KUBOVA FORMULA

1. Operátory nábojovej a prúdovej hustoty

• lagranžián častice v EM poli: $L = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 + q \vec{A}\cdot\vec{v} - q\varphi$

[pretože $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \vec{v}}\right) = \frac{\partial L}{\partial \vec{r}}$ je ekvivalentné s $m\vec{a} = q(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})$

ak použijeme $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}$]

• zovšeobecnená hybnosť $\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + q\vec{A}$

• hamiltonián $H = \vec{p}\cdot\vec{v} - L = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\varphi$

• kanonické kvantovanie $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$

• Schrödingerova rovnica

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2 + q\varphi\right]\psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2 + q\varphi\right]\psi^*$$

• stredná hodnota nábojovej hustoty $\langle \rho(\vec{r})\rangle = q\, \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})$

$$\frac{\partial\langle\rho\rangle}{\partial t} = \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \xrightarrow[\text{rovnica}]{\text{Schrödingerova}} = -\vec{\nabla}\cdot\langle\vec{j}\rangle$$

$$\langle\vec{j}\rangle = -\frac{i\hbar q}{2m}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) - \frac{q^2}{m}\vec{A}|\psi|^2$$ ... stredná hodnota prúdovej hustoty

• žiadame:

$$\left.\begin{aligned} \langle\rho(\vec{r})\rangle &= \int d^3x\, \psi^*(x)\, \hat{\rho}(\vec{r})\, \psi(x) \\ \langle\vec{j}(\vec{r})\rangle &= \int d^3x\, \psi^*(x)\, \hat{\vec{j}}(\vec{r})\, \psi(x) \end{aligned}\right\} (*)$$

• riešenie:

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\rho}(\vec{r}) &= q\,\delta(\vec{x}-\vec{r}) \\ \hat{\vec{j}}(\vec{r}) &= \underbrace{\frac{q}{2m}\left[\vec{p}\,\delta(\vec{x}-\vec{r}) + \delta(\vec{x}-\vec{r})\,\vec{p}\right]}_{\equiv\, \vec{J}(\vec{r})\ \text{(mechanický prúd)}} - \underbrace{\frac{q^2}{m}\vec{A}(\vec{x})\,\delta(\vec{x}-\vec{r})}_{\vec{J}_{dia}(\vec{r})\ \text{(diamagnetický prúd)}} \end{aligned}}$$

dôkaz: dosadenie do (*) + integrácia per partes

2. Kvantovomechanická úloha – mnoho častíc

hamiltonián
$$H = \underbrace{H_0}_{\text{hamiltonián bez aplikovaného poľa}} \underbrace{- \frac{1}{2}\sum_i \frac{q_i}{m_i}\left(\vec{p}_i\cdot\vec{A}_i + \vec{A}_i\cdot\vec{p}_i\right)}_{V(t)} + \frac{1}{2}\sum_i \Big(\underbrace{\frac{q_i^2\vec{A}_i^2}{m_i}}_{\text{zanedbať (lineárna odozva)}} + \underbrace{q_i\varphi_i}_{=0 \text{ (kalibrácia } \varphi=0)}\Big)$$

Predpoklad:
$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\left(\vec{A}_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}-i\omega t} + \vec{A}_{-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}+i\omega t}\right); \quad \vec{A}_{-q} = \vec{A}_q^{\,*}$$

Fourierove transformácie:
(podobne pre ostatné veličiny)
$$\vec{j}_q = \int d^3r\, \vec{j}(r)\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$
$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_q \vec{j}_q\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i q_i\,\delta(r-r_i)$$
$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\sum_i \frac{q_i}{m_i}\left[\vec{p}_i\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_i) + \delta(\vec{r}-\vec{r}_i)\,\vec{p}_i\right] - \sum_i \frac{q_i^2}{m_i}\vec{A}_i\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_i)$$

$$\rho_q = \sum_i q_i\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$$
$$\vec{J}_q = \frac{1}{2}\sum_i \frac{q_i}{m_i}\left[\vec{p}_i\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}\,\vec{p}_i\right]$$
$$\vec{J}_q^{\,dia} = -\sum_i \frac{q_i^2}{m_i}\vec{A}_i\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$$

Potom
$$\boxed{\begin{aligned} V(t) &= F e^{-i\omega t} + F^{\dagger} e^{i\omega t} \\ F &= -\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\vec{A}_q\cdot\vec{J}_{-q} \qquad F^{\dagger} = -\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\vec{A}_{-q}\cdot\vec{J}_q \end{aligned}}$$

Úloha: máme počítať stredné hodnoty $\langle \vec{J}_q\rangle + \langle \vec{J}_q^{\,dia}\rangle$
do prvého rádu v aplikovanom poli $\vec{A}$

3. Riešenie QM úlohy

• diamagnetický prúd: operátor je úmerný $\vec{A}$ → stačí počítať stredné hodnoty, rešime s hamiltoniánom $H = H_0$

$$\langle \vec{J}_q^{dia} \rangle = -\sum_i \left\langle \frac{q_i^2}{m_i} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \frac{1}{\Omega} \left(\vec{A}_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i - i\omega t} + \vec{A}_{-q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i + i\omega t} \right) \right\rangle_0$$

$$= -\frac{1}{\Omega} \sum_i \frac{q_i^2}{m_i} \left(\vec{A}_q e^{-i\omega t} + \vec{A}_{-q} e^{i\omega t} \langle e^{-2i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \rangle_0 \right)$$

uvažujme odteraz pre jednoduchosť iba elektróny, $q_i = e$, $m_i = m$

$$\langle \vec{J}_q^{dia} \rangle = -\frac{e^2}{m}\frac{1}{\Omega} \sum_i \left(\vec{A}_q e^{-i\omega t} + \vec{A}_{-q} e^{i\omega t} \underbrace{\left\langle \frac{\rho_{2q}}{e} \right\rangle}_{=0 \text{ pre } 2q \neq K} \right)$$

$$\boxed{\langle \vec{J}_q^{dia} \rangle = -\frac{n e^2}{m} \vec{A}_q e^{-i\omega t}}$$

• mechanický prúd: ak vezmeme $H = H_0$ → $\langle \vec{J}_q \rangle = 0$

treba počítať korekcie k vlnovej funkcii 1. rádu v $V(t)$

výsledok časovo závislej poruchovej teórie:

$$\langle \vec{J}_q \rangle = -\frac{1}{\hbar} \sum_{m \neq n} (\rho_n - \rho_m) \left[\frac{\langle n|\vec{J}_q|m\rangle\langle m|F|n\rangle e^{-i\omega t}}{\omega_{mn} - (\omega + i0)} + \cancel{\frac{\langle n|\vec{J}_q|m\rangle\langle m|F^+|n\rangle}{\omega_{mn} + (\omega + i0)} e^{i\omega t}} \right]$$

↳ úmerné $\langle n|\vec{J}_q|m\rangle\langle m|\vec{J}_q|n\rangle = 0$ (viď cvičenia)

$|n\rangle$ = vl. stav H_0 s energiou E_n

Preto

$$\boxed{\langle J_{q\alpha} \rangle = \Lambda_{\alpha\beta}(\vec{q},\omega) A_{q\beta} e^{-i\omega t}}$$

$$\rho_n = \frac{1}{Z} e^{-E_n/T}$$

$$\boxed{\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{q},\omega) = \frac{1}{\hbar\Omega} \sum_{m \neq n} \frac{\rho_n - \rho_m}{\omega_{mn} - (\omega + i0)} \langle n|J_{q\alpha}|m\rangle\langle m|J_{-q\beta}|n\rangle}$$

celkový prúd $\langle j_{q\alpha}\rangle = \langle J_{q\alpha}\rangle + \langle J_{q\alpha}^{dia}\rangle$ adiabatické zapínanie poruchy

$$E_{q\beta} = i\omega A_{q\beta}\, e^{-i\omega t + 0t}\,; \text{ definujme } \langle j_{q\alpha}\rangle = \sigma_{\alpha\beta}(q,\omega) E_{q\beta}$$

Potom $$\boxed{\sigma_{\alpha\beta}(q,\omega) = \frac{i}{\omega + i0}\left[\frac{ne^2}{m}\delta_{\alpha\beta} - \Lambda_{\alpha\beta}(q,\omega)\right]}$$ Kubova formula

4. <u>Špeciálny prípad: optické frekvencie, izotropný systém</u>

$$q = \frac{2\pi}{\lambda}\,,\ \lambda \sim 100\,\mathrm{nm} \ \rightarrow\ q \approx 0$$

izotropný systém: $\sigma_{\alpha\beta}, \Lambda_{\alpha\beta} \propto \delta_{\alpha\beta}$. Definujme: $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma\,\delta_{\alpha\beta}$

$\Lambda_{\alpha\beta} = \Lambda\,\delta_{\alpha\beta}$

Potom $$\boxed{\sigma(\omega) = \frac{i}{\omega + i0}\left[\frac{ne^2}{m} - \Lambda(\omega)\right]} \quad (*)$$

$$\Lambda(\omega) = \Lambda_{xx}(0,\omega) = \Lambda_{yy}(0,\omega) = \frac{1}{3}\sum_\alpha \Lambda_{\alpha\alpha}(0,\omega)$$

Preto
$$\boxed{\Lambda(\omega) = \frac{e^2}{3m^2}\frac{1}{\Omega}\sum_{m\neq n}\frac{p_n - p_m}{E_m - E_n - (\hbar\omega + i0)}\underbrace{\langle n|\vec{P}|m\rangle\cdot\langle m|\vec{P}|n\rangle}_{\text{označme } |\vec{P}_{mn}|^2}} \quad (**)$$

(Pretože $\vec{J}_{q=0} = \frac{e}{m}\vec{P}$) $\vec{P}$ → celková hybnosť

Lemma: $$\boxed{\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{x + i\delta} = \lim_{\delta\to 0}\left(\frac{x}{x^2+\delta^2} - i\frac{\delta}{x^2+\delta^2}\right) = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x)}$$

Potom z rovnice (*) máme $\sigma = \sigma' + i\sigma''$

$$\boxed{\begin{aligned}\sigma'(\omega) &= \pi\left(\frac{ne^2}{m} - \Lambda'(0)\right)\delta(\omega) + \frac{1}{\omega}\Lambda''(\omega)\\ \sigma''(\omega) &= \frac{1}{\omega}\left(\frac{ne^2}{m} - \Lambda'(\omega)\right)\end{aligned}}$$

prítomné len pre ideálny vodič bez rozptylov

Nech $E(t) = E_0 \cos\omega t$. Potom $j = j_1 \cos\omega t + j_2 \sin\omega t$

$j_1 \propto \sigma'$, $j_2 \propto \sigma''$

Stredné straty: $\langle j \cdot E \rangle = j_1 E_0 \langle \cos^2\omega t \rangle + j_2 E_0 \underbrace{\langle \cos\omega t \sin\omega t \rangle}_{=0} \propto \sigma'$

$\rightarrow \sigma'$ meria straty v systéme.

$$\boxed{\Lambda''(\omega) = \frac{\pi e^2}{3m^2} \frac{1}{\Omega} \sum_{m \neq n} (\rho_n - \rho_m) |\vec{P}_{mn}|^2 \underbrace{\delta(E_m - E_n - \hbar\omega)}}$$

zákon zachovania energie pri emisii/absorbcii fotónu

Reálne vodiče: $\boxed{\sigma'(\omega) = \frac{1}{\omega} \Lambda''(\omega)}$

5. Niekoľko exaktných výsledkov

- dokonale translačne invariantný systém: $\hat{\vec{P}} |n\rangle = \vec{P}_n |n\rangle$ — vlastný stav operátora $\vec{P}$

Potom + rovnice (**), str. 4 máme $\Lambda(\omega) = 0$

$$\rightarrow \boxed{\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \left[\pi \delta(\omega) + \frac{i}{\omega} \right]}$$ vodivosť neinteragujúceho systému

- sumačné pravidlo pre vodivosť

$$j(t) = \int_0^\infty d\tau\, \sigma(\tau) E(t-\tau)$$

pulz v čase $t=0$: $E(t) = E_0 \tau_0 \delta(t) \Rightarrow j(t) = \sigma(t) \tau_0 E_0$

Pre malé časy sa elektróny nestihnú rozptýliť

$\Rightarrow \sigma(t=0^+) =$ vodivosť neinteragujúceho systému

$$\sigma(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega) e^{-i\omega t} \rightarrow \sigma(0^+) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega)$$

$\Rightarrow \sigma(0^+) = \frac{1}{2} \frac{ne^2}{m}$ pre neinteragujúci systém

využime $\sigma'(\omega) = \sigma'(-\omega)$, $\sigma''(\omega) = -\sigma''(-\omega)$ $\xrightarrow{\text{sumačné pravidlo}}$ $\boxed{\int_0^\infty d\omega\, \sigma'(\omega) = \frac{\pi}{2} \frac{ne^2}{m}}$

- <u>asymptotika $\varepsilon_R(\omega)$ pre $\omega \to \infty$</u>

$$\varepsilon_R'(\omega) = 1 - \frac{\sigma''}{\varepsilon_0 \omega} = 1 - \frac{1}{\varepsilon_0 \omega^2}\left(\frac{ne^2}{m} - \Lambda'(\omega)\right) \quad \text{(viď str. 4)}$$

$\Lambda'(\omega) \to 0$ pre $\omega \to \infty$. Preto $\boxed{\varepsilon_R'(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$ pre $\omega \to \infty$

(exaktné tvrdenie)

- <u>Poznámka</u>: formula $\sigma(\omega) = \dfrac{ne^2\tau}{m(1-i\omega\tau)}$ spĺňa:
  1. Kramers-Kronig
  2. sumačné pravidlo $\int_0^\infty d\omega\, \sigma'(\omega)$
  3. asymptotika $\omega \to \infty$

$$\Updownarrow$$

$$\varepsilon_R = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + \frac{i}{\tau})}$$