

Mgr. Radoslav Németh

Autoreferát dizertačnej práce

Perzistentný prúd a elektrón-elektrónová interakcia v
jednorozmernom mezoskopickom prstenci

Na získanie vedecko-akademickej hodnosti Philosophiae Doctor
v odbore 11-22-9 Fyzika kondenzovaných látok a akustika

**Konferenčné príspevky**

12. **R. Németh**, K. M. Indlekofer, *Terahertz response of nanowires: a theoretical approach*, Nanoelectronics days, May 13 - 16, 2008, Aachen, Germany, poster
13. **R. Németh**, K. M. Indlekofer, *Many-body model for the simulation of few-electron THz response in gated nanowires*, 72. Annual Meeting of the DPG and DPG Spring Meeting of the Condensed Matter Division, February 25 - 29, 2008, Berlin, Germany, poster
14. **R. Németh**, M. Moško, *One-dimensional ring with Kronig-Penney periodic potential: Persistent currents at full filling*, 17th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional systems, July 15 - 20, 2007, Genova, Italy, poster
15. **R. Németh**, M. Moško, *Hartree-Fock model of persistent current in rings with single scatterer: Comparison with correlated models*, XXXIV International school on the physics of semiconducting compounds, June 3 - 10, 2005, Jaszowiec, Poland, poster

Mgr. Radoslav Németh

Autoreferát dizertačnej práce

Perzistentný prúd a elektrón-elektrónová interakcia v
jednorozmernom mezoskopickom prstenci

Na získanie vedecko-akademickej hodnosti Philosophiae Doctor
v odbore 11-22-9 Fyzika kondenzovaných látok a akustika

Dizertačná práca bola vypracovaná v rámci dennej formy doktorandského štúdia na Elektrotechnickom ústave SAV v Bratislave.

Predkladateľ: Mgr. Radoslav Németh
Oddelenie teórie polovodičových mikroštruktúr
EIÚ SAV, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava

Školiteľ: RNDr. Martin Moško, CSc.
Oddelenie teórie polovodičových mikroštruktúr
EIÚ SAV, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava

Oponenti: Ing. Peter Bokes, PhD.
FEI STU, Bratislava

doc. RNDr. Richard Hlubina, DrSc.
FMFI UK, Bratislava

RNDr. Pavol Farkašovský, CSc.
ÚEF SAV, Košice

Autoreferát bol rozoslaný dňa:

Obhajoba dizertačnej práce sa koná dňa o hod. pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore doktorandského štúdia 11-22-9 Fyzika kondenzovaných látok a akustika, vymenovanou predsedom spoločnej odborovej komisie dňa na Elektrotechnickom ústave SAV, Dúbravská cesta 9, Bratislava.

Predseda spoločnej odborovej komisie: prof. RNDr. Viktor Bezák, DrSc.
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava

- [43] K. A. Matveev, D. Yue, and L. I. Glazman, Phys. Rev. Lett. **71**, 3351 (1993).
- [44] D. G. Polyakov and I. V. Gornyi, Phys. Rev. B **68**, 035421 (2003).
- [45] A. Mošková, M. Moško, A. Gendiar, Physica E **40**, 1991 (2008).
- [46] T. Enss, V. Meden, S. Andregassen, X. Barnabé-Thériault, W. Metzner, and K. Schönhammer, Phys. Rev. B **71**, 155401 (2005).
- [47] V. Meden, T. Enss, S. Andregassen, V. Meden, W. Metzner, and K. Schönhammer, Phys. Rev. B **71**, 041302 (2005).
- [48] S. Andregassen, T. Enss, V. Meden, W. Metzner, U. Schollwöck, and K. Schönhammer, Phys. Rev. B **73**, 045125 (2006).

ZOZNAM PUBLIKOVANÝCH PRÁČ

Publikácie indexované v SCI

1. K. M. Indlekofer, **R. Németh** and J. Knoch, *Many-body approach to the terahertz response of Wigner molecules in gated nanowire structures*, Phys. Rev. B **77** (2008) 125436
2. R. Krčmár, A. Gendiar, M. Moško, **R. Németh**, P. Vagner, L. Mitaš, *Persistent current of correlated electrons in mesoscopic ring with impurity*, Physica E **40** (2008) 1507
3. **R. Németh**, M. Moško, *One-dimensional ring with Kronig-Penney periodic potential: Persistent currents at full filling*, Physica E **40** (2008) 1498
4. P. Vagner, M. Moško, **R. Németh**, L. Wagner, L. Mitaš, *Hartree-Fock versus quantum Monte Carlo study of persistent current in rings with single scatterer*, Physica E **32** (2006) 350
5. A. Gendiar, M. Moško, P. Vagner, **R. Németh**, *Tunneling of interacting one-dimensional electrons through a single scatterer: Luttinger liquid behavior in the Hartree-Fock model*, Physica E **34** (2006) 596
6. M. Moško, P. Vagner, A. Gendiar, **R. Németh**, *Coherent transport of interacting electrons through a single scatterer*, Physica B **378** (2006) 908
7. **R. Németh**, M. Moško, *Hartree-Fock simulation of persistent current in rings with single scatterer*, Acta Physica Polonica A **108** (2005) 795
8. A. Gendiar, M. Moško, P. Vagner, **R. Németh**, *Tunneling of interacting fermions in 1D systems*, Acta Physica Polonica A **108** (2005) 661

Ostatné publikácie

9. K. M. Indlekofer, **R. Németh** and J. Knoch, *Spatially resolved THz response as a characterization concept for nanowire FETs*, (2007), 0706.1417 [cond-mat.other]
10. K. M. Indlekofer, **R. Németh**, *Recursive approach to the calculation of a many-body basis in discrete electronic nanosystems*, (2006), cond-mat/0609540
11. **R. Németh** and M. Moško, *Spinless Hartree-Fock model of persistent current in rings with single scatterer: Comparison with correlated models*, (2005), cond-mat/0503146



- [20] J. F. Weisz, R. Kishore, F. V. Kusmartsev, Phys. Rev. B **49**, 8126 (1994).
- [21] A. O. Gogolin, N. V. Prokof'ev, Phys. Rev. B **50**, 4921 (1994).
- [22] A. Cohen, K. Richter, R. Berkovits, Phys. Rev. B **57**, 6223 (1998).
- [23] A. Cohen, R. Berkovits, A. Heinrich, Int. J. Mod. Phys. B **11**, 1845 (1997).
- [24] V. Meden, U. Schollwöck, Phys. Rev. B **67**, 035106 (2003).
- [25] L. P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir, H. Bouchiat, Phys. Rev. Lett. **64**, 2074 (1990).
- [26] V. Chandrasekar, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketchen, W. J. Gallagher, A. Kleinsasser, Phys. Rev. Lett. **67**, 3578 (1991).
- [27] D. Mailly, C. Chapelier, A. Benoit, Phys. Rev. Lett. **70**, 2020 (1993).
- [28] E. M. Q. Jariwala, P. Mohanty, M. B. Ketchen, R. A. Webb, Phys. Rev. Lett. **86**, 1594 (2001).
- [29] W. Rabaud, L. Saminadayar, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Etienne, Phys. Rev. Lett. **86**, 3124 (2001).
- [30] S. Viefers, P. Koskinen, P. S. Deo, M. Manninen, Physica E **21**, 1 (2004).
- [31] U. Eckern, P. Schwab, J. Low Temp. Phys. **126**, 1291 (2002).
- [32] Y. Imry, R. Landauer, Rev. Mod. Phys. **71**, S306 (1999).
- [33] P. Vágner, Dizertačná práca, *Teoretické štúdium transportných a optických vlastností polovodičových kvantových drôtov*, Bratislava 1999.
- [34] A. Müller-Groeling et al.: Phys. Rev. B **49**, 4752 (1994).
- [35] R. Németh, M. Moško, Physica E **40**, 1498 (2008).
- [36] R. Németh, M. Moško, to be published.
- [37] K. M. Indlekofer, R. Németh, and J. Knoch, Phys. Rev. B **77**, 125436 (2008).
- [38] D. Loss, Phys. Rev. Lett. **69**, 343 (1992).
- [39] R. Németh, M. Moško, R. Krčmár, A. Gendiar, K. M. Indlekofer, and L. Mitaš, to be published.
- [40] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical recipes*, Word Wide Web sample from <http://www.nr.com>, Cambridge University Press, New York 1995.
- [41] A. Szabo, N. S. Ostlund, *Modern quantum chemistry-Introduction to advanced electronic structure theory*, Dover Publications, USA 1996.
- [42] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors-An introduction*, Glasgow University, Cambridge University Press. 1998.



ÚVOD

Pri popise vodivostných elektrónov v tuhých látkach hrajú dôležitú úlohu tri charakteristické dĺžky [1,2]: Fermiho vlnová dĺžka (λ_F), stredná voľná dráha (L_{mean}) a koherenčná dĺžka (L_ϕ). Najjednoduchší na popis je prípad, keď rozmery vzorky sú oveľa väčšie ako tieto tri dĺžky a zároveň $L_{mean} > L_\phi \gg \lambda_F$. Vtedy na elektrón medzi dvomi zrážkami možno nazerať ako na klasickú časticu a elektrónová vodivosť je dobre popísaná klasickým Lorentz-Drudeho vzťahom [3]. S klesajúcou teplotou táto klasická vodivosť rastie v dôsledku slabnúceho elektrón-fonónového rozptylu. Pri dostatočne nízkych teplotách ju obmedzujú už len klasické elastické zrážky elektrónov so statickými rozptyľovačmi (prímesami). Preto v limite nulovej teploty Lorentz-Drudeho vodivosť prestáva rásť a saturuje sa na konečnej (konštantnej) hodnote. Tento režim sa zvykne nazývať aj kovový režim [1].

Koherenčnú dĺžku elektrónov, L_ϕ , limitujú neelastické rozptyľové procesy ako napr. elektrón-fonónový a elektrón-elektrónový rozptyl [4,5]. Koherenčná dĺžka preto rastie s klesajúcou teplotou, až sa stane väčšia ako stredná voľná dráha. Vtedy sa ku klasickej Lorentz-Drudeho vodivosti pridá malá záporná korekcia, ktorá je kvantovej povahy a je známa ako slabá lokalizácia [1,2]. Stručne povedané, odrazom elektrónovej vlny od mnohých prímies vzniká mnoho parciálnych vln, ktoré navzájom interferujú. Táto interferencia má tendenciu lokalizovať vlnovú funkciu elektrónu, v dôsledku čoho elektrónová vodivosť klesá. Ide teda o interferenčný jav demonštrujúci vlnovú povahu elektrónov.

Vo všeobecnosti, ak makroskopické vlastnosti (odpor, konduktancia, ...) nejakého makroskopického systému (vzorky skladajúcej sa z obrovského počtu atómov) priamo manifestujú vlnovú povahu elektrónov typickú pre mikroskopet atómov a molekúl, takýto systém sa zvykne nazývať mezoskopický [1]. Slabá lokalizácia je v súčasnosti už len jedným z mnohých mezoskopických javov. Rýchlo sa totiž prišlo na to, že ako mezoskopický sa chová každý systém, ktorého rozmery sú menšie ako koherenčná dĺžka vodivostných elektrónov. Trend miniaturizácie v mikroelektronike prirodzene viedol k objavom nových mezoskopických javov a mezoskopická fyzika sa v posledných dvoch desaťročiach vyvinula na samostatnú fyzikálnu disciplínu so špecifickými teoretickými a experimentálnymi metódami. V súčasnosti zahŕňa také mezoskopické javy ako fundamentálne kvantovanie balistickej vodivosti [6,7], kvantový Hallov jav [8], Aharonov-Bohmov jav [2,9–11], Andersonovú lokalizáciu [12], už spomenutú slabú lokalizáciu, univerzálne fluktuácie vodivosti [13,14], a mnohé ďalšie [1,2].

Jeden z mezoskopických javov, perzistentný prúd v jednorozmernom mezoskopickom prstenci (I), skúmame teoreticky v tejto práci. Literatúra o probléme je obsiahla. Náš text sa opiera o pionierske články predpovedajúce perzistentné prúdy [15–17], o niektoré pokročilejšie teórie perzistentných prúdov pre neinteragujúce [18–21] a interagujúce [21–24] elektróny, o základné experimentálne články [25–29] a o niekoľko prehľadových prác [1,30–32].

Skôr ako vysvetlíme pôvod perzistentného prúdu, uvažujme najprv priamy vodič, ktorý je tak tenký, že pohyb vodivostných elektrónov je v ňom kvantovomechanicky viazaný (kvantovaný) v oboch smeroch kolmých na vodič a voľný len v smere paralelnom s vodičom. Keďže je voľný iba v jednom smere, plyn takýchto vodivostných elektrónov sa zvykne nazývať kvázi-jednorozmerný plyn. Energetické spektrum kvázi-jednorozmerného plynu sa v dôsledku kvantovania kolmého pohybu skladá z jednorozmerných subpásov energie. O jednorozmernom plyne hovoríme vtedy, keď elektróny obsadzujú len najnižší energetický subpás [2,33].



Ak zatočíme takýto jednorozmerný vodič do tvaru uzavretého kruhového prstenca a ak je dĺžka prstenca (obvod) kratšia ako koherenčná dĺžka, hovoríme o mezoskopickom jednorozmernom prstenci. V prípade, že otvorom takéhoto mezoskopického jednorozmerného prstenca preniká v čase konštantný magnetický tok ϕ , tak jeho obvodom cirkuluje termodynamický rovnovážny prúd, nazývaný tiež perzistentný prúd. V protiklade s intuíciou založenou na klasickej fyzike, tento perzistentný prúd nezanikne, keď sú elektróny v prstenci rozptyľované prímiesami. Vysvetliť to môžeme nasledovne.

Keď sa poloha elektrónu zmení práve o dĺžku obvodu prstenca (L), tak magnetický tok zmení fázu jedoelektrónovej vlnovej funkcie o hodnotu $2\pi\phi e/h$. V dôsledku toho sú jedoelektrónové energetické hladiny v prstenci periodickými funkciami toku ϕ s periódou $\phi_0 = h/e$. Táto periodičnosť je analogická periodičnosti energie Blochovho elektrónu v k priestore, ibaže vlnový vektor k nahrádza magnetický tok ϕ . V analógii s Blochovým elektrónom, každej obsadenej diskkrétnej energii $\varepsilon(\phi)$ prislúcha jedoelektrónový prúd $-d\varepsilon(\phi)/d\phi$. Sčítaním jednotlivých jedoelektrónových prúdov dostaneme celkový perzistentný prúd. Z toho vidno, že pri teplote absolútnej nuly môžeme perzistentný prúd určiť tak, že energiu základného stavu všetkých elektrónov v prstenci zderivujeme podľa magnetického toku ϕ .

V prvej kapitole dizertačnej práce sa venujeme výpočtom tohto perzistentného prúdu v modeli neinteragujúcich elektrónov. V spojitom modeli neinteragujúcich elektrónov s parabolickým disperzným zákonom [1, 21] perzistentný prúd klesá s rastúcou dĺžkou prstenca L ako $1/L$. Podobne sa chová prúd rátany v mriežkových modeloch s preskokom na najbližších susedov, v ktorých je disperzný zákon kosínusovou funkciou vlnového vektora [18, 34]. Ak je takýto kosínusový pás čiastočne zaplnený, tak v limite veľkých L prúd opäť klesá ako $1/L$. Táto závislosť prúdu na dĺžke je teda typická pre vodivé 1D prstence. Situácia sa ale podstatne zmení, ak je kosínusový pás zaplnený úplne. Vtedy je prúd v mriežkových modeloch identicky rovný nule. V prvej kapitole našej práce ukážeme, že takýto výsledok je artefaktom modelov s kosínusovým disperzným zákonom. Ukážeme, že v realistickejšom modeli (s disperzným zákonom, ktorý sa kosínusovému len podobá) je perzistentný prúd pri plne zaplnenom páse nenulový, aj keď pre veľké L klesá s dĺžkou L exponenciálne. Napriek tomuto exponenciálnemu poklesu získame vhodnou voľbou parametrov prúdu na úrovni 1 nanoampér [35, 36], čo je hodnota v princípe experimentálne merateľná.

V druhej kapitole našej práce uvažujeme mezoskopický jednorozmerný prstenec s interagujúcimi elektrónmi a perzistentný prúd počítame pomocou mnohočasticových metód. Keď elektróny v jednorozmernom plyne interagujú prostredníctvom párovej elektrón-elektrónovej interakcie $V_{e-e}(x-x')$, vzniká korelovaný mnohočasticový stav známy ako Luttingerova kvapalina. V modeli Luttingerovej kvapaliny bolo ukázané analyticky [21], že keď sa do jednorozmerného prstenca vloží jeden lokalizovaný rozptyľovač resp. slabý spoj, tak perzistentný prúd (I) v prstenci vykazuje chovanie typické pre Luttingerovu kvapalinu, totiž mocninú závislosť $I \propto L^{-1-\alpha}$, kde L je dĺžka prstenca a mocnina α závisí len na elektrón-elektrónovej interakcii [21, 24] a nie na vlastnostiach rozptyľovača. Naším cieľom je preskúmať toto chovanie pomocou mikroskopických mnohočasticových metód, ktoré nie sú založené na predpokladoch modelu Luttingerovej kvapaliny a preto môžu závislosť $I \propto L^{-1-\alpha}$ nezávisle overiť. Opierame sa predovšetkým o plne korelovanú mnohočasticovú metódu [37] založenú na algoritme "bucket brigade configuration interaction" (BBCI). V plne korelovanom výpočte naozaj nachádzame perzistentný prúd, ktorý sa chová ako $I \propto L^{-1-\alpha}$, s mocninou α závisiacou len na elektrón-elektrónovej interakcii.



Fourier transform of $V_{e-e}(x-x')$. Our BBCI calculations have demonstrated that this theoretical result holds in the continuous model only if the range of $V_{e-e}(x-x')$ approaches zero. Treating the e-e interaction in the Hartree-Fock approximation, we have found the exponentially decaying $I(L)$ instead of the power law. However, we have also shown that the slope of $\log[I(L)]$ still depends solely on the parameter α_{RG} as long as the range of $V_{e-e}(x-x')$ approaches zero. The dependence on the single e-e interaction parameter α_{RG} is a common feature of the Hartree-Fock and BBCI models. We have shown analytically that this is due to the special properties of the matrix-elements of the many-body Hamiltonian.

LITERATÚRA

- [1] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press, Oxford, UK 2002.
- [2] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, UK 1995.
- [3] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid state physics*, Saunders College Publishing, Ed. D. G. Crane, Cornell University, USA 1976.
- [4] B. L. Altshuler, A. G. Aronov, D. E. Khmel'nitsky, J. Phys. C **15**, 7367 (1982).
- [5] K. K. Choi, D. C. Tsui, K. Alavi, Phys. Rev. B **36**, 7751 (1987).
- [6] B. J. van Wees et al., Phys. Rev. Lett **60**, 848 (1988).
- [7] D. Wharam et al., J. Phys. C **21**, L209 (1988).
- [8] K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, Phys. Rev. Lett **45**, 494 (1980).
- [9] Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [10] C. Van Haesendonck, Y. Bruynseraede, Europhysics News **19**, 89 (1988).
- [11] B. Schwarzschild, Physics Today **41**, 17 (1986).
- [12] P. W. Anderson *et al.*, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).
- [13] P. A. Lee, Physica **140A**, 169 (1986).
- [14] R. A. Webb, S. Washburn, Physics Today **41**, 46 (1988).
- [15] W. Kohn, Phys. Rev. **133**, A171 (1964).
- [16] N. Byers, C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. **7**, 46 (1961).
- [17] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, Phys. Lett. A **96**, 365 (1983).
- [18] H.-F. Cheung, Y. Gefen, E. K. Riedel, W.-H. Shih, Phys. Rev. B **37**, 6050 (1988).
- [19] G. Montambaux, H. Bouchiat, D. Sigeti, R. Friesner, Phys. Rev. B **42**, 7647 (1990).



blíži k nule. Univerzálna závislosť prúdu na jedinom interakčnom parametri α_{RG} je teda spoločná vlastnosť Hartree-Fockovho a BBCI modelu. Ukázali sme analyticky, že je to dôsledok špeciálnych vlastností maticových elementov mnohočasticového interakčného Hamiltonianu.

SUMMARY

In the first chapter of our thesis we have introduced the effect of the persistent current in the mesoscopic 1D ring with non-interacting electrons. We have reviewed previous analytical calculations of persistent currents in the clean ring [15,16] and ring with static scatterers [21]. Afterwards we have introduced a numerical approach allowing us to calculate the persistent current of the non-interacting 1D electron gas in a ring subjected to an external electrostatic potential. Our main goal was to calculate the persistent current in the 1D ring in presence of the periodic external potential. The periodic potential gives rise to the electron energy bands similar to a band structure of the 1D crystal. We have asked the question what is the persistent current in the situation when a single energy band is fully filled while the other bands are empty. We have addressed this question both numerically and analytically. We have demonstrated existence of the persistent current at full filling [35,36,45], albeit according to the previous theories [18,34], the persistent current at full filling is precisely equal to zero. In particular, our numerical simulations demonstrated that the persistent current at full filling decays exponentially with the ring length, but still with a measurable value ($\sim \ln A$) for properly chosen and technologically feasible ring parameters. In addition, our analytical calculations allowed us to derive the analytical formula $I(\phi) \approx I_0 |t_{qF}|^N \sin(2\pi\phi/\phi_0 + \pi N)$ which reproduces the numerically simulated exponential decay in the limit of strong structureless barriers. In principle, such non-zero persistent current exists also in the ring made of the perfect crystalline insulator [45].

In the second chapter we have analyzed the 1D ring with interacting electron gas and we have investigated the effect of the e-e interaction on the persistent current. One-dimensionality combined with the e-e interaction gives rise to the non-Fermi-liquid state known as Luttinger liquid. Our major goal was to perform a microscopic many-body calculation of the persistent current carried by the Luttinger liquid.

We have introduced a many-body problem and formally derived a many-body expression for the persistent current in the ground state. After that we have presented two many-body methods capable to solve the many-body problem numerically, i.e. the Hartree-Fock approximation and the bucket-brigade-configuration-interaction method (BBCI). The Hartree-Fock approximation ignores the electron correlations except for the Fock exchange [3,41] while the BBCI provides a fully correlated many-body solution [37]. By means of these methods, we have solved the many-body Schrodinger equation for several tens of electrons interacting via the exponentially-screened pair interaction $V_{e-e}(x-x')$.

As a major result, we have calculated the persistent current of the interacting spinless electrons in the continuous 1D ring with a single weak link. Our BBCI calculations have shown, that the persistent current (I) as a function of the ring length (L) exhibits for large L the power law typical of the Luttinger liquid, $I \propto L^{-1-\alpha}$, where the power α depends only on the e-e interaction. For strong e-e interactions, the previous theories predicted for α the formula $\alpha = (1 + 2\alpha_{RG})^{1/2} - 1$, where $\alpha_{RG} = [V(0) - V(2k_F)]/2\pi\hbar v_F$ is the renormalization-group result for weakly interacting electrons, with $V(q)$ being the



Novým výsledkom je zistenie, že pre krátkodosahovú elektrón-elektrónovú interakciu je mocnina α nezávislá od tvaru interakcie. Aby sme videli, čo sa stane bez mnohočasticových korelácií, problém študujeme aj v Hartree-Fockovej aproximácii, v ktorej je jedinou koreláciou Fockov výmenný efekt. V Hartree-Fockovej aproximácii nachádzame prúd, ktorý s rastúcim L klesá exponenciálne, nie mocninne. Sklon funkcie $\log[I(L)]$ však naďalej závisí iba od elektrón-elektrónovej interakcie a pre krátkodosahové interakcie opäť nezávisí od samotného tvaru interakcie.

CIELE DIZERTAČNEJ PRÁCE

Ciele dizertačnej práce sú nasledovné:

- (i) Vyvinúť numerickú jednočasticovú metódu pre výpočet perzistentného prúdu neinteragujúcich elektrónov v jednorozmernom prstenci, na ktorý je aplikovaný ľubovoľný vonkajší elektrostatický potenciál.
- (ii) Overiť správnosť vyvinutej metódy zreprodukovaním niektorých štandardných výsledkov. Predovšetkým, simulovať perzistentný prúd neinteragujúcich elektrónov v čistom jednorozmernom prstenci a v jednorozmernom prstenci s jednou silno lokalizovanou bariérou a porovnať získane výsledky so známymi analytickými teóriami [16,21].
- (iii) Vypočítať (numericky aj analyticky) perzistentný prúd neinteragujúcich elektrónov v jednorozmernom prstenci, na ktorý je aplikovaný vonkajší periodický potenciál. Ukázať, aký je perzistentný prúd pri plnom zaplnení energetického pásu.
- (iv) Vyvinúť numerické metódy, ktoré nám umožnia vypočítať perzistentný prúd interagujúcich jednorozmerných elektrónov. Konkrétne, implementovať selfkonzistentnú Hartree-Fockovu aproximáciu a najmä plne korelovanú mnohočasticovú metódu BBCI založenú na *konfiguračnej interakcii* (CI) a algoritme *bucket brigade* (BB). Otestovať obidve metódy na simulácii perzistentného prúdu interagujúcich elektrónov v čistom jednorozmernom prstenci, kde sú výsledky dobre známe [34,38].
- (v) Najdôležitejším cieľom našich mnohočasticových simulácií je vypočítať perzistentný prúd interagujúcich bezspinových elektrónov v spojitom jednorozmernom prstenci s jedným slabým spojom a vyšetriť efekty spojené s existenciou Luttingerovej kvapaliny. Chceme overiť univerzalitu mocninného zákona $I \propto L^{-1-\alpha}$ s ohľadom na silu slabého spoja a tvar elektrón-elektrónovej interakcie $V_{e-e}(x-x')$. Cieľ dosiahneme pomocou plne korelovannej metódy BBCI. Ten istý problém chceme preskúmať aj v strednopoľovej (Hartree-Fockovej) aproximácii, aby sme videli, čo sa stane keď pôsobí len výmenná Fockova korelácia.

ZHRNUTIE DOSIAHNUTÝCH VÝSLEDKOV

V dizertačnej práci sme pomocou numerických metód skúmali perzistentné prúdy neinteragujúcich a interagujúcich elektrónov tečúce v jednorozmernom (1D) mezoskopickom prstenci [35,36,39], ak jeho otvorom preniká magnetický tok ϕ . V prvej kapitole sme



študovali vplyv vonkajšieho periodického potenciálu na perzistentný prúd neinteragujúcich elektrónov. Numerické simulácie neinteragujúcich elektrónov boli založené na metóde prechodových matic, metóde konečných diferencií a na bisekčnej metóde [33, 40]. Získané výsledky sú v tomto autoreferáte zhrnuté v odseku "Perzistentný prúd v 1D prstenci s periodickým potenciálom". V druhej kapitole dizertačnej práce sme pomocou Hartree-Fockovej aproximácie [3, 41] a metódy konfiguračnej interakcie [37, 41] analyzovali vplyv párovej elektrón-elektrónovej interakcie na perzistentný prúd interagujúcich elektrónov v 1D prstenci s jedným slabým spojmom. Získané výsledky sme v tomto autoreferáte zhrnuli v odseku "Perzistentný prúd Luttingerovej kvapaliny v 1D prstenci so slabým spojmom". Všetky simulácie boli robené pre bezspinové (resp. spinovo polarizované) elektróny v GaAs prstenci s efektívnou hmotnosťou elektrónov $m = 0.067m_e$ a elektrónovou koncentráciou $n_e = 5 \times 10^7$ 1/m.

Perzistentný prúd v 1D prstenci s periodickým potenciálom

Pozdĺž obvodu prstenca bol aplikovaný Kronig-Penneyov potenciál [42] zložený z N periodicky sa opakujúcich δ -bariér s transmisíou $t_k = k/(k + i\zeta)$, kde $\zeta = k_F|r_{k_F}|/|t_{k_F}|$, $k_F = \pi n_e$ je Fermiho vlnový vektor a $|r_{k_F}| = \sqrt{1 - |t_{k_F}|^2}$. Tento periodický potenciál zmení parabolický disperzný zákon elektrónov na (takmer) kosínusové energetické pásy, oddelené energetickými medzerami. Najprv sme perzistentný prúd odvodili analyticky v limite $|t_{k_F}| \ll 1$ a v priblížení presne kosínusových energetických pásov. Ak je obsadených $N_e \leq N$ najnižších elektrónových stavov (pri teplote 0K), podľa nášho odvodenia prstencom tečie pre nepárne N_e prúd [35, 36]

$$I(\phi) \approx I_t \frac{\sin(\pi N_e/N)}{\sin(\pi/N)} \sin\left(\frac{2\pi}{N} \frac{\phi}{\phi_0}\right), \quad \phi/\phi_0 \in (-1/2, 1/2) \quad (1)$$

a pre párne N_e prúd

$$I(\phi) \approx I_t \frac{\sin(\pi N_e/N)}{\sin(\pi/N)} \sin\left(\frac{\pi}{N} \left[\frac{2\phi}{\phi_0} - 1\right]\right), \quad \phi/\phi_0 \in (0, 1), \quad (2)$$

kde $I_t = e\hbar k_F |t_{k_F}|/mL|r_{k_F}|$. Pri zaplnení $N_e/N < 1$ tieto prúdy klesajú v limite $N \rightarrow \infty$ ako $1/N$, čo je v zhode s výsledkami modelu voľných elektrónov a modelu tesnej väzby. Pri úplnom zaplnení ($N_e = N$) dostaneme pre párne aj nepárne N_e presne nulový prúd, čo je v zhode so známym výsledkom modelu tesnej väzby.

Numericky získany perzistentný prúd $I(\phi)$ pre $N_e = N$ je ukázaný na obrázku 1. Dáta boli vypočítané pre Kronig-Penneyov potenciál s periodou $L_0 = 20$ nm, prúd $I(\phi)$ je na obrázku normovaný ako $I(\phi)/I_0$, kde $I_0 = e\hbar k_F/mL$. Výsledné prúdy sú nenulové a teda principiálne odlišné od predpovede, ktorú pre $N_e = N$ dávajú rovnice (1) a (2).

Na obrázku 2 ukazujeme numerické výsledky pre závislosť prúdu od dĺžky prstenca L . Vidno, že perzistentný prúd v plne zaplnenom páse ($N_e = N$) klesá s L exponenciálne pre ľubovoľné $|t_{k_F}| < 1$. Pokles je pomalší pre slabšie δ -bariéry a rýchlejší pre silnejšie δ -bariéry. Toto chovanie sa nám podarilo odvodiť aj analyticky, keď sme išli za priblíženie presne kosínusových pásov. Konkrétne, v limite $|t_{k_F}| \ll 1$ sme pre $N_e = N$ odvodili vzťah

$$I(\phi) \approx I_0 |t_{k_F}|^N \sin(2\pi\phi/\phi_0 + \pi N). \quad (3)$$

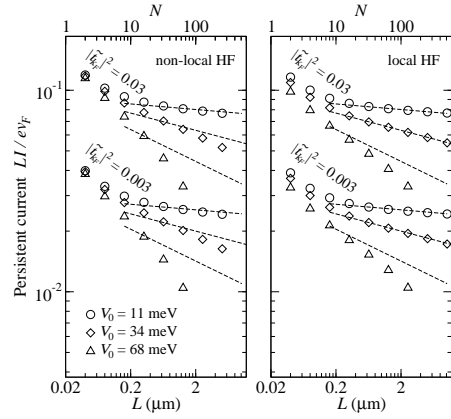
ZHRNUTIE

Prvá kapitola dizertačnej práce začala úvodom do perzistentných prúdov v mezoskopickom jednorozmernom prstenci s neinteragujúcimi elektrónmi. Urobili sme prehľad analytických teórií perzistentných prúdov v čistom prstenci [15, 16] a v prstenci so statickými rozptyľovačmi [21]. Potom sme zaviedli numerickú metódu umožňujúcu počítať perzistentný prúd neinteragujúcich jednorozmerných elektrónov v prstenci, ktorý je vystavený pôsobeniu vonkajšieho elektrostatického potenciálu. Naším hlavným cieľom bolo vypočítať perzistentný prúd v prstenci s periodickým elektrostatickým potenciálom. Periodický potenciál má za následok vznik elektrónovej pásovej štruktúry podobnej pásovej štruktúre jednorozmerného kryštálu. Položili sme otázku, aký je perzistentný prúd v prípade, že je úplne zaplnený jeden energetický pás a ostatné pásy sú prázdne. Demonstrovali sme existenciu perzistentného prúdu pri úplnom zaplnení [35, 36, 45], zatiaľ čo podľa predchádzajúcich teórií [18, 34] je perzistentný prúd pri plnom zaplnení presne rovný nule. Naše numerické simulácie sice ukázali, že perzistentný prúd pri úplnom zaplnení klesá exponenciálne s rastúcim obvodom prstenca, avšak s merateľnou hodnotou ($\sim \ln A$) pre vhodne vybrané a technologicky dosiahnuteľné parametre prstenca. Analyticky sme odviedli vzťah $I(\phi) \approx I_0 |t_{qF}|^N \sin(2\pi\phi/\phi_0 + \pi N)$, ktorý tiež vykazuje exponenciálny pokles a v limite silných bezštruktúrnych bariér súhlasí s numerickými výsledkami kvantitatívne. Nenulový perzistentný prúd v princípe existuje aj v prstenci vyrobenom z dokonalého kryštalického izolátora [45].

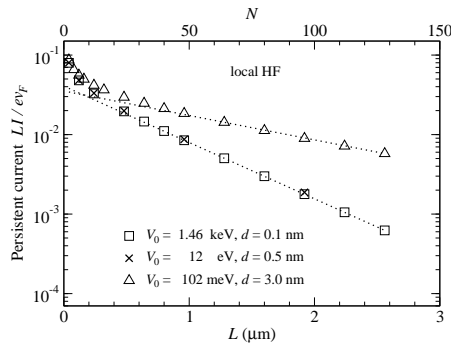
V druhej kapitole sme analyzovali jednorozmerný prstenec s interagujúcim elektrónovým plynom a skúmali sme vplyv e-e interakcie na perzistentný prúd. Jednorozmernosť plynu v kombinácii s e-e interakciou vedie k vzniku korelovaného mnohočasticového stavu známeho ako Luttingerova kvapalina, fundamentálne odlišného od Fermiho kvapaliny kvázičastic. Naším hlavným cieľom bol mikroskopický mnohočasticový výpočet perzistentného prúdu neseného Luttingerovou kvapalinou.

Začali sme úvodom do problému mnohých častíc a formálne sme odviedli mnohočasticový výraz pre perzistentný prúd v základnom stave. Potom sme implementovali dve mnohočasticové metódy schopné riešiť mnohočasticový problém numericky, t.j. Hartree-Fockovu aproximáciu a metódu BBCI, založenú na *konfiguračnej interakcii* (CI) a algoritme *bucket brigade* (BB). Hartree-Fockova aproximácia ignoruje mnohočasticové korelácie s výnimkou Fockovej výmeny [3, 41], zatiaľ čo BBCI dáva plne korelované riešenie [37]. Pomocou týchto metód sme riešili mnohočasticovú Schrödingerovú rovnicu pre niekoľko desiatok elektrónov interagujúcich cez exponenciálne tienenu e-e interakciu $V_{e-e}(x - x')$.

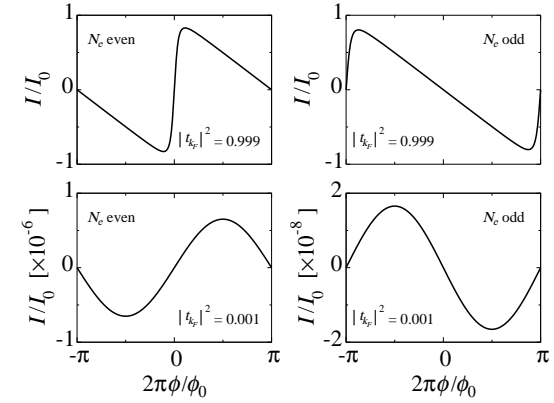
Hlavným výsledkom je vypočítaný perzistentný prúd interagujúcich bezspinových elektrónov v spojitom jednorozmernom prstenci s jedným slabým spojmom. Naše BBCI výpočty ukázali, že perzistentný prúd (I) ako funkcia dĺžky prstenca (L) vykazuje pre veľké L mocninný zákon typický pre Luttingerovu kvapalinu, $I \propto L^{-1-\alpha}$, kde mocnina α závisí výlučne na e-e interakcii. Pre ľubovoľne silnú e-e interakciu by podľa predchádzajúcich teórií mal platiť vzťah $\alpha = (1 + 2\alpha_{RG})^{1/2} - 1$, kde $\alpha_{RG} = [V(0) - V(2k_F)]/2\pi\hbar v_F$ je výsledok teórie renormalizačnej grupy pre slabo interagujúce elektróny a $V(q)$ je Fourierova transformácia párovej interakcie $V_{e-e}(x - x')$. BBCI výpočty potvrdili tento teoretický výsledok len v limitnom prípade, keď sa dosah párovej interakcie $V_{e-e}(x - x')$ blíži k nule. Ten istý problém sme simulovali aj v Hartree-Fockovej aproximácii. Namiesto mocninného poklesu sme našli exponenciálne klesajúcu závislosť $I(L)$, zistili sme však, že sklon funkcie $\log[I(L)]$ stále závisí výlučne na parametri α_{RG} , keď sa dosah $V_{e-e}(x - x')$



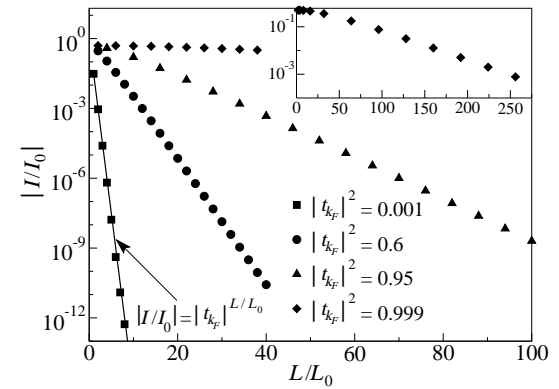
Obrázok 9: Perzistentný prúd versus dĺžka prstencu v prstenci s δ -bariérou. Prezentaované sú výpočty pre rôzne transmisie $|t_{k_F}|^2$ a rôzne amplitúdy V_0 , dosah e-e interakcie ($d = 3\text{nm}$) je zaфіxovaný. Hartree-Fockove výsledky pre slabú e-e interakciu ($\alpha_{\text{RG}} = 0.0277$) a silnú e-e interakciu ($\alpha_{\text{RG}} = 0.2565$) sú zobrazené s použitím symbolov. Čiarkovanými čiarami je znázornený mocinný zákon $LI \propto L^{-\alpha}$, kde $\alpha = (1 + 2\alpha_{\text{RG}})^{1/2} - 1$ a $\alpha_{\text{RG}} = 0.0277, 0.0855$ a 0.171 pre $V_0 = 11, 34$ a 68 meV .



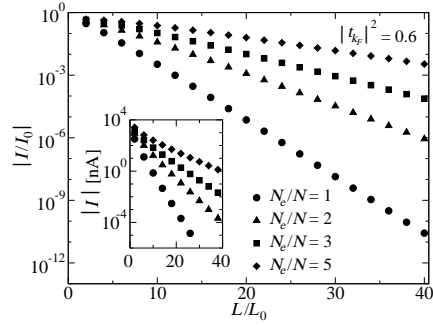
Obrázok 10: Perzistentný prúd versus dĺžka prstencu v prstenci s δ -bariérou, vypočítaný v lokálnej Hartree-Fockovej aproximácii. Transmisia δ -bariéry je $|t_{k_F}|^2 = 0.03$. Parametre V_0 a d sú zvolené tak, že $\alpha_{\text{RG}} = 0.2565$.



Obrázok 1: Perzistentný prúd $I(\phi)$ v prstenci s periodickým potenciálom a úplne zaplneným energetickým pásmom ($N_e = N$). Panely v ľavom stĺpci ukazujú výsledky pre $N_e = N = 4$, v pravom stĺpci sú výsledky pre $N_e = N = 5$. Prúdy v horných paneloch majú pílovitý tvar typický pre čistý 1D prsteneček. Prúdy v dolných paneloch majú sínusový priebeh, ako to predpovedá vzťah (3).



Obrázok 2: Perzistentný prúd $I(L)$ v prstenci s periodickým potenciálom a úplne zaplneným energetickým pásmom ($N_e = N$) vypočítaný numericky pre magnetický tok $\phi/\phi_0 = 0.25$ a pre rôzne $|t_{k_F}|$. Plná čiara ukazuje analytický výsledok (3), kde $N = L/L_0$. Inset v pravom hornom rohu ukazuje ešte raz numerický výsledok pre najslabšiu δ -bariéru, ale pre väčšie hodnoty L .



Obrázok 3: Perzistentný prúd $I(L)$ v prstenci s periodickým potenciálom pre rôzne celočíselné hodnoty N_e/N a magnetický tok $\phi/\phi_0 = 0.25$. Periodický potenciál bol pre rôzne N_e/N rovnaký - sila jednotlivých δ -bariér bola nastavená tak, že ich transmisia bola $|t_{k_F}| = 0.6$ pre $N_e/N = 1$. *Inset* ukazuje dáta z hlavného panelu v nanoampéroch.

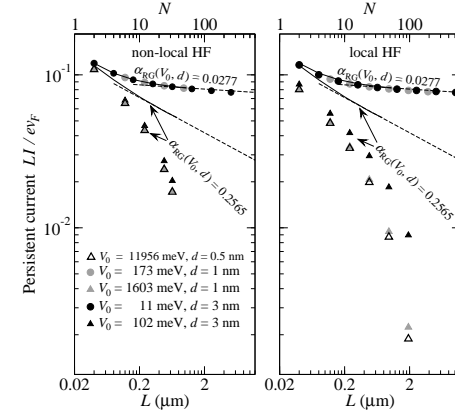
Plná čiara na obrázku 2 ukazuje dáta vypočítané zo vzťahu (3), kde $N = L/L_0$. Vidno, že numerické dáta a vzťah (3) sú pre $|t_{k_F}|^2 = 0.001$ vo veľmi dobrej zhode. Vzťah (3) teda naozaj platí pre $|t_{k_F}| \ll 1$.

Na obrázku 3 sú ukázané numerické závislosti prúdu od dĺžky L pre rôzne celočíselné zaplnenia N_e/N od $N_e/N = 1$ až po $N_e/N = 5$. Ako na predchádzajúcom obrázku, aj tu prúd klesá s L exponenciálne, len rýchlosť poklesu je s rastúcim N_e/N pomalšia. Je to dôsledok toho, že elektróny vo vyšších energetických pásoch majú vyššie energie a preto cez δ -bariéry ľahšie tunelujú. *Inset* v obrázku 3 ukazuje tie isté prúdy v nanoampéroch. Vidno, že pri koncentráciách elektrónov na úrovni $5 \times n_e$ ide o perzistentné prúdy na úrovni jeden nanoampér. Perzistentné prúdy ~ 1 nA sú v princípe experimentálne merateľné [1].

V praxi bude ťažké vytvoriť ideálny periodický potenciál. Preto sme skúmali, ako perzistentný prúd pri úplnom zaplnení ovplyvní narušená periodicitá potenciálu. V danej vzorke sme δ -bariéry umiestnili do náhodných polôh x_j generovaných z distribúcie

$$f(x_j) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x_j - \mu_j)^2}{2\sigma^2}\right), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (4)$$

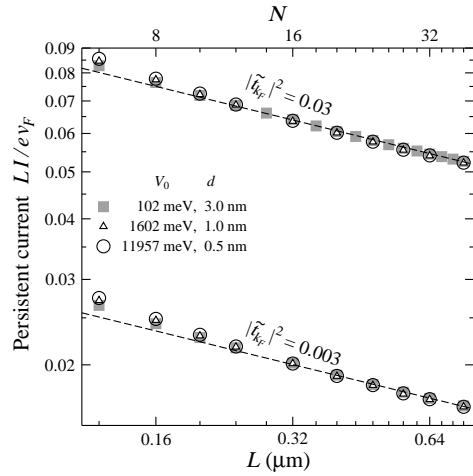
kde μ_j sú polohy bariér v ideálne periodickom potenciáli a σ je štandardná odchýlka od ideálnej polohy. Pre danú konfiguráciu bariér sme vypočítali prúd a vystredovaním cez veľký súbor vzoriek sme dostali stredný prúd. Na obrázku 4 ukazujeme výsledný stredný prúd (body zobrazené plnými symbolmi) pre $N_e/N = 1$ a $N_e/N = 2$. Pre porovnanie sú plnou a prerušovanou čiarou ukázané aj príslušné prúdy v prstenci s ideálne periodickým potenciálom. Vidíme, že narušením ideálnej periodicity sa prúd pri úplnom zaplnení dokonca mierne zväčšil (exponenciálny pokles s L je pomalší). Nedokonalosť periodického potenciálu by teda nemala byť prekážkou pozorovania perzistentného prúdu pri úplnom zaplnení.



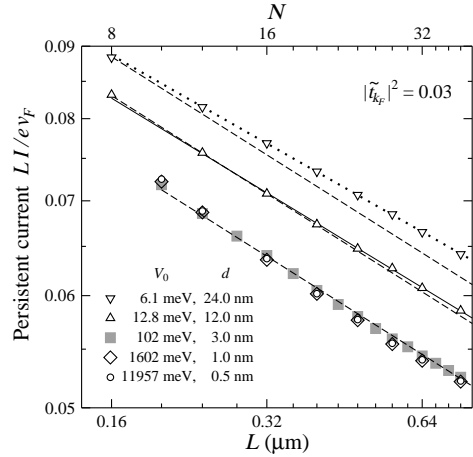
Obrázok 8: Perzistentný prúd versus dĺžka prstenca pre prstenc s obsahujúci δ -bariéru s transmisiou $|t_{k_F}|^2 = 0.03$ a pre rôzne parametre elektrón-elektrónovej interakcie. Symbolmi sú zobrazené Hartree-Fockove výsledky pre slabú interakciu ($\alpha_{RG} = 0.0277$) a silnú interakciu ($\alpha_{RG} = 0.2565$). Pre porovnanie sú plnou čiarou zobrazené príslušné BBCI dáta. Čiarkovaná čiara znázorňuje mocninný zákon $LI \propto L^{-\alpha}$ s $\alpha = (1 + 2\alpha_{RG})^{1/2} - 1$.

avšak pre veľmi veľké d už hodnoty α zistené numericky nesúhlasia s hodnotou $\alpha = 0.23$ získanou zo vzťahu (9). V dizertačnej práci sme analyzovali (analyticky) maticové elementy elektrón-elektrónovej interakcie. Z analýzy vyplýva, že mocnina α môže byť pri fixnom α_{RG} nezávislá od d iba ak $d \ll 1/2k_F$, čo je v zhode s našimi BBCI výsledkami.

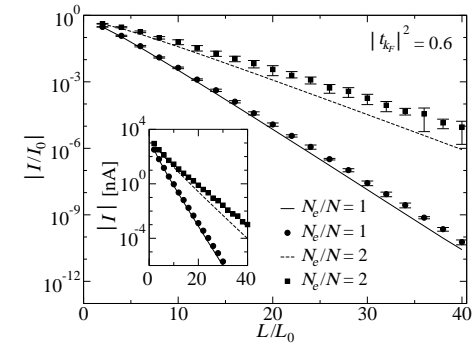
Doposiaľ sme diskutovali plne korelované mnohočasticové výsledky, získane BBCI metódou. Aby sme videli, čo sa stane bez korelácií, tie isté výpočty sme urobili aj v Hartree-Fockovej (HF) aproximácii [3, 41]. Využili sme dva rôzne prístupy. V jednom z nich sme Fockov nelokálny člen aproximovali vhodným lokálnym potenciálom [23], v druhom sme nelokálny tvar Fockovho potenciálu [39] započítali exaktne. Na obrázku 8 ukazujeme perzistentné prúdy, vypočítané Hartree-Fockovou metódou pre rovnaké parametre ako v BBCI výpočtoch. Ľavý panel ukazuje Hartree-Fockove výsledky pre exaktný (nelokálny) Fockov potenciál, v pravom paneli sú Hartree-Fockove výsledky v lokálnej aproximácii. Hartree-Fockove dáta sú zobrazené pomocou symbolov, plnou čiarou sú pre porovnanie zobrazené BBCI dáta a prerušované čiary ukazujú príslušné mocninné zákony $LI \propto L^{-\alpha}$. Pre slabé interakcie ($\alpha_{RG} = 0.0277$) sa Hartree-Fockove a BBCI dáta zhodujú. Pre silné interakcie ($\alpha_{RG} = 0.2565$) sa Hartree-Fockove dáta od korelovaných dát výrazne odlišujú už pre malé počty elektrónov, takže nespĺňajú mocninný zákon. Vidíme však aj to, že v Hartree-Fockovej aproximácii dostávame pre dostatočne malé hodnoty d (pri fixnej hodnote α_{RG}) výsledky, ktoré nezávisia od d . V tomto zmysle sú teda Hartree-Fockove výsledky rovnako univerzálne ako BBCI výsledky. Navyše, ako ukazuje obrázok 9, aj v Hartree-Fockovej aproximácii je perzistentný prúd priamo úmerný transmisnej amplitúde $|t_{k_F}|$. Konečne, s využitím lokálnej Hartree-Fockovej aproximácie sa nám podarilo určiť aj asymptotický charakter závislosti prúdu na dĺžke prstenca. Na obrázku 10 je ukázané, že v Hartree-Fockovej aproximácii perzistentný prúd klesá s dĺžkou prstenca exponenciálne, pričom rýchlosť poklesu je pre dostatočne malé d nezávislá od d .



Obrázok 6: Porovnanie perzistentného prúdu $I(L)$ v režime $LI \propto L^{-\alpha}$ pre dve rôzne transmisie $|t_{k_F}|^2$ a pre rôzne dvojice (V_0, d) dávajúce to isté $\alpha_{RG} = 0.2565$. Čiarkovaná čiara ukazuje mocinnú závislosť $LI \propto L^{-\alpha}$, kde $\alpha = (1 + 2\alpha_{RG})^{1/2} - 1$.



Obrázok 7: Perzistentný prúd $I(L)$ pre rôzne dvojice (V_0, d) zvolené tak, že vzťahy (8) a (9) dávajú vždy $\alpha_{RG} = 0.2565$ a $\alpha = 0.23$. Mocinný zákon $LI \propto L^{-0.23}$ je ukázaný prerušovanou čiarou. Vidno, že v dobrej zhode s $LI \propto L^{-0.23}$ sú BBCI dáta pre $d \leq 3$ nm. BBCI dáta pre $d = 12$ nm vyhovujú mocinnému zákonu $LI \propto L^{-0.222}$ (plná čiara) a BBCI dáta pre $d = 24$ nm fituje mocinný zákon $LI \propto L^{-0.207}$ (bodkovaná čiara).



Obrázok 4: Perzistentný prúd $I(L)$ v prstenci s periodickým potenciálom pre dve rôzne celočíselné hodnoty N_c/N a magnetický tok $\phi/\phi_0 = 0.25$. Výsledky pre periodický potenciál s narušenou periodicitou (viď text) sú ukázané plnými symbolmi. Plnou a prerušovanou čiarou sú pre porovnanie ukázané príslušné prúdy v prstenci s ideálnym periodickým potenciálom. *Inset* ukazuje dáta z hlavného panelu v nanoampéroch.

Perzistentný prúd Luttingerovej kvapaliny v 1D prstenci so slabým spojom

Skúmali sme perzistentný prúd interagujúcich bezspinových elektrónov v 1D prstenci s jedným slabým spojom. Spoj bol modelovaný ako silno odrážajúca δ -bariéra s transmiou $|\tilde{t}_{k_F}|^2 \ll 1$. Keď sa v tejto situácii neuvažuje interakcia medzi elektrónmi, pre perzistentný prúd platí vzťah [21]

$$I = (ev_F/2L)|\tilde{t}_{k_F}| \sin(2\pi\phi/\phi_0), \quad (5)$$

kde v_F je Fermiho grupová rýchlosť. Tento vzťah sa fundamentálne zmení, ak sa interakcia medzi elektrónmi vezme do úvahy v modeli bezspinovej Luttingerovej kvapaliny. V tomto modeli bola odvodená závislosť [21]

$$I \propto L^{-\alpha-1} \sin(2\pi\phi/\phi_0), \quad (6)$$

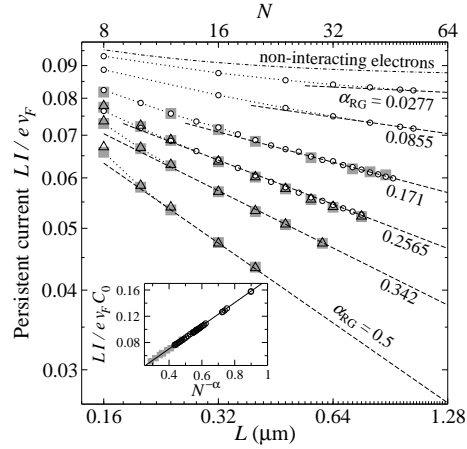
kde mocnina α závisí len na elektrón-elektrónovej interakcii a nie na vlastnostiach bariéry. Obidva vyššie uvedené vzťahy platia v limite veľkých L .

Vzťah (6) možno získať aj nasledovným heuristickým spôsobom. Autori práce [43] analyzovali vplyv elektrón-elektrónovej interakcie na holú transmišnú amplitúdu \tilde{t}_{k_F} jednej lokalizovanej bariéry umiestnenej v strede 1D vodiča dĺžky L . Metódou renormalizačnej grupy (RG) sa im podarilo odvodiť renormalizovanú transmišnú amplitúdu t_{k_F} pre slabointeragujúce elektróny. Ich výsledok sa v limite $|\tilde{t}_{k_F}|^2 \ll 1$ dá písať v tvare

$$t_{k_F} \approx (\tilde{t}_{k_F}/|\tilde{r}_{k_F}|)(d/L)^\alpha, \quad (7)$$

kde d je dosah elektrón-elektrónovej interakcie a mocnina α je daná vzťahom

$$\alpha_{RG} = [V(0) - V(2k_F)]/2\pi\hbar v_F, \quad (8)$$



Obrázok 5: Perzistentný prúd versus dĺžka prstenca L pre rôzne V_0 a d z tabuľky 1. Krúžky, štvorce a trojuholníky ukazujú BBCI výsledky pre $d = 3$ nm, 1 nm a 0.5 nm. Prerušované čiary ukazujú mocinný zákon $LI \propto L^{-\alpha}$ zapísaný v tvare (11), kde $\alpha = (1 + 2\alpha_{RG})^{1/2} - 1$ a α_{RG} je dané RG vzťahom (8). V *insete* ukazujeme ešte raz tie BBCI dáta, ktoré sú už v asymptotickom režime $LI \propto L^{-\alpha}$. Dáta sú vydelené faktorom $C_0(\alpha) = 0.5 + 0.83\alpha$ (viď text) a zobrazené v lineárnej škále v závislosti od premennej $N^{-\alpha}$. Všetky takto prezentované dáta ležia na jedinej priamke (plnej čiare), ktorá je grafom funkcie $\frac{|\tilde{t}_{k_F}|}{|\tilde{r}_{k_F}|} N^{-\alpha}$.

v ktorom vystupuje Fourierova transformácia $V(q)$ párovej elektrón-elektrónovej interakcie $V_{e-e}(x-x')$. Ak vzťahom (7) nahradíme v rovnici (5) holú transmisíu \tilde{t}_{k_F} , dostaneme závislosť (6) s mocninou α určenou mikroskopicky pomocou vzťahu (8). Rovnosť $\alpha = \alpha_{RG}$ však platí iba pre slabu interagujúce elektróny ($\alpha_{RG} \ll 1$). Pre silnú interakciu (napr. $\alpha_{RG} \sim 0.5$) teória predpovedá [44]

$$\alpha = (1 + 2\alpha_{RG})^{1/2} - 1. \quad (9)$$

Verí sa, že tento výsledok platí pre ľubovoľné $V_{e-e}(x-x')$ s konečným dosahom d , ktorý môže v princípe byť aj veľmi veľký (v porovnaní s $1/k_F$).

V dizertačnej práci sme tieto výsledky overovali pomocou plne korelovannej mikroskopkej mnohočasticovej metódy BBCI, založenej na *konfiguračnej interakcii* [37, 41] a na algoritme *bucket brigade* [37]. Numerické výpočty sme robili pre silno odrazivú bariéru a párovú elektrón-elektrónovu interakciu

$$V_{e-e}(x-x') = V_0 \exp(-|x-x'|/d), \quad (10)$$

ktorá simuluje tienenu Coulombovskú interakciu (tienenu napr. pomocou kovových hradíel).

Na obrázku 5 ukazujeme v log-log škále perzistentné prúdy $I(L)$ vypočítané pre GaAs prstencok obsahujúci δ -bariéru s transmisíou $|\tilde{t}_{k_F}|^2 = 0.03$, keď cez otvor prstenca tečie magnetický tok $\phi = 0.25\phi_0$. S použitím symbolov sú ukázané výsledne BBCI dáta pre



V_0 (meV)	d (nm)	α_{RG}	α	symbol v obr. 5
11	3	0.0277	0.0273	○
34	3	0.0855	0.0821	○
68	3	0.171	0.158	○
1068	1	0.171	0.158	■
102	3	0.2565	0.230	○
1602	1	0.2565	0.230	■
11957	0.5	0.2565	0.230	△
15942	1	0.342	0.298	■
15942	0.5	0.342	0.298	△
3142	1	0.5	0.414	■
23445	0.5	0.5	0.414	△

Tabuľka 1: Vstupné parametre V_0 a d použité v BBCI výpočtoch obrázku 5 a hodnoty α_{RG} a α vypočítané zo vzťahov (8) a (9). V poslednom stĺpci tabuľky je každej trojici (V_0, d, α_{RG}) priradený symbol, ktorý na obrázku 5 používame na prezentáciu príslušných BBCI dát.

rôzne V_0 a d uvedené v tabuľke 1. Prerušované čiary ukazujú mocinný zákon $LI \propto L^{-\alpha}$, presnejšie zákon

$$\frac{LI}{ev_F} = C_0(\alpha) \frac{|\tilde{t}_{k_F}|}{|\tilde{r}_{k_F}|} N^{-\alpha} \sin(2\pi\phi/\phi_0), \quad (11)$$

ktorý sme získali uvedeným heuristickým spôsobom. Jediný neznámy (fitovací) parameter v tomto vzťahu je faktor úmernosti C_0 . Vzťah (11) vynikajúco fituje všetky BBCI dáta v asymptotickom režime (obr. 5), ak C_0 fitujeme funkciou $C_0(\alpha) = 0.5 + 0.83\alpha$.

Závery, ktoré okamžite vidno z obrázku 5, sú teda tieto:

- (i) BBCI dáta potvrdzujú asymptotický mocinný zákon $LI \propto L^{-\alpha}$.
- (ii) BBCI dáta potvrdzujú v zhode so vzťahmi (8) a (9), že pre rôzne dvojice (V_0, d) dávajúce to isté α_{RG} (tabuľka 1) závisí mocnina α jedine od parametra α_{RG} , nie od parametrov (V_0, d) . Preto hovoríme, že mocnina α je univerzálna - rovnaká pre rôzne e-e interakcie dávajúce to isté α_{RG} . (Neskôr však ukážeme, že táto univerzalita platí iba pre dostatočne malé d .)
- (iii) BBCI dáta ukazujú, že faktor C_0 závisí jedine od parametra α , nie od parametrov (V_0, d) . Podľa vzťahu (11) má byť podiel $\frac{LI}{ev_F C_0}$ presne rovný výrazu $\frac{|\tilde{t}_{k_F}|}{|\tilde{r}_{k_F}|} N^{-\alpha}$, čo BBCI dáta (*inset* na obrázku 5) potvrdzujú pre širokú škálu hodnôt N , V_0 a d .

Na obrázku 6 demonštrujeme nezávislosť mocniny α od sily δ -bariéry. Symboly ukazujú BBCI dáta vypočítané pre dve veľmi odlišné transmisie a pre rôzne parametre V_0 a d zvolené tak, že dávajú to isté $\alpha_{RG} = 0.2565$. Prerušované čiary opäť ukazujú mocinný zákon $LI \propto L^{-\alpha}$. Vidno, že BBCI dáta pre dve rôzne transmisie dávajú to isté α . Taktiež znovu potvrdzujú už dokumentovanú univerzalitu mocniny α vzhľadom na tvar elektrón-elektrónovej interakcie.

V dizertačnej práci ukazujeme, že α je v skutočnosti univerzálne len pre dostatočne malé d . Na obrázku 7 vidno, že ak dosah elektrón-elektrónovej interakcie (d) zväčšujeme pri zafixovanom $\alpha_{RG} = 0.2565$, tak BBCI dáta síce sledujú mocinný zákon $LI \propto L^{-\alpha}$,