

Zasedenost nivoja nečistoče za Andersonov model brez interakcije

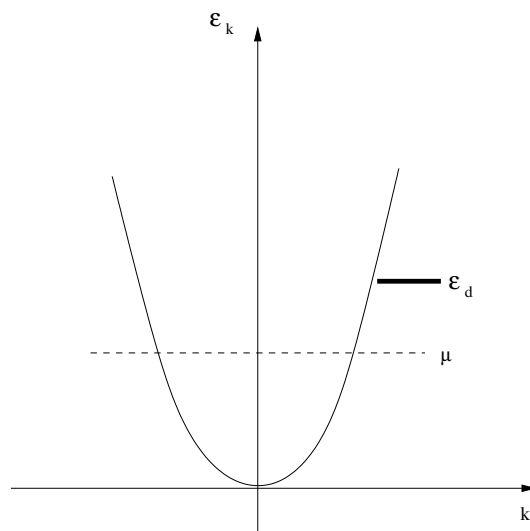
Matjaž Zemljič

15. januar 2004

Obravnavamo Andersonov model brez interakcije

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \epsilon_d d^\dagger d + \sum_k (V_k d^\dagger c_k + V_k^* c_k^\dagger d), \quad (1)$$

kjer prvi člen opisuje sistem neodvisnih elektronov, drugi člen predstavlja dodano stanje nečistoče z energijo ϵ_d , tretji člen pa omogoča preskoke med stanji spektra elektronov in nečistočo ter obratno. Spina elektronov nismo upoštevali, a je posplošitev trivialna.



Slika 1: Spekter neodvisnih (na sliki prostih) elektronov z dodanim stanjem nečistoče

Zasedenost stanja d izračunamo s pomočjo enačbe gibanja v frekvenčnem prostoru za retardirano Greenovo funkcijo

$$\hbar\omega \ll A; B \gg = \langle [A, B]_+ \rangle + \ll [A, H]_-; B \gg, \quad (2)$$

kjer smo uporabili notacijo Zubareva

$$\ll A; B \gg = G_{AB}^r(\omega) = \int G_{AB}^r(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (3)$$

in

$$G_{AB}^r(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \theta(\tau) \langle [A(\tau), B(0)]_+ \rangle. \quad (4)$$

Ko imamo opravka s fermioni, je Greenova funkcija definirana z antikomutatorjem (Enačba (4)).

Izračunati hočemo Greenovo funkcijo za nečistočo, torej postavimo v Enačbi (2) $A = d$ in $B = d^\dagger$ in dobimo

$$\hbar\omega \ll d; d^\dagger \gg = \langle [d, d^\dagger]_+ \rangle + \ll [d, H]_-; d^\dagger \gg. \quad (5)$$

Za operatorje c_k in c_k^\dagger veljajo običajne antikomutatorske relacije rabimo pa še

$$[c_{karkoli}^{karkoli}, d^{karkoli}]_+ = 0, \quad [d, d^\dagger]_+ = 1, \quad [d, d]_+ = 0 \quad in \quad [d^\dagger, d^\dagger]_+ = 0.$$

Malce več dela imamo torej z izračunom edinega komutatorja v Enačbi (5)

$$[d, H]_- = \sum_k \epsilon_k [d, c_k^\dagger c_k]_- + \epsilon_d [d, d^\dagger d]_- + \sum_k V_k^* [d, c_k^\dagger d]_- + \sum_k V_k [d, d^\dagger c_k]_-. \quad (6)$$

Gremo lepo po vrsti:

– > $[d, c_k^\dagger c_k]_- = d c_k^\dagger c_k - c_k^\dagger c_k d = d c_k^\dagger c_k - d c_k^\dagger c_k = 0$; v drugem členu razpisanega komutatorja smo d dvakrat preantikomutirali na začetek in s pomočjo zgornjih pravil pridelali dva minusa=en plus

– > $[d, d^\dagger d]_- = d d^\dagger d - d^\dagger d d = d - \underbrace{2d^\dagger d d}_0$; $d d^\dagger$ v prvem členu smo nadomestili z $(1 - d^\dagger d)$ in upoštevali, da dvakratno delovanje istega fermionskega operatorja na ustrezno stanje zaradi Paulijevega principa da ničlo

– > Pauli nam olajša delo tudi tukaj

– > $[d, d^\dagger c_k]_- = d d^\dagger c_k - d^\dagger c_k d = [d, d^\dagger]_+ c_k = c_k$.

Če označimo $\ll d; d^\dagger \gg = G_{dd}$ in $\ll c_k; d^\dagger \gg = G_{kd}$ se Enačba (5) po računariji glasi

$$\hbar\omega G_{dd} = 1 + \epsilon_d G_{dd} + \sum_k V_k G_{kd}. \quad (7)$$

Ker ne poznamo G_{kd} , uporabimo enačbo gibanja še za set operatorjev c_k in d^\dagger

$$\hbar\omega \ll c_k; d^\dagger \gg = \langle [c_k, d^\dagger]_+ \rangle + \ll [c_k, H]_-; d^\dagger \gg. \quad (8)$$

Ker smo pri izračunu prejšnjega komutatorja razložili prav vse korake, ne bomo sedaj razložili niti enega, saj verjamem, da ta posel obvladate. Kakorkoli, malce zabave vas bo pripeljalo do naslednjega rezultata

$$\hbar\omega G_{kd} = \epsilon_k G_{kd} + V_k^* G_{dd}. \quad (9)$$

Iz Enačb (7) in (9) lahko izrazimo iskano Greenovo funkcijo nečistoče

$$G_{dd} = \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_d) - \sum_k \frac{|V_k|^2}{(\epsilon - \epsilon_k)}}, \quad (10)$$

kjer je $\epsilon = \hbar\omega + is$. Vsoto v zgornjem izrazu nadomestimo z $\Lambda - i\Delta$ in prepostavimo, da sta Λ in Δ konstanti

$$G_{dd} = \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_d) - (\Lambda - i\Delta)}. \quad (11)$$

Hkrati smo predpostavili neodvisnost prekrivalnega integrala od stanja $|V_k| \rightarrow |V|$. Sedaj uporabimo formulo

$$-\frac{\hbar}{\pi} \text{Im}(G_{dd}) = (e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1) J(\omega) \quad (12)$$

iz katere izračunamo $J(\omega)$, ki ga potrebujemo za izračun iskane količine preko enačbe

$$\langle B(\tau)A(0) \rangle = \int J(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (13)$$

oz. v našem konkretnem primeru

$$n_d = \langle d^\dagger(\tau = 0)d(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) d\omega. \quad (14)$$

$J(\omega)$ se torej izraža z imaginarnim delom G_{dd}

$$J(\omega) = -\frac{\hbar}{\pi} \frac{-\Delta}{(\epsilon - \epsilon_d - \Lambda)^2 + \Delta^2} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}. \quad (15)$$

Izraz (14) izračunamo v dveh primerih:

a) $\mathbf{T=0}$

Enačba (14) se glasi

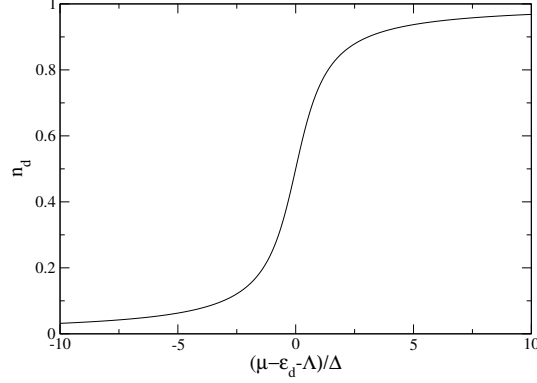
$$n_d = \int_{-\infty}^{\mu} \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\epsilon - \epsilon_d - \Lambda)^2 + \Delta^2} d\epsilon, \quad (16)$$

kjer nam je Fermijeva funkcija določila zgornjo mejo pri vrednosti kemijskega potenciala. Integral uženemo s pomočjo

$$\int \frac{dz}{a^2 + z^2} = \frac{1}{a} \arctan\left(\frac{z}{a}\right) + C \quad (17)$$

in dobimo rezultat

$$n_d = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\mu - \epsilon_d - \Lambda}{\Delta} \right). \quad (18)$$



Slika 2: Zasedenost nivoja nečistoče v odvisnosti od zasedenosti pasu

Kljub temu, da smo računali pri $T=0$, dobimo neničelno zasedenost že pri vrednostih kemijskega potenciala pod ϵ_d , kar je posledica hopping člena v hamiltonianu, ki omogoča preskoke iz pasu na nečistočo in obratno.

b) $|\mathbf{V}| \rightarrow \mathbf{0}$ oz. $\Delta, \Lambda \rightarrow \mathbf{0}$

V tem primeru se drugi ulomek (so trije) izraza (15) zlimitira v delta funkcijo, tako da se zasedenost izraža

$$n_d = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} \delta(\epsilon - \epsilon_d) d\epsilon = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_d - \mu)} + 1}. \quad (19)$$

V tem primeru se torej nečistoča obnaša kot navaden enoelektronski nivo, katerega zasedenost je podana s Fermijevo funkcijo pri ϵ_d .