

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta  
Ústav teoretické fyziky

# DIPLOMOVÁ PRÁCE

Jindřich Kolorenč

Teorie Hallova jevu v polovodičových  
kvantových strukturách

**Vedoucí práce**  
Ing. Ludvík Smrčka, DrSc.

**Studijní program**  
Teoretická fyzika

Na tomto místě bych chtěl poděkovat Ing. Ludvíku Smrčkovi, DrSc. a Ing. Pavlu Středovi, DrSc. za mnoho cenných rad a především za to, že mi ukázali krásnou oblast fyziky pevných látek, v níž jsou principy kvantové mechaniky postřehnutelné takřka pouhým okem.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 20. dubna 2000

Jindřich Koloreňč

# Obsah

Úvod	5
<b>1 Dvoukanálový transport</b>	<b>7</b>
1.1 Jednoelektronová Kubova formule . . . . .	7
1.2 Popis fyzikálního systému . . . . .	8
1.3 Odezva na elektrické pole ve směru osy $x$ . . . . .	8
1.3.1 Proudová odezva . . . . .	11
1.3.2 Změna obsazení kanálů . . . . .	12
1.3.3 Příčný proud a rovnice kontinuity . . . . .	13
1.4 Odezva na vnitřní pole . . . . .	14
<b>2 Elastický rozptyl na příměsích</b>	<b>15</b>
2.1 CPA pro jednočásticovou Greenovu funkci . . . . .	16
2.2 CPA pro koeficienty lineární odezvy . . . . .	18
2.3 Limita slabého rozptylu . . . . .	20
2.3.1 Jednočásticová Greenova funkce . . . . .	20
2.3.2 Koeficienty lineární odezvy . . . . .	21
<b>3 Kvantová dvojjáma bez přítomnosti magnetického pole</b>	<b>22</b>
3.1 Hustota stavů . . . . .	24
3.1.1 Systém bez nečistot . . . . .	24
3.1.2 Započtení nečistot (CPA) . . . . .	25
3.2 Vodivost . . . . .	28
3.2.1 Příklad obsazení obou podpásů . . . . .	28
3.2.2 Příklad obsazení pouze spodního podpásu . . . . .	31
3.3 Odporová rezonance . . . . .	32
3.4 Příčné efekty . . . . .	36
<b>4 Kvantová dvojjáma v podélném magnetickém poli</b>	<b>37</b>
4.1 Hustota stavů pro systém bez nečistot . . . . .	37
4.2 Greenovy funkce systému s nečistotami . . . . .	40
4.3 Odezva na vnější elektrické pole . . . . .	42
4.3.1 Aproximace pro $\hat{K}$ . . . . .	42

4.3.2	Proudová hustota . . . . .	45
4.3.3	Přesun náboje . . . . .	45
4.4	Odezva na příčné vnitřní pole . . . . .	46
4.4.1	Proudová hustota . . . . .	46
4.4.2	Přesun náboje . . . . .	46
4.5	Selfkonzistentní podmínka . . . . .	47
4.6	Tenzor vodivosti . . . . .	47
<b>Závěr</b>		<b>50</b>
<b>A</b>	<b>Jednoelektronová matice hustoty</b>	<b>52</b>
<b>B</b>	<b>Identita pro (1.14) a (1.38)</b>	<b>54</b>
<b>C</b>	<b>Poznámky k integraci po Fermiho liniích</b>	<b>55</b>
<b>D</b>	<b>Vzorce pro aproximaci <math>\Gamma \rightarrow 0</math></b>	<b>57</b>
<b>Literatura</b>		<b>61</b>

# Úvod

Teoretický popis Hallova jevu ve vodičích makroskopických rozměrů vychází z výpočtu složek tenzoru vodivosti v elektrickém poli, zahrnujícím i pole Hallovo. Uvnitř vzorku je možno zanedbat okrajové efekty a Hallovo pole považovat za homogenní. Měrný odpor ve směru kolmém na magnetické pole je potom dán inverzí tenzoru vodivosti

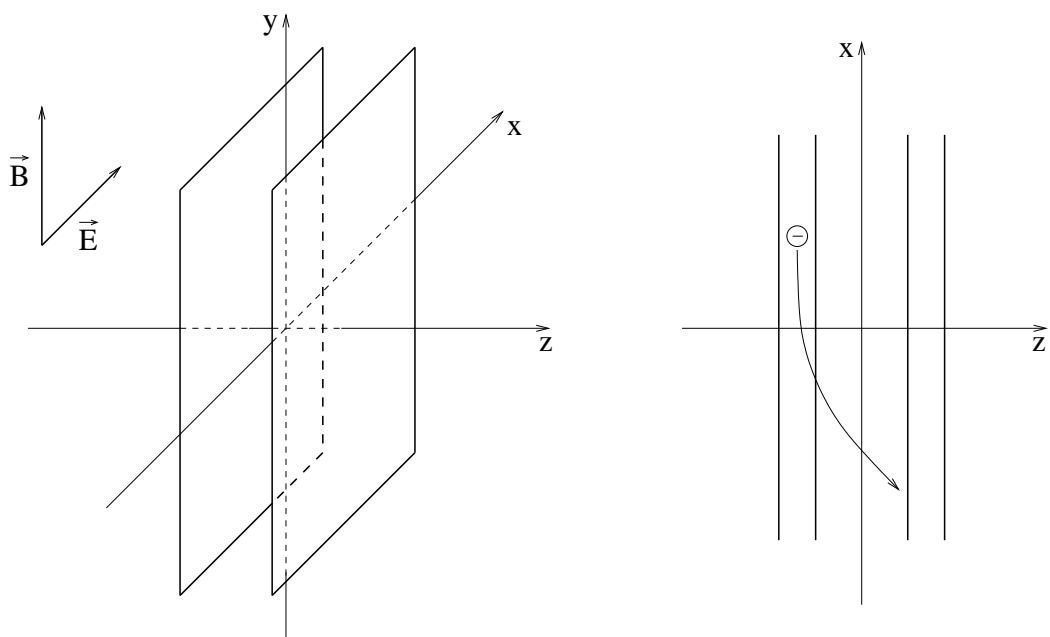
$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}^2}.$$

Ve vrstevnatých polovodičových nanostrukturách hranice vzorku jistě přehlížet nelze. Je třeba použít jiný způsob výpočtu, který je paradoxně blíže samotnému principu vzniku Hallova jevu, neboť Hallovo pole určíme přímo z přerozdělení náboje v systému. Je zřejmé, že tato procedura není možná zcela v rámci jednoduché jednoelektronové teorie.

Výklad provedeme na modelovém systému tvořeném dvěma tunelově vázanými dvourozměrnými plyny. Přitom se omezíme pouze na studium vlivu magnetického pole  $\vec{B}$ , orientovaného rovnoběžně s dvojrstvou. Aplikujeme-li dále vnější elektrické pole  $\vec{E} \perp \vec{B}$  (viz obrázek na následující straně), získají elektrony rychlost v naznačeném směru a začne na ně působit Lorentzova síla. Díky ní budou preferovat pravou vrstvu na úkor levé, čímž se změní Hartreeho člen v hamiltoniánu a vznikne vnitřní Hallovo pole. Pro zjištění proudu tekoucího vzorkem je třeba sečíst lineární odezvu jak na vnější, tak na sekundárně vzniklé vnitřní elektrické pole. Velikost Hallova pole je nutno určit selfkonzistentním postupem, protože samo sebe zmenšuje zpětným přerozdělením elektronů v důsledku jejich vzájemného odpuzování. Uvedený přístup přesně odpovídá aproximaci náhodných fází (RPA), jak je zřejmé například z rozboru v [1].

Než však dospějeme k aplikaci právě uvedeného postupu ve čtvrté kapitole, musíme udělat několik přípravných kroků. V první kapitole vcelku standardní procedurou odvodíme známou Kubovu formuli pro diagonální složky tenzoru vodivosti (1.26). Analogicky dospějeme k dalším vzorcům lineární odezvy nutným pro započítání příčných efektů.

Druhá kapitola je věnována zahrnutí elastického rozptylu na nečistotách. Je popsána aproximace koherentního potenciálu (CPA) a následně její limita směrem ke slabému rozptylu. Zcela stranou ponecháváme problém lokalizace [2], který je v současné době v popředí zájmu studia dvourozměrných systémů. Jednoduše



Elektronová dvojrstva s vyznačením směru aplikovaných polí a výsledek působení Lorentzovy síly na pohyb elektronu.

uvažujeme, že se pohybujeme v dostatečně vysokých elektronových koncentracích, při nichž vzorky vykazují kovupodobné chování [3].

Ve třetí části rozebereme vodivost kvantové dvojjámy v nulovém magnetickém poli. Přitom pochopíme některé aspekty kvantového transportu ve dvou koherentně propojených kanálech a ujasníme, co znamenají použité aproximace rozptylových procesů. Mimo jiné zjistíme, za jakých okolností lze použít limitu slabého rozptylu, jejíž relativní jednoduchost je klíčová při výpočtech v poslední kapitole.

# Kapitola 1

## Dvoukanálový transport

### 1.1 Jednoelektronová Kubova formule

Pro odvození Kubovy formule ([4], [5]) využijeme faktu, že se jednoelektronová matice hustoty  $\hat{f}$ , v případě absence mezičásticové interakce, chová zcela analogicky jako mnohočásticová  $\hat{\rho}_{\text{Fock}}$  (dodatek A).

Je-li  $\hat{H}$  na čase nezávislý hamiltonián a  $\hat{H}'(t)$  jeho časově závislá porucha, máme pro vývoj matice hustoty (A.8)

$$\frac{d\hat{f}(t)}{dt} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{f}(t), \hat{H} + \hat{H}'(t)] + \frac{\hat{f}(t) - \hat{f}_{\text{FD}}(\hat{H})}{\tau} = 0. \quad (1.1)$$

Třetí člen zajišťuje relaxaci do rovnovážného stavu (podle [6]). Rovnici (1.1) převedeme do integrálního tvaru vhodného pro iterativní řešení. Označíme  $\epsilon = 1/\tau$ .

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( e^{\epsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{f}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right) \\ = \epsilon e^{\epsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{f}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} + e^{\epsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \left( \frac{d\hat{f}(t)}{dt} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{f}(t), \hat{H}] \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \end{aligned} \quad (1.2)$$

Do druhého členu na pravé straně dosadíme podle (1.1)

$$\frac{d}{dt} \left( e^{\epsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{f}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right) = \epsilon e^{\epsilon t} f_{\text{FD}}(\hat{H}) - \frac{1}{i\hbar} e^{\epsilon t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} [\hat{f}(t), \hat{H}'(t)] e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad (1.3)$$

a po přeintegrování získaného vztahu s podmínkou  $\hat{f}(t_0) = f_{\text{FD}}(\hat{H})$  již máme hledanou integrální rovnici pro časový vývoj matice hustoty

$$\begin{aligned} \hat{f}(t) = f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ 1 - e^{\epsilon(t_0-t)} \right] \\ - \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'-t)} [\hat{f}(t'), \hat{H}'(t')] e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'-t)}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Ihned vidíme, že v rozvoji  $\hat{f}(t)$  podle mocnin  $\hat{H}'(t)$  má lineární člen, po volbě  $t_0 = -\infty$  a substituci v integrační proměnné, tvar

$$\delta\hat{f}(t) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{ct'} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'} \left[ f_{\text{FD}}(\hat{H}), \hat{H}'(t+t') \right] e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}. \quad (1.5)$$

V dalším budeme předpokládat poruchu  $\hat{H}'(t) = -\hat{A}F(t)$ , kde  $\hat{A}$  je na čase nezávislý operátor. Je-li rovnovážná střední hodnota operátoru  $\hat{B}$  rovna nule, pak v lineárním přiblížení (1.5) dostáváme Kubovu formuli [4]

$$\delta B(t) = \text{Tr} \left( \hat{B} \delta\hat{f}(t) \right) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{ct'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{A}^I(t'), \hat{B} \right] \right) F(t+t'), \quad (1.6)$$

přičemž jsme při úpravě využili cykličnosti stopy a označili operátor v interakční reprezentaci vzhledem k hamiltoniánu  $\hat{H}$  prostřednictvím

$$\hat{A}^I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \quad (1.7)$$

Ke vzorci (1.6) lze dospět i jinou cestou ([4]). Adiabatické zapínání poruchy automaticky poskytne konvergenční faktor  $e^{ct'}$ , a je tedy možné vynechat „relaxační“ člen v (1.1).

## 1.2 Popis fyzikálního systému

O studovaném vzorku budeme předpokládat, že je alespoň v jednom směru, řekněme ve směru osy  $x$ , homogenní a otevřený, a umožňuje tedy transport. Hilbertův prostor  $\mathcal{H}$  jeho jednoelektronových stavů rozdělíme na dvě disjunktní části  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \oplus \mathcal{H}_R$ , přičemž projektory na jednotlivé podprostory označíme  $\hat{P}_L$  a  $\hat{P}_R$ . Zmíněný rozklad může být motivován rozlišitelností odpovídajících stavů v prostoru (odtud i volba indexů — levý a pravý kanál) nebo v energii (pásky).

V aproximaci efektivní hmotnosti bude mít jednoelektronový hamiltonián tvar<sup>1</sup>

$$\hat{H} = \frac{\left( \hat{\vec{p}} + e\vec{A}_B(\vec{r}) \right)^2}{2m^*} + V(\vec{r}) \quad (1.8)$$

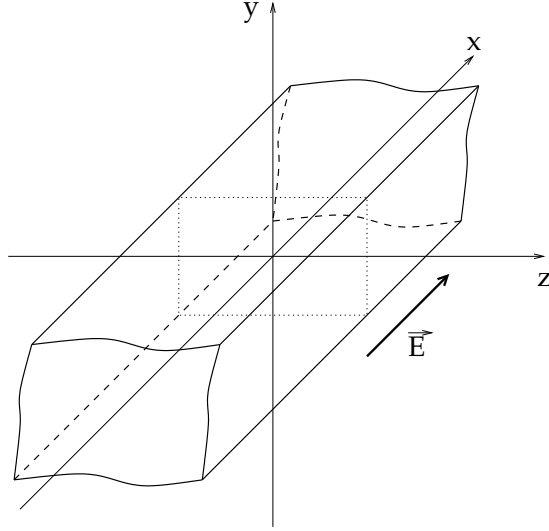
## 1.3 Odezva na elektrické pole ve směru osy $x$

Nejprve odvodíme odezvu na homogenní elektrické pole, jehož jediná nenulová složka míří ve směru osy  $x$ . Použijeme kalibraci  $\varphi = 0$  a

$$A_{Ex}(t) = -\frac{1}{i\omega} E_x e^{i\omega t} \quad \Rightarrow \quad E_x(t) = E_x e^{i\omega t}. \quad (1.9)$$

<sup>1</sup>Náboj elektronu označujeme  $-e$ ,  $e > 0$ .





Obrázek 1.1: Schematický náčrt studovaného vzorku

Díky tomu, že  $A_{E_x}(t)$  nezávisí na poloze, a komutuje tedy s hybností, indukuje toto elektrického pole dodatečný člen k hamiltoniánu (1.8)<sup>2</sup>

$$\hat{H}'(t) = -\frac{e}{i\omega} \frac{\hat{p}_x + eA_{Bx}(\vec{r})}{m^*} E_x e^{i\omega t} = -\frac{e}{i\omega} \hat{v}_x E_x e^{i\omega t}. \quad (1.10)$$

Po dosazení této poruchy do Kubovy formule (1.6) dostaneme výraz

$$\delta B(t) = -\frac{e}{\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \int_{-\infty}^0 dt' e^{(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{B} \right] \right), \quad (1.11)$$

který rozdělíme na dvě části. O druhé později ukážeme, že kompenzuje tzv. kalibrační proud (gauge current).

$$\begin{aligned} \delta B(t) = & -e E_x e^{i\omega t} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \frac{e^{i\omega t'} - 1}{\hbar\omega} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{B} \right] \right) \\ & - \frac{e}{\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{B} \right] \right) \end{aligned} \quad (1.12)$$

Dále upravíme integrál ve druhém členu na pravé straně. Přitom využijeme toho, že operátory  $\hat{v}_x$  a  $\hat{B}$  nezávisí explicitně na čase. V tom případě

$$\hat{v}_x^I(t) = \frac{d\hat{x}^I(t)}{dt} \quad (1.13)$$

<sup>2</sup>Zajímají nás pouze efekty lineární v  $E_x$ .

a nabízí se integrovat per-partes

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{B} \right] \right) \\ &= \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{x}^I(0), \hat{B} \right] \right) - \int_{-\infty}^0 dt' \epsilon e^{\epsilon t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{x}^I(t'), \hat{B} \right] \right). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Protože integrál napravo vymizí (dodatek B), má Kubova formule tvar

$$\begin{aligned} \delta B(t) &= -\frac{e}{\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{x}, \hat{B} \right] \right) \\ &\quad - e E_x e^{i\omega t} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \frac{e^{i\omega t'} - 1}{\hbar\omega} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{B} \right] \right). \end{aligned} \quad (1.15)$$

V dalším kroku provedeme časovou integraci analogicky jako v dodatku B s výsledkem

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^0 dt' e^{(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{B} \right] \right) \\ &= \int dE \int dE' \frac{i\hbar}{E' - E - \hbar\omega + i\hbar\epsilon} \\ &\quad \times \left[ f_{\text{FD}}(E) - f_{\text{FD}}(E') \right] \text{Tr} \left[ \delta(E - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(E' - \hat{H}) \hat{B} \right] \\ &= -i\hbar \int dE f_{\text{FD}}(E) \\ &\quad \times \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \left[ \hat{v}_x \hat{G}^-(E + \hbar\omega) \hat{B} + \hat{B} \hat{G}^+(E - \hbar\omega) \hat{v}_x \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.16)$$

kde jsme zavedli Greenovy funkce

$$\hat{G}^+(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\tilde{\epsilon}}, \quad \hat{G}^-(E) = \frac{1}{E - \hat{H} - i\tilde{\epsilon}}. \quad (1.17)$$

Pro změnu střední hodnoty operátoru  $\hat{B}$  nakonec dostáváme vzorec

$$\begin{aligned} \delta B(t) &= -i\hbar e E_x e^{i\omega t} \int dE f_{\text{FD}}(E) \\ &\quad \times \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \left[ \hat{B} \frac{\hat{G}^+(E) - \hat{G}^+(E - \hbar\omega)}{\hbar\omega} \hat{v}_x \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \hat{v}_x \frac{\hat{G}^-(E + \hbar\omega) - \hat{G}^-(E)}{\hbar\omega} \hat{B} \right] \right\} \\ &\quad - \frac{e}{\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{x}, \hat{B} \right] \right), \end{aligned} \quad (1.18)$$

jehož limita  $\omega \rightarrow 0$  popisuje odezvu na statické elektrické pole

$$\begin{aligned} \delta B(t) = & -i\hbar e E_x \int dE f_{FD}(E) \\ & \times \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \left[ \hat{B} \frac{d\hat{G}^+(E)}{dE} \hat{v}_x - \hat{v}_x \frac{d\hat{G}^-(E)}{dE} \hat{B} \right] \right\} \\ & - \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{e}{\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \text{Tr} \left( f_{FD}(\hat{H}) [\hat{x}, \hat{B}] \right). \end{aligned} \quad (1.19)$$

### 1.3.1 Proudová odezva

K získání proudové odezvy ve směru osy  $x$  nyní stačí za operátor  $\hat{B}$  vzít operátor odpovídající proudové hustoty, který má v použité kalibraci elektrického pole tvar

$$\hat{j}_x = -\frac{e}{V} \hat{v}_x + \frac{e^2}{iVm^*\omega} E_x e^{i\omega t}. \quad (1.20)$$

Druhý člen dá příspěvek lineární v  $E_x$  už při středování s rovnovážnou maticí hustoty  $f_{FD}(\hat{H})$

$$j_x^{\text{gauge}} = \frac{e^2}{iVm^*\omega} E_x e^{i\omega t} \text{Tr} \left( f_{FD}(\hat{H}) \right), \quad (1.21)$$

do Kubovy formule (1.19) je pak nutno dosadit už jen člen první. Potenciálně divergentní část výrazu řádu  $1/\omega$  je

$$\frac{e^2}{V\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \text{Tr} \left( f_{FD}(\hat{H}) [\hat{x}, \hat{v}_x] \right) = \frac{e^2}{Vm^*\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \text{Tr} \left( f_{FD}(\hat{H}) [\hat{x}, \hat{p}_x] \right) = -j_x^{\text{gauge}}, \quad (1.22)$$

takže právě odečte (1.21). Pro proudovou hustotu v přítomnosti statického elektrického pole potom dostáváme

$$j_x(t) = \frac{i\hbar e^2}{V} E_x \int dE f_{FD}(E) \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \hat{v}_x \left[ \frac{d\hat{G}^+(E)}{dE} - \frac{d\hat{G}^-(E)}{dE} \right] \hat{v}_x \right\}. \quad (1.23)$$

Tento výraz můžeme dále zjednodušit použitím vztahu

$$\delta(E - \hat{H}) = \frac{1}{2\pi i} \left[ \hat{G}^-(E) - \hat{G}^+(E) \right] \quad (1.24)$$

a následnou integrací per-partes na finální tvar

$$j_x(t) = \frac{\pi\hbar e^2}{V} E_x \int dE \left[ -\frac{df_{FD}(E)}{dE} \right] \text{Tr} \left[ \delta(E - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(E - \hat{H}) \hat{v}_x \right], \quad (1.25)$$

který při teplotě  $T = 0$  K přejde na

$$j_x(t) = \frac{\pi\hbar e^2}{V} E_x \text{Tr} \left[ \delta(E_F - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(E_F - \hat{H}) \hat{v}_x \right]. \quad (1.26)$$

### 1.3.2 Změna obsazení kanálů

Pro zjištění, jakou nábojovou změnu v pravém kanálu způsobí aplikace elektrického pole  $E_x$ , dosadíme do (1.19)  $\hat{B} = -e\hat{P}_R$ . Díky komutační relaci  $[\hat{x}, \hat{P}_R] = 0$  máme

$$\begin{aligned} \delta Q_R(t) &= i\hbar e^2 E_x \int dE f_{FD}(E) \\ &\quad \times \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \left[ \hat{P}_R \frac{d\hat{G}^+(E)}{dE} \hat{v}_x - \hat{v}_x \frac{d\hat{G}^-(E)}{dE} \hat{P}_R \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Ačkoli je toto velmi kompaktní výraz pro  $\delta Q_R(t)$ , pro pozdější použití bude výhodnější poněkud jiný tvar.  $\delta$ -funkci rozepíšeme podle (1.24)

$$\begin{aligned} \delta Q_R(t) &= \frac{\hbar e^2}{2\pi} E_x \int dE f_{FD}(E) \text{Tr} \left\{ \frac{d}{dE} [\hat{G}^+(E) \hat{v}_x \hat{G}^-(E)] \hat{P}_R \right. \\ &\quad \left. - \left[ \hat{G}^-(E) \hat{v}_x \frac{d\hat{G}^-(E)}{dE} + \frac{d\hat{G}^+(E)}{dE} \hat{v}_x \hat{G}^+(E) \right] \hat{P}_R \right\} \end{aligned} \quad (1.28)$$

a všimneme si, že v důsledku očividné identity  $(\hat{G}^+)^\dagger = \hat{G}^-$  platí rovnost

$$\text{Tr} \left\{ \frac{d\hat{G}^+(E)}{dE} \hat{v}_x \hat{G}^+ \hat{P}_R \right\} = \overline{\text{Tr} \left\{ \hat{G}^- \hat{v}_x \frac{d\hat{G}^-(E)}{dE} \hat{P}_R \right\}}. \quad (1.29)$$

V tom případě je dále

$$\begin{aligned} &\text{Tr} \left\{ \left[ \hat{G}^-(E) \hat{v}_x \frac{d\hat{G}^-(E)}{dE} + \frac{d\hat{G}^+(E)}{dE} \hat{v}_x \hat{G}^+(E) \right] \hat{P}_R \right\} \\ &= 2 \text{Re} \text{Tr} \left\{ \frac{d\hat{G}^+(E)}{dE} \hat{v}_x \hat{G}^+ \hat{P}_R \right\} \\ &= 2 \text{Re} \text{Tr} \left\{ \frac{d}{dE} [\hat{G}^+(E) \hat{v}_x \hat{G}^+(E')] \Big|_{E=E'} \hat{P}_R \right\}, \end{aligned} \quad (1.30)$$

čímž nahradíme poslední dva členy v (1.28). Po provedení per-partes ve členu prvním dostaneme  $\delta Q_R(t) = \delta Q_R^{(1)}(t) + \delta Q_R^{(2)}(t)$ , kde

$$\delta Q_R^{(1)}(t) = \frac{\hbar e^2}{2\pi} E_x \int dE \left[ -\frac{df_{FD}(E)}{dE} \right] \text{Tr} \left[ \hat{G}^+(E) \hat{v}_x \hat{G}^-(E) \hat{P}_R \right], \quad (1.31)$$

$$\delta Q_R^{(2)}(t) = \frac{\hbar e^2}{\pi} E_x \int dE f_{FD}(E) \text{Re} \text{Tr} \left\{ \frac{d}{dE} [\hat{G}^+(E) \hat{v}_x \hat{G}^+(E')] \Big|_{E=E'} \hat{P}_R \right\}. \quad (1.32)$$

Za nulové absolutní teploty lze explicitně provést integraci v (1.31) s výsledkem

$$\delta Q_R^{(1)}(t) = \frac{\hbar e^2}{2\pi} E_x \text{Tr} \left[ \hat{G}^+(E_F) \hat{v}_x \hat{G}^-(E_F) \hat{P}_R \right]. \quad (1.33)$$

Pro důkaz identit spojených se zachováním náboje je výhodnější dosadit  $\hat{B} = -e\hat{P}_R$  již do (1.11), čímž získáme

$$\delta Q_R(t) = \frac{e^2}{\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \int_{-\infty}^0 dt' e^{(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{P}_R \right] \right). \quad (1.34)$$

Přímým důsledkem vztahu  $\hat{P}_R = 1 - \hat{P}_L$  pak je očekávaná rovnost

$$\delta Q_R(t) = -\delta Q_L(t). \quad (1.35)$$

### 1.3.3 Příčný proud a rovnice kontinuity

Zavedeme zobecněnou souřadnici  $\hat{Z} = -\hat{P}_L + \hat{P}_R$  a příslušnou rychlost  $\hat{v}_Z = [\hat{Z}, \hat{H}]/i\hbar$ . Celkový proud ve směru  $Z$ , vyvolaný polem  $E_x$ , získáme dosazením<sup>3</sup>  $\hat{J}_Z = -e\hat{v}_Z/2$  na místo operátoru  $\hat{B}$  ve vztahu (1.11)

$$J_Z(t) = \frac{e^2}{2\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \int_{-\infty}^0 dt' e^{(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{v}_Z \right] \right). \quad (1.36)$$

Díky cykličnosti stopy a nulovosti komutátoru  $f_{\text{FD}}(\hat{H})$  s hamiltoniánem  $\hat{H}$  je

$$J_Z(t) = \frac{e^2}{2\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \int_0^{\infty} dt' e^{-(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x, \hat{v}_Z^I(t') \right] \right), \quad (1.37)$$

a protože  $\hat{v}_x$  ani  $\hat{v}_Z$  nezávisí explicitně na čase, můžeme provést integraci per-partes, vedoucí k výrazu

$$\begin{aligned} J_Z(t) &= \frac{e^2}{2\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} e^{-(i\omega+\epsilon)t} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x, \hat{Z}^I(t') \right] \right) \Big|_{t'=0}^{\infty} \\ &+ \frac{e^2}{2\hbar\omega} E_x e^{i\omega t} \int_0^{\infty} dt' (\epsilon + i\omega) e^{-(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x, \hat{Z}^I(t') \right] \right). \end{aligned} \quad (1.38)$$

První část nepřispívá, neboť  $[\hat{v}_x, \hat{Z}] = 0$ , ve zbytku můžeme navíc opustit integrál násobený  $\epsilon$  (viz dodatek B)

$$\begin{aligned} J_Z(t) &= i \frac{e^2}{2\hbar} E_x e^{i\omega t} \int_0^{\infty} dt' e^{-(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x, \hat{Z}^I(t') \right] \right) \\ &= i \frac{e^2}{2\hbar} E_x e^{i\omega t} \int_{-\infty}^0 dt' e^{(i\omega+\epsilon)t'} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{v}_x^I(t'), \hat{Z} \right] \right). \end{aligned} \quad (1.39)$$

---

<sup>3</sup>Faktor 1/2 se objevuje proto, že  $Z$ -ový rozměr vzorku je 2.

Odtud už je použitím (1.34) a (1.35) vidět, že platí rovnice kontinuity ve tvaru

$$J_Z(t) = \frac{d}{dt} \delta Q_R(t). \quad (1.40)$$

Kromě toho je ve statickém případě příčný proud nulový, protože v limitě  $\omega \rightarrow 0$  veličina  $\delta Q_R(t)$  na čase ve skutečnosti nezávisí.

## 1.4 Odezva na vnitřní pole

V této části popíšeme odezvu studovaného systému na vnitřní pole, reprezentované poruchovým hamiltoniánem

$$\hat{H}'(t) = -W e^{i\omega t} \hat{P}_R. \quad (1.41)$$

Nejde tedy o nic jiného než o změnu energetického rozdílu mezi kanály. Protože veškerá odvození jsou zcela analogická jako v předchozím případě elektrického pole  $E_x$ , v mnoha ohledech i jednodušší, omezíme se pouze na výčet výsledných vzorců.

$$\begin{aligned} \delta B(t) = & -W e^{i\omega t} \int dE f_{\text{FD}}(E) \\ & \times \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \left[ \hat{P}_R \hat{G}^-(E + \hbar\omega) \hat{B} + \hat{B} \hat{G}^+(E - \hbar\omega) \hat{P}_R \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.42)$$

### Proudová odezva ve směru osy $x$

$$j_x(t) \Big|_{\omega \rightarrow 0} = \frac{e}{V} W \int dE f_{\text{FD}}(E) \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \left[ \hat{P}_R \hat{G}^-(E) \hat{v}_x + \hat{v}_x \hat{G}^+(E) \hat{P}_R \right] \right\} \quad (1.43)$$

### Změna obsazení kanálů

$$\delta Q_R(t) \Big|_{\omega \rightarrow 0} = eW \int dE f_{\text{FD}}(E) \text{Tr} \left\{ \delta(E - \hat{H}) \hat{P}_R \left[ \hat{G}^-(E) + \hat{G}^+(E) \right] \hat{P}_R \right\} \quad (1.44)$$

### Identity o zachování náboje

$$\delta Q_R(t) = -\delta Q_L(t) \quad (1.45)$$

$$J_Z(t) = \frac{d}{dt} \delta Q_R(t) \quad (1.46)$$

# Kapitola 2

## Elastický rozptyl na příměsích

Ačkoli pro popis mnoha vlastností pevných látek je dokonalý krystal dobrým modelem, v případě transportu tomu tak není. Ideálně periodické prostředí vykazuje nekonečnou vodivost, protože v něm není přítomen žádný mechanismus, který by působil proti aplikovanému poli. Naproti tomu v reálné pevné látce jak nečistoty, tak termální kmity mříže způsobují rozpad elektronových stavů s daným kvaziimpulsem (Blochových stavů).

V této práci se omezíme na natolik nízké teploty, kdy už rozptyl elektronů na fononech nehraje podstatnou roli, a můžeme se tedy omezit pouze na elastický rozptyl na příměsích. Použijeme model zcela neuspořádané binární slitiny: V každém mřížovém bodě se s pravděpodobností  $x$  nachází atom typu A a s pravděpodobností  $y = 1 - x$  atom typu B.

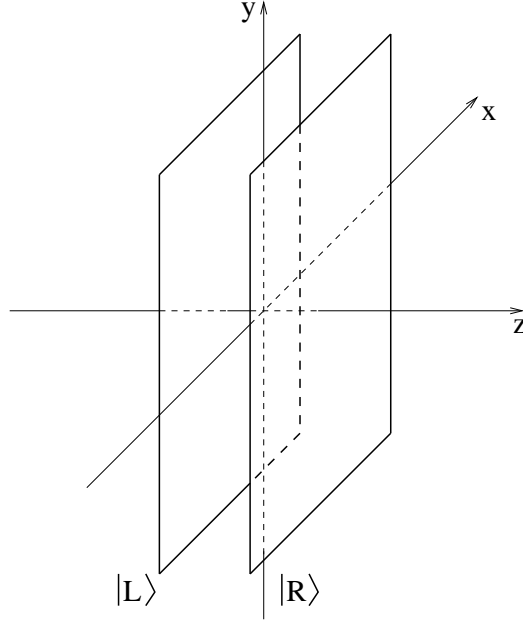
Budeme se zabývat systémem složeným ze dvou paralelních dvourozměrných částí (obrázek 2.1), který je v rovině  $x$ - $y$  homogenní a izotropní. Určení polohy ve směru osy  $z$  se redukuje pouze na dvě možnosti — levou a pravou. Odpovídající Hilbertův prostor má tvar direktního součinu  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{2D} \otimes \mathbb{C}_2$ , přičemž díky absenci jakýchkoli spinově závislých procesů jsou jednotlivé části v  $\mathcal{H}_{2D} = \mathcal{H}_{2D\uparrow} \oplus \mathcal{H}_{2D\downarrow}$  zcela nezávislé. Této vlastnosti využijeme a výklad provedeme pouze pro jeden z těchto podprostorů. V  $\mathcal{H}_{2D\uparrow}$  máme dvě přirozené báze — Wannierovy stavy  $\{|n\uparrow\rangle\}$ , lokalizované v mřížových polohách indexovaných  $n$ , a Blochovy stavy  $\{|\vec{k}\uparrow\rangle\}$ , které jsou naopak delokalizované v celé rovině  $x$ - $y$ .<sup>1</sup> V prostoru  $\mathbb{C}_2$  se nabízí báze  $\{|i\rangle\}$ , kde  $i \in \{L, R\}$ .

Do našeho modelu zahrneme i možnost, že v jednotlivých jámách jsou různé dvojice atomů A a B zastoupené v různých poměrech. Hamiltonián má tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U} = \hat{H}_0 + \sum_{\nu} \hat{U}_{\nu}, \quad (2.1)$$

přičemž  $\nu$  je multiindex  $\nu = (n, i)$ . Operátor  $\hat{H}_0$  má symetrii mříže, operátor  $\hat{U}_{\nu}$  je s pravděpodobností  $x_i$  roven operátoru  $\hat{U}_{\nu}^A$  a s pravděpodobností  $y_i = 1 - x_i$  operátoru  $\hat{U}_{\nu}^B$ . O  $\hat{U}_{\nu}^{A,B}$  budeme dále předpokládat, že jsou krátkodosahové, přesněji  $\hat{U}_{\nu}^{A,B} = |\nu\rangle U_i^{A,B} \langle \nu|$ .

<sup>1</sup>Dále už spinový index pro větší přehlednost vzorců nevypisujeme.



Obrázek 2.1: Dva paralelní dvoudimenzionální podsystémy

Výsledky makroskopických měření na konkrétním uspořádání atomů A a B nezávisejí, zatímco vzorce získané v předchozí kapitole ano. Abychom popsali reálné experimenty, musíme nakonec přes všechny možné atomové konfigurace středovat. V následujících dvou odstavcích provedeme toto konfigurační středování v aproximaci koherentního potenciálu (CPA), přičemž pouze jemně modifikujeme postup uvedený v [7].

## 2.1 CPA pro jednočásticovou Greenovu funkci

Středovanou Greenovu funkci označíme  $\langle \hat{G}(z) \rangle$ ,

$$\langle \hat{G}(z) \rangle = \left[ z - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}(z) \right]^{-1}, \quad (2.2)$$

kde selfenergie<sup>2</sup>  $\hat{\Sigma}$  má symetrii mříže jako  $\hat{H}_0$ . Provedeme-li rozklad  $\hat{H} = (\hat{H}_0 + \hat{\Sigma}) + (\hat{U} - \hat{\Sigma})$ , dostaneme pro úplnou Greenovu funkci vyjádření

$$\hat{G} = \langle \hat{G} \rangle + \langle \hat{G} \rangle (\hat{U} - \hat{\Sigma}) \hat{G} = \langle \hat{G} \rangle + \langle \hat{G} \rangle \hat{T} \langle \hat{G} \rangle. \quad (2.3)$$

Zde zavedená  $T$ -matice

$$\begin{aligned} \hat{T} &= (\hat{U} - \hat{\Sigma}) + (\hat{U} - \hat{\Sigma}) \langle \hat{G} \rangle (\hat{U} - \hat{\Sigma}) + \dots \\ &= (\hat{U} - \hat{\Sigma}) \left[ 1 + \langle \hat{G} \rangle \hat{T} \right] = \left[ 1 + \hat{T} \langle \hat{G} \rangle \right] (\hat{U} - \hat{\Sigma}) \end{aligned} \quad (2.4)$$

<sup>2</sup>Proměnnou  $z$  budeme ve zbytku tohoto odstavce vynechávat.



nám umožňuje zapsat podmínku pro selfenergii  $\hat{\Sigma}$ , kterou získáme středováním rovnice (2.3), v kompaktním tvaru

$$\langle \hat{T} \rangle = 0. \quad (2.5)$$

Protože je operátor  $\hat{\Sigma}$  v rovině  $x$ - $y$  periodický, lze ho rozložit na sumu

$$\hat{\Sigma} = \sum_{\nu} \hat{\Sigma}_{\nu}. \quad (2.6)$$

Ačkoli tento zápis neznamena žádný předpoklad o lokalizaci  $\hat{\Sigma}_{\nu}$  na jediný mřížový bod, dovoluje zavést atomovou  $T$ -matici následujícím postupem: Na jednu z mřížových poloh vrátíme skutečný atomový potenciál, tj. uvážíme hamiltonián  $\hat{H}' = (\hat{H}_0 + \hat{\Sigma}) + (\hat{U}_{\nu} - \hat{\Sigma}_{\nu})$ . Odpovídající Greenova funkce je pak dána tímž výrazem jako (2.3), pouze se záměnou  $\hat{T}$  za

$$\hat{T}_{\nu} = \left( \hat{U}_{\nu} - \hat{\Sigma}_{\nu} \right) \left[ 1 + \langle \hat{G} \rangle \hat{T}_{\nu} \right]. \quad (2.7)$$

Dále odvodíme vyjádření celkové  $T$ -matice pomocí atomových  $T$ -matic (viz například [8]). Za tímto účelem provedeme rozklad  $\hat{T} = \sum_{\nu} \hat{Q}_{\nu}$ , který znamená pouze označení

$$\hat{Q}_{\nu} = \left( \hat{U}_{\nu} - \hat{\Sigma}_{\nu} \right) \left[ 1 + \langle \hat{G} \rangle \hat{T} \right] = \left( \hat{U}_{\nu} - \hat{\Sigma}_{\nu} \right) \left[ 1 + \langle \hat{G} \rangle \sum_{\mu} \hat{Q}_{\mu} \right]. \quad (2.8)$$

Převedením  $\hat{Q}_{\nu}$  na levou stranu a násobením příslušnou inverzní maticí snadno získáváme

$$\hat{Q}_{\nu} = \underbrace{\left[ 1 - \left( \hat{U}_{\nu} - \hat{\Sigma}_{\nu} \right) \langle \hat{G} \rangle \right]^{-1} \left( \hat{U}_{\nu} - \hat{\Sigma}_{\nu} \right)}_{\hat{T}_{\nu}} \left[ 1 + \langle \hat{G} \rangle \sum_{\mu \neq \nu} \hat{Q}_{\mu} \right]. \quad (2.9)$$

Pokud vše shrneme, máme vyjádření

$$\hat{T} = \sum_{\nu} \hat{Q}_{\nu}, \quad \hat{Q}_{\nu} = \hat{T}_{\nu} \left[ 1 + \langle \hat{G} \rangle \sum_{\mu \neq \nu} \hat{Q}_{\mu} \right], \quad (2.10)$$

přičemž snadno zjistíme, že použitím jiné části výrazu (2.4) bychom zcela stejným postupem dostali analogickou dvojici rovnic

$$\hat{T} = \sum_{\nu} \hat{Q}'_{\nu}, \quad \hat{Q}'_{\nu} = \left[ 1 + \sum_{\mu \neq \nu} \hat{Q}'_{\mu} \langle \hat{G} \rangle \right] \hat{T}_{\nu}. \quad (2.11)$$

Až do této chvíle byly prováděny pouze přesné úpravy, aproximaci směřující k CPA uvedeme až nyní.

- Předpokládáme, že existuje takový rozklad (2.6), kdy je možno zanedbat statistickou korelaci mezi atomovou  $T$ -maticí  $\hat{T}_\nu$  a efektivní vlnou  $\hat{Q}_\mu$ , pokud  $\nu \neq \mu$ . Jinými slovy

$$\langle \hat{T} \rangle = \sum_{\nu} \langle \hat{Q}_\nu \rangle, \quad \langle \hat{Q}_\nu \rangle = \langle \hat{T}_\nu \rangle \left[ 1 + \langle \hat{G} \rangle \sum_{\mu \neq \nu} \langle \hat{Q}_\mu \rangle \right] \quad (2.12)$$

je dobrou aproximací pro (2.10).

- Selfkonzistentní podmínka pro  $\hat{\Sigma}_\nu$  následně je

$$\langle \hat{T}_\nu \rangle = x_i \hat{T}_\nu^A + y_i \hat{T}_\nu^B = 0. \quad (2.13)$$

Jednoduchými úpravami, během nichž se uplatní vyjádření  $\hat{T}_\nu$ , použité už v (2.9), a též jemu analogické, vzniklé z jiné části (2.4), lze dospět k soustavě rovnic

$$\hat{\Sigma}_\nu = x_i \hat{U}_\nu^A + y_i \hat{U}_\nu^B - \left( \hat{U}_\nu^A - \hat{\Sigma}_\nu \right) \langle \hat{G} \rangle \left( \hat{U}_\nu^B - \hat{\Sigma}_\nu \right). \quad (2.14)$$

Dále dosadíme  $\hat{U}_\nu^{A,B} = |\nu\rangle U_i^{A,B} \langle \nu|$  a budeme předpokládat řešení pro efektivní médium v obdobném tvaru  $\hat{\Sigma}_\nu = |\nu\rangle \Sigma_i \langle \nu|$ . Tím se (2.14) zredukuje na dvě svázané rovnice pro skalární neznámé  $\Sigma_i$

$$\Sigma_i = x_i U_i^A + y_i U_i^B - \left( U_i^A - \Sigma_i \right) \langle \nu | \langle \hat{G} \rangle | \nu \rangle \left( U_i^B - \Sigma_i \right). \quad (2.15)$$

Zde je podstatné, že díky periodicitě systému v rovině  $x$ - $y$  veličina  $F_i(z) = \langle \nu | \langle \hat{G}(z) \rangle | \nu \rangle$  nezávisí na celém multiindexu  $\nu$ , ale pouze na jeho části  $i$ .

## 2.2 CPA pro koeficienty lineární odezvy

Pro získání konfiguračně středovaných veličin, týkajících se nerovnovážných vlastností systému, potřebujeme aproximovat i složitější výrazy než  $\langle \hat{G}(z) \rangle$ . Vrátime-li se k výsledkům první kapitoly, zjistíme, že pro lineární odezvu na vnější elektrické pole  $E_x$  je podstatný ještě

$$\hat{K}(z_1, z_2) = \left\langle \hat{G}(z_1) \hat{v}_x \hat{G}(z_2) \right\rangle. \quad (2.16)$$

Do (2.16) dosadíme vyjádření Greenových funkcí pomocí  $T$ -matic (2.3), které následně rozepíšeme podle (2.10) a (2.11)<sup>3</sup>

$$\hat{K} = \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle + \langle \hat{G} \rangle \underbrace{\left\langle \hat{T} \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle \hat{T} \right\rangle}_{\hat{\Gamma}} \langle \hat{G} \rangle, \quad (2.17)$$

---

<sup>3</sup>Vypisování závislostí jednotlivých operátorů na  $z_1, z_2$  budeme, podobně jako v předchozí části, pro větší přehlednost výrazů vynechávat.

$$\hat{\Gamma} = \sum_{\mu, \nu} \hat{\Gamma}_{\mu\nu} = \sum_{\mu, \nu} \left\langle \hat{T}_\mu \left( 1 + \langle \hat{G} \rangle \sum_{\pi \neq \mu} \hat{Q}_\pi \right) \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle \left( 1 + \sum_{\sigma \neq \nu} \hat{Q}_\sigma \langle \hat{G} \rangle \right) \hat{T}_\nu \right\rangle. \quad (2.18)$$

V dalším kroku opět předpokládáme zanedbatelnou statistickou korelaci mezi atomovou  $T$ -maticí a efektivní vlnou, což vede k aproximaci

$$\hat{\Gamma}_{\mu\nu} = \left\langle \hat{T}_\mu \left\langle \left( 1 + \langle \hat{G} \rangle \sum_{\pi \neq \mu} \hat{Q}_\pi \right) \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle \left( 1 + \sum_{\sigma \neq \nu} \hat{Q}_\sigma \langle \hat{G} \rangle \right) \right\rangle \hat{T}_\nu \right\rangle. \quad (2.19)$$

Nyní si všimneme, že operátory  $\hat{T}_\mu$ ,  $\hat{T}_\nu$  se v případě  $\mu \neq \nu$  středují nezávisle, přičemž navíc platí (2.13). Díky tomu  $\hat{\Gamma}_{\mu\nu} = \hat{\Gamma}_\nu \delta_{\mu\nu}$  se zřejmou definicí  $\hat{\Gamma}_\nu$ . Po roznásobení závorek v (2.19) a opětném použití (2.13) dostaneme pro vrcholovou korekci vyjádření

$$\hat{\Gamma}_\nu = \left\langle \hat{T}_\nu \langle \hat{G} \rangle \left( \hat{v}_x + \sum_{\pi \neq \nu} \hat{\Gamma}_\pi \right) \langle \hat{G} \rangle \hat{T}_\nu \right\rangle. \quad (2.20)$$

Pokud ještě ve vnitřních závorkách přičteme a odečteme  $\hat{\Gamma}_\nu$ , získáme nakonec

$$\hat{\Gamma}_\nu = \left\langle \hat{T}_\nu \hat{K} \hat{T}_\nu \right\rangle - \left\langle \hat{T}_\nu \langle \hat{G} \rangle \hat{\Gamma}_\nu \langle \hat{G} \rangle \hat{T}_\nu \right\rangle. \quad (2.21)$$

Tato rovnice, společně s (2.17), určuje hledanou aproximaci pro  $\hat{K}$ , která je konzistentní s dříve uvedeným přiblížením pro  $\langle \hat{G} \rangle$ , jak je podrobně rozebráno v [7].

V následujícím postupu se omezíme na případ, kdy  $\hat{U}_\nu^{A,B} = |\nu\rangle U_i^{A,B} \langle \nu|$ . Přírodním důsledkem tohoto tvaru rozptylového potenciálu je obdobný tvar pro atomovou  $T$ -maticí, tj.  $\hat{T}_\nu = |\nu\rangle T_\nu \langle \nu|$ .<sup>4</sup> Dosadíme-li tento výsledek do (2.21), zjistíme, že rovněž  $\hat{\Gamma}_\nu = |\nu\rangle \Gamma_\nu \langle \nu|$ . Pro  $\Gamma_\nu$  máme rovnici

$$\Gamma_\nu = \left\langle T_\nu \langle \nu | \hat{K} | \nu \rangle T_\nu \right\rangle - \left\langle T_\nu \langle \nu | \langle \hat{G} \rangle | \nu \rangle \Gamma_\nu \langle \nu | \langle \hat{G} \rangle | \nu \rangle T_\nu \right\rangle, \quad (2.22)$$

jejímž řešením, po zavedení  $F_i = \langle \nu | \langle \hat{G} \rangle | \nu \rangle$ , je

$$\Gamma_\nu = \underbrace{\langle \nu | \hat{K} | \nu \rangle \langle T_\nu T_\nu \rangle}_{\mathcal{L}_i} \left[ 1 + \langle T_\nu T_\nu \rangle F_i F_i \right]^{-1}. \quad (2.23)$$

Vztah (2.17) potom přejde na

$$\hat{K} = \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle + \langle \hat{G} \rangle \sum_{\nu} |\nu\rangle \mathcal{L}_i \frac{1}{2n_S S} \text{Tr}_{2D} \left( \langle i | \hat{K} | i \rangle \right) \langle \nu | \langle \hat{G} \rangle, \quad (2.24)$$

<sup>4</sup>Použitím (2.7) ihned vidíme, že  $\langle \mu | \hat{T}_\nu = 0$ , pokud  $\mu \neq \nu$ . Podobně též  $\hat{T}_\nu | \mu \rangle = 0$ .

kde  $\text{Tr}_{2\text{D}}(\dots)$  je částečná stopa přes  $\mathcal{H}_{2\text{D}}$ , který obsahuje i spinový stupeň volnosti. Při úpravě jsme využili faktu, že maticový element  $\langle \nu | \hat{K} | \nu \rangle$  závisí, díky předpokladu o homogenitě systému v rovině  $x$ - $y$ , pouze na indexu  $i$ , a lze tedy psát

$$\langle \nu | \hat{K} | \nu \rangle = \frac{1}{2n_S S} \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle i | \hat{K} | i \rangle \right). \quad (2.25)$$

Zde  $n_S$  je plošná koncentrace mřížových bodů ve vrstvě, přičemž uvažujeme, že je v obou vrstvách stejná. Rovnici (2.24) lze vyřešit tak, že najdeme vyjádření pro jednotlivé stopy a dosadíme je zpět. Provedeme-li stopu obou stran (2.24), dostaneme soustavu dvou lineárních rovnic pro  $\text{Tr}_{2\text{D}}(\langle L | \hat{K} | L \rangle)$  a  $\text{Tr}_{2\text{D}}(\langle R | \hat{K} | R \rangle)$ .

$$\begin{aligned} & \left[ 1 - \frac{\mathcal{L}_L}{2n_S S} \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle L | \langle \hat{G} \rangle | L \rangle \langle L | \langle \hat{G} \rangle | L \rangle \right) \right] \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle L | \hat{K} | L \rangle \right) \\ & - \frac{\mathcal{L}_R}{2n_S S} \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle L | \langle \hat{G} \rangle | R \rangle \langle R | \langle \hat{G} \rangle | L \rangle \right) \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle R | \hat{K} | R \rangle \right) = \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle L | \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle | L \rangle \right) \\ & \left[ 1 - \frac{\mathcal{L}_R}{2n_S S} \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle R | \langle \hat{G} \rangle | R \rangle \langle R | \langle \hat{G} \rangle | R \rangle \right) \right] \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle R | \hat{K} | R \rangle \right) \\ & - \frac{\mathcal{L}_L}{2n_S S} \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle R | \langle \hat{G} \rangle | L \rangle \langle L | \langle \hat{G} \rangle | R \rangle \right) \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle L | \hat{K} | L \rangle \right) = \text{Tr}_{2\text{D}} \left( \langle R | \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle | R \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

## 2.3 Limita slabého rozptylu

V této části budeme předpokládat, že  $U_i^A - U_i^B$  je malé, a rozvineme dříve odvozené rovnice — (2.15), (2.24) a (2.26) — do druhého řádu v  $U_i^A - U_i^B$ .

### 2.3.1 Jednočásticová Greenova funkce

Sovenovu rovnici (2.15) zjednodušíme tím, že na její pravou stranu dosadíme za  $\Sigma_i$  pouze  $\langle U_i \rangle = x_i U_i^A + y_i U_i^B$ . Po uplatnění  $x_i + y_i = 1$  je

$$\Sigma_i^{(w)} = x_i U_i^A + y_i U_i^B + x_i y_i (U_i^A - U_i^B)^2 \tilde{F}_i, \quad (2.27)$$

kde

$$\tilde{F}_i(z) = \langle \nu | \left( z - \hat{H}_0 - \langle \hat{U} \rangle \right)^{-1} | \nu \rangle. \quad (2.28)$$

Pokud dále  $\langle U_i \rangle = 0$ , což je vždy možno zabezpečit zahrnutím této střední hodnoty do hamiltoniánu  $\hat{H}_0$ , dospějeme k jednoduchému vyjádření

$$\Sigma_i^{(w)} = x_i y_i (U_i^A - U_i^B)^2 F_{0i} = \mathcal{L}_i^{(w)} F_{0i}. \quad (2.29)$$

Význam  $F_{0i}$  je zřejmý a o rozumnosti označení zbytku jako  $\mathcal{L}_i^{(w)}$  se přesvědčíme vzápětí.

### 2.3.2 Koeficienty lineární odezvy

Limita slabého rozptylu pro rovnice (2.24) a (2.26) se skládá ze dvou kroků. V první řadě je třeba dosadit (2.29) za selfenergii do  $\langle \hat{G} \rangle$  a s odpovídající přesností vypočítat stopy  $\text{Tr}_{2D}(\dots)$ <sup>5</sup>, v druhé řadě pak aproximovat  $\mathcal{L}_i$  zavedené v (2.23)

$$\mathcal{L}_i = \langle T_\nu T_\nu \rangle \left[ 1 + \langle T_\nu T_\nu \rangle F_i F_i \right]^{-1} \approx \langle T_\nu T_\nu \rangle \approx \langle (U_\nu - \Sigma_\nu)^2 \rangle. \quad (2.30)$$

Dále můžeme za  $\Sigma_\nu$  dosadit  $\langle U_i \rangle$  a po jednoduchých úpravách, využívajících  $\langle U_\nu U_\nu \rangle = x_i (U_i^A)^2 + y_i (U_i^B)^2$ , dostaneme

$$\mathcal{L}_i^{(w)} = x_i y_i (U_i^A - U_i^B)^2. \quad (2.31)$$

---

<sup>5</sup>K těmto výpočtům se vrátíme v konkrétním případě ve čtvrté kapitole. Ukazuje se, že tyto stopy jsou, zhruba řečeno, úměrné  $1/\text{Re}\Sigma$ .

## Kapitola 3

# Kvantová dvojjáma bez přítomnosti magnetického pole

V předcházejících kapitolách jsme uvažovali elektronový systém s určitými vlastnostmi bez jakékoli zmínky o jeho konkrétní realizaci. Ve zbylých dvou částech se budeme zabývat polovodičovou vrstevnatou strukturou načrtnutou na obrázku 3.1, která právě tyto vlastnosti, alespoň v jistém přiblížení, má. Na obrázku 3.2 je naznačen idealizovaný profil jednoelektronového potenciálu a jemu odpovídající dva nejnižší kvantové stavy spolu s jejich energiemi.

Analytické řešení jenorozměrné Schrödingerovy rovnice s takovým potenciálem neexistuje a řešení numerické, ačkoli poměrně jednoduché, není pro další úvahy vhodné. Znamenalo by provádět všechny navazující výpočty taktéž numericky. Naštěstí lze použít jednoduchou aproximaci, která v mnohých případech poskytne dobrou představu o závislosti studovaných vlastností vzorku na několika přirozených parametrech. Touto aproximací je metoda těsné vazby, jejíž aplikaci na tento a jemu podobné systémy lze nalézt v [9].<sup>1</sup>

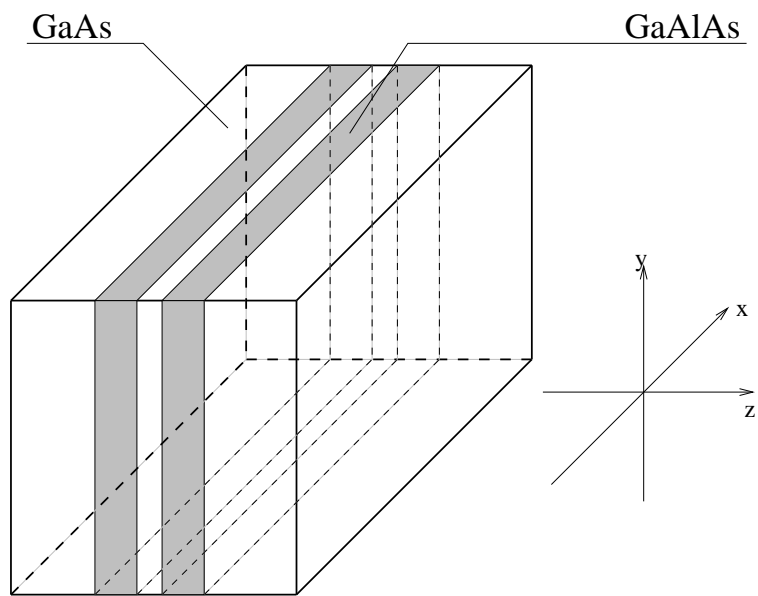
Budeme předpokládat, že pohyb částice ve směru osy  $z$  lze popsat v rámci Hilbertova prostoru  $\mathcal{H}_z = \mathbb{C}_2$  s bazí  $\{|L\rangle, |R\rangle\}$ , což jsou nejnižší stavy v levé, respektive pravé jámě. Překryv  $\langle L|R\rangle$  zanedbáme a tunelování vezmeme v úvahu zavedením přeskokové pravděpodobnosti  $t$ . Zmíněný postup je oprávněný v případě, že energetická škála, daná vzdáleností hladin v nezávislých jámách, je mnohem větší než  $t$ . Přidáme-li nakonec stupně volnosti odpovídající dvoudimenzionálnímu pohybu uvnitř jednotlivých vrstev, dostáváme hamiltonián (bez nečistot)

$$\langle \vec{k} | \hat{H}_0 | \vec{k} \rangle = \begin{pmatrix} \varepsilon - \Delta & t \\ t & \varepsilon + \Delta \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

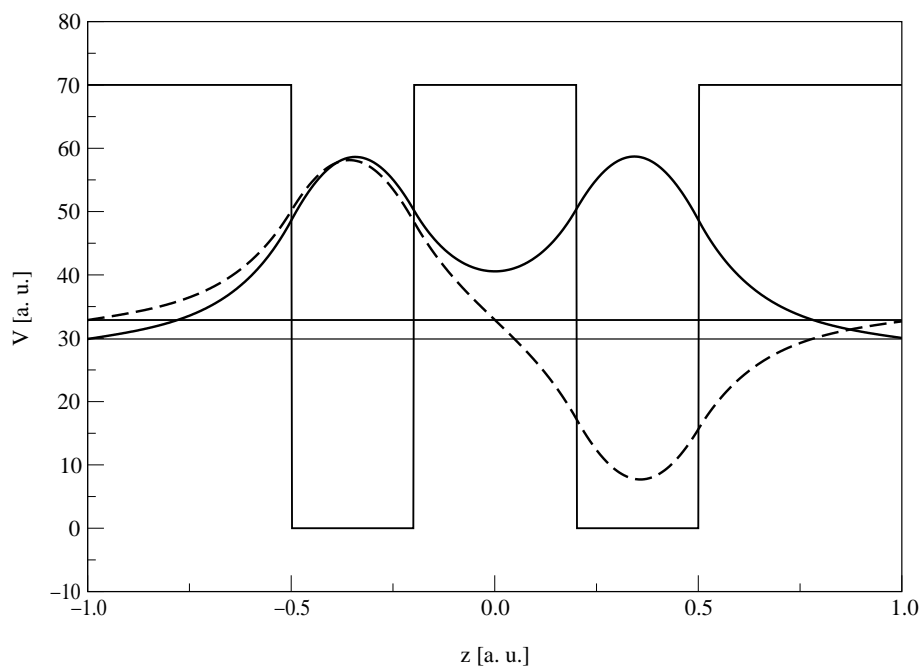
kde<sup>2</sup>  $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$  je disperzní relace v aproximaci efektivní hmotnosti a  $\Delta$  popisuje energetický rozdíl mezi dny jam.

<sup>1</sup>Poněkud jiný, ale velmi názorný přístup, je uveden v [10].

<sup>2</sup>Veškeré vyznačování funkčních závislostí budeme, kromě případů, kde by mohlo dojít k nedorozumění, vynechávat.



Obrázek 3.1: Kvantová dvojjáma.



Obrázek 3.2: Potenciálový profil ve směru osy  $z$  a dublet nejnižších stavů v případě symetrické pravoúhlé kvantové dvojjámy.

## 3.1 Hustota stavů

### 3.1.1 Systém bez nečistot

V první řadě najdeme vlastní stavy hamiltoniánu  $\hat{H}_0$ . Jak vypadá jejich závislost na souřadnicích  $x$  a  $y$  je zřejmé, konečně formulace (3.1) již předpokládá diagonalitu v těchto stupních volnosti. Standardní procedurou určíme vlastní energie hamiltoniánu (3.1)

$$E_{B,A} = \varepsilon \mp \sqrt{\Delta^2 + t^2} \quad (3.2)$$

a taktéž jeho vlastní stavy. Energeticky nižší označujeme  $|B\rangle$  — „bonding“, energeticky vyšší pak  $|A\rangle$  — „antibonding“.

$$|B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}}} |L\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}}} |R\rangle \quad (3.3)$$

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}}} |L\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}}} |R\rangle \quad (3.4)$$

Dále zavedeme neporušenou Greenovu funkci  $\hat{G}_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}$ , najdeme její maticové vyjádření v bázi  $\{|L\rangle, |R\rangle\}$  a přímočaře vypočteme lokální neporušené hustoty stavů, vztažené na jednotkovou plochu. Využijeme toho, že  $\text{Tr}_{2D}(\dots) = S/2\pi^2 \iint d^2k \dots$

$$\begin{aligned} g_{0L}(E) &= -\frac{1}{\pi S} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[ \langle L | \hat{G}_0^+(E) | L \rangle \right] \right\} \\ &= \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \left[ \left( 1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} \right) \theta \left( E + \sqrt{\Delta^2 + t^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( 1 - \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} \right) \theta \left( E - \sqrt{\Delta^2 + t^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} g_{0R}(E) &= -\frac{1}{\pi S} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[ \langle R | \hat{G}_0^+(E) | R \rangle \right] \right\} \\ &= \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \left[ \left( 1 - \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} \right) \theta \left( E + \sqrt{\Delta^2 + t^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( 1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} \right) \theta \left( E - \sqrt{\Delta^2 + t^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Celková hustota stavů je dána prostým součtem (3.5) a (3.6)

$$\begin{aligned} g_0(E) &= g_{0L}(E) + g_{0R}(E) \\ &= \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \left[ \theta \left( E + \sqrt{\Delta^2 + t^2} \right) + \theta \left( E - \sqrt{\Delta^2 + t^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$



Výrazy (3.5), (3.6) a (3.7) už na první pohled nemohou být zcela v pořádku, neboť popisují nekonečné pásy, obsahující nekonečný počet stavů. Ve skutečnosti ale v našem jednoduchém modelu máme (kapitola 2) jen tolik stavů, kolik je dvojnásobek (spin) mřížových bodů. Nejjednodušší postup, jak získat konečný pás, je omezit rozsah vlnových vektorů na  $0 < |\vec{k}| < k_M$ . Hodnotu  $k_M$ , popřípadě  $\varepsilon_M = \hbar^2 k_M^2 / 2m^*$ , vypočteme následujícím postupem: Hustota stavů dvourozměrného plynu je  $g_{2D}(E) = m^* / \pi \hbar^2 \theta(E)$ . Z požadavku

$$\int_{-\infty}^{\varepsilon_M} dE g_{2D}(E) = 2n_S \quad (3.8)$$

dostáváme

$$\varepsilon_M = \frac{2\pi\hbar^2}{m^*} n_S, \quad k_M = 2\sqrt{\pi n_S}. \quad (3.9)$$

Podrobnější popis zavedení tohoto modelu dvourozměrného pásu, společně s porovnáním s přesnějšími metodami, je uveden v [8].

### 3.1.2 Započtení nečistot (CPA)

Za hamiltonián systému vezmeme (2.1), přičemž  $\hat{H}_0$  má tvar (3.1). Rozmístění rozptylových center uvažujeme v jednotlivých jámách nezávislé, čehož důsledkem je diagonalita  $\hat{\Sigma}(z)$  vzhledem k  $\{|L\rangle, |R\rangle\}$ . Řešením rovnice  $\langle \hat{G}^+(E) \rangle (E - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}^+) = 1$ , kde  $\hat{\Sigma}^+ = \hat{\Sigma}(E + i\delta)$ , snadno dostáváme maticové elementy středované Greenovy funkce

$$\langle L, \vec{k} | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | L, \vec{k} \rangle = \frac{E - \varepsilon - \Delta - \Sigma_R^+}{(E - \varepsilon + \Delta - \Sigma_L^+)(E - \varepsilon - \Delta - \Sigma_R^+) - t^2}, \quad (3.10)$$

$$\langle R, \vec{k} | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | R, \vec{k} \rangle = \frac{E - \varepsilon - \Delta - \Sigma_L^+}{(E - \varepsilon + \Delta - \Sigma_L^+)(E - \varepsilon - \Delta - \Sigma_R^+) - t^2}, \quad (3.11)$$

$$\langle L, \vec{k} | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | R, \vec{k} \rangle = \frac{t}{(E - \varepsilon + \Delta - \Sigma_L^+)(E - \varepsilon - \Delta - \Sigma_R^+) - t^2}. \quad (3.12)$$

Kromě toho platí  $\langle R, \vec{k} | \hat{G}^+(E) | L, \vec{k} \rangle = \langle L, \vec{k} | \hat{G}^+(E) | R, \vec{k} \rangle$ . Maticové elementy  $\langle \hat{G}^-(E) \rangle$  se od uvedených liší pouze záměnou  $\Sigma_{L,R}^+$  za  $\Sigma_{L,R}^-$ , přitom  $\Sigma_{L,R}^- = \overline{\Sigma_{L,R}^+}$ .

Pro selfkonzistentní výpočet  $\Sigma_{L,R}^+$  z rovnic (2.15) potřebujeme vyjádření veličiny  $F_{L,R}^+$ . Přepíšeme-li její definici pomocí dvoudimenzionální stopy, jako jsme přepsali  $\langle \nu | \hat{K} | \nu \rangle$  v rovnici (2.25), a provedeme-li integraci rozkladem na parciální

zlomky, získáme

$$\begin{aligned}
F_L^+(E) &= \frac{1}{2n_S S} \text{Tr}_{2D} \left[ \langle L | \hat{G}^+(E) | L \rangle \right] \\
&= \frac{1}{\epsilon_M} \left\{ \frac{\epsilon_1 - \Delta_R + i\Gamma_R}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \left[ \ln(E - \epsilon_1) - \ln(E - \epsilon_M - \epsilon_1) \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{\epsilon_2 - \Delta_R + i\Gamma_R}{\epsilon_2 - \epsilon_1} \left[ \ln(E - \epsilon_1) - \ln(E - \epsilon_M - \epsilon_1) \right] \right\}. \quad (3.13)
\end{aligned}$$

Zde jsme zavedli označení  $\Sigma_{L,R}^+ = \Lambda_{L,R} - i\Gamma_{L,R}$  ( $\Lambda_{L,R}, \Gamma_{L,R} \in \mathbb{R}$ ) a následně  $\Delta_L = -\Delta + \Lambda_L$  a  $\Delta_R = \Delta + \Lambda_R$ . Dále  $\epsilon_{1,2}$  jsou kořeny jmenovatelů ve výrazech (3.10)–(3.12), uvažovaných jako funkce proměnné  $\epsilon = E - \varepsilon$ . Jejich explicitní tvar je

$$\begin{aligned}
\epsilon_{1,2} &= \frac{1}{2}(\Delta_L + \Delta_R - i\Gamma_L - i\Gamma_R) \\
&\mp \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_L + \Delta_R - i\Gamma_L - i\Gamma_R)^2 - 4(i\Gamma_R - \Delta_R)(i\Gamma_L - \Delta_L) + 4t^2}, \quad (3.14)
\end{aligned}$$

přičemž komplexní odmocninu chápeme v takovém smyslu, aby  $\text{Re } \epsilon_1 < \text{Re } \epsilon_2$ . Vzorec pro  $F_R^+$  se od (3.13) liší pouze záměnou indexu  $R$  za  $L$  v čitatelích zlomků.

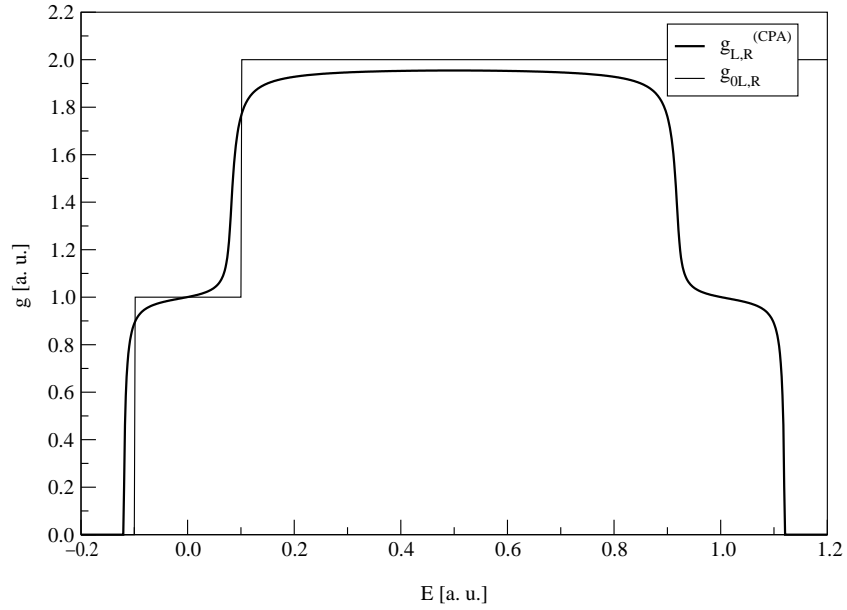
Znalost  $F_{L,R}^+$  nám umožňuje počítat hustoty stavů podle vzorce

$$g_{L,R}(E) = -\frac{2n_S}{\pi} \text{Im } F_{L,R}^+(E). \quad (3.15)$$

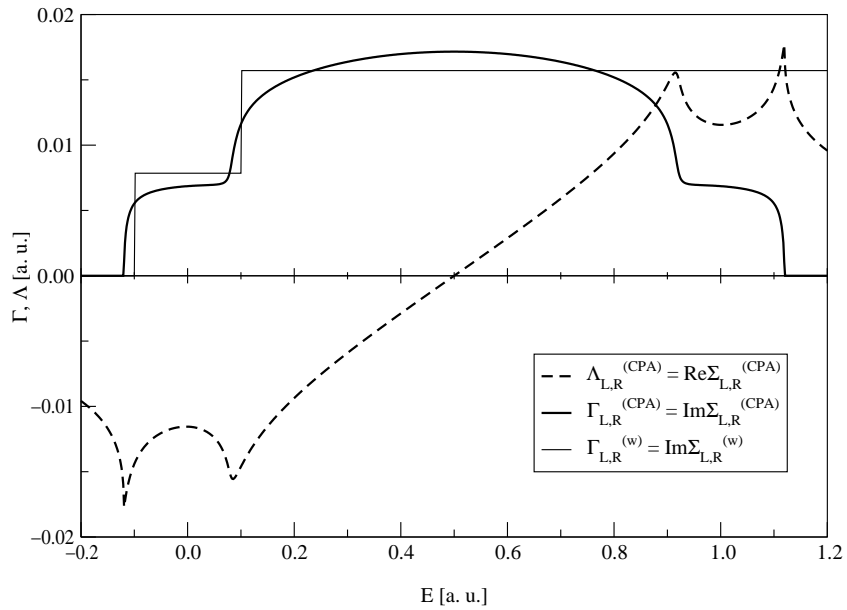
Výsledky ilustrativních výpočtů a srovnání s hustotou stavů čistého systému jsou pro zcela symetrickou dvojjámu ( $\Delta = 0$ , nečistoty v obou jamách stejné) uvedeny na obrázku 3.3. Na obrázku 3.4 jsou pak zaneseny reálná a imaginární část self-energie společně s imaginární částí selfenergie počítanou v limitě slabého rozptylu

$$\Gamma_{L,R}^{(w)}(E) = \frac{\pi}{2n_S} x_{L,R} y_{L,R} (U_{L,R}^A - U_{L,R}^B)^2 g_{0L,R}(E). \quad (3.16)$$

V bodech, kde má CPA reálná část selfenergie peaky,  $\Lambda_{L,R}^{(w)}$  diverguje. Přesto ji budeme ve výpočtech, vztahujících se k výše uvedené limitě, zanedbávat. Důvod je ten, že v přesnější aproximaci (CPA) je reálná část selfenergie nejen konečná, ale též přibližně stejně velká jako část imaginární. Zatímco však  $\Gamma_{L,R}$  mění dobu života odpovídajících stavů z nekonečné na konečnou (tj. podstatně ovlivňuje jejich vlastnosti), je význam  $\Lambda_{L,R}$  mnohem menší — pouze nepatrně posouvá energii těchto stavů.



Obrázek 3.3: Hustota stavů symetrické dvojjámy, vztahená na jeden mřížový bod, v aproximaci koherentního potenciálu (CPA) porovnaná s hustotou stavů čistého systému. Při výpočtu  $g_0$  nebyl proveden „cut-off“ na konečný pás.



Obrázek 3.4: Selfenergie symetrické dvojjámy v aproximaci koherentního potenciálu (CPA) a imaginární část selfenergie v limitě slabého rozptylu. V druhém případě opět nebyl proveden „cut-off“ na konečný pás.

## 3.2 Vodivost

V této části vypočteme vodivost  $\sigma_{xx}$  studované dvojjámy. V první kapitole jsme pro tuto veličinu odvodili vzorec (1.26), kam nyní dosadíme za  $\delta$ -funkce podle (1.24). Provedeme konfigurační středování a uplatníme definici (2.16) operátoru  $\hat{K}(z_1, z_2)$

$$\sigma_{xx} = -\frac{\hbar e^2}{4\pi V} \text{Tr} \left[ \left( \hat{K}^{++}(E_F, E_F) + \hat{K}^{--}(E_F, E_F) - 2\hat{K}^{+-}(E_F, E_F) \right) \hat{v}_x \right]. \quad (3.17)$$

Následně ukážeme, že vrcholová korekce nepřispívá. Jak vidíme z (2.24), je úměrná  $\text{Tr}_{2D}(\langle i | \hat{K} | i \rangle)$ , které jsou zase podle (2.26) úměrné  $\text{Tr}_{2D}(\langle i | \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle | i \rangle)$ . Snadno nahlédneme, že tyto stopy jsou nulové, neboť  $\langle \hat{G} \rangle$  je sudou funkcí  $k_x$ , zatímco  $\hat{v}_x$  lichou. Lze tedy nahradit  $\hat{K} = \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle$ . Rozepíšeme-li dále explicitně maticové násobení, dostaneme vodivost jako sumu devíti obecně různých členů

$$\sigma_{xx} = -\sigma_{LL}^{++} - \sigma_{LL}^{--} + 2\sigma_{LL}^{+-} - \sigma_{RR}^{++} - \sigma_{RR}^{--} + 2\sigma_{RR}^{+-} - 2\sigma_{LR}^{++} - 2\sigma_{LR}^{--} + 4\sigma_{LR}^{+-}, \quad (3.18)$$

kde například

$$\sigma_{LL}^{++} = \frac{e^2 \hbar}{4\pi V} \text{Tr}_{2D} \left[ \langle L | \langle \hat{G}^+(E_F) \rangle | L \rangle \hat{v}_x \langle L | \langle \hat{G}^+(E_F) \rangle | L \rangle \hat{v}_x \right]. \quad (3.19)$$

Po dosazení podle (3.10) a po substituci v integrační proměnné dojdeme ke vzorci

$$\sigma_{LL}^{++} = \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar D} \int_{E_F - \varepsilon_M}^{E_F} d\epsilon (E_F - \epsilon) \left[ \frac{\epsilon - \Delta_R + i\Gamma_R}{(\epsilon - \epsilon_1)(\epsilon - \epsilon_2)} \right]^2, \quad (3.20)$$

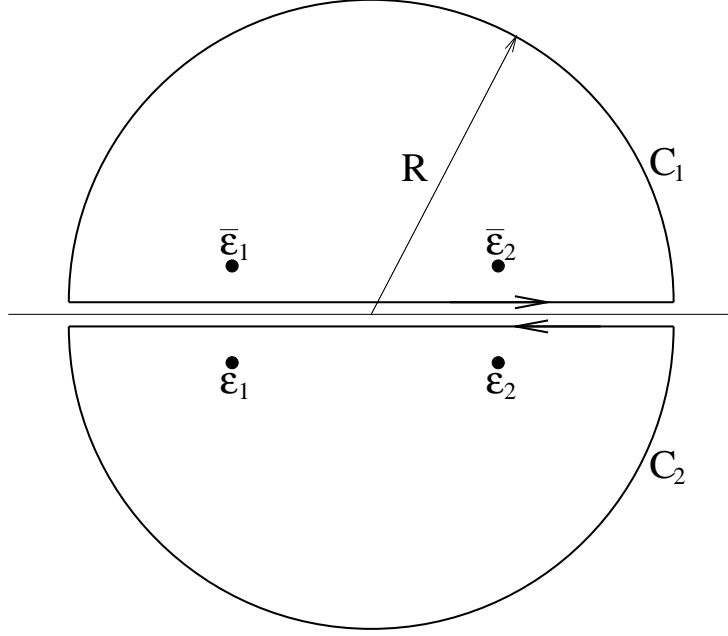
kde  $\epsilon_{1,2}$  jsou dány vztahem (3.14) a  $D$  je  $z$ -rozměr oblasti obsahující volné nosiče náboje. Ve jmenovateli jiných sčítanců (3.18) vystupují také komplexně sdružené kořeny  $\bar{\epsilon}_{1,2}$ , pocházející od  $\langle \hat{G}^- \rangle$ . Dále lze pokračovat rozkladem na parciální zlomky zcela analogicky jako v případě veličiny  $F_{L,R}^+$  v předchozí části. Touto metodou ale nedospějeme k nijak přehledným výsledkům, se kterými by bylo možné dále pracovat. V následujících odstavcích odvodíme jiným postupem pouze přibližné vzorce, které budou pro pochopení principů výhodnější.

### 3.2.1 Příklad obsazení obou podpásů

Zde budeme předpokládat, že

$$E_F - \text{Re } \epsilon_2 \gg |\Sigma_{L,R}| \quad \text{a zároveň} \quad \text{Re } \epsilon_1 + \varepsilon_M - E_F \gg |\Sigma_{L,R}|. \quad (3.21)$$

První podmínka znamená, že Fermiho mez je v oblasti, kde do hustoty stavů přispívají oba podpásy, a též že efekty způsobené nečistotami jsou oproti velikosti  $E_F$  zanedbatelné. Druhá nerovnost pak pouze říká, že horní hrana pásu je příliš daleko na to, aby mohla cokoli ovlivnit. Za těchto okolností se nedopustíme velké



Obrázek 3.5: Integrační cesty v Gaussově rovině.

chyby, pokud protáhneme integrační meze v (3.20) do  $\mp\infty$ . Potom je vodivost  $\sigma_{xx}$  lineární v  $E_F$  a lze označit  $\sigma_{xx} = \alpha E_F + \beta$ . Koeficienty  $\alpha$  a  $\beta$  vypočteme contourovou integrací s využitím residuové věty. Použité integrační cesty jsou zakresleny na obrázku 3.5.

Začneme s koeficientem  $\alpha$ . Díky tomu, že odpovídající integrandy se pro velká  $|\epsilon|$  chovají jako  $1/\epsilon^2$ , příspěvky od oblouků v limitě  $R \rightarrow \infty$  vymizí. Následně jsou nulové členy typu  $\alpha^{++}$  a  $\alpha^{--}$ , neboť pro každý z nich vždy jeden z contourů  $C_1$ ,  $C_2$  neobsahuje póly. Zbylé členy typu  $\alpha^{+-}$  vypočteme po křivce  $C_1$  s výsledkem

$$\alpha_{LL}^{+-} = \frac{ie^2}{2\pi\hbar D} \left[ \frac{(\bar{\epsilon}_1 - \Delta_R + i\Gamma_R)(\bar{\epsilon}_1 - \Delta_R - i\Gamma_R)}{(\bar{\epsilon}_1 - \epsilon_1)(\bar{\epsilon}_1 - \epsilon_2)(\bar{\epsilon}_1 - \bar{\epsilon}_2)} + \frac{(\bar{\epsilon}_2 - \Delta_R + i\Gamma_R)(\bar{\epsilon}_2 - \Delta_R - i\Gamma_R)}{(\bar{\epsilon}_2 - \epsilon_1)(\bar{\epsilon}_2 - \epsilon_2)(\bar{\epsilon}_2 - \bar{\epsilon}_1)} \right]. \quad (3.22)$$

V dalších úpravách využijeme identity tří typů

$$\begin{aligned} &(\bar{\epsilon}_1 - \Delta_R + i\Gamma_R)(\bar{\epsilon}_1 - \Delta_R - i\Gamma_R) \\ &+ (\bar{\epsilon}_1 - \Delta_L + i\Gamma_L)(\bar{\epsilon}_1 - \Delta_L - i\Gamma_L) + 2t^2 = 4t^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2 + (\Gamma_R + \Gamma_L)^2 \\ &+ 2i\bar{\epsilon}_1(\Gamma_R + \Gamma_L) - 2i(\Delta_L\Gamma_R + \Delta_R\Gamma_L), \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$(\bar{\epsilon}_1 - \epsilon_1)(\bar{\epsilon}_1 - \epsilon_2) = 2i\bar{\epsilon}_1(\Gamma_R + \Gamma_L) - 2i(\Delta_L\Gamma_R + \Delta_R\Gamma_L), \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} & [\bar{\epsilon}_1(\Gamma_R + \Gamma_L) - \Delta_L\Gamma_R - \Delta_R\Gamma_L] [\bar{\epsilon}_2(\Gamma_R + \Gamma_L) - \Delta_L\Gamma_R - \Delta_R\Gamma_L] \\ & = -\Gamma_R\Gamma_L [(\Gamma_R + \Gamma_L)^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2] - t^2(\Gamma_R + \Gamma_L)^2. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Rovnosti (3.23) a (3.24) snadno ověříme, vzpomeneme-li, že  $\bar{\epsilon}_1$  je kořenem jmenovatele maticových elementů Greenovy funkce  $\langle \hat{G}^- \rangle^3$ , rovnost (3.25) pak explicitním dosazením za kořeny.

Nyní už jen sečteme všechny nenulové příspěvky do koeficientu  $\alpha$  a postupně uplatníme vztahy (3.23)–(3.25)

$$\alpha = \frac{e^2}{2\pi\hbar D} (\Gamma_R + \Gamma_L) \frac{4t^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2 + (\Gamma_R + \Gamma_L)^2}{\Gamma_R\Gamma_L [(\Gamma_R + \Gamma_L)^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2] + t^2(\Gamma_R + \Gamma_L)^2}. \quad (3.26)$$

Podobně vypočteme i koeficient  $\beta$ . Jediný rozdíl je v tom, že přispívají nejen póly, ale též integrály přes oblouky. Nulové členy jsou pouze  $\beta_{LR}^{++} = \beta_{LR}^{--} = 0$ , jinak

$$\beta_{LL}^{++} = \beta_{RR}^{++} = -\beta_{LL}^{--} = -\beta_{RR}^{--} = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar D} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\tilde{C}_1} \frac{1}{z} dz = \frac{ie^2}{4\pi\hbar D}, \quad (3.27)$$

kde  $\tilde{C}_1$  je oblouková část contouru  $C_1$ . Ve členech  $\beta_{LL}^{+-}$ ,  $\beta_{RR}^{+-}$  a  $\beta_{LR}^{+-}$ , které vyčíslujeme po křivce  $C_1$ , je taktéž třeba k pólovým příspěvkům přidat (3.27). Dále opět sečteme všechny nenulové příspěvky a po použití identit (3.23)–(3.25) dostaneme

$$\beta = -\frac{e^2}{2\pi\hbar D} (\Delta_L\Gamma_R + \Delta_R\Gamma_L) \frac{4t^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2 + (\Gamma_R + \Gamma_L)^2}{\Gamma_R\Gamma_L [(\Gamma_R + \Gamma_L)^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2] + t^2(\Gamma_R + \Gamma_L)^2}. \quad (3.28)$$

Kombinací (3.26) a (3.28) již získáme vyjádření pro hledanou složku tenzoru vodivosti

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{e^2}{2\pi\hbar D} (\Gamma_R + \Gamma_L) \left[ E_F - \frac{\Delta_L\Gamma_R + \Delta_R\Gamma_L}{\Gamma_R + \Gamma_L} \right] \\ &\quad \times \frac{4t^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2 + (\Gamma_R + \Gamma_L)^2}{\Gamma_R\Gamma_L [(\Gamma_R + \Gamma_L)^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2] + t^2(\Gamma_R + \Gamma_L)^2}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Na závěr tohoto odstavce se podíváme, jak se (3.29) chová v limitě slabého tunelování mezi jámami. Pokud  $t \ll \Delta$ , můžeme  $t$  zanedbat jak v čitateli, tak ve jmenovateli, a výraz pro vodivost se rozpadne na součet

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\pi\hbar D} \left[ \frac{E_F - \Delta_L}{\Gamma_L} + \frac{E_F - \Delta_R}{\Gamma_R} \right]. \quad (3.30)$$

Uvědomíme-li si, že v popsané limitě se také soustava (2.15) skládá ze dvou nezávislých rovnic, vidíme, že první člen závisí pouze na parametrech levé jámy a druhý člen naopak pouze na parametrech jámy pravé. Máme tedy výsledek, který byl zřejmý již od začátku — jámy o sobě „nevědí“.

<sup>3</sup>Přesněji: K levé straně vždy přičteme vhodnou nulu — zmíněný jmenovatel.

Pokud ještě přejdeme k limitě slabého rozptylu, můžeme v čitatelích opustit  $\Lambda_{L,R}$ . Kromě toho lze lokální hustoty stavů aproximovat výrazy (3.5) a (3.6), které v případě  $t \ll \Delta$  implikují

$$E_F \pm \Delta = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n_{L,R}, \quad (3.31)$$

kde  $n_{L,R}$  jsou lokální koncentrace elektronů. Vztah (3.30) je pak sumou dvou Drudeho vzorců

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 n_L \hbar}{m^* D 2\Gamma_L} + \frac{e^2 n_R \hbar}{m^* D 2\Gamma_R}. \quad (3.32)$$

### 3.2.2 Příklad obsazení pouze spodního podpásu

Dosud jsme zanedbávali  $|\Sigma_{L,R}|$  pouze proti  $E_F$ . To znamená, že původní struktura dvojitého schodu, patrná v  $g_0$ , mohla být působením nečistot zcela „zahlazena“. Zde budeme předpokládat víc. Je-li  $\sqrt{\Delta^2 + t^2} \gg |\Sigma_{L,R}|$ , existuje oblast Fermiho energií, kdy do hustoty stavů přispívá pouze spodní podpás. Pokud pro  $E_F$  platí

$$E_F - \text{Re } \epsilon_1 \gg |\Sigma_{L,R}| \quad \text{a zároveň} \quad \text{Re } \epsilon_2 - E_F \gg |\Sigma_{L,R}| \quad (3.33)$$

a horní hrana pásu  $\varepsilon_M$  splňuje

$$\text{Re } \epsilon_1 + \varepsilon_M - E_F \gg |\Sigma_{L,R}|, \quad (3.34)$$

můžeme opět protáhnout integrační meze v (3.20) do  $\mp\infty$ . Při výpočtu získaného integrálu residuovou větou je třeba brát do úvahy jen póly  $\epsilon_1, \bar{\epsilon}_1$ , které odpovídají spodnímu podpásu. Po použití identit (3.23) a (3.24) dostáváme pro koeficienty  $\alpha$  a  $\beta$  vyjádření

$$\alpha = \frac{ie^2}{\pi \hbar D} \frac{1}{\bar{\epsilon}_1 - \bar{\epsilon}_2} \left[ 1 + \frac{4t^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R)^2}{2i\bar{\epsilon}_1(\Gamma_L + \Gamma_R) - 2i(\Delta_L\Gamma_R + \Delta_R\Gamma_L)} \right], \quad (3.35)$$

$$\beta = -\frac{ie^2}{\pi \hbar D} \frac{\bar{\epsilon}_1}{\bar{\epsilon}_1 - \bar{\epsilon}_2} \left[ 1 + \frac{4t^2 + (\Delta_L - \Delta_R)^2 + (\Gamma_L + \Gamma_R)^2}{2i\bar{\epsilon}_1(\Gamma_L + \Gamma_R) - 2i(\Delta_L\Gamma_R + \Delta_R\Gamma_L)} \right]. \quad (3.36)$$

Díky tomu, že můžeme zanedbávat selfenergii vzhledem k  $\sqrt{\Delta^2 + t^2}$ , dostáváme pro vodivost vztah

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{\pi \hbar D} \frac{\sqrt{\Delta^2 + t^2}}{(\Gamma_L + \Gamma_R)\sqrt{\Delta^2 + t^2} + \Delta(\Gamma_L - \Gamma_R)} \left[ \frac{E_F}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} + 1 \right]. \quad (3.37)$$

I zde je (3.7) dobrou aproximací hustoty stavů, načež můžeme psát

$$\left[ \frac{E_F}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} + 1 \right] = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} \frac{n}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} \quad (3.38)$$

a také

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 n}{m^* D} \frac{\hbar \sqrt{\Delta^2 + t^2}}{(\Gamma_L + \Gamma_R)\sqrt{\Delta^2 + t^2} + \Delta(\Gamma_L - \Gamma_R)}. \quad (3.39)$$

### 3.3 Odporová rezonance

V systému dvou vázaných kvantových jam lze pozorovat jev nazvaný odporová<sup>4</sup> rezonance (resistivity resonance, [11]). Předpokládejme, že máme dvojjámu s nesympetricky rozmístěnými nečistotami (v jedné jámě je nečistot více než v druhé) a experimentální uspořádání, které umožňuje měnit vazbu mezi oběma jámami. Je-li vazba slabá, lze jámy považovat za nezávislé. To nás opravňuje použít pravidlo pro sčítání paralelně zapojených odporů  $1/R_{\text{celk}}^{\text{off}} = 1/R_L + 1/R_R$ . V opačném případě silné vazby „cítí“ všechny elektrony jak nečistoty vpravo, tak nečistoty vlevo a lze předpokládat, že  $R_{\text{celk}}^{\text{res}} \sim R_R + R_L$ . Pokud například  $R_L \gg R_R$ , platí přibližně  $R_{\text{celk}}^{\text{off}} \approx R_R$  a  $R_{\text{celk}}^{\text{res}} \sim R_L$ .

Tyto intuitivní úvahy lze ověřit na základě vztahu (3.29), který má při splnění podmínky slabého rozptylu  $|\Sigma_{L,R}| \ll \Delta, t$  tvar

$$\rho = \frac{1}{\sigma_{xx}} = \frac{\pi \hbar D}{2e^2} \frac{1}{E_F(\Gamma_L + \Gamma_R) + \Delta(\Gamma_R - \Gamma_L)} \left[ 4\Gamma_L\Gamma_R + \frac{t^2}{\Delta^2 + t^2}(\Gamma_R - \Gamma_L)^2 \right]. \quad (3.40)$$

Je-li  $\Delta \ll E_F$ , dostáváme přesně to, co jsme odhadli výše (způsob zavedení lokálních odporů je patrný z (3.32))

$$\rho^{\text{off}} = \rho \Big|_{t \ll \Delta} = \frac{2\pi \hbar D}{e^2 E_F} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R} = \left( \frac{1}{\rho_L} + \frac{1}{\rho_R} \right)^{-1}, \quad (3.41)$$

$$\rho^{\text{res}} = \rho \Big|_{t \gg \Delta} = \frac{\pi \hbar D}{2e^2 E_F} (\Gamma_L + \Gamma_R) = \frac{1}{4}(\rho_L + \rho_R). \quad (3.42)$$

Je třeba poznamenat, že  $\Gamma_{L,R}$  obecně závisejí jak na  $E_F$ , tak na  $t$  a  $\Delta$ . Na druhou stranu, pohledem na (2.29), (3.5) a (3.6), zjistíme, že v našem dvoupásovém případě to jsou jednoduše konstanty. Poměr (3.41) a (3.42), po označení  $\Gamma_L/\Gamma_R = r$ , je

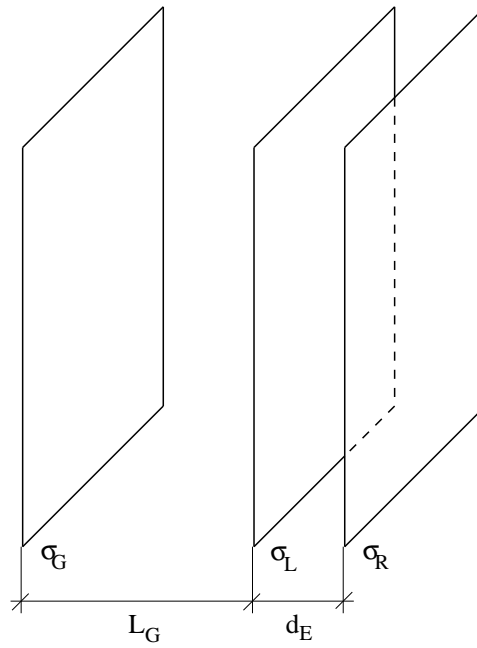
$$\frac{\rho^{\text{res}}}{\rho^{\text{off}}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left( r + \frac{1}{r} \right). \quad (3.43)$$

Výraz v závorce má minimum v bodě  $r = 1$ , kdy je roven 2. Z toho důvodu je vždy  $\rho^{\text{res}}/\rho^{\text{off}} \geq 1$ , přičemž rovnost nastává pouze v případě symetrického rozložení nečistot.

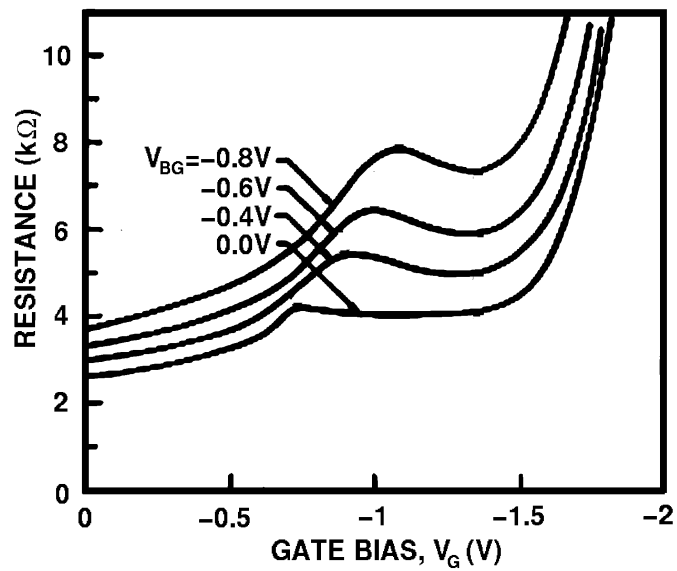
Ačkoli teoreticky je jistě přímočařejší zkoumat nalezené rezonanční chování jako funkci parametru  $t$ , experimentálně je tato možnost nedosažitelná, neboť  $t$  je přímo svázáno s tloušťkou polovodičové vrstvy tvořící potenciálovou bariéru mezi jámami. Mnohem snadnější je měnit parametr  $\Delta$  v uspořádání schematicky zachyceném na obrázku 3.6. Přitom  $\rho$  vykazuje rezonanci jako funkce hradlového napětí  $U_G$ , jak je patrné z experimentálních dat (obrázek 3.7, [11]). Na tuto

<sup>4</sup>Protože experimentální data jsou zpravidla prezentována v podobě odporu, přejdeme do této formulace i my.





Obrázek 3.6: Schematický náčrt experimentálního uspořádání pro ladění energetického rozdílu mezi dny jam  $\Delta$ .



Obrázek 3.7: Závislost odporu na hradlovém napětí  $V_G$  při  $T = 4,2\text{K}$  pro různé hodnoty napětí na zpětném hradle  $V_{BG}$ . Převzato z [11].

závislost však není možné přímočaře aplikovat vzorec (3.40), neboť změnami  $U_G$  se mění nejen  $\Delta$ , ale též koncentrace elektronů v dvojčímě  $n = n_L + n_R$ .

Pro rozbor situace rozdělíme  $\Delta = \Delta^{(i)} + \Delta^{(e)}$ , kde  $\Delta^{(i)}$  je příspěvek od iontových zbytků v mřížových bodech a  $\Delta^{(e)}$  od Harteeho selfkonzistentního pole, vyvolaného ostatními elektrony. Dále uvažujeme iontový příspěvek neměnný a zabýváme se pouze elektronovou částí. Na prostorové rozložení elektronů použijeme velmi jednoduchý model. Budeme předpokládat, že jsou lokalizovány ve velmi tenkých rovinách, načež pro hradlové napětí a elektronový příspěvek  $\Delta^{(e)}$  dostaneme vyjádření

$$U_G^{(e)} = \varphi_L^{(e)} - \varphi_G^{(e)} = \frac{L_G}{2\varepsilon}(\sigma_L + \sigma_R - \sigma_G), \quad (3.44)$$

$$\Delta^{(e)} = \frac{1}{2}(\varphi_R^{(e)} - \varphi_L^{(e)}) = \frac{ed_E}{4\varepsilon}(\sigma_G + \sigma_L - \sigma_R). \quad (3.45)$$

Zde  $\sigma_{L,R}$  jsou plošné náboje příslušející jednotlivým jámám,  $\sigma_G$  je plošný náboj na hradle a  $\varepsilon$  je permitivita vzorku. Byla též zavedena efektivní vzdálenost jam  $d_E$ , kterou lze použít jako fitovací parametr pro přiblížení se reálnému rozložení elektronového náboje (obrázek 3.2).

Elektrická neutralita vyžaduje zachování počtu elektronů v systému, tj.

$$\sigma_L + \sigma_R + \sigma_G = \sigma_C = -ne. \quad (3.46)$$

Vyloučením  $\sigma_G$  pomocí (3.46) a vyjádřením jámových nábojů integrály z hustot stavů získáme z (3.44) a (3.45) soustavu dvou rovnic<sup>5</sup> pro  $E_F$  a  $\Delta$

$$\int_{-\infty}^{E_F} dE [g_L(E) - g_R(E)] = \frac{4\varepsilon}{ed_E} (\Delta - \Delta^{(i)}) + \frac{\varepsilon U_G}{L_G}, \quad (3.47)$$

$$\int_{-\infty}^{E_F} dE [g_L(E) + g_R(E)] = \sigma_C + \frac{\varepsilon U_G}{L_G}. \quad (3.48)$$

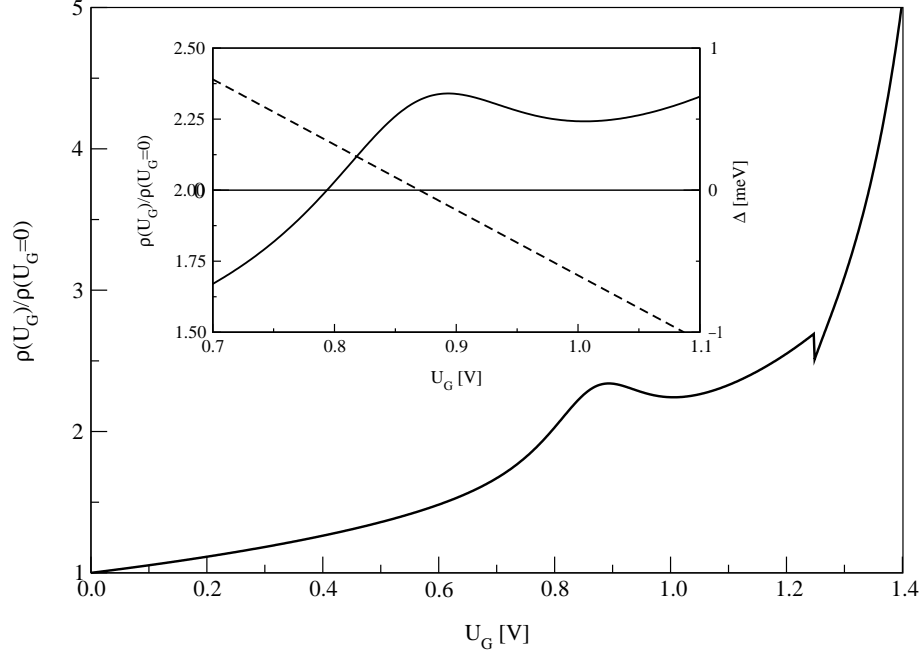
V případě, že by  $g_{L,R}$  byly CPA aproximace hustot stavů, museli bychom dále pokračovat numericky. I to by bylo poměrně obtížné, neboť pro  $g_{L,R}^{(CPA)}(E)$  je třeba v každém bodě iterativně řešit dvě Sovenovy rovnice. Pokud ale zůstaneme v aproximaci slabého rozptylu, je situace výrazně jednodušší. Jsou-li obsazeny oba podpásky, lze najít řešení ve tvaru

$$\Delta = \frac{\pi\hbar^2\varepsilon}{2} \frac{4\Delta^{(i)} - ed_E U_G / L_G}{e^2 d_E m^* + 2\pi\hbar^2\varepsilon}, \quad (3.49)$$

$$E_F = -\frac{\pi\hbar^2}{2em^*} \left( \frac{\varepsilon U_G}{L_G} + \sigma_C \right). \quad (3.50)$$

---

<sup>5</sup>Hradlové napětí  $U_G = -L_G\sigma_G/2\varepsilon$  se liší od  $U_G^{(e)}$ . Bylo zvoleno tak, aby platilo  $U_G(\sigma_G = 0) = 0$ .



Obrázek 3.8: Závislost normalizovaného měrného odporu na hradlovém napětí. Jde o výsledek numerického výpočtu v textu popsaného modelu s parametry  $\Delta(U_G = 0) = 4 \text{ meV}$ ,  $E_F(U_G = 0) = 9 \text{ meV}$ ,  $t = 0,5 \text{ meV}$ ,  $d_E = 200 \text{ \AA}$  a  $x_L/x_R = 3$ . Ve vloženém grafu je přerušovanou čarou vynesena též závislost  $\Delta(U_G)$ . Všimněme si, že rezonanční maximum neodpovídá přesně bodu  $\Delta = 0$ , což je způsobeno změnou koncentrace elektronů. Skok při hodnotě  $U_G \approx 1,25 \text{ V}$  je spojen s vyprázdněním horního podpásu.

V případě obsazení pouze spodního podpásu je  $\Delta$  dána řešením rovnice (která je nyní jen jedna a pro jednu neznámou)

$$\frac{4\varepsilon}{ed_E} (\Delta - \Delta^{(i)}) - \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + t^2}} \left( \frac{\varepsilon U_G}{L_G} + \sigma_C \right) + \frac{\varepsilon U_G}{L_G} = 0. \quad (3.51)$$

Fermiho energii získáme následným dosazením do

$$E_F = -\frac{\pi \hbar^2}{em^*} \left( \frac{\varepsilon U_G}{L_G} + \sigma_C \right) - \sqrt{\Delta^2 + t^2}. \quad (3.52)$$

Na obrázku 3.8 jsou vyneseny výsledky numerického výpočtu, kvalitativně odpovídajícího experimentu [11]. Přestože jde o výpočet realistický, nelze provést kvantitativní srovnání s uvedeným měřením, protože neznáme přesné parametry použitého vzorku.

Pozornému čtenáři jistě neuniklo, že jsme prozatím zcela opominuli možnost splnění rovnosti  $\Delta = 0$  v případě, kdy je obsazen pouze spodní podpás. Tehdy je

situace poněkud odlišná. V limitním případě  $t \ll |\Delta|$  vztah (3.39) přechází na

$$\rho^{\text{off}} = \begin{cases} \frac{m^* D}{ne^2} \frac{2\Gamma_L^{\text{off}}}{\hbar}, & \Delta > 0 \\ \frac{m^* D}{ne^2} \frac{2\Gamma_R^{\text{off}}}{\hbar}, & \Delta < 0 \end{cases} \quad (3.53)$$

a v „rezonanci“  $t \gg |\Delta|$  na

$$\rho^{\text{res}} = \frac{m^* D}{ne^2} \frac{\Gamma_L^{\text{res}} + \Gamma_R^{\text{res}}}{\hbar}. \quad (3.54)$$

Imaginární části selfenergie  $\Gamma_{L,R}^{\text{off}}$  a  $\Gamma_{L,R}^{\text{res}}$  jsou tentokrát v jednotlivých limitách různé, přesněji  $\Gamma_{L,R}^{\text{off}} = 2\Gamma_{L,R}^{\text{res}}$ . Pro poměr (3.54) a (3.53) dostáváme vyjádření

$$\frac{\rho^{\text{res}}}{\rho^{\text{off}}} = \begin{cases} \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{\Gamma_R^{\text{off}}}{\Gamma_L^{\text{off}}} \right), & \Delta > 0, \\ \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{\Gamma_L^{\text{off}}}{\Gamma_R^{\text{off}}} \right), & \Delta < 0, \end{cases} \quad (3.55)$$

kteří nedává nic zajímavého, pokud se nečistoty v jednotlivých jámách výrazně liší. Jsou-li však rozptylová centra rozmístěna symetricky, dochází v okolí bodu  $\Delta = 0$  k potlačení odporu, což je jev přesně opačný, než jaký je pozorován v dvoupásovém případě.

Experimentální ověření právě uvedeného výsledku v uspořádání z obrázku 3.6 však prakticky není možné. Zmíněná metoda je založena na tom, že se aplikací hradlového napětí dosahuje konkurence mezi  $\Delta^{(i)}$  a  $\Delta^{(e)}$ . Pokud jsou při napětí  $U_G = 0$  všechny elektrony v jedné z jam (to odpovídá případu  $t \ll |\Delta|$ ), je již tato konkurence maximální a zvyšováním  $U_G$  se nic podstatného nezmění.

### 3.4 Příčné efekty

V předchozí kapitole jsme ukázali, že elektrony za jistých okolností cítí pouze nečistoty lokalizované v jedné z jam. Nabízí se tedy interpretace, že se do této jámy přesouvají a nabíjejí ji. Nyní s použitím výsledků první kapitoly tento pohled vyvrátíme.

Konfiguračním středováním vzorců (1.32) a (1.33) získáme

$$\delta Q_R = \frac{\hbar e^2}{2\pi} \text{Tr} \left[ \hat{K}^{+-}(E_F, E_F) \hat{P}_R \right] + \frac{\hbar e^2}{\pi} \int dE f_{\text{FD}}(E) \text{Re Tr} \left\{ \frac{d}{dE} \left[ \hat{K}^{++}(E, E') \right] \Big|_{E=E'} \hat{P}_R \right\}, \quad (3.56)$$

kde opět  $\hat{K} = \langle \hat{G} \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G} \rangle$ . V důsledku toho vidíme, že argumenty stop v (3.56) jsou lichými funkcemi proměnné  $k_x$ , a tedy  $\delta Q_R = 0$ .

# Kapitola 4

## Kvantová dvojjáma v podélném magnetickém poli

Za posledních deset let se objevilo několik experimentálních ([12], [13], [14]) i teoretických ([15], [16]) prací, týkajících se transportu v systému dvou tunelově vázaných dvoudimenzionálních plynů, umístěných v podélném magnetickém poli. Byla diskutována anizotropie vodivosti vzhledem k vzájemnému úhlu mezi směrem proudu a magnetického pole, odporová rezonance a vlivy různých rozptylových mechanismů na její chování. Pokud je nám ale známo, příčné efekty zůstaly dosud bez povšimnutí. Poslední část naší práce si klade za cíl udělat první krok k vyplnění právě této mezery.

Použijeme tentýž model jako v případě nulového magnetického pole, nyní rozšířený o vektorový potenciál  $\vec{A} = (zB, 0, 0)$ , popisující magnetické pole  $\vec{B} = (0, B, 0)$ . Oproti předchozí kapitole se omezíme jen na případ slabého rozptylu, kdy bude možné všechny výrazy upravit na tvar, obsahující pouze jednorozměrné integrály. Kromě toho budeme uvažovat symetrickou dvojjámu ( $\Delta = 0$ ). Tím se sice připravíme o možnost dosažení odporové rezonance mimo bod  $B = 0$  T ([14]), pro příčné efekty, které jsou naším hlavním cílem, to však velké omezení není.

### 4.1 Hustota stavů pro systém bez nečistot

Nejprve ukážeme, jak se na hamiltoniánu (3.1) projeví přidání výše zmíněného vektorového potenciálu.<sup>1</sup> Zanedbáme-li vliv magnetického pole na samotné stavy  $|L\rangle$ ,  $|R\rangle$ , tkví jediný rozdíl v záměně disperzní relace v izolované jámě

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_y^2 + k_x^2) \quad \longrightarrow \quad \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2m^*} (\hbar k_x + eBz)^2. \quad (4.1)$$

<sup>1</sup>Tuto poměrně standardní záležitost lze nalézt například v [16], [17].

V důsledku toho dostáváme pro diagonální maticové elementy hamiltoniánu vyjádření

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}, L/R | \hat{H}_0 | \vec{k}, L/R \rangle &= \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2m^*} \left( \hbar k_x + eB \langle L/R | z | L/R \rangle \right)^2 \\ &+ \frac{e^2 B^2}{2m^*} \left( \langle L/R | z^2 | L/R \rangle - \langle L/R | z | L/R \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Využijeme symetrie dvojjámy, označíme  $\langle R | z | R \rangle = -\langle L | z | L \rangle = d_B/2$  a posuneme referenční hladinu energie o

$$\frac{e^2 B^2}{4m^*} \left( \langle L | z^2 | L \rangle - \langle L | z | L \rangle^2 + \langle R | z^2 | R \rangle - \langle R | z | R \rangle^2 \right). \quad (4.3)$$

Poté (4.2) přejde na mnohem jednodušší výraz

$$\langle \vec{k}, L/R | \hat{H}_0 | \vec{k}, L/R \rangle = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2m^*} \left( \hbar k_x \mp \frac{1}{2} eB d_B \right)^2. \quad (4.4)$$

Na tomto místě je vhodné si uvědomit, že zavedená efektivní vzdálenost jam  $d_B$  má obecně jinou hodnotu než dříve použité  $d_E$  a  $D$ .

Vlastní energie získaného hamiltoniánu jsou

$$\varepsilon_{B,A} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{e^2 d_B^2 B^2}{8m^*} \mp \sqrt{\delta^2 + t^2}, \quad (4.5)$$

kde jsme označili  $\delta = \hbar e d_B B k_x / 2m^*$ . Odpovídající vlastní stavy mají, až na záměnu  $\Delta$  za  $\delta$ , tentýž tvar jako (3.3) a (3.4). Koefficienty typu  $\langle \vec{k}L | \vec{k}B \rangle$  jsou nyní závislé na  $k_x$ , přičemž splňují identity

$$\langle k_x, k_y, L | k_x, k_y, B \rangle = \langle -k_x, k_y, R | -k_x, k_y, B \rangle, \quad (4.6)$$

$$\langle k_x, k_y, L | k_x, k_y, A \rangle = -\langle -k_x, k_y, R | -k_x, k_y, A \rangle. \quad (4.7)$$

Pro celkovou hustotu stavů (díky symetrii dvojjámy je samozřejmě  $g_{0L}(E) = g_{0R}(E) = g_0(E)/2$ ) nelze analyticky napsat nic o mnoho konkrétnějšího než integrál

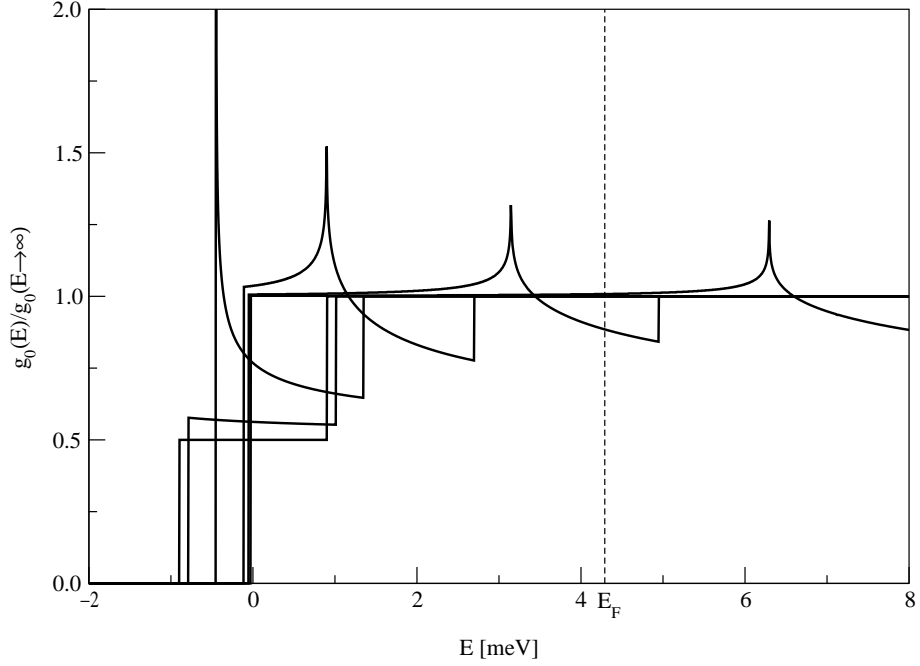
$$g_0(E) = -\frac{1}{\pi S} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[ \hat{G}_0^+(E) \right] \right\} = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\alpha \in \{B,A\}} \iint d^2k \delta(E - \varepsilon_\alpha). \quad (4.8)$$

Numericky vypočítané<sup>2</sup> hustoty stavů pro několik hodnot magnetického pole jsou uvedeny na obrázku 4.1.

Analýzou linií v rovině  $k_x$ - $k_y$  odpovídajících stejné hodnotě  $\varepsilon_{B,A}$ , přes které se v (4.8) integruje, dospějeme k následujícím vzorcům pro polohy význačných bodů hustoty stavů:

---

<sup>2</sup>Použitá metoda je popsána v dodatku C.



Obrázek 4.1: Hustota stavů pro různé hodnoty magnetického pole:  $0\text{T}$ ,  $B_c/2$ ,  $B_c$ ,  $2B_c$ ,  $3B_c$  a  $4B_c$ , přičemž singularita se poprvé objevuje při poli  $B_c = 2,74\text{T}$ . Parametry dvojjámy  $t = 0,9\text{meV}$ ,  $d_B = 135\text{Å}$ ,  $n = 2,4 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$  ( $\sim E_F = 4,29\text{meV}$ ) odpovídají vzorku B použitému v [12].

- dolní hrana podpásmu odpovídajícího vazebnému stavu  $|B\rangle$  a dolní hrana pásu vůbec

$$E_B^{\min} = \begin{cases} \frac{e^2 d_B^2 B^2}{8m^*} - t, & |B| \leq B_c, \\ -\frac{2m^* t^2}{e^2 d_B^2 B^2}, & |B| \geq B_c, \end{cases} \quad (4.9)$$

- dolní hrana podpásmu odpovídajícího ne vazebnému stavu  $|A\rangle$

$$E_A^{\min} = \frac{e^2 d_B^2 B^2}{8m^*} + t, \quad (4.10)$$

- poloha singularity

$$E^{\text{div}} = \frac{e^2 d_B^2 B^2}{8m^*} - t. \quad (4.11)$$

Velikost magnetického pole, při níž se mění charakter závislosti  $E_B^{\min}(B)$  a při které se poprvé objevuje divergence, je  $B_c = 2\sqrt{m^* t}/ed$ .

Pro transportní vlastnosti bude podstatná pouze hustota stavů na Fermiho ploše, jejíž závislost na aplikovaném magnetickém poli je uvedena na obrázku 4.2.<sup>3</sup>

## 4.2 Greenovy funkce systému s nečistotami

Zde explicitně vypíšeme rozklad Greenovy funkce  $\langle \hat{G}^+(E) \rangle$  analogický výrazům (3.10) – (3.12), tentokrát provedený vzhledem k bázi vlastních stavů  $\{|B\rangle, |A\rangle\}$

$$\langle \vec{k}, B | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | \vec{k}, B \rangle = \frac{E - \varepsilon_A - \Sigma_{AA}^+}{(E - \varepsilon_B - \Sigma_{BB}^+)(E - \varepsilon_A - \Sigma_{AA}^+) - \Sigma_{BA}^+{}^2}, \quad (4.12)$$

$$\langle \vec{k}, A | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | \vec{k}, A \rangle = \frac{E - \varepsilon_B - \Sigma_{BB}^+}{(E - \varepsilon_B - \Sigma_{BB}^+)(E - \varepsilon_A - \Sigma_{AA}^+) - \Sigma_{BA}^+{}^2}, \quad (4.13)$$

$$\langle \vec{k}, B | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | \vec{k}, A \rangle = \frac{\Sigma_{BA}^+}{(E - \varepsilon_B - \Sigma_{BB}^+)(E - \varepsilon_A - \Sigma_{AA}^+) - \Sigma_{BA}^+{}^2}. \quad (4.14)$$

V zápisu jsme zavedli nové označení<sup>4</sup>

$$\Sigma_{\alpha\beta}^+ = \langle \alpha | \hat{\Sigma}^+ | \beta \rangle = \sum_{i \in \{L, R\}} \langle \alpha | i \rangle \langle \beta | i \rangle \Sigma_i^+, \quad (4.15)$$

přičemž jsme využili toho, že koeficienty  $\langle \alpha | i \rangle$  jsou reálné. Poznamenejme ještě, že  $\Sigma_{\alpha\beta}^+$  závisí nejen na  $E$ , ale také na vlnovém vektoru  $\vec{k}$ , přesněji na jeho komponentě  $k_x$ .

Dále přejdeme do aproximace slabého rozptylu, přičemž na základě rozboru uvedeného v předchozí kapitole položíme reálnou část selfenergie rovnou nule. Kromě toho budeme zanedbávat veškeré nové efekty způsobené nečistotami a  $\Gamma_{L,R}^{(w)}$  ponecháme pouze na místech, kde regularizují divergence.<sup>5</sup> V tom případě je  $\langle \vec{k}, B | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | \vec{k}, A \rangle = 0$  a pro diagonální maticové elementy středované Greenovy funkce máme jednoduše

$$\langle \vec{k}, B | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | \vec{k}, B \rangle = \frac{1}{E - \varepsilon_B + i\Gamma_{BB}^{(w)}}, \quad (4.16)$$

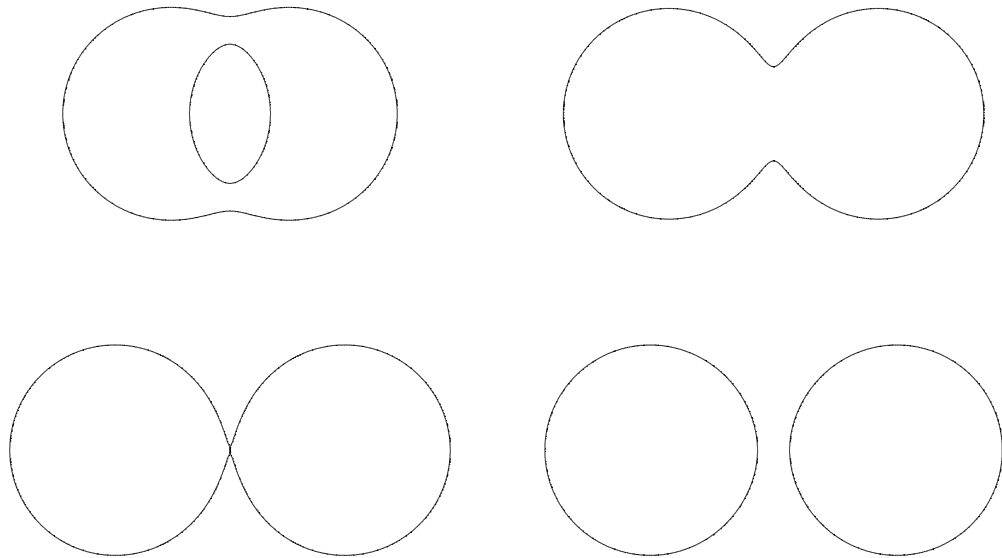
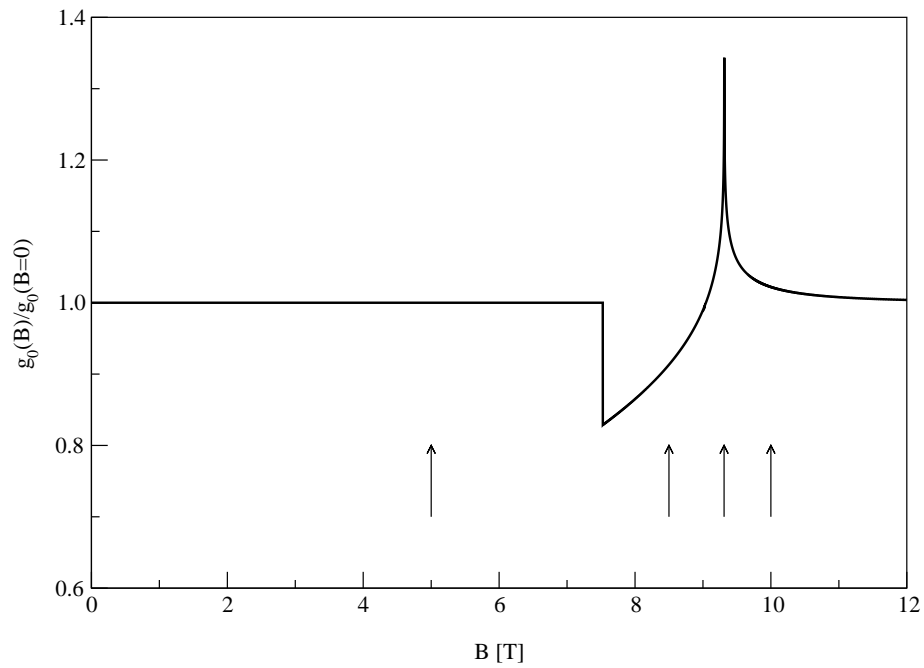
$$\langle \vec{k}, A | \langle \hat{G}^+(E) \rangle | \vec{k}, A \rangle = \frac{1}{E - \varepsilon_A + i\Gamma_{AA}^{(w)}}. \quad (4.17)$$

<sup>3</sup>V průběhu celého výpočtu byla Fermiho energie považována za konstantu,  $E_F(B) = E_F(0)$ . Z podrobnější numerické analýzy totiž plyne, že pro použité parametry jsou změny  $E_F$  o několik řádů menší než typická energetická škála systému, daná například velikostí přeskokové pravděpodobnosti  $t$ .

<sup>4</sup>V dalším textu budeme dodržovat konvenci, že řecké indexy nabývají hodnot  $\{B, A\}$ , latinské pak hodnot  $\{L, R\}$ .

<sup>5</sup>Například vodivost bude úměrná  $1/\Gamma_{L,R}^{(w)}$ .





Obrázek 4.2: Hustota stavů na Fermiho ploše v závislosti na magnetickém poli pro vzorek B použitý v [12] (viz popis obrázku 4.1). Pro vybrané hodnoty magnetického pole, v grafu označené šipkou, jsou vykresleny též tvary Fermiho ploch. Postupně: obsazeny oba podpásky ( $B = 5\text{T}$ ), horní podpás vyprázdněn ( $B = 8,5\text{T}$ ), okamžik „roztržení“ Fermiho ploch ( $B = 9,31\text{T}$ ) a opět dva podpásky, tentokrát každý odpovídá jedné jámě ( $B = 10\text{T}$ ).

### 4.3 Odezva na vnější elektrické pole

V této části odvodíme výrazy popisující reakci studovaného systému na vnější elektrické pole, které leží v rovině jam. Vyšetříme oba možné případy —  $\vec{E} \perp \vec{B}$  a  $\vec{E} \parallel \vec{B}$ . Formule odpovídající druhé orientaci vždy dostaneme zjednodušením vzorců pro orientaci první.

#### 4.3.1 Aproximace pro $\hat{K}$

Abychom získali vyjádření pro  $\hat{K}$ , které odpovídá naší aproximaci (budeme ho označovat  $\hat{K}^{(w)}$ ), musíme vyřešit (2.26) a získaný výsledek dosadit do (2.24). Přitom je třeba ve zmíněných vzorcích nahradit  $\mathcal{L}_{L,R}$  limitní hodnotou  $\mathcal{L}_{L,R}^{(w)}$ .

V soustavě rovnic (2.26) vystupují dvoudimenzionální stopy obsahující dvě Greenovy funkce  $\langle \hat{G} \rangle$ , například  $\text{Tr}_{2D}(\langle i | \langle \hat{G} \rangle | j \rangle \langle j | \langle \hat{G} \rangle | i \rangle)$ . Tento výraz nejprve rozepíšeme pomocí maticových elementů (4.16) a (4.17)

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{2D} \left( \langle i | \langle \hat{G} \rangle | j \rangle \langle j | \langle \hat{G} \rangle | i \rangle \right) \\ = \sum_{\alpha, \beta} \text{Tr}_{2D} \left( \langle \alpha | i \rangle \langle \beta | i \rangle \langle \alpha | j \rangle \langle \beta | j \rangle \langle \alpha | \langle \hat{G} \rangle | \alpha \rangle \langle \beta | \langle \hat{G} \rangle | \beta \rangle \right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

a následně provedeme rozklad  $\langle \alpha | \langle \hat{G}^\pm \rangle | \alpha \rangle = R_\alpha \mp iF_\alpha$ , kde  $R_\alpha$  a  $F_\alpha$  jsou reálné a jejich explicitní tvar je

$$R_\alpha = \frac{E - \varepsilon_\alpha}{(E - \varepsilon_\alpha)^2 + \Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)2}}, \quad F_\alpha = \frac{\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}}{(E - \varepsilon_\alpha)^2 + \Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)2}}. \quad (4.19)$$

Ze vzorců odvozených v dodatku D vyplývá, že vedoucí členy v rozvoji (4.18) podle mocnin  $\Gamma_{AA, BB}^{(w)}$  jsou řádu  $1/\Gamma_{AA, BB}^{(w)}$  a navíc se vyskytují pouze u kombinace indexů  $\alpha\alpha$  a  $+-$ . Ostatní příspěvky jsou řádu  $o(1/\Gamma_{AA, BB}^{(w)})$ , a pro další výpočty je tedy podstatné pouze

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \frac{1}{S} \text{Tr}_{2D} \left( \langle i | \langle \hat{G}^+ \rangle | j \rangle \langle j | \langle \hat{G}^- \rangle | i \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha} \iint d^2k \langle \alpha | i \rangle^2 \langle \alpha | j \rangle^2 \frac{1}{\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}} \delta(E - \varepsilon_\alpha). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Zcela analogicky lze upravit i stopy z pravých stran (2.26), načež dostaneme

$$\begin{aligned} B_i &= \frac{1}{S} \text{Tr}_{2D} \left( \langle i | \langle \hat{G}^+ \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G}^- \rangle | i \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha, j} \iint d^2k \langle \alpha | i \rangle^2 \langle \alpha | j \rangle^2 v_{xj} \frac{1}{\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}} \delta(E - \varepsilon_\alpha), \end{aligned} \quad (4.21)$$

kde  $v_{xj}$  je  $x$ -složka rychlosti v  $i$ -té jámě, jinými slovy

$$\hat{v}_x = |L\rangle v_{xL} \langle L| + |R\rangle v_{xR} \langle R|. \quad (4.22)$$

Na následujících několika řádcích ukážeme, že mezi právě zavedenými veličinami platí i jiné vztahy než jen očividná identita  $A_{ij} = A_{ji}$ . Za tím účelem rozepíšeme podrobněji  $\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}$  sloučením (4.15) a (2.29)

$$\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)} = \frac{\pi g_0}{4n_S} \left( \langle \alpha|L\rangle^2 \mathcal{L}_L^{(w)} + \langle \alpha|R\rangle^2 \mathcal{L}_R^{(w)} \right). \quad (4.23)$$

Krom jiného jsme využili toho, že lokální hustota je polovinou celkové. Nejdříve převedeme do jiného tvaru  $A_{LR}$ . Po rozepsání

$$\langle \alpha|R\rangle^2 = \frac{1}{\mathcal{L}_R^{(w)}} \left( \langle \alpha|R\rangle^2 \mathcal{L}_R^{(w)} + \langle \alpha|L\rangle^2 \mathcal{L}_L^{(w)} \right) - \frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} \langle \alpha|L\rangle^2 \quad (4.24)$$

dostaneme

$$A_{LR} = \frac{2n_S}{\pi^2 g_0 \mathcal{L}_R^{(w)}} \sum_{\alpha} \iint d^2k \langle \alpha|L\rangle^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) - \frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} A_{LL}. \quad (4.25)$$

V části prvního členu poznáváme levou hustotu stavů, po jejímž dosazení získáme jednoduchý vztah

$$A_{LR} = \frac{2n_S}{\mathcal{L}_R^{(w)}} - \frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} A_{LL}. \quad (4.26)$$

Díky symetrii platí obdobná rovnice také s  $A_{RR}$  na pravé straně, jejíž explicitní tvar očividně je

$$A_{LR} = \frac{2n_S}{\mathcal{L}_L^{(w)}} - \frac{\mathcal{L}_R^{(w)}}{\mathcal{L}_L^{(w)}} A_{RR}. \quad (4.27)$$

Rovnice (4.26) a (4.27) samozřejmě implikují také souvislost mezi diagonálními elementy  $A_{LL}$  a  $A_{RR}$

$$A_{RR} = 2 \frac{\mathcal{L}_R^{(w)} - \mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)^2}} n_S + \left( \frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} \right)^2 A_{LL}. \quad (4.28)$$

Vidíme tedy, že při konkrétních výpočtech stačí ze čtyř složek matice  $A_{ij}$  určit pouze jedinou. Podobným postupem najdeme vazbu mezi  $B_L$  a  $B_R$ . Použijeme-li opět trik (4.24), bude mít (4.21) tvar

$$B_R = \frac{2n_S}{\pi^2 g_0 \mathcal{L}_R^{(w)}} \sum_{\alpha,j} \iint d^2k \langle \alpha|j\rangle^2 v_{xj} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) - \frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} B_L. \quad (4.29)$$

Následně ukážeme, že přispívá pouze jednoduchá druhá část. Pro  $v_{xj}$  lze podle (4.4) psát  $v_{xL,R} = v_0 \mp v_B$ , kde  $v_0 = \hbar k_x / m^*$  a  $v_B = ed_B B / 2m^*$ . Potom je

$$\begin{aligned} \sum_j \iint d^2k \langle \alpha | j \rangle^2 v_{xj} \delta(E - \varepsilon_\alpha) &= \iint d^2k v_0 \delta(E - \varepsilon_\alpha) \\ &+ \iint d^2k \langle \alpha | R \rangle^2 v_B \delta(E - \varepsilon_\alpha) - \iint d^2k \langle \alpha | L \rangle^2 v_B \delta(E - \varepsilon_\alpha). \end{aligned} \quad (4.30)$$

První člen na pravé straně je nulový, protože integrand je v proměnné  $k_x$  lichý. Zbylé dva se právě odečtou, neboť oba jsou až na konstantu pravá, respektive levá hustota stavů. Díky tomu jsme dospěli k vyjádření

$$B_R = -\frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} B_L. \quad (4.31)$$

V této chvíli již máme vše připraveno na sestavení dvojice rovnic (2.26) v limitě slabého rozptylu. Přitom budeme používat označení  $K_i = \text{Tr}_{2D}(\langle i | \hat{K}^{(w)} | i \rangle) / S$ . Snadno zjistíme, že  $K_i^{++}$  a  $K_i^{--}$  jsou řádu  $o(1/\Gamma_{AA,BB}^{(w)})$ , pro  $K_i^{+-}$  pak první rovnice z (2.26) přejde, po použití výše dokázaných identit mezi koeficienty  $A_{ij}$  a  $B_i$ , na tvar

$$\frac{\mathcal{L}_R^{(w)}}{2n_S} A_{LR} (K_L^{+-} - K_R^{+-}) = B_L. \quad (4.32)$$

Toto už je veškerá informace, kterou můžeme získat, protože druhá rovnice ze soustavy (2.26) je pouze  $-\mathcal{L}_L^{(w)} / \mathcal{L}_R^{(w)}$  násobkem vztahu (4.32). To je poněkud překvapivé zjištění, protože zdánlivě neznáme vše, co potřebujeme. Brzy ale ukážeme, že tomu tak není.

Úplně nakonec dodejme, že pokud zaměníme  $\hat{v}_x$  za  $\hat{v}_y$ , budeme mít

$$\frac{\mathcal{L}_R^{(w)}}{2n_S} A_{LR} (K_L^{+-} - K_R^{+-}) = 0, \quad (4.33)$$

kde nula na pravé straně je nulou ve všech řádech  $\Gamma_{AA,BB}^{(w)}$ . Důvody, proč  $B_i$  nepřispívá, byly diskutovány již ve třetí kapitole.<sup>6</sup>

<sup>6</sup>Nyní se mohou vynořit pochybnosti ohledně důkazu nulovosti vrcholových korekcí v nepřítomnosti magnetického pole, který byl proveden v předchozí kapitole. Tam jsme předpokládali, že matice soustavy (2.26) má inverzi. Skutečnost je taková, že neznáme přesný důkaz korektnosti tohoto kroku. Na druhou stranu je třeba říci, že limita slabého rozptylu je v jistém smyslu patologická, protože jak v rovnicích pro  $\langle \hat{G} \rangle$ , tak pro  $\hat{K}$  vystupují parametry nečistot v téže kombinaci  $\mathcal{L}_i^{(w)}$ . Tento fakt byl pro identity výše klíčový.

### 4.3.2 Proudová hustota

Posledním krokem ke vzorci pro proudovou hustotu je dosazení (2.24) do (3.17). Pro přehlednost rozdělíme  $j_x^{(E_x)}$  na dva příspěvky — na  $j_x^{(a)}$ , odpovídající jednoduchému decouplingu, a na vrcholovou korekci  $j_x^{(b)}$ . První z nich je

$$\begin{aligned} j_x^{(a)} &= \frac{\hbar e^2}{2\pi V} E_x \text{Tr} \left( \langle \hat{G}^+ \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G}^- \rangle \hat{v}_x \right) \\ &= \frac{\hbar e^2}{4\pi^2 D} E_x \sum_{\alpha} \iint d^2 k \left[ v_0 + v_B (\langle \alpha | R \rangle^2 - \langle \alpha | L \rangle^2) \right]^2 \frac{1}{\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}} \delta(E_F - \varepsilon_{\alpha}), \end{aligned} \quad (4.34)$$

druhý pak s využitím (4.32)

$$\begin{aligned} j_x^{(b)} &= \frac{\hbar e^2}{2\pi D} E_x \sum_i \frac{\mathcal{L}_i^{(w)}}{2n_S} K_i^{+-} \frac{1}{S} \text{Tr}_{2D} \left( \langle i | \langle \hat{G}^- \rangle \hat{v}_x \langle \hat{G}^+ \rangle | i \rangle \right) \\ &= \frac{\hbar e^2}{2\pi D} E_x \frac{\mathcal{L}_i^{(w)}}{2n_S} B_L (K_L^{+-} - K_R^{+-}) = \frac{\hbar e^2}{2\pi D} E_x \frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} \frac{B_L^2}{A_{LR}}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

V případě  $j_y^{(E_y)}$  se vrcholová korekce podle (4.33) neuplatní, a je tedy jednoduše

$$j_y^{(E_y)} = j_y^{(a)} = \frac{\hbar e^2}{4\pi^2 D} E_y \sum_{\alpha} \iint d^2 k v_y^2 \frac{1}{\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}} \delta(E_F - \varepsilon_{\alpha}). \quad (4.36)$$

### 4.3.3 Přesun náboje

Protože  $K_R^{++}$  je řádu  $o(1/\Gamma_{AA,BB}^{(w)})$ , je z (3.56) relevantní pouze první člen

$$\delta Q_R^{(E_x)} = \frac{\hbar e^2}{2\pi} E_x \text{Tr} \left( \hat{K}^{+-} \hat{P}_R \right) = \frac{\hbar e^2 S}{2\pi} E_x K_R^{+-}. \quad (4.37)$$

V tomto vzorci vystupuje samostatně  $K_R^{+-}$ , jehož vyjádření neznáme. Přesto máme řešení na dosah ruky. Pro změnu náboje v levé jámě totiž analogicky platí

$$\delta Q_L^{(E_x)} = \frac{\hbar e^2 S}{2\pi} E_x K_L^{+-}, \quad (4.38)$$

což spolu s identitou (1.35) vynucuje  $K_L^{+-} = -K_R^{+-}$ . Kombinací s rovnicí (4.32) pak získáváme

$$K_L^{+-} = \frac{n_S B_L}{\mathcal{L}_R^{(w)} A_{LR}}, \quad K_R^{+-} = \frac{n_S B_R}{\mathcal{L}_L^{(w)} A_{LR}}, \quad (4.39)$$

načež můžeme psát

$$\delta Q_R^{(E_x)} = \frac{\hbar e^2 S}{2\pi} E_x \frac{n_S B_R}{\mathcal{L}_L^{(w)} A_{LR}}. \quad (4.40)$$

Co se týče transportu podél magnetického pole, k žádnému přeuspořádání náboje nedojde, neboť tehdy je  $K_i^{+-} = 0$ . Získaný výsledek nepřekvapuje, protože tato konfigurace se příliš neliší od případu, kdy magnetické pole přítomno není.

## 4.4 Odezva na příčné vnitřní pole

Při diskusi vlivu příčného pole se formálně omezíme pouze na systém bez nečistot. Protože veškerá lineární odezva vyjde konečná, znamená to, že vedoucí řád v rozvoji podle  $\Gamma$  v okolí nuly je  $O(\Gamma^0)$ . Odtud plyne, že ponechání pouze zmíněných členů je konzistentní s předchozím postupem.

### 4.4.1 Proudová hustota

Přímočárými úpravami dospějeme od (1.43) ke tvaru

$$j_x^{(W)} = \frac{e}{2\pi^2 D} W \sum_{\alpha, \beta, i} \iint d^2 k \times \langle \alpha | R \rangle \langle \beta | R \rangle \langle \alpha | i \rangle \langle \beta | i \rangle v_{xi} f_{\text{FD}}(\varepsilon_\alpha) [G_{0\beta}^-(\varepsilon_\alpha) + G_{0\beta}^+(\varepsilon_\alpha)], \quad (4.41)$$

kde si podrobněji všimneme výrazu v závorce. Podstatné je, že v obou Greenových funkcích vystupuje totéž regularizační  $\epsilon$ , jak je zřejmé z odvození v první kapitole. Díky tomu platí

$$G_{0\beta}^-(\varepsilon_\alpha) + G_{0\beta}^+(\varepsilon_\alpha) = \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta - i\epsilon} + \frac{1}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + i\epsilon} = \begin{cases} \frac{2}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta}, & \varepsilon_\alpha \neq \varepsilon_\beta, \\ 0, & \varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta, \end{cases} \quad (4.42)$$

načež výsledná formule pro proudovou odezvu je

$$j_x^{(W)} = -\frac{e}{\pi^2 D} W \sum_i \iint d^2 k \times \langle B | R \rangle \langle A | R \rangle \langle B | i \rangle \langle A | i \rangle v_{xi} \frac{1}{\varepsilon_A - \varepsilon_B} [f_{\text{FD}}(\varepsilon_B) - f_{\text{FD}}(\varepsilon_A)]. \quad (4.43)$$

Při nulové teplotě jde o integrál přes oblast ohraničenou z jedné strany komponentou Fermiho plochy odpovídající vazebnému podpásu, z druhé strany pak komponentou odpovídající podpásu nevazebnému. Protože rozdíl  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$  závisí pouze na  $k_x$ , je integrace přes složku  $k_y$  triviální a do numerického výpočtu opět vstupuje pouze jednorozměrný integrál.

### 4.4.2 Přesun náboje

Zcela stejným postupem je možno upravit i (1.44), popisující nabíjení pravé jámy. Po několika krocích dostáváme

$$\delta Q_R^{(W)} = -\frac{eS}{\pi^2} W \iint d^2 k \langle B | R \rangle^2 \langle A | R \rangle^2 \frac{1}{\varepsilon_A - \varepsilon_B} [f_{\text{FD}}(\varepsilon_B) - f_{\text{FD}}(\varepsilon_A)]. \quad (4.44)$$

## 4.5 Selfkonzistentní podmínka

Na předchozích stránkách jsem ukázali, že vnější pole  $E_x$  způsobí kromě proudu  $j_x$  také přeuspořádání elektronů v systému. To znamená, že se změní Hartreeho člen v potenciálu a objeví se příčné elektrické pole  $E_z$ . Pro výpočet tohoto Hallova pole použijeme tentýž model jako ve třetí kapitole, kde jsme předpokládali, že elektrony jsou lokalizovány v tenkých rovinách, vzdálených od sebe  $d_E$ . Za těchto okolností je

$$E_z = -\frac{1}{\varepsilon S} \left( \delta Q_R^{(E_x)} + \delta Q_R^{(W)} \right), \quad (4.45)$$

přičemž  $W = -ed_E E_z$ . Dále zavedeme koeficienty úměrnosti  $q_R^{(E_x)}$  a  $q_R^{(E_z)}$  definičními vztahy

$$\delta Q_R^{(E_x)} = q_R^{(E_x)} S E_x, \quad \delta Q_R^{(W)} = q_R^{(E_z)} S E_z, \quad (4.46)$$

s použitím kterých lze řešení selfkonzistentní podmínky (4.45) zapsat v jednoduchém tvaru

$$E_z = -\frac{q_R^{(E_x)}}{q_R^{(E_z)} + \varepsilon} E_x. \quad (4.47)$$

## 4.6 Tenzor vodivosti

Složku  $\sigma_{yy}$  tenzoru vodivosti už máme prakticky spočítanou, stačí vydělit výraz (4.36) velikostí elektrického pole  $E_y$

$$\sigma_{yy} = \frac{\hbar e^2}{4\pi^2 D} \sum_{\alpha} \iint d^2 k v_y^2 \frac{1}{\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}} \delta(E_F - \varepsilon_{\alpha}). \quad (4.48)$$

Pro určení  $\sigma_{xx}$  musíme udělat víc. Je třeba sečíst příspěvky (4.34), (4.35) a přidat (4.43), kam bylo předtím dosazeno  $W = -ed_E E_z$  s  $E_z$  daným podle (4.47). Tak nakonec získáme

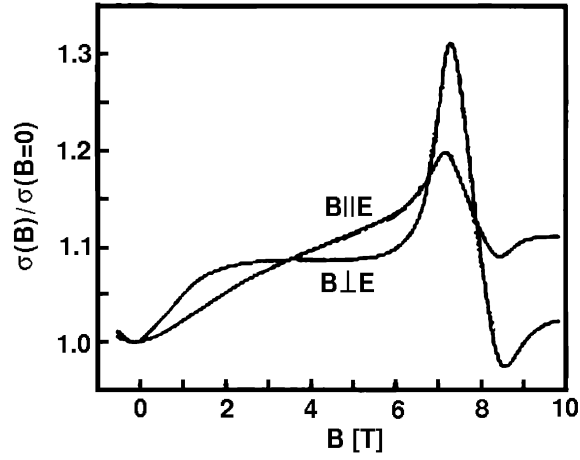
$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = & \frac{\hbar e^2}{4\pi^2 D} \sum_{\alpha} \iint d^2 k \left[ v_0 + v_B \left( \langle \alpha | R \rangle^2 - \langle \alpha | L \rangle^2 \right) \right]^2 \frac{1}{\Gamma_{\alpha\alpha}^{(w)}} \delta(E_F - \varepsilon_{\alpha}) \\ & + \frac{\hbar e^2}{2\pi D} \frac{\mathcal{L}_L^{(w)}}{\mathcal{L}_R^{(w)}} \frac{B_L^2}{A_{LR}} \\ & - \frac{e^2 d_E}{\pi^2 D} \frac{q_R^{(E_x)}}{q_R^{(E_z)} + \varepsilon} \sum_i \iint d^2 k \\ & \times \langle B | R \rangle \langle A | R \rangle \langle B | i \rangle \langle A | i \rangle v_{xi} \frac{1}{\varepsilon_A - \varepsilon_B} [f_{\text{FD}}(\varepsilon_B) - f_{\text{FD}}(\varepsilon_A)]. \quad (4.49) \end{aligned}$$

Na následující straně jsou pro srovnání uvedeny naměřené hodnoty vodivosti (obrázek 4.3), spolu s odpovídajícími teoretickými závislostmi (obrázek

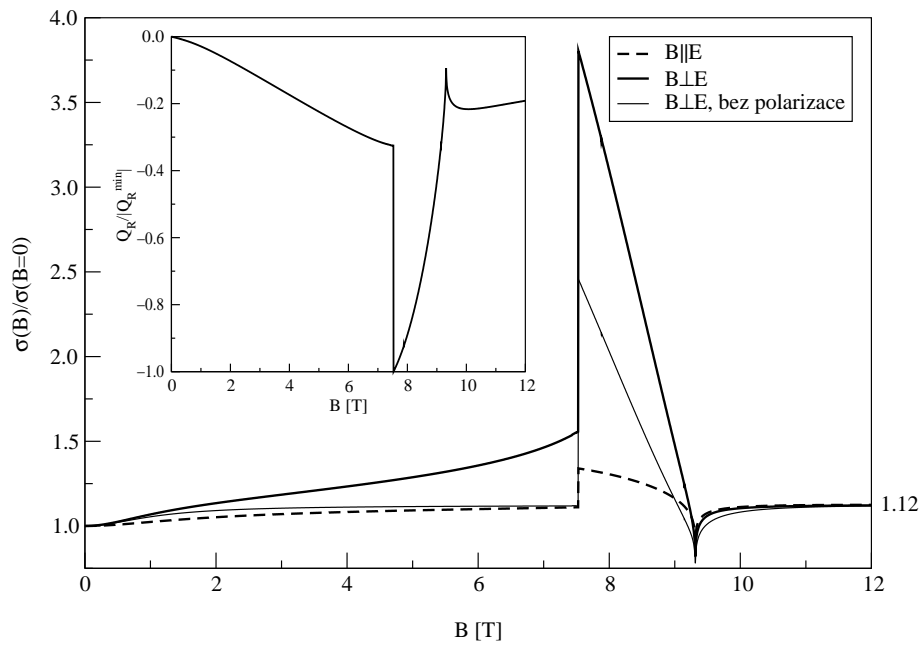
4.4). Kromě kvalitativní shody v podstatných rysech vidíme, že se elektrony skutečně přesouvají do pravé jámy, jak jsme předpokládali již v úvodu této práce. Také kladný hallovský příspěvek k vodivosti lze pochopit na základě jednoduché představy o driftovém pohybu nabitě částice ve zkřížených polích  $\vec{E}_z \perp \vec{B}$ .

Za zmínku rovněž stojí fakt, že hodnota  $\sigma_{xx,yy}(B \rightarrow \infty)/\sigma_{xx,yy}(B = 0)$  přesně odpovídá poměru  $\rho^{\text{res}}/\rho^{\text{off}} = 1,125$  počítanému podle (3.43) při  $r = 2$ . Lze tedy mluvit o tom, že magnetické pole potlačuje tunelování mezi jámami.





Obrázek 4.3: Experimentálně zjištěná závislost vodivosti na podélném magnetickém poli ([12], vzorek B).



Obrázek 4.4: Vypočtená závislost vodivosti na magnetickém poli pro tentýž vzorek, k jakému se vztahuje obrázek 4.3. Parametry modelu byly uvedeny již v popisu obrázku 4.1, zde navíc  $d_E = d_B = 135 \text{ \AA}$  a  $\mathcal{L}_L^{(w)}/\mathcal{L}_R^{(w)} = 2$ . Příklad  $\vec{B} \perp \vec{E}$  bez uvážení polarizačních efektů odpovídá výpočtům provedeným v [16], které vycházejí z Boltzmannovy rovnice. Vložený graf ukazuje přebytek záporného náboje v pravé jámě, který je v souladu s intuitivními úvahami z úvodu této práce.

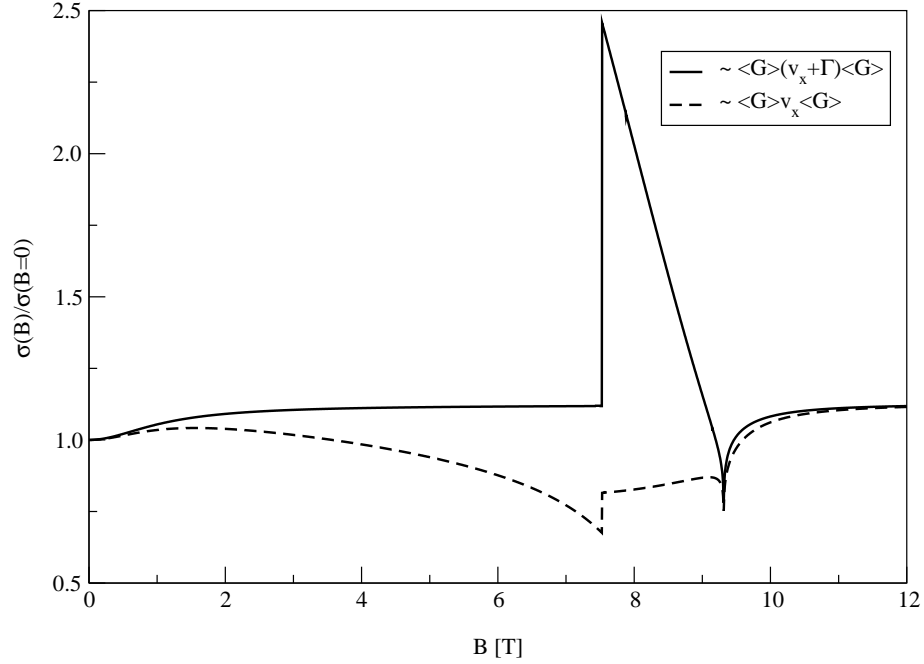
# Závěr

Pro nulové magnetické pole se nám podařilo za poměrně málo omezujícího předpokladu  $E_F \gg |\Sigma|$  dospět až k výsledkům analytickou cestou. Díky tomu je snadno přístupný charakter závislosti vodivosti na přeskokové pravděpodobnosti  $t$  a na parametru popisujícím nesymetrii dvojjámy  $\Delta$ . Následně je možný hlubší vhled do problematiky odporové rezonance, než jaký je obvykle prezentován ([11], [14]). Zjistili jsme, že rezonance má lorentzovský charakter a že ve struktuře s hradlem její maximum neodpovídá přesně symetrické dvojjámě.

V případě podélného magnetického pole jsme už byli i v použitém jednoduchém modelu donuceni přistoupit k numerickým výpočtům. V důsledku toho nejsou získané výsledky tak průzračné. Také podrobnější srovnání naší teorie se stávajícími experimenty a posouzení, zda vypočtený vliv příčné polarizace na vodivost  $\sigma_{xx}$  kvantitativně odpovídá naměřeným závislostem, je z několika důvodů velmi obtížné.

- Vodivost vykazuje výraznou anizotropii vzhledem k vzájemnému směru vnějšího elektrického pole  $\vec{E}$  a magnetického pole  $\vec{B}$ . Do této anizotropie však naneštěstí nepřispívají pouze hallovské efekty, ale významnou měrou též komplikovaný tvar Fermiho plochy (obrázek 4.2).
- Náš jednoduchý model selhává pro silné magnetické pole, kdy jeho vliv není zanedbatelný díky konečné tloušťce jednotlivé jámy. Tehdy zůstane Fermiho plocha (a s ní i vodivost) anizotropní i v případě, kdy je tunelování mezi jámami magnetickým polem zcela potlačeno.
- Aby bylo zcela jasné, co přesně popisují naměřená data, museli bychom podrobněji rozebrat efekty v okolí makroskopických kontaktů. Protože zmíněná problematika zcela jistě vybočuje mimo rámec této práce, omezíme se pouze na konstatování, že do změřeného odporu přispívá jak odpor podélný, tak i hallovský.

Pro skutečné vyjasnění, jak velké Hallovo pole v reálné kvantové dvojjámě vzniká, by bylo třeba měřit příčné efekty přímo. Nabízí se sledování kapacity mezi hradlem a dvojrstvou, k jejímž změnám v závislosti na polích  $\vec{E}$  a  $\vec{B}$  jistě díky přesunu náboje dochází.



Ilustrace vlivu vrcholových korekcí pro tytéž parametry, s jakými byl počítán i obrázek 4.4. Závislosti se týkají pouze prvních dvou členů v (4.49), polarizační efekty jsou ponechány stranou.

Vrátíme-li se nakonec k teoretickému aspektu naší práce, můžeme uzavřít, že jsme vytvořili vnitřně konzistentní teorii zahrnující polarizační efekty v aproximaci náhodných fází (RPA). Jejich chování (směr vzniklého příčného pole a zvětšení vodivosti) přitom podle očekávání odpovídá pohybu elektronu ve zkříženém elektrickém a magnetickém poli. Modelové výpočty ukazují, že vliv hallowského pole je překvapivě silný.

Taktéž velmi výrazný je příspěvek vrcholových korekcí pro vodivost  $\sigma_{xx}$ , které nevymizí, protože magnetické pole narušuje symetrii

$$v_x(-\vec{k}) = -v_x(\vec{k}).$$

# Dodatek A

## Jednoelektronová matice hustoty

Jednoelektronovou matici hustoty zavedeme standardním vztahem

$$\hat{f} = \sum_{m,n} |m\rangle \text{Tr}_{\text{Fock}} (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m \hat{\rho}_{\text{Fock}}) \langle n|, \quad (\text{A.1})$$

kde  $|m\rangle, |n\rangle$  jsou stavy z jednoelektronového Hilbertova prostoru  $\mathcal{H}$  a  $\hat{\rho}_{\text{Fock}}$  je mnohočásticová matice hustoty. V celém dodatku budeme předpokládat, že máme hamiltonián tvaru

$$\hat{H}_{\text{Fock}} = \sum_i \hat{H}_i = \sum_{m,n} \langle m|\hat{H}|n\rangle \hat{c}_m^\dagger \hat{c}_n. \quad (\text{A.2})$$

### Střední hodnoty operátorů

Pro kvantově mechanickou střední hodnotu operátoru  $\hat{A}_{\text{Fock}} = \sum_i \hat{A}_i$  můžeme ihned napsat jednoduchý výsledek

$$A = \text{Tr}_{\text{Fock}} (\hat{A}_{\text{Fock}} \hat{\rho}_{\text{Fock}}) = \sum_{m,n} \langle m|\hat{A}|n\rangle \underbrace{\text{Tr}_{\text{Fock}} (\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_n \hat{\rho}_{\text{Fock}})}_{\langle n|\hat{f}|m\rangle} = \text{Tr} (\hat{A} \hat{f}). \quad (\text{A.3})$$

### Časový vývoj matice hustoty

Mnohočásticová matice hustoty  $\hat{\rho}_{\text{Fock}}$  se vyvíjí podle Liouvillový rovnice

$$\frac{d\hat{\rho}_{\text{Fock}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{\text{Fock}}, \hat{\rho}_{\text{Fock}}], \quad (\text{A.4})$$

ze které snadno dostaneme

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{m,n} |m\rangle \text{Tr}_{\text{Fock}} (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m [\hat{H}_{\text{Fock}}, \hat{\rho}_{\text{Fock}}]) \langle n|. \quad (\text{A.5})$$

Dosadíme-li za hamiltonián podle (A.2) a využijeme-li cykličnosti stopy, máme

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{m,n,k,l} |m\rangle \langle k| \hat{H} |l\rangle \text{Tr}_{\text{Fock}} \left( \left[ \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m, \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \right] \hat{\rho}_{\text{Fock}} \right) \langle n|, \quad (\text{A.6})$$

kam za komutátor můžeme dosadit vyjádření

$$\left[ \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m, \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \right] = \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_l \delta_{mk} - \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_m \delta_{nl}, \quad (\text{A.7})$$

o jehož platnosti se přesvědčíme použitím antikomutační relace  $\{\hat{c}_m, \hat{c}_n^\dagger\} = \delta_{mn}$ . Po několika přímočarých algebraických úpravách již získáme

$$\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{H}, \hat{f} \right]. \quad (\text{A.8})$$

### Rovnovážná matice hustoty

Od této chvíle budeme předpokládat, že  $|m\rangle$  jsou vlastní stavy jednoelektronového hamiltoniánu  $\hat{H}_i$ , příslušející vlastním hodnotám  $\varepsilon_m$ .

Termodynamické rovnováže odpovídá grandkanonická matice hustoty

$$\hat{\rho}_{\text{Fock}} = \frac{1}{Z_G} e^{-\beta(\hat{H}_{\text{Fock}} - \mu \hat{N})}, \quad (\text{A.9})$$

kde  $Z_G$  označuje partiční sumu

$$\begin{aligned} Z_G &= \text{Tr}_{\text{Fock}} \left( e^{-\beta(\hat{H}_{\text{Fock}} - \mu \hat{N}_{\text{Fock}})} \right) \\ &= \text{Tr}_{\text{Fock}} \left( e^{-\beta \sum_n (\varepsilon_p - \mu) \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p} \right) = \prod_p (1 + e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)}). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Zcela analogicky vypočteme též maticové elementy jednoelektronové matice hustoty

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{f}_{\text{rovn.}} | n \rangle &= \prod_p (1 + e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)})^{-1} \text{Tr}_{\text{Fock}} \left( \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m e^{-\beta \sum_n (\varepsilon_p - \mu) \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p} \right) \\ &= \delta_{m,n} \prod_p (1 + e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)})^{-1} e^{-\beta(\varepsilon_n - \mu)} \prod_{p \neq n} (1 + e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)}) \\ &= \delta_{m,n} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} + 1}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Ve zkráceném tvaru tedy můžeme psát

$$\hat{f}_{\text{rovn.}} = \frac{1}{e^{\beta(\hat{H} - \mu)} + 1} = f_{\text{FD}}(\hat{H}). \quad (\text{A.12})$$

## Dodatek B

### Identita pro (1.14) a (1.38)

V tomto dodatku ukážeme, že v termodynamické limitě platí

$$\int_{-\infty}^0 dt \epsilon e^{(i\omega+\epsilon)t} \text{Tr} \left( f_{\text{FD}}(\hat{H}) \left[ \hat{A}^I(t), \hat{B} \right] \right) = 0. \quad (\text{B.1})$$

Výraz nejprve přepíšeme na tvar

$$\int_{-\infty}^0 dt \epsilon e^{(i\omega+\epsilon)t} \int dE \int dE' e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} \times \left[ f_{\text{FD}}(E) - f_{\text{FD}}(E') \right] \text{Tr} \left[ \delta(E - \hat{H}) \hat{A} \delta(E' - \hat{H}) \hat{B} \right], \quad (\text{B.2})$$

načež provedeme časovou integraci

$$\int dE \int dE' \frac{i\hbar\epsilon}{E' - E - \hbar\omega + i\hbar\epsilon} \times \left[ f_{\text{FD}}(E) - f_{\text{FD}}(E') \right] \text{Tr} \left[ \delta(E - \hat{H}) \hat{A} \delta(E' - \hat{H}) \hat{B} \right]. \quad (\text{B.3})$$

V limitě  $\epsilon \rightarrow 0+$  nakonec máme

$$\int dE \int dE' \delta_{E', E+\hbar\omega} \left[ f_{\text{FD}}(E) - f_{\text{FD}}(E') \right] \text{Tr} \left[ \delta(E - \hat{H}) \hat{A} \delta(E' - \hat{H}) \hat{B} \right]. \quad (\text{B.4})$$

Pokud  $\omega = 0$ , je integrand nulový a splnění identity (B.1) je očividné. V opačném případě je situace složitější. Integrál (B.4) s jistotou vymizí pouze v případě, že nosič  $\delta_{E', E+\hbar\omega}$  je míry nula vůči nosiči výrazu  $\text{Tr} \left[ \delta(E - \hat{H}) \hat{A} \delta(E' - \hat{H}) \hat{B} \right]$ . Toto je pravda v termodynamické limitě ( $V \rightarrow \infty$ ), v níž je spektrum hamiltoniánu spojitě.

# Dodatek C

## Poznámky k integraci po Fermiho liniích

Analytické úpravy ve čtvrté kapitole vedou k integrálům typu

$$\iint d^2k \phi(k_x, k_y) \delta(E - \varepsilon(k_x, k_y)), \quad (\text{C.1})$$

které je třeba počítat numericky. Dále uvedeme jednu z metod, jak tuto integraci provést.<sup>1</sup> Předně označíme  $C_i$  ty intervaly na ose  $k_x$ , pro které má rovnice  $\varepsilon(k_x, \tilde{k}_y) = E$  řešení  $\tilde{k}_y(k_x)$ , a zavedeme symboly  $k_{xi}^{\min}$  a  $k_{xi}^{\max}$  pro dolní a horní hranici těchto intervalů. Po integraci v proměnné  $k_y$  máme

$$2 \sum_i \int_{k_{xi}^{\min}}^{k_{xi}^{\max}} dk_x \phi(k_x, \tilde{k}_y) \left. \frac{1}{\left| \frac{\partial \varepsilon(k_x, k_y)}{\partial k_y} \right|} \right|_{k_y=\tilde{k}_y} = \frac{2m^*}{\hbar^2} \sum_i \int_{k_{xi}^{\min}}^{k_{xi}^{\max}} dk_x \phi(k_x, \tilde{k}_y) \frac{1}{\tilde{k}_y}, \quad (\text{C.2})$$

přičemž jsme pro  $\varepsilon(k_x, k_y)$  použili vyjádření (4.5). Koeficient 2 se objevuje proto, že ke každému řešení  $\tilde{k}_y(k_x)$  existuje též řešení  $-\tilde{k}_y(k_x)$ , jak plyne z (4.5). Protože platí  $\tilde{k}_y(k_{xi}^{\min}) = \tilde{k}_y(k_{xi}^{\max}) = 0$ , vidíme, že získaný integrand na integračních mezích diverguje. Tyto singularity snadno odstraníme substitucí

$$k_x = \frac{1}{2} (k_{xi}^{\max} + k_{xi}^{\min}) + \frac{1}{2} (k_{xi}^{\max} - k_{xi}^{\min}) \cos(\varphi), \quad (\text{C.3})$$

díky níž přejde upravovaný integrál na tvar

$$\frac{m^*}{\hbar^2} \sum_i (k_{xi}^{\max} - k_{xi}^{\min}) \int_{-\pi}^0 d\varphi \phi(k_x, \tilde{k}_y) \frac{\sin(\varphi)}{\tilde{k}_y}, \quad (\text{C.4})$$

---

<sup>1</sup>Je třeba poznamenat, že uvedený postup selhává v případě, kdy má Fermiho plocha tvar odpovídající roztržení na dva pásy (viz obrázek 4.2). Tehdy integrál (C.1) diverguje díky singularitě integrandu v bodě  $(k_x, k_y) = (0, 0)$ . Protože tato situace nastává pro každý vzorek vždy pouze pro jednu jedinou hodnotu magnetického pole, která nemá pro naše úvahy žádný zvláštní význam, jednoduše ji pomíneme.

kde  $\tilde{k}_y, k_x$  je třeba chápat jako funkce proměnné  $\varphi$ . Nyní již lze použít jakoukoli integrační proceduru ([18]), používající otevřený vzorec (integrand je na integračních mezích definován jako limita typu 0/0).



## Dodatek D

### Vzorce pro aproximaci $\Gamma \rightarrow 0$

Zde doplníme chybějící článek úprav výrazů typu (4.18), které byly prováděny ve čtvrté kapitole. Všude budeme předpokládat, že testovací funkce  $\varphi$  je na uzavřeném intervalu  $\langle -R, R \rangle$  spojitá včetně své první derivace a že  $\Gamma$  je kladné číslo.

**Tvrzení:**

$$\int_{-R}^R \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \varphi(x) dx = \pi \varphi(0) + o(\Gamma^0) \quad (\text{D.1})$$

**Důkaz:** V prvním kroku vypočteme normu

$$N_{\Gamma,R} = \int_{-R}^R \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} dx = 2 \arctan \left( \frac{R}{\Gamma} \right),$$

jejíž limita při  $\Gamma \rightarrow 0$  je očividně  $\pi$ . V druhém kroku odhadneme velikost zbytku

$$\left| \int_{-R}^R \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \varphi(x) dx - \pi \varphi(0) \right| = \left| \int_{-R}^R \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \left[ \varphi(x) - \frac{\pi}{N_{\Gamma,R}} \varphi(0) \right] dx \right|.$$

V integračním oboru vydělíme  $\varepsilon$ -ové okolí nuly. Potom je zbytek jistě menší nebo roven než

$$\begin{aligned} & \int_{\langle -R, \varepsilon \rangle \cup \langle \varepsilon, R \rangle} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \left| \varphi(x) - \frac{\pi}{N_{\Gamma,R}} \varphi(0) \right| dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \left| \varphi(x) - \frac{\pi}{N_{\Gamma,R}} \varphi(0) \right| dx \\ & \leq 2R \frac{\Gamma}{\varepsilon^2} \max_{\langle -R, R \rangle} \left| \varphi(x) - \frac{\pi}{N_{\Gamma,R}} \varphi(0) \right| + N_{\Gamma, \varepsilon} \max_{\langle -\varepsilon, \varepsilon \rangle} \left| \varphi(x) - \frac{\pi}{N_{\Gamma,R}} \varphi(0) \right|. \end{aligned}$$

Nyní již můžeme provést limitu  $\Gamma \rightarrow 0$ , v níž se první člen neuplatní

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} \left| \int_{-R}^R \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \varphi(x) dx - \pi \varphi(0) \right| \leq \pi \max_{\langle -\varepsilon, \varepsilon \rangle} |\varphi(x) - \varphi(0)| < \delta.$$

Díky spojitosti  $\varphi$  v okolí 0 je vždy možno k libovolně malému  $\delta$  najít příslušné  $\varepsilon$ , odkud plyne, že zbytek v uvedené limitě nepřispívá.

Toto bylo spíše pomocné tvrzení, které použijeme v některých důkazech dále. Další tři vzorce se už přímo týkají integrálů obsahujících  $\langle \alpha | \langle \hat{G} | \alpha \rangle \langle \alpha | \langle \hat{G} | \alpha \rangle$ .

**Tvrzení:** ( $F_\alpha F_\alpha$ )

$$\int_{-R}^R \frac{\Gamma^2}{(x^2 + \Gamma^2)^2} \varphi(x) dx = \frac{\pi}{2\Gamma} \varphi(0) + o(1/\Gamma) \quad (\text{D.5})$$

**Důkaz:** Použijeme totéž schéma jako v případě důkazu (D.1). Norma je

$$N_{\Gamma,R} = \int_{-R}^R \frac{\Gamma^2}{(x^2 + \Gamma^2)^2} dx = \frac{1}{\Gamma} \arctan\left(\frac{R}{\Gamma}\right) + \frac{R}{R^2 + \Gamma^2} = \frac{\pi}{2\Gamma} + o(1/\Gamma)$$

a pro zbytek násobený  $\Gamma$  lze ukázat nerovnost

$$\begin{aligned} \Gamma \left| \int_{-R}^R \frac{\Gamma^2}{(x^2 + \Gamma^2)^2} \varphi(x) dx - \frac{\pi}{2\Gamma} \varphi(0) \right| \\ \leq 2R \frac{\Gamma^3}{\varepsilon^4} \max_{\langle -R, R \rangle} \left| \varphi(x) - \frac{\pi}{2\Gamma N_{\Gamma,R}} \varphi(0) \right| + \Gamma N_{\Gamma,\varepsilon} \max_{\langle -\varepsilon, \varepsilon \rangle} \left| \varphi(x) - \frac{\pi}{2\Gamma N_{\Gamma,R}} \varphi(0) \right|. \end{aligned}$$

Nakonec provedeme limitu  $\Gamma \rightarrow 0$ , ve které první člen na pravé straně opět nepřispěje a druhý můžeme učinit libovolně malým.

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} \Gamma \left| \int_{-R}^R \frac{\Gamma^2}{(x^2 + \Gamma^2)^2} \varphi(x) dx - \frac{\pi}{2\Gamma} \varphi(0) \right| \leq \frac{\pi}{2} \max_{\langle -\varepsilon, \varepsilon \rangle} |\varphi(x) - \varphi(0)| < \delta$$

**Tvrzení:** ( $R_\alpha R_\alpha$ )

$$\int_{-R}^R \frac{x^2}{(x^2 + \Gamma^2)^2} \varphi(x) dx = \frac{\pi}{2\Gamma} \varphi(0) + o(1/\Gamma) \quad (\text{D.8})$$

**Důkaz:** Tento případ se od předchozího liší jen v nepodstatných členech normy, která je

$$N_{\Gamma,R} = \int_{-R}^R \frac{x^2}{(x^2 + \Gamma^2)^2} dx = \frac{1}{\Gamma} \arctan\left(\frac{R}{\Gamma}\right) - \frac{R}{R^2 + \Gamma^2} = \frac{\pi}{2\Gamma} + o(1/\Gamma).$$

**Tvrzení:** ( $F_\alpha R_\alpha$ )

$$\int_{-R}^R \frac{x\Gamma}{(x^2 + \Gamma^2)^2} \varphi(x) dx = \frac{\pi}{2} \frac{d\varphi}{dx}(0) + o(\Gamma^0) = o(1/\Gamma) \quad (\text{D.10})$$

**Důkaz:** Abychom ukázali platnost tohoto vzorce, provedeme integraci per-partes

$$\int_{-R}^R \frac{x\Gamma}{(x^2 + \Gamma^2)^2} \varphi(x) dx = -\frac{1}{2} \left[ \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \varphi(x) \right]_{-R}^R + \frac{1}{2} \int_{-R}^R \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \frac{d\varphi}{dx}(x) dx$$

a na druhý člen následně použijeme (D.1). Tím je důkaz hotov, protože první část je řádu  $O(\Gamma)$ .

Nakonec dokážeme tři identity, které se od předchozích liší pouze tím, že jednotlivé  $F_\alpha$ ,  $R_\beta$  nejsou lokalizované v okolí stejného bodu. Tento případ odpovídá členům obsahujícím kombinaci  $\langle \alpha | \langle \hat{G} \rangle | \alpha \rangle \langle \beta | \langle \hat{G} \rangle | \beta \rangle$ ,  $\alpha \neq \beta$ .

**Tvrzení:** ( $F_\alpha F_\beta$ )

$$\int_{-R}^R \frac{\Gamma_0}{x^2 + \Gamma_0^2} \frac{\Gamma_a}{(x - a)^2 + \Gamma_a^2} \varphi(x) dx = O(\Gamma_0, \Gamma_a) \quad (\text{D.12})$$

**Důkaz:** Pro určitost předpokládejme, že  $a > 0$ . Potom můžeme interval  $\langle -R, R \rangle$  rozdělit na dvě části  $\langle -R, b \rangle$  a  $\langle b, R \rangle$ , z nichž jedna obsahuje 0 a druhá bod  $a$ . V dalším se stačí omezit pouze na jeden z těchto intervalů, zvolme první. Pro absolutní hodnotu integrálu přes interval  $\langle -R, b \rangle$  máme

$$\left| \int_{-R}^b \frac{\Gamma_0}{x^2 + \Gamma_0^2} \frac{\Gamma_a}{(x - a)^2 + \Gamma_a^2} \varphi(x) dx \right| \leq \frac{\Gamma_a}{(a - b)^2} \int_{-R}^b \frac{\Gamma_0}{x^2 + \Gamma_0^2} |\varphi(x)| dx = O(\Gamma_a),$$

kde jsme v posledním kroku použili (D.1).

**Tvrzení:** ( $R_\alpha R_\beta$ )

$$\int_{-R}^R \frac{x}{x^2 + \Gamma_0^2} \frac{x - a}{(x - a)^2 + \Gamma_a^2} \varphi(x) dx = o(1/\Gamma_0, 1/\Gamma_a) \quad (\text{D.14})$$

**Důkaz:** Stejně jako v předchozím případě rozdělíme integrační obor na dva pod-intervaly a soustředíme se pouze na jeden z nich.

$$\begin{aligned} \left| \int_{-R}^b \frac{x}{x^2 + \Gamma_0^2} \frac{x - a}{(x - a)^2 + \Gamma_a^2} \varphi(x) dx \right| &\leq \frac{2}{a - b} \max_{\langle -R, R \rangle} |\varphi(x)| \int_0^R \frac{x}{x^2 + \Gamma_0^2} dx \\ &= \frac{2}{a - b} \max_{\langle -R, R \rangle} |\varphi(x)| \left[ \frac{1}{2} \ln(R^2 + \Gamma_0^2) - \ln \Gamma_0 \right] \end{aligned}$$

Vedoucí člen obsahuje  $\ln \Gamma_0$ , a je tedy řádu  $o(1/\Gamma_0)$ , neboť  $\Gamma_0 \ln \Gamma_0 \rightarrow 0$  v limitě  $\Gamma_0 \rightarrow 0$ .

**Tvrzení:**  $(F_\alpha R_\beta)$

$$\int_{-R}^R \frac{\Gamma_0}{x^2 + \Gamma_0^2} \frac{x - a}{(x - a)^2 + \Gamma_a^2} \varphi(x) dx = O(\Gamma_0^0) + o(1/\Gamma_a) \quad (\text{D.15})$$

**Důkaz:** Na intervalu  $\langle -R, b \rangle$  provedeme odhad analogicky jako u (D.12)

$$\left| \int_{-R}^b \frac{\Gamma_0}{x^2 + \Gamma_0^2} \frac{x - a}{(x - a)^2 + \Gamma_a^2} \varphi(x) dx \right| \leq \frac{1}{a - b} \int_{-R}^b \frac{\Gamma_0}{x^2 + \Gamma_0^2} |\varphi(x)| dx = O(\Gamma_0^0),$$

na intervalu  $\langle b, R \rangle$  je zase situace obdobná případu (D.14)

$$\begin{aligned} \left| \int_b^R \frac{\Gamma_0}{x^2 + \Gamma_0^2} \frac{x - a}{(x - a)^2 + \Gamma_a^2} \varphi(x) dx \right| &\leq \frac{\Gamma_0}{b^2} \max_{\langle -R, R \rangle} |\varphi(x)| \int_0^R \frac{x}{x^2 + \Gamma_a^2} dx \\ &= \frac{\Gamma_0}{b^2} \max_{\langle -R, R \rangle} |\varphi(x)| \left[ \frac{1}{2} \ln(R^2 + \Gamma_a^2) - \ln \Gamma_a \right] = o(1/\Gamma_a). \end{aligned}$$

# Literatura

- [1] Rickayzen, G.: Green's functions and condensed matter, Academic Press, London, 1991
- [2] Abrahams, E., Anderson, P. W., Licciardello, D. C., Ramakrishnan, T. V., *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979)
- [3] Kravchenko, S. V., Kravchenko, G. V., Furneaux, J. E., Pudalov, V. M., D'Iorio, M.: Possible metal–insulator transition at  $B = 0$  in two dimensions, *Phys. Rev.* **B50**, 8039 (1994)
- [4] Kubo, R.: Statistical Mechanics of Irreversible Processes, *Journ. Phys. Soc. Japan* **12**, 570 (1957)
- [5] Kubo, R., Toda, M., Hashitsume, N.: Statistical Physics II — Nonequilibrium Statistical Mechanics, Springer–Verlag, Berlin, 1995
- [6] Lax, M., *Phys. Rev.* **109**, 1921 (1958)
- [7] Velický, B.: Theory of electronic transport in disordered binary alloys: Coherent-potential approximation, *Phys. Rev.* **184**, 614 (1969)
- [8] Economou, E. N.: Green's functions in quantum physics, Springer–Verlag, Berlin, 1979
- [9] Bastard, G.: Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, Les Éditions de Physique, Paris, 1990
- [10] Feynman, R. P., Leighton, R. B., Sands, M.: Feynmanove prednášky z fyziky 5, Alfa, Bratislava, 1990
- [11] Palevski, A., Beltram, F., Capasso, F., Pfeiffer, L. N., West, K. W.: Resistance resonance in coupled potential wells, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1929 (1990)
- [12] Simmons, J. A., Lyo, S. K., Harff, N. E., Klem, J. F.: Conductance modulation in double quantum wells due to magnetic field-induced anticrossing, *Phys. Rev. Lett.* **73** 2256 (1994)

- [13] Berk, Y., Kamenev, A., Palevski, A., Pfeiffer, L. N., West, K. W.: Resonance magnetoresistance of coupled quantum wells, *Phys. Rev.* **B51** 2604 (1995)
- [14] Ihn, T., Carmona, H., Main, P. C., Eaves, L., Henini, M.: Magnetic-field-induced resonant tunneling in parallel two-dimensional systems. *Phys. Rev.* **B54**, 2315 (1996)
- [15] Berk, Y., Kamenev, A., Palevski, A., Pfeiffer, L. N., West, K. W.: Resonant transport in coupled quantum wells: A probe for scattering mechanisms, *Phys. Rev.* **B50** 420 (1994)
- [16] Raichev, O. E., Vasko, F. T.: Conductivity of coupled quantum wells under an in-plane magnetic field, *Phys. Rev.* **B53**, 1522 (1996)
- [17] Hu, J., MacDonald, A. H.: Electronic structure of parallel two-dimensional electron systems in tilted magnetic fields, *Phys. Rev.* **B46**, 554 (1992)
- [18] Press, W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P.: Numerical recipes in FORTRAN, Cambridge University Press, 1992