

Formiranje pseudoprocijepa topološkom rekonstrukcijom dvodimenzionalne dirakovske vrpce u okolini Lifshitzove točke

B. Keran*, D. Radić*

Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Bijenička cesta 32, Zagreb

(Datum: 20. siječnja 2019.)

U ovom radu na dvodimenzionalnu dirakovsku disperziju razmotren je preduvjet za primijenjivost novog modela opisa nastanka valova gustoće naboja za dvodimenzionalne izotropne vodiče zatvorene Fermijeve površine temeljen na topološkoj rekonstrukciji elektronske vrpce. Pokazano je da modulacija sustava periodičkim potencijalom dovodi do topološke rekonstrukcije Fermijeve površine u otvorenu topologiju. Promatranjem gustoće elektronskih stanja uočeno je otvaranje pseudoprocijepa oko Fermijeve energije koji očekivano iščezava u limesu u kojem nema strukturalne nestabilnosti što vodi do slutnje da je ovaj mehanizam zaslužan za valove gustoće naboja interkaliranog grafitu. Provedena je i analiza nad aproksimativnim rješenjem za koji se ispostavilo da ipak ne daje dovoljno dobro slaganje s egzaktnim rezultatom.

I. UVOD

Valovi gustoće naboja (eng. charge density waves - CDWs) isprva su bili predviđeni tek u jednodimenzionalnim metalima vezanim uz rešetku (sustavi elektron-fononske interakcije) kao pojava koja izlazi iz nestabilnosti metala spram samosuglasne periodičke modulacije rešetke.¹ Otvaranjem procijepa u osnovnom stanju jednočestičnog spektra na Fermijevoj energiji elektronske vrpce te spuštanjem totalne energije elektronskog kondenzata, kompenzira se porast u ukupnoj energiji uzrokovan deformacijom kristalne rešetke. Ali, pokazano je da je moguć nastanak valova gustoće naboja i u dvodimenzionalnim materijalima velike anizotropije Fermijeve površine koja po svojim dijelovima ima dovoljno visok stupanj ugnježđenja, tj. da se jedan dio Fermijeve plohe može jedinstvenim valnim vektorom preslikati u drugi, čime postiže stabilnost CDW-a (eksperimentalno i teorijski objašnjeno).²

Međutim, valovi gustoće naboja detektirani su i u dvodimenzionalnim materijalima zatvorenih Fermijevih površina koji zbog njihovih izotropnosti ne mogu zadovoljiti uvjet ugnježđenja Fermijeve površine. Kako su pokazali Rahnejat *et al.*³, jedan od takvih materijala je dopirani grafit s interkaliranim kalcijem između slojeva (CaC_6). U njemu dolazi do stvaranja kalcijeve superrešetke i elektronskih nabojnih pruga (eng. stripes). Opažanje da moduliranje kalcijevih interkalata ne uzrokuje nikakvu deformaciju ugljikove rešetke vodi na važan zaključak da su upravo grafenski slojevi odgovorni za održavanje CDW-a. Odavde se prirodno nametnulo pitanje modela koji bi mogao opisati nastanak

valova gustoće naboja i u dvodimenzionalnim materijalima izotropne Fermijeve površine dirakovske disperzije.

Kadigrobov *et al.*⁴ predstavili su metodu koja ne uključuje standardno kvalitativno objašnjenje mehanizmom ugnježđenja Fermijeve plohe, a ipak dovodi do strukturalne nestabilnosti u dvodimenzionalnim izotropnim vodičima parabolične elektronske disperzije mehanizmom topološke rekonstrukcije elektronske vrpce kojom se prvobitno zatvorena Fermijeva površina transformira u otvorenu. Pokazali su uz to i da na ovaj način sustav spontano stabilizira CDW za dvodimenzionalne parabolične disperzije.

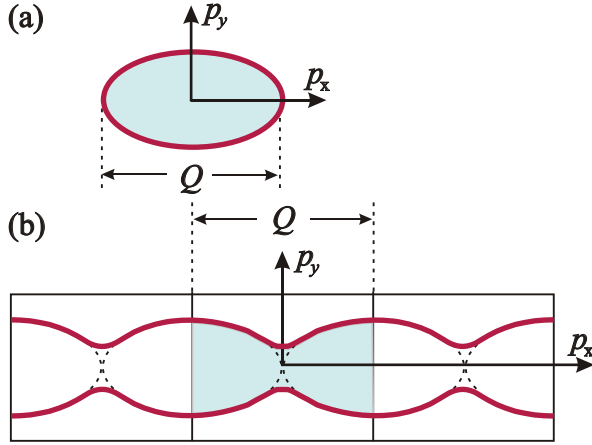
U ovom radu razmatrana je topološka rekonstrukcija dvodimenzionalne dirakovske vrpce na primjeru grafenske disperzije. Za početak, u II. poglavlju pojašnjena su glavna razmatranja ovakvog pristupa problemu i uvedene su početne pretpostavke. Zatim je provedena topološka rekonstrukcija Fermijeve površine nastale za sad zadanom periodičkom modulacijom gustoće naboja što omogućava numeričko određivanje gustoće stanja elektrona u poglavlju III. na elektronsku disperziju, kako za egzaktan izraz, tako i za aproksimaciju. Naposljetku, u poglavlju IV. izneseni su konačni zaključci.

II. ANALIZA I TOPOLOŠKA REKONSTRUKCIJA ELEKTRONSKE VRPCE

Kako bi problem ostao dovoljno jednostavan, promatrano je što se događa s osnovnim stanjem grafenske linearne disperzije $\epsilon(p_x, p_y) = nv_F|\mathbf{p}| = nv_F\sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ u okolini K-točke u Brillouineovoj zoni. Na postojeći sustav uveden je periodički potencijal koji ga modulira. Takav jednostavni sinu-

* barbara.keran@gmail.com; dradic@phy.hr

soidalni potencijal $V(x) = \Delta \cos\left(\frac{Q}{\hbar}x + \Phi\right)$, gdje je pod pretpostavkom $Q = 2p_{F_0} = 2\frac{\epsilon_{F_0}}{v_F}$, uz promjenu koordinata u recipročnom prostoru u skladu s novom Brillouineovom zonom tako da $p_x \in [-Q/2, Q/2]$ dok p_y ostaje isti, dovoljan je da dovede do topološkog prijelaza Fermijeve površine iz zatvorene (a) u otvorenu topologiju (b) periodičnosti Q nakon otvaranja procijepa u točkama degeneracije. Slika uz dozvolu nacrtana po uzoru na [4].



Slika 1. Prikaz promjene topologije Fermijeve površine dvodimenzionalne dirakovske disperzije uzrokovane periodičkom modulacijom impulsa $Q = 2p_{F_0}$ u recipročnom prostoru iz zatvorene (a) u otvorenu topologiju (b) periodičnosti Q nakon otvaranja procijepa u točkama degeneracije. Slika uz dozvolu nacrtana po uzoru na [4].

Promatrani vezani elektron-fononski sustav opisan je Fröhlichovim hamiltonijanom⁵,

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\sqrt{A}} g \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} (b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}}), \quad (1)$$

gdje su $\epsilon(\mathbf{k})$ i $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ energija i impuls elektrona čiji su operatori stvaranja i poništenja $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ i $a_{\mathbf{k}}$. Fononska su stanja određena energijom $\hbar\omega(\mathbf{q})$ i impulsom $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ dok su njihovi operatori stvaranja i poništenja redom $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ i $b_{\mathbf{q}}$. A predstavlja površinu dvodimenzionalnog sustava, a radi jednostavnosti je pretpostavljeno da elektron-fononska konstanta vezanja g nema eksplicitne ovisnosti o impulsima elektrona i fonona.

Hamiltonijan u aproksimaciji srednjeg polja prelazi

u novi oblik,

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\epsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \Delta e^{i\Phi} a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \Delta e^{-i\Phi} a_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \right] + \frac{A\hbar\omega_Q}{2g^2} \Delta^2, \quad (2)$$

gdje je

$$\sqrt{A} \Delta e^{i\Phi} = g \left(\langle b_{\mathbf{Q}} \rangle + \langle b_{-\mathbf{Q}}^{\dagger} \rangle \right) \quad (3)$$

parametar uređenja, a $\langle b_{\mathbf{Q}} \rangle = \langle b_{-\mathbf{Q}}^{\dagger} \rangle$ očekivana vrijednost makroskopski zaposjednutog fononskog stanja valnog vektora \mathbf{Q} . Energije elektrona sustava s uključenom modulacijom određuju se iz dijagonalizacije hamiltonijana (2) po elektronskim stanjima uz zanemarivanje posljednjeg člana. To vodi na izraz:

$$\epsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{\epsilon_1(\mathbf{p}) + \epsilon_2(\mathbf{p})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1(\mathbf{p}) - \epsilon_2(\mathbf{p})}{2} \right)^2 + \Delta^2}, \quad (4)$$

gdje je Δ širina novonastalog procijepa.

U pomaknutim impulsima nove Brillouineove zone energije $\epsilon_1(\mathbf{p})$ i $\epsilon_2(\mathbf{p})$ dane su sa

$$\epsilon_{1,2}(\mathbf{p}) \equiv \epsilon\left(p_x \pm \frac{Q}{2}, p_y\right) = nv_F \sqrt{\left(p_x \pm \frac{Q}{2}\right)^2 + p_y^2}. \quad (5)$$

Ovakav pomak ishodišta za $\frac{Q}{2}$ omogućava uvid u pojave na rubu novonastale Brillouineove zone. U ovom trenutku prikladno je odabrati $n = +1$ čime se svi daljnji rezultati odnose samo na elektrone obzirom da je za šupljine rezultat potpuno analogan do na zrcaljenje po $p_x - p_y$ ravnini.

Konačno, nakon otvaranja procijepa i topološke rekonstrukcije elektronski spektar određen jednadžbama (4) i (5) ima oblik

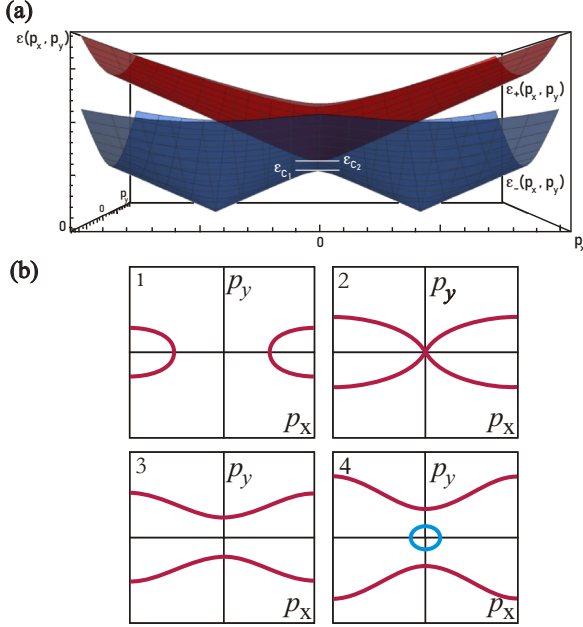
$$\epsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} v_F \left[\sqrt{(+)} + \sqrt{(-)} \pm \sqrt{\left[\sqrt{(+)} - \sqrt{(-)} \right]^2 + \frac{4}{v_F^2} \Delta^2} \right], \quad (6)$$

uz definiranu pokratu

$$(\pm) \equiv \left(p_x \pm \frac{Q}{2}\right)^2 + p_y^2. \quad (7)$$

Slika 2 prikazuje ovisnost novih energija (6) o p_x i p_y . Donja vrpca ima sedlenu točku na $(p_x, p_y) = (0, 0)$ u $\epsilon_{C_1} = \epsilon_{F_0} - \Delta$, gdje je $\epsilon_{F_0} = v_F \frac{Q}{2} = v_F p_{F_0}$ početna Fermijeva energija, dok gornja vrpca ima

dno na $(p_x, p_y) = (0, 0)$ u $\varepsilon_{C_2} = \varepsilon_{F_0} + \Delta$. Na drugom dijelu slike nalaze se sheme ekvienijskih ploha za različite iznose $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \varepsilon$ iz čijeg je pregleda odmah vidljivo događanje topološke promjene Fermijeve plohe porastom vrijednosti energije. Kako bi se ispitalo formiranje pseudoprocijepa, u nastavku treba odrediti gustoću stanja elektrona rekonstruiranog spektra.



Slika 2. (a) Prikaz topološke rekonstrukcije elektronske vrpce dvodimenzionalne prvotno linearne disperzije dane izrazom (6). Energijska vrijednost na $p_x = p_y = 0$ u $\varepsilon_{C_1} = \varepsilon_{F_0} - \Delta$ predstavlja sedlenu točku donje vrpce, a $\varepsilon_{C_2} = \varepsilon_{F_0} + \Delta$ dno gornje vrpce. (b) Shematski prikaz transformacije ploha konstantne energije za energiju ispod (1) i iznad (2) vrijednosti ε_{C_1} , između energije sedlene točke i dna gornje vrpce $\varepsilon_{C_1} < \varepsilon < \varepsilon_{C_2}$ te iznad ε_{C_2} . Slika uz dozvolu nacrtana po uzoru na [4].

III. ELEKTRONSKA GUSTOĆA STANJA

Gustoća stanja elektrona u dvije dimenzije općenito je dana izrazom

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \frac{dp_l}{\sqrt{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_y}\right)^2}}, \quad (8)$$

gdje dodatni faktor dva dolazi od zbroja po spinovima (degeneracija po dolinama (eng. valleys),

tj. K i K', ovdje nije uzeta u obzir), a dp_l predstavlja linijski diferencijal $dp_l = \sqrt{(dp_x)^2 + (dp_y)^2}$ odakle je vidljivo da dp_x i dp_y nisu međusobno nezavisni. Tada se energija može izraziti kao funkcijska ovisnost $\varepsilon(p_x, p_y) = \varepsilon[p_y(p_x)]$ što zajedno dovodi do, za izračun elegantnije, relacije za dvodimenzionalnu elektronsku gustoću stanja:

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \frac{dp_x}{\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_y}}. \quad (9)$$

Budući da problem od interesa ima dvije vrpce, ukupna gustoća stanja elektrona bit će određena zbrojem gustoće stanja gornje i donje vrpce $g(\varepsilon) = g_-(\varepsilon) + g_+(\varepsilon)$. Prije nastavka određivanja ukupne gustoće stanja moduliranog grafenskog sustava uvodimo skaliranje parametara:

$$x \equiv \frac{p_x}{Q/2}, \quad y \equiv \frac{p_y}{Q/2}, \quad e \equiv \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{F_0}}, \quad \delta \equiv \frac{\Delta}{\varepsilon_{F_0}}, \quad (10)$$

pa je u duhu ovih definicija prigodno redefinirati pokratu (\pm) u

$$(\pm) \equiv (x \pm 1)^2 + y^2. \quad (11)$$

Sada spektar energija može biti zapisan kao

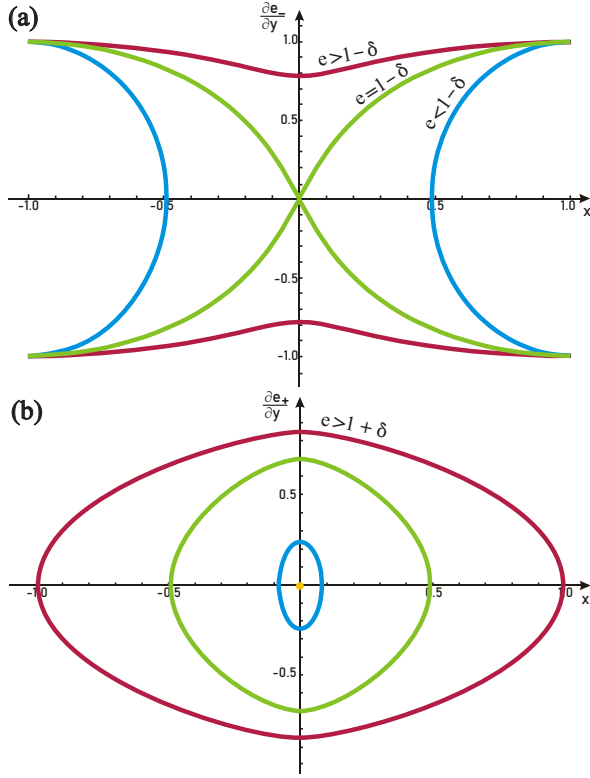
$$e_{\pm}(x, y) = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(+)} + \sqrt{(-)} \pm \sqrt{\left[\sqrt{(+)} - \sqrt{(-)} \right]^2 + 4\delta^2} \right]. \quad (12)$$

Odavde kvadriranjem izlazi još jedna korisna jednakost,

$$(e^2 - \delta^2) - e \left[\sqrt{(+)} + \sqrt{(-)} \right] + \sqrt{(+)} \cdot \sqrt{(-)} = 0. \quad (13)$$

Kako bismo najjednostavnije odredili $\frac{\partial y}{\partial e}$, koji nam je potreban za izračunavanje gustoće stanja, parcijalno deriviramo jednadžbu (13) po e . Nakon dotjerivanja dobivene relacije, uz manipuliranje izrazima (12) i (13), vraćamo se u (9) odakle se tražena elektronska gustoća stanja dopiranog grafena za samo jednu njegovu dolinu može zapisati kao:

$$g(e) = \frac{2}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1}{v_F} \cdot \frac{Q}{2} \int dx \cdot \frac{1}{y} \cdot \frac{e \left(1 + \frac{\delta^2}{e^2} \right) - \frac{1}{e} \sqrt{(+)} \sqrt{(-)}}{\left(1 + 2 \frac{\delta^2}{e^2} \right) - \frac{1}{e^2} \sqrt{(+)} \sqrt{(-)} + \delta^2 \left(1 - \frac{\delta^2}{e^2} \right) \frac{1}{\sqrt{(+)} \sqrt{(-)}}}. \quad (14)$$



Slika 3. (a) Krivulje podintegralne funkcije $\frac{\partial e_-}{\partial y}$ za različite odnose parametara e i δ . Donja granica integracije za donju vrpce određena je nultočkom $\frac{\partial e_-}{\partial y}|_{x_C^{(1)}} = 0$ za $e < 1 - \delta$, a iznosi $x_C^{(1)} = 0$ za $e \geq 1 + \delta$. Gornja granica je u oba slučaja $x_C^{(2)} = 1$. (b) Krivulje podintegralne funkcije $\frac{\partial e_+}{\partial y}$, koja ima fizikalna rješenja samo za $e \geq 1 + \delta$. Donja granica integracije gornje vrpce je $x_C^{(1)} = 0$ dok je gornja definirana nultočkom $\frac{\partial e_+}{\partial y}|_{x_C^{(2)}} = 0$.

Odmah je uočljivo da se pod integralom osim integranda x nalazi i $y(x, e)$. Budući da se (13) svodi na jednadžbu osmog stupnja po y , odlučili smo problemu pristupiti numeričkim metodama. Koristeći programski sustav *Mathematica*, dobiveno je svih osam analitičkih rješenja za $y(x, e)$. Među njima su izdvojena dva fizikalna rješenja koja određuju donju i gornju vrpce. Njihovim uvrštavanjem u (14) i daljnjom integracijom moguće je izvrijediti $g_+(e)$ i $g_-(e)$.

Da bi se odredile granice integracije, potrebno je поближе analizirati podintegralnu funkciju. Na Slici 3 nacrtana je funkcija $\frac{\partial e_{\pm}}{\partial y}$, gdje e_- određuje energiju donje, a e_+ energiju gornje vrpce. Iz vidne simetrije dovoljno je integrirati po samo prvom kvadrantu pa doprinos ostalih dodati množeći faktorom

četiri. Granice integrala određuju se iz varirajućeg odnosa parametara energije i procijepa. Za donju vrpce krivulja mijenja svoju donju granicu tako da je za $e < 1 - \delta$ određena onim $x_C^{(1)}$ koji je rješenje jednadžbe $\frac{\partial e_-}{\partial y}|_{x_C^{(1)}} = 0$, a u slučaju $e \geq 1 + \delta$ granica je $x_C^{(1)} = 0$. Gornja granica je za obje situacije jednaka i iznosi $x_C^{(2)} = 1$. Podintegralna funkcija gornje vrpce ima realna rješenja jedino za ispunjen uvjet $e \geq 1 + \delta$ tako da pri integraciji njene granice idu od $x_C^{(1)} = 0$ do nultočke određene jednadžbom $\frac{\partial e_+}{\partial y}|_{x_C^{(2)}} = 0$.

Konačno, numeričkom integracijom relacije (14) po definiranim granicama dobivena je gustoća stanja elektrona. Kao što je odmah vidljivo na Slici 4, doista se oko energije $e = 1 \pm \delta$ otvara pseudoprocijep koji postaje sve širi za veći parametar δ , a potpuno iščezava u limesu $\delta \rightarrow 0$ u kojem daje potpuno slaganje s gustoćom elektronskih stanja grafena poznate linearne disperzije za jednu njegovu dolinu, $\frac{|e|}{\pi}$, u novom skaliranju (10), kao što bismo i očekivali.

Obzirom da egzaktne jednadžbe vode na dosta složene izraze s kojima je teško dalje manipulirati, odlučili smo iskoristiti aproksimaciju energija oko Fermijeve razvijajući (5) u Taylorov red do drugog stupnja oko $(p_x, p_y) = (0, 0)$. Ukoliko aproksimacija bude pokazala dobro slaganje s egzaktnim rješenjem, ona bi mogla biti korištena za opis sustava oko pseudoprocijepa na energijama $e = 1 \pm \delta$. Sada su, uz iskorištenu prethodno uvedenu renormalizaciju (10), vrpce opisane sa:

$$e_{1,2}(x, y) = 1 \pm x + \frac{1}{2}y^2, \quad (15)$$

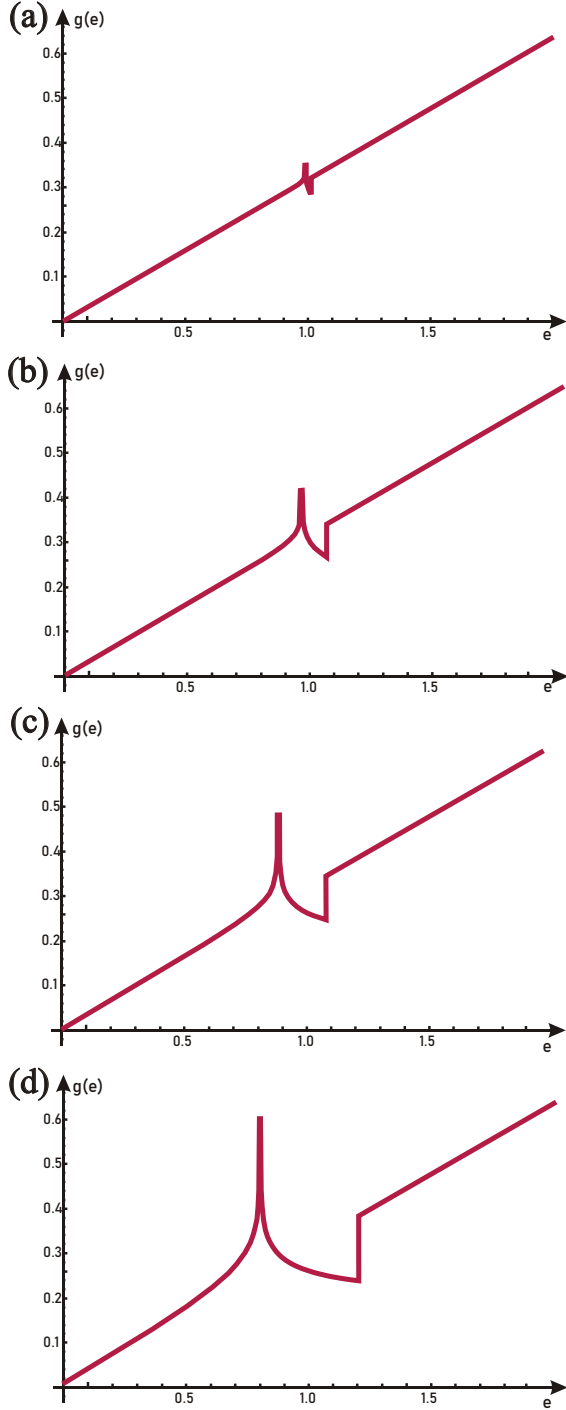
odakle uvrštavanjem u (4) slijede relacije za gornju i donju vrpce u ovoj aproksimaciji:

$$e_{\pm}(x, y) = 1 + \frac{1}{2}y^2 \pm \sqrt{x^2 + \delta^2}. \quad (16)$$

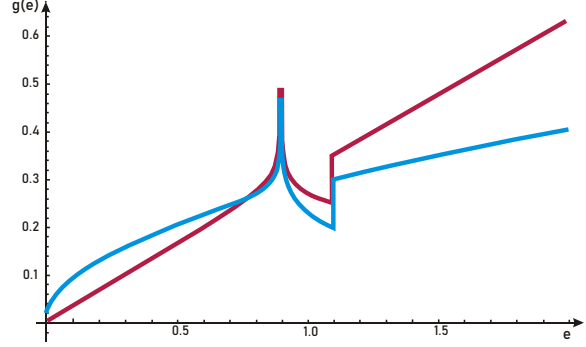
Naposljetku, parcijalno derivirajući prethodnu jednakost po y i vrativši se u (9), u aproksimaciji oko Fermijeve energije traženi izraz za gustoću elektronskih stanja donje i gornje vrpce je

$$g_{\mp}(e) = \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1}{v_F} \cdot \frac{Q}{2} \int \frac{dx}{\sqrt{e - 1 \pm \sqrt{x^2 + \delta^2}}}. \quad (17)$$

Ovaj integral je analitički rješiv, no kako su njegova rješenja određena eliptičnim integralima prve i druge vrste, i u ovom smo se slučaju zadržali na numeričkom pristupu. Traženje granica integracije ponovno zahtijeva analiziranje podintegralne funkcije



Slika 4. Elektronska gustoća stanja $g(e)$ za različite vrijednosti parametra širine procijepa: (a) $\delta = 0.01$, (b) $\delta = 0.05$, (c) $\delta = 0.1$ i (d) $\delta = 0.2$. Lako je uočljivo formiranje sve većeg pseudoprocijepa s porastom δ .



Slika 5. Usporedba egzaktnog (crveno) i aproksimativnog (plavo) rješenja gustoće elektronskih stanja za parametar $\delta = 0.1$. Aproksimacija ne ispunjava očekivanje da bi trebala dobro pratiti egzaktnu funkciju na intervalu $1 - \delta < e < 1 + \delta$.

koja u ovom slučaju nije ništa drugo doli $y_{\mp}(x)$. Uzimajući simetriju u obzir, dovoljno je integrirati samo po prvom kvadrantu i rezultat umnožiti sa četiri. Ispostavlja se da su granice slično definirane kao i za egzaktni problem: U donjoj vrpici donja granica se mijenja tako da je određena multočkom $y_{-}(x_C^{(1)}) = 0$ za $e < 1 - \delta$, a ima vrijednost $x_C^{(1)} = 0$ za $e \geq 1 + \delta$. U oba slučaja gornja granica je $x_C^{(2)} = 1$. U gornjoj vrpici postoje fizikalna rješenja samo za uvjet $e \geq 1 + \delta$ za koji je $x_C^{(1)} = 0$, a gornja granica definirana sa $y_{+}(x_C^{(2)}) = 0$.

Po provedenoj integraciji, kako se može vidjeti na Slici 5, i u aproksimaciji za gustoću stanja otvara se pseudoprocijep, ali ova funkcija u okolini $e < 1 - \delta$ i $e > 1 + \delta$ ima korijensku ovisnost o energiji, što nije kompatibilno s egzaktnim rezultatom koji je linearan.

Usporedivši dobivene rezultate za gustoću stanja u egzaktnom i aproksimativnom slučaju, što prikazuje Slika 5, vidljivo je postojeće odstupanje aproksimacije od egzaktnog rješenja u području pseudoprocijepa što upućuje na zaključak da ova aproksimacija ipak ne daje dovoljno dobar opis funkcije $g(e)$ na željenom rasponu.

IV. ZAKLJUČAK

Promatrajući dvodimenzionalni dirakovski sustav, koji nema zadovoljen uvjet dobrog ugnježđenja Fermijeve površine, pokazano je da uvođenje strukturalne nestabilnosti na njega u obliku periodičkog potencijala vodi na rekonstrukciju elektronskih vrpici

sustava. Također, pojavljuje se i topološki prijelaz kojim prvotno zatvorena Fermijeva površina prelazi u otvorenu (Slika 1) u proširenom recipročnom prostoru. Određivanjem funkcije za gustoću stanja elektrona sustava rekonstruiranih vrpce zamijetili smo formiranje pseudoprocijepa na energijskom intervalu oko Fermijeve energije čija je širina dana parametrom Δ slijeva i zdesna od $\varepsilon = \varepsilon_{F_0}$, kao što je vidljivo na Slici 4. Kako je i očekivano, pseudoprocijep nestaje uklanjanjem periodičke modulacije iz sustava. Nadalje, promotrena je aproksimacija za gustoću stanja oko pseudoprocijepa dobivena Taylorovim razvojem energija rekonstruiranog spektra do drugog reda, no u konačnici se ispostavilo da ona ne daje dovoljno dobro slaganje s egzaktnom funkcijom te da je nije povoljno koristiti u narednim

računima koji zahtijevaju veliku točnost. Navedeni rezultati vode na procjenu da bi ovaj mehanizam nastanka pseudoprocijepa topološki rekonstruiranom Fermijevom površinom mogao, među ostalim, objasniti pojavu CDW-a u grafitnim interkalatima poput CaC_6 . Ovu bi pretpostavku trebalo još direktno eksperimentalno provjeriti ARPES-om (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy) kako bi se mogla potpuno potvrditi.

ZAHVALE

Zahvaljujem se svome mentoru izv. prof. dr. sc. Danku Radiću na velikodušnom dijeljenju svog znanja i vremena s ciljem uspješnog nastanka ovog rada.

¹ R. E. Peierls, *Ann. Phys.* **4**, 121 (1930);

² J. P. Pouget, *Crystals* **2**, 466 (2012);

³ K. C. Rahnejat, C. A. Howard, N. E. Shuttlesworth, S. R. Schofield, K. Iwaya, C. F. Hirjibehedin, Ch. Renner,

G. Aeppli, M. Ellerby, *Nat. Commun.* **2**, 558 (2011);

⁴ A. M. Kadigrobov, D. Radić, A. Bjeliš, *Phys. Rev. B* **97**, 235439 (2018);

⁵ H. Fröhlich, *Advances in Physics*, 325 (1954);