



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ  
FAKULTA**  
Univerzita Karlova

**BAKALÁŘSKÁ PRÁCE**

Josef Kadlec

**Lineární terahertzová spektroskopie  
polovodičových nanostruktur**

Katedra chemické fyziky a optiky

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

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2018

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

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 ..... dne .....

Podpis autora

Děkuji doc. RNDr. Tomáši Ostatnickému, Ph.D. za vedení práce a cenné rady.

Název práce: Lineární terahertzová spektroskopie polovodičových nanostruktur

Autor: Josef Kadlec

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

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

Abstrakt: V této práci je využito kvantového modelu elektronové vodivosti polovodičových nanostruktur zavedeného v [4]. Vodivost je vypočtena v prvním řádu poruchového počtu s přidáním termalizačního proudu. Hlavní část této práce je věnována výpočtu vodivosti krystalu tvaru plné nebo duté koule za použití zmíněného modelu. Vypočteného vzorce je dále využito k numerickému výpočtu vodivostního spektra GaAs v terahertzové oblasti, které je pak graficky znázorněno.

Klíčová slova: terahertzová spektroskopie, vodivost polovodičů, nanostruktury

Title: Linear terahertz spectroscopy of semiconductor nanostructures

Author: Josef Kadlec

Department: Department of Chemical Physics and Optics

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

Abstract: In this thesis there is used quantum model of electron conductivity of semiconductor nanostructures introduced in [4]. Conductivity is calculated in first order perturbation theory with addition of thermalization current. Main focus of this thesis is concerned on calculation of conductivity of crystal shaped full or hollow sphere with use of above mentioned model. Calculated equation is then used for numerical calculation of conductivity spectra of GaAs in terahertz region, that is then graphically visualised.

Keywords: terahertz spectroscopy, semiconductor conductivity, nanostructures

# Obsah

Úvod	2
<b>1 Výpočet vodivosti</b>	<b>3</b>
1.1 Výchozí problém a rovnice . . . . .	3
1.2 Koherentní člen . . . . .	4
1.3 Difúzní rovnice . . . . .	5
1.4 Řešení Schrödingerovy rovnice . . . . .	6
1.5 Termální proud . . . . .	9
1.6 Nekoherentní člen . . . . .	11
1.7 Výsledná vodivost . . . . .	12
<b>2 Numerické výpočty</b>	<b>14</b>
Závěr	18
Seznam použité literatury	19
<b>A Přílohy</b>	<b>20</b>
A.1 Limita nulové frekvence . . . . .	20
A.2 Výpočet (1.67) . . . . .	21

# Úvod

Máme-li polovodičový krystal a chceme znát lineární odezvu na elektromagnetické záření je především důležitá velikost krystalu.

Pokud by se jednalo o objemový materiál, použije se klasického Drudeho vzorečku:  $\sigma(\omega) = \sigma_0/(1 + \omega^2\tau^2)$ , který má maximum při nulové frekvenci a lorentzovsky klesá pro vyšší frekvence.

Pro materiály, jejichž vodivostní spektrum ukazuje minimum při nulové frekvenci a maximum v terahertzové oblasti byl vytvořen model [1], který toto splňuje a zobecňuje tak klasický Drudeho vzoreček pro optické frekvence.

Pokud by nás zajímala vodivost pro mikrokrystaly, lze využít semiklasického postupu [2].

Ovšem pro nanokrystaly v terahertzové oblasti je třeba použít plně kvantové teorie. Na elektron vodivostního pásu v nanokrystalu můžeme pohlížet jako na částici v potenciálové jámě, kde energie přechodů mezi hladinami je v terahertzové spektrální oblasti. Kvantová Kubova rovnice podle [3] s tímto počítá, má ovšem tu chybu, že pro nulové frekvence má nenulovou vodivost, což je nefyzikální, protože ve stacionární případě nulové frekvence nemá téct žádný proud. Z toho důvodu je podle této rovnice nepřesně celá nízkofrekvenční oblast. Tato nepřesnost se řeší ve článku [4] přidáním termalizačního proudu, který způsobí, že se oba proudy při nulové frekvenci odečtou a zpřesňuje tak nízkofrekvenční vodivost. V tomto článku je zaveden vzorec pro vodivost, který je nezávislý na geometrii krystalu. Zde bude vypočteno vodivostní spektrum pro krystal tvaru koule nebo duté koule.

# 1. Výpočet vodivosti

## 1.1 Výchozí problém a rovnice

Cílem této práce je výpočet vodivosti kulového polovodičového nanokrystalu pro elektromagnetické záření v terahertzové spektrální oblasti.

Mějme krystal kulového tvaru. Krystal si aproximujeme sféricky symetrickou potenciálovou jámou ve které se pohybují elektrony vodivostního pásu  $V(r) = 0$  pro  $r \in (r_1, r_2)$  a  $V(r) = \infty$  pro  $r \notin (r_1, r_2)$ . Kde  $r_1$  je vnitřní poloměr  $r_1 \in [0, r_2)$  a  $r_2$  je vnější poloměr. Pro hamiltonián s tímto potenciálem vyřešíme jednočásticovou Schrödingerovou rovnici a za použití Fermi-Diracova rozdělení dostaneme stacionární matici hustoty  $\rho_0$  (1.1).

Elektromagnetické záření s elektrickou složkou ve směru  $z$  aproximujeme elektrickou intenzitou s časovou závislostí  $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$ .

V prvním řádu poruchového počtu vyřešíme a dostaneme porušenou matici hustoty  $\rho_C(t)$ , které odpovídá koherentní proud a z toho plynoucí koherentní vodivost  $\sigma_{coh}(\omega)$ .

Limita nulové frekvence dává v tomto případě nenulovou vodivost, což je nefyzikální, protože ve stacionárním případě nemůže téct žádný proud. Byl proto přidán člen  $n_I$ , který vede k termalizačnímu proudu, který vrací matici hustoty zpět k rovnovážnému stavu. Termalizační proud dává nekoherentní vodivost  $\sigma_{incoh}$ .

Termalizační člen  $n_I$  je dán difúzní rovnicí (1.3) s difúzní konstantou danou Einsteinovou rovnicí  $D = k_b T / (m\gamma)$ , kde  $k_b$  je Boltzmannova konstanta,  $T$  je absolutní teplota,  $m$  je efektivní hmotnost a  $\gamma$  je převrácená střední doby mezi srážkami.

Celkově je tedy elektron v rovnovážném stavu excitován fotonem. Dále se koherentně vyvíjí podle Schrödingerovy rovnice, než je nekoherentním rozptylem posunut zpátky k rovnovážnému stavu.

Číselně bude výpočet proveden pro GaAs s efektivní hmotností  $m = 0.067m_e$ , kde  $m_e$  je hmotnost elektronu a  $\gamma = (1/270) \text{fs}^{-1}$ .

Podle článku [4] je sada pohybových rovnic<sup>1</sup>:

$$\frac{d}{dt}\rho_0 = 0, \rho_0 = \sum_k |k\rangle f_k \langle k| \quad (1.1)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_C = -\frac{i}{\hbar} [H', \rho_0] - \frac{i}{\hbar} [H_0, \rho_C] - \gamma \rho_C \quad (1.2)$$

$$\frac{d}{dt}n_I = \gamma \sum_{k,l} \langle \mathbf{r} | k \rangle \rho_{Ckl} \langle l | \mathbf{r} \rangle + D \nabla^2 n_I \quad (1.3)$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

$$H' = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (1.5)$$

<sup>1</sup>Pro slhnutí normy PDF/A zde  $h$  značí redukovanou Planckovu konstantu

a vodivostní tenzor:

$$\sigma = \frac{e}{\mathcal{V}E} \left[ \frac{\text{Tr } p_z \rho_C}{m} - D \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial n_I}{\partial z} d^3 \mathbf{r} \right] \quad (1.6)$$

kde Tr značí stopu. První člen je koherentní a druhý nekoherentní. Výpočet bude rozdělen do několika kroků. Nejprve bude spočten člen koherentní.

## 1.2 Koherentní člen

Přistupme nejprve k řešení rovnice (1.2), kterou si vyjádříme v bázi vlastních stavů neporušeného hamiltoniánu  $|k\rangle$ . Pro přehlednost půjdeme nejdřív člen po členu a vynecháme časovou závislost, kterou u všech členů předpokládáme úměrnou  $e^{-i\omega t}$ .

$$\langle k | \frac{d}{dt} \rho_C | k' \rangle = \langle k | -i\omega \rho_C | k' \rangle = -i\omega \langle k | \rho_C | k' \rangle \quad (1.7)$$

$$\begin{aligned} \langle k | \frac{-i}{h} (H' \rho_0 - \rho_0 H') | k' \rangle &= \\ &= \langle k | \frac{-i}{h} \left( -ezE_0 \sum_l |l\rangle f_l \langle l| - \sum_l |l\rangle f_l \langle l| (-e)zE_0 \right) | k' \rangle = \\ &= \frac{ieE_0}{h} \langle k | z f_{k'} - f_k z | k' \rangle = \frac{-ieE_0 f_{kk'} z_{kk'}}{h} \langle k | z | k' \rangle = \frac{-ieE_0 f_{kk'} z_{kk'}}{h} \end{aligned} \quad (1.8)$$

$$\langle k | \frac{-i}{h} (H_0 \rho_C - \rho_C H_0) | k' \rangle = \frac{-i}{h} \langle k | E_k \rho_C - \rho_C E_{k'} | k' \rangle = -i\omega_{kk'} \langle k | \rho_C | k' \rangle \quad (1.9)$$

kde se použilo  $f_{kk'} = f_k - f_{k'}$  a  $\omega_{kk'} = \omega_k - \omega_{k'} = \frac{E_k - E_{k'}}{h}$ , kde  $E_k$  je energie stavu  $|k\rangle$ .

Dosazením výše odvozených rovnic do rovnice (1.2) dostáváme:

$$\begin{aligned} -i\omega \langle k | \rho_C | k' \rangle &= \frac{-ieE_0 f_{kk'} z_{kk'}}{h} - i\omega_{kk'} \langle k | \rho_C | k' \rangle - \gamma \langle k | \rho_C | k' \rangle \\ (\omega - \omega_{kk'} + i\gamma) \langle k | \rho_C | k' \rangle &= \frac{eE_0 f_{kk'} z_{kk'}}{h} \\ \langle k | \rho_C | k' \rangle &= \frac{eE_0}{h} \frac{f_{kk'} z_{kk'}}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Vyjádřili jsme tedy porušenou matici hustoty v bázi vlastních stavů neporušeného hamiltoniánu. Upravme si nyní koherentní vodivostní člen v (1.6):

$$\sigma_{coh} = \frac{e}{\mathcal{V}E_0 m} \sum_k \langle k | p_z \rho_C | k \rangle = \frac{e}{\mathcal{V}E_0 m} \sum_{k,k'} \langle k | p_z | k' \rangle \langle k' | \rho_C | k \rangle. \quad (1.11)$$

Nyní se pokusíme vyjádřit maticový element operátoru hybnosti pomocí maticového elementu operátoru polohy s využitím nulovosti potenciálu.

$$\begin{aligned} \langle k | [z, H_0] | k' \rangle &= \langle k | z H_0 - H_0 z | k' \rangle = -h\omega_{kk'} \langle k | z | k' \rangle = -h\omega_{kk'} z_{kk'} \\ \langle k | [z, H_0] | k' \rangle &= \frac{1}{2m} \langle k | [z, p_z^2] | k' \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle k | p_z | k' \rangle. \end{aligned}$$



A tedy dostáváme

$$\langle k | p_z | k' \rangle = im\omega_{kk'} z_{kk'}. \quad (1.12)$$

Dosazením (1.10) a (1.12) do (1.11) dostaneme koherentní vodivostní člen.

$$\sigma_{coh} = \frac{-ie^2}{\mathcal{V}h} \sum_{k,k'} \frac{f_{kk'} \omega_{kk'} |z_{kk'}|^2}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma}. \quad (1.13)$$

Toto je témeř finální tvar koherentního vodivostního členu. Zatím nezávisí na geometrii. Pro další řešení bude třeba třeba vyřešit Schrödingerovu rovnici pro naši geometrii a vypočítat dipólovou matici. Nyní se ale pustme do řešení difúzní rovnice (1.3).

### 1.3 Difúzní rovnice

Rovnici (1.3) vyřešíme rozepsáním funkce  $n_I$  do báze tvořené soustavou řešení stacionární homogenní diferenciální rovnice:

$$D\nabla^2 n_m = -\Gamma_m n_m \quad (1.14)$$

$$n_I = \sum_m c_m n_m \quad (1.15)$$

kde  $\Gamma_m$  jsou příslušné vlastní hodnoty a  $c_m$  jsou rozkladové koeficienty.

Do stejné báze rozložíme i zbývající člen rovnice (1.3):

$$\sum_{k,k'} \langle \mathbf{r} | k \rangle \langle k | \rho_C | k' \rangle \langle k' | \mathbf{r} \rangle = \sum_m s_m n_m \quad (1.16)$$

kde koeficient rozkladu  $s_m$  vypočteme přenásobením této rovnice funkcí  $n_m$  a integrací přes objem krystalu, přičemž se využije ortonormalita systému  $n_m$ .

Rovnice (1.3) pak dostává tvar

$$\sum_{m'} \left( \frac{d}{dt} c_{m'} \right) n_{m'} = \gamma \sum_{m'} s_{m'} n_{m'} - \sum_{m'} \Gamma_{m'} c_{m'} n_{m'} \quad (1.17)$$

přenásobením funkcí  $n_m$ , integrací přes celý objem s využitím ortonormality a toho, že  $c_m$  je úměrné  $e^{-i\omega t}$ , dostává rovnice (1.17) tvar:

$$c_m(\omega) = \frac{i\gamma}{\omega + i\Gamma_m} s_m(\omega) \quad (1.18)$$

Celkově tedy dostáváme tvar termalizační matice hustoty:

$$\begin{aligned} n_I(\mathbf{r}) &= e^{-i\omega t} \sum_m \frac{i\gamma}{\omega + i\Gamma_m} s_m(\mathbf{r}) \\ &= e^{-i\omega t} \sum_m \frac{i\gamma}{\omega + i\Gamma_m} \int_{\mathcal{V}} \sum_{k,k'} n_m(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | k \rangle \langle k | \rho_C | k' \rangle \langle k' | \mathbf{r}' \rangle d^3 \mathbf{r}' \\ &= e^{-i\omega t} \frac{i\gamma e E_0}{h} \sum_{kk'} \frac{f_{kk'} z_{kk'}}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma} \sum_m \frac{n_m}{\omega + i\gamma} \int_{\mathcal{V}} n_m(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | k \rangle \langle k | \rho_C | k' \rangle \langle k' | \mathbf{r}' \rangle d^3 \mathbf{r}' \end{aligned} \quad (1.19)$$

Kde se za  $s_m$  vyjádřilo ze rovnice(1.16). Dále byla využita rovnice (1.10).

Máme tedy vyjádřen člen  $n_I$ .

## 1.4 Řešení Schrödingerovy rovnice

Abychom mohli pokračovat dál, potřebujeme znát konkrétní tvar vlastních stavů hamiltoniánu  $|k\rangle$  a funkcí  $n_m$ . Vyřešíme tedy nyní Schrödingerovu rovnici a rovnici (1.14).

Po vlastních stavech hamiltoniánu budeme požadovat, aby na hranici měli nulovou hodnotu a po funkcích  $n_m$  budeme požadovat, aby měly nulovou normálovou derivaci, tedy aby nic neteklo přes hranici ven.

Zavedme sférické souřadnice

$$\begin{aligned}x &= r \sin \varphi \cos \vartheta \\y &= r \sin \varphi \sin \vartheta \\z &= r \cos \varphi\end{aligned}\tag{1.20}$$

Převedení Laplaceova operátoru do sférických souřadnic umožňuje separovat úhlovou a radiální část Schrödingerovy rovnice.

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$$

Úhlovou část pak řeší kulové funkce  $Y_{lm}$ , kde  $l$  je celkový moment hybnosti a  $m$  je jeho průmět do osy  $z$ . Kulové funkce tvoří úplný ortonormální systém. Tímto prozatím opustíme kulové funkce. Dále v textu, až bude potřeba, budou zmíněny některé jejich další vlastnosti.

Teď nás zajímá řešení radiální části Schrödingerovy rovnice a podmínky, za kterých tvoří tato řešení ortonormální systém. Nejprve si ještě povšimněme, že naše Schrödingerova rovnice je až na multiplikativní konstantu totožná s rovnicí (1.14). Tedy i pro tuto rovnici máme již vyřešenou úhlovou část a stačí vyřešit část radiální. U radiálních částí budeme mít ovšem různé okrajové podmínky. Od vlastních stavů Hamiltoniánu budeme požadovat, aby byly na hranicích nulové. Po řešení rovnice (1.14) budeme požadovat nulovost derivace na hranici. Dále ukážeme, že obě tyto podmínky souhlasí s tím, aby daný systém byl ortogonální (po normalizaci ortonormální).

Radiální SR má tvar podle [5]:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) R_{kl}(r) = ER_{kl}(r)\tag{1.21}$$

Což po menší úpravě  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  dává:

$$\frac{d^2 R_{kl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{kl}(r)}{dr} + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{kl}(r) = 0\tag{1.22}$$

Zavedením proměnné  $\rho = kr$  dostane rovnice tvar:

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} + \left( 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R_l(\rho) = 0\tag{1.23}$$

Řešením této rovnice jsou sférické Besselovy funkce  $j_l(\rho)$  a Neumannovy funkce  $y_l(\rho)$ . Standardní značení bývá  $n_l$ , ale v tomto textu již máme  $n_m$  zavedené, tak pro sférické Neumannovy funkce použijeme  $y_l$ , pro jejich vztah s Neumannovými

funkcemi, nebo také sférickými Besselovými funkcemi druhého druhu, které se značí  $Y_{l+1/2}(\rho) = \sqrt{2\rho/\pi} y_l(\rho)$  (tohoto označení Neumannových funkcí již nebude použito, aby se nepletlo s kulovými funkcemi). Stejný vztah existuje mezi sférickými Besselovými funkcemi a Besselovými funkcemi. Což je důležité pro numerické výpočty, neboť programy pro numerické výpočty neobsahují knihovny pro počty se sférickými Besselovými a Neumannovými funkcemi.

Ukažme zde aspoň pro představu, jak vypadají tyto funkce pro  $l = 0$  a rekurentní vztah, pro výpočet dalších.

$$j_0 = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad y_0 = -\frac{\cos \rho}{\rho} \quad (1.24)$$

$$f_{l+1}(\rho) = \frac{l}{\rho} f_l(\rho) - \frac{df_l(\rho)}{d\rho} \quad (1.25)$$

kde  $f_l$  je buď  $n_l$  nebo  $y_l$ .

Nyní se podíváme na slíbenou ortogonalitu. Budeme požadovat, aby operátor  $H_r$  na levé straně (1.21) byl hermitovský, protože jak víme, tvoří vlastní stavy hermitovského operátoru ortogonální systém.

$$\langle H_r \psi | \phi \rangle = \langle \psi | H_r \phi \rangle, \quad \forall \psi, \phi \quad (1.26)$$

Protože skalární součin je lineární, budeme při vyšetřování hermitovskosti řešit jednotlivé sčítance v (1.21) zvlášť. Pro druhý sčítanec plyne triviálně, že je vždy hermitovský. Řešme tedy první člen bez multiplikačních konstant a s neopomenutím jakobiánu  $r^2$ .

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) | \phi \right\rangle &= \int_{r_1}^{r_2} r (r\psi)'' \phi dr = [(r\psi)'(r\phi)]_{r_1}^{r_2} - \int_{r_1}^{r_2} (r\phi)'(r\psi)' dr = \\ &= [(r\psi)'(r\phi)]_{r_1}^{r_2} - [(r\psi)(r\phi)']_{r_1}^{r_2} + \int_{r_1}^{r_2} \psi r (r\phi)'' dr = \\ &= \langle \psi | \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\phi) \rangle + [(r\psi)'(r\phi)]_{r_1}^{r_2} - [(r\psi)(r\phi)']_{r_1}^{r_2} \quad (1.27) \end{aligned}$$

kde  $r_{1,2}$  značí vnitřní nebo vnější poloměr.

Dostáváme tedy, že hamiltonián je hermitovský pokud na hranicích nastane jedna ze tří podmínek:

$$1) \quad (r\psi)|_{r_{1,2}} = 0 \quad (1.28)$$

$$2) \quad (r\psi)'|_{r_{1,2}} = 0 \quad (1.29)$$

$$3) \quad (r\psi)'|_{r_{1,2}} = C(r\psi)|_{r_{1,2}} \quad (1.30)$$

kde  $C$  je libovolná pevně daná konstanta. Podmínka 2) nás zde ale nebude zajímat, je uvedena pouze pro úplnost.

Pokud máme potenciál tvaru plné koule, tak na vnitřní hranici nemusíme klást žádnou dodatečnou podmínku, neboť je automaticky splněna podmínka 1). Pokud naopak máme dutou kouli a řešíme dvě okrajové podmínky, může být na každém okraji podmínka jiná, čehož zde také nebude využito.

Pro vlastní stavy hamiltoniánu volíme okrajovou podmínku 1) z požadavku spojitosti vlnové funkce.

Pro řešení rovnice (1.14) volíme okrajovou podmínku:  $\phi'|_{r_{1,2}} = 0$ , což souhlasí s podmínkou 3) s konstantou  $C = 1/r_{1,2}$ .

$$(r\psi)'|_{r_{1,2}} = \psi|_{r_{1,2}} + r_{1,2}\psi'|_{r_{1,2}} = \psi|_{r_{1,2}} \quad (1.31)$$

Pro případ potenciálu tvaru plné koule máme jen jednu počáteční podmínku, ale dimenzi řešení 2. Neboť však všechny sférické Neumannovy funkce  $y_l$  v počátku divergují, volí se jako řešení sférické Besselovy funkce s  $k$  splňujícím okrajovou podmínku. Pro případ duté koule nás divergence v počátku netrápí, volí se tedy jako řešení taková lineární kombinace sférických Besselových a Neumannových funkcí s takovým  $k$ , aby byly splněny obě dvě okrajové podmínky.

Radiální část vlastního stavu budeme dále značit  $R_{kl}$  a úhlovou část řešení (1.14)  $N_{nl}$  a platí pro ně:

$$R_{kl}(r) = A_{kl}j_l(\alpha_{kl}r) \quad R_{kl}(r_2) = 0 \quad (1.32)$$

$$N_{nl}(r) = B_{kl}j_l(\beta_{nl}r) \quad N'_{nl}(r_2) = 0 \quad (1.33)$$

pro plnou kouli a:

$$R_{kl}(r) = A_{kl}l(j_l(\alpha_{kl}r) + a_{kl}y_l(\alpha_{kl}r)) \quad R_{kl}(r_{1,2}) = 0 \quad (1.34)$$

$$N_{nl}(r) = B_{kl}(j_l(\beta_{nl}r) + b_{kl}y_l(\beta_{nl}r)) \quad N_{nl}(r_{1,2}) = 0 \quad (1.35)$$

pro dutou kouli. Kde  $A_{kl}, B_{kl}$  jsou normovací konstanty,  $\alpha_{kl}, \beta_{nl}$  jsou takové, aby byly splněny okrajové podmínky, kde  $k_{kl}, n_{kl}$  indexuje kolikáté to je řešení pro dané  $l$  a  $a_{kl}, b_{kl}$  je poměr v jakém se sčítají Besselovy a Neumannovy funkce.

Pro plnou kouli spočívá nalezení správného  $\alpha_{kl}$  případně  $\beta_{nl}$  v tom, že dosadíme  $r = r_2$  a koukáme na (1.32) jako na funkci  $\alpha_{kl}$  a vybereme taková  $\alpha_{kl}$ , pro která tato funkce prochází nulou. Pro (1.33) se postupuje stejně s tím, že za derivaci se dosadí z rekurentního vztahu (1.25).

Pro dutou kouli je postup obdobný jen je vyžadovaná drobná úprava. V (1.34) lze z dvou okrajových podmínek, které mají dvě proměnné  $\alpha_{kl}$  a  $a$  snadno eliminovat proměnnou  $a_{kl}$ :

$$A_{kl}(j_l(\alpha_{kl}r_1) + a_{kl}y_l(\alpha_{kl}r_1)) = 0 \quad (1.36)$$

$$A_{kl}(j_l(\alpha_{kl}r_2) + a_{kl}y_l(\alpha_{kl}r_2)) = 0 \quad (1.37)$$

vydělíme obě rovnice  $A_{kl}$  a převedeme člen s  $y_l$  na druhou stranu.

$$j_l(kr_1) = -a_{kl}y_l(\alpha_{kl}r_1) \quad (1.38)$$

$$j_l(kr_2) = -a_{kl}y_l(\alpha_{kl}r_2) \quad (1.39)$$

Obě rovnice podělíme a zbavíme se tak  $a_{kl}$ . Po menší úpravě dostaneme:

$$j_l(\alpha_{kl}r_1)y_l(\alpha_{kl}r_2) - j_l(\alpha_{kl}r_2)y_l(\alpha_{kl}r_1) = 0 \quad (1.40)$$

Na tento tvar, kde se nevyskytuje podíl Besselových funkcí, se rovnice upravila, neboť Besselovy funkce oscilují okolo nuly a při numerických výpočtech nedělá dobře, pokud jimi dělíme.

Tento tvar je zase pouze funkcí  $\alpha_{kl}$ , stačí tedy zase vyšetřit pouze, kde je funkce nulová. Poměr  $a_{kl}$  se pro jednotlivé  $\alpha_{kl}$  pak nalezne jednoduše z jedné z okrajových podmínek.

Pro (1.35) je zase postup obdobný, jen všude budou derivace, stačí tedy ve výsledném vzorečku dosadit zase za derivaci  $z$  (1.25).

Naše hledané stavy pak mají tvar:

$$\langle \mathbf{r} | k \rangle = R_{kl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (1.41)$$

$$n_{nlm}(\mathbf{r}) = N_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (1.42)$$

Tím bychom měli vyřešenou otázku, jak vypadají vlastní stavy hamiltoniánu a řešení rovnice (1.14) a můžeme se přesunout k dalšímu výpočtu.

## 1.5 Termální proud

Ve vzorci (1.6) se vyskytuje integrál přes objem krystalu ze  $z$ -tové derivace  $n_I$ . My ovšem máme rozložené  $n_I$  do báze  $n_{nlm}$ , zajímá nás tedy, jak tento integrál vypadá pro bázevých členů:

$$\int_V \frac{\partial n_{nlm}}{\partial z} d^3\mathbf{r} \quad (1.43)$$

Abychom to mohli vyřešit, musíme si nejprve vyjádřit derivaci podle  $z$  do sférických souřadnic. Kde  $z = z(r, \vartheta, \varphi)$ , řetězkové pravidlo tedy dává.

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (1.44)$$

Za pomoci inverzních vztahů k (1.20) nalezneme jednotlivé parciální derivace.

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{\partial(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}{\partial z} = \frac{2z}{2(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} = \frac{r \cos \vartheta}{r} = \cos \vartheta \quad (1.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vartheta}{\partial z} &= \frac{\partial \arccos(\frac{z}{r})}{\partial z} = -\frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{z}{r})^2}} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \right) = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{1 - \cos^2 \vartheta}} \left( \frac{1}{r} - \frac{z^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \right) = -\frac{1}{\sin \vartheta} \left( \frac{1}{r} - \frac{r^2 \cos^2 \vartheta}{r^3} \right) = \\ &= -\frac{1}{r \sin \vartheta} (1 - \cos^2 \vartheta) = \frac{\sin \vartheta}{r} \quad (1.46) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\partial(\arctan \frac{y}{x})}{\partial z} = 0 \quad (1.47)$$

Derivace podle  $z$  tedy dostává tvar:

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \quad (1.48)$$

Když máme nyní derivaci podle  $z$  ve sférických souřadnicích, můžeme vypo-

čítat integrál (1.43).

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial n_{nlm}}{\partial z} d^3\mathbf{r} &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_{r_1}^{r_2} r^2 \sin \vartheta \frac{\partial n_{nlm}}{\partial z} dr d\vartheta d\varphi = \\
&= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_{r_1}^{r_2} r^2 \sin \vartheta \left( \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) N_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) dr d\vartheta d\varphi = \\
&= \int_{r_1}^{r_2} r^2 \frac{\partial N_{nl}(r)}{\partial r} dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \vartheta \cos \vartheta Y_{lm}(\vartheta, \varphi) d\vartheta d\varphi - \\
&\quad - \int_{r_1}^{r_2} r N_{nl}(r) dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^2 \vartheta \frac{\partial Y_{lm}(\vartheta, \varphi)}{\partial \vartheta} d\vartheta d\varphi \quad (1.49)
\end{aligned}$$

Pro přehlednost upravíme jednotlivé členy samostatně a využijeme toho, že  $d \cos \vartheta = -\sin \vartheta d\vartheta$  a  $\frac{\partial}{\partial \vartheta} = -\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \cos \vartheta}$ . Jedná se vlastně o cosinovou substituci, ale zde nebude cosinus nahrazen jiným písmenkem. Že došlo k substituci se pozná podle změněných mezí a diferenciálu.

$$\int_{r_1}^{r_2} r^2 \frac{\partial N_{nl}(r)}{\partial r} dr = [r^2 N_{nl}(r)]_{r_1}^{r_2} - \int_{r_1}^{r_2} 2r N_{nl}(r) dr \quad (1.50)$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \vartheta \cos \vartheta Y_{lm}(\vartheta, \varphi) d\vartheta d\varphi = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \cos \vartheta Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) d \cos \vartheta d\varphi \quad (1.51)$$

$$\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^2 \vartheta \frac{\partial Y_{lm}(\vartheta, \varphi)}{\partial \vartheta} d\vartheta d\varphi = - \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \sin^2 \vartheta \frac{\partial Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi)}{\partial \cos \vartheta} d \cos \vartheta d\varphi = \\
&= - \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 (1 - \cos^2 \vartheta) \frac{\partial Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi)}{\partial \cos \vartheta} d \cos \vartheta d\varphi = - \int_0^{2\pi} [(1 - \cos^2 \vartheta) Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi)]_{-1}^1 d\varphi - \\
&- \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 2 \cos \vartheta Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) d \cos \vartheta d\varphi = -2 \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \cos \vartheta Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) d \cos \vartheta d\varphi \quad (1.52)
\end{aligned}$$

Nyní dosadme tyto výsledky zpět do rovnice (1.49):

$$\begin{aligned}
&\left( [r^2 N_{nl}(r)]_{r_1}^{r_2} - 2 \int_{r_1}^{r_2} r N_{nl}(r) dr \right) \left( \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \cos \vartheta Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) d \cos \vartheta d\varphi \right) + \\
&\quad + \left( \int_{r_1}^{r_2} r N_{nl}(r) dr \right) \left( \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 2 \cos \vartheta Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) d \cos \vartheta d\varphi \right) = \\
&\quad = [r^2 N_{nl}(r)]_{r_1}^{r_2} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \cos \vartheta Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) d \cos \vartheta d\varphi \quad (1.53)
\end{aligned}$$

Výraz dále upravíme za použití vztahu:

$$Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_{lm}(\cos \vartheta) \quad (1.54)$$

kde  $P_{lm}(\cos \vartheta)$  je normovaný přidružený Legendrův polynom. (Obvykle bývá Legendrův polynom nenormovaný, zde pro přehlednost uvažujme normované Legendrovy polynomy.) Uvědomme si dále, že pro dané  $m$  tvoří Legendrovy polynomy

ortonormální systém. A také  $\cos \vartheta = \sqrt{2/3}P_{10}(\cos \vartheta)$ . Integrál přes úhlové souřadnice v rovnici (1.53) se dá tedy zjednodušit:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} d\varphi \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{2}{3}} P_{10} P_{lm}(\cos \vartheta) d \cos \vartheta &= \\ &= \sqrt{2\pi} \delta_{0m} \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{2}{3}} P_{10} P_{lm}(\cos \vartheta) d \cos \vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \delta_{0m} \delta_{1l} \end{aligned} \quad (1.55)$$

Celkem tedy dostáváme z rovnice (1.43):

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial n_{nlm}}{\partial z} d^3 \mathbf{r} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_{r_1}^{r_2} r^2 \sin \vartheta \frac{\partial n_{nlm}}{\partial z} dr d\vartheta d\varphi = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} [r^2 N_{nl}(r)]_{r_1}^{r_2} \delta_{0m} \delta_{1l} \quad (1.56)$$

Nenulové jsou pouze členy s celkovým momentem hybnosti  $l = 1$  a s jeho průmětem do osy  $z$   $m = 0$ , což velmi zjednoduší výpočet, neboť z trojné sumy budeme mít pouze sumu jedinou.

## 1.6 Nekoherentní člen

Přesuňme se nyní k výpočtu druhého vodivostního členu z rovnice (1.6). Kde dostáváme:

$$\sigma_{incoh} = -\frac{eD}{\mathcal{V}E} \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial n_I}{\partial z} d^3 r \quad (1.57)$$

Dosaďme za  $n_I$  ze vztahu (1.19).

$$\sigma_{incoh} = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{eD}{\mathcal{V}E} \sum_n [r^2 N_{n1}]_{r_1}^{r_2} \frac{i\gamma}{\omega + i\Gamma_{n10}} s_{n10} \quad (1.58)$$

Nyní vypočtěme  $s_{n10}$  ze vztahu (1.16):

$$\begin{aligned} s_{n10} &= \int_{\mathcal{V}} n_{n10}(\mathbf{r}) \sum_{kk'} \langle \mathbf{r} | k \rangle \langle k | \rho_C | k' \rangle \langle k' | \mathbf{r} \rangle d^3 \mathbf{r} = \\ &= \sum_{kk'} \langle k | \rho_C | k' \rangle \int_{\mathcal{V}} n_{n10}(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | k \rangle \langle k' | \mathbf{r} \rangle d^3 \mathbf{r} = \\ &= \sum_{klmk'l'm'} \langle k | \rho_C | k' \rangle \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_{r_1}^{r_2} r^2 R_{kl}(r) Y_{lm}^*(\cos \vartheta, \varphi) R_{k'l'}(r) Y_{l'm'}(\cos \vartheta, \varphi) \\ &\quad N_{n1}(r) Y_{10}(\cos \vartheta, \varphi) dr d \cos \vartheta d\varphi = \\ &= \sum_{klmk'l'm'} \langle k | \rho_C | k' \rangle \int_{r_1}^{r_2} r^2 R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) N_{n0}(r) dr \\ &\quad \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 Y_{lm}^*(\cos \vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\cos \vartheta, \varphi) Y_{10}(\cos \vartheta, \varphi) d \cos \vartheta d\varphi = \\ &= \sum_{klmk'l'm'} \langle k | \rho_C | k' \rangle \int_{r_1}^{r_2} r^2 R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) N_{n0}(r) dr \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \delta_{mm'} \int_{-1}^1 P_{lm}(\cos \vartheta) P_{l'm'}(\cos \vartheta) \sqrt{\frac{3}{2}} \cos \vartheta d \cos \vartheta \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_{klmk'l'} \langle k | \rho_C | k' \rangle S_{kk'n} U_{l'l'm} \end{aligned} \quad (1.59)$$

kde:

$$S_{kk'n} = \int_{r_1}^{r_2} r^2 R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) N_{n1}(r) dr \quad (1.60)$$

$$U_{l'm} = \int_{-1}^1 P_{lm}(\cos \vartheta) P_{l'm}(\cos \vartheta) \cos \vartheta d \cos \vartheta \quad (1.61)$$

Nyní dostadme (1.59) do (1.58).

$$\sigma_{incoh} = -\frac{eD}{\mathcal{V}E} \sum_{klmk'l'n} \langle k | \rho_C | k' \rangle U_{l'm} \sum_n [r^2 N_{n1}]_{r_1}^{r_2} \frac{i\gamma}{\omega + i\Gamma_{n10}} S_{kk'n} \quad (1.62)$$

Což s využitím vztahu (1.10) dostává tvar:

$$\sigma_{incoh} = -\frac{ie^2 D \gamma}{\mathcal{V} h} \sum_{klmk'l'} \frac{f_{kk'} z_{kk'}}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma} U_{l'm} \sum_n [r^2 N_{n1}]_{r_1}^{r_2} \frac{S_{kk'n}}{\omega + i\Gamma_{n10}} \quad (1.63)$$

Dostali jsme tedy výsledný tvar nekoherentního vodivostního členu s zatím neznámou dipólovou maticí  $z_{kk'}$ . Tu nyní spočítejme:

$$\begin{aligned} z_{kk'} &= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_{r_1}^{r_2} r^2 R_{kl}(r) Y_{lm}^*(\varphi, \cos \vartheta) r \cos \vartheta R_{k'l'}(r) Y_{l'm'}(\varphi, \cos \vartheta) dr d \cos \vartheta d \varphi \\ &= \int_{r_1}^{r_2} r^3 R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) dr \int_{-1}^1 \cos \vartheta P_{lm}(\cos \vartheta) P_{l'm'}(\cos \vartheta) d \cos \vartheta \delta_{mm'} = \\ &= Z_{kk'} U_{l'm} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (1.64)$$

kde:

$$Z_{kk'} = \int_{r_1}^{r_2} r^3 R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) dr \quad (1.65)$$

## 1.7 Výsledná vodivost

Sečtením obou členů nabývá vodivost tvaru:

$$\sigma = \frac{-ie^2}{\mathcal{V} h} \sum_{klmk'l'} \frac{f_{kk'} U_{l'm}^2 Z_{kk'}}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma} \left[ D \gamma \sum_n [r^2 N_{n1}]_{r_1}^{r_2} \frac{S_{kk'n}}{\omega + i\Gamma_{n10}} + \omega_{kk'} Z_{kk'} \right] \quad (1.66)$$

Dále lze ukázat, že  $U_{l'm}$  je nenulové pouze pro  $l' = l \pm 1$  a navíc  $U_{l'm}$  je jediný člen závislý na  $m$ , lze tedy sumu přes  $m$  přesunout pouze k tomuto členu. V příloze je vypočteno (A.12):

$$\sum_m U_{l+1m}^2 = \frac{l+1}{3}. \quad (1.67)$$

Zbavíme se tím tedy jedné sumy.

Druhé sumy se zbavíme, protože  $l'$  se sčítá pouze přes dva indexy:  $l' = l - 1$  a  $l' = l + 1$ . Rozdělme si tuto sumu s dvěma  $l'$  na dvě sumy s jedním  $l'$ . Obě sumy se sčítají přes kombinaci  $l$  a  $l'$  takové, že se tyto dva indexy liší o jedničku. Rozdíl je pouze v tom, že v prvním případě je větší  $l$  a ve druhém  $l'$ . Všimněme si, co se stane, pokud ale v prvním případě prohodíme  $l$  a  $l'$ . Bude se sčítat přes kombinaci momentů hybnosti, kde první hodnota je menší než druhá, stejně jako



v druhém případě. Lehce se také nahlédne, že uvnitř sumy změni členy  $f_{kk'}$  a  $\omega_{kk'}$  znaménko a jinak vše zůstane nezměněno.

Zbavili jsme se tedy dalšího sčítacího indexu a zajímá nás nyní, jak vypadá:

$$\frac{1}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma} \pm \frac{1}{\omega + \omega_{kk'} + i\gamma} \quad (1.68)$$

protože vše až na tyto dva členy můžeme vytknout. Znaménko  $\pm$  je protože koherentní člen změnil znaménko dvakrát, tedy sčítáme a nekoherentní jednou, tedy odčítáme.

$$\frac{1}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma} + \frac{1}{\omega + \omega_{kk'} + i\gamma} = \frac{2(\omega + i\gamma)}{(\omega + i\gamma)^2 - \omega_{kk'}^2} \quad (1.69)$$

$$\frac{1}{\omega - \omega_{kk'} + i\gamma} - \frac{1}{\omega + \omega_{kk'} + i\gamma} = \frac{2\omega_{kk'}}{(\omega + i\gamma)^2 - \omega_{kk'}^2} \quad (1.70)$$

Dosazením do (1.66) dostaneme finální tvar vodivosti:

$$\sigma = \frac{-2ie^2}{3\mathcal{V}h} \sum_{klk'} \frac{(l+1)f_{kk'}Z_{kk'}\omega_{kk'}}{(\omega + i\gamma)^2 - \omega_{kk'}^2} \left[ D\gamma \sum_n [r^2 N_{n1}]_{r_1}^{r_2} \frac{S_{kk'n}}{\omega + i\Gamma_{n10}} + (\omega + i\gamma)Z_{kk'} \right]. \quad (1.71)$$

Kde  $l$  indexuje celkový moment hybnosti sčítá se od 0,  $k, k'$  indexují řešení Schrödingerovi rovnice pro  $l$  a  $l+1$  a  $n$  indexuje řešení rovnice (1.14)

V příloze je analyticky dokázáno, že vodivost při nulové frekvenci je nulová.

## 2. Numerické výpočty

Numerické výpočty byly provedeny pro GaAs s elektrony s efektivní hmotností  $m = 0.067m_e$  a  $\gamma = (1/270)fs^{-1}$ . Zastoupení stavů  $f_k$  je dáno Fermi-Diracovým rozdělením:

$$f_k = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_k - \mu}{k_b T}}} \quad (2.1)$$

kde chemický potenciál  $\mu$  se bere jako energie základního stavu minus  $kb_T$ . Elektronová hustota se potom pohybuje v řádech  $10^{15} - 10^{18}cm^{-3}$ .

V grafech bude na ose  $y$  frekvence  $f$ , která má vztah s úhlovou frekvencí  $f = \frac{\omega}{2\pi}$  a na ose  $x$  bude pohyblivost elektronů  $\mu_e$  daná vztahem k vodivosti:

$$\mu_e = \frac{\sigma \mathcal{V}}{eN} \quad (2.2)$$

kde  $N$  je celkový počet elektronů:  $N = \sum_k f_k$ .

Na obrázku (2.1) vidět chování vodivostního spektra krystalu tvaru plné koule pro různé poloměry. Pro malé poloměry pozorujeme počet píků dále od sebe. S roustoucím poloměrem se počet píků zvětšuje a píky jsou blíže sebe. Až se píky přiblíží moc, nelze mezi nimi rozeznat a pozorujeme pouze jedno široké maximum vodivostního spektra. Pozorujeme tedy přechod od kvantové vodivosti ke klasickému Drudeho modelu.

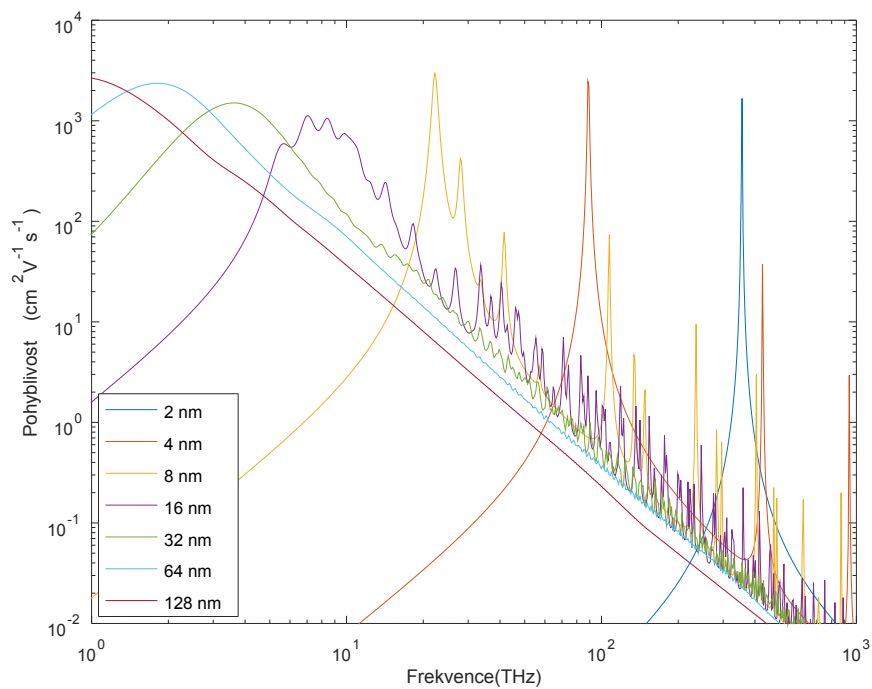
Dále na prvním obrázku pozorujeme posun píků k nižším frekvencím. Přibližně vychází, zvláště pro menší krystaly, že pro dvojnásobný poloměr krystalu je hlavní vodivostní pík na čtvrtinové frekvenci.

Energie vlastních stavů jsme dostali tak, že pro Besselovy funkce jsme našli  $k$  takové, aby byla splněna okrajová podmínka. Pokud zachováme geometrii a pouze zvětšíme krystal, musíme stejným způsobem zmenšit  $k$ , které je tedy úměrné  $1/r$ . Energie i frekvence jsou úměrné  $k^2 \sim 1/r^2$ . Pokud tedy zachováme geometrii a zvětšíme krystal, sníží se energie všech vlastních stavů čtyřikrát.

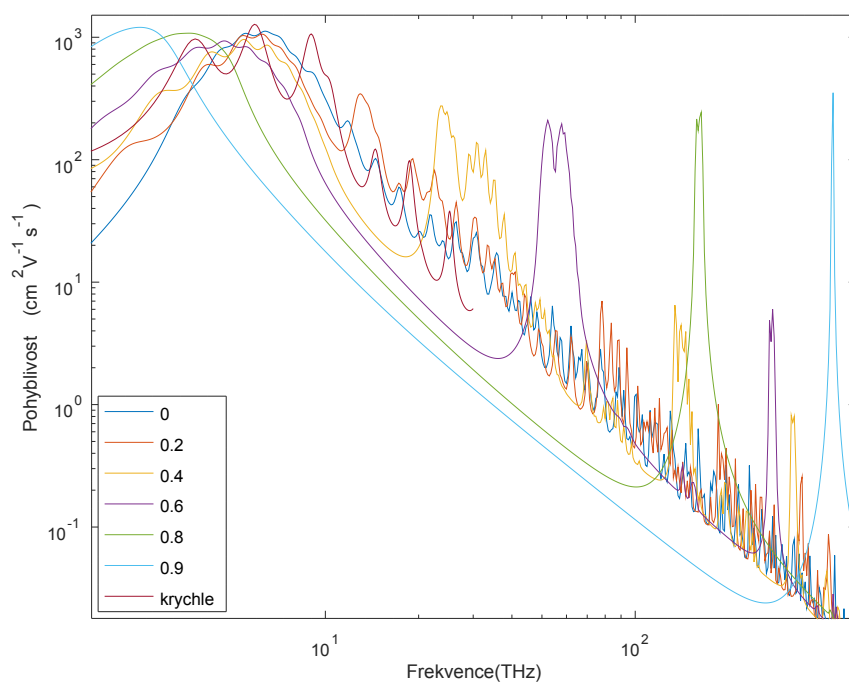
Při výpočtu spektra se počítá několik členů úměrných  $\frac{1}{(\omega + i\gamma) - \omega_{kk'}}$ , což má maximum pro  $\omega = \omega_{kk'}$ . Víme tedy, kde můžeme očekávat maxima. Protože  $\omega_k \sim 1/r^2$  je jasné, proč pro větší poloměr jsou píky blíže sebe, i jejich posun k nižším frekvencím. Nyní ještě proč pro malé krystaly je píků méně. Podívejme se na tvar Fermi-Diracova rozdělení (2.1). Je vidět, že pro vysoké energie rychle klesá pravděpodobnost zastoupení k nule, pro malé krystaly bude s nezanedbatelnou pravděpodobností zastoupeno méně stavů, v sumě se tedy s větší vahou započítá jen pár členů.

Na obrázku (2.2) je vykresleno vodivostní spektrum několika krystalů se stejným objemem, ale různou geometrií. Ke kulovým krystalům s různým poměrem  $r_1/r_2$  je přidán také krychlový krystal s elektronovou hustotou  $10^{16}cm^{-3}$  vypočtený v [4]. Data ke krychlovému krystalu byly zapůjčeny doc. RNDr. Tomášem Ostatnickým, Ph.D.

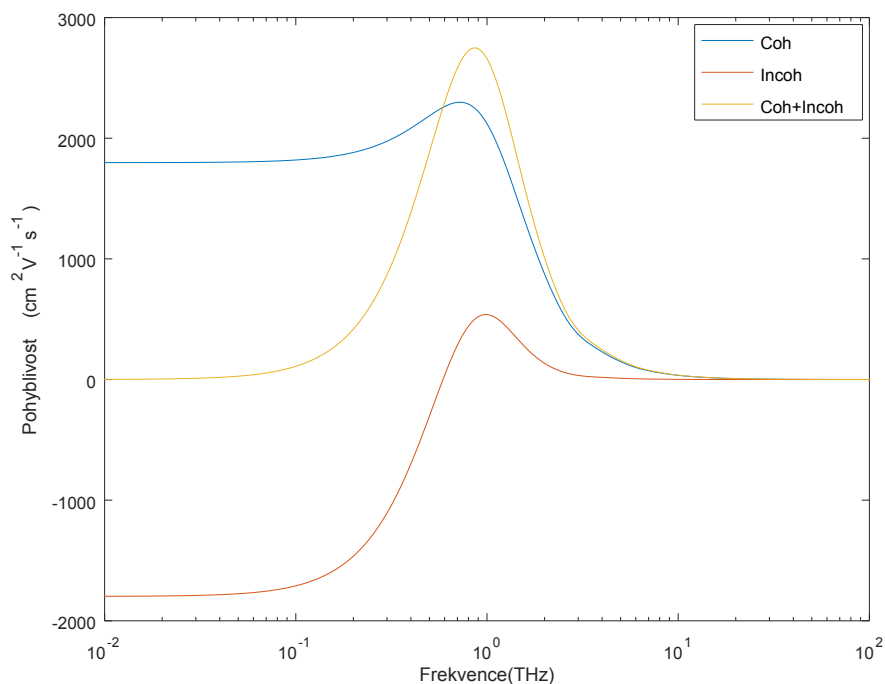
Můžeme zde pozorovat důležitost toho, jak je hmota v prostoru rozložena a nejen celkový objem. Oblast největší vodivosti mají všechny krystaly ve stejné spektrální oblasti a pro sférické krystaly je tato oblast dosti podobná. Ale jak se posuneme do vyšších frekvencí, tak se začínají projevovat rozdíly. Celkový pokles je podobný, ale rozdíl je v polohách a velikosti vedlejších maxim.



Obrázek 2.1: Reálná část pohyblivosti plné koule pro vybrané poloměry při teplotě  $T=300\text{K}$



Obrázek 2.2: Reálná část pohyblivosti pro krystaly s konstantním objemem  $(32\text{nm})^3$  ale různého tvaru. Pro koule s různými poměry  $r_1/r_2$  a krychli za teploty  $T=300\text{K}$



Obrázek 2.3: Srovnání reálné části koherentního a nekoherentního vodivostního členu pro krystal tvaru plné koule o poloměru 128 nm za teploty  $T=300\text{K}$

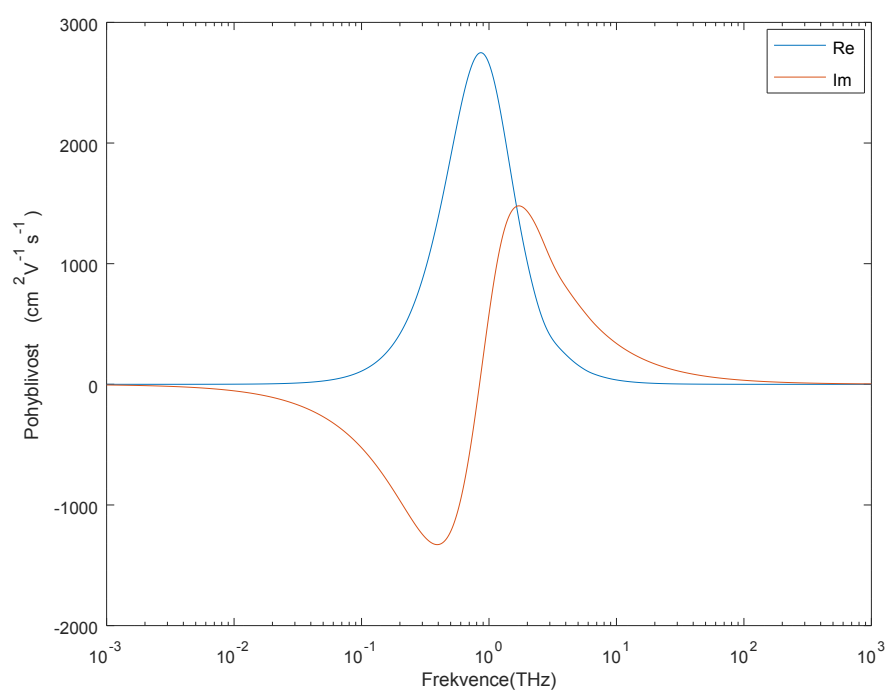
Pro malé  $r_1/r_2$  je v místě nejvyšší vodivosti hrbolaté maximum a směrem k vyšší frekvenci vodivost celkově klesá s nízkými ale častými oscilacemi. S větším  $r_1/r_2$  se hlavní maximum vyhlazuje, posouvá k nižším frekvencím a zvětšuje se vzdálenost k dalšímu píku, který je ale výrazně vyšší, dokonce srovnatelný s hlavním píkem.

Pokles k nižším frekvencím je stejný, ale čáry s větším  $r_1/r_2$  jsou výše než čáry s menším  $r_1/r_2$ .

Pohledem na vodivost krychlového krystalu vidíme, že v oblasti maximální vodivosti jsou tři výraznější maxima. Dále ve spektru jsou opět menší píky blíže sebe, ale dále od sebe a vyšší než pro plnou kouli.

Na obrázku (2.3) pozorujeme srovnání reálné části koherentního a nekoherentního členu pro krystal tvaru plné koule o poloměru 128 nm. Vidíme že při této velikosti krystalu. Je zde vidět, jak důležité je zavedení termalizačního proudu. Okolo maxima a pro vyšší frekvence je samotný koherentní člen docela přesný, ale v nízkofrekvenční oblasti je samostatně špatně a pro správný výsledek je tedy třeba započíst i člen nekoherentní.

Na obrázku (2.4) vidíme porovnání reálné a imaginární části vodivosti pro krystal tvaru plné koule o poloměru 128 nm. Pozorujeme, že v místě maximální vodivosti nabývá imaginární část nulové hodnoty.



Obrázek 2.4: Srovnání reálné a komplexní části vodivosti pro krystal tvaru plné koule o poloměru 128 nm za teploty  $T=300\text{K}$

# Závěr

V této práci bylo vypočteno vodivostní spektrum polovodičového sféricky symetrického nanokrystalu. Výsledný vzorec by v plné obecnosti obsahoval sumu přes devět indexů, v této práci se nám ale podařilo sumu zjednodušit, takže se ve výsledném vzorci 1.71 sčítá pouze přes indexy čtyři.

Dále také bylo analyticky dokázáno, že vodivost při nulové frekvenci je skutečně nulová.

Také bylo získaného analytického vzorce využito pro numerický výpočet vodivostního spektra pro různé velikosti krystalu, kde byl ukázán především přechod od kvantové vodivosti ke klasické. Bylo zde pozorováno chování spekter různě velkých krystalů a vysvětleny některé aspekty tohoto chování.

Na dalším grafu bylo ukázáno, jak vypadají dva vodivostní členy nesečtené a bylo zde ukázáno, jak je důležitý nekoherentní člen pro nízkofrekvenční vodivost.

# Seznam použité literatury

- [1] N. V. Smith. Classical generalization of the drude formula for the optical conductivity. *Phys. Rev. B*, 64:155106, Sep 2001.
- [2] Hynek Němec, Petr Kužel, and Villy Sundström. Far-infrared response of free charge carriers localized in semiconductor nanoparticles. *Phys. Rev. B*, 79:115309, Mar 2009.
- [3] J Lloyd-Hughes and T-I Jeon. A review of the terahertz conductivity of bulk and nano-materials. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, pages 1–55, 2012.
- [4] T. Ostatnický, V. Pushkarev, H. Němec, and P. Kužel. Quantum theory of terahertz conductivity of semiconductor nanostructures. *Phys. Rev. B*, 97:085426, Feb 2018.
- [5] Jan Klíma and Bedřich Velický. *Kvantová mechanika*. Univerzita Karlova v Praze, nakladatelství Karolinum, Praha, vydání první edition, 2015.
- [6] Wikipedia contributors. Clebsch–gordan coefficients — Wikipedia, the free encyclopedia, 2018. [Online; accessed 4-July-2018].

# A. Přílohy

## A.1 Limita nulové frekvence

Na závěr ještě ukážeme, že v limitě nulové frekvence se skutečně oba členy odečtou na nulu. Podívejme se pouze na hranatou závorku v (1.71) s dosazenou nulovou frekvencí. S využitím vztahu  $\Gamma_{n10} = Dn^2$ . Hranatá závorka tedy dostává tvar:

$$D\gamma \sum_n [r^2 N_{n1}]_{r_1}^{r_2} \frac{S_{kk'n}}{iDn^2} + i\gamma Z_{kk'} = -i\gamma \left( \sum_n [r^2 N_{n1}]_{r_1}^{r_2} \frac{S_{kk'n}}{n^2} - Z_{kk'} \right)$$

Ignorujme multiplikační konstanty a rozepišme  $S_{kk'n}$  a  $Z_{kk'}$

$$\begin{aligned} \sum_n \frac{[r^2 N_{n1}]}{n^2} \int_{r_1}^{r_2} r^2 N_{n1}(r) R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) dr - \int_{r_1}^{r_2} r^3 R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) dr \\ = \int_{r_1}^{r_2} r^2 R_{kl}(r) R_{k'l'}(r) \left( \sum_n \frac{[r^2 N_{n1}]_{r_1}^2}{n^2} N_{n1}(r) - r \right) dr \quad (\text{A.1}) \end{aligned}$$

Požadovaný výsledek bychom dostali, pokud by kulatá závorka byla nulová. Podívejme se, jak by vypadalo  $r$  rozepsané do báze  $N_{n1}(r)$ , předpokládejme tedy:

$$r = \sum_{n'} f_{n'} N_{n'1} \quad (\text{A.2})$$

Provedme skalární součin obou stran rovnice s  $N_{n1}$  s využitím toho, že  $N_{n1}$  tvoří ortonormální systém.

$$f_n = \int_{r_1}^{r_2} r^3 N_{n1}(r) dr \quad (\text{A.3})$$

Připomeňme nyní vztah pro besselovy funkce:

$$\left( -\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) N_{nl} = n^2 N_{nl} \quad (\text{A.4})$$

a naší okrajovou podmínku  $(rN_{n1})'|_{r_{1,2}} = N_{n1}|_{r_{1,2}}$ . Upravme tedy nyní integrál v (A.3)

$$\begin{aligned} f_n &= \int_{r_1}^{r_2} r^3 N_{n1}(r) dr = \frac{1}{n^2} \left( - \int_{r_1}^{r_2} r^2 (rN_{n1}(r))'' dr + 2 \int_{r_1}^{r_2} r N_{n1}(r) dr \right) = \\ &= \frac{1}{n^2} \left( - [r^2 (rN_{n1}(r))']_{r_1}^{r_2} + \int_{r_1}^{r_2} 2r (rN_{n1}(r))' dr + 2 \int_{r_1}^{r_2} r N_{n1}(r) dr \right) = \\ &= \frac{1}{n^2} \left( - [r^2 N_{n1}(r)]_{r_1}^{r_2} + [2r^2 N_{n1}(r)]_{r_1}^{r_2} - \int_{r_1}^{r_2} 2r N_{n1}(r) dr + 2 \int_{r_1}^{r_2} r N_{n1}(r) dr \right) = \\ &= \frac{[r^2 N_{n1}(r)]_{r_1}^{r_2}}{n^2} \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

Po dosazení (A.2) a (A.5) do (A.1) dostáváme požadovaný výsledek, tedy že vodivost je nulová při nulové frekvenci.



## A.2 Výpočet (1.67)

Integrál  $U_{l'm}$ , lze převést na integrál tří kulových funkcí přes úhlové proměnné.

$$\begin{aligned} U_{l'm} &= \int_{-1}^1 P_{lm}(\cos \vartheta) P_{l'm}(\cos \vartheta) \cos \vartheta d \cos \vartheta = \\ &= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 Y_{lm}^*(\varphi, \cos \vartheta) \cos \vartheta Y_{l'm}(\varphi, \cos \vartheta) d \cos \vartheta = \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 Y_{lm}^*(\varphi, \cos \vartheta) Y_{10}^*(\varphi, \cos \vartheta) Y_{l'm}(\varphi, \cos \vartheta) d \cos \vartheta \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

Podle [6] vypadá integrál tří kulových funkcí

$$\int Y_{l_1 m_1}^* Y_{l_2 m_2}^* Y_{LM} d\Omega = \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}{4\pi 2L + 1}} \langle l_1 0 l_2 0 | L 0 \rangle \langle l_1 m_1 l_2 m_2 | LM \rangle \quad (\text{A.7})$$

kde  $\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | LM \rangle$  jsou Clebsch-Gordonovi koeficienty, které pro  $l_2 = 1, m_2 = 0, L = l_1 + 1$  a  $M = m_1$  vypadají:

$$\langle lm10 | (l+1)m \rangle = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(l+1)}} \quad (\text{A.8})$$

Náš integrál tří kulových funkcí tedy vypadá takto:

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 Y_{lm}^*(\varphi, \cos \vartheta) Y_{10}^*(\varphi, \cos \vartheta) Y_{(l+1)m}(\varphi, \cos \vartheta) d \cos \vartheta = \\ &= \sqrt{\frac{3(2l+1)}{4\pi(2l+3)}} \langle l010 | (l+1)0 \rangle \langle lm10 | (l+1)m \rangle = \\ &= \sqrt{\frac{3(2l+1)}{4\pi(2l+3)}} \sqrt{\frac{(l+1)(l+1)}{(2l+1)(l+1)}} \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(l+1)}} = \\ &= \sqrt{\frac{3(l-m+1)(l+m+1)}{4\pi(2l+3)(2l+1)}} = \sqrt{\frac{3((l+1)^2 - m^2)}{4\pi(2l+3)(2l+1)}} = U_{l+1m} \frac{3}{4\pi} \quad (\text{A.9}) \end{aligned}$$

Nás ovšem nezajímá  $U_l(l+1)m$  ale kvadrát tohoto vysčítaný přes všechny možné  $m$ . To tedy nyní spočítejme.

$$\sum_m U_{l(l+1)m}^2 = \sum_m \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)} = \frac{(l+1)^2}{(2l+3)} - \frac{1}{(2l+3)(2l+1)} \sum_m m^2 \quad (\text{A.10})$$

Využijeme vztahu:

$$\sum_{k=1}^n k^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} \quad (\text{A.11})$$

a nezapomene, že sčítáme i pro záporná  $m$ , tedy celá suma bude dvakrát. Suma lze tedy zjednodušit až na tvar:

$$\sum_m U_{l(l+1)m}^2 = \frac{(l+1)^2}{(2l+3)} - \frac{l(l+1)}{3(2l+3)} = \frac{(l+1)(3l+3-l)}{3(2l+3)} = \frac{l+1}{3} \quad (\text{A.12})$$

Kde nám vyšla jednoduchá lineární funkce  $l$ .