

MATRIČNA GENERALIZACIJA DIFUZIJSKE ENAČBE: RAZISKOVANJE PREPLETA DIFUZIJE DELCEV IN TOPLOTE

JERNEJ MRAVLJE^(1,2) IN JURE KOKALJ^(3,1)

- (1) Odsek za teoretično fiziko Inštitut Jožef Stefan
(2) Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani
(3) Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo, Univerza v Ljubljani

Kadar termoelektrični pojav v trdnih snoveh ni zanemarljiv sta transporta naboja in toplote medsebojno povezana. To vpliva tudi na obravnavo difuzije in jo je v tem primeru potrebno formulirati v matrični obliki. Elemente difuzijske matrike povežemo s transportnimi koeficienti in dobimo posplošeno Nernst-Einsteinovo zvezo. Izven-diagonalni element, ki določa jakost sklopitve med difuzijo naboja in toplote, je podan z razliko med Seebeckovim koeficientom in njegovo Kelvinovo aproksimacijo.

MATRIX GENERALIZATION OF DIFFUSION EQUATION: EXPLORING THE INTERPLAY OF PARTICLE AND HEAT DIFFUSION

When the thermoelectric phenomenon in solid is not negligible, the transport of charge and heat are mutually connected. This also influences the diffusion, requiring it to be formulated in matrix form in this case. The elements of the diffusion matrix are linked to transport coefficients, resulting in a generalized Nernst-Einstein relation. The off-diagonal element, which determines the strength of coupling between charge and heat diffusion, is determined by the difference between the Seebeck coefficient and its Kelvin approximation.

1. Uvod

Difuzijo povezujemo s širokim naborom pojavov, med katerimi so najbolj poznani difuzija toplote, difuzija vodne pare ali drugega plina, in difuzija kemijskih spojin v raztopinah. Poseben primer difuzije je prenos naboja. V snoveh se naboj prenaša z mest z glede na ravnovesno vrednost presežno gostoto naboja proti mestom z manjšo gostoto. Ker nabojna difuzijska konstanta D_c karakterizira hitrost razširjanja naboja v materialu ni presenetljivo, da je neločljivo povezana z bolj znano specifično električno prevodnostjo σ . To zvezo imenujemo Nernst-Einsteinova zveza, ki se za primer nabojne difuzije glasi $\sigma = D_c \chi$. Pri tem je $\chi = dn/d\mu$ nabojna susceptibilnost, to je sprememba gostote naboja ob spremembi kemijskega potenciala. Običajno so meritve količin D_c in χ v materialih težko izvedljive in njihove vrednosti neposredno niso dostopne, v nasprotju z vrednosti σ , ki so dostopne prek meritev električne upornosti. Za primer toplotne prevodnosti κ Nernst-Einsteinova zveza velja v obliki $\kappa = D_Q c$, kjer je D_Q toplotna difuzijska konstanta in c specifična toplota. V tem primeru so v snoveh sicer eksperimentalno neposredno dostopne vse tri količine, tako κ , kot D_Q in c , kljub temu pa se zaradi prikladnosti Nernst-Einsteinova zvezo pogosto uporablja za določanje toplotne prevodnosti pri tako imenovani "bliskovni" (ang., "flash") metodi [1], ki določi toplotno difuzijsko konstanto iz meritve hitrosti širjenja toplote po lokalnem obsevanju z laserskim žarkom.

Nernst-Einsteinova zveza se uporablja tudi za primer naboja, ko prevodnost ni enostavno merljiva. Primer slednjega so nedavne meritve električnega transporta v sistemih s hladnimi atomi [2] saj je v prostorsko omejenem oblaku hladnih atomov težko ustvariti konstantne tokove, medtem ko je lažje izmeriti časovni razpad modulacije gostote atomov oz. difuzijsko konstanto.

Pri interpretaciji meritev difuzije se pojavi vprašanje, kako na izmerjeno količino vplivajo termoelektrični efekti. Vzemimo za primer meritev difuzije naboja! Pri difuziji naboja so tokovi naboja nehomogeni in ker tok naboja preko termoelektričnega efekta inducira toplotne tokove se v sistemu pojavijo gradienti temperature. Ti poženejo dodatne toplotne tokove, ki pa ponovno preko termoelektričnega efekta vplivajo na transport naboja oz. na njegovo difuzijo. Podoben pojav lahko pričakujemo tudi pri meritvah spinske difuzije v hladnih atomih [3] in pa tudi pri merjenju toplotne difuzije preko segrevanja le dela merjenca in opazovanju kako se s časom segrevajo drugi deli merjenca.

2. Fickov zakon in difuzijska enačba

Fickov zakon (Adolf Fick, 1855) je fenomenološka zveza, ki podaja linearno zvezo med tokom neke količine in njenim gradientom, ki tok poganja. V našem primeru imamo opravka z dvema sklopljenima količinama zato zveza dobi matrično obliko. Zapišimo posplošen Fickov zakon

$$\begin{pmatrix} j_n \\ j_\epsilon \end{pmatrix} = -\underline{\underline{D}} \begin{pmatrix} \nabla n \\ \nabla \epsilon \end{pmatrix}, \quad (1)$$

kjer je $\underline{\underline{D}}$ difuzijska matrika, ki podaja difuzijo naboja in energije. Količini n in ϵ sta gostoti naboja in energije. Ukvarjamo se z izotropnim sredstvom, zato lahko tokove in gradiente zapišemo v samo eni smeri, npr. x in koordinatne indekse izpustimo.¹ Tokove in gostote lahko združimo v stolpce

$$\vec{j} = \begin{pmatrix} j_n \\ j_\epsilon \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} \nabla n \\ \nabla \epsilon \end{pmatrix}, \quad (2)$$

in s tem Fickov zakon prepisemo v kompaktno obliko

$$\vec{j} = -\underline{\underline{D}}\vec{n}. \quad (3)$$

Če uporabimo še kontinuitetni enačbi za naboj $\partial_t n = -\nabla j_n$ in pa energijo $\partial_t \epsilon = -\nabla j_\epsilon$, ki veljata zato, ker sta tako naboj kot energija ohranjeni količini, dobimo difuzijsko enačbo

$$\partial_t \begin{pmatrix} n \\ \epsilon \end{pmatrix} = \underline{\underline{D}}\nabla^2 \begin{pmatrix} n \\ \epsilon \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Difuzijsko enačbo lahko rešimo v prostoru ravnih valov v formalni obliki

$$\vec{v}(t) = \exp(-\underline{\underline{D}}k^2 t)\vec{v}(0), \quad (5)$$

kjer z $\vec{v}(0)$ označimo začetno konfiguracijo oz. začetno modulacijo naboja in energije. Lahko pa difuzijsko matriko $\underline{\underline{D}}$ diagonaliziramo in časovno odvisnost zapišemo z lastnima vrednostima D_\pm in lastnima vektorjema \vec{v}_\pm kot

$$\vec{v}(t) = a_+ \vec{v}_+ e^{-D_+ k^2 t} + a_- \vec{v}_- e^{-D_- k^2 t}. \quad (6)$$

Tu sta koeficienta a_\pm podana z začetnim pogojem. V splošnem torej začetno modulacijo razstavimo v dva prispevka, ki padata z različnima časovnima konstantama.

3. Difuzijska matrika v različnih bazah

Zgoraj smo difuzijsko matriko podali v bazi gostote naboja in energije (n, ϵ) , pogosto pa je bolje uporabiti druge termodinamske količine, ki stanje enako dobro določajo. Namesto gostote naboja bi lahko uporabili kemijski potencial μ , namesto gostote energije pa temperaturo T ali pa gostoto entropije s . Za pretvarjanje med različnimi količinami (bazami) uporabimo termodinamske zveze, saj predpostavljamo, da je sistem kljub modulacijam in časovnemu razvoju ves čas v lokalnem ravnovesju.

Izrazimo spremembi $(dn, d\epsilon)$ s spremembama (dn, dT) in vpeljimo največkrat uporabljeno bazo (n, T) . V termodinamsko zvezo $d\epsilon = Tds + \mu dn$ vstavimo spremembo entropije $ds = (c_\mu/T)dT + \zeta d\mu$,

¹V primeru anizotropnega sredstva tokove in gradiente nadomestimo z 3 dimenzionalni vektorji in vsak element matrike $\underline{\underline{D}}$ z 3×3 matriko.

pri čemer $d\mu$ izrazimo še z dn in dT iz enačbe $dn = \chi d\mu + \zeta dT$.² Tako dobimo povezavo $d\epsilon = c_n dT + (\mu + T\zeta/\chi)dn$, kjer smo uporabili specifično toploto pri konstantni gostoti $c_n = c_\mu - \zeta^2 T/\chi$. Zvezi lahko zapišemo v matrični obliki

$$\begin{pmatrix} dn \\ d\epsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \mu + T\zeta/\chi & c_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dn \\ dT \end{pmatrix} = \underline{\underline{P}} \begin{pmatrix} dn \\ dT \end{pmatrix} \quad (7)$$

kjer smo definirali prehodno matriko $\underline{\underline{P}}$. Sedaj lahko zapišemo enačbo difuzije v novi bazi, torej

$$\partial_t \begin{pmatrix} n \\ T \end{pmatrix} = \underline{\underline{D}}^{(n,T)} \nabla^2 \begin{pmatrix} n \\ T \end{pmatrix}, \quad (8)$$

kjer je

$$\underline{\underline{D}}^{(n,T)} = \underline{\underline{P}}^{-1} \underline{\underline{D}}^{(n,\epsilon)} \underline{\underline{P}}. \quad (9)$$

Lastne vrednosti matrike se ob podobnostni transformaciji sicer ne spremenijo, matrični elementi pa se. Če npr. za začetno stanje uporabimo čisto nabojno modulacijo, bo nadaljnji razvoj odvisen od tega ali smo za drugo količino, ki je konstantna oz. brez modulacije, izbrali energijo ali pa temperaturo.

4. Povezava s transportnimi koeficienti in posplošena Nernst-Einsteinova zveza

V običajnih meritvah transportnih količin merimo tokove, ki jih inducirajo zunanja polja. V vektorski notaciji lahko zapišemo

$$\vec{j} = -\underline{\underline{\sigma}} \nabla \vec{\mu}, \quad (10)$$

kar razpisano označuje

$$\begin{pmatrix} j_n \\ j_q \end{pmatrix} = -\underline{\underline{\sigma}} \begin{pmatrix} \nabla \mu \\ \nabla T \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Pri tem je

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma & \alpha \\ \alpha T & \tilde{\kappa} \end{pmatrix} \quad (12)$$

matrika transportnih koeficientov: električne prevodnosti σ , mešalnega koeficienta α in toplotne prevodnosti $\tilde{\kappa}$ (ki je z običajno toplotno prevodnostjo κ , ki se meri pri pogoju, da je nabojni tok enak nič in s tem pri neničelnem gradientu kemijskega potenciala, povezana z $\kappa = \tilde{\kappa} - \alpha^2 T/\sigma$). Mešalni koeficient α je povezan s Seebeckovim koeficientom, ki podaja termoelektrični odziv $S = -\alpha/\sigma$.

Transportne zveze podajajo tokove preko gradientov potencialov, Fickov zakon pa preko gradientov gostot. V približku lokalnega ravnovesja lahko gradiente gostot izrazimo z gradienti potencialov,

$$\begin{pmatrix} \nabla n \\ T \nabla s \end{pmatrix} = \underline{\underline{\chi}} \begin{pmatrix} \nabla \mu \\ \nabla T \end{pmatrix}, \quad (13)$$

in obratno preko inverza susceptibilnostne matrike $\underline{\underline{\chi}}$. Z uporabo te zveze lahko prepisemo enačbo (11).

$$\begin{pmatrix} j_n \\ j_q \end{pmatrix} = -\underline{\underline{\sigma}} \nabla \mu = -\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{\chi}}^{-1} \begin{pmatrix} \nabla n \\ T \nabla s \end{pmatrix}. \quad (14)$$

²Uporabili smo oznake c_μ za specifično toploto pri konstantnem kemijskem potencialu, χ za nabojno susceptibilnost in ζ za mešano susceptibilnost. Količine je npr. možno zapisati tudi z odvodi velepotenciala $\Omega = \Omega(\mu, T) = \epsilon - Ts - \mu n$ ($d\Omega = -s dT - n d\mu$), kot $\chi = -(\partial^2 \Omega / \partial^2 \mu)_T = (\partial n / \partial \mu)_T$, $c_\mu / T = (\partial s / \partial T)_\mu = -(\partial^2 \Omega / \partial^2 T)_\mu$ in $\zeta = -\partial^2 \Omega / (\partial \mu \partial T) = (\partial n / \partial T)_\mu = (\partial s / \partial \mu)_T$.

Dobili smo matrično obliko Fickovega zakona, iz katere lahko določimo difuzijsko matriko kot

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{\chi}}^{-1}. \quad (15)$$

To predstavlja posplošeno Nernst-Einsteinovo relacijo med difuzijo in prevodnostjo. V tem primeru je zapisana v bazi (n, q) , kjer je q gostota toplote $dq = Tds$. Z uporabo prehodnih matrik pa lahko difuzijsko matriko povežemo z matriko transportnih koeficientov tudi v drugih bazah. Pomembna je zlasti baza (n, T) . V tej bazi difuzijska matrika zavzame sledečo obliko

$$\underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} D_c & \pm \sqrt{\frac{c_n \chi_c D_{\text{corr}} D_c}{T}} \\ \pm \sqrt{\frac{D_{\text{corr}} D_c T}{c_n \chi_c}} & \widetilde{D}_Q \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Tu so $D_c = \sigma/\chi$ znana nabojna difuzijska konstanta, $\widetilde{D}_Q = D_Q + D_{\text{corr}}$ je posplošena toplotna difuzijska konstanta, medtem ko termoelektrične mešalne efekte določa

$$D_{\text{corr}} = D_c W (S_K - S)^2. \quad (17)$$

Pri tem je $W = T\chi/c_n$ in ga lahko poimenujemo posplošeno Wilsonovo razmerje, $S_K = -(\partial\mu/\partial T)_n$ pa je Kelvinov približek za Seebeckov koeficient. Predznaka izvendiagonalnih členov sta podana s predznakom $S_K - S$. Lastne vrednosti difuzijske matrike lahko z uporabo teh količin zapišemo kot

$$D_{\pm} = \frac{D_c + \widetilde{D}_Q}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{D_c - \widetilde{D}_Q}{2}\right)^2 + D_c D_{\text{corr}}}. \quad (18)$$

5. Primeri

Pri analizi meritev se običajno mešanje in termoelektrične efekte zanemari in se difuzijo obravnava kot ali čisto nabojno ali čisto toplotno difuzijo. Taka obravnava v splošnem ni dovolj točna. V tem razdelku obravnavamo vpliv termoelektričnega mešanja v primeru difuzije naboja in pa primeru difuzije toplote, začnemo pa z obravnavo primera, ko mešalnih vplivov ni.

5.1 Difuzija za nične vrednosti termoelektričnih koeficientov

Če sklopitve med toplotnimi in nabojnimi količinami ni niti v transportnih količinah (se pravi, če je $\alpha = 0$) niti v termodinamskih količinah ($\zeta = 0$) lahko nabojno difuzijo in njeno povezavo s prevodnostjo obravnavamo ločeno od difuzije in prevodnosti toplote. Potem ločeno veljata Fickov zakon za naboj $j_n = -D_c \nabla n$ z $D_c = \sigma/\chi$ in za $j_q = -D_Q \nabla q$ z $D_Q = \kappa/c_n$ (v tem primeru velja $c_\mu = c_n$).

V matrični formulaciji je Seebeckov koeficient $S = 0$, ker je $\alpha = 0$. $\zeta = -(\partial n/\partial T)_\mu = 0$ pa narekuje, da se n ne spreminja s T pri konstantnem μ , kar po drugi strani pomeni tudi, da se μ ne spreminja s T pri konstantem n in je zato tudi $S_K = -(\partial\mu/\partial T)_n = 0$. Ker sta oba S in S_K enaka nič, je tudi $D_{\text{corr}} = 0$ po enačbi (17). Difuzijska matrika (enačba (16)) pričakovano postane diagonalna v bazi (n, T) z vrednostima D_c in D_Q na diagonalni, ki predstavljata tudi lastni vrednosti difuzijske matrike. Ravno tako, sta čisti nabojni in čisti temperaturni modulaciji lastna vektorja ali lastna načina v tem primeru.

Zanimivo je pripomniti, da podobna situacija nastopi tudi v primeru neničelnega termoelektričnega koeficienta $S \neq 0$, a le če velja Kelvinov približek in je $S = S_K$, torej podan le s termodinamskimi količinami in sipalni časi ne igrajo vloge. Tudi takrat je $D_{\text{corr}} = 0$ in je difuzijska matrika diagonalna v bazi (n, T) .

5.2 Nabojna difuzija

V splošnem $S \neq S_K$ in $D_{\text{corr}} \neq 0$, kar privede do nediagonalne difuzijske matrike in mešanja. V tem primeru imata lastna vektorja \vec{v}_{\pm} difuzijske matrike tako nabojno kot tudi temperaturno komponento in lastni vrednosti D_{\pm} odstopata od čistih D_c in D_Q .

Poglejmo si najprej primer nabojne difuzije, pri čemer imamo v začetnem stanju samo modulacijo n in nimamo modulacije T oz. je temperatura konstantna. Časovni potek je podan z enačbo (6), pri čemer moramo začetno stanje razviti po lastnih vektorjih in nato vsakemu lastnemu načinu pripisati časovni razvoj z ustrezno časovno konstanto, t.j. $\exp(-D_{\pm}k^2t)$. Torej je časovni potek daleč od enostavnega eksponentnega razpada podanega z $\exp(-D_c k^2t)$ in gre v resnici za vsoto dveh eksponentnih funkcij od katerih nobena ne ustreza difuziji s konstanto D_c .

Izjema so le kratki oz. začetni časi. Ker imamo na začetku le nabojno modulacijo brez temperaturnega gradienta, le-ta na začetku ne bo znatno vplival na razpad nabojne modulacije. To je možno opisati npr. z enačbo (5), pri kateri časovno odvisnost razvijemo za male čase, $\exp(-\underline{D}k^2t) = \underline{1} - \underline{D}k^2t + o(t^2)$. Torej bo začetni (linearen) razpad nabojne modulacije podan z elementom \underline{D}_{nn} difuzijske matrike, ki v izbrani bazi (n, T) kar enak D_c . Pri kasnejših časih in ko se oddaljimo od začetnega linearnega-v-času razpada, pa je obnašanje boljše popisano z D_{\pm} .

Potrebno se je zavedati, da smo zgoraj tako začetni pogoj kot tudi difuzijsko matriko obravnavali v bazi (n, T) . V primeru, da je začetni pogoj drugačen, npr. začetna modulacija n in homogena energija ϵ , potem lahko začetni razpad modulacije podobno kot zgoraj opišemo z $\underline{D}_{nn}^{(n, \epsilon)}$. Ker pa se pri transformaciji baze iz (n, T) v (n, ϵ) vsi elementi difuzijske matrike spremenijo, se spremeni tudi \underline{D}_{nn} in tako v tem primeru tudi začetni razpad nabojne modulacije ni podan zgolj z D_c .

Pripomnimo še, da v splošnem primeru s končnimi mešalnimi efekti, začetna čista modulacije naboja (brez gradienta temperature) v kasnejših časih inducira tudi temperaturno modulacijo. To je očitno iz enačbe (6), kjer oba lastna vektorja \vec{v}_{\pm} vsebujeta tudi temperaturno komponento.

5.3 Difuzija toplote

Tudi difuzija toplote se podobno spremeni zaradi termoelektričnih oz. mešalnih efektov. To je še posebej pomembno za meritve, kjer termično difuzijo določajo preko opazovanja časovnega poteka temperaturnega profila po začetnem lokalnem segrevanju merjenca. Med takšne metode spada standardna "bliskovna" metoda [1], kjer na eni strani merjenec segrejejo in opazujejo koliko časa je potrebnega, da se druga stran segreje za polovico do končne temperature. Takšna metoda je tudi metoda, pri kateri izmenično segrevajo manjšo površino merjenca, npr. z izmeničnim laserskim obsevanjem, in merijo časovni potek temperature nekoliko stran od mesta segrevanja [4]. Pri tej metodi določijo termično difuzijsko konstanto preko faznega zamika temperaturnega profila.

Tudi temperaturna modulacija in njen razpad oz. difuzija se obnaša podobno kot zgoraj obravnavana nabojna modulacija. Tako na začetku vzpostavljena čista temperaturna modulacija s homogeno gostoto naboja razpada po enačbi (6), torej je začetno modulacijo potrebno razstaviti na dve lastni komponenti difuzijske matrike in vsaka komponenta potem pada s svojo časovno konstanto.

Ravno tako kot pri nabojni modulaciji, je tudi pri temperaturni modulaciji začetni razpad pri kratkih časih podan z elementom matrike \underline{D}_{TT} . Zanimivo je, da v primeru začetnega pogoja brez gradienta gostote naboja, temperaturna modulacija začne padati s časovno konstanto podano z $\tilde{D}_Q = D_Q + D_{\text{corr}}$, ki torej za D_{corr} odstopa od običajne termične difuzije $D_Q = \kappa/c_n$. Začetni pogoj bi lahko bil tudi drugačen, npr. da bi namesto homogene gostote naboja imeli homogen kemijski potencial μ . V tem primeru bi bilo priročno uporabiti bazo (μ, T) namesto (n, T) , kar ponovno v celoti spremeni difuzijsko matriko in tudi element \underline{D}_{TT} . Le-ta bi bil v tem primeru enak $D_{TT}^{(\mu, T)} = D_Q + T\chi D_c S(S - S_K)/c_n$, kar ponovno odstopa od preprostega $D_Q = \kappa/c_n$ s popravkom,

ki je lahko pozitiven ali negativen. Za razliko je popravek v bazi (n, T) vedno pozitiven ($D_{\text{corr}} > 0$).

Torej toplotna difuzija v prisotnosti mešalnih efektov niti za kratke čase in ob npr. zanemarljivih nabojskih modulacijah ne ustreza D_Q in ima popravke, ki so odvisni od začetnih pogojev. Pri daljših časih pa je odstopanje od opisa s čisto temperaturno modulacijo in eno difuzijsko konstanto D_Q lahko še znatnejše, saj časovni potek določajo lastni načini difuzijske matrike z dvema časovnima konstantama.

6. Diskusija

V nedavnem članku [5] smo formalizem, kot je predstavljen zgoraj, uporabili na primeru konkretnih transportnih koeficientov, ki smo jih izračunali za dvodimenzionalen Hubbardov model, ki opisuje eksperimente s hladnimi atomi na optičnih rešetkah. Opazili smo, da so efekti mešanja difuzije zaradi zmernih vrednosti D_{corr} razmeroma majhni v eksperimentalnem režimu visokih temperatur. Ali lahko mešalni efekti kdaj postanejo pomembni?

Učinki mešanja pri difuziji so podani z vrednostjo $D_{\text{corr}}/D_c = W(S - S_K)^2$. Kako se ta vrednost obnaša pri različnih vrednostih T ? Pri visokih T je $W \sim T^2$, $S - S_K \sim 1/T$, zato gre D_{corr}/D_c proti konstanti. Ker je tudi D_c pri visokih T konstanta, to pomeni, da je D_{corr} pri visokih T konstanten. V nizko-temperaturnem režimu velja obnašanje značilno za Fermijeve tekočine. Tam velja $\chi_c \sim$ konstanten in $c_n = \gamma T$, zato je $W \sim$ konstanten. Tako S kot S_K sta sorazmerna s Tm^*/m (kjer je m^*/m renormalizacija kvazidelcev), vendar z različnimi koeficienti, kar narekuje $S_K - S \sim T$. Zato pričakujemo, da je $D_{\text{corr}}/D_c \sim T^2$ in mešanje postane nepomembno v režimu nizkih temperatur.

Ali lahko D_{corr}/D_c kdaj postane velik? Velike vrednosti W lahko povečajo termoelektrični učinek. Na primer divergenca χ_c v bližini fazne separacije, do katere lahko pride v nekaterih anti-feromagnetih [6, 7] ali v Hundovih kovinah [8], bi lahko pomembno povečala W in D_{corr} .

Naj omenimo še, da je obravnavo možno razširiti z vključitvijo spinskega transporta in spinske difuzije in opisom z matriko 3×3 . Možna je tudi vpeljava relaksacijskega časa tokov, ki igra znatnejšo vlogo pri končnih valovnih vektorjih k in se s tem difuzijska enačba prepíše v enačbo sklopljenih harmonskih oscilatorjev [5]. Ta zanimivo dopušča tudi resonančne efekte.

Tukaj smo se osredotočili le na elektronske prispevke in predvsem pri termični difuziji v materialih lahko pomembno vlogo igrajo tudi prispevki rešetke oz. fononov. Posledice naše obravnave so tako pomembne zlasti za primere, kjer je takšen prispevek majhen, npr. v materialih kjer je glavni prispevek k toplotni prevodnosti elektronskega izvora ali v sistemih s hladnimi atomi, kjer praviloma efektov rešetke ni.

LITERATURA

- [1] W. J. Parker, R. J. Jenkins, C. P. Butler in G. L. Abbott, *Flash Method of Determining Thermal Diffusivity, Heat Capacity, and Thermal Conductivity*, Journal of Applied Physics **32**, 1679 (1961).
- [2] P. T. Brown, D. Mitra, E. Guardado-Sanchez, R. Nourafkan, A. Reymbaut, C.-D. Hebert, S. Bergeron, A.-M. S. Tremblay, J. Kokalj, D. A. Huse, P. Schauss in W. S. Bakr, *Bad metallic transport in a cold atom Fermi-Hubbard system*, Science **363**, 379 (2019).
- [3] M. A. Nichols, L. W. Cheuk, M. Okan, T. R. Hartke, E. Mendez, T. Senthil, E. Khatami, H. Zhang in M. W. Zwierlein, *Spin Transport in a Mott Insulator of Ultracold Fermions* Science **363**, 383 (2019).
- [4] J. Zhang, E. M. Levenson-Falk, B. J. Ramshaw, D. A. Bonn, R. Liang, W. N. Hardy, S. A. Hartnoll in A. Kapitulnik, *Anomalous thermal diffusivity in underdoped YBa₂Cu₃O₆*, Proc. Natl. Acad. Sci. **114**, 5378 (2017).
- [5] M. Ulaga, J. Mravlje in J. Kokalj, *Thermoelectric effect on diffusion in the two-dimensional Hubbard model* Phys. Rev. B **108**, 155118 (2023).
- [6] V. J. Emery in S. Kivelson, *Frustrated electronic phase separation and high-temperature superconductors*, Physica C: Superconductivity **209**, 597 (1993).
- [7] J. Kokalj, *Bad-metallic behavior of doped Mott insulators*, Phys. Rev. B **95**, 041110 (2017).
- [8] L. de'Medici, *Hund's Induced Fermi-Liquid Instabilities and Enhanced Quasiparticle Interactions*, Phys. Rev. Lett. **118**, 167003 (2017).