Elektronska gustoća stanja trodimenzionalnog polumetala s invertiranim vrpcama

Karla Lemac

23. siječnja 2022.

Sažetak

U ovome radu definirat ćemo polumetal koji ima invertirane vrpce te ćemo izračunati 3D gustoću stanja takvoga materijala. Također, računamo i elektronsku gustoću stanja za 3D slobodni elektronski plin radi usporedbe sa spomenutim materijalom.

1 Uvod

Topološki izolator (TI, eng. *topological insulator*), kao i obični izolator, ima energijski procijep koji razdvaja najvišu popunjenu elektronsku vrpcu od najniže prazne vrpce. Površina (u 2D rub) topološkog izolatora, nužno ima svojstvena stanja zaštićena simetrijom vremenske obrativosti. Proširenje na sustave bez procijepa dovelo je do identifikacija nove klase metala: topoloških polumetala (TSM, eng. *topological semimetals*) [1]. TSM-ovi su karakterizirani topološki stabilnom Fermijevom površinom koja potječe od preklapanja energetskih vrpca. Preklapanja vrpci takve vrste mogu se povezati s topološkim brojem, ovisnim o simetrijama metala.[2]

Različiti tipovi TSM-a mogu se razlikovati na temelju ključnih svojstava preklapanja vrpci, npr. kao njegova degeneracija, kodimenzija (tj. javlja li se degeneracija vrpce u točki ili na liniji) i disperzija u blizini prijelaza. Na temelju se mjesta preklopa, može napraviti još jedna moguća razlika o podrijetlu preklopa, to jest, da li je nametnuto simetrijom ili nastaje kao rezultat inverzije vrpce. [4]Takva su svojstva, u kombinaciji sa svojim topološkom karakteritikama, dovela do identifikacije sve većeg broja različitih TSM familija, koje uključuju Dirac i Weyl polumetale, polumetale nodalne linije, polumetale tipa I i tipa II i višestruke fermionske polumetale. [3]

Diracovi polumetali imaju nuldimenzionalni (0D) pojas preklapanja (Diracove nodalne točke (DNP,eng. *Dirac nodal point*) čije Fermijeve plohe sadrže izolirane točke u Brillounovoj zoni). Polumetali nodalne linije (NLSM, eng. *nodal line semimetals*) imaju jednodimenzionalni (1D) pojas preklapanja na Fermijevoj plohi sa zatvorenim Diracovim nodalnim linijama u Brillounovoj zoni.Nodalne su točke čvorne točke u kojima se vrpce križaju, a nodalne linije krivulje u kojima se vrpce križaju.
Proširujući ideju o polumetalima nodalne linije dolazimo do polumetala nodalne plohe (NSSM, eng. *nodal surface semimetals*) u kojem se vrpce dodiruju preko površine koja se proteže u Brillouinovu zonu. Ta je ploha ekvivalentna liniji u 2D slučaju.[2]

U ovom ćemo radu analizirati unutarvrpčana i među vrpčana svojstva jednočestičnog sustava opisanog dvovrpčanim Hamiltonijanom te napaviti usporedbu gustoće stanja polumetala s invetiranim vrpcama i gustoće stanja slobodnog elektronskog plina. Hamiltonijan sadrži tri slobodna parametra i opisuje razmaknutu (GSM, eng. *gapped semimetals*) i metalnu (NSSM) fazu.
Glavna je značajka energijskih vrpca invertirani oblik do neke kritične energije i parabolična dis-

perzija slobodnog elektrona izvan inverzije vrpca. Pretpostavljamo da je Fermijeva energija u sredini vrpčanog procjepa u GSM fazi, odnosno na dodiru vrpca u NSSM fazi.

Topološki su polumetali od velikog značaja zbog buduće primjene u kemijskoj katalizi, kvantnim računalima i spintronicima[4]. Ključno je pitanje, mogu li ekperimenti kao npr. elektronički transport i optička mjerenja razriješiti dva moguća osnovna stanja, ona s procijepom (GSM) i polumetalna (NSSM)? Time se rješava glavni problem koji je svojstven gotov svim topološkim materijalima. Njhove su intrinsične energetske skale, pri kojima bi se mogla uočiti topološka svojstva, jako male, nekoliko mili elektron Volti. Upravo tu leži eksperimentalni izazov razlučivanja dvaju mogućih osnovnih stanja.[5]

2 Gustoća stanja slobodnog elektronskog plina

Najmanji volumen zauzet s jednim stanjem je

$$\nu = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

te je recipročni volumen sfere sa N^{3d} stanja jest $\nu_N = \frac{4}{3}\pi k^3$, gdje je valni broj k radijus 3D sfere, a V volumen realne kristalne rešetke. Broj stanja dobiva se kao omjer

$$N^{3d} = \frac{\nu_N}{\nu} = \frac{V}{6\pi^2}k^3.$$

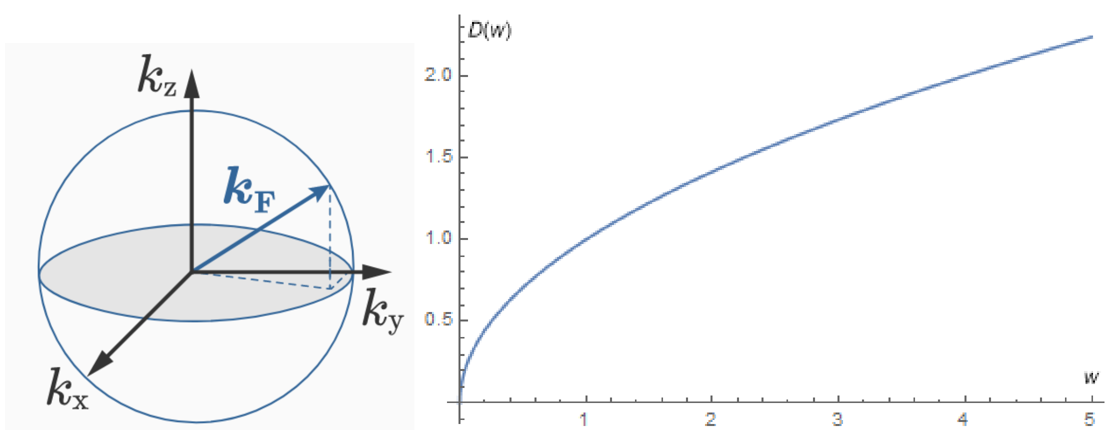
Uzimajući u obzir i spin elektrona, gornju relaciju množimo sa 2 te valni broj izražavamo preko kvadratne disperzije $\omega(k) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$. Broj stanja tada možemo zapisati kao funkciju energije ω

$$N^{3d} = \frac{V}{3\pi^2}(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}\omega^{3/2}.$$

Slijedi da je gustoća stanja po jediničnom volumenu [6]

$$D(\omega) = \frac{1}{3\pi^2}(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}\sqrt{\omega}$$

prikazana je grafički na Slici 1. U trećem i četvrtom poglavlju, računat ćemo gustoću stanja polumetala s invertiranim vrpcama.



Slika 1: S lijeve strane prikazana je Fermijeva ploha u recipročnom prostoru sa Fermijevim valnim vektorom kao radijusom, dok je s desne strane prikazana gustoća stanja za 3D slobodni elektronski plin.

3 Dvovrpčani Hamiltonijan

Definirat ćemo kontinuum 2×2 izotropnu matricu Hamiltonijana koja opisuje opću formu GSM i NSSM faze. Hamiltonijan je

$$\hat{H} = (A - Bk^2)\sigma_z + C\sigma_x \tag{1}$$

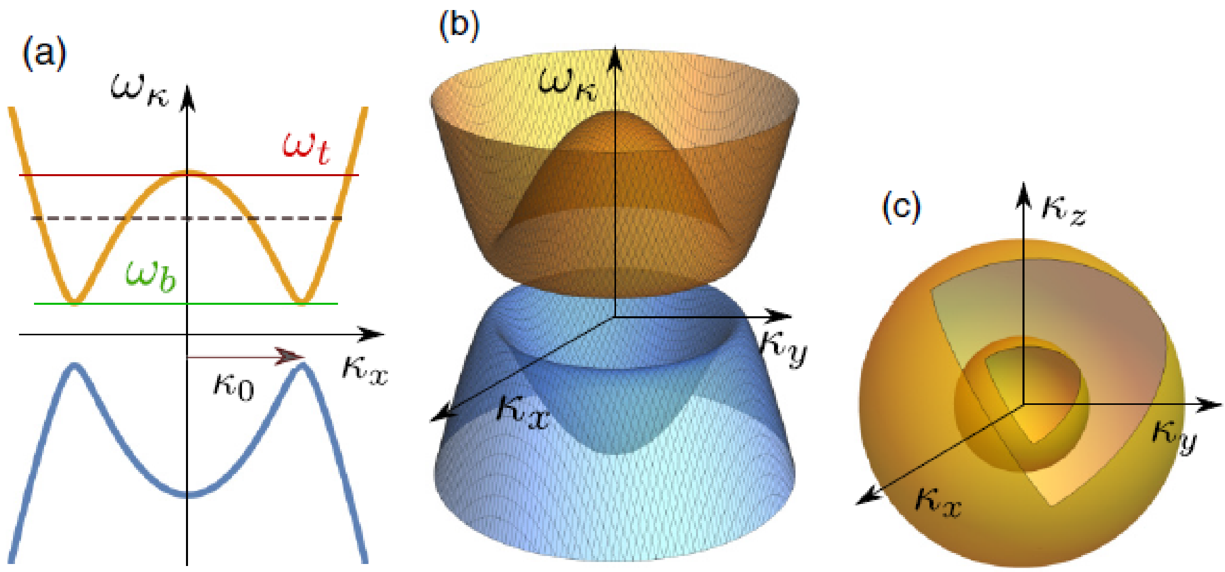
gdje su σ_x i σ_z Paulijeve matrice, a A i C pozitivne konstante koje predstavljaju parametare procijepa. Upravo $A - Bk^2$ je dio koji opisuje invertiranu vrpcu. Ovo je najjednostavnija izotropna forma nodalne plohe gdje je k^2 kvadrat ukupnog Blochovog valnog vektora. Parametar B možemo zapisati i u formi $B = \hbar^2/(2m^*)$. Hamiltonijan (1) je, obzirom da je realna matrica, invarijantan na vremensku obrativost.
Dijagonalizacija je ovog Hamiltonijana izravna i daje nam elektron-šupljina simetrične svojstvene vrijednosti

$$\epsilon_{\mathbf{k}}{}^{c,v} = \pm\sqrt{(A - Bk^2)^2 + C^2}. \tag{2}$$

Indeks c nam označava vodljivu vrpcu (plus predznak), a v vodljivu vrpcu (minus predznak).
Radi poopćenja (1), skalirat ćemo svojstvene vrijednosti na parametar procijepa A i uvesti bezdimenzionalne veličine. Bezdiomenzionalni procijep $\Delta = C/A$ i bezdiomenzionalni valni vektor $\kappa^2 = k^2 B/A$. Slijedi da svojstvene vrijednosti 2 dobivaju jednostavniju formu

$$\omega_\kappa = \pm\sqrt{(1 - \kappa^2)^2 + \Delta^2} \tag{3}$$

uz definiciju $\omega_\kappa = \epsilon_{\mathbf{k}}{}^{c,v}/A$.



Slika 2: (a) Valentne vrpce iz relacije (3) za GSM fazu u 1D. Invertirane vodljive vrpce (narančasto) u rasponu su energija od ω_b (zeleno) do ω_t (crveno). Crtkana linija označava Fermijevu energiju ω_F. U NSSM fazi, vrpce se dodiruju na površini kruga radijusa κ_0, dok u GSM fazi κ_0 je pozicija minimuma (maksimuma) vodljive (valentne) vrpce. (b) Analogne valentne vrpce u 2D slučaju. (c) Fermijeve plohe u 3D sustavu u slučaju partcijalno popunjenih vodljivih vrpca sa Fermijevom energijom u rasponu od $\omega_b < \omega_F < \omega_t$.[5]

Disperzije dane jednadžbom (3) prikazane su na Slici 1. Vrpce za 1D slučaj $\mathbf{k} = (k_x, 0, 0)$ zajedno sa 2D slučajem i Fermijevom plohom u 3D. Visina invertirane vrpce opisana je parametrom A, dok C određuje minimum separacije vrpci. Ovo nam razlučuje dvije faze, GSM i NSSM, gdje za GSM imamo $\Delta > 0$, a za NSSM $\Delta = 0$. U trodimenzionalnom NSSM slučaju dvije se vrpce dodiruju duž sferične plohe radijusa $\kappa_0 = 1$. Sfera u 2D postaje kružnica, a u 1D slučaju $2\kappa_0$ definira udaljenost između dvije točke u kojima se vrpce dodiruju.

Ako je vrijednost Fermijeve energije ω_F unutar granica $\omega_b < \omega_F < \omega_t$, tada Fermijevu površinu čine dvije koncentrične sfere u 3D, odnosno dvije koncentrične kružnice u 2D. Sa

$$\omega_b = \Delta, \omega_t = \sqrt{1+\Delta^2} \tag{4}$$

odredili smo elergije koje pripadaju dnu (b) i vrhu (t) invertirane vrpce prikazane na Slici 2.

4 Gustoća stanja

4.1 Izvod gustoće stanja preko Diracove delta funkcije

U ovome ćemo poglavlju izvesti 3D gustoću stanja (DOS, eng. *density of states*) po jedinici volumena za disperziju (2).
Prema definiciji, DOS po jedinici volumena je

$$N(\varepsilon) = \frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \tag{5}$$

Slijedi

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^3}\int k^2 dk$$

$$\sin\vartheta d\vartheta d\phi \delta(\varepsilon - \sqrt{(A-Bk^2)+C^2})$$

te uvodimo bezdimenzionalne veličine koje smo definirali u prošlome poglavlju. Tada se izraz pojednostavljuje na oblik

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2}\sqrt{\frac{A}{B^3}}\int \kappa^2 d\kappa \delta(\omega - \sqrt{(1-\kappa^2)^2+\Delta^2}).$$

Dekompozicija delta funkcije

$$\delta(\omega - \sqrt{(1-\kappa^2)^2+\Delta^2}) = \sum_{\kappa_0} \frac{\delta(\kappa-\kappa_0)}{\left|\frac{2(1-\kappa^2)(-)2\kappa}{2\sqrt{(1-\kappa^2)^2+\Delta^2}}\right|} =$$

$$= \sum_{\kappa_0} \frac{\delta(\kappa-\kappa_0)}{|(1-\kappa_0^2)\kappa_0|}\frac{\omega}{2}$$

gdje je κ_0 :

$$\omega = \sqrt{(1-\kappa^2)^2+\Delta^2}$$

$$\omega^2 - \Delta^2 = (1-\kappa_0^2)^2$$

$$\kappa_0 = \pm\sqrt{1 \pm \sqrt{\omega^2-\Delta^2}}$$

Mora biti zadovoljeno $\kappa_0 > 0$ i očigledno $\omega > \Delta$. Slijedom toga $1+\Delta^2 > \omega^2$. Ako je $\Delta < \omega < \sqrt{1+\Delta^2}$ tada obje točke doprinose, a ako je $\omega^2 > 1+\Delta^2$ tada je $\sqrt{\omega^2-\Delta^2} > 1$ i tada samo $\sqrt{1 \pm \sqrt{\omega^2-\Delta^2}}$ doprinosi.
Vratimo li se sada na gustoću stanja, pišemo

$$N(\omega) = \frac{1}{\pi^2}\sqrt{\frac{A}{B^3}}\omega \sum_{\kappa_0}\frac{\kappa_0^2}{|(1-\kappa_0^2)\kappa_0|} \tag{6}$$

$$= \frac{1}{\pi^2}\sqrt{\frac{A}{B^3}}\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2-\Delta^2}}\Big\{(\sqrt{1+\sqrt{\omega^2-\Delta^2}}+$$

$$\sqrt{1-\sqrt{\omega^2-\Delta^2}})\,\Theta(\omega-\Delta)\,\Theta(\sqrt{1+\Delta^2}-\omega)+$$

$$\sqrt{1+\sqrt{\omega^2-\Delta^2}}\,\Theta(\omega-\sqrt{1+\Delta^2})\Big\}.$$

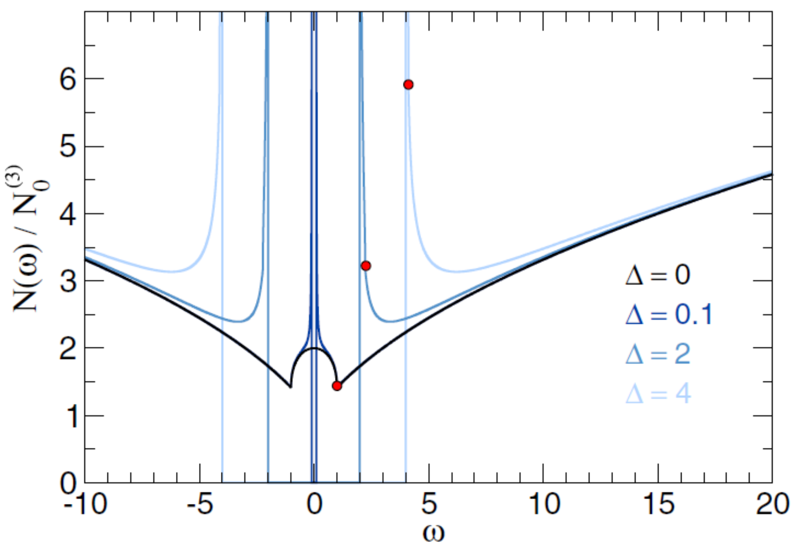
Uvodimo $\Delta = \omega_b$, $\sqrt{1+\Delta^2} = \omega_t$ i $N_0 = \frac{1}{2\pi^2}\sqrt{\frac{A}{B^3}}$ Sve restrikcije za moguće intervale ω i suma za bilokoju fukciju od κ_0 može se implementirati u $f(\kappa_0)$ pomoću Heavisidove step funkcije $\Theta(\omega)$.

$$\sum_{\kappa_0} f(\kappa_0) = \Theta(\omega-\omega_b)\,\Theta(\omega_t-\omega)[f(\kappa_0^+)+f(\kappa_0^-)] \tag{7}$$

$+\Theta(\omega-\omega_t)f(\kappa_0^+)$ pa konačno dobivamo izraz za gustoću stanja

$$N(\omega) = N_0^{(3)}\,\frac{|\omega|}{\sqrt{\omega^2-\omega_b^2}}\,\Theta(|\omega|-\omega_b) \tag{8}$$

$$\Big\{\sqrt{1+\sqrt{\omega^2-\omega_b^2}}+\sqrt{1-\sqrt{\omega^2-\omega_b^2}}\,\Theta(\omega_t-|\omega|)\Big\}$$



Slika 3: Gustoća stanja (8)
za 3D sustav izvedena iz disperzije (2). DOS je funkcija bezdimenzionalnog parametra ω te je na istom grafikonu prikazana za više različitih vrijednosti parametra procijepa, $\omega_b = \Delta$.[5]

4.2 Analiza gustoće stanja

Relacija (8) prikazana je na Slici 3. za različite vrijednosti parametra ω_b u jedinicama $N_0^{(3)} = \sqrt{A}/(2\pi^2 B^{3/2})$. U NSSM slučaju, kada je $\omega_b = 0$, relacija (8) daje gustoću stanja kupolastog oblika između točaka $\omega = \pm\omega_t = \pm 1$ kao što je vidljivo u relaciji (4). Za konačne vrijednosti ω_b dobivamo GSM slučaj gdje DOS ima korijenski singularitet na ω_b.
Razlučivanjem relacije (8) dobivamo

$$N(\omega) \approx N_0^{(3)} \sqrt{\frac{2\omega_b}{\omega - \omega_b}}, \;\; \omega \gtrapprox \omega_b \tag{9}$$

$$N(\omega) \approx N_0^{(3)} \sqrt{\omega}, \;\; \omega \gg \omega_b \tag{10}$$

Divergencija gustoće stanja u GSM fazi za energije na dnu vrpce ω_b lako se mogu shvatiti prebrajajući energijska stanja i komparirajući njihov broj sa 3D paraboličnom vrpcom izolatora, gdje je gustoća stanja proporcionalna $\sqrt{\omega - \omega_b}$. Spuštajući Fermijev nivo, broj stanja (površina Fermijeve plohe) pada na nulu pri ω_b i dovodi do iščezavanja gustoće stanja. No, to se ne događa u GSM slučaju. Kako spuštamo Fermijevu energiju prema ω_b, Fermijeva ploha ostaje sferična ljuska, kao što je prikazano na Slici 2, ali s velikim brojem stanja na njenoj najnižoj energiji. Stoga, DOS divergira. Slika 2 također pokazuje vrijednosti $N(\omega_t)$ određene crvenim kružićima. Pokazuje nam koliko brzo ω_t ide u ω_b dok se Δ povećava. Dok ω_b determinira DOS na početku, pri ω_t ne događa se ništa posebno. Za slučaj $\Delta = 0$ (NSSM), kupola je vidljiva za energije između $(-1, 1)$ (crna linija) sa maksimalnom visinom od $2N_0^{(3)}$. Za $\Delta > 0$ pri energiji $\omega = \omega_b$, DOS ima korijenski singularitet, i za vrijednost $\omega = \omega_t$ dan je sa crvenim kružićima. Za visokoenergijski limit dobivamo DOS kao i za 3D slobodni elektronski plin, kao što možemo vidjeti na Slici 1.

5 Zaključak

Pomoću formalizma Diracove delta funkcije, izračunali smo 3D gustoću stanja polumetala s invertiranim vrpcama. Zaključili da se ona, za razliku od 3D gustoće stanja slobodnog elektronskog plina razlikuje u niskim energijama između ω_b i ω_t, gdje dobivamo egzotičan (kupolasti) oblik, a za energije $\omega \gg \omega_t$, proporcionalna je gustoći stanja 3D slobodnog elektronskog plina, $\sqrt{\omega}$. Također, pojavljuju se i korijenski singulariteti koji nisu svojstveni za DOS 3D slobodnog elektronskog plina.

Literatura

[1] M.Z.Hasan and C.L.Kane, Rev.Mod.Phys. 82, 3045 (2010)

[2] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, Rev. Mod. Phys. 82, 1959 (2010).

[3] J. Wang, Y. Liu, K.-H. Jin, X. Sui, L. Zhang, W. Duan, F. Liu, and B. Huang, Phys. Rev. B 98, 201112(R) (2018).

[4] L. Jin, X. Zhang, Y. Liu, X. Dai, X. Shen, L. Wang, and G. Liu, Phys. Rev. B 102, 125118 (2020).

[5] Z. Rukelj and A. Akrap, Phys. Rev. B 104, 075108 (2021)

[6] vježbe iz kolegija Fizika čvrstog stanja I i II