

Utjecaj anizotropije trodimenzionalne slobodnoelektronske disperzije na gustoću stanja sustava izloženog periodičkom potencijalu

Seminar iz kolegija “Samostalni seminar iz istraživanja u fizici”

Autor: Marin Spaić

Mentor: izv. prof. dr. sc. Danko Radić

Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

24. siječnja 2019.

- Elektroni u metalima → Fermijeva tekućina čija se niskoenergetska pobuđenja mogu shvatiti kao kvazičestice s vlastitom disperzijskom relacijom $\epsilon(\vec{p})$.
- $\epsilon(\vec{p})$ uključuje efekte kristalne rešetke. → Općenito periodična, višeznačna funkcija u recipročnom prostoru (shema ponovljene zone).
- Sastoji se od pojasa, koji se mogu i ne moraju preklapati. Svaki pojas je identificiran svojom disperzijom.
- Pobuđenja kristalne rešetke, fononi, narušit će translacijsku simetriju kristala te interagirati s elektronima. → Interakcija može dovesti do faznog prijelaza (npr. konvencionalni supravodiči).
- Strukturalne nestabilnosti?

Peierlsova nestabilnost i Kohnova anomalija

- Rudolf Peierls (1930.) → U jednodimenzionalnim sustavima postoji sklonost ka stvaranju statičke periodičke modulacije gustoće naboja popraćene statičkom deformacijom kristalne rešetke s periodom $q = 2k_F$.
- Usko povezano s Kohnovom anomalijom. → "Mekšanje" fononskog moda valnog vektora $2k_F$.
- Nestabilnost možemo "naslutiti" u 2. redu računa smetnje.
- (Pojednostavljeni) Frolichov hamiltonijan elektron-fonon interakcije:

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q + \frac{g}{\sqrt{L}} \sum_{kq} c_{k+q}^\dagger c_k (a_q + a_{-q}^\dagger)$$

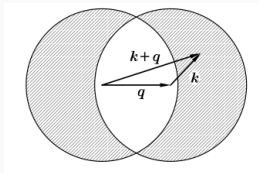
- "Nesmetano" stanje → fonon + popunjeno Fermijevo more →

$$|1q\rangle = a_q^\dagger |FS\rangle$$

- Interakcije će "renormalizirati" energiju fonona:

$$\hbar\omega_q^{(1)} = \hbar\omega_q + \sum_k \frac{|\langle k, k+q | H_{int} | 1q \rangle|^2}{\hbar\omega_q - (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)}$$

- Međustanja → elektron-šupljina parovi $|k+q, k\rangle = c_{k+q}^\dagger c_k |FS\rangle$
- Područje sumiranja: $|k| < k_F$,
 $|k+q| > k_F \rightarrow$ Broj međustanja najveći za $q = 2k_F$.



- Zanemarivanje fononske energije u nazivniku:

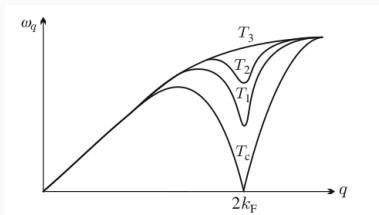
$$\hbar\omega_q^{(1)} = \hbar\omega_q - g^2 \sum_k \frac{f_0(k)(1 - f_0(k+q))}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k}$$

- Logaritamska divergencija za $q = 2k_F$. Indikacija moguće nestabilnosti (neperturbativan efekt).

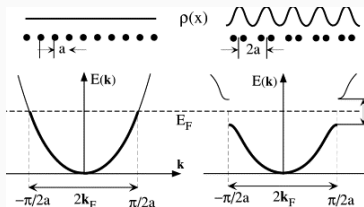
- Precizniji račun (teorija linearnog odziva):

$$k_B T_c = 2.28 \epsilon_F e^{-\frac{\hbar \omega(2k_F)}{g^2 \rho(\epsilon_F)}}$$

- Renormalizirana frekvencija za $q = 2k_F$ će potpuno iščeznuti na konačnoj temperaturi.

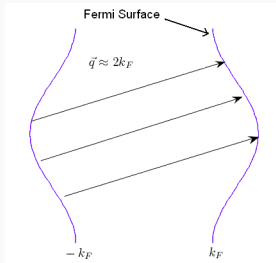


- Na T_c za fononski mod $q = 2k_F$ postane "mekan". → Makroskopsko zaposjednuće! → Statička deformacija!
- $2k_F$ novi primitivni vektor recipročne rešetke. → Otvaranje procjepa na Fermijevoj energiji. → Spuštanje energije vrpce (na niskim temperaturama).



Valovi gustoće naboja (CDW)

- Nema faznih prijelaza u striktno jednodimensionalnim materijalima. Fluktuacije uvijek nadvladaju tendenciju ka uređenju.
- Kvizijednodimensionalni materijali (npr. $NbSe_3$) \rightarrow Fluktuacije ograničene 3D uređenjem 1D lanaca. \rightarrow Valovi gustoće naboja (CDW).
- Osnovno stanje slomljene simetrije karakterizirano kompleksnim parametrom uređenja $\Psi = \Delta e^{i\phi}$, gdje je Δ energetski procjep otvoren na Fermijevoj energiji zbog periodičke modulacije, a ϕ određuje poziciju vala gustoće u odnosu na pozadinsku rešetku.
- Uobičajeni mehanizam stabilizacije je gniježđenje Fermijeve plohe (eng. nesting).
- Postoje međusobno (približno) paralelni dijelovi koji se mogu preslikati jedan u drugog jedinstvenim vektorom \vec{q} .



Topološka rekonstrukcija Fermijeve plohe

- CDW faza opažena i u materijalima u kojima nema gniježđenja (npr. pod-dopirani kupratni supravodiči). → Potencijalni novi mehanizam: Topološka rekonstrukcija Fermijeve plohe.
- Okvirno, prilikom pojave CDW-a Fermijeva ploha promijeni topologiju (npr. zatvorena → otvorena) te tako dođe do smanjenja energije vrpce koja kompenzira elastičnu energiju deformacije.
- Za sada istraženo samo za slučaj 2D izotropne vrpce:

$$\epsilon(p_x, p_y) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2)$$

- Hamiltonijan:

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q + \frac{g}{\sqrt{A}} \sum_{kq} c_{k+q}^\dagger c_k (a_q + a_{-q}^\dagger)$$

- Statička deformacija u smjeru osi $x \rightarrow$ Fononski mod \vec{Q} makroskopski zaposjednut. \rightarrow Aproksimacija srednjeg polja:

$$H_{MF} = \sum_k [\epsilon_k c_k^\dagger c_k + \Delta e^{i\phi} c_{k+Q}^\dagger c_k \Delta e^{-i\phi} c_{k-Q}^\dagger c_k] + \frac{A\hbar\omega_Q}{2g^2} \Delta^2$$

- Zamijenili smo fononske operatore njihovim očekivanim vrijednostima ($\sqrt{A}\Delta e^{i\phi} = g(\langle a_Q \rangle + \langle a_{-Q}^\dagger \rangle)$).
- Preostali elektronski hamiltonijan dijagonaliziramo kanonskom transformacijom. \rightarrow Nova disperzija:

$$\epsilon_{\pm}(\vec{p}) = \frac{\epsilon_1(\vec{p}) + \epsilon_2(\vec{p})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1(\vec{p}) - \epsilon_2(\vec{p})}{2}\right)^2 + \Delta^2},$$

gdje je \vec{p} impuls u novoj Brillouinovoj zoni, pomaknutoj za $Q/2$ u smjeru p_x , a $\epsilon_{1,2}$ originalne disperzije pomaknute za $\pm Q/2$:

$$\epsilon_{1,2} = \frac{1}{2m} ((p_x \pm Q/2)^2 + p_y^2).$$

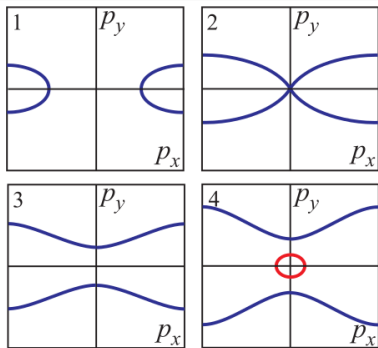
- Pomoću skaliranja uvodimo bezdimenzionalne varijable:

$$e = \frac{2m\epsilon}{(Q/2)^2}, \quad \delta = \frac{2m}{(Q/2)^2}\Delta, \quad (x, y) = \frac{2}{Q}(p_x, p_y)$$

- Disperzija u bezdimenzionalnim varijablama:

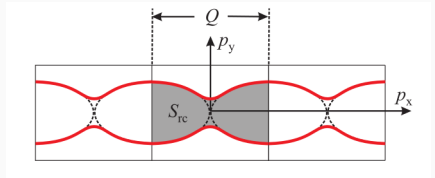
$$e_{\pm}(x, y) = 1 + x^2 + y^2 \pm \sqrt{4x^2 + \delta^2}$$

- Donja vrpca e_- (plava boja) ima sedlenu točku u $x = y = 0$ na energiji $e = 1 - \delta$.
- Gornja vrpca e_+ (crvena boja) ima minimum u $x = y = 0$ energije $e = 1 + \delta$.
- Na tim energijama dolazi do promjene topologije ekvienergetskih linija.



Stabilizacija CDW-a

- Periodička modulacija valnog vektora $Q = 2k_F$ dovest će Fermijeve plohe u dodir i ukloniti degeneraciju u točkama dodira. → Topološka rekonstrukcija zatvorene Fermijeve plohe u otvorenu.



- Povećava se površina Fermijevog mora, a samim time i broj stanja. Očuvanje broja elektrona \Rightarrow Smanjuje se Fermijeva energija (kemijski potencijal).

$$\int_{\epsilon(p_x, p_y) = \epsilon_F} dp_x dp_y = \pi p_{F0}^2$$

- Teorem malih inkremenata (termodinamika) \Rightarrow Smanjuje se energija čitave vrpce.

- Kvantitativno, traženje optimalnog Q koji će minimizirati energiju vrpce vodi nas na jednakost

$$\epsilon_F = \epsilon_{F0}$$

Ovaj uvjet predstavlja granični slučaj argumenta od prije. → Teorem malih inkremenata nije konkluzivan.

- Kombinirajući ovaj uvjet s uvjetom očuvanja broja elektrona

$$\int_{\epsilon(p_x, p_y) = \epsilon_F} dp_x dp_y = \pi p_{F0}^2,$$

može se pokazati da razvoj ukupne energije (vrpca + rešetka) po (bezdimezionalnom) parametru uređenja ima oblik

$$\frac{E_{CDW}}{E_0} = \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_c} \right) \delta^2 + \frac{1}{\pi} \delta^3 + O(\delta^{\frac{7}{2}}),$$

gdje je $\delta = \Delta/\epsilon_{F0}$ bezdimezionalni parametar uređenja, a $\lambda = mg^2/2\pi\hbar^3\omega_Q$ bezdimezionalna konstanta vezanja.

- Kritična vrijednost konstante vezanja $\lambda_c = (1 + 2/\pi)^{-1} \rightarrow$ Stabilizacija CDW-a moguća za $\lambda > \lambda_c$.

Anizotropna trodimenzionalna disperzija

- Istraživanje mehanizma topološke rekonstrukcije zahtijeva uvid u gustoću stanja sustava podvrgnutog peridičkoj modulaciji.
- Najčešće nemamo striktno 2D sustav nego jako anizotropne 3D sustave. → Računamo gustoću stanja 3D anizotropnog sustava.
- Inicijalna disperzija:

$$\epsilon(\vec{p}) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + ap_y^2 + bp_z^2)$$

→ bezdimenzionalni parametri anizotropije a i b

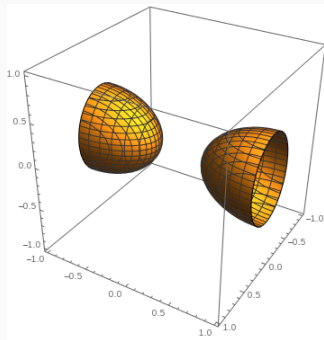
- Uključivanje periodičke modulacije valnog vektora \vec{Q} u smjeru osi x i jakosti Δ modificira disperziju:

$$\epsilon_{\pm} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + ap_y^2 + bp_z^2 + (Q/2)^2 \pm \sqrt{(p_x Q)^2 + (2m\Delta)^2})$$

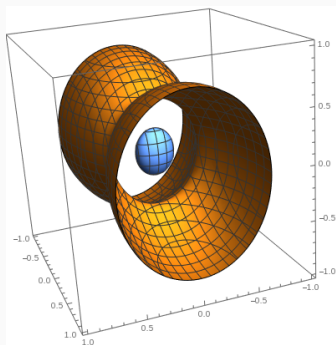
- Radi jednostavnosti, opet uvodimo bezdimenzionalne varijable (skaliranje od prije):

$$e_{\pm}(x, y, z) = x^2 + ay^2 + bz^2 + 1 \pm \sqrt{4x^2 + \delta^2}$$

- Disperzija donje vrpce e_- ima sedlenu točku za $e = 1 - \delta$ u $x = y = z = 0$.
- Za $e < 1 - \delta$ plohe konstantne energije su zatvoreni "elipsoidi".
- Za $e > 1 - \delta$ plohe konstantne energije postaju otvorene.



- Gornja vrpca ima minimum na energiji $e = 1 + \delta$ pa se za energije $e > 1 + \delta$ pojavljuje i topološki nepovezani "džep" u plohi konstantne energije koji će davati odvojeni doprinos gustoći stanja.



Gustoća stanja

- Općenita formula $\rightarrow g(\epsilon) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{S(\epsilon)} \frac{dS}{|\nabla_k \epsilon(k)|} \rightarrow$ Integrira se po plohi konstantne energije. \rightarrow Uzimamo da su p_x, p_y nezavisne varijable, a p_z promatramo kao njihovu funkciju.
- Element površine možemo izraziti kao:

$$dS = \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_y}\right)^2} dp_x dp_y.$$

- S obzirom da integriramo po plohi konstantne energije možemo pisati:

$$d\epsilon = \frac{\partial \epsilon}{\partial p_x} dp_x + \frac{\partial \epsilon}{\partial p_y} dp_y + \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} dp_z = 0.$$

- Koristeći ovaj izraz te tretirajući p_z kao zavisnu varijablu, može se pokazati da vrijedi:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial p_x} = -\frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \frac{\partial p_z}{\partial p_x}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial p_y} = \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \frac{\partial p_z}{\partial p_y}$$

$$\Rightarrow |\nabla_k \epsilon(k)| = \hbar \left| \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \right| \sqrt{1 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_y}\right)^2}$$

- Formula za gustoću stanja se pojednostavljuje:

$$g(\epsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \left| \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \right|^{-1} dp_x dp_y$$

Kada se izračuna derivacija i ponovno uvedu bezdimenzionalne varijable \rightarrow

$$g(e) = \frac{mQ}{(2\pi\hbar)^3 b} \int \int |z|^{-1} dx dy$$

- Dva doprinosa:

$$g(e) = g^+(e) + g^-(e)$$

- Prvo računamo $g^-(e)$. Invertiranje disperzijske relacije daje:

$$|z^-| = \sqrt{\frac{e - 1 - x^2 - ay^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2}}{b}}$$

$$g^-(e) = \frac{8mQ}{(2\pi\hbar)^3 \sqrt{b}} \int_{x_c^-(e)}^1 dx \int_0^{y_c(x)} dy \frac{1}{\sqrt{f^-(x; e) - ay^2}}$$

gdje smo uveli pokratu $f^-(x; e) = e - 1 - x^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2}$.

- Za $e < 1 - \delta$ donja granica x-integracije dana je rješenjem jednadžbe

$$e - 1 - x_c^-(e)^2 + \sqrt{4x_c^-(e)^2 + \delta^2} = 0$$

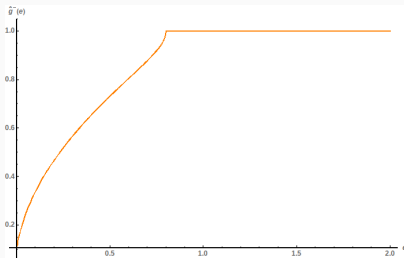
Za $e \geq 1 - \delta$ ploha konstantne energije postoje otvorena, pa donja granica postaje 0.

Granicu y-integracije dobivamo invertiranjem uvjeta $z^- = 0$ što nam daje:

$$y_c(x; e) = \sqrt{\frac{f^-(x; e)}{a}}$$

- Supstitucijom $\sqrt{\frac{a}{f(x; e)}} y = z$ integral po y postaje tablični \rightarrow

$$g^-(e) = \frac{mQ}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{[1 - x_c^-(e)]}{\sqrt{ab}}$$



- Računamo gustoću stanja za gornju vrpcu:

$$g^+(e) = \frac{8mQ}{(2\pi\hbar)^3\sqrt{b}} \int_0^{x_c^+(e)} dx \int_0^{y_c(x)} dy \frac{1}{\sqrt{f^+(x; e) - ay^2}}$$

gdje smo opet uveli pokratu $f^+(x; e) = e - 1 - x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2}$.

- Za $e \geq 1 + \delta$, $x_c^+(e)$ dobivamo kao rješenje jednadžbe

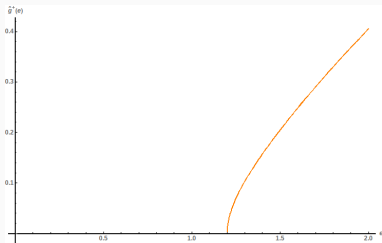
$$e - 1 - x_c^+(e)^2 - \sqrt{4x_c^+(e)^2 + \delta^2} = 0,$$

dok je gornja granica y-integracije:

$$y_c(x; e) = \sqrt{\frac{f^+(x; e)}{a}}.$$

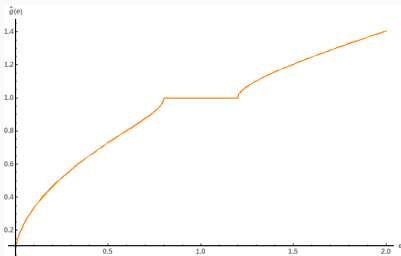
- Supstitucijom $\sqrt{\frac{a}{f(x; e)}}y = z$ integral po y opet postaje tablični pa preostaje \rightarrow

$$g^+(e) = \frac{mQ}{2\pi^2\hbar^3} \frac{x_c^+(e)}{\sqrt{ab}}$$



- Ukupnu gustoću stanja dobivamo jednostavnim zbrajanjem:

$$g(e) = \frac{mQ}{2\pi^3\hbar^3} \frac{[1 - x_c^-(e) + x_c^+(e)]}{\sqrt{ab}}$$



- Točke u kojima dolazi do topološke rekonstrukcije plohe konstantne energije nazivamo Lifshitzove točke.
- Gustoća stanja je klase C^0 u čitavom rasponu energija. Međutim, u Lifshitzovim točkama dolazi do loma (gustoća stanja nije C^1) te između njih gustoća stanja naglo poprima konstantnu vrijednost (kao da se radi o 2D kvadratičnoj disperziji).

- Singularne točke u skladu s Van Hoveovom klasifikacijom:
 - Donja Lifshitzova točka ($e_L^- = 1 - \delta$) je sedlena točka donjeg pojasa
→ Van Hove predviđa:

$$g^-(e) = \begin{cases} A - B\sqrt{e_L^- - e}, & e < e_L^- \\ A + O(e - e_L^-), & e > e_L^- \end{cases}$$

⇒ "Objašnjava" zanimljivo povećanje nagiba gustoće stanja neposredno prije donje Lifshitzove točke.

- Gornja Lifshitzova točka $e_L^+ = 1 + \delta$ je minimum gornje vrpce.
→ Van Hove predviđa:

$$g^+(e) = \begin{cases} 0, & e < e_L^+ \\ \sqrt{e - e_L^+}, & e > e_L^+ \end{cases}$$

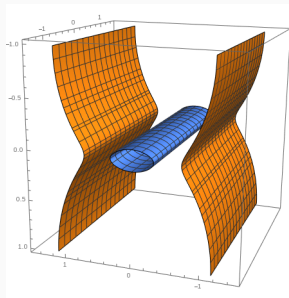
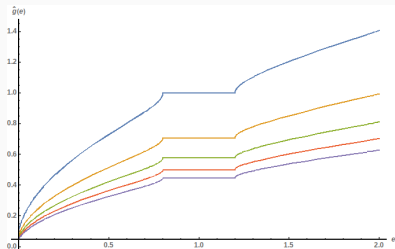
- Limes $\delta \rightarrow 0 \rightarrow$ Lifshitzove točke se približavaju. U konačnici, potpunim gašenjem potencijala ($\delta = 0$) dobivamo:

$$g(\epsilon) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{\epsilon},$$

što je uobičajeni rezultat za slobodni elektronski plin u 3 dimenzije.

Utjecaj anizotropije

- Parametri anizotropije a i b ulaze u gustoću stanja preko faktora \sqrt{ab} u nazivniku.
- Nema kvalitativne promjene, samo skaliranje!
- Račun nije dobar u granici maksimalne anizotropije ($a = 0$ ili $b = 0$).
- Disperzija postaje egzaktno dvodimenzionalna.
- Plohe konstantne energije (u slučaju $a = 0$) postanu neograničene u y smjeru.

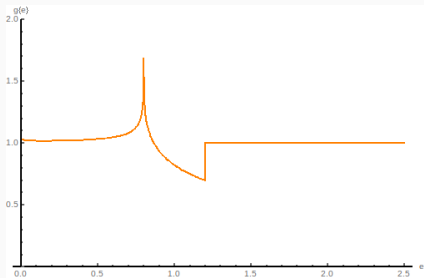


- Diisperzija ne ovisi o $p_y \rightarrow$ računamo integral na konačnom rasponu $p_y \rightarrow$ gustoća stanja po jedinici p_y

$$\Rightarrow \frac{g^\pm(e)}{\Delta k_y g^{(0)}} = \frac{2}{\pi} \int \frac{dx}{\sqrt{e-1-x^2} \mp \sqrt{4x^2 + \delta^2}},$$

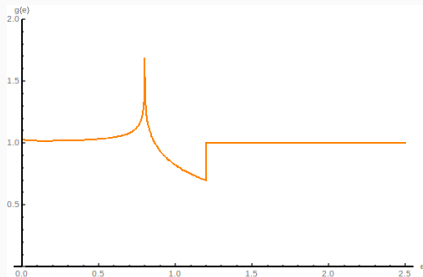
\rightarrow normalizacija konstantnom gustoćom stanja za dvodimenzionalni slobodni elektronski plin $g^{(0)} = \frac{m}{\pi \hbar^2}$

- Ovaj integral rješavamo numerički sa istim granicama kao i prije.
- Kvalitativno drukčije od slučaja konačne anizotropije.
- "Singularno" ponašanje s obzirom na anizotropiju posljedica promjene poretka "limesa" i integracije!



- Gustoća stanja naglo divergira kad energija dođe do donje Lifshitzove točke ($e_L^- = 1 - \delta$)
→ Van Hoveov singularitet logaritamskog tipa

$$g(e) \sim \ln \left| 1 - \frac{e}{e_L^-} \right|$$



- Područje između Lifshitzovih točki gdje je gustoća stanja značajno smanjena nazivamo pseudoprocjep (pseudogap).
- Ukoliko se Fermijeva energija sustava nalazi između Lifshitzovih točki, pojava vala gusotće naboja "prebacit" će dio elektrona u stanja niže energije (u skladu s raspodjelom stanja po energiji) pa će tako doći do značajnog smanjenja energije elektronskog podsustava.
→ Stabilizacija CDW-a!

- A priori smo očekivali da će, povećavanjem anizotropije, trodimenzionalna gustoća stanja kontinuirano prelaziti u dvodimenzionalnu.
- Ispostavilo se da je gustoća stanja u tri dimenzije kvalitativno različita od one u dvije dimenzije, bez obzira na anizotropiju.
- U tri dimenzije područje između Lifshitzovih točki nije tako značajno osiromašeno stanjima kao u dvije dimenzije → Robustnost mehanizma topološke rekonstrukcije?
- Provjera zahtijeva detaljnu energetska "bilancu" i elektronskog i fononskog podsustava!

Hvala na pažnji!