SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Željana Agić

FOTOEMISIJSKA SVOJSTVA KVAZIJEDNODIMENZIONALNIH VODIČA

Magistarski rad

Zagreb, 2002.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Željana Agić

FOTOEMISIJSKA SVOJSTVA KVAZIJEDNODIMENZIONALNIH VODIČA

Magistarski rad
predložen Fizičkom odsjeku
Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu
radi stjecanja akademskog stupnja magistra prirodnih znanosti fizike

Zagreb, 2002.

Ovaj je magistarski rad izrađen na Fakultetu prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja Sveučilišta u Splitu, pod vodstvom dr. sc. Paška Županovića i prof. dr. sc. Alekse Bjeliša, u sklopu Sveučilišnog poslijediplomskog studija pri Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkoga fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.

Srdačno se zahvaljujem prof. dr. sc. Aleksi Bjelišu i dr. sc. Pašku Županoviću na pomoći i suradnji tijekom izrade ovog magistarskog rada.

Posebno se zahvaljujem prof. dr. sc. Slavenu Barišiću koji mi je svojim konstruktivnim primjedbama pomogao da ovaj rad stavim u kontekst dosadašnjih istraživanja.

Također se zahvaljujem i svojim kolegama na Fakultetu prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja Sveučilišta u Splitu i Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu na pruženoj podršci.

Najljepše se zahvaljujem svima koji su mi svojim razumijevanjem, razgovorom i savjetima pomogli.

Sadržaj

TEMELJNA DOKUMENTACIJA KARTICA

Sveučilište u Zagrebu
Prirodoslovno-matematički fakultet
Fizički odsjek

Magistarska teza

FOTOEMISIJSKA SVOJSTVA KVAZIJEDNODIMENZIONALNIH VODIČA

ŽELJANA AGIĆ

Fakultet prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja Sveučilišta u Splitu, Teslina 12, 21 000 Split

U ovom radu izvedena je jednočestična Greenova matrica za proizvoljan broj vrpci u aproksimaciji nasumičnih faza u bazi Blochovih funkcija čvrste veze. Dobijeni rezultat primjenjen je na model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom i s trodimenzionalnom dugodosežnom Coulombovom interakcijom. Izvedena spektralna funkcija ima maksimum na energijskoj skali reda veličine plazmonske energije i u kvalitativnom je slaganju s nedavnim mjerenjima kutno razlučivom fotoemisijom na Bechgaardovim solima.

(77 stranica, 28 crteža, 55 literarnih navoda, jezik izvornika hrvatski)

Rad je pohranjen u Središnjoj knjižnici za fiziku na Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Bijenička 32, Zagreb

Ključne riječi: fotoemisija/ ARPES/ Greenova funkcija/ spektralna funkcija/ kolektivni mod/ kvazijenodimenzionalni vodiči/ ,,sudden" aproksimacija

Mentor: prof. dr. sc. Aleksa Bjeliš

Ocjenjivač: prof. dr. sc. Slaven Barišić, prof. dr. sc. Aleksa Bjeliš i dr. sc. Silvia Tomić

Rad prihvaćen: 22. 10. 2002.

BASIC DOCUMENTATION CARD

University of Zagreb
Faculty of Science
Department of Physics

Master of Science Thesis

PHOTOEMISSION PROPERTIES OF QUASI-ONE-DIMENSIONAL CONDUCTORS

ŽELJANA AGIĆ

Faculty of natural sciences, mathematics and education, University of Split, Teslina 12, 21 000 Split

RPA oneparticle Green's matrix is calculated in the thight binding approach. The result is applied to the model of quasi-one-dimensional metal with one band and three-dimensional long-range Coulomb interaction. The spectral function obtained from this Green's function has a wide maximum at the energy scale of the plasmon energy and it is in qualitative agreement with ARPES spectra of Bechgaard salts.

(77 pages, 28 figures, 55 references, original in croatian)

Thesis deposited in Central Library for Physics, Department of Physics, Faculty of Science, University of Zagreb, Bijenička 32, Zagreb

Keywords: photoemission/ ARPES/ Green's function/ spectral function/ collective mods/ quasi one-dimensional conductors/ sudden approximation

Supervisor: prof. dr. sc. Aleksa Bjeliš

Reviewers: prof. dr. sc. Slaven Barišić, prof. dr. sc. Aleksa Bjeliš and dr. sc. Silvia Tomić

Thesis accepted: 22. 10. 2002.

Poglavlje 1

Uvod

Kvazijednodimenzionalni (Q1D) metali su u zadnje vrijeme ponovno pobudili veliko zanimanje jer njihovi spektri dobijeni kutno razlučivom fotoemisijom pokazuju kvalitativno drugačije osobine od onih normalnih metala [1, 2, 3, 4]. Kutno razlučiva fotoemisija pokazala je da u nekima od ovih materijala fotostruja iščezava blizu kemijskog potencijala [1, 2, 3, 4], da nema disperzije [1, 3, 4], te da nema razdvajanja spinskih i nabojskih modova [1, 2, 3, 4].

Normalni metali teorijski su opisani Landauovom teorijom Fermijevih tekućina. Ta teorija međutim ne tumači nestajanje spektralne težine na kemijskom potencijalu i nepostojanje disperzije u spektralnoj funkciji. Prema njoj se na kemijskom potencijalu za Fermijev valni vektor pojavljuje kvazičestica te postoji disperzija.
S druge strane za jednodimenzionalne interakcijske elektronske sustave koristi se model Luttingerove tekućine koji se u određenim specijalnim slučajevima može egzaktno riješiti [5, 6]. Osobina Luttingerovih tekućina je nestajanje gustoće stanja na kemijskom potencijalu ($\omega = 0$) koja je dana zakonom $N(\omega) \sim |\omega|^\alpha$ u njegovoj blizini, gdje je parametar α anomalna dimenzija koja ovisi o elektron-elektron interakciji [7]. Ovisno o tom parametru spektralna funkcija može imati bitno različito ponašanje. Npr. za $\alpha < 1/2$ pojavljuje se δ-peak na kemijskom potencijalu za Fermijev valni vektor, a promjenom valnog vektora pojavljuju se dva izrazita maksimuma u spektralnoj funkciji koji odgovaraju nabojskom i spinskom kolektivnom modu [7, 9, 8]. Za $\alpha > 1$ dolazi do potencijskog pada spektralne funkcije na nulu na kemijskom potencijalu [7, 9, 8].
Eksperimentalni podaci daju α reda veličine 1 [1, 3, 4] što je mnogo više od $\alpha \leq 1/8$

koji se dobije za Luttingerov model s dominantnom lokalnom interakcijom (on-site Hubbard). Viši α se može dobiti uzimajući dovoljno jak doprinos elektron-elektron interakciji susjednih kristalnih mjesta (site-site) ili uzimajući jaku dugodosežnu Coulombovu interakciju (s odgovarajućim zasjenjenjem) [10].

Opažanje širokog maksimuma na 1eV najmanje se uklapa u sliku Luttingerove tekućine jer je ona dobro definirana u području nižih frekvencija reda veličine širine vrpci ($\approx 0.25eV$). Baš zbog njega potrebna je analiza na široj energetskoj skali. Zato u ovom radu računamo spektralna svojstva kvazijenodimenzionalnih metala za srednje i velike energije koristeći RPA.

Uzimamo model pravokutne rešetke paralelnih lanaca s jednom vrpcom po lancu i s trodimenzionalnom Coulombovom interakcijom. Polazimo od planarnih Fermijevih površina, tj. integrali prijenosa konačni su samo duž lanaca. Cilj ovog rada je odrediti spektralnu funkciju u ovom modelu.

Radi boljeg uvida u spektralna svojstva koja daje RPA prisjećamo se analize koju su proveli Hedin i Lundqvist [11, 12, 13] za RPA vlastitu energiju u ,,jellium" modelu pogodno parametrizirajući izraz za RPA dielektričnu funkciju. Nakon složenih numeričkih proračuna našli su da je spektralna funkcija dominantno određena kolektivnim modom, plazmonom [11, 12, 13]. Zbog dugodosežne nezasjenjene Coulombove interakcije, kolektivni mod ima najmanju frekvenciju $\omega_{min} = \omega_{pl}$. Upravo je optički karakter plazmona odgovoran za pojavu kvazičestice na kemijskom potencijalu za Fermijev valni vektor, što je u kvalitativnom slaganju s Landauovom teorijom Fermijevih tekućina. Nadalje, plazmoni smanjuju težinu ovog peak-a prenoseći je na energije reda veličine Fermijeve energije uvećane ili umanjene za plazmonsku frekvenciju.

Za razliku od trodimenzionalnog ,,jelliuma" kod kvazijednodimenzionalnih materijala postoje niskofrekventna kolektivna pobuđenja za koja je $\omega_{min} = 0$. Ona su odgovorna za nestajanje spektralne težine na kemijskom potencijalu što je vidljivo u standardnoj slici Luttingerovih tekućina preko spomenute anomalne dimenzije. Luttingerov model riješen je samo na energijskoj skali reda veličine širine vrpci. Očekujemo da će RPA dati kvalitativno dobar rezultat na široj energijskoj skali.

Rad je podijeljen na sedam poglavlja.

U drugom poglavlju dan je kratak pregled saznanja o kvazijednodimenzionalnim vodičima $(TMTSF)_2X$ (Bechgaardovim solima) čiji su ARPES spektri bili motivacija za ovaj rad.

U trećem poglavlju govori se o kutno razlučivoj fotoemisiji elektrona emitiranih iz uzorka pod djelovanjem elektromagnetskog vala. Ističe se primjena kutno razlučive fotoemisije kod kvazijednodimenzionalnih i kvazidvodimenzionalnih kristala. Određuje se struja fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji ovisno o energiji pobuđenja ioniziranog podsistema i o razlici valnih vektora pobuđenog sistema s N-1 česticom i sistema s N čestica. Pokazuje se kako je struja fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji povezana s matričnim elementima spektralne matrice.

U četvrtom poglavlju se nakon uvođenja Greenove funkcije pokazuje da je spektralna matrica proporcionalna imaginarnom dijelu Greenove matrice. Iznosi se primjer Greenove funkcije u Landauovoj teoriji Fermijevih tekućina i dosadašnja saznanja o spektralnoj funkciji u Luttingerovom modelu.

U petom poglavlju izvodi se jednočestična Greenova matrica za proizvoljan broj vrpci u aproksimaciji nasumičnih faza u pristupu čvrste veze, te se pokazuje kako ona ovisi o RPA zasjenjenoj Coulombovoj interakciji.
Na primjeru ,,jellium" modela [11, 12, 13] pokazuje se kakav utjecaj ima Coulombova interakcija na spektralna svojstva u RPA.

Dobijeni rezultati primjenjuju se, u šestom poglavlju, na model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom. Kvazijednodimenzionalne vodiče karakterizira anizotropna vodljivost, jako vode u jednom smjeru u odnosu na preostala dva okomita smjera. Stoga se uzima da jednoelektronski spektar nesmetanog problema ovisi samo o komponenti valnog vektora elektrona koja je paralelna tom smjeru. Računa se RPA zasjenjena interakcija. Ona ovisi o dvjema vrstama pobuđenja, nekoherentnim čija je energija mikroskopski blizu energiji odgovarajućeg elektronsko-šupljinskog pobuđenja i kolektivnim čija energija nije mikroskopski blizu energiji pobuđenja odgovarajućeg elektronsko-šupljinskog para. Zanemari li se doprinos nekoherentnih pobuđenja Greenovoj funkciji u odnosu na doprinos kolektivnih modova i zanemari li se širina vrpce u odnosu na energiju kolektivnog pobuđenja dobije se analitički izraz za spektralnu funkciju, pomoću kojeg se diskutiraju rezultati mjerenja kutno razlučivom fotoemisijom na Bechgaardovim solima [1, 3, 4].

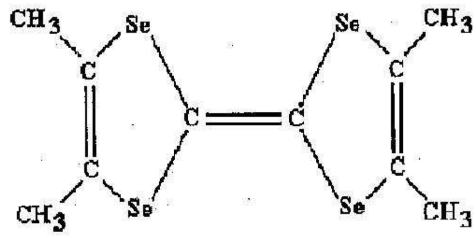
Konačno u sedmom poglavlju ukratko su izneseni najvažniji rezultati ovog rada nakon čega slijede zaključne napomene.

Poglavlje 2

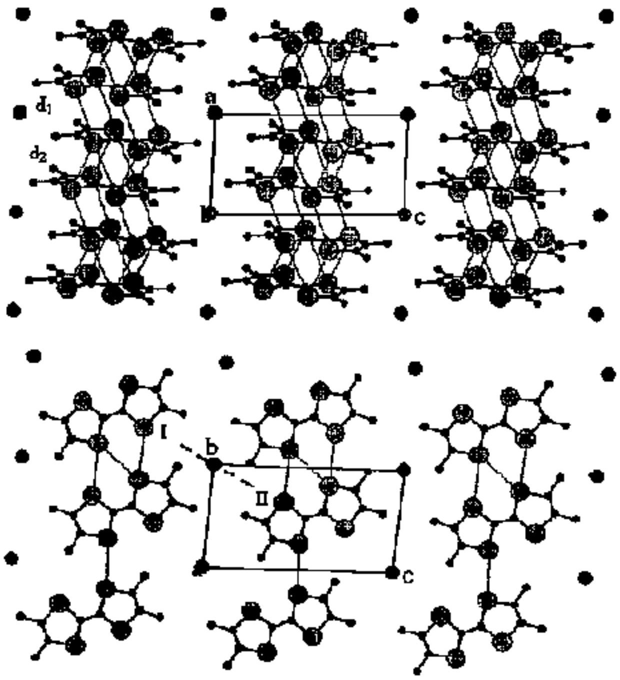
Bechgaardove soli

Otkriće supravodljivosti potaklo je potragu za materijalima koji bi bili supravodljivi na što višim temperaturama. Ta potraga dovela je do stvaranja mnogih materijala sa zanimljivim svojstvima. Jedni od njih su i kvazijednodimenzionalni vodiči. Među najzanimljivijim je TTF-TCNQ. Sastavljen je od planarnih molekula donora TTF i akceptora TCNQ koje se slažu u lance istovrsnih molekula. Naboj po molekuli u lancima nije cijeli broj, tj. dolazi do djelomičnog prijelaza naboja s donorskih molekula na akceptorske što osigurava djelomičnu popunjenost najviše elektronske vrpce. U vođenju struje sudjeluju obje vrste lanaca. Vodljivost TTF-TCNQ-a na sobnoj temperaturi je velika ($500(\Omega cm)^{-1}$) i povećava se smanjenjem temperature dosežući $10^4(\Omega cm)^{-1}$ na $60K$. Na $54K$ dolazi do prijelaza iz metalne faze u fazu vala gustoće naboja.

Kvazijednodimenzionalni vodiči koji imaju supravodljivu fazu su Bechgaardove soli $(TMTSF)_2X$. Metalni karakter Bechgaardovih soli očituje se u prekrivanju π-orbitala između susjednih molekula. Organska molekula TMTSF (sl. 2.1) je planarna molekula koja lako otpušta elektrone, a X je jedan od anorganskih aniona ClO_4, ReO_4,



Slika 2.1: Molekula $TMTSF$.

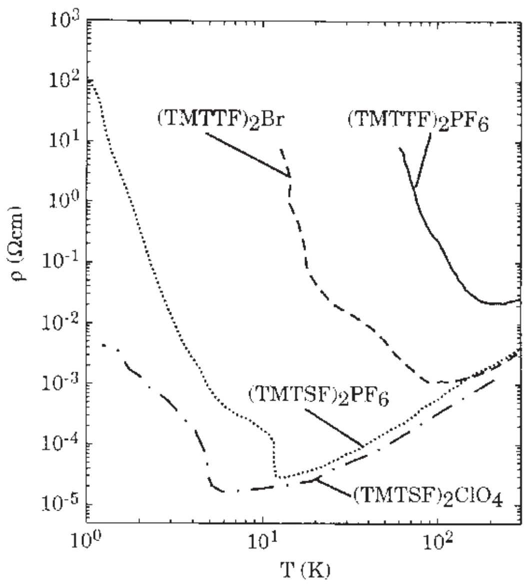


Slika 2.2: Pogled na lance $(TMTSF)_2X$ (gornja slika) i okomito na njih (donja slika).

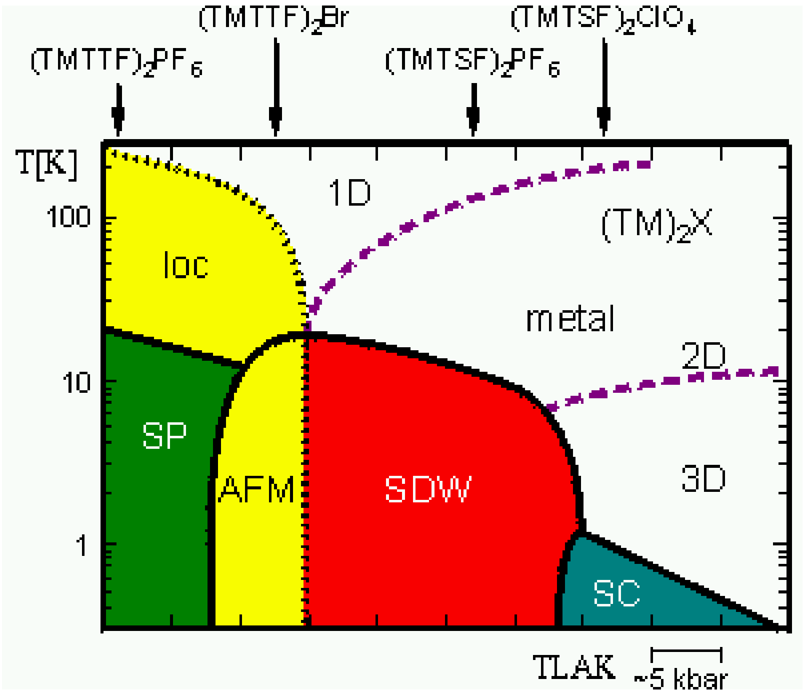
NO_3, FSO_3, SCN, ... Molekule $TMTSF$ slažu se u lance između kojih su smješteni anioni (sl. 2.2). $(TMTSF)_2X$ sadrže dva donora i jedan anion po jediničnoj ćeliji, a kristaliziraju u triklinskoj prostornoj grupi. Dvije organske molekule po jediničnoj ćeliji predaju jedan elektron anorganskoj molekuli što rezultira tročetvrtinskim popunjenjem elektronske vrpce.

Slika 2.3 prikazuje otpornost $\rho(T)$ Bechgaardovih soli duž lanaca. $(TMTSF)_2X$ imaju metalno ponašanje (monotono padanje otpornosti s padom temperature) do temperature prijelaza u SDW fazu (val gustoće naboja) koja je 12K i 6K za $X = PF_6$ i ClO_4. Na istom dijagramu su i kvazijednodimenzionalni vodiči $(TMTTF)_2X$ koji se u strukturi od njih razlikuju po tome što imaju atom S umjesto Se.

Fazni dijagram Bechgaardovih soli prikazan je na slici 2.4. Na istom dijagramu su i kvazijednodimenzionalni vodiči $(TMTTF)_2X$ koji se ponašaju slično Bechgaardovim solima. $(TMTSF)_2ClO_4$ na 1 K prelazi u supravodljivu fazu.



Slika 2.3: Temperaturna ovisnost otpornosti mjerene duž lanaca za $(TMTTF)_2X$ i $(TMTSF)_2X$ [4].



Slika 2.4: Fazni dijagram za $(TMTSF)_2X$ i $(TMTTF)_2X$ spojeve [14]. Značenje oznaka je slijedeće: loc=lokalizacija naboja, SP=spin-Pierlsovo stanje, AFM=antiferomagnetsko stanje, SDW=val gustoće spina, SC=supravodljivo stanje.

Kontinuirana promjena temperature i tlaka dovodi i do kontinuirane promjene dimenzionalnosti ovih sistema. Povećanjem tlaka i smanjenjem temperature sistem prelazi iz jednodimenzionalnog u dvodimenzionalni, a zatim trodimenzionalni.

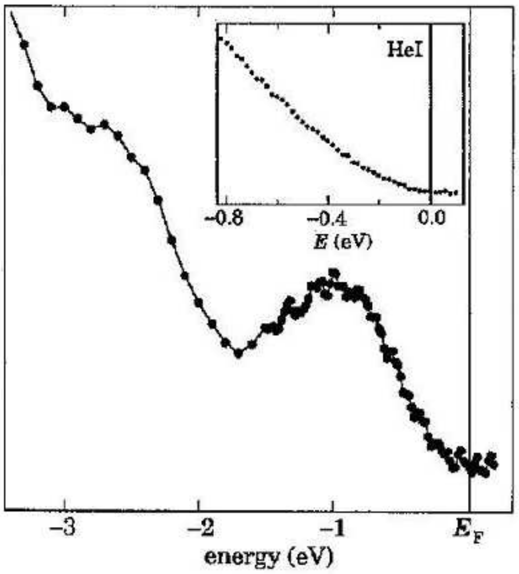
U jednočestičnoj teoriji vrpci u aproksimaciji čvrste veze uzima se jedna vrpca po lancu čija je energija

$$E(\mathbf{k}) = -2t_a \cos(k_a a) - 2t_b \cos(k_b b) - 2t_c \cos(k_c c), \tag{2.1}$$

gdje se pretpostavlja ortorombska rešetka u kojoj je a konstanta rešetke u smjeru lanaca, a b i c su konstante rešetki u smjerovima okomitim na lance. Integral prekrivanja duž lanaca t_a je reda veličine 250 meV dok su integrali prekrivanja u smjerovima okomitim na lance $t_b = 25meV$ i $t_c = 1meV$ [15].

Gruba ocjena do kada bi mogla vrijediti 3D slika može se dobiti iz vrijednosti integrala prekrivanja u smjeru okomitom na lance $t_\perp$ koja se dobije iz teorije vrpci. Za $T \ll t_\perp$ termalne fluktuacije su slabe tako da je neodređenost pripadnog valnog vektora $\delta k_\perp \ll 1/d_\perp$ mala u odnosu na veličinu Brillouinove zone. U ovom režimu bi sistem mogao biti dobro opisan u 3D. S druge strane za $T > t_\perp$ je $\delta k_\perp > 1/d_\perp$ i neodređenost u gibanju elektrona u smjeru okomitom na lance je mala $\delta r_\perp < d_\perp$ što upućuje na opis u jednodimenzionalnoj slici.

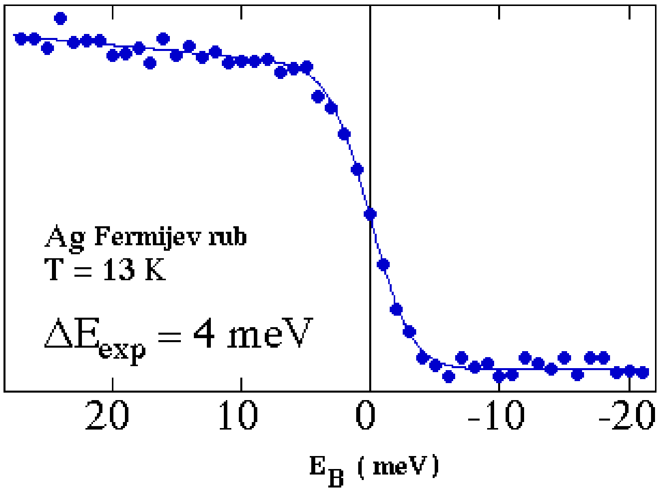
Promjena dimenzije sistema dovodi do promjene fizikalnog modela koji opisuje sistem: trodimenzionalni sistem je opisan Landauovom teorijom Fermijevih tekućina, dok je jednodimenzionalni sistem opisan modelom Luttingerove tekućine.
Landauova teorija Fermijevih tekućina dobro opisuje interagirajuće elektrone u metalima. Zasnovana je na predpostavci da su slabo pobuđena stanja interagirajućih elektrona u $1-1$ korespondenciji s onima neinteragirajućeg plina. Ova teorija uvodi pojam kvazičestice za jedno takvo stanje.
U jednodimenzionalnoj granici bozonizacijskom tehnikom egzaktno je rješiv Luttingerov model interagirajućih elektrona. U ovom modelu dobivaju se za svojstvena stanja sistema dogovalni nabojski i spinski akustični kolektivni modovi kao kombinacije niskoenergijskih elektronsko-šupljinskih pobuđenja. Pojam kvazičestice pri niskim energijama



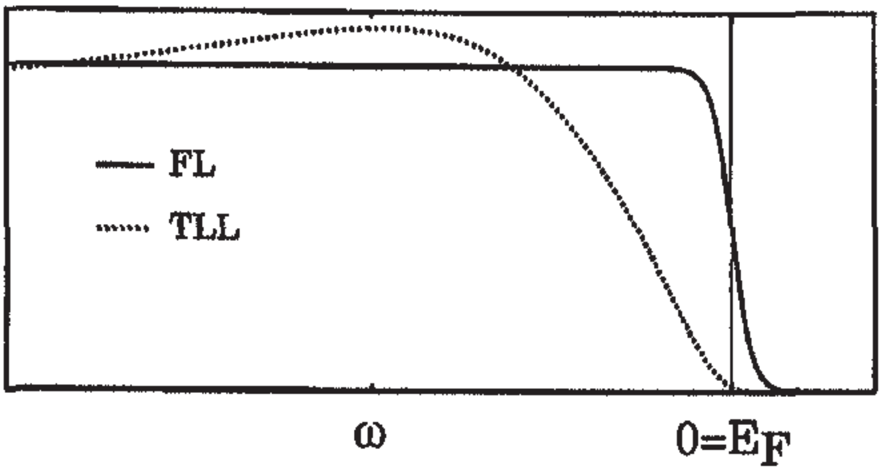
Slika 2.5: PES spektar $(TMTSF)_2PF_6$ pri temperaturi 50 K [16]. Slični spektri dobijeni su i za $(TMTSF)_2ClO_4$ te $(TMTSF)_2AsF_6$.

tako nije prisutan u ovom modelu. Sva svojstva modela određena su konstantama $K_{\rho,s}$ i brzinama $v_{\rho,s}$ akustičkih nabojskih (ρ) i spinskih (s) pobuđenja koje ovise o interakciji. Ovaj opis valjan je za proizvoljan jednodimenzionalan interakcijski sistem ako se uzmu odgovarajući $K_{\rho,s}$ i $v_{\rho,s}$ [17] iako je u početku Luttingerov model izveden za interakcije mnogo slabije od širine vrpci [5, 6]. Izrazi za spomenute veličine $K_{\rho,s}$ i $v_{\rho,s}$ dani su u 4. poglavlju u kojem će biti više riječi o samom modelu.

Iako su različite faze Bechgaardovih soli (SDW, spin-Pierls, supravodljiva,...) bile intenzivno proučavane zadnjih dvadesetak godina nedavni fotoemisijski eksperimenti doveli su do velikog zanimanja za metalnu fazu. Svojstva fotoemisijskih spektara Bechgaardovih soli u ovoj fazi koja nisu u skladu s onima koje predviđa Landauova teorija Fermijevih tekućina vidljiva su u rezultatima ovih eksperimenata. Landauova teorija u kutno integriranom spektru daje konačan intenzitet na E_F (sl. 2.7) gdje je vidljiva pojava tzv. Fermijevog ruba. Suprotno tome prvi fotoemisijski eksperimenti na $(TMTSF)_2PF_6$ na 50 K nisu pokazali postojanje Fermijevog ruba u kutno integriranom spektru (PES) (sl. 2.5) koji je uobičajeni pokazatelj metalnog stanja (sl. 2.6) [16]. U tom spektru po-



Slika 2.6: PES spektar za Ag [18].

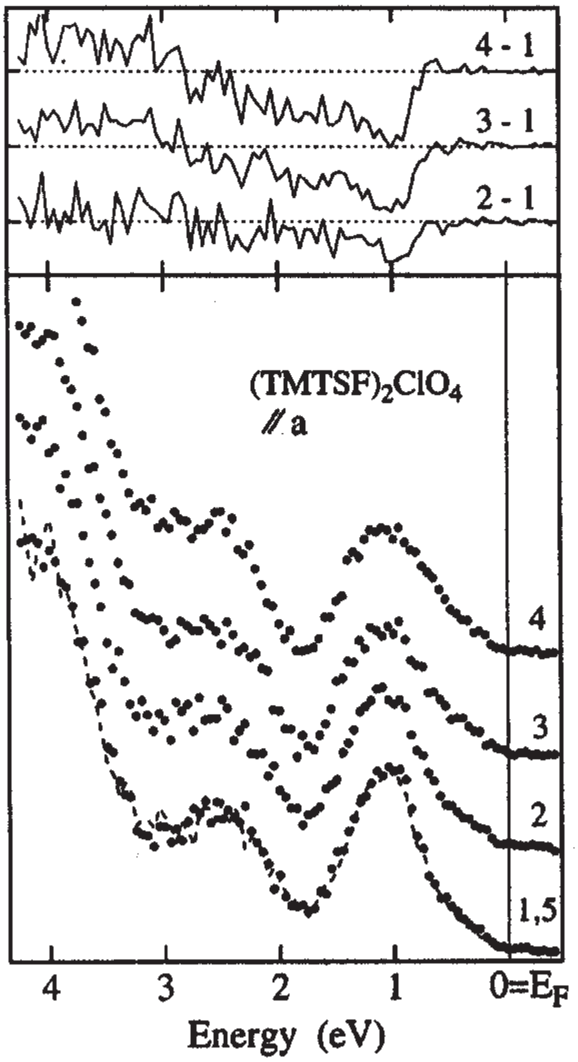


Slika 2.7: PES spektar za Fermijevu tekućinu i za Luttingerovu tekućinu.

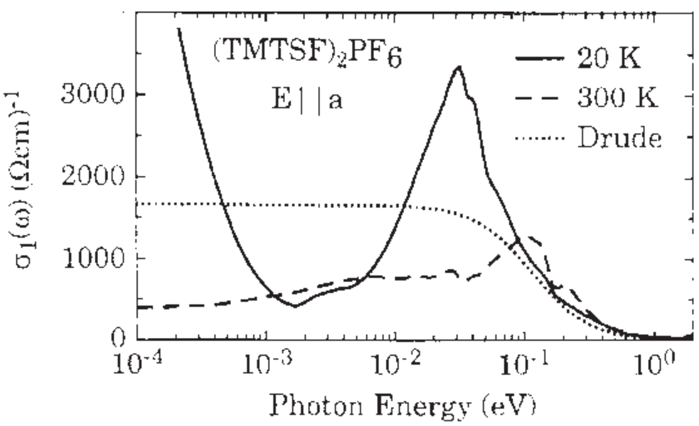
javljuje se širok maksimum na $-1.2eV$, spektralna težina nestaje na E_F. Slični spektri dobijeni su i za $(TMTSF)_2ClO_4$ te $(TMTSF)_2AsF_6$. Ovakvo ponašanje pokazuje da uobičajena slika Fermijevih tekućina ne vrijedi za ove kvazijednodimenzionalne materijale.
S druge strane kutno integrirani spektar Luttingerovog modela iščezava na kemijskom potencijalu (E_F) i to po pravilu $\mid \omega \mid^{\alpha}$ (sl. 2.7), gdje je $\alpha = (K_\rho + K_\rho^{-1} - 2)/4$ interakcijski ovisan parametar tzv. anomalna dimenzija. Analiza eksperimentalnih podataka daje $\alpha = 1.5$ i $K_\rho = 1/8$ što ukazuje na jako dugodosežno elektronsko međudjelovanje [1, 3, 4].

U kutno razlučivom spektru Landauova teorija Fermijevih tekućina daje kvazičesticu na kemijskom potencijalu za Fermijev moment k_F koja se odmiče od kemijskog potencijala po jednoelektronskoj disperziji za $k \neq k_F$. Oštri peak koji dominira na kemijskom potencijalu za $k = k_F$ postaje širi i niži kako se $E - E_F$ povećava. Nasuprot tome u spektru $(TMTSF)_2ClO_4$ dobijenom kutno razlučivom fotoemisijom (ARPES) na 150 K [1, 3, 4] spektralna težina nestaje na Fermijevoj energiji za sve valne vektore (sl. 2.8) upućujući, usprkos metalnoj prirodi uzorka, na nepostojanje kvazičestica blizu Fermijeve energije što je u skladu su s nepostojanjem Fermijevog ruba u kutno integriranom spektru. Također, u ovom kutno razlučivom spektru ističe se širok maksimum na 1 eV čiji se položaj ne mijenja promjenom valnog vektora što ukazuje na nepostojanje disperzije. Ovo nije u skladu ni s Luttingerovim modelom [7] koji i za veliki α predviđa ovisnost spektralne težine o momentu k blizu kemijskog potencijala.

Također su zanimljiva i nedavna mjerenja optičke vodljivosti Bechgaardovih soli [4, 19, 20] za koje dc vodljivost pokazuje metalno ponašanje sve do niskih temperatura prijelaza u SDW fazu. Optička vodljivost im se značajno razlikuje od one običnih metala koja je dobro opisana Drude-ovim modelom (sl. 2.9) [4, 19, 20]. Dobro definiran procijep na 25meV i mod na nultoj frekvenciji vidljivi su na niskoj temperaturi. Iako ovaj mod nosi 1% ukupne težine odgovoran je za veliku metalnu vodljivost. Kako je veliki ostatak spektralne težine iznad 25meV vjerojatno je nemoguće ovo neobično ponašanje optičke vodljivosti opisati teorijom koja uključuje slabo međudjelovanje



Slika 2.8: ARPES spektar duž lanaca $(TMTSF)_2ClO_4$ [1]. Spektri su numerirani od centra prema rubu zone. Temperatura je 150 K, a energija fotona 20 eV.



Slika 2.9: Optička vodljivost duž lanaca za $(TMTSF)_2PF_6$ [4].

odnosno koja bi bila slična Landauovoj.

Kako smo već spomenuli granica za prijelaz s 1D na 3D je $t_\perp \approx 25meV$ pa bi se veliki postotak ukupne težine optičke vodljivosti iznad ove energije mogao pokušati opisati u jednodimenzionalnoj slici Luttingerovim modelom. Ovisno o jakosti interakcije Luttingerova tekućina može postati nestabilna za četvrtinsko popunjenje čineći sistem da postane Mott izolator. U slučaju četvrtinskog punjenja interakcija pojačava dodatni član Hamiltonijanu Luttingerovog modela tzv. Umklapp član koji otvara procijep. Ovaj pristup daje $\sigma_1 \propto \omega^{-\gamma}$ za $t_a < \omega < 4t_a$, gdje je $\gamma = 16K_\rho - 5$. Dobijeni rezultati mogu biti opisani koristeći $\gamma = 1.3$ i $K_\rho = 0.23$ [4, 19, 20] koji ističu značaj jake dugodosežne interakcije.

Temperaturna ovisnost relaksacije nuklearnog spina radi utjecaja rešetke T_1^{-1} dobijenog nuklearnom magnetskom rezonancijom (NMR) upućuje na opis Bechgaardovih soli u 1D slici.

Za Fermijeve tekućine vrijedi $T_1^{-1} = CT\chi_s^2$, gdje je χ_s spinska susceptibilnost, a C temperaturno neovisan parametar. Eksperimenti na $(TMTSF)_2X$ pokazuju da je χ_s temperaturno ovisan, naime vrijedi $T_1^{-1} = CT\chi_s^2(T)$ za visoke temperature u normalnoj fazi. Opis u standardnoj slici Fermijevih tekućina još više ne odgovara eksperimentalnim podacima za niske temperature u normalnoj fazi koji ukazuju na to da $(T_1T)^{-1}$ ima rast umjesto očekivanog pada [21, 22, 23]. Ovo je prvi put primjećeno

za $(TMTSF)_2ClO_4$ [21, 22, 23], a kasnije je pronađeno isto ponašanje i za ostale pripadnike porodice $(TMTSF)_2X$. Npr. za $(TMTSF)_2PF_6$ to je slučaj za temperature između 50K i 200K [28, 24].
S druge strane za Luttingerove tekućine vrijedi [27, 28]

$$T_1^{-1} = C_0 T \chi_s^2 + C_1 T^{K_\rho}, \tag{2.2}$$

gdje su C_0 i C_1 parametri neovisni o temperaturi. $K_\rho \approx 0.1 - 0.2$ je u skladu s eksperimentalnim podacima za $(TMTSF)_2PF_6$ za $T \geq 50K$ pri atmosferskom tlaku [25, 24].

Temperaturna ovisnost otpornosti u metalnim sistemima u kojima fononi i nečistoće imaju mali utjecaj na raspršenje nositelja naboja uvjetovana je elektron-elektron interakcijom te je unutar Landauove slike Fermijevih tekućina dana s [29, 30, 31]

$$\rho(T) \sim T^2 \tag{2.3}$$

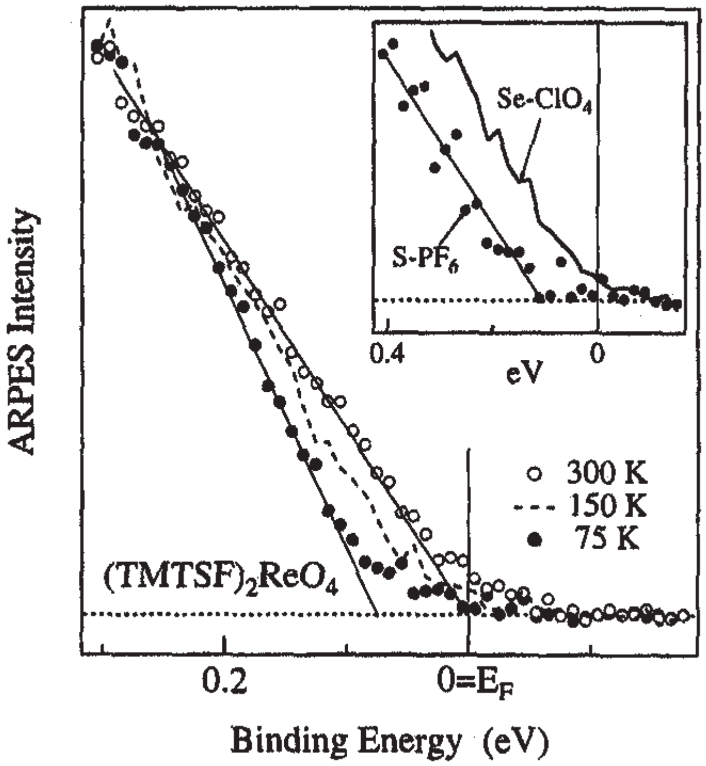
Za $(TMTSF)_2PF_6$ ovaj zakon zadovoljava longitudinalna otpornost $\rho_a(T)$ od 50K do blizine prijelaza u SDW fazu [30]. Za više temperature eksperimentalni rezultati su dobro opisani otpornošću koja dolazi od Umklapp procesa za 1/4 popunjenu 1D vrpcu [20, 32, 33, 34]

$$\rho_a(T) \approx g_{1/4}^2 T^{16K_\rho - 3}, \tag{2.4}$$

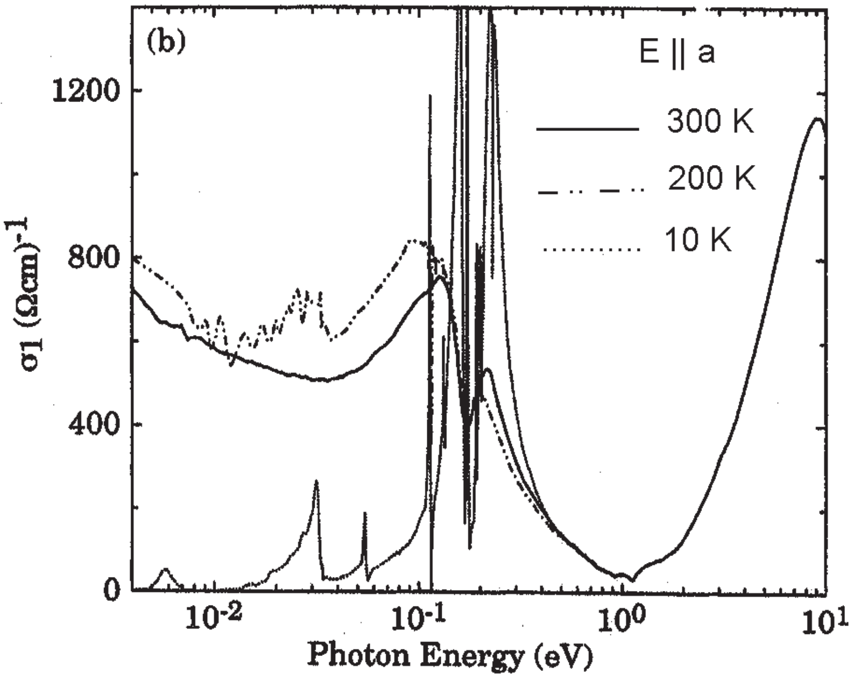
za $K_\rho = 0.22$, gdje je $g_{1/4}$ konstanta vezanja za Umklapp proces, a 1/4 označava popunjenje.

Tako različite eksperimentalne metode upućuju na istu vrijednost K_ρ što i mora biti slučaj.

Navedena optička i fotoemisijska mjerenja vršena su na temperaturama iznad faznog prijelaza. $(TMTSF)_2ReO_4$ na 180K prelazi iz metala u izolator te je zato pogodna za mjerenja iznad i ispod temperature faznog prijelaza. ARPES spektri ovih soli na 300K su izrazito slični spektrima već spomenutih Bechgaardovih soli [3]. Posebno ih karakterizira isti α unutar Luttingerovog modela. Međutim, na 150K kraj



Slika 2.10: ARPES spektar od $(TMTSF)_2ReO_4$ u centru Brillouinove zone [3].



Slika 2.11: Optička vodljivost duž lanaca za $(TMTSF)_2ReO_4$ [3].

spektra se pomaknuo za 50meV od E_F (sl. 2.10) što je analogno spektrima izolatora $(TMTTF)_2X$.

Također, se i u optičkim mjerenjima dobro vidi razlika između metalne i izolatorske faze (sl. 2.11). Spektralna težina u optičkoj vodljivosti za male energije na $T < T_c$ je smanjena u odnosu na onu na $T > T_c$ i vodljivost je jednaka izolatorskoj.
Nasuprot fotoemisijskim mjerenjima rezultati optičkih mjerenja odgovaraju većem γ nego kod $X = PF_6$ i ClO_4 koji se ne slaže s jednakim α [3]. Tako različiti eksperimenti na $X = ReO_4$ daju različite K_ρ što nikako ne ide u prilog spomenutim interpretacijama eksperimentalnih podataka jer taj koeficijent mora biti isti za različite eksperimente na istom materijalu.

PES je vrlo osjetljiv na površinske efekte i odstupanje od metalnog ponašanja moglo bi biti njima uvjetovano. Vođeni ovom idejom Dressel i suradnici proučavali su utjecaj strukture površine Bechgaardovih soli na spektralna svojstva [26]. Prijašnja (AR)PES mjerenja vršena su na prirodnoj površini kristala koja je paralelna (001) ravnini. Ona sadrži samo $TMTSF$ ili samo PF_6 ione tako da ima pozitivan ili negativan površinski naboj što bi moglo imati utjecaja na spektralna svojstva. Zato oni grubo odsjecaju uzorak duž (001) ravnine da bi dobili nepolariziranu površinu. Dobijaju iste (AR)PES spektre koji su dobijeni i na uzorcima s prirodnom površinom [4] te slijedi da oni ne odražavaju površinska svojstva ovih materijala.

Poglavlje 3

Kutno razlučiva fotoemisija elektrona

3.1 Fizikalni principi kutno razlučive fotoemisije

Kutno razlučivom fotoemisijom elektrona [35, 36] mjeri se jakost struje fotoelektrona ovisno o kinetičkoj energiji i smjeru valnog vektora elektrona uz zadanu polarizaciju, upadni kut i frekvenciju elektromagnetskog vala (sl. 3.1).
Pri izlazu elektrona iz kristala, pod djelovanjem elektromagnetskog zračenja neutralni kristal prelazi iz osnovnog stanja $| N >$ u pobuđeno stanje koje čine elektron u stanju valnog vektora $\mathbf{K}'$ i energije $E(\mathbf{K}')$ i ionizirani podsistem u stanju $|N-1, s>$. Vrijedi zakon sačuvanja impulsa

$$\mathbf{k}_s = \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{K}', \tag{3.1}$$

gdje je

$$\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_{N-1,s} - \mathbf{k}_N \tag{3.2}$$

valni vektor pobuđenja ioniziranog podsistema, i zakon sačuvanja energije

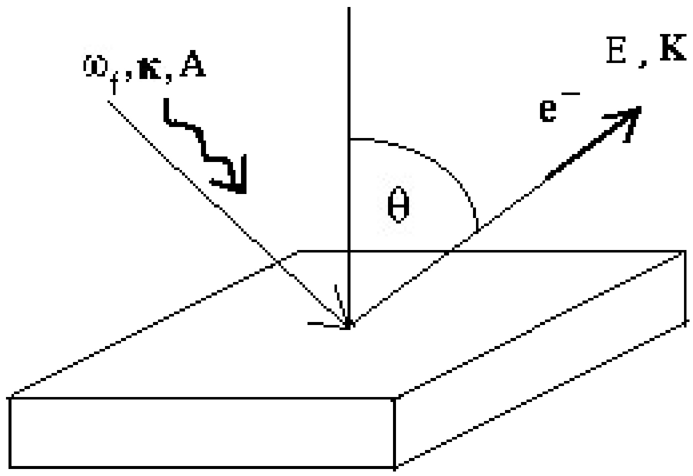
$$\omega_f = E(\mathbf{K}') + E_{N-1,s} - E_N. \tag{3.3}$$

Zapišemo li (3.3) preko kemijskog potencijala $\mu = E_N - E_{N-1}$ vrijedi

$$\omega_f = E(\mathbf{K}') - \mu + \epsilon_{N-1,s} \tag{3.4}$$

gdje je

$$\epsilon_{N-1,s} = E_{N-1,s} - E_{N-1}, \tag{3.5}$$



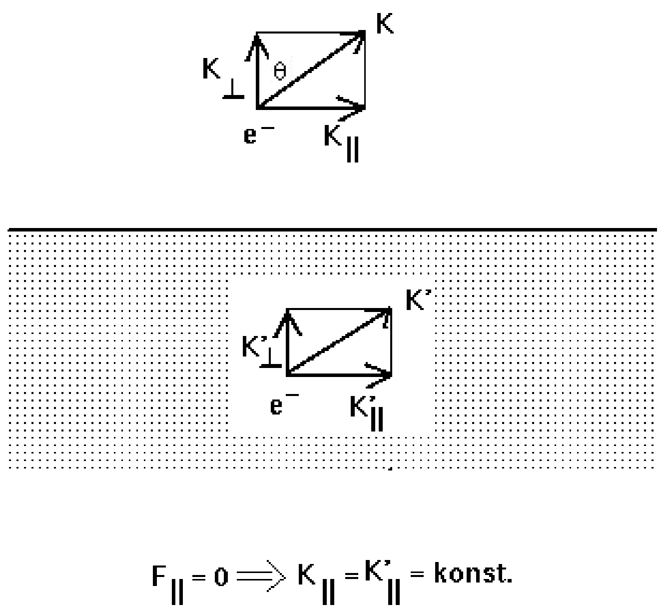
Slika 3.1: Fotoemisija elektrona iz uzorka s energijom $E = K^2/2m$ i valnim vektorom $\mathbf{K}$ pod djelovanjem elektromagnetskog polja frekvencije ω_f, valnog vektora $\boldsymbol{\kappa}$ i polarizacije $\mathbf{A}$.

energija pobuđenja ioniziranog podsistema. Da bi elektron izašao iz kristala mora proći kroz površinu kristala. Pri tom prolazu mijenja mu se valni vektor iz $\mathbf{K}'$ u $\mathbf{K}$. Predpostavljamo da mu energija ostaje ista tj. $E(\mathbf{K}') = K^2/2m$. Zbog simetrije problema prosječna sila na elektron paralelna površini kristala u kristalu i izvan njega jednaka je nuli (sl. 3.2) pa je komponenta valnog vektora elektrona paralelna površini kristala sačuvana pri prijelazu elektrona iz kristala u vakuum tj.

$$K'_{\|} = K_{\|} = \sqrt{2mE}\sin\Theta. \tag{3.6}$$

Fotoemisijska mjerenja na kvazijednodimenzionalnim i kvazidvodimenzionalnim materijalima odvijaju se na površini koja je paralelna lancima, odnosno ravninama za koje energije ioniziranog podsistema slabo ovise o $\mathbf{k}_{s\perp} = \boldsymbol{\kappa}_{\perp} - \mathbf{K'}_{\perp}$. Kod tih materijala se za dani $\mathbf{K}_{\|}$ može po (3.4) odrediti raspodjela fotoelektrona ovisno o energijama ioniziranog podsistema kako je prikazano na slici 2.8. mijenjajući $\mathbf{K}_{\perp}$, a time i $E(\mathbf{K}') = K^2/2m$. Kako je $\mathbf{k}_{s\|} = \boldsymbol{\kappa}_{\|} - \mathbf{K'}_{\|} = \boldsymbol{\kappa}_{\|} - \mathbf{K}_{\|}$ različita pobuđenja ioniziranog podsistema za dani $\mathbf{K}_{\|}$ ovise o istom $\mathbf{k}_{s\|}$.

Kod fotoemisije postoji najveća energija fotoelektrona. Označimo li tu energiju s



Slika 3.2: Sačuvanje komponente valnog vektora elektrona paralelne površini

E_M, fotoemisija postoji za $K^2/2m < E_M$ pa po zakonu sačuvanja energije (3.3) postoji

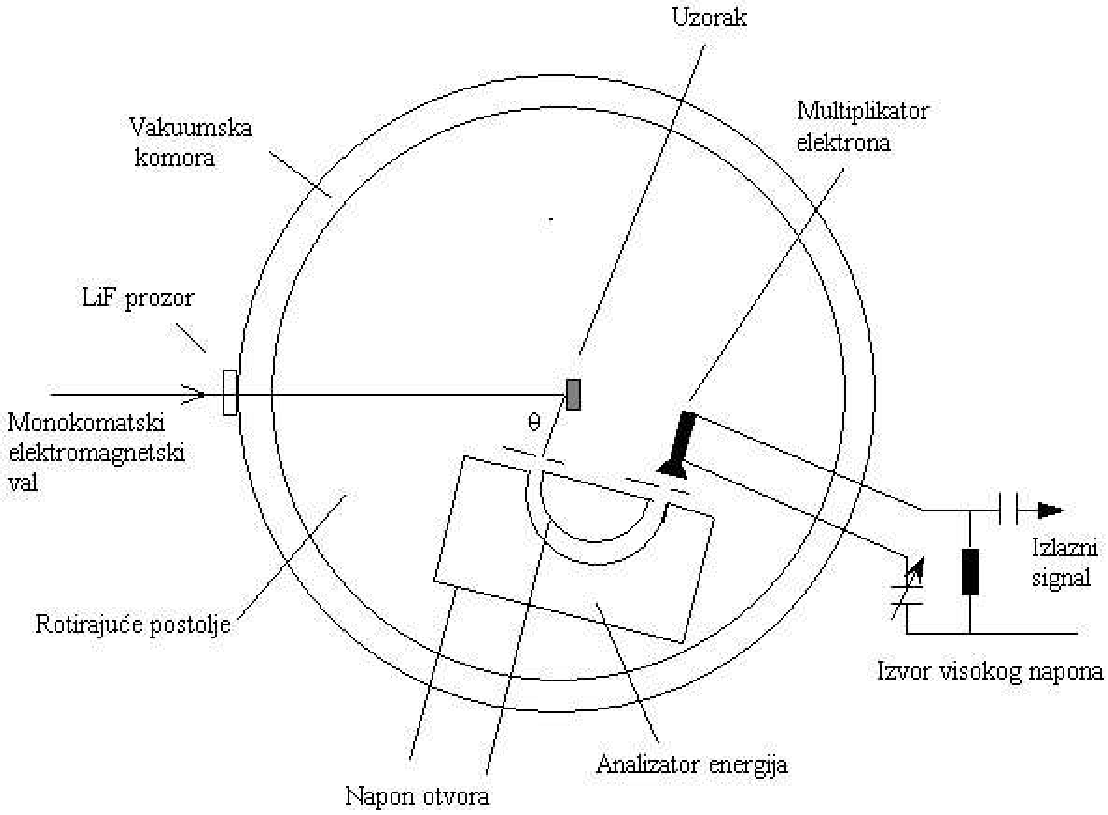
$$\min_s [\epsilon_{N-1,s}(-K_{||})] \geq 0. \tag{3.7}$$

Uobičajeno je predpostaviti da apsolutni minimum od $\epsilon_{N-1,s}$ iščezava, $\min_s \epsilon_{N-1,s} = 0$, tj. da pri fotoemisiji uvijek postoji proces kod kojeg se ionizirani podsistem nalazi u osnovnom stanju. Razlika $E_M - E(\mathbf{K}')$ je sada po (3.3) jednaka energiji pobuđenja $\epsilon_{N-1,s}$ ioniziranog podsistema. Uobičajeno je energiju ioniziranog podsistema zvati energija vezanja E_B, tj.

$$E_B = \epsilon_{N-1,s}. \tag{3.8}$$

3.2 Shematski prikaz eksperimenta

Na slici 3.3 prikazan je mjerni uređaj koji za danu polarizaciju elektromagnetskog vala u odnosu na graničnu kristalnu ravninu mjeri jakost struje fotoelektrona u ovisnosti o kutu raspršenja Θ i energiji fotoelektrona $E(\mathbf{K}) = K^2/2m$. Pokretni analizator energije fotoelektrona je ugrađen na postolje koje može rotirati, tako da se kut Θ između normale na površinu uzoraka i smjera prikupljanja elektrona može mijenjati (sl. 3.3). Energiju elektrona $E(\mathbf{K})$, odnosno iznos valnog vektora $\mathbf{K}$, određuje napon otvora u analizatoru



Slika 3.3: Shematski prikaz uređaja za kutno razlučivu fotoemisiju [37]

energije. Nakon što elektroni prođu kroz analizator energije udaraju u multiplikator elektrona koji mjeri jakost struje. U slučaju prikazanom na slici 3.3 u analizator energije ulaze samo elektroni koji se propagiraju u ravnini crteža. Elektroni koji se propagiraju u ostalim ravninama, koje čine pramen ravnina kroz smjer upadnog fotona, mogu se analizirati rotacijom uzorka i ravnine polarizacije upadnog vala za isti kut. Na taj način mogu se mjeriti jakosti fotostruje u bilo kojem prostornom kutu, za danu polarizaciju.

3.3 Hamiltonijan elektron-foton interakcije u bazi Blochovih funkcija čvrste veze

Jednočestični dio hamiltonijana elektrona u modelu čvrste veze je

$$H_0 = \sum_{l\mathbf{k}} E_l(\mathbf{k}) a^+_{l\mathbf{k}} a_{l\mathbf{k}} \tag{3.9}$$

gdje je energija l-te elektronske vrpce

$$E_l(\mathbf{k}) = E_l - 2\sum_{i=1}^{3} t_{li} cos k_i a_i \tag{3.10}$$

a

$$\psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{kR}} \varphi_l(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \tag{3.11}$$

su pripadne Blochove funkcije čvrste veze.
Neka se sistem nalazi u elektromagnetskom polju danom vektorskim potencijalom

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A_0} e^{i(\boldsymbol{\kappa r} - \omega_f t)} \tag{3.12}$$

koji zadovoljava Coulombovo baždarenje

$$\nabla \mathbf{A} = 0. \tag{3.13}$$

Hamiltonijan interakcije elektromagnetskog polja s elektronima u bazi Blochovih funkcija čvrste veze je

$$H_{e-f} = -\frac{e}{mc} \sum_{l\mathbf{k},l'\mathbf{k}} < l\mathbf{k} \mid \mathbf{Ap} \mid l'\mathbf{k}' > a^+_{l\mathbf{k}} a_{l'\mathbf{k}'} \tag{3.14}$$

gdje je $\mathbf{p} = -i\nabla$, a $a^+_{l\mathbf{k}}$ i $a_{l\mathbf{k}}$ su operatori stvaranja, odnosno poništenja elektrona.

3.4 ,,Sudden" aproksimacija

,,Sudden" aproksimacija osniva se na dvije pretpostavke.

Po prvoj sistem pod djelovanjem visokofrekventnog elektromagnetskog polja prelazi iz osnovnog stanja $\mid N>$ u pobuđeno stanje $a^{+}_{n\mathbf{K}'} \mid N-1, s>$. Uvjet na $\mid n\mathbf{K}'>$ stanje je da je stanje vrlo visoke Blochove orbitale čvrste veze i da nije sadržano u osnovnom stanju neutralnog mnogočestičnog sistema $\mid N>$. Uočimo da $a^{+}_{n,\mathbf{K}'}$ stvara elektron u $\mid n\mathbf{K}'>$ stanju kristala, a ne u vakuumu.

Druga pretpostavka je da je vjerojatnost prelaska sistema u stanje $a^{+}_{n\mathbf{K}'} \mid N-1, s>$ jednaka vjerojatnosti fotoemisije elektrona iz kristala. Dakle, ne bavimo se detaljima procesa kroz površinu kojim elektron izlazi iz kristala, ali pretpostavljamo da svaki elektron pobuđen fotonom izlazi iz kristala.

Struja fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji je po zlatnom pravilu proporcionalna vjerojatnosti prijelaza za gore opisani proces pobuđenja,

$$\begin{aligned} J_{n\mathbf{K}'}(\omega_f) \quad \propto \quad & \sum_{s} |< N-1, s \mid a_{n\mathbf{K}'} \sum_{l\mathbf{k},l'\mathbf{k}'} < l\mathbf{k} \mid e^{i\boldsymbol{\kappa r}} \mathbf{A_0 p} \mid l'\mathbf{k}'> a^{+}_{l\mathbf{k}} a_{l'\mathbf{k}'} \mid N>|^2 \\ & \delta(E_n(\mathbf{K}') + E_{N-1,s} - E_N - \omega_f). \end{aligned} \tag{3.15}$$

gdje je E_N energija osnovnog stanja sistema, a $E_{N-1,s}$ energija pobuđenog stanja sistema s N-1 elektronom. Zanemarimo li prekrivanje orbitala susjednih atoma dobijamo

$$< l\mathbf{k} \mid e^{i\boldsymbol{\kappa r}} \mathbf{A_0 p} \mid l'\mathbf{k}' >= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\boldsymbol{\kappa}} \Delta_{ll'}, \tag{3.16}$$

gdje je

$$\Delta_{ll'} = \int e^{i\boldsymbol{\kappa r}} \varphi^*_l(\mathbf{r})(\mathbf{A}_0\mathbf{p})\varphi_{l'}(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{3.17}$$

Valna dužina elektromagnetskog vala je znatno veća od dimenzija jedinične ćelije, tj. $\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r} \ll 1$. Stoga u podintegralnoj funkciji u (3.17) možemo ispustiti fazni faktor $e^{i\boldsymbol{\kappa r}}$ te je

$$\Delta_{ll'} = \int \varphi^*_l(\mathbf{r})(\mathbf{A}_0\mathbf{p})\varphi_{l'}(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{3.18}$$

Poznato je [38] da se gornji izraz može napisati u obliku

$$\Delta_{ll'} = \frac{i}{e}(E_l - E_{l'})A_0 p_{ll'}, \tag{3.19}$$

gdje su E_l i $E_{l'}$ energije elektrona u stanjima $\varphi_l(\mathbf{r})$ odnosno $\varphi_{l'}(\mathbf{r})$, a

$$p_{ll'} = e\int \varphi_l^*(\mathbf{r})(\frac{\mathbf{A_0}}{A_0}\mathbf{r})\varphi_{l'}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{3.20}$$

matrični element dipolnog prijelaza.

Za struju fotoelektrona u ovoj, dipolnoj, aproksimaciji vrijedi

$$J_{n\mathbf{K}'}(\omega_f) \propto \sum_s |< N-1, s \mid a_{n\mathbf{K}'} \sum_{ll',\mathbf{k}} \Delta_{ll'} a^+_{l\mathbf{k}} a_{l'\mathbf{k}-\boldsymbol{\kappa}} \mid N >|^2 \,\delta(E_n(\mathbf{K}') + E_{N-1,s} - E_N - \omega_f). \tag{3.21}$$

Koristeći početnu pretpostavku, $a_{n\mathbf{K}'} \mid N >= 0$, ovaj izraz prelazi u

$$J_{n\mathbf{K}'}(\omega_f) \propto \sum_s |< N-1, s \mid \sum_l \Delta_{nl} a_{l\mathbf{K}'-\boldsymbol{\kappa}} \mid N >|^2 \,\delta(E_n(\mathbf{K}') + E_{N-1,s} - E_N - \omega_f). \tag{3.22}$$

Definicijom spektralne funkcije u $(\mathbf{k}, \omega)$ prostoru

$$A^-_{mn}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \sum_s < N-1, s \mid a_{m\mathbf{k}} \mid N >< N \mid a^+_{n\mathbf{k}'} \mid N-1, s > \delta(E_{N-1,s} - E_N + \omega) \tag{3.23}$$

struja fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji može se zapisati u obliku

$$J_{n\mathbf{K}'}(E_n(\mathbf{K}') - \omega_f) \propto \sum_{ij} \Delta_{nj} A^-_{ji}(\mathbf{K}' - \boldsymbol{\kappa}, E_n(\mathbf{K}') - \omega_f)\Delta^*_{ni}. \tag{3.24}$$

Pomoću energije vezanja (3.8) gornji izraz postaje

$$J_{n\mathbf{k}_s}(\mu - E_B) \propto \sum_{ij} \Delta_{nj} A^-_{ji}(-\mathbf{k}_s, \mu - E_B)\Delta^*_{ni}, \tag{3.25}$$

tj. on predstavlja most između eksperimenta i teorije.

Za kvazijednodimenzionalne i kvazidvodimenzionalne materijale za dani $\mathbf{k}_{s\|} = \boldsymbol{\kappa}_\| - \mathbf{K}'_\| = \boldsymbol{\kappa}_\| - \mathbf{K}_\|$ mijenjajući $K_\perp$, a time i $E_n(\mathbf{K}') = (K^2_\| + K^2_\perp)/2m$ mogu se koristeći rezultat ,,sudden" aproksimacije dobiti struje fotoelektrona za različite energije ioniziranog podsistema kako je prikazano na slici 2.8. Pri tom se uzima da je pri prolazu elektrona kroz površinu energija elektrona u stanju visoke Blochove orbitale čvrste veze jednaka energiji istog elektrona nakon prolaska kroz površinu kristala $E_n(\mathbf{K}') = K^2/2m$.

Poglavlje 4

Greenova funkcija

4.1 Greenova funkcija u Blochovoj bazi čvrste veze

Jednočestična Greenova funkcija u Blochovoj bazi čvrste veze je [39, 40]

$$G(x,x') = -i < N \mid T[\Psi(x)\Psi^+(x')] \mid N >, \tag{4.1}$$

gdje su

$$\Psi^+(x) = \sum_{l\mathbf{k}} \psi^*_{l\mathbf{k}}(x) a^+_{l\mathbf{k}}, \tag{4.2}$$

$$\Psi(x) = \sum_{l\mathbf{k}} \psi_{l\mathbf{k}}(x) a_{l\mathbf{k}} \tag{4.3}$$

Heisenbergovi operatori polja, a $a^+_{l\mathbf{k}}$ i $a_{l\mathbf{k}}$ operatori stvaranja odnosno poništenja čestica u jednočestičnom Blochovu stanju $\psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (3.11). T je operator vremenskog uređenja, $x \equiv (\mathbf{r}, t)$, a $\mid N >$ je osnovno stanje sistema s N čestica.
Za potpun skup stanja $\{\mid N \pm 1, s >\}$ hamiltonijana H sustava s $N \pm 1$ česticom problem vlastitih vrijednosti i relacije potpunosti glase

$$H \mid N \pm 1, s >= E_{N\pm 1,s} \mid N \pm 1, s >, \tag{4.4}$$

$$1 = \sum_s \mid N \pm 1, s >< N \pm 1, s \mid . \tag{4.5}$$

Uvrste li se relacije potpunosti u (4.1) dobije se

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= -i \sum_s A_{s+}(\mathbf{r}) A^*_{s+}(\mathbf{r}') e^{-i(E_{N+1,s} - E_N)t} \Theta(t) \\ &+ i \sum_s A_{s-}(\mathbf{r}) A^*_{s-}(\mathbf{r}') e^{i(E_{N-1,s} - E_N)t} \Theta(-t) \end{aligned} \tag{4.6}$$

gdje su

$$A_{s+}(\mathbf{r}) =< N \mid \Psi(\mathbf{r}) \mid N + 1, s > \tag{4.7}$$

$$A_{s-}(\mathbf{r}) =< N-1,s \mid \Psi(\mathbf{r}) \mid N > . \tag{4.8}$$

Kako je $\mu = E_{N+1} - E_N$ vrijedi $E_{N+1,s} - E_N \geq \mu$ i $E_N - E_{N-1,s} < \mu$. Fourierova transformacija

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},t)e^{i\omega t}dt \tag{4.9}$$

daje

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega) = \sum_s \Big\{ \frac{A_{s+}(\mathbf{r})A^*_{s+}(\mathbf{r}')}{E_N - E_{N+1,s} + \omega + i\eta} + \frac{A_{s-}(\mathbf{r})A^*_{s-}(\mathbf{r}')}{E_{N-1,s} - E_N + \omega - i\eta} \Big\}, \tag{4.10}$$

gdje je $\eta > 0$ infinitezimalno mala veličina.

Definiramo spektralnu funkciju

$$\begin{aligned} A(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega) &= \sum_s A_{s+}(\mathbf{r})A^*_{s+}(\mathbf{r}')\delta(E_N - E_{N+1,s} + \omega) \\ &+ \sum_s A_{s-}(\mathbf{r})A^*_{s-}(\mathbf{r}')\delta(E_{N-1,s} - E_N + \omega). \end{aligned} \tag{4.11}$$

Iz izraza (4.10) slijedi

$$A(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = \frac{1}{\pi} \mid ImG(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) \mid, \tag{4.12}$$

(uočimo da u (4.11) za dani ω ne mogu obje sume biti konačne). Nadalje, iz relacija potpunosti (4.5) za mnogočestična stanja i relacija potpunosti za Blochove valne funkcije

$$\sum_{n,\mathbf{k}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi^*_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{4.13}$$

slijedi

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)d\omega = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{4.14}$$

Greenovu funkciju u $(\mathbf{k},\omega)$ prostoru definira izraz

$$G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = \int \psi^*_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega)\psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}'. \tag{4.15}$$

Pomoću (4.10) i (3.11) dobijamo

$$G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega) = \sum_s \Big\{ \frac{A^{s+}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})}{E_N - E_{N+1,s} + \omega + i\eta} + \frac{A^{s-}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})}{E_{N-1,s} - E_N + \omega - i\eta} \Big\}, \tag{4.16}$$

gdje su

$$A^{s+}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'}) =< N \mid a_{m\mathbf{k}} \mid N+1,s >< N+1,s \mid a^+_{n\mathbf{k}'} \mid N >, \tag{4.17}$$

$$A^{s-}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'}) =< N \mid a^+_{n\mathbf{k}'} \mid N-1,s >< N-1,s \mid a_{m\mathbf{k}} \mid N > . \tag{4.18}$$

Definiramo li matrične elemente spektralne matrice

$$A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = \int \psi^*_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})A(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega)\psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \tag{4.19}$$

dobijamo

$$\begin{aligned} A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega) &= \sum_s A^{s+}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})\delta(E_N - E_{N+1,s} + \omega) \\ &+ \sum_s A^{s-}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})\delta(E_{N-1,s} - E_N + \omega). \end{aligned} \tag{4.20}$$

Koristeći svojstvo potpunosti stanja sistema s $N \pm 1$ česticom dobijamo izraz

$$\int_{-\infty}^{\infty} A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)d\omega = \delta_{mn}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \tag{4.21}$$

koji je Fourierov ekvivalent izraza (4.14). Vidimo da

$$A^+_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega) = A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)\Theta(\omega-\mu) \tag{4.22}$$

daje informacije o procesima u kojima sistemu dodajemo jednu česticu, a

$$A^-_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega) = A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)\Theta(\mu-\omega) \tag{4.23}$$

govori o procesima u kojima sistemu oduzimamo česticu i povezana je izrazom (3.25) sa strujom fotoelektrona u sudden aproksimaciji. Iz izraza (4.16) slijedi

$$A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = \frac{1}{\pi} \mid ImG_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) \mid . \tag{4.24}$$

Ovaj izraz je od središnje važnosti jer pokazuje da Greenova funkcija određuje fotoemisijski spektar kristala u sudden aproksimaciji.

4.2 Greenova funkcija nesmetanog problema u Blochovoj bazi čvrste veze

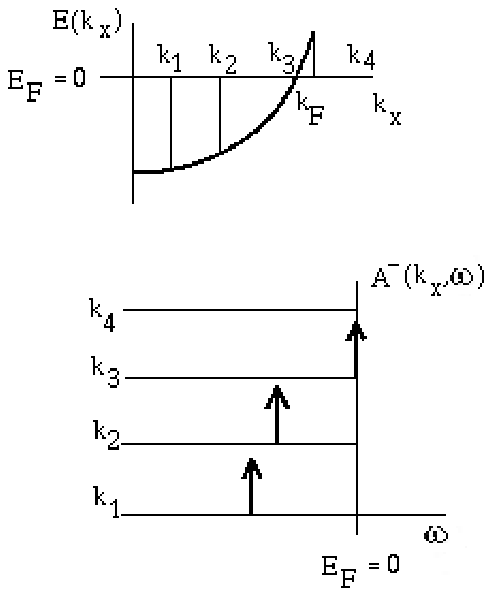
Za problem neinteragirajućih elektrona u Blochovoj bazi čvrste veze vrijedi

$$A_{s+}(\mathbf{r}) = A_{l\mathbf{k}+}(\mathbf{r}) = \psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})[1 - n_l(\mathbf{k})], \tag{4.25}$$

$$A_{s-}(\mathbf{r}) = A_{l\mathbf{k}-}(\mathbf{r}) = \psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})n_l(\mathbf{k}), \tag{4.26}$$

gdje su

$$n_l(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1, & E_l(\mathbf{k}) < E_F \\ 0, & E_l(\mathbf{k}) > E_F, \end{cases} \tag{4.27}$$



Slika 4.1: Disperzija i spektralna funkcija nesmetanog problema u Blochovoj bazi čvrste veze

zaposjednutosti stanja, a $E_l(\mathbf{k})$ su dani izrazom (3.10). Tada je Greenova funkcija nesmetanog problema

$$G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = \sum_{l\mathbf{k}} \psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi^*_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r}')G^0_l(\mathbf{k},\omega) \tag{4.28}$$

gdje je

$$G^0_l(\mathbf{k},\omega) = \frac{1-n_l(\mathbf{k})}{\omega - E_l(\mathbf{k}) + i\eta} + \frac{n_l(\mathbf{k})}{\omega - E_l(\mathbf{k}) - i\eta}. \tag{4.29}$$

Vrijedi

$$A^{0-}_l(\mathbf{k},\omega) = \delta(\omega - E_l(\mathbf{k}))n_l(\mathbf{k}). \tag{4.30}$$

Tada je struja fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji

$$J_{n\mathbf{k}}(\mu - E_B) \sim \sum_l \mid \Delta_{nl} \mid^2 A^{0-}_l(-\mathbf{k},\mu - E_B). \tag{4.31}$$

Spektralna funkcija za slučaj jedne vrpce prikazana je na slici 4.1.

4.3 Greenova funkcija u Landauovoj teoriji Fermijevih tekućina

Landau je razvio teoriju slabo pobuđenih stanja 3D sistema interagirajućih fermiona. Predpostavka Landauove teorije Fermijevih tekućina je da se može uspostaviti $1-1$ korespondencija između slabo pobuđenih stanja ovog sistema $E(\mathbf{k})$ s onima Fermijevog plina. Tada se blizu $\mid \mathbf{k} \mid= k_F$, $\omega = 0$ Greenova funkcija može zapisati u obliku [41]

$$G(\mathbf{k},\omega) = \frac{Z}{\omega - v_F(\mid \mathbf{k} \mid -k_F) + i\eta \text{sign}(\mid \mathbf{k} \mid -k_F)}. \tag{4.32}$$

k_F je Fermijev impuls definiran relacijom $E(k_F) = \mu$, a $v_F(\mid \mathbf{k} \mid -k_F)$ je razlika $E(k)-\mu$ razvijena u okolini $\mid \mathbf{k} \mid= k_F$. Koeficijent v_F je brzina pobuđenja na Fermijevoj površini, jednaka k_F/m^*, gdje je m^* efektivna masa pobuđenja. $Z = n(k_F-0)-n(k_F+0)$ je širina diskontinuiteta distribucije impulsa slabih pobuđenja $n(\mathbf{k})$ na Fermijevom impulsu.

4.4 Spektralna svojstva Luttinger-ovih tekućina

Hamiltonijan jednodimenzionalnog sistema elektrona koji međudjeluju je

$$H = H_0 + H_{forward} + H_{backward} + H_{Umklapp}. \tag{4.33}$$

H_0 je Hamiltonijan slobodnih elektrona

$$H_0 = \sum_k \epsilon(k) c^+_{ks} c_{ks}. \tag{4.34}$$

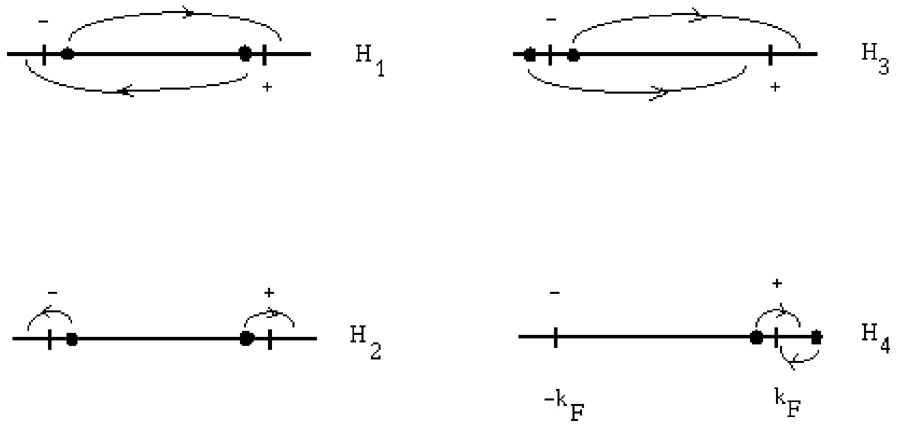
c^+_{ks} stvara elektron spina s i impulsa k.
Lineariziramo li $\epsilon(k)$ oko Fermijevih točaka dobijamo $\epsilon_r(k) = v_F(rk - k_F)$ gdje je v_F Fermijeva brzina, a $r = \pm$ daje lijevu i desnu granu za $-\infty < k < \infty$.
Energija elektronsko-šupljinskog para kreiranog operatorom gustoće čestica

$$\rho_{r,s}(p) = \sum_k c^+_{rs,k+p} c_{rs,k} = \rho^+_{rs}(-p) \tag{4.35}$$

je

$$\epsilon_r(k+p) - \epsilon_r(k) = r v_F p \tag{4.36}$$

i neovisna je o impulsu k. Stanja stvorena ovim operatorom su linearna kombinacija elektronsko-šupljinskih pobuđenja koja sva imaju istu energiju i stoga su svojstvena



Slika 4.2: Slikoviti prikaz interakcijskih članova Hamiltonijana jednodimenzionalnog sistema elektrona koji slabo međudjeluju

stanja sistema. Tada su za $p > 0$, $\rho_{+,s}(p)$ $[\rho_{-,s}(p)]$ operatori stvaranja, odnosno poništenja. Sada se H_0 može napisati na sljedeći način

$$H_0 = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{r=\pm} \sum_{p>0} \rho_{rs}(rp)\rho_{rs}(-rp) \tag{4.37}$$

preko operatora gustoće čestica.

Ostali članovi u hamiltonijanu (4.33) su interakcijski (sl. 4.2). Član koji opisuje ,,forward" raspršenje je

$$H_{forward} = H_2 + H_4, \tag{4.38}$$

gdje su

$$H_2 = \frac{1}{L} \sum_p \sum_{ss'} g_2^{ss'}(p)\rho_{+s}(p)\rho_{-s'}(-p), \tag{4.39}$$

$$H_4 = \frac{1}{2L} \sum_p \sum_{ss'} g_4^{ss'}(p)[\rho_{+s}(p)\rho_{+s'}(-p) + \rho_{-s}(p)\rho_{-s'}(-p)]. \tag{4.40}$$

Operatori ρ_{rs} uključuju operatore stvaranja i poništenja na istoj grani. Definirajmo operatore ρ_s^r koji sadrže operatore sa različitih grana,

$$\rho_s^r(p) = \sum_k c_{rs,k}^+ c_{-rs,k+p}. \tag{4.41}$$

Preko ovih operatora izraženi su ,,backward" raspršenje

$$H_{backward} = H_1 = \sum_p \sum_{ss'} g_1^{ss'}(p)\rho_s^+(p)\rho_{s'}^-(-p) \tag{4.42}$$

i Umklapp član

$$H_{Umklapp} = H_3 = \frac{1}{2L}\sum_p \sum_{ss'} g_3^{ss'}(p)[\rho_s^+(p)\rho_{s'}^+(-p) + \rho_s^-(p)\rho_{s'}^-(-p)]. \tag{4.43}$$

U gornjim izrazima konstante vezanja mogu biti ovisne o spinu:

$$g_i^{ss'}(p) = g_{i\|}\delta_{s,s'}(p) + g_{i\perp}\delta_{s,-s'}(p). \tag{4.44}$$

Uzimanjem samo „forward" raspršenja, uz navedenu linearizaciju disperzije $\epsilon(k)$, dobija se Luttingerov model koji je egzaktno rješiv [5].
Voit [7, 8] je za spektralnu funkciju u (q, ω) prostoru u ovom modelu dobio rezultat

$$A_r(k, \omega + \mu) \sim (\omega - v_s r q_r)^{\alpha - 1/2} \mid \omega - v_\rho r q_r \mid^{(\alpha-1)/2} (\omega + v_\rho r q_r)^{\alpha/2}, \tag{4.45}$$

gdje je $q_r = k - rk_F$, a ρ i s označavaju naboj i spin. Koeficijent α je

$$\alpha = (K_\rho + K_\rho^{-1} - 2)/4, \tag{4.46}$$

gdje je

$$K_{\rho,s} = \sqrt{\frac{\pi v_F + g_{4\rho,s} - g_{2\rho,s}}{\pi v_F + g_{4\rho,s} + g_{2\rho,s}}}, \tag{4.47}$$

$$g_{i\rho,s} = \lim_{p\to 0} g_{i\rho,s}(p),\ \ i = 1, ..., 4, \tag{4.48}$$

$$g_{i\rho}(p) = \frac{1}{2}[g_{i\|}(p) + g_{i\perp}(p)], \tag{4.49}$$

$$g_{is}(p) = \frac{1}{2}[g_{i\|}(p) - g_{i\perp}(p)], \tag{4.50}$$

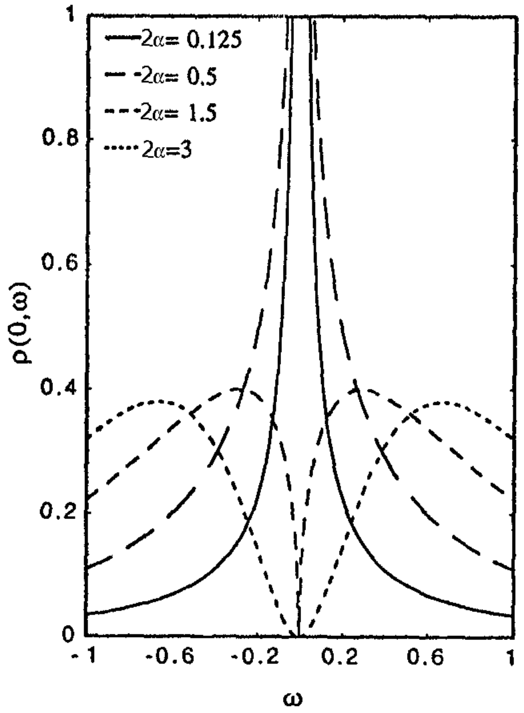
dok su

$$v_{\rho,s} = \sqrt{(v_F + g_{4\rho,s}/\pi)^2 - (g_{2\rho,s}/\pi)^2} \tag{4.51}$$

renormalizirane brzine nabojskih i spinskih kolektivnih modova.
Spektralna funkcija može imati dva singulariteta ovisno o interakcijski ovisnom eksponentu α pa dolazi do odvajanja nabojske i spinske grane. Za $\alpha < 0.5$ dolazi do razdvajanja nabojskih i spinskih modova dok za $\alpha > 1$ spektralna funkcija nema singulariteta. Zanimljivo je pogledati slučaj $q_r = 0$. Tada je spektralna funkcija (sl. 4.3)

$$A(k_F, \omega + \mu) \sim \mid \omega \mid^{2\alpha - 1}. \tag{4.52}$$

Za $\alpha < 1/2$ spektralna funkcija divergira u $\omega = 0$ dok za $\alpha > 1/2$ monotono pada na



Slika 4.3: Spektralna funkcija $A(k_F, \omega + \mu) = \rho(0, \omega)$ za različite α [8].

nulu.

Koeficijent α je mali u odnosu na jedinicu za lokalizirane interakcije. Tada u niskoenergijskom području dominira razdvajanje nabojskih i spinskih modova kao svojstvenih stanja sistema. To je slučaj npr. kod $U = \infty$ Hubbard-ovog modela za kojeg je $\alpha = 0.125$.

U slučaju interakcije dugog dosega kao što je Coulombov potencijal $V(q) \sim 1/q^2$ dolazi do jakih korelacija, α je velik, te razdvajanje spinskih i nabojskih modova ima mali značaj.

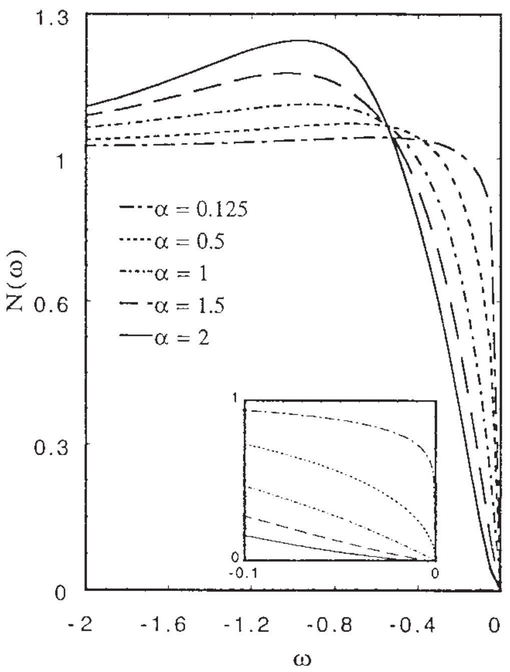
Voit je izračunao i jednočestičnu gustoću stanja

$$N(\omega) = \sum_r \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_r}{2\pi} \rho_r(q_r, \omega), \tag{4.53}$$

gdje je $\rho_r(q_r, \omega) = A_r(rk_F + q_r, \omega + \mu)$ spektralna funkcija. Dobijena gustoća stanja prikazana je na slici 4.4, a asimptotski se ponaša za $\omega \to 0$ kao

$$N(\omega) \sim \mid \omega \mid^{\alpha} . \tag{4.54}$$

Dobijeni rezultat je u niskoenergijskom području u skladu s rezultatima eksperimenta za veliki α koji ukazuje na jaku i dugodosežnu interakciju. U slučaju velikog α gustoća



Slika 4.4: Gustoća stanja Luttingerovog modela za različite α [8].

stanja ima maksimum za energije koje se ne mogu točno odrediti u ovom modelu. Spektralna težina se pomiče na više energije ali se ne može ovim modelom odrediti jesu li te energije izvan ili unutar vodljive vrpce. Poistovjećivanje dobijenog maksimuma s onim u kutno integriranom spektru nije dopušteno jer se Luttingerov model ne odnosi na energije reda veličine širine vrpci. Stoga se moraju uzeti potpuniji modeli da bi se objasnio spektralni maksimum.

Schönhammer i Meden također su proračunali spektralnu funkciju i dobili rezultat [43]

$$A_{r,\rho,s}(k_F,\omega) \sim \mid \omega \mid^{\gamma_\rho+\gamma_s-1},\ \omega \to 0, \tag{4.55}$$

gdje su $\gamma_{\rho,s}$ koeficijenti ovisni o v(q), u(q) dobijenim Fourierovom transformacijom interakcije

$$V_{ss'}(|x-x'|) = V(x-x') + ss'U(|x-x'|), \tag{4.56}$$

na sljedeći način

$$\sinh^2\Theta_{\rho,s} = \gamma_{\rho,s}e^{-\lambda_{\rho,s}|q|}, \tag{4.57}$$

$$\tanh(2\Theta_\rho) = -\frac{v(q)}{v(q) + 2\pi v_F}, \tag{4.58}$$

$$\tanh(2\Theta_s) = -\frac{u(q)}{u(q) + 2\pi v_F}. \tag{4.59}$$

Također, integracijom po različitim k-ovima

$$A_{r,\rho,s} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} A_{r,\rho,s}(k,\omega) \tag{4.60}$$

dobije se spektralna funkcija

$$A_{r,\rho,s}(\omega) \sim |\omega|^{\gamma_\rho + \gamma_s}, \ \omega \to 0. \tag{4.61}$$

Spektralnu funkciju u cijelom niskofrekventnom području dobili su numeričkom integracijom u slučaju odbojne interakcije neovisne o spinu $u(q) = 0$, $v(q) > 0$ ($\gamma_s = 0$). Pokazalo se da je za velike γ_ρ spektralna težina u niskoenergijskom režimu jako reducirana u odnosu na onu za male γ_ρ. Tako fotoemisijski eksperimenti sugeriraju veliki γ_ρ koji je indikacija jake dugodosežne interakcije Coulombovog tipa. Slično je dobio i Voit. Kako jednodimenzionalni modeli s kratkodosežnom interakcijom daju $\alpha \ll 1$, a eksperimenti na kvazijednodimenzionalnim vodičima sugeriraju veliku vrijednost eksponenta α dugodosežna Coulombova interakcija mora imati veliki značaj u ovim materijalima.

Stoga Schönhammer, Meden i Kopietz uvode realističniji model s paralelnim lancima između kojih nema prijelaza elektrona, a elektroni imaju 3D Coulombovo međudjelovanje. Pokazuju da je ovakav 3D sistem Luttingerova tekućina. Naime, ovo je problem vezanih Luttingerovih modela i ekzaktno je rješiv [42]. Dobijaju spektralnu funkciju [10]

$$A(\omega) \sim |\omega|^{\gamma_{cb}}, \tag{4.62}$$

s anomalnim eksponentom γ_{cb} u eksperimentalnom području. Sam koeficijent je naravno određen interakcijom i to na sljedeći način

$$\gamma_{cb} = \frac{1}{2} \lim_{q_\| \to 0} < 2s^2(\mathbf{q}) >, \tag{4.63}$$

gdje je

$$s^2(\mathbf{q}) = [\tilde{v}_F(\mathbf{q}) - v_F]^2 / 4\tilde{v}_F(\mathbf{q}) v_F, \tag{4.64}$$

$$v_F(\mathbf{q}) = v_F[1 + 2U(q_\|, \mathbf{q}_\perp)/\pi v_F]^{1/2} \tag{4.65}$$

renormalizirana Fermijeva brzina, a

$$U(q_{\|}, \mathbf{q}_\perp) = e^2 \int dx \sum_{\mathbf{r}_\perp} \frac{e^{-i[q_{\|}x + \mathbf{q}_\perp \mathbf{r}_\perp]}}{\sqrt{x^2 + \mathbf{r}_\perp^2}} \tag{4.66}$$

Fourierova transformacija Coulombove interakcije. U nastavku analize isti autori proračunali su ovisnost spektralne funkcije o valnom broju [44]

$$A_+^-(k,\omega) \sim \Theta(v_F[k-k_F]-\omega)(v_F[k-k_F]-\omega)^{\gamma_{cb}-1/2} \tag{4.67}$$

u slučaju $\gamma_{cb} < 1/2$ te

$$A_+^-(k,\omega) \sim \Theta(-\omega)(-\omega)^{\gamma_{cb}-1} \tag{4.68}$$

u slučaju $1/2 < \gamma_{cb} < 1$. Za anomalnu dimenziju veću od jedinice nema ovih divergencija i spektrima dominira široki nabojski peak. Ovi rezultati su analogni onima dobijenim u 1D slučaju.

Takav model proučavan je i prije [45, 46, 47]. Barišić i Botrić promatraju kubičnu rešetku paralelnih lanaca na udaljenosti $d_\perp$ većoj od udaljenosti čvorova duž lanaca $d_{\|}$ [45, 46]. Elektronima je dozvoljeno gibanje samo duž lanaca. Krećući od trodimenzionalne Coulombove interakcije u dugovalnom limesu čiji je matrični element

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2e^2}{d_\perp^2 \mathbf{q}^2 v_F} \tag{4.69}$$

Barišić je pokazao da je „forward" raspršenje duž lanaca

$$g_2 \approx \frac{e^2}{\pi v_F} \ln \frac{E_F}{\omega_{pl}}, \;\; v_F q_{\|} < \omega_{pl}, \tag{4.70}$$

gdje je $E_F = v_F k_F$, a $\omega_{pl} = 8e^2 v_F / d_\perp^2$ [45]. Koristeći ovaj rezultat parketnom sumacijom dobija da $2k_F - CDW$ i $2k_F - SDW$ korelacijske funkcije ($\tilde{P}$) imaju uobičajeno [5, 6] potencijsko ponašanje [45]

$$\tilde{P} \sim |\omega|^{-\frac{e^2}{\pi v_F} \ln \frac{E_F}{\omega_{pl}}}, \;\; \omega < \omega_{pl}. \tag{4.71}$$

Isti rezultat dobijaju Botrić i Barišić bozonizacijom uzimajući samo „forward" raspršenje [46].

Schulz [47] promatra kubičnu rešetku N paralelnih lanaca kojima se gibaju elektroni, dok je gibanje elektrona okomito na lance zabranjeno. Provodi bozonizacijsku metodu za vezane lance promatrajući samo „forward" raspršenje tj. za generalizirani Luttingerov model. Rezultate primjenjuje na model s Coulombovom interakcijom za koju je

$$g_{2\rho}(\mathbf{q}) = g_{4\rho}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{a^2}\frac{1}{\varepsilon_{\parallel} q_{\parallel}^2 + \varepsilon_{\perp}\mathbf{q}_{\perp}^2}, \tag{4.72}$$

gdje su $\varepsilon_{\parallel}$ i $\varepsilon_{\perp}$ dielektrične konstante u longitudinalnom i transverzalnom smjeru. Zanimljivo je pogledati njegov asimptotski rezultat za Greenovu funkciju

$$G_r(xt) \simeq i\Theta(t)t^{-(1+C^{\rho}/4+C^{s}/4)},\ x \simeq 0 \tag{4.73}$$

gdje je x u smjeru lanaca i $C^{\rho,s} = C_{-}^{\rho,s} + C_{+}^{\rho,s}$, te korelacijske funkcije

$$R_i \approx t^{-2+\alpha_i},\ t \gg x/v_F, \tag{4.74}$$

s

$$\alpha_{CDW} = \alpha_{SDW_z} = -C_{+}^{\rho} - C_{+}^{s} \tag{4.75}$$

$$\alpha_{SDW_x} = \alpha_{SDW_y} = -C_{+}^{\rho} - C_{-}^{s}. \tag{4.76}$$

Za Coulombovu interakciju neovisnu o spinu je je $C_r^s = 0$ te

$$C_r^{\rho} = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2 q_{\perp}\left[\left(1 + \frac{1}{\varepsilon_{\perp}}\left(\frac{\omega_{pl}}{v_F \mathbf{q}_{\perp}}\right)^2\right)^{-r/2} - 1\right], \tag{4.77}$$

gdje je $\omega_{pl}^2 = 8e^2 v_F/a^2$. Za $(1/\varepsilon_{\perp})(\omega_{pl}a/\pi v_F)^2$ malo podintegralna funkcija se može razviti vodeći na

$$C_r^{\rho} = 1 + \frac{r\pi}{8\varepsilon_{\perp}}\left(\frac{\omega_{pl}a}{\pi v_F}\right)^2 \ln\left[\frac{1}{4\varepsilon_{\perp}}\left(\frac{\omega_{pl}a}{\pi v_F}\right)^2\right] \tag{4.78}$$

Ovako dobijen rezultat za korelacijske funkcije se slaže s rezultatom kojeg su dobili Barišić i Botrić.

Posebno je zanimljivo promotriti slučaj $t_{\perp} \neq 0$ jer se varirajući $t_{\perp}$ može pratiti prijelaz između Luttingerovih i Fermijevih tekućina. Schönhammer, Meden i Kopietz [10, 44] pokazuju da se za mali $t_{\perp} \neq 0$ pojavljuje i luttingerovsko ponašanje iako spektralna težina kvazičestice premda znatno smanjena ne nestaje.
Zaključuju da je prijelaz elektrona s lanca na lanac irelevantan kad su u pitanju eksperimenti.

Poglavlje 5

Greenova matrica elektrona u kristalu s većim brojem elektronskih vrpci u aproksimaciji nasumičnih faza

5.1 RPA dielektrična matrica

RPA zasjenjena Coulombova interakcija slijedi iz Dysonove jednadžbe [39] koja je u dijagramatskom obliku prikazana na slici 5.1. Njen analitički zapis u direktnom prostoru glasi

$$\bar{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int d\mathbf{r_1} d\mathbf{r'_1} V(\mathbf{r} - \mathbf{r_1}) \Pi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r'_1}, \omega) \bar{V}(\mathbf{r'_1}, \mathbf{r}', \omega) \tag{5.1}$$

gdje je

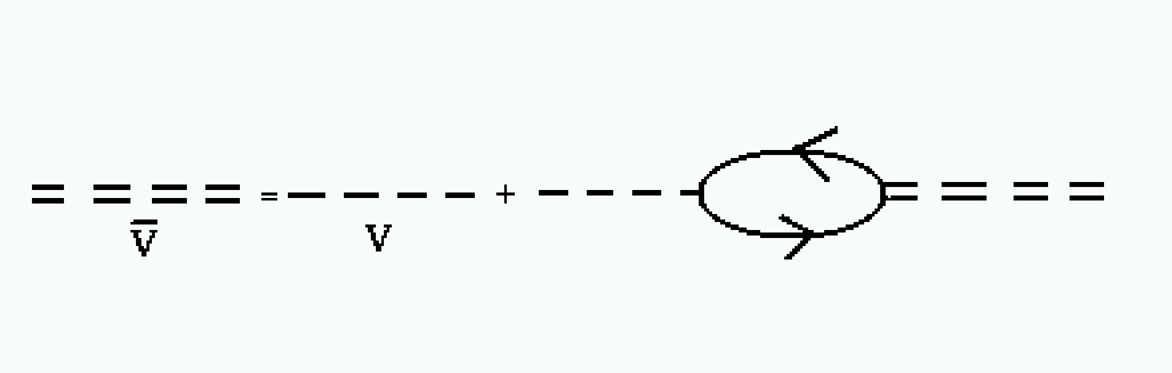
$$\Pi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r'_1}, \omega) = -\frac{i}{\pi} \int d\omega' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega + \omega') G_0(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \omega') \tag{5.2}$$

RPA vlastiti polarizacijski dijagram. Pomoću (4.28) i (5.2) jednadžba (5.1) se transformira u sustav algebarskih jednadžbi,

$$\sum_{l_3 l'_3} [\delta_{l_3 l_1} \delta_{l'_3 l'_1} - V_{l_1 l'_3 l'_1 l_3}(\mathbf{q}) \Pi_{l_3 l'_3}(\mathbf{q}, \omega)] \bar{V}_{l_3 l_2 l'_3 l'_2}(\mathbf{q}, \omega) = V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2}(\mathbf{q}), \tag{5.3}$$

za matrične elemente zasjenjenog potencijala u Blochovoj bazi čvrste veze [49],

$$\bar{V}_{l_1 l_2 l'_1 l'_2}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \varphi^*_{l_1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \varphi^*_{l_2}(\mathbf{r}') \bar{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \varphi_{l'_1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \varphi_{l'_2}(\mathbf{r}'). \tag{5.4}$$



Slika 5.1: RPA zasjenjena interakcija

$V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2}(\mathbf{q})$ su odgovarajući matrični elementi nezasjenjene Coulombove interakcije, a dobiju se zamjenom zasjenjene interakcije $\bar{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ u izrazu (5.4) s $e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$. Konačno,

$$\Pi_{l,l'}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{[1 - n_l(\mathbf{k})] n_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\omega + E_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_l(\mathbf{k}) + i\eta} - \frac{n_l(\mathbf{k})[1 - n_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\omega + E_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_l(\mathbf{k}) - i\eta} \right\}, \tag{5.5}$$

su RPA vlastiti polarizacijski dijagrami u $(\mathbf{q}, \omega)$ prostoru. Koeficijenti s lijeve strane jednadžbe (5.3),

$$\varepsilon_{l_1 l'_1, l_3 l'_3} \equiv \delta_{l_3 l_1} \delta_{l'_3 l'_1} - V_{l_1 l'_3 l'_1 l_3}(\mathbf{q}) \Pi_{l_3 l'_3}(\mathbf{q}, \omega), \tag{5.6}$$

određuju dielektričnu matricu u reprezentaciji čvrste veze. Determinanta ove matrice, $\varepsilon_m(\mathbf{q}, \omega)$, naziva se mikroskopska dielektrična funkcija. Ona je nazivnik svih matričnih elemenata zasjenjene interakcije, a njene nule određuju kolektivna i nekoherentna pobuđenja sistema [48, 50, 49].

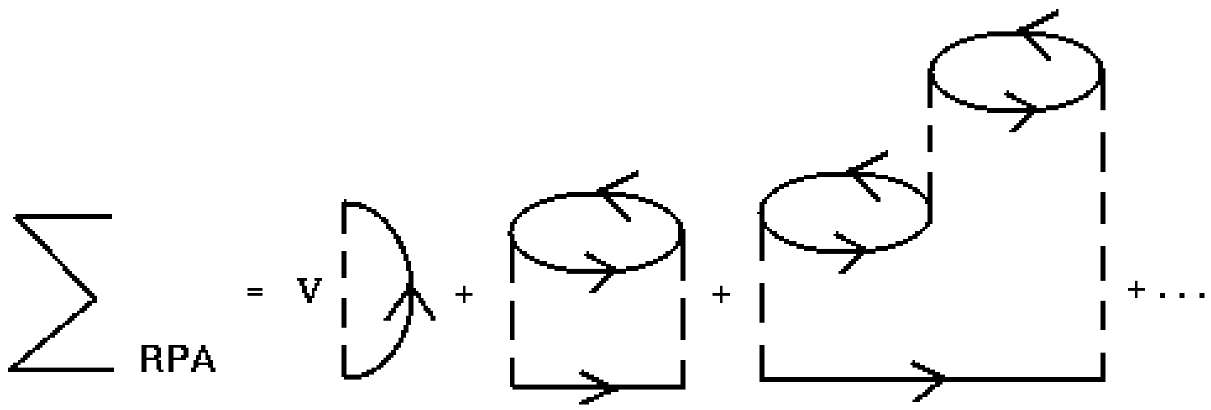
5.2 RPA Greenova matrica

Polazimo od Dysonove jednadžbe za Greenovu funkciju u realnom prostoru [39]

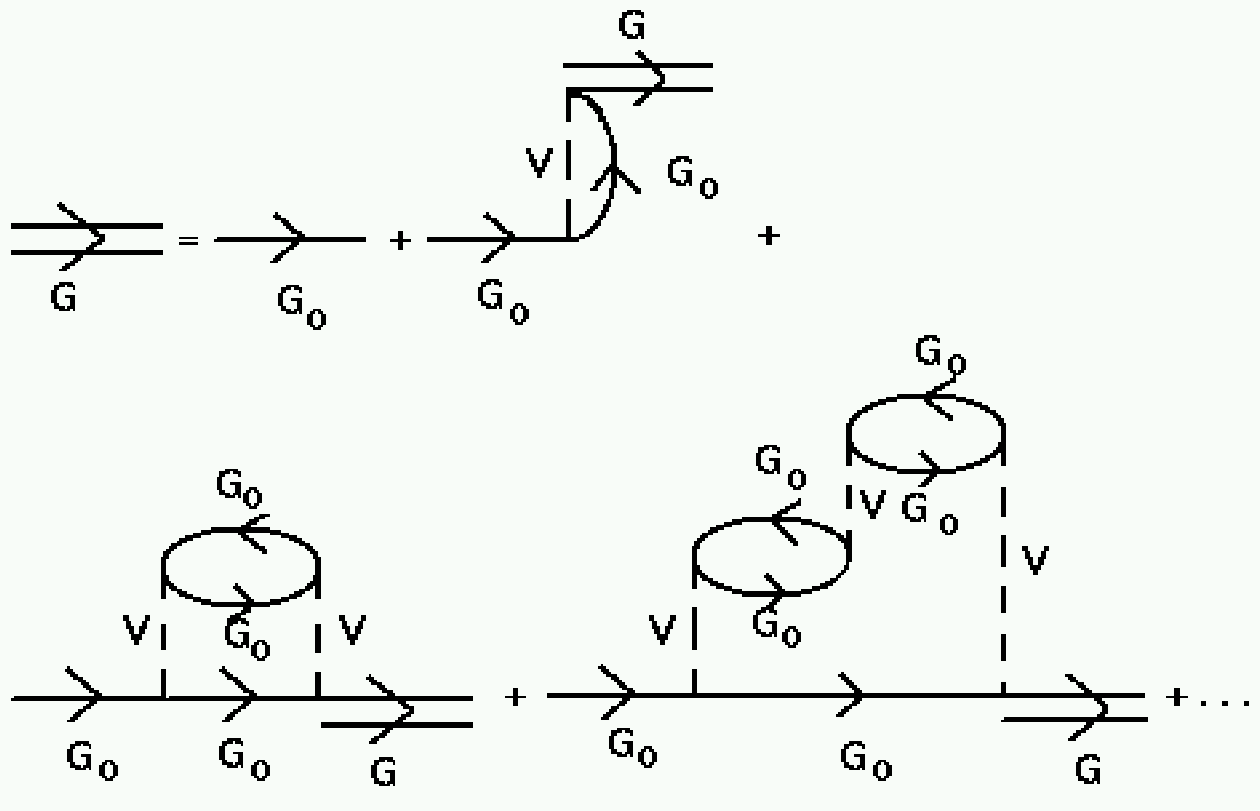
$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \int d\mathbf{r_1} d\mathbf{r'_1} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r_1}, \omega) \Sigma(\mathbf{r_1}, \mathbf{r'_1}, \omega) G(\mathbf{r'_1}, \mathbf{r}', \omega), \tag{5.7}$$

u kojoj vlastitu energiju $\Sigma(\mathbf{r_1}, \mathbf{r'_1}, \omega)$ računamo u aproksimaciji nasumičnih faza (RPA) (5.2). Dysonova jednadžba (5.7) prikazana je na slici 5.3.

Dysonova jednadžba za Greenovu funkciju zapisana pomoću zasjenjene Coulombove interakcije glasi



Slika 5.2: RPA vlastita energija



Slika 5.3: Greenova funkcija

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) &= G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)+\frac{i}{2\pi}\int G_0(\mathbf{r},\mathbf{r_1},\omega)G_0(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}',\omega-\omega') \\
&\quad [\bar{V}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}',\omega')-V(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}')]G(\mathbf{r_1}',\mathbf{r}',\omega)d\mathbf{r_1}d\mathbf{r_1}'d\omega' \\
&+ \frac{i}{2\pi}\int G_0(\mathbf{r},\mathbf{r_1},\omega)G_0(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}',\omega-\omega')V(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}')e^{i\omega'\delta}G(\mathbf{r_1}',\mathbf{r}',\omega)d\mathbf{r_1}d\mathbf{r_1}'d\omega'
\end{aligned}
\tag{5.8}
$$

Ovu integralnu jednadžbu možemo transformirati u sustav algebarskih jednadžbi za matrične elemente Greenove matrice u Blochovoj bazi čvrste veze. Korištenjem potpunosti Blochovih valnih funkcija (4.13) i periodičnosti zasjenjenog potencijala dobija se sustav linearnih jednadžbi

$$
\begin{aligned}
G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) &= \delta_{mn}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}G_m^0(\mathbf{k},\omega)+\frac{i}{2\pi N}G_m^0(\mathbf{k},\omega)\sum_{ll_1\mathbf{q}}\Big\{V_{ml_1l_1l}(\mathbf{q})\times \\
&\times \Big[-\int d\omega' G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')+\int d\omega' e^{i\omega'\delta}G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')\Big] \\
&+ \int d\omega'\bar{V}_{ml_1l_1l}(\mathbf{q},\omega')G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')\Big\}G_{ln}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega).
\end{aligned}
\tag{5.9}
$$

gdje su

$$
G_l^0(\mathbf{k},\omega)=\frac{1-n_l(\mathbf{k})}{\omega-E_l(\mathbf{k})+i\eta}+\frac{n_l(\mathbf{k})}{\omega-E_l(\mathbf{k})-i\eta} \tag{5.10}
$$

matrični elementi Greenove matrice nesmetanog problema.

Integracijom članova uz nezasjenjeni potencijal po ω',

$$
\int d\omega' G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')=-i\pi+2i\pi n_l(\mathbf{k}+\mathbf{q}), \tag{5.11}
$$

$$
\int d\omega' e^{i\omega'\delta}G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')=2i\pi n_l(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \tag{5.12}
$$

dobija se sustav linearnih jednadžbi

$$
\begin{aligned}
G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) &= \delta_{mn}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}G_m^0(\mathbf{k},\omega)+\frac{i}{2\pi N}G_m^0(\mathbf{k},\omega)\sum_{ll_1\mathbf{q}}\Big[i\pi V_{ml_1l_1l}(\mathbf{q}) \\
&+ \int d\omega'\bar{V}_{ml_1l_1l}(\mathbf{q},\omega')G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')\Big]G_{ln}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega).
\end{aligned}
\tag{5.13}
$$

Sustav ima netrivijalno rješenje za $\mathbf{k}=\mathbf{k}'$.

5.3 RPA Greenova funkcija u „jellium” modelu

„Jellium” model često se koristi da bi se prikazali efekti elektron-elektron interakcije te da bi se ispitale različite aproksimacije. Tako su Hedin i Lundqvist računali Greenovu funkciju u „jellium” modelu zanemarujući „vertex” korekcije, uz očekivanje da njihov glavni utjecaj neće biti kvalitativan već samo kvantitativan [11, 12, 13]. Polaze od Dysonove jednadžbe za Greenovu funkciju

$$G(\mathbf{k},\omega) = G_0(\mathbf{k},\omega) + G_0(\mathbf{k},\omega)\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega), \tag{5.14}$$

gdje je

$$\Sigma(\mathbf{k},\omega) = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^4 \int e^{i\omega'\delta} W(\mathbf{q},\omega) G_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega+\omega') d\mathbf{k}' d\omega' \tag{5.15}$$

vlastita energija. Uzme li se $W = 0$ dobije se Hartreejeva aproksimacija. Tada je $\Sigma_H = 0$, a Greenova funkcija je jednaka Greenovoj funkciji nesmetanog problema. Uzme li se $W = V = \frac{4\pi e^2}{q^2}$ dobije se Hartree-Fockova aproksimacija. Tada Greenova funkcija ima isti oblik kao i Greenova funkcija nesmetanog problema s tim da je

$$E^{HF}(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{2\pi}\left[2 + \frac{k_F^2 - k^2}{k_F k} \ln\left|\frac{k_F + k}{k_F - k}\right|\right]. \tag{5.16}$$

$E^{HF}(\mathbf{k})$ ima beskonačnu derivaciju za $k = k_F$ pa gustoća stanja nestaje. Uzrok tome je divergencija Fourierovog transformata dugodosežne Coulombove interakcije. Stoga Hedin i Lundqvist idu korak dalje i uzimaju zasjenjenu Coulombovu interakciju $W = V\varepsilon^{-1}$, gdje je

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\omega) = 1 + \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 - \omega_1^2(\mathbf{q})} \tag{5.17}$$

njihov izbor za dielektričnu funkciju, a

$$\omega_1^2(\mathbf{q}) = \omega_{pl}^2 + \frac{16}{3}q^2 + q^4 \tag{5.18}$$

frekvencija plazmonskih pobuđenja. Dielektrična funkcija (5.17) reproducira osnovne karakteristike potpune dielektrične funkcije koja u sebi ima i elektronsko-šupljinska pobuđenja jer je $Im[1/\varepsilon_{RPA}(\mathbf{q},\omega)]$ mnogo manje za elektronsko-šupljinska nego za plazmonska pobuđenja, a za malo q i za $\omega > \omega_{pl}$ imaju isto ponašanje. Dakle, uzimaju samo plazmonska, a zanemaruju elektronsko-šupljinska pobuđenja u dielektričnoj funkciji. Nakon integracije po frekvencijama dobijaju

$$\Sigma(\mathbf{k},\omega) = Re\Sigma(\mathbf{k},\omega) + iIm\Sigma(\mathbf{k},\omega), \tag{5.19}$$

gdje je $Im\Sigma(\mathbf{k},\omega) = 0$ za $E_F - \omega_{pl} < \omega < E_F + \omega_{pl}$, te numeričkim proračunom pokazuju da u tom području postoji jedinstveno rješenje $E(\mathbf{k})$ jednadžbe

$$E(\mathbf{k}) = k^2/2m + Re\Sigma(\mathbf{k}, E(\mathbf{k})). \tag{5.20}$$

Tada je $E(\mathbf{k})$ pol Greenove funkcije koji odgovara uobičajenoj kvazičestici pa nju na tom području možemo zapisati na sljedeći način

$$G(\mathbf{k},\omega) = \frac{Z(\mathbf{k})}{\omega - E(\mathbf{k})}, \tag{5.21}$$

gdje je

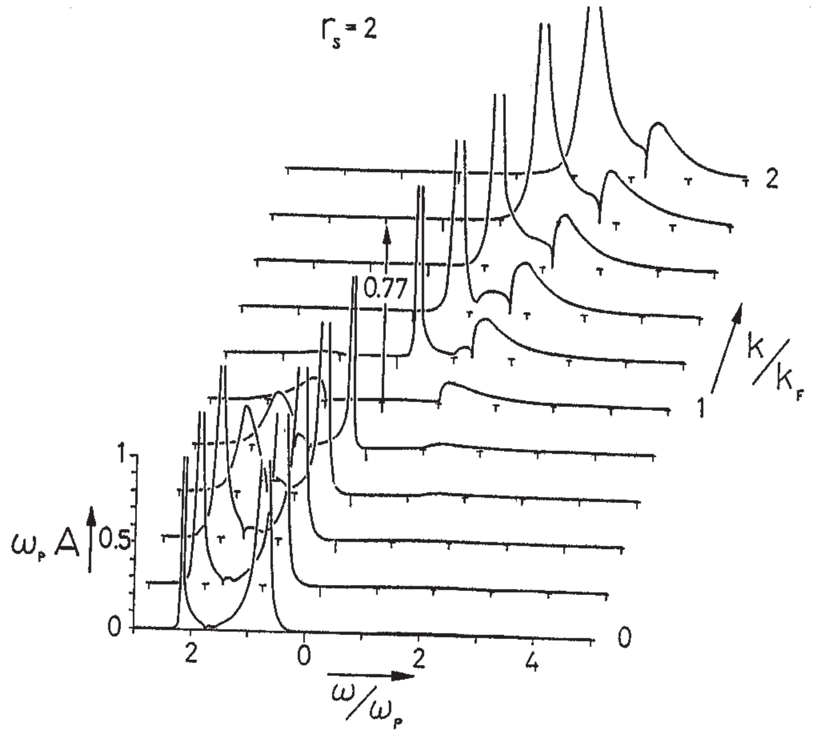
$$Z(\mathbf{k}) = \Big(1 - \partial Re\Sigma(\mathbf{k}, E(\mathbf{k}))/\partial\omega\Big)^{-1}. \tag{5.22}$$

Pripadna spektralna funkcija jednaka je

$$A(\mathbf{k},\omega) = Z(\mathbf{k})\delta(\omega - E(\mathbf{k})). \tag{5.23}$$

Za $k \neq k_F$ postoje još dva rješenja jednadžbe (5.20) na koja prelazi dio spektralne težine kvazičestice. Jedno od njih ima energiju manju od $k^2/2m - \omega_{pl}$ i odgovara novom pobuđenju tzv. plazmaronu.

Numerički su Hedin i Lundqvist dobili kvalitativno isti rezultat za spektralnu funkciju kad su uzeli Lindhardovu dielektričnu funkciju čime su pokazali da plazmoni dominantno određuju tu funkciju [12].



Slika 5.4: Spektralna funkcija $A(k,\omega)$ za $\hbar\omega_{pl} = 1.225Ry$ [12].

Poglavlje 6

Model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom

Kvazijednodimenzionalni kristali sastavljeni su od velikih planarnih molekula koje tvore lance okomite na ravnine tih molekula. Ravnine u kojima leže te molekule na mnogo su manjim udaljenostima nego lanci. Preklapanje valnih funkcija u smjeru lanaca dovodi do lakog gibanja elektrona duž lanaca, u odnosu na gibanje okomito na lance pa je gibanje elektrona gotovo jednodimenzionalno.
Uzet ćemo model $N_a N_c$ paralelnih lanaca u pravokutnoj rešetci duž kojih se gibaju elektroni u kojem postoji jedna elektronska vrpca po lancu, nema preskakanja elektrona s lanca na lanac i postoji Coulombovo međudjelovanje elektrona na istom i na različitim lancima.
U ovom poglavlju ćemo nakon kratkog pregleda dielektrične funkcije izračunati spektralnu funkciju kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom.

6.1 Dielektrična funkcija i pobuđenja

Dysonova jednadžba (5.3) za model kristala s jednom vrpcom glasi

$$[1 - V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q},\omega)]\bar{V}(\mathbf{q},\omega) = V(\mathbf{q}). \tag{6.1}$$

Matrični element nezasjenjene Coulombove interakcije u bazi jednoelektronskih funkcija čvrste veze u dugovalnoj granici ($\mathbf{q} \to 0$) je

$$V(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}\neq 0} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \frac{e^2}{R} + U, \tag{6.2}$$

gdje je $\mathbf{R}$ vektor rešetke, a

$$U = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \varphi^*(\mathbf{r})\varphi^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{\mid \mathbf{r} - \mathbf{r}' \mid} \varphi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}') \tag{6.3}$$

matrični element unutaratomske interakcije. U dugovalnom limesu ($\mathbf{q} \to 0$) doprinos U se može zanemariti jer doprinos od sumacije preko rešetke divergira,

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{v_0 q^2}. \tag{6.4}$$

Ovdje je v_0 volumen elementarne ćelije.

Zbog predpostavke da nema preskakanja elektrona s lanca na lanac jednoelektronski spektar ovisi samo o komponenti valnog vektora duž lanaca $k_\parallel$ pa jednoelektronsku energiju mjerenu od Fermijeve energije u pristupu čvrste veze možemo zapisati u obliku

$$E_0(\mathbf{k}) = E_0(k_\parallel) = -2t_0(\cos k_\parallel b - \cos k_F b), \tag{6.5}$$

gdje je b konstanta rešetke duž lanca.

Polarizacijski dijagram (5.5) također ovisi samo o projekciji valnog vektora u smjeru lanaca, tj.

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{N_b} \sum_{k_\parallel = -\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \left\{ \frac{[1 - n(k_\parallel)] n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega + E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel) + i\eta} - \frac{n(k_\parallel)[1 - n(k_\parallel + q_\parallel)]}{\omega + E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel) - i\eta} \right\}, \tag{6.6}$$

gdje je N_b broj elementarnih ćelija duž lanca, a

$$E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel) = 4t_0 \sin \frac{2k_\parallel + q_\parallel}{2} b \sin \frac{q_\parallel b}{2} \tag{6.7}$$

je energija elektronsko-šupljinskog pobuđenja. Zamjenom $k_\parallel \to -k_\parallel - q_\parallel$ u prvom članu pod znakom sume i korištenjem simetrije kristala na operaciju inverzije dobije se

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \Pi(q_\parallel, \omega) = \frac{4}{N_b} \sum_{k_\parallel = -\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \frac{[1 - n(k_\parallel + q_\parallel)] n(k_\parallel)[E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel)]}{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - [E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel)]^2}. \tag{6.8}$$

Energije elektronsko-šupljinskih pobuđenja koje ulaze u polarizacijski dijagram (6.8) prikazane su na slikama 6.2 i 6.3.

U našoj analizi je pogodno zadržati diskretnost valnih vektora ovdje parametriziranih uobičajenim izborom Born-von Karman-ovih valnih vektora za koje je

$$k_i = n_i \frac{2\pi}{L}, \; n_i \in Z, \tag{6.9}$$

gdje je L brid kocke kristala. Energije pobuđenja jednake su nul točkama mikroskopske dielektrične funkcije

$$\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega) = 1 - V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q},\omega). \tag{6.10}$$

U ω-ravnini razlikujemo dvije vrste pobuđenja [51], nekoherentna i kolektivna. Ako je energija pobuđenja $\Omega(k_{\|},\mathbf{q})$ mikroskopski blizu energiji odgovarajućeg elektronsko-šupljinskog pobuđenja $\left(\Omega(k_{\|},\mathbf{q}) - \mid E_0(k_{\|}+q_{\|}) - E_0(k_{\|}) \mid \propto \frac{1}{L}\right)$ takvo pobuđenje nazivamo nekoherentnim. Kada pak energija kolektivnog pobuđenja nije mikroskopski blizu energiji odgovarajućeg elektronsko-šupljinskog pobuđenja, govorimo o kolektivnom pobuđenju.

Obično je razlika energija kolektivnog pobuđenja i odgovarajućeg elektronsko-šupljinskog pobuđenja istog reda veličine kao i druge relevantne veličine recimo npr. širina vrpce. Energija nekoherentnog pobuđenja se nalazi između energija dvaju susjednih elektronsko-šupljinskih pobuđenja, tj.

$$\Omega(k_{\|},\mathbf{q}) = E_0(k_{\|},q_{\|}) + \Theta(k_{\|},\mathbf{q})\Delta E_0(k_{\|},q_{\|}), \tag{6.11}$$

gdje je

$$E_0(k_{\|},q_{\|}) = \mid E_0(k_{\|}+q_{\|}) - E_0(k_{\|}) \mid \tag{6.12}$$

energija elektronsko šupljinskog pobuđenja, a

$$\Delta E_0(k_{\|},q_{\|}) = E_0(k_{\|}+\frac{2\pi}{L},q_{\|}) - E_0(k_{\|},q_{\|}) \tag{6.13}$$

razlika energija dvaju susjednih elektronsko-šupljinskih pobuđenja. Funkcija

$$0 < \Theta(k_{\|},\mathbf{q}) < 1 \tag{6.14}$$

pokazuje koliki je pomak nekoherentnog pobuđenja $\Omega(k_{\|},\mathbf{q})$ u odnosu na elektronsko-šupljinsko pobuđenje $E_0(k_{\|},q_{\|})$ [51]. Uočimo da $\Omega(k_{\|},\mathbf{q})$ ovisi o $\mathbf{q}$, tj. prisustvo trodimenzionalne interakcije $V(\mathbf{q})$ u Dysonovoj jednadžbi (6.1) razbija degeneraciju elektronsko-šupljinskog pobuđenja $E_0(k_{\|},q_{\|})$ obzirom na perpendikularnu komponentu valnog vektora $\mathbf{q}$.

Energija kolektivnog pobuđenja veća je od maksimalnog elektronsko-šupljinskog pobuđenja

$$E_{0max}(q_{\|}) = \max\{\mid E_0(k_{\|},q_{\|}) - E_0(k_{\|}) \mid : \mid k_{\|} \mid \leq k_F, \mid k_{\|}+q_{\|} \mid > k_F\} \tag{6.15}$$

za dani $q_{\|}$. Dok se energije nekoherentnih pobuđenja mogu odrediti samo u diskretnom pristupu [51], kolektivna pobuđenja se jednako dobro računaju i u diskretnom i u kontinuiranom pristupu, tj. nema bitne razlike u računu njihove energije u spomenutim pristupima.

Pobliže promotrimo dugovalnu granicu, $\mathbf{q} \to 0$. U njoj vrijedi

$$E_0(k_{\|} + q_{\|}) - E_0(k_{\|}) \approx v_F q_{\|} \tag{6.16}$$

u slučaju $[1 - n(k_{\|} + q_{\|}]n(k_{\|}) = 1$ tj. za ona elektronsko-šupljinska pobuđenja koja ulaze u polarizacijski dijagram (6.8). $v_F = 2t_0 \sin k_F b$ je Fermijeva brzina. Stoga je tada polarizacijski dijagram jednak

$$\Pi(q_{\|}, \omega) \approx \frac{4}{N_b} \frac{v_F q_{\|}^2}{\omega^2 - v_F^2 q_{\|}^2} \frac{L}{2\pi} \tag{6.17}$$

tako da pomoću (6.10) dobijamo dielektričnu funkciju u dugovalnom limesu

$$\varepsilon_m(\mathbf{q}, \omega) = \frac{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - \Omega^2(\mathbf{q})}{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - v_F^2 q_{\|}^2,} \tag{6.18}$$

gdje je

$$\Omega(\mathbf{q}) = \mid q_{\|} \mid \left(v_F^2 + \frac{\omega_{pl}^2}{q^2} \right)^{1/2}, \; \omega_{pl}^2 = \frac{8e^2 v_F}{ac} \tag{6.19}$$

frekvencija plazmona, a i c su konstante rešetke okomite na lance.

Iz izraza (6.19) vidi se eksplicite kako interakcija otklanja degeneraciju elektronsko-šupljinskog pobuđenja $v_F q_{\|}$.

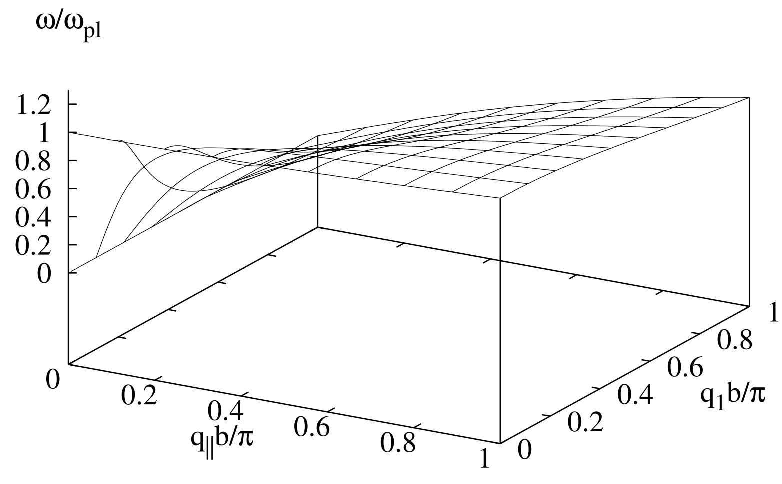
Primijetimo da su elektronsko-šupljinska pobuđenja za dani $q_{\|}$ reda veličine $v_F q_{\|}$ ili manja u cijeloj I. Brillouinovoj zoni. Stoga vrijedi $E_{0max}(q_{\|}) \approx v_F q_{\|}$.

Za veće valne vektore $q_{\|}$ plazmonska disperzija je izračunata numerički [52] te je pokazano da je uvijek viša od maksimuma elektronsko-šupljinskog spektra.

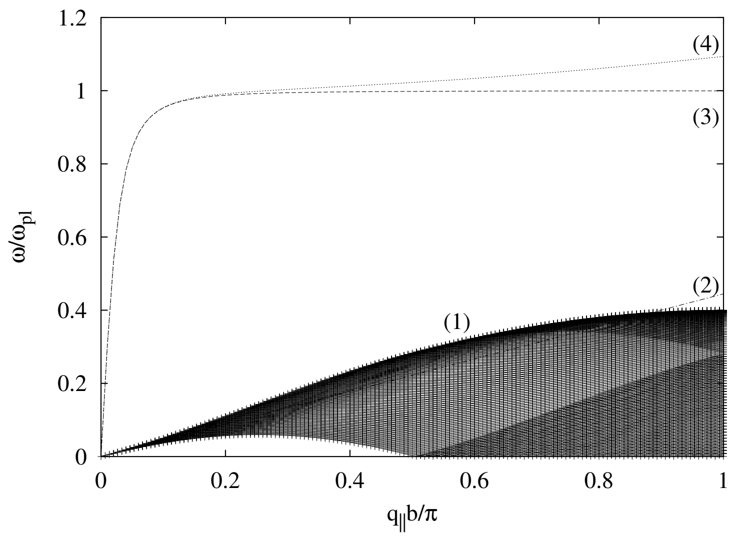
Proširi li se izraz za plazmonsku frekvenciju u dugovalnom limesu (6.19) na cijelu I. Brillouinovu zonu vidi se da ima isto takvo ponašanje (sl. 6.1, 6.2 i 6.3). Također se vidi da za

$$\Omega(\mathbf{q}) = \omega_{pl} \frac{\mid q_{\|} \mid}{q} \tag{6.20}$$

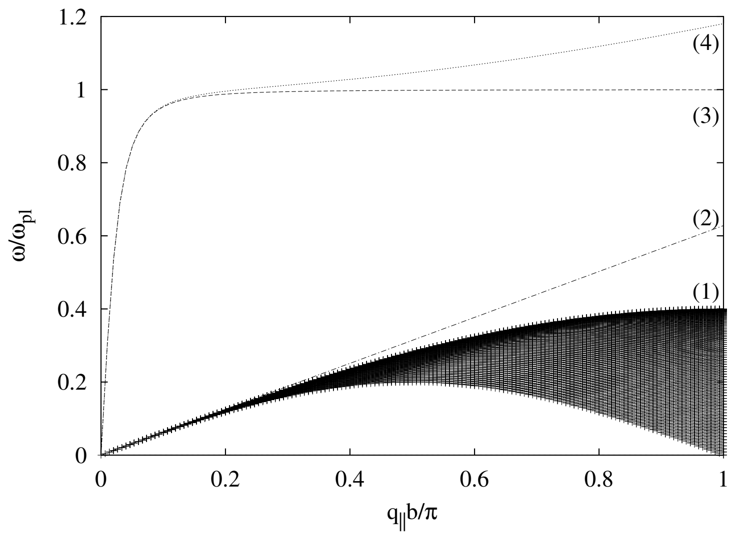
vrijedi isto te da ovaj izraz dobro aproksimira plazmonsku frekvenciju u dugovalnom limesu (6.19) (sl. 6.2, 6.3). Stoga ćemo u daljnjem računu koristiti izraz (6.20) za plazmonsku frekvenciju u cijeloj I. Brillouinovoj zoni.



Slika 6.1: Plazmonska disperzija dana izrazom (6.19) uz $q^2 = q_{\|}^2 + q_{\perp}^2$ u slučaju $k_F = 3\pi/4b$, $t_0 = 0.2eV$, $\omega_{pl} = 2eV$.



Slika 6.2: (1) Spektar elektronsko-šupljinskih pobuđenja koja ulaze u polarizacijski dijagram (6.8), (2) $v_F q_{\|}$, (3) plazmonska frekvencija dana izrazom (6.20) i (4) plazmonska disperzija dana izrazom (6.19). $k_F = 3\pi/4b$, $t_0 = 0.2eV$, $\omega_{pl} = 2eV$, $q_{\perp} = \frac{1}{10b}$.



Slika 6.3: (1) Spektar elektronsko-šupljinskih pobuđenja koja ulaze u polarizacijski dijagram (6.8), (2) $v_F q_{\|}$, (3) plazmonska frekvencija dana izrazom (6.20) i (4) plazmonska disperzija dana izrazom (6.19) $k_F = \pi/2b$, $t_0 = 0.2eV$, $\omega_{pl} = 2eV$, $q_\perp = \frac{1}{10b}$.

Za razliku od dugovalnog limesa u kojem smo mogli elektronsko-šupljinska pobuđenja aproksimirati jedinstvenom ovisnošću $v_F q_{\|}$, za velike vrijednosti valnog vektora $\mathbf{q}$ imamo mnogo takvih pobuđenja. Po (6.8), (6.10) i osnovnom teoremu algebre dielektričnu funkciju tada možemo prikazati u obliku

$$\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega) = \prod_{|k_{\|}|\le k_F, |k_{\|}+q_{\|}|>k_F} \frac{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - \Omega^2(k_{\|},\mathbf{q})}{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - E_0^2(k_{\|},q_{\|})}. \tag{6.21}$$

6.2 Greenova funkcija

Postupkom opisanim u 5. poglavlju dolazi se do Dysonove jednadžbe za jednočestičnu Greenovu funkciju elektrona u kvazijednodimenzionalnom metalu s jednom vrpcom,

$$G(\mathbf{k},\omega) = G_0(\mathbf{k},\omega) + \frac{i}{2\pi N} G_0(\mathbf{k},\omega) \sum_{\mathbf{q}} [\int d\omega' \bar{V}(\mathbf{q},\omega') G_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega') + i\pi V(\mathbf{q})] G(\mathbf{k},\omega), \tag{6.22}$$

gdje je Greenova funkcija nesmetanog problema

$$G_0(\mathbf{k},\omega) = \frac{1-n(k_\parallel)}{\omega - E_0(k_\parallel) + i\eta} + \frac{n(k_\parallel)}{\omega - E_0(k_\parallel) - i\eta}. \tag{6.23}$$

Iz izraza (6.22) se dobije inverzna Greenova funkcija

$$G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) - \frac{i}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}}[\int d\omega' \bar{V}(\mathbf{q},\omega')G_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega') + i\pi V(\mathbf{q})] \tag{6.24}$$

gdje je

$$G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E_0(k_\parallel) + i\eta[1-2n(k_\parallel)]. \tag{6.25}$$

RPA zasjenjena interakcija je

$$\bar{V}(\mathbf{q},\omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega)} \tag{6.26}$$

gdje je $\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega)$ mikroskopska dielektrična funkcija (6.18).

Matrični element nezasjenjene Coulombove interakcije

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{v_0 q^2,} \tag{6.27}$$

koji divergira za $\mathbf{q}\to 0$, ekstrapolirat ćemo na cijelu prvu Brillouinovu zonu. Također, ćemo to učiniti i s dielektričnom funkcijom (6.18) koja vrijedi u dugovalnom limesu tj. zanemarit ćemo doprinos nekoherentnih pobuđenja u odnosu na doprinos plazmona u cijeloj I Brillouinovoj zoni. (Istu vrstu pojednostavljenja napravili su Hedin i Lundqvist za 3d slučaj (5.17), (5.18)). Uvrštavanjem (6.25) i (6.26) u (6.24) dobije se

$$\begin{aligned} G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E_0(k_\parallel) + i\eta[1-2n(k_\parallel)] - \frac{i}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Big\{ i\pi + \\ + \int d\omega' \frac{(\omega'+i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - v_F^2 q_\parallel^2}{(\omega'+i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - \Omega^2(\mathbf{q})}\Big[\frac{1-n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega-\omega'-E_0(k_\parallel+q_\parallel)+i\eta} \\ + \frac{n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega-\omega'-E_0(k_\parallel+q_\parallel)-i\eta}\Big]\Big\}. \end{aligned} \tag{6.28}$$

Sljedeći korak je integracija po ω' koju ćemo provesti zatvarajući konturu integracije po onoj kompleksnoj poluravnini koja ne sadrži polove nesmetane Greenove funkcije, nakon čega ćemo uzeti $\eta'\to 0$.

Vrijedi

$$\begin{aligned} \int d\omega' \frac{(\omega'+i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - v_F^2 q_\parallel^2}{(\omega'+i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - \Omega^2(\mathbf{q})}\frac{1-n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega-\omega'-E_0(k_\parallel+q_\parallel)+i\eta} = -i\pi[1-n(k_\parallel+q_\parallel)] \\ - 2i\pi\frac{\Omega^2(\mathbf{q}) - v_F^2 q_\parallel^2}{2\Omega(\mathbf{q})}\frac{1-n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega-\Omega(\mathbf{q})-E_0(k_\parallel+q_\parallel)+i\eta} \end{aligned} \tag{6.29}$$

za integraciju preko donje kompleksne poluravnine oko pola $\Omega(\mathbf{q}) - i\eta'$, te

$$\int d\omega' \frac{(\omega' + i\eta'\text{sign}\omega')^2 - v_F^2 q_\parallel^2}{(\omega' + i\eta'\text{sign}\omega')^2 - \Omega^2(\mathbf{q})} \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \omega' - E_0(k_\parallel + q_\parallel) + i\eta} = i\pi n(k_\parallel + q_\parallel)$$
$$2i\pi \frac{\Omega^2(\mathbf{q}) - v_F^2 q_\parallel^2}{-2\Omega(\mathbf{q})} \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega + \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel + q_\parallel) + i\eta} \tag{6.30}$$

za integraciju preko gornje kompleksne poluravnine oko pola $-\Omega(\mathbf{q}) + i\eta'$.
Tada izraz (6.28) postaje

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - E_0(k_\parallel) + i\eta[1 - 2n(k_\parallel)] - E_{ex}(k_\parallel) - \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \frac{\Omega^2(\mathbf{q}) - v_F^2 q_\parallel^2}{\Omega(\mathbf{q})} \times$$
$$\times \left[\frac{1 - n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel + q_\parallel) + i\eta} + \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega + \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel + q_\parallel) - i\eta} \right], \tag{6.31}$$

gdje je

$$E_{ex}(k_\parallel) = -\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) n(k_\parallel + q_\parallel) \tag{6.32}$$

energija izmjene po elementarnoj ćeliji za stanje $| k_\parallel >$ [40].
Kako je $\Omega(\mathbf{q}) \gg v_F q_\parallel$ vrijedi

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - E_0(k_\parallel) + i\eta[1 - 2n(k_\parallel)] - E_{ex}(k_\parallel) - \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q}) \times$$
$$\times \left[\frac{1 - n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel + q_\parallel) + i\eta} + \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega + \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel + q_\parallel) - i\eta} \right]. \tag{6.33}$$

Inverzna Greenova funkcija postaje

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - E_0(k_\parallel) + i\eta[1 - 2n(k_\parallel)] - E_{ex}(k_\parallel)$$
$$- \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q}) \left[\frac{1 - n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \Omega(\mathbf{q}) + i\eta} + \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega + \Omega(\mathbf{q}) - i\eta} \right]. \tag{6.34}$$

zanemarimo li $E_0(k_\parallel + q_\parallel)$ u odnosu na $\Omega(k_F, \mathbf{q})$."Koristeći

$$\frac{1}{x \pm iy} = \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(y) \tag{6.35}$$

realni dio inverzne Greenove funkcije je

$$ReG^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - E_0(k_\parallel) - E_{ex}(k_\parallel) - I(\mathbf{k}, \omega) \tag{6.36}$$

gdje je

$$I(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q}) \left[\frac{1 - n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \Omega(\mathbf{q})} + \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega + \Omega(\mathbf{q})} \right], \tag{6.37}$$

a imaginarni dio inverzne Greenove funkcije je

$$ImG^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q})\{[1-n(k_\parallel+q_\parallel)]\delta[\omega-\Omega(\mathbf{q})]-n(k_\parallel+q_\parallel)\delta[\omega+\Omega(\mathbf{q})]\}. \tag{6.38}$$

Primijetimo da će imaginarni dio inverzne Greenove funkcije biti različit od nula za $n(k_\parallel+q_\parallel)=1$ u području negativnih ω i za $n(k_\parallel+q_\parallel)=0$ u području pozitivnih ω.

Aproksimirajmo sada I Brillouinovu zonu cilindrom istog volumena i iste visine. Radijus njegove baze jednak je tada

$$Q_\perp = \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{ac}}, \tag{6.39}$$

gdje su a i c poprečne konstante rešetke. Prelaskom na cilindrične koordinate

$$\sum_{\mathbf{q}} \to \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dq_\parallel \int_0^{Q_\perp} 2\pi q_\perp dq_\perp \tag{6.40}$$

i integracijom po $q_\perp$ dobije se

$$I(k_\parallel,\omega) = \frac{e^2}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}}\left[-\ln\left|\frac{\sqrt{q_\parallel^2+Q_\perp^2}\left(1-\frac{\omega_{pl}}{\omega}\right)}{\sqrt{q_\parallel^2+Q_\perp^2}-|q_\parallel|\frac{\omega_{pl}}{\omega}}\right| + n(k_\parallel+q_\parallel)\ln\left|\frac{(q_\parallel^2+Q_\perp^2)\left(1-\frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}\right)}{q_\parallel^2+Q_\perp^2-q_\parallel^2\frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}}\right|\right]dq_\parallel \tag{6.41}$$

i

$$E_{ex}(k_\parallel) = -\frac{e^2}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dq_\parallel n(k_\parallel+q_\parallel)\ln\left|1+\frac{Q_\perp^2}{q_\parallel^2}\right|. \tag{6.42}$$

U daljnjem računu koristimo integrale

$$\int \ln x dx = xlnx - x, \tag{6.43}$$

$$\int \ln \mid x^2-a^2 \mid dx = x\ln\mid x^2-a^2\mid -2x + a\ln\left|\frac{x+a}{x-a}\right|, \tag{6.44}$$

$$\int \ln \mid x^2+a^2 \mid dx = x\ln\mid x^2+a^2\mid -2x + 2a\arctan\frac{x}{a}, \tag{6.45}$$

$$\int \ln\mid\sqrt{1+x^2}\mp ax\mid dx = x\ln\mid\sqrt{1+x^2}\mp ax\mid - x \mp \frac{1}{2\sqrt{a^2-1}}\ln\left|\frac{a\sqrt{1+x^2}\mp x-\sqrt{a^2-1}}{a\sqrt{1+x^2}\mp x+\sqrt{a^2-1}}\right|,\ a>0 \tag{6.46}$$

te

$$\int \ln\mid\sqrt{1+x^2}\mp ax\mid dx = x\ln\mid\sqrt{1+x^2}\mp ax\mid - x \pm \frac{1}{2\sqrt{a^2-1}}\ln\left|\frac{-a\sqrt{1+x^2}\pm x-\sqrt{a^2-1}}{-a\sqrt{1+x^2}\pm x+\sqrt{a^2-1}}\right|, a<0. \tag{6.47}$$

Integracijom po $q_{\|}$ dobije se za $Q_{\perp} \ll \pi/b$

$$\begin{aligned} I(k_{\|},\omega) &= -\frac{U'}{2} - E_{ex}(k_{\|}) + \frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{ \frac{Q_{\perp}\omega}{\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}} \ln\left|\frac{\omega_{pl}-\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}{\omega_{pl}+\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}\right| + \frac{b}{\pi}\frac{Q_{\perp}^2\omega}{\omega_{pl}-\omega} \\ &+ \Big[F_1(k_F-|k_{\|}|,\omega)+F_1(k_F+|k_{\|}|,\omega)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_{\|}|-k_F\Big) \\ &+ \Big[F_1(k_F-|k_{\|}|,\omega)+2F_1\Big(\frac{\pi}{b},\omega\Big)-F_1\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_{\|}|,\omega\Big)\Big]\Theta\Big(k_F+|k_{\|}|-\frac{\pi}{b}\Big)\Bigg\} \end{aligned} \tag{6.48}$$

u slučaju $t_0 > 0$, gdje je

$$F_1(x,\omega) = 2x\ln|\,x\,| - x\ln\left|x^2 - \frac{Q_{\perp}^2\omega^2}{\omega_{pl}^2-\omega^2}\right| - \frac{Q_{\perp}\omega}{\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}\ln\left|\frac{x+\frac{Q_{\perp}\omega}{\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}}{x-\frac{Q_{\perp}\omega}{\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}}\right|. \tag{6.49}$$

Ovdje je

$$U' = \frac{e^2}{b}\Big\{\ln\Big[\Big(\frac{bQ_{\perp}}{\pi}\Big)^2+1\Big] + \frac{2bQ_{\perp}}{\pi}\arctan\frac{\pi}{bQ_{\perp}}\Big\} \tag{6.50}$$

veličina analogna matričnom elementu unutaratomske interakcije jer se dobije integracijom izraza

$$U' = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \tag{6.51}$$

koji prelaskom na cilindrične koordinate i integracijom po $q_{\perp}$ glasi

$$U' = \frac{e^2}{\pi}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dq_{\|}\ln\sqrt{1+\Big(\frac{Q_{\perp}}{q_{\|}}\Big)^2}. \tag{6.52}$$

Za $Q_{\perp} \ll \pi/b$ je

$$U' = e^2 Q_{\perp} + \frac{e^2}{\pi^2}Q_{\perp}^2 b. \tag{6.53}$$

Stoga je realni dio inverzne Greenove funkcije (6.36) tada jednak

$$\begin{aligned} ReG^{-1}(k_{\|},\omega) &= \omega - E_0(k_{\|}) + \frac{U'}{2} - \frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{ \frac{Q_{\perp}\omega}{\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}} \ln\left|\frac{\omega_{pl}-\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}{\omega_{pl}+\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}\right| + \frac{b}{\pi}\frac{Q_{\perp}^2\omega}{\omega_{pl}-\omega} \\ &+ \Big[F_1(k_F-|k_{\|}|,\omega)+F_1(k_F+|k_{\|}|,\omega)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_{\|}|-k_F\Big) \\ &+ \Big[F_1(k_F-|k_{\|}|,\omega)+2F_1\Big(\frac{\pi}{b},\omega\Big)-F_1\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_{\|}|,\omega\Big)\Big]\Theta\Big(k_F+|k_{\|}|-\frac{\pi}{b}\Big)\Bigg\}. \end{aligned} \tag{6.54}$$

Vrijedi $ReG^{-1}(k_{\|},\omega) \to \frac{U'}{2} - E_0(k_{\|})$ za $\omega \to 0$.

Također vrijedi $ReG^{-1}(k_{\|},\omega) \to \infty$ za $\omega \to -\omega_{pl} + 0$.

Prelaskom na cilindrične koordinate i integracijom po $q_\perp$ se za imaginarni dio inverzne Greenove funkcije dobije

$$ImG^{-1}(k_\|,\omega) = \frac{e^2}{2}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dq_\| \Bigg\{[1-n(k_\|+q_\|)]\Theta(\omega_{pl}-\omega)\Theta\Bigg(\omega-\omega_{pl}\sqrt{\frac{q_\|^2}{q_\|^2+Q_\perp^2}}\Bigg) - \\ - n(q_\|+k_\|)\Theta(\omega+\omega_{pl})\Theta\Bigg(-\omega-\omega_{pl}\sqrt{\frac{q_\|^2}{q_\|^2+Q_\perp^2}}\Bigg)\Bigg\}. \quad (6.55)$$

Ako za dani ω uvedemo moment q_c takav da je

$$\omega = \pm\omega_{pl}\sqrt{\frac{q_c^2}{q_c^2+Q_\perp^2}} \quad (6.56)$$

ovisno o tome je li ω pozitivan ili negativan, integrali u imaginarnom dijelu inverzne Greenove funkcije ovisit će samo o $\mid q_\| \mid \leq q_c$ gdje je

$$q_c = \frac{\mid\omega\mid Q_\perp}{\sqrt{\omega_{pl}^2-\omega^2}}. \quad (6.57)$$

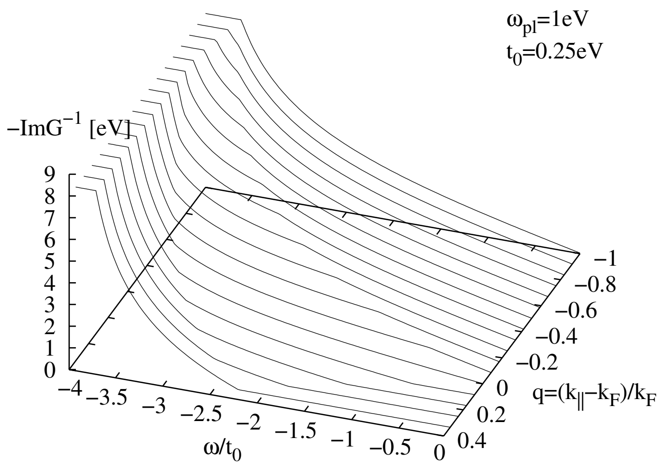
Sada je imaginarni dio inverzne Greenove funkcije jednak

$$\begin{aligned} ImG^{-1}(k_\|,\omega) &= \frac{e^2}{2}\Theta(\omega_{pl}-\omega)\Theta(\omega)\int_{-q_c}^{q_c} dq_\|[1-n(k_\|+q_\|)] \\ &- \frac{e^2}{2}\Theta(\omega_{pl}+\omega)\Theta(-\omega)\int_{-q_c}^{q_c} dq_\| n(k_\|+q_\|). \end{aligned} \quad (6.58)$$

Integracijom po $q_\|$ za imaginarni dio inverzne Greenove funkcije dobijemo u slučaju $t_0 > 0$

$$\begin{aligned} ImG^{-1}(k_\|,\omega) = \frac{e^2}{2}\Big\{&[2q_c\Theta(\frac{\pi}{b}-q_c)+\frac{2\pi}{b}\Theta(q_c-\frac{\pi}{b})]\Theta(\omega_{pl}-\omega)\Theta(\omega) - \Big[\Theta(\omega_{pl}+\omega)\Theta(-\omega) \\ &+\Theta(\omega_{pl}-\omega)\Theta(\omega)\Big]\Big[2k_F\Theta(q_c-\frac{\pi}{b}) + [2q_c\Theta(k_F-|k_\||-q_c)+2k_F\Theta(q_c-|k_\||-k_F) \\ &+(k_F-|k_\||+q_c)\Theta(|k_\||+q_c-k_F)\Theta(k_F-\mid|k_\||-q_c\mid)\Theta(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\||-q_c) \\ &+(2k_F+2q_c-\frac{2\pi}{b})\Theta(k_F-\mid|k_\||-q_c\mid)\Theta(-\frac{2\pi}{b}+k_F+|k_\||+q_c)]\Theta(\frac{\pi}{b}-q_c)\Big]\Big\}. \end{aligned} \quad (6.59)$$

Vrijedi $ImG^{-1}(k_\|,\omega)\to 0$ za $\omega\to 0$, a $ImG^{-1}(k_\|,\omega)\to -e^2k_F$ za $\omega\to-\omega_{pl}+0$.
Kako fotoemisijski spektar detektira područje negativnih vrijednosti od ω detaljnije ćemo promotriti samo to područje.
Na slici 6.4 prikazana je funkcija $ImG^{-1}(k_\|,\omega)$ za različite vrijednosti paralelne



Slika 6.4: Imaginarni dio inverzne Greenove funkcije $G^{-1}(k_{\|},\omega)$ u slučaju $k_F = 3\pi/4b$.

komponente valnog vektora. Uočimo da za $k_{\|} > k_F$ imaginarni dio iščezava za ω blizu 0. Razlog tome nalazimo u izrazu (6.38) koji preko $n(k_{\|} + q_{\|})$ za $k_{\|} > k_F$ traži da su neiščezavajući članovi za $\omega < -\Omega(\mathbf{k}_{\|} - \mathbf{k}_F + \mathbf{Q}_{\perp})$, tj. visokofrekventna kolektivna pobuđenja. Iščezavanje imaginarnog dijela inverzne Greenove funkcije u niskofrekventnom području za $k_{\|} > k_F$ je posljedica zanemarivanja nekoherentnih pobuđenja i uzimanja samo plazmonske disperzije.

Kako je za $k \leq k_F$ $ImG^{-1}(k_{\|},\omega) = 0$ samo za $\omega = 0$, a $ReG^{-1}(k_{\|},\omega) \to \frac{U'}{2} - E_0(k_{\|})$ za $\omega \to 0$ očito dobijena inverzna Greenova funkcija nema nulu. Stoga ne postoji pol prvog reda Greenove funkcije $\omega_0(k_{\|}) = \omega_{0R}(k_{\|}) + i\omega_{0I}(k_{\|})$ preko kojeg bismo u okolini tog pola mogli Greenovu funkciju zapisati u rezonantnom obliku

$$G(k_{\|},\omega) = \frac{Z(k_{\|})}{\omega - \omega_0(k_{\|})}, \tag{6.60}$$

gdje je $Z(k_{\|})$ reziduum Greenove funkcije u polu $\omega_0(k_{\|})$ tj.

$$Z(k_{\|}) = \left| \frac{\partial ReG^{-1}(k_{\|},\omega_0(k_{\|}))}{\partial\omega} \right|^{-1} \tag{6.61}$$

te ne možemo govoriti o postojanju kvazičestice. Ovaj rezultat direktna je posljedica postojanja niskofrekventnih kolektivnih modova i može se predvidjeti promatranjem izraza (6.34) za inverznu Greenovu funkciju koja ima mnoštvo bliskih singulariteta oko ω pa se nikako Greenova ne može zapisati u obliku (6.60) na širem području oko $\omega = 0$. Ona bi se mogla tako zapisati na širem području oko $\omega = 0$ kad u njemu inverzna Greenova funkcija (6.34) ne bi imala singulariteta, ali bi imala jednostruku nulu. Ta nula bila bi pol Greenove funkcije oko kojeg bi se mogla razviti u oblik (6.60). Dakle, za postojanje kvazičestice za $\omega = 0$ zahtijeva se analitičnost inverzne Greenove funkcije na širem području oko $\omega = 0$ i postojanje njene nule u tom području što bi se uspjelo ostvariti kad ne bi bilo niskofrekventnih kolektivnih modova u danom sistemu.

Napomenimo konačno da u slučaju $t_0 < 0$ vrijedi

$$[I(k_{\|}, \omega)]_{t_0<0} = -[I(k_{\|}, -\omega)]_{t_0>0} \tag{6.62}$$

a za imaginarni dio inverzne Greenove funkcije je

$$[ImG^{-1}(k_{\|}, \omega)]_{t_0<0} = -[ImG^{-1}(k_{\|}, -\omega)]_{t_0>0}. \tag{6.63}$$

Tako se pomoću (6.62) za realni dio inverzne Greenove funkcije u slučaju $t_0 < 0$ dobije

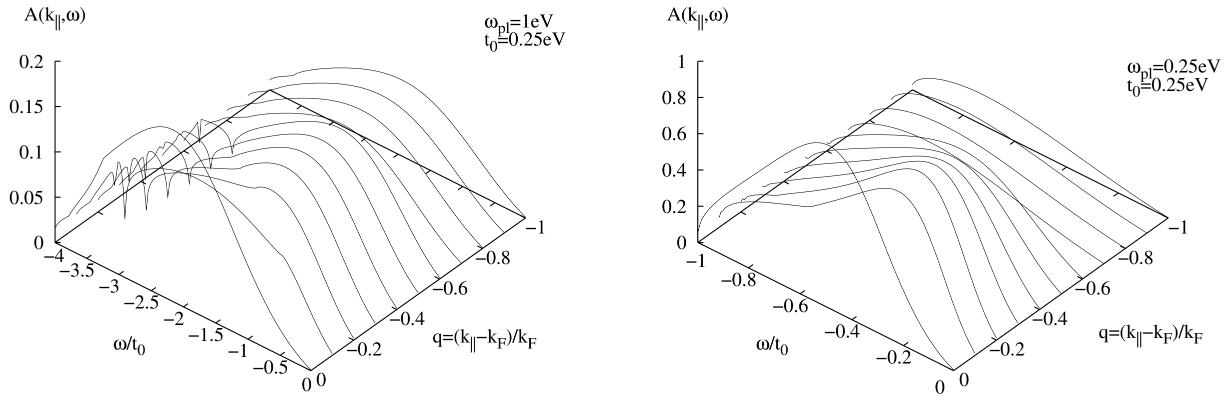
$$\begin{aligned} ReG^{-1}(k_{\|}, \omega) = \omega - E_0(k_{\|}) + \frac{U'}{2} + \frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{ - \frac{Q_{\perp}\omega}{\sqrt{\omega_{pl}^2 - \omega^2}} \ln\left|\frac{\omega_{pl} - \sqrt{\omega_{pl}^2 - \omega^2}}{\omega_{pl} + \sqrt{\omega_{pl}^2 - \omega^2}}\right| - \frac{b}{\pi}\frac{Q_{\perp}^2\omega}{\omega_{pl} + \omega} \\ + \Big[F_1(k_F - |k_{\|}|, -\omega) + F_1(k_F + |k_{\|}|, -\omega)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b} - |k_{\|}| - k_F\Big) \\ + \Big[F_1(k_F - |k_{\|}|, -\omega) + 2F_1\Big(\frac{\pi}{b}, -\omega\Big) - F_1\Big(\frac{2\pi}{b} - k_F - |k_{\|}|, -\omega\Big)\Big]\Theta\Big(k_F + |k_{\|}| - \frac{\pi}{b}\Big)\Bigg\}. \end{aligned} \tag{6.64}$$

6.3 Spektralna funkcija

Spektralna funkcija kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom za $k_{\|}$ je

$$A(k_{\|}, \omega) = \frac{1}{\pi}\frac{|\ ImG^{-1}(k_{\|}, \omega)\ |}{[ReG^{-1}(k_{\|}, \omega)]^2 + [ImG^{-1}(k_{\|}, \omega)]^2}. \tag{6.65}$$

Najznačajniji rezultat je da imaginarni dio inverzne Greenove funkcije teži nuli, dok $ReG^{-1}(k_{\|}, \omega) \to \frac{U'}{2} - E_0(k_{\|})$ za $\omega \to 0^-$ te $k_{\|} \leq k_F$ i $t_0 > 0$. Stoga tada i $A(k_{\|}, \omega) \to 0$ (sl. 6.5). S druge strane za $t_0 < 0$ spektralna funkcija se jednako tako ponaša za $k_{\|} \geq k_F$ (sl. 6.6). U spektralnoj funkciji ističe se široki maksimum reda veličine plazmonske



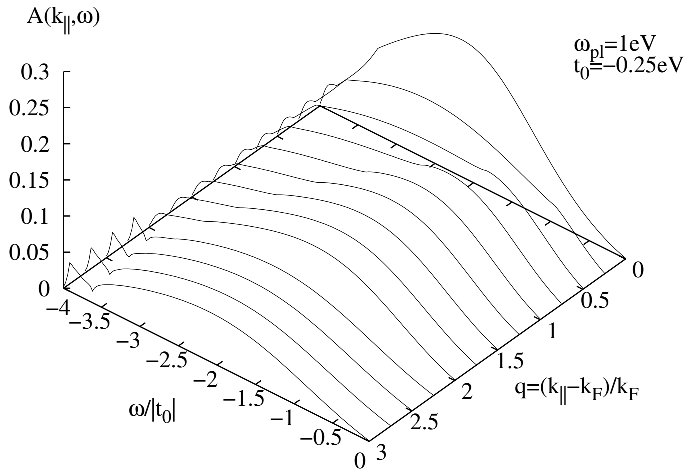
Slika 6.5: Spektralna funkcija $A(k_{||}, \omega)$ za ω_{pl}/t_0 4 i 1 u slučaju $k_F = 3\pi/4b$ i $t_0 > 0$.

frekvencije koji pokazuje blagu ovisnost o $k_{||}$.

U spektrima normalnih metala pojavljuje se kvazičestica na kemijskom potencijalu i javlja se disperzija [11, 12, 13]. Postojanje ili nestajanje kvazičestice kod kemijskog potencijala jasno se može uočiti promatranjem inverzne Greenove funkcije oko $\omega = 0$ na sljedeći način. Ako spektar kolektivnih modova ne počinje od nule već od neke minimalne vrijednosti $\omega_{min} > 0$ (npr. ω_{pl} u ,,jellium" modelu) imaginarni dio inverzne Greenove funkcije (6.38) iščezava za frekvencije $-\omega_{min} < \omega < \omega_{min}$. S druge strane po (6.36) $ReG^{-1}(\mathbf{k}, \omega) \to \pm\infty$ za $\omega \to \pm\omega_{min}$, tj. u danom intervalu mora postojati točka $\omega_0(k_{||})$ takva da je $ReG^{-1}(\mathbf{k}, \omega_0(k_{||})) = 0$. Tada je u tom intervalu spektralna funkcija dana izrazom

$$A(k_{||}, \omega) = Z(k_{||})\delta(\omega - \omega_0(k_{||})), \tag{6.66}$$

tj. u toj točki možemo govoriti o postojanju kvazičestice na kemijskom potencijalu za $k_{||} = k_F$. Ukratko, za spektralnu funkciju koju dominantno određuju kolektivni modovi možemo govoriti o kvazičestici na kemijskom potencijalu ako oni imaju najmanju frekvenciju $\omega_{min} > 0$, inače ne. U promatranom modelu kvazijednodimenzionalnih kristala je $\omega_{min} = 0$ te u dobijenim spektrima ne postoji kvazičestica na kemijskom potencijalu za $k = k_F$. ARPES eksperimenti na Bechgaardovim solima [1, 3, 4] i TTF-TCNQ-u [2] jasno ukazuju da u ovim sistemima ne vrijedi koncept kvazičestice na kemijskom potencijalu.



Slika 6.6: Spektralna funkcija $A(k_{||}, \omega)$ za $k_F = \pi/4b$, $t_0 = -0.25eV$ i $\omega_{pl} = 1eV$.

Ista diskusija može se provesti i za kvazidvodimenzionalne kristale. ARPES spektri kvazidvodimenzionalnih kristala u normalnoj fazi pokazuju formiranje kvazičestice na kemijskom potencijalu praćeno pojavom širokog maksimuma na višim energijama [54]. Ovakva svojstva u spektralnoj funkciji nalaze Artemenko et al [55] proučavajući utjecaj Coulombove interakcije u modelu kvazidvodimenzionalog metala kod kojeg su metalne ravnine vezane malim integralom prijelaza $t_\perp$ okomitim na njih. Zbog uzimanja konačnih integrala prijelaza $t_\perp$ je $\omega_{min} \neq 0$. Stoga Artemenko et al dobivaju slabo izraženu kvazičesticu na kemijskom potencijalu uz pojavu širokog maksimuma na višim energijama koji dolazi od kolektivnih modova.

Navedena svojstva spektralne funkcije u modelu kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom nisu u skladu sa spektrima normalnih metala u tri dimenzije za koje vrijedi Landauova teorija Fermijevih tekućina. Da bi se mogla primijeniti Landauova teorija inverzna Greenova funkcija mora biti analitička u okolini kemijskog potencijala. Postojanje niskoenergijskih kolektivnih modova uvodi singularitete u inverznu Greenovu funkciju blizu kemijskog potencijala pa se Landauova teorija Fermijevih tekućina ne može primijeniti.

Kolektivni modovi određuju i spektralnu funkciju u Luttingerovu modelu (4.45). Ona ima karakteristično potencijsko ponašanje dano izrazom (4.52) za $k = k_F$ i $\omega \to 0^-$. Pogledajmo pobliže kakva je spektralna funkcija (6.65) za $\omega \to 0^-$ u slučaju $k = k_F$. Kako je $ReG^{-1}(k_F, \omega) \to \frac{U'}{2}$ i

$$ImG^{-1}(k_F, \omega) = -\frac{e^2}{2}\frac{|\omega|Q_\perp}{\sqrt{\omega_{pl}^2 - \omega^2}}, \tag{6.67}$$

vrijedi

$$A(k_F, \omega) \approx \frac{1}{\pi}\frac{e^2}{2}\frac{|\omega|Q_\perp}{\omega_{pl}\left(\frac{U'}{2}\right)^2}. \tag{6.68}$$

Vidimo da spektralna funkcija ima linearnu ovisnost o ω za $\omega \to 0^-$. Dobijeni RPA rezultat se razlikuje od potencijskog ponašanja u Luttingerovu modelu danog izrazom (4.52) jer za svako vezanje daje linearno ponašanje spektralne funkcije dok je u Luttingerovu modelu anomalna dimenzija α interakcijski ovisna. $\alpha = 1$ koji daje linearnu ovisnost vodi na jako vezanje („strong coupling"). Bozonizacijskim proračunom spektralne funkcije kvazijednodimenzionalnog metala s trodimenzionalnom Coulombovom interakcijom dobili bismo egzaktno potencijsko ponašanje u niskoenergijskom području za jako vezanje. Već se zna da su niskoenergijski kolektivni modovi svojstvena stanja takvog sistema [46].

Pogledajmo također i gustoću stanja

$$N(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} A(k_\parallel, \omega) \tag{6.69}$$

za $\omega \to 0^-$. Za jako vezanje možemo zanemariti $E(k_\parallel)$ u odnosu na $U'/2$ pa vrijedi $ReG^{-1}(k_F, \omega) \to \frac{U'}{2}$ za $\omega \to 0^-$. Kako je $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) \propto |\omega|$ za $k_\parallel \leq k_F$, a $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) = 0$ za $k_\parallel > k_F$, vrijedi da je i $A(k_\parallel, \omega) \propto |\omega|$ za $k_\parallel \leq k_F$ i $A(k_\parallel, \omega) = 0$ za $k_\parallel > k_F$. Tada i $N(\omega)$ također linearno teži u nulu za $\omega \to 0^-$. I ovo ponašanje razlikuje se od potencijskog ponašanja gustoće stanja u Luttingerovu modelu danog izrazom (4.54) s interakcijski ovisnom anomalnom dimenzijom α.

Iako RPA rezultat nije egzaktan u niskoenergijskom području očekujemo da kvalitativno dobro opisuje spektralna svojstva kvazijednodimenzionalnih vodiča na široj energijskoj skali reda veličine plazmonske energije. Zaključujemo da je upravo anizotropnost pri dugodosežnoj Coulombovoj interakciji koja kod kvazijednodimenzionalnog vodiča vodi na stvaranje niskoenergijskih kolektivnih modova, koji daju dominantan doprinos Greenovoj funkciji, odgovorna za spektralna svojstva kvazijednodimenzionalnih vodiča u metalnoj fazi. Ona u ovom modelu dovodi do nestajanja spektralne težine na kemijskom potencijalu te do stvaranja širokog maksimuma na skali reda veličine plazmonske frekvencije. Primijetimo da smanjenjem omjera plazmonske frekvencije i širine vrpce dolazi do jačanja disperzije maksimuma ovisne o $k_{\|}$ koja nije istaknuta ako je plazmonska frekvencija mnogo veća od širine vrpci (sl. 6.5). Kako u ARPES spektrima Bechgaardovih soli spektralna težina nestaje blizu kemijskog potencijala i nema disperzije [1, 3, 4], upravo slučaj velike plazmonske frekvencije u odnosu na širinu vrpce kvalitativno odgovara eksperimentalnim rezultatima.

Također, vrijedi da je za $t_0 > 0$ spektralna težina manja za $k_{\|} < k_F$ nego za k_F te da je za $t_0 < 0$ je spektralna težina manja za $k_{\|} > k_F$ nego za k_F što ukazuje da se iz ARPES spektra može odrediti parnost valne funkcije. Eksperimentalno dobijeni maksimum spektralne funkcije pada kada idemo od središta prema rubu I. Brillouinove zone [1, 3] što upućuje na to da je integral prekrivanja za valentnu vrpcu negativan. Dakle, Blochove valne funkcije valentne vrpce su neparne, kao što i zahtijeva predpostavka da su viskoenergijske jednočestične Blochove funkcije, kao i ravni val, parne funkcije na dimenziji elementarne ćelije. U protivnom iščezavao bi matrični element dipolnog prijelaza (3.20).

Ukratko, rezultati ARPES mjerenja na Bechgaardovim solima u skladu su s modelom koji je razmotren u ovom radu uz navedena ograničenja.

Poglavlje 7

Zaključak

Spektralna funkcija kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom po lancu s 3D Coulombovom interakcijom izračunata je u ovom modelu u RPA. Kvazijednodimenzionalni metali zbog svoje anizotropnosti imaju niskofrekventna kolektivna pobuđenja. Ona u iznesenom modelu uvode singularitete u inverznu Greenovu funkciju blizu kemijskog potencijala. Posljedica toga je nestajanje spektralne težine na kemijskom potencijalu i pojava širokog maksimuma na energijskoj skali reda veličine plazmonske frekvencije. Maksimum pokazuje ovisnost o komponenti valnog vektora paralelnoj lancima koja gubi značaj rastom plazmonske frekvencije u odnosu na integrale prijelaza duž lanaca. Proračunati spektri su u kvalitativnom slaganju s nedavnim mjerenjima kutno razlučive fotoemisije na Bechgaardovim solima [1, 3, 4].

Nepostojanje kvazičestice na kemijskom potencijalu za Fermijev valni vektor u suprotnosti je s poznatim rezultatom za izotropne metale [11, 12, 13, 41]. Diskutirana je veza s Landauovom teorijom Fermijevih tekućina i zaključeno je da upravo postojanje niskofrekventnih kolektivnih modova kod Q1D metala ne dopušta razvoj Greenove funkcije oko kemijskog potencijala, što je upravo početna predpostavka te teorije [41].

S druge strane, spektralna funkcija u Luttingerovu modelu pokazuje potencijsko ponašanje u niskoenergijskom području za Fermijev valni vektor koje ovisi o interakcijski ovisnoj anomalnoj dimenziji. RPA spektralna funkcija linearno teži u nulu za Fermijev valni vektor pa očekujemo da nije egzaktna u niskoenergijskom području. U ovom području trebalo bi upotrijebiti bozonizacijsku tehniku na generaliziranom

Luttingerovom modelu s 3D Coulombovom interakcijom da bi se dobio egzaktan rezultat. Bozonizacijskom tehnikom dobijaju se u ovom modelu niskoenergijski kolektivni modovi za svojstvena stanja sistema [46]. Proračunom spektralne funkcije dobili bismo potencijsko ponašnje u niskoenergijskom području za Fermijev valni vektor s anomalnom dimenzijom koja ovisi o interakciji.

S druge strane RPA daje kvalitativno dobar rezultat na široj energijskoj skali reda veličine plazmonske energije čime ponovno dolazi do izražaja važnost kolektivnih modova za spektralna svojstva kvazijednodimenzionalnih vodiča. Već sama RPA za model s 3D dugodosežnom Coulombovom interakcijom preko niskofrekventnih kolektivnih modova vodi na ponašanje koje nije u skladu s Landauovom teorijom Fermijevih tekućina. Spomenimo da i analiza spektralnih svojstava kvazidvodimenzionalnih vodiča s RPA renormaliziranom 3D Coulombovom interakcijom također ukazuje na važnost kolektivnih modova [55].

U ovom radu iznesen je model kvazijednodimenzionalnog metala u kojem nema prijelaza elektrona s lanca na lanac. Kako u realnom sistemu prijelaz postoji zanimljivo bi bilo vidjeti kakav rezultat daje njegovo uključivanje. Odgovor na pitanje vodi li njegovo uključivanje do stvaranja kvazičestice dao bi bolji uvid u prijelaz iz Fermijeve tekućine u Luttingerovu i u relevantnost prijelaza elektrona s lanca na lanac u spektralnim svojstvima kvazijednodimenzionalnih vodiča.

Analiza utjecaja Coulombove interakcije na spektralna svojstva kvazidvodimenzionalnih metala koju su proveli Artemenko et al [55] na modelu s konačnim integralom prijelaza okomitim na metalne ravnine ukazuje da uključivanje konačne širine vrpce vodi do pojave kolektivnih modova s minimalnom frekvencijom različitom od nule. To otvara procijep u spektralnoj funkciji oko kemijskog potencijala na kojem se tada javlja kvazičestični pol. Na frekvencijama višim od minimalne javlja se široki maksimum koji dolazi od kolektivnih modova. Očekujemo da bismo kvalitativno isto ponašanje dobili i u slučaju kvazijednodimenzionalnog metala s konačnom širinom vrpce u smjeru okomitom na lance. Granični slučaj u kojem integral prijelaza okomit na lance teži u nulu morao bi dovesti do rezultata dobijenog u ovom radu što bi pokazalo da je uključivanje širine vrpce irelevantno za spektralna svojstva kvazijednodimenzionalnih metala.

Za razliku od Bechgaardovih soli koje su lančasti sistemi s cijelobrojnim nabojem u prijelazu i pogodne su za opis u modelu kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom po lancu $TTF - TCNQ$ se zbog djelomičnog prijelaza naboja s donorskih na akceptorske molekule može opisati modelom kvazijednodimenzionalnog metala s dvije vrpce po lancu. Tako on traži proračun spektralne funkcije za ovaj model. $TTF-TCNQ$ zbog jake sprege plazmona i dipolnog moda ima meki kolektivni mod [53]. Preostaje vidjeti kako takav mod utječe na spektralna svojstva ovih kristala. Analiza modela kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom po lancu vodi na očekivanje da će taj meki mod dovesti do isticanja disperzije u njihovoj spektralnoj funkciji.

Poglavlje 8

Dodatak

Greenova funkcija nesmetanog problema u Blochovoj bazi čvrste veze u rešetki s ionskom bazom

Polazimo od rešetke s ionskom bazom koja sadrži pozitivni ion u čvoru $\mathbf{R}$ s jednom elektronskom orbitalom $d(\mathbf{R}) = d(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ i anion u čvoru $\mathbf{R}+\mathbf{d}$ podrešetke.
Hamiltonijan sistema u Blochovoj bazi čvrste veze je

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) c^+_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + V_{+ion-ion} + V_{-ion-ion} + V_{el.-ion} + V_{el.+ion} + V_{+ion+ion} + H_{el.el.}, \quad (8.1)$$

gdje je

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \sum_{\boldsymbol{\delta}} t_{\boldsymbol{\delta}} e^{-i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}} \quad (8.2)$$

u aproksimaciji prvih susjeda, te elektron-elektron interakcija

$$H_{el.el.} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) c^+_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (8.3)$$

uz

$$V(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' d^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}) d^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r},\mathbf{r}') d(\mathbf{r}') d(\mathbf{r}-\mathbf{R}). \quad (8.4)$$

U dugovalnom limesu ($\mathbf{q}$=0) vrijedi

$$V(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{e^2}{\mid \mathbf{r}-\mathbf{r}' \mid} \rightarrow \frac{e^2}{R} \quad (8.5)$$

te doprinos ovih članova zajedno s $V_{el.+ion} + V_{+ion+ion} + V_{+ion-ion} + V_{-ion-ion} + V_{el.-ion}$ daje Madelungovu energiju

$$N\Big\{ -\frac{e^2}{d} + \sum_{\mathbf{R}\neq 0} \Big[\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{\mid \mathbf{R}-\mathbf{d} \mid}\Big]\Big\}, \tag{8.6}$$

gdje je N broj elementarnih ćelija. Označimo li s E_M Madelungovu energiju po elementarnoj ćeliji vrijedi

$$H = \sum_{\mathbf{k}} [E(\mathbf{k}) + E_M] c^+_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}\neq 0} V(\mathbf{q}) c^+_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \tag{8.7}$$

te je Greenova funkcija nesmetanog problema

$$G^0(\mathbf{k},\omega) = \frac{1-n(\mathbf{k})}{\omega - E(\mathbf{k}) - E_M + i\eta} + \frac{n(\mathbf{k})}{\omega - E(\mathbf{k}) - E_M - i\eta} \tag{8.8}$$

i mogu se uzimati isti dijagrami kao u ,,jellium" modelu.

Popis literature

[1] F. Zwick *et al.*, Phys. Rev. Lett. **79**, 3982 (1997).

[2] F. Zwick *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 2974 (1998).

[3] F. Zwick *et al.*, Solid State Commun. **113**, 179 (2000).

[4] F. Zwick *et al.*, Eur. Phys. J. B **13**, 503 (2000).

[5] J. Sólyom, *The Fermi Gas Model of One-Dimensional Conductors*, Hungarian Acad. of Science, Budapest, (1978).

[6] V. J. Emery, *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, ed. J. T. Devreese et al., Plenum Press, New York, 1979.

[7] J. Voit, Phys. Rev. B **47**, 6740 (1993).

[8] J. Voit, J. Phys. Condens. Matter **5**, 8305 (1993).

[9] J. Voit, **cond-mat/9510014**.

[10] P. Kopietz, V. Meden and K. Schönhammer, Phys. Rev. Lett. **74**, 2999 (1995).

[11] L. Hedin i S. Lundqvist, *Solid State Physics* Vol. 23, p. 1 Edited by Seitz &Turnbull (Academic, 1969)

[12] B. I. Lundqvist, Phys. kondens. Materie **7**, 117 (1968).

[13] B. I. Lundqvist, Phys. kondens. Materie **6**, 206 (1967).

[14] J. Moser et al., Eur. Phys. J. D **1**, 39 (1998).

[15] D. Jérome and H. J. Schulz, Adv.Phys. **31**, 299 (1982).

[16] B. Dardel et al., Europhys. Lett. **24**, 687 (1993).

[17] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).

[18] M. Grioni, ipawww.epfl.ch/lpme/LPMESubPages/Grioni/Resolution.htm

[19] V. Vescoli et al., Science **281**, 1181 (1998).

[20] A. Schwartz. et al., Phys. Rev. B **58**, 1216 (1998).

[21] C. Bourbonnais et al., J.Phys. (Paris) Lett. **45** L755 (1984).

[22] T. Takahashi, D. Jérome, K. Bechgaard, J. Phys. (Paris) **45**, 945 (1984).

[23] M. Takigawa, G. Saito, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1233 (1986).

[24] P. Wzietek et al., J. Phys. I (France) **3**, 171 (1993).

[25] C. Bourbonnais, D. Jérome, **cond-mat/9903101**, "Advances in Synthetic Metals, Twenty years of Progress in Science and Technology", edited by P. Bernier, S. Lefrant, and G. Bidan (Elsevier, New York, 1999), pp. 206-301.

[26] Dressel *et al.*, **cond-mat/0208422**.

[27] C. Bourbonnais, J. Phys. I (France) **3** 143 (1993).

[28] C. Bourbonnais et al., Phys. Rev. Lett. **62** 1532 (1989).

[29] L. Gorkov, J. Phys. I (France) **6**, 1697 (1996).

[30] L. P. Gorkov and M. Mochena, Phys. Rev. B **57**, 6204 (1998).

[31] V. Yakovenko et al., **cond-mat/9802172**, Eur. Phys J. B **11**, 385 (1999).

[32] T. Giamarchi, Phys. Rev. B **44**, 2905 (1991).

[33] T. Giamarchi, Physica B **230-232**, 975 (1997).

[34] T. Giamarchi and A. J. Millis, Phys. Rev. B **46**, 9325 (1992).

[35] S. Hüfner, *Photoelectron Spectroscopy*, (Springer Verlag, Berlin, 1995).

[36] *Photoemission in Solids I*, edited by M. Cardona and L. Ley, (Springer Verlag, Berlin, 1978).

[37] I. Lindau, S. B. M. Hagström, J. Phys. E **4**, 936 (1971).

[38] L. I. Schiff, *Quantum mechanics*, McGraw-Hill, 1968.

[39] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1971.

[40] G. D. Mahan, *Many Particle Physics*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2000.

[41] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Dover Publications, Inc., New York, 1975.

[42] K.Penc and J. Solyom, Phys. Rev. B **47**, 6273 (1993).

[43] V. Meden and K. Schönhammer, Phys. Rev. B **46**, 15753 (1992).

[44] P. Kopietz, V. Meden and K. Schönhammer, Phys. Rev. B **56**, 7232 (1997).

[45] S. Barišić, J. Physique **44**, 185 (1983).

[46] S. Botrić and S. Barišić, J. Physique **45**, 185 (1984).

[47] H. J. Schulz, J. Phys. C **16**, 6769 (1983).

[48] P. Županović, A. Bjeliš and S. Barišić, Z. Phy. B **97**, 113 (1995).

[49] P. Županović, A. Bjeliš, S. Barišić, Z. Phys. B **101**, 387 (1996).

[50] P. Županović, A. Bjeliš i S. Barišić, Z. Phys. B **101**, 397 (1996).

[51] P. Županović, A. Bjeliš, Ž. Agić, Fizika A (Zagreb) **10**, 203 (2001).

[52] P. F. Williams, A. N. Bloch, Phys. Rev. B **10**, 1097 (1974).

[53] P. Županović, *Doktorska teza*, Zagreb, 1998.

[54] D. S. Dessau *et al.*, Phys. Rev. Lett. **71**, 2781, (1993).

[55] S. N. Artemenko i S. V. Remizov, **cond-mat/0109264**.

Životopis

Rođena sam 3. srpnja 1973. godine u Splitu, gdje sam završila osnovnu i srednju školu.
Fakultet prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja Sveučilišta u Splitu, smjer matematika-fizika, upisala sam 1992. godine. Diplomsku radnju pod nazivom „Dielektrična svojstva kristala s većim brojem elektronskih vrpci" izrađenu pod vodstvom prof. dr. Davora Juretića i dr. Paška Županovića obranila sam 1997. godine.
Poslijediplomski studij iz fizike čvrstog stanja upisala sam na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu 1998. godine.
Od 1998. godine radim na Fakultetu prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja Sveučilišta u Splitu kao mlađi asistent na Zavodu za fiziku.

Popis radova

1. P. Županović, A. Bjeliš, Ž. Agić: **Discrete approach to incoherent excitations in conductors**, FIZIKA A (Zagreb) **10** (2001) 4, 203-214
2. Ž. Agić, P. Županović, A. Bjeliš: **Photo-emission properties of quasi-one-dimensional conductors**, Journal de physique, colloque, prihvaćen