

A) Mottov prechod (odpudive' Coulombovske interakcije)

najjednoduchši model: Hubbard

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

min
cest najbl.
miedov

kinetická energia

Coulombove interakcie

1. limita $U=0$ (neinteragujúci systém)

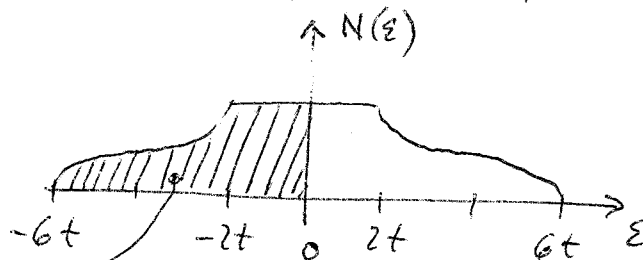
definujeme $c_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ik \cdot R} c_{R\sigma}$

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}$$

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

systém volných elektrónov s disperziou ϵ_k

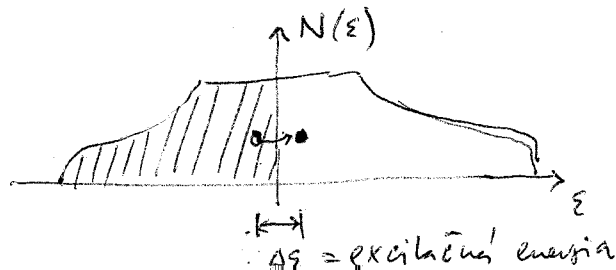
$$\epsilon_k \in (-6t, 6t)$$



ak počet elektrónov = počet miest. bodov
podľa toho sa v obrádku

preto $\epsilon_k = 0$: Fermiho hladina $\rightarrow$ ten!
($v \cdot k$ -priečna)

existujú v ňom lattice excitácie:



2. limita $t = 0$ (atohová limita)

každý bod může být užítý
na 1 bodě může být 4 možnosti:

$$|0\rangle = \text{vákuum} \rightarrow \varepsilon = 0 \quad (\text{holon})$$

$$\underbrace{c_{R\uparrow}^+ |0\rangle, c_{R\downarrow}^+ |0\rangle}_{\text{jednotlivice}} \rightarrow \varepsilon = 0$$

jednotlivice

$$\underbrace{c_{R\uparrow}^+ c_{R\downarrow}^+ |0\rangle}_{\text{plně obsazený bod může být}} \rightarrow \varepsilon = U \quad (\text{dublón})$$

pro poloviční obsazenou fázi (= 1 el / bod může být)

existuje 2^N řádů stavů s energií $= 0$

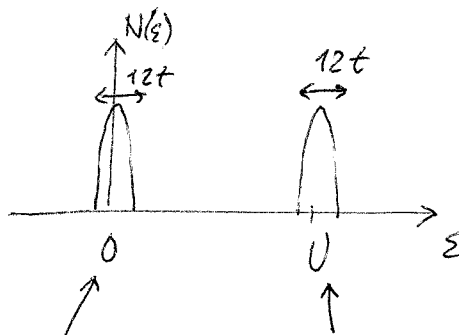
na každém bodě může být 1 elektron, spin = $\uparrow$ nebo $\downarrow$

1. excitovaný stav: tohle, ale na 1 bodě může být 0 elektronů
a na nějakém jiném 2 elektrony
energie U

Ak systému dodáme energii $< U$, nevyhnutně nastojí
excitací $\rightarrow$ izolant

3. koněné t, U

ak $t \ll U$: očkávání



↖ dolní Hubbardova pás

↖ horní Hubbardova pás

diagram v poloviční zaplněné fázi

kin. energie $\in \langle -6t, 6t \rangle$

↖ dvojzátvorné obsazený stav

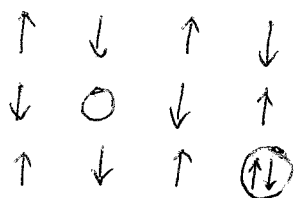
energie $\in \langle U-6t, U+6t \rangle$

(pro feromagnetické uspořádání
spinů!)

(opět pro feromagnetické
uspořádání spinů)

predvoj kv - izolant:

ked' na taci' napolnime kvant' jazy holon - dublon



... energije vici stavu s 1 el / bod miestky:

$$\sim U - 12t = \underbrace{-6t}_{\text{holon}} + \underbrace{U-6t}_{\text{dublon}}$$

predvoj ocekavame pri $U \sim 12t$

Alternativny odhad: tacivne s $t \gg U$.

kovovy' stav: $|FS\rangle = \left(\prod_{\mathbf{k} < 0} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$... Fermiho more

izolacny' stav: $|\psi\rangle = \left(\prod_R c_{R\uparrow}^\dagger c_{R\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$

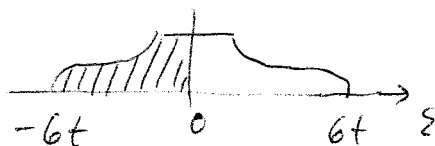
$$\langle FS | H | FS \rangle = \underbrace{2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}}_{\substack{\text{kin. energia} \\ \text{Fermiho more}}} + U \underbrace{\sum_R \langle n_{R\uparrow} \rangle \langle n_{R\downarrow} \rangle}_{\substack{\downarrow = \frac{1}{2} \quad \downarrow = \frac{1}{2}}} = \frac{N}{4} U$$

Na druhej strane:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = 0$$

Teda predvoj kv - izolant nadvahuje pre $\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} + \frac{U}{4} = 0$

zafornova' energija
vzhledu t



$$\rightarrow \boxed{U_c = + \frac{8}{N} \sum_{\mathbf{k}} |\varepsilon_{\mathbf{k}}| f_{\mathbf{k}}}$$

podobny' odhad ako pre $t \ll U$

4. magnetické usporiadanie iónovej fázy ($U \gg t$)

$$H_0 = U \sum_R n_{R\uparrow} n_{R\downarrow} \quad \dots \text{reformovaný hamiltonián}$$

2^N degenerovaný štát. stav

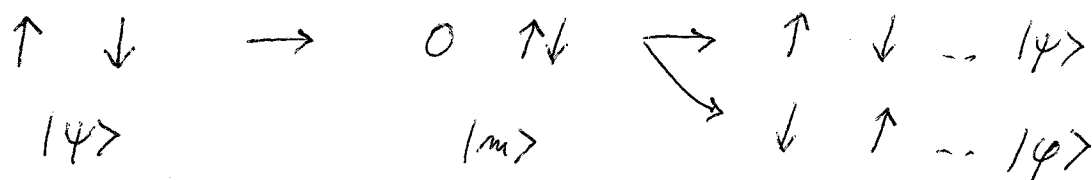
$$H' = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$$

$\rightarrow$ obl. funkcie $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$

v 1. ráde poruchovej teórie žiadne korekcie k energii,

lebo $\langle \varphi | H' | \psi \rangle = 0 \quad \forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle$

$\Rightarrow$ musíme počítať korekcie 2. rádu, tie závisia od energie štát. stavu:



Teda v 2. ráde poruchovej teórie

je energia závislá na konfigurácii s antiparalelnými spinmi

Pre paralelné spinny:

$$\uparrow \uparrow \rightarrow \cancel{0 \uparrow \uparrow} \quad \text{nenosné (Pauliho princíp)}$$

Práve energia je závislá na konfigurácii s antiparalelnými spinmi

Efektívny hamiltonián:

$$H_{\text{eff}} = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad \text{Heisenbergov model}$$

$\rightarrow$ pri nízkych T : antiferomagnetické usporiadanie !

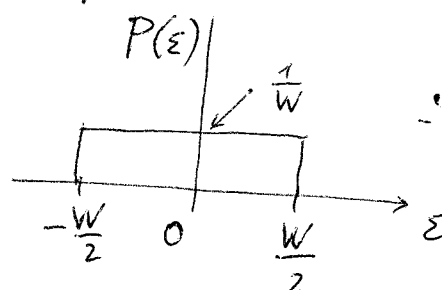
B) Andersonov prechod (neusporiadané systémy)

model: $H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) + \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i$

(vín ulhna' rohu)

$\varepsilon_i = \text{náhodná premenná}$

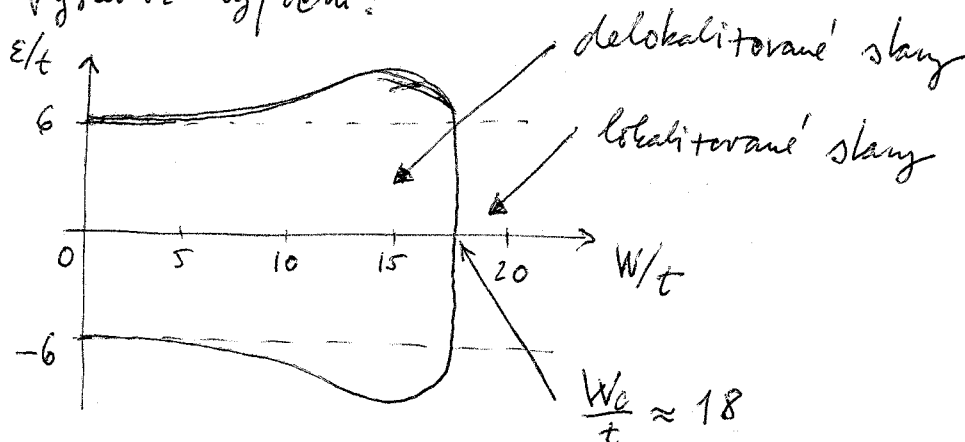
pravidlo podrobného rozloženia



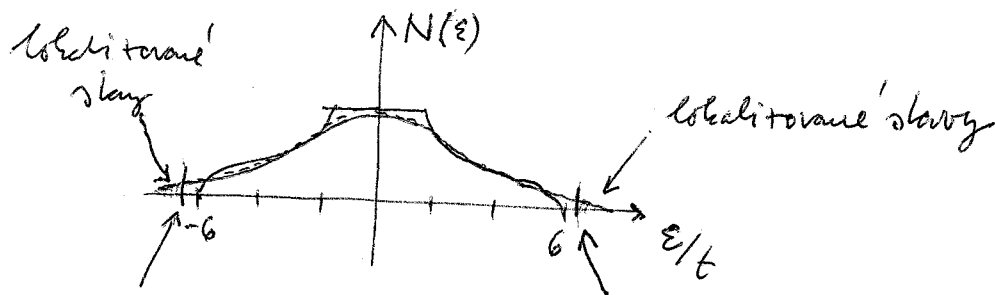
$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\varepsilon) d\varepsilon = 1$$

$\frac{W}{t} = \text{miera neusporiadanej metakidly}$

Výsledok výpočtu:



už podľa $W/t \sim 5$:



medza polystability $\rightarrow E_m$ medza polystability

pre $|\varepsilon| < E_m$ -- delokalizované stavy

$|\varepsilon| > E_m$ -- lokalizované stavy (podobne p'umerovým stavom v polovodičoch)

6

Medna polyblivost oddeljuje

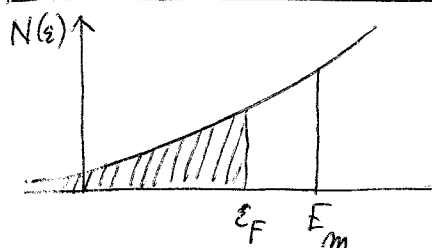
lokalizované stavy $\psi \propto e^{-1/\xi}$ ξ = lokalizačná dĺžka
od delokalizovaných stavov

pre $|\epsilon| > E_m$ sú všetky stavy lokalizované! (hypotéza, Mott)

pre $W > W_c$ sú všetky stavy v páske lokalizované (Anderson 1958)

C) Mechanizmy vodičov v lokalizovanom režime

1. aktivácia nad hranou polyblivosti



$\sigma \propto$ počet volných elektrónov

$$\int_{E_m}^{\infty} \frac{d\epsilon N(\epsilon)}{e^{\frac{\epsilon - \epsilon_F}{T}} + 1} \approx \int_{E_m}^{\infty} d\epsilon e^{\frac{\epsilon_F - \epsilon}{T}} N(\epsilon)$$

$$\boxed{\sigma \propto e^{-\frac{E_m - \epsilon_F}{T}}}$$

2. preskoku vodičov



elektrón to stavu $|i\rangle$ môže preskočiť do túlavého stavu $|f\rangle$ radikálneho radikálu $\approx \xi$; stav $|f\rangle$ však nemôže mať tú istú energiu ako $|i\rangle \Rightarrow$ nutné dodat excitačnú energiu Δ

$$\text{potom } \boxed{\sigma \propto e^{-\frac{\Delta_s}{T}}}$$

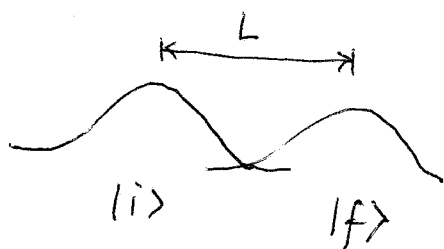
odhad Δ_s : v objeme ξ^3 existuje ΔN stavov v intervale $\Delta\epsilon$,

$$\frac{\Delta N}{\Delta\epsilon} \sim N(0) \xi^3$$

rozdiel
Preto energiu susedných hladín v energii je

$$\boxed{\Delta_s \sim \frac{1}{N(0) \xi^3}}$$

3. skokanie s premenlivou dlžkou (variable range hopping) VRH ⁷



Prisvajme skok s dlžkou $L > \xi$.

Potom $\sigma \propto \underbrace{e^{-\frac{2L}{\xi}}}_{\text{peknyv mechi } |i\rangle, |f\rangle}} e^{-\frac{\Delta_L}{T}}$

Optimalna dlžka skoku: minimum $\frac{2L}{\xi} + \frac{\Delta_L}{T} = \frac{2L}{\xi} + \frac{1}{N(0)L^3 T}$

$$L \sim \left(\frac{\xi}{N(0)T} \right)^{1/4}$$

$$\sigma \propto e^{-\left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4}}$$

kde $T_0 \sim \frac{1}{N(0)\xi^3}$

$$\frac{L}{\xi} \sim \frac{T_0}{T}$$

Teplotné režimy pre skokový hopping a VRH:

$$T < T_0 \rightarrow L > \xi \rightarrow \text{VRH: } \sigma \propto e^{-\left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4}}$$

$$T > T_0 \rightarrow L < \xi \rightarrow \text{skok. hopping: } \sigma \propto e^{-\frac{\Delta(\xi)}{T}}$$

Summary:

Typ izolantu	Podmienky spektra	Typ vodivosti
Prvý izolant (Si)	$\Delta > 0$	aktivný mech.
Ďalší izolant	$\Delta > 0$	aktivný mech.
Andermann izolant	$\Delta = 0$	— — + hopping + VRH

lebo $\Delta(L) = \frac{1}{N(0)L^3} \rightarrow 0$ pre $L \rightarrow \infty$