Elektron-fononsko međudjelovanje

« Fizika čvrstog stanja »

Ivo Batistić

Fizički odsjek, PMF
Sveučilište u Zagrebu

predavanja 2014/2015 (zadnja inačica 5. svibnja 2016.)

Pregled predavanja

Elektron-fononsko međudjelovanje u metalima

Elektron-fononsko vezanje u TBA

Elektron-fononsko u ionskim kristalima

Prošireni jellium model

Kohnova anomalija

Peierlsova nestabilnost

Međudjelovanje elektrona preko fonona

Elektron-fononsko međudjelovanje u metalima

Kulonsko međudjelovanje

Kulonska energija međudjelovanja:

$$H_{int} = \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} \right] + \left[\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] + \left[\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \right]$$

prikazana preko Fourijerovog razvoja:

$$H_{int} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{e^2}{2\epsilon_0 q^2} \left[2\rho^i_{\vec{q}}\, \rho_{-\vec{q}} + (\rho_{\vec{q}}\, \rho_{-\vec{q}} - N) + (\rho^i_{\vec{q}}\, \rho^i_{-\vec{q}} - Z^2 N_i) \right]$$

gdje su:

$$\rho_{\vec{q}} = \sum_i e^{-\imath \vec{q}\cdot\vec{r}_i} \qquad \text{(elektronska gustoća)}$$

$$\rho^i_{\vec{q}} = \sum_i Z_i\, e^{-\imath \vec{q}\cdot\vec{R}_i} \qquad \text{(ionska gustoća)}$$

$$Z^2 N_i = \sum_i Z_i^2 \qquad \text{(broj iona i prosječni kvadrat } Z_i)$$

Fourijerove komponente elektronske i ionske gustoće.

Kulonsko međudjelovanje

$$H_{int} = \sum_{\vec{q}\neq 0} \frac{e^2}{2\epsilon_0 q^2}\left[2\rho^i_{\vec{q}}\,\rho_{-\vec{q}} + \left(\rho_{\vec{q}}\,\rho_{-\vec{q}} - N\right) + \left(\rho^i_{\vec{q}}\,\rho^i_{-\vec{q}} - Z^2 N_i\right)\right]$$

- Sumira se samo po valnim brojevima osim $\vec{q} = 0$. Član $\vec{q} = 0$ se krati zbog neutralnosti sustava.
- Elektron-elektron i ion-ion međudjelovanje sadrže dijelove koji se brinu da nema samo-međudjelovanja čestica.

Zasjenjivanje ionskog međudjelovanja

$$H_{int} = \sum_{\vec{q}\neq 0} \frac{e^2}{2\epsilon_0 q^2} \left[2\rho^i_{\vec{q}}\,\rho_{-\vec{q}} + (\rho_{\vec{q}}\,\rho_{-\vec{q}} - N) + (\rho^i_{\vec{q}}\,\rho^i_{-\vec{q}} - Z^2 N_i) \right]$$

- Prvi dio izraza (plava boja) predstavlja međudjelovanje elektrona i iona. Ioni stvaraju vanjski potencijal kojem će se slobodni elektroni prilagoditi i zasjeniti ga. U teoriji linearnog odziva međudjelovanje elektrona i iona dovodi do zasjenjivanja ion-ion međudjelovanja ali i elektron-elektron međudjelovanja.
- Drugi dio izraza (crvena boja) je međudjelovanje elektrona. Ono se može uzeti obzir u RPA (najdivergentniji doprinosi u svim redovima računa smetnje).
- Efekt zasjenjivanja opisuje se dielektričnom funkcijom:

$$\frac{e^2}{\epsilon_0\, q^2} \longrightarrow \frac{e^2}{\epsilon(\vec{q},\omega)\, q^2} \approx \frac{e^2}{\epsilon(\vec{q},0)\, q^2}$$

Zasjenjivanje ionskog međudjelovanja

Kao konačni rezultat se dobiva zasjenjeno ionsko međudjelovanje:

$$H_{int} \longrightarrow \sum_{\vec{q}\neq 0} \frac{e^2}{2\epsilon(\vec{q},0)q^2}(\rho^i_{\vec{q}}\,\rho^i_{-\vec{q}} - Z^2 N_i) + H_{el-el}$$

- Ioni međudjeluju zasjenjenim kulonskim silama. Ovo zasjenjeno kratkodosežno ionsko međudjelovanje dovodi do akustičkih (i optičkih) fononska titranja rešetke.
- Ako zasjenjenje (dielektrična funkcija) uzima u obzir i međudjelovanje elektrona kroz RPA, npr., tada se dobiva plazmonsko kolektivno gibanje elektronske gustoće i efektivni elektroni koji međudjeluju kratkodosežnim silama.

Elektron-fononsko međudjelovanje

Što ako ione izvučemo iz ravnotežnog položaja?

Gustoća iona se mijenja:

$$\rho^i_{\vec{q}} \longrightarrow \sum_i Z\, e^{-\imath\vec{q}\cdot(\vec{R}_i+\vec{u}_i)} \approx \rho^i_{\vec{q}} - \overbrace{\imath\vec{q}\cdot Z \underbrace{\left(\sum_i e^{-\imath\vec{q}\cdot\vec{R}_i}\, \vec{u}_i\right)}_{=\vec{u}_{\vec{q}}}}^{\delta\rho^i_{\vec{q}}}$$

- Promjena ionske gustoće naboja inducirat će promjenu elektronske gustoće.
- Ovaj efekt nije uračunat ni u kratkodosežnom ionskom međudjelovanju, a niti u efektivnom elektronskom međudjelovanju.
- Efekt se uzima u obzir kroz dodatni hamiltonijan koji je linearno ovisan o deformaciji rešetke. Ovakav hamiltonijan nazivamo **elektron-fononsko vezanje** (međudjelovanje).

Elektron-fononsko međudjelovanje

Do međudjelovanje elektrona i fonona može se doći polazeći od početnog izraza za međudjelovanje elektrona i iona, te izdvajajući dio koji opisuje vezanje elektrona i deformirane rešetke:

$$H_{el-ph} = -\sum_{\vec{q}\neq 0} \frac{e^2}{\epsilon(\vec{q},0)q^2}\, \rho_{-\vec{q}}\, \delta\rho^{i}_{\vec{q}}$$

gdje je:

$$\begin{aligned} \delta\rho^{i}_{\vec{q}} &= -\imath Z\,(\vec{q}\cdot\vec{u}_{\vec{q}}) \\ &= -\imath Z\,(\vec{q}\cdot\vec{e}_{\vec{q}})\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}}\,(a_{\vec{q}} + a^{\dagger}_{-\vec{q}}) \end{aligned}$$

Napomena: U metalima poremećena ionska gustoća naboja međudjeluje s elektronima zasjenjenim kulonskim silama.

Elektron-fononsko međudjelovanje

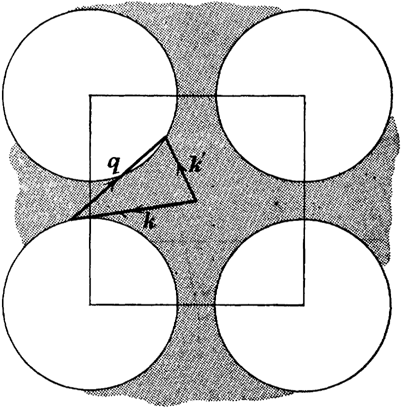
Elektron-fononsko međudjelovanje moguće je napisati u poopćenom obliku pomoću operatora stvaranja i poništenja:

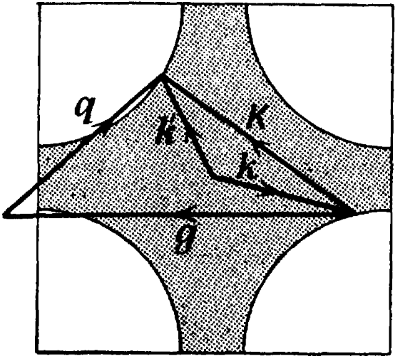
$$H_{el-ph} \quad = \quad \sum_{\vec{q},\vec{k},\sigma} g(\vec{k},\vec{q})\ (a_{\vec{q}} + a^{\dagger}_{-\vec{q}}) c^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} c_{\vec{k},\sigma}$$

gdje je $g(\vec{k},\vec{q})$ konstanta koja opisuje vezanja elektrona i fonona. U našem izvodu ona samo ovisi od $\vec{q}$. Općenito $g(\vec{k},\vec{q})$ ovisi i o impulsu elektrona. Vrijedi: $g(\vec{k}+\vec{q},-\vec{q})^{\star}$ = $g(\vec{k},\vec{q})$.

- Hamiltonijan elektron fononskog međudjelovanja sadrži dva člana koja opisuju dva moguća procesa.
- U tim procesima elektron valnog broja $\vec{k}$ se raspršuje u elektronsko stanje valnog broja $\vec{k}+\vec{q}$ i pri tome dolazi do poništenja jednog fonon valnog broja $\vec{q}$ ili do stvaranja jednog fonona valnog broja -$\vec{q}$.

Preklopni procesi





Proces raspršenja elektrona i fonona može dovesti elektron u stanje valnog broja izvan prve Brillouinove zone, pa je njegov valni broj potrebno vratiti nazad (preklopiti) u 1BZ. Ovakvi procesi se nazivaju **preklopni** procesi (ili Umklapp-procesi, U-procesi). Procesi u kojima valni broj elektrona ostaje unutar prve Brillouinove zone nazivaju se normalni procesi (ili N-procesi).

Elektron-fononsko vezanje u TBA

Elektron-fononsko vezanje u TBA

U aproksimaciji čvrste veze elektronsko gibanje opisano je hamiltonijanom:
$$H_{el} = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij}(c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i)$$

gdje $\langle ij \rangle$ označava sumiranje samo po susjednim čvorištima rešetke. Pojedini članovi u sumaciji označavaju preskakanje elektrona između i-tog i j-tog čvorišta, dok je t_{ij} integral prekrivanja (preskakanja, en. hopping).

- Ukoliko dolazi do deformiranja rešetke integrali preskakanja će se promijeniti.
- Najveća promjena u integrali preskakanja dolazi od takvih pomaka koji udaljavaju ili približavaju čvorišta jadna drugom.

Općenito može se pretpostaviti da je:

$$\begin{aligned} t_{ij} &= t(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = t(\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)} + \vec{u}_i - \vec{u}_j) \\ &\approx t_{ij}^{(0)} - \alpha\, \vec{n}_{ij} \cdot (\vec{u}_i - \vec{u}_j) \quad \text{gdje je} \quad \vec{n}_{ij} = \frac{\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)}}{|\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)}|} \end{aligned}$$

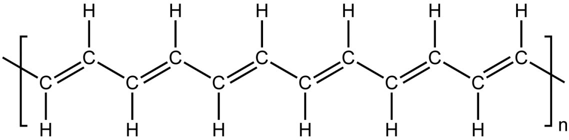
Elektron-fononsko vezanje u TBA

1d TB model s elektron-fononskim međudjelovanjem:

$$H = -\sum_n [t - \alpha\,(u_{n+1} - u_n)] \left(c^\dagger_{n+1} c_n + c^\dagger_n c_{n+1} \right) + \frac{K}{2} (u_{n+1} - u_n)^2$$

S. Barišić, Phys.Rev.B **5** (1972) 932, *ibid.* 941
W.P. Su et al., Phys.Rev.Lett. **42** (1979) 1698

Model je poslužio za modeliranje vodljivih plastika kao što je trans-poliacetilen:



Za otkriće vodljivih plastika dodijeljena je Nobelova nagrada 2000 iz kemije A. Heegeru, A.G. MacDiarmidu i H. Shirakawa-i.
(http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2000/)

Elektron-fononsko u ionskim kristalima

Elektron-fononsko u ionskim kristalima

- U ionskim kristalima nema slobodnih elektrona koji mogu zasjenjivati kulonsko međudjelovanje.
- Usamljeni elektroni međudjeluju s rešetkom kroz polarizaciju induciranu optičkim fononskim titranjima.

Elektron se giba u potencijalu koji se dobije rješavanjem elektrostatičke jednadžbe:

$$\Delta V(\vec{r}) = e\rho_{ion}(\vec{r}) = -e(\vec{\nabla}\vec{P})$$

Polarizaciju koja je nastala zbog optičkih fononskih titranja općenito je proporcionalna pomaku optičkog fonona:

$$\vec{P}(\vec{r}) = \alpha' \sum_{\vec{q},\lambda} \vec{e}_{\vec{q},\lambda} \frac{e^{+\imath\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q},\lambda}}} \left(a_{\vec{q},\lambda} + a^{\dagger}_{-\vec{q},\lambda}\right)$$

gdje je α' konstanta proporcionalnosti.

Elektron-fononsko u ionskim kristalima

Gustoća naboja koja stvara potencijal u kojem se elektron giba:

$$\begin{aligned}\rho_{ion} &= -\vec{\nabla}\vec{P} \\ &= \imath\alpha' \sum_{\vec{q},\lambda} (\vec{q}\cdot\vec{e}_{\vec{q},\lambda}) \frac{e^{+\imath\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q},\lambda}}} \left(a_{\vec{q},\lambda} + a^{\dagger}_{-\vec{q},\lambda}\right)\end{aligned}$$

Potencijal prikazan preko Fourijerovih komponenti:

$$U(\vec{r}) = -\imath\alpha' \sum_{\vec{q},\lambda} \frac{(\vec{q}\cdot\vec{e}_{\vec{q},\lambda})}{q^2} \frac{e^{+\imath\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q},\lambda}}} \left(a_{\vec{q},\lambda} + a^{\dagger}_{-\vec{q},\lambda}\right)$$

Tada je hamiltonijan međudjelovanja:

$$\begin{aligned}H_{el-ph} &= (-e)\int d\vec{r}\, U(\vec{r})\, \hat{\phi}^{\dagger}(\vec{r})\hat{\phi}(\vec{r}) = (-e)\sum_{\vec{q},\vec{k},\sigma} U_{\vec{q}}\, c^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\, c_{\vec{k},\sigma} \\ &= -\imath \sum_{\vec{q},\lambda,\sigma} \frac{\alpha_\lambda}{q} \left(a_{\vec{q},\lambda}\, c^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\, c_{\vec{k},\sigma} - a^{\dagger}_{\vec{q},\lambda}\, c^{\dagger}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}\, c_{\vec{k},\sigma}\right)\end{aligned}$$

Elektron-fononsko u ionskim kristalima

- Rijetki elektroni u polarnom (ionskom) kristalu induciraju fononsku deformaciju oko sebe.
- Elektron putuje kroz kristal vukući deformaciju za sobom.
- Efektivna masa elektrona je povećana.
- Elektron zajedno s induciranom deformacijom naziva se **polaron**.
- Između polarona postoji privlačenje pa se polaroni mogu kombinirati u **bipolarone** - bozonske čestice.

Polaronski modeli:

L.D.Landau, Phys.Z.Sowjetunion **3** (1933) 644.
T.-D.Lee i D.Pines, Phys.Rev. **92** (1953) 883.
R.P. Feynman, Phys.Rev. **97** (1955) 660.
T. Holstein, Ann. Phys. (N.Y.) **8** (1959) 325.

Prošireni jellium model

Prošireni jellium model

- Pretpostavit će se da ionski naboji **nisu** jednoliko razmazani.
- Međutim, zanemarit će se atomska struktura i konačne dimenzije iona. Ion konačnih dimenzija aproksimira se točkastim nabojem.
- Zanemaruje se kratkodosežno odbijanje između iona koje dolazi od preklapanja elektronskih orbitala.
- Zanemarit će se da valne funkcije elektronskog plina moraju biti ortogonalne na dubokoležeće ne ionizirane elektronske orbitale.
- Zanemaruje se mogućnost tranverzalnog titranja iona koje u realnim materijalima postoji.
- Budući da je gibanje elektrona puno brže od ionskog gibanja, točkasti ioni se gibaju u razmazanom elektronskom naboju.

Prošireni jellium model

- Ako bi postojalo samo kulonsko međudjelovanje između iona, ion bi titrali frekvencijom ionske plazme, kao što to elektroni titraju plazmonskim frekvencijama.
- Ionske plazma ima konačnu frekvenciju za valni broj $\vec{q} = 0$:

$$\Omega_i = \sqrt{\frac{(Ze)^2 N_i}{\epsilon_0 M_i V}}$$

  koja je potpuno analogna plazmonskoj frekvenciji ω_p.
- U realnim tijelima ioni imaju akustičko titranje, stoga zanemarivanje elektron-ionskog međudjelovanja nije opravdano.
- Elektron-ionsko međudjelovanje dovest će do zasjenjivanja dugodosežnih kulonskih sila između iona. Frekvencija titranja iona neće više biti konačna, nego će se težiti u nulu linearno s $\vec{q}$.
- Isti efekt ne postoji u slučaju elektrona, jer frekvencija titranja elektronske plazme je mnogo veća od frekvencije titraja iona. Ioni ne mogu zasjeniti dugodosežno kulonsko međudjelovanje elektrona.

Prošireni jellium model

Frekvencija titranja zasjenjene ionske plazme:

$$\begin{aligned}\Omega_i^2 \to \omega_i^2(\vec{k}) &= \Omega_i^2 \, \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{el}(\vec{k},\omega_i)} \approx \Omega_i^2 \, \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{el}(\vec{k},0)} = \frac{(Ze)^2 N_i}{\epsilon_0 M_i V} \, \frac{1}{1+\frac{k_{TF}^2}{k^2}} \\ &\approx \frac{(Ze)^2 N_i}{\epsilon_0 M_i k_{TF}^2 V} \, k^2 = c^2 \, k^2\end{aligned}$$

gdje je:

$$c^2 = \frac{Z}{3} \, \frac{m}{M_i} \, v_F^2 \qquad \text{brzina zvuka.}$$

Gruba procjena brzine zvuka:

$$\frac{m}{M_i} \sim 10^{-4} - 10^{-5} \quad \Rightarrow \quad c \sim 10^{-3} v_F \sim 10^3 \, \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$$

Kohnova anomalija

Kohnova anomalija

- Izvedeni izraz za frekvenciju je dobar samo za male valne brojeve.
- Za veće valne brojeve ($> 2k_F$) Thomas-Fermijeva aproksimacija više nije dobra. Treba koristiti rezultat izveden u RPA - statičku granicu.
- Frekvencija titranja bit će dana izrazom:

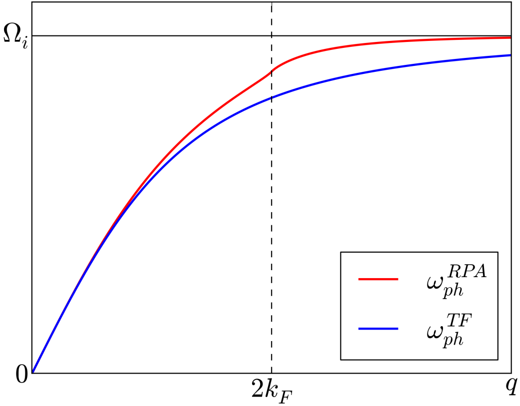
$$\omega(\vec{k}) = \Omega_i \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_{el}(\vec{k}, 0)}} = \frac{\Omega_i}{\sqrt{k^2 + k_{TF}^2 \cdot F(k)}} \cdot |\vec{k}|$$

gdje je:

$$F(k) = \frac{1}{2} + \frac{k_F}{2k} \left[1 - \left(\frac{k}{2k_F} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{k + 2k_F}{k - 2k_F} \right|$$

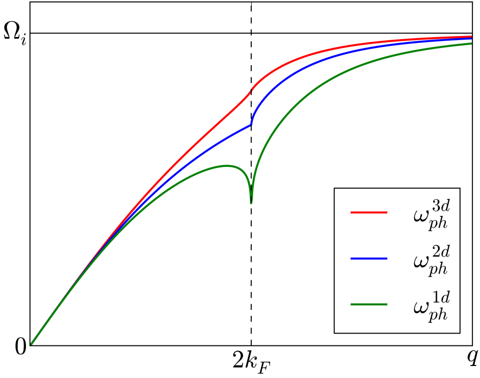
funkcija koja se pojavljuje u Lindhardovoj odzivnoj funkciji.

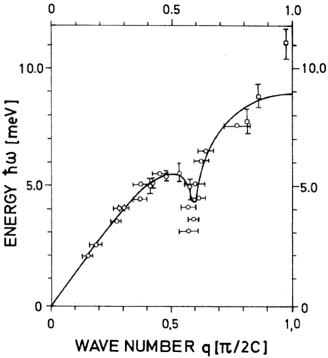
Kohnova anomalija u jellium modelu



Fononska frekvencija izračunata pomoću RPA dielektrične funkcije. RPA dielektrična funkcija ima logaritamsku divergenciju u derivaciji za valni broj $2k_F$. To se odražava na fononskoj disperziji koja na tom valnom broju ima neanalitičko ponašanje. Neanalitičnost fononske disperzije na valnom broju $2k_F$ je poznata kao **Kohnova anomalija** (W. Kohn, Phys.Rev.Lett. **2** (1959) 393.)

Kohnova anomalija u 1d, 2d i 3d jellium modelu





Iz rada B. Renker et al., Phys.Rev.Lett. **30** (1973) 1144. Kohnova anomalija u $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3}\cdot 3H_2O$.

Kohnova anomalija posebno dolazi do izražaja u niskodimenzionalnim sustavima ili 3d sustavima s gniježđenjem Fermijeve površine. U takvim sustavima funkcija linearnog odgovora ima logaritamski singularitet koji dovodi do mekšanja fononske frekvencije na valnom broju $2k_F$.

Nobelova nagrada 1998

Walter Kohn - Nobelova nagrada 1998 iz kemije za razvoj teorije funkcionala gustoće. Radi se o kvantnoj teoriji mnoštva čestica od prvih principa (*ab initio* računi).

Detalji:
http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/kohn.html

Peierlsova nestabilnost

Kohnova anomalija u (kvazi)-1d sustavima

- Kohnova anomalija se ne pojavljuje na višim temperaturama.
- Singularitet u odzivnoj funkciji na valnom broju $2k_F$ (i Kohnova anomalija) su posljedica skoka u Fermi-Diracovoj funkciji raspodjele. na Fermijevoj razini. Na povišenim temperaturama skok u funkciji raspodjele je razmazan (razmazanost $\sim k_B T$), pa nema singularnog ponašanja u odzivnoj funkciji, a u fononskoj disperziji se ne vide anomalije.
- Između niskih i visokih temperatura postoji temperatura faznog prijelaza (T_p) na kojoj frekvencija $\omega(k = 2k_F)$ postane jednaka nuli te se formira statička deformacija rešetke valnog broja $2k_F$.
- Pojava statičke $2k_F$ deformacije rešetke poznata je kao **Peierlsova nestabilnost**.

Peierlsova nestabilnost

Razmotrimo 1d elektronski plin koji se nalazi u periodičnom potencijalu rešetke valnog broja $2k_F$. Periodični će potencijal dovesti do stvaranja procijepa u elektronskom spektru na Fermijevoj razini, tj. na valnim brojevima $\pm k_F$.

Schrödingerova jednadžba:

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\overbrace{2\alpha\Delta\cos(2k_F x)}^{U(x)}\Big]\psi(x)=E\,\psi(x)$$

gdje je Δ amplituda periodičke deformacije rešetke, a α jačina elektron-fononskog vezanja. Elektronski spektar:

$$E_{\pm}(k)=\frac{\hbar^2}{2m}(k_F^2+(k\pm k_F)^2)\pm\sqrt{4\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\frac{\hbar^2(k\pm k_F)^2}{2m}+\alpha^2\Delta^2}$$

Promjena energije elektronskog podsustava (po jedinici dužine):

$$\delta E_{el}(\Delta)=2\int_{-k_F}^{+k_F}\frac{dk}{2\pi}\left(E_-(k)-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)$$

Peierlsova nestabilnost

Osim elektronskog dijela energije, postoji fononski čiji će iznos biti dan elastičnom energijom:

$$\delta E_{ph}(\Delta) = \left\langle \frac{1}{2} M_i \, \omega_0^2(2k_F) \, \left(\Delta \cos(2k_F x) \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{4} C \Delta^2$$

Ravnotežna vrijednost statičke deformacije Δ izlazi iz minimuma ukupne energije:

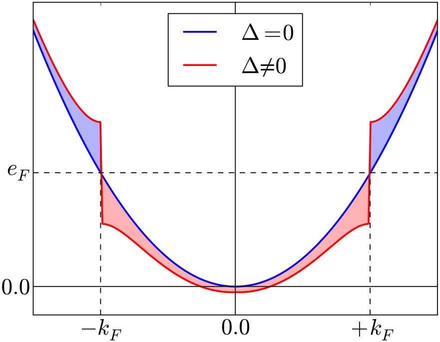
$$\frac{d}{d\Delta} \left\{ \delta E_{el}(\Delta) + \delta E_{ph}(\Delta) \right\} = 0$$

Kao rezultat se dobije da je:

$$\alpha \Delta = 4 E_F \, e^{-1/(g_F V)} \qquad \text{gdje je } V = \frac{2\alpha^2}{C}$$

Peierlsova nestabilnost

Na Fermijevoj energiji otvara se procijep. Popunjenim elektronskim stanjima do Fermijeve energije umanjuje se energija. Dobitak u energiji je površina označena crvenkastom bojom. U isti mah postoji gubitak u energiji zbog deformacije rešetke. Ta dva doprinosa suprotnog predznaka daju ravnotežnu vrijednost deformacije tako da je ukupni dobitak u energiji maksimalan.



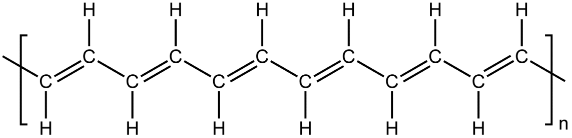
Na konačnim temperaturama dio elektrona je pobuđen u stanja iznad procijepa. Zbog toga je dobitak u elektronskom dijelu energije umanjen pa je i ravnotežna vrijednost deformacije umanjena. Na kritičnoj temperaturi T_p i višim temperaturama od T_p, ne postoji dobitak u ukupnoj energiji zbog stvaranja periodičke deformacije. Slobodna energija kao funkcija deformacije rešetke i temperature ima oblik Landauovog razvoja po parametru uređenja.

$$f = a' \, (T - T_p) \, \frac{\Delta^2}{2} + b \, \frac{\Delta^4}{4}$$

Peierlsova nestabilnost

Peierlsova nestabilnost postoji u poliacetilenu (vodljivoj plastici) gdje dovodi do stvaranja alternirajućih dvostrukih/jednostrukih veza u lancu ugljikovih atoma. Radi se o polapopunjenoj vrpci gdje je:

$$\cos(2k_F x) = \cos(2k_F a\, n) = (-1)^n$$



Neočekivano velika vodljivost poliacetilena dolazi od gibanja solitona, topoloških defekata sličnih polaronima.

Međudjelovanje elektrona preko fonona

Međudjelovanje elektrona preko fonona

$$H_{el-ph} = \sum_{\vec{q},\vec{k},\sigma} g(\vec{k},\vec{q})\,(a_{\vec{q}} + a^{\dagger}_{-\vec{q}})c^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}c_{\vec{k},\sigma}$$

Elektron-fononsko međudjelovanje opisuje procese u kojima elektron stvara (emitira) ili poništava (apsorbira) fonon i pri tome mijenja valni broj tako da je ukupni impuls sustava sačuvan.

Razmjena fonona između elektrona dovodi do privlačnog međudjelovanja.

- Neka se dva elektrona nalaze u početnom stanju $\vec{k}$ i $\vec{k}'$.
- Neka je konačno stanje tih elektrona $\vec{k}+\vec{q}$ i $\vec{k}'-\vec{q}$.
- Od početnog do konačnog stanja moguće je doći ako:
  1. elektron valnog broja $\vec{k}$ emitira fonon valnog broja $-\vec{q}$, a drugi ga elektron valnog broja $\vec{k}'$ apsorbira.
  2. ili ako elektron valnog broja $\vec{k}'$ emitira fonon valnog broja $\vec{q}$, a prvi ga elektron apsorbira.

Međudjelovanje elektrona preko fonona

Amplitudu vjerojatnosti za prelazak iz početnog u konačno stanje moguće je izračunati računom smetnje:

$$\langle \text{fin}|H_{int}|\text{init}\rangle = -\sum_{n=\text{sva međustanja}} \frac{\langle \text{fin}|H_{el-ph}|n\rangle\langle n|H_{el-ph}|\text{init}\rangle}{E_n - E_{init}}$$

gdje je H_{int} efektivni hamiltonijan koji opisuje proces prelaska iz početnog stanja u konačno. Zbog zakona sačuvanja energije vrijedi:

$$E_{init} = E_{fin} = e_{\vec{k}'} + e_{\vec{k}} = e_{\vec{k}+\vec{q}} + e_{\vec{k}'-\vec{q}}$$

U slučaju razmjene fonona međustanja koja odgovaraju navedenim procesima su:

1. Elektroni u stanjima $\vec{k}+\vec{q}$ i $\vec{k}'$ i fonon u stanju $-\vec{q}$. Pri tome je:

$$E_n - E_{init} = e_{\vec{k}+\vec{q}} - e_{\vec{k}} + \hbar\omega_{-\vec{q}}$$

2. Elektroni u stanjima $\vec{k}'-\vec{q}$ i $\vec{k}$ i fonon u stanju $\vec{q}$. Vrijedi:

$$E_n - E_{init} = e_{\vec{k}'-\vec{q}} - e_{\vec{k}'} + \hbar\omega_{\vec{q}} = -(e_{\vec{k}+\vec{q}} - e_{\vec{k}}) + \hbar\omega_{\vec{q}}$$

Međudjelovanje elektrona preko fonona

Amplitudu vjerojatnosti:

$$
\begin{aligned}
\langle \mathrm{fin}|H_{int}|\mathrm{init}\rangle &= -g(\vec{k},\vec{q})g(\vec{k}',-\vec{q})\left[\frac{1}{e_{\vec{k}+\vec{q}}-e_{\vec{k}}+\hbar\omega_{-\vec{q}}}+\frac{1}{-(e_{\vec{k}+\vec{q}}-e_{\vec{k}})+\hbar\omega_{+\vec{q}}}\right]\\
&= -g(\vec{k},\vec{q})g(\vec{k}',-\vec{q})\,\frac{2\hbar\omega_{\vec{q}}}{(\hbar\omega_{\vec{q}})^2-(e_{\vec{k}+\vec{q}}-e_{\vec{k}})^2}\\
&\approx -g(\vec{k},\vec{q})g(\vec{k}',-\vec{q})\,\frac{2}{\hbar\omega_{\vec{q}}}\\
&= V(\vec{k},\vec{k}',\vec{q})
\end{aligned}
$$

Efektivno međudjelovanje elektrona.

$$
H_{el-el} = \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}\\ \sigma,\sigma'}} V(\vec{k},\vec{k}',\vec{q})\; c^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} c^{\dagger}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'} c_{\vec{k}',\sigma'} c_{\vec{k},\sigma}
$$

Osim ovog dijela koji dolazi od razmjene fonona postoji još i zasjenjeno kolonsko odbijanje!

Dielektrična funkcija metala

Općenito dielektrična funkcija je definirana:

$$\epsilon \, V^{\text{tot}} = \epsilon_0 \, V^{\text{ext}}$$

Želimo povezati dielektričnu funkciju s dielektričnim funkcijama elektrona i iona.

Za dielektričnu funkciju elektrona vrijedi:

$$\epsilon_{el} \, V^{\text{tot}} = \epsilon_0 \, (V^{\text{ext}} + V^{\text{ion}})$$

pri čemu se ionski naboji tretiraju kao dio vanjskih naboja.

Na isti se način može definirati dielektričnu funkcija iona:

$$\epsilon_{ion} \, V^{\text{tot}} = \epsilon_0 \, (V^{\text{ext}} + V^{\text{el}})$$

gdje se elektronski naboji tretiraju kao dio vanjskih naboja.
Iz tih triju relacija izlazi da je:

$$\overbrace{(\epsilon_{el} + \epsilon_{ion} - \epsilon)}^{=\epsilon_0} \, V^{\text{tot}} = \epsilon_0 \, (V^{\text{ext}} + V^{\text{ion}} + V^{\text{el}}) = \epsilon_0 \, V^{\text{tot}}$$

Dielektrična funkcija metala u jellium modelu

Dielektrična funkcija sustava elektrona i iona je:

$$\epsilon = \epsilon_{el} + \epsilon_{ion} - \epsilon_0$$

U području fononskih frekvencija i za male valne vektore:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ion} &= \epsilon_0 \left(1 - \frac{\Omega_i^2}{\omega^2}\right) \\ \epsilon_{el} &= \epsilon_0 \left(1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2}\right) \end{aligned}$$

Uvrštavanjem u ukupnu dielektričnu funkciju:

$$\epsilon \approx \epsilon_{el}(\vec{q}) \left(1 - \frac{\omega_i^2(\vec{q})}{\omega^2}\right) \quad \text{gdje je} \quad \omega_i^2(\vec{q}) \approx \Omega_i^2 \frac{q^2}{k_{TF}^2}$$

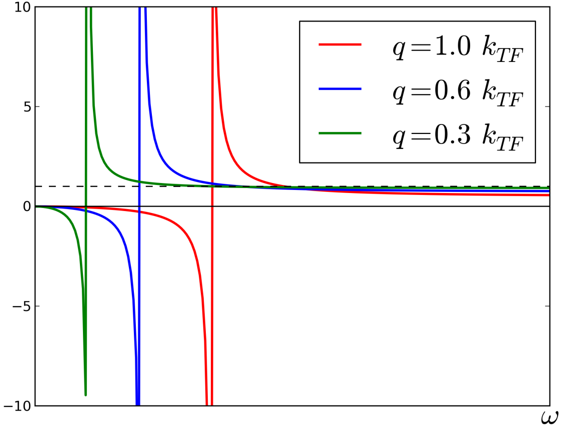
Efektivno elektron-elektron međudjelovanje u jellium modelu

Efektivno elektron-elektron međudjelovanje u jellium modelu:

$$
\begin{aligned}
V(\vec{q},\omega) &= \frac{e^2}{\epsilon(\vec{q},\omega)q^2} \\
&= \frac{e^2}{\epsilon_0(k_{TF}^2+q^2)}\,\frac{1}{1-\dfrac{\omega_i^2(\vec{q})}{\omega^2}} \\
&= \frac{e^2}{\epsilon_0(k_{TF}^2+q^2)} + \frac{e^2}{\epsilon_0(k_{TF}^2+q^2)}\,\frac{\omega_i^2(\vec{q})}{\omega^2-\omega_i^2(\vec{q})}
\end{aligned}
$$

- Prvi dio izraza (plava boja) je zasjenjeno kulonsko međudjelovanje
- Drugi dio izraza (crvena boja) je efektivno međudjelovanje putem razmjene fononskih pobuđenja. Za frekvencije ω manje od fononskih ono je privlačno. U području malih frekvencija **privlačni dio veći od zasjenjenog kulonskih odbijanja**.

Efektivno elektron-elektron međudjelovanje u jellium modelu



Efektivno međudjelovanje elektrona u jellium modelu, $V(\vec{q}, \omega)$ kao funkcija frekvencije ω za tri različita valna broja. Za frekvencije manje od fononske postoji privlačenje među elektronima. U granici $\omega \to 0$ privlačno i odbojno međudjelovanje se točno međusobno krate. To je svojstvo jellium modela.

Efektivno elektron-elektron međudjelovanje

Što znači frekvencijski ovisno međudjelovanje?

- Matrični element $V(\vec{q}, \omega)$ označava proces u kojem su impuls $\hbar\vec{q}$ i energija $\hbar\omega$ preneseni s jednog elektrona na drugi.
- Elastični sudar dvaju elektrona je onaj u kojem nema prijenosa energije, pa je on opisan s matričnim elementom $V(\vec{q}, 0)$.
- Između ω i $\vec{q}$ ne postoji disperzijska relacija iako se proces događa putem razmjene fonona. U međustanju dolazi do narušavanja sačuvanja energije. Međutim, ono što jest važno je da je ukupna energija i ukupni impuls prije i poslije sudara isti.
- Privlačno međudjelovanje postoji ako je prenesena energija mala, odnosno manja od fononske frekvencije.
- U metalu jedini elektroni koji mogu sudjelovati u sudarima su oni na Fermijevoj razini. Privlačenje između elektrona postoji samo za tanki sloj elektrona oko Fermijeve razine.
- Ovo naizgled zanemarivo privlačenje kvalitativno mijenja valnu funkciju sustava i dovodi do pojave supravodljivosti.