

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

Seminar iz kolegija “Samostalni seminar iz istraživanja u fizici”
Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Marin Spaić

Mentor: izv. prof. dr. sc. Danko Radić (Zavod za teorijsku fiziku kondenzirane tvari)

19. siječnja 2019.

Cilj ovog seminara je izračun gustoće stanja trodimenzionalnog elektronskog plina anizotropne disperzijske relacije koji je podvrgnut periodičkom potencijalu. Kako je podrijetlo periodičkog potencijala u strukturalnoj nestabilnosti rešetke u stvaranju tzv. valova gustoće naboja, iz didaktičkih razloga započinjemo izlaganje kratkim uvodom u pojavu Peierlsove nestabilnosti i valova gustoće naboja. Nakon toga se ukratko osvrćemo na jedan potencijalni mehanizam stabilizacije takvih valova gustoće naboja pomoću topološke rekonstrukcije Fermijeve plohe. Taj mehanizam, iako nije glavna tema ovog seminara, predstavlja kontekst u kojem bi rezultat mogao imati svoju upotrebu. Nakon uvođenja konteksta, predstavljamo naš izračun gustoće stanja te utjecaj anizotropije na njega. Na posljetku, pokušavamo interpretirati naš rezultat te istaknuti potencijalne probleme i mogućnosti za daljnja istraživanja.

1 Uvod

Temeljni koncept Bloch-Sommerfeldove ideje elektronske strukture kristalnih materijala je slobodni fermionski plin elektrona čija se interakcija s kristalnom rešetkom uvodi preko potencijala koji posjeduje periodičnost rešetke i koji predstavlja efekt interakcije elektrona s efektivnim električnim poljem kojeg stvaraju svi ioni u rešetci. Da bi se opravdalo ovu sliku i u prisustvu interakcija među elektronima, elektrone u metalima promatramo kao Fermijevu tekućinu¹ čija se niskoenergetska pobuđenja ponašaju poput nezavisnih kvazičestica sa vlastitom disperzijskom relacijom $\epsilon(\vec{p})$ koja uključuje efekte kristalne rešetke. Ova je disperzija modificirana s obzirom na disperziju slobodnih elektrona te je općenito periodička, višeznačna funkcija u recipročnoj rešetci (u shemi ponovljene zone), odnosno sastoji se od vrpce koje se mogu i ne moraju preklapati (u slučaju preklapanja, pojedine vrpce čuvaju svoj identitet jer imaju različite disperzije)[1]. Unatoč brojnim uspjesima ove jednostavne slike (između ostalog, i jednostavno objašnjenje razlike između me-

tala i izolatora), ona potpuno ignorira činjenicu da kristalna rešetka ima svoja pobuđenja (fonone) koja će narušiti postojeću translacijsku simetriju kristala te će interagirati s elektronima². Takva će interakcija između elektronskog i fononskog podsustava, u nekim slučajevima dovesti do faznog prijelaza (npr. u konvencionalnim supravodičima, gdje proizvoljno mala interakcija elektrona preko fononskog podsustava potpuno destabilizira Fermijevu tekućinu). Slična je situacija i sa strukturalnim nestabilnostima koje nas zanimaju u ovom seminaru.

2 Peierlsova nestabilnost i Koh-nova anomalija

Rudolf Peierls je u svom članku [2] iz 1930. uočio da u jednodimenzionalnim sustavima postoji sklonost ka stvaranju statičke periodičke modulacije gustoće naboja popraćene statičkom deformacijom kristalne rešetke s periodom $q = 2k_F$. Temeljni uzrok ove nestabilnosti je elektron-fonon međudjelovanje i usko

¹Landau je ovu ideju originalno primjenio na razmatranje ³He.

²Zbog jednostavnosti, Landauove kvazičestice nazivamo elektronima.

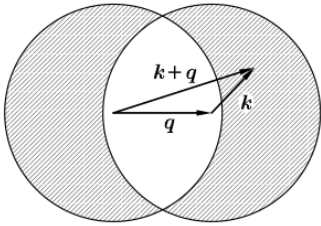
je povezan s Kohnovom anomalijom, odnosno pojavom "mekšanja" fononskog moda valnog vektora $2k_F$. Iako se radi o faznom prijelazu, dakle neperturbativnom efektu, ipak se možemo poslužiti 2. redom računa smetnje da barem "naslutimo" nestabilnost. Radi jednostavnosti, elektron-fonon interakciju opisujemo pojednostavljenim Frolichovim hamiltonijanom u kojem konstanta veze ne ovisi o valnom vektoru.

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q + \frac{g}{\sqrt{L}} \sum_{kq} c_{k+q}^\dagger c_k (a_q + a_{-q}^\dagger) \quad (2.1)$$

Tu smo, radi jednostavnosti pisanja, ispustili spinske indekse operatora stvaranja i poništenja elektrona. Također, L predstavlja duljinu našeg sustava, a c_k (a_q) su operatori poništenja elektrona (fonona) u stanju valnog vektora k (q). Vidimo da interakcijski član uzrokuje stvaranje elektron-šupljina parova poništavanjem jednog ili stvaranjem drugog fonona obrnutog impulsa. Ako je u "nesmetanom" stanju prisutan jedan fonon uz elektrone u popunjenom Fermijevom moru ($|1q\rangle = a_q^\dagger |FS\rangle$), interakcije će renormalizirati energiju (frekvenciju) tog fonona. U drugom redu računa smetnje imamo:

$$\hbar\omega_q^{(1)} = \hbar\omega_q + \sum_k \frac{|\langle k, k+q | H_{int} | 1q \rangle|^2}{\hbar\omega_q - (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)}, \quad (2.2)$$

gdje su međustanja preko kojih sumiramo dana elektron-šupljina parovima ($|k+q, k\rangle = c_{k+q}^\dagger c_k |FS\rangle$). Također,



Slika 1: Prikaz dozvoljenih međustanja (elektron-šupljina parova) u računu smetnje (zatomnjeni dio desnog kruga). Preuzeto iz [3].

sumiramo samo preko onih vrijednosti k za koje je $|k| < k_F$, a $|k+q| > k_F$. Taj je podskup prikazan na slici 1, s koje se vidi da će broj međustanja biti najveći za $q = 2k_F$. Računanje matricelementa u brojničku uz zanemarivanje fononske energije u nazivniku

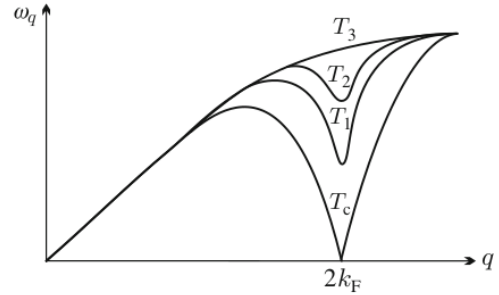
daje nam:

$$\hbar\omega_q^{(1)} = \hbar\omega_q - g^2 \sum_k \frac{f_0(k)(1 - f_0(k+q))}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k}, \quad (2.3)$$

gdje sada sumiramo po svim vrijednostima k , a Fermijeva funkcija se brine o zaposjednućima. Kada se suma pretvori u integral i izračuna korekcija pokazuje se da (u jednoj dimenziji³) dolazi do logaritamske divergencije korekcije za $q = 2k_F$, što nam daje inicijalnu indicaciju moguće nestabilnosti, ali i ukazuje na neperturbativnost efekta. Kada se provede precizniji račun koristeći teoriju linearnog odziva, dobije se korigirani izraz koji predviđa da će renormalizirana frekvencija za $q = 2k_F$ potpuno iščeznuti na konačnoj temperaturi (Slika 2).

$$k_B T_c = 2.28 \epsilon_F e^{-\frac{\hbar\omega(2k_F)}{g^2 \rho(\epsilon_F)}} \quad (2.4)$$

Na kritičnoj temperaturi za taj fononski mod se kaže

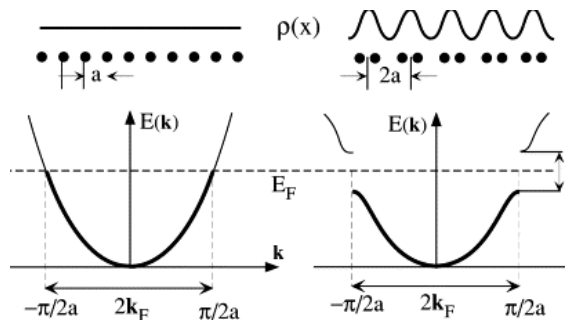


Slika 2: Renormalizirane fononske disperzije za različite temperature. Preuzeto iz [3].

da je postao "mekan". Kao takav, on može postati makroskopski zaposjednut (analogno stanju impulsa nula u Bose-Einstein kondenzatu), a sustav postaje nestabilan s obzirom na statičku deformaciju valnog vektora $2k_F$. Djelovanje takve deformacije na elektronski podsustav možemo uvesti samosuglasno preko periodičkog potencijala $V(x) = \Delta \cos(2k_F x)$, što znači da će $2k_F$ postati novi primitivni vektor recipročne rešetke. To će uzrokovati otvaranje procjepa na Fermijevoj energiji.

Zbog otvaranja procjepa dolazi do spuštanja energije čitavog Fermijevog mora (ispod procjepa) koje je u jednodimenzionalnim materijalima uvijek dovoljno veliko da kompenzira povećanje elastične energije nas-

³Iako postoji, efekt je jedva vidljiv u 3 dimenzije.



Slika 3: Otvaranje procjepa na Fermijevoj energiji kao posljedica spontane statičke deformacije rešetke.

talo zbog statičke deformacije. Ovo neće funkcionirati na dovoljno visokim temperaturama jer će dio elektrona biti pobuđen u stanja iznad procjepa te podizati ukupnu energiju elektronskog podsistema.

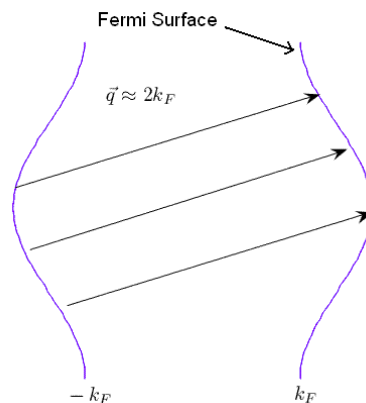
3 Valovi gustoće naboja

Dobro je poznato u teoriji faznih prijelaza da u striktno jednodimenzionalnim sustavima ne može doći do pravog faznog prijelaza. Naime, fluktuacije su na svim temperaturama dovoljno jake da nadvladaju tendenciju ka uređenju. Srećom, u stvarnom svijetu ne bavimo se striktno jednodimenzionalnim materijalima već kvazijednodimenzionalnim materijalima koji se sastoje od slabo vezanih jednodimenzionalnih lanaca u kojima su fluktuacije ograničene trodimenzionalnim uređenjem valova gustoće na individualnim lancima. U takvim slučajevima, na dovoljno niskim temperaturama, može doći do faznog prijelaza i formiranja vala gustoće naboja. To je osnovno stanje slomljene simetrije⁴, 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 rešetku⁵. Ovo osnovno stanje slomljene simetrije od sada ćemo zvati CDW (charge-density-wave). Od 70-ih pa nadalje otkriveno je podosta kvazijednodimenzionalnih materijala koji posjeduju CDW fazu (npr. $NbSe_3$). Oni pokazuju mnoštvo zanimljivih svojstava, kao npr. gigantske dielektrične konstante, neobična elastična svojstva itd[4].

⁴U ovom slučaju se "slama" (reducirana) translacijska simetrija kristala.

⁵Varijacije u Δ i ϕ dovode do kolektivnih pobuđenja. To su tzv. "fazoni" i "amplitoni".

Mehanizam stabilizacije u ovakvim materijalima zasniva se na gniježđenju Fermijeve površine (eng. nesting).



Slika 4: Primjer Fermijeve plohe koja posjeduje svojstvo gniježđenja.

Naime, ukoliko na Fermijevoj površini postoje međusobno (približno) paralelni dijelovi koji se mogu preslikati jedan u drugog jedinstvenim valnim vektorom \vec{q} (Slika 4) tada sustav "izgleda" kvazijednodimenzionalno duž vektora \vec{q} pa je otvorena mogućnost Peierlsove nestabilnosti, odnosno formiranja CDW stanja⁶. Bitno je za napomenuti da neće svi materijali koji zadovoljavaju uvjet gniježđenja formirati CDW jer to ovisi i o drugim parametrima.

Međutim, valovi gustoće naboja opaženi su i u materijalima sa zatvorenom Fermijevom površinom koja ne zadovoljava uvjet gniježđenja (npr. pod-dopirani kupratni supravodiči), te u njima mehanizam stabilizacije CDW-a nije još razjašnjen. Jedan mogući mehanizam predložen je u [6] i zasniva se na topološkoj rekonstrukciji Fermijeve plohe.

4 Topološka rekonstrukcija Fermijeve plohe

Grubo rečeno, da bi se stabilizirao CDW, potrebno je da se prilikom statičke deformacije energija elektrona u vrpici spusti dovoljno da kompenzira elastičnu energiju nastalu zbog deformacije. Mehanizam topološke rekonstrukcije predložen u [6] tvrdi da bi u nekim okolnostima takvo nešto bilo moguće kada bi se topologija Fermijeve plohe promijenila (npr. iz zatvorene

⁶Primjer ovakvog materijala su Bechgaardove soli.

u otvorenu) prilikom "uključivanja" periodičke modulacije. Mehanizam je za sada istražen samo za slučaj 2D izotropne vrpce i stoga ćemo ga za taj slučaj skicirati.

Neka u početku imamo elektrone opisane 2D izotropnom disperzijom:

$$\epsilon(p_x, p_y) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2). \quad (4.1)$$

Sustav, kao i prije, opisujemo pojednostavljenim Frolichovim Hamiltonijanom

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q + \frac{g}{\sqrt{A}} \sum_{kq} c_{k+q}^\dagger c_k (a_q + a_{-q}^\dagger), \quad (4.2)$$

gdje je sada A površina našeg 2D sustava. U slučaju statičke deformacije u smjeru x osi, fononski mod valnog vektora $Q\hat{x}$ biva makroskopski zaposjednut. Zbog toga, možemo se poslužiti Bogoliubovljevim shemom srednjeg polja te u hamiltonijanu (4.2) zamijeniti fononske operatore stvaranja i poništenja njihovim očekivanim vrijednostima⁷. Hamiltonijan u okviru aproksimacije srednjeg polja glasi:

$$H_{MF} = \sum_k [\epsilon_k c_k^\dagger c_k + \Delta e^{i\phi} c_{k+Q}^\dagger c_k + \Delta e^{-i\phi} c_{k-Q}^\dagger c_k] + \frac{A\hbar\omega_Q}{2g^2} \Delta^2, \quad (4.3)$$

gdje smo definirali parametar uređenja

$$\sqrt{A}\Delta e^{i\phi} = g(\langle a_Q \rangle + \langle a_{-Q}^\dagger \rangle), \quad (4.4)$$

u kojem A predstavlja površinu sustava. Preostali hamiltonijan elektronskog podsustava u kojem elektronšupljina parovi nastaju iz "kondenzata" fonona u modu valnog vektora \vec{Q} , može se dijagonalizirati kanonskom (Bogoliubovljevom) transformacijom iz čega slijedi nova disperzija

$$\epsilon_\pm(\vec{p}) = \frac{\epsilon_1(\vec{p}) + \epsilon_2(\vec{p})}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1(\vec{p}) - \epsilon_2(\vec{p})}{2}\right)^2 + \Delta^2}, \quad (4.5)$$

⁷Makroskopsko zaposjednuće se obično uvodi preko koherentnog stanja poznatog iz kvantne optike koji nema dobro definiran broj fonona, ali ima dobro definiranu fazu, baš kao i naša periodička modulacija. Također, u ovom stanju, očekivane vrijednosti operatora stvaranja i poništenja nisu nula što omogućava upotrebu teorije srednjeg polja.

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 $\pm Q/2$:

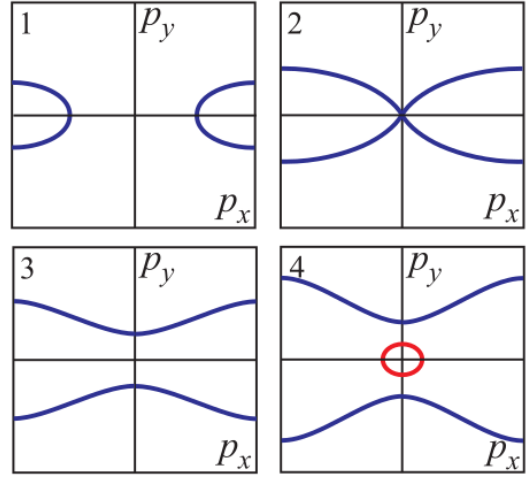
$$\epsilon_{1,2} = \frac{1}{2m}((p_x \pm Q/2)^2 + p_y^2). \quad (4.6)$$

Kada se uvedu nove, bezdimenzionalne varijable

$$e = \frac{2m\epsilon}{(Q/2)^2}, \quad \delta = \frac{2m}{(Q/2)^2}\Delta, \quad (x, y) = \frac{2}{Q}(p_x, p_y), \quad (4.7)$$

koje će nam dobro poslužiti u ostatku ovog seminara, disperzije se mogu zapisati kao:

$$e_\pm(x, y) = 1 + x^2 + y^2 \pm \sqrt{4x^2 + \delta^2} \quad (4.8)$$

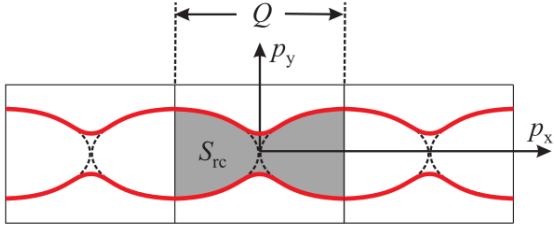


Slika 5: Linije konstantne energije za (i). $e < 1 - \delta$, (ii) $e = 1 - \delta$, (iii) $1 - \delta < e < 1 + \delta$, (iv) $e > 1 + \delta$. Preuzeto iz [6].

Na slici 5 prikazane su linije konstantne energije unutar 1. Brillouinove zone ($-1 < x < 1$) za energije u različitim intervalima. Donji pojas e_- (plava boja) ima sedlenu točku u $x = y = 0$ na energiji $e = 1 - \delta$. Za energije manje od te kritične, linije konstantne energije su zatvorene (u prikazu ponovljene zone) te se prolaskom kroz kritičnu energiju transformiraju u otvorene. Krivulja $e = 1 - \delta$ je separatrissa. Također, gornji pojas e_+ ima svoj minimum u $x = y = 0$ energije $e = 1 + \delta$ pa se za energije veće od te pojavljuje novi, topološki nepovezani "džep" na ekvivalentnoj konturi.

Sada možemo ukratko skicirati mehanizam stabilizacije valova gustoće naboja koji se zasniva na prethod-

nim razmatranjima.



Slika 6: Shematski prikaz topološke transformacije Fermijeve plohe iz inicijalno zatvorene (crtkana linija) u otvorenu (crvena linija) uzrokovane pojavom CDW-a valnog vektora $Q = 2k_F$. Preuzeto iz [6].

Grubo rečeno, uključivanje periodičkog potencijala (uzrokovanog pojavom CDW-a) periodičnosti dane s $Q = 2k_F$ ⁸ dovesti će početne Fermijeve plohe (kružnice) u dodir (u prikazu ponovljenih zona) te ukloniti degeneraciju u točkama dodira. To će dovesti do topološke transformacije Fermijeve plohe iz zatvorenog u otvoreni tip (Slika 6). Kako je vidljivo na slici 6, takva topološka rekonstrukcija povećava površinu Fermievog mora, a samim time i broj stanja. S obzirom da broj elektrona u vrpce mora biti očuvan, sustav će morati smanjiti svoju Fermijevu energiju (kemijski potencijal), a shodno tome i energiju čitave vrpce. To implicira općenita termodinamička relacija jednakosti među malim promjenama termodinamičkih potencijala prilikom promjene neke od termodinamičkih varijabli koja nije uključena u Legendreovu transformaciju među njima (poznata kao teorem malih inkremenata [9]).

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

$$\epsilon_F = \epsilon_{F0}. \quad (4.9)$$

Ovaj uvjet predstavlja granični slučaj argumenta u prethodnom paragrafu u kojem teorem malih inkremenata nije konkluzivan. Kombinirajući ovaj uvjet s uvjetom očuvanja broja elektrona

$$\int_{\epsilon(p_x, p_y) = \epsilon_F} dp_x dp_y = \pi p_{F0}^2, \quad (4.10)$$

može se pokazati da razvoj ukupne energije (vrpca +

⁸Detaljniji račun minimizacije energije elektronske vrpce vodi na nešto malo drugačiju vrijednost Q , no to nam nije bitno za naša kvalitativna razmatranja.

rešetka) po (bezdimezionalnom) parametru uređenja ima oblik

$$\frac{E_{CDW}}{E_0} = \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_C} \right) \delta^2 + \frac{1}{\pi} \delta^3 + O(\delta^{\frac{7}{2}}), \quad (4.11)$$

gdje je $\delta = \Delta/\epsilon_{F0}$ bezdimezionalni parametar uređenja, a $\lambda = mg^2/2\pi\hbar^3\omega_Q$ bezdimezionalna konstanta vezanja. Razvoj (4.11) ukazuje na činjenicu da postoji kritična vrijednost konstante vezanja $\lambda_c = (1 + 2/\pi)^{-1}$, takva da će jedino za $\lambda > \lambda_c$ biti moguće stabilizirati val gustoće. Za te vrijednosti konstante vezanja, ukupna energija imati će minimum za konačnu vrijednost parametra uređenja. Iako analogan razvoju slobodne energije u teoriji faznog prijelaza 2. reda, razvoj (4.11) razlikuje se po tome što je stabilizirajući član kubičan, a ne kvartičan u parametru uređenja.

5 Gustoća stanja

Kvalitativna, a i kvantitativna razmatranja vezana za mehanizam skiciran u prethodnom potpoglavlju zahtijevaju uvid u gustoću stanja "rekonstruiranog" sustava. Iako je analiza ovog mehanizma stabilizacije za sada provedena samo za dvodimezionalni sustav, u fizici obično nemamo čisti 2D sustav, već možemo govoriti samo o jako anizotropnim 3D sustavima. Stoga, gustoću stanja računamo za trodimezionalni anizotropni plin podvrgnut periodičkoj modulaciji. Ponašanje gustoće stanja u ovisnosti o anizotropiji trebalo bi nam dati korisne smjernice za daljnja istraživanja vezana za ovaj mehanizam.

Neka su elektroni inicijalno opisani 3D anizotropnom kvadratičnom disperzijom

$$\epsilon(\vec{p}) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + ap_y^2 + bp_z^2), \quad (5.1)$$

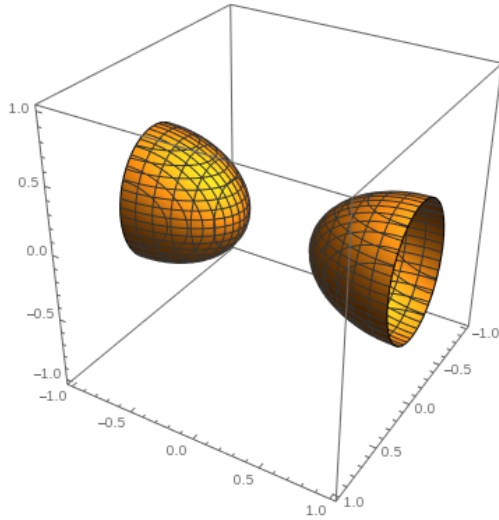
gdje smo uveli bezdimezionalne parametre anizotropije a i b . 3D izotropni slučaj dobivamo u granici $a = b = 1$, a maksimalno anizotropni slučaj (2D) u granici $b = 1, a = 0$ (ili obrnuto). Nakon uključivanja periodičkog potencijala jakosti Δ i impulsa Q u x -smjeru, novu disperziju dobivamo uvrštavanjem (5.1) u (4.5):

$$\epsilon_{\pm} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + ap_y^2 + bp_z^2 + (Q/2)^2 \pm \sqrt{(p_x Q)^2 + (2m\Delta)^2}). \quad (5.2)$$

Radi jednostavnosti računanja i analize, opet uvodimo bezdimenzionalne varijable pomoću skaliranja (4.7). Disperzija sada glasi:

$$e_{\pm} = x^2 + ay^2 + bz^2 + 1 \pm \sqrt{4x^2 + \delta^2} \quad (5.3)$$

Disperzija ima dvije vrpce koji imaju slično ponašanje kao i u prethodno analiziranom dvodimenzionalnom slučaju. Za energije $e < 1 - \delta$, plohe konstantne energije su zatvoreni "elipsoidi" (Slika 7; prikazana je samo 1. Brillouinova zona). Disperzija donje vrpce



Slika 7: Primjer plohe konstantne energije za $e < 1 - \delta$. Prikazana je samo 1. Brillouinova zona.

e_- ima sedlenu točku za $e = 1 - \delta$ u $x = y = z = 0$ te za veće energije plohe konstantne energije postaju otvorenog tipa (Slika 8).

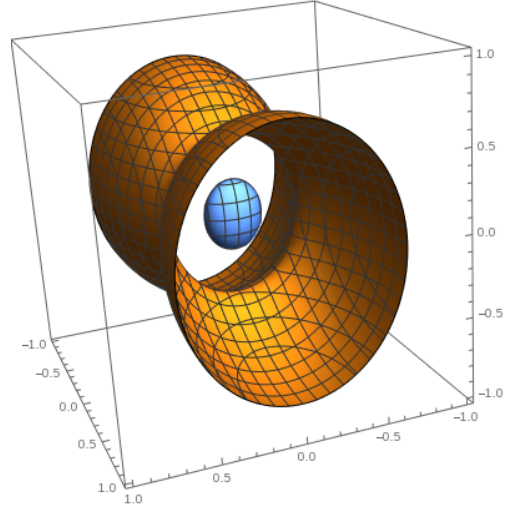
Gornja vrpca ima minimum na energiji $e = 1 + \delta$ pa se za energije $e > 1 + \delta$ pojavljuje i topološki nepovezani "džep" u plohi konstantne energije koji će davati odvojeni doprinos gustoći stanja.

Račun gustoće stanja

Počinjemo sa općenitim izrazom za gustoću stanja

$$g(\epsilon) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{S(\epsilon)} \frac{dS}{|\nabla_k \epsilon(k)|} \quad (5.4)$$

gdje se integrira po plohi konstantne energije $S(\epsilon)$ u Brillouinovoj zoni. Stoga, uzimamo da su p_x, p_y nezavisne varijable, a p_z promatramo kao njihovu funkciju.



Slika 8: Primjer plohe konstantne energije za $e > 1 - \delta$. Kao što vidimo ploha donje vrpce je otvorenog tipa, a pojavljuje se i "džep" (plava boja) koji potječe od gornje vrpce.

Element površine možemo izraziti kao:

$$dS = \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_y}\right)^2} dp_x dp_y. \quad (5.5)$$

S obzirom da integriramo po plohi konstantne energije možemo pisati:

$$d\epsilon = \frac{\partial \epsilon}{\partial p_x} dp_x + \frac{\partial \epsilon}{\partial p_y} dp_y + \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} dp_z = 0. \quad (5.6)$$

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

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial p_x} = -\frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \frac{\partial p_z}{\partial p_x}, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial p_y} = -\frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \frac{\partial p_z}{\partial p_y} \quad (5.7)$$

pa se nazivnik u (5.4) može napisati kao

$$|\nabla_k \epsilon(k)| = \hbar \left| \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \right| \sqrt{1 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial p_z}{\partial p_y}\right)^2}. \quad (5.8)$$

Koristeći (5.8) i (5.5) dobivamo prilično pojednostavljen izraz za gustoću stanja

$$g(\epsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \left| \frac{\partial \epsilon}{\partial p_z} \right|^{-1} dp_x dp_y. \quad (5.9)$$

Kada se izračuna derivacija i ponovno uvedu bezdimenzionalne varijable (4.7) ovaj izraz postaje

$$g(e) = \frac{mQ}{(2\pi\hbar)^3 b} \int \int |z|^{-1} dx dy, \quad (5.10)$$

gdje još nismo specificirali granice integracije. Ukupna gustoća stanja sastojat će se od dva doprinosa koji potječu od dvije energijske vrpce (5.3);

$$g(e) = g^+(e) + g^-(e). \quad (5.11)$$

Gornja vrpca počinje na energiji $e = 1 + \delta$ pa neće doprinosti gustoći stanja na nižim energijama. Stoga prvo računamo doprinos donje vrpce $g^-(e)$. Prvo, izražavamo z na plohi konstantne energije kao funkciju x, y i e . U tu svrhu invertiramo disperzijsku relaciju donje vrpce:

$$|z^-| = \sqrt{\frac{e - 1 - x^2 - ay^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2}}{b}}. \quad (5.12)$$

Da bi odredili granice integracije potrebno je odrediti ponašanje geometrijskog područja u $x - y$ ravnini iznad (ispod) kojeg postoji točka na plohi konstantne energije. Ponašanje tog područja s obzirom na povećanje energije dano je na slici 5. Neka je $f^-(x; e) = e - 1 - x^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2}$. Gustoću stanja za donju vrpcu sada možemo zapisati kao:

$$g^-(e) = \frac{8mQ}{(2\pi\hbar)^3\sqrt{b}} \int_{x_c^-(e)}^1 dx \int_0^{y_c(x)} dy \frac{1}{\sqrt{f^-(x; e) - ay^2}}. \quad (5.13)$$

Faktor 8 dolazi zbog toga što imamo 4 kvadranta te pozitivnu i negativnu granu plohe konstantne energije, a mi integriramo samo po jednom kvadrantu ($x \geq 0$, $y \geq 0$) i jednoj grani (Slika 7,8). Za energije $e < 1 - \delta$ donja granica x-integracije dana je rješenjem jednadžbe

$$e - 1 - x_c^-(e)^2 + \sqrt{4x_c^-(e)^2 + \delta^2} = 0. \quad (5.14)$$

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

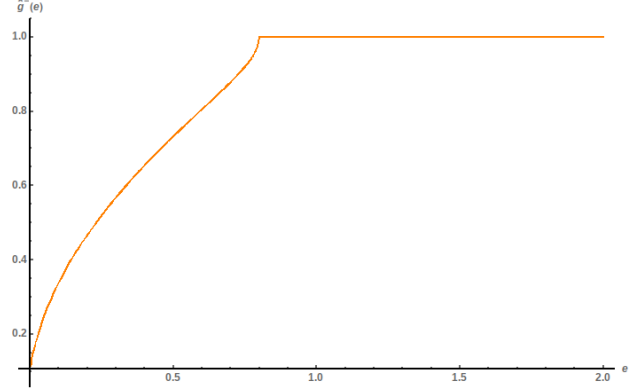
Granicu y-integracije dobivamo invertiranjem uvjeta $z^- = 0$ što nam daje

$$y_c(x; e) = \sqrt{\frac{f^-(x; e)}{a}}. \quad (5.15)$$

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

blićni⁹ te gustoća stanja postaje

$$g^-(e) = \frac{mQ}{2\pi^2\hbar^3} \frac{[1 - x_c^-(e)]}{\sqrt{ab}}. \quad (5.16)$$



Slika 9: (Skalirana) gustoća stanja $\hat{g}^-(e) = g^-(e)2\pi^2\hbar^3/mQ$ donje vrpce za $\delta = 0.2$, $a = 1$ i $b = 1$.

Problem gustoće stanja sveo se na numeričko traženje korijena jednadžbe (5.14) što nam daje prikaz na slici 9 (za slučaj $\delta = 0.2$). Kao što smo već naglasili, za $e > 1 - \delta$ je donja granica integracije $x_c^-(e) = 0$ pa stoga gustoća stanja donjeg pojasa poprima konstantnu vrijednost. Poslije ćemo se osvrnuti na ovu zanimljivost.

Posvetimo se sada gustoći stanja gornje vrpce. Slično kao i prije, neka je $f^+(x; e) = e - 1 - x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2}$. Koristeći (5.10) slijedi izraz

$$g^+(e) = \frac{8mQ}{(2\pi\hbar)^3\sqrt{b}} \int_0^{x_c^+(e)} dx \int_0^{y_c(x)} dy \frac{1}{\sqrt{f^+(x; e) - ay^2}}. \quad (5.17)$$

Izraz je gotovo isti kao i za $g^-(e)$. Glavna razlika je u granicama x-integracije. Kako gornja vrpca počinje tek na energiji $e = 1 + \delta$, doprinos $g^+(e)$ na energijama manjim od te će biti nula. Kada prijedemo taj prag, pojavljuje se "elipsoidni" džep plohe konstantne energije (Slika 8) u centru Brillouinove zone po kojem integriramo da bi dobili gustoću stanja. Kao i prije, iz uvjeta $z^+ = 0$ dobivamo granice. Za $e \geq 1 + \delta$, $x_c^+(e)$ dobivamo kao rješenje jednadžbe

$$e - 1 - x_c^+(e)^2 - \sqrt{4x_c^+(e)^2 + \delta^2} = 0, \quad (5.18)$$

⁹ $\int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{1-z^2}} = \frac{\pi}{2}$

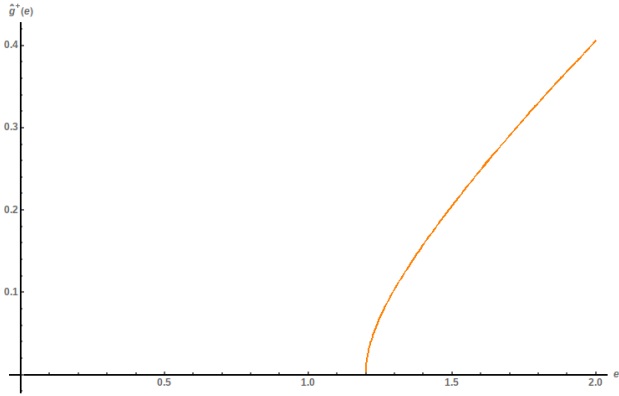
dok je gornja granica y-integracije:

$$y_c(x; e) = \sqrt{\frac{f^+(x; e)}{a}}. \quad (5.19)$$

Integracija po y je opet tablična pa preostaje

$$g^+(e) = \frac{mQ}{2\pi^2\hbar^3} \frac{x_c^+(e)}{\sqrt{ab}}, \quad (5.20)$$

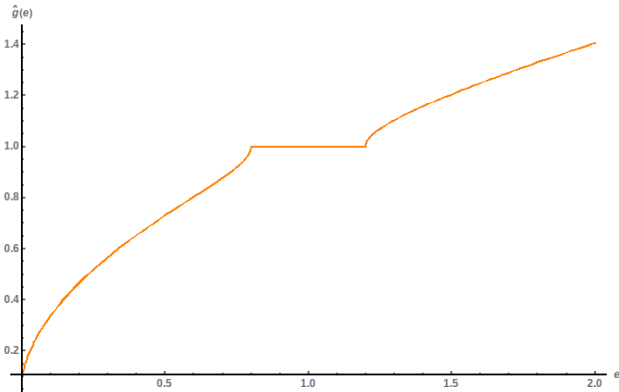
gdje uzimamo da je $x_c^+(e) = 0$ za $e < 1 + \delta$. Numeričkim rješavanjem (5.18) dobivamo prikaz na slici 10.



Slika 10: (Skalirana) gustoća stanja $\hat{g}^+(e) = g^+(e)2\pi^2\hbar^3/mQ$ donje vrpce za $\delta = 0.2$, $a = 1$ i $b = 1$.

Sada, ukupnu gustoću stanja dobivamo jednostavnim zbrajanjem $g(e) = g^+(e) + g^-(e)$:

$$g(e) = \frac{mQ}{2\pi^3\hbar^3} \frac{[1 - x_c^-(e) + x_c^+(e)]}{\sqrt{ab}}. \quad (5.21)$$



Slika 11: (Skalirana) ukupna gustoća stanja $\hat{g}(e) = g(e)2\pi^2\hbar^3/mQ$ za $\delta = 0.2$, $a = 1$ i $b = 1$.

6 Analiza i utjecaj anizotropije

Prije svega, nomenklature radi, točke u kojima dolazi do topološke rekonstrukcije plohe konstantne energije nazivamo Lifshitzove točke¹⁰. Kao što vidimo na slici 11, gustoća stanja je klase C^0 (u smislu matematičke analize) 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). Ovo je u skladu s Van Hoveovim općenitim razmatranjima analitičkog ponašanja gustoće stanja[8]. Također, singularno ponašanje naše gustoće stanja potpuno je u skladu s Van Hoveovom klasifikacijom singulariteta u gustoći stanja s obzirom na vrstu "kritične" točke ($\nabla_k \epsilon(k) = 0$) disperzije. Donja Lifshitzova točka ($e_L^- = 1 - \delta$) je sedlena točka donjeg pojasa te prolaskom kroz nju u smjeru povećanja energije, zatvorena ploha konstantne energije postaje otvorena. Van Hove predviđa da će u blizini e_L^- gustoća stanja imati sljedeće ponašanje:

$$g^-(e) = \begin{cases} A - B\sqrt{e_L^- - e}, & e < e_L^- \\ A + O(e - e_L^-), & e > e_L^- \end{cases} \quad (6.1)$$

S druge strane, gornja Lifshitzova točka $e_L^+ = 1 + \delta$ je minimum gornje vrpce. Van Hove predviđa sljedeće ponašanje gustoće stanja:

$$g^+(e) = \begin{cases} 0, & e < e_L^+ \\ \sqrt{e - e_L^+}, & e > e_L^+ \end{cases} \quad (6.2)$$

Oba ova rezultata su u skladu s ponašanjem naše gustoće stanja (Slika 11). Posebno, (6.1) nam "objašnjava" zanimljivo povećanje nagiba gustoće stanja neposredno prije donje Lifshitzove točke u kojoj naglo postaje konstantna.

Također, smanjenjem jakosti periodičkog potencijala ($\delta \rightarrow 0$) Lifshitzove točke se približavaju te područje u kojem gustoća stanja poprima konstantnu vrijednost nestaje. U konačnici, potpunim gašenjem potencijala ($\delta = 0$), gornja i donja vrpca se spajaju te ponovno imamo običnu 3D kvadratičnu disperziju (5.1). Naša gustoća stanja u tom limesu daje (nakon prikladnog

¹⁰Prema I.M. Lifshitzu koji je bio jedan od prvih fizičara koji je proučavao kritično ponašanje elektronskog sistema uzrokovano promjenom topologije Fermijeve plohe [7].

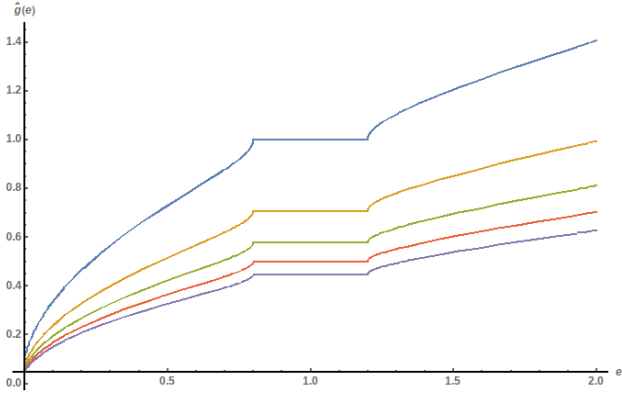
reskaliranja)

$$g(\epsilon) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{\epsilon}, \quad (6.3)$$

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

Utjecaj anizotropije

Parametri anizotropije a i b ulaze u gustoću stanja preko jednostavnog faktora \sqrt{ab} u nazivniku izraza (5.21). Iz toga je jasno da povećavanje anizotropije neće kvalitativno promijeniti ponašanje gustoće stanja, već će ju samo skalirati (Slika 12).



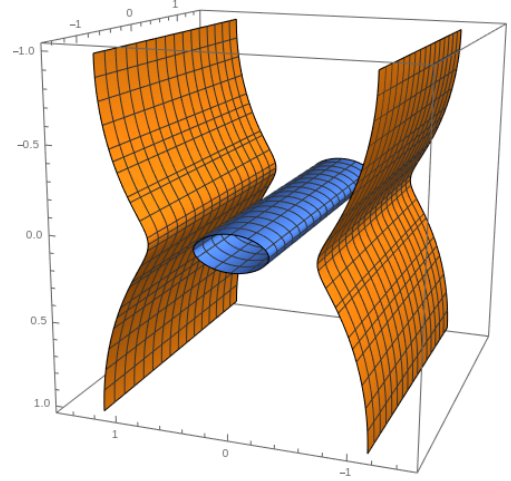
Slika 12: (Skalirana) gustoća stanja $\hat{g}(e) = g(e)2\pi^2\hbar^3/mQ$ za $\delta = 0.2$, $a = 1$ i različite vrijednosti b : (i) $b = 1$ (plava linija), (ii) $b = 2$ (narančasta linija), (iii) $b = 3$ (zeleno linija), (iv) $b = 4$ (crvena linija), (v) $b = 5$ (tamno plava linija).

Međutim, naš račun nije dobar u granici maksimalne anizotropije ($a = 0$ ili $b = 0$) u kojem naša početna disperzija (5.1) postaje egzaktno dvodimenzionalna. To se očituje i u formuli (5.21) pojavom nule u nazivniku za taj slučaj.

Razlog zašto naša formula nije dobra u tom slučaju je to što plohe konstantne energije (u slučaju $a = 0$ postanu neograničene u y smjeru (Slika 13), pa gornja granica integracije po y (5.15) ode u beskonačnost što čini integral (5.13) loše definiranim. Kako disperzija više ne ovisi o p_y , tom problemu ćemo doskočiti tako što ćemo odrezati integral na nekoj konačnoj vrijednosti impulsa p_y te računati gustoću stanja po jedinici p_y .

Stavljanjem $b = 1$ i $a = 0$ izraz (5.13) postaje

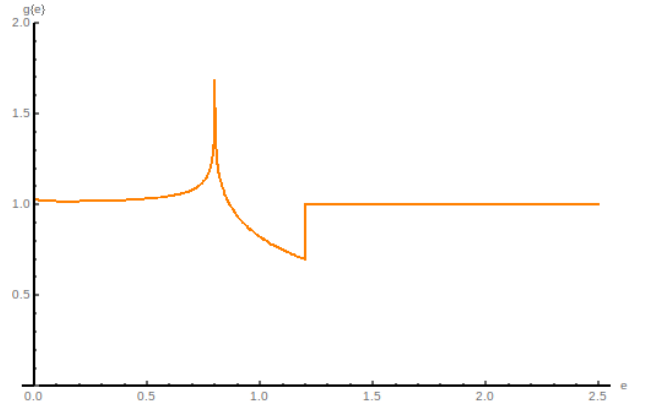
$$g^\pm(e) = \frac{8mQ}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{2\hbar}{Q} \Delta k_y \int \frac{dx}{\sqrt{e-1-x^2} \mp \sqrt{4x^2+\delta^2}}$$



Slika 13: Primjer plohe konstantne energije u slučaju maksimalne anizotropije.

$$\Rightarrow \frac{g^\pm(e)}{\Delta k_y g^{(0)}} = \frac{2}{\pi} \int \frac{dx}{\sqrt{e-1-x^2} \mp \sqrt{4x^2+\delta^2}}, \quad (6.4)$$

gdje smo u posljednjem koraku podijelili gustoću stanja sa (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. Rezultat je prikazan na slici 14.



Slika 14: Gustoća stanja u dvodimenzionalnom slučaju (maksimalna anizotropija).

Evidentno je da je gustoća stanja u slučaju maksimalne anizotropije značajno drugačija od slučaja konačne anizotropije. Ovakvo "singularno" ponašanje gustoće stanja s obzirom na anizotropiju posljedica je promjene poretka limesa i integracije. Kao što se vidi na slici 14, gustoća stanja je u početku konstantna

(kao i u slučaju 2D slobodnog elektronskog plina), ali naglo divergira kad energija dođe do donje Lifshitzove točke ($e_L^- = 1 - \delta$). Tu se radi o Van Hoveovom singularitetu logaritamskog tipa

$$g(e) \sim \ln \left| 1 - \frac{e}{e_L^-} \right|. \quad (6.5)$$

U području između Lifshitzovih točaka gustoća stanja pada sve dok za $e = 1 + \delta$ naglo ne poprimi konstantnu vrijednost standardnog 2D plina (zahvaljujući diskontinuitetu u $g^+(e)$). Područje između Lifshitzovih točki, gdje je gustoća stanja značajno smanjena nazivamo pseudoprocjep (pseudogap).

Činjenica da se valovi gustoće naboja mogu stabilizirati u dvije dimenzije svakako je u skladu s postojanjem pseudoprocjepa. Naime, ukoliko se Fermijeva energija sustava nalazi između Lifshitzovih točki, pojava vala gustoće 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. S obzirom da, prema našim izračunima, u 3 dimenzije područje između Lifshitzovih točki nije tako značajno osiromašeno stanjima kao u dvije dimenzije, otvara se niz zanimljivih pitanja o robustnosti mehanizma topološke rekonstrukcije u trodimenzionalnim anizotropnim sustavima. Ta su pitanja kvantitativne prirode i predstavljaju moguće pravce daljnjih napora u istraživanju valova gustoće naboja.

7 Zaključak

U ovom smo se seminaru prvenstveno bavili jednim specifičnim, dobro definiranim problemom izračuna gustoće stanja za trodimenzionalnu anizotropnu disperzijsku relaciju elektrona izloženih periodičkom potencijalu. Kao uvertiru u taj izračun, izložili smo elementarnu skicu grupe fenomena poznatih pod nazivom "valovi gustoće naboja". Takvi fenomeni odlikuju se spontanom pojavom statičke deformacije rešetke popraćene periodičkom modulacijom raspodjele naboja i njihovo razmatranje pružili su nam kontekst i inicijalnu motivaciju bavljenja gustoćom stanja. Nakon toga, predstavili smo naš rezultat te diskutirali njegovo ponašanje s obzirom na energiju i anizotropiju te pokušali povezati to ponašanje sa svojstvima disperzijske relacije. Iako bi bilo razumno očekivati

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. Iako sugestivan, implikacije tog rezultata nismo imali vremena istražiti u sklopu ovog seminara jer zahtijevaju detaljan uvid u energetske "bilancu" i elektronskog i fononskog podsustava. Ta ćemo razmatranja ostaviti kao mogućnost budućih istraživanja.

Zahvale

Iskreno zahvaljujem svom mentoru, izv. prof. dr. sc. Danku Radiću, što me primio kao svog studenta te mi pružio savjet, poduku i moralnu podršku svaki put kada se za to ukazala potreba.

Literatura

- [1] Lifshitz I. M., Kaganov M. I., **Some problems of the electron theory of metals I. Classical and quantum mechanics of electrons in metals**, Sov. Phys. Usp. 2 831–855 (1960)
- [2] Peierls R., **On the theory of electric and thermal conductivity of metals**, Ann. Phys. 4, 121 (1930)
- [3] Solyom J., **Fundamentals of the physics of solids, Vol.2-Electronic structure; Vol.3-Normal, broken symmetry and correlated systems**, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2009)
- [4] Thorne R. E., **Charge-density-wave conductors**, Physics Today 49, 5, 42 (1996)
- [5] Gruner G., **Density waves in solids**, CRC press (2000)
- [6] Kadigrobov A., Bjeliš A., Radić D., **Topological instability of two-dimensional conductors**, Physical Review B. 97. 10.1103 (2018)
- [7] Lifshitz. I. M., **Anomalies of Electron Characteristics of a Metal in the High Pressure Region**, JETP, Vol. 11, No. 5 (1960)

- [8] Van Hove L., **The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of crystal**, Phys. Rev. 89, 1189 (1953)
- [9] Landau L.D., Lifshitz E.M., **Statistical physics**, Part 1, Sec. 15, 24, Pergamon Press, Oxford (1980)