{ll'}(\mathbf{k}; 2) = m \frac{\partial^2 H_0^{ll'}}{\partial p_\alpha \partial p_\beta}. \quad (\text{B.29})$$

Izraze (B.26) i (B.28) konačno možemo zapisati i u drugoj kvantizaciji

$$H_1 = -\frac{1}{c} \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{j}^{ll'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{l\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{l'\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{B.30})$$

$$H_2 = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \sum_{\alpha\beta} A_\alpha(\mathbf{q}') A_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \sum_{ll'} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\alpha\beta}^{ll'}(\mathbf{k}; 2) c_{l\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{l'\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{B.31})$$

## Dodatak C

### C.1 Strujne vršne funkcije anizotropnog 3D Diracovog modela

Izraz (B.27) predstavlja голу strujnu vršnu funkciju u linearnom doprinosu u hamiltonijanu elektron-foton vezanja. U anizotropnom 3D Diracovom modelu (1.19), u reprezentaciji delokaliziranih orbitala, izraz se svede na

$$\left( j_\alpha^{ll'}(\mathbf{k}) \right) = ev_{F\alpha} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\alpha \\ \sigma_\alpha & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.32})$$

Izraz (B.29) predstavlja kvadratni doprinos. Budući da su matrični elementi  $H_0^{ll'}(\mathbf{k})$  linearni u  $K_\alpha$ , ova vršna funkcija iščezava,

$$\gamma_{\alpha\beta}^{ll'}(\mathbf{k}; 2) = 0. \quad (\text{C.33})$$

(C.32) se može prevesti u reprezentaciju Blochovih funkcija koristeći transformaciju (2.32). Direktnim uvrštavanjem dobivamo

$$\left( j_\alpha^{LL'} \right) = \frac{ev_{F\alpha}}{2\lambda(\lambda - M)} \begin{pmatrix} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & \lambda - M \\ M - \lambda & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\alpha \\ \sigma_\alpha & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} & M - \lambda \\ \lambda - M & \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.34})$$

Množenjem dobivamo

$$\left( j_\alpha^{LL'} \right) = \frac{ev_{F\alpha}}{2\lambda(\lambda - M)} \begin{pmatrix} (\lambda - M)(\sigma_\alpha(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_\alpha) & (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_\alpha(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \sigma_\alpha(M - \lambda)^2 \\ (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_\alpha(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \sigma_\alpha(M - \lambda)^2 & (M - \lambda)(\sigma_\alpha(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_\alpha) \end{pmatrix}.$$

Izračunajmo potrebne elemente na dijagonali

$$\sigma_x(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_x = 2K_x I_2, \quad (\text{C.35})$$

$$\sigma_y(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_y = 2K_y I_2, \quad (\text{C.36})$$

$$\sigma_z(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_z = 2K_z I_2, \quad (\text{C.37})$$

te na rubovima

$$(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_x(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \begin{pmatrix} K_z K_+ + K_z K_- & -K_z^2 + K_-^2 \\ -K_z^2 + K_+^2 & -K_z K_+ - K_z K_- \end{pmatrix}, \quad (\text{C.38})$$

$$(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_y(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = -i \begin{pmatrix} K_z K_+ - K_z K_- & -K_z^2 - K_-^2 \\ K_z^2 + K_+^2 & -K_z K_+ + K_z K_- \end{pmatrix}, \quad (\text{C.39})$$

$$(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma_z(\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \begin{pmatrix} K_z^2 - K_+ K_- & 2K_z K_- \\ 2K_z K_+ & -K_z^2 + K_+ K_- \end{pmatrix}. \quad (\text{C.40})$$

Uvrštavanjem ovih rezultata u (C.34) dobivamo konačne rezultate za strujne vršne funkcije.

Vidimo da za unutarvrpčane doprinose imamo

$$|j_\alpha^{LL}(\mathbf{k})|^2 = e^2 v_{F\alpha}^2 \frac{K_\alpha^2}{M^2 + K^2}, \quad (\text{C.41})$$

te za međuvrpčane doprinose među degeneriranim vrpcama

$$j_\alpha^{LL'}(\mathbf{k}) = 0 \quad \text{za } LL' = 12, 21, 34, 43. \quad (\text{C.42})$$

Izračunajmo još kvadrate modula efektivnih vršnih strujnih funkcija kod međuvrpčanih doprinosa vodljivosti. Primijetimo da za matricele elemente vrijedi  $|j_\alpha^{13}| = |j_\alpha^{24}|$  i  $|j_\alpha^{14}| = |j_\alpha^{23}|$ , te  $j_\alpha^{LL'} = j_\alpha^{L'L}$ , pa stoga imamo

$$|j_x^{+-}(\mathbf{k})|^2 = |j_x^{-+}(\mathbf{k})|^2 = |j_x^{13}(\mathbf{k})|^2 + |j_\alpha^{23}(\mathbf{k})|^2. \quad (\text{C.43})$$

Računamo

$$|j_x^{-+}(\mathbf{k})|^2 = \frac{e^2 v_{Fx}^2}{4\lambda^2(\lambda - M)^2} \left[ 4K_x^2 K_z^2 + (-K_z^2 + K_x^2 - K_y^2 - (M - \lambda)^2)^2 + 4K_x^2 K_y^2 \right],$$

$$|j_x^{+-}(\mathbf{k})|^2 = \frac{e^2 v_{Fx}^2}{4\lambda^2(\lambda - M)^2} \left[ (2K_x^2 - K^2 - (M - \lambda)^2)^2 + 4K_x^2(K^2 - K_x^2) \right],$$

$$|j_x^{-+}(\mathbf{k})|^2 = \frac{e^2 v_{Fx}^2}{4\lambda^2(\lambda - M)^2} \left[ (K^2 + (M - \lambda)^2)^2 - 4K_x^2(M - \lambda)^2 \right],$$

$$|j_x^{-+}(\mathbf{k})|^2 = \frac{e^2 v_{Fx}^2}{4\lambda^2(\lambda - M)^2} [4\lambda^2(\lambda - M)^2 - 4K_x^2(M - \lambda)^2],$$

i konačno dobivamo

$$|j_x^{-+}(\mathbf{k})|^2 = e^2 v_{Fx}^2 \left( 1 - \frac{K_x^2}{M^2 + K^2} \right). \quad (\text{C.44})$$

Iz oblika matrice u slučaju  $\alpha = y, z$  možemo analogijom zaključiti

$$|j_y^{+-}(\mathbf{k})|^2 = |j_y^{-+}(\mathbf{k})|^2 = e^2 v_{Fy}^2 \left( 1 - \frac{K_y^2}{M^2 + K^2} \right), \quad (\text{C.45})$$

$$|j_z^{+-}(\mathbf{k})|^2 = |j_z^{-+}(\mathbf{k})|^2 = e^2 v_{Fz}^2 \left( 1 - \frac{K_z^2}{M^2 + K^2} \right). \quad (\text{C.46})$$



## Dodatak D

### D.1 Aproksimacija slučajnih faza

Ovdje ćemo izvesti izraz za tenzor unutarvrpčane vodljivosti u 3D Diracovom modelu koristeći aproksimaciju slučajnih faza (RPA - *random phase approximation*) [8]. Dakle, dobit ćemo rezultat za longitudinalni tenzor vodljivosti. Puno složeniji jer račun za transverzalni tenzor vodljivosti, i mi ga ovdje nećemo raditi. Važno je da se dobije isti izraz.

U ovom slučaju možemo smetnju napisati u obliku

$$H_1(t) = \sum_{\mathbf{q}} \Phi^{tot}(\mathbf{q}, t) \hat{\rho}(-\mathbf{q}), \quad (\text{D.47})$$

gdje je

$$\hat{\rho}(-\mathbf{q}) = (-e) \sum_{L\mathbf{k}} c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{L\mathbf{k}} \equiv \sum_{L\mathbf{k}} \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{L\mathbf{k}} \quad (\text{D.48})$$

operator gustoće naboja, a  $\rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = (-e) \langle L\mathbf{k} + \mathbf{q} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | L\mathbf{k} \rangle$  su pripadne nabojne vršne funkcije. U dugovalnoj granici su one uvijek jednake  $-e$ . Nadalje,

$$\Phi^{tot}(\mathbf{q}, t) = \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega) (e^{-i\omega t} e^{\eta t} + c.c.) \quad (\text{D.49})$$

je zasjenjena smetnja čije je uključivanje opisano adijabatskim faktorom  $\exp\{\eta t\}$ , a c.c. označava kompleksno konjugiran oblik prvog člana.

### D.2 Vremenski ovisan račun smetnje

Rješavamo vremenski ovisnu Schrödingerovu jednadžbu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (H_0 + H_1(t)) |\psi(t)\rangle. \quad (\text{D.50})$$

Goli hamiltonijan  $H_0$  opisuje sustav nesmetanog problema,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\mathbf{k}, t\rangle = H_0 |\mathbf{k}, t\rangle. \quad (\text{D.51})$$

Smetnja  $H_1$  je dana sa (D.47-D.49),

$$H_1(t) = \hat{\rho}(-\mathbf{q})\Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega) (e^{-i\omega t} e^{\eta t} + c.c.). \quad (D.52)$$

Rješenje smetanog problema pretpostavljamo u obliku

$$|\psi(t)\rangle \equiv |\psi\rangle = |\mathbf{k}\rangle + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} |\mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} |\mathbf{k} - \mathbf{q}\rangle, \quad (D.53)$$

gdje svi elementi desne strane jednakosti ovise o vremenu, dakle koristimo skraćeni zapis  $|\mathbf{k}, t\rangle \equiv |\mathbf{k}\rangle$ . Uvrštavajući ovu pretpostavku u Schrödingerovu jednadžbu dobivamo

$$\frac{\partial b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial t} |\mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle + \frac{\partial b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{\partial t} |\mathbf{k} - \mathbf{q}\rangle = \frac{1}{i\hbar} H_1 |\psi\rangle. \quad (D.54)$$

Množeći s lijeva sa  $\langle \mathbf{k} \pm \mathbf{q} |$ , prelazimo u matricnu reprezentaciju Schrödingerove jednadžbe

$$i\hbar \frac{\partial b_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}}{\partial t} = \langle \mathbf{k} \pm \mathbf{q} | H_1 | \psi \rangle = \langle \mathbf{k} \pm \mathbf{q} | H_1 | \mathbf{k} \rangle. \quad (D.55)$$

Druga jednakost slijedi kao posljedica zakona očuvanja impulsa za  $H_1$  danog izrazom (D.52). Eksplicitni oblik izraza na desnoj strani je

$$i\hbar \frac{\partial b_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}}{\partial t} = e^{-i(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + \hbar\omega)t/\hbar} e^{\eta t} \rho(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \Phi^{tot}(\pm\mathbf{q}, \pm\omega). \quad (D.56)$$

Rješenje ove smetane Schrödingerove jednadžbe je (D.53) gdje su koeficijenti  $b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)$  dani sa

$$b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) = \frac{\Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega)}{\hbar\omega + \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} \rho(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) e^{-i(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + \hbar\omega)t/\hbar}, \quad (D.57)$$

$$b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) = \frac{\Phi^{tot}(-\mathbf{q}, -\omega)}{-\hbar\omega + \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + i\eta} \rho(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) e^{-i(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \hbar\omega)t/\hbar}. \quad (D.58)$$

### D.3 Unutarvrpčani doprinos induciranoj strujnoj gustoći

Unutarvrpčani doprinos induciranoj strujnoj gustoći se može napisati kao

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{r}, t) = \sum_{L\mathbf{k}} j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k}) \left( |\psi_{L\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{1}{V} \right) f_L(\mathbf{k}). \quad (\text{D.59})$$

Tu smo samo u standardnom izrazu za  $\rho^{ind}(\mathbf{r}, t)$  zamijenili nabojni verteks ( $-e$ ) sa strujnim verteksom  $j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k})$ . Ako uvrstimo izraze koje smo dobili u vremenskom računu smetnje iz prošlog potpoglavlja za  $\psi_{L\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle$  dobivamo

$$\psi_{L\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle}{\sqrt{V}} \left\{ 1 + \frac{\rho(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} + \frac{\rho(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \Phi^{tot}(-\mathbf{q}, -\omega) e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}}{-\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + i\eta} \right\}. \quad (\text{D.60})$$

Uvrštavajući u  $J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{r}, t)$ , zadržavajući pritom samo linearne doprinose, preostaje nam 5 od 9 pribrojnika, od kojih se još jedan pokrati sa  $1/V$ . Rezultat je

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \times \left\{ \frac{1}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} + \frac{1}{-\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - i\eta} \right\} \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega) + c.c. \quad (\text{D.61})$$

Sada izdvajamo Fourierove komponente na lijevoj i na desnoj strani te relacije te dobivamo

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \quad (\text{D.62})$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} + \frac{1}{-\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - i\eta} \right\} \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{D.63})$$

Zamjenom nijeme varijable  $\mathbf{k}$  u drugom pribrojniku na način  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$  vodi do

$$J_{\alpha}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{L\mathbf{k}} j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{D.64})$$

#### D.4 Unutarvrpčani doprinos tenzoru vodljivosti

U slučaju kad promatramo unutarvrpčane doprinose vodljivosti operatore gustoće naboja i strujne gustoće možemo napisati redom kao

$$\hat{\rho}(-\mathbf{q}) = \sum_{L\mathbf{k}} \rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{L\mathbf{k}}, \quad (\text{D.65})$$

$$\hat{J}_\alpha(-\mathbf{q}) = \sum_{L\mathbf{k}} j_\alpha^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{L\mathbf{k}}. \quad (\text{D.66})$$

Ti operatori su povezani operatorskom jednadžbom kontinuiteta

$$\frac{\partial \hat{\rho}(\mathbf{q})}{\partial t} = -i\mathbf{q} \cdot \hat{J}(\mathbf{q}). \quad (\text{D.67})$$

Ako iskoristimo činjenicu da je

$$\frac{\partial \hat{\rho}(\mathbf{q})}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [H_0, \hat{\rho}(\mathbf{q})], \quad (\text{D.68})$$

dobivamo vezu između strujnih i nabojnih vršnih funkcija

$$\rho^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = q_\alpha \frac{\hbar j_\alpha^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})}. \quad (\text{D.69})$$

sada to uvrštavamo u izraz za induciranu gustoću struje

$$J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\hbar}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \frac{|j_\alpha^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} q_\alpha \Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{D.70})$$

i uzmemo u obzir da je

$$\mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) = -i\mathbf{q}\Phi^{tot}(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{D.71})$$

Dobiveni izraz kombiniramo s Ohmovim zakonom u translacijski invarijantnim sustavima

$$J_\alpha^{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) E_\beta(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{D.72})$$

te konačno dolazimo do unutarvrpčane vodljivosti oblika

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{intra}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i\hbar}{V} \sum_{L\mathbf{k}} \frac{|j_{\alpha}^{LL}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2}{\epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_L(\mathbf{k})} \frac{f_L(\mathbf{k}) - f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar\omega + \epsilon_L(\mathbf{k}) - \epsilon_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta}. \quad (\text{D.73})$$

## Dodatak E

### *E.1 Python skripta za izračun i skiciranje vodljivosti za različite temperature*

```
1 from numpy import sqrt, exp, inf
2 import numpy as np
3
4 import scipy.integrate as integrate
5 from scipy.optimize import fsolve
6
7 import matplotlib.pyplot as plt
8
9 #####
10
11 hbar=6.582119569*10**(-16)
12 kb=8.617333262*10**(-5)
13 pi=np.pi
14 e=1.602176634*10**(-19)
15 ev=e
16 v0=100*10**(-30)
17 v=6*10**5
18 m=9.1093837*10**(-31)
19 hg1=0.010
20 hg2=0.015
21 M=0.05
22 Kf=0.1
23
24 #####
25
26 def fermi_dirac(E,Ef,T):
27     if T>0:
28         if E<Ef:
29             return exp((+E-Ef)/(kb*T))/(exp((+E-Ef)/(kb*T))+1)
30         else:
31             return 1/(exp((-E+Ef)/(kb*T))+1)
32     else:
33         if E<Ef: return 0
34         else: return 1
```

```

35
36 def fermi_dirac_derivative(E, Ef, T):
37     tmp=(-E+Ef)/(kb*T)
38     if T>0:
39         if tmp<=0: return fermi_dirac(E, Ef, T)**2*exp(tmp)/(kb*T)
40         else: return fermi_dirac(E, Ef, T)**2/exp(-tmp)/(kb*T)
41
42 def podintegral_intra(x, M, T, u1):
43     return (x**2/4-M**2)**(3/2)/x*fermi_dirac_derivative(x/2, u1, T)
44
45 def faktor_intra(gamma1, omega):
46     return hbar*gamma1*ev/((hbar*omega)**2+(hbar*gamma1)**2)*v0*m/3/pi
47     **2/hbar**3/v/ev**2
48
49 def podintegral_inter(x, M, gamma2, omega, T, u1):
50     one=sqrt(x**2-4*M**2)
51     two=1+2*M**2/x**2
52     three=hbar*gamma2/((hbar*omega+x)**2+(hbar*gamma2)**2)
53     four=hbar*gamma2/((hbar*omega-x)**2+(hbar*gamma2)**2)
54     return one*two*(three+four)*fermi_dirac(x/2, u1, T)
55
56 def faktor_inter():
57     return m*v0/12/pi**2/v/hbar**3/ev
58
59 def int_intra(M, Kf, T, u1):
60     if T>0:
61         pod=[]
62         for k in np.arange(2*M, 3, 0.001):
63             pod.append(podintegral_intra(k, M, T, u1))
64         maximum=np.arange(2*M, 3, 0.001)[pod.index(max(pod))]
65         return integrate.quad(podintegral_intra, 2*M, 7, args=(M, T, u1),
66             limit=80000, points=[maximum])[0]
67     else: return Kf**3/sqrt(Kf**2+M**2)
68
69 def integral_inter(M, Kf, gamma2, omega, T, u1):
70     pod=[]
71     for k in np.arange(2*M, 3, 0.001):
72         pod.append(podintegral_inter(k, M, gamma2, omega, T, u1))
73     maximum=np.arange(2*M, 3, 0.001)[pod.index(max(pod))]

```

```

72     return integrate.quad(podintegral_inter, 2*M, 10*sqrt(Kf**2+M**2),
73     args=(M, gamma2, omega, T, u1), limit=80000, points=[maximum])[0]
74
75 def particle_density(E, Ef, M, T):
76     g=E*sqrt(E**2-M**2)/pi**2/(hbar*v)**3
77     fs=-fermi_dirac(-E, -Ef, T)+fermi_dirac(-E, Ef, T)
78     return g*fs
79
80 def particle_density_int(Ef, M, Kf, T):
81     na=1/3/pi**2*Kf**3/(v*hbar)**3
82     return na-integrate.quad(particle_density, M, 2, args=(Ef, M, T), limit
83     =80000)[0]
84
85 #####
86
87 for T in [0, 150, 300, 500]:
88     conductivity=[]
89     u_=-fsolve(particle_density_int, -0.2, args=(M, Kf, T))[0]
90     for hw in np.arange(0, 1, 0.002):
91         inter=integral_inter(M, Kf, hg2/hbar, hw/hbar, T, u_)
92         intra=int_intra(M, Kf, T, u_)
93         conductivity.append(faktor_intra(hg1/hbar, hw/hbar)*intra+
94         faktor_inter()*inter)
95     plt.plot(np.arange(0, 1, 0.002), conductivity, label=f"$T=${T} K")
96
97 plt.xlabel(r"$\hbar \omega$ [eV]")
98 plt.ylabel(r"$\sigma_{\alpha \alpha}$ [$\sigma^0]$")
99 plt.legend()
100 plt.xlim([-0.001, 0.4])
101 plt.ylim([0.0, 0.11])
102 plt.text(0.20, 0.06, f"$K_F=${Kf:.2f} eV, $\hbar \Gamma_2=${hg2:.3f} eV",
103         ", fontsize=10)
104 plt.show()

```



## Bibliography

- [1] Le Mardelé, F.; Wyzula, J.; Mohelsky, I.; Nasrallah, S.; Loh M.; Ben David, S.; Toledano, O.; Tolj, D.; Novak, M.; Eguchi, G.; Paschen, S.; Barišić, N.; Chen, J.; Kimura, A.; Orlita, M.; Rukelj, Z.; Akrap, A.; Santos-Cottin D. Evidence for three-dimensional Dirac conical bands in TlBiSSe by optical and magneto-optical spectroscopy. // Physical Review B. Vol. 107, 6(2023), str. 241101.
- [2] Zhang, H.; Liu C. X.; Qi, X. L.; Dai, X.; Fang, Z.; Zhang, S. C. Topological insulators in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  and  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  with a single Dirac cone on the surface. // Nature physics. Vol. 5, 6(2009), str. 438-442.
- [3] Despoja, V.; Novko, D.; Dekanić, K.; Šunjić, M.; Marušić, L. Two-dimensional and  $\pi$  plasmon spectra in pristine and doped graphene. // Physical Review B. Vol. 87, 7(2013), str. 075447.
- [4] Kupčić, I. Damping effects in doped graphene: The relaxation-time approximation. // Physical Review B. Vol. 90, 10(2014), str. 205426.
- [5] Kubo, R. Nonequilibrium Statistical Mechanics. Springer, 1991.
- [6] Liu, C. X.; Qi, X. L.; Zhang, H.; Dai, X.; Fang, Z.; Zhang, S. C. Model Hamiltonian for topological insulators. // Physical Review B. Vol. 82, 4(2010), str. 045122.
- [7] Virtanen et al. (2020) SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. Nature Methods, 17(3), 261-272.
- [8] Kupčić, I. Fizika čvrstog stanja: Zbirka riješenih zadataka. Hinus, 1998.