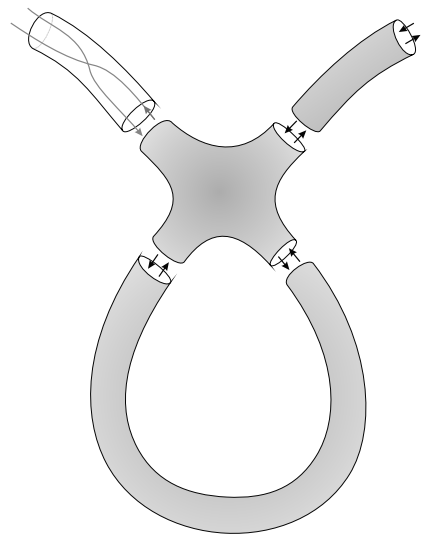


WŁASNOŚCI TRANSPORTOWE I LOKALIZACJA  
STANÓW JEDNOELEKTRONOWYCH  
W UKŁADACH O ZABURZONEJ SYMETRII  
TRANSLACYJNEJ





Bartłomiej J. Spisak

WŁASNOŚCI TRANSPORTOWE I LOKALIZACJA  
STANÓW JEDNOELEKTRONOWYCH  
W UKŁADACH O ZABURZONEJ SYMETRII  
TRANSLACYJNEJ

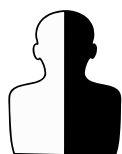
©Copyright by Bartłomiej J. Spisak and Wydawnictwo LIBRON Kraków 2013

ISBN: 978-83-62196-86-9

Recenzent:  
prof. dr hab. inż. Janusz Tobała

Wydanie książki dofinansowane przez Akademię Górniczo-Hutniczą im. Stanisława Staszica w Krakowie (dotacja podmiotowa na działalność statutową 11.11.220.01/Bednarek)

Redakcja: Anna Gagatek  
Skład: Bartłomiej J. Spisak  
Projekt okładki: Sławomir Sroka



LIBRON

Wydawnictwo Libron  
Filip Lohner  
ul. Ujejskiego 8/1  
30-102 Kraków  
tel. 12 628 05 12  
e-mail: [office@libron.pl](mailto:office@libron.pl)  
[www.libron.pl](http://www.libron.pl)

# Spis treści

<b>Wstęp</b>	<b>15</b>
<b>1 Wprowadzenie</b>	<b>23</b>
1.1 Kwantyzacja w przestrzeni fazowej . . . . .	23
<b>2 Dynamika stanów jednoelektronowych w przestrzeni fazowej</b>	<b>37</b>
2.1 Równanie kinetyczne i ewolucja czasowa funkcji Wignera . . . . .	37
2.2 Własności transportowe wybranych nanourządzeń rezonansowo-tunelowych . . . . .	41
2.3 Dynamika pakietu falowego w jednowymiarowym układzie aperiodycznym . . . . .	59
<b>3 Nieporządek strukturalny i kwantowe metody opisu własności transportowych</b>	<b>75</b>
3.1 Układy nieuporządkowane . . . . .	75
3.2 Model układu z nieporządkiem strukturalnym . . . . .	86
3.3 Funkcje Greena i elementy teorii rozpraszania . . . . .	98
3.4 Liniowa odpowiedź układu. Tensor przewodnictwa elektrycznego .	114
3.5 Kinetyczny opis zjawisk transportowych . . . . .	117
<b>4 Zjawisko lokalizacji w układach nieuporządkowanych</b>	<b>127</b>
4.1 Od silnej do słabej lokalizacji . . . . .	127
4.2 Model Vollhardta-Wöflflego . . . . .	133
4.3 Wpływ mechanizmu rozpraszania wstecznego na przewodnictwo elektryczne . . . . .	144
4.4 Model Morgana-Howsona-Šaubu . . . . .	150
4.5 Wpływ temperatury na słabą lokalizację . . . . .	168
4.6 Wpływ pola magnetycznego na słabą lokalizację . . . . .	190
<b>Podsumowanie</b>	<b>207</b>

<b>A</b>	<b>Dodatek matematyczno-fizyczny</b>	<b>213</b>
A.1	Transformata Fouriera . . . . .	213
A.2	Transformata Weyla . . . . .	215
A.3	Równanie Wignera – wyprowadzenie . . . . .	217
	<b>Summary: Transport properties and localisation of one-electron states in systems with disturbed translational symmetry</b>	<b>221</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>224</b>
	<b>Skorowidz</b>	<b>251</b>

# Spis rysunków

1.1	Ujęcie liouville’owskie dynamiki hamiltonowskiej odpowiada przemieszczaniu się funkcji rozkładu będącej deltą Diraca wzdłuż klasycznej trajektorii parametryzowanej czasem . . . . .	24
1.2	Pokrycie foremne (parkietaż) dwuwymiarowej przestrzeni fazowej komórkami o powierzchni $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$ . . . . .	25
1.3	Funkcja Wignera odpowiadająca stanowi kwantowemu o minimalnej nieoznaczoności pędu i położenia . . . . .	31
1.4	Stany ściśnięte . . . . .	32
2.1	Ewolucja czasowa cząstki swobodnej w przestrzeni fazowej jest określona na zbiorze komórek fazowych przez które przechodzi trajektoria (linia ciągła). Wzdłuż tej trajektorii przemieszcza się funkcja rozkładu . . . . .	38
2.2	Potencjał Wignera odpowiadający 20 deltom Diraca, których rozmieszczenie jest generowane przez ciąg Fibonacciego . . . . .	40
2.3	(a) Schemat symetrycznej dwubarierowej półprzewodnikowej diody rezonansowo-tunelowej. Między kontaktami znajduje się obszar aktywny nanourządzenia rezonansowo-tunelowego, który obejmuje warstwy buforowe, bariery potencjału oraz studnię kwantową; (b) Profil energii potencjalnej elektronu w pasmie przewodnictwa dla rozpatrywanego nanourządzenia rezonansowo-tunelowego dla napięcia $V_B = 0$ ; (c) Profil energii potencjalnej elektronu w pasmie przewodnictwa dla rozpatrywanego urządzenia rezonansowo-tunelowego dla napięcia $V_B \neq 0$ . Wysokość barier potencjału wynosi $V_B = 0.27$ eV, natomiast wartość potencjału chemicznego w kontaktach wynosi $\mu_F^R = \mu_F^P = 0.086$ eV, gdy $V_B = 0$ . Dla $V_B \neq 0$ zachodzi równość $\mu_F^L = \mu_F^R + eV_B$ . . . . .	43

2.4	Charakterystyka prądowo-napięciowa symetrycznej dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej uzyskana na podstawie niezależnego od czasu modelu Wignera. Współczynnik PVR dla tego nanourządzenia wynosi 2.41 w temperaturze $T = 4.2$ K. Na wykresie zostały również zaznaczone obszary dodatniego oporu różniczkowego (PVR) oraz ujemnego oporu różniczkowego (NDR)	44
2.5	Wpływ zmian (a) temperatury kontaktów, (b) potencjału chemicznego na warunek brzegowy (2.25) opisujący rozkład elektronów w kontakcie	46
2.6	Wpływ zmian (a) temperatury kontaktów na charakterystykę prądowo-napięciową symetrycznej dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej; (b) Wpływ zmian temperatury kontaktów na parametr nieklasyczności wyliczany w funkcji przyłożonego napięcia dla rozpatrywanego nanourządzenia rezonansowo-tunelowego	47
2.7	Przykładowe funkcje Wignera uzyskane na podstawie niezależnego od czasu modelu Wignera w temperaturze $T = 4.2$ K dla różnych wartości napięć $V_B$ . Na mapie zaznaczono czarnymi ciągłymi liniami położenie barier potencjału	49
2.8	Wpływ procesów relaksacyjnych opisanych efektywnym czasem relaksacji na (a) charakterystykę prądowo-napięciową; (b) parametr nieklasyczności odpowiadający symetrycznej dwubarierowej diodzie rezonansowo-tunelowej pracującej w temperaturze $T = 4.2$ K	51
2.9	(a) Schemat asymetrycznej trójbarierowej półprzewodnikowej diody rezonansowo-tunelowej; (b) Profil energii potencjalnej elektronu w pasmie przewodnictwa dla rozpatrywanego nanourządzenia rezonansowo-tunelowego dla napięcia $V_B = 0$ ; (c) Profil energii potencjalnej elektronu w pasmie przewodnictwa dla rozpatrywanego urządzenia rezonansowo-tunelowego dla napięcia $V_B \neq 0$	54
2.10	Charakterystyki prądowo-napięciowe asymetrycznej trójbarierowej diody rezonansowo-tunelowej wyznaczone w temperaturze $T = 77$ K na podstawie: (a) modelu Wignera, (b) modelu Wignera-Poissona	55
2.11	Schemat ilustrujący układ 50 delt Diraca rozmieszczonych w położeniach generowanych przez ciąg Fibonacciego	60
2.12	Ewolucja czasowa w przestrzeni fazowej swobodnego wignerowskiego pakietu falowego w układzie jednorodnym. Biała linia oznacza trajektorię kwantową swobodnego pakietu, która pokrywa się z trajektorią klasyczną dla cząstki swobodnej. Deformacja eliptyczna jest zgodna z wzorem (2.51)	63
2.13	Ewolucja czasowa w przestrzeni fazowej wignerowskiego pakietu falowego przez układ składający się z dwóch obszarów warstw buforowych oraz supersieci Fibonacciego. Białymi liniami przerywanymi został zaznaczony obszar odpowiadający supersieci Fibonacciego	65



2.14	Przykładowe trajektorie kwantowe wignerowskiego pakietu falowego odpowiadające różnym wartościom energii kinetycznej w chwili początkowej. Szarym kolorem jest zaznaczony obszar odpowiadający supersieci Fibonacciego . . . . .	66
2.15	Zależność czasowa parametru nieklasyczości dla wignerowskiego pakietu falowego odpowiadająca kilku wartościom pędu początkowego . . . . .	67
2.16	Deformacja eliptyczna wignerowskiego pakietu falowego podczas ewolucji czasowej w ośrodku jednorodnym . . . . .	68
2.17	Ewolucja czasowa w przestrzeni fazowej funkcji Husimiego odpowiadającej wignerowskiemu pakietowi falowemu przedstawionemu na rys. 2.13. Białymi liniami przerywanymi został zaznaczony obszar odpowiadający supersieci Fibonacciego . . . . .	70
2.18	Zależność czasowa parametru IPR w przestrzeni fazowej odpowiadająca wignerowskiemu pakietowi falowemu, który przechodzi przez supersieć Fibonacciego złożoną ze 100 delt Diraca przy różnych wartościach pędu początkowego . . . . .	71
3.1	Rodzaje nieporządku w skali atomowej w ciałach stałych. (a) nieporządek chemiczny, (b) nieporządek strukturalny, (c) nieporządek topologiczny, (d) nieporządek chemiczno-strukturalny . . . . .	76
3.2	Poglądowy profil energii swobodnej układu atomów tworzących ciało stałe. Minimum globalne odpowiada układowi znajdującemu się w stanie krystalicznym, natomiast stabilne minima lokalne odpowiadają stanom amorficznym . . . . .	77
3.3	Lokalna konfiguracja atomowa w układzie z nieporządkiem strukturalnym i odpowiadające jej typowe przebiegi funkcji rozkładu par $g(\Delta R)$ oraz czynnika strukturalnego $S(Q)$ . Koncentryczne pierścienie reprezentują odpowiednio pierwszą i drugą strefę koordynacyjną wokół wybranego atomu . . . . .	91
3.4	Parcjalne czynniki strukturalne Ashcrofta-Langretha dla układu dwuskładnikowego $Rb_{70}Cs_{30}$ . . . . .	93
3.5	Graficzna reprezentacja szeregu wielokrotnego rozpraszania odpowiadającego opóźnionej funkcji Greena. Procesy jedno- i dwukrotnego rozpraszania są reprezentowane przez diagramy zawierające prostopadłe linie przerywane (linie oddziaływania). Poziome linie ciągłe (linie fermionowe) odpowiadają swobodnym opóźnionym funkcjom Greena . . . . .	102
3.6	Reprezentacja graficzna uśrednionej funkcji Greena . . . . .	105
3.7	Struktura diagramowa nieprzywiedlnej energii własnej . . . . .	107
3.8	Diagram odpowiadający przybliżeniu nieprzywiedlnej energii własnej obliczonej w pierwszym przybliżeniu Borna, $\Sigma^{R(A)}(\mathbf{k}) \approx \Sigma_{(1)}^{R(A)}(\mathbf{k})$ . . . . .	108

3.9	Szereg wielokrotnego rozpraszania dla uśrednionej funkcji Greena z energią własną obliczoną w pierwszym przybliżeniu Borna . . . . .	109
3.10	Diagramy krzyżowe . . . . .	110
3.11	Propagacja pary elektronowo-dziurowej w układzie nieuporządkowanym .	111
3.12	Przedstawienie graficzne równania Bethego-Salpetera w reprezentacji położeniowej . . . . .	113
3.13	Deformacja konturu Kadanoffa-Bayma (lewa strona) do konturu Schwingera-Keldysha (prawa strona). Deformacji towarzyszy usunięcie gałęzi $C_v$	121
3.14	Kontury odpowiadające elementom macierzowym nierównowagowej funkcji Greena. (a) przyczynowa funkcja Greena, (b) funkcja korelacji $G$ -większe, (c) funkcja korelacji $G$ -mniejsze, (d) antyprzyczynowa funkcja Greena	121
4.1	Wpływ koherencji fazowej na proces dyfuzji elektronów przewodnictwa w układzie nieuporządkowanym . . . . .	131
4.2	Tuba kwantowa o przekroju poprzecznym $s_F$ . . . . .	132
4.3	Reprezentacja diagramowa przewodnictwa elektrycznego . . . . .	145
4.4	Funkcja wierzchołkowa w przybliżeniu dyfuzyjnym jest reprezentowana przez szereg diagramów drabinkowych . . . . .	145
4.5	Funkcja wierzchołkowa w przybliżeniu cooperonowym jest reprezentowana przez szereg diagramów maksymalnie skrzyżowanych . . . . .	148
4.6	Rozkręcenie diagramów skrzyżowanych prowadzi do diagramów drabinkowych. Takiej operacji symetrii towarzyszy zamiana kanału dyfuzyjnego na kanał cooperonowy . . . . .	148
4.7	Idea przybliżenia ośrodka efektywnego (EMA) . . . . .	155
4.8	Względna zmiana oporu właściwego spowodowana słabą lokalizacją, uzyskana na podstawie modelu MHŠ . . . . .	166
4.9	Wkłady spowodowane słabą lokalizacją (linia ciągła) oraz silną lokalizacją (linia przerywana) do odwrotności transportowego czasu relaksacji wyznaczonego na podstawie modelu MHŠ, przy założeniu, że $\tau_{FZ}/\tau = 1$	167
4.10	Względna zmiana oporu właściwego spowodowana słabą lokalizacją, uzyskana na podstawie modelu MHŠ . . . . .	168
4.11	Procesy nieelastycznego rozpraszania elektronów na jonie . . . . .	171
4.12	Całka transportowa $I_{\pm}(\beta; X)$ . . . . .	181
4.13	Wpływ temperatury na własności transportowe szkła metalicznego $\text{Ca}_{70}\text{Al}_{30}$ . Dane eksperymentalne zostały zaczerpnięte z prac [1–3] . . .	185
4.14	Względna zmiana oporu właściwego szkła metalicznego $\text{Ca}_{70}\text{Al}_{30}$ spowodowana zmianą temperatury. Liniami ciągłymi zaznaczono krzywe teoretyczne wynikające z dopasowania do danych eksperymentalnych przy użyciu metody najmniejszych kwadratów . . . . .	187

- 
- 4.15 Magnetoopór szkła metalicznego  $\text{Ca}_{70}\text{Al}_{30}$  dla różnych temperatur. Linie reprezentują krzywe teoretyczne uzyskane na podstawie uogólnionego modelu MHŠ po zastosowaniu wzoru (4.254) . . . . . 204



# Spis tabel

2.1	Wartości numeryczne parametrów dopasowania dla krzywej opisanej wzorem $\langle x^2(t) \rangle = Dt^\kappa + \xi$ , uzyskane na podstawie metody najmniejszych kwadratów . . . . .	72
4.1	Wartości numeryczne parametrów dopasowania dla krzywej oporu właściwego w funkcji temperatury uzyskane w ramach modelu MHŠ po zastosowaniu metody najmniejszych kwadratów . . . . .	188
A.1	Reguły kwantyzacji zmiennych dynamicznych i odpowiadające im nieklasyczne funkcje rozkładu. W przypadku uporządkowania normalnego (a) i uporządkowania antynormalnego (b) zostały wprowadzone zmienne zespolone $z = (x + ip)/\sqrt{2}$ , przy czym $z^*$ jest sprzężeniem zespolonym liczby $z$ , natomiast $\hat{a} = (\hat{x} + i\hat{p})/\sqrt{2}$ , zaś $\hat{a}^\dagger$ jest sprzężeniem hermitowskim operatora $\hat{a}$ . . . . .	219



# Wstęp

*„ (...) lekceważenie filozofii w fizyce oznacza niezrozumienie fizyki.  
Nie ma bowiem fizyki teoretycznej bez jakiejś filozofii; nieuznanie  
tego faktu byłoby samooszukiwaniem się”.*

*F. Rohrlich*

Obecny stan wiedzy na temat materii, jak i zjawisk transportowych w niej zachodzących, pogłębia się z roku na rok za sprawą coraz to dokładniejszych metod badawczych, zarówno tych eksperymentalnych, jak i teoretycznych. O ile poprawnie zaprojektowany i wykonany eksperyment dostarcza wyników pomiaru, o tyle teoria pozwala dokonać interpretacji uzyskanych wyników na podstawie adekwatnego modelu matematycznego. Czasami jednak zdarza się, że model matematyczny jest tak bardzo skomplikowany, iż wnioskowanie na jego podstawie wymaga wprowadzenia uproszczeń, bądź przeprowadzenia symulacji komputerowych. Zdarza się również, że dla dobrze ugruntowanych modeli matematycznych zjawisk fizycznych poszukuje się narzędzi badawczych, które w zamierzeniu ich twórców mają być prostsze, wygodniejsze bądź po prostu bardziej intuicyjne. Wielokrotnie zdarzało się w historii fizyki czy matematyki, iż konstruowano narzędzie badawcze pod kątem rozwiązania określonego problemu, a następnie stosowano je z powodzeniem do rozwiązania innych problemów, wykazując tym samym ich uniwersalność. Jednym z przykładów nakreślonego powyżej schematu było stworzenie formalizmów: lagrange'owskiego, hamiltonowskiego czy liouville'owskiego i zastosowanie ich do opisu klasycznej dynamiki cząstek. Te nowe koncepcje teoretyczne okazały się nad wyraz inspirujące i elastyczne w działaniu, tak że dały one początek mechanice kwantowej i statystycznej układów wielocząstkowych, a co więcej, dostrzeżono również możliwość ich uogólnienia na układy polowe. Koncepcja parzystowymiarowej przestrzeni fazowej opartej na współrzędnych sprzężonych kanonicznie (pęd-położenie) okazała się szczególnie doniosła dla rozwoju klasycznej mechaniki statystycznej, gdyż umożliwiła stworzenie odpowiednich ram matematycznych dla klasycznej bądź półklasycznej teorii zjawisk transportowych.

Z uwagi na dualizm korpuskularno-falowy i przypisanie cząstkom własności falowych dalszy opis zjawisk transportowych w przestrzeni fazowej wymagał dość radykalnych zmian, gdyż straciło sens pojęcie trajektorii, a co za tym idzie, także pojęcie klasycznego stanu układu. Te przejściowe trudności spowodowały, że zmieniono sposób opisu dynamiki kwantowej cząstek przechodząc do koncepcji przestrzeni Hilberta, w której stan układu jest opisany przez abstrakcyjny wektor stanu, którego współrzędna wyrażona względem wybranej bazy jest funkcją falową. Opis dynamiki kwantowej w terminach funkcji falowej jest realizowany za pomocą równania Schrödingera i obecnie właśnie takie podejście jest najbardziej rozpowszechnione w badaniach nad własnościami ciał stałych, a w szczególności zjawisk transportowych. Nie oznacza to jednak, że koncepcja przestrzeni fazowej przestała być słuszną w odniesieniu do opisu dynamiki kwantowej cząstek. Uległa ona jedynie daleko idącej modyfikacji, stając się przestrzenią dyskretną, przy czym „punkty” w tej przestrzeni odpowiadają komórkom o objętości równej (kwantowi działania)<sup>N</sup>, gdzie  $N$  jest liczbą stopni swobody. Dynamika kwantowa w tak zmodyfikowanej przestrzeni fazowej jest opisana za pomocą równania kinetycznego o strukturze zbliżonej do równania Boltzmana, a funkcja, która spełnia to równanie, nie jest prawdziwą funkcją rozkładu prawdopodobieństwa. Funkcja Wignera, bo o niej mowa, należy do grupy nieklasycznych funkcji rozkładu. Funkcje te mają swoje źródło w statystycznym opisie układów kwantowych w przestrzeni fazowej, ale w odróżnieniu od klasycznych funkcji rozkładu nie spełniają wszystkich warunków stawianych takim funkcjom. Jest to szczególnie widoczne w przypadku funkcji Wignera, która w pewnych obszarach przestrzeni fazowej może przyjmować wartości ujemne. Nieco subtelniejsza trudność ma miejsce w przypadku funkcji Husimiego. Pomimo iż jest ona dodatnio określona, to jej rozkłady brzegowe nie posiadają interpretacji zgodnej z oczekiwaniami. Obie funkcje mają jednak wiele cech wspólnych z klasyczną funkcją rozkładu.

W literaturze przedmiotu funkcje Wignera i Husimiego są często nazywane kwaziklasycznymi lub kwantowymi funkcjami rozkładu. W prezentowanej pracy zrezygnowano z użycia określenia kwantowych funkcji rozkładu, gdyż w literaturze polskiej przyjęło się określać tym mianem funkcje rozkładu Fermiego-Diraca oraz Bosego-Einsteina. Natomiast w miejsce terminu kwaziklasyczny zdecydowano się na używanie określenia nieklasyczny, gdyż zdaniem autora nie nasuwa to niepotrzebnych skojarzeń, a poza tym pozwala w sposób precyzyjny wyrazić nieklasyczny charakter stanu kwantowego.

Funkcja Wignera jak i równanie kinetyczne, które ona spełnia, umożliwiają prowadzenie badań nad dynamiką elektronów oraz własnościami transportowymi ciał stałych metodami przestrzeni fazowej. W szczególności dotyczy to układów niskowymiarowych, bądź układów nieuporządkowanych, gdzie istotną rolę w procesach transportowych odgrywają zjawiska interferencji kwantowej i tunelowania.



Układy niskowymiarowe są to struktury metaliczne lub półprzewodnikowe, sztucznie wytwarzane na drodze procesu technologicznego i charakteryzujące się własnościami fizycznymi ściśle zależnymi od ich rozmiarów geometrycznych, jak i materiałów, z których są wykonane. Rozmiary liniowe takich układów w wybranych kierunkach są rzędu nanometrów i tym samym wywierają silny efekt rozmiarowy na strukturę energetyczną. W szczególności można takie układy sklasyfikować jako zero-, jedno- i dwuwymiarowe, co w rezultacie prowadzi do zamrożenia orbitalnych stopni swobody elektronów przewodnictwa w trzech, dwóch lub jednym wymiarze. Jednocześnie oznacza to, iż zostaje zaburzona symetria translacyjna w takich układach, a tym samym uniemożliwia to zastosowanie twierdzenia Blocha do analizy stanów elektronowych. Ograniczenie rozmiarów liniowych rozpatrywanych układów do nanometrów stwarza możliwość bezpośredniej eksploracji zjawisk kwantowych, gdyż to właśnie one determinują szereg własności takich nanostruktur, w tym również ich własności transportowych. Kluczową rolę podczas analizy zjawisk transportowych w nanostrukturach odgrywają charakterystyczne skale długości: długość fali de Broglie'a na poziomie Fermiego, średnia droga swobodna, długość koherencji i rozmiary liniowe układu. Relacje między tymi wielkościami wyznaczają odpowiednie reżimy dla transportu elektronowego, o czym będzie jeszcze mowa w dalszej części pracy. Do układów niskowymiarowych można także zaliczyć wytwarzane w warunkach laboratoryjnych heterostruktury aperiodyczne. Są to układy niejednorodne, w których jest zaburzona symetria translacyjna z uwagi na aperiodyczny rozkład warstw zastosowanych materiałów. Dynamika elektronów przewodnictwa w takich układach również przejawia bardzo silne własności kwantowe, gdyż są one spowodowane zjawiskami interferencji kwantowej oraz tunelowania.

Trzecią grupą materiałów, które wykazują zaburzoną symetrię translacyjną, są układy nieuporządkowane. Układy te wzbudzają duże zainteresowanie z uwagi na obserwowalne bogactwo zjawisk w nich występujących oraz potencjalne zastosowania. Jest to szczególnie widoczne w dziedzinie fizyki ciała stałego, w której od kilkudziesięciu lat trwają intensywne badania nad własnościami elektronowymi i strukturalnymi tych układów. Opis teoretyczny układów nieuporządkowanych wymaga zastosowania nie tylko zaawansowanych narzędzi matematycznych, ale również postawienia nowych i niejednokrotnie śmiałych hipotez.

U podstaw fizyki materii nieuporządkowanej leży idea braku symetrii translacyjnej na poziomie budowy atomowej ciał stałych, która objawia się nieistnieniem uporządkowania w ułożeniu atomów na dużych odległościach. Jednym z najbardziej spektakularnych przejawów braku tej symetrii w ciałach stałych jest możliwość wystąpienia lokalizacji elektronów przewodnictwa, co w konsekwencji prowadzi do wzrostu wartości oporu właściwego i przejścia układu w stan izolatora. Wytlumaczenie i zrozumienie zjawiska lokalizacji elektronów przewodnictwa wymaga pogłębionej wiedzy abstrakcyjnej umożliwiającej opracowanie adekwatne-

go modelu matematycznego i wskazania czynników odpowiedzialnych za występowanie tego zjawiska w układach nieuporządkowanych na drodze rozumowania dedukcyjnego. Redukcjonistyczne podejście do zagadnienia lokalizacji elektronów przewodnictwa w układach nieuporządkowanych pozwoliło stwierdzić P. W. Andersonowi [4], że przyczyną przejścia układu nieuporządkowanego w stan izolatora jest całkowity zanik dyfuzji elektronów pod wpływem nieporządku. Postrzeganie transportu elektronowego w układach nieuporządkowanych jako procesu dyfuzji elektronów przewodnictwa pozwala zrozumieć własności transportowe metali będących dobrymi przewodnikami na poziomie półklasycznej teorii kinetycznej gazu fermionowego opracowanej przez A. Sommerfelda. Z kolei wyrażenie własności transportowych układów metalicznych nie będących dobrymi przewodnikami wymaga zastosowania kwantowej teorii, gdyż na poziomie mikroskopowym nie można już ignorować falowej natury tych nośników ładunku. Tym bardziej, że zjawiska falowe wprowadzają do opisu cząstkowego pewien rodzaj „pamięci”, który sprawia, że pomiędzy rozproszonymi elektronami przewodnictwa na jonach istnieją korelacje. Jest to szczególnie widoczne w przypadku zjawiska słabej lokalizacji, które zostało przewidziane teoretycznie w 1979 roku i od tamtej pory wciąż pozostaje w centrum zainteresowania badań podstawowych, choć obecnie większą wagę przykładają się do detekcji różnych mechanizmów rozfazowania z uwagi na ich znaczenie dla realizacji kwantowego przetwarzania informacji opartej na układach wykorzystujących ładunkowe, orbitalne bądź spinowe stopnie swobody elektronów w ciałach stałych.

Przewodnym motywem prezentowanej pracy jest analiza transportu elektronowego w ciałach stałych o zaburzonej symetrii translacyjnej metodami przestrzeni fazowej, opartymi na nieklasycznych funkcjach rozkładu, tj. funkcji Wignera i funkcji Husimiego. Celami szczegółowymi pracy są:

- a) wprowadzenie formalizmu nieklasycznych funkcji rozkładu na podstawie koncepcji kwantyzatora i zasady opisu dynamiki stanu kwantowego w przestrzeni fazowej;
- b) analiza ilościowa zjawisk nieklasycznych w nanourządzeniach rezonansowo-tunelowych, takich jak dwubarierowa dioda rezonansowo-tunelowa oraz supersieć Fibonacciego;
- c) przedstawienie zasad opisu układów z nieporządkiem strukturalnym oraz aparatu matematycznego (metoda funkcji Greena) niezbędnego do opisu zjawisk transportowych w takich układach. Nakreślenie ogólnego schematu teorii zjawisk transportowych w układach nieuporządkowanych, poczynając od półklasycznej teorii Drudego-Sommerfelda, aż do formalizmu nierównowagowych funkcji Greena, ze szczególnym naciskiem na stosowane przybliżenia;

- d) wprowadzenie i szczegółowa analiza zjawiska słabej lokalizacji w litych układach nieuporządkowanych na podstawie wybranych modeli samouzgodnionych;
- e) rozwinięcie kwantowej teorii przewodnictwa opartej na modelu Morgana-Howsona-Šaub, sformułowanej na bazie równania kinetycznego dla funkcji Wignera.

Praca jest wynikiem badań prowadzonych przez autora nad zjawiskami transportowymi i lokalizacją w układach o zaburzonej symetrii translacyjnej i składa się z wprowadzenia, trzech rozdziałów, podsumowania oraz dodatku matematyczno-fizycznego. Ponadto rozprawa została wzbogacona w skorowidz nazw. W pracy przyjęto konwencję, zgodnie z którą wielkości wektorowe są oznaczane pogrubionymi symbolami, natomiast w przypadku wielkości tensorowych nad symbolem umieszczono daszek, podobnie zresztą jak nad wielkościami będącymi operatorami. Konsekwentnie w całej pracy stosowano niesymetryczną konwencję dla transformacji Fouriera.

We wprowadzeniu zostało omówione przestrzenno-fazowe sformułowanie mechaniki kwantowej. Należy jednak zaznaczyć, że nie jest to wyczerpujące studium tego sformułowania, lecz przedstawienie zasadniczych idei, pojęć oraz narzędzi umożliwiających ilościowy opis stanów kwantowych w przestrzeni fazowej i ich własności.

Rozdział drugi dotyczy badań nad dynamiką stanów elektronowych w nanourządzeniach rezonansowo-tunelowych. Jest on podzielony na trzy podrozdziały, z których pierwszy jest poświęcony równaniu kinetycznemu i dynamice funkcji Wignera. W drugim podrozdziale omówiono dwu- i trójbarierową diodę rezonansowo-tunelową oraz scharakteryzowano własności transportowe tego typu nanourządzeń. Z uwagi na to, iż część badań dotyczących własności transportowych tych nanourządzeń została uprzednio opublikowana, tutaj przedstawiono jedynie ilościową analizę zjawisk nieklasycznych, które leżą u podstaw działania diod rezonansowo-tunelowych. Z kolei trzeci podrozdział poświęcony jest dynamice wignerowskiego pakietu falowego w aperiodycznej heterostrukturze półprzewodnikowej generowanej przez ciąg Fibonacciego. W podrozdziale tym przedstawiono nieopublikowane jeszcze wyniki badań nad własnościami dynamicznymi stanu kwantowego w supersieci Fibonacciego, uzyskane na podstawie formalizmu nieklasycznych funkcji rozkładu. Stosując te metody wyznaczono zależność czasową parametru nieklasyczności, jak również parametru IPR w przestrzeni fazowej. Ponadto wykazano, iż transport w takich układach ma charakter superdyfuzyjny.

Przedstawiona w pierwszym rozdziale idea zastosowania funkcji Wignera oraz funkcji Husimiego do analizy ilościowej zjawisk nieklasycznych w nanourządzeniach rezonansowo-tunelowych jest w pełni oryginalna i, według wiedzy aktualnie posiadanej przez autora, nie ma ona swojego odpowiednika w literaturze doty-

czącej zjawisk transportowych w tego typu układach. W związku z tym stanowi to oryginalny wkład autora w tę dziedzinę badań i może być bardzo pomocne przy projektowaniu i optymalizacji urządzeń działających w kwantowym reżimie zjawisk.

Rozdziały trzeci i czwarty są poświęcone litym układom nieuporządkowanym i ich własnościom transportowym. W rozdziale trzecim omówiono zasady opisu układów metalicznych z nieporządkiem strukturalnym, jak również przedstawiono różne modele przewodnictwa elektrycznego. Duży nacisk położono na założenia tkwiące u podstaw półklasycznego modelu Sommerfelda, gdyż dzięki temu można dostrzec naturalne ograniczenia nakładane na opis zjawisk transportowych w układach nieuporządkowanych w ramach tego modelu, co ma istotne znaczenie w kontekście procesu lokalizacji elektronów przewodnictwa i roli jaką odgrywa interferencja kwantowa. Wiele miejsca w tym rozdziale poświęcono metodzie funkcji Greena i jej zastosowaniom w kwantowej teorii rozpraszania, dzięki czemu dość naturalnie wyłoniły się różne pojęcia stosowane w kwantowej teorii przewodnictwa w układach nieuporządkowanych. W szczególności pozwoliło to autorowi uzasadnić często stosowany przez niego model dyfrakcyjny do badania własności transportowych litych oraz warstwowych układów nieuporządkowanych. Rozdział trzeci jest zakończony omówieniem metody nierównowagowych funkcji Greena i wyprowadzeniem równania Kadanoffa-Bayma oraz pokazaniem jego związku z kinetycznym równaniem Wignera.

Ostatni rozdział składa się z sześciu podrozdziałów i w całości dotyczy kwantowej teorii zjawisk transportowych w układach nieuporządkowanych. Przeprowadzono w nim wnikliwą analizę zjawiska słabej lokalizacji w metalicznych układach nieuporządkowanych na gruncie wprowadzonych modeli. W szczególności skoncentrowano się na wyprowadzeniu poprawek kwantowych do przewodnictwa elektrycznego spowodowanych interferencją kwantową, jak również przeanalizowano wpływ pola termicznego generowanego przez dynamikę jonów w układzie na wprowadzone poprawki kwantowe. Zakładając istnienie różnych mikroskopowych mechanizmów oddziaływania elektronów przewodnictwa z jonami w układach nieuporządkowanych wykazano, że w granicy bardzo niskich temperatur model kinetyczny przewodnictwa oparty na równaniu Wignera prowadzi do różnych zależności temperaturowych oporu właściwego, w zależności od przyjęcia założenia o występowaniu bądź niewystępowaniu w temperaturze zera bezwzględnego mechanizmu rozfazowania. Wyprowadzanie praw  $T^p$ , gdzie  $p = 1/2, 1/4$ , na podstawie modelu kinetycznego Morgana-Howsona-Šaubaj jest oryginalnym wynikiem uzyskanym przez autora w tym rozdziale. Otrzymany wynik ma istotne znaczenie, gdyż stanowi proste kryterium pozwalające rozstrzygnąć kontrowersje dotyczące występowania niezależnego od temperatury mechanizmu rozfazowania na drodze badań eksperymentalnych w ekstremalnie niskich temperaturach. Drugim analizowanym w tym rozdziale mechanizmem prowadzącym do zniszczenia interferen-

cji kwantowej jest pole magnetyczne. Wpływ pola magnetycznego na poprawki kwantowe jest rozpatrywany na bazie dwóch kwantowych modeli przewodnictwa elektrycznego, tj. modelu Morgana-Howsona-Šaubu oraz modelu A. Kawabaty. Szczegółowa analiza obu modeli pozwoliła wykazać autorowi, że są one równoważne w granicy słabych pól magnetycznych. Rozwinięta w tym rozdziale teoria przewodnictwa elektrycznego w układach nieuporządkowanych została zastosowana do interpretacji danych pomiarowych oporu dla szkła metalicznego  $\text{Ca}_{70}\text{Al}_{30}$  w funkcji temperatury i pola magnetycznego.

W podsumowaniu zawarto wnioski wynikające z przeprowadzonych badań oraz przedstawiono dalszą perspektywę prac nad własnościami transportowymi w układach o zaburzonej symetrii translacyjnej, opartą na formalizmie nieklasycznych funkcji rozkładu.

Dodatek matematyczno-fizyczny obejmuje materiał bezpośrednio wykorzystywany w rozprawie, który z uwagi na jego pomocniczy charakter został potraktowany jako uzupełnienie.

Obszerna bibliografia obejmuje tematykę prezentowaną w niniejszej pracy.

Do najważniejszych wyników badań autora, które zostały zaprezentowane w tej pracy należą<sup>1</sup>:

- a) uogólnienie parametru nieklasyczności na przypadek dynamiczny i przebadanie wpływu czynników wewnętrznych, jak i zewnętrznych na jego zachowanie na przykładzie symetrycznej dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej oraz supersieci Fibonacciego;
- b) analiza dynamiki wignerowskiego pakietu falowego w supersieci Fibonacciego oparta na nieklasycznych funkcjach rozkładu i wyznaczenie podstawowych charakterystyk dynamicznych, takich jak trajektoria kwantowa, parametr nieklasyczności, parametr IPR w przestrzeni fazowej oraz wykazanie, że transport w takiej supersieci ma charakter superdyfuzyjny;
- c) szczegółowe wyprowadzenie zjawiska rozpraszania wstecznego („rozpraszania  $2k_F$ ”), będącego źródłem słabej lokalizacji na podstawie samouzgodnionych modeli opracowanych na początku lat osiemdziesiątych ubiegłego wieku;
- d) wprowadzenie całki transportowej będącej uogólnieniem wyników uprzednio uzyskanych przez G. J. Morgana i współpracowników (A. Paję i N. Bruce’a) oraz wyprowadzenie ogólnego wyrażenia na odwrotność transportowego czasu relaksacji w ramach modelu Morgana-Howsona-Šaubu;

---

<sup>1</sup>Niektóre z nich były przedstawione na konferencjach: 5<sup>th</sup> Workshop on Quantum Chaos and Localisation Phenomena 2011, Warszawa (Polska) oraz InnoWave 2012, Nottingham (Wielka Brytania).

- e) odkrycie praw  $\Delta\rho/\rho_0 \propto T^{1/4}$  oraz  $\Delta\rho/\rho_0 \propto T^{1/2}$  na podstawie modelu Morgana-Howsona-Šauba w granicy niskich temperatur;
- f) wykazanie równoważności samouzgodnionego modelu Morgana-Howsona-Šauba oraz modelu A. Kawabaty w granicy słabych pól magnetycznych;
- g) rozwinięcie teorii magnetooporu na podstawie modelu Morgana-Howsona-Šauba;
- h) reinterpretacja wyników pomiaru względnej zmiany oporu właściwego w funkcji temperatury oraz pola magnetycznego dla szkła metalicznego  $\text{Ca}_{70}\text{Al}_{30}$ .

W tym miejscu chciałbym złożyć serdeczne podziękowania osobom i instytucjom dzięki którym powstała ta praca.

Przede wszystkim dziękuję profesorowi Jimowi Morganowi z Wydziału Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Leeds (Wielka Brytania) za wieloletnią współpracę nad własnościami transportowymi układów nieuporządkowanych, wprowadzenie w technikę funkcji Greena, inspirujące dyskusje oraz ukierunkowanie mojego zainteresowania na formalizm funkcji Wignera.

Dziękuję doktorowi Maciejowi Wołoszynowi z Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie za wieloletnią współpracę i cenne dyskusje nad zagadnieniami podejmowanymi w prezentowanej pracy oraz pomoc w obliczeniach numerycznych.

Pragnę również podziękować profesorowi Antoniemu Paji z Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie za zainteresowanie mnie tematyką zjawisk transportowych w ciałach stałych, metodologię badań nad nimi oraz długoletnią współpracę.

Moje podziękowania należą się również doktorom Pawłowi Wójcikowi, Sławomirowi Sroce oraz Maurycemu Ornatowi za współpracę i szereg dyskusji nad niektórymi z zagadnień poruszanych w tej pracy.

Dziękuję obecnym jak i poprzednim Władzom Dziekańskim Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH w Krakowie, Kierownikowi Katedry Informatyki i Fizyki Komputerowej, obecnemu i poprzedniemu Kierownikowi Zespołu Teorii Nanostruktur i Nanourządzeń (poprzednio Zespołu Fizyki Teoretycznej i Komputerowej) za swobodę intelektualną w doborze tematyki badawczej i stworzenie warunków do twórczej pracy naukowej.

Kolegom z zespołu dziękuję za życzliwą atmosferę i niekończące się dyskusje na temat różnorodnych aspektów fizyki.

Na zakończenie pragnę złożyć podziękowania Ministerstwu Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz British Council za finansowanie moich badań i pobytów na Uniwersytecie w Leeds w latach 2004-2009.