

# Utjecaj anizotropije trodimenzionalne slobodnoelektronske vrpce pod utjecajem periodičkog potencijala na stabilnost kondenzata

---

Spaić, Marin

Master's thesis / Diplomski rad

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:180639>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-03-14**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

Marin Spaić

UTJECAJ ANIZOTROPIJE  
TRODIMENZIONALNE  
SLOBODNOELEKTRONSKE VRPCE POD  
UTJECAJEM PERIODIČKOG POTENCIJALA NA  
STABILNOST KONDENZATA

Diplomski rad

Zagreb, 2020.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: ISTRAŽIVAČKI

**Marin Spaić**

Diplomski rad

**Utjecaj anizotropije trodimenzionalne  
slobodnoelektronske vrpce pod  
utjecajem periodičkog potencijala na  
stabilnost kondenzata**

Voditelj diplomskog rada: izv. prof. dr. sc. Danko Radić

Ocjena diplomskog rada: \_\_\_\_\_

Povjerenstvo: 1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

Datum polaganja: \_\_\_\_\_

Zagreb, 2020.

*Zahvaljujem se svom mentoru izv. prof. dr. sc. Danku Radiću na strpljenju koje je za mene imao, vremenu koje mi je poklonio, znanju koje je sa mnom podijelio i slobodi koju mi je omogućio.*

*Također, zahvaljujem svojim kolegama i prijateljima Eugenu Rožiću, Deniju Nurkiću, Juraju Ovčaru i Bruni Gudcu bez čije prisutnosti bi mi intelekt, ali i smisao za humor, zasigurno otupjeli.*

*Na posljetku, zahvaljujem svojim roditeljima, Branimiru i Mariji, na beskonačnoj podršci i strpljenju koje mi je bilo potrebno tijekom mnogih uspona i padova te djevojci Gloriji koja mi je, u sutonu mog studiranja, pružila prijeko potrebnu svježinu i inspiraciju.*

## Sažetak

Pojava valova gustoće naboja (eng. charge density waves - CDWs) tradicionalno je povezana sa tzv. kvazi-jednodimenzionalnim materijalima visoko anizotropne Fermijeve plohe koja zadovoljava uvjet gniježđenja što omogućava pojavu Peierlsove nestabilnosti. Međutim, realizacija valova gustoće naboja u materijalima čije su Fermijeve plohe topološki zatvorene i koje ne zadovoljavaju uvjet gniježđenja, zahtijeva kvalitativno drukčiji mehanizam stabilizacije CDW uređenja. Upravo takav mehanizam predložili su Kadigrobov i suradnici u [Kadigrobov et al. Phys. Rev. B (2018)] za slučaj 2D izotropne paraboličke vrpce i on se zasniva na topološkoj rekonstrukciji elektronske vrpce podvrgnute periodičkom potencijalu koji će topološki transformirati inicijalno zatvorenu Fermijevu plohu u otvorenu (u prikazu ponovljene zone).

Tema ovog diplomskog rada je poopćenje ovog mehanizma za slučaj trodimenzionalne slobodnoelektronske vrpce te ispitivanje utjecaja anizotropije na mogućnost stabilizacije valova gustoće naboja. Nakon kratkog uvoda u fenomen valova gustoće naboja u kvazi-jednodimenzionalnim materijalima i mehanizam njihovog nastanka, odnosno Peierlsovu nestabilnost, dajemo kvalitativnu skicu mehanizma topološke rekonstrukcije vrpce te određujemo utjecaj pojave CDW uređenja na elektronsku disperziju trodimenzionalne slobodnoelektronske vrpce u okviru aproksimacije srednjeg polja. Potom računamo gustoću stanja za dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu rekonstruiranu vrpcu te uvodimo anizotropiju varirajući efektivnu masu u jednom smjeru u originalnoj disperziji. Utvrđuje se da ovaj način uvođenja anizotropije ne dovodi do kvalitativne promjene u gustoći stanja te nam stoga ne dozvoljava da prirodno povežemo naše rezultate s rezultatima za dvodimenzionalnu vrpcu. Zbog toga se okrećemo novom načinu tretiranja anizotropnog sustava kao izotropnog sustava koji egzistira u prostoru necjelobrojne dimenzionalnosti što, ako već nema sa geometrijskog, ima smisla sa fizikalnog gledišta. U ovakvom tretmanu, variranje dimenzije u rasponu  $d \in [2, 3]$  dovodi do "glatkog" prijelaza gustoće stanja 2D vrpce u pripadnu gustoću stanja 3D vrpce. Nakon toga, okrećemo se ispitavanju energetske "bilance" sustava. Kao preliminarni rezultat, metodom Lagrangeovog multiplikatora, pokazujemo da je smanjenje energije vrpce (uz ograničenje očuvanja broja elektrona) najveće ukoliko Fermijeva energija ostane nepromijenjena prilikom rekonstrukcije vrpce. Ovaj rezultat je općenit utoliko što ne ovisi o detaljima promjene gustoće sta-

nja sustava te upućuje na činjenicu da će smanjenje energije potjecati isključivo od redistribucije popunjenih stanja od viših prema nižim energijama uzrokovane promjenom gustoće stanja. Ovaj rezultat potom uvrštavamo u uvjet očuvanja broja elektrona što nam omogućava da numeričkim rješavanjem jednadžbe odredimo optimalni valni vektor CDW parametra uređenja koji se, kako povećavamo dimenziju, sve više razlikuje od vrijednosti  $2k_{F0}$  koja se pojavljuje u Peierlsovoj nestabilnosti, gdje je  $k_{F0}$  Fermijev valni broj nerekonstruirane vrpce. Koristeći optimalni valni vektor, računamo relativno smanjenje energije vrpce  $\Delta E/E_0$  te dodavanjem pozitivnog fononskog doprinosa (elastična energija statičke deformacije rešetke) utvrđujemo da se val gustoće naboja može stabilizirati za bilo koju dimenziju sustava  $d \in [2, 3]$  ukoliko je bezdimenzionalna konstanta elektron-fonon vezanja  $\lambda$  veća od kritičnog iznosa  $\lambda_c$  koji raste s porastom dimenzije. U tom smislu, možemo zaključiti da CDW uređenje predstavlja kvantni fazni prijelaz s obzirom na parametar  $\lambda$  koji određuje relativnu jakost elektron-fonon interakcije.

Ključne riječi: valovi gustoće naboja, topološka rekonstrukcija vrpce, anizotropija, necjelobrojna dimenzija

# The influence of anisotropy of three-dimensional free electron band under periodic potential on stability of the condensate

## Abstract

The phenomenon of charge density waves (CDWs) is traditionally related to so-called quasi-one-dimensional materials with a highly anisotropic Fermi surface that satisfies the nesting condition which brings about the possibility of Peierls instability. However, the realization of density waves in materials with closed Fermi surfaces which don't satisfy the nesting condition, requires a qualitatively different mechanism of CDW stabilization. Such a mechanism was proposed by Kadigrobov et al. [Kadigrobov et al. Phys. Rev. B (2018)] for a case of 2D isotropic parabolic band and it is based on topological reconstruction of electron band subjected to a periodic potential causing a topological transformation of initially closed Fermi surface to an open one.

The subject of this master's thesis is the generalization of the proposed mechanism to the case of three-dimensional free-electron band and the investigation of the effect of anisotropy on the possibility of CDW stabilization. After a short introduction to the phenomenon of charge density waves in quasi-one-dimensional materials and the mechanism of their stabilization, namely Peierls instability, we give first a qualitative sketch of the mechanism of topological reconstruction and then calculate the effect of CDW ordering on electron dispersion of a three-dimensional free electron band using the mean field approximation. After that, we calculate the density of states (DOS) both for the case of two- and three-dimensional bands where anisotropy is introduced by varying the effective mass corresponding to a chosen direction in the original dispersion. We find that such a method of introducing anisotropy doesn't bring about any qualitative change in the calculated density of states and, therefore, makes it impossible to connect our results for a 3D band with the results for a 2D band. For this reason, we turn to a new way of treating an anisotropic system as an isotropic system living in a space of non-integer dimensionality which seems nonsensical from a purely geometrical point of view, but makes sense from a physical one. Such a treatment enables us to obtain a smooth crossover of density of states as we

vary the dimension in the range  $d \in [2, 3]$ . After that, we turn our attention to the "energetics" of the system. As a preliminary result we establish, using the method of Lagrange multipliers, that the decrease of band energy due to band reconstruction is maximal (subject to the constraint of electron number conservation) when the Fermi energy remains as it was before the reconstruction. This result is general in so far as it does not depend on the details of the change in the density of states and it points to the fact that the energy decrease will be solely the effect of redistribution of filled states from higher toward lower energies caused by the change in DOS. Plugging this result back in the equation expressing electron number conservation enables us to find the optimal CDW wave vector of the CDW order parameter which differs more and more significantly from the value  $2k_{F0}$  required by Peierls instability as the dimension gets higher, where  $k_{F0}$  is a Fermi wave number of the initial band. Using the optimal wave vector we calculate the relative decrease of band energy  $\Delta E/E_0$  which, when combined with the mean field phonon contribution (elastic energy of static lattice deformation), enables us to find that CDW stabilization via topological reconstruction is possible for all dimensions in range  $d \in [2, 3]$  if the dimensionless electron-phonon coupling constant  $\lambda$  is larger than its critical value  $\lambda_c$  which increases with dimension. In that sense, we conclude that CDW ordering is a quantum phase transition with respect to a parameter  $\lambda$  that determines the relative strength of electron-phonon interaction.

Keywords: charge density waves, topological reconstruction of the electron band, anisotropy, non-integer dimension



# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Valovi gustoće naboja</b>	<b>4</b>
2.1	Peierlsova nestabilnost . . . . .	4
2.2	Nestabilnost u kvazi-jednodimenzionalnim materijalima i gniježđenje (eng. nesting) Fermijeve plohe . . . . .	6
2.3	Svojstva CDW stanja . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Topološka rekonstrukcija vrpce</b>	<b>13</b>
3.1	Topološka rekonstrukcija dvodimenzionalne slobodnoelektronske vrpce	13
3.2	Kvalitativna diskusija stabilizacije CDW-a . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Gustoća stanja</b>	<b>18</b>
4.1	Gustoća stanja dvodimenzionalne izotropne vrpce pod utjecajem peri- odičkog potencijala . . . . .	18
4.2	Topološka rekonstrukcija trodimenzionalne anizotropne slobodnoelek- tronske vrpce . . . . .	22
4.2.1	Gustoća stanja . . . . .	24
4.2.2	Utjecaj anizotropije . . . . .	27
4.3	Gustoća stanja topološki rekonstruirane vrpce necjelobrojne dimenzi- onalnosti . . . . .	29
4.3.1	Račun gustoće stanja . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Energija vrpce i stabilnost kondenzata</b>	<b>34</b>
5.1	Optimalna Fermijeva energija nakon topološke rekonstrukcije . . . . .	34
5.2	Optimalni impuls vala gustoće naboja . . . . .	36
5.2.1	Provjera uvjeta minimuma . . . . .	39
5.3	Račun energije vrpce . . . . .	42
5.3.1	Stabilizacija vala gustoće naboja . . . . .	44
<b>6</b>	<b>Zaključak</b>	<b>49</b>
	<b>Literatura</b>	<b>51</b>

# 1 Uvod

U apstraktnom smislu, kristalne materijale možemo promatrati kao amalgam kristalne rešetke atoma sa svojim fononskim pobuđenjima i Fermijeve tekućine elektrona čija su kvazičestična pobuđenja opisana određenom disperzijskom relacijom  $\varepsilon(\mathbf{p})$  koja inkorporira efekt interakcije elektrona i periodičkog potencijala kristalne rešetke [1]. Interakcija elektrona i fonona, koja je u temeljnom smislu kulonske prirode, na dovoljno visokim temperaturama neće imati dramatične posljedice. Priča postaje zanimljivija na niskim temperaturama kada će, u određenim uvjetima, interakcija elektronskog i fononskog podsustava dovesti do nestabilnosti te ponekad i do prijelaza u novu fazu slomljene simetrije. Povijesno najvažniji primjer takvog fenomena je supravodljivost, gdje proizvoljno slaba efektivna privlačna interakcija među elektronima preko fononskog podsustava dovodi do Cooperovog sparivanja te potpune destabilizacije Fermijeve tekućine na dovoljno niskoj temperaturi. Ovisno o parametrima sustava, moguća je i pojava drugih zanimljivih faza slomljene simetrije kao npr. valovi gustoće spina i valovi gustoće naboja od kojih potonji čine centralni fenomen ovog diplomskog rada.

Val gustoće naboja (eng. charge density wave ili skraćeno CDW) pojava je strukturne nestabilnosti određenih materijala koja se očituje spontanom pojavom periodičke modulacije gustoće naboja popraćene statičkom deformacijom rešetke. Teorijski ih je predvidio za 1D sustave već 1930. godine Rudolf Peierls [2] čije se razmatranje zasniva na opažanju da će spontana statička deformacija kristala otvoriti procjep na inicijalnoj Fermijevoj energiji te tako spustiti energiju čitave vrpce. Ukoliko je ovo smanjenje energije dovoljno da kompenzira povećanje elastične energije zbog statičke deformacije, nastupa uređenje sustava u novo osnovno stanje vala gustoće naboja (CDW). Peierlsova nestabilnost predstavlja teorijsku paradigmu za objašnjenje pojave CDW uređenja u posebnoj klasi 2D materijala (tzv. kvazi-jednodimenzionalni materijali) jako anizotropne (uglavnom otvorene) Fermijeve plohe koja zadovoljava tzv. uvjet gniježđenja, gdje "gniježđenje" predstavlja mogućnost preslikavanja dijela Fermijeve plohe na njezin drugi dio jedinstvenim valnim vektorom. CDW-ovi ovog tipa dobro su teorijski istraženi i opaženi u raznim materijalima [3].

Međutim, valovi gustoće naboja opaženi su i u određenim 2D materijalima sa zatvorenim Fermijevim plohami koje ne zadovoljavaju uvjet gniježđenja (npr. [4] i [5])

te se stoga postavlja pitanje mehanizma stabilizacije strukturnih nestabilnosti u takvim materijalima. Jedan takav mehanizam predložili su Kadigrobov et al. [6]. Taj se mehanizam zasniva na topološkoj rekonstrukciji Fermijeve plohe. Ideja je da će pojava statičke deformacije rešetke valnog vektora  $Q/\hbar$  uzrokovati promjenu topologije inicijalno zatvorene i visoko izotropne Fermijeve plohe. Takva promjena topologije uzrokovat će drastičnu promjenu u gustoći stanja te dovesti do premještanja popunjenih stanja na niže energije što će uzrokovati smanjenje energije čitave vrpce. Mehanizam je za sada istražen samo za egzaktno dvodimenzionalnu izotropnu paraboličku vrpcu [6] i za istu vrpcu u vanjskom magnetskom polju [7].

Naš je zadatak u ovom diplomskom radu istražiti mehanizam topološke rekonstrukcije za trodimenzionalnu anizotropnu paraboličku vrpcu te razmotriti utjecaj anizotropije na gustoću stanja rekonstruiranog sustava te na energiju elektronske vrpce i optimalnih parametara CDW uređenja. U sljedećem poglavlju, zbog potpunosti prezentacije, dajemo kratak opis nastanka CDW-a u jako anizotropnim kvazi-jednodimenzionalnim materijalima putem Peierlsove nestabilnosti i gniježđenja Fermijeve plohe. Također, dajemo kratak opis općih svojstava CDW stanja te njegove fenomenologije u raznim materijalima. Ova razmatranja omogućiti će nam da bolje uočimo što je novo kod mehanizma topološke rekonstrukcije kojeg razmatramo u poglavlju 3 i u kojem tretiramo elektron-fonon interakciju u aproksimaciji srednjeg polja te izvodimo rekonstruiranu disperziju elektronske vrpce čija svojstva potom diskutiramo. U poglavlju 4 bavimo se gustoćom stanja rekonstruiranog sustava u dvije i tri dimenzije te diskutiramo utjecaj anizotropije na istu. Također, diskutiramo ključne razlike među 2D i 3D gustoćama stanja te njihovu relevantnost za mehanizam topološke rekonstrukcije. Utjecaj anizotropije prvo uvodimo variranjem efektivnih masa u originalnoj paraboličkoj disperziji. Pokazuje se da takvim tretmanom ne dobivamo kvalitativni učinak na oblik gustoće stanja te ne možemo ostvariti glatki prijelaz iz 3D u 2D koji nam je potreban da bismo povezali naše rezultate s rezultatima u [6]. Stoga, anizotropiju tretiramo uvođenjem necjelobrojne dimenzije sustava po uzoru na [8] što nam omogućava da prirodno diskutiramo dimenzionalni prijelaz iz 2D u 3D. Na posljetku, u poglavlju 5 minimiziramo energiju vrpce (uz ograničenje očuvanja broja elektrona u vrpici) metodom Lagrangeovih multiplikatora što nam omogućava da nađemo optimalne vrijednosti Fermijeve energije nakon rekonstrukcije te optimalni impuls (valni vektor) CDW-a te diskutiramo ovis-

nost istog o parametru uređenja  $\Delta$  i dimenziji (anizotropiji). Za kraj, optimalni impuls koristimo da bismo izračunali ovisnost energije vrpce o parametru uređenja što nam, uz uračunavanje elastične energije rešetke nastale zbog statičke deformacije, omogućava da odredimo uvjete pod kojima će stabilizacija vala gustoće naboja biti moguća.

## 2 Valovi gustoće naboja

U ovom ćemo se poglavlju pozabaviti fenomenom valova gustoće naboja koji predstavlja širi fizikalni kontekst unutar kojeg se kreće ovaj diplomski rad. Radi se o fazi slomljene simetrije<sup>1</sup> u kojoj će interakcija elektrona i fononskih pobuđenja rešetke destabilizirati Fermijevu tekućinu elektrona te (na dovoljno niskim temperaturama) dovesti do stvaranja periodičke modulacije gustoće naboja popraćene statičkom deformacijom kristalne rešetke. Takav fenomen teorijski je predvidio Rudolf Peierls u jednodimenzionalnim materijalima već 1930. godine [2]. Prije nego krenemo razmatrati valove gustoće naboja u realnim materijalima ukratko se osvrćemo na tu pojavu jer upravo ona postavlja teorijski okvir za objašnjenje CDW-a u materijalima s jako anizotropnom Fermijevom plohom te nam daje jednostavnu sliku o tome kako interakcija elektronskog i fononskog podsustava može dovesti do nestabilnosti i jednog i drugog.

### 2.1 Peierlsova nestabilnost

Peierls je uočio da u jednodimenzionalnim sustavima postoji sklonost ka stvaranju statičke periodičke modulacije gustoće naboja popraćene statičkom deformacijom kristalne rešetke s periodom  $q = 2k_F$ , gdje je  $k_F$  Fermijev valni broj. Temeljni uzrok ove nestabilnosti je elektron-fonon međudjelovanje i usko 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 računom smetnje da barem "naslutimo" nestabilnost. Radi jednostavnosti, elektron-fonon interakciju opisujemo pojednostavljenim jednodimenzionalnim Frolichovim [9] hamiltonijanom u kojem konstanta vezanja  $g$  ne ovisi o valnom vektoru.

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

gdje je  $\varepsilon_k$  disperzija elektronske vrpce, a  $\hbar\omega_q$  energija jednog fonona valnog broja  $q$ . Tu smo, radi jednostavnosti pisanja, ispustili spinske indekse operatora stvaranja i poništenja elektrona jer je  $H$  spiniski degeneriran. Također,  $L$  predstavlja duljinu našeg sustava, a  $c_k$  ( $a_q$ ) su operatori poništenja elektrona (fonona) u sta-

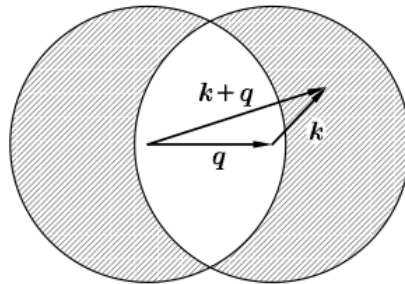
---

<sup>1</sup>U slučaju CDW-a lomi se (reducirana) translacijska simetrija kristala.

nju valnog broja  $k$  ( $q$ ). Vidimo da interakcijski član uzrokuje stvaranje elektron-šupljina parova apsorpcijom ili emisijom fonona obrnutog impulsa. Ako je u "nesmetanom" stanju  $|1q\rangle$  prisutan jedan fonon uz elektrone u popunjenom Fermijevom moru ( $|1q\rangle = a_q^\dagger |FS\rangle$ , gdje stanje  $|FS\rangle$  predstavlja popunjeno Fermijevo more), interakcije će renormalizirati energiju (frekvenciju) tog fonona  $\hbar\omega_q$ . U drugom redu računa smetnje imamo

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

gdje su međustanja preko kojih sumiramo dana elektron-šupljina parovima  $|k+q, k\rangle = c_{k+q}^\dagger c_k |FS\rangle$ . Također, zbog Paulijevog principa, sumiramo samo preko onih vrijednosti  $k$  za koje je  $|k| < k_F$ , a  $|k+q| > k_F$ . Taj je podskup prikazan na slici 2.1 za slučaj dvodimenzionalnog sustava, s koje se vidi da će broj međustanja biti najveći za  $q = 2k_F$  (situacija je ista i u 1D). Računanje matričnog elementa u brojniku uz



Slika 2.1: Prikaz dozvoljenih međustanja (elektron-šupljina parova) u računu smetnje (zatanjeni dio desnog kruga predstavlja moguća šupljinska stanja). Preuzeto iz [10].

zanemarivanje fononske energije (u odnosu na elektronske) u nazivniku daje nam

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

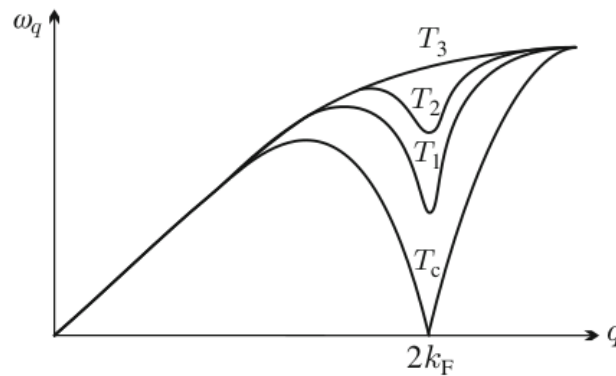
gdje sada sumiramo po svim vrijednostima  $k$ , a Fermijeva distribucija  $f_0(k)$  se brine o zaposjednućima. Kada se suma pretvori u integral i izračuna korekcija, pokazuje se da u jednodimenzionalnim<sup>2</sup> sustavima dolazi do logaritamske divergencije korekcije za  $q = 2k_F$ , što nam daje snažnu sugestiju moguće nestabilnosti, ali i ukazuje na neperturbativnost efekta. Kada se provede precizniji račun koristeći teoriju linearnog odziva [10], dobije se korigirani izraz koji predviđa da će renormalizirana frekvencija

<sup>2</sup>Iako postoji, efekt je jedva vidljiv u 3 dimenzije.

fononskog moda valnog broja  $q = 2k_F$  potpuno iščeznuti na konačnoj temperaturi

$$k_B T_c = 2.28 \varepsilon_F e^{-\hbar \omega_{2k_F} / g^2 g(\varepsilon_F)}, \quad (2.4)$$

gdje je  $g(\varepsilon_F)$  gustoća stanja na Fermijevom nivou. Na kritičnoj temperaturi za taj fononski mod se kaže da je postao "mekan" (Slika 2.2). Kao takvog, lako ga je pobuđivati te on spontano postaje makroskopski zaposjednut (analogno stanju impulsa nula u Bose-Einstein kondenzatu), a sustav postaje nestabilan s obzirom na statičku deformaciju valnog broja  $q = 2k_F$ . Djelovanje takve deformacije na elektron-

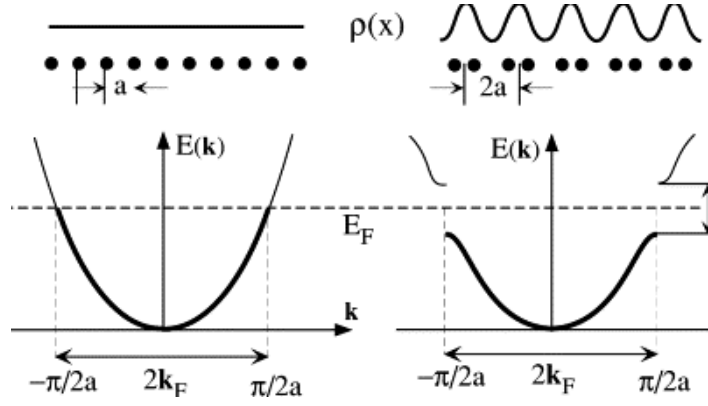


Slika 2.2: Renormalizirane fononske disperzije za različite temperature  $T$ , gdje je  $T_c$  kritična temperatura. Preuzeto iz [10].

ski podsustav možemo uvesti samosuglasno preko periodičkog potencijala  $V(x) = \Delta \cos(2k_F x)$  duž prostorne koordinate  $x$ , gdje je  $\Delta$  CDW parametar uređenja. To znači da će  $2k_F$  postati novi primitivni vektor recipročne rešetke, što nam omogućuje da "retrogradno" shvatimo zašto je uopće došlo do statičke deformacije rešetke. Naime, samosuglasni periodički potencijal će uzrokovati otvaranje procjepa (slika 2.3) na Fermijevoj energiji, zbog čega dolazi do spuštanja energije čitavog Fermijevog mora (ispod procjepa) koje je u jednodimenzionalnim materijalima uvijek dovoljno veliko da kompenzira povećanje elastične energije nastalo zbog statičke deformacije.

## 2.2 Nestabilnost u kvazi-jednodimenzionalnim materijalima i gniježđenje (eng. nesting) Fermijeve plohe

Dobro je poznato u teoriji faznih prijelaza da u striktno jednodimenzionalnim sustavima ne može doći do pravog faznog prijelaza. Naime, fluktuacije su na svim tem-



Slika 2.3: Otvaranje procjepa na Fermijevoj energiji kao posljedica spontane statičke deformacije rešetke.

peraturama dovoljno jake da nadvladaju tendenciju ka uređenju. Stoga, da bismo poopćili Peierlsov argument na sustave koji nisu striktno jednodimenzionalni trebamo se još jednom osvrnuti na njegovu suštinu iz drukčije perspektive, a to je da je odgovor (odziv) jednodimenzionalnog sustava elektrona na pobudu valnog vektora  $q = 2k_F$  singularan. Drugim riječima, dovoljan je samo jedan fonon s tim valnim vektorom da svojim raspršenjima u čestično-šupljinskom kanalu potpuno destabilizira sustav. Promotrimo поблиže odzivnu funkciju elektronskog sustava. Neka su potencijal  $\phi(\mathbf{r})$  i pripadna inducirana gustoća naboja  $\rho^{ind}(\mathbf{r})$  dani preko njihovih Fourierovih transformata.

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{q}} \phi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^d q \quad \rho^{ind}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{q}} \rho^{ind}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^d q \quad (2.5)$$

Uz pretpostavku linarnog kauzalnog odgovora,  $\phi(\mathbf{q})$  i  $\rho^{ind}(\mathbf{q})$  su povezani relacijom

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}) = \chi(\mathbf{q})\phi(\mathbf{q}), \quad (2.6)$$

gdje je statička odzivna funkcija  $\chi(\mathbf{q})$  za slobodni plin elektrona u  $d$  dimenzija dana Lindhardovim izrazom [11]

$$\chi(\mathbf{q}) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}, \quad (2.7)$$

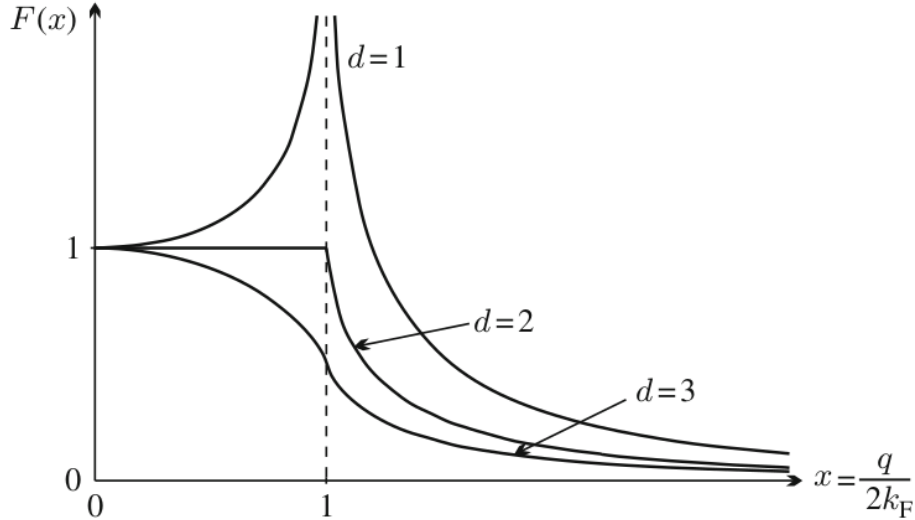
gdje je  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\mathbf{k}^2/2m$  disperzija slobodnih elektrona valnog vektora  $\mathbf{k}$  i mase  $m$ , a  $f_{\mathbf{k}}$  Fermijeva distribucija. Sa slike 2.4 vidimo da u 1D elektronskom plinu odzivna funkcija (2.7) divergira za  $q = 2k_F$ . Jednostavan račun [11] integrala u jednadžbi



(2.7) daje nam izraz

$$\chi(q) = \frac{-e^2}{\pi \hbar v_F} \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| = -e^2 g(\varepsilon_F) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|, \quad (2.8)$$

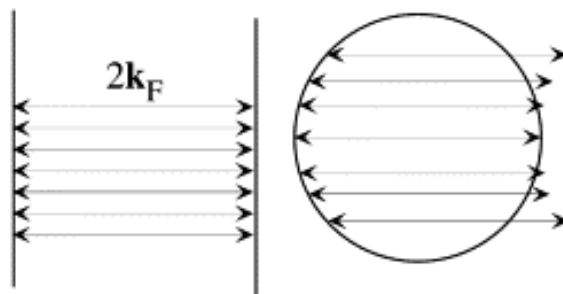
gdje je  $v_F$  Fermijeva brzina, a  $e$  elementarni naboj. Iz izraza (2.8) je jasno da se radi o



Slika 2.4: Ovisnost statičke odzivne funkcije  $F(q) = \frac{\chi(q)}{-e^2 g(\varepsilon_F)}$  o  $q$  za elektronski plin u jednoj, dvije i tri dimenzije. Preuzeto iz [10].

singularitetu logaritamskog tipa. Singularan odziv za  $q = 2k_F$  znači da je elektronski podsustav na  $T = 0\text{K}$  sam po sebi nestabilan s obzirom na formiranje periodičke modulacije gustoće naboja. Matematički gledano, razlog za to je oblik Fermijeve plohe 1D sustava koja zadovoljava uvjet tzv. savršenog gniježđenja (eng. perfect nesting) (Slika 2.5 lijevo) što ugrubo znači da će integralom (2.7) izdominirati upravo parovi stanja koji se razlikuju za  $q = 2k_F$  od kojih je jedno puno, a drugo prazno i koji imaju približno istu energiju te tako daju divergentan doprinos integralu. Takvih parova stanja u 1D ima mnogo pa je integral divergentan, odnosno odgovor singularan, dok je u 2D i 3D broj takvih stanja značajno smanjen (Slika 2.5 desno) što dovodi do uklanjanja singularnosti za  $q = 2k_F$ . Možemo se pitati što se događa u realnim tro-dimenzionalnim materijalima koji imaju Fermijeve plohe koje značajno odstupaju od sfernog oblika. Uzmimo za primjer materijal opisan disperzijom

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 \cos k_x a + \varepsilon_2 \cos k_y b + \varepsilon_3 \cos k_z c \quad (2.9)$$

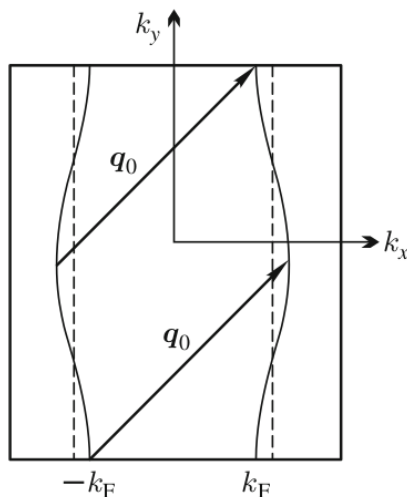


Slika 2.5: Fermijeve plohe za 1D i 2D elektronski plin. Strelice označavaju parove stanja, od kojih je jedno popunjeno, a drugo prazno i koje se razlikuju za valni vektor  $|\mathbf{q}| = 2k_F$ .

koji zbog različitih preklopa susjednih orbitala u raznim smjerovima ima preferirani smjer propagacije elektrona ( $|\varepsilon_1| \gg |\varepsilon_2|, |\varepsilon_3|$  i  $|\varepsilon_2| \gg |\varepsilon_3|$ )<sup>3</sup>. Takve materijale nazivamo kvazi-jednodimenzionalnima. Ako lineariziramo disperziju u preferiranom smjeru u blizini Fermijeve plohe te zanemarimo treći član dobivamo izraz

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + \hbar v_F (\pm k_x - k_F) + \varepsilon_2 \cos k_y b. \quad (2.10)$$

Fermijeva ploha za ovakvu disperziju prikazana je na slici 2.6 i na njoj se lako uočava



Slika 2.6: Fermijeva ploha kvazi-jednodimenzionalnog sustava sa vektorom ugniježđenja  $\mathbf{q}_0$ . Preuzeto iz [10].

da postoji valni vektor  $\mathbf{q}_0 = (2k_F, \pi/b)$  koji će egzaktno mapirati (ugnijezditi) lijevu stranu Fermijeve plohe na desnu. Općenitije, za Fermijevu plohu kažemo da zadovoljava uvjet gniježđenja ukoliko postoji barem dio Fermijeve plohe koji se može

<sup>3</sup>Elektroni se puno lakše gibaju "longitudinalno" (duž preferiranog smjera) nego "transverzalno" (okomito na taj smjer).

preslikati u drugi jedinstvenim valnim vektorom  $\mathbf{q}_0$ . Ako se za takve sustave izračuna odzivna funkcija za vektor ugniježđenja  $\mathbf{q}_0$ , energetski nazivnik u Lindhardovoj funkciji 2.7 iščezavat će duž cijelog područja ugniježđenja pa će tako i odzivna funkcija imati isti logaritamski singularitet kao i u 1D slučaju. Kada se izraz (2.7) izračuna na konačnoj temperaturi  $T \neq 0$ , odziv za  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$  više nije singularan čak ni za Fermijeve plohe koje zadovoljavaju uvjet ugniježđenja. Umjesto divergencije, pojavljuje se konačan vrh koji se smanjuje s porastom temperature.

Do sada smo prešutno diskutirali "golu" odzivnu funkciju neinteragirajućeg sustava na vanjski potencijal. Kada u sustav uvedemo interakcije, ukupna "pobuda" sastojat će se od vanjskog doprinosa  $\phi^{ext}(\mathbf{q})$  i inducirano doprinosa  $\phi^{ind}(\mathbf{q})$  koji potječe od interakcija u sustavu i kojeg povezujemo s  $\rho^{ind}(\mathbf{q})$  jednostavnom relacijom proporcionalnosti

$$\phi^{ind}(\mathbf{q}) = g\rho^{ind}(\mathbf{q}), \quad (2.11)$$

gdje je  $g$  konstanta vezanja interakcije za koju pretpostavljamo da je neovisna o  $\mathbf{q}$ . U okviru aproksimacije slučajnih faza (RPA) dobiva se izraz za odziv na vanjski potencijal

$$\rho^{ind}(\mathbf{q}) = \frac{\chi(\mathbf{q}, T)}{1 - g\chi(\mathbf{q}, T)}\phi^{ext}(\mathbf{q}) \quad (2.12)$$

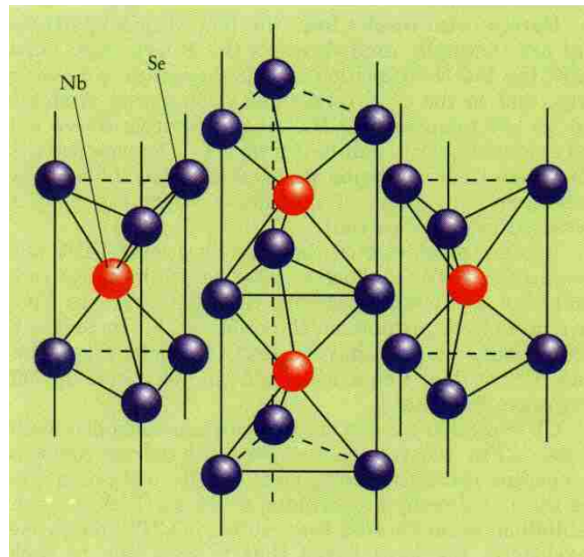
u sustavu s interakcijom, gdje je  $\chi(\mathbf{q}, T)$  neinteragirajuća (Hartree-Fock) susceptibilnost. Ukoliko je  $g > 0$ , ovaj izraz će izdivergirati za  $1 - g\chi(\mathbf{q}, T_c) = 0$  te dovesti do nestabilnosti elektronskog sustava na konačnoj kritičnoj temperaturi  $T = T_c$  (tzv. Stonerov kriterij). Ta nestabilnost, kada se uključi elektron-fonon interakcija, može dovesti do faznog prijelaza u novo osnovno stanje slomljene translacijske simetrije kojeg nazivamo val gustoće naboja<sup>4</sup> (CDW).

### 2.3 Svojstva CDW stanja

Pojava vala gustoće naboja ispod kritične temperature predstavlja osnovno stanje slomljene simetrije opisano, poput supravodljivog stanja, kompleksnim parametrom uređenja  $\Delta = |\Delta|e^{i\phi}$ , gdje magnituda  $|\Delta|$  određuje procjep otvoren na Fermijevoj

<sup>4</sup>Val gustoće naboja nije jedino stanje koje može nastati s druge strane faznog prijelaza. Za nestabilnosti u čestično-šupljinskom kanalu raspršenja moguća je i formacija vala gustoće spina (eng. spin density wave- SDW) ukoliko elektron-šupljina parovi sačinjavaju spinski triplet, a ne singlet kao kod CDW-a (vidi [11]). SDW se mogu promatrati kao dva CDW-a suprotnog spina koji su međusobno fazno pomaknuti za pola valne duljine.

energiji dok faza  $\phi$  određuje položaj CDW-a u odnosu na pozadinsku rešetku. Varijacije u  $|\Delta|$  i  $\phi$  povezane su s kolektivnim pobuđenjima CDW stanja koje zovemo "amplitoni" i "fazoni". Promatrajući elektronski spektar, koji u CDW stanju ima procep koji razdvaja popunjena i prazna stanja mogli bismo zaključiti da se radi o poluvodiču. Ipak, to nije tako zbog toga što CDW ima mogućnost kolektivnog transporta naboja - val gustoće naboja "klizi" u odnosu na pozadinsku rešetku stvarajući putujući periodički potencijal koji za sobom "povlači" elektrone koji pritom sačinjavaju električnu struju. S druge strane, metal koji nosi CDW ima konačan otpor zbog raznih efekata "zapinjavanja" (eng. pinning) za rešetku i nečistoće pa i kvantno tuneliranje igra važnu ulogu pri transportu [12]. Stoga, kao i supravodljivost, CDW transport je makroskopski kvantni fenomen u kojem se mnoštvo elektrona mora korelirati preko velikih udaljenosti.



Slika 2.7: Ilustracija slabo vezanih molekularnih lanaca u  $\text{NbSe}_3$ . Preuzeto iz [3].

Peierlsov prijelaz u CDW stanje opažen je u mnoštvu anorganskih (npr.  $\text{NbSe}_3$ ,  $\text{K}_{0,3}\text{MoO}_3$ ,  $\text{TaS}_3$  itd.) i organskih (npr.  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ ) vodiča. Svi ti materijali sastavljeni su od međusobno slabo vezanih molekularnih lanaca (Slika 2.7) duž kojih su elektroni jako delokalizirani tako da je električna vodljivost duž lanaca tipično 2 do 3 reda veličine veća nego u smjeru okomitom na lance. Osim toga, CDW materijali imaju izrazito bogatu fenomenologiju te pokazuju mnoštvo zanimljivih fenomena počevši od postojanja naponskog praga za transport koji je puno manji od temperaturne skale pa stoga potječe od kvantnog tuneliranja kojim se savladava zapinjavanje [12], neobičnih elastičnih svojstava, gigantskih dielektričnih konstanti itd.

Zanimljivo je i opažanje da kada na materijal u CDW stanju primijenimo istosmjerni napon rezultirajuća struja sadrži koherentnu oscilatornu komponentu frekvencije  $\omega_c$  koja je direktno proporcionalna istosmjernoj komponenti struje koja protječe kroz materijal. To se događa zbog toga što svaki put kada se CDW pomakne za jednu valnu duljinu lokalne sile uzrokovane nečistoćama u materijalu naprave jedan ciklus pa su takvi materijali "prirodni" strujno-kontrolirani oscilatori.

### 3 Topološka rekonstrukcija vrpce

U prošlom smo poglavlju vidjeli kako u određenoj klasi 2D materijala jako anizotropne, uglavnom otvorene, Fermijeve plohe (tzv. kvazi-jednodimenzionalni materijali) postojanje jedinstvenog valnog vektora  $\mathbf{q}_0$ , koji će "ugnijezditi" jedan dio Fermijeve plohe na drugi, dovodi do Peierlsove nestabilnosti i formiranja vala gustoće naboja. Međutim, kako smo napomenuli u uvodu, nabojne pruge karakteristične za CDW stanje opažene su i u materijalima sa zatvorenim Fermijevim plohama koje ni blizu ne zadovoljavaju uvjet gniježđenja kao npr. visokotemperaturni supravodiči s vodljivim  $\text{CuO}_2$  slojevima [4] i heksagonalni polumetalni slojevi koji se pojavljuju u interkalatima baziranim na grafenu (npr.  $\text{CaC}_6$  [5]). Mehanizam stabilizacije valova gustoće naboja u takvim materijalima, koji su predložili Kadigrobov et al. u [6], zasniva se na topološkoj rekonstrukciji vrpce i njegovim aspektima se bavimo u ostatku ovog diplomskog rada.

#### 3.1 Topološka rekonstrukcija dvodimenzionalne slobodnoelektronske vrpce

S obzirom na to da je mehanizam za sada istražen [6] samo za slučaj dvodimenzionalne izotropne paraboličke vrpce, taj će nam slučaj poslužiti za ilustraciju njegovih glavnih karakteristika. U ovom potpoglavlju poslužiti ćemo se aproksimacijom srednjeg polja da utvrdimo na koji način pojava CDW-a utječe na disperziju elektronske vrpce. Rezultat koji dobijemo lako ćemo u sljedećem poglavlju poopćiti na slučaj 3D anizotropne vrpce. Neka je početna elektronska vrpca opisana 2D izotropnom disperzijom

$$\varepsilon(p_x, p_y) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2). \quad (3.1)$$

Elektron-fonon interakciju, kao i prije, opisujemo pojednostavljenim Frolichovim hamiltonijanom

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega(\mathbf{q}) a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\sqrt{A}} g \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} (a_{-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\mathbf{q}}), \quad (3.2)$$

gdje je  $A$  površina našeg 2D sustava,  $g$  konstanta vezanja za koju pretpostavljamo da ne ovisi o  $\mathbf{k}$  i  $\mathbf{q}$ , a  $c_{\mathbf{k}}^\dagger$  ( $a_{\mathbf{q}}^\dagger$ ) operatori stvaranja elektrona (fonona) impulsa  $\mathbf{k}$  ( $\mathbf{q}$ ). U

slučaju pojave CDW modulacije u smjeru osi  $x$ , fononski mod valnog vektora  $Q\hat{x}$  biva makroskopski zaposjednut. Zbog toga, možemo se poslužiti Bogoliubovljevim shemom srednjeg polja te u hamiltonijanu (3.2) zamijeniti fononske operatore stvaranja i poništenja njihovim očekivanim vrijednostima<sup>5</sup>. Hamiltonijan u okviru aproksimacije srednjeg polja glasi

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \left[ \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \Delta e^{i\Phi} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \Delta e^{-i\Phi} c_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \right] + \frac{A\hbar\omega_Q}{2g^2} \Delta^2, \quad (3.3)$$

gdje je

$$\sqrt{A}\Delta e^{i\Phi} = g \left( \langle a_{\mathbf{Q}} \rangle + \langle a_{-\mathbf{Q}}^\dagger \rangle \right) \quad (3.4)$$

parametar uređenja, a  $\langle a_{\mathbf{Q}} \rangle = \langle a_{-\mathbf{Q}}^\dagger \rangle$  neiščezavajuće očekivane vrijednosti operatora stvaranja i poništenja fonona u makroskopski zaposjednutom fononskom modu  $\mathbf{Q}$ . Elektronski dio hamiltonijana (prvi član) sada je bilinearan u operatorima stvaranja i poništenja te se stoga može dijagonalizirati Bogoliubovljevom transformacijom nakon čega se dobiva općeniti izraz za rekonstruiranu disperziju

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_2(\mathbf{p})}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\varepsilon_1(\mathbf{p}) - \varepsilon_2(\mathbf{p})}{2} \right)^2 + \Delta^2}, \quad (3.5)$$

gdje su  $\varepsilon_1(\mathbf{p})$  i  $\varepsilon_2(\mathbf{p})$  dani s<sup>6</sup>

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{p}) \equiv \varepsilon(p_x \pm Q/2, p_y) = \frac{(p_x \pm Q/2)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m}. \quad (3.6)$$

Uvrštavanjem u (3.5) dobiva se

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{(Q/2)^2 + p_y^2 + p_x^2 \pm \sqrt{(Qp_x)^2 + (2m\Delta)^2}}{2m}. \quad (3.7)$$

Sada nam je pogodno definirati bezdimenzionalne varijable

$$e = \frac{2m\varepsilon}{(Q/2)^2}, \quad \delta = \frac{2m}{(Q/2)^2} \Delta, \quad (x, y, z) = \frac{2}{Q} (p_x, p_y, p_z) \quad (3.8)$$

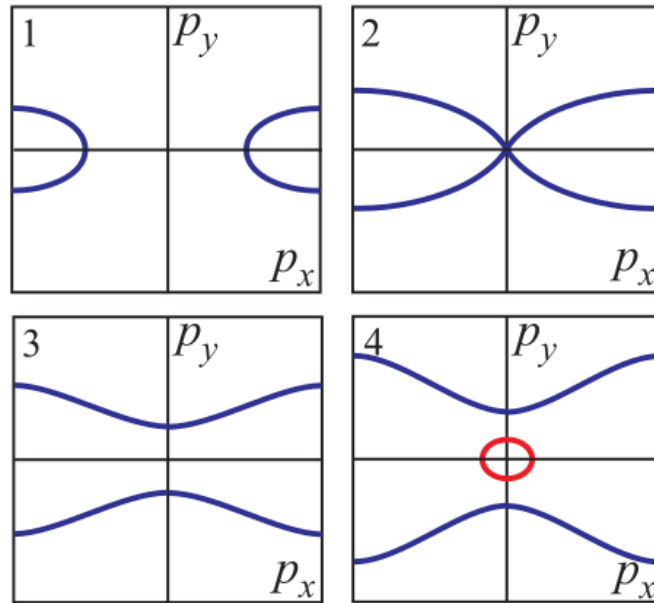
<sup>5</sup>Makroskopsko zaposjednuće obično se uvodi preko koherentnog stanja poznatog iz kvantne optike koji nema dobro definiran broj fonona, ali ima dobro definiranu fazu, baš kao i naša periodička modulacija. Također, u ovom stanju, očekivane vrijednosti operatora stvaranja i poništenja nisu nula što omogućava upotrebu pristupa srednjeg polja.

<sup>6</sup>Ovim izborom smo efektivno pomakli Brillouinovu zonu za  $Q/2$  udesno ( $p_x \rightarrow p_x + Q/2$ ) tako da se nakon uvođenja periodičke modulacije originalne Fermijeve plohe "dodiruju" u ishodištu.

koje će nam dobro poslužiti u nastavku. Kada se (3.7) napiše preko ovih varijabli dobiva se bezdimenzionalna formula za rekonstruiranu disperziju

$$e_{\pm} = 1 + x^2 + y^2 \pm \sqrt{4x^2 + \delta^2}. \quad (3.9)$$

Linije konstantne energije za obje vrpce prikazane su na slici 3.1.



Slika 3.1: Linije konstantne energije za (1)  $e < 1 - \delta$ , (2)  $e = 1 - \delta$ , (3)  $1 - \delta < e < 1 + \delta$ , (4)  $e > 1 + \delta$ . Preuzeto iz [6].

Vidimo da je "uključivanje" CDW-a izazvalo topološku rekonstrukciju vrpce u smislu da su od dvije originalne paraboličke izotropne vrpce unutar Brillouinove zone nastale odvojena donja i gornja vrpca između kojih se, uvjetno rečeno<sup>7</sup>, pojavio procjep u središtu zone. Donja vrpca ima sedlenu točku za  $x = y = 0$  na energiji<sup>8</sup>  $e = 1 - \delta$ , dok gornja vrpca ima parabolički minimum u  $x = y = 0$  na energiji  $e = 1 + \delta$ . Za energije manje od  $1 - \delta$  linije konstantne energije su zatvorene krivulje u prikazu ponovljene zone. Jednom kad se prijeđe sedlena točka na energiji  $e = 1 - \delta$ , linije konstantne energije postaju otvorene, a za  $e > 1 + \delta$  pojavljuje se i kružni "džep" koji potječe od dna gornje vrpce (Slika 3.1).

<sup>7</sup>Donja je vrpca hiperbolička, a gornja parabolička pa u biti nema pravog procjepa u energetsom spektru. Kada mi govorimo o "procjepu", govorimo samo o razlici energija između sedlene točke donje vrpce i minimuma gornje vrpce u središtu Brillouinove zone.

<sup>8</sup>Zbog jednostavnosti i kompaktnosti diskusije, bezdimenzionalnu veličinu  $e$  zovemo "energija".



### 3.2 Kvalitativna diskusija stabilizacije CDW-a

Da bi došlo do stabilizacije CDW uređenja potrebno je da se ukupna energija elektronske vrpce smanji dovoljno da kompenzira povećanje elastične energije nastalo zbog pojave statičke periodičke deformacije rešetke. Teoretski, dva su načina kako se to može dogoditi. Prvi je to da se prilikom "uključivanja" CDW-a spusti Fermijeva energija (kemijski potencijal), što bi zbog teorema malih inkremenata<sup>9</sup> povlačilo spuštanje energije čitave vrpce. Druga mogućnost je da se gustoća stanja promijeni na način da niskoenergetske "ljuske" u inverznom prostoru postanu bogatije stanjima. Na taj način bi došlo do redistribucije elektrona prema stanjima niže energije i ukupna energija vrpce bi se smanjila. U poglavlju 5 ćemo pokazati da za fiksni parametar uređenja  $\Delta$  minimizacija razlike energije vrpce

$$\Delta E = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_{F0}} g_0(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon, \quad (3.10)$$

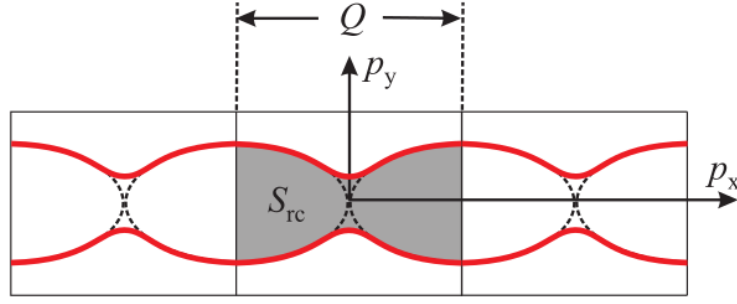
gdje su  $g_0(\varepsilon)$  i  $g(\varepsilon)$  gustoće stanja prije i poslije rekonstrukcije, uz ograničenje očuvanja broja elektrona

$$\int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_{F0}} g_0(\varepsilon)d\varepsilon = 0, \quad (3.11)$$

vodi na uvjet jednakosti Fermijeve energije prije i poslije rekonstrukcije  $\varepsilon_F = \varepsilon_{F0}$ . U ovoj optimizaciji Lagrangeov multiplikator će biti upravo Fermijeva energija  $\varepsilon_{F0}$ , ali kako nam je ona fizikalno zadana, tretiramo impuls CDW-a  $Q$  kao nepoznanicu u jednadžbi očuvanja broja elektrona. To znači da će, za dani parametar uređenja  $\Delta$  i dano popunjenje vrpce  $\varepsilon_{F0}$ ,  $Q$  "odabrati" točno takvu vrijednost da Fermijeva energija ostane ista, ali i da se površina (volumen u 3D) omeđena Fermijevom plohom ne promijeni. U dvije dimenzije, dobiva se da je taj  $Q$  približno jednak<sup>10</sup>  $2p_{F0}$  (vidi poglavlje 5 ili [6]), odnosno  $Q$  je točno takav da dovede inicijalne Fermijeve plohe u "dodir" (Slika 3.2). Uklanjanjem degeneracije u točkama dodira, nametnuti periodički potencijal će topološki transformirati Fermijevu plohu iz zatvorene u otvorenu što znači da će se vrpca rekonstruirati točno tako da Fermijeva energija upadne u raspon između sedlene točke donje vrpce  $e = 1 - \delta$  (ili ako vratimo dimenzije  $\varepsilon = (Q/2)^2/2m - \Delta$ ) i dna gornje vrpce  $e = 1 + \delta$  ( $\varepsilon = (Q/2)^2/2m + \Delta$ ). Optimalna

<sup>9</sup>Općenita termodinamička relacija jednakosti među malim promjenama termodinamičkih potencijala prilikom promjene neke od termodinamičkih varijabli koja nije uključena u Legendreovu transformaciju među njima [13].

<sup>10</sup>Točnije,  $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{Q}{2p_{F0}} = 1$ .



Slika 3.2: Shematski prikaz topološke transformacije Fermijeve plohe uzrokovane pojavom CDW uređenja valnog vektora jednakog dvostrukom Fermijevom valnom vektoru ( $Q/\hbar = 2k_{F0}$ ). Preuzeto iz [6].

vrijednost impulsa periodičke modulacije  $Q_m$  nije egzaktno jednaka dvostrukom Fermijevom impulsu već ovisi o parametru uređenja. Razvoj po malom  $\delta$  daje (vidi [6])

$$\frac{Q_m}{2p_{F0}} \approx 1 - \frac{\delta}{2} + \frac{1}{\pi} \left( \frac{\delta}{2} \right)^{3/2} + O(\delta^2). \quad (3.12)$$

Zbog toga autori u [6] predlažu da se ovaj mehanizam stabilizacije zove mehanizam "dodira" zbog kontrasta s "gniježđenjem" gdje je impuls CDW-a određen isključivo geometrijom Fermijeve plohe. Vidjet ćemo u poglavlju 5 da, povećanjem dimenzije sustava,  $Q$  postaje sve manji te za  $d = 3$  postaje približno jednak  $p_{F0}$ . Stoga, u tom slučaju više nećemo moći smisleno govoriti o mehanizmu "dodira".

Na posljertku, korištenjem optimalnih parametara za fiksni parametar uređenja  $\Delta$  dobiva se razvoj ukupne energije (vrpca + rešetka opisani hamiltonijanom (3.3)) po bezdimenzionalnom parametru uređenja  $\delta \equiv \Delta/\varepsilon_{F0}$  (vidi [6])

$$\frac{E_{CDW}}{E_0} = \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_c} \right) \delta^2 + \frac{1}{\pi} \delta^3 + O(\delta^{7/2}), \quad (3.13)$$

gdje je  $E_0$  energija nerekonstruirane vrpce,  $\lambda \equiv \frac{m}{\pi \hbar^2} \frac{g^2}{2\hbar\omega_Q}$  bezdimenzionalna konstanta vezanja, a  $\lambda_c = \frac{1}{1+\frac{2}{\pi}}$  njena kritična vrijednost. Iz ovoga je jasno da će CDW biti moguće stabilizirati samo za  $\lambda > \lambda_c$  te stoga  $\lambda_c$  predstavlja kritičnu točku kvantnog faznog prijelaza<sup>11</sup>. Također, zanimljivo je da je stabilizirajući član u (3.13) kubičan, za razliku od termalnih faznih prijelaza 2. reda gdje je pripadni član kvartičan.

<sup>11</sup>Kvantni fazni prijelaz označava naglu promjenu osnovnog stanja sustava mnoštva čestica na temperaturi  $T = 0K$  uslijed promjene nekog ne-termalnog parametra sustava. Kvantni fazni prijelazi događaju se zbog kvantnih fluktuacija (za razliku od klasičnih faznih prijelaza gdje analognu ulogu igraju termalne fluktuacije) [14].

## 4 Gustoća stanja

U prošlom smo poglavlju naveli da će topološka rekonstrukcija vrpce dovesti do smanjenja energije elektronskog podsustava isključivo putem promjene u gustoći stanja. Tako će doći do premještanja elektrona s viših energija na niže energije te (u određenim uvjetima) do stabilizacije CDW-a. Stoga, detaljan uvid u gustoću stanja je nužan za daljnje proučavanje ovog mehanizma. U ovom poglavlju, prvo računamo gustoću stanja za rekonstruiranu 2D izotropnu vrpcu. Poznavanje te gustoće stanja poslužit će nam kao odskočna daska za diskusiju utjecaja anizotropije na gustoću stanja trodimenzionalne anizotropne vrpce kojom se bavimo u ostatku ovog poglavlja.

### 4.1 Gustoća stanja dvodimenzionalne izotropne vrpce pod utjecajem periodičkog potencijala

Općenito, u  $d$  dimenzija, gustoća stanja dana je formulom

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^d} \int_{S(\varepsilon)} \frac{dS}{|\nabla_k \varepsilon(k)|}, \quad (4.1)$$

gdje faktor 2 potječe od spinske degeneracije, a integrira se po  $(d-1)$ -dimenzionalnoj (hiper)plohi konstantne energije  $S(\varepsilon)$ . U dvije dimenzije, formula (4.1) svodi se na

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2} \int_{L(\varepsilon)} \frac{ds}{\sqrt{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_y}\right)^2}}, \quad (4.2)$$

gdje se sada integrira po linijama konstantne energije  $L(\varepsilon)$  prikazanim na slici 3.1, a  $ds = \sqrt{dp_x^2 + dp_y^2} = dp_x \sqrt{1 + \left(\frac{dp_y}{dp_x}\right)^2}$  predstavlja duljinu elementa krivulje konstantne energije. Kako na krivulji konstantne energije  $p_x$  i  $p_y$  nisu nezavisne varijable, upotrebom lančanog pravila za deriviranje dobivamo

$$\sqrt{\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_y}\right)^2} = \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_y} \right| \sqrt{1 + \left(\frac{dp_y}{dp_x}\right)^2}, \quad (4.3)$$

te skraćivanjem razlomka u podintegralnoj funkciji dobivamo izraz za gustoću stanja

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2} \int dp_x \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_y} \right|^{-1}. \quad (4.4)$$

Kako nakon rekonstrukcije imamo dvije vrpce, svaka od njih će imati zasebni doprinos gustoći stanja

$$g(\varepsilon) = g^+(\varepsilon) + g^-(\varepsilon), \quad g^\pm(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2} \int dp_x \left| \frac{\partial \varepsilon_\pm}{\partial p_y} \right|^{-1}. \quad (4.5)$$

Deriviranjem disperzije (3.7) i uvođenjem bezdimenzionalnih varijabli (3.8) doprinos donje vrpce možemo zapisati kao

$$g^-(e) = \frac{2m}{(2\pi\hbar)^2} \times 4 \int_{x_c^-(e)}^1 \frac{dx}{\sqrt{e-1-x^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2}}}, \quad (4.6)$$

gdje faktor 4 potječe od 4 kvadranta Brillouinove zone. Gornja granica integracije je rub Brillouinove zone što u bezdimenzionalnim varijablama znači  $x = 1$  ( $p_x = Q/2$ ). Donja granica  $x_c^-(e)$  je nešto kompliciranija jer ovisi o energiji. Za  $e < 1 - \delta$  linije konstantne energije su zatvorene krivulje (Slika 3.1) i sijeku x os u točki  $x_c^-(e)$  koja je rješenje jednadžbe  $y^-(x_c^-, e) = 0$ , odnosno

$$e - 1 - x_c^-(e)^2 + \sqrt{4x_c^-(e)^2 + \delta^2} = 0. \quad (4.7)$$

Ta jednadžba se lako svede na kvadratnu, pa je fizikalno relevantno rješenje dano s

$$x_c^-(e, \delta) = \sqrt{e + 1 - \sqrt{4e + \delta^2}}. \quad (4.8)$$

S druge strane, za  $e = 1 - \delta$  donja vrpca ima sedlenu točku u ishodištu pa linije konstantne energije postaju otvorene (u prikazu ponovljene zone) te više ne sijeku os x pa stoga donja granica integracije postaje 0. Konačno,  $x_c^-$  možemo definirati po dijelovima:

$$x_c^-(e) = \begin{cases} \sqrt{e + 1 - \sqrt{4e + \delta^2}} & \text{za } e < 1 - \delta \\ 0 & \text{za } e \geq 1 - \delta \end{cases} \quad (4.9)$$

S druge strane, doprinos gornje vrpce dan je izrazom

$$g^+(e) = \frac{2m}{(2\pi\hbar)^2} \times 4 \int_0^{x_c^+(e)} \frac{dx}{\sqrt{e-1-x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2}}}, \quad (4.10)$$

gdje je sada donja granica integracije 0 zbog toga što su linije konstantne energije gornje vrpce (koja ima parabolički minimum u ishodištu na energiji  $e = 1 + \delta$ ) elipse

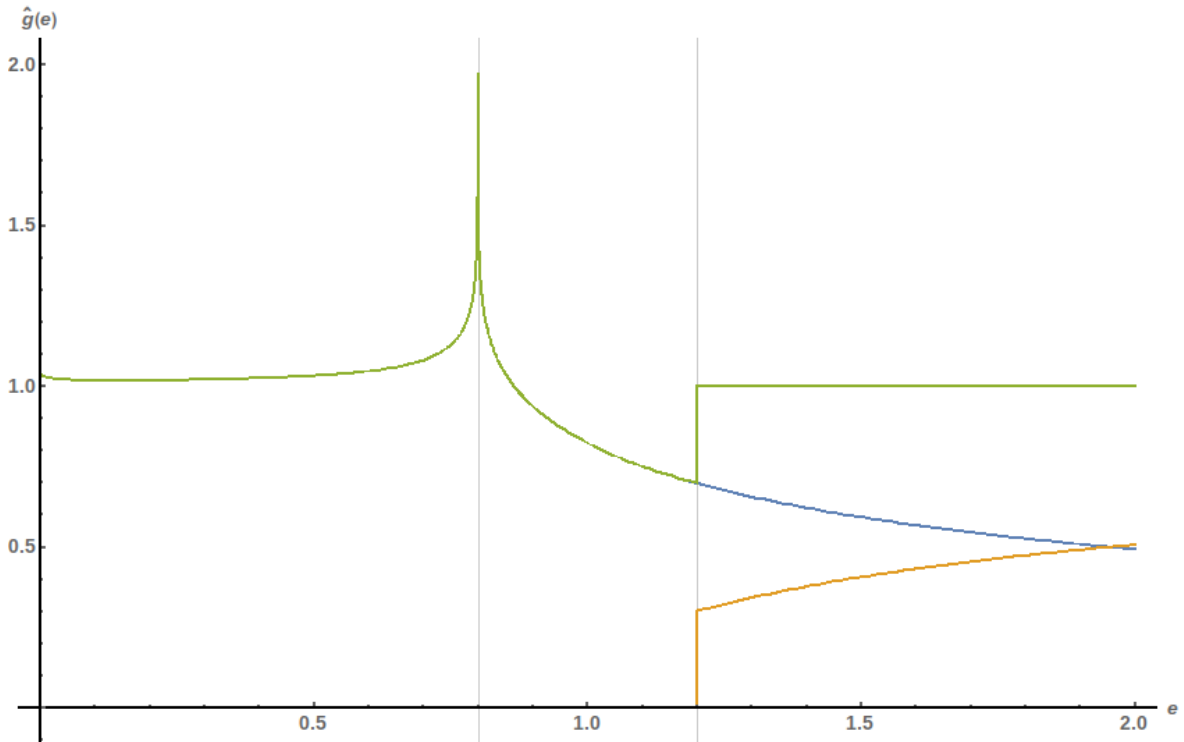
centrirane u ishodištu Brillouinove zone (Slika 3.1). Gornja granica  $x_c^+(e)$  jednaka je nuli za energije  $e < 1 + \delta$ , a za  $e \geq 1 + \delta$  dana je kao rješenje jednadžbe  $y^+(x_c^+, e) = 0$ , odnosno

$$e - 1 - x_c^+(e)^2 - \sqrt{4x_c^+(e)^2 + \delta^2} = 0, \quad (4.11)$$

čije je fizikalno prihvatljivo rješenje također dano s (4.8). Sve skupa,  $x_c^+(e)$  možemo definirati po dijelovima kao

$$x_c^+(e) = \begin{cases} 0 & \text{za } e < 1 + \delta \\ \sqrt{e + 1 - \sqrt{4e + \delta^2}} & \text{za } e \geq 1 + \delta \end{cases} \quad (4.12)$$

Integrale (4.6) i (4.10) rješavamo numerički, a rezultati su prikazani na slici 4.1,



Slika 4.1: Ukupna gustoća stanja rekonstruirane 2D izotropne paraboličke vrpce za  $\delta = 0.2$  podijeljena konstantnom 2D gustoćom stanja slobodnog elektronskog plina  $g_0(\varepsilon) = \frac{m}{\pi\hbar^2}$  (zeleno boja). Prikazani su također i doprinosi donje (plava boja) i gornje (narančasta boja) vrpce. Vertikalne sive linije označavaju Lifshitzove točke  $e = 1 \pm \delta$  na kojima se nalaze dno gornje i sedlena točka donje vrpce.

gdje smo normirali gustoću stanja konstantnom gustoćom stanja 2D slobodnoelektronske vrpce  $g_0 = \frac{m}{\pi\hbar^2}$  [10].

Zbog sličnosti mehanizma topološke rekonstrukcije s Lifshitzovim "2 $\frac{1}{2}$ " prijelazom<sup>12</sup>,

<sup>12</sup>Lifshitzov prijelaz označava elektronski prijelaz na  $T = 0$  uzrokovan promjenom topologije Fermijeve plohe prilikom varijacije parametra prijelaza X (npr. tlak u originalnom Lifshitzovom razma-

stacionarne točke naše rekonstruirane disperzije  $e_L^\pm = 1 \pm \delta$  ( $\varepsilon_L^\pm = (Q/2)^2/2m \pm \Delta$ ) nazivamo Lifshitzovim točkama. Kako vidimo na slici 4.1 gustoća stanja ima singularitet u donjoj Lifshitzovoj točki. Prirodu tog singulariteta možemo jednostavno naslutiti promatrajući podintegralnu funkciju u (4.6). Radi lakše diskusije definiramo funkcije

$$f^\pm(x; e) = e - 1 - x^2 \mp \sqrt{4x^2 + \delta^2} \quad (4.13)$$

tako da potintegralne funkcije u (4.6) i (4.10) možemo pisati kao  $1/\sqrt{f^\pm(x, e)}$ . Funkcija  $f^-$  ima nulu točno na granici integracije  $x_c^-$ . Jednostavnim razvojem u red oko  $x_c^-$  možemo utvrditi da je ta nula prvog reda za  $e < e_L^-$  što znači da će integral imati oblik  $\sim \int_{x_c^-}^x \frac{1}{\sqrt{x-x_c^-}}$  što neće biti singularno. S druge strane točno na  $e = e_L^-$  prva derivacija od  $f^-$  će iščeznuti te će nula biti drugog reda. To znači da će singularni doprinos integralu imati oblik  $\sim \int_{x_c^-}^x \frac{1}{x-x_c^-}$  što ukazuje na logaritamski tip singulariteta. Ovo je u skladu s Van Hoveovom općenitom klasifikacijom [15] singulariteta gustoće stanja s obzirom na vrstu eskrema disperzije (maksimum, minimum ili sedlena točka) i dimenzionalnost sustava. Naime, za 2D sedlenu točku Van Hove predviđa singularitet logaritamskog tipa

$$g(e) \sim \ln \left| 1 - \frac{e}{e_L^-} \right|. \quad (4.14)$$

U području između Lifshitzovih točaka gustoća stanja (Slika 4.1) pada sve dok za  $e = e_L^+ = 1 + \delta$  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).

Sada kada imamo uvid u gustoću stanja, možemo vidjeti suštinu mehanizma topološke rekonstrukcije. Naime, pojava CDW uređenja ostavit će Fermijevu energiju netaknutom, ali će zato otvoriti pseudoprocjep "oko" nje tako da će dio stanja otići na niže energije i smanjiti energiju čitave vrpce (singularno područje oko donje Lifshitzove točke postaje bogato stanjima na račun osiromašenja pseudoprocjepa).

tranju [16]). Variranjem parametra prijelaza Fermijeva energija prođe kroz vrijednost  $\varepsilon_0$  na kojoj disperzija ima stacionarnu točku što dovodi do raznih anomalnih termodinamičkih i kinetičkih karakteristika elektronskog podsustava. Ime " $2\frac{1}{2}$ " dolazi zbog toga što slobodna energija na  $T = 0$  ima singularitet korijenskog tipa ( $X^{1/2}$ ) u drugoj derivaciji. Za detaljnija razmatranja vidjeti [16] ili [17].

## 4.2 Topološka rekonstrukcija trodimenzionalne anizotropne slobodnoelektronske vrpce

U skladu sa temom ovom diplomskog rada, u ovom se potpoglavlju počinjemo baviti pitanjem mogućnosti poopćenja mehanizma topološke rekonstrukcije na slučaj trodimenzionalne anizotropne slobodnoelektronske vrpce. Neka je početna vrpca opisana kvadratičnom disperzijom

$$\varepsilon(\vec{p}) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + ap_z^2), \quad (4.15)$$

gdje smo uveli bezdimenzionalni parametar anizotropije  $a$  (omjer efektivnih masa). Izotropni slučaj dobivamo za  $a = 1$ , a maksimalno anizotropni slučaj, u kojem nema disperzije u  $z$  smjeru dobivamo u granici  $a = 0$  (pripadna efektivna masa je beskonačna). Nakon uključivanja periodičkog potencijala impulsa  $Q$  u smjeru  $x$  osi, rekonstruiranu disperziju dobivamo koristeći općenitu formulu (neovisnu o početnoj disperziji) (3.5), gdje su sada

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{p}) \equiv \varepsilon(p_x \pm Q/2, p_y, p_z) = \frac{1}{2m} ((p_x \pm Q/2)^2 + p_y^2 + ap_z^2). \quad (4.16)$$

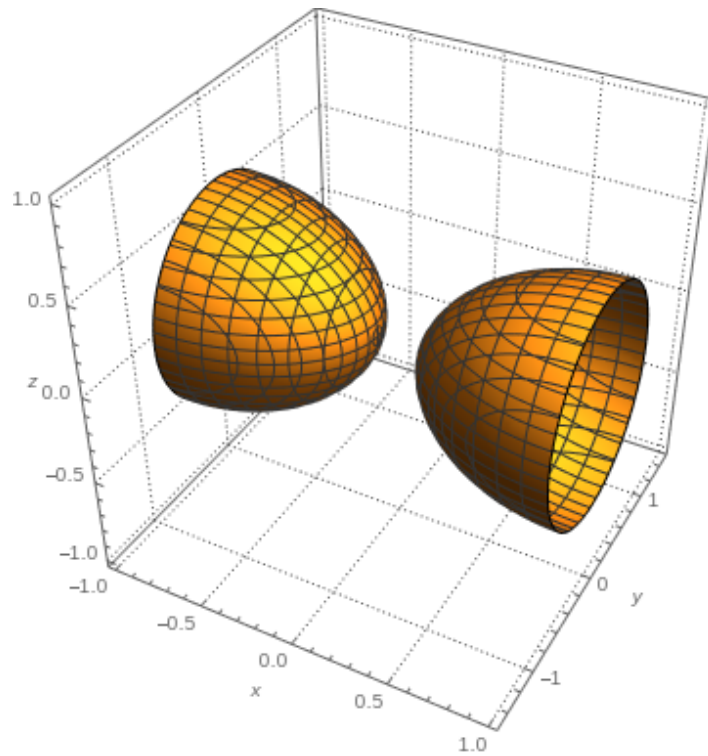
Nakon uvrštavanja dobivamo disperziju rekonstruirane vrpce

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \left( p_x^2 + p_y^2 + ap_z^2 + (Q/2)^2 \pm \sqrt{(p_x Q)^2 + (2m\Delta)^2} \right). \quad (4.17)$$

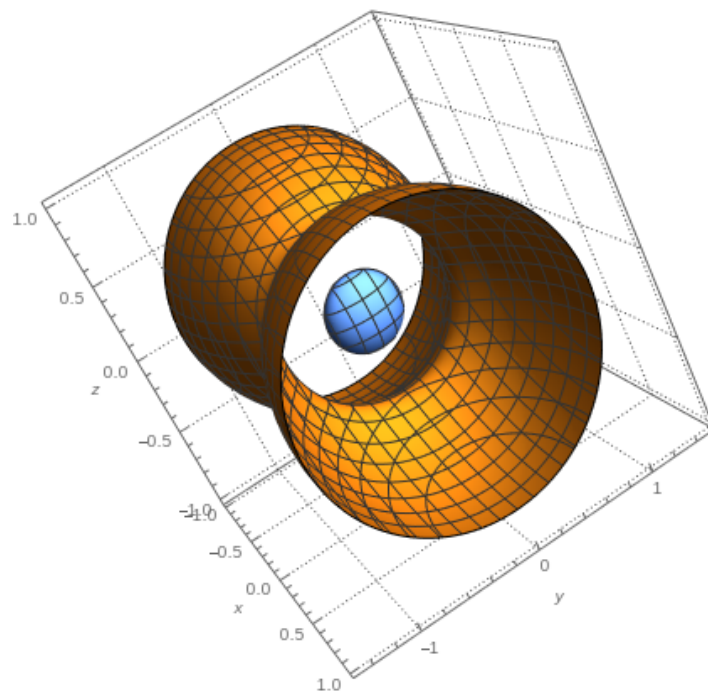
Radi jednostavnosti računanja i analize, opet uvodimo bezdimenzionalne varijable pomoću skaliranja (3.8) pa bezdimenzionalna disperzija sada glasi

$$e_{\pm}(x, y, z) = x^2 + y^2 + az^2 + 1 \pm \sqrt{4x^2 + \delta^2}. \quad (4.18)$$

Disperzija ima dvije vrpce koje imaju slična svojstva kao i u prethodno razmatranom dvodimenzionalnom slučaju. Donja vrpca ima sedlenu točku u ishodištu ( $x = y = z = 0$ ) na energiji  $e = 1 - \delta$ . Za energije  $e < 1 - \delta$  plohe donje vrpce su zatvorene (Slika 4.2) dok za  $e > 1 - \delta$  postaju otvorene (Slika 4.3) (ploha  $e = 1 - \delta$  je separatrisa). Gornja vrpca ima parabolički minimum na energiji  $e = 1 + \delta$  pa se za energije  $e > 1 + \delta$  pojavljuje i topološki nepovezan elipsoidni "džep" (Slika 4.3) koji će davati odvojeni doprinos gustoći stanja.



Slika 4.2: Primjer plohe konstantne energije za  $e < 1 - \delta$  u 1. Brillouinovoj zoni. U prikazu ponovljene zone plohe bi sačinjavale skup zatvorenih disjunktih elipsoida.



Slika 4.3: Primjer plohe konstantne energije za  $e > 1 + \delta$  u 1. Brillouinovoj zoni. Ploha koja potječe od donje vrpce (smeđa boja) je otvorena dok u centru zone imamo "džep" (plava boja) koji potječe od gornje vrpce.



### 4.2.1 Gustoća stanja

Za račun gustoće stanja opet se koristimo formulom

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^d} \int_{S(\varepsilon)} \frac{dS}{|\nabla_k \varepsilon(k)|}, \quad (4.19)$$

gdje je  $d = 3$ , a element površine plohe konstantne energije  $dS$  je povezan s elementom površine u  $p_x - p_y$  ravnini formulom

$$dS = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{d\mathbf{p}}{dp_x} \times \frac{d\mathbf{p}}{dp_y} \right| dp_x dp_y, \quad (4.20)$$

što se, koristeći definiciju vektorskog produkta<sup>13</sup>, može zapisati kao

$$dS = \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{1 + \left( \frac{\partial p_z}{\partial p_x} \right)^2 + \left( \frac{\partial p_z}{\partial p_y} \right)^2} dp_x dp_y. \quad (4.21)$$

S druge strane, na plohi konstantne energije vrijedi

$$d\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_x} dp_x + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_y} dp_y + \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_z} dp_z = 0, \quad (4.22)$$

gdje  $p_z$  možemo tretirati kao zavisnu varijablu

$$dp_z = \frac{\partial p_z}{\partial p_x} dp_x + \frac{\partial p_z}{\partial p_y} dp_y. \quad (4.23)$$

Koristeći ove jednadžbe, gradijent u nazivniku možemo napisati kao

$$|\nabla_k \varepsilon(k)| = \hbar \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_z} \right| \sqrt{1 + \left( \frac{\partial p_z}{\partial p_x} \right)^2 + \left( \frac{\partial p_z}{\partial p_y} \right)^2} \quad (4.24)$$

što vodi na izraz za gustoću stanja

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \iint \left| \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_z} \right|^{-1} dp_x dp_y, \quad (4.25)$$

koji, kada se izračuna derivacija i izraz prevede u bezdimenzionalne varijable (3.8), poprima oblik

$$g(e) = \frac{mQ}{(2\pi\hbar)^3 a} \iint |z|^{-1} dx dy, \quad (4.26)$$

---

<sup>13</sup> $(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} a_j b_k$

gdje još nismo specificirali integracijsku domenu. Kada se  $z$  izrazi preko  $x$  i  $y$  koristeći (4.18), a integracija ograniči na prvi kvadrant i pozitivnu granu plohe konstantne energije dobije se

$$g^-(e) = \frac{8mQ}{(2\pi\hbar)^3\sqrt{a}} \int_{x_c^-(e)}^1 dx \int_0^{y_c^-(x)} dy \frac{1}{\sqrt{f^-(x;e) - y^2}} \quad (4.27)$$

za doprinos donje i

$$g^+(e) = \frac{8mQ}{(2\pi\hbar)^3\sqrt{a}} \int_0^{x_c^+(e)} dx \int_0^{y_c^+(x)} dy \frac{1}{\sqrt{f^+(x;e) - y^2}} \quad (4.28)$$

za doprinos gornje vrpce, gdje faktor 8 dolazi od 4 kvadranta i 2 grane (pozitivna i negativna) po kvadrantu. Integrale smo zapisali koristeći funkcije definirane u (4.13) da bismo jasno odvojili dio koji ovisi o  $x$  od onog koji ovisi o  $y$ . Rub domene integracije dan je uvjetom  $z(x, y, e) = 0$ , što znači da su linije konstantne energije u 2D slučaju sada rubovi integracije pa su stoga  $x_c^\pm$  dani istim izrazima kao i prije ((4.9) i (4.12)). Invertiranjem uvjeta  $z = 0$  dobivamo i granicu integracije po  $y$  koja je dana s

$$y_c^\pm(x; e) = \sqrt{f^\pm(x; e)} \quad (4.29)$$

Supstitucijom  $\frac{y}{\sqrt{f^\pm(x; e)}} = u$  integral po  $y$  postaje trivijalan te se lako riješi trigonometrijskom supstitucijom  $u = \sin\theta$ :

$$\int_0^1 \frac{du}{\sqrt{1-u^2}} = \frac{\pi}{2}. \quad (4.30)$$

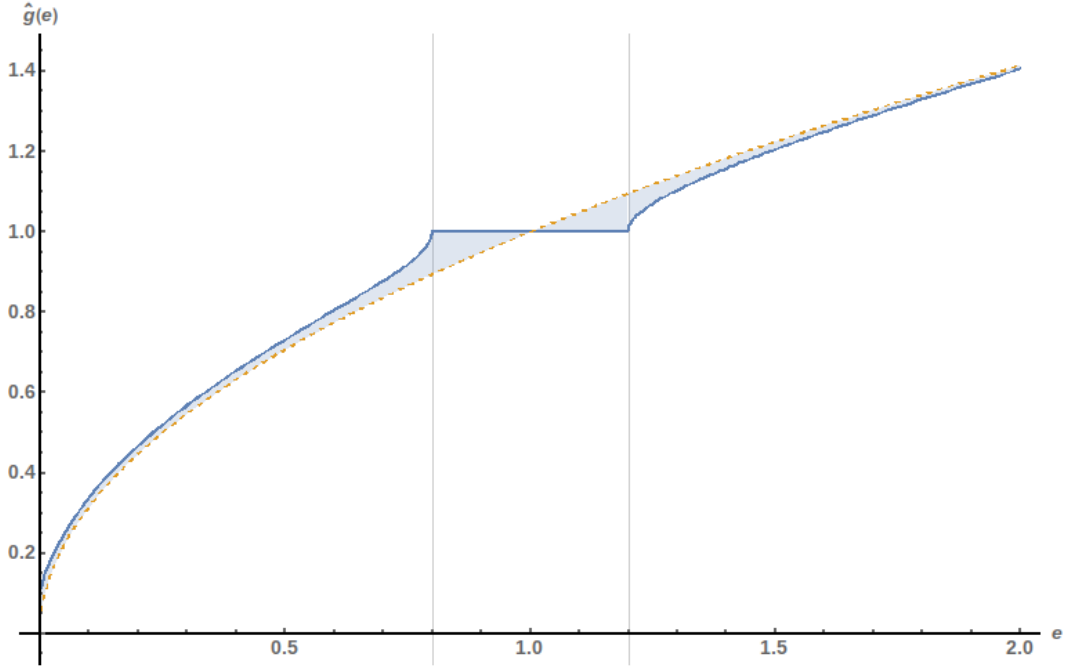
Sve skupa, gustoća stanja rekonstruirane 3D anizotropne slobodnoelektronske vrpce glasi

$$g(e) = g^+(e) + g^-(e) = \frac{mQ}{2\pi^2\hbar^3} \frac{[1 - x_c^-(e) + x_c^+(e)]}{\sqrt{a}}, \quad (4.31)$$

odnosno, koristeći (4.9) i (4.12),

$$g(e) = \frac{mQ}{2\pi^2\hbar^3\sqrt{a}} \times \begin{cases} 1 - \sqrt{e+1 - \sqrt{4e + \delta^2}} & \text{za } e < 1 - \delta \\ 1 & \text{za } 1 - \delta \leq e \leq 1 + \delta \\ 1 + \sqrt{e+1 - \sqrt{4e + \delta^2}} & \text{za } e > 1 + \delta \end{cases} \quad (4.32)$$

Kao što vidimo na slici 4.4, gustoća stanja je klase  $C^0$  (u smislu matematičke analize) u čitavom rasponu energija. Međutim, u Lifshitzovim točkama  $e_L^\pm = 1 \pm \delta$ ,



Slika 4.4: (Normirana) gustoća stanja rekonstruirane 3D slobodnoelektronske vrpce  $\hat{g}(e) = g(e)2\pi^2\hbar^3/mQ$  za  $\delta = 0.2$  i  $a = 1$  (plava boja). Usporedbe radi, prikazana je i gustoća stanja inicijalne vrpce ( $\delta = 0$ ,  $a = 1$ ) (smeđa crtkana linija). Vertikalne linije označavaju Lifshitzove točke  $e = 1 \pm \delta$ .

dolazi do loma (gustoća stanja nije  $C^1$ ) te između njih gustoća stanja naglo poprima konstantnu vrijednost (kao da se radi o 2D paraboličkoj disperziji). Ovo je u skladu s Van Hoveovim općenitim razmatranjima analitičkog ponašanja gustoće stanja [15]. Osim toga, singularno ponašanje naše gustoće stanja opet se slaže s Van Hoveovom klasifikacijom singulariteta u gustoći stanja s obzirom na vrstu "kritične" točke ( $\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p}) = 0$ ) disperzije i dimenzionalnosti sustava. Donja Lifshitzova točka ( $e_L^- = 1 - \delta$ ) je sedlena točka donje vrpce te prolaskom kroz nju u smjeru povećanja energije, zatvorena ploha konstantne energije postaje otvorena. U tom slučaju gustoća stanja bi trebala imati sljedeće ponašanje [15]

$$g^-(e) \sim \begin{cases} A - B\sqrt{e_L^- - e} & \text{za } e < e_L^- \\ A + O(e - e_L^-) & \text{za } e > e_L^- \end{cases} \quad (4.33)$$

gdje su  $A$ ,  $B$  i  $O$  konstante. S druge strane, gornja Lifshitzova točka  $e_L^+ = 1 + \delta$  je minimum gornje vrpce što vodi na korijenski doprinos gustoći stanja

$$g^+(e) \sim \begin{cases} 0 & \text{za } e < e_L^+ \\ \sqrt{e - e_L^+} & \text{za } e > e_L^+ \end{cases} \quad (4.34)$$

Oba ova rezultata su u skladu s ponašanjem naše gustoće stanja (Slika 4.4). Posebno, (4.33) nam "objašnjava" zanimljivo povećanje nagiba funkcije gustoće stanja neposredno prije donje Lifshitzove točke u kojoj naglo postaje konstanta.

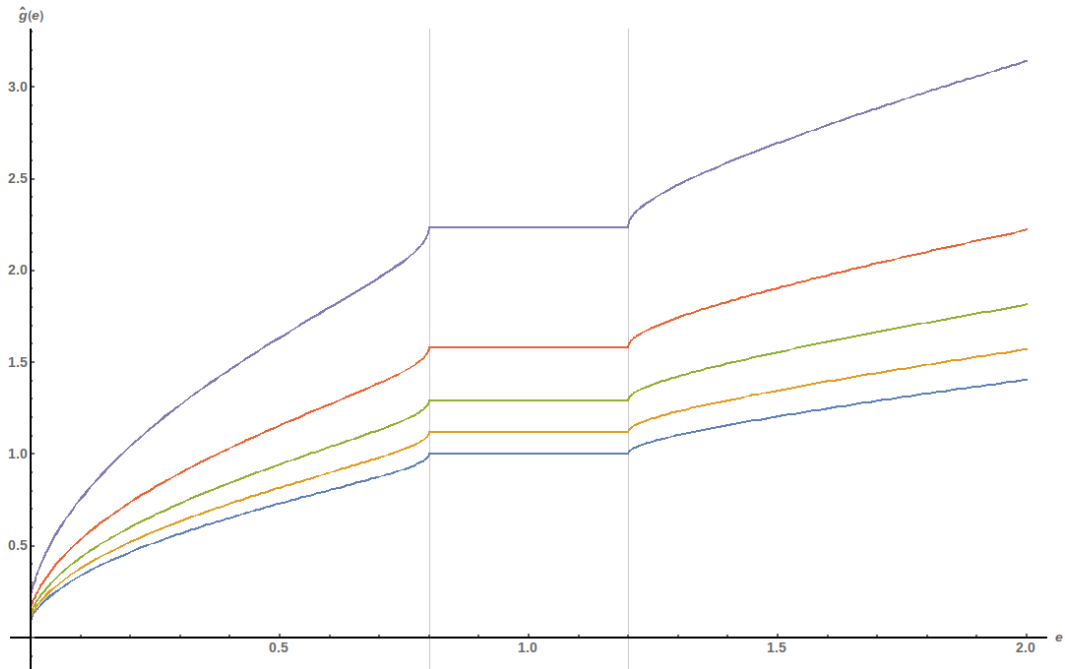
Također, smanjenjem jakosti periodičkog potencijala ( $\delta \rightarrow 0$ ) Lifshitzove točke se približavaju te područje u kojem gustoća stanja poprima konstantnu vrijednost nestaje. U konačnici, potpunim iščezavanjem potencijala ( $\delta = 0$ ), gornja i donja vrpca se spajaju te ponovno imamo običnu 3D kvadratičnu disperziju (4.15). Naša gustoća stanja (4.32) u tom limesu daje (nakon prikladnog reskaliranja te ignorirajući anizotropiju)

$$g(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{\varepsilon}, \quad (4.35)$$

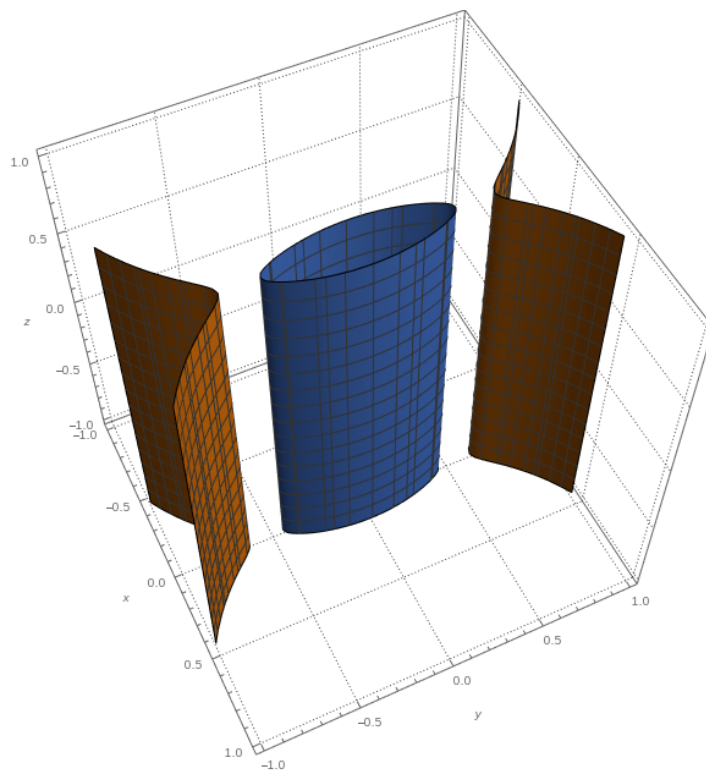
što je uobičajeni rezultat za slobodni elektronski plin u 3 dimenzije.

#### 4.2.2 Utjecaj anizotropije

Vidimo iz (4.32) da parametar anizotropije  $a$  ulazi u gustoću stanja preko jednostavnog faktora  $\sqrt{a}$  u nazivniku. Iz toga je jasno da povećavanje anizotropije neće kvalitativno promijeniti ponašanje gustoće stanja, već će ju samo skalirati (Slika 4.5). Štoviše, formula (4.32) ne može se uopće protegnuti u granicu maksimalne anizotropije ( $a = 0$ ) u kojem naša početna disperzija (4.15) postaje egzaktno dvodimenzionalna što se očituje pojavom nule u nazivniku za taj slučaj. To znači da na ovaj način nećemo moći reproducirati dvodimenzionalnu gustoću stanja koju smo izračunali u prethodnom potpoglavlju (Slika 4.1). Razlog za to je ukorijenjen u dimenzionalnost problema. Naime, bez obzira na to što je u slučaju  $a = 0$  disperzija (4.15) izgubila ovisnost o  $p_z$  (kaže se da nema više disperziju u tom smjeru), impuls  $p_z$  je i dalje kvantni broj čije različite vrijednosti označavaju različita stanja. Jedini je problem u tome što su sva ta stanja sada degenerirana pa ploha konstantne energije postaje neograničena u  $z$  smjeru kao na slici 4.6, što znači da će gustoća stanja imati beskonačan doprinos na svim energijama. Prethodna razmatranja očitito upućuju na to da tretiranje anizotropije pomoću variranja efektivne mase nije prikladno za diskusiju dimenzionalnog prijelaza sustava (u našem slučaju  $3D \rightarrow 2D$ ) pa stoga u sljedećem potpoglavlju krećemo u razmatranje, po našem mišljenju, relevantnijeg tretmana anizotropije pomoću necjelobrojne dimenzionalnosti.



Slika 4.5: (Normirana) gustoća stanja rekonstruirane 3D slobodnoelektronske vrpce  $\hat{g}(e) = g(e)2\pi^2\hbar^3/mQ$  za  $\delta = 0.2$  i razne vrijednosti parametra anizotropije: (i)  $a = 1$  (svijetlo plava boja), (ii)  $a = 0.8$  (narančasta boja), (iii)  $a = 0.6$  (zeleno boja), (iv)  $a = 0.4$  (crvena boja), (v)  $a = 0.2$  (tamno plava boja).



Slika 4.6: Primjer plohe konstantne energije za slučaj maksimalne anizotropije  $a = 0$ . Vidimo da ploha postaje neograničena u smjeru z osi.

### 4.3 *Gustoća stanja topološki rekonstruirane vrpce necjelobrojne dimenzionalnosti*

U geometrijskom smislu, svi zamislivi prostori, a na koncu i onaj u kojem živimo, imaju cjelobrojnu<sup>14</sup> dimenziju. To se formalno vidi i u samoj definiciji topološke mnogostrukosti čija je dimenzija definirana kao dimenzija prostora  $\mathbb{R}^n$  koji joj je lokalno homeomorfan (gdje opet nema smisla govoriti o necjelobrojnoj dimenziji)<sup>15</sup>. Međutim, ideja necjelobrojne dimenzionalnosti već više od pola stoljeća pojavljuje se u raznolikim fizikalnim kontekstima kao npr. u teoriji kritičnih fenomena u obliku tzv.  $\epsilon = 4 - d$  razvoja gdje je  $d$  necjelobrojna dimenzija sustava [18]. Necjelobrojna dimenzija se također pojavljuje kao prirodan matematički opis u sustavima koji posjeduju elemente fraktalne geometrije (vidi npr. Stapleton et al. [19]). S druge strane, efektivna necjelobrojna dimenzionalnost sustava opazila se i u mjerenjima svojstava sustava koji nemaju fraktalnu geometriju kao npr. linearnih kristalnih lanaca i ultratankih molekularnih žica gdje je dimenzionalnost varirala s debljinom žice, temperaturom itd.

U ovom poglavlju, a i u ostatku ovog diplomskog rada, mi ćemo (po uzoru na [8]) uvesti efektivnu necjelobrojnu dimenziju kao prirodan opis anizotropije sustava. Taj se pristup zasniva na intuitivnoj ideji da efektivna dimenzionalnost sustava nije čisto geometrijsko svojstvo (svi materijali su geometrijski gledano trodimenzionalni) već svojstvo koje ovisi o ograničenjima koja su nametnuta na sustav. Tako ćemo, primjerice, polimere zvati 1D, a laminarne spojeve 2D materijalima ne zbog njihove geometrijske dimenzionalnosti već zbog ograničene dinamike njihovih pobuđenja koja mogu biti "zatočena" u prostoru čija je dimenzionalnost manja od dimenzije geometrijskog prostora u koji su uronjeni.

Ideja ovakvog pristupa je da se sustav koji posjeduje pobuđenja čija je dinamika anizotropna formalno zamijeni s izotropnim sustavom, ali u prostoru necjelobrojne dimenzije, gdje efektivna dimenzija ovisi o stupnju anizotropije. Efektivna dimenzija može se definirati i operativno, preko eksperimentalnih svojstava sustava koja ovise o dimenziji. Tako npr. Dhar [20] uvodi necjelobrojnu dimenziju anizotropne rešetke da bi opisao ponašanje fononskog doprinosa toplinskom kapacitetu na niskim ener-

<sup>14</sup>Također, dimenzija je uvijek ne-negativna.

<sup>15</sup>Usprkos tome, moguće je konzistentno aksiomatizirati topološke prostore necjelobrojne dimenzionalnosti (vidi [21]).

gijama ( $C_v \sim T^d$ ) dok u [8] nalazimo efektivnu necjelobrojnu dimenziju kao opis elektronske gustoće stanja koja se mjeri u optičkoj spektroskopiji. Efektivna dimenzija koju mjerimo ovisit će o svojstvima koja mjerimo, odnosno o interakcijama koje igraju ulogu u mjerenju. Tako npr. dimenzija izmjerena promatranjem toplinskog kapaciteta (ili niskoenergetske gustoće stanja) fonona ne mora biti ista kao dimenzija izmjerena preko gustoće stanja elektrona zbog različitih interakcija koje igraju ulogu u mjerenju.

### 4.3.1 Račun gustoće stanja

Kako bismo poopćili izračun gustoće stanja za slučaj necjelobrojne dimenzije krećemo od formule za bezdimenzionalnu disperziju 3D izotropne rekonstruirane vrpce

$$e_{\pm} = 1 + x^2 + y^2 + z^2 \pm \sqrt{4x^2 + \delta^2}. \quad (4.36)$$

Iz formule se jasno vidi da je energija invarijantna na rotacije u  $yz$  ravnini pa stoga uvodimo polarni radijus  $r$  kao  $r^2 = y^2 + z^2$ . Gustoću stanja koju smo prije izračunali pomoću (4.19) sada možemo računati preko formule

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\Omega_p(\varepsilon)}{d\varepsilon}, \quad (4.37)$$

gdje  $\Omega_p(\varepsilon)$  označava volumen u Brillouinovoj zoni omeđen plohom konstantne energije  $S(\varepsilon)$ . Formula (4.37) odražava ideju da  $g(\varepsilon)d\varepsilon$  označava broj stanja s energijom u rasponu  $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$ . Volumen u impulsom prostoru može se, koristeći skaliranje (3.8), napisati preko volumena u bezdimenzionalnoj Brillouinovoj zoni  $\Omega_x$

$$\Omega_p(\varepsilon) = \left(\frac{Q}{2}\right)^3 \Omega_x(e), \quad (4.38)$$

a derivaciju po  $\varepsilon$  zamjenjujemo onom po  $e$  koristeći lančano pravilo

$$\frac{d}{d\varepsilon} = \frac{2m}{(Q/2)^2} \frac{d}{de}. \quad (4.39)$$

Sve skupa, formula za gustoću stanja je

$$g(e) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{Q}{2}\right)^3 \frac{2m}{(Q/2)^2} \frac{d\Omega_x(e)}{de}. \quad (4.40)$$

Kako je disperzija simetrična na rotacije oko osi  $x$ , prostor omeđen plohom konstantne energije bit će rotacijsko tijelo pa njegov volumen možemo zapisati kao

$$\Omega_x(e) = 2 \left( \int_{x_c^-(e)}^1 \pi r_-^2(x, e) dx + \int_0^{x_c^+(e)} \pi r_+^2(x, e) dx \right), \quad (4.41)$$

gdje su granice  $x_c^\pm$  definirane u (4.9) i (4.12), a  $r_\pm$  dobivamo invertiranjem disperzije (4.36)

$$r_\pm(x, e) = \sqrt{e - 1 - x^2 \mp \sqrt{4x^2 + \delta^2}}. \quad (4.42)$$

Podintegralna funkcija u (4.41) je volumen 3 – 1 dimenzionalne kugle pa, ako želimo poopćiti naš izračun gustoće stanja za slučaj općenite (necjelobrojne) dimenzije, vršimo zamjenu

$$r_\pm^2 \pi \rightarrow V_{d-1}(r_\pm) = \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2} + 1\right)} r_\pm^{d-1}, \quad (4.43)$$

gdje je  $V_{d-1}$  formula za volumen  $(d - 1)$ -dimenzionalne kugle [8], a  $\Gamma(z)$  gama funkcija definirana izrazom

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt. \quad (4.44)$$

Također, treba poopćiti prefaktor u u izrazu (4.40) na sljedeći način

$$\frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{Q}{2}\right)^3 \rightarrow \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^d. \quad (4.45)$$

Sve skupa, dobivamo izraz za gustoću stanja u  $d$  dimenzija

$$g_d(e) = \frac{8m}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^{d-2} \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2} + 1\right)} \frac{d}{de} \left( \int_{x_c^-(e)}^1 r_-^{d-1}(x, e) dx + \int_0^{x_c^+(e)} r_+^{d-1}(x, e) dx \right), \quad (4.46)$$

što, primjenom pravila deriviranja funkcije čiji se argument nalazi i pod integralom i u granicama integracije [22]

$$\frac{\partial}{\partial y} \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} f(x, y) dx = \beta'(y) f[\beta(y), y] - \alpha'(y) f[\alpha(y), y] + \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} dx, \quad (4.47)$$

postaje

$$g_d(e) = \frac{8m}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^{d-2} \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \left( \int_{x_c^-(e)}^1 r_-^{d-3}(x, e) dx + \int_0^{x_c^+(e)} r_+^{d-3}(x, e) dx \right). \quad (4.48)$$

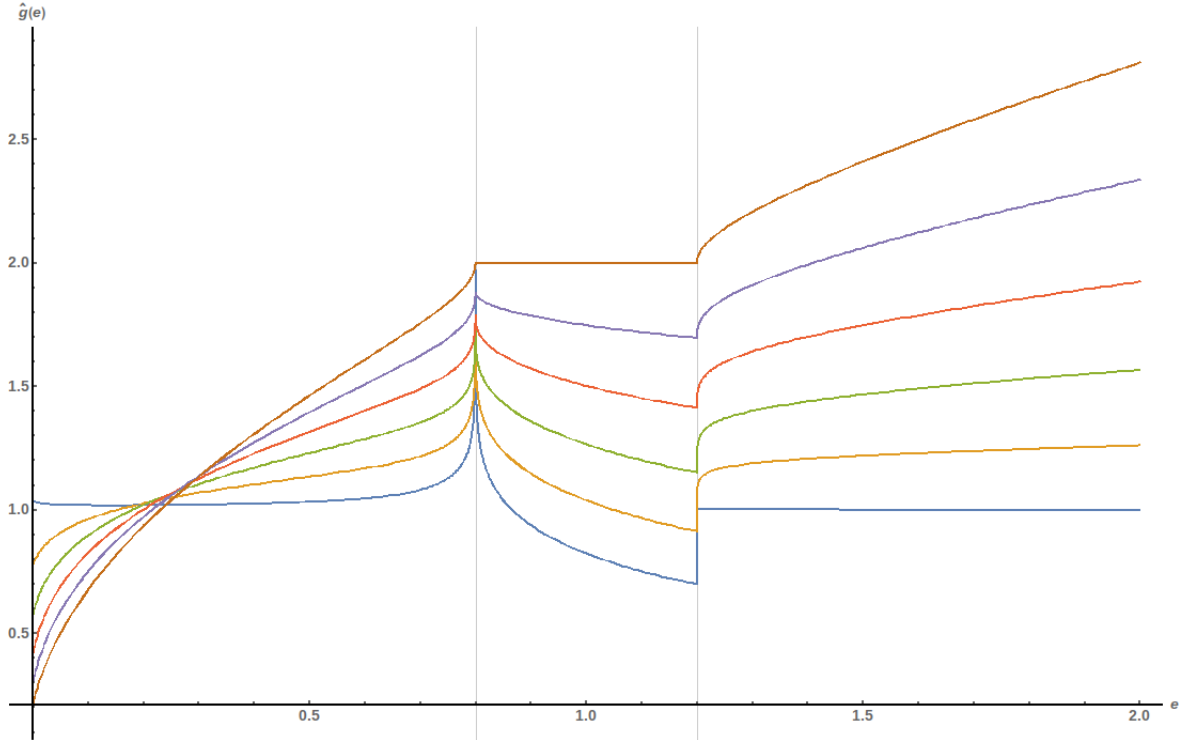


Tu smo upotrijebili svojstvo gama funkcije  $\Gamma(z + 1) = z\Gamma(z)$ . Uvrštavanjem izraza za  $r_{\pm}$  konačna formula za gustoću stanja rekonstruirane vrpce proizvoljne dimenzionalnosti glasi

$$g_d(e) = \frac{8m}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^{d-2} \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \int_{x_{\bar{c}}^-(e)}^1 (e - 1 - x^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2})^{\frac{d-3}{2}} dx$$

$$+ \frac{8m}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^{d-2} \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \int_0^{x_{\bar{c}}^+(e)} (e - 1 - x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2})^{\frac{d-3}{2}} dx \quad (4.49)$$

Lako se provjeri, koristeći vrijednosti gama funkcije  $\Gamma(1) = 1$  i  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ , da (4.49) reproducira gustoće stanja u 2D i 3D koje smo izračunali u prošlim potpoglavljima. Osim toga, formula (4.49) nam za dimenzije između 2 i 3 daje gustoće

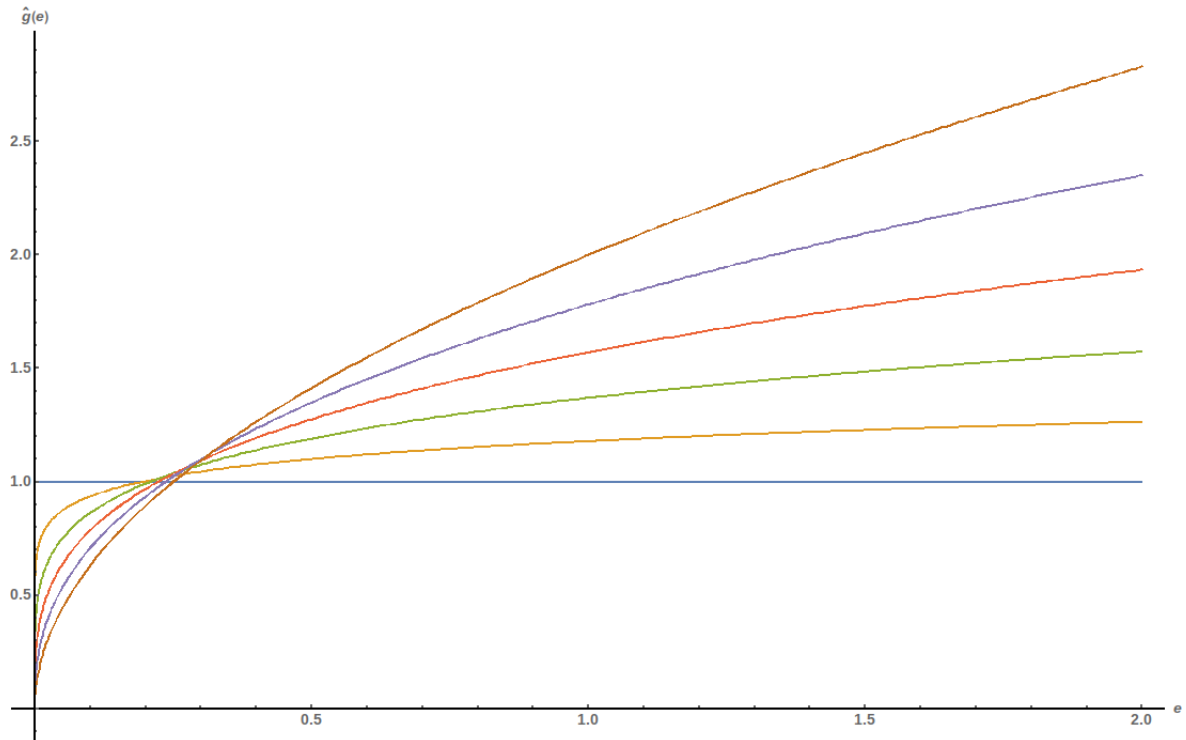


Slika 4.7: Dimenzionalni prijelaz gustoće stanja iz 3D u 2D. Nacrtnane su normirane gustoće stanja  $\hat{g}(e)$  za  $\delta = 0.2$  i dimenzije  $d = 3$  (smeđom bojom),  $d = 2.8$  (tamno plavom bojom),  $d = 2.6$  (crvenom bojom),  $d = 2.4$  (zelenom bojom),  $d = 2.2$  (narančastom bojom) i  $d = 2$  (svijetlo plavom bojom).

stanja koje glatko prelaze iz trodimenzionalnog slučaja u dvodimenzionalni kako smanjujemo  $d$ . Na slici 4.7 prikazan je takav prijelaz normirane gustoće stanja  $\hat{g}(e)$  definirane formulom

$$\frac{2}{\pi} \times g_d(e) = \frac{8m}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^{d-2} \hat{g}_d(e), \quad (4.50)$$

gdje smo normiranje odabrali tako da 2D gustoća stanja u slučaju  $\delta = 0$  (bez rekonstrukcije) bude normirana na jedinicu. Sa slike vidimo kako se smanjenjem dimenzije postupno mijenja priroda singulariteta u Lifshitzovim točkama, odnosno vidimo formiranje šiljka na energiji  $e_L^-$  i diskontinuiteta u  $e_L^+$  koji bivaju sve izraženiji kako se približavamo granici  $d = 2$ , a nestaju kako se približavamo granici  $d = 3$ . Ovakav dimenzionalni prijelaz nismo mogli ostvariti uvođenjem anizotropije pomoću parametra anizotropije u smislu efektivne mase u početnoj trodimenzionalnoj disperziji te sad vidimo i zašto - variranje parametra anizotropije ukinut će disperziju u jednom smjeru, ali stanja obilježena kvantnim brojem koji je ispao iz igre u disperziji i dalje ćemo morati brojati kao različita (iako su degenerirana) pa stoga dimenzionalnost problema ostaje ista. Na posljertku, u formulu (4.49) stavljamo  $\delta = 0$  te dajemo



Slika 4.8: Prikaz dimenzionalnog prijelaza gustoće stanja slobodnoelektronske vrpce (bez utjecaja periodičkog potencijala) iz 3D (plava boja) u 2D (svijetlo smeđa boja).

prikaz dimenzionalnog prijelaza gustoće stanja nerekonstruirane vrpce na slici 4.8. Vidimo kako gustoća stanja smanjenjem dimenzije postepeno prelazi iz korijenskog oblika karakterističnog za 3D slobodnoelektronsku vrpcu u konstantu karakterističnu za 2D vrpcu.

## 5 Energija vrpce i stabilnost kondenzata

U ovom poglavlju dolazimo do ključnog pitanja ovog diplomskog rada: Je li smanjenje energije vrpce uzrokovano topološkom rekonstrukcijom dovoljno da kompenzira povećanje elastične energije rešetke uslijed pojave CDW-a? Da bismo dali odgovor, postupamo analitički te pitanje razdvajamo na više manjih dijelova. U prvom se potpoglavlju pitamo koje će popunjenje vrpce (Fermijeva energija) nakon topološke rekonstrukcije dovesti do najvećeg smanjenja energije čitave vrpce, a da pritom broj elektrona ostane očuvan. U tu svrhu provodimo postupak optimizacije s ograničenjem koristeći metodu Lagrangeovih multiplikatora. Taj rezultat će nam u drugom potpoglavlju poslužiti da odredimo optimalni impuls  $Q_m$  vala gustoće naboja za dani parametar uređenja  $\Delta$ . Na posljeticu, koristeći optimalne parametre računamo smanjenje energije čitave vrpce u ovisnosti o parametru uređenja  $\Delta$ . U konačnici, uvođenjem elastičnog doprinosa energiji određujemo uvjete mogućnosti stabilizacije CDW-a te ovisnost istih o dimenzionalnosti sustava.

### 5.1 Optimalna Fermijeva energija nakon topološke rekonstrukcije

Vidjeli smo u prethodnom poglavlju da će efekt pojave vala gustoće naboja na vrpcu biti promjena gustoće stanja što će uzrokovati redistribuciju elektrona u stanja niže energije. Ovdje se pitamo za koju Fermijevu energiju nakon rekonstrukcije vrpce će smanjenje energije biti najveće uz uvjet očuvanja broja elektrona. Rezultat koji dobijemo biti će općenit utoliko što neće ovisiti o detaljima promjene gustoće stanja. Neka se gustoća stanja promijeni iz  $g_0(\varepsilon)$  u  $g(\varepsilon)$ . Promjena energije u ovisnosti o Fermijevim energijama prije i nakon promjene dana je izrazom

$$\Delta E(\varepsilon_F, \varepsilon_{F0}) = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_{F0}} g_0(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon. \quad (5.1)$$

Naš je zadatak naći minimum ovog izraza uz uvjet očuvanja broja elektrona

$$\Delta N(\varepsilon_F, \varepsilon_{F0}) = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_{F0}} g_0(\varepsilon)d\varepsilon = 0. \quad (5.2)$$

Da bismo našli minimum energije uz ograničenje (5.2) uvodimo Lagrangeov multiplikator  $\mu$  i definiramo funkciju

$$L = \Delta E - \mu \Delta N. \quad (5.3)$$

Optimalne Fermijeve energije sada su dane kao rješenja jednadžbi

$$\frac{\partial L}{\partial \varepsilon_F} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \varepsilon_{F0}} = 0. \quad (5.4)$$

S obzirom da se Fermijeve energije pojavljuju samo u granicama integracije, primjena pravila (4.47) daje

$$\frac{\partial L}{\partial \varepsilon_F} = g(\varepsilon_F)(\varepsilon_F - \mu) = 0 \quad (5.5)$$

i

$$\frac{\partial L}{\partial \varepsilon_{F0}} = g_0(\varepsilon_{F0})(\mu - \varepsilon_{F0}) = 0, \quad (5.6)$$

iz čega lako zaključimo da energija vrpce ima ekstrem kada su Fermijeve energije prije i poslije rekonstrukcije jednake. Da bismo odredili Lagrangeov multiplikator  $\mu$  uvrštavamo uvjet  $\varepsilon_F = \varepsilon_{F0}$  u jednadžbu očuvanja broja elektrona (5.2). Međutim, iz fizikalne perspektive, nama je inicijalna Fermijeva energija zadana pa ćemo stoga jednadžbu  $\Delta N(\varepsilon_{F0}, \varepsilon_{F0}) = 0$  tretirati kao jednadžbu za optimalni impuls vala gustoće naboja  $Q_m$ . Rješavanje te jednadžbe ostavljamo za sljedeće potpoglavlje, a sada se pitamo pod kojim uvjetima  $\varepsilon_F = \varepsilon_{F0}$  predstavlja minimum energije. S obzirom da se radi o optimizaciji s ograničenjem, umjesto običnog Hessiana, razmatramo tzv. granični Hessian (eng. bordered Hessian)

$$H_B(\varepsilon_F, \varepsilon_{F0}, \mu) = \begin{bmatrix} 0 & \partial_0 \Delta N & \partial_1 \Delta N \\ \partial_0 \Delta N & \partial_{00} L & \partial_0 \partial_1 L \\ \partial_1 \Delta N & \partial_1 \partial_0 L & \partial_1 L \end{bmatrix}, \quad (5.7)$$

gdje privremeno koristimo oznake  $\partial_0 = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{F0}}$  i  $\partial_1 = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_F}$ . Ekstrem energije će biti minimum ukoliko je determinanta graničnog Hessiana negativna. Računanjem derivacija, te uvrštavanjem  $\varepsilon_F = \varepsilon_{F0} = \mu$  lako se dobiva

$$\det H_B(\mu, \mu, \mu) = g(\mu)g_0(\mu)[g(\mu) - g_0(\mu)], \quad (5.8)$$

što znači da ćemo minimum imati pod uvjetom da je rekonstruirana gustoća stanja na Fermijevoj energiji manja od početne

$$g(\varepsilon_F) < g_0(\varepsilon_F). \quad (5.9)$$

## 5.2 Optimalni impuls vala gustoće naboja

U prošlom smo potpoglavlju utvrdili da će smanjenje energije biti najveće u slučaju kada su Fermijeve energije prije i poslije topološke rekonstrukcije jednake ( $\varepsilon_F = \varepsilon_{F0}$ ). To u praksi znači da je, ukoliko imamo zadanu paraboličku vrpcu popunjenu do neke Fermijeve energije  $\varepsilon_{F0}$  i parametar uređenja  $\Delta$ , jednadžba  $\Delta N = 0$  zapravo jednadžba za optimalni impuls CDW-a  $\mathbf{Q}_m$  kojeg biramo tako da Fermijeva energija ostane ista, a da se pritom broj elektrona ne promjeni. Broj elektrona u inicijalnoj vrpici možemo napisati preko volumena Fermijevog mora<sup>16</sup> u Brillouinovoj zoni na sljedeći način

$$N_0 = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} p_{F0}^d, \quad (5.10)$$

gdje smo opet iskoristili formulu za volumen d-dimenzionalne kugle radijusa  $r$

$$V_d(r) = \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} r^d. \quad (5.11)$$

Korištenjem veze između Fermijevog impulsa i energije  $p_{F0} = \sqrt{2m\varepsilon_{F0}}$  i uvođenjem bezdimenzionalne Fermijeve energije  $e_{F0} = \frac{2m\varepsilon_{F0}}{(Q/2)^2}$  skaliranjem iz (3.8) dobivamo

$$N_0 = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^d \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} e_{F0}^d. \quad (5.12)$$

S druge strane, broj elektrona poslije rekonstrukcije možemo zapisati koristeći, kao i prije, činjenicu da je Fermijevo more rotacijsko tijelo u Brillouinovoj zoni (zbog simetrije disperzije s obzirom na rotacije oko osi  $x$ )

$$N = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \left(\frac{Q}{2}\right)^d \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2} + 1\right)} \left( \int_{x_{\bar{c}}(e_F)}^1 r_-^{d-1}(x, e_F) dx + \int_0^{x_c^+(e_F)} r_+^{d-1}(x, e_F) dx \right), \quad (5.13)$$

<sup>16</sup>U slučaju izotropne paraboličke disperzije Fermijevo more je kugla.

gdje  $r$  kao i prije dobivamo invertiranjem disperzije

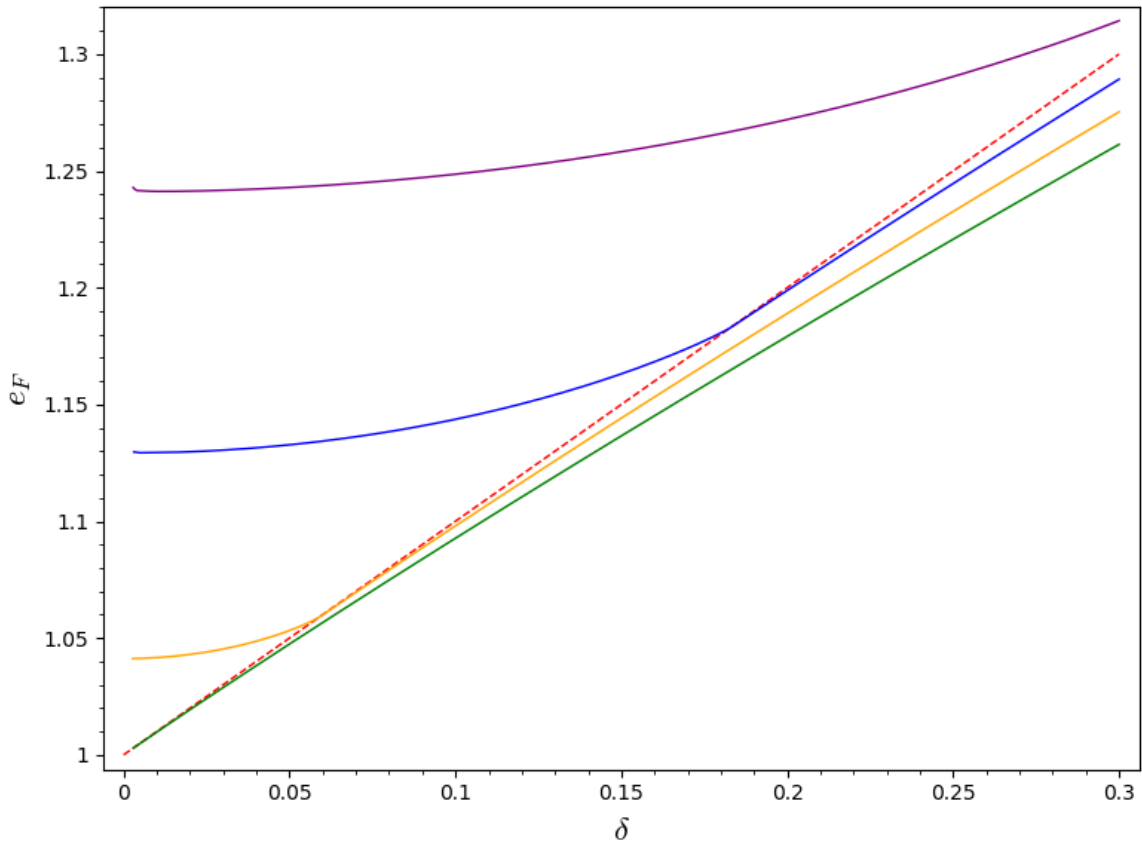
$$r_{\pm}(x, e) = \sqrt{e - 1 - x^2 \mp \sqrt{4x^2 + \delta^2}}. \quad (5.14)$$

Izjednačavanjem (5.13) i (5.12) u ekstremu ( $\varepsilon_F = \varepsilon_{F0}$ ) i sređivanjem dobivamo jednadžbu za  $e_F$

$$\int_{x_{\bar{e}}(e_F)}^1 (e_F - 1 - x^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2})^{\frac{d-1}{2}} dx + \int_0^{x_{\bar{e}}^+(e_F)} (e_F - 1 - x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2})^{\frac{d-1}{2}} dx =$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{d-1}{d} \cdot \frac{\Gamma(\frac{d-1}{2})}{\Gamma(\frac{d}{2})} \cdot e_F^{\frac{d}{2}}. \quad (5.15)$$

Jednadžbu (5.15) ne možemo riješiti analitički, a pokazalo se također zahtjevnim



Slika 5.1: Prikaz rješenja jednadžbe (5.15) u ovisnosti o parametru uređenja  $\delta$  za razne dimenzionalnosti:  $d = 2$  (zelenom bojom),  $d = 2.05$  (narančastom bojom),  $d = 2.1$  (plavom bojom) i  $d = 2.15$  (ljubičastom bojom). Također, crtkanom crvenom linijom prikazan je pravac  $e_F = 1 + \delta$  koji predstavlja dno gornje vrpce.

provesti račun smetnje pa stoga problem rješavamo numeričkim metodama<sup>17</sup>. Rezultati numeričkog izračuna prikazani su na slici 5.1, gdje su prikazane ovisnosti bezdimenzionalne Fermijeve energije  $e_F = e_{F0}$  o bezdimenzionalnom parametru uređenja  $\delta$  za razne dimenzije sustava. Vidimo da jedino za  $d = 2$  Fermijeva energija nikada ne upada u gornju vrpce već se čitavo vrijeme nalazi "malo" ispod njenog "praga", odnosno vrijednosti  $1 + \delta$ . Zapravo, autori u [6] su pokazali da odstupanje  $(1 + \delta) - e_F$  u vodećem redu računa smetnje raste s povećanjem  $\delta$  kao

$$(1 + \delta) - e_F \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \delta^{3/2}. \quad (5.16)$$

S druge strane, za  $d > 2$  bezdimenzionalna Fermijeva energija počinje na nekoj konstantnoj vrijednosti iznad  $1 + \delta$  te se nalazi iznad dna gornje vrpce. Povećanjem  $\delta$  ona se približava dnu gornje vrpce te na nekoj vrijednosti parametra uređenja izlazi iz nje te nakon toga ima slično ponašanje kao i Fermijeva energija u dvije dimenzije. Evidentno je sa slike 5.1 da početna vrijednost  $e_F(\delta = 0)$  raste s povećanjem dimenzionalnosti. Ta je ovisnost prikazana na slici 5.2.

Ako se prisjetimo definicije bezdimenzionalne energije (3.8) vidimo da nam, za fiksno popunjenje incijalne vrpce  $\varepsilon_{F0}$ , rješenje  $e_{F0}$  daje optimalni impuls CDW-a prema formuli

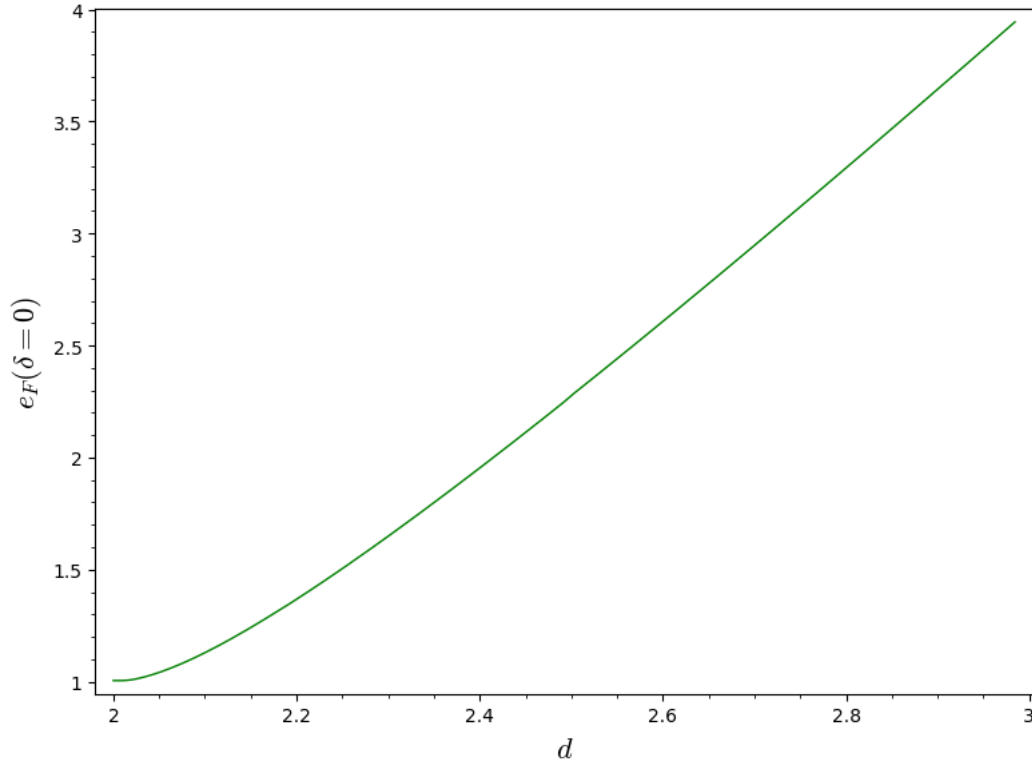
$$\frac{Q_m}{p_{F0}} = \frac{2}{\sqrt{e_{F0}}}, \quad (5.17)$$

čija je ovisnost o  $\delta$  prikazana na slici 5.3 za različite dimenzije u rasponu od  $d = 2$  do  $d = 3$ . Vidimo da jedino za  $d = 2$  imamo značajnu varijaciju impulsa u rasponu  $\delta = 0 - 0.3$ . U tom slučaju, impuls pada od vrijednosti  $Q = 2p_{F0}$  za  $\delta = 0$  (ne-rekonstruirane Fermijeve plohe se dodiruju) prema sve manjim vrijednostima (sve veći preklop Fermijevih ploha). Razvoj u red po  $\delta$  možemo dobiti koristeći formulu (5.16) preuzetu iz [6] i koristeći poznati razvoj  $1/\sqrt{1+x} \simeq 1 - x/2 + \frac{3}{8}x^2 + O(x^3)$ :

$$\frac{Q_m}{2p_{F0}} \approx 1 - \frac{\delta}{2} + \frac{1}{\pi} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{3/2} + \frac{3}{8}\delta^2 + O(\delta^{5/2}). \quad (5.18)$$

Graf ove aproksimacije prikazan je na slici 5.3 narančastom crtkanom linijom koja se prilično dobro slaže s numeričkim izračunom za dovoljno mali  $\delta$ .

<sup>17</sup>Zbog ne-analitičkog ponašanja lijeve strane jednadžbe (5.15) u točki  $e = 1 + \delta$ , Newtonov algoritam ponekad daje besmislene rezultate, stoga smo pri rješavanju implementirali jednu varijantu "binary search" algoritma.



Slika 5.2: Prikaz ovisnosti bezdimenzionalne Fermijeve energije za  $\delta = 0$  o dimenziji  $d$ .

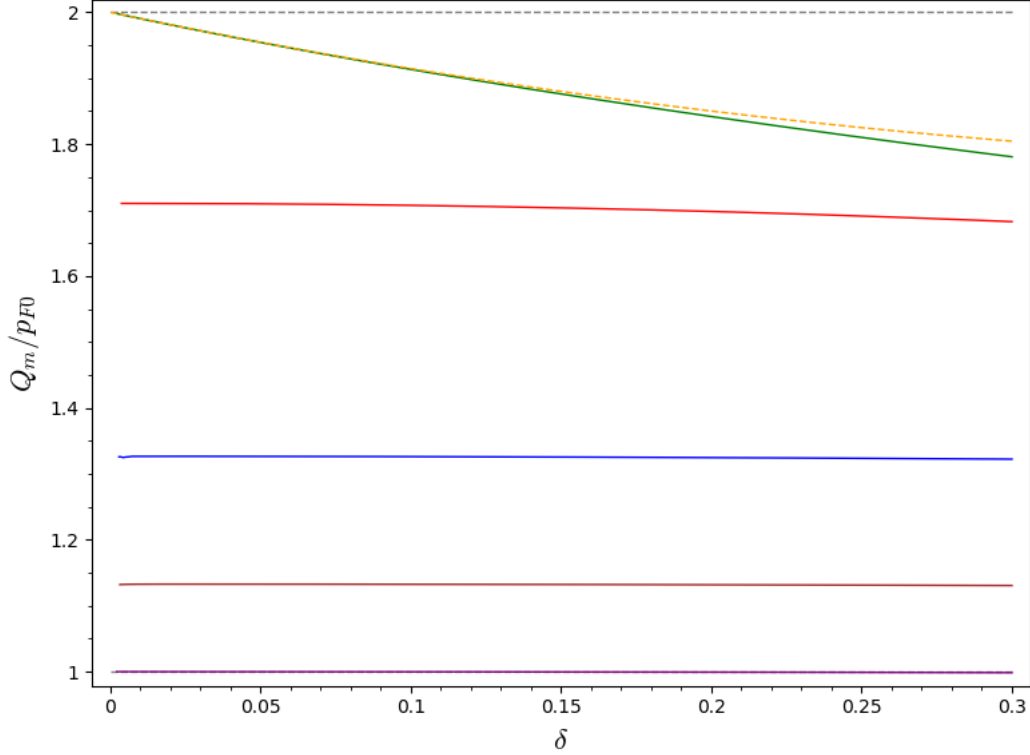
Kako se dimenzija povećava, varijacija optimalnog impulsa  $Q_m$  u ovisnosti o  $\delta$  je sve manja (u promatranom rasponu  $\delta$ ) te se može bez značajne greške aproksimirati konstantom. Također, vidimo da porastom dimenzije preklap Fermijevih ploha postaje sve veći. Zanimljivo je da za trodimenzionalni slučaj  $Q_m$  skoro egzaktno poprima vrijednost  $p_{F0}$  što znači da u tom slučaju periodička modulacija dovodi originalne Fermijeve plohe u "polu-preklap" (rub Fermijeve plohe prolazi kroz centar Fermijevog mora u susjednoj Brillouinovoj zoni) za razliku od 2D slučaja gdje ih dovodi u "dodir" (za  $\delta \ll 1$ ).

### 5.2.1 Provjera uvjeta minimuma

Prilikom optimizacije energije vrpce utvrdili smo da će energija imati ekstrem kada su Fermijeve energije prije i poslije rekonstrukcije jednake ( $\varepsilon_F = \varepsilon_{FO}$ ). Također, ispitivanjem graničnog Hessiana utvrdili smo da je uvjet da je pronađeni ekstrem zapravo minimum to da je početna gustoća stanja na Fermijevoj energiji veća od gustoće stanja na (istoj) Fermijevoj energiji nakon rekonstrukcije:

$$g_0(\varepsilon_F) > g(\varepsilon_F). \quad (5.19)$$





Slika 5.3: Ovisnost impulsa vala gustoće naboja  $Q_m$  o bezdimenzionalnom parametru uredjenja  $\delta$  za dimenzije  $d = 2$  (zelenom bojom),  $d = 2.2$  (crvenom bojom),  $d = 2.5$  (plavom bojom),  $d = 2.75$  (smeđom bojom) i  $d = 3$  (ljubičastom bojom). Narančastom crtkanom linijom prikazan je rezultat dobiven računom smetnje [6] i razvojem u red (5.18) za dvodimenzionalni slučaj.

Da bismo mogli provjeriti ovaj uvjet, potreban nam je izraz za početnu gustoću stanja. Njega možemo dobiti jednostavnim deriviranjem volumena Fermijevog mora ( $d$ -dimenzionalne sfere u impulsnom prostoru)

$$g_0^{(d)}(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \frac{d}{d\varepsilon} \left( \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} p^d \right). \quad (5.20)$$

Uvrštavanjem  $p = \sqrt{2m\varepsilon}$  i uvođenjem bezdimenzionalne energije iz jednadžbe (3.8) dobiva se

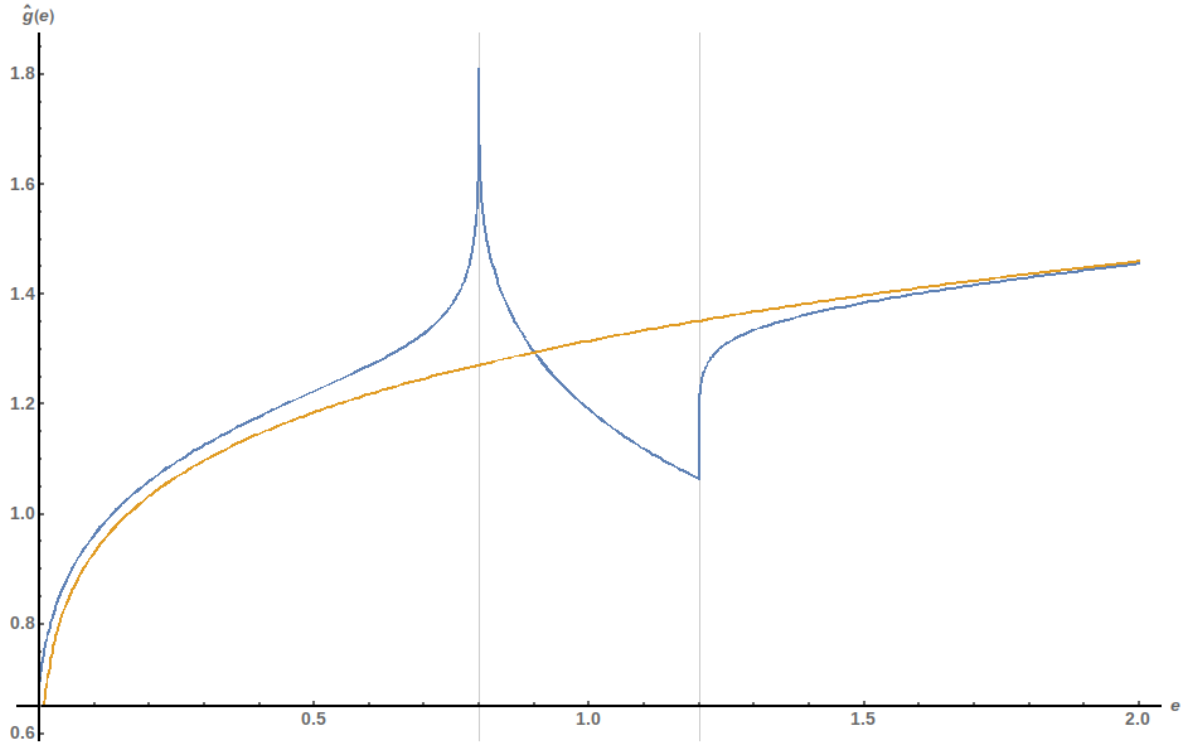
$$g_0^{(d)}(e) = \frac{4m}{(2\pi\hbar)^d} \left( \frac{Q}{2} \right)^{d-2} \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} e^{\frac{d}{2}-1}. \quad (5.21)$$

Korištenjem prije izvedenog izraza za gustoću stanja rekonstruirane vrpce (4.49) i sređivanjem dobivamo uvjet minimuma kojeg možemo podvrgnuti numeričkoj provjeri

$$\int_{x_{\bar{e}}^-(e_F)}^1 \left( e_F - 1 - x^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2} \right)^{\frac{d-3}{2}} dx + \int_0^{x_c^+(e_F)} \left( e_F - 1 - x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2} \right)^{\frac{d-3}{2}} dx <$$

$$< \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)}{\Gamma(d/2)} \cdot e_F^{\frac{d}{2}-1}. \quad (5.22)$$

Numeričkim računanjem integrala na lijevoj strani za bezdimenzionalne Fermijeve energije dobivene u prethodnom potpoglavlju lako se utvrdi da je ovaj uvjet zadovoljen za sve fizikalno relevantne parametre uređenja  $\delta$  i za sve dimenzije između  $d = 2$  i  $d = 3$ . Primjera radi, na slici 5.4 prikazan je graf lijeve i desne strane uvjeta (5.22)



Slika 5.4: Prikaz lijeve (plavom bojom) i desne (narančastom bojom) strane uvjeta (5.22) za  $d = 2.3$  i  $\delta = 0.2$ .

za  $d = 2.3$ . Jasno je da je uvjet (5.22) zadovoljen jer se za sve fizikalno relevantne vrijednosti  $\delta$  bezdimenzionalna Fermijeva energija  $e_F$  nalazi iznad gornje Lifshitzove točke  $1 + \delta$  gdje je lijeva strana očito manja od desne<sup>18</sup>.

<sup>18</sup>Desna strana se asimptotski približava lijevoj odozdo, odnosno  $\lim_{e \rightarrow \infty} \frac{g(e)}{g_0(e)} = 1^-$ .

### 5.3 Račun energije vrpce

U dosadašnjim razmatranjima bavili smo se određivanjem parametara (Fermijeva energija, impuls vala gustoće naboja) koji će dovesti do najvećeg smanjenja energije elektronske vrpce. Sada, kada smo odredili te parametre i njihovu ovisnost o parametru uređenja, određujemo točan iznos smanjenja<sup>19</sup> energije

$$\Delta E = E - E_0 \quad (5.23)$$

uzrokovan topološkom rekonstrukcijom vrpce, gdje je  $E$  energija rekonstruirane, a  $E_0$  energija nerekonstruirane vrpce. Prvo nam treba izraz za ukupnu energiju početne (nerekonstruirane) vrpce  $E_0$  (za općenitu dimenziju sustava) koji ćemo dobiti integrirajući disperziju po Fermijevom moru<sup>20</sup>

$$E_0 = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \int_{\varepsilon(\mathbf{p}) < \varepsilon_F} \varepsilon_0(\mathbf{p}) d^d \mathbf{p} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \int_0^{p_F} \frac{d\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} p^{d-1} \cdot \frac{p^2}{2m} dp, \quad (5.24)$$

gdje smo opet iskoristili formulu za volumen sferne ljuske u  $d$ -dimenzionalnom prostoru i disperziju slobodnoelektronske vrpce  $\varepsilon_0(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}$ . Integriranjem i sređivanjem dolazimo do izraza za energiju vrpce prije rekonstrukcije

$$E_0 = \frac{4}{(2\pi\hbar)^d} \cdot \frac{(2\pi m)^{\frac{d}{2}}}{(d+2)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \varepsilon_F^{\frac{d}{2}+1}. \quad (5.25)$$

S druge strane, energiju vrpce nakon rekonstrukcije trebamo rastaviti na doprinos gornje i donje vrpce

$$E = E^+ + E^- = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \left( \int_{\varepsilon_-(\mathbf{p}) < \varepsilon_F} \varepsilon_-(\mathbf{p}) d^d \mathbf{p} + \int_{\varepsilon_+(\mathbf{p}) < \varepsilon_F} \varepsilon_+(\mathbf{p}) d^d \mathbf{p} \right), \quad (5.26)$$

gdje integriramo po Fermijevom moru unutar Brillouinove zone. Opet koristeći činjenicu osne simetrije rekonstruirane disperzije integral po impulsu za donju vrpcu<sup>21</sup> možemo

<sup>19</sup> $\Delta E$  do kraja rada zovemo "smanjenje energije" iako se zapravo radi o negativnom inkrementu energije.

<sup>20</sup>U prethodnim potpoglavljima utvrdili smo da je smanjenje energije najveće kada je  $\varepsilon_F = \varepsilon_{F0}$  pa stoga u ostatku ovog rada koristimo oznaku  $\varepsilon_F$  i za jednu i za drugu.

<sup>21</sup>Doprinos gornje vrpce će biti formalno (ne i brojčano) isti, do na razliku u granicama x-integracije.

napisati kao

$$E^- = \frac{1}{2m} \left( \frac{Q}{2} \right)^{d+2} \cdot 2 \int_{x_c^-(e_F)}^1 dx \int_0^{r_F^{(-)}} dr \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} r^{d-2} e_-(x, r), \quad (5.27)$$

gdje smo opet uveli bezdimenzionalne varijable (3.8) te, u svrhu integracije po  $r$  (koji je definiran jednadžbom (5.14)), uveli formulu za volumen  $(d-1)$ -dimenzionalne sferne ljuske. Integracijom po  $r$  dobiva se izraz

$$E^- = \frac{1}{m} \left( \frac{Q}{2} \right)^{d+2} \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \left( \frac{e_F}{d-1} \int_{x_c^-}^1 dx \cdot (r_F^-)^{d-1} + \frac{2}{1-d^2} \int_{x_c^-}^1 dx \cdot (r_F^-)^{d+1} \right) \quad (5.28)$$

gdje smo izostavili ključan međukorak u kojem smo  $1 + x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2}$  napisali kao  $e_F - r_F^2$  te odvojili doprinose prema potenciji  $r_F$  koja se pojavljuje u njima. Dodavanjem doprinosa gornje vrpce dobivamo

$$E = \frac{1}{m} \left( \frac{Q}{2} \right)^{d+2} \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \frac{e_F}{d-1} \left( \int_{x_c^-}^1 dx \cdot (r_F^-)^{d-1} + \int_0^{x_c^+} dx \cdot (r_F^+)^{d-1} \right) + \frac{1}{m} \left( \frac{Q}{2} \right)^{d+2} \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \frac{2}{1-d^2} \left( \int_{x_c^-}^1 dx \cdot (r_F^-)^{d+1} + \int_0^{x_c^+} dx \cdot (r_F^+)^{d+1} \right), \quad (5.29)$$

gdje izraz u gornjem redu u zagradi prepoznamo kao lijevu stranu jednadžbe očuvanja elektrona (5.15) pa ga zamjenjujemo s desnom stranom (5.15). Oduzimanjem energije nerekonstruirane vrpce i algebarskim manipulacijama dolazimo do konačnog izraza za smanjenje energije vrpce

$$\Delta E = \frac{4}{(2\pi\hbar)^d} \cdot \frac{(2\pi m)^{\frac{d}{2}}}{(d+2)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \varepsilon_F^{\frac{d}{2}+1} \left( \frac{2}{d} - \frac{4(d+2)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}{\sqrt{\pi}(d^2-1)\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \frac{I(e_F, \delta, d)}{e_F^{d/2+1}} \right), \quad (5.30)$$

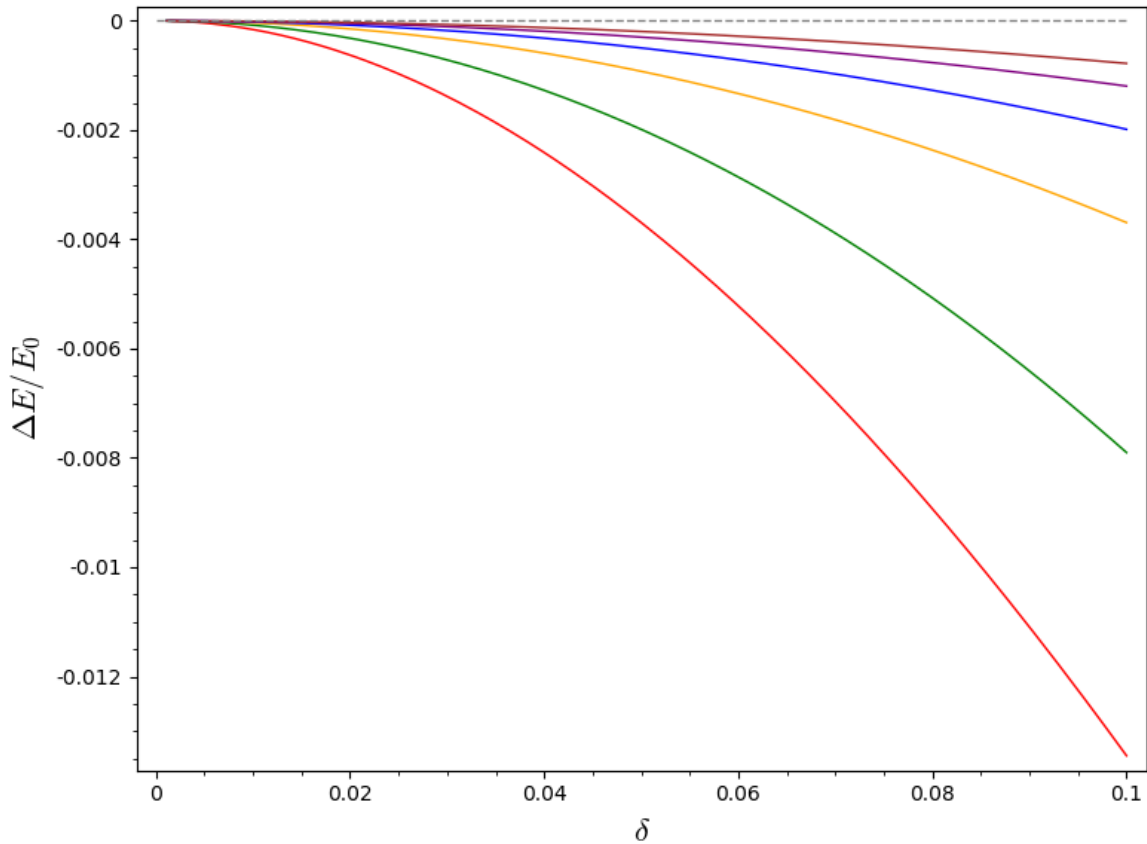
gdje smo radi preglednijeg zapisa uveli funkciju  $I(e_F, \delta, d)$  kao

$$I(e_F, \delta, d) = \int_{x_c^-}^1 dx (e_F - 1 - x^2 + \sqrt{4x^2 + \delta^2})^{\frac{d+1}{2}} + \int_0^{x_c^+} dx (e_F - 1 - x^2 - \sqrt{4x^2 + \delta^2})^{\frac{d+1}{2}}. \quad (5.31)$$

Predfaktor u (5.30) prepoznamo kao energiju početne vrpce pa stoga dijeljenjem s  $E_0$  dobivamo izraz za relativno smanjenje energije

$$\frac{\Delta E}{E_0} = \frac{2}{d} - \frac{4(d+2)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}{\sqrt{\pi}(d^2-1)\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \frac{I(e_F, \delta, d)}{e_F(\delta)^{d/2+1}} \quad (5.32)$$

koji računamo koristeći numeričke metode (za  $e_F(\delta)$  uvrštavamo rezultate dobivene numeričkim rješavanjem jednačbe (5.15)). Rezultati numeričkog proračuna prika-



Slika 5.5: Prikaz ovisnosti relativnog smanjenja energije  $\Delta E/E_0$  o bezdimenzionalnom parametru uređenja  $\delta$  za različite dimenzije sustava:  $d = 2$  (crvenom bojom),  $d = 2.2$  (zelenom bojom),  $d = 2.4$  (narančastom bojom),  $d = 2.6$  (plavom bojom),  $d = 2.8$  (ljubičastom bojom) i  $d = 3$  (smeđom bojom).

zani su na slici 5.5 gdje se vidi kako se smanjenje energije u ovisnosti o  $\delta$  ponaša kvalitativno isto za sve dimenzije između  $d = 2$  i  $d = 3$ . Također, za svaki pojedini  $\delta$  smanjenje energije se povećava kako se spuštamo od  $d = 3$  prema  $d = 2$ . Naš posljednji zadatak je da, poput autora u [6], odredimo u kojem režimu konstante elektron-fonon vezanja će smanjenje energije prikazano na slici 5.5 biti dovoljno da kompenzira povećanje elastične energije rešetke i time stabilizira CDW uređenje te odredimo ovisnost tog režima o dimenziji. Time se bavimo u sljedećem odjeljku.

### 5.3.1 Stabilizacija vala gustoće naboja

Stabilnost kondenzata ovisit će o preciznom balansu smanjenja energije (5.30) i elastičnog doprinosa rešetke, koji u aproksimaciji srednjeg polja (jednačba (3.3))

ima oblik

$$\Delta E_{el.} = \frac{\hbar\omega_Q}{2g^2} \Delta^2, \quad (5.33)$$

gdje je  $\hbar\omega_Q$  energija jednog fonona impulsa  $Q$  jednakog impulsu CDW-a, dok je  $g$  konstanta elektron-fonon vezanja. Množenjem s  $1 = \frac{E_0}{E_0}$  i  $1 = \frac{\varepsilon_F^2}{\varepsilon_F^2}$  elastični doprinos možemo napisati kao

$$\Delta E_{el} = E_0 \cdot \frac{\hbar\omega_Q}{E_0} \frac{\varepsilon_F^2}{2g^2} \left( \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \right)^2 = \frac{E_0}{\lambda} \left( \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \right)^2, \quad (5.34)$$

gdje smo uveli bezdimenzionalnu konstantu vezanja  $\lambda = \frac{E_0}{\hbar\omega_Q} \frac{2g^2}{\varepsilon_F^2}$ . Nadalje, relativno smanjenje energije elektronske vrpce množimo s  $1 = \frac{e_F^2}{e_F^2}$  pa dobivamo

$$\frac{\Delta E}{E_0} = \frac{1}{e_F^2} \left( \frac{2e_F^2}{d} - \frac{4(d+2)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}{\sqrt{\pi}(d^2-1)\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \frac{I(e_F(\delta), \delta, d)}{e_F(\delta)^{d/2-1}} \right) \quad (5.35)$$

Izraz u zagradi možemo, s odličnim slaganjem<sup>22</sup> u relevantnom režimu parametra uređenja, fenomenološki opisati kubičnim polinomom u  $\delta$  sljedećeg oblika

$$\left( \frac{2e_F^2}{d} - \frac{4(d+2)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}{\sqrt{\pi}(d^2-1)\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \frac{I(e_F(\delta), \delta, d)}{e_F(\delta)^{d/2-1}} \right) \simeq -\frac{1}{\lambda_c(d)}\delta^2 + b(d)\delta^3, \quad (5.36)$$

gdje koeficijente  $\lambda_c$  i  $b$  (ovisne o dimenziji) pronalazimo numerički<sup>23</sup>, a sam oblik polinoma na desnoj strani postuliramo po uzoru na razvoj energije u [6]. Unutar ove aproksimacije ukupnu energiju elektronske vrpce i rešetke sada možemo napisati kao

$$\frac{\Delta E_{tot}}{E_0} = \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_c} \right) \left( \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \right)^2 + be_F \left( \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \right)^3, \quad (5.37)$$

gdje smo iskoristili relaciju

$$\frac{\delta}{e_F} = \frac{\Delta}{\varepsilon_F}, \quad (5.38)$$

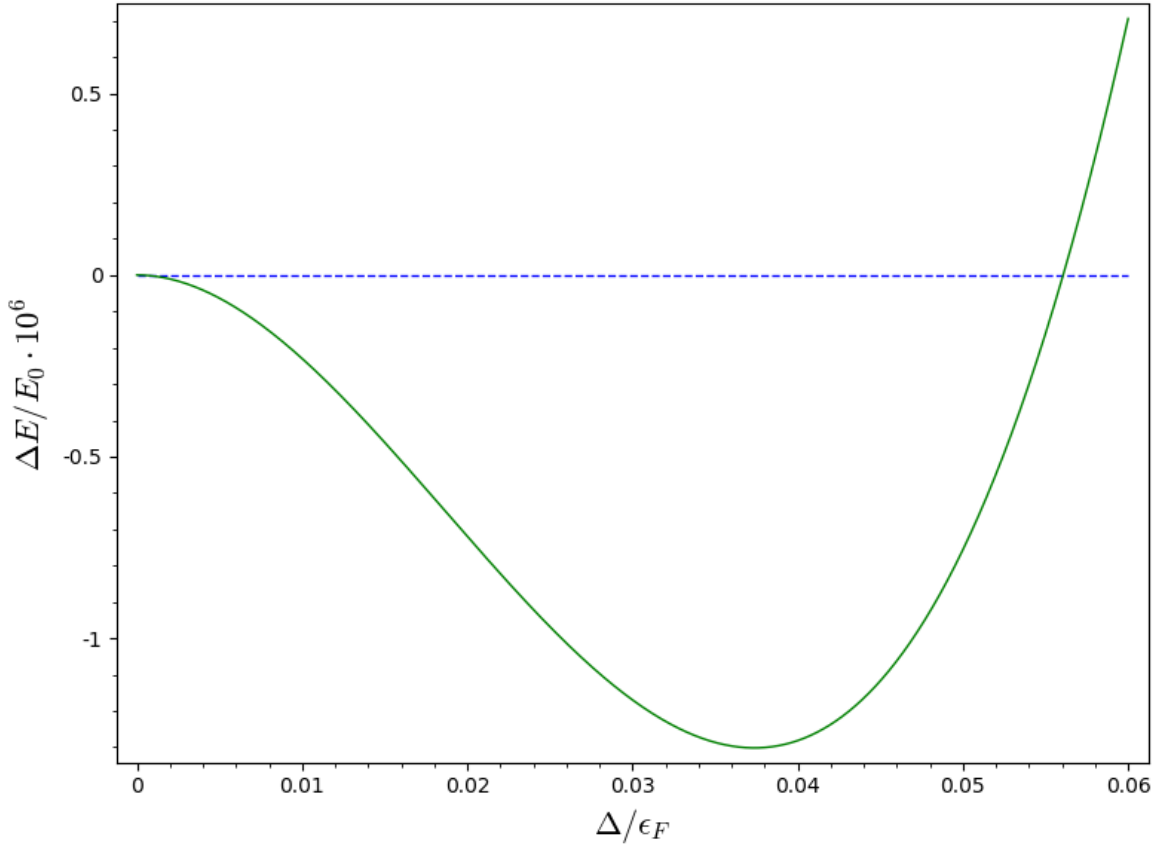
koja slijedi iz definicije bezdimenzionalnih varijabli (3.8). Bezdimenzionalna Fermijeva energija koja se pojavljuje ispred kubičnog člana ovisi o  $\delta$ , međutim za dovoljno mali  $\delta$  tu ovisnost možemo zanemariti tako da imamo

$$\frac{\Delta E_{tot}}{E_0} = \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_c} \right) \left( \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \right)^2 + be_F^{(0)} \left( \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \right)^3, \quad (5.39)$$

<sup>22</sup>Za  $d = 2.3$ , srednje kvadratno odstupanje je  $\sim 10^{-5}$ .

<sup>23</sup>Koristimo funkciju find-fit() u programskom paketu Sage [23].

gdje smo uveli  $e_F^{(0)} = \lim_{\delta \rightarrow 0} e_F(\delta)$ . Jasno je iz (5.39) da će val gustoće naboja biti moguće stabilizirati samo u slučaju kada je bezdimenzionalna konstanta  $\lambda$  vezanja veća od kritične vrijednosti  $\lambda_c$  koja će ovisiti o dimenziji  $d$ . U tom slučaju, kvadratični član je negativan pa je  $\Delta E_{tot}$  negativan za mali  $\Delta/\varepsilon_F$ , dok za veće vrijednosti  $\Delta/\varepsilon_F$  kubični član dominira te  $\Delta E_{tot}$  postaje pozitivan. Stoga,  $\Delta E_{tot}$  nužno posjeduje minimum na konačnoj vrijednosti  $\Delta_m/\varepsilon_F$  (Slika 5.6). Taj  $\Delta_m$  predstavlja

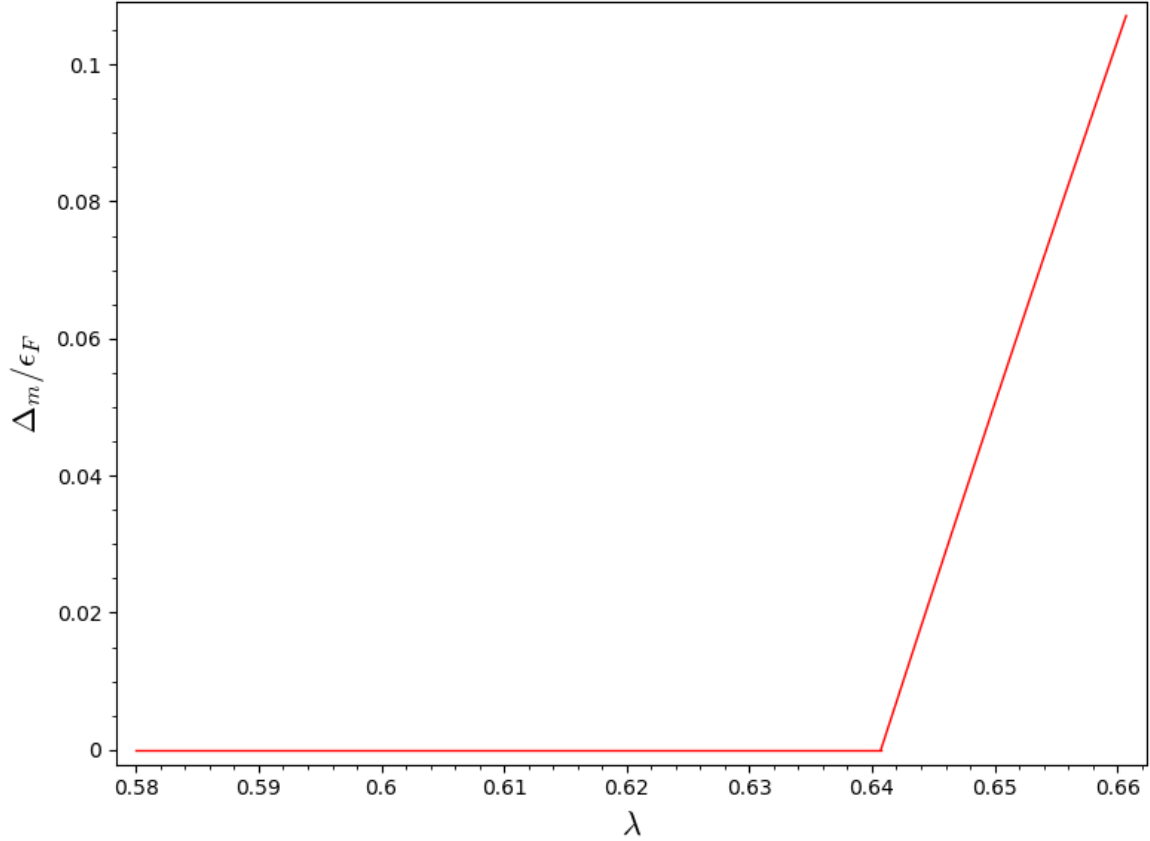


Slika 5.6: Prikaz ovisnosti ukupne energije  $\Delta E_{tot}/E_0$  o bezdimenzionalnom parametru uređenja  $\Delta/\varepsilon_F$  za  $d = 2.4$  i  $\lambda$  malo iznad  $\lambda_c \approx 0.707$ . Jasno je vidljiv minimum na konačnoj vrijednosti  $\Delta_m/\varepsilon_F \approx 0.037$ . Promjena energije uzrokovana topološkom rekonstrukcijom vrpce iznosi  $\Delta E_{tot}^m/E_0 \approx -1.35 \times 10^{-6}$ .

upravo ravnotežnu vrijednost parametra uređenja. Deriviranjem izraza (5.39) po  $\Delta/\varepsilon_F$  i izjednačavanjem s nulom dobivamo izraz za  $\Delta_m/\varepsilon_F$

$$\frac{\Delta_m}{\varepsilon_F} \simeq \begin{cases} 0 & \lambda < \lambda_c \\ \frac{2}{3be_F^{(0)}} \left( \frac{1}{\lambda_c} - \frac{1}{\lambda} \right) & \lambda \geq \lambda_c \end{cases} \quad (5.40)$$

čija je ovisnost o konstanti vezanja  $\lambda$  prikazana na slici 5.7. Na slici se jasno vidi da kada konstanta vezanja premaši kritičnu vrijednost  $\lambda_c(d)$  osnovno stanje sustava



Slika 5.7: Prikaz ovisnosti optimalnog parametra uređenja  $\Delta_m$  normiranog na Fermijevu energiju  $\varepsilon_F$  za  $d = 2.1$ . Val gustoće naboja se ne može stabilizirati ako je konstanta vezanja  $\lambda$  manja od kritičnog iznosa  $\lambda_c \approx 0.640$  pa je  $\Delta_m$  u tom rasponu 0. Za  $\lambda > \lambda_c$  parametar uređenja je monotono rastuća funkcija od  $\lambda$ .

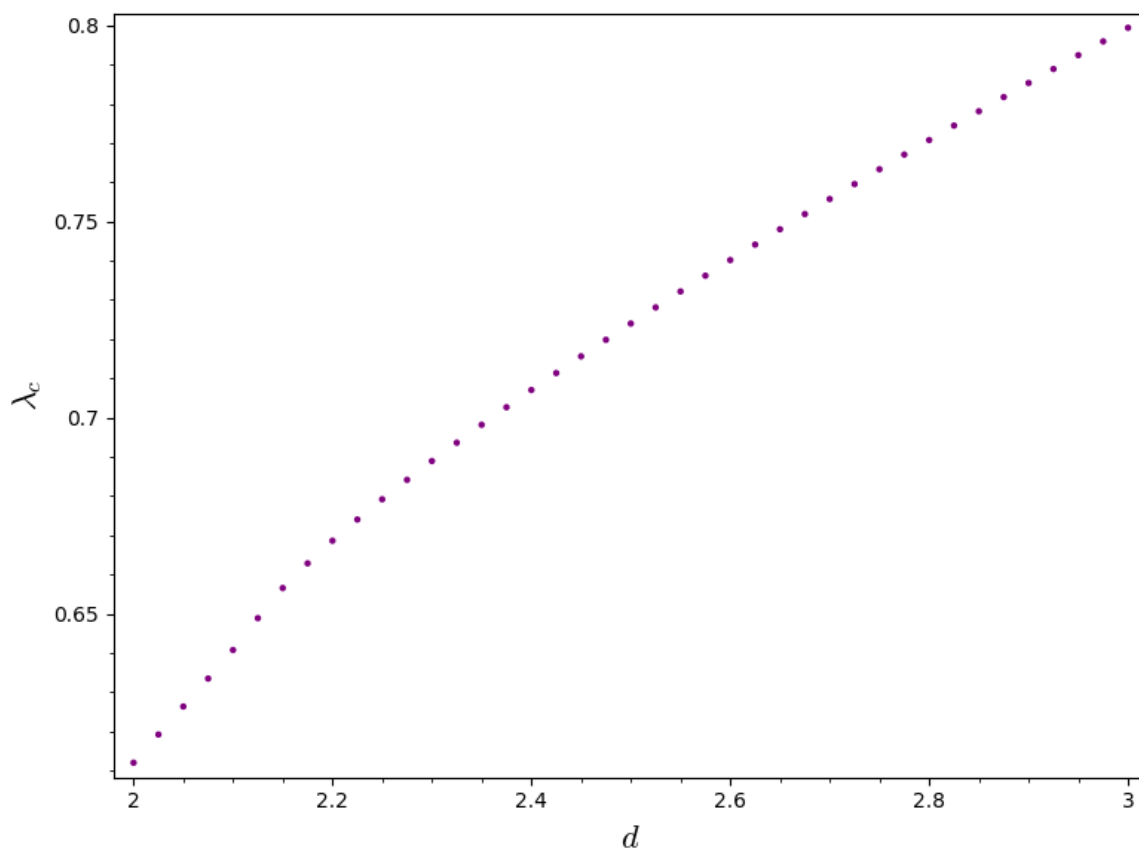
izgubi stabilnost te dolazi do kvantnog faznog prijelaza u novo stabilno osnovno stanje s konačnim parametrom uređenja  $\Delta_m \neq 0$  koji raste s jačinom elektron-fonon vezanja.

S obzirom da je za stabilizaciju zaslužno smanjenje energije vrpce te da to smanjenje potječe od premještanja popunjenih stanja na niže energije, očito će stabilizacija biti lakša ukoliko je gustoća stanja takva da se veći broj stanja premjesti u područje oko donje Lifshitzove točke  $e_L^- = 1 - \delta$  na račun većeg osiromašenja "pseudoprocjepa". Uvid u ovisnost gustoće stanja o dimenziji sustava na slici 4.7 intuitivno sugerira da će stabilizacija biti sve teža kako dimenzija raste. To potvrđuju i naši numerički izračuni. U tablici 5.1 dane su vrijednosti kritične konstante vezanja za neke dimenzije u rasponu  $d = 2$  i  $d = 3$ . Dobivena vrijednost za  $d = 2$  približno se slaže s vrijednošću  $\lambda_c(2) = (1 + 2/\pi)^{-1} \approx 0.61$  koju su dobili autori u [6] razvijajući ukupnu energiju po bezdimenzionalnom parametru uređenja  $\Delta/\varepsilon_F$ .



dim	$\lambda_c$
2	0.6119832
2.2	0.6685891
2.4	0.7070263
2.6	0.7401636
2.8	0.7707733
3	0.7994015

Tablica 5.1: Vrijednosti kritične konstante vezanja  $\lambda_c$  za različite dimenzije.



Slika 5.8: Prikaz ovisnosti kritične konstante vezanja  $\lambda_c$  o dimenziji.

Također, na slici 5.8 vidljiv je rast kritične konstante vezanja s dimenzijom što ukazuje na to da je potrebno sve jače vezanje elektronskog i fononskog podsustava da bi došlo do destabilizacije sustava, odnosno spontane formacije vala gustoće naboja.

## 6 Zaključak

U ovom smo radu prezentirali proširenje mehanizma topološke rekonstrukcije elektronske vrpce na sustave necjelobrojne dimenzionalnosti u rasponu  $d = 2$  do  $d = 3$ , gdje smo dimenziju sustava tretirali kao svojevrsnu mjeru anizotropije. Istaknuli smo glavne razlike u odnosu na nestabilnosti uzrokovane gniježđenjem Fermijeve plohe, odredili utjecaj na gustoću stanja te pokazali da će stabilizacija CDW uređenja ovim mehanizmom uistinu biti moguća za dovoljno veliku konstantu elektron-fonon vezanja. Također, otkrili smo da prilikom poopćavanja nismo morali mijenjati neke osnovne značajke mehanizma u odnosu na originalna razmatranja u [6]. Naime, pojava vala gustoće naboja ostavit će Fermijevu energiju netaknutom te će se opet u jednoelektronskom spektru pojaviti Lifshitzove točke među kojima će se otvoriti pseudo-procjep u kojem će gustoća stanja biti smanjena. To će uzrokovati smanjenje energije vrpce putem premještanja popunjenih stanja s viših na niže energije. Uračunavanjem fononskog doprinosa u ukupnoj energiji utvrdili smo da je smanjenje energije vrpce dovoljno da kompenzira povećanje elastične energije ukoliko je (bezdimezionalna) konstanta elektron-fonon vezanja  $\lambda$  veća od kritične vrijednosti  $\lambda_c$ . Kada  $\lambda$  dostigne  $\lambda_c$  ukupna energija dobije negativni minimum na konačnoj vrijednosti parametra uređenja  $\Delta_m$  te sustav kvantnim faznim prijelazom prelazi u novo osnovno stanje slomljene simetrije. Za veće vrijednosti parametra uređenja ukupna energija postaje pozitivna zahvaljujući stabilizirajućem kubičnom članu u razvoju ukupne energije po parametru uređenja  $\Delta$ , za razliku od konvencionalnog CDW uređenja putem Peierlsove nestabilnosti gdje ukupna energije ostaje negativna za sve vrijednosti  $\Delta$ . Porastom dimenzije područje među Lifshitzovim točkama postaje sve manje "osiromašeno" stanjima pa je stoga potrebno sve jače elektron-fonon vezanje da bi stabilizacija CDW uređenja bila moguća. To dovodi do rasta kritične konstante vezanja s dimenzijom od vrijednosti  $\lambda_c \simeq 0.61$  za  $d = 2$  sve do  $\lambda_c \simeq 0.8$  za  $d = 3$ .

U dvije dimenzije, optimalna vrijednost impulsa vala gustoće naboja  $Q_m$  bliska je dvostrukom Fermijevom impulsu  $2p_{F0}$  te blago varira porastom parametra uređenja. U tom će slučaju pojava CDW-a dovesti inicijalne Fermijeve plohe u dodir te ukloniti degeneraciju u točkama dodira što će topološki transformirati Fermijevu plohu iz zatvorenog u otvoreni tip. To je navelo autore u [6] da ovom mehanizmu stabilizacije nadjenu ime mehanizam "dodira" da bi ga razlikovali od konvencionalnog meha-

nizma gniježđenja (eng. nesting) gdje je impuls CDW fiksiran isključivo geometrijom Fermijeve plohe. Međutim, naši izračuni pokazuju da se optimalni impuls značajno smanjuje porastom dimenzije te za  $d = 3$  poprima vrijednost blisku  $p_{F0}$ . Takva periodičnost dovest će originalne Fermijeve plohe u "polu-preklop" u prikazu ponovljene zone te stoga postaje neprikladno govoriti o mehanizmu "dodira".

Na posljepku, određivanje minimuma ukupne energije pokazuje da ravnotežni parametar uređenja  $\Delta$  veoma naglo raste porastom  $\lambda - \lambda_c$  za sve  $d \in [2, 3]$  pa stoga rezultate dobivene u okviru aproksimacije srednjeg polja, koju smo koristili tijekom cijelog rada, možemo smatrati valjanima samo u blizini kvantne kritične točke  $\lambda = \lambda_c$ . Za veće vrijednosti  $\lambda - \lambda_c$ , parametar uređenja (procjep)  $\Delta$  brzo postaje reda veličine Fermijeve energije pa se pristup srednjeg polja raspada te ga je potrebno zamijeniti rigoroznijim tretmanom. Usprkos tome, razmatranja u [6] i ovom radu ukazuju na robustnost diskutiranog mehanizma u stabilizaciji valova gustoće naboja te moguću primjenjivost za objašnjenje pojave istih u materijalima čije su Fermijeve plohe relativno izotropne te se ne mogu ugniježditi.

## 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. Vol. 2, 6, (1960)
- [2] Peierls, R. E., On the theory of electric and thermal conductivity of metals. // Ann. Phys. Vol. 4, (1930), str. 121-148.
- [3] Thorne, R. E., Charge-density-wave conductors // Physics Today Vol. 49, 5, (1996).
- [4] Keimer, B.; Kivelson, S. A.; Norman, M.R.; Uchida, S.; Zaanen, J., From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides // Nature Vol. 518, 179, (2015).
- [5] Rahnejat, K. C.; Howard, C.A.; Shuttleworth, N.E.; Schofield, S. R., Iwaya, K.; Hirjibehedin, C. F.; Renner, C.; Aeppli, G.; Ellerby, M., Charge density waves in the graphene sheets of the superconductor  $CaC_6$  // Nat. Commun. Vol. 2, 558, (2011).
- [6] Kadigrobov, A.M.; Bjeliš, A.; Radić, D., Topological instability of two-dimensional conductors // Physical Review B, Vol. 97, 235439, (2018).
- [7] Kadigrobov, A.M.; Bjeliš, A.; Radić, D., Density wave and topological reconstruction of an isotropic two-dimensional electron band in external magnetic field // Physical Review B, Vol. 100, 115108, (2019).
- [8] He, X. F., Anisotropy and isotropy: A model of fraction-dimensional space // Solid-state communications Vol.75, 2, (1990).
- [9] Fröhlich, H., Electrons in lattice fields // Advances in Physics. Vol. 3, 11 (1954).
- [10] 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).
- [11] Gruner, G., Density waves in solids : CRC press, (2000).

- [12] Bardeen, J., Classical versus quantum models of charge-density-wave depinning in quasi-one-dimensional metals // Physical Review B Vol. 39, 6, (1989).
- [13] Landau, L.D.; Lifshitz E.M., Statistical physics, Part 1, Sec. 15, 24 : Pergamon Press, Oxford, (1980).
- [14] Vojta, T., Quantum phase transitions in electronic systems // arXiv:cond-mat/9910514, (1999).
- [15] Van Hove, L., The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of crystal // Phys. Rev. Vol. 89, 1189, (1953).
- [16] Lifshitz, I. M., Anomalies of Electron Characteristics of a Metal in the High Pressure Region // Soviet Physics JETP Vol. 11, 5, (1960).
- [17] Volovik, G. E., Topological Lifshitz transitions // arXiv:1606.08318, (2016).
- [18] Wilson, K. G.; Kogut, J., The renormalization group and the  $\varepsilon$  expansion // Physical reports Vol. 12, 2, (1974).
- [19] Stapleton, H. J.; Allen, J. P.; Flynn, C. P.; Stinson, D. G.; Kurtz S. R., Fractal form of proteins // Phys. Rev. Lett. Vol. 45, 1456, (1980).
- [20] Dhar, D., Lattices of effectively nonintegral dimensionality // Journal of Mathematical Physics Vol. 18, 577, (1977).
- [21] Stillinger, F. H., Axiomatic basis for spaces with noninteger dimension // Journal of Mathematical Physics Vol. 18, 1224, (1977).
- [22] Bronstein, I. N.; Semendjajev, K. A.; Musiol, G.; Mühlig, H., Matematički priručnik : Golden marketing - Tehnička knjiga, (2004).
- [23] Kumerički, K., Sage računalno okruženje za fizičare, <http://www.phy.pmf.unizg.hr/~kkumer/sage/SagePhyUniZg.pdf>
- [24] Khomskii, D. I., Basic aspects of the quantum theory of solids: Order and elementary excitations : Cambridge university press, (2010).