



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ  
FAKULTA**  
Univerzita Karlova

**BAKALÁŘSKÁ PRÁCE**

Jindřich Šándor

**Lineární terahertzová odezva  
polovodičových nanostruktur**

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2023

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne 20. 7. 2023

Jindřich Šándor

Na tomto místě bych chtěl poděkovat svému vedoucímu doc. RNDr. Tomáši Ostatnickému, Ph.D. za jeho vedení a cenné rady, které mi nesmírně pomohly při vypracování této práce.

Název práce: Lineární terahertzová odezva polovodičových nanostruktur

Autor: Jindřich Šándor

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D., Katedra chemické fyziky a optiky

Abstrakt: V této práci zkoumáme interakci elektronů v Diracových bodech s terahertzovým zářením. Nejprve hledáme vlastní stavy efektivního hamiltoniánu v Diracových bodech. Poté zavádíme interakční hamiltonián a následně v prvním řádu poruchové teorie nalézáme vztah pro evoluci matice hustoty. Nakonec odvozuje složky tenzoru vodivosti. Toto vše provádíme ve dvou různých kalibracích elektromagnetického potenciálu.

Klíčová slova: grafen, Diracovy body, vodivost, terahertzová oblast

Title: Linear terahertz response of semiconductor nanostructures

Author: Jindřich Šándor

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D., Department of Chemical Physics and Optics

Abstract: In this work we study an interaction between electrons in Dirac points and terahertz electromagnetic radiation. First, we find eigenstates of the effective hamiltonian in Dirac points. Then we introduce the interaction Hamiltonian and subsequently we find an evolution relation for a density matrix in the first order of perturbation theory. Eventually we derive matrix elements of a conductivity tensor. We do all this in two different gauges of an electromagnetic potential.

Keywords: graphene, Dirac points, conductivity, terahertz range

# Obsah

Úvod	2
<b>1 Grafen</b>	<b>3</b>
1.1 Efektivní hamiltonián a Diracovy body . . . . .	3
1.2 Armchair a zigzag okrajové podmínky . . . . .	4
1.3 Vodivost nanokrystalu . . . . .	5
<b>2 Vázané stavy efektivního hamiltoniánu</b>	<b>7</b>
<b>3 Interakce elektromagnetického záření s Diracovými elektrony</b>	<b>12</b>
3.1 Interakční hamiltonián . . . . .	12
3.1.1 Interakční hamiltonián v kalibraci $\Phi = 0$ . . . . .	13
3.1.2 Interakční hamiltonián v kalibraci $A = 0$ . . . . .	15
3.2 Dipólové přechody . . . . .	16
3.2.1 Výběrová pravidla pro polarizaci $\nu = x$ . . . . .	16
3.2.2 Výběrová pravidla pro polarizaci $\nu = y$ . . . . .	18
<b>4 Časová evoluce matice hustoty</b>	<b>22</b>
4.1 Matice hustoty v kalibraci $\Phi = 0$ . . . . .	24
4.2 Matice hustoty v kalibraci $\mathbf{A} = 0$ . . . . .	24
<b>5 Příspěvek do vodivosti od středního proudu</b>	<b>25</b>
5.1 Výpočet v kalibraci $\Phi = 0$ . . . . .	26
5.2 Výpočet v kalibraci $A = 0$ . . . . .	28
<b>6 Příspěvek do vodivosti od difuzního proudu</b>	<b>30</b>
6.1 Výpočet v kalibraci $\Phi = 0$ . . . . .	33
6.2 Výpočet v kalibraci $\mathbf{A} = 0$ . . . . .	35
<b>7 Numerické výsledky v kalibraci <math>\mathbf{A}=0</math></b>	<b>37</b>
Závěr	42
Seznam použité literatury	43
Seznam obrázků	44

# Úvod

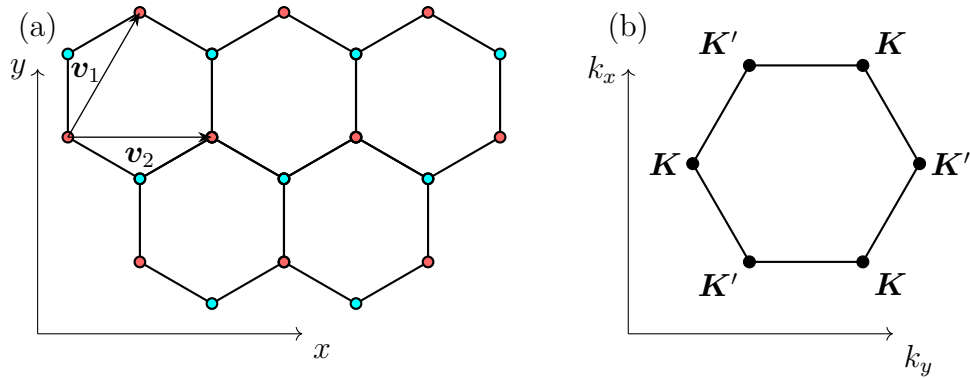
Pochopení terahertzové odezvy materiálu v sobě nabízí potenciální uplatnění například ve fotodetektorech, nanoskopických laserech či jiných elektronických součástkách. Problematika odezvy nanokrystalů byla na kvantově-mechanické úrovni rozpracována teprve nedávno v článku [1]. Teorie je sice dobře rozpracovaná a obecně aplikovatelná pro libovolnou geometrii a libovolný materiál krystalu, ale to pouze za předpokladu, že je definovaná nenulová efektivní hmotnost elektronu. To není ovšem splněno pro grafem, takže model je potřeba přizpůsobit i pro tento systém.

V práci sledujeme osnovu článku [1], ale již od začátku zavádíme jiný hamiltonián systému - efektivní hamiltonián elektronu v Diracově bodě. Problematika byla už rozpracována v bakalářské práci [2], ale nepodařilo se ji dotáhnout do konce. V této práci opravujeme některé chyby našeho předchůdce a model dotahujeme až do fáze, kdy z něj dáváme předpovědi pro všechny složky komponentu modelu, čímž je model kompletní.

# 1. Grafen

Grafen je alotrop uhlíku, jehož krystalová mříž je tvořena hexagonálními buňkami připomínající včelí plástve. Tato mříž má tloušťku jednoho atomu, jedná se proto o efektivně dvoudimenzionální materiál, který je základním stavebním kamenem několika dalších alotropických forem uhlíku. Nejběžnějším případem je v přírodě se volně vyskytující grafit, který si můžeme představit jako na sebe naskládané vrstvičky grafenu spojené van der Waalsovou vazbou [3]. Dalším příkladem jsou uhlíkové nanotrubičky, jež vzniknou stočením grafenu do válce či fullereny, které naopak obdržíme, svineme-li jej do sféry [4]. Nanokrystaly grafenu mají také zajímavé elektronické vlastnosti ve střední infračervené oblasti, díky nimž má grafen velký potenciál pro uplatnění zejména v medicíně, chemii, biologii a spektroskopii [5], což jej činí atraktivním materiálem pro výzkum.

## 1.1 Efektivní hamiltonián a Diracovy body



Obrázek 1.1: (a) Hexagonální mříž grafenu složená ze dvou proložených trojúhelníkových podmříží  $A$  (červené body) a  $B$  (modré body) s mřížovými vektory  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}_2$ . (b) 1. Brillouinova zóna reciproké mříže grafenu složená ze dvou neekvivalentních trojic Diracových bodů  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$ .

Krystalová mříž grafenu se skládá ze dvou trojúhelníkových podmříží  $A$  a  $B$ , které jsou proloženy tak, aby dohromady vytvářely pravidelné šestiúhelníky – viz obrázek 1.1:(a).

První Brillouinova zóna reciproké mříže má tvar pravidelného šestiúhelníku, v jehož vrcholech se nachází dvě neekvivalentní trojice tzv. *Diracových bodů*  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$  (viz obr. 1.1:(b)), v nichž dochází k dotyku valenčního a vodivostního pásu. Elektrony v těchto bodech jsou popsány Dirac-Weylovou rovnicí, což je rovnice popisující pohyb dvoudimenzionálních nehmotných Diracových fermionů [3]. Pro Diracovy elektrony v bodech  $\mathbf{K}$  byl z těsnovazebního modelu již v minulosti odvozen *efektivní hamiltonián* [3, 4]

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} = v_f \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

kde  $\hbar$  je redukovaná Planckova konstanta,  $v_f$  je Fermiho rychlost,  $\hat{\sigma}$  značí vektor Pauliho matic

$$\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z) = \left( \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \quad (1.2)$$

a  $\hat{p}$  reprezentuje operátor hybnosti v rovině  $xy$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla_{xy} = -i\hbar \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Efektivní hamiltonián popisující elektrony v bodech  $\mathbf{K}'$  je spjat s hamiltoniánem  $\hat{H}_{\mathbf{K}}$  časovou inverzí, takže jej lze zapsat jako [4]

$$\hat{H}_{\mathbf{K}'} = (\hat{H}_{\mathbf{K}})^* = v_f(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})^* = -i\hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & -\partial_x - i\partial_y \\ -\partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.4)$$

kde hvězdičkou značíme komplexní sdružení. Celkový efektivní hamiltonián zahrnující popis elektronů jak v bodě  $\mathbf{K}$ , tak i v bodě  $\mathbf{K}'$  je pak možné vyjádřit ve formě blokově diagonální matice [6]

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathbf{K}} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{\mathbf{K}'} \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

## 1.2 Armchair a zigzag okrajové podmínky

Pro popis reálného nanokrystalu grafenu je potřeba zvolit okrajové podmínky, které respektují jeho vnitřní strukturu. Ukazuje se, že pro grafen jsou vhodné okrajové podmínky pro tzv. *armchair* a *zigzag* okraje [2]. Pro účely výpočtů budeme v celé této práci předpokládat, že pracujeme s obdélníkovým nanokrystalem, který má ve směru osy  $x$  armchair okraje a ve směru osy  $y$  okraje zigzag. Střed nanokrystalu položíme do počátku souřadnicové soustavy a jeho rozměry si zadefinujeme jako  $x \in [-a, a]$  a  $y \in [-b, b]$ . Označíme-li vlastní vlnové funkce hamiltoniánu  $\hat{H}_0$  jako

$$\phi(x, y) = \begin{pmatrix} \phi_A(x, y) \\ \phi_B(x, y) \\ \phi'_A(x, y) \\ \phi'_B(x, y) \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

pak musí splňovat okrajové podmínky [6]

$$\phi_A(\pm a, y) + \phi'_A(\pm a, y) = 0, \quad (1.7a)$$

$$\phi_B(\pm a, y) + \phi'_B(\pm a, y) = 0, \quad (1.7b)$$

a

$$\phi_A(x, -b) = 0, \quad (1.8a)$$

$$\phi_B(x, b) = 0, \quad (1.8b)$$

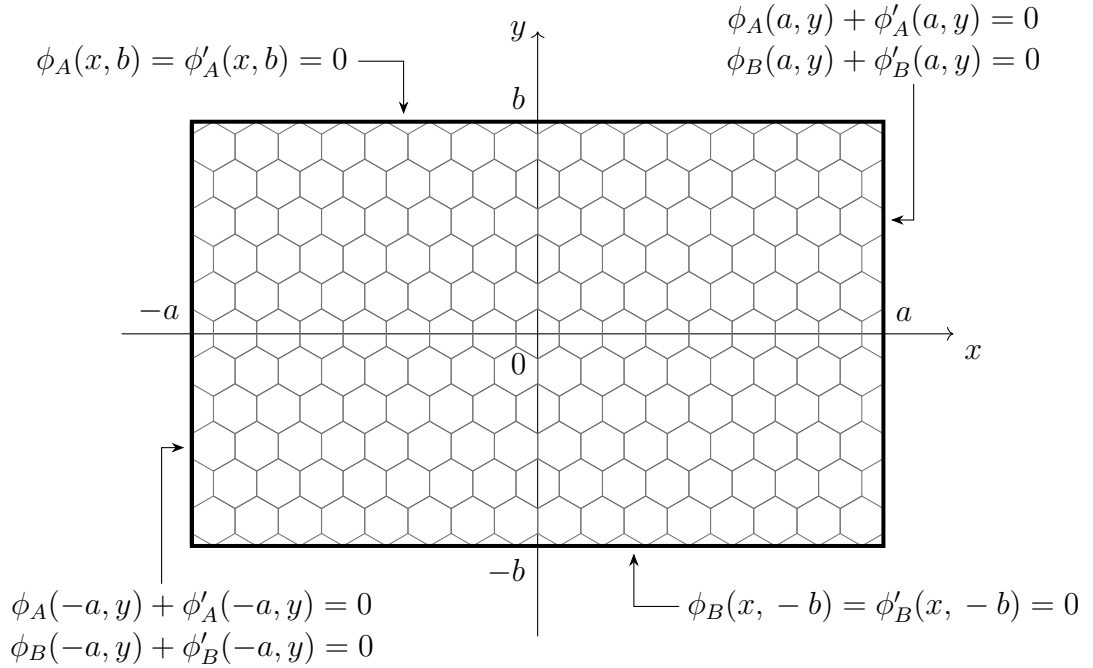
$$\phi'_A(x, -b) = 0, \quad (1.8c)$$



$$\phi'_B(x, b) = 0. \quad (1.8d)$$

Sada rovnic (1.7a) a (1.7b) definuje armchair okraje, zatímco čtveřice podmínek (1.8a–1.8d) definuje zigzag okraje. Uvažovaný obdélníkový nanokrystal je znázorněn na obrázku 1.2.

Dále si vysvětlíme význam složek vlastních funkcí (1.6), což nám pomůže porozumět významu výše zavedených okrajových podmínek. Indexy  $A$  a  $B$  značí, jaké podmítníci přímého prostoru daná vlnová funkce náleží, zatímco přítomnost čárky označuje, zda vlnová funkce popisuje stavy v bodech  $\mathbf{K}$  nebo  $\mathbf{K}'$ . Například vlnová funkce  $\phi_A$  přísluší podmítníci  $A$ , přičemž popisuje stavy v bodech  $\mathbf{K}$ , zatímco vlnová funkce  $\phi'_B$  náleží podmítníci  $B$  a popisuje stavy v bodech  $\mathbf{K}'$ . Z toho pak plyne, že například okrajová podmínka (1.7a) nám říká, že na armchair okrajích se vlnová funkce popisující stavy podmítníci  $A$  úplně odrazí z bodu  $\mathbf{K}'$  do bodu  $\mathbf{K}$  či naopak. Pro zigzag okraje můžeme obdobně vyvodit, že se vlnové funkce z bodů  $\mathbf{K}$  odrážejí do bodu  $\mathbf{K}$  a z bodu  $\mathbf{K}'$  do bodu  $\mathbf{K}'$ .



Obrázek 1.2: Obdélníkový nanokrystal s armchair okraji ve směru osy  $x$  a zigzag okraji ve směru osy  $y$ .

### 1.3 Vodivost nanokrystalu

Hustotu objemového proudu elektronů v nanokrystalu je možné popsat vztahem [1]

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{\mathcal{V}} \left( \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m_e} + \int_{\mathcal{V}} \mathbf{j}_{\text{th}} d\mathbf{r} \right), \quad (1.9)$$

kde  $e$  je elementární náboj,  $\mathcal{V}$  je objem nanokrystalu a  $m_e$  je hmotnost elektronu. První sčítanec na pravé straně rovnice (1.9) vyjadřuje příspěvek do celkové hustoty proudu od středního proudu, tj. příspěvek od elektronů v koherentním

režimu, zatímco druhý sčítanec představuje příspěvek od difuzního proudu. Vzhledem k tomu, že pracujeme s Diracovými elektrony, které mají nulovou efektivní hmotnost, se pro nás stává člen  $\langle \mathbf{p} \rangle / m_e$  nepoužitelný. Jedním z našich úkolů proto bude nalézt alternativní metodu výpočtu, jež bude nezávislá na hmotnosti nosiče náboje. V případě difuzního proudu bude naše situace již o poznání snažší, jelikož budeme moci vyjít ze známé teorie, která byla pro nanokrystaly již rozpracována například v článku [7].

Tenzor vodivosti, resp. jeho složky  $\sigma_{\nu\nu'}$  jsou definovány vztahem

$$j_\nu = \sum_{\nu'} \sigma_{\nu\nu'} E_{\nu'}, \quad (1.10)$$

v němž  $E_{\nu'}$  jsou složky vektoru intenzity elektrického pole a  $j_\nu$  jsou složky vektoru proudové hustoty  $\mathbf{j}$ . Jelikož se podle rovnice (1.9) skládá celková hustota objemového proudu ze dvou příspěvků, budou obdobně i složky tenzory vodivosti dány dvěma příspěvky, tzn.

$$\sigma_{\nu\nu'} = \sigma_{J,\nu\nu'} + \sigma_{\text{th},\nu\nu'}, \quad (1.11)$$

kde  $\sigma_{J,\nu\nu'}$  představuje příspěvek do vodivosti od středního proudu a  $\sigma_{\text{th},\nu\nu'}$  je příspěvek od difuzního proudu.

## 2. Vázané stavy efektivního hamiltoniánu

Naším prvním úkolem je nalezení vázaných stavů efektivního hamiltoniánu  $\hat{H}_0$  nanokrystalu grafenu s armchair a zigzag okraji. Při výpočtu se nejprve budeme věnovat vlastním stavům v bodě  $\mathbf{K}$ , při jejichž hledání můžeme vyjít z některých poznatků bakalářské práce [2]. Získané výsledky poté použijeme k odvození vázaných stavů hamiltoniánu  $\hat{H}_{\mathbf{K}'}$ , resp.  $\hat{H}_0$ .

Pro hamiltonián

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} = -i\hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

zavedeme na základě výsledků z práce [2] vlastní energii

$$E_{k_x k_y}^{\pm} = \pm \hbar v_f |\mathbf{k}| = \pm \hbar v_f \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (2.2)$$

a k ní příslušnou vlnovou funkci budeme hledat ve tvaru

$$\phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm}(x, y) = \begin{pmatrix} \phi_{A, k_x k_y}(x, y) \\ \pm \zeta(k_x, k_y) \phi_{B, k_x k_y}(x, y) \end{pmatrix} = C e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \sin(k_y(y + b)) \\ \pm \zeta(k_x, k_y) \sin(k_y(y - b)) \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Ve vztazích výše je obecně  $C \in \mathbb{C}$  a  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  je vlnový vektor, jehož složky splňují  $k_x \in \mathbb{R} \wedge k_y > 0$  a zároveň jsou spolu svázané transcendentní rovnicí

$$\tan(2k_y b) = -\frac{k_y}{k_x}. \quad (2.4)$$

Uvedme, že oproti zdroji se liší námi zavedené stavy (2.3) dodatečným faktorem  $\zeta(k_x, k_y)$ , o němž předpokládáme, že má charakter znaménka. Vlnová funkce (2.3) již ve směru  $y$  splňuje okrajové podmínky pro zigzag okraje (1.8a) a (1.8b), avšak ve směru  $x$  zatím nespĺňuje armchair okrajové podmínky (1.7a) a (1.7b). Naším úkolem v následujících odstavcích proto bude vyjádřit znaménkový faktor  $\zeta$  a nalézt dodatečné podmínky na vlnovou funkci, aby popisovala nanokrystal grafenu se správnou geometrií.

Nejdříve se zaměříme na nalezení znaménkového faktoru  $\zeta$ , což provedeme ověřením platnosti stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm} = E_{k_x k_y}^{\pm} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm}. \quad (2.5)$$

Využitím vztahů (2.1) a (2.3) můžeme levou stranu Schrödingerovy rovnice (2.5) rozepsat jako

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\mathbf{K}} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm} &= \hbar v_f \begin{pmatrix} \pm \zeta (-i\partial_x - \partial_y) \phi_{B, k_x k_y} \\ (-i\partial_x + \partial_y) \phi_{A, k_x k_y} \end{pmatrix} = \\ &= \hbar v_f C e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \pm \zeta [k_x \sin(k_y(y - b)) - k_y \cos(k_y(y - b))] \\ k_x \sin(k_y(y + b)) + k_y \cos(k_y(y + b)) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Rovnici (2.6) upravíme následovně: podmínku (2.4) přepíšeme do tvaru  $k_y = -k_x \tan(2k_y b)$ , ve kterém ji dosadíme za  $k_y$  nacházející se vně argumentů sinů a cosinů, a poté využijeme součtový vzorec

$$\sin(k_y(y \mp b)) \cos(2k_y b) \pm \sin(2k_y b) \cos(k_y(y \mp b)) = \sin(k_y(y \pm b)). \quad (2.7)$$

Tímto způsobem z rovnice (2.6) dostaneme

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm} = \hbar v_f C \frac{k_x}{\cos(2k_y b)} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \pm \zeta \sin(k_y(y + b)) \\ \sin(k_y(y - b)) \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Člen  $k_x / \cos(2k_y b)$  můžeme znovupoužitím relace  $k_y = -k_x \tan(2k_y b)$  přepsat jako

$$\begin{aligned} \frac{k_x}{\cos(2k_y b)} &= \operatorname{sgn}\left(\frac{k_x}{\cos(2k_y b)}\right) \sqrt{\frac{k_x^2}{\cos^2(2k_y b)}} = \\ &= \operatorname{sgn}\left(\frac{k_x}{\cos(2k_y b)}\right) \sqrt{k_x^2 \frac{\cos^2(2k_y b) + \sin^2(2k_y b)}{\cos^2(2k_y b)}} = \\ &= \operatorname{sgn}\left(\frac{k_x}{\cos(2k_y b)}\right) \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

což nám dává z (2.8) rovnici ve tvaru

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm} = \hbar v_f \sqrt{k_x^2 + k_y^2} C \operatorname{sgn}\left(\frac{k_x}{\cos(2k_y b)}\right) e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \pm \zeta \sin(k_y(y + b)) \\ \sin(k_y(y - b)) \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Vytknutím faktoru „ $\pm$ “ z první složky vektoru a využitím vztahu (2.2) získáme

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm} = E_{k_x k_y}^{\pm} C \operatorname{sgn}\left(\frac{k_x}{\cos(2k_y b)}\right) e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \zeta \sin(k_y(y + b)) \\ \pm \sin(k_y(y - b)) \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

V posledním kroku označíme  $\zeta \equiv \operatorname{sgn}(k_x / \cos(2k_y b))$ , pak totiž po dosazení vztahu (2.3) dostaneme

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm} = E_{k_x k_y}^{\pm} C e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \zeta^2 \sin(k_y(y + b)) \\ \pm \zeta \sin(k_y(y - b)) \end{pmatrix} = E_{k_x k_y}^{\pm} \phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm}, \quad (2.12)$$

z čehož vyplývá, že  $\phi_{\mathbf{K}, k_x k_y}^{\pm}$  jsou vlastními funkcemi hamiltoniánu  $\hat{H}_{\mathbf{K}}$  právě tehdy, když

$$\zeta(k_x, k_y) = \operatorname{sgn}\left(\frac{k_x}{\cos(2k_y b)}\right). \quad (2.13)$$

Dále se budeme věnovat armchair okrajové podmínce. V podkapitole 1.2 jsme již naznačili, že k jejímu splnění budeme muset smíchat stavy z bodů  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$  [6]. Připomeneme, že hamiltoniány  $\hat{H}_{\mathbf{K}}$  a  $\hat{H}_{\mathbf{K}'}$  jsou navzájem komplexně sdružené, takže vlastní funkce v bodě  $\mathbf{K}'$  lze hledat ve tvaru komplexně sdružených funkcí (2.3). Pro vlastní stavy hamiltoniánu  $\hat{H}_{\mathbf{K}'}$  tak můžeme snadno odvodit vztah

$$\phi_{\mathbf{K}', k_x k_y}^{\pm}(x, y) = \begin{pmatrix} \phi'_{A, k_x k_y}(x, y) \\ \pm \zeta \phi'_{B, k_x k_y}(x, y) \end{pmatrix} = C' e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} \sin(k_y(y + b)) \\ \pm \zeta \sin(k_y(y - b)) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

kde  $C' \in \mathbb{C}$ . Nyní přejdeme k popisu systému pomocí hamiltoniánu

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathbf{K}} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{\mathbf{K}'} \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

jehož vlastní stavy díky blokové diagonalitě jednoduše získáme složením stavů (2.3) a (2.14) do čtyřsložkového vektoru

$$\phi_{k_x k_y}^{\pm}(x, y) = \begin{pmatrix} \phi_{A, k_x k_y}(x, y) \\ \pm \zeta \phi_{B, k_x k_y}(x, y) \\ \phi'_{A, k_x k_y}(x, y) \\ \pm \zeta \phi'_{B, k_x k_y}(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C e^{i k_x x} \sin(k_y(y+b)) \\ \pm \zeta C e^{i k_x x} \sin(k_y(y-b)) \\ C' e^{-i k_x x} \sin(k_y(y+b)) \\ \pm \zeta C' e^{-i k_x x} \sin(k_y(y-b)) \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

pro který zůstává v platnosti původní vztah pro vlastní energii (2.2). Armchair okrajovou podmínku můžeme podle vztahů (1.7a) a (1.7b) popsat čtveřicí rovnic

$$\phi_{A, k_x k_y}(a, y) + \phi'_{A, k_x k_y}(a, y) = 0, \quad (2.17a)$$

$$\phi_{A, k_x k_y}(-a, y) + \phi'_{A, k_x k_y}(-a, y) = 0, \quad (2.17b)$$

$$\phi_{B, k_x k_y}(a, y) + \phi'_{B, k_x k_y}(a, y) = 0, \quad (2.17c)$$

$$\phi_{B, k_x k_y}(-a, y) + \phi'_{B, k_x k_y}(-a, y) = 0, \quad (2.17d)$$

z nichž stanovíme možné hodnoty  $k_x$  a fázový posuv mezi faktory  $C$  a  $C'$ . Potřebujeme tedy nalézt dvě neznámé konstanty, k čemuž nám budou stačit dvě rovnice, například (2.17a) a (2.17b). Dosazením složek vektoru (2.16) do podmínek (2.17a) a (2.17b) dostaneme soustavu dvou rovnic

$$(C e^{i k_x a} + C' e^{-i k_x a}) \sin(k_y(y+b)) = 0, \quad (2.18a)$$

$$(C e^{-i k_x a} + C' e^{i k_x a}) \sin(k_y(y+b)) = 0. \quad (2.18b)$$

Z první rovnice vyjádříme  $C'$  jako

$$C' = -C e^{i 2 k_x a}. \quad (2.19)$$

Dosazení vztahu (2.19) do (2.18b) nám pak dá

$$C(e^{-i k_x a} - e^{i 2 k_x a} e^{i k_x a}) = -2i C e^{i k_x a} \sin(2 k_x a) = 0, \quad (2.20)$$

z čehož plyne podmínka

$$k_x = \frac{\pi n}{2a}, \quad n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}, \quad (2.21)$$

kde jsme vyloučili případ  $n = 0$ , protože vede na nefyzikální řešení. Zde poznamenejme, že podmínky (2.19) a (2.21) zaručují i splnění okrajových podmínek (2.17c) a (2.17d), takže se není třeba nimi dále zabývat. Do vlnové funkce (2.16) nyní dosadíme podmínku (2.19), z čehož obdržíme vztah

$$\phi_{k_x k_y}^{\pm}(x, y) = C \begin{pmatrix} e^{i k_x x} \sin(k_y(y+b)) \\ \pm \zeta e^{i k_x x} \sin(k_y(y-b)) \\ -e^{-i k_x(x-2a)} \sin(k_y(y+b)) \\ \mp \zeta e^{-i k_x(x-2a)} \sin(k_y(y-b)) \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

kde zbývá vypočítat normalizační konstantu  $C$ .

Vlnovou funkci (2.22) normalizujeme na jednotku, takže máme

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-b}^b \int_{-a}^a |\phi_{k_x k_y}^\pm(x, y)|^2 dx dy = \\
&= 2C^2 \int_{-b}^b \int_{-a}^a [\sin^2(k_y(y+b)) + \sin^2(k_y(y-b))] dx dy = \\
&= 8aC^2 \left( b - \frac{\sin(4bk_y)}{4k_y} \right),
\end{aligned} \tag{2.23}$$

z čehož plyne

$$C = \frac{1}{\sqrt{\frac{2a}{k_y}(4bk_y - \sin(4bk_y))}}. \tag{2.24}$$

Na závěr kapitoly shrneme nejdůležitější výsledky a přepíšeme je do tvaru vhodnějšího pro další práci. V souvislosti s tím zavedeme nové značení, které budeme v nadcházejících kapitolách hojně využívat.

Začneme úpravou výrazů (2.4) a (2.13), do kterých dosadíme vztah (2.21), čímž obdržíme

$$\tan(2k_y b) = -\frac{2k_y a}{\pi n} \quad \text{pro } k_y > 0, n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\} \tag{2.25}$$

a

$$\zeta(n, k_y) = \operatorname{sgn}\left(\frac{n}{\cos(2k_y b)}\right). \tag{2.26}$$

V rovnicích (2.25) a (2.26) si všimněme, že funkce  $f(k_y) = \tan(2k_y b)$  i  $g(k_y) = \operatorname{sgn}(n/\cos(2k_y b))$  jsou obě  $\pi/(2b)$ -periodické. Této skutečnosti využijeme při dalších úpravách vztahu (2.26). Předtím si ale budeme muset podrobněji rozebrat vlastnosti podmínky (2.25), kde si proto označíme  $h(k_y) = -2k_y a/(\pi n)$ . Máme tedy  $\pi/(2b)$ -periodickou funkci  $f(k_y)$ , která je navíc na každé periodě prostá s oborem hodnot  $H_f = \mathbb{R}$ , zatímco  $h(k_y)$  je lineární funkce. Z toho vyplývá, že pro pevné  $n$  bude na každé periodě funkce  $f(k_y)$  vždy existovat právě jedno  $k_y$  takové, které splňuje podmínku (2.25). Tato řešení označíme jako  $k_y \equiv k_\alpha$ , kde nám diskrétní index  $\alpha \in \mathbb{N}$  říká, na jaké periodě funkce  $f(k_y)$  řešení  $k_y = k_\alpha$  při pevném  $n$  leží. Místo podmínky (2.25) tedy můžeme psát

$$\forall n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\} \forall \alpha \in \mathbb{N} \exists! k_\alpha \in \left( \frac{-\pi}{4b} + \frac{\pi\alpha}{2b}, \frac{\pi}{4b} + \frac{\pi\alpha}{2b} \right): \tan(2k_\alpha b) = -\frac{2k_\alpha a}{\pi n}. \tag{2.27}$$

Podmínka ve tvaru (2.27) nám nyní umožní zjednodušit výraz (2.26), jelikož platí  $\operatorname{sgn}(1/\cos(2k_\alpha b)) = (-1)^\alpha$ , takže po dosazení  $k_y = k_\alpha$  můžeme psát

$$\zeta(n, k_\alpha) = \operatorname{sgn}\left(\frac{n}{\cos(2k_\alpha b)}\right) = \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha. \tag{2.28}$$

Jako další upravíme výraz pro vlastní energii  $E_{k_x k_y}^\pm$ . Do rovnice (2.2) dosadíme vztah (2.21), dále položíme  $k_y = k_\alpha$  a  $E_{k_x k_y}^\pm$  nově označíme jako  $E_{nk_\alpha}^s$ . Pak můžeme pro vlastní energii psát

$$E_{nk_\alpha}^s = s\hbar v_f \sqrt{\left(\frac{\pi n}{2a}\right)^2 + k_\alpha^2} = s\hbar \omega_{nk_\alpha}, \tag{2.29}$$

kde  $n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ ,  $s = \pm 1$  je znaménkový faktor, který rozděluje energie na energie valenčního ( $s = -1$ ) a vodivostního ( $s = +1$ ) pásu, a  $\omega_{nk_\alpha}$  je úhlová frekvence definovaná vztahem

$$\omega_{nk_\alpha} = v_f \sqrt{\left(\frac{\pi n}{2a}\right)^2 + k_\alpha^2}. \quad (2.30)$$

Zbývá již jen přepsat a přeznačit výraz pro vlastní funkce  $\phi_{k_x k_y}^\pm$ , což provedeme následovně. Do vztahu (2.22) dosadíme rovnici (2.21), pak položíme  $k_y = k_\alpha$  a místo  $\phi_{k_x k_y}^\pm$  budeme používat nové značení  $\phi_{nk_\alpha}^s$ . Navíc ještě využijeme relace

$$e^{-ik_x(x-2a)} = e^{-i\frac{\pi(x-2a)}{2a}n} = (-1)^n e^{-i\frac{\pi n}{2a}x} \quad (2.31)$$

a normalizační konstantu ze vztahu (2.24) označíme jako  $C = N_{k_\alpha}$ . Pak můžeme vlastní funkce hamiltoniánu  $\hat{H}_0$  z rovnice (2.22) přepsat do tvaru

$$\phi_{nk_\alpha}^s(x, y) = \langle \mathbf{r} | s, nk_\alpha \rangle = N_{k_\alpha} \begin{pmatrix} e^{i\pi n x / (2a)} \sin(k_\alpha(y + b)) \\ s \operatorname{sgn}(n) (-1)^\alpha e^{i\pi n x / (2a)} \sin(k_\alpha(y - b)) \\ (-1)^{n+1} e^{-i\pi n x / (2a)} \sin(k_\alpha(y + b)) \\ s \operatorname{sgn}(n) (-1)^{n+\alpha+1} e^{-i\pi n x / (2a)} \sin(k_\alpha(y - b)) \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

kde

$$N_{k_\alpha} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2a}{k_\alpha} (4k_\alpha b - \sin(4k_\alpha b))}} \quad (2.33)$$

je normalizační konstanta,  $\mathbf{r}$  je polohový vektor a  $|s, nk_\alpha\rangle$  jsou vázané objemové stavy nanokrystalu grafenu s energií (2.29).

# 3. Interakce elektromagnetického záření s Diracovými elektrony

V této kapitole zavedeme interakci Diracových elektronů s lineárně polarizovaným elektromagnetickým zářením. Interakční hamiltonián odvodíme v dipólové aproximaci za předpokladu kolmého dopadu světla na nanokrystal, přičemž se budeme řídit postupem popsaným v [3]. Na závěr kapitoly vypočítáme výběrová pravidla pro dipólové přechody.

## 3.1 Interakční hamiltonián

Uvažujme rovinnou elektromagnetickou vlnu o úhlové frekvenci  $\omega$  a intenzitě elektrického pole

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_+(\mathbf{r})e^{i\omega t} + \mathbf{E}_-(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \quad (3.1)$$

kde  $\mathbf{E}_\pm$  je

$$\mathbf{E}_\pm(\mathbf{r}) = E_0 \mathbf{e}_\nu e^{\mp i \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (3.2)$$

V rovnicích výše  $\mathbf{r}$  značí polohový vektor,  $t$  je čas,  $\mathbf{Q}$  značí vlnový vektor,  $E_0$  je amplituda a  $\mathbf{e}_\nu$  jsou kartézské bázové vektory určující polarizaci vlny podle indexu  $\nu \in \{x, y\}$ . Vektor  $\mathbf{E}$  je svázán se skalárním potenciálem  $\Phi$  a vektorovým potenciálem  $\mathbf{A}$  rovnicí

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (3.3)$$

Dále položíme  $\Phi = 0$ , takže se předchozí rovnice redukuje na tvar

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (3.4)$$

z čehož integrací podle  $t$  obdržíme vektorový potenciál

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\omega} \left( \mathbf{E}_+(\mathbf{r})e^{i\omega t} - \mathbf{E}_-(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \right) = \mathbf{A}_+(\mathbf{r})e^{i\omega t} + \mathbf{A}_-(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \quad (3.5)$$

kde jsme označili

$$\mathbf{A}_\pm(\mathbf{r}) = \pm \frac{i}{\omega} \mathbf{E}_\pm(\mathbf{r}). \quad (3.6)$$

Zde poznamenejme, že pro  $\mathbf{Q} = 0$  jsme mohli zvolit kalibraci s nenulovým  $\Phi$ , například lze položit  $\mathbf{A} = 0$ , ale potom se výsledky z obou kalibrací musejí rovnat. Volba  $\mathbf{A} = 0$  může být výhodná z toho důvodu, že ve stejnosměrné limitě  $\omega \rightarrow 0$  máme při  $\Phi = 0$  singularitu ve vektorovém potenciálu, kterou není možné jednoduše odstranit. Na druhou stranu jsme omezení tím, že pro  $\mathbf{A} = 0$  musí být  $\mathbf{Q} = 0$ . Chceme-li výsledek i pro obecné  $\mathbf{Q}$ , musíme vztah(3.6) renormalizovat přechodem  $\omega \rightarrow \omega \mp i\gamma$  [8], kde  $\gamma$  značí tlumící koeficient. Z renormalizace obdržíme

$$\mathbf{A}_\pm(\mathbf{r}) = \pm \frac{i}{\omega \mp i\gamma} \mathbf{E}_\pm(\mathbf{r}), \quad (3.7)$$



z čehož zpětným dosazením do výrazu (3.5) získáme vektorový potenciál v novém tvaru

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\omega - i\gamma} \mathbf{E}_+(\mathbf{r}) e^{i\omega t} - \frac{i}{\omega + i\gamma} \mathbf{E}_-(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}. \quad (3.8)$$

V následující části využijeme vektorový potenciál (3.8) k odvození tvaru interakčního hamiltoniánu pro interakci Diracových elektronů s elektromagnetickým zářením v kalibraci  $\Phi = 0$ . Později zavedeme popis zmínované interakce i pro kalibraci  $\mathbf{A} = 0$ , přičemž již vyjdeme ze známých výsledků.

### 3.1.1 Interakční hamiltonián v kalibraci $\Phi = 0$

Pro částici o hmotnosti  $m$  a náboji  $q$  je v kvantové mechanice známý hamiltonián

$$\hat{H}_1 = \frac{(\hat{\mathbf{p}}_1 - q\mathbf{A})^2}{2m} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - \frac{q}{2m} (\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}, \quad (3.9)$$

kde  $\hat{\mathbf{p}}_1 = -i\hbar\nabla$  je operátor hybnosti. Dále budeme požadovat Coulombovskou kalibrační podmínku  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , díky níž je [3]

$$[\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \hat{\mathbf{p}}_1] = i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.10)$$

a navíc budeme předpokládat, že

$$\frac{q^2}{2m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A} \ll \left| \frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1 \right|. \quad (3.11)$$

Pak můžeme vztah (3.9) upravit na tvar

$$\hat{H}_1 \approx \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - \frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1, \quad (3.12)$$

z čehož dostáváme interakční hamiltonián

$$\hat{H}_{1,I_1} = -\frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1 = -q\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{v}}_1, \quad (3.13)$$

kde  $\hat{\mathbf{v}}_1 = \hat{\mathbf{p}}_1/m$  je operátor rychlosti. Do vztahu (3.13) nyní dosadíme rovnici (3.8), čímž obdržíme

$$\hat{H}_{1,I_1}(\mathbf{r}, t) = -qE_0 \left[ \frac{i}{\omega - i\gamma} e^{-i(\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} - \frac{i}{\omega + i\gamma} e^{i(\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \right] \mathbf{e}_\nu \cdot \hat{\mathbf{v}}_1. \quad (3.14)$$

Dále přejdeme do dipólové aproximace, jejíž platnost je dána podmínkou  $\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r} \ll 1$  [3], takže můžeme psát

$$e^{\mp i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} = 1 \mp i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r} - \frac{(\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r})^2}{2} + \dots \approx 1. \quad (3.15)$$

Z toho vyplývá, že v dipólové aproximaci se zbavíme závislosti interakčního hamiltoniánu na souřadnicích, neboť vztah (3.14) se zjednoduší na tvar

$$\hat{H}_{1,I_1}(t) = \hat{H}_{1,I_1,+,\nu} e^{i\omega t} + \hat{H}_{1,I_1,-,\nu} e^{-i\omega t}, \quad (3.16)$$

kde jsme zdefinovali

$$\hat{H}_{1,I_1,\pm,\nu} \equiv \mp q E_0 \frac{i}{\omega \mp i\gamma} \mathbf{e}_\nu \cdot \hat{\mathbf{v}}_1. \quad (3.17)$$

Týmto jsme odvodili obecný tvar interakčního hamiltoniánu pro interakci mezi nabitou částicí a elektromagnetickým vlněním v dipólové aproximaci. V příštím odstavci se budeme zabývat případem interakce, kdy nabitou částicí jsou Diracovy elektrony.

Nejprve se budeme zabývat Diracovými elektrony v bodě  $\mathbf{K}$ , pro které definujeme operátor rychlosti kanonickou komutační relací

$$\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\mathbf{K}}, \hat{\mathbf{r}}] = v_f \frac{i}{\hbar} [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}], \quad (3.18)$$

v níž je  $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  operátor polohy. Do (3.17) dosadíme náboj  $q = -e$  a  $\hat{\mathbf{v}}_1 = \hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}}$ , čímž získáme

$$\hat{H}_{\mathbf{K},I_1,\pm,\nu} \equiv \hat{H}_{1,I_1,\pm,\nu} = \pm e E_0 \frac{i}{\omega \mp i\gamma} \mathbf{e}_\nu \cdot \hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}}. \quad (3.19)$$

Interakci elektromagnetického záření s Diracovými elektrony pak zavedeme jako časově závislou poruchu hamiltoniánu  $\hat{H}_{\mathbf{K}}$  vztahem

$$\hat{H}_{1',\mathbf{K}}(t) \equiv \hat{H}_{\mathbf{K}} + \hat{H}_{\mathbf{K},I_1,+,\nu} e^{i\omega t} + \hat{H}_{\mathbf{K},I_1,-,\nu} e^{-i\omega t} \quad (3.20)$$

Ve vztahu (3.19) tedy potřebujeme vyjádřit operátor rychlosti  $\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}}$  z relace (3.18). Necht je  $f(\mathbf{r})$  obecná funkce souřadnic, pak můžeme komutátor  $[\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}]$  upravit následovně:

$$\begin{aligned} [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}] f(\mathbf{r}) &= -i\hbar(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \nabla_{xy})(\hat{x}\mathbf{e}_x + \hat{y}\mathbf{e}_y + \hat{z}\mathbf{e}_z) f(\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{r}}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) f(\mathbf{r}) = \\ &= -i\hbar(\hat{\sigma}_x \partial_x + \hat{\sigma}_y \partial_y)(x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z) f(\mathbf{r}) - \mathbf{r}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) f(\mathbf{r}) = \\ &= -i\hbar(\hat{\sigma}_x \mathbf{e}_x + \hat{\sigma}_y \mathbf{e}_y) f(\mathbf{r}) - i\hbar(x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z)(\hat{\sigma}_x \partial_x + \hat{\sigma}_y \partial_y) f(\mathbf{r}) \\ &\quad - \mathbf{r}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) f(\mathbf{r}) = \\ &= -i\hbar(\hat{\sigma}_x \mathbf{e}_x + \hat{\sigma}_y \mathbf{e}_y) f(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.21)$$

kde jsme při úpravách za  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ , resp.  $\nabla_{xy}$ , dosadili vztahy (1.2), resp. (1.3), a dále jsme využili realce  $\hat{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) = \mathbf{r} f(\mathbf{r})$ . Z výpočtu (3.21) plyne, že operátor rychlosti (3.18) můžeme vyjádřit jako

$$\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}} = v_f(\hat{\sigma}_x \mathbf{e}_x + \hat{\sigma}_y \mathbf{e}_y). \quad (3.22)$$

Dosazením (3.22) do (3.19) obdržíme

$$\hat{H}_{\mathbf{K},I_1,\pm,\nu} = \pm e v_f E_0 \frac{i}{\omega \mp i\gamma} \mathbf{e}_\nu \cdot (\hat{\sigma}_x \mathbf{e}_x + \hat{\sigma}_y \mathbf{e}_y) = \pm e v_f E_0 \frac{i}{\omega \mp i\gamma} (\hat{\sigma}_x \delta_{\nu x} + \hat{\sigma}_y \delta_{\nu y}). \quad (3.23)$$

kde  $\delta_{\nu x}$ , resp.  $\delta_{\nu y}$  je Kroneckerova delta.

Interakci pro Diracovy elektrony v bodě  $\mathbf{K}'$  můžeme zavést v analogii se vztahem (3.20) jako

$$\hat{H}_{1',\mathbf{K}'}(t) \equiv \hat{H}_{\mathbf{K}'} + \hat{H}_{\mathbf{K}',I_1,+,\nu} e^{i\omega t} + \hat{H}_{\mathbf{K}',I_1,-,\nu} e^{-i\omega t}, \quad (3.24)$$

kde nyní definujeme

$$\hat{H}_{\mathbf{K}', I_1, \pm, \nu} \equiv \pm e E_0 \frac{i}{\omega \mp i\gamma} \mathbf{e}_\nu \cdot \hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}'}. \quad (3.25)$$

Výše je  $\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}'}$  operátor rychlosti v bodě  $\mathbf{K}'$ , pro který platí

$$\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}'} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\mathbf{K}'}, \hat{\mathbf{r}}] = -v_f \frac{i}{\hbar} [\hat{\boldsymbol{\sigma}}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}] = -v_f (\hat{\sigma}_x \mathbf{e}_x - \hat{\sigma}_y \mathbf{e}_y), \quad (3.26)$$

takže vztah (3.25) můžeme upravit na tvar

$$\hat{H}_{\mathbf{K}', I_1, \pm, \nu} = \mp e v_f E_0 \frac{i}{\omega \mp i\gamma} (\hat{\sigma}_x \delta_{\nu x} - \hat{\sigma}_y \delta_{\nu y}). \quad (3.27)$$

Využitím vztahů (3.20) a (3.24) můžeme zavést interakci elektromagnetického záření s Diracovými elektrony v bodech  $\mathbf{K}'$  a  $\mathbf{K}$  jako

$$\begin{aligned} \hat{H}_{1'}(t) &\equiv \begin{pmatrix} \hat{H}_{1', \mathbf{K}}(t) & 0 \\ 0 & \hat{H}_{1', \mathbf{K}'}(t) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathbf{K}} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathbf{K}, I_1, +, \nu} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{\mathbf{K}', I_1, +, \nu} \end{pmatrix} e^{i\omega t} + \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathbf{K}, I_1, -, \nu} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{\mathbf{K}', I_1, -, \nu} \end{pmatrix} e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Matice ve vztahu výše označíme jako

$$\hat{H}_{I_1, \pm, \nu} \equiv \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathbf{K}, I_1, \pm, \nu} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{\mathbf{K}', I_1, \pm, \nu} \end{pmatrix} e^{\pm i\omega t} = \pm e \frac{i}{\omega \mp i\gamma} E_0 \hat{v}_\nu, \quad (3.29)$$

kde po dosazení za  $\hat{H}_{\mathbf{K}, I_1, \pm, \nu}$  a  $\hat{H}_{\mathbf{K}', I_1, \pm, \nu}$  z rovnic (3.23) a (3.27) dostáváme operátor rychlosti na stavech v bodech  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$  ve tvaru

$$\hat{v}_\nu = v_f \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_x \end{pmatrix} \delta_{\nu x} + v_f \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_y & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_y \end{pmatrix} \delta_{\nu y}. \quad (3.30)$$

Dosazením vztahu (2.15) a (3.29) do (3.28) dostáváme popis interagujícího systému jako časovou poruchu hamiltoniánu  $\hat{H}_0$ , tedy platí

$$\hat{H}_{1'}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{I_1, +, \nu} e^{i\omega t} + \hat{H}_{I_1, -, \nu} e^{-i\omega t}. \quad (3.31)$$

### 3.1.2 Interakční hamiltonián v kalibraci $\mathbf{A} = 0$

Pro interakci elektronu s elektromagnetickým zářením, které má v dipólové aproximaci tvar

$$\mathbf{E}'(t) = E_0 \mathbf{e}_\nu e^{-i\omega t}, \quad (3.32)$$

lze v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$  odvodit interakční hamiltonián ve tvaru [1]

$$\hat{H}_{2, I_2, \nu}(t) = e \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_\nu E_0 e^{-i\omega t}. \quad (3.33)$$

Obdobně jako v předchozí podkapitole lze operátor (3.33) využít k odvození interakčního hamiltoniánu pro interakci s Diracových elektronů v  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$  s elektromagnetickým zářením ve tvaru

$$\hat{H}_{I_2, \nu}(t) = \hat{H}_{I_2, -, \nu} e^{-i\omega t} = e \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_\nu \hat{I} E_0 e^{-i\omega t} = \begin{cases} ex \hat{I} E_0 e^{-i\omega t} & \text{pro } \nu = x, \\ ey \hat{I} E_0 e^{-i\omega t} & \text{pro } \nu = y, \end{cases} \quad (3.34)$$

kde  $\hat{I} = \text{diag}(1,1,1,1)$ . Hamiltonián tohoto interagujícího systému můžeme zavést jako časovou poruchu hamiltoniánu  $\hat{H}_0$  ve tvaru

$$\hat{H}_{2'}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{I_2, -, \nu} e^{-i\omega t}. \quad (3.35)$$

## 3.2 Dipólové přechody

Dále nás budou zajímat výběrová pravidla pro dipólové přechody mezi jednotlivými vázanými stavy. Výpočet provedeme v obou kalibracích pro dvě různé polarizace  $\nu \in \{x, y\}$ .

V kalibraci  $\Phi = 0$  jsou pravidla pro dipólové přechody dány maticovými elementy interakčního hamiltoniánu

$$\langle s, nk_\alpha | \hat{H}_{I_1, \pm, \nu} | s', ml_\beta \rangle = \pm e \frac{i}{\omega \mp i\gamma} E_0 v_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \quad (3.36)$$

kde  $|s, nk_\alpha\rangle$ ,  $|s', ml_\beta\rangle$  jsou vázané stavy (2.32) a kde značíme

$$v_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \langle s, nk_\alpha | \hat{v}_\nu | s', ml_\beta \rangle. \quad (3.37)$$

K získání výběrových pravidel tedy zřejmě bude stačit vypočítat maticové elementy  $v_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$ .

Pro případ kalibrace  $\mathbf{A} = 0$  jsou dipólové přechody dány maticovými elementy

$$\langle s, nk_\alpha | \hat{H}_{I_2, -, \nu} | s', ml_\beta \rangle = e E_0 r_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \quad (3.38)$$

takže výběrová pravidla obdržíme výpočtem maticových elementů operátoru polohy, pro které budeme dále v této práci používat značení

$$r_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \equiv \langle s, nk_\alpha | \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_\nu \hat{I} | s', ml_\beta \rangle = \begin{cases} \langle s, nk_\alpha | x \hat{I} | s', ml_\beta \rangle & \text{pro } \nu = x, \\ \langle s, nk_\alpha | y \hat{I} | s', ml_\beta \rangle & \text{pro } \nu = y. \end{cases} \quad (3.39)$$

### 3.2.1 Výběrová pravidla pro polarizaci $\nu = x$

**Výpočet v kalibraci  $\Phi = 0$**

Pro kalibraci  $\Phi = 0$  potřebujeme spočítat maticové elementy operátoru rychlosti

$$\hat{v}_x = v_f \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_x \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Dosazení vázaných stavů (2.32) do definičního předpisu (3.37) dává

$$\begin{aligned} v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= \\ &= v_f N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \int_{-b}^b \int_{-a}^a \left[ s' \text{sgn}(m) (-1)^\beta e^{i\frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y-b)) \right. \\ &\quad + s \text{sgn}(n) (-1)^\alpha e^{i\frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y+b)) \\ &\quad - s' \text{sgn}(m) (-1)^{m-n+\beta} e^{-i\frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y-b)) \\ &\quad \left. - s \text{sgn}(n) (-1)^{m-n+\alpha} e^{-i\frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y+b)) \right] dx dy. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Bez důkazu zde uvedeme, že pro integrály z rovnice výše platí

$$\int_{-a}^a e^{\pm i \frac{\pi}{2a}(m-n)x} dx = \frac{4a \sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)}, \quad (3.42)$$

$$\int_{-b}^b \sin(k_\alpha(y \pm b)) \sin(l_\beta(y \mp b)) dy = \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2}. \quad (3.43)$$

Použitím relací (3.42) a (3.43) a následným vytknutím stejných faktorů můžeme vztah (3.41) upravit do tvaru

$$\begin{aligned} v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= 4av_f N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right) l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{\pi(m-n) k_\alpha^2 - l_\beta^2} \\ &\times \left[ s' \operatorname{sgn}(m)(-1)^\beta + s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha \right] \left[ 1 - (-1)^{m-n} \right]. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Z posledního řádku rovnice (3.44) můžeme snadno vyvodit, že maticový element  $v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  je nenulový pouze v případech, kdy je  $s' \operatorname{sgn}(m)(-1)^\beta = s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha$  a zároveň je rozdíl  $m - n$  liché číslo. Ve výrazu (3.44) nesmíme zapomenout na singularitu  $m = n$  a  $l_\beta^2 = k_\alpha^2$ , které je nutné okomentovat zvlášť. Příklad  $m = n$  dopočítáme jako limitu vztahu (3.44), což nám dá

$$v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \lim_{m \rightarrow n} v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = 0. \quad (3.45)$$

Připomeňme, že  $k_\alpha$ , resp.  $l_\beta$ , musí splňovat podmínku ve tvaru (2.27), v níž máme  $k_\alpha > 0$ , resp.  $l_\beta > 0$ , takže případ  $l_\beta = -k_\alpha$  nemůže nastat. Z podmínky (2.27) lze navíc ukázat, že případ  $k_\alpha = l_\beta$  může nastat jen tehdy, pokud je  $m = n$ . Pro  $m = n$  jsme ale v rovnici (3.45) již získali nulový maticový element, takže máme  $v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = 0$ .

Podmínky nenulovosti maticových elementů  $v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$ , které jsme diskutovali výše, můžeme shrnout do výběrových pravidel ve tvaru

$$m - n = 2q_x + 1, \quad q_x \in \mathbb{Z}, \quad (3.46a)$$

$$l_\beta - k_\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, \quad (3.46b)$$

$$s' \operatorname{sgn}(m)(-1)^\beta - s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha = 0. \quad (3.46c)$$

### Výpočet v kalibraci $\mathbf{A} = 0$

Jako další vypočítáme maticové elementy  $r_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$ . Dosazením vázaných stavů (2.32) do (3.39) dostaneme

$$\begin{aligned} r_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \int_{-b}^b \int_{-a}^a x \left[ e^{i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y+b)) \right. \\ &+ s s' \operatorname{sgn}(nm)(-1)^{\alpha+\beta} e^{i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y-b)) \\ &+ (-1)^{m-n} e^{-i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y+b)) \\ &\left. + s s' \operatorname{sgn}(nm)(-1)^{m-n+\alpha+\beta} e^{-i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y-b)) \right] \\ &\times dx dy. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Nejprve se podívejme na případ  $m = n$ , pro který nám intergrace podle  $x$  dává

$$\int_{-a}^a x dx = 0, \quad (3.48)$$

z čehož ihned plyne

$$r_{x,nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} = 0. \quad (3.49)$$

Pro  $m \neq n$  máme k dispozici integrály

$$\int_{-a}^a x e^{\pm i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} dx = \pm i 4a^2 \left[ \frac{2 \sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi^2(m-n)^2} - \frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \right], \quad (3.50)$$

$$\int_{-b}^b \sin(k_\alpha(y \pm b)) \sin(l_\beta(y \pm b)) dy = \frac{1}{2} \left[ \frac{\sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} - \frac{\sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right], \quad (3.51)$$

pomocí nichž můžeme výraz (3.47) přepsat na tvar

$$\begin{aligned} r_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= i 2a^2 N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \left[ \frac{2 \sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi^2(m-n)^2} - \frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \right] \\ &\quad \times \left[ \frac{\sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} - \frac{\sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \\ &\quad \times \left[ 1 + s s' \operatorname{sgn}(nm) (-1)^{\alpha+\beta} \right] \left[ 1 - (-1)^{m-n} \right]. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Z posledního řádku rovnice (3.52) můžeme opět vyčíst, že maticový element  $r_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  je nenulový pouze v případě, kdy  $s' \operatorname{sgn}(m) (-1)^\beta = s \operatorname{sgn}(n) (-1)^\alpha$  a současně je rozdíl  $m - n$  liché číslo.

Z výpočtů výše vyplývají stejná výběrová pravidla, jako jsme získali v rovnicích (3.46a–3.46c). To znamená, že pro polarizaci  $\nu = x$  dává kalibrace  $\mathbf{A} = 0$  stejná výběrová pravidla pro dipólové přechody jako kalibrace  $\Phi = 0$ , a výsledky jsou tudíž konzistentní.

### 3.2.2 Výběrová pravidla pro polarizaci $\nu = y$

#### Výpočet v kalibraci $\Phi = 0$

Dále vypočítáme maticové elementy operátoru

$$\hat{v}_y = v_f \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_y & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_y \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

pro které dosazením vázaných stavů (2.32) do definice (3.37) obdržíme rovnici

$$\begin{aligned} v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= \\ &= i v_f N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \int_{-b}^b \int_{-a}^a \left[ -s' \operatorname{sgn}(m) (-1)^\beta e^{i \frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y-b)) \right. \\ &\quad + s \operatorname{sgn}(n) (-1)^\alpha e^{i \frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y+b)) \\ &\quad - s' \operatorname{sgn}(m) (-1)^{m-n+\beta} e^{-i \frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y-b)) \\ &\quad \left. + s \operatorname{sgn}(n) (-1)^{m-n+\alpha} e^{-i \frac{\pi}{2a}(m-n)x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y+b)) \right] dx dy. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Využitím integrálů (3.42) a (3.43) můžeme vztah (3.54) přepsat do tvaru

$$v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = iv_f N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \frac{4a \sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} \quad (3.55)$$

$$\times \left[ s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha - s' \operatorname{sgn}(m)(-1)^\beta \right] \left[ 1 + (-1)^{m-n} \right].$$

Poslední řádek v rovnici (3.55) vyžaduje, aby rozdíl  $m-n$  byl sudé číslo. Ovšem pro  $m-n$  sudé dostáváme ve funkci  $\sin(\pi(m-n)/2)$  v prvním řádku rovnice celočíselný násobek čísla  $\pi$ , takže maticový element je vždy nulový vyjma singularity  $m=n$ . Platí tedy

$$v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = 0 \quad \text{pro } m \neq n. \quad (3.56)$$

Pro případ  $m=n$  provedeme limitu vztahu (3.55), čímž dostaneme

$$v_{y,nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} = \lim_{m \rightarrow n} v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} =$$

$$= 4av_f N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} \operatorname{sgn}(n) \left[ s(-1)^\alpha - s'(-1)^\beta \right]. \quad (3.57)$$

Z poslední závorky v rovnici (3.57) můžeme vypořadovat, že povolené jsou pouze ty přechody, které splňují  $s'(-1)^\beta = -s(-1)^\alpha$ . Ve vztahu (3.57) musíme ještě ošetřit singularitu  $l_\beta = k_\alpha$ , což provedeme limitním přechodem

$$v_{y,nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} = \lim_{l_\beta \rightarrow k_\alpha} v_{y,nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} =$$

$$= 4av_f N_{k_\alpha}^2 \left( b \cos(2bk_\alpha) - \frac{\sin(2bk_\alpha)}{2k_\alpha} \right) \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha (s - s'). \quad (3.58)$$

Z podmínek nenulovosti maticových elementů  $v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  diskutovaných výše plynou výběrová pravidla

$$m - n = 0, \quad (3.59a)$$

$$l_\beta - k_\alpha \in \mathbb{R}, \quad (3.59b)$$

$$s'(-1)^\beta - s(-1)^\alpha = \pm 2. \quad (3.59c)$$

## Výpočet v kalibraci $\mathbf{A} = 0$

Na konec nám zbývá vypočítat maticové elementy  $r_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$ . Dosazení vázaných stavů (2.32) do (3.39) dává rovnici

$$r_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \int_{-b}^b \int_{-a}^a y \left[ e^{i\frac{\pi(m-n)}{2a}x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y+b)) \right.$$

$$+ ss' \operatorname{sgn}(nm)(-1)^{\alpha+\beta} e^{i\frac{\pi(m-n)}{2a}x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y-b))$$

$$+ (-1)^{m-n} e^{-i\frac{\pi(m-n)}{2a}x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y+b))$$

$$\left. + ss' \operatorname{sgn}(nm)(-1)^{m-n+\alpha+\beta} e^{-i\frac{\pi(m-n)}{2a}x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y-b)) \right]$$

$$\times dx dy. \quad (3.60)$$

Pro integrály podle  $y$  z rovnice výše platí

$$\begin{aligned} \int_{-b}^b y [\sin(k_\alpha(y \pm b)) \sin(l_\beta(y \pm b))] dy = \\ = \mp \frac{1}{2} \left[ \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2} - \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2} - \frac{b \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} \right. \\ \left. + \frac{b \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Dosazením (3.42) a (3.61) do (3.60) obdržíme

$$\begin{aligned} r_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \frac{2a \sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \left[ \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2} - \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2} \right. \\ \left. - \frac{b \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} + \frac{b \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \\ \times [ss' \operatorname{sgn}(nm)(-1)^{\alpha+\beta} - 1] [1 + (-1)^{m-n}]. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Znovu se dostáváme do situace, kdy závorka na posledním řádku rovnice (3.62) vyžaduje, aby rozdíl  $m - n$  byl sudé číslo, zatímco  $\sin(\pi(m-n)/2)$  v prvním zlomku je nenulový jen pro  $m - n$  liché. Z toho vyplývá, že

$$r_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = 0 \quad \text{pro } m \neq n. \quad (3.63)$$

Nenulový maticový element je možné dostat jen pro  $m = n$ . Limitou vztahu (3.62) obdržíme

$$\begin{aligned} r_{y, nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} = \lim_{m \rightarrow n} r_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \\ = 2a N_{k_\alpha} N_{l_\beta} \left[ \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2} - \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2} - \frac{b \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} \right. \\ \left. + \frac{b \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] [ss'(-1)^{\alpha+\beta} - 1]. \end{aligned} \quad (3.64)$$

V rovnici (3.64) musíme ošetřit singularitu  $l_\beta = k_\alpha$ , což provedeme dalším limitním přechodem, pomocí čehož dostaneme

$$r_{y, nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} = \lim_{l_\beta \rightarrow k_\alpha} r_{y, nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} = a N_{k_\alpha}^2 \left( \frac{b \sin(4bk_\alpha)}{k_\alpha} - \frac{\sin^2(2bk_\alpha)}{k_\alpha^2} \right) (ss' - 1). \quad (3.65)$$

Z předchozích výpočtů plyne, že maticové elementy  $r_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  jsou nenulové jen tehdy, když je  $s'(-1)^\beta = -s(-1)^\alpha$  a  $m = n$ . To jsou stejná výběrová pravidla, jako jsme obdrželi v rovnicích (3.59a–3.59c). Kalibrace  $\Phi = 0$  a  $\mathbf{A} = 0$  tedy dávají pro polarizaci  $\nu = y$  stejná výběrová pravidla pro dipólové přechody a výsledky jsou opět konzistentní.

Na závěr kapitoly srovnáme výběrová pravidla dipólových přechodů pro polarizace  $\nu = x$  a  $\nu = y$ . Porovnáním rovnic (3.46a), (3.46c) se vztahy (3.59a), (3.59c)



můžeme rychle dojít k závěru, že výběrová pravidla pro polarizaci  $\nu = x$  jsou navzájem vylučná s výběrovými pravidly pro polarizaci  $\nu = y$ . To můžeme využít k tomu, abychom odvodili užitečné pravidlo pro součiny maticových elementů  $v_{\nu, nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'}$  a  $r_{\nu, nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'}$ , s nimiž se setkáme později. Díky vylučnosti výběrových pravidel platí

$$r_{\nu, nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'} r_{\nu', nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'} = r_{\nu, nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'} v_{\nu', nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'} = v_{\nu, nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'} v_{\nu', nk_{\alpha} ml_{\beta}}^{ss'} = 0 \quad \text{pro } \nu \neq \nu'. \quad (3.66)$$

## 4. Časová evoluce matice hustoty

Časový vývoj interagujícího systému popíšeme pomocí matice hustoty, pro kterou si v této kapitole podle článku [1] odvodíme v prvním řádu poruchové teorie evoluční rovnici. Odvození evolučního vztahu současně provedeme pro kalibraci  $\Phi = 0$  i  $\mathbf{A} = 0$ .

Uvažujme terahertzové budící pole, které v dipólové aproximaci můžeme popsat vztahem

$$\mathbf{E}'(t) = E_0 \mathbf{e}_\nu e^{-i\omega t}. \quad (4.1)$$

Dle poznatků z kapitoly 3.1 můžeme intrakci Diracových elektronů s tímto polem zavést jako časovou poruchu hamiltoniánu  $\hat{H}_0$  ve tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{I_{\kappa,\nu}}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{I_{\kappa,-,\nu}} e^{-i\omega t}, \quad (4.2)$$

kde značíme

$$\hat{H}_{I_{\kappa,\nu}}(t) = \hat{H}_{I_{\kappa,-,\nu}} e^{-i\omega t} = \begin{cases} -e \frac{i}{\omega + i\gamma} E_0 \hat{v}_\nu e^{-i\omega t} & \text{pro } \kappa = 1, \\ e \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_\nu \hat{\mathbf{I}} e^{-i\omega t} & \text{pro } \kappa = 2. \end{cases} \quad (4.3)$$

Ve vztahu (4.3) dostáváme pro  $\kappa = 1$  interakční hamiltonián v kalibraci  $\Phi = 0$  (viz rovnice (3.29)) a pro  $\kappa = 2$  naopak obdržíme interakční hamiltonián v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$  (viz vztah (3.34)). Poznamenejme, že toto značení budeme často využívat i v dalších kapitolách této práce, a proto si je doporučujeme zapamatovat.

Matici hustoty interagujícího systému (4.2) můžeme zapsat jako

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \Delta \hat{\rho}_{I_{\kappa,\nu}}(t), \quad (4.4)$$

kde  $\hat{\rho}_0$  značí matici hustoty, která popisuje počáteční stav v termální rovnováze a  $\Delta \hat{\rho}_{I_{\kappa,\nu}}$  je poruchová matice hustoty v příslušné kalibraci, která popisuje odezvu elektronů na poruchu způsobenou polem (4.1). Operátory  $\hat{H}_0$  a  $\hat{\rho}_0$  jsou v bázi vázaných stavů grafenu  $|s, nk_\alpha\rangle$  diagonální a platí pro ně rozklady

$$\hat{H}_0 = \sum_{n, k_\alpha} \sum_s |s, nk_\alpha\rangle s \hbar \omega_{nk_\alpha} \langle s, nk_\alpha|, \quad (4.5)$$

$$\hat{\rho}_0 = \sum_{n, k_\alpha} \sum_s |s, nk_\alpha\rangle f_{nk_\alpha}^s \langle s, nk_\alpha|, \quad (4.6)$$

kde  $f_{nk_\alpha}^s$  udává střední počet částic s energií  $s \hbar \omega_{nk_\alpha}$  dle Fermi-Diracova rozdělení.

Časový vývoj matice hustoty  $\hat{\rho}(t)$  je dán Liouvilleovou rovnicí

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (4.7)$$

Dosazením vztahů (4.2) a (4.4) do Liouvilleovy rovnice (4.7) obdržíme

$$\frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial t} + \frac{\partial \Delta \hat{\rho}_{I_{\kappa,\nu}}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left\{ [\hat{H}_0, \hat{\rho}_0] + [\hat{H}_0, \Delta \hat{\rho}_{I_{\kappa,\nu}}] + [\hat{H}_{I_{\kappa,\nu}}, \hat{\rho}_0] + [\hat{H}_{I_{\kappa,\nu}}, \Delta \hat{\rho}_{I_{\kappa,\nu}}] \right\}. \quad (4.8)$$

První člen na levé a pravé straně rovnice (4.8) vypadnou, protože tyto členy musí splňovat pohybovou rovnici

$$\frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{\rho}_0] = 0, \quad (4.9)$$

kde rovnost nule plyne z toho, že v bázi vázaných stavů  $|s, nk_\alpha\rangle$  jsou operátory  $\hat{H}_0$  a  $\hat{\rho}_0$  diagonální, takže musí nutně komutovat. V rovnici (4.8) dále můžeme zanedbat člen  $[\hat{H}_{I_\kappa, \nu}, \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}]$ , protože je úměrný druhé mocnině poruchy a my se zde budeme zabývat pouze lineární teorií. Z Liouvilleovy rovnice (4.8) po těchto úpravách obdržíme

$$\frac{\partial \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}] - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{I_\kappa, \nu}, \hat{\rho}_0]. \quad (4.10)$$

Na pravou stranu rovnice (4.10) nyní ručně přidáme tlumící člen „ $-\gamma \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}$ “ dle modelu popsaného v [1], to znamená, že :

$$\frac{\partial \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}}{\partial t} \equiv -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}] - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{I_\kappa, \nu}, \hat{\rho}_0] - \gamma \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}. \quad (4.11)$$

Poruchová matice  $\Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}$  je vybuzena poruchou  $\mathbf{E}'(t) \propto e^{-i\omega t}$ , takže očekáváme časovou závislost  $\Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu} \propto e^{-i\omega t}$ . Díky tomu můžeme v rovnici (4.11) na levé straně provést časovou derivaci, čímž obdržíme

$$-i\omega \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}] - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{I_\kappa, \nu}, \hat{\rho}_0] - \gamma \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}. \quad (4.12)$$

Rovnici (4.12) dále vynásobíme zleva, resp. zprava, stavy  $|s, nk_\alpha\rangle$ , resp.  $|s', ml_\beta\rangle$ , čímž obdržíme

$$\begin{aligned} & -i\omega \Delta \rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \\ & = -\frac{i}{\hbar} \langle s, nk_\alpha | [\hat{H}_{I_\kappa, \nu}, \hat{\rho}_0] | s', ml_\beta \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle s, nk_\alpha | \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu} | s', ml_\beta \rangle - \gamma \Delta \rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

kde označili maticové elementy operátoru  $\Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}$  jako

$$\Delta \rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \langle s, nk_\alpha | \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu} | s', ml_\beta \rangle. \quad (4.14)$$

V bázi vázaných stavů lze ukázat, že pro složky komutátorů z rovnice (4.13) platí

$$\begin{aligned} \langle s, nk_\alpha | [\hat{H}_0, \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}] | s', ml_\beta \rangle & = \hbar (s\omega_{nk_\alpha} - s'\omega_{ml_\beta}) \langle s, nk_\alpha | \Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu} | s', ml_\beta \rangle = \\ & = \hbar \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \Delta \rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned} \langle s, nk_\alpha | [\hat{H}_{I_\kappa, \nu}, \hat{\rho}_0] | s', ml_\beta \rangle & = -(f_{nk_\alpha}^s - f_{ml_\beta}^{s'}) \langle s, nk_\alpha | \hat{H}_{I_\kappa, \nu} | s', ml_\beta \rangle = \\ & = -f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} H_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

kde jsme označili

$$\omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = s\omega_{nk_\alpha} - s'\omega_{ml_\beta}, \quad (4.17)$$

$$f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = f_{nk_\alpha}^s - f_{ml_\beta}^{s'}, \quad (4.18)$$

$$H_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \langle s, nk_\alpha | \hat{H}_{I_\kappa, \nu} | s', ml_\beta \rangle. \quad (4.19)$$

Použitím vztahů (4.15) a (4.16) přepíšeme rovnici (4.13) do tvaru

$$-i\omega \Delta\rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \frac{i}{\hbar} f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} H_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss} - i\omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \Delta\rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} - \gamma \Delta\rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \quad (4.20)$$

z čehož můžeme vyjádřit maticový element  $\Delta\rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  jako

$$\Delta\rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = -\frac{1}{\hbar} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} H_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \quad (4.21)$$

čímž jsme obdrželi evoluční vztah pro poruchovou matici hustoty  $\Delta\hat{\rho}_{I_\kappa, \nu}$  v prvním řádu poruchové teorie.

## 4.1 Matice hustoty v kalibraci $\Phi = 0$

Pro kalibraci  $\Phi = 0$  máme  $\kappa = 1$ , což odpovídá interakčnímu hamiltoniánu  $\hat{H}_{I_1, \nu}(t) = \hat{H}_{I_1, -\nu} e^{-i\omega t}$ , jehož maticové elementy jsme definovali v rovnici (3.36). Dosazením (3.36) do (4.21) obdržíme

$$\Delta\rho_{I_1, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}(t) = i \frac{e}{\hbar} \frac{E_0}{\omega + i\gamma} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} e^{-i\omega t}. \quad (4.22)$$

## 4.2 Matice hustoty v kalibraci $\mathbf{A} = 0$

V tomto případě dosadíme do rovnice (4.21) ze vztahu (3.38), čímž lze obdržet vztah

$$\Delta\rho_{I_2, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}(t) = -\frac{eE_0}{\hbar} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} r_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} e^{-i\omega t}. \quad (4.23)$$

Poznamenejme, že evoluční vztah (4.23) jsme mohli přejemout z článku [1].

# 5. Příspěvek do vodivosti od středního proudu

Hustotu proudu  $\mathbf{J}$  definujeme pomocí kanonické hybnosti vztahem

$$\mathbf{J} = \frac{q}{m\mathcal{V}}(\mathbf{p}_1 - q\mathbf{A}). \quad (5.1)$$

Pro elektrony v grafenu máme  $q = -e$ ,  $m = m_e$  a  $\mathcal{V} = 4ab$  je objem, resp. obsah nanokrystalu. V rovnici (5.1) dále nahradíme hybnost  $\mathbf{p}_1$  vektorem rychlosti  $\mathbf{v}_1$ , tzn.  $\mathbf{p}_1 = m_e\mathbf{v}_1 = m_e(v_{1,x}\mathbf{e}_x + v_{1,y}\mathbf{e}_y)$ , takže pro hustotu proudu pak můžeme psát

$$\mathbf{J} = -\frac{e}{4ab}\left(v_{1,x}\mathbf{e}_x + v_{1,y}\mathbf{e}_y + \frac{e}{m_e}\mathbf{A}\right). \quad (5.2)$$

Nyní přejdeme do operátorového tvaru. To provedeme tak, že složky vektoru rychlosti  $v_{1,x}$ ,  $v_{1,y}$  nahradíme operátory  $\hat{v}_x$ ,  $\hat{v}_y$  z rovnice (3.30). Tímto způsobem ze vztahu (5.2) obdržíme operátor hustoty proudu na stavech v bodech  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$  ve tvaru

$$\hat{\mathbf{J}} = -\frac{e}{4ab}\left[\hat{v}_x\mathbf{e}_x + \hat{v}_y\mathbf{e}_y + \frac{e}{m_e}\mathbf{A}\right]. \quad (5.3)$$

Střední hodnotu operátoru  $\hat{\mathbf{J}}$  můžeme spočítat pomocí matice hustoty (4.4) jako

$$\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle_{I_\kappa, \nu} = \text{Tr}(\hat{\rho}_0 \hat{\mathbf{J}}) + \text{Tr}(\Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu} \hat{\mathbf{J}}). \quad (5.4)$$

Pro první člen v rovnici (5.4) platí

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_0 \hat{\mathbf{J}}) = 0, \quad (5.5)$$

protože ve stacionárním stavu nemůže protékat konečným nanokrystalem proud. Druhý člen na pravé straně rovnice (5.4) můžeme v bázi vázaných stavů  $|s, nk_\alpha\rangle$ ,  $|s', ml_\beta\rangle$  rozepsat jako

$$\text{Tr}(\Delta \hat{\rho}_{I_\kappa, \nu} \hat{\mathbf{J}}) = \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha, l_\beta} \sum_{s, s'} \Delta \rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha, ml_\beta}^{ss'} \mathbf{J}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's}, \quad (5.6)$$

V rovnici (5.6) je  $\mathbf{J}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's}$  vektor složek operátoru hustoty proudu  $\hat{\mathbf{J}}$ , pro které z rovnice (5.3) plyne vztah

$$\mathbf{J}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} = \langle s', ml_\beta | \hat{\mathbf{J}} | s, nk_\alpha \rangle = -\frac{e}{4ab} \left[ \left( v_{x, ml_\beta nk_\alpha}^{ss'} \mathbf{e}_x + v_{y, ml_\beta nk_\alpha}^{ss'} \mathbf{e}_y \right) + \frac{e}{m_e} \mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} \right], \quad (5.7)$$

kde značíme

$$\mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} = \langle s', ml_\beta | \mathbf{A} | s, nk_\alpha \rangle. \quad (5.8)$$

Dosazením vztahů (5.5–5.7) do rovnice (5.6) a využitím relací  $v_{x, ml_\beta nk_\alpha}^{s's} = v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{s's}$  a  $v_{y, ml_\beta nk_\alpha}^{s's} = -v_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{s's}$  (viz rovnice (3.44, 3.45) a (3.56, 3.57, 3.58)) obdržíme

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{J}} \rangle_{I_\kappa, \nu} &= \\ &= -\frac{e}{4ab} \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha, l_\beta} \sum_{s, s'} \Delta \rho_{I_\kappa, \nu, nk_\alpha, ml_\beta}^{ss'} \left[ \left( v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \mathbf{e}_x - v_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \mathbf{e}_y \right) + \frac{e}{m_e} \mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} \right]. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Pro příspěvek do tenzoru vodivosti od středního proudu  $\sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'}$  platí vztah

$$\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle_{I\kappa,\nu} = \sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'} \mathbf{E}'(t) = \sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'} \mathbf{e}_{\nu'} E_0 e^{-i\omega t}, \quad (5.10)$$

kde  $\mathbf{E}'(t)$  je budící pole dle rovnice (4.1). Člen  $\sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'}$  z rovnice (5.10) můžeme vyjádřit jako

$$\sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'} = \frac{e^{i\omega t}}{E_0} \langle \hat{\mathbf{J}} \rangle_{I\kappa,\nu} \cdot \mathbf{e}_{\nu'}, \quad (5.11)$$

z čehož po dosazení vztahu (5.9) obdržíme výraz

$$\begin{aligned} \sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'} = & -e \frac{e^{i\omega t}}{4abE_0} \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha,l_\beta} \sum_{s,s'} \Delta\rho_{I\kappa,\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \left[ \left( v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{x\nu'} - v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{y\nu'} \right) \right. \\ & \left. + \frac{e}{m_e} \mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} \cdot \mathbf{e}_{\nu'} \right]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

V rovnici výše si z praktických důvodu označíme

$$\begin{aligned} \sigma_{J,I\kappa,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \equiv & -e \frac{e^{i\omega t}}{4abE_0} \Delta\rho_{I\kappa,\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \left[ \left( v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{x\nu'} - v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{y\nu'} \right) \right. \\ & \left. + \frac{e}{m_e} \mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} \cdot \mathbf{e}_{\nu'} \right], \end{aligned} \quad (5.13)$$

díky čemuž budeme moci psát vztah (5.12) ve tvaru

$$\sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'} = \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha,l_\beta} \sum_{s,s'} \sigma_{J,I\kappa,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}. \quad (5.14)$$

Příspěvek do vodivosti  $\sigma_{J,I\kappa,\nu\nu'}$  je tedy dán sumou elementů  $\sigma_{J,I\kappa,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$ , jejichž výpočtem v kalibracích  $\Phi = 0$  a  $\mathbf{A} = 0$  se budeme zabývat ve zbytku této kapitoly.

## 5.1 Výpočet v kalibraci $\Phi = 0$

Pro kalibraci  $\Phi = 0$  máme  $\kappa = 1$ . Do vztahu (5.13) proto dosadíme matici hustoty  $\Delta\rho_{I_1,\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  z rovnice (4.22), což nám dá výraz

$$\begin{aligned} \sigma_{J,I_1,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = & -i \frac{e^2}{4ab\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \left[ \left( v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{x\nu'} - v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{y\nu'} \right) \right. \\ & \left. + \frac{e}{m_e} \mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} \cdot \mathbf{e}_{\nu'} \right]. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Všimněme si, že v rovnici (5.15) se nachází člen  $\mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's}/m_e$ , který je divergentní kvůli nulové hmotnosti Diracových elektronů. Je tedy nutné najít způsob, jak člen  $\mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's}/m_e$  v rovnici (5.15) nahradit, aby bylo možné příspěvek do vodivosti v kalibraci  $\Phi = 0$  vypočítat. Zde prozradíme, že toto se nám bohužel v této práci nepodaří, takže otázka vodivosti v kalibraci  $\Phi = 0$  zůstane otevřená. V následující části si ukážeme výpočet konvergentní části rovnice (5.15). Pro nadcházející výpočty si z praktických důvodů označíme

$$\tilde{\sigma}_{J_A,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \equiv -i \frac{e^3}{4ab\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's} \cdot \mathbf{e}_{\nu'}, \quad (5.16)$$

což nám umožní přepsat vztah (5.15) do kompaktnějšího tvaru

$$\begin{aligned} \sigma_{J,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= -i \frac{e^2}{4ab\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{\nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \left( v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{x\nu'} - v_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{y\nu'} \right) \\ &\quad + \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, \nu\nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Nejprve se budeme zabývat případem  $\nu \neq \nu'$ . Využitím pravidel (3.66) ihned ze vztahu (5.17) plyne

$$\sigma_{J, I_1, yx, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, yx, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \quad (5.18)$$

$$\sigma_{J, I_1, xy, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, xy, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}. \quad (5.19)$$

Dále se budeme věnovat případu  $\nu = \nu' = x$ , pro který se vztah (5.17) redukuje na tvar

$$\sigma_{J, I_1, xx, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = -i \frac{e^2}{4ab\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \left( v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \right)^2}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} + \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, xx, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}. \quad (5.20)$$

Dosazením do rovnice (5.20) za  $v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  ze vztahů (3.44), (3.45) lze ukázat, že platí

$$\begin{aligned} \sigma_{J, I_1, xx, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= -i 16 \frac{ae^2 v_f^2}{b\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2 f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi^2(m-n)^2} \\ &\quad \times \left[ \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} \right]^2 \left[ 1 + ss' \operatorname{sgn}(mn) (-1)^{\alpha+\beta} \right] \\ &\quad \times \left[ 1 - (-1)^{m-n} \right] + \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, xx, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\sigma_{J, I_1, xx, nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} = \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, xx, nk_\alpha nl_\beta}^{ss'}. \quad (5.22)$$

Jako poslední nám zbývá vyřešit případ  $\nu = \nu' = y$ , pro který má vztah (4.22) tvar

$$\sigma_{J, I_1, yy, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = i \frac{e^2}{4ab\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \left( v_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \right)^2}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} + \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, yy, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}. \quad (5.23)$$

Využitím vztahů (3.56), (3.57) a (3.58) obdržíme z výrazu (5.23) tři rovnice

$$\sigma_{J, I_1, yy, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, yy, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \quad \text{pro } m \neq n, \quad (5.24)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{J, I_1, yy, nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} &= i 8 \frac{ae^2 v_f^2}{b\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2 f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \left[ \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} \right]^2 \\ &\quad \times \left[ 1 - ss' (-1)^{\alpha+\beta} \right] + \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A, yy, nk_\alpha nl_\beta}^{ss'}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{J,I_1,yy,nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} &= i8 \frac{ae^2 v_f^2}{b\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{N_{k_\alpha}^4 f_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} + i\gamma} \left( b \cos(2bk_\alpha) - \frac{\sin(2bk_\alpha)}{2k_\alpha} \right)^2 \\ &\quad \times (1 - ss') + \frac{1}{m_e} \tilde{\sigma}_{J_A,yy,nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

## 5.2 Výpočet v kalibraci $\mathbf{A} = 0$

Pro kalibraci  $\mathbf{A} = 0$  z rovnice (5.13) vymizí divergující člen  $\mathbf{A}_{ml_\beta nk_\alpha}^{s's}/m_e$ , takže je možné provést kompletní výpočet příspěvku do tenzoru vodivosti od středního proudu. Do vztahu (5.13) dosadíme matici hustoty  $\Delta\rho_{I_2,\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  z rovnice (4.23), čímž obdržíme vztah

$$\sigma_{J,I_2,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \frac{e^2}{4ab\hbar} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} r_{\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \left( v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{x\nu'} - v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \delta_{y\nu'} \right), \quad (5.27)$$

Nejprve se budeme věnovat nediagonálním členům  $\nu' \neq \nu$ , pro které užitím pravidel (3.66) z rovnice (5.27) ihned obdržíme

$$\sigma_{J,I_2,xy,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \sigma_{J,I_2,yx,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = 0. \quad (5.28)$$

Z toho vyplývá, že příspěvek do tenzoru vodivosti od středního proudu  $\sigma_{J,I_2,\nu\nu'}$  je v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$ .

V případě  $\nu = \nu' = x$  se rovnice (5.27) redukuje na tvar

$$\sigma_{J,I_2,xx,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \frac{e^2}{4ab\hbar} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} r_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}. \quad (5.29)$$

Využitím vztahů (3.44), (3.44) a (3.52), (3.49) lze ukázat, že z rovnice (5.29) obdržíme vztahy

$$\begin{aligned} \sigma_{J,I_2,xx,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} &= i8 \frac{a^2 e^2 v_f}{b\hbar} \frac{N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2 f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \left[ \frac{2 \sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi^2(m-n)^2} - \frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \right] \\ &\quad \times \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \left[ \frac{\sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} - \frac{\sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \\ &\quad \times \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} s \operatorname{sgn}(n) (-1)^\alpha \\ &\quad \times \left[ 1 + ss' \operatorname{sgn}(mn) (-1)^{\alpha+\beta} \right] \left[ 1 - (-1)^{m-n} \right], \end{aligned} \quad (5.30)$$

$$\sigma_{J,I_2,xx,nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} = 0. \quad (5.31)$$

Pro  $\nu = \nu' = y$  přejde rovnice (5.27) na tvar

$$\sigma_{J,I_2,yy,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = -\frac{e^2}{4ab\hbar} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} r_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}, \quad (5.32)$$



z čehož po použití vztahů (3.56),(3.57), (3.58) a (3.63), (3.64), (3.65) obdržíme elementy sumy

$$\sigma_{J,I_2,yy,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = 0 \quad \text{pro } m \neq n, \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} & \sigma_{J,I_2,yy,nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} = \\ & = i4 \frac{ae^2 v_f}{b\hbar} \frac{N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2 f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \left[ \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2} - \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2} \right. \\ & \quad \left. - \frac{b \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} + \frac{b \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} \quad (5.34) \\ & \quad \times s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha [1 - ss'(-1)^{\alpha+\beta}], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{J,I_2,yy,nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} & = i2 \frac{ae^2 v_f}{b\hbar} \frac{N_{k_\alpha}^4 f_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} + i\gamma} \left( \frac{b \sin(4k_\alpha b)}{k_\alpha} - \frac{\sin^2(2k_\alpha b)}{k_\alpha^2} \right) \\ & \quad \times \left( b \cos(2bk_\alpha) - \frac{\sin(2bk_\alpha)}{2k_\alpha} \right) s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha (1 - ss'). \quad (5.35) \end{aligned}$$

# 6. Příspěvek do vodivosti od difuzního proudu

Difuzní proud vzniká v nanokrystalu v důsledku nerovnoměrného rozložení náboje. Difuzi lze popsat rovnicí [7]

$$\frac{dn_{\text{th}}}{dt} = \gamma \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha, l_\beta} \sum_{s,s'} \Delta \rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} \langle \mathbf{r} | s, nk_\alpha \rangle \langle s', ml_\beta | \mathbf{r} \rangle + D \nabla^2 n_{\text{th}}, \quad (6.1)$$

kde  $D$  je difuzní konstanta a  $n_{\text{th}}$  popisuje prostorovou nehomogenitu náboje. Teorie difuze je pro nanokrystalu rozpracována v článku [7], z něhož pro grafen vyplývá sada rovnic

$$D \nabla^2 n_{\eta_x \eta_y}(x, y) = -\Gamma_{\eta_x \eta_y} n_{\eta_x \eta_y}(x, y), \quad (6.2)$$

$$j_{\nu, \eta_x \eta_y} = -\frac{eD}{4ab} \int_{-b}^b \int_{-a}^a \partial_\nu n_{\eta_x \eta_y}(x, y) dx dy, \quad (6.3)$$

$$s_{I_\kappa, \nu', \eta_x \eta_y}(\omega) = 4ab \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha, l_\beta} \sum_{s,s'} \Delta \rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}(\omega) \int_{-b}^b \int_{-a}^a \langle s', ml_\beta | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | s, nk_\alpha \rangle dx dy, \quad (6.4)$$

$$\sigma_{\text{th}, I_\kappa, \nu \nu'}(\omega) = \frac{1}{E_0} \sum_{\eta_x, \eta_y} \frac{i\gamma}{\omega + i\Gamma_{\eta_x \eta_y}} j_{\nu, \eta_x \eta_y} s_{I_\kappa, \nu', \eta_x \eta_y}(\omega). \quad (6.5)$$

Funkce  $n_{\eta_x \eta_y}$  jsou vlastní funkce homogenní diferenciální rovnice (6.2) s vlastními čísly  $\Gamma_{\eta_x \eta_y}$ . Hodnoty  $j_{\nu, \eta_x \eta_y}$  jsou proudové příspěvky do hustoty difuzního proudu v bázi  $n_{\eta_x \eta_y}$  a funkce  $s_{I_\kappa, \nu', \eta_x \eta_y}$  představují zdrojové členy nehomogenity náboje. Nakonec  $\sigma_{\text{th}, I_\kappa, \nu \nu'}$  značí příspěvek do tenzoru vodivosti od difuzního proudu počítaný v příslušné kalibraci.

V rovnicích (6.4) a (6.5) chápeme členy závislé na frekvenci  $\omega$  jako Fourierovy obrazy stejných členů akorát závislých na  $t$ . Tedy například  $\Delta \rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}(\omega)$  chápeme jako  $\Delta \rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}(\omega) = \mathcal{F}(\Delta \rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}(t))(\omega)$ , apod.

Před zahájením výpočtu vodivosti si z praktických důvodů označíme

$$S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x \eta_y}^{s's} = \int_{-b}^b \int_{-a}^a \langle s', ml_\beta | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | s, nk_\alpha \rangle n_{\eta_x \eta_y}(x, y) dx dy, \quad (6.6)$$

takže rovnici (6.4) pak můžeme psát ve tvaru

$$s_{I_\kappa, \nu', \eta_x \eta_y}(\omega) = 4ab \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha, l_\beta} \sum_{s,s'} \Delta \rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}(\omega) S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x \eta_y}^{s's}. \quad (6.7)$$

a dále si označíme

$$\sigma_{\text{th}, I_\kappa, \nu \nu', nk_\alpha ml_\beta, \eta_x \eta_y}^{ss'} = \frac{4ab}{E_0} \frac{i\gamma}{\omega + i\Gamma_{\eta_x \eta_y}} j_{\nu, \eta_x \eta_y} \Delta \rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x \eta_y}^{s's}, \quad (6.8)$$

takže pro příspěvek  $\sigma_{\text{th}, I_\kappa, \nu \nu'}$  z rovnice (6.5) můžeme psát

$$\sigma_{\text{th}, I_\kappa, \nu \nu'} = \sum_{\eta_x, \eta_y} \sum_{n,m} \sum_{k_\alpha, l_\beta} \sum_{s,s'} \sigma_{\text{th}, I_\kappa, \nu \nu', nk_\alpha ml_\beta, \eta_x \eta_y}^{ss'}. \quad (6.9)$$

Jako první budeme hledat vlastní funkce  $n_{\eta_x\eta_y}$  homogenní diferenciální rovnice (6.2), kterou budeme řešit pro okrajové podmínky

$$\partial_x n_{\eta_x\eta_y}(\pm a, y) = 0, \quad (6.10a)$$

$$\partial_y n_{\eta_x\eta_y}(x, \pm b) = 0, \quad (6.10b)$$

jež nám říkají, že hustota elektronů nesmí vytékat ven z nanokrystalu. Na funkce  $n_{\eta_x\eta_y}$  navíc klademe normalizační podmínku

$$\int_{-b}^b \int_{-a}^a |n_{\eta_x\eta_y}(x, y)|^2 dx dy = \frac{1}{4ab}. \quad (6.11)$$

Homogenní diferenciální rovnici (6.2) můžeme řešit v separovaném tvaru

$$n_{\eta_x\eta_y}(x, y) = n_{\eta_x}(x)n_{\eta_y}(y). \quad (6.12)$$

Pro řešení rovnice (6.2), které splňuje okrajové podmínky (6.10a), (6.10b) a normalizační podmínku (6.11), lze odvodit tvar

$$n_{\eta_x\eta_y}(x, y) = M_{\eta_x\eta_y} \cos\left(\frac{\pi(x-a)}{2a}\eta_x\right) \cos\left(\frac{\pi(y-b)}{2b}\eta_y\right), \quad (6.13)$$

kde je  $\eta_x, \eta_y \in \mathbb{N} \cup \{0\}$  a  $M_{\eta_x\eta_y}$  je normalizační konstanta

$$M_{\eta_x\eta_y} = \begin{cases} \frac{1}{2ab} & \eta_x > 0 \wedge \eta_y > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{8ab}} & \eta_x = 0 \wedge \eta_y > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{8ab}} & \eta_x > 0 \wedge \eta_y = 0, \\ \frac{1}{4ab} & \eta_x = 0 \wedge \eta_y = 0, \end{cases} \quad (6.14)$$

přičemž pro vlastní energie platí

$$\Gamma_{\eta_x\eta_y} = D \left[ \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 \eta_x^2 + \left(\frac{\pi}{2b}\right)^2 \eta_y^2 \right]. \quad (6.15)$$

Dále dle rovnice (6.3) vypočítáme proudové příspěvky  $j_{\nu, \eta_x\eta_y}$ . Pro  $\nu = x$  řešíme integrál

$$\int_{-b}^b \int_{-a}^a \partial_x \left[ \cos\left(\frac{\pi(x-a)}{2a}\eta_x\right) \right] \cos\left(\frac{\pi(y-b)}{2b}\eta_y\right) dx dy = 2b[1 - (-1)^{\eta_x}] \delta_{0, \eta_y}, \quad (6.16)$$

z čehož po dosazení do vztahu (6.3) obdržíme

$$j_{x, \eta_x\eta_y} = -\frac{eD}{2\sqrt{8a^2b}} [1 - (-1)^{\eta_x}] \delta_{0, \eta_y}. \quad (6.17)$$

V případě  $\nu = y$  analogicky dorazíme ke vztahu

$$j_{y, \eta_x\eta_y} = -\frac{eD}{2\sqrt{8ab^2}} [1 - (-1)^{\eta_y}] \delta_{0, \eta_x}. \quad (6.18)$$

Nyní se budeme věnovat výpočtu elementů  $S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x \eta_y}^{s's}$ . Ze vztahů (6.17) a (6.18) plyne, že stačí vypočítat pouze členy  $S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x 0}^{s's}$  a  $S_{ml_\beta nk_\alpha, 0 \eta_y}^{s's}$ . Dosazením vázaných stavů (2.32) do rovnice (6.6) pro  $\eta_y = 0$  obdržíme

$$\begin{aligned}
S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x 0}^{s's} &= \\
&= N_{k_\alpha} N_{l_\beta} M_{\eta_x 0} \int_{-b}^b \int_{-a}^a \left[ e^{-i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y+b)) \right. \\
&\quad + ss' \operatorname{sgn}(mn) (-1)^{\alpha+\beta} e^{-i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y-b)) \\
&\quad + (-1)^{m-n} e^{i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y+b)) \\
&\quad \left. + ss' \operatorname{sgn}(mn) (-1)^{\alpha+\beta+m-n} e^{i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y-b)) \right] \\
&\quad \times \cos\left(\frac{\pi(x-a)}{2a} \eta_x\right) dx dy. \tag{6.19}
\end{aligned}$$

Pro integrál podle  $x$  v předchozí rovnici platí

$$\int_{-a}^a e^{\mp i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \cos\left(\frac{\pi(x-a)}{2a} \eta_x\right) dx = \pm i \frac{2a}{\pi} \frac{(\pm i)^{m-n} (m-n)}{\eta_x^2 - (m-n)^2} [(-1)^{\eta_x} - (-1)^{m-n}]. \tag{6.20}$$

Dosazením vztahů (3.51) a (6.20) do (6.19) můžeme odvodit vztah

$$\begin{aligned}
S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x 0}^{s's} &= \\
&= \frac{a}{\pi} N_{k_\alpha} N_{l_\beta} M_{\eta_x 0} \frac{i^{m-n+1} (m-n)}{\eta_x^2 - (m-n)^2} \left[ \frac{\sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} - \frac{\sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \\
&\quad \times [1 + ss' \operatorname{sgn}(mn) (-1)^{\alpha+\beta}] [1 - (-1)^{2(m-n)}] [(-1)^{\eta_x} - (-1)^{m-n}] = 0, \tag{6.21}
\end{aligned}$$

kde rovnost nule plyne z posledního řádku rovnice. Pro  $\eta_x = |m-n|$  máme v rovnici (6.21) singularitu, takže tento případ musíme okomentovat zvlášť. V případě  $\eta_x = |m-n|$  nás zajímá integrál

$$\int_{-a}^a e^{\mp i \frac{\pi(m-n)}{2a} x} \cos\left(\frac{\pi(x-a)}{2a} |m-n|\right) dx = a (\mp i)^{m-n}, \tag{6.22}$$

který společně se vztahem (3.51) dosadíme do rovnice (6.19), z čehož obdržíme

$$\begin{aligned}
S_{ml_\beta nk_\alpha, |m-n| 0}^{s's} &= \\
&= -a N_{k_\alpha} N_{l_\beta} M_{|m-n| 0} (-i)^{m-n} \left[ \frac{\sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} - \frac{\sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \\
&\quad \times [1 + ss' \operatorname{sgn}(mn) (-1)^{\alpha+\beta}]. \tag{6.23}
\end{aligned}$$

Pro element  $S_{ml_\beta nk_\alpha, 0 \eta_y}^{s's}$  získáme dosazením vázaných stavů (2.32) do rovnice (6.6) vztah

$$\begin{aligned}
S_{ml_\beta nk_\alpha, 0 \eta_y}^{s's} &= \frac{2N_{k_\alpha} N_{l_\beta}}{\sqrt{8ab}} \int_{-b}^b \int_{-a}^a \left[ \sin(k_\alpha(y+b)) \sin(l_\beta(y+b)) \right. \\
&\quad \left. + ss' (-1)^{\alpha+\beta} \sin(k_\alpha(y-b)) \sin(l_\beta(y-b)) \right] \\
&\quad \times \cos\left(\frac{\pi(y-b)}{2b} \eta_y\right) dx dy. \tag{6.24}
\end{aligned}$$

Pro integrace podle  $y$  z předchozí rovnice platí

$$\begin{aligned} & \int_{-b}^b \sin(k_\alpha(y \pm b)) \sin(l_\beta(y \pm b)) \cos\left(\frac{\pi(y-b)}{2b}\eta_y\right) dy = \\ & = -(\pm 1)^{\eta_y} \frac{1}{2} \left[ \frac{(k_\alpha + l_\beta) \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} - \frac{(k_\alpha - l_\beta) \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Dosazením vztahu (6.25) a (6.14) do (6.24) obdržíme výraz

$$\begin{aligned} S_{nl_\beta nk_\alpha, 0\eta_y}^{s's} &= -\frac{N_{k_\alpha} N_{l_\beta}}{\sqrt{2b}} \left[ \frac{(k_\alpha + l_\beta) \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} - \frac{(k_\alpha - l_\beta) \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} \right] \\ & \times [1 + ss'(-1)^{\alpha+\beta+\eta_y}]. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Tímto máme veškeré potřebné mezivýpočty hotové. V následujících dvou podkapitolách vypočítáme využitím známých výsledků příspěvky do vodivosti od difuzního proudu v kalibracích  $\Phi = 0$  a  $\mathbf{A} = 0$ .

## 6.1 Výpočet v kalibraci $\Phi = 0$

Dosazením matice hustoty  $\Delta\rho_{I_\kappa, \nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  =  $\Delta\rho_{I_1, \nu, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  ze vztahu (4.22) (Fourierovského obrazu) obdržíme

$$\sigma_{\text{th}, I_1, \nu\nu', nk_\alpha ml_\beta, \eta_x \eta_y}^{ss'} = -4ab \frac{e\gamma}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{j_{\nu, \eta_x \eta_y}}{\omega + i\Gamma_{\eta_x \eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{\nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} S_{ml_\beta nk_\alpha, \eta_x \eta_y}^{s's}. \quad (6.27)$$

Nyní je potřeba provést podrobnou diskuzi vztahu (6.27) pro  $\nu, \nu' \in \{x, y\}$ .

V rovnici (6.27) nejprve uvažujme případ  $\nu = x$ , pro který jsou dle vztahů (6.17), (6.23) a (6.21) příspěvky  $\sigma_{\text{th}, I_1, x\nu', nk_\alpha ml_\beta, \eta_x \eta_y}^{ss'}$  nenulové jen v případě, kdy  $\eta_y = 0$  a  $\eta_x = |m - n|$ , což nám umožní zjednodušit rovnici (6.27) na tvar

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{th}, I_1, x\nu', nk_\alpha ml_\beta, |m-n|0}^{ss'} &= \\ &= -4ab \frac{e\gamma}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{j_{\nu, |m-n|0}}{\omega + i\Gamma_{|m-n|0}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{\nu', nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} S_{ml_\beta nk_\alpha, |m-n|0}^{s's}. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Z rovnice (6.21) dále můžeme vypožorovat, že člen  $S_{ml_\beta nk_\alpha, |m-n|0}^{s's}$  je nenulový pouze tehdy, pokud platí  $s' \text{sgn}(m)(-1)^\beta = s \text{sgn}(n)(-1)^\alpha$ , což je stejné výběrové pravidlo, jako má člen  $v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  (viz (3.46c)), a navíc je vylučné s výběrovým pravidlem členu  $v_{y, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  (viz (3.59c)). Z toho vyplývá, že pro  $\nu' = y$  obdržíme z rovnice (6.28) vztah

$$\sigma_{\text{th}, I_1, xy, nk_\alpha ml_\beta, |m-n|0}^{ss'} = 0 \quad (6.29)$$

a pro  $\nu' = x$  máme

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{th}, I_1, xx', nk_\alpha ml_\beta, |m-n|\eta_y}^{ss'} &= \\ &= -4ab \frac{e\gamma}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{j_{\nu, |m-n|0}}{\omega + i\Gamma_{|m-n|0}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{x, nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} S_{ml_\beta nk_\alpha, |m-n|0}^{s's}. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Využitím vztahů (3.44), (3.45), (6.17) a (6.23) můžeme z rovnice (6.30) obdržet

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{th},I_1,xx,nk_\alpha ml_\beta,|m-n|0}^{ss'} &= -8\sqrt{2}a \frac{e^2\gamma v_f D}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2 M_{|m-n|0}}{\omega + i\Gamma_{|m-n|0}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \\
&\times (-i)^{m-n} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} \\
&\times \left[ \frac{\sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} - \frac{\sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \\
&\times s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha \left[ 1 + ss' \operatorname{sgn}(mn)(-1)^{\alpha+\beta} \right] \left[ 1 - (-1)^{m-n} \right], \tag{6.31}
\end{aligned}$$

$$\sigma_{\text{th},I_1,xx,nk_\alpha nl_\beta,|m-n|0}^{ss'} = 0. \tag{6.32}$$

Dále si rozebereme případ  $\nu = y$ , pro který z rovnice (6.18) plyne, že nenulové elementy  $\sigma_{\text{th},I_1,y\nu',nk_\alpha ml_\beta,\eta_x\eta_y}^{ss'}$  obdržíme jen pro  $\eta_x = 0$ , takže z rovnice (6.27) obdržíme

$$\sigma_{\text{th},I_1,y\nu',nk_\alpha ml_\beta,0\eta_y}^{ss'} = -4ab \frac{e\gamma}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{j_{y,0\eta_y}}{\omega + i\Gamma_{0\eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} S_{ml_\beta nk_\alpha,0\eta_y}^{s's}. \tag{6.33}$$

Podíváme-li se na rovnice (6.18) a (6.26) zjistíme, že kvůli součinu  $j_{y,0\eta_y} S_{ml_\beta nk_\alpha,0\eta_y}^{s's}$  v rovnici (6.33) je člen  $\sigma_{\text{th},I_1,y\nu',nk_\alpha ml_\beta,0\eta_y}^{ss'}$  nenulový pouze tehdy, pokud platí  $[1 - ss'(-1)^{\alpha+\beta}] \neq 0$ , což je stejné výběrové pravidlo, jako má  $v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  ((3.59c)), přičemž je ale vylučné s výběrovým pravidlem členu  $v_{x,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  (viz (3.46c)). Z toho vyplývá, že pro  $\nu' = x$  dostáváme z rovnice (6.33) výraz jen pokud platí

$$\sigma_{\text{th},I_1,yx,nk_\alpha ml_\beta,0\eta_y}^{ss'} = 0, \tag{6.34}$$

zatímco pro  $\nu' = y$  získáme

$$\sigma_{\text{th},I_1,yy,nk_\alpha ml_\beta,0\eta_y}^{ss'} = -4ab \frac{e\gamma}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{j_{y,0\eta_y}}{\omega + i\Gamma_{0\eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} v_{y,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} S_{ml_\beta nk_\alpha,0\eta_y}^{s's}. \tag{6.35}$$

Dosazením vztahů (3.56), (3.57), (3.58), (6.18) a (6.24) do rovnice (6.35) obdržíme

$$\sigma_{\text{th},I_1,yy,nk_\alpha ml_\beta,0\eta_y}^{ss'} = 0 \quad \text{pro } m \neq n, \tag{6.36}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{th},I_1,yy,nk_\alpha nl_\beta,0\eta_y}^{ss'} &= -i2 \frac{a}{b^2} \frac{e^2\gamma v_f D}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2}{\omega + i\Gamma_{0\eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha nl_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} + i\gamma} \\
&\times \frac{l_\beta \sin(2bk_\alpha) - k_\alpha \sin(2bl_\beta)}{k_\alpha^2 - l_\beta^2} \\
&\times \left[ \frac{(k_\alpha + l_\beta) \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} - \frac{(k_\alpha - l_\beta) \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} \right] \\
&\times s \operatorname{sgn}(n)(-1)^\alpha \left[ 1 - ss'(-1)^{\alpha+\beta} \right] \left[ 1 + ss'(-1)^{\alpha+\beta+\eta_y} \right] \\
&\times [1 - (-1)^{\eta_y}], \tag{6.37}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{th},I_1,yy,nk_\alpha nk_\alpha,0\eta_y}^{ss'} &= -i4 \frac{a}{b^2} \frac{e^2 \gamma v_f D}{\hbar} \frac{1}{\omega + i\gamma} \frac{N_{k_\alpha}^4}{\omega + i\Gamma_{0\eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} + i\gamma} \\
&\times \left( b \cos(2bk_\alpha) - \frac{\sin(2bk_\alpha)}{2k_\alpha} \right) \frac{k_\alpha \sin(4bk_\alpha)}{4k_\alpha^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} \\
&\times \text{sgn}(n)(-1)^\alpha (s - s') [1 + ss'(-1)^{\eta_y}] [1 - (-1)^{\eta_y}].
\end{aligned} \tag{6.38}$$

## 6.2 Výpočet v kalibraci $\mathbf{A} = 0$

Dosazením matice hustoty  $\Delta\rho_{I_\kappa,\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} = \Delta\rho_{I_2,\nu,nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  ze vztahu (4.23) do rovnice (6.8) obdržíme

$$\sigma_{\text{th},I_2,\nu\nu',nk_\alpha ml_\beta,\eta_x\eta_y}^{ss'} = -i4ab \frac{e\gamma}{\hbar} \frac{j_{\nu,\eta_x\eta_y}}{\omega + i\Gamma_{\eta_x\eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} r_{\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} S_{ml_\beta nk_\alpha,\eta_x\eta_y}^{s's} \tag{6.39}$$

Vztah (6.39) opět vyžaduje podrobnou diskuzi případů  $\nu, \nu' \in \{x, y\}$ . Zde připomeneme, členy  $r_{\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  z rovnice (6.39) mají stejná výběrová pravidla, jako členy  $v_{\nu',nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}$  z rovnice (6.27). Z toho vyplývá, že rozbor rovnice (6.39) bude identický jako rozbor vztahu (6.39). Z tohoto důvodu si zde pouze shrneme nejdůležitější vztahy vycházející z předpisu (6.39) a postup již nebudeme znovu komentovat.

Využitím vztahů (3.47), (3.49), (3.63), (3.64), (3.65), (6.17), (6.18), (6.21), (6.23), (6.26) lze ukázat, že z rovnice (6.39) plynou následující vztahy:

$$\sigma_{\text{th},I_2,xy,nk_\alpha ml_\beta,\eta_x\eta_y}^{ss'} = \sigma_{\text{th},I_2,yx,nk_\alpha ml_\beta,\eta_x\eta_y}^{ss'} = 0, \tag{6.40}$$

$$\sigma_{\text{th},I_2,xx,nk_\alpha ml_\beta,\eta_x\eta_y}^{ss'} = 0 \quad \text{pro } \eta_x \neq |m - n| \vee \eta_y \neq 0, \tag{6.41}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{th},I_2,xx,nk_\alpha ml_\beta,|m-n|0}^{ss'} &= 4\sqrt{2}a^2 \frac{e^2 \gamma D}{\hbar} N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2 M_{|m-n|0} \frac{1}{\omega + i\Gamma_{|m-n|0}} \frac{f_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha ml_\beta}^{ss'} + i\gamma} \\
&\times (-i)^{m-n} \left[ \frac{2 \sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi^2(m-n)^2} - \frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{\pi(m-n)} \right] \\
&\times \left[ \frac{\sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} - \frac{\sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right]^2 \\
&\times [1 + ss' \text{sgn}(mn)(-1)^{\alpha+\beta}] [1 - (-1)^{m-n}],
\end{aligned} \tag{6.42}$$

$$\sigma_{\text{th},I_2,xx,nk_\alpha nl_\beta,|m-n|0}^{ss'} = 0, \tag{6.43}$$

$$\sigma_{\text{th},I_2,yy,nk_\alpha ml_\beta,\eta_x\eta_y}^{ss'} = 0 \quad \text{pro } m \neq n \vee \eta_x \neq 0, \tag{6.44}$$

$$\begin{aligned}
& \sigma_{\text{th}, I_2, yy, nk_\alpha nl_\beta, 0\eta_y}^{ss'} = \\
& = -i \frac{a}{b^2} \frac{e^2 \gamma D}{\hbar} \frac{N_{k_\alpha}^2 N_{l_\beta}^2}{\omega + i\Gamma_{0\eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha nl_\beta}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha nl_\beta}^{ss'} + i\gamma} \left[ \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2} - \frac{2 \sin^2(b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2} \right. \\
& \quad \left. - \frac{b \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{k_\alpha - l_\beta} + \frac{b \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{k_\alpha + l_\beta} \right] \\
& \quad \times \left[ \frac{(k_\alpha + l_\beta) \sin(2b(k_\alpha + l_\beta))}{(k_\alpha + l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} - \frac{(k_\alpha - l_\beta) \sin(2b(k_\alpha - l_\beta))}{(k_\alpha - l_\beta)^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} \right] \\
& \quad \times [1 - ss'(-1)^{\alpha+\beta}] [1 + ss'(-1)^{\alpha+\beta+\eta_y}] [1 - (-1)^{\eta_y}],
\end{aligned} \tag{6.45}$$

$$\begin{aligned}
& \sigma_{\text{th}, yy, nk_\alpha nk_\alpha, 0\eta_y}^{ss'} = \\
& = -i \frac{a}{b^2} \frac{e^2 \gamma D}{\hbar} \frac{N_{k_\alpha}^4}{\omega + i\Gamma_{0\eta_y}} \frac{f_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'}}{\omega - \omega_{nk_\alpha nk_\alpha}^{ss'} + i\gamma} \left( \frac{b \sin(4k_\alpha b)}{k_\alpha} - \frac{\sin^2(2k_\alpha b)}{k_\alpha^2} \right) \\
& \quad \times \frac{k_\alpha \sin(4bk_\alpha)}{4k_\alpha^2 - \left(\frac{\eta_y \pi}{2b}\right)^2} [1 - ss'(-1)^{\alpha+\beta}] [1 + ss'(-1)^{\alpha+\beta+\eta_y}] \\
& \quad \times [1 - (-1)^{\eta_y}].
\end{aligned} \tag{6.46}$$

Ze vztahu (6.40) plyne, že tenzor vodivosti je v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$  diagonální.



# 7. Numerické výsledky v kalibraci $A=0$

Střední počet elektronů ve stavu  $|s, nk_\alpha\rangle$  s energií  $s\hbar\omega_{nk_\alpha}$  je dán dle Fermi-Diracova rozdělení vztahem

$$f_{nk_\alpha}^s(T, \mu_{chem}) \equiv f(s\hbar\omega_{nk_\alpha}, T, \mu_{chem}) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{s\hbar\omega_{nk_\alpha} - \mu_{chem}}{k_B T}\right) \right]^{-1}, \quad (7.1)$$

Počet elektronů  $\mathcal{N}_e$  ve vodivostním můžeme za pomoci vztahu (7.1) spočítat jako

$$\mathcal{N}_e = \sum_{n, k_\alpha} \sum_s \left( f_{nk_\alpha}^s(T, \mu_{chem}) - f_{nk_\alpha}^s(0, 0) \right). \quad (7.2)$$

Při výpočtu numerických výsledků musíme mít na paměti, že máme pouze efektivní disperzi, a proto je potřeba zavést nějakou energii  $\mathcal{E}_0$ , ze kterou zdola ohraničíme energetické spektrum. Elektrony s nižší energií než  $\mathcal{E}_0$ , již do vodivosti nemohou přispívat, jelikož stavy bezprostředně nad nimi jsou zaplněné, přičemž o budícím záření předpokládáme, že nemá dostatečnou energii na to, aby tyto elektrony excitovalo do stavů vodivostního pásu. Za tohoto předpokladu lze vztah (7.2) mírně zjednodušit. Označme

$$\mathcal{N}_0 = \sum_{n, k_\alpha} \sum_s f_{nk_\alpha}^s(0, 0), \quad (7.3)$$

kde počet elektronů  $\mathcal{N}_0$  odpovídá počtu stavů, které mají energie v intervalu  $[\mathcal{E}_0, 0]$ . Využitím rovnice (7.3) můžeme vztah (7.2) přepsat do tvaru

$$\mathcal{N}_e + \mathcal{N}_0 = \sum_{n, k_\alpha} \sum_s f_{nk_\alpha}^s(T, \mu_{chem}), \quad (7.4)$$

Při numerickém výpočtu si pak můžeme zvolit počet vodivostních elektronů  $\mathcal{N}_e$  a ze vztahu (7.4) dopočítáme odpovídající chemický potenciál  $\mu_{chem}$ . Ze znalosti chemického potenciálu  $\mu_{chem}$  pak můžeme spočítat počet děr ve valenčním pásu jako

$$\mathcal{N}_h = \sum_{n, k_\alpha} \sum_s \left( 1 - f_{nk_\alpha}^s(T, \mu_{chem}) \right) \quad \text{pro } s\hbar\omega_{nk_\alpha} \in (\mathcal{E}_0, 0). \quad (7.5)$$

Hustotu vodivostních elektronů a děr definujeme jako

$$n_{e,h} = \frac{\mathcal{N}_{e,h}}{4ab}, \quad (7.6)$$

čehož můžeme spočítat pohyblivost  $\mu$  jako

$$\mu = \frac{\sigma}{e(n_e + n_h)} = 4ab \frac{\sigma}{e(\mathcal{N}_e + \mathcal{N}_h)}, \quad (7.7)$$

kde  $\sigma$  je vodivost.

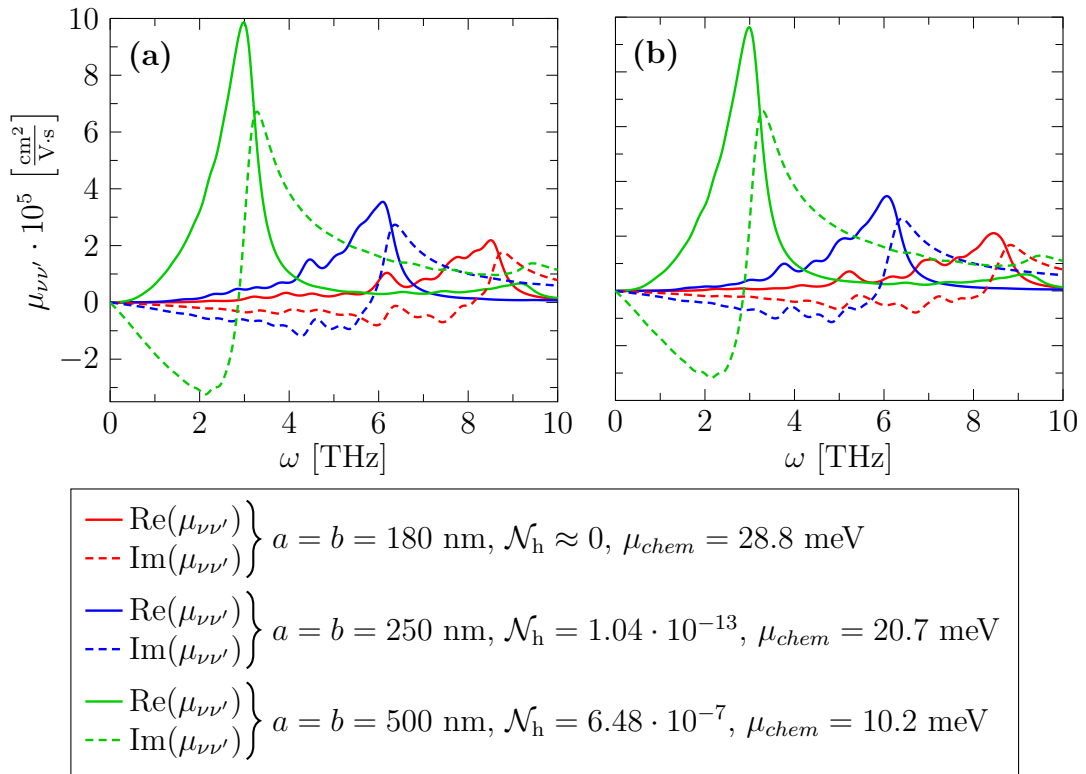
Pro grafen máme difuzní konstantu

$$D = \frac{v_f^2}{2\gamma}. \quad (7.8)$$

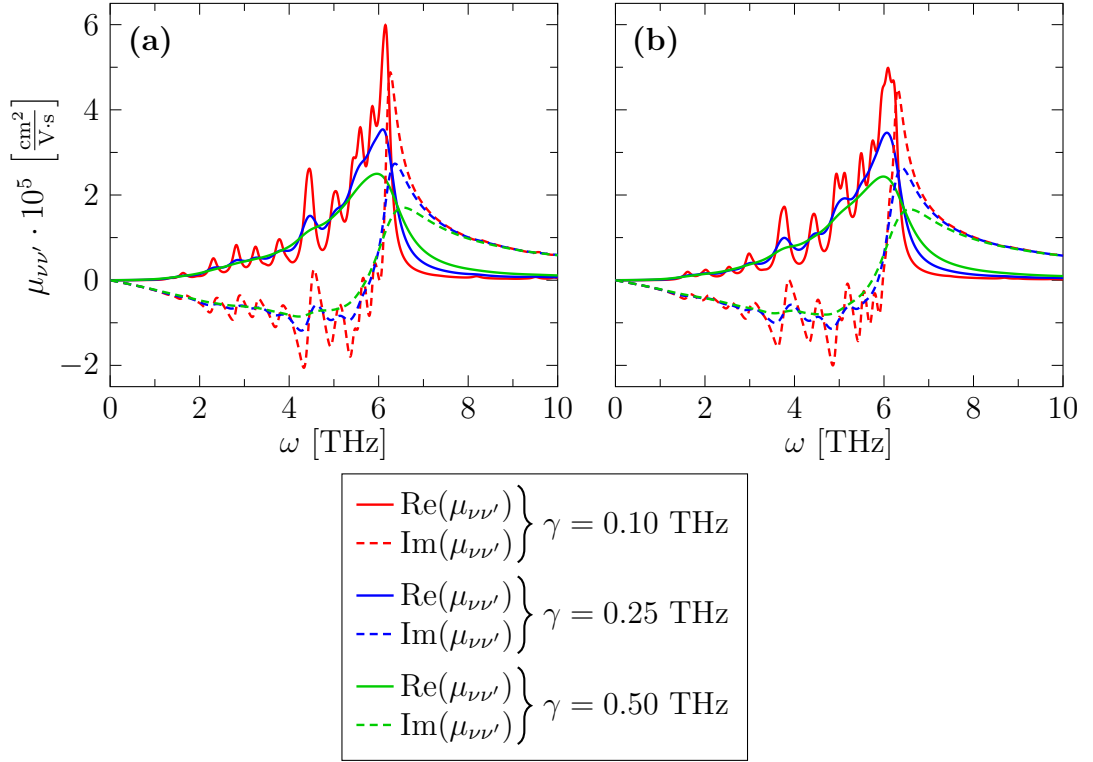
V případě grafenu je vodivost tenzorová veličina, takže z analogie se vztahem (7.7), zavedeme pohyblivost jako tenzorovou veličinu vztahem

$$\mu_{\nu\nu'} \equiv 4ab \frac{\sigma_{J,I_2,\nu\nu'} + \sigma_{\text{th},I_2,\nu\nu'}}{e(\mathcal{N}_e + \mathcal{N}_h)}, \quad (7.9)$$

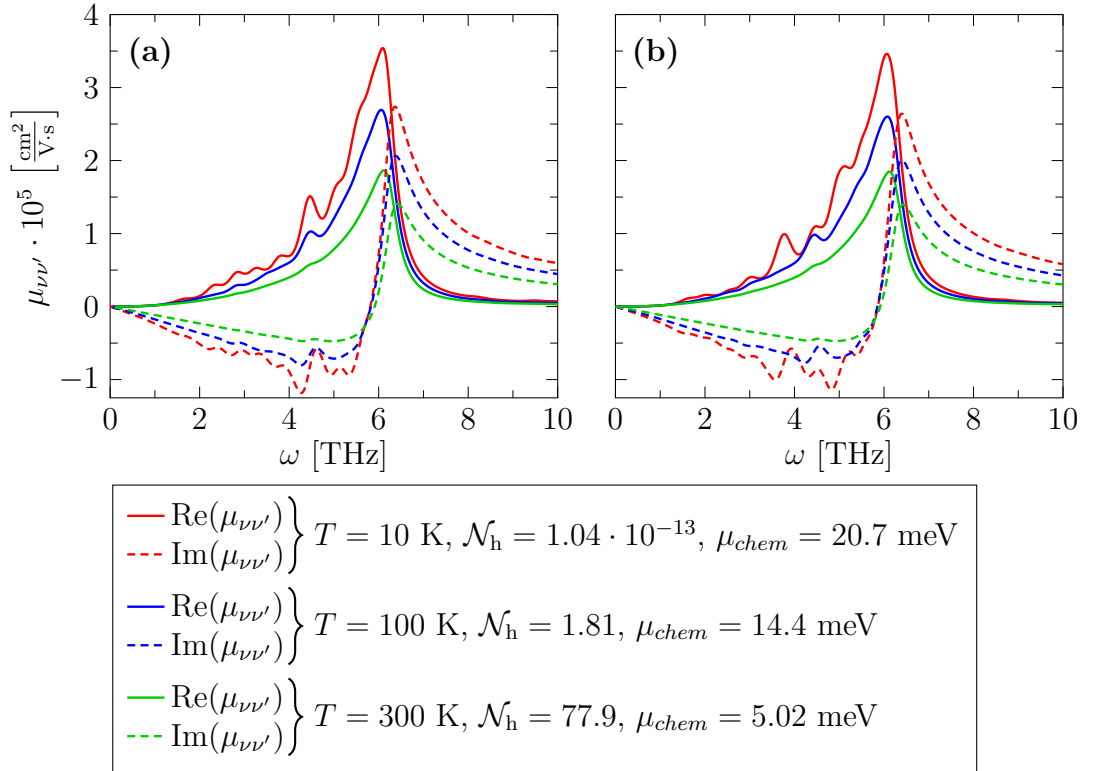
Ve vztahu (7.9) jsou  $\sigma_{J,I_2,\nu\nu'}$  a  $\sigma_{\text{th},I_2,\nu\nu'}$  příspěvky do vodivosti od středního a difuzního proudu počítané v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$ . Na závěr práce si graficky znázorníme numerického řešení našeho modelu v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$ . V obrázcích níže vynášíme pohyblivosti  $\mu_{\nu\nu'}$  na frekvenci budícího záření  $\omega$  pro různé parametry systému, jako jsou rozměry  $a$  a  $b$ , teplota  $T$ , tlumicí koeficient  $\gamma$  a počty nosičů náboje  $\mathcal{N}_e$  a  $\mathcal{N}_h$ .



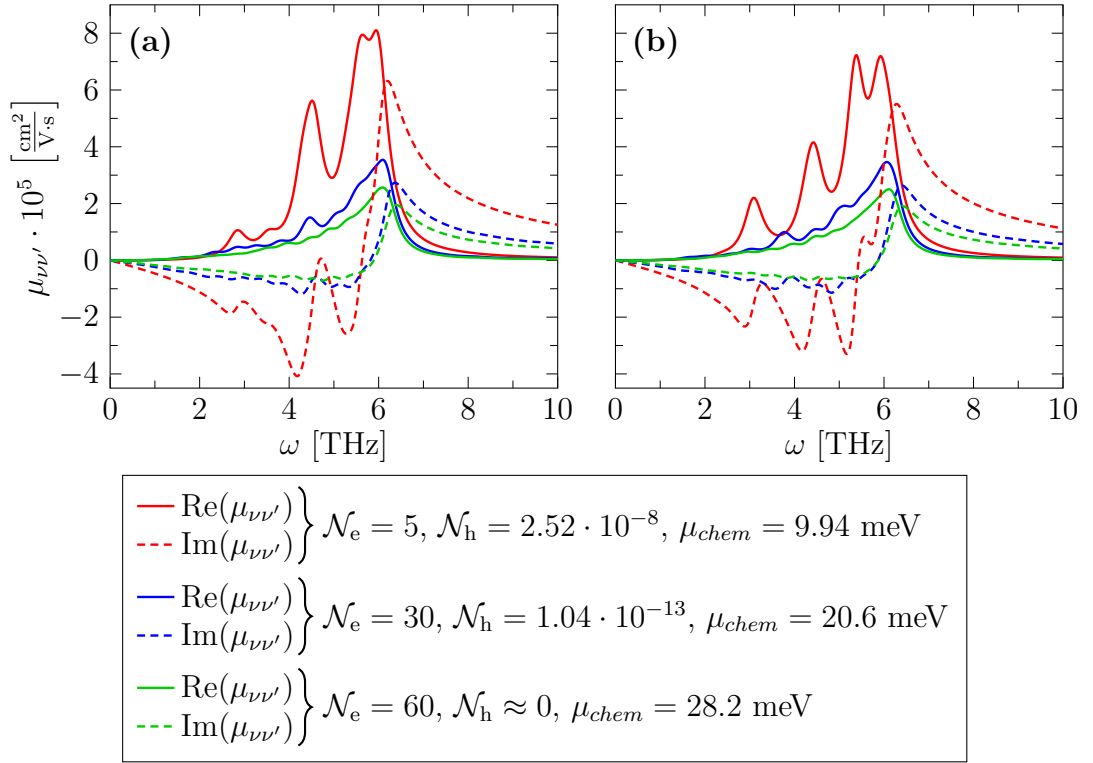
Obrázek 7.1: Závislost pohyblivosti  $\mu_{\nu\nu'}$  na rozměrech nanokrystalu  $a$ ,  $b$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry  $T = 10 \text{ K}$ ,  $\mathcal{N}_e = 30$ ,  $\mathcal{E}_0 = -0.1 \text{ eV}$ ,  $\gamma = 0.25 \text{ THz}$  a  $v_f = 10^6 \text{ m}\cdot\text{s}$ . (a):  $\nu = \nu' = x$ . (b):  $\nu = \nu' = y$ .



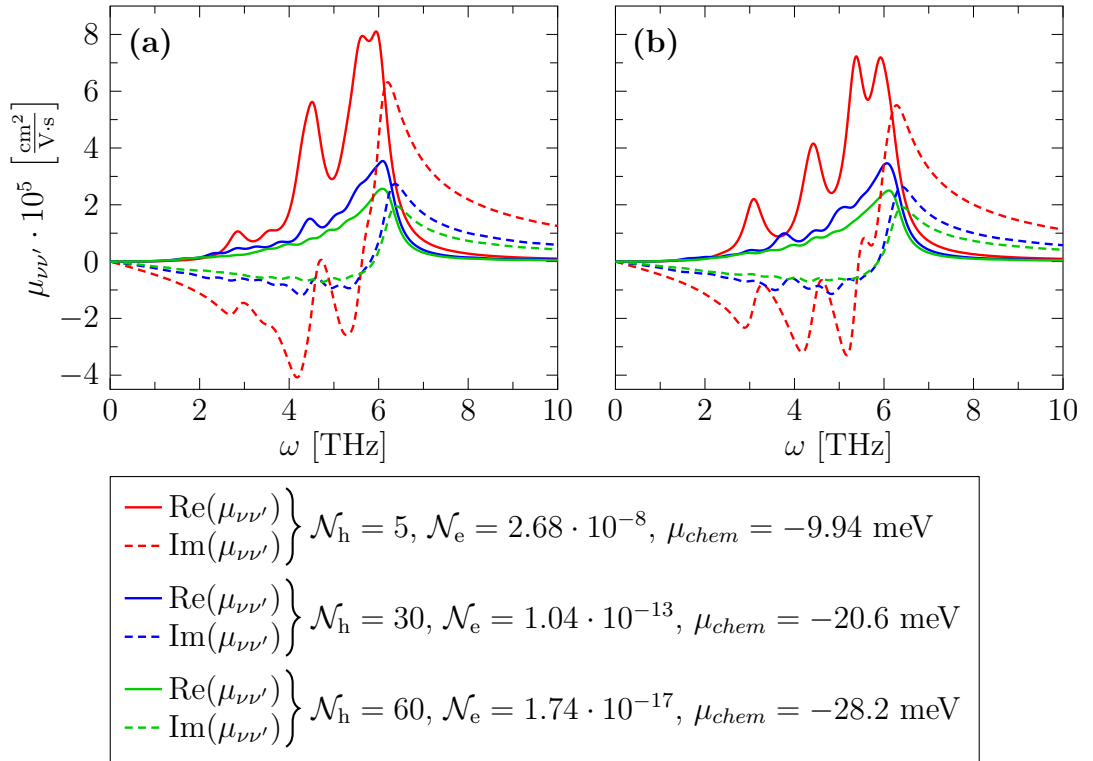
Obrázek 7.2: Závislost pohyblivosti  $\mu_{\nu\nu'}$  na tlumícím koeficientu  $\gamma$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry  $a = b = 250$  nm,  $T = 10$  K,  $\mathcal{N}_e = 30$ ,  $\mathcal{N}_h = 1.04 \cdot 10^{-13}$ ,  $\mu_{chem} = 20.7$  meV,  $\mathcal{E}_0 = -0.1$  eV,  $v_f = 10^6$  m.s. (a):  $\nu = \nu' = x$ . (b):  $\nu = \nu' = y$ .



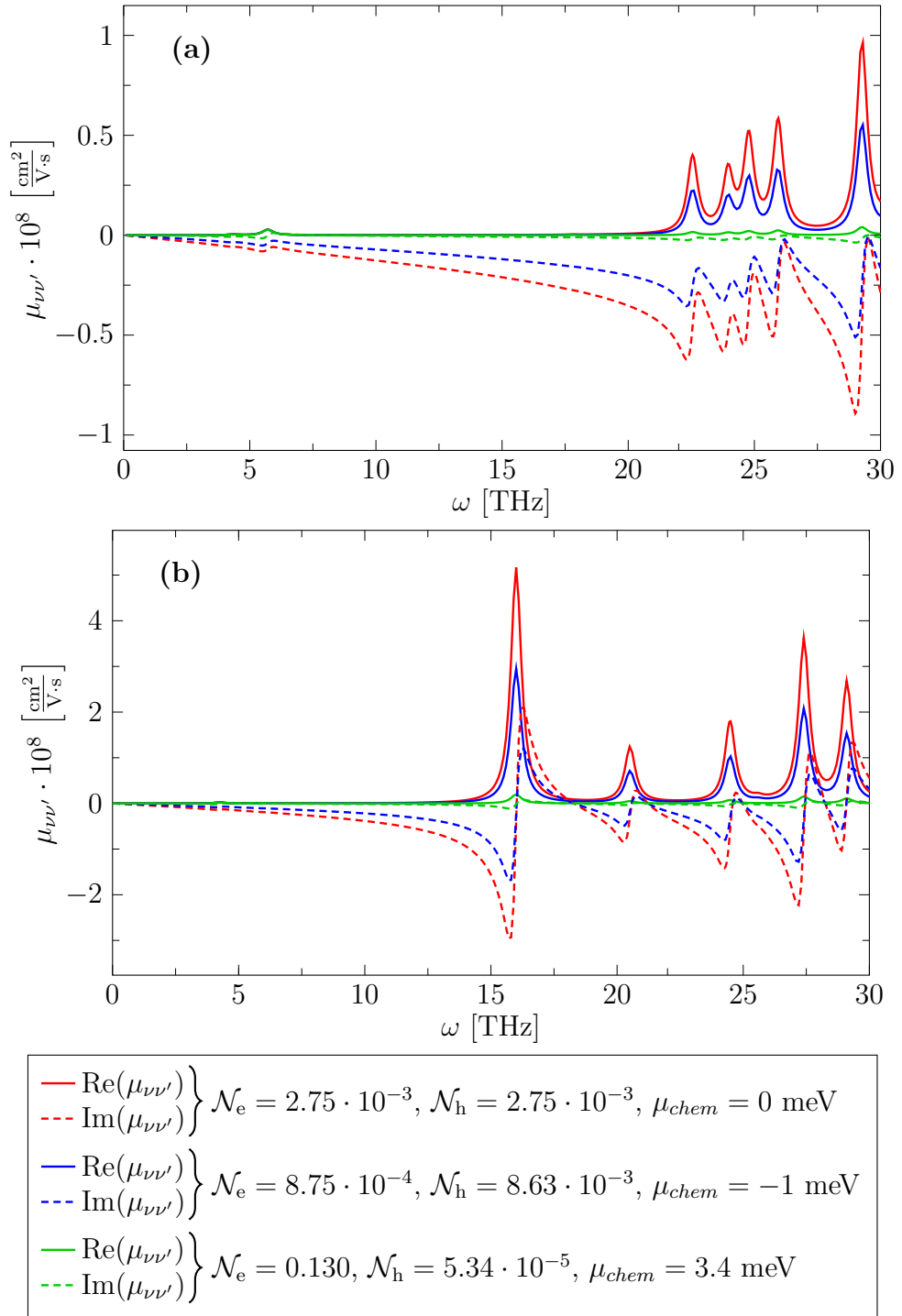
Obrázek 7.3: Závislost pohyblivosti  $\mu_{\nu\nu'}$  na teplotě nanokrystalu  $T$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry  $a = b = 250$  nm,  $\mathcal{N}_e = 30$ ,  $\mathcal{E}_0 = -0.1$  eV,  $\gamma = 0.25$  THz a  $v_f = 10^6$  m.s. (a):  $\nu = \nu' = x$ . (b):  $\nu = \nu' = y$ .



Obrázek 7.4: Závislost pohyblivosti  $\mu_{\nu\nu'}$  na počtu elektronů  $\mathcal{N}_e$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry  $a = b = 250 \text{ nm}$ ,  $T = 10 \text{ K}$ ,  $\mathcal{E}_0 = -0.1 \text{ eV}$ ,  $v_f = 10^6 \text{ m}\cdot\text{s}$ . (a):  $\nu = \nu' = x$ . (b):  $\nu = \nu' = y$ .



Obrázek 7.5: Závislost pohyblivosti  $\mu_{\nu\nu'}$  na počtu děr  $\mathcal{N}_h$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry  $a = b = 250 \text{ nm}$ ,  $T = 10 \text{ K}$ ,  $\mathcal{E}_0 = -0.1 \text{ eV}$ ,  $v_f = 10^6 \text{ m}\cdot\text{s}$ . (a):  $\nu = \nu' = x$ . (b):  $\nu = \nu' = y$ .



Obrázek 7.6: Závislost pohyblivosti  $\mu_{\nu\nu'}$  na počtu elektronů  $\mathcal{N}_e$ . Grafy jsou vynešeny pro parametry  $a = b = 250 \text{ nm}$ ,  $T = 10 \text{ K}$ ,  $\mathcal{E}_0 = -0.2 \text{ eV}$  a  $v_f = 10^6 \text{ m.s.}$  (a):  $\nu = \nu' = x$ . (b):  $\nu = \nu' = y$ .

# Závěr

V naší práci jsme úspěšně našli vlastní stavy popisující Diracovy elektrony v bodech  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$  pro konečný nanokrystal grafenu s armchair a zigzag okraji.

Pro elektrony v těchto bodech jsme poté v dipólové aproximaci odvodili interakční hamiltonián pro interakci s elektromagnetickým zářením v kalibraci  $\Phi = 0$ . Vedle toho jsme zavedli alternativní popis v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$ , pro který jsme převzali hamiltonián z článku [1]. Pro tyto dvě kalibrace jsme vypočítali výběrová pravidla pro dipólové přechody a úspěšně jsme ověřili, že dávají stejné výsledky.

Následně jsme podle článku [1] odvodili v prvním řádu poruchové teorie vztah pro evoluci matice hustoty, jenž jsme poté využili při výpočtu příspěvku středního a difuzního proudu do tenzoru vodivosti. V kalibraci  $\mathbf{A} = 0$  se nám tak podařilo ukázat, že tenzor vodivosti musí být diagonální, což je v souladu s očekávanou symetrií nanokrystalu. Zatímco pro kalibraci  $\Phi = 0$  jsme narazili na problém při výpočtu střední hodnoty operátoru proudu. Pro operátor proudu na stavech v bodech  $\mathbf{K}$  a  $\mathbf{K}'$  jsme totiž našli předpis

$$\hat{\mathbf{J}} = -\frac{e}{4ab} \left[ \hat{v}_x \mathbf{e}_x + \hat{v}_y \mathbf{e}_y + \frac{e}{m_e} \mathbf{A} \right],$$

kde se ovšem na pravé straně v závorce nachází člen  $e\mathbf{A}/m_e$ , který kvůli nulové efektivní hmotnosti Diracových elektronů diverguje. Pro tento člen se nám nepodařilo najít alternativní metoda výpočtu, která by byla nezávislá na hmotnosti, takže otázka vodivosti v kalibraci  $\Phi = 0$  zůstala otevřená.

Na konci práce jsme získané vztahy pro vodivost v kalibraci  $\mathbf{A} = 0$  numericky zpracovali a vynesli jsme je jako závislost pohyblivosti  $\nu$  nosičů náboje na frekvenci  $\omega$  budícího pole. V grafech jsme ověřili, že ve stejnosměrné limitě  $\omega \rightarrow 0$ , je vodivost nulová.

# Seznam použité literatury

- [1] T. Ostatnický, V. Pushkarev, H. Němec, and P. Kužel. Quantum theory of terahertz conductivity of semiconductor nanostructures. *Physical review. B*, 97(8), 2018.
- [2] D. Spitzkopf. Terahertzová vodivost Diracových elektronů. Praha, 2020. Bakalářská práce. Univerzita Karlova. Matematicko-fyzikální fakulta. Katedra chemické fyziky a optiky.
- [3] R. R. Hartmann and M. E. Portnoi. Optoelectronic Properties of Carbon-based Nanostructures: Steering electrons in graphene by electromagnetic fields. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing, 2011. ISBN 978-3844328585.
- [4] A. H. Castro Neto, F Guinea, N. M. R Peres, K. S Novoselov, and A. K Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81(1):109–162, 2009.
- [5] T. Low and P. Avouris. Graphene Plasmonics for Terahertz to Mid-Infrared Applications. *ACS nano*, 8(2):1086–1101, 2014.
- [6] L. Brey and H. A. Fertig. Electronic States of Graphene Nanoribbons. *Physical review. B*, 73, 2006.
- [7] T. Ostatnický, V. Pushkarev, H. Němec, and P. Kužel. Quantum theory of terahertz conductivity of semiconductor nanostructures: Supplementary material. *Physical review. B*, 97(8), 2018.
- [8] Korekce  $\omega \rightarrow \omega \mp i\gamma$  v rovnici (3.6) zavedena na pokyn instrukce školitele, protože pak kalibrace  $\Phi = 0$  dává stejné výsledky jako kalibrace  $\mathbf{A} = 0$ . Důvod korekce kalibrace  $\Phi = 0$  je ten, že máme otevřený systém, ze kterého disipuje energie, a proto není možné napsat celý lagrangián a kanonicky z něj odvodit požadovaný vztah pro kanonickou hybnost. Pro  $\mathbf{A} = 0$  je naopak celý hamiltonián dobře definovaný i pro otevřený systém, takže ten korigovat nemusíme a naopak slouží jako referenční kalibrace při  $\mathbf{Q} = 0$ .

# Seznam obrázků

1.1	(a) Hexagonální mříž grafenu složená ze dvou proložených trojúhelníkových podmříží $A$ (červené body) a $B$ (modré body) s mřížovými vektory $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ . (b) 1. Brillouinova zóna reciproké mříže grafenu složená ze dvou neekvivalentních trojic Diracových bodů $\mathbf{K}$ a $\mathbf{K}'$ . . . . .	3
1.2	Obdélníkový nanokrystal s armchair okraji ve směru osy $x$ a zigzag okraji ve směru osy $y$ . . . . .	5
7.1	Závislost pohyblivosti $\mu_{\nu\nu'}$ na rozměrech nanokrystalu $a, b$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry $T = 10$ K, $\mathcal{N}_e = 30$ , $\mathcal{E}_0 = -0.1$ eV, $\gamma = 0.25$ THz a $v_f = 10^6$ m·s. (a): $\nu = \nu' = x$ . (b): $\nu = \nu' = y$ . . . . .	38
7.2	Závislost pohyblivosti $\mu_{\nu\nu'}$ na tlumícím koeficientu $\gamma$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry $a = b = 250$ nm, $T = 10$ K, $\mathcal{N}_e = 30$ , $\mathcal{N}_h = 1.04 \cdot 10^{-13}$ , $\mu_{chem} = 20.7$ meV, $\mathcal{E}_0 = -0.1$ eV, $v_f = 10^6$ m·s. (a): $\nu = \nu' = x$ . (b): $\nu = \nu' = y$ . . . . .	39
7.3	Závislost pohyblivosti $\mu_{\nu\nu'}$ na teplotě nanokrystalu $T$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry $a = b = 250$ nm, $\mathcal{N}_e = 30$ , $\mathcal{E}_0 = -0.1$ eV, $\gamma = 0.25$ THz a $v_f = 10^6$ m·s. (a): $\nu = \nu' = x$ . (b): $\nu = \nu' = y$ . . . . .	39
7.4	Závislost pohyblivosti $\mu_{\nu\nu'}$ na počtu elektronů $\mathcal{N}_e$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry $a = b = 250$ nm, $T = 10$ K, $\mathcal{E}_0 = -0.1$ eV, $v_f = 10^6$ m·s. (a): $\nu = \nu' = x$ . (b): $\nu = \nu' = y$ . . . . .	40
7.5	Závislost pohyblivosti $\mu_{\nu\nu'}$ na počtu děr $\mathcal{N}_h$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry $a = b = 250$ nm, $T = 10$ K, $\mathcal{E}_0 = -0.1$ eV, $v_f = 10^6$ m·s. (a): $\nu = \nu' = x$ . (b): $\nu = \nu' = y$ . . . . .	40
7.6	Závislost pohyblivosti $\mu_{\nu\nu'}$ na počtu elektronů $\mathcal{N}_e$ . Grafy jsou vyneseny pro parametry $a = b = 250$ nm, $T = 10$ K, $\mathcal{E}_0 = -0.2$ eV a $v_f = 10^6$ m·s. (a): $\nu = \nu' = x$ . (b): $\nu = \nu' = y$ . . . . .	41