UNIVERZA V LJUBLJANI FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Dielektrični preboj Mottovega izolatorja

Zala Lenarčič

Delo je pripravljeno v skladu s Pravilnikom o podeljevanju Prešernovih nagrad študentom, pod mentorstvom prof. dr. Petra Prelovška.

Ljubljana, 2011

Zahvala

Zahvalila bi se družini, ki mi je dala brezskrbno otroštvo; prijateljem, s katerimi smo se oblikovali in mentorju, prof. dr. Petru Prelovšku, ki me je učil držati nit.

Povzetek

V diplomskem delu s pomočjo preprostega primera enodimenzionalnega Mottovega izolatorja poskušam narediti korak k razumevanju preboja izolatorske faze pod vplivom močnega električnega polja. Vodilna nit je vprašanje, ali preboj lahko opišem z Landau-Zenerjevim neadiabatskim tuneliranjem med dvema nivojema. V skladu z razhajanji med originalnim Landau-Zenerjevim in mojim problemom je potrebno obravnavo primerno prikrojiti. Z upoštevanjem drugačne oblike energijskih nivojev in številčnosti prevodnih stanj prehode iz izolatorskega stanja v vzbujena opišem s prehajanjem v efektivne nivoje, ki so lastni Hubbardovemu modelu z U = 0, vseeno pa uspejo solidno opisati razpadanje izolatorskega stanja pri U > 0. Zaradi uporabljenih približkov ima opis svoje omejitve, a kljub temu poda polje potrebno za dielektrični preboj in opozori na odstopanja od teorije Landaua in Zenerja.

Ključne besede: Hubbardov model, Mottov izolator, dielektrični preboj, Landau-Zenerjeva teorija kvantnega tuneliranja.

Abstract

In the present work the dielectric breakdown of Mott insulator is studied on a simple Hubbard model. The main goal is to examine whether the Landau-Zener non-adiabatic tunneling between two levels is the appropriate mechanism for description of conduction of low fields. According to deviations between assumptions of the original Landau-Zener problem and features of the current one some modified approaches are needed. We have to account for different profiles of adiabatic energy levels and besides the ground state more than one excited state. The dielectric breakdown is quite sufficiently described using 'effective' levels which are the eigenstates of Hubbard Hamiltonian with U = 0, but still manage to explain the decay of insulating ground state at U > 0. Due to the use of these simplifications the description has its own limitations, nevertheless gives the threshold field for the dielectric breakdown and exposes problems of the direct use of the Landau-Zener approach.

Keywords: Hubbard model, Mott insulator, dielectric breakdown, Landau-Zener quantum tunneling.

PACS: 71.27.+a, 71.30.+h, 72.20.-i

Kazalo

1	Uvod	
2	Teoretični okvir2.1Močno korelirani sistemi2.2Preboj Mottovega izolatorja2.3Landau-Zenerjev neadiabatski prehod2.4Peierlsova substitucija2.5Kriterij za izolatorske lastnosti2.6Enodelčna teorija elektrona v zunanjem električnem polju	 11 13 14 17 19 20
3	Formulacija problema3.1Hamiltonov operator3.2Valovne funkcije	23 23 24
4	Iskanje energijskih nivojev in lastnih valovnih funkcij4.1Vezano stanje4.2Nevezana stanja	25 26 29
5	Časovni razvoj5.1Limita hitrega vklopa	33 33 35
6	Numerični rezultati6.1Starkova lokalizacija6.2Eksponentno razpadanje osnovnega stanja6.3Limitna obnašanja razpadnega koeficienta6.4Tuneliranje skozi bariero	37 37 40 41 43
7	Implikacija Landau-Zenerjevega tuneliranja7.1Efektivno stanje7.2Tuneliranje znotraj pasu vzbujenih stanj	45 46 47
8	Analitična obravnava 8.1 Verjetnost za prehod v efektivno stanje	49 49 53 55

9	Ostale objavljene raziskave				
	9.1	Experimentalne potrditve	61		
	9.2	Teoretične objave	63		
10 Zaključek					
Literatura					
\mathbf{A}	Ena	kost razpadnih koeficientov $\Gamma_1{}^0$ in Γ_p	69		

Poglavje 1

Uvod

Neravnovesni fazni prehodi in nelinearni transport v močno koreliranih sistemih sta v zadnjem času temi, deležni številnih teoretičnih in eksperimentalnih obravnav. Eden izmed najbolj fundamentalih primerov s tega področja je dielektrični preboj, pri katerem se prehod iz izolatorske faze zgodi zaradi prisotnosti močnega električnega polja. Tipično se ga opazuje na t.i. Mottovem izolatorju, ki je osnovno stanje polzapolnjenega Hubbardovega sistema, pri katerem izolatorska faza nastopi zaradi močnega Coulombskega odboja med elektroni. Ta, figurativno rečeno, zamrzne njihovo gibanje. Prehod iz izolatorske v prevodno fazo je v splošnem lahko posledica različnih dejavnikov. Eden izmed njih je dopiranje, ki sistem premakne iz polzapolnjenega stanja in vnese nosilce naboja, česar posledice so dokaj dobro raziskane. Kot naravno nadaljevanje pa poraja vprašanje, kaj se z Mottovim izolatorjem zgodi, če ga postavimo v močno električno polje.

Eksperimentalno je bil dielektrični preboj opažen v tipičnih Mottovih izolatorjih, kupratih Sr_2CuO_3 in $SrCuO_2$ [1] ter v organskih materialih [2]. V zadnjem času pa je problem nelinearnega transporta postal zanimiv tudi zaradi možnosti realizacije Mottovega izolatorja v hladnih plinih [3].

Teoretično je opis zaradi sočasne prisotnosti dveh neperturbativnih efektov, močne korelacije in velikega električnega polja kompliciran in še ne popolnoma raziskan. V objavljenih člankih [4], [5], [6] se avtorji idejno navežejo na dielektrični preboj v pasovnih izolatorjih, ki je dobro opisan v okviru Landau-Zenerjevega tuneliranja med valenčnim in prevodnim pasom. Verjetnost za tuneliranje med dvema enodelčnima nivojema sta ločeno izpeljala Landau [7] in Zener [8] že leta 1932. Ta ideja tuneliranja se poskuša uporabiti tudi za opis dielektričnega preboja v Mottovem izolatorju. Za razliko od pasovnih izolatorjev, kjer se elektroni in vrzeli, nastali zaradi polja, obnašajo kot prosti, je pri Mottovih izolatorjih potreben večdelčen formalizem. Čeprav avtorji omenjajo dobro ujemanje med numeričnim časovnim razvojem in napovedmi Landau-Zenerjeve formule, se zdi, da je še vedno odprt raziskovalni prostor za analitično potrditev oziroma zavrnitev mehanizma na sistemih z npr. drugačno magnetizacijo; za razumevanje sipanja med vzbujenimi stanji, ki je tipičen večdelčen efekt; za teorijo pri temperaturi T > 0, ki je potrebna za korektno primerjavo z eksperimentom, in gotovo še več.

V diplomskem delu sem poskušala primernost Landau-Zenerjevega tuneliranja preveriti na kar se da preprostem modelu, čigar osnovno stanje je še vedno Mottov izolator. Tak je polzapolnjen Hubbardov model v eni dimenziji, ki pa je spinsko polariziran tako, da imajo vsi delci razen enega spine obrnjene v isto smer. Postavitev kljub svoji preprostosti ni čisto za lase privlečena, saj bi se jo dalo realizirati v močnem magnetnem polju. V 2. poglavju omenim glavne teoretične koncepte, ki uokvirjajo problem tega diplomskega dela. To vključuje tudi Zenerjevo izpeljavo za verjetnost tuneliranja med dvema stanjema. V 3. poglavju predstavim glavne lastnosti sistema, ki sledijo direktno iz Hamiltonovega operatorja. K temu spadajo lastne energije in stanja, ki so osnova za nadaljnja razmišljanja. V 5. poglavju uvedem časovni razvoj sistema in numerične rezultate, ki iz tega sledijo predstavim v 6. poglavju. Te rezultate poskušam interpretirati in kolikor se da analitično opisati v 8. poglavju. Ključna ideja tega opisa je vpeljava efektivnih stanj, ki niso lastna Hamiltonovemu operatorju, vseeno pa se s prehodi vanje dobro opiše razpadanje izolatorskega stanja. Efektivna stanja so definirana v 7. poglavju, približki in omejitve, ki jih prinesejo pa so komentirani še v 8. poglavju. Na koncu v 9. poglavju povzamem objavljeno publikacijo glede eksperimentalnih in teoretičnih aspektov preboja Mottovega izolatorja in v njej objavljene rezultate primerjam z rezultati diplomskega dela.

Poglavje 2

Teoretični okvir

2.1 Močno korelirani sistemi

Za opis elektronov v kristalu potrebujemo Hamiltonov operator, sestavljen iz kinetičnega in potencialnih členov. Elektroni čutijo potencial, ki ima več izvorov. Ti so zunanja polja, interakcija z ionsko kristalno mrežo in medsebojna interakcija z ostalimi elektroni

$$H = H_{kin} + V_{ext} + V_{ion-e} + V_{e-e}.$$

Zaenkrat postavimo $V_{ext} = 0$. Izmed zgornjih operatorjev sta H_{kin}, V_{ion-e} enodelčna, Coulombski odboj med elektroni V_{e-e} pa dvodelčen, kar oteži reševanje. V enodelčnem približku lahko Coulombski odboj med elektroni zanemarimo, vendar obstajajo pojavi, ki za razložitev potrebujejo elektronsko-elektronsko interakcijo. Tak primer so snovi, ki so izolatorji tudi pri nezapolnjenih enodelčnih pasovih. Sisteme, kjer je ta medelektronska interakcija pomembna, navadno imenujemo močno korelirani sistemi. Moč odbojne interakcije je odvisna predvsem od značaja orbital.

V prvem približku reševanje večdelčnega problema prevedemo na reševanje enodelčnega, tako da elektron postavimo v povprečen potencial ostalih elektronov. Največkrat uporabljen primer takega približka je Hartree-Fochov približek. Ta poleg povprečnega polja ostalih elektronov vsebuje še izmenjalne člene.

V naslednjim približku v račun vzamemo samo nekatere prispevke dvodelčnih operatorjev. Za uvedbo enodelčnih in dvodelčnih operatorjev v jeziku druge kvantizacije moramo najprej vpeljati operatorje polja, ki ustvarijo delec v točki **r**. Definiramo jih z

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{j} c_{j} \varphi_{j}(\mathbf{r}),$$

kjer je c_j^+ fermionski kreacijski operator, ki ustvari delec v stanju j, φ_j pa je kompletna enodelčna baza funkcij. Enodelčne in dvodelčne operatorje s tem zapišemo kot

$$H^{(1)} = \int d\mathbf{r} \ \psi_i^+(\mathbf{r}) h^{(1)} \psi_j(\mathbf{r}) = \sum_{ij} h^{(1)}_{ij} c_i^+ c_j, \quad h^{(1)}_{ij} = \int d\mathbf{r} \ \varphi_i^*(\mathbf{r}) h^{(1)}(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}),$$

$$H^{(2)} = \sum_{ii'jj'} h^{(2)}_{ii'jj'} c_i^+ c_{i'}^+ c_{j'} c_j, \quad h^{(2)}_{ii'jj'} = \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \ \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_{i'}^*(\mathbf{r}') h^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{j'}(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}).$$

Za opis izolatorjev, polprevodnikov in tudi pasov d in f orbital v kovinah, za katere so značilni ozki valenčni elektronski pasovi, navadno delamo v približku tesne vezi. Pri njem so bazna stanja $\varphi_i(\mathbf{r})$ Wannierove funkcije in c_i, c_i^+ njim pripadajoči operatorji. V tem približku enodelčni del Hamiltonovega operatorja parametriziramo s $h_{ij}^{(1)} = -t_{ij}$, če sta i, j najbližja soseda in $h_{ij}^{(1)} = 0$ sicer. Za enostaven enoatomni kristal, kjer ima vsak ion samo eno orbitalo, je $t_{ij} = t_h$ za vsa mesta enak.

Z uporabo operatorjev polja se dvodelčni Coulombski potencial zapiše kot

$$V_{e-e} = \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r_1} d\mathbf{r_2} V(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) \sum_{\sigma, \sigma'} \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r_1}) \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r_2}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r_2}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r_1})$$
$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \int \int d\mathbf{r_1} d\mathbf{r_2} V(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) \varphi_i^*(\mathbf{r_1}) \varphi_j^*(\mathbf{r_2}) \varphi_l(\mathbf{r_2}) \varphi_k(\mathbf{r_1}) \sum_{\sigma, \sigma'} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma'}^+ c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma}, \quad (2.1)$$

pri čemer je eksplicitno izpisana notranja prostostna stopnja stanj - spin, ki je določen s projekcijo $\sigma = \pm \frac{1}{2}$. V splošnem je v indeksu $i = (n_i, m_i)$ vsebovano mesto iona n_i , na katerem je Wannierova funkcija lokalizirana in orbitala m_i . Za enoatomni kristal, kjer ima vsak ion samo eno orbitalo, naj *i* označuje kar mesto iona. V tem primeru je v (2.1) najpomembnejši t.i. Hubbardov člen, ki ustreza interakciji med elektronoma na isti orbitali (i = j = k = l).

$$H_U = \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\varphi_i(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_i(\mathbf{r}_2)|^2 c^+_{i,\sigma} c^+_{i,-\sigma} c_{i-\sigma} c_{i\sigma}$$
$$= \sum_i U c^+_{i,\sigma} c_{i\sigma} c^+_{i,-\sigma} c_{i-\sigma} = \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$
(2.2)

V izpeljavi je uporabljeno vedenje, da imata zaradi Paulijevega izključitvenega načela elektrona na isti orbitali različna spina. Upoštevane so še trivialne komutacijske relacije za nastopajoče kreacijske in anihilacijske operatorje tako, da se dobi zapis z operatorjem lokalnega števila delcev z danim spinom $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$. Ključen element te interakcije je

$$U = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\varphi_i(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_i(\mathbf{r}_2)|^2,$$

ki pove lokalni Coulombski odboj. Tipično ima vrednosti $U \sim 6 - 8eV$. Hamiltonov operator za Hubbardov model, ki od vseh členov v dvoelektronski interakciji (2.1) vsebuje le Hubbardovega, je torej enak

$$H = -t_h \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (c^+_{i\sigma} c_{j\sigma} + c^+_{j\sigma} c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \qquad (2.3)$$

kjer je $\langle i, j \rangle$ vsota po parih najbližjih sosedov. Primeren je za opis ozkih elektronskih pasov, kjer velja $U > t_h$. Pri tem parameter enodelčnega dela Hamiltonovega operatorja t_h kvantificira zmožnost skakanja med mesti v kristalu. Hubbardov model ima lastnost, da je pri dovolj velikem U njegovo osnovno stanje izolatorsko. V polzapolnjenem enodimenzionalnem sistemu pa je to res celo za vsak U > 0. Naivna interpretacija izolatorske lastnosti je, da elektron raje ostaja na svojem mestu, saj se mu v primeru, ko skoči na sosednje mesto, ki je že zasedeno, energija poveča za U. Snovi, katerih izolatorske lastnosti opišemo s Hubbardovim modelom, imenujemo *Mottovi izolatorji*.



Slika 2.1: Možna končna stanja v perturbaciji do drugega reda.

Ce je $U \gg t_h$, lahko kinetični člen vzamemo kot perturbacijo in si pogledamo procese do drugega reda. Slika 2.1 prikazuje dve možni končni stanj. Vmesno stanje je fiktivno, saj ima energijo za U večjo od osnovnega. Recimo, da obravnavamo polzapolnjen primer $n_i = 1$, pri katerem vmesno stanje vedno vsebuje dvojno zasedeno orbitalo. Perturbacijo lahko zapišemo s

$$H' = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{2t_h^2}{U} c_{i\sigma'}^+ c_{j\sigma'} c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}.$$
(2.4)

Ce izvedemo sumacijo po spinih in kreacijske/anihilacijske operatorje zapišemo s spinskimi operatorji

$$S_{nz} = \frac{1}{2} (c_{n\uparrow}^+ c_{n\uparrow} - c_{n\downarrow}^+ c_{n\downarrow}), \quad S_{n+} = c_{n\uparrow}^+ c_{n\downarrow}, \quad S_{n-} = c_{n\downarrow}^+ c_{n\uparrow},$$

dobimo

$$H' = \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{4t_h^2}{U} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4}n_i n_j).$$
(2.5)

Za paralelno konfiguracijo spinov gre $H' \rightarrow 0$, kar le pove, da elektroni ne morejo skočiti na sosednje mesto, če je tam že elektron s paralelnim spinom. Ker je predfaktor $4t_h^2/U > 0$, perturbativni Hamiltonov operator kaže na antiferomagnetno interakcijo med spini, ki pa je v bistvu posledica gibanja elektronov. S tem smo uspeli razložiti še antiferomagnetno naravo osnovnega stanja Mottovih izolatorjev.

2.2 Preboj Mottovega izolatorja

V polzapolnjenem sistemu z v povprečju enim elektronom na osnovno celico (n = 1), elektroni stremijo k temu, da so vsak na svojem ionu in da so antiferomagnetno urejeni. Osnovno stanje je izolatorske narave in je od vzbujenih stanj ločeno z energijsko vrzeljo. Če snov dopiramo z nekimi drugimi elementi tako, da povečamo ali zmanjšamo zasedenost pasu stran od n = 1, bo sistem postal prevodnik. Efektivni nosilci toka so dvojno zasedena mesta s spinom gor in dol (dublon) oziroma nezasedena mesta (holon). Taki prehodi iz izolatorja v kovino so v močno koreliranih snoveh eksperimentalno dobro potrjeni.

Naravno se je vprašati, kaj se zgodi, če Mottov izolator postavimo v električno polje. Kot eksperimentalno opaženo [1] se tudi v tem primeru zgodi preboj izolatorja. Pri tem mora biti električno polje dovolj močno, da kreira dublone in holone v Mottovem izolatorskem osnovnem stanju [9]. Predlagano je bilo [4], [5], da je mehanizem za kreacijo večdelčen analog Zenerjevega preboja, ki je sicer teorija za preboj v polprevodnikih. Podobno kot tam, naj bi se tudi pri močno koreliranih sistemih preboj izolatorske faze s kreiranjem dublonov in holonov dalo razumeti kot tuneliranje skozi bariero, le da dubloni in holoni zamenjajo elektrone in vrzeli. Če je res tako, obliko bariere določata odboj med elektroni na istem mestu U in električno polje E, katerega potencial je v 1D enak xF, F = eE. Če ju združimo, dobimo bariero, prikazano na sliki 2.2. Za sistem, ki je v



Slika 2.2: Tuneliranje skozi bariero.

osnovnem stanju pri energiji $\epsilon_0,$ naj bi polj
eE povzročilo nastaneh vrzeli in dublona na razdalj
i l_{dh}

$$\epsilon_0 \sim U - l_{dh} F. \tag{2.6}$$

Ceprav je ta razmisleh bolj ko ne le shematičen, vseeno nakazuje, da obstaja minimalno polje E_{th} , potrebno za tak dogodek, kar se ujema s splošno opazko, da za preboj izolatorskega stanja ravno tako obstaja neko mejno polje. Pri majhnih električnih poljih je namreč razdalja med vrzeljo in dublonom, pri kateri bi bila izpolnjena enakost (2.6), velika. In ker je prekrivanje takega vzbujenega stanja in osnovnega izolatorskega stanja majhno, je posledično verjetnost za tuneliranje pri majhnih poljih zanemarljiva. Slika 2.2 močno spominja na obravnavo razpada jeder. Omeniti gre, da je fizika v primeru Mottovega izolatorja drugačna, saj polja, ki so večja od E_{th} , povzročajo kontinuirano nastajanje novih parov dublonov in holonov in ne le enkratnega razpada kot v jedrskem primeru.

2.3 Landau-Zenerjev neadiabatski prehod

Zgodovinsko gledano sta se s problemom tuneliranja med dvema enodelčnima stanjema prva uspešno spoprijela Landau [7] in Zener [8], oba že v letu 1932. Vsak se je reševanja lotil na svoj način. V glavnih postankih bom opisala Zenerjev pristop k problemu.

Imejmo sistem (npr. atom), ki je odvisen od parametra R in ima dve lastni stanji ψ_1, ψ_2 (npr. elektronski stanji), katerih energiji sta $E_1(R), E_2(R)$. Značilnost teh dveh nivojev je, da se okrog parametra R_0 približata drug drugemu, kot prikazuje slika 2.3. Predpostavimo, da energiji obeh stanj $E_1(R), E_2(R)$ tvorita hiperbolično obliko, ki ima za asimptoti funkciji $\epsilon_1(R), \epsilon_2(R)$ in razdaljo med temenoma $E_1(R_0) - E_2(R_0) = 2\epsilon_{12}(R_0)$. Namesto v bazi lastnih stanj bomo delali v t.i. diabatski bazi. Stanji ϕ_1, ϕ_2 iz te baze sta ortogonalni in vsako za sebe opisuje situacijo, pri kateri delec (npr. elektron) pri variaciji parametra R okrog R_0 popolnoma preide iz enega nivoja v drugega. Po dogovoru ima



Slika 2.3: Odvisnost energije nivojev E_1 in E_2 od parametra R z označenima asimptotskima premicama ϵ_1 in ϵ_2 .

 ϕ_i karakteristik
e ψ_i za $R \ll R_0.$ Ker ϕ_1,ϕ_2 nista lastni stanji Hamilton
ovega operatorja, izpolnjujeta

$$H(R)\phi_1(x,R) = \epsilon_1(R)\phi_1(x,R) + \epsilon_{12}(R)\phi_2(x,R), H(R)\phi_2(x,R) = \epsilon_{12}(R)\phi_1(x,R) + \epsilon_2(R)\phi_2(x,R).$$
(2.7)

Problem rešujemo v okviru naslednjih poenostavitev:

- parameter R je kot funkcija časa poznana spremenljivka. Če je atom v zunanjem polju in je to polje kar parameter R, potem polje obravnavamo kot klasično spremenljivko, katere vrednost točno poznamo v vsakem trenutku.
- predpostavimo, da se prehodi med stanjema dogajajo v glavnem v ozkem intervalu okrog vrednosti parametra R_0 tako, da lahko razliko $\epsilon_1 \epsilon_2$ aproksimiramo z linearno funkcijo časa, funkcije $\epsilon_{12}(R = R_0), \phi_1(x, R_0), \phi_2(x, R_0)$ pa vzamemo kot neodvisne od časa, torej izračunane pri $R = R_0$.

$$\frac{1}{\hbar}(\epsilon_1 - \epsilon_2) = \alpha t,$$

$$\epsilon_{12}^{\cdot} = \dot{\phi}_1 = \dot{\phi}_2 = 0.$$
(2.8)

To je dobro izpolnjeno, ko je $\epsilon_{12}(R_0)$ majhen. Poudariti gre, da je ta predpostavka ključna. Za splošnejše oblike pasov zato ne moremo uporabiti končnega rezultata, ki ima korenine v predpostavljeni hiperbolični obliki.

Valovno funkcijo v diabatski bazi zapišemo kot

$$\psi = C_1(t)e^{\frac{i}{\hbar}\int^t \epsilon_1 dt}\phi_1 + C_2(t)e^{\frac{i}{\hbar}\int^t \epsilon_2 dt}\phi_2.$$
(2.9)

Če to vstavimo v Schrödingerjevo enačbo, za koeficiente dobimo relaciji, ki sta sklopljeni

diferencialni enačbi

$$\dot{C}_1 = \frac{i}{\hbar} \epsilon_{12} \ e^{-\frac{i}{\hbar} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} \ C_2,$$

$$\dot{C}_2 = \frac{i}{\hbar} \epsilon_{12} \ e^{\frac{i}{\hbar} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} \ C_1.$$
 (2.10)

Sistem rešujemo pri začetnih pogojih, da je delec ob $t,R\sim-\infty$ v spodnjem stanju ψ_2 (oz. ekvivalentno v $\phi_2)$

$$C_1(-\infty) = 0, \quad |C_2(-\infty)| = 1.$$
 (2.11)

Z eliminacijo C_2 iz sistema (2.10) dobimo eno samo enačbo drugega reda

$$\frac{d^2C_1}{dt^2} + \left(\frac{i}{\hbar}(\epsilon_1 - \epsilon_2) - \frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_{12}}\right)\frac{dC_1}{dt} + \left(\frac{\epsilon_{12}}{\hbar}\right)^2 C_1 = 0.$$
(2.12)

Z upoštevanjem predpostavk (2.8) in s substitucijo $C_1 = e^{-\frac{i}{2\hbar}\int(\epsilon_1-\epsilon_2)dt}U_1$, v enačbi (2.12) prepoznamo Webrovo enačbo za U_1

$$\frac{d^2 U_1}{dz^2} + (n + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4})U_1 = 0, \quad z = \sqrt{\alpha}e^{-i\pi/4}t, n = i\frac{\epsilon_{12}^2}{\hbar^2\alpha}$$
(2.13)

Njene rešitve so analitične Webrove funkcije $D_{-n-1}(-iz)$. Te imajo kot funkcije parametra z v kompleksni ravnini v smeri $e^{-i3\pi/4}$ asimptotsko obnašanje, ki je kompatibilno z našimi začetnimi pogoji. Upoštevajoč te začetne pogoje končno dobimo, da

$$|C_1(\infty)|^2 = 1 - \exp\left(-\frac{2\pi\epsilon_{12}^2}{\hbar\frac{d}{dt}(\epsilon_1 - \epsilon_2)}\right),$$
 (2.14)

kar pomeni, da je verjetnost, da je delec tuneliral v zgornji nivo enaka

$$P = \exp\left(-\frac{2\pi\epsilon_{12}^2}{\hbar\frac{d}{dt}(\epsilon_1 - \epsilon_2)}\right) = \exp\left(-\frac{2\pi\epsilon_{12}^2}{\hbar\alpha}\right).$$
 (2.15)

Verjetnost za prehod je torej parametrizirana z najmanjšim razmikom med nivojema in s 'hitrostjo', s katero se približujeta drug drugemu. Odvisnosti sta smiselni, saj za manjši razmik ϵ_{12} pričakujemo večjo verjetnost za tuneliranje. Verjetnost P kaže ustrezno odvisnost tudi za adiabatsko limito. Ko parameter R zelo počasi spreminjamo, namreč pričakujemo, da bo delec sledil svojemu nivoju in ne bo tuneliral v drugega. In verjetnost za tuneliranje je v limiti $\lim_{\alpha\to 0} P \to 0$ res eksponentno majhna.

Dobljeni rezultati naj bi bili uporabni za popis prehodov med elektronskimi stanji v atomu, ko sta pomembni samo dve stanji. Poleg tega morajo biti za stanji izpoljenje še predpostavke (2.8). Če hočemo ta princip uporabiti za obrazločitev preboja Mottovega izolatorja, moramo najprej premisliti, kaj se spremeni, ko gremo iz enodelčnih stanj v večdelčna. Poleg tega pa se moramo še prepričati, da so res izpolnjene predpostavke, uporabljene v Zenerjevi izpeljavi.

2.4 Peierlsova substitucija

V prvi stopnji raziskovanja lastnosti preboja Mottovega izolatorja, si je treba najprej izbrati ustrezen Hamiltonov operator. Mottove izolatorje popiše že Hubbardov model, potrebno pa je v model vpeljati še električno polje, kar je v tem poglavju narejeno za 1D sistem.

Standardno ga lahko vpeljemo preko potencialov na dva načina. Prvi je s skalarnim potencialom, ki je za 1D sistem enak Fx, kjer je F = eE sorazmeren električnemu polju E. V Hamiltonov operator to vstopi kot

$$H(F) = H_H - FX, \quad X = \sum_j jn_j,$$
 (2.16)

kjer je X operator pozicije. Tak Hamiltonov operator je primeren le za sisteme z odprtimi robnimi pogoji. Tudi sam operator je odprt, saj lahko s pomikanjem elektrona v $j \to -\infty$ neskončno zmanjšamo energijo.

Druga možnost pa je preko vektorskega potenciala. Tak pristop je primeren, ko imamo periodične robne pogoje. Električno polje efektivno vnesemo prek spremenljivega magnetnega pretoka, ki prebada 1D sistem zaključen v obroč. Magnetni pretok Φ izberemo



Slika 2.4: Magnetni pretok $\Phi(t)$, ki prebada 1D sistem zaključen v obroč.

tako, da v področju, kjer se elektroni gibljejo, ni magnetnega polja $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$. V teh področjih torej lahko vektorski potencial izrazimo kot gradient skalarnega polja, $\mathbf{A} = \nabla \Lambda$, kjer je $\Lambda = \int^x \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}$.

Splošen Hamiltonian, ki vsebuje vektorski potencial in ne vsebuje skalarnega potenciala, se zapiše kot

$$H = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \ \psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{x}) \left[\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^{2}}{2m} \right] \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) + U \int d\mathbf{x} \ n_{\uparrow}(\mathbf{x}) n_{\downarrow}(\mathbf{x}), \tag{2.17}$$

kjer je $e = -e_0$. S členom z U smo upoštevali Coulomski odboj med elektronoma na istem mestu. Ker delamo na obroču, mora n-elektronska valovna funkcija

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1\dots\sigma_n} \int d\mathbf{x}_1\dots d\mathbf{x}_n \Psi(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_n) \psi_{\sigma_1}^+(\mathbf{x}_1)\dots\psi_{\sigma_n}^+(\mathbf{x}_n)|0\rangle$$
(2.18)

upoštevati periodične robne pogoje

$$\Psi(\dots, x_i + l, \dots) = \Psi(\dots, x_i, \dots), \qquad (2.19)$$

kjer je l obseg obroča. Če naredimo umeritveno transformacijo t.i. Peierlsovo substitucijo [10], pri kateri se kreacijski in anihilacijski operatorji transformirajo tako, da je po transformaciji operator polja

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \to \tilde{\psi}_{\sigma} = \psi_{\sigma}(\mathbf{x})e^{-i\frac{e}{\hbar}\Lambda},$$
(2.20)

se bo
z $\tilde{\psi}_{\sigma}$ Hamiltonov operator zapisal kot

$$\widetilde{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \ \widetilde{\psi}_{\sigma}^{+}(\mathbf{x}) e^{-i\frac{e}{\hbar}\Lambda} \left[\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^{2}}{2m} \right] e^{i\frac{e}{\hbar}\Lambda} \widetilde{\psi}_{\sigma}(\mathbf{x}) + U \int d\mathbf{x} \ n_{\uparrow}(\mathbf{x}) n_{\downarrow}(\mathbf{x})
= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \ \widetilde{\psi}_{\sigma}^{+}(\mathbf{x}) \ \frac{\mathbf{p}^{2}}{2m} \ \widetilde{\psi}_{\sigma}(\mathbf{x}) + U \int d\mathbf{x} \ n_{\uparrow}(\mathbf{x}) n_{\downarrow}(\mathbf{x}),$$
(2.21)

pri čemer smo uporabili, da je

$$\begin{split} e^{-i\frac{e}{\hbar}\Lambda}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2 e^{i\frac{e}{\hbar}\Lambda} \\ &= e^{-i\frac{e}{\hbar}\Lambda}(-\hbar^2\nabla^2 + ie\hbar(\nabla\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\nabla) + e^2A^2)e^{i\frac{e}{\hbar}\Lambda} \\ &= e^{-i\frac{e}{\hbar}\Lambda}\left(-\hbar^2\nabla^2\left(i\frac{e}{\hbar}\Lambda\right) + ie\hbar\nabla\cdot\mathbf{A} + ie\hbar\mathbf{A}\cdot i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A} + e^2A^2\right)e^{i\frac{e}{\hbar}\Lambda} - \hbar^2\nabla^2 \\ &= -\hbar^2\nabla^2. \end{split}$$

Dosežemo torej, da vektorski potencial v Hamiltonovem operatorju ne nastopa več eksplicitno. Ker pa je naš sistem zaključen v obroč, transformacija vpliva tudi na robne pogoje. Če valovno funkcijo (2.18) izrazimo z $\tilde{\psi}_{\sigma_i}(x_i)$, potem vidimo, da velja

$$\tilde{\Psi}(\dots, x_i + l, \dots) = \tilde{\Psi}(\dots, x_i, \dots) e^{i\frac{e}{\hbar}\Phi}, \qquad (2.22)$$

kjer je

$$\Phi = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \tag{2.23}$$

celoten magnetni pretok, ki gre skozi obroč. Očitno Peierlsova substitucija vpliva le na kinetični člen. Zato lahko namesto transformacije kreacijskih in anihilacijskih operatorjev transformiramo le parameter t_{ij} med mestoma i in j, operatorje pa pustimo nespremenjene.

$$\int d\mathbf{x} \,\varphi_j^*(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_i(\mathbf{x}) \,\cdot\, e^{i\frac{e}{\hbar}\Lambda(x_j)} c_j^+ e^{-i\frac{e}{\hbar}\Lambda(x_i)} c_i \longrightarrow \int d\mathbf{x} \,\varphi_j^*(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_i(\mathbf{x}) e^{i\frac{e}{\hbar}\int_{\mathbf{x_i}}^{\mathbf{x_j}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}} \cdot c_j^+ c_i$$

Ce je komponenta polja **A** vzdolž obroča konstantna in je na obroču L mest, na katerih so lokalizirane $\varphi_i(\mathbf{x})$, lahko izraz za t_{ji} še naprej razvijemo v

$$t_{ji} \rightarrow t_{ji} e^{i\frac{e}{\hbar} \int_{x_i}^{x_j} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}} = t_{ji} e^{i\frac{e}{\hbar} \frac{\Phi}{L}}.$$
 (2.24)

Električno poljeE,ki ga elektroni čutijo na verigi, dobimo iz pretoka Φ preko Faradayevega zakona

$$E = -\frac{1}{l}\frac{\partial\Phi}{\partial t}.$$
(2.25)

Končna diskretna oblika Hamiltonovega operatorja, ki vsebuje Hubbardov člen in je umeritveno transformiran, je

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} t_{ji} \left(e^{i\frac{e}{\hbar}\frac{\Phi}{L}} c_j^+ c_i + h.c. \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$
(2.26)

2.5 Kriterij za izolatorske lastnosti

Mehanizmi, zaradi katerih se snovi kažejo kot izolatorji, so različni. Dobro je, da imamo določene kriterije, glede na katere lahko presodimo, ali je snov izolator. Pri najpreprostejših - pasovnih izolatorjih za kriterij vzamemo zapolnjenost pasov. Pri njih je najvišji enodelčni pas popolnoma zapolnjen in od naslednjega praznega pasu ločen z energijsko vrzeljo. Pri temperaturi T = 0 je to dovolj, da snov ne prevaja toka.

Z določenim kriterijem bi radi opredelili tudi Mottove izolatorje. Tak splošen kriterij je t.i. Kohnov kriterij, katerega vpeljava bo na kratko motivirana v tem poglavju. Pri tem bo vpeljan operator toka, ki bo v delu omenjen še kasneje.

Operator toka dobimo iz infinitezimalne oblike Hamiltonovega operatorja (2.26) pri malih ${\bf A}$

$$H(\mathbf{A}) \approx H(0) - e\mathbf{A} \cdot \mathbf{j} + \frac{e^2}{2} \mathbf{A} \cdot \tau \mathbf{A},$$
 (2.27)

kjer je $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$,

$$\mathbf{j} = \frac{i}{\hbar} \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \mathbf{R}_{ij} (c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma} - h.c.)$$
$$\tau = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \mathbf{R}_{ij} \otimes \mathbf{R}_{ij} (c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma} + h.c.).$$

Iz enačbe(2.27)vidimo, da se da tok izraziti kot v
soto toka delcev in diamagnetnega prispevka

$$\mathbf{J}_e = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{A}} = e\mathbf{j} - e^2 \tau \mathbf{A}.$$
 (2.28)

Iz razvoja (2.27) izračunajmo energije lastnih stanj s pomočjo standardne perturbativne teorije. Upoštevati moramo člene do drugega reda v \mathbf{A} .

$$E_{n}(\mathbf{A}) = E_{n} - e\mathbf{A} \cdot \langle n | \mathbf{j} | n \rangle + \frac{e^{2}}{2} \mathbf{A} \cdot \langle n | \tau | n \rangle \mathbf{A}$$
$$-e^{2} \mathbf{A} \cdot \sum_{m, E_{m} \neq E_{n}} \frac{\langle n | \mathbf{j} | m \rangle \otimes \langle m | \mathbf{j} | n \rangle}{E_{m} - E_{n}} \mathbf{A}$$
(2.29)

Za vsak nivo definiramo koeficient

$$\mathcal{D}_{n} = \frac{1}{2L} \langle n | \tau | n \rangle - \frac{1}{N} \sum_{m, E_{m} \neq E_{n}} \frac{\langle n | \mathbf{j} | m \rangle \otimes \langle m | \mathbf{j} | n \rangle}{E_{m} - E_{n}}$$
$$= \frac{1}{2L} \frac{1}{e^{2}} \frac{\partial^{2} E_{n}(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A} \partial \mathbf{A}} |_{\mathbf{A}=0}, \qquad (2.30)$$

kjer je L skupno število mest. Končno se lahko spet vrnemo k splošnemu kriteriju za izolatorsko/kovinsko naravo snovi, ki mora biti povezana z operatorjem toka. Občutljivost toka na vektorski potencial lahko izrazimo z razvojem njegove pričakovane vrednosti okrog $\mathbf{A} = 0$

$$\langle J_n(\mathbf{A})\rangle = \langle J_n(\mathbf{0})\rangle + \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A} \partial \mathbf{A}}|_{\mathbf{A}=0} \mathbf{A} = \langle J_n(\mathbf{0})\rangle + 2Le^2 \mathcal{D}_n \mathbf{A}.$$
 (2.31)

Odziv v toku je v tem približku kar sorazmeren \mathcal{D}_n . Recimo, da se omejimo samo na temperaturo T = 0, ko je pomemben le t.i. koeficient togosti \mathcal{D}_0 . Glede na zgornjo sorazmernost je smiseln (t.i. Kohnov) kriterij sledeč: snov je za

 $\lim_{L \to \infty} \mathcal{D}_0(L) = \begin{cases} 0 & \text{izolator,} \\ \text{končen} & \text{električni prevodnik.} \end{cases}$

2.6 Enodelčna teorija elektrona v zunanjem električnem polju

Ceprav bo v diplomskem delu obravnavan sistem močno koreliranih elektronov v električnem polju, kar je tipično večdelčen problem, se bo izkazalo, da opazimo tudi enodelčne pojave. Zato bo že v tem poglavju podano nekaj enodelčne teorije, potrebne za razumevanje opaženih pojavov.

Obnašanje delca v kristalu, ki je v zunanjem električnem polju, lahko v prvem približku opišemo s kvazi-klasično obravnavo. V kvazi-klasičnem približku so enačbe gibanja

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}},\tag{2.32}$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \qquad (2.33)$$

kjer je ϵ_n disperzijska zveza za n-ti enodelčni nivo. Ob poljubnem času torej velja $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) - e_0 \mathbf{E}t/\hbar$, če $\mathbf{E} \neq \mathbf{E}(t)$. Ker je disperzijska relacija ϵ_n v k-prostoru omejena, in če jo razširimo izven 1BC tudi periodična funkcija, bo kot posledica enačbe (2.32) enako veljalo tudi za $v_n(\mathbf{k})$. Za primer lahko vzamemo disperzijsko zvezo za osnovno stanje 1D kristala v približku tesne vezi

$$\epsilon_1 = E_1 - 2t_h \cos(ka). \tag{2.34}$$

V tem primeru sta hitrost in pozicija delca v semi-klasični sliki enaka

$$v(t) = \frac{2at_h}{\hbar} \sin a \left(k_0 - \frac{e_0 E t}{\hbar} \right),$$

$$z(t) = \int^t v(t') dt' = z_0 + \frac{2t_h}{e_0 E} \cos a \left(k_0 - \frac{e_0 E t}{\hbar} \right)$$
(2.35)

in sta očitno periodični funkciji časa s periodo $\tau_B = 2\pi\hbar/e_0Ea$. Za razliko od prostega elektrona se elektron v kristalu ne pospešuje v neskončnost, ampak se pravzaprav obnaša oscilatorno. Te oscilacije imenujemo Blochove oscilacije, periodo τ_B pa Blochova perioda. Sodeč po amplitudi nihanj koordinate delca je ta lokaliziran na območju $4t_h/e_0E$. Korenine tega mogoče presenetljivega rezultata so v periodičnem potencialu ionske mreže, ki je implicitno prisoten v omejeni disperzijski relaciji.

Račun lahko naredimo tudi v čisto kvantni sliki z iskanjem lastnih energij in stanj Hamiltonovega operatorja

$$H = T + V_{ion} + e_0 E x, (2.36)$$

kjer so ioni na razdalji a. Iz komutacijskih lastnosti s translacijskim operatorjem ${\cal T}_{ja}$

$$T_{ja} = e^{i\hat{p}ja/\hbar}, \quad [T_{ja}, H] = e_0 Eja \ T_{ja}$$
 (2.37)

dobimo, da so lastne energije ekvidistančno razmaknjene, kar je poznano kot Wannier-Starkova veriga. Če fiksiramo eno izmed energij ϵ_0 , je ν -ta zaporedna energija enaka

$$\epsilon_{\nu} = \epsilon_0 + \nu e_0 E a = \epsilon_0 + \nu \hbar \omega_B. \tag{2.38}$$

Obliko lastnih stanj dobimo tako, da valovno funkcijo razvijemo v bazi Wannierovih funkcijw(x), centriranih prix=na

$$\psi_{\nu} = \sum_{n} c_{n,\nu} w(x - na).$$
(2.39)

Recimo, da kinetični in ionski potencial zapišemo v približku tesne vezi. Pri uporabi zgornjega razvoja v stacionalni Schrödingerjevi enačbi prepoznamo rekurzijsko zvezo za Besselove funkcije, tako da identificiramo [11]

$$c_{n,\nu} = J_{\nu-n} \left(-\frac{2e_0 Ea}{t_h} \right). \tag{2.40}$$

Koeficienti $c_{n,\nu}$ tudi kažejo na lokaliziranost valovne funkcije ψ_{ν} . Pravzaprav je med semiklasičnim in kvantnim rezultatom veliko podobnosti. Zaporedna razlika med energijskimi stanji se izraža z Blochovo periodo kot $\hbar 2\pi/t_B$, valovne funkcije pa so lokalizirane na razdalji $4t_h/e_0E$.

Poglavje 3

Formulacija problema

Obravnave preboja Mottovega izolatorja se lotim z manjšo žlico. Vzamem najmanjšo dimenzijo sistema in najenostavnejši Hubbardov sistem, v katerem je izolatorsko osnovno stanje, iz katerega je možnost prehajanja v vzbujena stanja. S tem želim dobiti razumevanje nastajanja parov holon-dublon, ki so najverjetneje ključni za preboj splošnejšega Mottovega izolatorja.

Postavitev problema:

Imam 1D verigo z L mesti in periodičnimi robnimi pogoji (mesto L naj bo ekvivalentno mestu 0), ki je polovično zapolnjena z elektroni tako, da je magnetizacija skoraj maksimalna. Privzamem liho število mest L. Za spine elektronov velja, da so vsi razen enega obrnjeni navzgor, torej $N_{\uparrow} = L - 1, N_{\downarrow} = 1$. Dva spina na istem mestu čutita odboj U > 0. Sistem je v električnem polju E.

Zaradi privzetih periodičnih robnih pogojev električno polje v sistem pripeljem preko spremenljivega magnetnega pretoka. Takšna vpeljava je teoretično čistejša. Pri neperiodičnih robnih pogojih se namreč polje pripelje preko kontaktov, na katere sta priključeni elektrodi s padcem napetosti. Problem nastopi s kvantnim opisom kontaktov in dogajanja okrog njih, ki je prav gotovo komplicirano. Vsemu temu pa se da s periodičnimi robnimi pogoji gladko izogniti.

Ceprav je definicija problema kar se da čista, se jo da aplicirati na naravno situacijo: realiziral bi jo 1D kristal, katerega atomi imajo v zunanji orbitali v povprečju en elektron.

3.1 Hamiltonov operator

Uporabila bom splošen Hamiltonov operator, ki vsebuje Hubbardov in kinetični člen, v katerega je polje vpeljano efektivno skozi transformiran parameter t_{ij} preko Peierlsove substitucije, kot je opisano v poglavju 2.4. Delala bom v približku, v katerem upoštevam le prispevek od skakanja med najbližjimi sosedi. Ker je prekrivanje orbital med vsemi najbližjimi sosedi enako, lahko vzamem $t_{ij} = t_h$. Hamiltonov operator je torej

$$H = -t_h \sum_{\sigma,i} \left(e^{i\frac{e}{\hbar}\frac{\Phi}{L}} c_{i+1\sigma}^+ c_{i\sigma} + e^{-i\frac{e}{\hbar}\frac{\Phi}{L}} c_{i\sigma}^+ c_{i+1\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$
(3.1)

Vpeljala bom naslednje brezdimenzijske količine, pri čemer je t_0 časovna enota, ki jo uvedem tako, da $\hbar/t_h t_0 = 1$, *a* pa razdalja med mestoma na verigi:

brezdimenzijski pretok na eno vez :
$$\phi = \frac{e}{\hbar} \frac{\Phi}{L}$$

brezdimenzijski čas : $t = \frac{t_{dim}}{t_0}$
brezdimenzijski valovni vektor : $k = ak_{dim}$
brezdimenzijsko polje : $F = \frac{\partial \phi}{\partial t} \rightarrow F = -\frac{aet_0}{\hbar}E = \frac{ae_0}{t_h}E$

Poleg tega bom tudi sam Hamiltonov operator zapisala v brezdimenzijski obliki. V njem enoto energije nosita parametra t_h in U. Od sedaj naprej bom energije izražala v enotah t_h . Brezdimenzijski parameter odboja med dvema elektronoma na istem mestu naj bo $U/t_h \rightarrow U$. Brezdimenzijski Hamiltonov operator je potem enak

$$H = -\sum_{\sigma,i} (e^{i\phi} c^{+}_{i+1\sigma} c_{i\sigma} + e^{-i\phi} c^{+}_{i\sigma} c_{i+1\sigma}) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$
 (3.2)

3.2 Valovne funkcije

Skleniti je potrebno dogovor glede označevanja valovnih funkcij. Ker je sistem determiniran s pozicijo spina \downarrow in odsotnostjo spina \uparrow oziroma s pozicijo dublona in holona, bom s slednjimi označila tudi valovne funkcije. Naj bo $|\varphi_{jk}\rangle$ valovna funkcija za konfiguracijo s holonom na mestu j in dublonom na mestu k, ki je grafično ponazorjena na sliki 3.1.

$$\bigwedge \bigwedge \bigwedge$$

Slika 3.1: Konfiguracija za valovno funkcijo $|\varphi_{ji}\rangle$.

V jeziku druge kvantizacije se z anihilacijskimi
(kreacijskimi) operatorji $c_j^{(+)}$ za Wannierove funkcije na mestu
 j to zapiše kot

$$|\varphi_{ji}\rangle = c_{i\downarrow}^+ c_{0\uparrow}^+ \dots c_{j-1\uparrow}^+ c_{j+1\uparrow}^+ \dots c_{L\uparrow}^+ |0\rangle.$$
(3.3)

S tako izbiro zaporedja nimam problemov s predznaki pri preskakovanju kreacijskih/anihilacijskih operatorjev, ko s Hamiltonovim operatorjem delujem na valovno funkcijo.

Ker ima sistem translacijsko simetrijo (tudi v primeru električnega polja), je gibalna količina sistema ohranjena količina, kot baza pa so bolj naravne Blochove funkcije, sestavljene iz φ_{ji} s konstantnim i - j = l. Za sistem z gibalno količino q je kompleten sistem Blochovih funkcij

$$|\Psi_q^l\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{iqj} |\varphi_{j,j+l}\rangle, \quad l \in [0, L-1].$$
(3.4)

Poglavje 4

Iskanje energijskih nivojev in lastnih valovnih funkcij

Matrični element za Hamiltonov operator (3.2) bom zapisala v bazi Blochovih funkcij $\{|\psi_q^l\rangle\}$ z dobro določeno gibalno količino sistema q. Najprej izračunam

$$H|\varphi_{ji}\rangle = -e^{-i\phi}(|\varphi_{j+1,i}\rangle + |\varphi_{j,i-1}\rangle) - e^{i\phi}(|\varphi_{j-1,i}\rangle + |\varphi_{j,i+1}\rangle) + U(1-\delta_{ji})|\varphi_{ji}\rangle,$$

da iz tega dobim, kaj Hamiltonov operator naredi na na baznem vektorju

$$H|\Psi_{q}^{l}\rangle = -e^{-i\phi}(1+e^{-iq})|\Psi_{q}^{l-1}\rangle - e^{i\phi}(1+e^{iq})|\Psi_{q}^{l+1}\rangle + U(1-\delta_{l,0})|\Psi_{q}^{l}\rangle.$$

V matrični reprezentaciji z Blochovo bazo je torej Hamiltonov operator (3.2) tridiagonalna matrika z izjemo dveh elementov na poziciji (1, L) in (L, 1), ki sta posledica periodičnih robnih pogojev.

$$\begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\phi}(1+e^{-iq}) & 0 & \dots & -e^{i\phi}(1+e^{iq}) \\ -e^{i\phi}(1+e^{iq}) & U & -e^{-i\phi}(1+e^{-iq}) & \dots & 0 \\ 0 & -e^{i\phi}(1+e^{iq}) & U & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -e^{-i\phi}(1+e^{-iq}) & 0 & \dots & -e^{i\phi}(1+e^{iq}) & U \end{pmatrix}$$

Za lastno funkcijo pri določenem $\phi, |\psi\rangle = \sum_j d_j |\Psi_q^j\rangle, H |\psi\rangle = \epsilon |\psi\rangle$, morajo biti izpolnjene enačbe $\langle \Psi_q^i | H | \psi \rangle = \epsilon d_i$, ki podajajo zveze med koeficienti d_j

$$(\epsilon - U(1 - \delta_{j0}))d_j + e^{-i\phi}(1 + e^{-iq})d_{j+1} + e^{i\phi}(1 + e^{iq})d_{j-1} = 0.$$
(4.1)

Zanimajo me energijski nivoji sistema, ki jih poiščem z enačbo (4.1). Uporabim Fourierovo transformacijo in zapišem

$$\delta_{l,0} = \frac{1}{L} \sum_{q'} e^{-iq'l}, \quad d_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k d_{kq} e^{ikj}.$$

To vstavim v relacijo (4.1)

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k} d_{kq} (e^{-i\phi} e^{ik(j+1)} (1+e^{-iq}) + e^{i\phi} e^{ik(j-1)} (1+e^{iq}))$$
$$= -\frac{U}{L^{3/2}} \sum_{q'k} e^{-iq'j} d_{kq} e^{ikj} - \frac{\epsilon - U}{\sqrt{L}} \sum_{k} d_{kq} e^{ikj}.$$

Enačbo pomnožim z $\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j} e^{-iq''j}$

$$\frac{1}{L} \sum_{kj} d_{kq} (e^{-i\phi} e^{i(k-q'')j} e^{ik} (1+e^{-iq}) + e^{i\phi} e^{i(k-q'')j} e^{-ik} (1+e^{iq}))$$
$$= -\frac{U}{L^2} \sum_{q'kj} e^{i(-q'+k-q'')j} d_{kq} - \frac{\epsilon - U}{L} \sum_{kj} d_{kq} e^{i(k-q'')j}.$$

Seštejem poj,kar v treh primerih d
a $\delta_{kq''},$ v tretjem členu pa $\delta_{q',k-q''}$ in celoten izraz po
enostavi v

$$d_{q''q}(e^{-i\phi}e^{iq''}(1+e^{-iq})+e^{i\phi}e^{-iq''}(1+e^{iq})) + \frac{U}{L}\sum_{k}d_{kq} = -(\epsilon-U)d_{q''q}$$
$$d_{q''q} = \frac{U}{L}\frac{\sum_{k}d_{kq}}{-(\epsilon-U)-2(\cos(q''-\phi)+\cos(q''-\phi-q))}.$$

Vsote \sum_k se znebim tako, da levo in desno stran seštejem poq''in končno dobim relacijo

$$-\frac{1}{U} = \frac{1}{L} \sum_{q''} \frac{1}{\epsilon - U + 2(\cos(q'' - \phi) + \cos(q'' - \phi - q))}.$$
(4.2)

Energijo lastnih stanja dobim tako, da iz izraza (4.2) izračunam ϵ . Iz dimenzije sistema vem, da moram za ϵ dobiti L rešitev.

V limitiU=0 so te rešitve

(4.3)

Grafično so energije ϵ pri U = 0, kot funkcija skupne gibalne količine prikazane na sliki 4.1 levo. V limiti $L \to \infty$ bi bili nivoji za sosednje q'' poljubno blizu in bi zato tvorili kontinuum stanj.

Za U > 0 iskanje rešitev ϵ ni več trivialno. Grafično sta leva in desna stran enačbe (4.2) kot funkcija ϵ prikazani na sliki 4.1 desno. Rešitvam ustrezajo presečišča njunih krivulj. Že iz te slike se vidi, da obstajata za U > 0 dva tipa rešitev. Še vedno obstaja skoraj kontinuumski pasu, katerega rešitve so le malo spremenjene glede na (4.3) za U = 0. Nekdanja najnižja rešitev tega kvazi kontinumskega pasa pa se za U > 0 odcepi od njega in leži še nižje. Ta nivo bom imenovala vezani, skoraj kontinuumski pas pa vzbujeni.

4.1 Vezano stanje

V limiti neskončnega sistema $L \to \infty$ lahko energijo vezanega stanja poiščem tako, da vsoto $\sum_{q''}$ pretvorim v integral $\frac{L}{2\pi} \int dq''$. Enačba (4.2) je potem

$$\begin{aligned} -\frac{1}{U} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq''}{\epsilon_0 - U + 4\cos(q/2)\cos(q'' - \phi - q/2))} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi - \phi - \frac{q}{2}}^{\pi - \phi - q/2} \frac{d\xi}{\epsilon_0 - U + 4\cos(q/2)\cos(\xi)} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{(\epsilon_0 - U)^2 - (4\cos q/2)^2}}. \end{aligned}$$



Slika 4.1: levo: Kontinuumski pas pri U = 0 in $\phi = 0$, desno: Leva (-1/U) in desna (vsota) stran enačbe (4.2) kot funkcija ϵ pri q = 0, U = 3, L = 31. Rešitvam ustrezajo presešišča obeh krivulj.

Od tod je le še korak do izraza za energijo vezanega stanja v odvisnosti od skupne gibalne količine q in odboja U

$$\epsilon_0 = U \pm \sqrt{U^2 + \left(4\cos\frac{q}{2}\right)^2} \quad \longrightarrow \quad \epsilon_0 = U - \sqrt{U^2 + \left(4\cos\frac{q}{2}\right)^2}. \tag{4.4}$$

Predznak 'minus' izberem zato, ker je vezano stanje pod kontinuumskim pasom. Vezavna energija je enaka oddaljenosti vezanega stanja od kontinuumskega pasa, katerega spodnja meja je $\epsilon_1 \approx U - 4\cos(q/2)$

$$\Delta = \epsilon_1 - \epsilon_0 = U - 4\cos\left(\frac{q}{2}\right) - \left(U - \sqrt{U^2 + \left(4\cos\frac{q}{2}\right)^2}\right)$$
$$= \sqrt{U^2 + \left(4\cos\frac{q}{2}\right)^2} - 4\cos\left(\frac{q}{2}\right). \tag{4.5}$$

Očitno je pri večjem odboju med elektronoma na istem mestu tudi vezava obravnavanega efektivnega para holona in dublona močnejša.

Vezani nivo in meje kontinuumskega pasa kot funkcije skupne gibalne količine pri parametrih U = 2 in U = 5 prikazuje slika 4.2.

S pomočjo splošnega kriterija za preverjanje izolatorske/prevodne narave stanja, katerega vpeljavo sem motivirala v poglavju 2.5, lahko sedaj pokažem, da je sistem v vezanem stanju izolator. Relevanten koeficient togosti \mathcal{D}_0 je v 1D primeru enak

$$\mathcal{D}_0 = \frac{a^2 t_h}{2L\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 \epsilon_0}{\partial \phi^2} \right|_{\phi=0}.$$
(4.6)

Ker v limiti neskončnega sistema energija osnovnega stanja ni odvisna od ϕ , je tudi

$$\lim_{L \to \infty} \mathcal{D}_0 = 0. \tag{4.7}$$

Torej je osnovno stanje izolatorsko. Celoten sistem skupaj z vzbujenimi stanji pa je primeren za študiranje preboja Mottovega izolatorja pod vplivom električnega polja.



Slika 4.2: Vezani nivo (odebeljeno) z mejami vzbujenega pasu pri U = 2 (levo), U = 5 (desno).

Obliko vezanega stanja se dobi s pomočjo fizikalno smiselnega nastavka. Ker iščem vezano stanje, je tak nastavek $|\varphi_0\rangle = \sum_j d_j |\Psi_q^j\rangle$ s koeficienti [12]

$$d_j = N_0 e^{-\kappa|j|} e^{iq''j},\tag{4.8}$$

kjer velja opomniti na cikličnost indeksov, torej $-1 \equiv L-1, -2 \equiv L-2, \dots$ Eksponentno padanje valovne funkcije predpostavim zaradi vezanosti, q'' pa dovoljuje lokalno fazo. Nastavek mora izpolniti enačbo (4.1). Za $1 \leq j \leq (L-1)/2$ je to

$$e^{-\kappa|j|}e^{iq''j}[(\epsilon_0 - U) + e^{-i\phi}(1 + e^{-iq})e^{-\kappa}e^{iq''} + e^{i\phi}(1 + e^{iq})e^{\kappa}e^{-iq''}] = 0$$

(\epsilon_0 - U) + 2\cos\left(\frac{q}{2}\right)[e^{-\kappa}e^{-i(-q''+\phi+q/2)} + e^{\kappa}e^{i(-q''+\phi+q/2)}] = 0. (4.9)

Ker je energija ϵ_0 realna vrednost, morajo biti imaginarni argumenti v eksponentih enaki 0, torej $q'' = \phi + q/2$. Odtod sledi relacija

$$\epsilon_0 - U = -2\cos\left(\frac{q}{2}\right)(e^{-\kappa} + e^{\kappa}). \tag{4.10}$$

Tudi za $(L-1)/2 < j \le L-1$ dobimo po enakem postopku na koncu isto zvezo.

Poiskati je treba hitrost padanja funkcije, κ . Enačbo (4.1) uporabimo še za j = 0, ki se od ostalih razlikuje po tem, da vsebuje člen $U(1 - \delta_{0j}) = 0$.

$$\epsilon_0 + e^{-i\phi}(1 + e^{-iq})e^{-\kappa}e^{iq''} + e^{i\phi}(1 + e^{iq})e^{-\kappa}e^{-iq''} = 0$$
(4.11)

$$\epsilon_0 + 4\cos\left(\frac{q}{2}\right)e^{-\kappa} = 0 \tag{4.12}$$

Z uporabo poznavanja funkcijske odvisnosti $\epsilon_0 = \epsilon_0(q, U)$ dobimo, da je

$$e^{-\kappa} = \frac{-U + \sqrt{U^2 + 16\cos(q/2)^2}}{4\cos(q/2)}.$$
(4.13)

Če pa bi v račun namesto enačbe (4.1) za j = 0 vzela sistem treh enačb za j = -1, 0, 1, bi lahko neodvisno od rezultata za energijo z integracijo, dobila izraza za κ in ϵ_0 v odvisnosti od U in q. Koeficienti v razvoju valovne funkcije po Blochovi bazi so torej enaki

$$d_j = N_0 \ e^{-\kappa|j|} e^{i(\phi+q/2)j}, \quad N_0 = \sqrt{\frac{\sinh\kappa}{\cosh\kappa}}, \tag{4.14}$$

kjer sem N_0 izračunala v limiti neskončnega sistema.

Ker nastavek za valovno funkcijo izpolni enačbe z realnim in pozitivnim κ , je točno pokazano, da je najnižje energijsko stanje dejansko vezano stanje efektivnih delcev, holona in dublona. Ta dva se lahko gibata s skupnim momentom q, ki se v času ne spreminja, ostajata pa relativno vezana in zato lokalizirana. Končno povzamem, da električno polje v limiti neskončnega sistema ne vpliva na energijo vezanega stanja, vpliva pa na valovno funkcijo tega stanja, katere faza se časovno spreminja in to za vsako mesto j drugače kot $\exp(i(q/2 + \phi j))$. In mogoče celo najpomembnejše, osnovno stanje je izolatorsko.

4.2 Nevezana stanja

Motivacijo za obliko nevezanih stanj se da poiskati v matrični reprezentaciji Hamiltonovega operatorja, ki je zapisana v začetku tega poglavja. Brez matričnih elementov v prvi vrsti in v prvem stolpcu je matrika tridiagonalna, njena oblika pa je enaka kot za prosto gibanje v približku tesne vezi s premaknjenim energijskim izhodiščem. Le parameter t_h je sedaj kompleksen. Enodelčne lastne funkcije kinetičnega člena z realnim t_h so ravni valovi: $|\Psi\rangle = \sum_j (Ae^{ikj} + Be^{-ikj})c_j^{\dagger}|0\rangle$ z energijo $\epsilon = -2t_h \cos(k)$. Če je $t_h = |t_h|e^{i\gamma}$ kompleksen, se simetrija med premikanjem v levo in desno stran poruši. Takrat imata isto energijo valovni funkciji $|\Psi\rangle = \sum_j e^{-i(k-\gamma)j}c_j^{\dagger}|0\rangle$ in $|\Psi\rangle = \sum_j e^{i(k+\gamma)j}c_j^{\dagger}|0\rangle$.

Ker je v mojem primeru faza $\gamma = \phi + q/2$, glede na zgornji razmislek za nevezana stanja vzamem nastavek $|\varphi_k\rangle = \sum_j d_j |\Psi_q^j\rangle$

$$d_{j} = \begin{cases} Ae^{i(k+\phi+\frac{q}{2})j} + Be^{-i(k-\phi-\frac{q}{2})j} & \text{za } j \neq 0, \\ C & \text{za } j = 0. \end{cases}$$

Identičnost matrike Hamiltonovega operatorja brez prve vrstice in stolpca z matriko prostega delca v približku tesne vezi sem upoštevala v nastavku za $j \neq 0$, ki sem ga sestavila iz degeneriranih ravnih valov. Vlogo momenta k prostega delca v približku tesne vezi sedaj prevzame relativni moment dublona glede na holon. Na mestu j = 0 pa je neka druga amplituda, določena z robnimi pogoji.

Energijo stanja dobim iz enačbe (4.1), če vanjo vstavim nastavek pri 1 < j < L - 1

$$\epsilon_k = U - 4\cos\left(\frac{q}{2}\right)\cos(k). \tag{4.15}$$

Kateri relativni momenti k so dovoljeni in kakšni so koeficienti A,B,C izračunam iz robnih pogojev, ki sklopijo valovno funkcijo pri j = 0. Robni pogoji so enačbe (4.1) za j = L - 1, 0, 1. Ta set enačb je

$$\begin{aligned} \epsilon_k d_{L-1} &= -\tilde{t} d_{L-2} + U d_{L-1} - \tilde{t}^* d_0, \\ \epsilon_k d_0 &= -\tilde{t} d_{L-1} - \tilde{t}^* d_1, \\ \epsilon_k d_1 &= -\tilde{t} d_0 + U d_1 - \tilde{t}^* d_2, \end{aligned}$$

kjer je $\tilde{t} = 2\cos(q/2) e^{i(\phi+q/2)}$. Če za d_j uporabim nastavek, dobim sistem treh enačb za tri neznane koeficiente A, B, C. V primeru sq = 0 je ena izmed enačb kar A + B = C. Če jo uporabim, mi ostane samo še sistem 2×2 , ki je enak

$$A(1 - e^{i(\phi+k)L}) + B(1 - e^{i(\phi-k)L}) = 0, \qquad (4.16)$$

$$A\left[1 + \frac{2(e^{i(k+\phi)L-ik} + e^{ik})}{U - 4\cos k}\right] + B\left[1 + \frac{2(e^{i(-k+\phi)L+ik} + e^{-ik})}{U - 4\cos k}\right] = 0.$$
(4.17)

Dovoljene vrednosti relativnega momenta k dobim iz pogoja, da je determinanta sistema enaka 0. Takrat ima sistem netrivialne rešitve. Takih k-jev je L - 2, ravno toliko, kot je nevezanih stanj.

Rešitve pogoja det(sistema) = 0 žal niso analitične, tako da je treba dovoljene k-je v splošnem poiskati numerično. Kako se energija nivojev spreminja v odvisnosti od pretoka ϕ pri L = 21 in U = 0.5, 2.5, prikazuje slika 4.3. Vseeno se da ugotoviti nekatere splošne



Slika 4.3: Energijski spekter v odvisnosti od pretoka ϕ za vezan (počrnjeno) in nevezane nivojev pri parametrih L = 21, q = 0 ter odboju U = 0.5 (levo), U = 2.5 (desno).

lastnosti nevezanih stanj in njihovih energij.

- Nivoji se v odvisnosti od ϕ periodično ponavljajo s periodo $\Delta \phi = 2\pi/L$, kar je vidno na sliki 4.3. To periodo se da razložiti z enačbo (4.2). Vsakič, ko je $\phi = q''$ za katerikoli q'', bo enačba imela iste rešitve za ϵ . To pa se dogaja s periodo $\Delta \phi = \Delta q'' = 2\pi/L$.
- V limiti U=0 lastne valovne funkcije in energije točno poznam. Valovne funkcije so oblike

$$|\varphi_k\rangle = \sum_j \frac{e^{ikj}}{\sqrt{L}} |\Psi_q^j\rangle, \quad k = \frac{2\pi j'}{L},$$
(4.18)

lastne energije pri izbranem k pa

$$\epsilon_k = -4\cos\left(\frac{q}{2}\right)\cos\left(\frac{q}{2} - (k - \phi)\right). \tag{4.19}$$

Za $\phi = i2\pi/L, i \in \mathbb{Z}$ so nivoji degenerirani.

• Če U > 0 se nivoji pri izbranem q razmaknejo in s tem tudi potencialne degenerirane točke izginejo. Razmik je odvisen od U, od velikosti sistema L in od pozicije nevezanega stanja. Velikost minimalne energijske razlike med sosednjimi stanji v vzbujenem pasu

$$\delta \epsilon_i = \operatorname{Min}[\epsilon_{i+1}(\phi) - \epsilon_i(\phi)]$$

za U = 1.5, 2.5 in L = 81, q = 0 prikazuje slika 4.4. Kot pričakovano so za večji



Slika 4.4: Velikost minimalne energijske razlike $\delta \epsilon_i$ med sosednjimi stanji v vzbujenem pasu za U = 1.5, 2.5 in L = 81, q = 0.

U večje energijske vrzeli. Maksimum energijske vrzeli $\delta \epsilon_m$, ki se nahaja na sredini nevezanega pasa kaže sledeče odvisnosti: $\delta \epsilon_m \propto L^{-1}, \delta \epsilon_m \propto U$. Slednja velja le za U < 2, potem pa manj točno.



Slika 4.5: Maksimum energijske vrzeli $\delta \epsilon_m$ v odvisnosti od U in L; levo pri konstantnem L = 151, desno pri U = 4.

- V nasprotju z energijami ϵ_i , lastne valovne funkcije za ϕ in $\phi + \Delta \phi$ niso enake.
- Ker je sistem za $\phi = 0$ simetričen glede na zamenjavo $j \leftrightarrow L j$, je pričakovano da bodo sodo/liho simetrijo imele tudi lastne valovne funkcije, vsaj ob nekaterih ϕ . Valovna funkcija bo soda/liha, če bo izpolnjeno $d_{L-1} = \pm d_1$, kar da dodatne pogoje na koeficiente A, B. Ti so skupaj z že omenjenimi pogoji izpolnjeni le za $\phi = n2\pi$. V energijskem spektru se sode in lihe valovne funkcije nahajajo izmenično, pri čemer je nevezano stanje z minimalno energijo ob teh periodah sodo.

Omenjene lastnosti energijskega spektra in lastnih stanj so osnova za nadaljnje delo, opisano v sledečih poglavjih.

Poglavje 5 Časovni razvoj

Cilj diplomskega dela je raziskati preboj izolatorskega stanja. Pristop bo naslednji: sistem postavim v osnovno stanje, ob času t = 0 pa vključim magnetni pretok $\phi(t)$ in opazujem, kaj se dogaja z valovno funkcijo, ki sistem popisuje. V tem poglavju bom komentirala oziroma vpeljala časovni razvoj valovne funkcije:

-v limiti hitrega vklopa, kjer električno polje vključim le za trenutek; -v splošnem konstantnem polju.

5.1 Limita hitrega vklopa

V limiti hitrega vklopa električno polje vključim le za trenutek, torej

$$\phi(t) = \begin{cases} 0 & \operatorname{za} t \le 0, \\ \phi_0 & \operatorname{za} t > 0. \end{cases}$$

Ta električni sunek vzbudi elektrone iz vezanega stanja v nevezana. To pomeni, da se z določeno verjetnostjo holon in dublon začneta oddaljevati drug od drugega. V katera nevezana stanja preideta in s kakšno verjetnostjo ostaneta vezana, dobim iz projekcije začetne valovne funkcije na trenutna lastna stanja, ki se v limiti hitrega vklopa za t > 0 ne spreminjajo več.

$$|\varphi_0(0)\rangle = a_0|\varphi_0(t)\rangle + \sum_{m\neq 0} a_m|\varphi_m(t)\rangle$$
(5.1)

Verjetnost, da delca ostaneta vezana, je

$$|a_0|^2 = \left| N_0^2 \sum_j e^{-2\kappa|j|} e^{i\phi_0 j} \right|^2 \longrightarrow \frac{(\sinh 2\kappa)^2}{(\cos \phi_0 - \cosh 2\kappa)^2},\tag{5.2}$$

kjer je desni izraz dobljen v limiti $L \to \infty$. Kot pričakovano gre za $\phi_0 \to 0$ verjetnost $|a_0|^2 \to 1$. Porazdelitev po nevezanih stanjih, pa dobim s projekcijo na trenutna nevezana stanja

$$|a_{k}|^{2} = |\langle \varphi_{k}(t)|\varphi_{0}(0)\rangle|^{2} = N_{0}^{2}N_{k}^{2} \left| \sum_{j} e^{-i(\phi_{0} + \frac{q}{2})j} (A^{*}e^{-ikj} + B^{*}e^{ikj})e^{-\kappa|j| + i\frac{q}{2}j} \right|^{2} \rightarrow N_{0}^{2}N_{k}^{2} (\sinh \kappa)^{2} \left| \frac{A^{*}}{\cos(k + \phi_{0}) - \cosh \kappa} + \frac{B^{*}}{\cos(-k + \phi_{0}) - \cosh \kappa} \right|^{2}, \quad (5.3)$$

kjer je zadnji izraz spet dobljen v limiti pri $L \to \infty$. Za parametre $L = 201, U = 1, \phi_0 = 0.4$ je porazdelitev po vzbujenih stanjih prikazana na sliki 5.1 levo. S časom se ta porazdelitev več ne spreminja, spreminja pa se sama valovna funkcija, ki je za iste parametre ob nekaj različnih časih prikazana na sliki 5.1 desno.



Slika 5.1: levo: Porazdelitev verjetnosti po nevezanih stanjih, desno: Absolutna vrednost valovne funkcija pri časih t = 0, 5, 15, 25 in parametrih $L = 201, U = 1, \phi_0 = 0.4$.

Njene kvalitativne lastnosti se da oceniti iz limite $U \rightarrow 0$, v kateri so lastna stanja $|\varphi_k\rangle$ in energije podane z enačbama (4.18) in (4.19). Že slika 5.1 nakazuje, da ima nevezan del valovne funkcije

$$|\psi^{pr}\rangle = \sum_j d_j |\Psi^j_q\rangle$$

obliko nekakšnega paketa. Če ga razvijem po stanjih $|\varphi_k\rangle$ v zvezni limiti z $L\to\infty,$ kjer integral nadomesti vsoto dobim

$$d_{j}(t) = \sum_{k} \langle \varphi_{k} | \varphi_{0}(0) \rangle \frac{e^{ikj}}{\sqrt{L}} e^{-i[-4\cos(q/2)\cos(k-\phi_{0}-q/2)]t} |d_{j}|^{2}(t) \propto \left| \int_{-\pi-q/2-\phi_{0}}^{\pi-q/2-\phi_{0}} dk \, \frac{2\kappa}{(k+\phi_{0})^{2}+\kappa^{2}} \, e^{ikj} e^{-i\epsilon(k)t} \right|^{2}.$$
(5.4)

Pri tem sem substituirala integracijsko spremenljivko $k \to k - \phi_0 - q/2$, da lahko v izrazu (5.4) prepoznam paket, z maksimumom pri $k = -\phi_0$. Predfaktor $2\kappa/((k+\phi_0)^2+\kappa^2)$ je namreč utež pri ravnem valu e^{ikj} z valovnim vektorjem k in energijo $\epsilon(k) = -4\cos\left(\frac{q}{2}\right)\cos(k)$. V limiti $U \to 0$ je torej nevezan del valovne funkcije kar paket, ki se premika s povprečnim valovnih vektorjem $k = -\phi_0$, torej v levo. Ali je obnašanje tako tudi pri U > 0 sem preverila s primerjavo razdalje maksimuma v nevezanem delu valovne funkcije od izhodišča (num) z analitično pričakovano razdaljo l_{max} (analitic)

$$l_{max} = \left| t \left| \frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right|_{k=-\phi_0} \right| = 4t \cos\left(\frac{q}{2}\right) \sin \phi_0.$$
(5.5)

Za parametre L = 121, $\phi_0 = 1$, U = 1.5, q = 0 obe vrednosti ob različnih časih prikazuje slika 5.2 levo. Kljub približku $U \rightarrow 0$ je dobljeno dobro ujemanje. Da se odhajajoči paket res obnaša podobno za U > 0 in U = 0, če ju le postavimo v enako začetno stanje, prikazuje slika 5.2 desno.



Slika 5.2: levo: Primerjava numerično dobljene razdalje maksimuma nevezanega dela valovne funkcije od izhodišča (num) z analitično pričakovano l_{max} (analitic) pri različnih časih za parametre $L = 121, \phi_0 = 1, U = 1.5$, desno: Primerjava $|d_j|^2(t)$ za U = 1.5 in U = 0, če ju v začetku postavimo v vezano stanje za U = 1.5 ($L = 121, \phi_0 = 1, t = 10$).

5.2 Razvoj v stalnem električnem polju

Od limitnega obnašanja v naslednjem poglavju končno preidem na obravnavo razvoja v stalnem električnem polju, ki se v sistemu pojavi ob času t = 0. Ustrezna oblika brezdimenzijskega magnetnega pretoka je

$$\phi(t) = \begin{cases} 0 & \operatorname{za} t \le 0, \\ Ft & \operatorname{za} t > 0. \end{cases}$$

Valovno funkcijo časovno razvijam s Schrödingerjevo enačbo, za kar potrebujem bazo. Poleg Blochove baze, vpeljane v prejšnjem poglavju, bi lahko uporabila impulzno bazo ali pa bazo trenutnih lastnih stanj. V impulzni bazi, katere lastne funkcije imajo dobro določeno relativno gibalno količino dublona in holona, je Hamiltonov operator v matrični reprezentaciji polna matrika, kar tipično ni zaželjeno. Baza trenutnih lastnih stanj je seveda mamljiva izbira, saj je v njej najlažje slediti, kam potekajo prehodi. Vendar je problem v tem, da je ne znam analitično poiskati. Končno torej vseeno ostanem pri bazi Blochovih funkcij, z dobro določenim skupnim momentom in razdaljo med dublonom in vrzeljo.

Kot je izpeljano v poglavju 4, valovno funkcijo $|\psi\rangle = \sum_j d_j |\Psi_q^j\rangle$ ob poljubnem času t dobim kot rešitev sistema L sklopljenih diferencialnih enačb

$$i\frac{\partial d_j}{\partial t} - U(1 - \delta_{j0})d_j + e^{-iFt}(1 + e^{-iq})d_{j+1} + e^{iFt}(1 + e^{iq})d_{j-1} = 0.$$
(5.6)

Poglavje 6

Numerični rezultati

V tem poglavju bom prikazala rezultate, ki jih dobim z numeričnim reševanjem sistema diferencialnih enačb (5.6). Nekateri izmed njih bodo obrazloženi že v tem poglavju, drugi pa v sledečih.

Vsi rezultati ustrezajo skupnemu momentu q = 0, kar pa ne pokvari njihove splošnosti. Pri razpadu osnovnega stanja so pomembne relativne količine (npr. razdalja med holonom in dublonom, njuna relativna gibalna količina), ki pa so neodvisne od skupne hitrosti, s katero se kot sistem vozita po obroču.

Valovne funkcije so razvite po Blochovi bazi s q = 0

$$|\psi\rangle = \sum_{j} d_{j} |\Psi_{0}^{j}\rangle.$$
(6.1)

Zaradi lažje primerjave energij bom namesto parametra U uporabljala energijsko vrzel med osnovnim stanjem in vzbujenim pasom Δ ,

$$\Delta(q=0) \to \Delta = -4 + \sqrt{U^2 + 16} = 4(\cosh \kappa - 1), \tag{6.2}$$

ki je z zgornjo enačbo povezana tudi s parametrom lokalizacije osnovnega stanja κ . Energiji, ki ju primerjam, sta energijska vrzel Δ in elektrostatska energija, za katero se sistemu zmanjša energija, če se vrzel in dublon razmakneta za eno mesto. V brezdimenzijskih količina je ta kar enaka F. Smiselno je torej opazovati parametre, za katere je F nekajkrat manjši od Δ .

6.1 Starkova lokalizacija

Prva lastnost, ki jo glede na hitri vklop opazim pri stalnem električnem polju, je lokaliziranost valovne funkcije. Ta se pri dovolj velikem polju ne raztegne po celotnem obroču. Absolutno vrednost valovne funkcije ob časih $t = 0.025t_B, 0.15t_B, 0.5t_B$ (kjer je $t_B = \tau_B/t_0 = 2\pi/F$ brezdimenzijski Blochov čas) za parametre $L = 301, \Delta = 0.47$ in polja F = 0.1 (levo), F = 0.3 (desno) prikazuje slika 6.1. Za polje, ki je dovolj močno za vzbuditev iz osnovnega stanja, najprej opazim verjetnost za premikanje (efektivno) negativnega dublona v levo. Zaradi translacijske simetrije si holon predstavljam kot vpet v izhodišče. Premikanje v levo se sklada s premikanjem negativnega delca v pozitivnem



Slika 6.1: $|d_j|^2$ ob časih $t = 0.025t_B, 0.15t_B, 0.5t_B$ (vedno temneje) za parametre $L = 301, \Delta = 0.47$ in polje F = 0.1 (levo), F = 0.3 (desno).

polju. Vendar se vidi, da se dublon od holona ne more oddaljiti poljubno. Obstaja mejna lega, tako da levo od nje verjetnost za nahajanje pada proti 0.

Potrebno je ugotoviti, kakšna je odvisnost lokalizacijske širine od polja in jo primerno interpretirati. Širino d sem definirala kot razdaljo med izhodiščem in pozicijo skrajno levega lokalnega maksimuma v $|d_j|^2$. Odvisnost širine d od časa prikazuje slika 6.2 levo. Očitno je za $t > t_B/2$ z nekaj izjemami konstantna. Za njeno odvisnost od polja je dovolj, če jo izračunam ob času $t = t_B/2$, kar za različne energijske vrzeli prikazuje slika 6.2 desno. Ne glede na vrednost Δ , vse jasno kažejo na $d \propto 1/F$.



Slika 6.2: levo: Lokalizacijska širina d pri ob različnih časih za parametre $\Delta = 1, F = 0.1, 0.2$, desno: Odvisnost d(F) za različne energijske vrzeli $\Delta = 1.66, 1.0, 0.47, 0.12$.

To spomni na enodelčno teorijo elektrona v zunanjem električnem polju, ki je bila v kratko omenjena v poglavju 2.6. Rezultat kvazi-klasičnega in kvantnega Wannier-Starkovega računa je bil, da je elektron v 1D kristalu in v električnem polju E lokaliziran približno na razdalji $4t_h/eE$, kar je v privzetih brezdimenzijskih enotah 4/F. Iz odvisnosti na sliki 6.2 desno pa dobim, da je v obravnavanem primeru $d \sim 8/F$. Odkod razlika se najlažje vidi iz primerjave s kvazi-klasičnim računom.

V kvazi-klasičnem računu je bila privzeta disperzijska relacija prostih elektronov v približku tesne vezi $\epsilon_1 = \epsilon_0 - 2\cos k$. Jasno je, da se v mojem dejanskem problemu

valovna funkcija razširi na območje širine d šele, ko je delno zaseden tudi vzbujeni pas, zato so za njeno širino ključna vzbujena stanja. Iz obravnave lastnih stanj vem:

- da je širina vzbujenega pasu $\Delta \epsilon = 8$. To je posledica prisotnosti dveh efektivnih delcev, kot se vidi iz enačbe (4.3).
- da lahko vsakemu vzbujenemu stanju pripišem valovni vektor k, tako da je njegova energija $\epsilon_k = U 4 \cos k$. Kvazi-klasični relaciji $k(t) = k_0 Ft$ bi torej v tej sliki ustrezalo popolno prehajanje med sosednjimi stanji v vzbujenem pasu, kar bo komentirano in kvantificirano v poglavju 7.2.

Ce apliciram tako kvazi-klasično sliko in ponovim račun (2.35) za pas širine 8, dobim lokalizacijsko dolžino 8/F.

Kako realna je kvazi-klasična slika, pri kateri se stanja v vzbujenem pasu polnijo s hitrostjo F (k narašča kot $k_0 - Ft$), pove dogajanje v energijskem prostoru. Pogledam ga s projekcijo valovne funkcije $|\psi\rangle$ na trenutna lastna stanja $|\varphi_n\rangle$, ki jih dobim iz diagonalizacije Hamiltonovega operatorja. Zasedenost posameznega vzbujenega stanja je podana z

$$|a_n|^2 = |\langle \psi | \varphi_n \rangle|^2 \tag{6.3}$$

Slika 6.3 prikazuje zasedenost energijskih stanj $|a_n|^2$ ob ekvidistančnih časih iz intervala $t \in [0.05t_B, 0.45t_B]$ za parametre F = 0.3 in $\Delta = 0.12$ (levo) oz. $\Delta = 0.47$ (desno). Portreta zasedenosti vzbujenih stanj sta karakteristično drugačna, čeprav je med njima



Slika 6.3: Zasedenost vzbujenih energijskih stanj $|a_n|^2$ ob ekvidistančnih časih iz intervala časih $t = [0.05t_B, 0.45t_B]$ (vedno svetleje) za parametre L = 201, F = 0.3 in $\Delta = 0.12$ (levo) oz. $\Delta = 0.47$ (desno).

razlika le v energijski vrzeli Δ . Pri manjši $\Delta = 0.12$ se prehodi v vzbujeni pas v večini zgodijo že pri majhnih časih, tako da se kasneje spreminja predvsem zasedenost znotraj pasu. To pa izgleda kot potovanje paketa s povprečnim $\bar{k} = Ft$, kar potrjuje smiselnost kvazi-klasičnega približka. Pri večji $\Delta = 0.47$ pa se prehodi v vzbujeni pas dogajajo na daljši časovni skali in zato ni samo enega izrazitega vrha v zasedenosti. Ostaja pa lastnost, da se prvi vrh v smeri višjih vzbujenih stanj premika s hitrostjo F.

Primernost kvazi-klasičnega argumenta potrjuje tudi opažanje, da d(t) doseže svojo končno vrednosti pri $t \approx t_B/2$.

Povzetki povedanega bi bili sledeči:

- Valovna funkcija je omejena na področje d = 8/F, ki je enako dvakratni lokalizaciji valovne funkcije enega samega delca v električnem polju.
- Čas, ki je potreben, da se razleze do mejne širine je $t_B/2$, kar je enako času, potrebnemu, da so v energijskem spektru zasedena najvišje ležeča stanja.
- Cas, karakterističen za razpad osnovnega stanja ima drugačno skalo, ki je neodvisna od t_B . Zaradi lažjega ločevanja obeh skal bom razpadanje opazovala le pri časih $t < t_B/2$, ko pravzaprav še ni efektov lokalizacije.

6.2 Eksponentno razpadanje osnovnega stanja

Cilj je opisati razpadanje izolatorskega stanja. Prva informacija o tem je gotovo zasedenost trenutnega osnovnega stanja in jo dobim s projekcijo trenutne valovne funkcije na trenutno osnovno stanje, ki je ves čas dano z enačbo 4.14

$$a_0 = \langle \varphi_0 | \psi \rangle. \tag{6.4}$$

Slika 6.4 prikazuje tipičen potek razpadanja osnovnega stanja, ki je od vzbujenih ločeno z energijsko vrzeljo $\Delta = 0.47$ in vzbujano s poljiF = 0.3, 0.15, 0.05. Pomembno opažanje



Slika 6.4: $-\log |a_0|^2(t)$ za parametre $\Delta = 0.47$ in F = 0.3, 0.15, 0.05 za levo: krajše čase in desno: daljše čase.

je, da je polje F = 0.05 očitno za dano energijsko vrzel Δ premajhno, da bi lahko znatno vzbudilo delca iz osnovnega stanja. Pri ostalih dveh poljih, ki sta dovolj velika, da povzročita preboj, pa je razpadanje osnovnega stanja eksponentne narave. Od začetka je razpadanje kvadratično (kar se na skalah slik 6.4 skoraj ne opazi), potem pa se jasno vidi odvisnost

$$-\log|a_0|^2 \propto t \quad \to \quad |a_0|^2 = \exp(-\Gamma t). \tag{6.5}$$

Pri daljših časih se ta odvistnost izgubi, kar je posledica lokalizacije valovne funkcije oziroma omejenosti energijskega spektra, ki povzroči efektivno vračanje dublona nazaj proti holonu. To se manifestira kot ponovno povečevanje zasedenosti osnovnega stanja. Zaradi tega je smiselno ločevati med dvema intervaloma $t < \frac{t_B}{2}$ in $t > \frac{t_B}{2}$. V prvem intervalu je razpadanje osnovnega stanja gotovo še eksponentno. V nadaljnjem se bom ukvarjala le z dogajanjem v tem intervalu, kar je tudi s fizikalnega stališča precej upravičeno. Lahko, da je lokalizacija valovne funkcije značilna le za konformacijo z enim obrnjenim spinom in bi morda izginila, če bi jih dodali več.

Očitno je razpadni koeficient Γ količina, ki karakterizira razpad. Če uspem ugotoviti njegove odvisnosti od parametrov Δ in F, sem na dobri poti k razumevanju preboja izolatorskega stanja, kar je sveti Gral mojega diplomskega dela.

Slika 6.5 prikazuje odvistnosti $\Gamma(F)$ (levo) in $\Gamma(\Delta)$ (desno), dobljene s fitanjem premice k $-\log |a_0|^2(t)$. Γ identificiram s koeficientom naklona. Dobljene odvisnosti so smiselne.



Slika 6.5: levo: Odvisnost $\Gamma(F)$ pri energijskih vrzelih $\Delta = 0.27, 0.47$ in desno: $\Gamma(\Delta)$ pri poljih F = 0.15, 0.25, dobljeni s fitanjem premice k $-\log |a_0|^2(t)$.

 $\Gamma(\Delta)$ z naraščajočim Δ pada, kar je pričakovano, saj bo vezano stanje, ki je od vzbujenih ločeno z večjo energijsko vrzeljo težje vzbuditi. $\Gamma(F)$ kaže, da pri večjem F osnovno stanje hitreje razpada.

Pomembna lastnost odvisnosti $\Gamma(F)$ je, da kaže na mejno polje F_{th} , pri katerem se Γ efektivno odlepi od 0. Za $F < F_{th}$ je verjetnost za razpad zelo majhna. Ta lastnost pravzaprav opravičuje naslov mojega diplomskega dela, saj se za $F > F_{th}$ razpadni koeficient hitro veča, kar pojmovno ustreza preboju izolatorskega stanja.

6.3 Limitna obnašanja razpadnega koeficienta

Slika 6.5 levo grafično nakazuje na obstoj F_{th} . Potrebno pa je še preveriti, ali res obstaja adiabatska limita za majhna polja, v kateri gre verjetnost za prehod iz osnovnega v vzbujena stanja eksponentno proti 0. Če torej velja $\sum_k |a_k|^2 \propto \exp(-b/F) t$, potem je razpadni koeficient s tem izražen kot

$$|a_{0}|^{2} = 1 - \sum_{k} |a_{k}|^{2} = 1 - \tilde{a}e^{-b/F}t$$

$$-\log|a_{0}|^{2} = -\log(1 - \tilde{a}e^{-b/F}t) \approx \tilde{a}e^{-b/F}t$$

$$\Gamma = \tilde{a}e^{-b/F}, \qquad (6.6)$$

kjer je v splošnem $\tilde{a} = \tilde{a}(\Delta, F)$. Ker pričakujem, da je odvisnost od polja F v parametru \tilde{a} le potenčna, bo pri dovolj majhnih F celoten razpadni koeficient Γ vseeno kazal eksponentno odvisnost od 1/F. Najlažje jo preverim z grafično predstavitvijo $\Gamma(1/F)$ v log-skali v limiti majhnih polj. Za $\Delta = 0.72$ jo prikazuje slika 6.6 zgoraj levo. Kolinearnost točk



Slika 6.6: Levo zgoraj: $\Gamma(1/F)$ v log-skali v limiti majhnih polj in desno zgoraj: $\Gamma(F)$ v limiti velikih polj za $\Delta = 0.72$; spodaj $\Gamma(\Delta)$ pri poljih F = 0.15, 0.25, dobljene s fitanjem premice k $-\log |a_0|^2(t)$.

v log-skali jasno kaže na adiabatsko limito. Enako obnašanje opazim tudi pri drugih Δ . Parameter *b* numerično določim s fitanjem premice k log $\Gamma(1/F)$. Če parametre *b*, dobljene pri različnih energijskih vrzelih Δ , nanesem na skupen graf (slika 6.6 spodaj), opazim, da je potenčno odvisen od Δ kot

$$b = c\Delta^d, \quad c = 0.92 \pm 0.01, d = 1.51 \pm 0.02.$$
 (6.7)

Z limito majhnih polj tako že (precej natančno) numerično določim odvisnosti $\Gamma(F, \Delta)$, ki nastopajo v eksponentu. Obliko $\tilde{a}(F, \Delta)$ pa dobim iz druge limite, $F \geq F_{th}$, saj takrat $e^{-b/F} \rightarrow 1$. Kot prikazuje slika 6.6 zgoraj desno je v tej limiti $\Gamma \propto F$, tako da tudi $\tilde{a} = a(\Delta)F$. Odvisnost razpadnega koeficienta od polja F in energijske vrzeli Δ , ki jo lahko napovem iz numeričnega opazovanja v limitnih režimih je torej

$$\Gamma(F,\Delta) = a(\Delta) \ F \ \exp\left(-\frac{c\Delta^{1.51}}{F}\right). \tag{6.8}$$

Njen izvor bo motiviran v sledečih poglavjih.

6.4 Tuneliranje skozi bariero

Za preverjanje predstave, v kateri dublon in holon nastaneta s tuneliranjem preko bariere, kot je ilustrirano v teoretičnem uvodu na sliki 2.2, je obravnavana magnetizacija elektronov zelo primerna. Ideja je v tem, da numerično pogledam, kje je pri majhnih časih vrh v vzbujenem delu valovne funkcije. S tem bi dobila informacijo ali dublon nastane okrog mesta

$$l_{dh} \sim \frac{U - \epsilon_0}{F},\tag{6.9}$$

kot sugerira analogija z jedrskim razpadom. Vendar je problem v tem, da se vrh seli v levo, četudi ga opazujem pri majhnih časih. Vseeno sem njegovo pozicijo opazovala v odvisnosti od 1/F ob enakem času v enotah Blochove periode $t = 0.1t_B$, saj je Blochova skala tista, ki določa potovanje v levo. Za $\Delta = 0.27, 0.77, 1.66$ jo prikazuje slika 6.7. Zanimivo je, da rezultati kažejo na grobo odvisnost $l_{dh} \propto 1/F$, kjer sorazmernostni faktor



Slika 6.7: Oddaljenost vrha nevezanega dela valovne funkcije od izhodišča l_{dh} v odvisnosti od 1/F za različne $\Delta = 0.27, 0.77, 1.66.$

z naraščajočim U res raste, ni pa kar enak $U - \epsilon_0 = \sqrt{U^2 + 16}$, ampak je precej manjši. Da prispodobe z bariero ne gre jemati preresno, opomni tudi premislek, da upoštevajoč Starkovo lokalizacijo, ki gre kot 8/F, za $U - \epsilon_0 > 8$ tuneliranje sploh ne bi bilo možno. Numerično pa ga opazim tudi v tem primeru.

Poglavje 7

Implikacija Landau-Zenerjevega tuneliranja

Eden od namenov dela je preveriti, ali se da razpadanje izolatorskega stanja opisati z Landau-Zenerjevo (LZ) teorijo za neadiabatski prehod med enodelčnima stanjema. Numerični rezultati iz adiabatske limite so pokazali, da vsaj v potenci Δ , ki nastopa v odvisnosti verjetnosti za tuneliranje iz osnovnega stanja $P \propto \exp(-c\Delta^d/F)$, ne stoji d = 2 tako kot v LZ formuli, ampak $d \sim 1.5$. Za razumevanje tega in ostalih odstopanj bom v tem poglavju naredila pregled podobnosti in različnosti z LZ problemom. Vpeljani koncepti bodo potrebni v računih naslednjega poglavja.

Glavne točke v primerjavi so naslednje:

- V konstantnem električnem polju je parameter LZ tuneliranja R kar pretok $\phi = Ft$. V vsakem trenutku je poznan in linearen v t.
- LZ račun je narejen za tuneliranje med dvema stanjema, katerih energiji sta kot funkciji parametra R hiperbolične oblike. V mojem problemu pa je število stanj enako L. Osnovno stanje je kot funkcija ϕ konstantno, vzbujena stanja pa imajo žagasto obliko okrog svoje povprečne vrednosti. Postavlja se vprašanje, s čim identificirati LZ dve stanji. Prva izbira bi bila, da za to vzamem osnovno in prvo vzbujeno stanje. Ideja v ozadju je, da prehodi v višja vzbujena stanja potekajo iz najnižjega vzbujenega in ne iz osnovnega stanja. Prvo vzbujeno stanje za razliko od osnovnega ni konstantno, ampak vsebuje nihanja s periodo $\tau = 2\pi/LF$. Znotraj te periode se osnovnemu stanju približa in se od njega tudi oddalji, kar nosi idejo LZ. Vendar vsa nadaljna razmišljanja izpodbije že drug argument. Kar kaže na neprimernost izbire je zasedenost vzbujenih stanj, kot jo prikazuje slika 6.3. Ključno je, da v začetnih časih najnižja stanja sploh niso tista, ki bi bila najbolj zasedena. In to drži ob poljubno kratkih časih, ki na sliki niso prikazani. Misel, da delca najprej tunelirata v najnižji vzbujeno stanje in od tam naprej v višje, je torej zgrešena.
- Postavlja se vprašanje, zakaj delec ne prehaja v najnižja vzbujena stanja. Naivna, ampak najbrž ne popolnoma zgrešena razlaga, se zdi Heisenbergov princip nedoločenosti. Ker sta v začetnem stanju delca lokalizirana, imata glede na princip ustrezno nedoločeno gibalno količino

$$\sigma_x \sigma_p \le \frac{\hbar}{2},\tag{7.1}$$

kjer je σ_x standardna deviacija osnovnega stanja. V tem okviru bi bilo pričakovano, da v začetku bolj lokalizirana delca (kar ustreza večjemu Δ oziroma U) lahko skačeta v višja vzbujena stanja. Da bi to kvalitativno opredelila, sem primerjala nedoločenost gibalne količine $\sigma_p = \hbar/2\sigma_x$ z relativno gibalno količino, ki ustreza v začetnih časih najbolj zasedenemu vzbujenemu stanju. Z relativno gibalno količino mislim na moment k, ki določa energijo vzbujenega stanja $\epsilon_k = U - 4 \cos k$. Kot relativni moment ga lahko interpretiram zaradi oblike valovne funkcije tega stanja. Utež pri razmiku j med holonom in dublonom je namreč (v limiti $U \to 0$ točno, sicer približno) ravni val $d_j \propto e^{i(k+Ft)j}/\sqrt{L} \sim e^{ikj}/\sqrt{L}$. Primerjavo prikazuje slika 7.1 levo. Neglede na preprostost argumenta so rezultati smiselni. Z naraščajočim U,



Slika 7.1: levo: Primerjava nedoločenosti relativne gibalne količine glede na Heisenbergov princip (σ_k) in relativne gibalne količine v začetnih časih najbolj zasedenega vzbujenega stanja pri vzbujanju s poljem F = 0.2 kot funkciji parametra U, desno: Temno označena efektivni in osnovni nivo.

ki pomeni večjo lokaliziranost osnovnega stanja, narašča tudi valovni vektor najbolj zasedenega stanja. Ta pa je vedno pod vrednostjo Heisenbergove nedoločenosti. Ta premislek opomni, da je lahko udeleženih več pojavov, ki vplivajo na rezultat.

• Naslednja izbira dveh energijskih nivojev, ki jih bom poskušala ujeti v LZ obravnavo, je prikazana na sliki 7.1 desno. Poleg osnovnega vzamem stanje, ki bi bilo lastno v limiti U = 0, sedaj pa ustreza primeru, ko sistem znotraj pasu vzbujenih stanj med njimi vedno tunelira. Imenovala ga bom efektivno stanje.

7.1 Efektivno stanje

Energijo efektivnega stanja dobim iz energije vzbujenih stanj v limiti U = 0. Njihove lastne valovne funkcije in energije podajata enačbi (4.18) in (4.19). Izraz za energijo je v stalnem električnem polju in skupni gibalni količini q = 0 enak

$$\epsilon_k = U - 4\cos(Ft - k),\tag{7.2}$$

kjer k-ji stojijo za relativno gibalno količino in lahko zavzamejo L-1 različnih vrednosti. Če si efektivno stanje izberem tako kot na sliki 7.1, da je ob t = 0 njegova energija najbolj oddaljena od osnovne, potem je $k = \pi$ (ali ekvivalentno $k = -\pi$). Casovna odvisnost njegove energije je

$$\epsilon_{\pi} = U - 4\cos(Ft - \pi). \tag{7.3}$$

Iz oblike $\epsilon_{\pi}(t)$ se vidi, da še vedno ni jasno, kaj vzeti za relativno hitrost približevanja nivojev, saj je

$$\frac{\partial(\epsilon_{\pi} - \epsilon_0)}{\partial t} = 4F\sin(Ft - \pi). \tag{7.4}$$

V standardnem LZ problemu je namreč ustrezna hitrost kar konstantna.

Potrebna je modificirana obravnava glede na standarno izpeljavo, ki bo upoštevala specifike mojega problema. Zaradi opaženega tuneliranja v višja vzbujena stanja se zdi, da bo v predelani obravnavi potrebno upoštevati tudi trenutne oblike valovnih funkcij obeh nivojev, ki jih v tem približku analitično poznam.

7.2 Tuneliranje znotraj pasu vzbujenih stanj

Efektivno stanje je smiselna izbira le, če je verjetnost za tuneliranje med pravimi vzbujenimi stanji velika. Iz oblike energije $\epsilon_k(\phi)$ vzbujenih stanj se zdi, da vsaj za izračun verjetnosti za tuneliranje med sosednjimi stanji lahko uporabim kar LZ formulo. Stanji, ki ju vzamem v obravnavo, sta zaporedni lastni stanji.

- Zagasti vzorec se pojavlja s periodo t_B/L , kar definira časovno skalo, relevantno za to notranje tuneliranje. V tem kratkem časovnem intervalu lahko sosednji lastni valovni funkciji vzamem kot konstantni.
- Zaradi žagaste oblike $\epsilon_n(t)$ je hitrost, s katero se stanji relativno približujeta, dokaj dobro definirana in v prvem približu konstantna vrednosti. Vrednost te konstante ni enaka za vse pare sosednjih nivojev; med n in n + 1-vim nivojem je približno

$$v_n \approx 2 \left. \frac{-4 \left. \partial \cos(Ft) \right|_{t_n}}{\partial t} \right|_{t_n} = 8F \sin\left(\frac{\pi n}{L}\right).$$
 (7.5)

Ker je ta ocena dobra predvsem za majhne U, sem v konkretnem računu, potrebnem za sliko 7.2, uporabila numerično oceno

$$v_n \approx \frac{(\epsilon_{n+1}(t_2) - \epsilon_n(t_2)) - (\epsilon_{n+1}(t_1) - \epsilon_n(t_1))}{\pi/LF}.$$
 (7.6)

 t_2 je čas, ob katerem sta zaporedna nivoja najbolj razmaknjena, t_1 pa, ko sta najbližje.

• Energijsko razliko
 Δ_n dobim kot razliko med zaporednima lastnima stanjema, ko sta si najbližje

$$\Delta_n = (\epsilon_{n+1}(t_1) - \epsilon_n(t_1)). \tag{7.7}$$

Kot je prikazano na sliki 4.5 je Δ_n implicitno odvisna tudi od velikosti sistema L. Večji kot je sistem, manjše so energijske vrzeli. Glede na enačbo (7.8) to pomeni večjo verjetnost za tuneliranje med sosednjimi stanji. Na sliki 7.2 so prikazani rezultati za L = 161, ki je velikost sistema uporabljena v relevantnih primerjavah numeričnih in analitičnih izrazov v naslednjem poglavju. Uporabim Landau-Zenerjevo verjetnost za tuneliranje

$$P = \exp\left(-\frac{2\pi(\Delta_n/2)^2}{v_n}\right) \tag{7.8}$$

in jo izračunam za vse dvojice sosednjih stanj. Ta je najmanjša pri v spektru najnižje in najvišje ležečem paru, zaradi najmanjše relativne hitrosti približevanja v_n . Slika 7.2 prikazuje odvisnost verjetnosti za tuneliranje p od energijske vrzeli Δ za najnižje ležečo dvojico pri parametrih L = 161, F = 0.05, F = 0.1. Dobljen rezultat, ki kaže na veliko



Slika 7.2: Minimalna verjetnost za tuneliranje med zaporednimi lastnimi stanji znotraj vzbujenega pasu pri parametrih L = 161, F = 0.05, F = 0.1.

verjetnost za tuneliranje znotraj vzbujenega pasu, daje zeleno luč za efektivna stanja, saj je to notranje tuneliranje edini resni predpogoj za njihovo uporabo.

Poglavje 8

Analitična obravnava

Odstopanja med LZ problemom in problemom diplomskega dela so bila povzeta v prejšnjem podpoglavju. Sedaj jih bom poskušala upoštevati in v določenih približkih izpeljati primernejši opis, ki bi se skladal z numeričnimi rezultati.

Delala bom v približku efektivnih stanj, vpeljanih v poglavju 7.1. Izpeljala bom verjetnost, da delec preide v efektivni nivo, če je njegova energija ob t = 0 najbolj oddaljena od energije osnovnega. S tem bom obšla LZ predpostavko o hiperbolični obliki obeh nivojev, da bi razložila neujemanje v potenci Δ pri eksponentu $\Gamma = a(\Delta, F)e^{-b(\Delta, F)}$. Hkrati bom upoštevala obliko valovnih funkcij pri danem ϕ . To se izkaže potrebno za motivacijo prehajanja v višja vzbujena stanja.

8.1 Verjetnost za prehod v efektivno stanje

Ob vsakem trenutku oziroma pri vsakem ϕ lahko najdem set lastnih stanj in energij, za katere velja

$$[H(\phi) - \epsilon_n(\phi)]|n(\phi)\rangle = 0.$$
(8.1)

Valovno funkcijo bom razpisala po trenutnih lastnih stanjih [13]

$$|\psi\rangle = \sum_{n} a_n(t)|n(\phi)\rangle \, \exp\left(-i\int_0^t \omega_n(\tau)d\tau\right), \quad \omega_n(t) = \epsilon_n(\phi), \tag{8.2}$$

pri čemer velja začetni pogoj $a_n(0) = \delta_{n0}$, saj delca postavim v vezano stanje. Če nastavek (8.2) vstavim v Schrödingerjevo enačbo in uporabim ortogonalnost lastnih stanj, dobim zvezo

$$\frac{da_n}{dt} + \frac{d\phi}{dt} \sum_m a_m(t) \left\langle n | \frac{\partial}{\partial \phi} | m \right\rangle \exp\left(-i \int_0^t \omega_{mn}(\tau) d\tau\right) = 0, \quad \omega_{mn} = \epsilon_m - \epsilon_n. \quad (8.3)$$

Če enačbo (8.1) odvajam po parametru ϕ , dobim še

$$\left\langle n \left| \frac{\partial}{\partial \phi} \right| m \right\rangle = \left\langle n \left| \frac{\partial H}{\partial \phi} \right| m \right\rangle (\epsilon_m - \epsilon_n)^{-1}.$$
 (8.4)

V prvem približku lahko v vsoti (8.3) zanemarim vse razen prispevka osnovnega nivoja, saj pričakujem, da v začetnih časih velja $a_0(t) \gg a_i(t), i \neq 0$. Tako končno dobim

$$a_{n0}(T) = \int_{0}^{T} \Phi(t) \exp\left(-i \int_{0}^{t} \omega_{0n}(\tau) d\tau\right) dt$$

$$\Phi(t) = \frac{\dot{\phi} \left\langle n | \frac{\partial H}{\partial \phi} | 0 \right\rangle}{\epsilon_{n}(\phi) - \epsilon_{0}(\phi)} = -\left\langle n | \frac{\partial}{\partial t} | 0 \right\rangle.$$
(8.5)

Baza pravih trenutnih lastnih stanj Hamiltonovega operatorja za dejanski račun ni najbolj primerna. Ne znam je izračunati analitično, analitičnost izrazov pa je ključna za pridobitev odvisnosti $\Gamma(\Delta, F)$. Zato se navežem na prehajanje iz osnovnega v efektivna stanja, vpeljana v poglavju 7.1. Bazo sestavim iz pravega trenutnega osnovnega stanja in efektivnih vzbujenih stanj za vse možne relativne momente k. Valovna funkcija osnovnega stanja $|\varphi_0\rangle$ je podana s (4.14) in ima energijo (4.4). Valovna funkcija efektivnega stanja z relativnim momentom $k, |\varphi_k\rangle$, pa je podana z (4.18) in ima energijo (7.2).

Ce to vstavim v enačbo (8.5), dobim

$$a_{k0}(T) = -\frac{iFN_0}{\sqrt{L}} \int_0^T dt \sum_{j=-n}^n j e^{-ikj} e^{-\kappa|j| + iFtj} e^{-i\int_0^t (U - \sqrt{U^2 + 16}) - (U - 4\cos(F\tau - k))d\tau}.$$
 (8.6)

Parametri κ, U, Δ so med seboj povezani s

$$\kappa = \ln\left((U + \sqrt{U^2 + 16})/4\right) \rightarrow \sqrt{U^2 + 16} = 4\cosh\kappa$$
$$\Delta = 4(\cosh\kappa - 1). \tag{8.7}$$

Ker je κ za smiselne U tipično majhna vrednost, bom v nadaljevanju vse izražala z njim. Tako se lažje prepozna in uporabi limitna obnašanja. Izraz (8.6) je v limiti neskončnega sistema $n \to \infty$

$$a_{k0}(T) = -\frac{iFN_0}{\sqrt{L}} \int_0^T dt \sum_{j=-\infty}^\infty j e^{-ikj} e^{-\kappa|j| + iFtj} e^{i\frac{4}{F}} \int_{-k}^{Ft-k} (\cosh\kappa - \cos x) dx$$
$$= -\frac{iN_0}{\sqrt{L}} \int_0^{FT} d(Ft) \frac{i\sin(Ft-k)\sinh\kappa}{(\cos(Ft-k) - \cosh\kappa)^2} e^{i\frac{4}{F}} \int_{-k}^{Ft-k} (\cosh\kappa - \cos x) dx$$
$$= \sqrt{\frac{\sinh\kappa^3}{L\cosh\kappa}} \int_{-k}^{FT-k} d\xi \frac{\sin\xi}{(\cos\xi - \cosh\kappa)^2} e^{i\frac{4}{F}} \int_{-k}^{\xi-k} (\cosh\kappa - \cos x) dx. \tag{8.8}$$

Dobljeno z numerično integracijo, zasedenost $|a_{k0}|^2$ v odvisnosti od časa znotraj periode $Ft \in [0, 2\pi]$ za $k = \pi$ prikazuje slika 8.1.

Verjetnost prehoda iz vezanega v efektivno stanje s $k=\pi$ v času celotne periode dobim iz

$$a_{\pi 0} \left(\frac{2\pi}{F}\right) = \sqrt{\frac{\sinh \kappa^3}{L \cosh \kappa}} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi \frac{\sin \xi}{\left(\cos \xi - \cosh \kappa\right)^2} \exp\left(i\frac{4}{F} \int_{0}^{\xi} (\cosh \kappa - \cos x) dx\right)$$
(8.9)
$$= \sqrt{\frac{\sinh \kappa^3}{L \cosh \kappa}} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi \frac{\sin \xi}{\left(\cos \xi - \cosh \kappa\right)^2} \exp\left(i\frac{4}{F} (\xi \cosh \kappa + \sin \xi)\right).$$



Slika 8.1: Zasedenost $|a_{k0}|^2$ za $k = \pi$ pri parametrih $L = 161, \kappa = 0.24(\Delta = 0.12)$ in različna polja F = 0.05, 0.1, 0.15.

V tej enačbi so vsebovane fundamentalne podobnosti in razlike z Landau-Zenerjevim prehodom. Tam se računa verjetnost, da delec v časovnem intervalu $t \in (-\infty, \infty)$ tunelira med dvema stanjema s hiperbolično obliko energij. Tu pa $|a_{\pi 0}|^2$ pove verjetnost za prehod iz osnovnega stanja s konstantno energijo v efektivno s kosinusno obliko energije znotraj intervala $t \in [0, 2\pi/F]$, kar je perioda efektivnega stanja. Pri tem je zgornji nivo v trenutku t = 0 maksimalno oddaljen od osnovnega, saj je tako podobnost z LZ tuneliranjem največja. Za razliko od LZ upoštevam tudi trenutni obliki obeh valovnih funkcij. S pomočjo tega lahko razložim numerične rezultate, ki kažejo, da je pri poljubno majhnih časih več prehajanja v višja prava vzbujena stanja. Kot se vidi iz oblike

$$\langle \varphi_{\pi} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{0} \rangle = -\frac{F \langle \varphi_{\pi} | \frac{\partial H}{\partial \phi} | \varphi_{0} \rangle}{\epsilon_{\pi} - \epsilon_{0}} = \frac{F \langle \varphi_{\pi} | J | \varphi_{0} \rangle}{\epsilon_{\pi} - \epsilon_{0}} = \frac{F \sin F t}{(\cos F t - \cosh \kappa)^{2}}$$
(8.10)

za (brezdimenzijski) operator toka matrični element med osnovnim in efektivnim stanjem ni največji, ko sta si najbližje. V bazi pravih lastnih stanj pa to pomeni prehajanje v nekoliko višja vzbujena stanja.

Glavni prispevki k integralu (8.9) so torej okrog ekstrema funkcije

$$\frac{\sin\xi}{(\cos\xi - \cosh\kappa)^2}$$

ki ima pola pri $\xi = \pm i\kappa$. Ker so za smiselne U vrednosti κ majhne, bosta tudi ekstrema v realnem prostoru v bližini $\xi = 0$, kar pomeni, da lahko naredim razvoj za ξ in κ do prvega reda in dobim

$$\frac{\sin\xi}{(\cos\xi - \cosh\kappa)^2} \to \frac{4\xi}{(\xi^2 + \kappa^2)^2},\tag{8.11}$$

meje integrala pa raztegnem v neskončnost, saj bodo prispevki na dodanih intervalih zanemarljivi. Ker je

$$\frac{2\xi}{(\xi^2 + \kappa^2)^2} = -\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{1}{\xi^2 + \kappa^2}\right),$$

se je integrala (8.9) smiselno lotiti per partes. Če označim $\omega_{\xi}=\xi^2+\kappa^2,$ potem je

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{4\xi}{(\xi^2 + \kappa^2)^2} \exp\left(i\frac{2}{F} \int_0^{\xi} (\xi'^2 + \kappa^2)d\xi'\right)$$

$$= -2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{1}{\omega_{\xi}}\right)' \exp\left(i\frac{2}{F} \int_0^{\xi} \omega_{\xi'}d\xi'\right)$$

$$= -\frac{2}{\omega_{\xi}} \exp\left(i\frac{2}{F} \int_0^{\xi} \omega_{\xi'}d\xi'\right) \Big|_{-\infty}^{\infty} + i\frac{4}{F} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(i\frac{2}{F} \int_0^{\xi} \omega_{\xi'}d\xi'\right)$$

$$= i\frac{8}{F} \int_0^{\infty} d\xi \cos\left[\frac{2}{F} \left(\frac{\xi^3}{3} + \xi\kappa^2\right)\right] = i\frac{8\kappa}{\sqrt{3F}} K_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{4\kappa^3}{3F}\right),$$
(8.12)

kjer je $K_{-1/3}(x)$ je modificirana Besselova funkcija. Verjetnost za prehod v efektivni nivo s $k = \pi$ v času celotne periode $t_B = 2\pi/F$ je torej

$$p = |a_{\pi 0}|^2 \left(\frac{2\pi}{F}\right) = \frac{1}{L} \frac{\kappa^2 \sinh \kappa^3}{\cosh \kappa} \frac{64}{3F^2} \left(K_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{4\kappa^3}{3F}\right)\right)^2.$$
 (8.13)

Zaradi privzetih poenostavitev pričakujem, da bo odvisnost (8.13) ustrezna vsaj za majhne $\kappa.$

S pomočjo poznavanja asimptotskega obnašanja modificirane Besselove funkcije, lahko napovem, kako se obnaša verjetnost za prehod v nevezano stanje p v različnih režimih.

• Adiabatsko območje:

V tej limiti gre $F \to 0$ in smiselno bi bilo, da tudi $p \to 0$, saj premajhna polja ne morejo vzbuditi prehoda. V tej limiti je enačba (8.13)

$$p = \frac{8\pi}{L} \frac{\sinh^3 \kappa}{\kappa \cosh \kappa} \frac{\exp\left(-8\kappa^3/3F\right)}{F}.$$
(8.14)

Eksponentna odvisnost poskrbi, da pri majhnih poljih res ni prehodov. Rezultat kliče po primerjavi z numerično dobljeno odvisnostjo $\Gamma(F)$ v adiabatski limiti (6.7). Ker je Γ sorazmeren verjetnosti za prehod v vzbujena stanja, lahko njegovo adiabatsko odvisnost primerjam s to za p

numerično	analitično
$\Gamma \propto \exp\left(-0.92 \ \Delta^{1.51}/F\right)$	$p \propto \exp\left(-8\kappa^3/3F\right)$
$\approx \exp\left(-2.60 \ \kappa^3/F\right)$	$\approx \exp\left(-2.67 \ \kappa^3/F\right)$

Pri tem sem uporabila razvoj Δ za male κ , $\Delta = 4(\cosh \kappa - 1) \approx 2\kappa^2$. Primerjava kaže na dobro ujemanje numeričnih in analitičnih rezultatov. Torej narejeni približki niso prehudi in je obravnava s tuneliranjem v efektivna stanja smiselna.

• Velika polja:

V limiti velikih pol
j ${\cal F}$ kažepverjetnost za prehod

$$p = \frac{1}{L} \left(\frac{8\pi}{3\Gamma(2/3)}\right)^2 \left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} \frac{\sinh^3 \kappa}{\cosh \kappa} \frac{1}{F^{4/3}},$$
(8.15)

ki je na prvi pogled malo presenetljiva. Za večja polja je namreč verjetnost za prehod manjša. Razlog za to leži v lihosti elementa

$$\left\langle \varphi_{\pi} \left| \frac{\partial}{\partial t} \left| \varphi_{0} \right\rangle \right|_{t=\pi/F-\tau} = -\left\langle \varphi_{\pi} \left| \frac{\partial}{\partial t} \left| \varphi_{0} \right\rangle \right|_{t=\pi/F+\tau}$$

glede na točko π/F , ko sta nivoja najbližje. Za neničelno skupno verjetnost pri prehodu poskrbi faza v enačbi (8.12), ki v integralu stoji poleg lihega elementa. Če pa je polje F veliko, so oscilacije v fazi počasnejše in je zato efekt destruktivne interference pri prehodu minimuma energije nevezanega stanja večji.

Kako dober je približek (8.13) za verjetnost prehoda v efektivno stanje se vidi iz primerjave vrednosti $|a_{\pi 0}|^2 (2\pi/F)$, dobljenih iz numerične integracije izraza (8.9) in vrednosti piz enačbe (8.13). To za odvisnosti $p(\kappa)$ prikazuje slika 8.2 levo, za odvisnost p(F) pa slika 8.2 desno. Kot napovedano, je ujemanje pri majhnih κ boljše kot pri večjih. Iz primerjav



Slika 8.2: Primerjava vrednosti $|a_0|^2(2\pi/F)$, dobljenih z numerično integracijo izraza (8.9) (točke) in odvisnosti p iz enačbe (8.13) (krivulja) za levo: $p(\kappa)$ pri F = 0.1 (črna), F = 0.2 (rdeča) in desno: p(F) pri $\kappa = 0.25$ (črna), $\kappa = 0.59$ (rdeča).

izhaja, da je formulo (8.13) varno uporabljati vsaj za $\kappa < 0.3$.

8.2 Razpadni koeficient osnovnega stanja

V okviru nekaterih približkov sem v prejšnjem poglavju dobila verjetnost za prehod v en efektivni nivo s $k = \pi$ v času ene njegove periode. Dejansko se vzbujeni pas približno opiše z L - 1 takimi, fazno zamaknjenimi nivoji. Zato je trenutna zasedenost osnovnega stanja dobljena z vsoto po vseh

$$|a_0|^2(t) = 1 - \sum_k |a_{k0}|^2(t).$$
(8.16)

Kako dober je približek (8.16) prikazuje slika 8.3, ki kaže skupno zasedenost vzbujenih stanj, dobljeno iz numeričnega reševanja Schrödingerjeve enačbe (num) in z vsoto po $|a_{k0}|^2$ (sum). Časovne odvisnosti členov $|a_{k0}^2|(t)$ ne poznam analitično, lahko pa jih dobim z numerično integracijo izraza (8.8). Ujemanje je pri majhnih časih zelo dobro. Da se

krivulji pri $\sum_{k} |a_{k0}|^2 \approx 0.4$ razideta, je pričakovano. Takrat približek $|a_0|^2 = 1$, s katerim še vedno računam, še z daleč ni več ustrezen. Iz istega razloga krivulja (sum) tudi preseže vrednost $\sum_{k} |a_{k0}|^2 = 1$, saj normiranost zasedenosti ni spoštovana. Vseeno pa da slika 8.3 vedeti, da predpostavka s popolnim tuneliranjem znotraj nevezanega pasu in uvedba efektivnih stanj nista zgrešeni.



Slika 8.3: Skupna zasedenost vzbujenih stanj dobljena iz numeričnega reševanja Schrödingerjeve enačbe (num) in z vsoto po $|a_{k0}|^2$ (sum) pri parametrih levo: $L = 161, F = 0.02, \kappa = 0.17$ ($\Delta = 0.06$) ter desno: $L = 161, F = 0.2, \kappa = 0.37$ ($\Delta = 0.27$).

Smetana vsega tega naj bi bila, da bi s pomočjo verjetnosti za prehod v efektivno stanje izračunala razpadni koeficient za osnovno stanje. Številne efektivne nivoje si predstavljam, kot da fazno zamaknjeni za $2\pi/LF$ prihajajo proti osnovnemu stanju. Sistem iz osnovnega stanja prehaja v vsakega izmed njih. Verjetnost za prehod v efektivno stanje v času Blochove periode je približno p (8.13) skoraj za vse efektivne nivoje (t.j. za različne k). Večina prehajanja namreč poteka, ko sta energiji osnovnega in izbranega efektivnega nivoja najbližje. Zato je smiselna ocena

$$|a_0|^2(t) = (1-p)^{t/\delta t}, \quad \delta t = \frac{2\pi}{LF},$$
(8.17)

kjer je $t/\delta t$ število nivojev, ki je do časa t prečkalo minimum svoje energije. Ti so v glavnem sistem odnesli iz osnovnega stanja. Enačba (8.17) je le ocena, ker je verjetnost ppribližno dosežena, ko se efektivni nivo že malo oddalji od osnovnega. Če predpostavim, da osnovno stanje res razpada eksponentno, $|a_0|^2 \propto \exp(-\Gamma t)$, potem bi moralo veljati

$$\Gamma_p = -\frac{1}{\delta t}\ln(1-p) \approx \frac{LF}{2\pi}p = \frac{32}{3\pi} \frac{\kappa^2 \sinh \kappa^3}{\cosh \kappa} \frac{1}{F} \left(K_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{4\kappa^3}{3F}\right)\right)^2.$$
(8.18)

Dobro je, da se odvisnost od velikosti sistema L pokrajša z normalizacijo, implicitno vsebovano v p. Numerični rezultati namreč ne kažejo odvisnosti razpadnega časa od velikosti sistema. Slika 8.4 prikazuje primerjavo odvisnosti $\Gamma(F)$ za Γ_{fit} in Γ_p . Γ_{fit} je dobljen iz fitanja premice k numerično pridobljenemu log $|a_0^{num}|^2(t)$ (kot v poglavju 6.2), Γ_p pa iz enačbe (8.18). Ujemanje razpadnih koeficientov Γ je solidno pri manjših poljih in kar dobro ujame pozicijo mejnega polja F_{th} . Na drugi strani pa so večja odstopanja pri močnejših poljih, čeprav je ujemanje zasedenosti osnovnega stanja za kratke čase vzpodbudno neglede na velikost polja.



Slika 8.4: Odvisnost razpadnega koeficienta od polja F za Γ_{fit} (dobljeno iz fitanja premice k ln $|a_0|^2(t)$) in Γ_p (iz enačbe (8.18)) pri $\Delta = 0.27$.

8.2.1 Trenutni razpadni koeficient

Kje se zgodi odstopanje, se da ugotoviti s primerjavo trenutnih razpadnih koefientov, ki ga definiram kot

$$\Gamma(t) = -\frac{|\dot{a}_0|^2}{|a_0|^2}(t). \tag{8.19}$$

Iz numeričnih rezultatov ga preberem kot odvod v grafu $-\ln |a_0^{num}|^2(t)$. Kaj je ta funkcija v okviru razmišljanj s prehajanji v efektivna stanja, pa bom izpeljala v sledečih odstavkih.

Ce koeficiente $a_{k0}(t)$ zapišem kot v enačbi (8.5), glede na vsoto (8.16) za razpadanje osnovnega stanja velja

$$\begin{aligned} |\dot{a_0}|^2(t) &= -\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \sum_k \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \ a_0(t_2) a_0^*(t_1) \ \langle \varphi_k | \dot{\varphi_0} \rangle_{t_2} \ \langle \dot{\varphi_0} | \varphi_k \rangle_{t_1} \ e^{-i \int_{t_1}^{t_2} (\epsilon_0 - \epsilon_k) dt''} \right\} \\ &= -2Re \sum_k \int_0^t dt_1 \ a_0(t) a_0^*(t_1) \ \langle \varphi_k | \dot{\varphi_0} \rangle_t \langle \dot{\varphi_0} | \varphi_k \rangle_{t_1} \ e^{-i \int_{t_1}^t (\epsilon_0 - \epsilon_k) dt''}. \end{aligned}$$

Naredila bom približek $a_0^*(t_1) \sim a_0^*(t)$, kar ni preslabo za majhne t, v vsakem primeru pa s tem račun postane izvedljivejši. Če delim z $|a_0(t)|^2$ in obe strani še integriram po času, končno pridem do

$$\ln|a_0|^2(t) = -2Re \sum_k \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \, \langle \varphi_k | \dot{\varphi}_0 \rangle_{t_2} \langle \dot{\varphi}_0 | \varphi_k \rangle_{t_1} \, e^{-i \int_{t_1}^{t_2} (\epsilon_0 - \epsilon_k) dt''}.$$
(8.20)

Zadnji izraz, ki vsebuje dva integrala in eno vsoto, se da računsko oklestiti [14]. In sicer, namesto da dvojno integracijo po času t_1 in t_2 seštevam po vseh (L-1) efektivnih nivojih, seštejem za vse dovoljene k-je prispevke konstantno razmaknjenih trenutkov $t_2 - t_1 = \tau$, potem pa še integriram po vseh možnih τ (slika 8.5). Ker delam v velikem sistemu $(L \to \infty)$, lahko vsoto po k nadomestim z integralom $(\sum_k \to \frac{L}{2\pi} \int dk)$. Efektivno se tako znebim ene integracije



Slika 8.5: Prehod iz vsote po nivojih na en sam nivo.

Tako nekako namesto z (L-1) nivoji, računam samo še z enim. Njegova disperzijska zveza in valovna funkcija, ki jo reproducira, sta

$$\epsilon_1(k) = U - 4\cos k, \quad |\varphi_1\rangle = \sum_j \frac{e^{i(k+Ft)j}}{\sqrt{L}} |\Psi_0^j\rangle.$$
(8.21)

Enačbo (8.20) po tem razmisleku zapišem kot

$$\ln |a_0|^2(t) = -\int_0^t d\tau (t-\tau) W(\tau), \qquad (8.22)$$

kjer je

$$W(\tau) = 2F^2 \frac{L}{2\pi} Re \int_{-\pi}^{\pi} dk \ g\left(k + \frac{F\tau}{2}\right) g^*\left(k - \frac{F\tau}{2}\right)$$
(8.23)

za

$$g(k) = \langle \varphi_1 | \frac{\partial}{\partial k} | \varphi_0 \rangle_k \, \exp\left(i \int_{-\pi}^k \epsilon_{10} \frac{dk'}{F}\right).$$

Ker sedaj stanja gledam kot funkcije k-ja, odvod po času nadomesti odvod po k-ju, $\partial/\partial t \rightarrow F \partial/\partial k$. $W(\tau)$ ima očitno obliko korelacijske funkcije za g(k). Za dejanske oblike valovnih funkcij je končna enačba enaka

$$W(\tau) = F^2 \frac{\sinh^3 \kappa}{\pi \cosh \kappa} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{\sin(k + F\tau/2)}{(\cos(k + F\tau/2) - \cosh \kappa)^2} \frac{\sin(k - F\tau/2)}{(\cos(k - F\tau/2) - \cosh \kappa)^2} \times \\ \times \cos\left(\frac{4}{F} \int_{k - F\tau/2}^{k + F\tau/2} (\cos k' - \cosh \kappa) dk'\right).$$

$$(8.24)$$

Integrala žal niti v smiselnih približkih ne znam analitično izračunati. $W(\tau)$ za parametre $\Delta = 0.27, F = 0.1$, dobljeno z numerično integracijo, prikazuje slika 8.6. $W(\tau)$ kot korelacijska funkcija kaže hitro padanje korelacij, ki pa se za $F\tau \sim 2\pi$ spet pojavijo, kar je posledica periodičnosti disperzije $\epsilon_1(k)$ v razširjenem k-prostoru.

Z zgornjimi enačbami se lahko napove karakteristična obnašanja razpadanja osnovnega stanja. Za kratke čase približno velja $\ln |a_0|^2 = -\frac{1}{2}W(0)t^2$, torej osnovno stanje razpada kvadratično. Tak rezultat ni presenečenje, saj je splošna posledica tega, da



Slika 8.6: Oblika $W(\tau)$ za parametre $\Delta = 0.27, F = 0.1.$

Schrödingerjeva enačba vsebuje prvi odvod po času. Amplituda za prehod iz osnovnega stanja gre zato linearno s časom, verjetnost za prehod pa kvadratično.

Trenutna zasedenost osnovnega stanja sledi iz (8.22), in sicer je

$$|a_0|^2(t) = \exp\left(-\Gamma_1(t)t + \Gamma_0(t)\right), \qquad (8.25)$$

$$\Gamma_1(t) = \int_0^t W(\tau) d\tau, \qquad (8.26)$$

$$\Gamma_0(t) = \int_0^t \tau W(\tau) d\tau.$$
(8.27)

W(t) hitro pade proti 0 in pri tej vrednosti ostane, vse dokler se korelacije zaradi periodičnosti spet ne pojavijo. Če bi funkcija W(t) ostala zanemarljivo majhna tudi za vse kasnejše čase, bi lahko govorili o še enem karakterističnem obnašanju, pri katerem postane $\Gamma_1^{0} = \int_0^\infty W(t) dt$ kar konstanta, ki zagotavlja eksponentno obliko razpadanja in pove hitrost le tega. Vrednosti te konstante se lahko v obravnavanem primeru približam z

$$\Gamma_1^{\ 0} = \int_0^{\pi/F} W(\tau) d\tau, \tag{8.28}$$

saj se v tem intervalu korelacije še ne pojavijo ponovno.

Končno bi rada ugotovila, kje nastopi odstopanje med razpadnim koeficientom, dobljenim iz numeričnega reševanja Schrödingerjeve enačbe, in trenutnim razpadnim koeficientom v približku efektivnih nivojev. Prvega, ki ustreza naklonu v numerično pridobljeni funkciji $\ln |a_0^{num}|^2$,

$$\Gamma_{num}(t) = -\frac{d}{dt} \ln |a_0^{num}|^2 \tag{8.29}$$

bom primerjala z $-|\dot{a}_0|^2(t)/|a_0|^2(t).$ Glede na enačbo (8.25) je ta

$$-\frac{|\dot{a}_0|^2}{|a_0|^2}(t) = \Gamma_1(t) + \dot{\Gamma}(t)_1 t - \dot{\Gamma}_0(t) = \Gamma_1(t) + W(t)t - tW(t) = \Gamma_1(t).$$
(8.30)

To pomeni, da bom v bistvu delala primerjavo med $\Gamma_{num}(t)$ in $\Gamma_1(t)$.

Pri parametrih $\Delta = 0.27, F = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ jo prikazuje slika 8.7. Iz nje se vidi, kdaj numerična vrednost $\Gamma_{num}(t)$ odstopi od $\Gamma_1(t)$. Vrednosti si dobro sledita pri kratkih



Slika 8.7: Primerjava Γ_1 , dobljenega iz numeričnega integriranja enačbe (8.26) in trenutne vrednosti razpadnega koeficienta Γ_{num} , dobljenega iz numeričnega reševanja Schrödingerjeve enačbe pri parametrih $\Delta = 0.27, F = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ zaporedoma.

časih, potem pa se ločita. $\Gamma_{num}(t)$ začne oscilirati okrog povprečne vrednosti, limitna vrednost Γ_1^{0} pa očitno ni vedno enaka tej povprečni vrednosti. Poleg tega se izkaže, da je limitna vrednost $\Gamma_1^{0} = \Gamma_p$ iz enačbe (8.18) (dokaz v A). To razloži diskrepanco iz slike 8.4, na kateri sem pravzaprav risala ravno povprečno vrednost $\Gamma_{fit} = \overline{\Gamma}_{num}$ in limitno vrednost Γ_1^{0} .

Če primerjam prvi maksimum funkcije $\Gamma_1(t)$ in povprečno vrednost $\overline{\Gamma}_{num}$, se vrednosti približno ujemata pri vseh F, saj se prvi maksimum še nahaja v območju majhnih časov. Grafično primerjavo za energijski vrzeli $\Delta = 0.06, 0.21$ prikazuje slika 8.8. Dorisana je tudi analitična krivulja Γ_p , ki dobro popiše preboj in hitrost razpadanja pri majhnih poljih ($F < \Delta/3$), ni pa primerna za opis pri velikih poljih.

Vprašanje, ki se ga ne da spregledati, je, kdaj in zakaj se $\Gamma_1(t)$ in $\Gamma_{num}(t)$ odcepita. Razlog za odcep in osciliranje $\Gamma_{num}(t)$ je mogoče razložiti z vsebino enačbe (8.26) za $\Gamma_1(t)$.

$$\Gamma_1(t) = \int_0^t W(\tau) d\tau = \int_0^t d\tau \int_{-\pi}^{\pi} dk \ f(k,\tau) \cos\left(\int_{k-F\tau/2}^{k+F\tau/2} \frac{\epsilon_{10}}{F} dk'\right),$$
(8.31)

kjer integral po k nadomesti seštevanje po vseh efektivnih nivojih, z integralom po τ pa upoštevam vsa možna tuneliranja do časa t. Padanje korelacij pri daljših τ poskrbi, da $\Gamma_1(t)$ gre proti limitni vrednosti. Tudi $\Gamma_{num}(t)$ se v začetnih časih obnaša ravno tako, kar kaže, da je v tem režimu opis s prehajanjem v efektivna stanja zelo primeren. Po nekem t_m pa odstopi od $\Gamma_1(t)$, začne oscilirati in ne gre k limitni vrednosti. Matematično bi



Slika 8.8: Primerjava prvega maksimuma Γ_1 , povprečne vrednosti Γ_{fit} in analitične vrednosti Γ_p v odvisnosti od polja F za $\Delta = 0.06$ (levo) in $\Delta = 0.21$ (desno).

 $\Gamma_{num}(t)$ za $t > t_m$ lahko opisala z enačbo

$$\Gamma_{num}(t) = \Gamma_1(t_m) + A\cos(\alpha + \frac{2\pi}{t_0}t).$$
(8.32)

Fizikalno morajo ta rezultat osmisliti narejeni približki.

- V celotni izpeljavi trenutnega razpadnega koeficienta je bil edini matematični približek narejen v enačbi (8.20) z $a_0^*(t_1) \sim a_0^*(t)$. Zaradi tega bi načeloma lahko dobila premajhne razpadne koeficiente.
- Zdi se, da je ključnejši fizikalni približek efektivnih stanj. Realno sistem gotovo ne tunelira v vzbujenem pasu popolnoma, kot predpostavljeno z efektivnimi stanji. Predvsem pri daljših časih se verjetno pojavijo tudi prehodi med sosednjimi efektivnimi stanji, kot prikazano na sliki 8.9. Moja špekulacija glede (8.32) je, da t_m



Slika 8.9: Prehodi med sosednjimi efektivnimi stanji.

pove maksimalno dolžino poti v vzbujenem pasu, ki sledi enemu efektivnemu nivoju. Pri časih $t > t_m$, ki jim ustrezajo daljše poti v vzbujenem pasu, pa se pojavijo prehodi med efektivnimi stanji. Daljši kot je t, več je takih prehodov. Celotna pot v vzbujenem pasu zato izgleda krajša, ker je nagubana. Še vedno jo lahko sestavim iz (koherentnega) dela dolžine t_m in ostalih delčkov, ki ustrezajo prehajanjem med nivoji. Njihova skupna dolžina mora biti sorazmerna $t - t_m$. Enačbo (8.32) poskusim dobiti iz (8.31). Upoštevam, da so za majhne τ prehodi predvsem okrog k = 0. Skupaj z razmislekom glede oblike poti v vzbujenem pasu, lahko ocenim

$$\Gamma_{num}(t) = \Gamma_1(t_m) + A \int_{t_m}^t d\tau \cos\left(\int_{-Ft_m/2}^{Ft_m/2} \frac{\epsilon_{10}}{F} dk' + (t - t_m)\epsilon_p\right)$$
$$= \Gamma_1(t_m) + \frac{A}{\epsilon_p} \left(-\sin\alpha + \sin(\alpha - \epsilon_p t_m + \epsilon_p t)\right), \tag{8.33}$$
$$\alpha = \int_{-Ft_m/2}^{Ft_m/2} \frac{\epsilon_{10}}{F} dk'$$

Ocena da opaženo odvisnost $\Gamma_{num}(t)$. Pri tem vpeljana energija ϵ_p , je neka povprečna energija, za katero je sistem odmaknjen od osnovne pri prehajanjih med sosednjimi efektivnimi nivoji. Iz opazovanja frekvence oscilacij ji lahko pripišem odvisnost

$$\epsilon_p \propto \frac{\sqrt{F}}{(\beta - \gamma \kappa)}, \quad \gamma > 0.$$
 (8.34)

Zaključek bi torej bil naslednji: predstava s potmi v vzbujenem pasu, ki so za $t > t_m$ sestavljene iz t_m dolgega koherentnega dela in $(t - t_m)$ trajajočega naključnega prehajanja med efektivnimi stanji, mogoče razloži osciliranje v $\Gamma_{num}(t)$.

Poglavje 9

Ostale objavljene raziskave

V zadnjem poglavju bom ugotovitve diplomskega dela navezala na dela drugih avtorjev, ki so se problema Mottovega izolatorja lotili tako z eksperimentalnega kot s teoretičnega stališča.

9.1 Ekperimentalne potrditve

Dielektrični preboj 1D Mottovega izolatorja je eksperimentalno potrjen[1]. Avtorji so opazovali kristala Sr_2CuO_3 in $SrCuO_2$, ki sta tipična 1D Mottova izolatorja, sestavljena iz enojnih in dvojnih CuO verig ujetih med izolatorskimi $(SrO)_2$ plastmi. Postavitev eksperimenta je nakazana na sliki 9.1. Na izvor napetosti so priključili zaporedno vezana



Slika 9.1: Postavitev eksperimenta.

upornik R_L (100 $k\Omega$) in kvader kristala. Upornik R_L poskrbi, da v krogu niso preveliki tokovi. Na celoten krog je bila priključena napetost V_{cir} do 1000V. Če skozi krog teče tok I, je napetost na kristalu enaka $V = V_{cir} - IR_L$. Upornost kristala, ki je informacija o njegovih transportnih lastnostih, so dobili z merjenjem toka I v krogu in padca napetosti na uporniku V_R . Dobljeno temperaturno odvisnost upornosti R za različne napetosti V_{cir} prikazuje slika 9.2. Opažena je rast upornosti s padajočo temperaturo. Najpomembnejše pa je, da pri večjih napetostih V_{cir} obstaja nezvezen skok med stanjema z nizko in visoko upornostjo. Najbolj jasno je izražen pri $V_{cir} = 900V$, kjer se zgodi pri T = 140K za



Slika 9.2: (a),(c): Odvisnost upornosti R od temperature za različne celotne napetosti V_{cir} pri Sr_2CuO_3 in $SrCuO_2$ zapovrstjo, (b),(d): Odvisnost gostote toka J od električnega polja E pri različnih temperaturah za Sr_2CuO_3 in $SrCuO_2$ zapovrstjo. Črtkano je označena Ohmska limita [1].

 Sr_2CuO_3 in pri T = 100K za $SrCuO_3$. Razlika v temperaturah kaže, da ima $SrCuO_3$ bolj prevodno naravo.

S teoretičnega stališča je seveda glavno vprašanje, kakšen mehanizem je v ozadju. Ker se prehod v stanje z nizko upornostjo zgodi z časovnim zamikom $\Delta t \sim 100ms$, bi lahko rekli, da se v tem času kristal ohmsko greje. A ker je moč akumulirana v Δt dovolj velika za segretje Sr_2CuO_3 ($SrCuO_2$) za $\Delta T \sim 3(1)K$, je to premalo za obrazložitev skoka. Stanji z nizko in visoko upornostjo morata torej biti lastni sistemu močno koreliranih elektronov.

Avtorji so raziskali tudi odvisnost gostote toka od električnega polja J(E), kjer je $E = (V_{cir} - R_L I)/d$ za dolžino kristala d. Rezultati so prikazani na sliki 9.2. Pri relativno majhnih vrednostih E je zveza J(E) linearna, kar ustreza ohmski karakteristiki. Od nekega mejnega polja naprej se pojavijo odstopanja od Ohmovega zakona in končno za $E > E_{th}$ celo negativna upornost. Slika 9.3 prikazuje odvisnost $E_{th}(T)$ za oba kristala. Točke precej dobro kažejo na

$$\frac{E_{th}(T)}{E_{th}(0)} = e^{-\frac{T}{T_0}},\tag{9.1}$$

kar dodatno omeji možne mehanizme v razlagi. Za primerjavo E_{th} z vrednostimi F_{th} , do-



Slika 9.3: Odvisnost $E_{th}(T)$ za Sr_2CuO_3 in $SrCuO_2$ [1].

bljenimi v mojem diplomskem delu je potrebna ekstrapolacija k $T \to 0$. Ob predpostavki, da ves čas velja zveza (9.1), je mejno polje

$$E_{th} \sim 10^6 - 10^7 \frac{V}{cm}.$$
 (9.2)

Če to primerjam z izrazom za mejno polje kot ugotovljeno numerično in analitično v prejšnjih poglavjih, dobim

$$E_{th} = \frac{\sqrt{8}}{3} \Delta^{3/2} \, \frac{t_{hop}}{ae_0} \approx 1.4 \cdot 10^7 \frac{V}{cm} \tag{9.3}$$

pri čemer sem uporabila tipične vrednosti $t_{hop} = 0.3eV$, a = 0.2nm, $\Delta = 1eV$. Vrednost se ujema z napovedmi ekstrapolacije. Seveda bi bilo za točnejše trditve potrebno poznavanje obnašanja sistema z resnično projekcijo skupnega spina, saj je moj sistem le poenostavljen približek z $S_z = L/2 - 1$. Poleg tega je bila sedaj za primerjavo potrebna ekstrapolacija $T \rightarrow 0$ in bi dejansko eksperiment najbolj korektno primerjali s teorijo, če bi bila ta razvita tudi za T > 0.

Kar se eksperimentalnega preverjanja tiče, bi rada dodala, da tudi spinska konfiguracija mojega diplomskega dela ni popolnoma za lase privlečena in bi se jo dalo realizirati v močnem magnetnem polju, ki bi poskrbelo za veliko skupno komponentno v smeri polja.

9.2 Teoretične objave

Teoretična obravnava dielektričnega preboja Mottovega izolatorja je bila naslovljena v kar nekaj člankih. Začenši s [4] se je v njih stalno ponavljal koncept Landau-Zenerjevega mehanizma za tuneliranje, s čimer naj bi se obrazložil preboj. V vseh člankih je bil obravnavan enodimenzionalen polzapolnjen Hubbardov sistem, vendar za razliko od mojega diplomskega dela s skupno z-komponentno spina $S_z = 0$. Moja obravnava s $S_z = L/2 - 1$ je torej le poenostavljen primer glede na $S_z = 0$, bazične lastnosti pa bi lahko ostale enake.

Med drugim so, ravno tako kot v tem delu, opazovali verjetnost za zasedenost osnovnega stanja. Pri tem je bil sistem ob vključitvi električnega polja v osnovnem stanju. V [4] so se ukvarjali z dogajanjem pri kratkih časih, v [5] pa so raziskave raztegnili na daljše čase. Numerični rezultati naj bi kazali razliko med kratko- in dolgočasovnim dogajanjem, pri katerem se razpadni koeficient za zasedenost osnovnega stanja Γ zmanjša. To prikazuje slika 9.4 levo. Za to naj bi bilo odgovorno sipanje med vzbujenimi stanji z anihilacijo parov dublon-holon. Vendar te trditve še niso podprte z izdelano teorijo.



Slika 9.4: levo: $-\ln |\Xi|^2(\tau)$, kjer je $|\Xi|^2$ verjetnost za zasedenosti trenutnega osnovnega stanja. Nakazani sta kratko- in dolgočasovna limita. Desno: Odvisnost razpadnega koeficienta Γ/L od polja F/t, kjer je $t = t_h$ z dodano analitično LZ odvisnostjo (9.4) [5].

V obeh primerih naj bi mejno polje, pri katerem se razpadni koeficient začne hitro povečevati, opisala LZ teorija

$$F_{th}^{LZ} = \frac{[\Delta(U)/2]^2}{v}.$$
(9.4)

Pri tem je $\Delta(U)$ Mottova energijska vrzel, kot jo napove Bethe-ansatz in $v/t_h = 2$. Vedno predpostavijo, da tuneliranje iz osnovnega stanja poteka samo v prvo vzbujeno stanje. Prehajanja v višja vzbujena stanja potem potekajo iz prvega vzbujenega stanja.

V tretjem članku [6] pa isti avtorji naslovijo problem odvisnosti od velikosti sistema. Hitrost približevanja adiabatskih nivojev naj bi bila $v \sim 2$ le za majhne U in sisteme. Za večje sisteme pa naj bi se nivoji glede na parameter magnetnega pretoka ϕ izravnali.

Poglavje 10

Zaključek

Skozi diplomsko delo sem poskušala najti opis za zmanjševanje zasedenosti osnovnega stanja Mottovega izolatorja zaradi prisotnosti električnega polja. Izkazalo se je, da direktna uporaba Landau-Zenerjeve formule za verjetnost prehoda iz osnovnega v vzbujena stanja v tem primeru ni pravilna. Veliko je k temu pripomogel kar problem sam, saj je kazal očitna odstopanja od predpostavk v Landau-Zenerjevi izpeljavi. Če ponovim, prva predpostavka je hiperbolična oblika energijskih nivojev, med katerima poteče tune-liranje. Druga pa, da večina tuneliranja poteče ko sta nivoja najbližje, tako da se lahko prekrivanje med stanjema obeh nivojev vzame za konstantno, sklopitev med nivojema se aproksimira z minimumom razlike $\epsilon_0 - \epsilon_1$, relativno hitrost približevanja nivojev pa z $d(\epsilon_0 - \epsilon_1)/dt = \alpha t$.

Prva očitna razlika, s katero se je treba spopasti pri obravnavi preboja Mottovega izolatorja je več stanj, v katera lahko sistem prehaja iz osnovnega. Avtorji v prejšnjem poglavju omenjenih člankov to obidejo tako, da obravnavajo prehode iz osnovnega v najnižje vzbujeno stanje, kar naj bi se dogajalo v začetnih časih. Prehodi v višja vzbujena stanja naj bi se dogajali z izhodiščem v nižjih in naj zato ne bi vplivali na mejno polje pri preboju izolatorskega stanja. To t.i. sipanje med vzbujenimi stanji pa naj bi bilo izvor anihilacij parov holon-dublon, kar naj bi se efektivno poznalo v zmanjšani hitrosti razpadanja osnovnega stanja. V mojem primeru se iz dogajanja v začetnih časih vidi, da sistem iz osnovnega stanja sploh ne prehaja najprej v najnižje vzbujeno in od tam naprej v višja, ampak je že takoj večja verjetnost za prehod v lastna stanja, ki so nekoliko višje v spektru. Ker vsakemu vzbujenemu lastnemu stanju z energijo $\epsilon_k = U - 4\cos\left(\frac{q}{2}\right)\cos k$ lahko pripišem moment k, sem to motivirala s Heisenbergovim načelom nedoločenosti, zaradi katerega efektivna delca (holon in dublon) iz bolj lokaliziranega osnovnega stanja prehajata v stanja z večjim relativnim momentom k. Iz obravnave z efektivnimi stanji pa se je pokazalo, da je matrični element toka večji za prehode malo pred in po trenutku, ko sta energiji efektivnega in osnovnega nivoja najbližje. Zaključek iz tega pogleda bi bil, da je treba dejansko preveriti, v katera vzbujena stanja bo sistem prešel z največjo verjetnostjo, ker to ni a priori kar najnižje stanje. Interpretacije sipanja med vzbujenimi stanji kot mehanizma za anihilacijo parov holon-dublon ne bi mogla komentirati s svojim primerom, kjer je zaradi ohranjanja spina vedno prisoten le en dublon. Studija tega pojava bo možna z dodatkom večih obrnjenih spinov, torej $S_z < S_z^{max} - 1$.

Kot drugo, moj problem že zaradi konstantnega osnovnega nivoja $\epsilon_0(\phi) = konst$ ne more izpolniti prve predpostavke Landau-Zenerjeve izpeljave glede hiperbolične oblike nivojev ne glede na to, kaj si izberem za drugi nivo. Ker je numerična slika zasedenosti v energijskem spektru kazala na prehajanje med stanji znotraj vzbujenega pasu, in ker je tudi ocena glede na Landau-Zenerjevo formulo za prehod med sosednjimi stanji v vzbujenem pasu pokazala veliko verjetnost, sem predpostavila, da iz osnovnega delca prehajata v efektivna stanja. Ta imajo Blochovo periodo in ustrezajo popolnemu tuneliranju znotraj vzbujenega pasu. Analitično sem izračunala verjetnost p, da sistem preide iz osnovnega v efektivno stanje, katerega energija je ob t = 0 najdlje od osnovne. Smiselno se zdi, da je mejno polje F_{th} , glede na katerega se pri $F > F_{th}$ verjetnost za prehod v efektivno stanje hitro dviga, mejno tudi za dejanski preboj izolatorskega stanja. F_{th} dobljen iz adiabatne limite izraza za p kaže odvisnost

$$F_{th} = \frac{8\kappa^3}{3} \sim \frac{\sqrt{8}\Delta^{3/2}}{3}.$$

Primerjava z numerično adiabatsko limito razpadanja osnovnega stanja je pokazala na zelo dobro ujemanje obeh izrazov za F_{th} . Odvisnost tega polja od energijske vrzeli, je očitni pokazatelj ključnosti oblike energijskih nivojev, med katerimi računam verjetnost za tuneliranje. Potenca $\Delta^{3/2}$ je posledica tega, da gre razlika med osnovnim in efektivnim vzbujenim nivojem v predelu, kjer poteka največ prehajanj kot $\epsilon_{\pi} - \epsilon_0 \sim \Delta + at^2$. V omenjenih člankih se avtorji ne ukvarjajo z obliko odvisnosti energij stanj od parametra ϕ , ampak kot ključno informacijo glede njih upoštevajo le najmanjšo razliko. Za potenco s katero nastopa Δ , pa kar privzamejo 2, kar je Landau-Zenerjev rezultat.

Navkljub vpeljavi efektivnih stanj je še vedno ostalo vprašanje večnivojskosti. Vseh efektivnih nivojev je L - 1, ravno toliko kot pravih vzbujenih stanj. Končno sem upoštevala, da sistem iz osnovnega stanja lahko prehaja v vsakega izmed teh nivojev, s čimer se je izgubila analitičnost izrazov. Dosegla pa sem dobro ujemanje med zasedenostjo osnovnega stanja, kot izračunano iz numeričnega reševanja Schrödingerjeve enačbe in s pomočjo prehajanja v efektivna stanja. Dobro ujemanje sem za začetne čase dobila tudi med trenutnim razpadnim koeficientom, izračunanim iz razpadanja osnovnega stanja in iz seštevanja po efektivnih nivojih. Povprečna vrednost razpadnega koeficienta iz numeričnih rezultatov in limitna analitična odvisnost v približku efektivnih nivojev se solidno ujemata pri manjših poljih. Kar pa spet ni tako problematično, saj je bil glavni cilj opisati dogajanje v območju preboja izolatorske faze.

Napisati zaključni odstavek je v fiziki težka naloga. Vedno ostajajo vprašanja, na katera ne poznaš odgovorov, pa bi jih rad - preden bi zapisal zaključni odstavek. V času študija so sklopi, med katerimi je diplomsko delo zadnje, zaključno. In zato enkrat mora biti zaključeno, čeprav pravi študij fizike šele odpira.

Literatura

- [1] Y. Taguchi, T. Matsumoto in Y. Tokura, Phys. Rev. B 62, 7015 (2000).
- [2] F. Sawano, I. Terasaki, H. Mori, T. Mori, M. Watanabe, N. Ikeda, Y. Nogami, in Y. Noda, Nature 437, 522 (2005).
- [3] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hänsch in I. Bloch, Nature 415, 39 (2002).
- [4] T. Oka, R. Arita in H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **91**, 66406 (2003).
- [5] T. Oka in H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **95**, 137601 (2005).
- [6] T. Oka in H. Aoki, Phys. Rev. B **81**, 033103 (2010).
- [7] L. D. Landau in D. Ter Haar, Collected papers of LD Landau (Gordon and Breach New York, 1965).
- [8] C. Zener, Proc. R. Soc. A **137**, 696 (1932).
- K. K. Bardhan, Quantum and semi-classical percolation and breakdown in disordered solids (Springer Verlag, 2009).
- [10] R. Peierls, Z. Phys. 80, 763 (1933).
- [11] E. Burstein in C. Weisbuc, Confined electrons and photons: new physics and applications (Plenum Publishing Corporation, 1995).
- [12] J. Bonča, neobjavljeno.
- [13] A. S. Dawydow, *Quantenmechanik* (Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1981).
- [14] Q. Niu, M. G. Raizen, Phys, Rev. Lett. 80, 3491 (1998).

Dodatek A

Enakost razpadnih koeficientov $\Gamma_1^{\ 0}$ in Γ_p

Enakost $\Gamma_1^{\ 0}$ (8.28) in Γ_p (8.18) se da preveriti z eksplicitnim zapisom Γ_p kot dvakratnim integralom.

$$\begin{split} \Gamma_{p} &= \frac{LF}{2\pi} p \\ &= \frac{LF}{2\pi} \int_{0}^{2\pi/F} dt \int_{0}^{2\pi/F} dt' \langle \varphi_{k} | \dot{\varphi}_{0} \rangle_{t} \langle \dot{\varphi}_{0} | \varphi_{k} \rangle_{t'} \exp\left(-i \int_{t'}^{t} \epsilon_{0k}(\tau) dt''\right) \\ &= 2Re \frac{LF}{2\pi} \int_{0}^{2\pi/F} dt \int_{0}^{t} dt' \langle \varphi_{k} | \dot{\varphi}_{0} \rangle_{t} \langle \dot{\varphi}_{0} | \varphi_{k} \rangle_{t'} \exp\left(-i \int_{t'}^{t} \epsilon_{0k}(\tau) dt''\right) \\ &= 2Re \frac{LF}{2\pi} \int_{0}^{2\pi/F} dt_{0} \int_{0}^{t_{mej}} d\tau \langle \varphi_{k} | \dot{\varphi}_{0} \rangle_{t_{0}+\tau} \langle \dot{\varphi}_{0} | \varphi_{k} \rangle_{t_{0}-\tau} \exp\left(-i \int_{t_{0}-\tau}^{t_{0}+\tau} \epsilon_{0k}(\tau) dt''\right), \end{split}$$
(A.1)

kjer je $k=\pi.$ Integracijska meja za τ je

$$t_{mej} = \begin{cases} t_0 & \text{za } t_0 \le \frac{\pi}{F}, \\ \frac{2\pi}{F} - t_0 & \text{za } t_0 > \frac{\pi}{F}. \end{cases}$$

Na drugi strani je ekspliciten izraz za $\Gamma_1{}^0$ enak

$$\Gamma_1^{\ 0} = 2Re \ \frac{LF}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \int_0^{\pi/2} ds \ \langle \varphi_1' | \varphi_0 \rangle_{k+s} \langle \varphi_0 | \varphi_1' \rangle_{k-s} \ \exp\left(-i \int_{(k-s)/F}^{(k+s)/F} \epsilon_{01} dt''\right). \tag{A.2}$$

Izraza sta upoštevajoč oblike stanj $|\varphi_0\rangle, |\varphi_k\rangle, |\varphi_1\rangle$ ter odvajanja po času [·] in k-ju [′] očitno identična z izjemo zgornje meje v integralih $\int ds$ in $\int dq$. Da je celotno integriranje vseeno enako, poskrbijo periodične lastnosti integranda, ki ima v A.1 periodo $2\pi/F$ oziroma v A.2 2π . Če funkcije ob (k-s) v integrandu (A.2) z $(k-s) < -\pi$ izvrednotim v $2\pi + (k-s)$ ugotovim, da temu ustreza izvrednotenje v (A.1) s

$$t_0 = \frac{k+\pi}{F}, \tau = \frac{\pi-s}{F}.$$

In podobno, če z
a $(k+s)>\pi$ funkcije ob času (k+s)v (A.2) izvredno
tim v $k+s-2\pi,$ to ustreza izvrednotenju v (A.1) z

$$t_0 = \frac{k - \pi}{F}, \tau = \frac{\pi - s}{F}.$$

S tem opišem, kako se da integracijski prostor Γ_p preslikati na integracijski prostor $\Gamma_1.$

Izjava o avtorstvu dela:

Podpisana Zala Lenarčič, rojena 2. 6. 1987 v Postojni, izjavljam, da sem avtorica diplomskega dela z naslovom Dielektrični preboj Mottovega izolatorja, ki sem ga izdelala pod mentorstvom prof. dr. Petra Prelovška.

V Ljubljani, 14. 6. 2011

Zala Lenarčič