SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Željana Bonačić Lošić

SPEKTRALNA SVOJSTVA KVAZIJEDNODIMENZIONALNIH ELEKTRONSKIH SUSTAVA

Disertacija

Zagreb, 2006.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Željana Bonačić Lošić

SPEKTRALNA SVOJSTVA KVAZIJEDNODIMENZIONALNIH ELEKTRONSKIH SUSTAVA

Disertacija
predložena Fizičkom odsjeku
Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu
radi stjecanja akademskog stupnja doktora prirodnih znanosti fizike

Zagreb, 2006.

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

Srdačno se zahvaljujem svom voditelju, prof. dr. sc. Aleksi Bjelišu, na sveukupnoj pomoći i podršci, te pitanjima, savjetima, komentarima i prijedlozima koje mi je dao i koji su mi uvijek bili vodilja u radu na ovoj disertaciji.

Zahvaljujem se i prof. dr. sc. Slavenu Barišiću koji je svojim komentarima mog magistarskog rada usmjerio nastavak mog istraživanja čiji je rezultat ova disertacija.

Posebno se zahvaljujem i dr. sc. Silviji Tomić koja mi je svojim konstruktivnim primjedbama pomogla u prezentaciji realnih sistema i eksperimentalnih rezultata.

Zahvaljujem se i doc. dr. sc. Pašku Županoviću na strpljenju, podršci i suradnji tijekom izrade objavljenog znanstvenog rada koji je dio ove disertacije.

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.

Sadržaj

1 Uvod **9**

2 Eksperimentalne informacije **14**

2.1 Bechgaardove soli 14

2.2 Kutno razlučiva fotoemisija elektrona 26

2.2.1 Fizikalni principi kutno razlučive fotoemisije 26

2.2.2 Shematski prikaz eksperimenta 27

2.2.3 Hamiltonijan elektron-foton interakcije u bazi Blochovih funkcija čvrste veze 29

2.2.4 ,,Sudden" aproksimacija 29

3 Greenova funkcija **32**

3.1 Greenova funkcija u Blochovoj bazi čvrste veze 32

3.1.1 Greenova funkcija 32

3.1.2 Spektralna funkcija 34

3.1.3 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenata 36

3.2 Spektralna svojstva nesmetanog problema u Blochovoj bazi čvrste veze . 38

3.2.1 Greenova funkcija 38

3.2.2 Spektralna funkcija 38

3.2.3 Gustoća stanja 40

3.3 Spektralna svojstva Fermijevih tekućina 42

3.3.1 Fermijev plin 42

3.3.2 Osnovne pretpostavke Landauove teorije Fermijevih tekućina . . . 43

3.3.3 Greenova funkcija u Landauovoj teoriji Fermijevih tekućina 43

3.4 Spektralna svojstva Luttingerovih tekućina 45

3.4.1 Luttingerov model 45
3.4.2 Slabo vezani metalni lanci koji međudjeluju dugodosežnim Coulombovom interakcijom i bez prijelaza elektrona s lanca na lanac 51
3.4.3 Efekt konačnog integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance . . 53
3.5 Greenova matrica elektrona u kristalu s većim brojem elektronskih vrpci u G_0W_0 aproksimaciji 55
3.5.1 RPA dielektrična matrica 55
3.5.2 G_0W_0 Greenova matrica 56
3.6 G_0W_0 Greenova funkcija u ,,jellium" modelu 58
3.6.1 G_0W_0 Greenova funkcija 58
3.6.2 Spektralna funkcija 59
3.6.3 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenta 61

4 Model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom u kojem nema prijelaza elektrona s lanca na lanac 62
4.1 Dielektrična funkcija i pobuđenja 62
4.2 Greenova funkcija 66
4.3 Spektralna funkcija 75
4.4 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenta 77

5 Model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom s konačnom širinom vrpce u smjeru okomitom na lance 81
5.1 Dielektrična funkcija i pobuđenja 81
5.2 Greenova funkcija 85
5.3 Spektralna funkcija 93
5.4 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenta 96

6 Zaključak 99

TEMELJNA DOKUMENTACIJA KARTICA

Sveučilište u Zagrebu
Prirodoslovno-matematički fakultet
Fizički odsjek

Disertacija

SPEKTRALNA SVOJSTVA KVAZIJEDNODIMENZIONALNIH ELEKTRONSKIH SUSTAVA

ŽELJANA BONAČIĆ LOŠIĆ

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

U ovom radu izračunata je jednočestična spektralna funkcija i odgovarajuće iz nje izvedene veličine za kvadratnu rešetku paralelnih lanaca s trodimenzionalnom dugodosežnom Coulombovom elektron-elektron interakcijom u okviru G_0W_0 aproksimacije predpostavljajući prvo jednodimenzionalnu elektronsku disperziju, a zatim uključujući i konačan integral prijelaza u transverzalnom smjeru. Dok nema transverzalnog integrala prijelaza spektralna funkcija nema niskoenergijsku kvazičesticu, već sadrži strukturu širine reda veličine plazmonske energije. Ovakva spektralna svojstva su u kvalitativnom slaganju sa spektrima Bechgaardovih soli dobivenim kutno razlučivom fotoemisijom.

(106 stranica, 44 crteža, 72 literarna 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: 14. 03. 2006.

BASIC DOCUMENTATION CARD

University of Zagreb
Faculty of Science
Department of Physics

PhD Thesis

SPECTRAL PROPERTIES OF QUASI-ONE-DIMENSIONAL ELECTRON SYSTEMS

ŽELJANA BONAČIĆ LOŠIĆ

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

One-particle spectral function and corresponding derived quantities for the square lattice of parallel chains with the three-dimensional long-range Coulomb electron-electron interaction within the G_0W_0 approximation is calculated assuming first one-dimensional electron dispersion, and in addition including the finite transfer integral in transversal direction. As long as there is no transversal transfer integral the spectral function doesn't have low-energy quasi-particle, but contains broad structure with the width of the order of plasmon energy. Such spectral properties are in qualitative agreement with ARPES spectra of Bechgaard salts.

(106 pages, 44 figures, 72 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: 14 March 2006

Poglavlje 1

Uvod

Mjerenja kutno razlučivih fotoemisijskih spektara nekih kvazijednodimenzionalnih organskih vodiča s lančastom strukturom rešetke u normalnoj fazi pokazuju izostanak kvazičestičnih pobuđenja na kemijskom potencijalu i pojavu širokog maksimuma na energijama koje su u pravilu veće od širine elektronske vrpce [1, 2, 3, 4].

Spektralna svojstva ovih kvazijednodimenzionalnih vodiča su umnogome različita od onih standardnih trodimenzionalnih metala koji su teorijski opisani Landauovom teorijom Fermijevih tekućina. Centralna predpostavka ove teorije je postojanje kvazičestice u spektralnoj funkciji na energijama blizu kemijskog potencijala i s valnim vektorima blizu Fermijevog valnog vektora [5]. Ova kvazičestica u spektralnoj funkciji dovodi do diskontinuiteta u funkciji distribucije momenta na Fermijevom valnom vektoru [6, 7].

Slika Fermijeve tekućine nije prikladna za opis jednodimenzionalnih interagirajućih elektronskih sustava za koje se koristi model Luttingerove tekućine [8, 9]. U ovom modelu svojstvena stanja su dugovalni nabojski i spinski kolektivni modovi kao kombinacije niskoenergijskih elektronsko-šupljinskih pobuđenja. Spektralna svojstva modela su određena konstantama $K_{\rho,s}$ i brzinama $v_{\rho,s}$ nabojskih (ρ) i spinskih pobuđenja (s) koje ovise o interakciji. Spektralna funkcija izračunata za Luttingerov model sa spinom i spinsko-rotacijskom invarijantnošću za Fermijev valni broj i blizu kemijskog potencijala $A(k_F, \omega) \sim \mid \omega \mid^{\alpha-1}$, uz interakcijski ovisnu anomalnu dimenziju $\alpha = (K_\rho + K_\rho^{-1} - 2)/4$, pokazuje da se spektralna težina pomiče s kemijskog potencijala za α koja prelazi jedinicu [10]. Pripadna funkcija distribucije momenta je kontinuirana za Fermijev valni broj. Nadalje, gustoća stanja u ovom modelu blizu kemijskog potencijala također pokazuje potencijsko ponašanje $N(\omega) \sim |\omega|^\alpha$ [10].

Spektri Bechgaardovih soli dobiveni kutno razlučivom fotoemisijom (ARPES) pokazuju široki maksimum intenziteta na energijama reda veličine plazmonske energije i nestajanje spektralne težine na kemijskom potencijalu. Ovi spektri bi mogli biti u kvalitativnom slaganju sa slikom Luttingerove tekućine, iako postoje naznake kao što je neovisnost spektralne težine o valnom vektoru u dijelu koji linearno pada na kemijski potencijal da bi glavne osobine ovih spektara mogle biti pod utjecajem površinskih efekata [11]. Interpretacija u slici Luttingerove tekućine zahtjeva α veći od jedinice da bi pripadna spektralna funkcija bila konzistentna ARPES spektrima. Takav α moguć je u sistemima s dovoljno jakom dugodosežnom Coulombovom interakcijom [12, 13, 14, 15].

Anomalna dimenzija α konzistentna ARPES spektrima Bechgaardovih soli daje konstantu K_ρ u području $K_\rho < 0.17$, što se slaže s nekim drugim nezavisnim mjerenjima. Naime, temperaturna ovisnost relaksacije nuklearnog spina radi utjecaja rešetke T_1^{-1} ima konstantu $K_\rho \approx 0.1$ [16, 17], dok s druge strane, optička vodljivost daje $K_\rho = 0.23$ [4, 18, 19], a mjerenja otpornosti daju $K_\rho = 0.25$ [20, 21].

Bechgaardove soli su zbog svoje anizotropne elektronske disperzije pogodne za analizu spektralnih svojstava pri prijelazu iz jednodimenzionalnog režima u trodimenzionalni [22]. Proučavajući model slabo vezanih metalnih lanaca s trodimenzionalnom Coulombovom interakcijom Kopietz, Meden i Schönhammer došli su do zaključka da ponašanje Luttingerove tekućine u ovom modelu postoji isključivo za slučaj kad je integral prijelaza u okomitom smjeru $t = 0$ [15, 23]. Našli su da za svaki konačan t postoji kvazičestični ostatak koji je dobro poznato svojstvo Fermijeve tekućine.

Spektralna svojstva na energijama reda veličine plazmonske energije i širine vrpce također postaju zanimljiva radi širokog maksimuma u ARPES spektrima na energiji reda veličine $1eV$, iako i ovo područje energija može biti pod utjecajem površinskih efekata. Kako je razmatranje u okviru slike Luttingerove tekućine ograničeno na niske energije, područje energija u kojem se nalazi široki maksimum je izvan dosega metoda u okviru ove slike. U ovom radu istražujemo širu energijsku skalu reda veličine plazmonske energije i širine vrpce u okviru tzv. G_0W_0 aproksimacije za Greenovu funkciju interagirajućih elektrona [24, 25]. Analiziramo spektralna svojstva kvazijednodimenzionalnih metala u kvadratnoj rešetki paralelnih lanaca s trodimenzionalnom dugodosežnom Coulombovom interakcijom koja kao što je već naglašeno ima bitnu ulogu u fotoemisijskim spektrima

Bechgaardovih soli. Prvo uzimamo jednodimenzionalnu elektronsku disperziju [24], a zatim proširujemo razmatranje i na slučaj disperzije s konačnim integralom prijelaza u transverzalnom smjeru koja je bliža stvarnoj disperziji elektrona u Bechgaardovim solima [25].

G_0W_0 aproksimacija korištena u određivanju spektralne funkcije za trodimenzionani izotropni ,,jellium", kao dobro poznat sistem za koji je Landauova teorija Fermijevih tekućina primjenjiva, otkriva postojanje kvazičestice u području $\mu - \Omega_{pl} < \omega < \mu + \Omega_{pl}$, gdje je Ω_{pl} minimum optičke dugovalne plazmonske disperzije, te strukturu s konačnom spektralnom težinom uvjetovanom plazmonskim modom koja se pojavljuje ispod, odnosno iznad ovih energija [26, 27, 28].

G_0W_0 aproksimacija općenito ne određuje potpuno samousaglašeno položaj kemijskog potencijala u homogenom elektronskom plinu [29], a pogotovo ne u nehomogenim sustavima [30]. Ovaj problem se obično rješava uvođenjem pomaka kemijskog potencijala koji ulazi u Greenovu funkciju neinteragirajućeg sustava u vlastitoj energiji na način da se njen kemijski potencijal samousaglašeno podudara s kemijskim potencijalom konačne Greenove funkcije [30, 31]. Primjenit ćemo ovaj postupak i u našem pristupu računu Greenove funkcije.

Svojstvo plazmonskog moda u slučaju jednodimenzionalne elektronske vrpce je anizotropna akustična disperzija u dugovalnoj granici. Budući da kolektivni plazmonski mod pokriva cijelo niskoenergijsko područje, pitanje je hoće li se niskoenergijska kvazičestica pojaviti u spektralnoj funkciji. Pokazat ćemo da u slučaju kad nema prijelaza elektrona u transverzalnom smijeru nema ni takve kvazičestice i da spektralnom funkcijom dominira široka struktura širine reda veličine plazmonske energije.
Nakon toga, proučavat ćemo i promjenu spektralne funkcije koja je izazvana promjenom plazmonske disperzije pri uključivanju integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance u elektronsku disperziju. Naime, konačan t u elektronskoj vrpci dovodi do otvaranja optičkog procijepa u plazmonskoj disperziji dajući joj trodimenzionalni karakter. U samoj spektralnoj funkciji optički karakter anizotropne plazmonske disperzije dovodi do pojave niskoenergijske kvazičestice uz široku strukturu koja je prisutna na energijama reda veličine plazmonske energije. Štoviše, postupak uključivanja integrala prijelaza u okomitom smjeru omogućit će nam direktan uvid u prijelaz iz režima ne-Fermijeve

tekućine u režim Fermijeve tekućine. Pokazat će se da spektralna težina kvazičestice prelazi na široku strukturu prisutnu na energijama reda veličine plazmonske energije prilikom zatvaranja optičkog procijepa u plazmonskoj disperziji pri smanjivanju integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance.

Rad je podijeljen na šest poglavlja.

U drugom poglavlju iznijet je kratak pregled eksperimentalnih informacija o kvazijednodimenzionalnim vodičima $(TMTSF)_2X$ (Bechgaardovim solima) čiji ARPES spektri potiču kasniju teorijsku analizu. Također je dan i pregled same primjenjene eksperimentalne metode kutno razlučive fotoemisije, te je pokazana veza između eksperimentalno mjerljive struje fotoelektrona sa spektralnom matricom u okviru ,,sudden" aproksimacije.

Treće poglavlje započinje uvođenjem Greenove funkcije u Blochovoj bazi čvrste veze i pomoću nje izvedenih veličina kao što su spektralna funkcija, gustoća stanja i funkcija distribucije momenta. Zatim slijedi pregled spektralnih svojstava Fermijevih tekućina, te Luttingerovih tekućina s posebnim naglaskom na dosadašnja saznanja o problemu metalnih lanaca koji međudjeluju dugodosežnom Coulombovom interakcijom. Nadalje, daje se pregled G_0W_0 aproksimacije s RPA zasjenjenom Coulombovom interakcijom na primjeru kristala s većim brojem elektronskih vrpci. Poglavlje završava prikazom spektralnih svojstava ,,jellium" modela u okviru G_0W_0 aproksimacije s RPA zasjenjenim Coulombovim potencijalom.

U četvrtom poglavlju G_0W_0 aproksimacija primjenjuje se na model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom u kojem nema prijelaza elektrona s lanca na lanac. Analitički se dobija recipročna Greenova funkcija na cijeloj energijskoj skali. Diskutiraju se njen realni i imaginarni dio, te pomoću njih određena spektralna funkcija s posebnim naglaskom na niskoenergijsko područje u kojem se ne pojavljuje kvazičestica. Numerički se računaju gustoća stanja i funkcija distribucije momenta u kojima se također očituje nepostojanje niskoenergijske kvazičestice u spektralnoj funkciji.

U petom poglavlju G_0W_0 aproksimacija primjenjuje se na model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom s konačnim integralom prijelaza u smjeru okomitom na lance. Pokazuje se da Greenova funkcija i iz nje izvedene veličine spektralna funkcija,

gustoća stanja i funkcija distribucije momenta u ovom slučaju imaju karakter pripadnih veličina trodimenzionalne Fermijeve tekućine. Zatim se proučava kako postupan rast transverzalnog integrala prijelaza izaziva jačanje kvazičestičnog pobuđenja.

Konačno u šestom poglavlju iznosimo najznačajnije rezultate ovo rada.

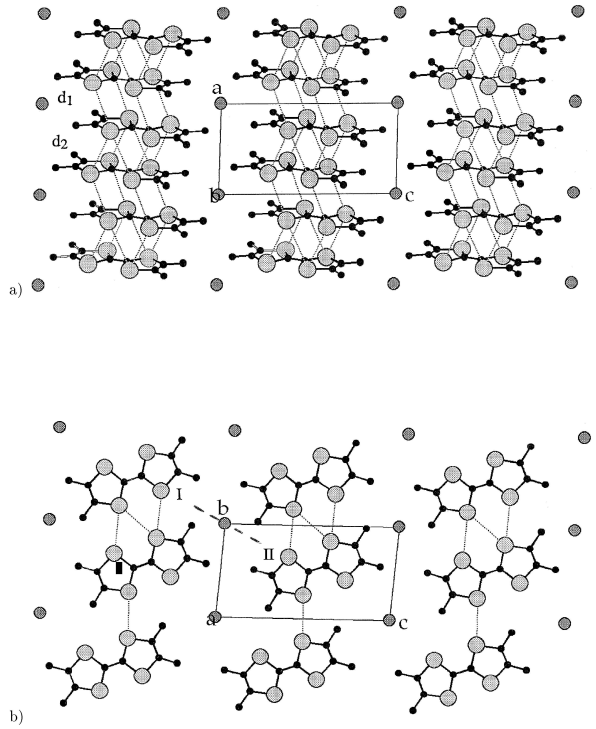
Poglavlje 2

Eksperimentalne informacije

2.1 Bechgaardove soli

Otkriće organskih vodiča potaknuto je potragom za materijalima koji bi imali temperaturu prijelaza u supravodljivu fazu iznad sobne temperature. Prvo je sintetiziran organski vodič $TTF-TCNQ$ koji je sastavljen od planarnih molekula donora TTF i akceptora $TCNQ$ koji se slažu u lance istovrsnih molekula. Naboj po molekuli u lancima nije cijeli broj tj. dolazi do djelomičnog prijelaza naboja s donorskih na akceptorske molekule što osigurava djelomičnu popunjenost njihovih najviših elektronskih vrpci. Zbog molekulskih π orbitala koje se prekrivaju u smjeru lanaca elektroni su delokalizirani duž lanaca. Slabo prekrivanje orbitala u druga dva smjera daje elektronskim disperzijama lanaca TTF i $TCNQ$ kvazijednodimenzionalni karakter. $TTF-TCNQ$ u metalnoj fazi pokazuje jaku vodljivost duž lanaca koja je do tri reda veličine veća nego vodljivost okomito na lance čineći $TTF-TCNQ$ kvazijednodimenzionalnim vodičem. Vodljivost duž lanaca $TTF-TCNQ$ na sobnoj temperaturi je $500\Omega^{-1}cm^{-1}$ i povećava se smanjenjem temperature dosežući $10^4\Omega^{-1}cm^{-1}$ na 60K. Na 54K $TTF-TCNQ$ iz metalne faze prelazi u fazu vala gustoće naboja.

Jednodimenzionalne vrpce s disperzijom u jednom organskom vodiču su po prvi put kutno razlučivom fotoemisijom opažene upravo kod $TTF-TCNQ-a$ [2]. Međutim, usporedba s jednočestičnim vrpcama u aproksimaciji čvrste veze daje širine 2.4eV za $TCNQ$ vrpcu i 0.95eV za TTF vrpcu što je 2-4 puta više nego što pokazuju ranije teorijske i eksperimentalne procjene [32]. Također, opaženo je i gušenje spektralne težine na kemijskom potencijalu. Ovakvo ponašanje spektara dobivenih kutno razlučivom fotoemisijom zahtjeva uključivanje elektron-elektron interakcije u njihovoj



Slika 2.1: Pogled na lance $(TMTSF)_2X$ (gornja slika) i okomito na njih (donja slika).

interpretaciji. Kako gušenje na kemijskom potencijalu nije u skladu s predviđanjima Landauove teorije Fermijevih tekućina, očekuje se da bi interpretacije u skladu s 1D modelima interagirajućih elektrona mogle bolje objasniti ove spektre.
Napomenimo, da su $TTF - TCNQ$ pogodni za proučavanje unutrašnjih svojstava kvazijednodimenzionalnih materijala kutno razlučivom fotoemisijom jer na njihove spektre površinski efekti nemaju utjecaja [11].

Jedan od predstavnika kvazijednodimenzionalnih organskih vodiča su i Bechgaardove soli $(TMTSF)_2X$. Organske molekule TMTSF (sl. 2.1) koje su gotovo planarne slažu se u lance koji su razdvojeni jednim od anorganskih aniona X (ClO_4, ReO_4, NO_3, PF_6,AsF_6 , ...) (sl. 2.1). $(TMTSF)_2X$ kristaliziraju u triklinskoj prostornoj grupi i sadrže dvije molekule TMTSF i jedan anion po jediničnoj ćeliji. Planarnost molekula TMTSF omogućava njihovo blisko pakiranje tako da je srednja udaljenost između ovih molekula $a_s = 3.645A$ što osigurava prekrivanje π orbitala između susjednih molekula u smjeru lanaca. Tako su elektroni ovih molekula delokalizirani ne samo unutar same

molekule nego i duž lanca kojem ona pripada. Jedan anion uzima jedan elektron zajedno od dvije molekule TMTSF što dovodi do tročetvrtinskog popunjenja elektronske vrpce koje omogućava metalnu vodljivost duž lanaca. Tipični omjeri vodljivosti na sobnoj temperaturi za Bechgaardove soli su $\sigma_a : \sigma_b : \sigma_c = 1000 : 10 : 0.01$, gdje a označava smjer duž lanaca, a b i c označavaju druga dva smjera ortorombske rešetke.
Zamjenom atoma Se u $TMTSF$ atomom S dobivamo kvazijednodimenzionalne vodiče $(TMTTF)_2X$ kod kojih postoji dimerizacija molekula duž lanaca. Posljedica dimerizacije je polupopunjenje vodljive vrpce.

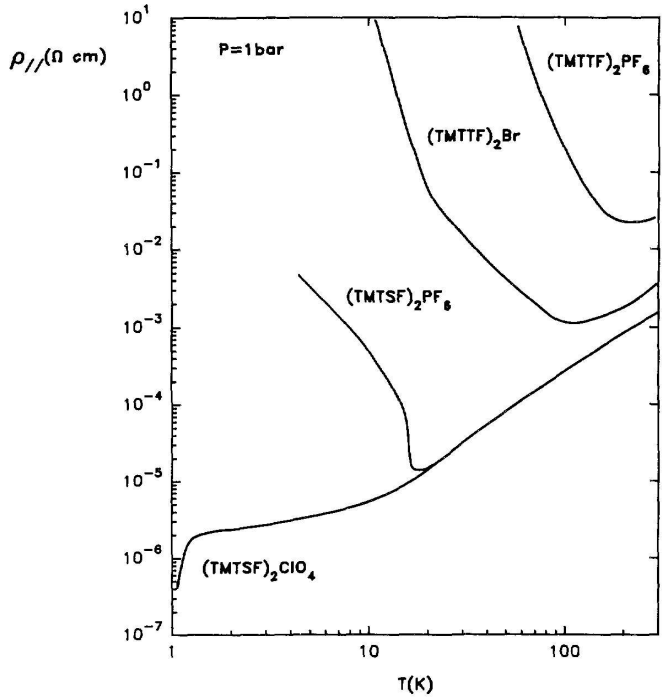
Jednočestična teorija vrpci u aproksimaciji čvrste veze uzima jednu vrpcu po lancu s energijom

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

gdje su t_a, t_b i t_c integrali prijelaza duž osi konstanti a, b i c ortorombske rešetke. Integral prijelaza duž lanaca Bechgaardovih soli na sobnoj temperaturi t_a je reda veličine 250 meV, a integrali prijelaza u smjerovima okomitim na lance $t_b = 25meV$ i $t_c = 1meV$ [32]. $(TMTTF)_2X$ soli su još više anizotropne, a integrali prijelaza su im $t_a = 250meV$, $t_b = 10meV$ i $t_c = 1meV$.

Dimenzionalnost sistema se određuje iz omjera termalne energije k_BT i parametara t_a, t_b i t_c. Kad je $k_BT/t_i \gg 1$ neodređenost pripadnog valnog vektora je velika u odnosu na veličinu Brillouinove zone $\delta k_i \gg 1/i$ te je neodređenost u gibanju elektrona u i-tom smjeru mala $\delta r_i < i$. Tako se kod anizotropnih sistema 3D ponašanje javlja tek za tako niske temperature za koje vrijedi $k_BT/t_i \ll 1$ za svaki i.
U slučaju Bechgaardovih soli se 1D ponašanje očekuje iznad 200K, a 3D ispod 10K.

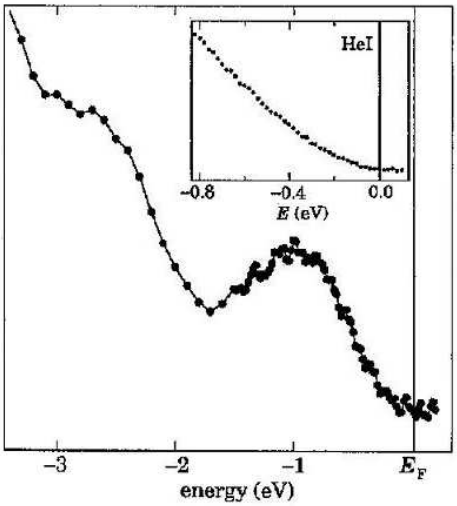
Dimenzionalnost sistema ima značajnu ulogu u izboru modela prikladnog za opis fizikalnih svojstava $(TMTSF)_2X$ koja zahtijevaju uključivanje elektron-elektron interakcije. Trodimenzionalni sistem interagirajućih elektrona u metalima opisan je Landauovom teorijom Fermijevih tekućina koja počiva na pretpostavci da slabo pobuđena stanja interagirajućih elektrona, tzv. kvazičestice, korespondiraju $1-1$ s onima neinteragirajućeg plina [5]. Kvazičestica se stvara iz slobodnog elektronskog



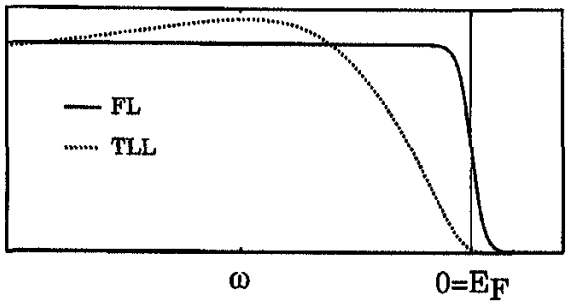
Slika 2.2: Temperaturna ovisnost otpornosti mjerene duž lanaca za $(TMTTF)_2X$ i $(TMTSF)_2X$ [4].

plina adijabatskim uključivanjem elektron-elektron interakcije.
Slika Fermijeve tekućine ne vrijedi za 1D sistem kojeg opisuje bozonizacijskom tehnikom egzaktno rješiv Luttingerov model interagirajućih elektrona. Niskoenergijske kvazičestice nisu prisutne u 1D sistemu interagirajućih elektrona već se pojavljuju nabojska i spinska kolektivna akustična pobuđenja kao svojstvena stanja sistema. Ovi dugovalni nabojski i spinski modovi su kombinacije niskoenergijskih elektronsko-šupljinskih pobuđenja. Svojstva ovog 1D modela određena su konstantama $K_{\rho,s}$ i brzinama $v_{\rho,s}$ nabojskih (ρ) i spinskih (s) pobuđenja koje ovise o interakciji [33, 34, 35].
Zbog jake anizotropnosti organski kvazijednodimenzionalni vodiči odlični su sistemi za proučavanje jednodimenzionalnih svojstava.

Prema jednočestičnoj teoriji vrpci $(TMTTF)_2X$ i $(TMTSF)_2X$ su metali s polu (četvrtinskim) popunjenjem vrpce. Međutim, elektronske korelacije mijenjaju ovu jednostavnu sliku. Metalna otpornost $\rho(T)$ Bechgaardovih soli duž lanaca prikazana je na slici 2.2. Ona monotono pada s temperaturom do temperature prijelaza u VGS fazu



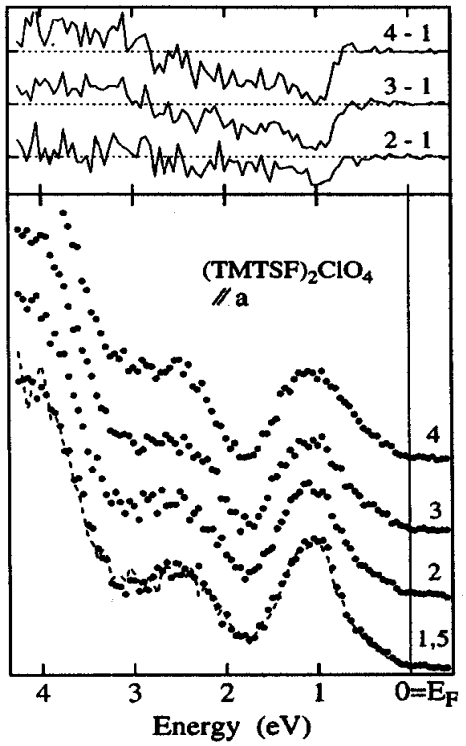
Slika 2.3: PES spektar $(TMTSF)_2PF_6$ pri temperaturi 50 K [36]. Slični spektri dobijeni su i za $(TMTSF)_2ClO_4$ te $(TMTSF)_2AsF_6$.



Slika 2.4: PES spektar za Fermijevu tekućinu i za Luttingerovu tekućinu.

(val gustoće spina) koja je 12K i 6K za $X = PF_6$ i ClO_4. S druge strane, $(TMTTF)_2X$ za $X = PF_6$ i Br imaju minimum otpornosti za $T_\rho \sim 100 - 200K$ koji je pokazatelj izolatorskog ponašanja. Minimum otpornosti ukazuje na procijep u spektru pobuđenja elektrona koji se može pokušati interpretirati u svjetlu niske dimenzionalnosti i odbojne interakcije elektrona o čemu će biti riječi kasnije u ovom poglavlju.

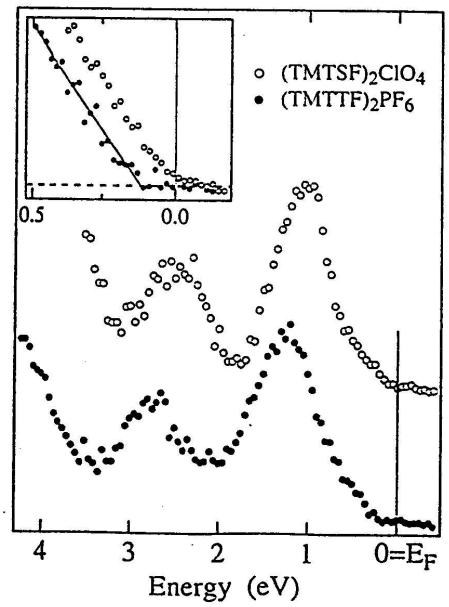
Rezultati fotoemisijskih eksperimenata na Bechgaardovim solima u metalnoj fazi pokazuju svojstva koja nisu u skladu s onima koja predviđa Landauova teorija Fermijevih tekućina. U kutno integriranom spektru ova teorija pokazuje postojanje konačnog intenziteta na Fermijevoj energiji, tzv. Fermijevog ruba dok su suprotno tome fotoemisijski eksperimenti na $(TMTSF)_2PF_6$ na 50 K pokazali nestajanje spektralne



Slika 2.5: 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.

težine na E_F u kutno integriranom spektru (PES) i pojavu širokog maksimuma na $-1.2eV$ (sl. 2.3) [36]. Nepostojanje Fermijevog ruba u kutno integriranom spektru moglo bi biti posljedica elektronskih korelacija u 1D metalu. Kutno integrirani spektar Luttingerovog modela potencijski iščezava na Fermijevoj energiji po $\mid \omega \mid^{\alpha}$ (sl. 2.4), gdje je $\alpha = (K_\rho + K_\rho^{-1} - 2)/4$ interakcijski ovisan parametar tzv. anomalna dimenzija. Interpretacija eksperimentalnih podataka PES-a u okviru Luttingerovog modela sugerira $\alpha > 1$ $(K_\rho < 0.17)$ [36].

U kutno razlučivom spektru Landauova teorija Fermijevih tekućina predviđa kvazičesticu na kemijskom potencijalu za Fermijev moment k_F. Za $k \neq k_F$ kvazičestica se udaljava od kemijskog potencijala i postaje šira i niža. Nasuprot tome u kutno razlučivom spektru (ARPES) $(TMTSF)_2ClO_4$ na 150 K [1, 3, 4] spektralna težina nestaje na Fermijevoj energiji za sve valne vektore i pojavljuje se široki maksimum na 1eV koji ne pokazuje disperziju i svojim niskoenergijskim dijelom koji također ne ovisi o valnom vektoru gotovo linearno pada na E_F (sl. 2.5) [1, 3, 4]. Nepostojanje

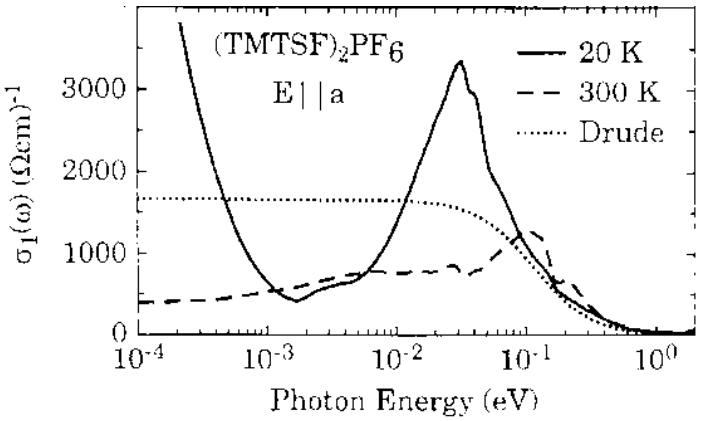


Slika 2.6: Usporedba ARPES spektar duž lanaca $(TMTSF)_2ClO_4$ i $(TMTTF)_2PF_6$ u centru zone [1]. $(TMTTF)_2PF_6$ pokazuju pomak ruba spektra za $100 \pm 20meV$.

kvazičestica blizu Fermijeve energije je u skladu s nepostojanjem Fermijevog ruba u kutno integriranom spektru. Štoviše kutno razlučivi spektar za kojeg Luttingerov model predviđa $A(k_F, \omega) \sim |\omega|^{\alpha-1}$ je u skladu s velikom anomalnom dimenzijom α ($\alpha > 1$) koju sugerira kutno integrirani spektar [1, 3, 4]. Međutim neovisnost spektralne težine o valnom vektoru u dijelu koji linearno pada na E_F nije u skladu s Luttingerovim modelom [37] koji predviđa ovisnost spektralne težine o momentu k.

Fotoemisijski spektar Bechgaardovih soli blizu Fermijeve površine može biti pod jakim utjecajem površinskih efekata [11]. Stoga je potreban oprez kad god se ponašanje fotoemisijskog spektra na Fermijevoj energiji uzima kao jedini dokaz neobičnog 1D mnogočestičnog stanja.

Spektri $(TMTTF)_2PF_6$ dobiveni kutno razlučivom fotoemisijom su pomaknuti prema višim energijama u odnosu na spektre $(TMTSF)_2ClO_4$ na način da je rub spektra pomaknut od kemijskog potencijala za $\Delta \approx 100meV$ (sl. 2.6) [1]. Ista situacija se sreće i kod spektara $(TMTTF)_2Br$ koji imaju pomak od kemijskog potencijala $\Delta \approx 30meV$ [1, 4]. Ni spektri ovih $TMTTF$ sustava nemaju kvazičesticu s disperzijom.



Slika 2.7: Optička vodljivost duž lanaca za $(TMTSF)_2PF_6$ [4].

Slika Luttingerove tekućine preko konstante K_ρ povezuje rezultate različitih eksperimenata.

Konstanta K_ρ može se odrediti i iz optičke vodljivosti Bechgaardovih soli koja ne odražava površinska svojstva materijala. Optička vodljivost Bechgaardovih soli značajno se razlikuje od one običnih metala koja je dobro opisana Drudeovim modelom (sl. 2.7) [4, 18, 19]. Naime, na niskoj temperaturi pojavljuje se mod na nultoj frekvenciji i procijep na 25 meV, dok je najveći dio spektralne težine optičke vodljivosti iznad ovog procijepa. Mod na nultoj frekvenciji odgovoran je za metalnu vodljivost iako nosi 1% spektralne težine. Za analizu ovih svojstava optičke vodljivosti treba uzeti u obzir dimenzionalni prijelaz do kojeg dolazi radi konačnog integrala prekrivanja okomitog na lance u kvazijednodimenzionalnim sustavima $(TMTSF)_2X$, te usporediti njihovo ponašanje s ponašanjem sustava $(TMTTF)_2X$. Pošto je granica za prijelaz iz 2D u 1D $t_b = 25meV$ kod $(TMTSF)_2PF_6$, niskoenergijski mod u principu bi se mogao opisati dvodimenzionalnom teorijom interagirajućih elektrona, dok bi se dio spektralne težine optičke vodljivosti iznad 25 meV mogao pokušati opisati u jednodimenzionalnoj slici Luttingerovim modelom. Naime, polu (četvrtinsko) popunjenje u Luttingerovom modelu pojačava dodatni član Hamiltonijana tzv. Umlapp član i sustav postaje Mott izolator s procijepom. Širina procijepa jako ovisi o popunjenju vrpce i jakosti elektron-elektron interakcije. Za polupopunjenu vrpcu Mottov procijep se otvara već za slabu odbojnu interakciju između nositelja naboja ($K_\rho < 1$). Vodiči s četvrtinskim popunjenjem vrpce

postaju izolatori kad je $K_\rho < 0.25$.

Eksperimentalni podaci za optičku vodljivost duž lanaca $(TMTSF)_2PF_6$ prikazani na slici 2.7 pokazuju procijep na 25meV koji je pripisan prisustvu Mottovog procijepa [4, 18, 19]. Za frekvencije iznad procijepa vrijedi

$$\sigma_1(\omega) \propto \omega^{16K_\rho - 5}. \tag{2.2}$$

Kako je za rezultate prikazane na slici 2.7 pri visokim frekvencijama $\sigma_1(\omega) \propto \omega^{-1.3}$ dobije se $K_\rho = 0.23$ [4, 18, 19].

Spomenimo da je za $(TMTTF)_2X$ sustave, kako imaju polupopunjenu vrpcu, već mala odbojna interakcija dovoljna da postanu Mottovi izolatori. Za ove sustave je procijep toliko velik da je integral prijelaza u okomitom smjeru na lance nadvladan izolatorskom prirodom 1D faze i nije relevantan. Uistinu, $(TMTTF)_2X$ za $X = PF_6$ i Br su izolatori na niskim temperaturama sa znatnim Mottovim procijepom. Spektri dobiveni kutno razlučivom fotoemisijom sugeriraju $E_{procijep} = 2\Delta \approx 0.2eV$ za $(TMTTF)_2PF_6$ i 60meV za $(TMTTF)_2Br$ [4].

Ako postoji procijep, longitudinalna otpornost ovisi o temperaturi po zakonu

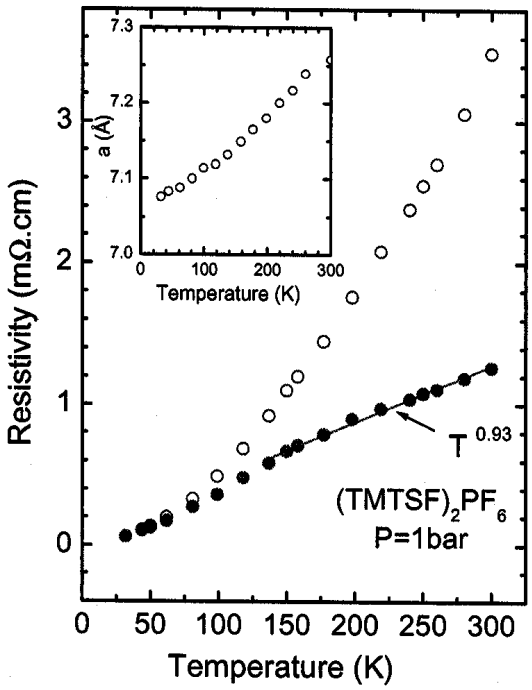
$$\rho_a(T) \propto T^{16K_\rho - 3} \tag{2.3}$$

za visoke temperature [20]. Eksperimentalni podaci za $(TMTSF)_2PF_6$ pokazuju da je od 300K do 150K $\rho_a(T) \propto T^{0.93}$ što daje $K_\rho = 0.25$ (sl. 2.8). Za temperature ispod 50K sve do temperature prijelaza u VGS fazu (12K) vrijedi

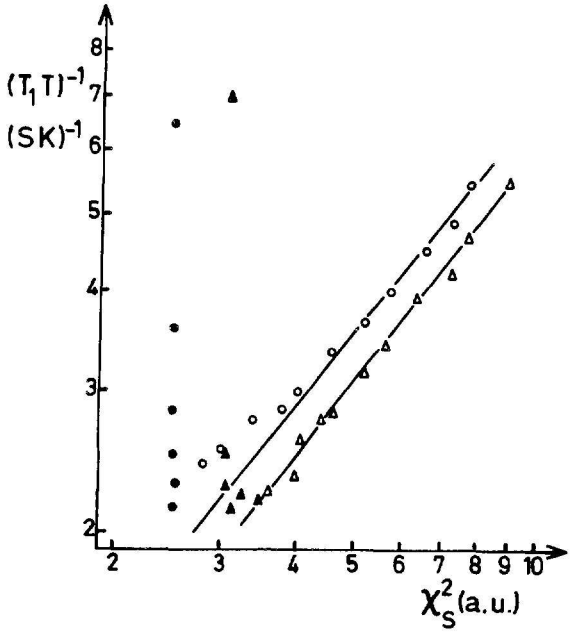
$$\rho(T) \sim T^2 \tag{2.4}$$

što je u skladu s predviđanjem Landauove teorije Fermijevih tekućina [38, 39, 40].

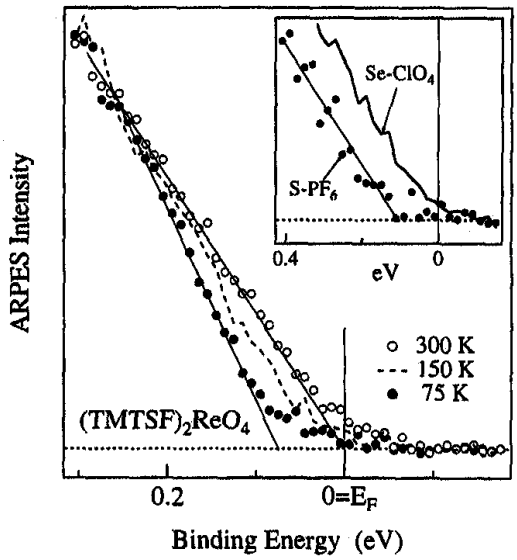
Temperaturna ovisnost relaksacije nuklearnog spina radi utjecaja rešetke T_1^{-1} dobivenog nuklearnom magnetskom rezonancijom (NMR) za $(TMTSF)_2X$ u velikom području temperatura u normalnoj fazi pokazuje ponašanje $T_1^{-1} \sim T\chi_s^2(T)$, gdje je χ_s spinska susceptibilnost, što bi moglo ići u prilog objašnjenja u okviru Landauove slike Fermijeve tekućine za koju vrijedi $T_1^{-1} \sim T\chi_s^2$. Međutim, slika Luttingerove tekućine vodi na sličan rezultat u istom području temperatura u kojem je χ_s konstantno ($T < 50K$). Štoviše, ona objašnjava T_1^{-1} u području temperatura u kojem $T_1^{-1}T$ za $(TMTSF)_2X$



Slika 2.8: Temperaturna ovisnost longitudinalne otpornosti za $(TMTSF)_2PF_6$ pri konstantnom volumenu [21].



Slika 2.9: $(T_1T)^{-1}$ kao funkcija od χ_s^2 za $(TMTSF)_2PF_6$ (krugovi) i $(TMTSF)_2ClO_4$ (trokuti) [17].



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

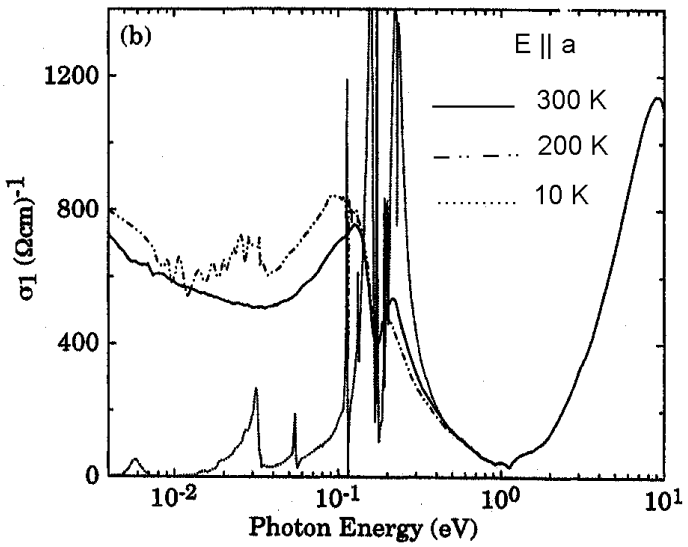
pokazuje veliko povećanje umjesto očekivanog pada dok istovremeno spinska susceptibilnost ostaje gotovo konstantna (sl. 2.9) [17, 41, 42, 43, 44]. Naime, za Luttingerove tekućine vrijedi [16]

$$T_1^{-1} = C_0 T \chi_s^2 + C_1 T^{K_\rho}, \tag{2.5}$$

gdje su C_0 i C_1 konstante. Usporedbom s eksperimentom za $(TMTSF)_2PF_6$ dobije se $K_\rho \approx 0.1$ za temperature između 50K i 180K pri atmosferskom tlaku [17, 45].

Navedimo, također, da su vršena mjerenja kutno razlučivom fotoemisijom na istom $TMTSF$ materijalu iznad i ispod temperature metal-izolator faznog prijelaza. Najpogodniji za to bio je $(TMTSF)_2ReO_4$ kojem je temperatura ovog prijelaza visoka $T_c \approx 180K$. Njegovi ARPES spektri na 300K izrazito su slični spektrima već spomenutih Bechgaardovih soli $(TMTSF)_2ClO_4$ (sl. 2.10) [3]. Karakterizira ih, također, isti α unutar Luttingerovog modela. Međutim, na 150K rub spektra je pomaknut za 50meV od E_F, dok je na 75K taj pomak 80meV (sl. 2.10). Razlika u spektrima dobivenim na 300K i 75K kvalitativno odgovara razlici između spektara metalnih soli $(TMTSF)_2ClO_4$ i izolatorskih soli $(TMTTF)_2PF_6$ (umetak slike 2.10).

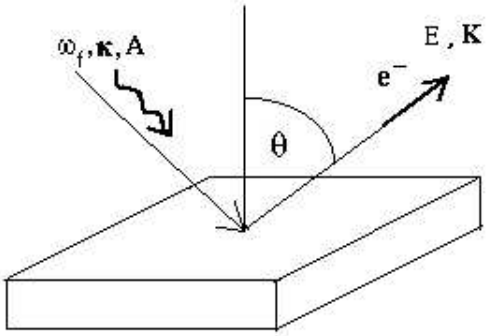
Također, i optička mjerenja pokazuju razliku između metalne i izolatorske faze. Spek-



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

tralna težina optičke vodljivosti u niskoenergijskom području na $T < T_c$ je smanjena u odnosu na onu na $T > T_c$ i pokazuje izolatorsko ponašanje (sl. 2.11) [3]. Za energije $\omega > E_{procijep}$ optička vodljivost pokazuje potencijsko ponašanje $\omega^{-\gamma}$ s $\gamma = 1.7$ i 1.9 za 300K i 10K. Eksponent γ značajno razlikuje ove soli od $(TMTSF)_2X$, $X = ClO_4$ i PF_6 kod kojih iznosi $\gamma = 1.3$.

S druge strane, eksponent α relevantan za fotoemisijska mjerenja ne pokazuje ovisnost o materijalu, što sugerira da bi površinski efekti mogli imati jak utjecaj na spektre dobivene kutno razlučivom fotoemisijom.



Slika 2.12: 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 $\mathbf{A}$.

2.2 Kutno razlučiva fotoemisija elektrona

2.2.1 Fizikalni principi kutno razlučive fotoemisije

Kutno razlučivom fotoemisijom elektrona [46, 47] se mjeri jakost struje fotoelektrona ovisno o kinetičkoj energiji i smjeru valnog vektora elektrona uz zadanu polarizaciju, valni vektor i frekvenciju elektromagnetskog vala (sl. 2.12).
Pod djelovanjem elektromagnetskog zračenja neutralni kristal prelazi iz osnovnog stanja s N elektrona $\mid N >$ 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

$$\mathbf{k}_s = \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{K}', \tag{2.6}$$

gdje je

$$\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_{N-1,s} - \mathbf{k}_N \tag{2.7}$$

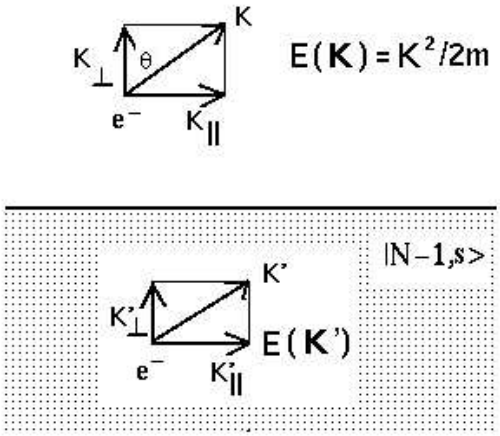
valni vektor pobuđenja ioniziranog podsistema, i zakon sačuvanja energije

$$\omega_f = E(\mathbf{K}') - \mu + \epsilon_{N-1,s} \tag{2.8}$$

gdje je $\mu = E_N - E_{N-1}$ kemijski potencijal, a

$$\epsilon_{N-1,s} = E_{N-1,s} - E_{N-1}, \tag{2.9}$$

energija pobuđenja ioniziranog podsistema koju je uobičajeno zvati energija vezanja i označavati E_B. Izlaskom elektrona iz kristala mijenja mu se valni vektor iz $\mathbf{K}'$ u $\mathbf{K}$.



Slika 2.13: Sačuvanje komponente valnog vektora elektrona paralelne površini

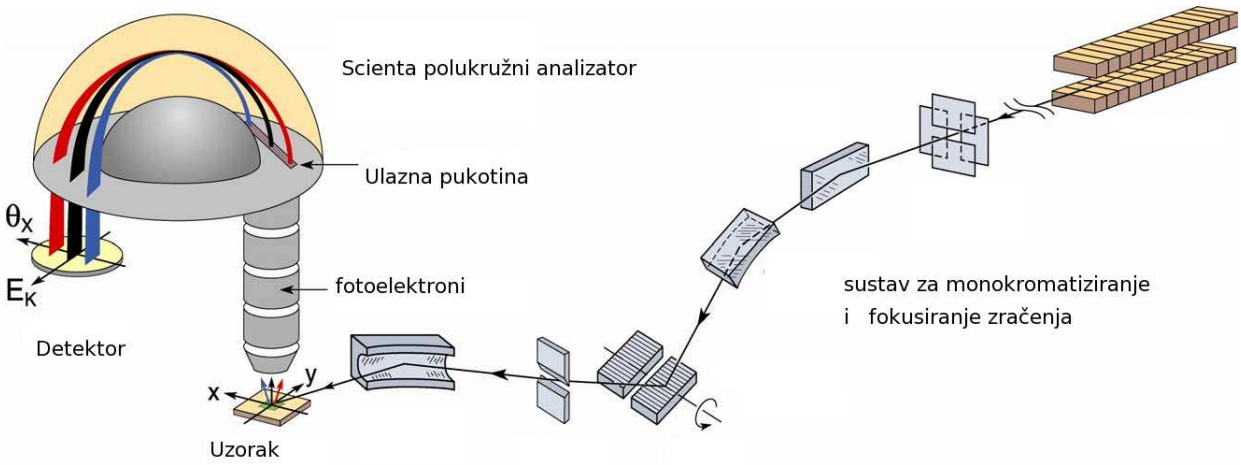
Pretpostavljamo da mu energija ostaje ista $E(\mathbf{K}') = E(\mathbf{K}) = K^2/2m$. Zbog simetrije problema prosječna sila na elektron paralelna površini kristala u kristalu i izvan njega jednaka je nuli pa je komponenta valnog vektora elektrona paralelna površini kristala sačuvana pri prijelazu elektrona iz kristala u vakuum (sl. 2.13)

$$K'_{\parallel} = K_{\parallel} = \sqrt{2mE}\sin\Theta. \tag{2.10}$$

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 $\mathbf{k}_{s\parallel} = \boldsymbol{\kappa}_{\parallel} - \mathbf{K'}_{\parallel} = \boldsymbol{\kappa}_{\parallel} - \mathbf{K}_{\parallel}$ može po (2.8) odrediti raspodjela fotoelektrona ovisno o energijama ioniziranog podsistema mijenjajući $\mathbf{K}_{\perp}$, a time i $E(\mathbf{K}') = K^2/2m$.

2.2.2 Shematski prikaz eksperimenta

Sistemom na slici 2.14 sinhrotronsko bijelo zračenje je monokromatizirano na željenu energiju fotona i fokusirano na uzorak. Fotoemitirani elektroni se prikupljaju u analizatoru u kojem im se određuje kinetička energija i izlazni kut. Uzorak i analizator se nalaze u vakuumskoj komori. Analizator se sastoji od elektrostatske ulazne leće, polusfernog deflektora koji ima ulaznu i izlaznu pukotinu, te detektora. Deflektor se sastoji od dviju polusfera radijusa R_1 i R_2 koje se nalaze na razlici potencijala ΔV tako



Slika 2.14: Shematski prikaz uređaja za kutno razlučivu fotoemisiju [48].

da samo oni elektroni koji dolaze do ulazne pukotine s kinetičkom energijom u uskom području oko $E_{prolaza} = e\Delta V/(R_1/R_2 - R_2/R_1)$ prolaze kroz polusferni kondenzator i dolaze do izlazne pukotine. Tako je moguće mjeriti kinetičku energiju elektrona s rezolucijom energije $\Delta E = E_{prolaza}(w/R_0 + \alpha^2/4)$, gdje je $R_0 = (R_1 + R_2)/2$, w širina ulazne pukotine, a α je kut prihvata elektrona. Uloga elektrostatske leće je da usporava i fokusira fotoelektrone na ulaznu pukotinu. Mijenjajući potencijal leće može se mjeriti intenzitet fotoemisije ovisno o kinetičkoj energiji fotoelektrona. Obično se jakost struje fotoelektrona u bilo kojem prostornom kutu može mjeriti rotacijom uzorka i ravnine polarizacije upadnog vala za isti kut, a informacija o momentu je usrednjena preko svih elektrona unutar kuta prihvata ($\pm 1^o$). Scienta sistem prikazan na slici za jedan položaj uzorka može dati informaciju ne samo za jedan moment nego za čitav interval momenata. Fotoelektroni unutar kuta 14^o duž smjera kojeg definira ulazna pukotina fokusirani su u detektor na različite položaje na osi koja je okomita u odnosu na onu koja prikazuje energiju. Tako je moguće istovremeno mjeriti distribucijske krivulje energije za različite kuteve, te dobiti 2D slike energije u odnosu na moment s intenzitetom kao trećom dimenzijom prikazanim različitim nijansama. Prikazani Scienta analizator omogućava rezoluciju od nekoliko meV i 0.2^o.

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

Jednočestični dio hamiltonijana elektrona u modelu čvrste veze je

$$H_0 = \sum_{l\mathbf{k}} E_l(\mathbf{k}) a^+_{l\mathbf{k}} a_{l\mathbf{k}} \tag{2.11}$$

gdje su energija l-te elektronske vrpce i pripadne Blochove funkcije

$$E_l(\mathbf{k}) = E_l - 2\sum_{i=1}^{3} t_{li} cosk_i a_i, \tag{2.12}$$

$$\psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{kR}} \varphi_l(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \tag{2.13}$$

Neka se sistem nalazi u elektromagnetskom polju danom vektorskim potencijalom

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A_0} e^{i(\boldsymbol{\kappa r} - \omega_f t)} \tag{2.14}$$

koji zadovoljava Coulombovo baždarenje $\nabla \mathbf{A} = 0$. Hamiltonijan interakcije elektromagnetskog polja s elektronima u bazi Blochovih funkcija čvrste veze je

$$H_{e-f} = -\frac{e}{mc} \sum_{l\mathbf{k}, l'\mathbf{k}} < l\mathbf{k} \mid \mathbf{Ap} \mid l'\mathbf{k}' > a^+_{l\mathbf{k}} a_{l'\mathbf{k}'} \tag{2.15}$$

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

2.2.4 ,,Sudden" aproksimacija

U ,,sudden" aproksimaciji pretpostavljamo da pod djelovanjem visokofrekventnog elektromagnetskog polja sistem prelazi iz osnovnog stanja $\mid N >$ u pobuđeno stanje $a^+_{n\mathbf{K}'} \mid N-1, s >$, gdje je $\mid n\mathbf{K}' >$ stanje vrlo visoke Blochove orbitale čvrste veze i nije sadržano u osnovnom stanju neutralnog mnogočestičnog sistema $\mid N >$. Nadalje, pretpostavljamo da je vjerojatnost prelaska sistema u stanje $a^+_{n\mathbf{K}'} \mid N-1, s >$ jednaka vjerojatnosti fotoemisije elektrona iz kristala.

Struja fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji je po zlatnom pravilu proporcionalna vjerojatnosti prijelaza

$$\begin{aligned} J_{n\mathbf{K}'}(\omega_f) \quad \propto \quad & \sum_s |< N-1, s \mid a_{n\mathbf{K}'} \sum_{l\mathbf{k}, l'\mathbf{k}'} < l\mathbf{k} \mid e^{i\boldsymbol{\kappa r}} \mathbf{A_0 p} \mid l'\mathbf{k}' > a^+_{l\mathbf{k}} a_{l'\mathbf{k}'} \mid N >|^2 \\ & \delta(E_n(\mathbf{K}') + E_{N-1,s} - E_N - \omega_f). \end{aligned} \tag{2.16}$$

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

$$< l\mathbf{k} \mid e^{i\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{r}}\mathbf{A_0}\mathbf{p} \mid l'\mathbf{k}' >= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\boldsymbol{\kappa}}\Delta_{ll'}, \tag{2.17}$$

gdje je

$$\Delta_{ll'} = \int e^{i\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{r}}\varphi_l^*(\mathbf{r})(\mathbf{A}_0\mathbf{p})\varphi_{l'}(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{2.18}$$

Kako je valna dužina elektromagnetskog vala znatno veća od dimenzija jedinične ćelije, $\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r} \ll 1$ u podintegralnoj funkciji u (2.18) možemo ispustiti fazni faktor $e^{i\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{r}}$ (dipolna aproksimacija) te je

$$\Delta_{ll'} = \int \varphi_l^*(\mathbf{r})(\mathbf{A}_0\mathbf{p})\varphi_{l'}(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{2.19}$$

Stoga za struju fotoelektrona u dipolnoj aproksimaciji vrijedi

$$J_{n\mathbf{K}'}(\omega_f) \propto \sum_s |< N-1, s \mid a_{n\mathbf{K}'}\sum_{ll',\mathbf{k}}\Delta_{ll'}a^+_{l\mathbf{k}}a_{l'\mathbf{k}-\boldsymbol{\kappa}} \mid N >|^2\, \delta(E_n(\mathbf{K}')+E_{N-1,s}-E_N-\omega_f). \tag{2.20}$$

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

$$J_{n\mathbf{K}'}(\omega_f) \propto \sum_s |< N-1, s \mid \sum_l \Delta_{nl}a_{l\mathbf{K}'-\boldsymbol{\kappa}} \mid N >|^2\, \delta(E_n(\mathbf{K}')+E_{N-1,s}-E_N-\omega_f). \tag{2.21}$$

Definicijom spektralne funkcije u $(\mathbf{k},\omega)$ prostoru o kojoj će biti više riječi u sljedećem poglavlju posvećenom teoriji

$$A^-_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = \sum_s < N-1, s \mid a_{m\mathbf{k}} \mid N >< N \mid a^+_{n\mathbf{k}'} \mid N-1, s > \delta(E_{N-1,s} - E_N + \omega) \tag{2.22}$$

struja fotoelektrona može se zapisati upravo pomoću te funkcije

$$J_{n\mathbf{K}'}(E_n(\mathbf{K}') - \omega_f) \propto \sum_{ij}\Delta_{nj}A^-_{ji}(\mathbf{K}' - \boldsymbol{\kappa}, E_n(\mathbf{K}') - \omega_f)\Delta^*_{ni}. \tag{2.23}$$

Zapisan pomoću energije vezanja ovaj izraz postaje veza između eksperimenta i teorije

$$J_{n\mathbf{k}_s}(\mu - E_B) \propto \sum_{ij}\Delta_{nj}A^-_{ji}(-\mathbf{k}_s, \mu - E_B)\Delta^*_{ni}. \tag{2.24}$$

Sumiranjem po $\mathbf{k}_s$ ovog izraza dobija se struja fotoelektrona za kutno integrirani spektar

$$J_n(\mu - E_B) \propto \sum_{\mathbf{k}_s}\sum_{ij}\Delta_{nj}A^-_{ji}(-\mathbf{k}_s, \mu - E_B)\Delta^*_{ni}. \tag{2.25}$$

U interpretaciji eksperimenata 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 $E_n(\mathbf{K}') = K^2/2m$. Po izrazu (2.25) može se dobiti raspodjela intenziteta po energijama ioniziranog podsistema kako je prikazano na slici 2.3. Posebno za kvazijednodimenzionalne i kvazidvodimenzionalne materijale za dani $\mathbf{k}_{s\parallel} = \boldsymbol{\kappa}_\parallel - \mathbf{K}'_\parallel = \boldsymbol{\kappa}_\parallel - \mathbf{K}_\parallel$ mijenjajući $K_\perp$, a time i $E_n(\mathbf{K}') = (K_\parallel^2 + K_\perp^2)/2m$ mogu se koristeći rezultat (2.24) aproksimacije dobiti struje fotoelektrona za različite energije ioniziranog podsistema kako je prikazano na slici 2.5.

Poglavlje 3

Greenova funkcija

3.1 Greenova funkcija u Blochovoj bazi čvrste veze

3.1.1 Greenova funkcija

Promatramo sistem s N čestica i definiramo jednočestičnu Greenovu funkciju [49, 50]

$$G(x,x') = -i < N \mid T[\Psi(x)\Psi^{+}(x')] \mid N >, \tag{3.1}$$

gdje je T je operator vremenskog uređenja, $x \equiv (\mathbf{r},t)$, $\mid N >$ osnovno stanje sistema, a $\Psi^{+}(x)$ i $\Psi(x)$ su Heisenbergovi operatori polja. U Blochovoj bazi čvrste veze vrijedi

$$\Psi^{+}(x) = \sum_{l\mathbf{k}} \psi^{*}_{l\mathbf{k}}(x) a^{+}_{l\mathbf{k}}, \tag{3.2}$$

$$\Psi(x) = \sum_{l\mathbf{k}} \psi_{l\mathbf{k}}(x) a_{l\mathbf{k}} \tag{3.3}$$

gdje su $a^{+}_{l\mathbf{k}}$ i $a_{l\mathbf{k}}$ operatori stvaranja odnosno poništenja čestica u jednočestičnom Blochovu stanju $\psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (2.13). Za $t > t'$ Greenova funkcija opisuje propagaciju elektrona dodanog sistemu u trenutku t', dok za $t < t'$ opisuje propagaciju šupljine.
Preko Greenove funkcije može se izraziti srednja gustoća naboja u stanju $\mid N >$

$$n(x) =< N \mid \Psi^{+}_{\alpha}(x)\Psi_{\alpha}(x) \mid N >, \tag{3.4}$$

gdje α uključuje spin. Gustoća $n(x)$ određuje broj čestica

$$N = \int n(x) d\mathbf{r}. \tag{3.5}$$

Po (3.1) vrijedi

$$n(x) = -i \lim_{\mathbf{r}\to\mathbf{r}',t'\to t+0} G_{\alpha\alpha}(x,x') = -2i \lim_{\mathbf{r}\to\mathbf{r}',t'\to t+0} G(x,x'). \tag{3.6}$$

Uvedemo li potpun skup stanja $\{\mid N\pm 1, s>\}$ hamiltonijana H sustava s $N\pm 1$ česticom čije su vlastite vrijednosti $E_{N\pm 1,s}$ dobijamo

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},t) &= -i\sum_s A_{s+}(\mathbf{r})A^*_{s+}(\mathbf{r}')e^{-i(E_{N+1,s}-E_N)t}\Theta(t) \\ &+ i\sum_s A_{s-}(\mathbf{r})A^*_{s-}(\mathbf{r}')e^{i(E_{N-1,s}-E_N)t}\Theta(-t) \end{aligned} \tag{3.7}$$

gdje su

$$A_{s+}(\mathbf{r}) =< N \mid \Psi(\mathbf{r}) \mid N+1, s> \tag{3.8}$$

$$A_{s-}(\mathbf{r}) =< N-1, s \mid \Psi(\mathbf{r}) \mid N> . \tag{3.9}$$

Kako je energija potrebna da se doda jedna čestica osnovnom stanju sistema $\mu = E_{N+1} - E_N$ vrijedi $E_{N+1,s} - E_N \geq \mu$ i $E_N - E_{N-1,s} < \mu$. Fourierova transformacija

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},t)e^{i\omega t}dt \tag{3.10}$$

daje

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega) = \sum_s \Big\{ \frac{A_{s+}(\mathbf{r})A^*_{s+}(\mathbf{r}')}{E_N - E_{N+1,s} + \omega + i\eta} + \frac{A_{s-}(\mathbf{r})A^*_{s-}(\mathbf{r}')}{E_{N-1,s} - E_N + \omega - i\eta} \Big\}, \tag{3.11}$$

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

Nadalje, Fourierova transformacija

$$\lim_{t'\to t+0} G(\mathbf{r},t,\mathbf{r}^{'},t') = \lim_{\eta\to 0+} \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega)e^{i\omega\eta}d\omega \tag{3.12}$$

daje

$$n(x) = -\frac{i}{\pi}\lim_{\mathbf{r}\to\mathbf{r}',\eta\to 0+}\int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega)e^{i\omega\eta}d\omega. \tag{3.13}$$

Greenova funkcija u $(\mathbf{k},\omega)$ prostoru definirana je izrazom

$$G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = \int \psi^*_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})G(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega)\psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}', \tag{3.14}$$

te uvrštavajući (3.11) dobijamo

$$G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega) = \sum_s \Big\{ \frac{A^{s+}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})}{E_N - E_{N+1,s} + \omega + i\eta} + \frac{A^{s-}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})}{E_{N-1,s} - E_N + \omega - i\eta} \Big\}, \tag{3.15}$$

gdje su

$$A^{s+}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'}) =< N \mid a_{m\mathbf{k}} \mid N+1, s >< N+1, s \mid a^+_{n\mathbf{k}'} \mid N>, \tag{3.16}$$

$$A^{s-}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'}) =< N \mid a^+_{n\mathbf{k}'} \mid N-1, s >< N-1, s \mid a_{m\mathbf{k}} \mid N> . \tag{3.17}$$

Broj čestica možemo izraziti pomoću Greenove funkcije u $(\mathbf{k}, \omega)$ prostoru

$$N = -\frac{i}{\pi} \lim_{\eta \to 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}l} G_{ll}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) e^{i\omega\eta} d\omega \tag{3.18}$$

uvrštavajući (3.13) u (3.5) te koristeći Fourierovu transformaciju

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'}, \omega) = \sum_{mn\mathbf{k}\mathbf{k}'} \psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi^*_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}^{'}) G_{mn}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega). \tag{3.19}$$

Uvrštavanjem izraza (3.15) u (3.18) i integracijom po ω dobijamo

$$N = 2 \sum_{l\mathbf{k}} \sum_{s} A^{s-}_{ll}(\mathbf{k}, \mathbf{k}). \tag{3.20}$$

Definiramo i retardiranu G^R i avansiranu G^A Greenovu funkciju relacijama

$$ReG^R = ReG = ReG^A, \tag{3.21}$$

$$ImG^R = ImGsign(\omega - \mu), \tag{3.22}$$

$$ImG^A = -ImGsign(\omega - \mu). \tag{3.23}$$

G^R ima polove u gornjoj kompleksnoj poluravnini, G^A u donjoj, dok G ima u obje.
U koordinatnoj reprezentaciji funkcije G^R i G^A su definirane relacijama

$$G^R(x, x') = -i\Theta(t - t') < N \mid [\Psi(x), \Psi^+(x')]_+ \mid N >, \tag{3.24}$$

$$G^A(x, x') = -i\Theta(t' - t) < N \mid [\Psi(x), \Psi^+(x')]_+ \mid N >, \tag{3.25}$$

gdje „+" označava antikomutator polja. G^R povezana je s propagacijom elektrona, a G^A s propagacijom šupljina.

3.1.2 Spektralna funkcija

Definiramo spektralnu funkciju

$$\begin{aligned} A(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'}, \omega) &= \sum_s A_{s+}(\mathbf{r}) A^*_{s+}(\mathbf{r}') \delta(E_N - E_{N+1,s} + \omega) \\ &+ \sum_s A_{s-}(\mathbf{r}) A^*_{s-}(\mathbf{r}') \delta(E_{N-1,s} - E_N + \omega). \end{aligned} \tag{3.26}$$

Iz izraza (3.11) pomoću

$$\frac{1}{x \pm iy} = \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \tag{3.27}$$

te (3.21),(3.22) i (3.23) vidimo da vrijedi

$$A(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)=\frac{1}{\pi}\mid ImG(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)\mid=\frac{1}{\pi}ImG^R(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)=-\frac{1}{\pi}ImG^A(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega). \tag{3.28}$$

Koristeći svojstva potpunosti mnogočestičnih stanja i potpunosti Blochovih valnih funkcija dobijamo da vrijedi pravilo sume (,,sum rule")

$$\int_{-\infty}^{\infty}A(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)d\omega=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{3.29}$$

Definiramo li spektralnu funkciju u $(\mathbf{k},\omega)$ prostoru

$$A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)=\int\psi^*_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})A(\mathbf{r},\mathbf{r}^{'},\omega)\psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \tag{3.30}$$

dobijamo

$$\begin{aligned}A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega) &= \sum_s A^{s+}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})\delta(E_N-E_{N+1,s}+\omega) \\ &+ \sum_s A^{s-}_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'})\delta(E_{N-1,s}-E_N+\omega).\end{aligned} \tag{3.31}$$

Vrijedi

$$A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega)=\frac{1}{\pi}\mid ImG_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega)\mid=\frac{1}{\pi}ImG^R_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega)=-\frac{1}{\pi}ImG^A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega). \tag{3.32}$$

Pomoću svojstva potpunosti mnogočestičnih stanja sistema dobijamo Fourierov ekvivalent izraza (3.29)

$$\int_{-\infty}^{\infty}A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)d\omega=\delta_{mn}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \tag{3.33}$$

Također, koristeći izraz (3.31) kako je $E_{N+1,s}-E_N\geq\mu$ i $E_N-E_{N-1,s}<\mu$ možemo izraziti broj čestica (3.20) pomoću spektralne funkcije u $(\mathbf{k},\omega)$ prostoru

$$N=2\sum_{l\mathbf{k}}\int_{-\infty}^{\mu}A_{ll}(\mathbf{k},\mathbf{k},\omega)d\omega. \tag{3.34}$$

Informacije o procesima u kojima sistemu dodajemo jednu česticu dobijamo iz

$$A^+_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega)=A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)\Theta(\omega-\mu) \tag{3.35}$$

dok

$$A^-_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega)=A_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega)\Theta(\mu-\omega) \tag{3.36}$$

govori o procesima u kojima sistemu oduzimamo česticu. Kako je $A^-_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}^{'},\omega)$ povezana izrazom (2.24) sa strujom fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji vidimo da upravo Greenova funkcija određuje tu struju.

3.1.3 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenata

Dijagonalni dio spektralne funkcije daje lokalnu gustoću stanja $N(\mathbf{r},\omega) = A(\mathbf{r},\mathbf{r},\omega)$ čijom integracijom po prostoru dobijamo gustoću stanja

$$N(\omega) = \int N(\mathbf{r},\omega)d\mathbf{r} = \int A(\mathbf{r},\mathbf{r},\omega)d\mathbf{r}. \tag{3.37}$$

Po definiciji spektralne funkcije (3.26) vrijedi

$$\begin{aligned} N(\omega) &= \sum_s \int |A_{s+}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}\delta(E_N - E_{N+1,s} + \omega) \\ &+ \sum_s \int |A_{s-}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}\delta(E_{N-1,s} - E_N + \omega). \end{aligned} \tag{3.38}$$

Kako je po (3.8), (3.9) i ortonomiranosti jednočestičnih Blochovih stanja $\psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$\int |A_{s\pm}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \sum_{l\mathbf{k}} A_{ll}^{s\pm}(\mathbf{k},\mathbf{k}) \tag{3.39}$$

vrijedi

$$\begin{aligned} N(\omega) &= \sum_{l\mathbf{k}} \Big[\sum_s A_{ll}^{s+}(\mathbf{k},\mathbf{k})\delta(E_N - E_{N+1,s} + \omega) \\ &+ \sum_s A_{ll}^{s-}(\mathbf{k},\mathbf{k})\delta(E_{N-1,s} - E_N + \omega) \Big]. \end{aligned} \tag{3.40}$$

te je konačno po (3.31)

$$N(\omega) = \sum_{l\mathbf{k}} A_{ll}(\mathbf{k},\mathbf{k},\omega). \tag{3.41}$$

Iz ovog izraza i izraza (3.34) vidimo da pomoću gustoće stanja možemo odrediti broj čestica na sljedeći način

$$N = 2\int_{-\infty}^{\mu} N(\omega)d\omega, \tag{3.42}$$

gdje 2 uzima u obzir spin elektrona.

Funkcija distribucije momenta

$$n_{l\mathbf{k}} = < N \mid a_{l\mathbf{k}}^{+} a_{l\mathbf{k}} \mid N > \tag{3.43}$$

može se također izračunati pomoću spektralne funkcije. Naime, uz pomoć potpunosti

$$1 = \sum_s \mid N-1, s >< N-1, s \mid \tag{3.44}$$

vrijedi

$$n_{l\mathbf{k}} = \sum_s < N \mid a^+_{l\mathbf{k}} \mid N-1, s >< N-1, s \mid a_{l\mathbf{k}} \mid N > \tag{3.45}$$

te je po (3.17)

$$n_{l\mathbf{k}} = \sum_s A^{s-}_{ll}(\mathbf{k}, \mathbf{k}). \tag{3.46}$$

Kako je $E_{N+1,s} - E_N \geq \mu$ i $E_N - E_{N-1,s} < \mu$ vrijedi po izrazu (3.31)

$$n_{l\mathbf{k}} = \int_{-\infty}^{\mu} A_{ll}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) d\omega. \tag{3.47}$$

Sumiranjem svih $n_{l\mathbf{k}}$ i množenjem s 2 radi spina dobijamo broj elektrona

$$N = 2 \sum_{l\mathbf{k}} n_{l\mathbf{k}}. \tag{3.48}$$

3.2 Spektralna svojstva nesmetanog problema u Blochovoj bazi čvrste veze

3.2.1 Greenova funkcija

Za problem neinteragirajućih elektrona u Blochovoj bazi čvrste veze vrijedi

$$A_{s+}(\mathbf{r}) = A_{l\mathbf{k}+}(\mathbf{r}) = \psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})[1 - n_l(\mathbf{k})], \tag{3.49}$$

$$A_{s-}(\mathbf{r}) = A_{l\mathbf{k}-}(\mathbf{r}) = \psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})n_l(\mathbf{k}), \tag{3.50}$$

gdje su

$$n_l(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1, & E_l(\mathbf{k}) < E_F \\ 0, & E_l(\mathbf{k}) > E_F, \end{cases} \tag{3.51}$$

zaposjednutosti stanja, a energije $E_l(\mathbf{k})$ su dane izrazom (2.12). Tada je Greenova funkcija nesmetanog problema

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \sum_{l\mathbf{k}} \psi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi^*_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r}')G^0_l(\mathbf{k}, \omega) \tag{3.52}$$

gdje je

$$G^0_l(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1 - n_l(\mathbf{k})}{\omega - E_l(\mathbf{k}) + i\eta} + \frac{n_l(\mathbf{k})}{\omega - E_l(\mathbf{k}) - i\eta}. \tag{3.53}$$

3.2.2 Spektralna funkcija

Spektralna funkcija neinteragirajućih elektrona jednaka je

$$A^0_l(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \mid G^0_l(\mathbf{k}, \omega) \mid = \delta(\omega - E_l(\mathbf{k})). \tag{3.54}$$

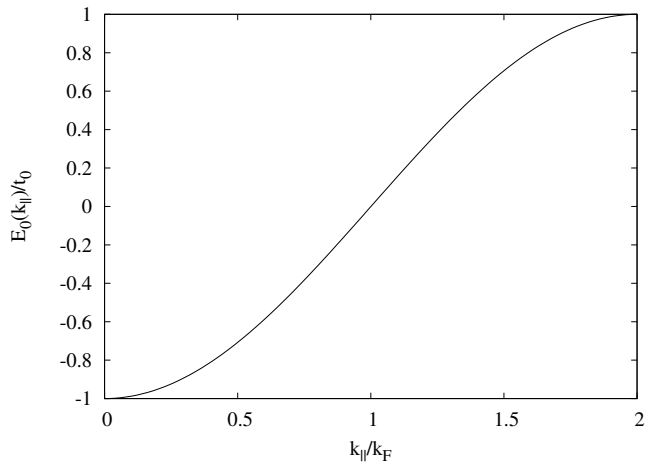
Tada je struja fotoelektrona u ,,sudden" aproksimaciji

$$J_{n\mathbf{k}}(\mu - E_B) \sim \sum_l \mid \Delta_{nl} \mid^2 A^{0-}_l(-\mathbf{k}, \mu - E_B), \tag{3.55}$$

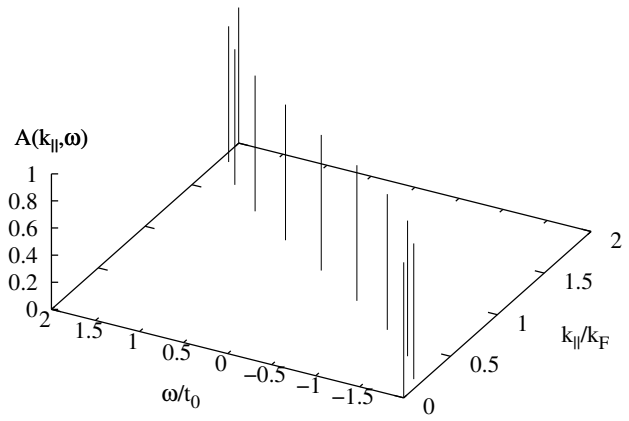
gdje je

$$A^{0-}_l(\mathbf{k}, \omega) = \delta(\omega - E_l(\mathbf{k}))n_l(\mathbf{k}). \tag{3.56}$$

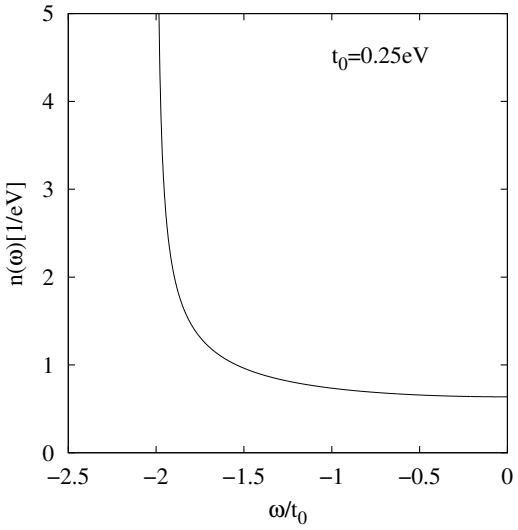
Na slici 3.2 prikazana je spektralna funkcija za slučaj jedne vrpce



Slika 3.1: Disperzija nesmetanog problema u Blochovoj bazi čvrste veze dana izrazom (3.58) za $k_F = \frac{\pi}{2b}$ i $t_0 = 0.25eV$.



Slika 3.2: Spektralna funkcija nesmetanog problema u Blochovoj bazi čvrste veze dana izrazom (3.57) za $k_F = \frac{\pi}{2b}$ i $t_0 = 0.25eV$.



Slika 3.3: Gustoća stanja neinteragirajućih elektrona s disperzijom (3.58) za $k_F = \frac{\pi}{2b}$ i $t_0 = 0.25eV$.

$$A_0(\mathbf{k}, \omega + E_F) = \delta(\omega - E_0(\mathbf{k})) \tag{3.57}$$

s disperzijom

$$E_0(\mathbf{k}) = E_0(k_\parallel) = -2t_0(\cos k_\parallel b - \cos k_F b), \tag{3.58}$$

prikazanom na slici 3.1. Ovdje je $E_F = E_0 - 2t_0 \cos k_F b$ Fermijeva energija. Stavimo li $E_0 = 0$ vrijedi $E_F = -2t_0 \cos k_F b$.

3.2.3 Gustoća stanja

Gustoća stanja neinteragirajućih elektrona s disperzijom (3.58) jednaka je

$$N(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} A(k_\parallel, \omega) \tag{3.59}$$

gdje suma po $\mathbf{k}$ ide preko prve Brillouinove zone. Prelaskom sa sume na integrale $\sum_{\mathbf{k}} \to (\frac{L}{2\pi})^3 \int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \int_{\frac{-\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{\frac{-\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dk_\parallel dk_x dkz$ i integrirajući po k_x i k_z, dobijamo izraz za gustoću stanja po broju elektrona u sistemu $N_e = 2(2k_F \frac{4\pi^2}{ac})/(8\pi^3/V)$,

$$n(\omega) = N(\omega)/N_e = \frac{1}{2k_F} \int_0^{\frac{\pi}{b}} A(k_\parallel, \omega) dk_\parallel. \tag{3.60}$$

Uvrštavajući izraz za spektralnu funkciju (3.57) imamo

$$n_0(\omega + E_F) = \frac{1}{2k_F}\int_0^{\frac{\pi}{b}} \delta(\omega - E_0(k_\parallel))dk_\parallel = \frac{1}{4k_F t_0 b|\sin(k_{\parallel 0}b)|}, \tag{3.61}$$

gdje je $k_{\parallel 0} = \frac{1}{b}\arccos(-(\omega + E_F)/(2t_0))$ nula jednadžbe $\omega - E_0(k_{\parallel 0}) = 0$. Kao što je prikazano na slici 3.3, ova gustoća stanja divergira na rubu elektronske vrpce (3.58) i ima minimum jednak $1/(4k_F t_0 b)$ u centru vrpce ($\omega = 0$).

Koristeći izraz za broj čestica (3.42) dobijamo relaciju za određivanje kemijskog potencijala

$$1 = 2\int_{-\infty}^{\mu} n(\omega)d\omega. \tag{3.62}$$

Tako rješavanjem jednadžbe

$$1 = 2\int_{-2t_0 - E_F}^{\mu - E_F} n_0(\omega + E_F)d\omega \tag{3.63}$$

dobijamo $\mu = E_F$.

Gustoća stanja neinteragitajućih elektrona s disperzijom

$$E(\mathbf{k}) = -2t_0(cosk_\parallel b - cosk_F b) - 2t(cosk_x a + cosk_z c) \tag{3.64}$$

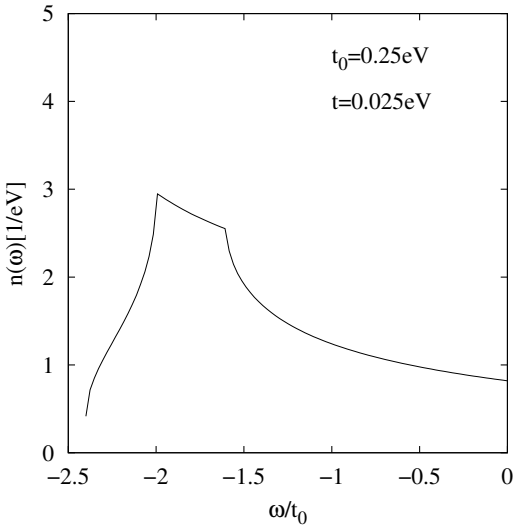
jednaka je

$$N(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} A_0(\mathbf{k}, \omega) \tag{3.65}$$

gdje suma po $\mathbf{k}$ ide preko iste prve Brillouinove zone. Prelaskom sa sume na integrale $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (\frac{L}{2\pi})^3 \int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \int_{\frac{-\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{\frac{-\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dk_\parallel dk_x dkz$ i uvrštavajući izraz za spektralnu funkciju (3.57) dobijamo izraz za gustoću stanja po broju elektrona u sistemu

$$n_0(\omega + E_F) = \frac{1}{2k_F\frac{4\pi^2}{ac}}\int_{\frac{-\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x \int_{\frac{-\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dkz \int_0^{\frac{\pi}{b}} \delta(\omega - E(\mathbf{k}))dk_\parallel = \frac{1}{4k_F t_0 b\frac{4\pi^2}{ac}|\sin(k_{\parallel 0}b)|}, \tag{3.66}$$

gdje je $k_{\parallel 0} = \frac{1}{b}\arccos(-(\omega + 2t(cosk_x a + cosk_z) + E_F)/(2t_0))$ nula jednadžbe $\omega - E(k_x, k_{\parallel 0}, k_z) = 0$. Ova funkcija prikazana je na slici 3.4. Vidimo da konačan t ukida divergenciju s ruba elektronske vrpce.



Slika 3.4: Gustoća stanja neinteragirajućih elektrona s disperzijom (3.64) za $k_F = \frac{\pi}{2b}$, $t = 0.025eV$ i $t_0 = 0.25eV$.

3.3 Spektralna svojstva Fermijevih tekućina

3.3.1 Fermijev plin

U translacijski invarijantnom neinteragirajućem sistemu čestica svojstvena stanja sistema su ravni valovi $|\mathbf{k}>= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ s energijom $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m}$. Ovdje smo uveli periodične rubne uvjete u kocki volumena $V = L^3$, gdje je L brid kocke, a dopuštene vrijednosti impulsa su $k_i = n_i \frac{2\pi}{L}$, $n_i \in Z$. U osnovnom stanju sistema s N čestica popunjena su sva stanja do Fermijevog valnog vektora k_F, koji je zbog pretpostavke o jednakom broju stanja i čestica za fermione dan izrazom $\frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$. Energija posljednjeg zaposjednutog stanja $E_F = \frac{k_F^2}{2m}$ naziva se Fermijeva energija i za neinteragirajući sistem je jednaka kemijskom potencijalu.

Hamiltonijan Fermijevog plina možemo zapisati preko energija pobuđenja sistema $\epsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ na sljedeći način

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}, \tag{3.67}$$

gdje je $n_{\mathbf{k}}$ operator broja čestica. $\epsilon_{\mathbf{k}} > 0$ ($|\mathbf{k}| > k_F$) opisuje dodavanje čestice s valnim vektorom $\mathbf{k}$ sistemu, a $\epsilon_{\mathbf{k}} < 0$ ($|\mathbf{k}| < k_F$) oduzimanje sistemu čestice s valnim vektorom $\mathbf{k}$.

3.3.2 Osnovne pretpostavke Landauove teorije Fermijevih tekućina

Pretpostavka Landauove teorije Fermijevih tekućina je da se može uspostaviti $1-1$ korespondencija između slabo pobuđenih stanja interagirajućeg sistema s onima Fermijevog plina.

Promotrimo stanje koje dobijamo dodajući česticu momenta $|\mathbf{k}| > k_F$ neinteragirajućem sistemu $|\mathbf{k}, N+1> = a^+_{\mathbf{k}}|0, N>$. U translacijski invarijantnom sistemu ukupni moment je sačuvan i nakon uključivanja interakcije, te će i stanje s interakcijom imati isti ukupni moment $\mathbf{k}$. Tako i najniži dopušteni moment $k_F < |\mathbf{k}|$ ostaje nepromijenjen uključivanjem interakcije. Međutim, interakcija dodane čestice s ostalim česticama, kao i interakcija tih čestica međusobno mijenjaju raspodjelu čestica po valnim vektorima što mijenja energiju pobuđenog stanja $|\mathbf{k}, N+1>$ u odnosu na energiju istog stanja Fermijevog plina. Prema pretpostavci Landauove teorije Fermijeve tekućine energija pobuđenog stanja interagirajućeg sistema, tzv. kvazičestice je $E(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m^*}$, gdje je m^* efektivna masa pobuđenja. Blizu k_F dovoljno je zadržati najniži član u razvoju oko $|\mathbf{k}| = k_F$, te je tada energija kvazičestiče $E(\mathbf{k}) - \mu = \frac{k_F}{m^*}(|\mathbf{k}| - k_F)$, gdje je μ kemijski potencijal interagirajućeg sistema.

3.3.3 Greenova funkcija u Landauovoj teoriji Fermijevih tekućina

Landauova pretpostavka o postojanju kvazičestice očituje se u tome da se blizu $\mid \mathbf{k} \mid = k_F$ i $\omega = 0$ Greenova funkcija može zapisati u obliku [5]

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z}{\omega - v_F(\mid \mathbf{k} \mid -k_F) + i\eta \mathrm{sign}(\mid \mathbf{k} \mid -k_F)}, \tag{3.68}$$

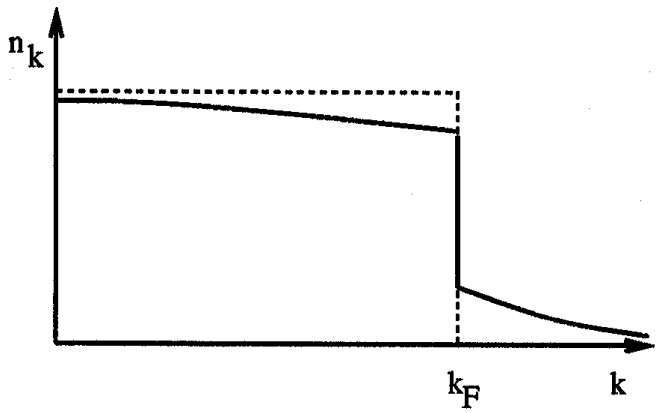
gdje je $v_F = k_F/m^*$, a $Z = n(k_F - 0) - n(k_F + 0)$ je širina diskontinuiteta na Fermijevom impulsu distribucije impulsa slabih pobuđenja $n(\mathbf{k})$ prikazane na slici 3.5.

Pripadna spektralna funkcija je

$$A(\mathbf{k}, \omega) = Z\delta(\omega - v_F(\mid \mathbf{k} \mid -k_F)). \tag{3.69}$$

Vidimo da Z predstavlja spektralnu težinu kvazičestice.

Da bi se ispunilo pravilo sume za $Z < 1$ moraju postojati i drugi doprinosi spektral-



Slika 3.5: Funkcija distribucije momenta za Fermijevu tekućinu (puna linija) i neinteragirajući elektronski plin (isprekidana linija).

noj funkciji osim kvazičestičnog. To su doprinosi nekoherentnih čestično-šupljinskih pobuđenja koji su mali blizu Fermijeve površine. Na sl. 3.5 njihov doprinos je istaknut u dijelu $|\mathbf{k}| > k_F$, dok je u dijelu $|\mathbf{k}| < k_F$ superponiran na znatniji kvazičestični doprinos od kojeg potječe diskontinuitet na k_F. Sam doprinos nekoherentnih čestično-šupljinskih pobuđenja funkciji distribucije momenta je kontinuiran na k_F.

3.4 Spektralna svojstva Luttingerovih tekućina

3.4.1 Luttingerov model

Najbolje istražen primjer svojstava koja ne odgovaraju Fermijevoj tekućini je onaj interagirajućih elektrona u jednoj dimenziji. Promotrimo prvo jednodimenzionalni sistem slobodnih elektrona u Blochovoj bazi čvrste veze u metalnoj fazi u kojoj je kemijski potencijal na sredini vrpce. Želimo li promatrati samo niskoenergijska svojstva važna su nam jedino stanja blizu Fermijevih točaka $\pm k_F$. Možemo linearizirati disperziju $E(k)$ oko tih točaka tako da dobijemo $E_r(k) = v_F(rk - k_F)$ gdje je $v_F = 2t \cos k_F b$ Fermijeva brzina, a $r = \pm$ daje lijevu i desnu granu za $-\infty < k < \infty$. Hamiltonijan slobodnih elektrona

$$H_0 = \sum_k E(k) c_{ks}^+ c_{ks}, \tag{3.70}$$

gdje c_{ks}^+ stvara elektron spina s i impulsa k, možemo zapisati preko operatora gustoće čestica

$$\rho_{r,s}(p) = \sum_k c_{rs,k+p}^+ c_{rs,k} = \rho_{rs}^+(-p) \tag{3.71}$$

koji kreira elektronsko-šupljinski par čija je energija

$$E_r(k+p) - E_r(k) = r v_F p \tag{3.72}$$

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

$$H_0 = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{r=\pm} \sum_{p>0} \rho_{rs}(rp) \rho_{rs}(-rp) \tag{3.73}$$

gdje su $\rho_{+,s}(p)$ $[\rho_{-,s}(p)]$ operatori stvaranja, odnosno poništenja.
Sada uvodimo interakciju među elektrone (sl. 3.6) te je Hamiltonijan sistema

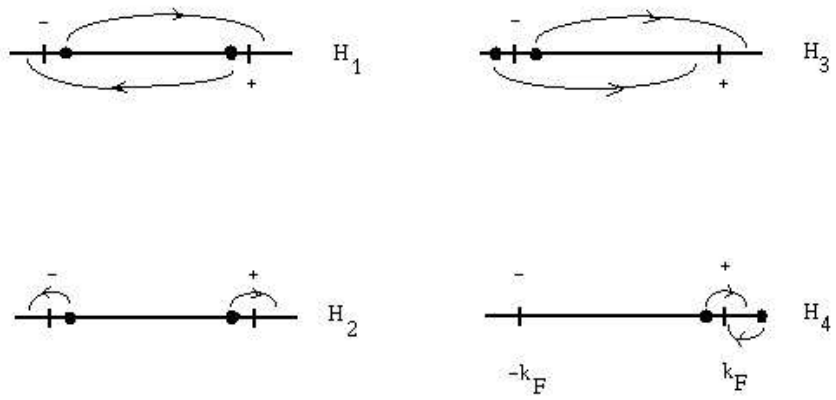
$$H = H_0 + H_{forward} + H_{backward} + H_{Umklapp}. \tag{3.74}$$

Član koji opisuje ,,forward" raspršenje je

$$H_{forward} = H_2 + H_4, \tag{3.75}$$

gdje su

$$H_2 = \frac{1}{L} \sum_p \sum_{ss'} g_2^{ss'}(p) \rho_{+s}(p) \rho_{-s'}(-p), \tag{3.76}$$



Slika 3.6: Slikoviti prikaz interakcijskih članova Hamiltonijana jednodimenzionalnog sistema elektrona koji slabo međudjeluju

$$H_4 = \frac{1}{2L}\sum_p \sum_{ss'} g_4^{ss'}(p)[\rho_{+s}(p)\rho_{+s'}(-p) + \rho_{-s}(p)\rho_{-s'}(-p)]. \tag{3.77}$$

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

$$\rho_s^r(p) = \sum_k c_{rs,k}^+ c_{-rs,k+p} \tag{3.78}$$

preko kojih su izraženi ,,backward" raspršenje

$$H_{backward} = H_1 = \sum_p \sum_{ss'} g_1^{ss'}(p)\rho_s^+(p)\rho_{s'}^-(-p) \tag{3.79}$$

i Umklapp član

$$H_{Umklapp} = H_3 = \frac{1}{2L}\sum_p \sum_{ss'} g_3^{ss'}(p)[\rho_s^+(p)\rho_{s'}^+(-p) + \rho_s^-(p)\rho_{s'}^-(-p)]. \tag{3.80}$$

Konstante vezanja u gornjim izrazima mogu biti ovisne o spinu:

$$g_i^{ss'}(p) = g_{i\parallel}\delta_{s,s'}(p) + g_{i\perp}\delta_{s,-s'}(p). \tag{3.81}$$

Uzimanjem samo ,,forward" raspršenja dobija se Tomonaga-Luttingerov model koji je egzaktno rješiv [51]. Hamiltonijan se dijagonalizira Bogoliubovom transformacijom tako da postane suma dva nezavisna dijela koji opisuju neinteragirajuće nabojske i spinske valove gustoće

$$H^{T-L} = H_s^{T-L} + H_\rho^{T-L} \tag{3.82}$$

sa svojstvenim energijama $E_s(q) = |q|v_s$ i $E_\rho(q) = |q|v_\rho$. Ovdje su

$$v_{\rho,s} = \sqrt{(v_F + \frac{g_{4\rho,s}}{2\pi})^2 - (\frac{g_{2\rho,s}}{2\pi})^2} \tag{3.83}$$

brzine kolektivnih nabojskih i spinskih modova.

Moguć je i egzaktan račun jednočestične Greenove funkcije pomoću koje se određuje spektralna funkcija [52]. Da bismo došli do Greenove funkcije uvode se bozonski operatori polja

$$\Phi_s(x) = -\frac{i\pi}{L}\sum_{q\neq 0}\frac{1}{q}e^{-\epsilon|q|/2-iqx}[\rho_{+s}(q) + \rho_{-s}(q)] - \frac{\pi x}{L}(N_{s+} + N_{s-}), \tag{3.84}$$

$$\Pi_s(x) = \frac{1}{L}\sum_{q\neq 0}e^{-\epsilon|q|/2-iqx}[\rho_{+s}(q) - \rho_{-s}(q)] + \frac{1}{L}(N_{s+} - N_{s-}), \tag{3.85}$$

gdje je $N_{\pm s} = \rho_{\pm s}(q = 0)$ broj elektrona sa spinom s na lijevoj i desnoj grani, a $\epsilon \to 0$,,cut-off" koji regulira interakcije. Fermionski operatori polja mogu biti reprezentirani preko bozonskih operatora

$$\Psi_{\pm s}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}}(\pm ik_F x - i(\pm(\Phi_\rho + s\Phi_\sigma) + (\theta_\rho + s\theta_\sigma))/\sqrt{2}). \tag{3.86}$$

Ovdje su uvedene linearne kombinacije $\Phi_{\rho,\sigma} = (\Phi_\uparrow \pm \Phi_\downarrow)/\sqrt{2}$ i $\Pi_{\rho,\sigma} = (\Pi_\uparrow \pm \Pi_\downarrow)/\sqrt{2}$, te $\theta_{\rho,\sigma} = \pi\int^x \Pi_{\rho,\sigma}(x')dx'$. Tada je retardirana Greenova funkcija

$$\begin{aligned} G^R(x,t) &= -i\Theta(t) < N \mid [\Psi_{+s}(x,t), \Psi^+_{+s}(0,0)]_+ \mid N > \\ &= -\frac{\Theta(t)}{\pi}e^{ik_F x}Re\left(\frac{1}{\sqrt{(v_\rho t - x)(v_s t - x)}}\left[\frac{\epsilon^2}{(\epsilon + iv_\rho t)^2 + x^2}\right]^{\alpha/2}\right). \end{aligned} \tag{3.87}$$

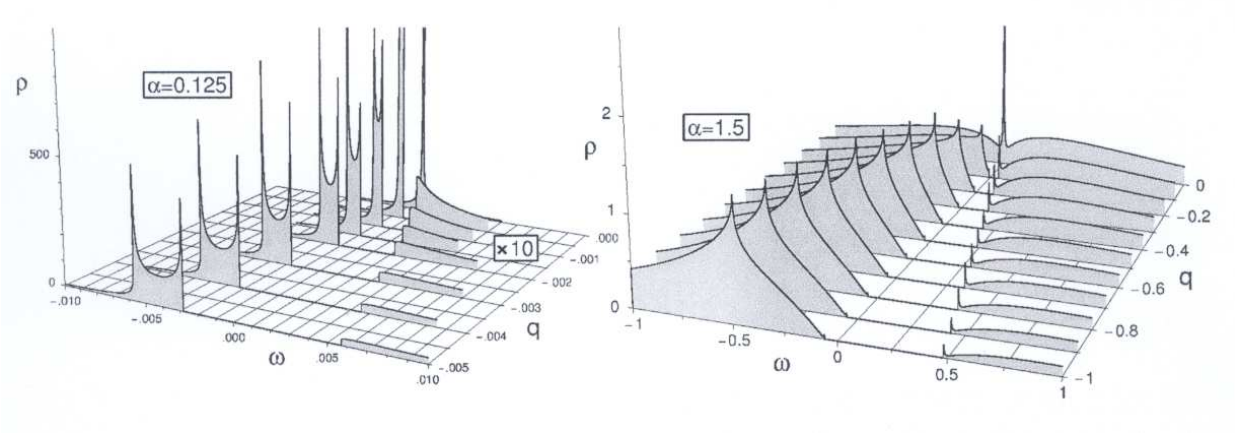
U ovoj Greenovoj funkciji su razdvojeni spinski i nabojski doprinosi koji se propagiraju različitim brzinama.

Voit [10, 37] u svom računu spektralne funkcije u (q,ω) prostoru u Tomonaga-Luttingerovom modelu uzima $g_{4\parallel} = 0$ što je s konačnim $g_{4\perp}$ kompatibilno spinsko-rotacijskoj invarijantnosti. Ovaj izbor opravdava činjenicom da bi konačni $g_{4\parallel}$ samo doveo do renormalizacije jednočestičnih svojstava kao što su brzine. Voit za model sa spinom i spinsko-rotacijskom invarijantnošću dobija spektralnu funkciju (sl. 3.7)

$$A_r(k, \omega + \mu) \sim (\omega - v_s r q_r)^{\alpha - 1/2} \mid \omega - v_\rho r q_r \mid^{(\alpha-1)/2} (\omega + v_\rho r q_r)^{\alpha/2}, \tag{3.88}$$

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

$$\alpha = (K_\rho + K_\rho^{-1} - 2)/4, \tag{3.89}$$



Slika 3.7: Spektralna funkcija $A(k, \omega + \mu) = \rho(q, \omega)$ za α jednako 0.125 i 1.5 [53].

gdje je

$$K_{\rho,s} = \sqrt{\frac{\pi v_F + g_{4\rho,s} - g_{2\rho,s}}{\pi v_F + g_{4\rho,s} + g_{2\rho,s}}}. \tag{3.90}$$

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.

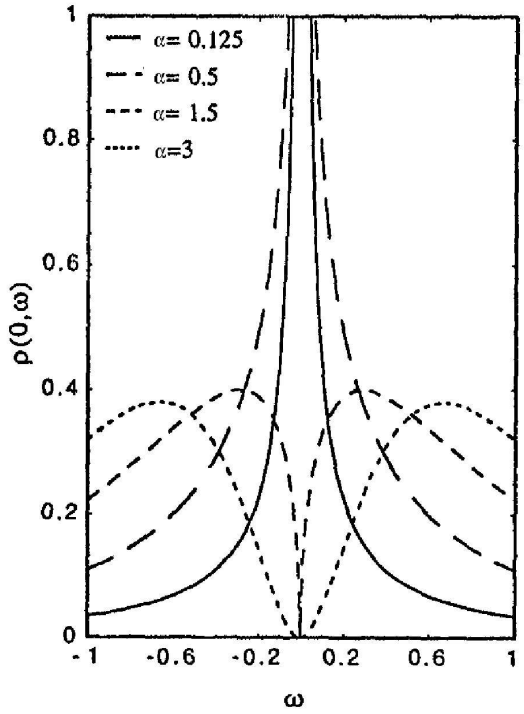
Spektralna funkcija za $k = k_F$ jednaka je (sl. 3.8)

$$A(k_F, \omega + \mu) \sim \mid \omega \mid^{\alpha - 1} . \tag{3.91}$$

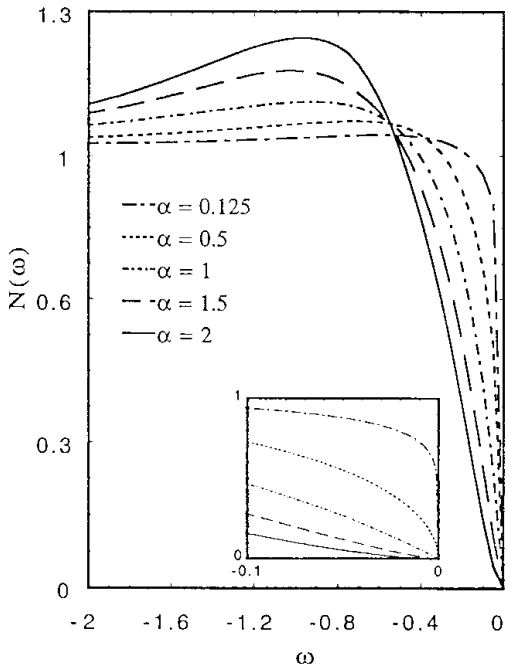
U granici $\omega \to 0$ spektralna funkcija divergira za $\alpha < 1$ i monotono pada na nulu za $\alpha > 1$. Kao što je prikazano na slici 3.8 spektralna težina se pomiče od Fermijeve površine ($\omega = 0$) kako α raste od jedinice. Parametar α je mali ako prevladava lokalizimerana interakcija. npr $\alpha \leq 1/8$ za Hubbardov model. Granica velikih α odgovara jakim korelacijama do kojih dolazi u slučaju dugodosežnog Coulombovog potencijala, $V(q) \sim 1/q^2$, kao što je to prikazano u analizi modela rešetke paralelnih lanaca s trodimenzionalnom Coulombovom interakcijom [12, 13, 14].

Jednočestična gustoća stanja

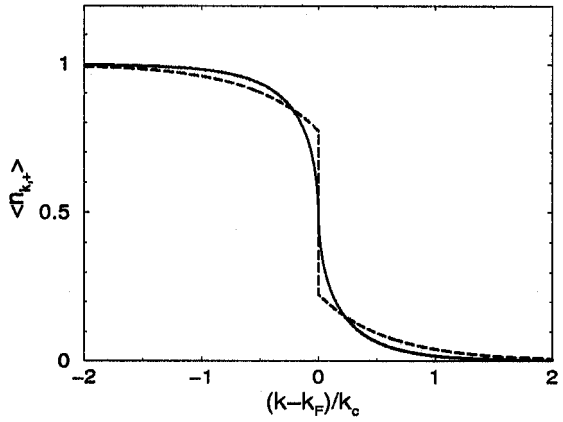
$$N(\omega) = \sum_r \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_r}{2\pi} A_r(k, \omega + \mu), \tag{3.92}$$



Slika 3.8: Spektralna funkcija $A(k_F, \omega + \mu) = \rho(0, \omega)$ za različite α [10].



Slika 3.9: Gustoća stanja Luttingerovog modela za različite α [10].



Slika 3.10: Funkcija distribucije momenta za Luttingerovu tekućinu (puna linija) i Fermijevu tekućinu (isprekidana linija) [54].

koju je izračunao Voit (sl. 3.9) asimptotski se ponaša za $\omega \to 0$ na način

$$N(\omega) \sim \mid \omega \mid^{\alpha} \tag{3.93}$$

kao što su već ranije pokazali Luther i Peschel [52]. Spektralna težina koja je rastom α izgubljena blizu Fermijeve površine pojavljuje se u maksimumu na konačnim frekvencijama. Fotoemisijski eksperimenti su u skladu s velikim α koji prelazi jedinicu.
Voit također dobija i funkciju distribucije momenta koja u blizini k_F ima već poznato ponašanje (sl. 3.10) [9]

$$n(k_F + q) \approx \frac{1}{2} - C_1 sign(q)|q|^{\alpha} - C_2 q \tag{3.94}$$

te tako eksplicitno određuje konstante C_1 i C_2. Zanimljivo je da kod Luttingerovih tekućina za razliku od Fermijevih nema diskontinuiteta na Fermijevoj površini u funkciji distribucije momenta.

Schönhammer i Meden također su proračunali spektralnu funkciju u (q, ω) prostoru za model sa spinom i u slučaju spinsko-rotacijske invarijantnosti su dobili analogne rezultate Voitovim za $A(k, \omega)$, $A(k_F, \omega)$ i $N(\omega)$ [55].

3.4.2 Slabo vezani metalni lanci koji međudjeluju dugodosežnim Coulombovom interakcijom i bez prijelaza elektrona s lanca na lanac

Kako eksperimenti na kvazijednodimenzionalnim vodičima sugeriraju značaj dugodosežne Coulombove interakcije Schönhammer, Meden i Kopietz promatraju model s paralelnim lancima između kojih nema prijelaza elektrona, a elektroni međudjeluju 3D Coulombovom interakcijom. Fourierova transformacija te interakcije je

$$U(q_\parallel, \mathbf{q}_\perp) = e^2 \int dx \sum_{\mathbf{r}_\perp} \frac{e^{-i[q_\parallel x + \mathbf{q}_\perp \mathbf{r}_\perp]}}{\sqrt{x^2 + \mathbf{r}_\perp^2}} \tag{3.95}$$

gdje se sumira po dvodimenzionalnoj rešetki lanaca. Kako je broj čestica na svakom lancu sačuvan ovaj problem se može riješiti standardnim jednodimenzionalnim bozonizacijskim tehnikama [13, 56]. Međutim, oni u pristupu višedimenzionalne bozonizacije pokazuju da je ovakav 3D sistem Luttingerova tekućina [15, 23]. Dobijena spektralna funkcija u (q, ω) prostoru analogna je onoj u 1D slučaju. Naime,

$$A_+^-(k, \omega) \sim \Theta(v_F[k - k_F] - \omega)(v_F[k - k_F] - \omega)^{\gamma_{cb} - 1/2} \tag{3.96}$$

u slučaju $\gamma_{cb} < 1/2$ te

$$A_+(k, \omega) \sim \Theta(-\omega)(-\omega)^{\gamma_{cb} - 1} \tag{3.97}$$

u slučaju $1/2 < \gamma_{cb} < 1$. Za anomalnu dimenziju veću od jedinice nema ovih divergencija i spektrima dominira široki nabojski maksimum. Ovdje je anomalna dimenzija određena interakcijom na sljedeći način

$$\gamma_{cb} = \frac{1}{2} \lim_{q_\parallel \to 0} < 2s^2(\mathbf{q}) >, \tag{3.98}$$

gdje je

$$s^2(\mathbf{q}) = [\tilde{v}_F(\mathbf{q}) - v_F]^2 / 4\tilde{v}_F(\mathbf{q}) v_F, \tag{3.99}$$

dok je

$$\tilde{v}_F(\mathbf{q}) = v_F[1 + 2U(q_\parallel, \mathbf{q}_\perp)/\pi v_F]^{1/2} \tag{3.100}$$

renormalizirana Fermijeva brzina.

Gustoća stanja koja ima potencijsko ponašanje za $\omega \to 0$ [52]

$$A(\omega) \sim |\omega|^{\gamma_{cb}}, \tag{3.101}$$

je u skladu s fotoemisijskim eksperimentima za $\gamma_{cb} > 1$ [36]. Ovaj model vodi na γ_{cb} u eksperimentalnom području s numerički izračunatim $U(q_\parallel, \mathbf{q}_\perp)$, ali i s $U(q_\parallel, \mathbf{q}_\perp) \approx \frac{4\pi e^2}{(a_\perp \mathbf{q})^2}$ u dugovalnom limesu ($\mathbf{q}_\perp \ll 1/a_\perp$), gdje je $a_\perp$ konstanta rešetke u smjeru okomitom na lance.

Model koji uključuje efekte dugodosežne Coulombove elektron-elektron interakcije proučavan je i ranije [12, 14]. Barišić i Botrić promatraju kvadratnu rešetku paralelnih lanaca s konstantom $d_\perp$ većom od udaljenosti čvorova duž lanaca $d_\parallel$ [12, 14]. Zanemaruju prijelaz elektrona s lanca na lanac i uzimaju trodimenzionalnu dugodosežnu Coulombove interakciju

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2e^2}{d_\perp^2 \mathbf{q}^2 v_F}. \tag{3.102}$$

Barišić je uz identifikaciju ,,forward" raspršenja duž lanaca g_2 s dinamički zasjenjenom Coulombovom interakcijom

$$g_2 \approx \frac{e^2}{\pi v_F} \ln \frac{E_F}{\omega_{pl}}, \; v_F q_\parallel < \omega_{pl}, \tag{3.103}$$

gdje je $E_F = v_F k_F$, a $\omega_{pl}^2 = 8e^2 v_F / d_\perp^2$, parketnom sumacijom dobio da $2k_F - CDW$ i $2k_F - SDW$ korelacijske funkcije ($\tilde{P}$) imaju poznato [33, 34] potencijsko ponašanje [12]

$$\tilde{P} \sim |\omega|^{-\frac{e^2}{\pi v_F} \ln \frac{E_F}{\omega_{pl}}}, \; \omega < \omega_{pl}. \tag{3.104}$$

Ovaj rezultat dobijaju i Botrić i Barišić bozonizacijskom metodom uzimajući samo ,,forward" raspršenje [14].

Također, Schulz [13] promatra u bozonizacijskom pristupu sistem vezanih Luttingerovih tekućina, tj. N paralelnih lanaca duž kojih se gibaju elektroni i među kojima nema prijelaza elektrona, te uzima samo ,,forward" raspršenje. Postupkom koji su proveli Luther i Peschel [52] za 1D sistem dobija rezultat za korelacijske funkcije koji se u slučaju Coulombove interakcije za koju je

$$g_{2\rho}(\mathbf{q}) = g_{4\rho}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{d_\perp^2} \frac{1}{\varepsilon_\parallel q_\parallel^2 + \varepsilon_\perp \mathbf{q}_\perp^2}, \tag{3.105}$$

gdje su $\varepsilon_\parallel$ i $\varepsilon_\perp$ dielektrične konstante u longitudinalnom i transverzalnom smjeru, slaže s onim kojeg su dobili Barišić i Botrić.

3.4.3 Efekt konačnog integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance

Eksperimenti koji služe kao proba Luttingerovog modela provode se na kvazijednodimenzionalnim vodičima s konačnim integralima prijelaza u smjeru okomitom na lance, $t_\perp \neq 0$. Stoga Schönhammer, Meden i Kopietz [15, 23] u model rešetke paralelnih lanaca s 3D interakcijom elektrona uključuju i konačan prijelaz elektrona s lanaca na lanac. Metodom višedimenzionalne bozonizacije pokazuju da ovaj sistem koji je za $t_\perp = 0$ Luttingerova tekućina, za $t_\perp \neq 0$ ima kvazičestični ostatak, te striktno govoreći više nije Luttingerova tekućina. Ako je $t_\perp$ malo u odnosu na integral prijelaza duž lanaca $t_\parallel$, kvazičestični ostatak ima spektralnu težinu

$$Z \sim (t_\perp / E_F)^{\gamma_{cb}}, \tag{3.106}$$

gdje se $\gamma_{cb} > 0$ može identificirati s anomalnom dimenzijom Luttingerove tekućine za $t_\perp = 0$.

Suprotno ovom rezultatu ranija proučavanja modela paralelnih lanaca među kojima dolazi do prijelaza elektrona u sklopu perturbacijske teorije po integralu prijelaza u transverzalnom smijeru $t_\perp$ vode na konačnu vrijednost kvazičestične težine samo za vrijednost anomalne dimenzije α manju od jedinice [57, 58, 59, 60, 61]. Osnova perturbacijskog pristupa kojeg je uveo Wen [57] je uzimanje samo prvog reda računa smetnje po $t_\perp$ tako da Greenova funkcija sistema bude

$$G(\mathbf{k}, \omega) = [G_0^{-1}(k_\parallel, \omega) - t_\perp(\mathbf{k})]^{-1}, \tag{3.107}$$

gdje je $G_0(k_\parallel, \omega)$ Greenova funkcija Tomonaga-Luttingerovog modela za jedan lanac, a za sistem dimenzije D je

$$t_\perp(\mathbf{k}) = t_\perp \sum_{i=1}^{D-1} \cos(k_i b_i). \tag{3.108}$$

Da bi se pojavila kvazičestica u sistemu na $\omega = 0$ Greenova funkcija mora imati pol u toj točki tako da se u okolini te točke može zapisati na način

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z(\mathbf{k})}{\omega}, \tag{3.109}$$

gdje je $Z(\mathbf{k}) = \mid \partial Re G^{-1}(\mathbf{k}, 0)/\partial\omega \mid^{-1}$ reziduum Greenove funkcije u polu $\omega = 0$ i predstavlja kvazičestičnu težinu. Pripadna spektralna funkcija jednaka je

$$A(\mathbf{k}, \omega) = Z(\mathbf{k})\delta(\omega). \tag{3.110}$$

Pol će se pojaviti za proizvoljno mali $t_\perp$ samo ako $G_0(k_\parallel, 0)$ divergira, a to je slučaj za $\alpha < 1$ [57]. Tada je kvazičestična težina proporcionalna s $(t_\perp/E_F)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}$.

3.5 Greenova matrica elektrona u kristalu s većim brojem elektronskih vrpci u G_0W_0 aproksimaciji

3.5.1 RPA dielektrična matrica

Zasjenjena Coulombova interakcija u aproksimaciji nasumičnih faza (RPA) slijedi iz Dysonove jednadžbe [49] koja je u dijagramatskom obliku prikazana na slici 3.11, dok je njen analitički zapis u $(\mathbf{r}, \omega)$ prostoru

$$\bar{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int d\mathbf{r_1} d\mathbf{r_1'} V(\mathbf{r} - \mathbf{r_1}) \Pi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_1'}, \omega) \bar{V}(\mathbf{r_1'}, \mathbf{r}', \omega) \tag{3.111}$$

gdje je

$$\Pi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_1'}, \omega) = -\frac{i}{\pi} \int d\omega' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega + \omega') G_0(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \omega') \tag{3.112}$$

RPA vlastiti polarizacijski dijagram. Integralna jednadžba (3.111) se pomoću (3.52) transformira u sustav algebarskih jednadžbi,

$$\sum_{l_3 l_3'} [\delta_{l_3 l_1} \delta_{l_3' l_1'} - V_{l_1 l_3' l_1' l_3}(\mathbf{q}) \Pi_{l_3 l_3'}(\mathbf{q}, \omega)] \bar{V}_{l_3 l_2 l_3' l_2'}(\mathbf{q}, \omega) = V_{l_1 l_2 l_1' l_2'}(\mathbf{q}), \tag{3.113}$$

za matrične elemente zasjenjenog potencijala u Blochovoj bazi čvrste veze [62],

$$\bar{V}_{l_1 l_2 l_1' l_2'}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \varphi_{l_1}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \varphi_{l_2}^*(\mathbf{r}') \bar{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \varphi_{l_1'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \varphi_{l_2'}(\mathbf{r}'). \tag{3.114}$$

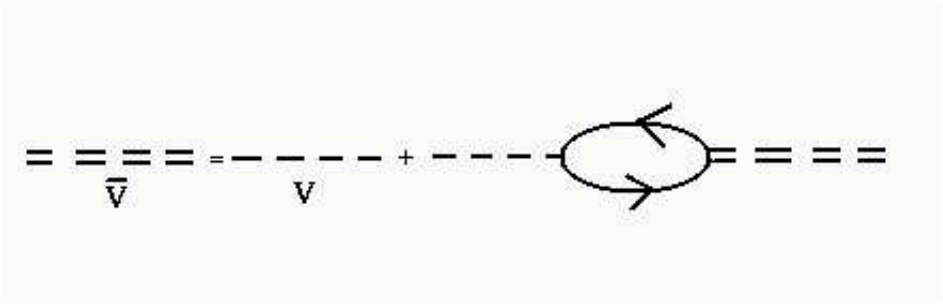
Ovdje su $V_{l_1 l_2 l_1' l_2'}(\mathbf{q})$ odgovarajući matrični elementi nezasjenjene Coulombove interakcije koji se dobiju zamjenom zasjenjene interakcije $\bar{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ u izrazu (3.114) s $e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, dok su

$$\Pi_{l,l'}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{[1 - n_l(\mathbf{k})] n_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\omega + E_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_l(\mathbf{k}) + i\eta} - \frac{n_l(\mathbf{k})[1 - n_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\omega + E_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_l(\mathbf{k}) - i\eta} \right\}, \tag{3.115}$$

RPA vlastiti polarizacijski dijagrami u $(\mathbf{q}, \omega)$ prostoru. Koeficijenti uz zasjenjeni potencijal u jednadžbi (3.113),

$$\varepsilon_{l_1 l_1', l_3 l_3'} \equiv \delta_{l_3 l_1} \delta_{l_3' l_1'} - V_{l_1 l_3' l_1' l_3}(\mathbf{q}) \Pi_{l_3 l_3'}(\mathbf{q}, \omega), \tag{3.116}$$

čine dielektričnu matricu u reprezentaciji čvrste veze. Determinanta ove matrice, $\varepsilon_m(\mathbf{q}, \omega)$, naziva se mikroskopska dielektrična funkcija. Rješavanjem sustava (3.113) ona postaje nazivnik svih matričnih elemenata zasjenjene interakcije te njene nule odgovaraju kolektivnim i nekoherentnim pobuđenjima sistema [62, 63, 64].



Slika 3.11: Dysonova jednadžba za RPA zasjenjenu interakciju

3.5.2 G_0W_0 Greenova matrica

Polazimo od Dysonove jednadžbe za G_0W_0 Greenovu funkciju koja je prikazana na slici 3.12, a njen analitički zapis u $(\mathbf{r},\omega)$ prostoru je [49]

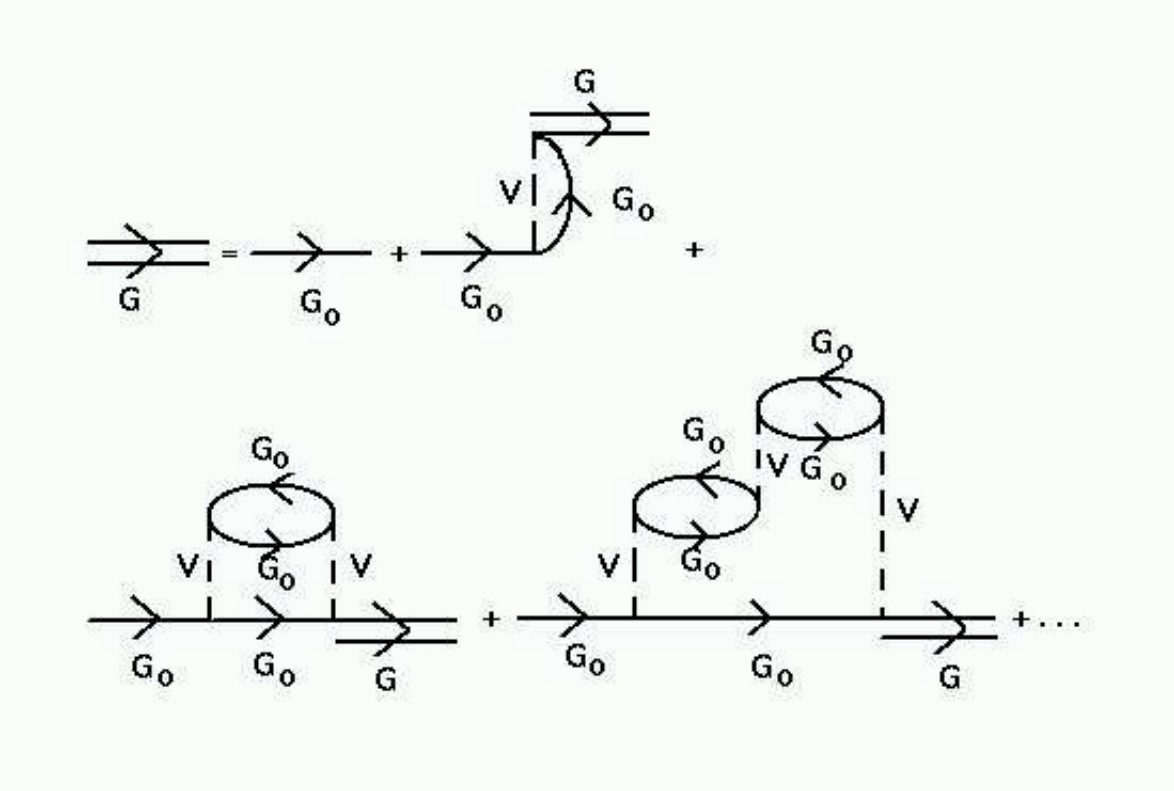
$$\begin{aligned} G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) &= G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)+\frac{i}{2\pi}\int G_0(\mathbf{r},\mathbf{r_1},\omega)G_0(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}',\omega-\omega') \\ &\quad [\bar{V}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}',\omega')-V(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}')]G(\mathbf{r_1}',\mathbf{r}',\omega)d\mathbf{r_1}d\mathbf{r_1}'d\omega' \\ &+ \frac{i}{2\pi}\int G_0(\mathbf{r},\mathbf{r_1},\omega)G_0(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}',\omega')V(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}')e^{i\omega'\delta}G(\mathbf{r_1}',\mathbf{r}',\omega)d\mathbf{r_1}d\mathbf{r_1}'d\omega', \end{aligned} \tag{3.117}$$

gdje je $\bar{V}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_1}',\omega')$ zasjenjena Coulombova interakcija. Ovdje smo razdvojili prvi član računa smetnje, koji ima $e^{i\omega'\delta}$, $\delta\to 0^+$, od viših. Faktor $e^{i\omega'\delta}$ pojavljuje se zato što prvi član računa smetnje u $(\mathbf{r},t)$ prostoru ima Greenovu funkciju s istim vremenima $(t'\to t)$. To u prikazu diagramom znači da fermionska linija počinje i završava u točkama s istim vremenima, odnosno da je povezana istom interakcijskom linijom. Integralnu jednadžbu (3.117) transformiramo u sustav algebarskih jednadžbi za matrične elemente Greenove matrice u Blochovoj bazi čvrste veze. Korištenjem potpunosti Blochovih valnih funkcija i periodičnosti zasjenjenog potencijala dobija se sustav linearnih jednadžbi

$$\begin{aligned} G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) &= \delta_{mn}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}G_m^0(\mathbf{k},\omega)+\frac{i}{2\pi N}G_m^0(\mathbf{k},\omega)\sum_{ll_1\mathbf{q}}\Big\{V_{ml_1l_1l}(\mathbf{q})\times \\ &\quad \times\ \Big[-\int d\omega' G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')+\int d\omega' e^{i\omega'\delta}G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega')\Big] \\ &+ \int d\omega'\bar{V}_{ml_1l_1l}(\mathbf{q},\omega')G_{l_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')\Big\}G_{ln}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega). \end{aligned} \tag{3.118}$$

gdje su

$$G_l^0(\mathbf{k},\omega)=\frac{1-n_l(\mathbf{k})}{\omega-E_l(\mathbf{k})+i\eta}+\frac{n_l(\mathbf{k})}{\omega-E_l(\mathbf{k})-i\eta} \tag{3.119}$$



Slika 3.12: Dysonova jednadžba za G_0W_0 Greenovu funkciju

matrični elementi Greenove matrice nesmetanog problema.

Integracijom članova uz nezasjenjeni potencijal po ω' dobija se sustav linearnih jednadžbi

$$G_{mn}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega) = \delta_{mn}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}G^0_m(\mathbf{k},\omega) + \frac{i}{2\pi N}G^0_m(\mathbf{k},\omega)\sum_{ll_1\mathbf{q}}\Big[i\pi V_{ml_1l_1l}(\mathbf{q}) + \int d\omega' \bar{V}_{ml_1l_1l}(\mathbf{q},\omega')G^0_{l_1}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\omega')\Big]G_{ln}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega). \quad (3.120)$$

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

3.6 G_0W_0 Greenova funkcija u ,,jellium" modelu

3.6.1 G_0W_0 Greenova funkcija

Polazeći od Dysonove jednadžbe za Greenovu funkciju

$$G(\mathbf{k},\omega) = G_0(\mathbf{k},\omega) + G_0(\mathbf{k},\omega)\Sigma(\mathbf{k},\omega)G(\mathbf{k},\omega), \tag{3.121}$$

Hedin i Lundqvist računaju vlastitu energiju [26, 27, 28]

$$\Sigma(\mathbf{k},\omega) = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^4 \int e^{i\omega'\delta} W(\mathbf{q},\omega') G_0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, \omega - E_0 + \omega') d\mathbf{k}' d\omega' \tag{3.122}$$

gdje je $W = V\varepsilon^{-1}$ zasjenjena Coulombova interakcija s dielektričnom funkcijom

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_1^2(\mathbf{q})} \tag{3.123}$$

u kojoj uzimaju plazmonsku frekvenciju

$$\omega_1^2(\mathbf{q}) = \omega_p^2 + \frac{16}{3}q^2 + q^4. \tag{3.124}$$

U izrazu (3.122) uveden je pomak E_0 u Greenovu funkciju nesmetanog problema tako da njen kemijski potencijal bude jednak kemijskom potencijalu konačne Greenove funkcije

$$E_0 = \mu - E(k_F). \tag{3.125}$$

Tako su Hedin i Lundqvist u G_0W_0 aproksimaciji kemijski potencijal konačne Greenove funkcije μ samousaglašeno odredili.
Iz Dysonove jednadžbe (3.121) slijedi

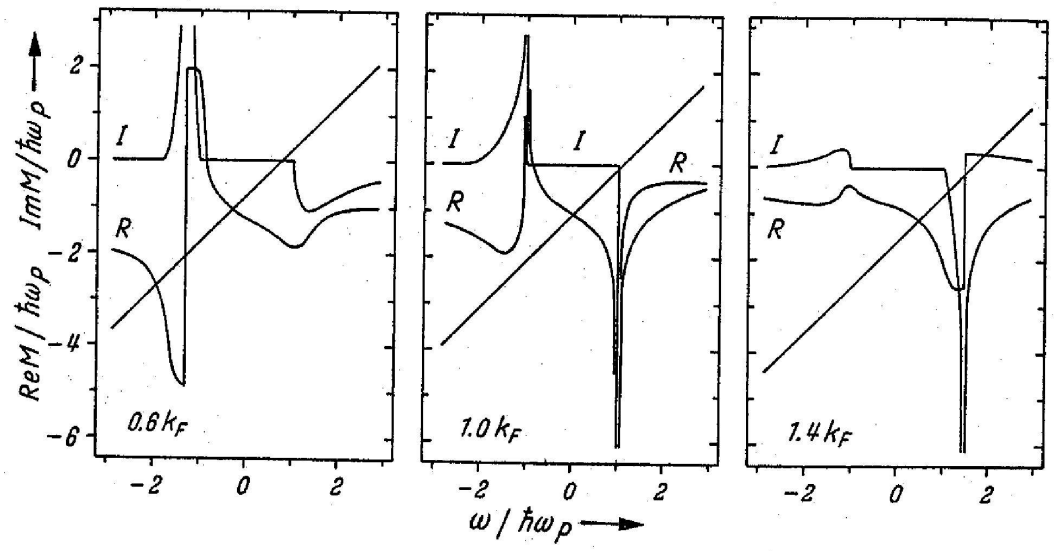
$$G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) - \Sigma(\mathbf{k},\omega), \tag{3.126}$$

gdje je $G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E(\mathbf{k}) + i\eta[1-2n(\mathbf{k})]$, $E(\mathbf{k}) = k^2/2m$. Kemijski potencijal je tada određen iz uvjeta

$$ReG^{-1}(k_F,\mu) = 0. \tag{3.127}$$

Plazmonska disperzija (3.124) u dugovalnoj granici je vrlo bliska RPA (Lindhard) plazmonskoj disperziji i dobro prati maksimum od $Im[1/\varepsilon_{RPA}(\mathbf{q},\omega)]$. Tako dielektrična funkcija zadržava osnovna obilježja RPA dielektrične funkcije iako su u njoj zanemarena elektronsko-šupljinska pobuđenja u odnosu na plazmonska. Nakon integracije dobijaju

$$\Sigma(\mathbf{k},\omega) = Re\Sigma(\mathbf{k},\omega) + iIm\Sigma(\mathbf{k},\omega) \tag{3.128}$$



Slika 3.13: Realni (R) i imaginarni (I) dio vlastite energije $\Sigma(k,\omega)$, gdje se ω mjeri u odnosu na kemijski potencijal μ [65].

čije je tipično ponašanje prikazano na slici 3.13. $Im\Sigma(\mathbf{k},\omega) = 0$ za $\mu - \omega_p < \omega < \mu + \omega_p$ je posljedica zanemarivanja elektronsko-šupljinskih pobuđenja.

$ReG^{-1}(\mathbf{k},\omega)$ ima nulu $\omega_0(\mathbf{k})$ u sjecištu pravca $ReG_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E(\mathbf{k})$ i krivulje $Re\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ u području $\mu - \omega_p < \omega < \mu + \omega_p$ (sl. 3.13). Kako $G(\mathbf{k},\omega)$ u toj nuli ima pol (kvazičesticu) može se zapisati u rezonantnom obliku

$$G(\mathbf{k},\omega) = \frac{Z(\mathbf{k})}{\omega - \omega_0(\mathbf{k})}, \tag{3.129}$$

gdje je

$$Z(\mathbf{k}) = \mid 1 - \partial Re\Sigma(\mathbf{k},\omega_0(\mathbf{k}))/\partial\omega \mid^{-1} = \mid \partial ReG^{-1}(\mathbf{k},\omega_0(\mathbf{k}))/\partial\omega \mid^{-1} . \tag{3.130}$$

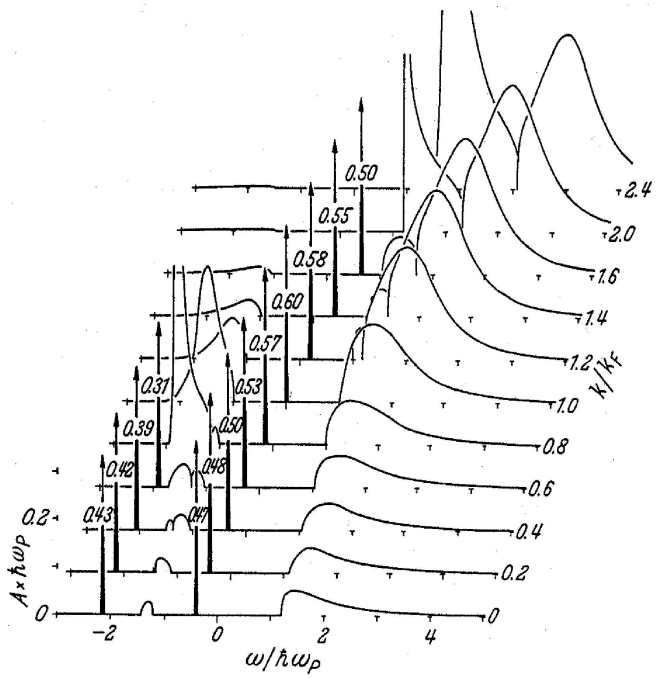
3.6.2 Spektralna funkcija

Pripadna spektralna funkcija prikazana na slici 3.14 dana je s

$$A(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\mid ImG^{-1}(\mathbf{k},\omega) \mid}{[ReG^{-1}(\mathbf{k},\omega)]^2 + [ImG^{-1}(\mathbf{k},\omega)]^2} \tag{3.131}$$

u području u kojem je $ImG^{-1}(\mathbf{k},\omega) \neq 0$, dok je δ-peak dan s

$$A(\mathbf{k},\omega) = Z(\mathbf{k})\delta(\omega - \omega_0(\mathbf{k})) \tag{3.132}$$



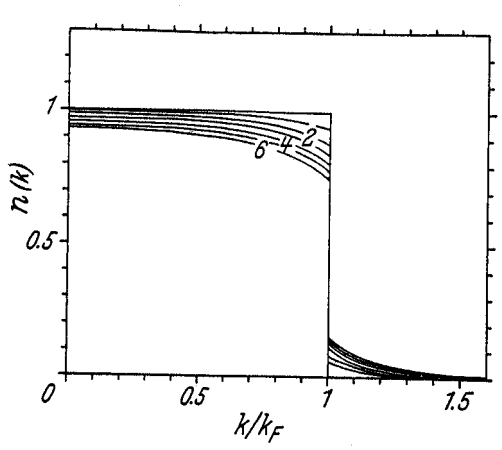
Slika 3.14: Spektralna funkcija $A(k,\omega)$ za $\hbar\omega_p = 0.236Ry$ [27], gdje se ω mjeri u odnosu na kemijski potencijal μ.

u nuli $\omega_0(\mathbf{k})$ realnog dijela $ReG^{-1}(\mathbf{k},\omega_0(\mathbf{k}))$ u području u kojem je $ImG^{-1}(\mathbf{k},\omega) = 0$. Za većinu vrijednosti valnog vektora $\mathbf{k}$ spektralna se funkcija sastoji od tri komponente, jednog singularnog δ-peak-a i dvije sporedne vrpce koje su posljedica singularnog Coulombovog potencijala i plazmonskog udijela u efektivnoj interakciji u dugovalnom limesu. Ova spektralna funkcija numerički zadovoljava pravilo sume

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{k},\omega) = 1 \tag{3.133}$$

s greškom reda veličine numeričke točnosti računa.

Hedin i Lundqvist su pokazali da plazmoni dominantno određuju spektralnu funkciju tako što su numerički ovim putem dobili kvalitativno isti rezultat za tu funkciju kao i kad su uzeli Lindhardovu dielektričnu funkciju [28].



Slika 3.15: Funkcija distribucije momenta $n(k)$ za različite plazmonske energije $\hbar\omega_{pl}$ [27].

3.6.3 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenta

Funkcija distribucije momenta

$$n(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\mu} d\omega A(\mathbf{k}, \omega) \tag{3.134}$$

prikazana na slici 3.15 zadržava tipično ponašanje Fermijeve tekućine s diskontinuitetom na $k = k_F$ jednakim kvazičestičnoj težini $Z(k_F)$.

Poglavlje 4

Model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom u kojem nema prijelaza elektrona s lanca na lanac

Razmatrat ćemo model $N_a N_c$ paralelnih lanaca u pravokutnoj rešetci duž kojih se gibaju elektroni bez preskakanja s lanca na lanac, te u kojem postoji jedna elektronska vrpca po lancu i Coulombovo međudjelovanje svih elektrona.
Zbog pretpostavke da se elektroni gibaju samo duž lanaca jednoelektronska disperzija ovisi samo o komponenti valnog vektora u smjeru lanaca. Stoga se jednoelektronski energijski spektar mjeren od Fermijeve energije u pristupu čvrste veze može zapisati izrazom (3.58) danim u poglavlju 3. U ovom poglavlju ćemo nakon kratke diskusije pobuđenja izračunati spektralnu funkciju, gustoću stanja i distribuciju momenta kvazi-jednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom u kojem nema prijelaza elektrona s lanca na lanac.

4.1 Dielektrična funkcija i pobuđenja

Dielektrična funkcija za model kristala s jednom vrpcom glasi

$$\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega) = 1 - V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q},\omega). \tag{4.1}$$

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

$$V(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}\neq 0} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \frac{e^2}{R} + U, \tag{4.2}$$

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

$$U = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \varphi^*(\mathbf{r})\varphi^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{\mid \mathbf{r} - \mathbf{r}' \mid} \varphi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}') \tag{4.3}$$

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

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{v_0 q^2}. \tag{4.4}$$

Ovdje je v_0 volumen elementarne ćelije.

Zbog pretpostavke o jednodimenzionalnoj disperziji (3.58) polarizacijski dijagram (3.115) koji ulazi u $\varepsilon_m(\mathbf{q}, \omega)$ također ovisi samo o komponenti valnog vektora u smjeru lanaca, tj.

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{N_b} \sum_{k_\parallel = -\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \left\{ \frac{[1 - n(k_\parallel)]n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega + E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel) + i\eta} - \frac{n(k_\parallel)[1 - n(k_\parallel + q_\parallel)]}{\omega + E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel) - i\eta} \right\}, \tag{4.5}$$

gdje je N_b broj elementarnih ćelija duž lanca, a

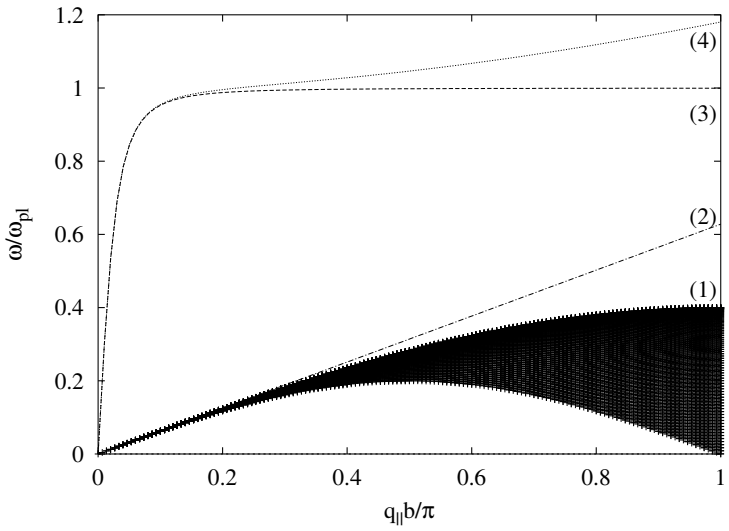
$$E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel) = 4t_0 \sin \frac{2k_\parallel + q_\parallel}{2} b \sin \frac{q_\parallel b}{2} \tag{4.6}$$

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

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \Pi(q_\parallel, \omega) = \frac{4}{N_b} \sum_{k_\parallel = -\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \frac{[1 - n(k_\parallel + q_\parallel)]n(k_\parallel)[E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel)]}{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - [E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel)]^2}. \tag{4.7}$$

Uočavamo da za dani $q_\parallel$ u polarizacijski dijagram ulaze elektronsko-šupljinska pobuđenja s valnim vektorom $k_\parallel$ u intervalu $k_F - q_\parallel < k_\parallel < k_F$. Energije svih elektronsko-šupljinskih pobuđenja koja ulaze u polarizacijski dijagram (4.7) prikazane su na slici 4.1.

Za razmatranja koja slijede korisno je promotriti nule mikroskopske dielektrične funkcije budući da one određuju energije pobuđenja. Da bismo lakše razlikovali dvije



Slika 4.1: Nekoherentna i koherentna elektronsko-šupljinska pobuđenja za izbor parametara $k_F = \pi/2b$, $t_0 = 0.2eV$, $\omega_{pl} = 2eV$, $q_\perp = \frac{1}{10b}$. (1) Nekoherentna elektronsko-šupljinskih pobuđenja koja ulaze u polarizacijski dijagram (4.7), (2) Akustična disperzija ($\sim v_F q_\parallel$) njihovog gornjeg dijela u dugovalnoj granici, (3) plazmonska frekvencija dana izrazom (4.13) i (4) aproksimativna plazmonska disperzija dana izrazom (4.12).

vrste pobuđenja, nekoherentna i kolektivna [66], zadržat ćemo diskretnost valnih vektora ovdje parametriziranih uobičajenim izborom Born-von Karman-ovih valnih vektora za koje je

$$k_i = n_i \frac{2\pi}{L},\ n_i \in Z, \tag{4.8}$$

gdje je L makroskopska duljina kristala u smjeru lanaca. Nekoherentna pobuđenja su ona za koja je energija pobuđenja $\Omega(k_\parallel, \mathbf{q})$ mikroskopski, reda veličine L^{-1}, blizu energiji odgovarajućeg elektronsko-šupljinskog pobuđenja s istim valnim vektorima (4.6). Energije nekoherentnih pobuđenja mogu se odrediti samo u diskretnoj reprezentaciji (4.8) [66], a na slici 4.1 predstavljene su gustim kvazikontinuumom nula dielektrične funkcije koje prožimaju spektar njenih polova jednakih energijama pripadnih golih elektronsko-šupljinskih pobuđenja.

Kolektivna plazmonska pobuđenja imaju energije koje su makroskopski, reda veličine L^0, udaljena od ruba spektra golih elektronsko-šupljinskih pobuđenja prikazanog na slici 4.1 i stoga se ona jednako dobro računaju i u kontinuiranom pristupu. Budući da će

plazmonska pobuđenja imati središnju ulogu u analizi spektralne funkcije, korisno je pojednostavniti njihovu disperziju tako da ostanu sačuvana relevantna svojstva dielektrične funkcije s ciljem da se omogući analitički proračun Greenove funkcije.

U dugovalnoj granici $\mathbf{q} \to 0$ u sumu po $k_\parallel$ u polarizacijskom dijagramu 4.7 ulaze samo elektronsko-šupljinska pobuđenja u uskom intervalu valnih vektora $k_F - q_\parallel < k_\parallel < k_F$ za čije energije vrijedi

$$E_0(k_\parallel + q_\parallel) - E_0(k_\parallel) \approx v_F q_\parallel, \tag{4.9}$$

gdje je $v_F = 2t_0 b \sin k_F b$ je Fermijeva brzina. Stoga se tada polarizacijski dijagram svodi na

$$\Pi(q_\parallel, \omega) \approx \frac{4}{N_b} \frac{v_F q_\parallel^2}{\omega^2 - v_F^2 q_\parallel^2} \frac{L}{2\pi} \tag{4.10}$$

te pomoću (4.1) dobijamo dielektričnu funkciju u dugovalnoj granici

$$\varepsilon_m(\mathbf{q}, \omega) = \frac{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - \Omega^2(\mathbf{q})}{(\omega + i\eta \mathrm{sign}\omega)^2 - v_F^2 q_\parallel^2}. \tag{4.11}$$

Ovdje je

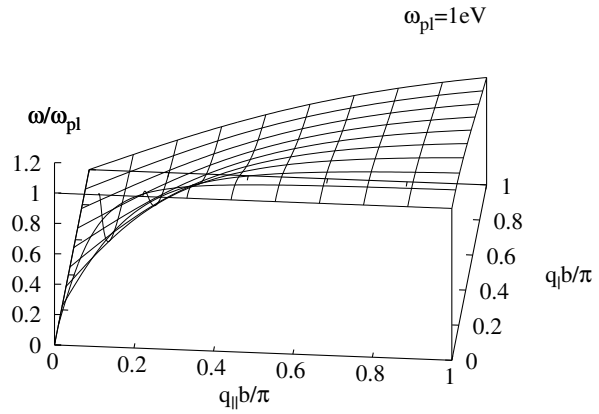
$$\Omega^2(\mathbf{q}) = \mid q_\parallel \mid^2 v_F^2 + \frac{\omega_{pl}^2 \mid q_\parallel \mid^2}{q^2}, \qquad \omega_{pl}^2 \equiv \frac{8e^2 v_F}{ac} \tag{4.12}$$

disperzija plazmonskog kolektivnog moda s konstantama rešetke a i c okomitim na lance. Vidljivo je da ova anizotropna plazmonska disperzija ima akustički karakter.

Nadalje, kao što se vidi na slici (4.1) plazmonska disperzija $\Omega(\mathbf{q})$, koja je bliska egzaktno izračunatoj numerički [67], je uvijek mnogo viša od maksimuma elektronsko-šupljinskog spektra, čak i onda kad se njen dugovalni izraz (4.12) proširi na cijelu I. Brillouinovu zonu. Zanemarimo li prvi član u izrazu za dugovalnu plazmonsku disperziju (4.12) dobijamo izraz

$$\Omega(\mathbf{q}) = \omega_{pl} \frac{\mid q_\parallel \mid}{q} \tag{4.13}$$

koji dobro aproksimira plazmonsku disperziju u dugovalnoj granici (4.12), a proširi li se na cijelu I. Brillouinovu zonu isto je uvijek mnogo viši od maksimuma elektronsko-šupljinskog spektra (sl. 4.1). Stoga ćemo u daljnjem računu koristiti ovu pojednostavljenu anizotropnu akustičnu plazmonsku disperziju u cijeloj I. Brillouinovoj zoni (sl. 4.2).



Slika 4.2: Plazmonska disperzija dana izrazom (4.13).

4.2 Greenova funkcija

Dysonova jednadžba (3.120) za jednočestičnu Greenovu funkciju elektrona u kvazijednodimenzionalnom metalu s jednom vrpcom je

$$G(\mathbf{k},\omega) = G_0(\mathbf{k},\omega)+\frac{i}{2\pi N}G_0(\mathbf{k},\omega)\sum_{\mathbf{q}}[\int d\omega' \bar{V}(\mathbf{q},\omega')G_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\mu-\omega')+i\pi V(\mathbf{q})]G(\mathbf{k},\omega), \tag{4.14}$$

gdje je Greenova funkcija nesmetanog problema

$$G_0(\mathbf{k},\omega) = \frac{1-n(k_\parallel)}{\omega - E_0(k_\parallel)+i\eta} + \frac{n(k_\parallel)}{\omega - E_0(k_\parallel)-i\eta}. \tag{4.15}$$

Imajući na umu nesamousaglašenost G_0W_0 aproksimacije, slijedimo proceduru koju je uveo Hedin [31] i elaborirao Schindlmayr [30]. Njome u jednadžbu (4.14) uvodimo kemijski potencijal μ koji ćemo odrediti iz uvjeta da mora biti jednak kemijskom potencijalu konačne Greenove funkcije $G(\mathbf{k},\omega)$. Iz izraza (4.14) se dobije recipročna vrijednost Greenove funkcije

$$G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) - \frac{i}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}}[\int d\omega' \bar{V}(\mathbf{q},\omega')G_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega-\mu-\omega')+i\pi V(\mathbf{q})] \tag{4.16}$$

gdje je

$$G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E_0(k_\parallel)+i\eta[1-2n(k_\parallel)]. \tag{4.17}$$

RPA zasjenjena interakcija je

$$\bar{V}(\mathbf{q},\omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega)} \tag{4.18}$$

gdje je $\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega)$ mikroskopska dielektrična funkcija (4.11) u dugovalnoj granici ekstrapolirana na cijelu I. Brillouinovu zonu čime smo zanemarili doprinos nekoherentnih pobuđenja u odnosu na doprinos plazmona u cijeloj I. Brillouinovoj zoni.
Matrični element nezasjenjene Coulombove interakcije

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{v_0 q^2,} \tag{4.19}$$

koji divergira za $\mathbf{q} \to 0$, ekstrapolirat ćemo također na cijelu prvu Brillouinovu zonu. Uvrštavanjem (4.17) i (4.18) u (4.16) dobije se

$$G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E_0(k_\parallel) + i\eta[1-2n(k_\parallel)] - \frac{i}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Bigg\{ i\pi + \\ + \int d\omega' \frac{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - v_F^2 q_\parallel^2}{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - \Omega^2(\mathbf{q})}\Bigg[\frac{1-n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega - \mu - \omega' - E_0(k_\parallel+q_\parallel) + i\eta} \\ + \frac{n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega - \mu - \omega' - E_0(k_\parallel+q_\parallel) - i\eta}\Bigg]\Bigg\}. \tag{4.20}$$

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

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

$$\int d\omega' \frac{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - v_F^2 q_\parallel^2}{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - \Omega^2(\mathbf{q})} \frac{1-n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega - \mu - \omega' - E_0(k_\parallel+q_\parallel) + i\eta} = -i\pi[1-n(k_\parallel+q_\parallel)] \\ - 2i\pi \frac{\Omega^2(\mathbf{q}) - v_F^2 q_\parallel^2}{2\Omega(\mathbf{q})} \frac{1-n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega - \mu - \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel+q_\parallel) + i\eta} \tag{4.21}$$

te

$$\int d\omega' \frac{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - v_F^2 q_\parallel^2}{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - \Omega^2(\mathbf{q})} \frac{n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega - \mu - \omega' - E_0(k_\parallel+q_\parallel) - i\eta} = i\pi n(k_\parallel+q_\parallel) + \\ + 2i\pi \frac{\Omega^2(\mathbf{q}) - v_F^2 q_\parallel^2}{-2\Omega(\mathbf{q})} \frac{n(k_\parallel+q_\parallel)}{\omega - \mu + \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel+q_\parallel) - i\eta} \tag{4.22}$$

za integraciju preko gornje kompleksne poluravnine oko pola $-\Omega(\mathbf{q}) + i\eta'$.
Tada izraz (4.20) postaje

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

$$\times \left[\frac{1 - n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \mu - \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel + q_\parallel) + i\eta} + \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \mu + \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel + q_\parallel) - i\eta} \right] \quad (4.23)$$

gdje je

$$E_{ex}(k_\parallel) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) n(k_\parallel + q_\parallel) \quad (4.24)$$

je energija izmjene po elementarnoj ćeliji za jednočestično stanje s valnim vektorom $k_\parallel$ [50]. Kako je $\Omega(\mathbf{q}) \gg v_F q_\parallel$ faktor $[\Omega^2(\mathbf{q}) - v_F^2 q_\parallel^2]/\Omega(\mathbf{q})$ u izrazu (4.23) može se reducirati na $\Omega(\mathbf{q})$. Nadalje, za $t_0 \ll \omega_{pl}$ nazivnici u zagradama izraza (4.23) mogu se također pojednostavniti zanemarujući ovisnost o $q_\parallel$ u disperziji $E_0(k_\parallel + q_\parallel)$, što je opravdano jer je ovisnost $E_0(k_\parallel + q_\parallel)$ o $q_\parallel$ u tim nazivnicima značajna jedino za velike vrijednosti transverzalne komponente $q_\perp \equiv \sqrt{q^2 - q_\parallel^2}$, a tada $\mathbf{q}$ sumacija zbog u tom slučaju malog faktora $V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q})$ daje zanemariv doprinos recipročnoj vrijednosti Greenove funkcije $G^{-1}(k_\parallel, \omega)$.

Nakon ovih pojednostavljenja izraz (4.23) se svodi na

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - E_0(k_\parallel) + i\eta[1 - 2n(k_\parallel)] - E_{ex}(k_\parallel) - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q}) \times$$
$$\times \left[\frac{1 - n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \mu - \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel) + i\eta} + \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \mu + \Omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel) - i\eta} \right]. \quad (4.25)$$

Odavde vidimo da je realni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije

$$ReG^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - E_0(k_\parallel) - E_{ex}(k_\parallel) - I(\mathbf{k}, \omega) \quad (4.26)$$

gdje je

$$I(k_\parallel, \omega) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q}) \left[\frac{1 - n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \mu - E_0(k_\parallel) - \Omega(\mathbf{q})} + \frac{n(k_\parallel + q_\parallel)}{\omega - \mu - E_0(k_\parallel) + \Omega(\mathbf{q})} \right] \quad (4.27)$$

te imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije

$$ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) = \frac{\pi}{2N} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Omega(\mathbf{q}) \{ [1 - n(k_\parallel + q_\parallel)] \delta[\omega - \mu - E_0(k_\parallel) - \Omega(\mathbf{q})]$$
$$- n(k_\parallel + q_\parallel) \delta[\omega - \mu - E_0(k_\parallel) + \Omega(\mathbf{q})] \}. \quad (4.28)$$

Kemijski potencijal sada slijedi direktno iz relacije

$$ReG^{-1}(k_F, \mu) = 0. \quad (4.29)$$

Uzimajući u obzir rezultat (4.24) dobijamo

$$\mu = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}). \quad (4.30)$$

Odredimo prvo realni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije. Da bismo odredili kemijski potencijal μ, energiju izmjene $E_{ex}(k_\parallel)$ i sumu $I(k_\parallel,\omega)$ aproksimirajmo I Brillouinovu zonu cilindrom istog volumena, a s visinom jednakom longitudinalnoj dimenziji $\frac{2\pi}{b}$ i radijusom baze $Q_\perp = \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{ac}}$, gdje su a i c poprečne konstante rešetke. Prelaskom na cilindrične koordinate

$$\sum_{\mathbf{q}} \to \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dq_\parallel \int_0^{Q_\perp} 2\pi q_\perp dq_\perp \tag{4.31}$$

i integracijom po $q_\perp$ dobiju se

$$I(k_\parallel,\omega) = \frac{e^2}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \Bigg[-\ln\left|\frac{\sqrt{q_\parallel^2+Q_\perp^2}\left(1-\frac{\omega_{pl}}{\omega-\mu-E_0(k_\parallel)}\right)}{\sqrt{q_\parallel^2+Q_\perp^2}-|q_\parallel|\frac{\omega_{pl}}{\omega-\mu-E_0(k_\parallel)}}\right| + n(k_\parallel+q_\parallel)\ln\left|\frac{(q_\parallel^2+Q_\perp^2)\left(1-\frac{\omega_{pl}^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}\right)}{q_\parallel^2+Q_\perp^2-q_\parallel^2\frac{\omega_{pl}^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}}\right|\Bigg] dq_\parallel, \tag{4.32}$$

energija izmjene

$$E_{ex}(k_\parallel) = -\frac{e^2}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dq_\parallel n(k_\parallel+q_\parallel)\ln\left|1+\frac{Q_\perp^2}{q_\parallel^2}\right| \tag{4.33}$$

i kemijski potencijal

$$\mu = -\frac{e^2}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dq_\parallel \ln\sqrt{1+\left(\frac{Q_\perp}{q_\parallel}\right)^2}. \tag{4.34}$$

U daljnjem računu koristimo integrale

$$\int \ln x dx = x ln x - x, \tag{4.35}$$

$$\int \ln \mid x^2-a^2 \mid dx = x\ln \mid x^2-a^2 \mid -2x + a\ln\left|\frac{x+a}{x-a}\right|, \tag{4.36}$$

$$\int \ln \mid x^2+a^2 \mid dx = x\ln \mid x^2+a^2 \mid -2x + 2a\arctan\frac{x}{a}, \tag{4.37}$$

te

$$\int \ln \mid \sqrt{1+x^2} \mp ax \mid dx = x\ln \mid \sqrt{1+x^2} \mp ax \mid -x \mp I_1 \tag{4.38}$$

gdje je

$$I_1 = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{a^2-1}}\ln\left|\frac{a\sqrt{1+x^2}\mp x-\sqrt{a^2-1}}{a\sqrt{1+x^2}\mp x+\sqrt{a^2-1}}\right|, & |a|>1, \\ \frac{2}{\sqrt{1-a^2}}\arctan\left[\frac{a+1}{\sqrt{1-a^2}}\frac{1}{x+\sqrt{1+x^2}}\right], & 0<a<1, \\ \frac{2}{\sqrt{1-a^2}}\arctan\left[\frac{a+1}{\sqrt{1-a^2}}(x+\sqrt{1+x^2})\right], & -1<a<0. \end{cases}$$

Integrirajući po $q_\parallel$ i uzimajući $Q_\perp \ll \pi/b$ dobijamo u području frekvencija $|\omega - \mu - E_0(k_\parallel)| < \omega_{pl}$

$$I(k_\parallel,\omega) + E_{ex}(k_\parallel) = \mu + \frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{\frac{b}{\pi}\frac{Q_\perp^2[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]}{\omega_{pl}-\omega+\mu+E_0(k_\parallel)} + \frac{Q_\perp[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]}{\sqrt{\omega_{pl}^2-[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]^2}}$$
$$\times \ln\left|\frac{\omega_{pl}-\sqrt{\omega_{pl}^2-[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]^2}}{\omega_{pl}+\sqrt{\omega_{pl}^2-[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]^2}}\right| + \Big[F_1(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu) +$$
$$+F_1(k_F+|k_\parallel|,\omega-\mu)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_\parallel|-k_F\Big) + \Big[F_1(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu) +$$
$$+2F_1\Big(\frac{\pi}{b},\omega-\mu\Big) - F_1\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\parallel|,\omega-\mu\Big)\Big]\Theta\Big(k_F+|k_\parallel|-\frac{\pi}{b}\Big)\Bigg\} \tag{4.39}$$

s funkcijom F_1 danom izrazom

$$F_1(x,y) = 2x\ln\mid x\mid -x\ln\left|x^2-\frac{Q_\perp^2(y-E_0(k_\parallel))^2}{\omega_{pl}^2-(y-E_0(k_\parallel))^2}\right| -$$
$$-\frac{Q_\perp(y-E_0(k_\parallel))}{\sqrt{\omega_{pl}^2-(y-E_0(k_\parallel))^2}}\ln\left|\frac{x+\frac{Q_\perp(y-E_0(k_\parallel))}{\sqrt{\omega_{pl}^2-(y-E_0(k_\parallel))^2}}}{x-\frac{Q_\perp(y-E_0(k_\parallel))}{\sqrt{\omega_{pl}^2-(y-E_0(k_\parallel))^2}}}\right|. \tag{4.40}$$

Kemijski potencijal i energija izmjene u izrazu (4.39) jednaki su

$$\mu = -\frac{e^2}{2b}\Big\{\frac{2bQ_\perp}{\pi}\arctan\frac{\pi}{bQ_\perp} + \ln\Big[\Big(\frac{bQ_\perp}{\pi}\Big)^2+1\Big]\Big\} \approx -\frac{1}{2}\Big(e^2Q_\perp + \frac{e^2}{\pi^2}Q_\perp^2 b\Big) \tag{4.41}$$

i

$$E_{ex}(k_\parallel) = -\frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{\Big[F(k_F-|k_{||}|)+F(k_F+|k_\parallel|)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_\parallel|-k_F\Big) +$$
$$+\Big[F(k_F-|k_{||}|)+2F\Big(\frac{\pi}{b}\Big)-F\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\parallel|\Big)\Big]\Theta\Big(k_F+|k_\parallel|-\frac{\pi}{b}\Big)\Bigg\}, \tag{4.42}$$

gdje je

$$F(x) = x\ln(Q_\perp^2+x^2) + 2Q_\perp\arctan\frac{x}{Q_\perp} - x\ln x^2. \tag{4.43}$$

Nadalje, u području frekvencija $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)| > \omega_{pl}$ dobijamo

$$I(k_\parallel,\omega) + E_{ex}(k_\parallel) = \mu + \frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{ - F_2(\omega-\mu-E_0(k_\parallel)) - \frac{b}{\pi}\frac{Q_\perp^2(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))}{\omega_{pl}-\omega+\mu+E_0(k_\parallel)}$$
$$+ \Big[F_3(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu)+F_3(k_F+|k_\parallel|,\omega-\mu)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_\parallel|-k_F\Big) +$$
$$+ \Big[F_3(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu)+2F_3\Big(\frac{\pi}{b},\omega-\mu\Big)-F_3\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\parallel|,\omega-\mu\Big)\Big]\times$$
$$\times\ \Theta\Big(k_F+|k_\parallel|-\frac{\pi}{b}\Big)\Bigg\} \tag{4.44}$$

s istim izrazima (4.41) za μ i (4.42) za $E_{ex}(k_\parallel)$, dok su funkcije F_2 i F_3 dane izrazima

$$F_2(x) = \frac{4xQ_\perp}{\sqrt{x^2-\omega_{pl}^2}}\left[\arctan\left(\sqrt{\frac{x+\omega_{pl}}{x-\omega_{pl}}}\frac{1}{\frac{\pi}{bQ_\perp}+\sqrt{1+(\frac{\pi}{bQ_\perp})^2}}\right)-\arctan\sqrt{\frac{x+\omega_{pl}}{x-\omega_{pl}}}\right],\ x>\omega_{pl},$$
$$F_2(x) = \frac{4xQ_\perp}{\sqrt{x^2-\omega_{pl}^2}}\left[\arctan\left(\sqrt{\frac{|x|+\omega_{pl}}{|x|-\omega_{pl}}}\left(\frac{\pi}{bQ_\perp}+\sqrt{1+(\frac{\pi}{bQ_\perp})^2}\right)\right)-\arctan\sqrt{\frac{|x|+\omega_{pl}}{|x|-\omega_{pl}}}\right], x<-\omega_{pl} \tag{4.45}$$

i

$$F_3(x,y) = 2x\ln\mid x\mid -x\ln\left|x^2-\frac{Q_\perp^2(y-E_0(k_\parallel))^2}{\omega_{pl}^2-(y-E_0(k_\parallel))^2}\right| -$$
$$-\frac{2Q_\perp(y-E_0(k_\parallel))}{\sqrt{(y-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}}\arctan\left(\frac{x\sqrt{(y-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}}{Q_\perp(y-E_0(k_\parallel))}\right). \tag{4.46}$$

Stoga je konačan izraz za $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ u području frekvencija $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|<\omega_{pl}$ jednak

$$\begin{aligned} ReG^{-1}(k_\parallel,\omega) &= \omega-\mu-E_0(k_\parallel)-\frac{e^2}{2\pi}\left\{\frac{b}{\pi}\frac{Q_\perp^2[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]}{\omega_{pl}-\omega+\mu+E_0(k_\parallel)}+\frac{Q_\perp[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]}{\sqrt{\omega_{pl}^2-[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]^2}}\right. \\ &\times \ln\left|\frac{\omega_{pl}-\sqrt{\omega_{pl}^2-[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]^2}}{\omega_{pl}+\sqrt{\omega_{pl}^2-[\omega-\mu-E_0(k_\parallel)]^2}}\right|+\Big[F_1(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu)+ \\ &+ F_1(k_F+|k_\parallel|,\omega-\mu)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_\parallel|-k_F\Big)+\Big[F_1(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu)+ \\ &+ \left.2F_1\Big(\frac{\pi}{b},\omega-\mu\Big)-F_1\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\parallel|,\omega-\mu\Big)\Big]\Theta\Big(k_F+|k_\parallel|-\frac{\pi}{b}\Big)\right\}, \end{aligned} \tag{4.47}$$

dok za odgovarajući izraz u području frekvencija $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|>\omega_{pl}$ dobijamo

$$\begin{aligned} ReG^{-1}(k_\parallel,\omega) &= \omega-\mu-E_0(k_\parallel)-\frac{e^2}{2\pi}\left\{-F_2(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))-\frac{b}{\pi}\frac{Q_\perp^2(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))}{\omega_{pl}-\omega+\mu+E_0(k_\parallel)}\right. \\ &+ \Big[F_3(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu)+F_3(k_F+|k_\parallel|,\omega-\mu)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_\parallel|-k_F\Big)+ \\ &+ \Big[F_3(k_F-|k_{||}|,\omega-\mu)+2F_3\Big(\frac{\pi}{b},\omega-\mu\Big)-F_3\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\parallel|,\omega-\mu\Big)\Big]\times \\ &\times \left.\Theta\Big(k_F+|k_\parallel|-\frac{\pi}{b}\Big)\right\}. \end{aligned} \tag{4.48}$$

Izračunajmo sada imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$. Koristeći ponovo cilindrične koordinate i integrirajući po $q_\perp$, dobijamo

$$ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)=\frac{e^2}{2}\Theta(\omega_{pl}-\omega+\mu+E_0(k_\parallel))\Theta(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\int_{-q_c}^{q_c}dq_\parallel[1-n(k_\parallel+q_\parallel)]$$
$$-\frac{e^2}{2}\Theta(\omega_{pl}+\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\Theta(-\omega+\mu+E_0(k_\parallel))\int_{-q_c}^{q_c}dq_\parallel n(k_\parallel+q_\parallel), \tag{4.49}$$

gdje je

$$q_c \equiv min\left(\frac{\mid \omega - \mu - E_0(k_\parallel) \mid Q_\perp}{\sqrt{\omega_{pl}^2 - (\omega - \mu - E_0(k_\parallel))^2}}, \frac{\pi}{b}\right). \tag{4.50}$$

Konačno, integrirajući po $q_\parallel$ dobijamo

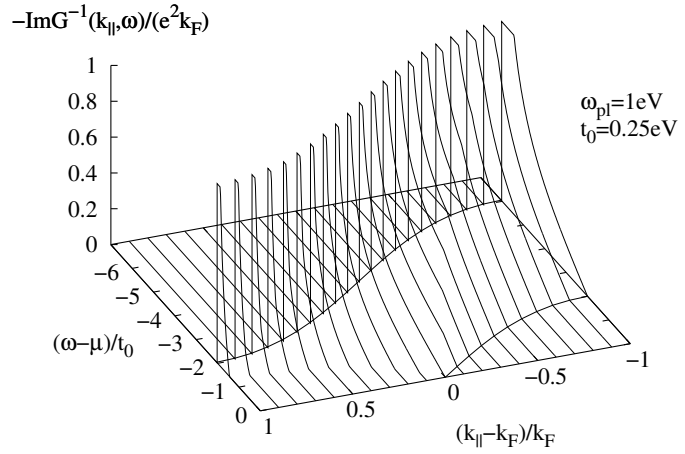
$$\begin{aligned} ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) &= \frac{e^2}{2}\Big\{2q_c\Theta[\omega_{pl} - \omega + \mu + E_0(k_\parallel)]\Theta[\omega - \mu - E_0(k_\parallel)] \\ &- \Big[\Theta[\omega_{pl} + \omega - \mu - E_0(k_\parallel)]\Theta[-\omega + \mu + E_0(k_\parallel)] + \Theta[\omega_{pl} - \omega + \mu + E_0(k_\parallel)] \times \\ &\times \Theta[\omega - \mu - E_0(k_\parallel)]\Big] \times \Big[2q_c\Theta(k_F - |k_\parallel| - q_c) + 2k_F\Theta(q_c - |k_\parallel| - k_F) \\ &+ (k_F - |k_\parallel| + q_c)\Theta(|k_\parallel| + q_c - k_F)\Theta(k_F - \mid |k_\parallel| - q_c \mid)\Theta(\frac{2\pi}{b} - k_F - |k_\parallel| - q_c) \\ &+ (2k_F + 2q_c - \frac{2\pi}{b})\Theta(k_F - \mid |k_\parallel| - q_c \mid)\Theta(-\frac{2\pi}{b} + k_F + |k_\parallel| + q_c)\Big]\Big\}, \end{aligned} \tag{4.51}$$

za $|\omega - \mu - E_0(k_\parallel)| < \omega_{pl}$, dok je

$$ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) = 0 \tag{4.52}$$

u području frekvencija $|\omega - \mu - E_0(k_\parallel)| > \omega_{pl}$.

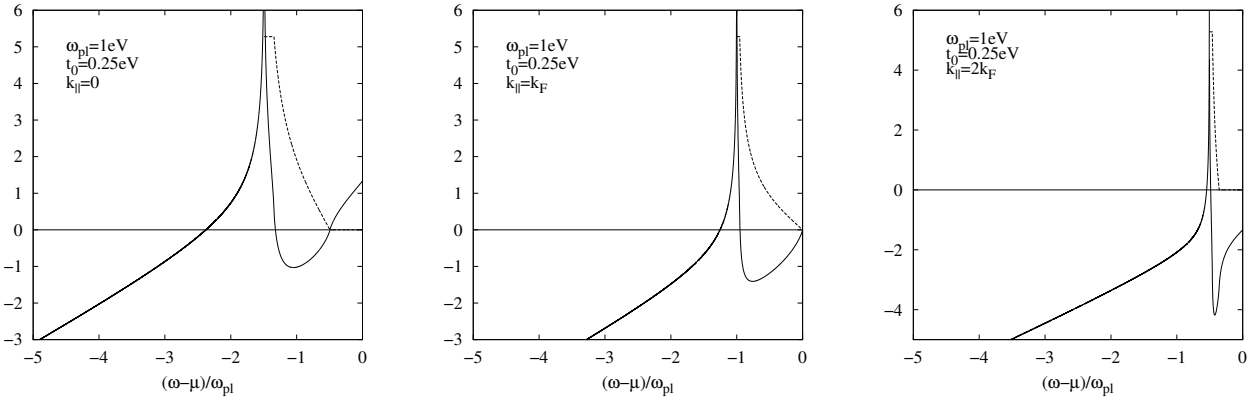
Pogledajmo pobliže funkcije $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ i $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ u području negativnih $\omega - \mu$ koje detektira fotoemisijski spektar. $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ je prikazana na slici 4.3. Vidljivo je da $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) \to -e^2k_F$ za $\omega \to \mu + E_0(k_\parallel) - \omega_{pl} + 0$ i $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) = 0$ za $\omega < \mu + E_0(k_\parallel) - \omega_{pl}$. Također $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) = 0$ za $k_\parallel < k_F$ i $\omega > \mu + E_0(k_\parallel)$, kao i za $k_\parallel > k_F$ i $\mu > \omega > \mu - \Omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$. Iščezavanje imaginarnog dijela recipročne vrijednosti Greenove funkcije u području frekvencija $\omega > \mu + E_0(k_\parallel)$ u okupiranom dijelu I. Brillouinove zone vidljivo je već iz izraza (5.23). Naime, Greenova funkcija nesmetanog problema nema polova s konačnim realnim dijelom u tom području frekvencija te polovi $\omega = \mu - \Omega(\mathbf{q}) + E_0(k_\parallel) + i\eta$ doprinose imaginarnom dijelu $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ samo u području $\omega < \mu + E_0(k_\parallel)$. Slično za $k_\parallel > k_F$ iz izraza (4.28) slijedi da funkcija zaposjednuća $n(k_\parallel + q_\parallel)$ omogućava neiščezavajuće doprinose gustog skupa diskretnih polova $\omega = \mu - \Omega(\mathbf{q}) + E_0(k_\parallel) + i\eta$ recipročnoj vrijednosti Greenove funkcije samo za frekvencije $\omega < \mu - \Omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$. Stoga, neiščezavajući doprinosi tada dolaze od visokofrekventnih kolektivnih pobuđenja. Potpuno iščezavanje imaginarnog



Slika 4.3: Ovisnost $ImG^{-1}(k_\|, \omega)$ o longitudinalnoj komponenti valnog vektora $k_\|$ i frekvenciji ω za $k_F = \pi/2b$.

dijela recipročne vrijednosti Greenove funkcije za $k_\| > k_F$ u području niskih frekvencija je posljedica zanemarivanja nekoherentnih pobuđenja u dielektričnoj funkciji (4.11). No, ova aproksimacija ne utječe na bitne zaključke o svojstvima Greenove funkcije koji slijede.

Na slici 4.3 primjetan je i plato u $ImG^{-1}(k_\|, \omega)$ pri $-e^2 k_F$ u području energija $\mu - \omega_{pl} + E_0(k_\|) < \omega < \mu - \Omega(\pi/b, Q_\perp) + E_0(k_\|)$ koji se pojavljuje zbog ograničenja sumacije u izrazu (4.28) na područje prve Brillouinove zone, $-\frac{\pi}{b} \leq q_\| \leq \frac{\pi}{b}$. Naime, integracija po $q_\perp$ od 0 do $Q_\perp$ u tom izrazu pokriva polove od $G^{-1}(k_\|, \omega)$ u energijskom području između $\mu - \omega_{pl} + E_0(k_\|) + i\eta$ i $\mu - \Omega(q_\|, Q_\perp) + E_0(k_\|) + i\eta$, dok integracija po $q_\|$ koja slijedi uključuje samo one polove koji ispunjavaju uvjet $\omega < \mu - \Omega(q_\|, Q_\perp) + E_0(k_\|)$ za danu vrijednost ω u području $\mu - \omega_{pl} + E_0(k_\|) < \omega < \mu + E_0(k_\|)$. Ovim određena granična vrijednost od ω, $\omega = \mu - \Omega(q_c, Q_\perp) + E_0(k_\|)$, i zahtjev da q_c ostane u I. Brillouinovoj zoni, određuju granice $\pm q_c$ integracije po $q_\|$ dane izrazom (5.39). Kao što se vidi iz tog izraza, $\frac{|\omega - \mu - E_0(k_\|)|Q_\perp}{\sqrt{\omega_{pl}^2 - (\omega - \mu - E_0(k_\|))^2}} > \frac{\pi}{b}$ za $\mu - \omega_{pl} + E_0(k_\|) < \omega < \mu - \Omega(\pi/b, Q_\perp) + E_0(k_\|)$, tj. za sve ove vrijednosti od ω granica integracije po $q_\|$ u izrazu (4.49) je ista $q_c = \frac{\pi}{b}$.



Slika 4.4: Frekvencijska ovisnost $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)/\omega_{pl}$ (puna linija) i $-ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)/\omega_{pl}$ (isprekidana linija) za $k_F=\pi/2b$ i $k_\parallel=0$ (a), $k_\parallel=k_F$ (b), i $k_\parallel=2k_F$ (c).

Posljedica je plato u $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$.

Ovisnost realnog i imaginarnog dijela recipročne vrijednosti Greenove funkcije o ω ilustrirana je na slici 4.4 za tri reprezentativne vrijednosti longitudinalne komponente valnog vektora $k_\parallel$ ($k_\parallel=0,k_F,2k_F$). $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ raste iz $-\infty$ kako ω raste iz $-\infty$ i divergira u $+\infty$ za $\omega=\mu-\omega_{pl}+E_0(k_\parallel)-0$. Za $\omega=\mu-\omega_{pl}+E_0(k_\parallel)$ $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ ima diskontinuitet širine e^2k_F, kao što je to prikazano na slici 4.3. Ovaj singularitet pomiče se prema većim ω kako $k_\parallel$ raste, kao što je vidljivo i na slikama 4.3 i 4.4. Nadalje, kako $k_\parallel$ raste, nula od $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ za $\omega<\mu+E_0(k_\parallel)-\omega_{pl}$ se također pomiče prema većim ω i sve se više primiče singularitetu u $\omega=\mu-\omega_{pl}+E_0(k_\parallel)$.

Kako ω nastavlja rasti od $\omega=\mu-\omega_{pl}+E_0(k_\parallel)+0$, $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ pada iz $+\infty$, prolazi kroz lokalni minimum, te konačno teži prema 0 za $\omega\to\mu+E_0(k_\parallel)$, u skladu s izrazom (4.47).

Važno je primjetiti da $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ ima nulu u području frekvencija $\omega<E_0(k_\parallel)-\omega_{pl}$ u kojem $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ također iščezava. Stoga dolazimo do zaključka da jedino u području $\omega<E_0(k_\parallel)-\omega_{pl}$ i nigdje drugdje Greenova funkcija $G(k_\parallel,\omega)$ ima pol prvog reda oblika $\omega_0(k_\parallel)=E(k_\parallel)-i\Gamma(k_\parallel)$, gdje je $\Gamma(k_\parallel)$ infinitezimalno malo u ovom idealiziranom pristupu, a vjerojatno i ostaje tako malo da je $|\Gamma(k_\parallel)|\ll|E(k_\parallel)|$ i nakon uzimanja uobičajenih dodatnih raspršenja koja dovode do konačne relaksacije elektronskih stanja.

Tada se jedino u ovom području Greenova funkcija može izraziti u standardnom rezonantnom obliku

$$G(k_\parallel, \omega) = \frac{Z(k_\parallel)}{\omega - \omega_0(k_\parallel)}, \tag{4.53}$$

gdje je $Z(k_\parallel) =\mid \partial ReG^{-1}(k_\parallel, \omega_0(k_\parallel))/\partial\omega \mid^{-1}$ reziduum Greenove funkcije u polu $\omega_0(k_\parallel)$. Drugim riječima, kvazičestice postoje samo u području frekvencija $\omega < E_0(k_\parallel) - \omega_{pl}$.

Ovakav rezultat se kvalitativno razlikuje od onog u trodimenzionalnom izotropnom "jellium"modelu, koji je dobijen u G_0W_0 pristupu [26, 27, 28]. Naime, u tom slučaju imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije iščezava u području frekvencija $\mu-\Omega_{pl} < \omega < \mu+\Omega_{pl}$, gdje je Ω_{pl} dugovalni minimum plazmonske disperzije. Istovremeno $ReG^{-1}(k_F, \omega)$ raste iz $-\infty$ za $\omega \to \mu - \Omega_{pl} + 0$ prema ∞ za $\omega \to \mu + \Omega_{pl} - 0$ prolazeći kroz nulu u $\mu = \omega_0(k_F)$. Stoga je kvazičestica dobro definirana.

4.3 Spektralna funkcija

Spektralna funkcija kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom

$$A(k_\parallel, \omega) = \frac{1}{\pi} \mid ImG(k_\parallel, \omega) \mid \tag{4.54}$$

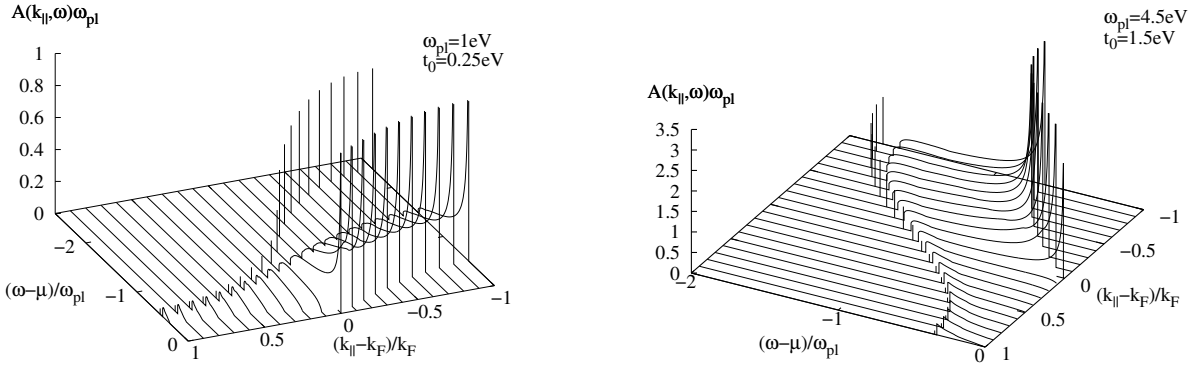
može se zapisati pomoću $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ i $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$

$$A(k_\parallel, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\mid ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) \mid}{[ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)]^2 + [ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)]^2} \tag{4.55}$$

ako $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ nema nulu $\omega_0(k_\parallel)$ u području frekvencija u kojem je $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) = 0$. Ako takva nula realnog dijela recipročne vrijednosti Greenove funkcije postoji, spektralna funkcija je prikazana kvazičesticom

$$A(k_\parallel, \omega) = Z(k_\parallel)\delta(\omega - \omega_0(k_\parallel)). \tag{4.56}$$

Uvrštavanjem dobijenih rezultata za realni i imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije danih izrazima (4.47-4.52) u (4.55), te numerički određujući nultočke $\omega_0(k_\parallel)$ i pripadne $Z(k_\parallel)$ koji ulaze u izraz (4.56), dobijamo spektralnu funkciju prikazanu na slici 4.5 za dvije vrijednosti omjera plazmonske frekvencije i integrala prijelaza, ω_{pl}/t_0 jednak 3 i 4. $A(k_\parallel, \omega)$ ima široku strukturu na energijskoj skali reda veličine plazmonske energije u području između $\omega = \mu + E_0(k_\parallel)$ i $\omega = \mu + E_0(k_\parallel) - \omega_{pl}$. Primjećujemo da se



Slika 4.5: Spektralna funkcija $A(k_\parallel, \omega)$ za ω_{pl}/t_0 4 (a) i 3 (b) u slučaju $k_F = \pi/2b$. Široka struktura za različite longitudinalne komponente valnog vektora $k_\parallel$ slijedi iz izraza (4.55), dok su δ-peak-ovi reprezentirani svojim težinama $Z(k_\parallel)$ prema izrazu (4.56).

ovo područje sporo mijenja ovisno o valnom vektoru $k_\parallel$. Konačno, spektralna funkcija sadrži kvazičesticu ovisnu o $k_\parallel$ u području energija $\omega < \mu + E_0(k_\parallel) - \omega_{pl}$.

Treba istaknuti da ovi rezultati za spektralnu funkciju odlično zadovoljavaju pravilo sume („sum rule") (3.33) za kvazijednodimenzionalni metal s jednom vrpcom po lancu

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(k_\parallel, \omega) d\omega = 1, \tag{4.57}$$

i to sa slaganjem do na 10^{-2} u cijelom području valnih vektora $k_\parallel$ i za sve ispitane omjere ω_{pl}/t_0.

Ponašanje spektralne funkcije na slici 4.5 usporedit ćemo s ponašanjem spektralne funkcije trodimenzionalnog izotropnog metala. Recipročna vrijednost Greenove funkcije trodimenzionalnog izotropnog metala je analitična za valni vektor k_F i u blizini frekvencije $\omega = \mu$, tako da se Landauova teorija Fermijevih tekućina može primjeniti. Kao što je pokazano u „jellium"modelu [26, 27, 28], spektralna funkcija ima tada kvazičesticu u μ za $k_\parallel = k_F$.

U konkretnom slučaju kvazijednodimenzionalnog metala Landauova teorija Fermijevih tekućina se ne može primjeniti zbog niskofrekventnih kolektivnih modova koji dovode do singulariteta u recipročnoj vrijednosti Greenove funkcije u blizini $\omega = \mu$ i za $k_\parallel = k_F$. Ovi singulariteti su direktna posljedica anizotropnosti plazmonske disperzije (3.58) koja im daje akustični karakter ($\omega_{min} = 0$), te dovodi do stvaranja široke strukture u spektralnoj funkciji. Ponašanje spektralne funkcije na slici 4.5 je u

kvalitativnom slaganju s rezultatima ARPES spektara nekih kvazijednodimenzionalnih vodiča [1, 3, 4] koji također imaju široku strukturu i u kojima se ne pojavljuje niskoenergijska kvazičestica.

Promotrimo pobliže spektralnu funkciju (4.55) za $k = k_F$ i u granici $\omega \to \mu^-$. Kako za $\omega \approx \mu$

$$ReG^{-1}(k_F,\omega) \approx \omega - \mu - \frac{e^2}{2\pi}\Big[\frac{Q_\perp(\omega-\mu)}{\omega_{pl}}\ln\Big(\frac{(\omega-\mu)^2}{2\omega_{pl}^2}\Big) + \frac{b}{\pi}Q_\perp^2\frac{\omega-\mu}{\omega_{pl}}\Big], \tag{4.58}$$

$$ImG^{-1}(k_F,\omega) = -\frac{e^2}{2}\frac{|\omega-\mu|Q_\perp}{\sqrt{\omega_{pl}^2-(\omega-\mu)^2}}, \tag{4.59}$$

za spektralnu funkciju vrijedi

$$A(k_F,\omega) \approx \frac{e^2}{2\pi}\frac{Q_\perp}{|\omega-\mu|\omega_{pl}\Big[1-\frac{e^2}{2\pi}\frac{Q_\perp}{\omega_{pl}}\Big(\ln\Big(\frac{(\omega-\mu)^2}{2\omega_{pl}^2}\Big)+\frac{b}{\pi}Q_\perp\Big)\Big]} \tag{4.60}$$

i divergira za $\omega \to \mu$. Nepostojanje kvazičetične δ-funkcije u spektralnoj funkciji posljedica je činjenice da se ovisnost o ω funkcije $ImG^{-1}(k_F,\omega)$ razlikuje od kvadratne ovisnosti koja je bitno svojstvo Fermijeve tekućine. Također, izraz (4.60), dobijen unutar G_0W_0 aproksimacije, razlikuje se od odgovarajućeg izraza za spektralnu funkciju jednodimenzionalnog spin-rotacijski invarijantnog Luttingerovog modela (3.91) [10] s interakcijski ovisnom anomalnom dimenzijom α. Rezultat (3.91) bio bi u slaganju s fotoemisijskim eksperimentima na kvazijednodimenzionalnim metalima [1, 3, 4] u niskoenergijskom području za α koji prelazi jedinicu kad bi oni bili mikroskopski relevantni. To bi bio pokazatelj da ovi materijali pripadaju režimu jake dugodosežne interakcije u modelu Luttingerove tekućine, kao što je to zaključeno u ranijim teorijskim analizama [12, 13, 14].

4.4 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenta

Promotrimo gustoću stanja (3.41) za kvazijednodimenzionalni metal s jednom vrpcom po lancu

$$N(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} A(k_\parallel,\omega) \tag{4.61}$$

gdje suma po $\mathbf{k}$ ide preko iste prve Brillouinove zone kao i prije. Prelaskom na cilindrične koordinate, $\sum_{\mathbf{k}} \to (\frac{L}{2\pi})^3 \int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dk_\parallel \int_0^{Q_\perp} 2\pi k_\perp dk_\perp$ i integrirajući po $k_\perp$, dobijamo izraz za

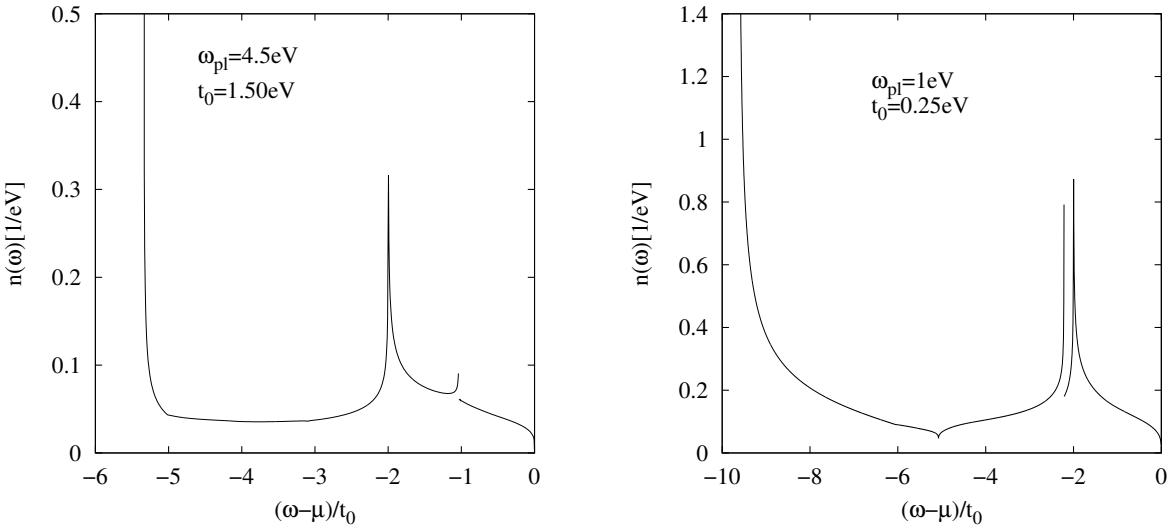
gustoću stanja po broju elektrona u sistemu $N_e = 2(2k_F\frac{4\pi^2}{ac})/(8\pi^3/V)$,

$$n(\omega) \equiv N(\omega)/N_e = \frac{1}{2k_F}\int_0^{\frac{\pi}{b}} A(k_\parallel,\omega)dk_\parallel. \tag{4.62}$$

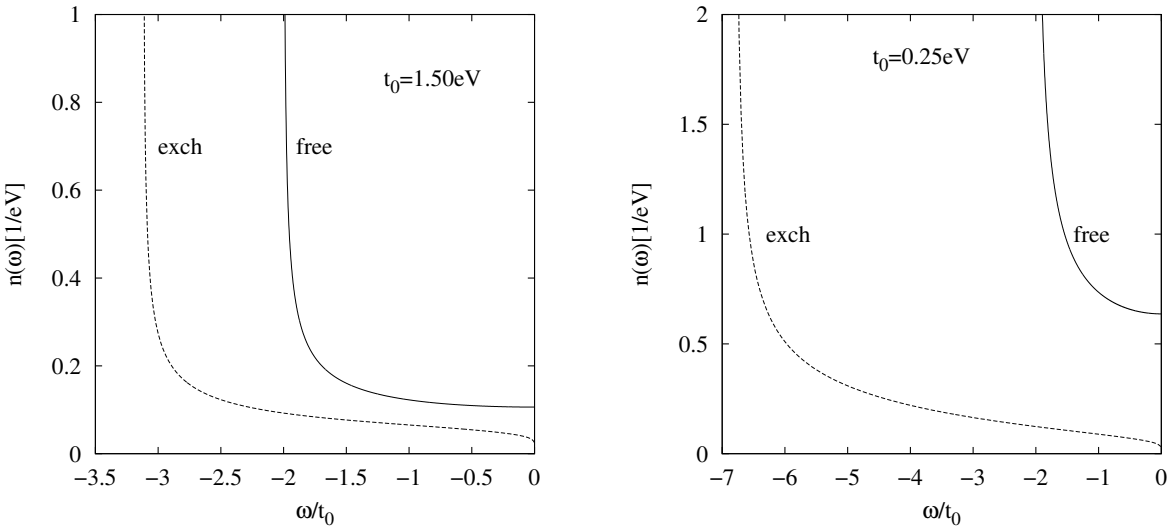
Integrirajući numerički spektralnu funkciju $A(k_\parallel,\omega)$ dobijamo pripadnu gustoću stanja po broju elektrona $n(\omega)$, prikazanu na slici 4.6 za ω_{pl}/t_0 jednako 3 i 4 kao i na slici 4.5. Gustoća stanja pada s maksimalne vrijednosti u području negativnih energija na lokalni minimum, a zatim raste do diskontinuiteta koji može biti dvaju različitih tipova. Prvo, ako je najviša energija kvazičestičnog δ-peaka ovisnog o $k_\parallel$ u energijskom području $\omega < \mu+E_0(k_\parallel)-\omega_{pl}$ manja od $\mu+E_0(k_\parallel)$, tada je to konačan diskontinuitet, kao što je to prikazano na slici 4.6(b) za $\omega_{pl}/t_0 = 4$. Kako ω dalje raste gustoća stanja raste i divergira prema $+\infty$ u $\mu + E_0(k_\parallel)$, te kontinuirano pada na nulu u $\omega = \mu$. Drugo, ako je najviša energija kvazičestičnog δ-peaka ovisnog o $k_\parallel$ u energijskom području $\omega < \mu+E_0(k_\parallel)-\omega_{pl}$ veća od $\mu + E_0(k_\parallel)$, gustoća stanja divergira u $\mu + E_0(k_\parallel)$. Kako ω dalje raste gustoća stanja pada na lokalni minimum i raste do konačnog diskontinuiteta na najvišoj energiji kvazičestičnog δ-peaka ovisnog o $k_\parallel$ u energijskom području $\omega < \mu + E_0(k_\parallel) - \omega_{pl}$ kao što je prikazano na slici Fig. 4.6(a) za slučaj $\omega_{pl}/t_0 = 3$. Konačno, kako ω dalje raste gustoća stanja pada na nulu u $\omega = \mu$.

Korisno je usporediti ovaj G_0W_0 rezultat za gustoću stanja s gustoćom stanja dobijenom uzimajući u obzir samo energiju izmjene (4.42) u Greenovoj funkciji (4.23). Energija izmjene pomiče kemijski potencijal na negativnu vrijednost $E_{ex}(k_F)$. Gustoća stanja mjerena od ovog kemijskog potencijala pomaknuta je prema negativnim energijama koje prelaze širinu vrpce. Preostali dio G_0W_0 vlastite energije pomiče gustoću stanja još više prema negativnim energijama u odnosu na G_0W_0 kemijski potencijal μ dajući značajan doprinos pri energijama reda veličine plazmonske energije kao što je to prikazano na slici 4.6.

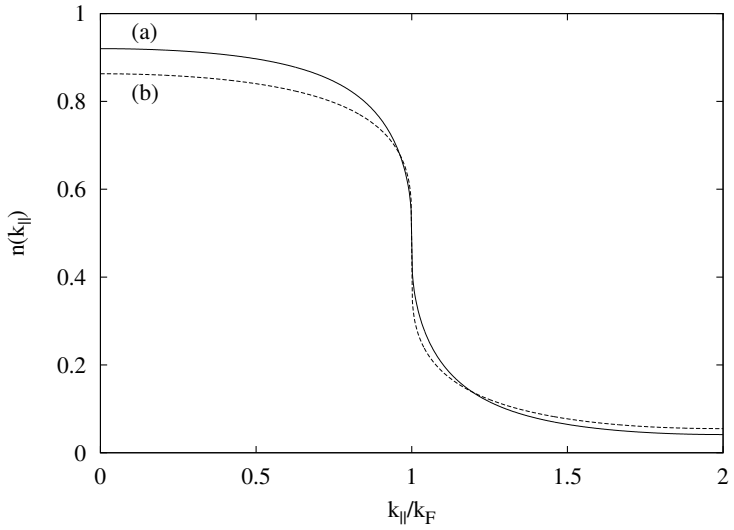
Ovakvo ponašanje razlikuje se od ponašanja gustoće stanja u Luttingerovom modelu koje je u niskoenergijskom području dano izrazom (3.93), a sadrži maksimum pri konačnim energijama. Ovaj maksimum osigurava ispunjenje pravila sume („sum rule"), ali njegov se položaj u odnosu na širinu vrpce ili plazmonsku energiju ne može direktno odrediti zbog irelevantnosti odabira energijskog „cut-off"-a u bozonizaciji Luttingerovog modela. S druge strane, G_0W_0 pristup u modelu kvazijednodimenzionalnog metala pokazuje postojanje široke strukture s divergencijom u $\mu + E_0(k_\parallel)$ u gustoći



Slika 4.6: Gustoća stanja $n(\omega)$ za ω_{pl}/t_0 3 (a) i 4 (b), te $k_F = \frac{\pi}{2b}$.



Slika 4.7: Gustoća stanja izmjene dobijena uzimanjem samo doprinosa energije izmjene (4.42) spektralnoj funkciji u izrazu (4.62), te gustoća stanja pripadnih neinteragirajućih elektrona u Blochovoj bazi čvrste veze dana izrazom (3.61) mjerene u odnosu na pripadne kemijske potencijale, za $k_F = \frac{\pi}{2b}$ i za t_0 jednake onima na slici (4.6), tj. $t_0 = 1.5eV$ (a) i $0.25eV$ (b).



Slika 4.8: Funkcija distribucije momenta za $k_F = \frac{\pi}{2b}$ i ω_{pl}/t_0 4 (a) i 3 (b).

stanja za energije reda veličine plazmonske energije.

Sada smo u mogućnosti odrediti i funkciju distribucije momenta (3.47) kvazijenodimenzionalnog metala s jednom vrpcom po lancu

$$n(k_\parallel) = \int_{-\infty}^{\mu} A(k_\parallel, \omega) d\omega, \tag{4.63}$$

i provjeriti samousaglašenost G_0W_0 aproksimacije. Numerički rezultati su prikazani na slici 4.8 za iste vrijednosti omjera ω_{pl}/t_0 kao i ranije. Površine ispod krivulja (a) i (b) razlikuju se od točnog broja elektrona za manje od 4% i 9%. Ovaj rezultat pokazuje da je G_0W_0 aproksimacija zadovoljavajuće samousaglašena.
Oblik funkcije distribucije momenta prikazan na slici 4.8 pokazuje da nema niskoenergijskih kvazičestica u spektru interagirajućih elektrona. Nadalje, krivulje za $n(k_\parallel)$ prikazane na slici 4.8 imaju divergentnu derivaciju za $k_\parallel = k_F$, što je svojstvo Luttingerove tekućine [68]. S druge strane, G_0W_0 rezultat za trodimenzionalni izotropni ,,jellium" pokazuje tipično ponašanje Fermijeve tekućine tj. $n(k_\parallel)$ ima konačan diskontinuitet za $k_\parallel = k_F$ jednak spektralnoj težini kvazičestice na k_F [26, 27].

Poglavlje 5

Model kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom s konačnom širinom vrpce u smjeru okomitom na lance

Razmatrat ćemo model $N_a N_c$ paralelnih lanaca u pravokutnoj rešetci s jednom vrpcom po lancu u kojem se elektroni gibaju duž lanaca, a postoji i preskakanje elektrona s lanca na lanac i Coulombovo međudjelovnje svih elektrona. Jednoelektronska disperzija nesmetanog problema tada je dobro reprezentirana u modelu čvrste veze izrazom (3.64) za $t \ll t_0$. U ovom ćemo poglavlju istražiti kako konačni integral prijelaza u smjeru okomitom na lance utječe prvo na plazmonsku disperziju, a zatim i na spektralnu funkciju, gustoću stanja i funkciju distribucije momenta kvazijednodimenzionalnog metala.

5.1 Dielektrična funkcija i pobuđenja

Polarizacijski dijagram (3.115) koji ulazi u RPA dielektričnu funkciju kristala s jednom vrpcom (4.1) u ovom modelu glasi

$$\Pi(\mathbf{q},\omega) = \frac{2}{N_a N_b N_c} \sum_{k_a=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \sum_{k_\parallel=-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \sum_{k_c=-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \left\{ \frac{[1-n(\mathbf{k})]n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega + E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - E(\mathbf{k}) + i\eta} - \frac{n(\mathbf{k})[1-n(\mathbf{k}+\mathbf{q})]}{\omega + E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - E(\mathbf{k}) - i\eta} \right\}, \tag{5.1}$$

gdje je N_b broj elementanih ćelija duž lanca. Zamjenom $k_\parallel \to -k_\parallel - q_\parallel$ u prvom članu u zagradama i korištenjem simetrije kristala na operaciju inverzije dobije se

$$\Pi(\mathbf{q},\omega) = \frac{4}{N_a N_b N_c} \sum_{k_a=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \sum_{k_\parallel=-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \sum_{k_c=-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{[1-n(\mathbf{k}+\mathbf{q})]n(\mathbf{k})[E(\mathbf{k}+\mathbf{q})-E(\mathbf{k})]}{(\omega+i\eta\mathrm{sign}\omega)^2-[E(\mathbf{k}+\mathbf{q})-E(\mathbf{k})]^2}, \tag{5.2}$$

te nadalje zamjenama $k_\parallel \to -k_\parallel - q_\parallel$ pa $k_\parallel + q_\parallel \to -k_\parallel$ [69] dobijamo

$$\Pi(\mathbf{q},\omega) = \frac{4}{N_a N_b N_c} \sum_{k_a=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \sum_{k_\parallel=-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \sum_{k_c=-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{n(\mathbf{k})[E(\mathbf{k}+\mathbf{q})-E(\mathbf{k})]}{(\omega+i\eta\mathrm{sign}\omega)^2-[E(\mathbf{k}+\mathbf{q})-E(\mathbf{k})]^2}. \tag{5.3}$$

Kako su plazmonska pobuđenja ključna za proračun spektralne funkcije zanima nas kako na njih utječe konačna transverzalna širina vrpce. Znajući da plazmonska disperzija u modelu u kojem nema preskakanja elektrona s lanca na lanac teži nuli za $q_\parallel \to 0$, a za veće $q_\parallel$ se uzdiže znatno iznad elektronsko-šupljinskog kvazikontinuuma, očekujemo da će mali $t \neq 0$ imati značajan utjecaj baš u dugovalnom limesu. Stoga i u ovom modelu promatramo polarizacijski dijagram u dugovalnom limesu ($\mathbf{q} \to 0$) u kojem je $\omega \gg E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - E(\mathbf{k})$. Tada polarizacijski dijagram postaje [70]

$$\Pi(\mathbf{q},\omega) = \frac{2}{N_a N_b N_c(\omega+i\eta\mathrm{sign}\omega)^2} \sum_{k_a=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \sum_{k_\parallel=-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \sum_{k_c=-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} n(\mathbf{k})(\mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}})^2 E(\mathbf{k}), \tag{5.4}$$

odnosno

$$\Pi(\mathbf{q},\omega) = \frac{2}{N_a N_b N_c(\omega+i\eta\mathrm{sign}\omega)^2} \sum_{k_a=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \sum_{k_\parallel=-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} \sum_{k_c=-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} n(\mathbf{k})\Big[q_x^2\frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_x^2}+q_\parallel^2\frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_\parallel^2}+q_z^2\frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_z^2}\Big]. \tag{5.5}$$

Da bismo odredili ovaj polarizacijski dijagram korisno je pretpostaviti da je u slučaju jednoelektronske disperzije (3.64) Fermijeva površina gotovo ravna, odnosno s komponentom valnog vektora u smjeru lanaca koja varira samo za mali δ od vrijednosti k_F koju poprima za $t = 0$. Da bismo našli kako se δ mijenja uključivanjem konačnog integrala prijelaza u okomitom smjeru t razvijamo jednoelektronsku disperziju (3.64) oko k_F do drugog reda [71]

$$E(k_x, k_F+\delta, k_z) = v_F\delta + E_F''\delta^2/2 - 2t(\cos k_x a + \cos k_z c) \tag{5.6}$$

gdje je E_F'' druga derivacija jednoelektronske disperzije u k_F za slučaj $t = 0$. U ovom procesu popunjenje vrpce držimo konstantnim tako da bude $\int_{-\pi/a}^{\pi/a}\int_{-\pi/c}^{\pi/c}\delta dk_x dk_z = 0$

te kako δ raste najmanje s t, integracijom po $\int_{-\pi/a}^{\pi/a}\int_{-\pi/c}^{\pi/c} dk_x dk_z$ izraza (5.6) dobijamo $E(k_x, k_F+\delta, k_z) = O(t^2)$. Rješavajući jednadžbu (5.6) po δ dobijamo

$$\delta = -\frac{v_F}{E_F''}\left\{1 \pm \sqrt{1 - 2\frac{E_F''}{v_F^2}\Big[- E(k_x, k_F+\delta, k_z) - 2t(\cos k_x a + \cos k_z c)\Big]}\right\}, \tag{5.7}$$

a uz uvjet $v_F > 2t$ razvojem u red do t^2 dolazimo do

$$\delta = \frac{2t}{v_F}(\cos k_x a + cosk_z c) + \frac{E(k_x, k_F+\delta, k_z)}{v_F} - 2\frac{E_F''}{v_F^3}t^2(cosk_x a + cosk_z c)^2. \tag{5.8}$$

Uvrštavanjem ovog izraza u jedandžbu $\int_{-\pi/a}^{\pi/a}\int_{-\pi/c}^{\pi/c}\delta dk_x dk_z = 0$ dobijamo $E(kx, k_F + \delta, kz) = 2E_F''t^2/v_F^2$, te je

$$\delta = \frac{2t}{v_F}(cosk_x a + cosk_z c) + 2\frac{E_F''}{v_F^2}t^2 - 2\frac{E_F''}{v_F^3}t^2(cosk_x a + cosk_z c)^2. \tag{5.9}$$

Prelaskom u izrazu (5.5) sa sume na integrale

$$\sum_{k_a=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}}\sum_{k_\parallel=-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}}\sum_{k_c=-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} n(\mathbf{k}) \to \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dk_z \int_{-(k_F+\delta)}^{k_F+\delta} dk_\parallel \tag{5.10}$$

te koristeći

$$\int_{-(k_F+\delta)}^{k_F+\delta} dk_\parallel \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_\parallel^2} = 2\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_\parallel}\Big|_0^{k_F+\delta} = 2(v_F + E_F''\delta + E_F'''\delta^2/2) \tag{5.11}$$

i

$$\frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_x^2} = 2ta^2\cos k_x a, \;\; \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_z^2} = 2tc^2\cos k_z c \tag{5.12}$$

nakon integracije dobijamo

$$\Pi(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{(\omega + i\eta\mathrm{sign}\omega)^2}\Big[\frac{2bv_F}{\pi}\Big(1 + 2\frac{E_F'''}{v_F^2}t^2\Big)q_\parallel^2 + \frac{4t^2a^2b}{\pi v_F}q_a^2 + \frac{4t^2c^2b}{\pi v_F}q_c^2\Big]. \tag{5.13}$$

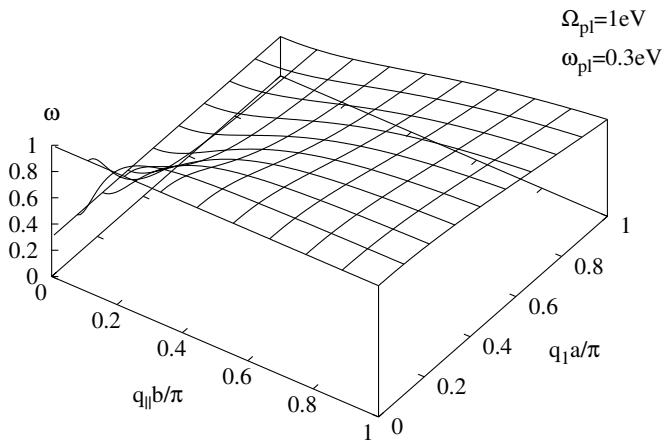
Tada dielektrična funkcija (4.1) postaje

$$\varepsilon_m(\mathbf{q},\omega) = 1 - \frac{\omega^2(\mathbf{q})}{(\omega + i\eta\mathrm{sign}\omega)^2} \tag{5.14}$$

s plazmonskom disperzijom

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \frac{\Omega_{pl}^2 q_\parallel^2 + \omega_{pla}^2 q_a^2 + \omega_{plc}^2 q_c^2}{q^2}, \tag{5.15}$$

gdje je $\Omega_{pl}^2 = \frac{8e^2v_F}{ac}(1+2\frac{E_F'''}{v_F^2}t^2)$ longitudinalna plazmonska frekvencija, a konačni t dovodi do konačnih transverzalnih plazmonskih frekvencija $\omega_{pla}^2 = \frac{16e^2t^2a}{cv_F}$, $\omega_{plc}^2 = \frac{16e^2t^2c}{av_F}$. Kako

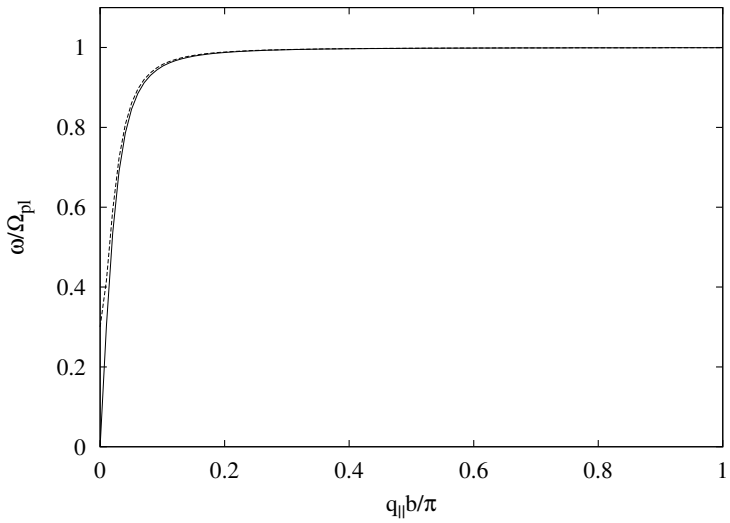


Slika 5.1: Plazmonska disperzija $\omega(\mathbf{q})$ dana izrazom (5.16).

je provedeni postupak u prvom redu služio za određivanje transverzalne plazmonske frekvencije, radi jednostavnosti zanemarit ćemo član proporcionalan s t^2 u longitudinalnoj plazmonskoj frekvenciji i zadržati se samo na prvom članu koji sam daje njenu dosadašnju vrijednost $\Omega_{pl}^2 = \frac{8e^2 v_F}{ac}$. Također radi jednostavnosti, uzet ćemo da je $a = c$, te time svesti plazmonsku disperziju (5.15) na

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \frac{\Omega_{pl}^2 q_\parallel^2 + \omega_{pl}^2 q_\perp^2}{q^2} \tag{5.16}$$

s plazmonskom frekvencijom u smjeru okomitom na lance $\omega_{pl}^2 = \frac{16e^2t^2}{v_F}$ i pripadnom komponentom valnog vektora $q_\perp^2 = q_a^2 + q_c^2$. Primjećujemo da ova anizotropna plazmonska disperzija, prikazana na slici 5.1, za $q_\parallel = 0$ dostiže svoj minimum ω_{pl}, a za $q_\perp = 0$ svoj maksimum Ω_{pl}. Upravo spomenuti minimum razlikuje ovu plazmonsku disperziju od one u slučaju $t = 0$, dok je u području maksimuma razlika neznatna u odnosu na već napravljenu aproksimaciju proširenja na cijelu I. Brillouinovu zonu dugovalne plazmonske disperzije za $t = 0$ (sl. 5.2). Stoga ćemo i u ovom slučaju dugovalni rezultat za plazmonsku disperziju proširiti na cijelu I. Brillouinovu zonu kao što je to prikazano na slikama 5.1 i 5.2.



Slika 5.2: Plazmonska disperzija $\omega(\mathbf{q})$ dana izrazom (5.16) za $\Omega_{pl} = 1eV$, $\omega_{pl} = 0$ (puna linija) i $\Omega_{pl} = 1eV$, $\omega_{pl} = 0.3eV$ (isprekidana linija), $q_\perp = \frac{1}{10b}$.

5.2 Greenova funkcija

Nastavljamo rješavanjem Dysonove jednadžbe (4.14) za jednočestičnu G_0W_0 Greenovu funkciju u slučaju $t \neq 0$. U tu Dysonovu jednadžbu ulazi Greenova funkcija nesmetanog problema

$$G_0(\mathbf{k},\omega) = \frac{1-n(\mathbf{k})}{\omega - E(\mathbf{k}) + i\eta} + \frac{n(\mathbf{k})}{\omega - E(\mathbf{k}) - i\eta}. \tag{5.17}$$

i RPA zasjenjena interakcija (4.18) s mikroskopskom dielektričnom funkcijom (5.14) i matričnim elementom nezasjenjene Coulombove interakcije (4.4) u dugovalnoj granici ekstrapoliranim na cijelu I. Brillouinovu zonu. Uvrštavanjem (4.18) i $G_0^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E(\mathbf{k}) + i\eta[1-2n(\mathbf{k})]$ u (4.16) dobije se

$$\begin{aligned} G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E(\mathbf{k}) + i\eta[1-2n(\mathbf{k})] - \frac{i}{2\pi N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\Bigg\{ i\pi + \\ + \int d\omega' \frac{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2}{(\omega' + i\eta'\mathrm{sign}\omega')^2 - \omega^2(\mathbf{q})}\Bigg[\frac{1-n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu - \omega' - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\eta} \\ + \frac{n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu - \omega' - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - i\eta}\Bigg]\Bigg\}. \end{aligned} \tag{5.18}$$

Integraciju po $\omega^{'}$ provest ćemo kao i u slučaju $t = 0$ zatvarajući konturu integracije po onoj kompleksnoj poluravnini koja ne sadrži polove nesmetane Greenove funkcije, a nakon integracije uzet ćemo isto tako $\eta' \to 0$.

Tada za integraciju preko donje kompleksne poluravnine oko pola $\omega(\mathbf{q}) - i\eta'$ vrijedi

$$\int d\omega' \frac{(\omega' + i\eta' \mathrm{sign}\omega')^2}{(\omega' + i\eta' \mathrm{sign}\omega')^2 - \omega^2(\mathbf{q})} \frac{1 - n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu - \omega' - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\eta} = -i\pi[1 - n(\mathbf{k}+\mathbf{q})] - i\pi\omega(\mathbf{q}) \frac{1 - n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu - \omega(\mathbf{q}) - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\eta}, \quad (5.19)$$

a za integraciju preko gornje kompleksne poluravnine oko pola $-\omega(\mathbf{q}) + i\eta'$ vrijedi

$$\int d\omega' \frac{(\omega' + i\eta' \mathrm{sign}\omega')^2}{(\omega' + i\eta' \mathrm{sign}\omega')^2 - \omega^2(\mathbf{q})} \frac{n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu - \omega' - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - i\eta} = i\pi n(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\pi\omega(\mathbf{q}) \frac{n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu + \omega(\mathbf{q}) - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - i\eta}. \quad (5.20)$$

Stoga izraz za recipročnu vrijednost Greenove funkcije (5.18) postaje

$$G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E(\mathbf{k}) + i\eta[1 - 2n(\mathbf{k})] - E_{ex}(\mathbf{k}) - \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\omega(\mathbf{q}) \times \times \left[\frac{1 - n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu - \omega(\mathbf{q}) - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + i\eta} + \frac{n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu + \omega(\mathbf{q}) - E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - i\eta}\right] \quad (5.21)$$

gdje je

$$E_{ex}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) n(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \quad (5.22)$$

energija izmjene po elementarnoj ćeliji za jednočestično stanje s valnim vektorom $\mathbf{k}$ [50]. Budući da plazmonska disperzija (5.16) ima minimalnu frekvenciju ω_{pl} u disperziji $E(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \approx E_0(k_\parallel) + v_F q_\parallel + E_\perp(k_a + q_a, k_c + q_c)$ možemo zanemariti dva zadnja člana u nazivnicima sumanada u zagradi izraza (5.21) u odnosu na plazmonsku energiju (5.16) za $t \ll \omega_{pl} < \Omega_{pl}$ i $t_0 \ll \Omega_{pl}$. Ova aproksimacija dovodi do gubitka u spektralnoj gustoći za mali Ω_{pl} ali kvalitativno zadržava njena svojstva.

Tada izraz za recipročnu vrijednost Greenove funkcije (5.21) postaje

$$G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E(\mathbf{k}) + i\eta[1 - 2n(\mathbf{k})] - E_{ex}(\mathbf{k}) - \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q})\omega(\mathbf{q})\left[\frac{1 - n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu - \omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel) + i\eta} + \frac{n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega - \mu + \omega(\mathbf{q}) - E_0(k_\parallel) - i\eta}\right], \quad (5.23)$$

te iz njega čitamo realni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije

$$Re G^{-1}(\mathbf{k},\omega) = \omega - E(\mathbf{k}) - E_{ex}(\mathbf{k}) - I(\mathbf{k},\omega) \quad (5.24)$$

uz

$$I(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q})\omega(\mathbf{q})\left[\frac{1-n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega-\mu-\omega(\mathbf{q})-E_0(k_\parallel)}+\frac{n(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\omega-\mu+\omega(\mathbf{q})-E_0(k_\parallel)}\right] \quad (5.25)$$

i njen imaginarni dio

$$\begin{aligned} ImG^{-1}(\mathbf{k},\omega) &= \frac{\pi}{2N}\sum_{\mathbf{q}}V(\mathbf{q})\omega(\mathbf{q})\{[1-n(\mathbf{k}+\mathbf{q})]\delta[\omega-\mu-\omega(\mathbf{q})-E_0(k_\parallel)] \\ &- n(\mathbf{k}+\mathbf{q})\delta[\omega-\mu+\omega(\mathbf{q})-E_0(k_\parallel)]\}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Kemijski potencijal μ određuje se iz istog uvjeta kao u prethodnom poglavlju (4.29). Dobijamo i ovdje isti izraz za kemijski potencijal (4.30) kao i u prethodnom poglavlju.

Provedimo prvo $\mathbf{q}$-integraciju za kemijski potencijal μ, energiju izmjene $E_{ex}(\mathbf{k})$ i sumu $I(\mathbf{k},\omega)$ da bismo odredili realni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije. I. Brillouinovu zonu aproksimiramo istim cilindrom kao u slučaju $t=0$ uzimjući ravnu Fermijevu površinu $|k_\parallel|=k_F$ za funkciju zaposjednuća.

Prelaskom na cilindrične koordinate po izrazu (4.31) i integrirajući po $q_\perp$ dobijamo

$$\begin{aligned} I(k_\parallel,\omega) = \mu - E_{ex}(k_\parallel) + \frac{e^2}{2\pi}\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}}\Bigg\{\frac{\omega_{pl}}{2(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))}\Bigg[\ln\left|\frac{\omega_{pl}-\Omega_{pl}}{\omega_{pl}+\Omega_{pl}}\right| \\ + \ln\left|\frac{\sqrt{q_\parallel^2+Q_\perp^2}+\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}q_\parallel^2+Q_\perp^2}}{\sqrt{q_\parallel^2+Q_\perp^2}-\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}q_\parallel^2+Q_\perp^2}}\right|\Bigg] + \ln\left|\frac{\sqrt{q_\parallel^2+Q_\perp^2}-\frac{\omega_{pl}}{\omega-\mu-E_0(k_\parallel)}\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}q_\parallel^2+Q_\perp^2}}{|q_\parallel|\left(1-\frac{\Omega_{pl}}{\omega-\mu-E_0(k_\parallel)}\right)}\right| \\ - n(k_\parallel+q_\parallel)\ln\left|1+\frac{Q_\perp^2[(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2]}{q_\parallel^2[(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2]}\right|\Bigg\}dq_\parallel \end{aligned} \quad (5.27)$$

s energijom izmjene i kemijskim potencijalom danim izrazima (4.33) i (4.34) iz prethodnog poglavlja.

U daljnjem računu koristimo integrale (4.35-4.37) iz prethodnog poglavlja, te integrale

$$\int\frac{x^2dx}{a^2+x^2}=x-a\arctan\frac{x}{a}, \quad (5.28)$$

$$\int\frac{x^2dx}{a^2-x^2}=-x+\frac{a}{2}\ln\left|\frac{x+a}{x-a}\right|. \quad (5.29)$$

Integrirajući po $q_\parallel$ dobijamo

$$I(k_\parallel,\omega)=\mu-E_{ex}(k_\parallel)+\frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\omega_{pl}}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\frac{2\pi}{b}\Bigg[\ln\frac{\omega_{pl}}{\omega_{pl}+\Omega_{pl}}+\ln\Bigg|\sqrt{1+\Big(\frac{bQ_\perp}{\pi}\Big)^2}$$
$$+\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}+\Big(\frac{bQ_\perp}{\pi}\Big)^2}\Bigg|\Bigg]+\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\Bigg[F\Big(\frac{\pi}{b},\omega-\mu\Big)-R(k_\parallel,\omega-\mu)$$
$$+\frac{2\pi}{b}\ln\Bigg|\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\sqrt{1+\left(\frac{bQ_\perp}{\pi}\right)^2}-\omega_{pl}\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}+\left(\frac{bQ_\perp}{\pi}\right)^2}}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))-\Omega_{pl}}\Bigg|\Bigg]$$
$$+Q_\perp\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}((\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2)}\int_{-\frac{\pi}{bQ_\perp}}^{\frac{\pi}{bQ_\perp}}\frac{dy}{\sqrt{y^2+1}\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}y^2+1}} \tag{5.30}$$
$$+Q_\perp\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^3(\omega_{pl}^2-\Omega_{pl}^2)}{\omega_{pl}((\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2)^2}\int_{-\frac{\pi}{bQ_\perp}}^{\frac{\pi}{bQ_\perp}}\frac{dy}{\sqrt{y^2+1}\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}y^2+1}\Big[y^2+\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2}\Big]}\Bigg\}$$

gdje je

$$R(k_\parallel,\omega) = \Big[R_1(k_F-|k_\parallel|,\omega)+R_1(k_F+|k_\parallel|,\omega)\Big]\Theta\Big(\frac{\pi}{b}-|k_\parallel|-k_F\Big) \tag{5.31}$$
$$+ \Big[R_1(k_F-|k_\parallel|,\omega)+2R_1\Big(\frac{\pi}{b},\omega\Big)-R_1\Big(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\parallel|,\omega\Big)\Big]\Theta\Big(k_F+|k_\parallel|-\frac{\pi}{b}\Big),$$

s

$$R_1(x,\omega)=-2x\ln\mid x\mid+x\ln\Bigg|x^2+Q_\perp^2\frac{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2}\Bigg|+F(x,\omega),x\neq0, \tag{5.32}$$

$$R_1(0,\omega)=0 \tag{5.33}$$

te

$$F(x,\omega)=2Q_\perp\sqrt{\frac{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2}}\times\arctan\frac{x}{Q_\perp\sqrt{\frac{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2}}},\ |\omega-E_0(k_\parallel)|<\omega_{pl},\Omega_{pl}<|\omega-E_0(k_\parallel)| \tag{5.34}$$

$$F(x,\omega)=Q_\perp\sqrt{\frac{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2-(\omega-E_0(k_\parallel))^2}}\times\ln\Bigg|\frac{x+Q_\perp\sqrt{\frac{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2-(\omega-E_0(k_\parallel))^2}}}{x-Q_\perp\sqrt{\frac{(\omega-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2-(\omega-E_0(k_\parallel))^2}}}\Bigg|,\omega_{pl}<|\omega-E_0(k_\parallel)|<\Omega_{pl}. \tag{5.35}$$

Kemijski potencijal i energija izmjene u izrazu (5.30) dani su izrazima (4.41) i (4.42) iz prethodnog poglavlja.

Tada realni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije postaje

$$
\begin{aligned}
ReG^{-1}(k_\parallel,\omega) &= \omega - E_0(k_\parallel) - \mu - \frac{e^2}{2\pi}\Bigg\{ \frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\omega_{pl}}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\frac{2\pi}{b}\Bigg[\ln\frac{\omega_{pl}}{\omega_{pl}+\Omega_{pl}} \\
&+ \ln\left|\sqrt{1+\left(\frac{bQ_\perp}{\pi}\right)^2}+\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}+\left(\frac{bQ_\perp}{\pi}\right)^2}\right|\Bigg] + \frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\Bigg[F\Big(\frac{\pi}{b},\omega-\mu\Big) \\
&- R(k_\parallel,\omega-\mu)+\frac{2\pi}{b}\ln\left|\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\sqrt{1+\left(\frac{bQ_\perp}{\pi}\right)^2}-\omega_{pl}\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}+\left(\frac{bQ_\perp}{\pi}\right)^2}}{\omega-\mu-E_0(k_\parallel)-\Omega_{pl}}\right|\Bigg] \\
&+ Q_\perp\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}((\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2)}\int_{-\frac{\pi}{bQ_\perp}}^{\frac{\pi}{bQ_\perp}}\frac{dy}{\sqrt{y^2+1}\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}y^2+1}} \\
&+ Q_\perp\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^3(\omega_{pl}^2-\Omega_{pl}^2)}{\omega_{pl}((\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2)^2}\int_{-\frac{\pi}{bQ_\perp}}^{\frac{\pi}{bQ_\perp}}\frac{dy}{\sqrt{y^2+1}\sqrt{\frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{pl}^2}y^2+1}\Big[y^2+\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\Omega_{pl}^2}\Big]}\Bigg\}.
\end{aligned}
\tag{5.36}
$$

Da bismo odredili imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije uočimo u izrazu (5.26) da je

$$ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)=0 \tag{5.37}$$

za $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|<\omega_{pl}$ i $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|>\Omega_{pl}$ te da je $ImG^{-1}(\mathbf{k},\omega)$ različit od nula za $\omega_{pl}<|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|<\Omega_{pl}$ zbog toga što spektar kolektivnog plazmonskog moda (5.15) ima minimalnu frekvenciju ω_{pl} i maksimalnu frekvenciju Ω_{pl}. Integrirajući po $\mathbf{q}$ možemo odrediti vrijednosti imaginarnog dijela recipročne vrijednosti Greenove funkcije i za energije $\omega_{pl}<|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|<\Omega_{pl}$. Integrirajući prvo po $q_\perp$ u cilindričnim koordinatama izraz (5.26) postaje

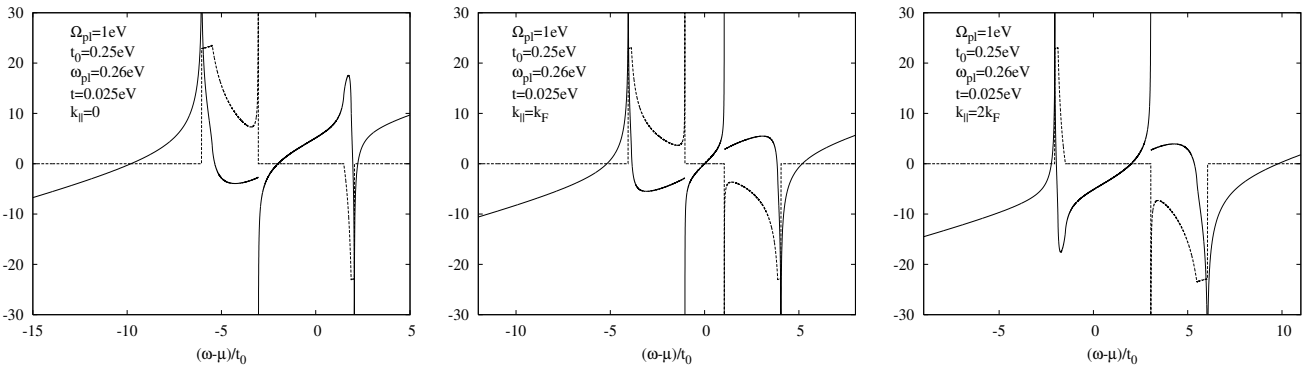
$$
\begin{aligned}
ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) &= \frac{e^2}{2}\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}}dq_\parallel\Bigg\{[1-n(k_\parallel+q_\parallel)]\Theta(\omega-\mu-E_0(k_\parallel)) \\
&-n(q_\parallel+k_\parallel)\Theta(-\omega+\mu+E_0(k_\parallel))\Bigg\}\Theta\Bigg(Q_\perp\sqrt{\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2-(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}}-|q_\parallel|\Bigg)
\end{aligned}
\tag{5.38}
$$

za energije $\omega_{pl}<|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|<\Omega_{pl}$.

Definiramo li, za dani ω, impuls

$$q_c = min\Bigg(Q_\perp\sqrt{\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2-(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}},\frac{\pi}{b}\Bigg) \tag{5.39}$$

imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije (5.38) možemo zapisati na sljedeći način



(a) (b) (c)

Slika 5.3: Frekvencijska ovisnost $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)/t_0$ (pune linije) i $-ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)/t_0$ (isprekidane linije) za $k_F=\pi/2b$ i $k_\parallel=0$ (a), $k_\parallel=k_F$ (b), te $k_\parallel=2k_F$ (c).

$$ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)=\frac{e^2}{2}\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\Big\{\Theta(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\int_{-q_c}^{q_c}dq_\parallel[1-n(k_\parallel+q_\parallel)]$$
$$-\Theta(-\omega+\mu+E_0(k_\parallel))\int_{-q_c}^{q_c}dq_\parallel n(q_\parallel+k_\parallel)\Big\}. \tag{5.40}$$

Konačno, integrirajući po $q_\parallel$ dobijamo

$$ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)=\frac{e^2}{2}\frac{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2}{(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))^2-\omega_{pl}^2}\Big\{2q_c\Theta(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))-\Big[\Theta(-\omega+\mu+E_0(k_\parallel))$$
$$+\Theta(\omega-\mu-E_0(k_\parallel))\Big]\times\Big[2q_c\Theta(k_F-|k_\parallel|-q_c)+2k_F\Theta(q_c-|k_\parallel|-k_F)$$
$$+(k_F-|k_\parallel|+q_c)\Theta(|k_\parallel|+q_c-k_F)\Theta(k_F-\mid|k_\parallel|-q_c\mid)\Theta(\frac{2\pi}{b}-k_F-|k_\parallel|-q_c)$$
$$+(2k_F+2q_c-\frac{2\pi}{b})\Theta(k_F-\mid|k_\parallel|-q_c\mid)\Theta(-\frac{2\pi}{b}+k_F+|k_\parallel|+q_c)\Big]\Big\} \tag{5.41}$$

za $\omega_{pl}<|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)|<\Omega_{pl}$.

$ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ i $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ prikazane su na slici 5.3 za tri reprezentativne vrijednosti longitudinalne komponente valnog vektora $k_\parallel$ ($k_\parallel=0$, k_F, $2k_F$). Promotrimo prvo $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)\neq 0$. Za $k_\parallel\leq k_F$, $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ pada s konačnog singulariteta vrijednosti $-\frac{e^2k_F\Omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2-\omega_{pl}^2}$ u $\omega=\mu-\Omega_{pl}+E_0(k_\parallel)$ na lokalni minimum kako ω raste, te nadalje raste do

lokalnog maksimuma s kojeg pada i divergira u $-\infty$ za $\omega = \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) - 0$. Prelaskom na pozitivni ω, za $k_\parallel \leq k_F$, $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ raste s nule za $\omega = \mu + \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$ na lokalni maksimum i pada na $\frac{e^2 k_F \Omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2 - \omega_{pl}^2}$ za $\omega = \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$ gdje ima singularitet tog iznosa. Za $k_\parallel \geq k_F$, $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ također ima konačni singularitet u $\omega = \mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$ jednak $-\frac{e^2 k_F \Omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2 - \omega_{pl}^2}$ ali pada na lokalni minimum i raste do vrijednosti nula koju dostiže za $\omega = \mu - \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$. Nadalje, za $k_\parallel \geq k_F$, kako ω raste od $\omega = \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) + 0$, $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ pada s $+\infty$ na lokalni minimum, raste na lokalni maksimum i pada na konačni singularitet vrijednosti $\frac{e^2 k_F \Omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2 - \omega_{pl}^2}$ za $\omega = \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$.

Primjećujemo da $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ također iščezava za $k_\parallel < k_F$ i $\mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$, kao i za $k_\parallel > k_F$ i $\mu - \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$. Ovo iščezavanje imaginarnog dijela recipročne vrijednosti Greenove funkcije vidljivo je već u izrazu (5.23). Naime, zbog funkcije zaposjednuća $n(\mathbf{k}+\mathbf{q})$ u tom izrazu neiščezavajući doprinosi diskretnih polova $\omega = \mu - \omega(\mathbf{q}) + E_0(k_\parallel) + i\eta$ recipročnoj vrijednosti Greenove funkcije mogući su samo za energije $\mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu - \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$ dok su neiščezavajući doprinosi polova $\omega = \mu + \omega(\mathbf{q}) + E_0(k_\parallel) - i\eta$ mogući samo za $\mu + \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$.

$ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima primjetni minimum i maksimum za pripadne energije $\omega = \mu - \Omega(\pi/b, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$ i $\omega = \mu + \Omega(\pi/b, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$ zbog toga što je sumacija u izrazu (5.26) ograničena na područje prve Brillouiove zone. Integracija po $q_\perp$ od 0 do $Q_\perp$ dovodi do ograničenja integracije po $q_\parallel$ na područje $|q_\parallel| < Q_\perp \sqrt{\frac{(\omega - \mu - E_0(k_\parallel))^2 - \omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2 - (\omega - \mu - E_0(k_\parallel))^2}}$. Kako $q_\parallel$ mora biti u području $|q_\parallel| < \frac{\pi}{b}$ uvjet $\frac{\pi}{b} < Q_\perp \sqrt{\frac{(\omega - \mu - E_0(k_\parallel))^2 - \omega_{pl}^2}{\Omega_{pl}^2 - (\omega - \mu - E_0(k_\parallel))^2}}$ je ispunjen za sve energije u području $\mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu - \Omega(\pi/b, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$ odnosno $\mu + \Omega(\pi/b, Q_\perp) + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$. Tako sve ove vrijednosti energije ω imaju istu granicu integracije po $q_\parallel$ jednaku $q_c = \frac{\pi}{b}$ što daje za rezultat $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) = \mp e^2 k_F \frac{(\omega - \mu - E_0(k_\parallel))^2}{(\omega - \mu - E_0(k_\parallel))^2 - \omega_{pl}^2}$ koji ima uočeni minimum, odnosno maksimum.

Kao što se vidi sa slike 5.3, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ raste iz $-\infty$ kako ω raste iz $-\infty$, te divergira u $+\infty$ za $\omega = \mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) - 0$. Baš u ovoj vrijednosti energije ω $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima konačni singularitet koji se pomiče prema većim vrijednostima od ω kako $k_\parallel$ raste, kao što je to prikazano na slici 5.3. Nadalje, kako $k_\parallel$ raste, nula realnog dijela recipročne vrijednosti Greenove funkcije u području energija $\omega < \mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$

pomiče se nadesno i sve je bliža singularitetu u $\omega = \mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$. Kako ω raste od $\omega = \mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) + 0$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ pada s $+\infty$ na lokalni minimum i raste prema konstantnoj vrijednosti koju dostiže za $\omega = \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) - 0$. Za $k_\parallel > k_F$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ je neprekidna za $\omega = \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$ i kako ω raste od $\omega = \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) + 0$, ona nastavlja rasti i divergira u $+\infty$ za $\omega = \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) - 0$. Kako je lokalni minimum od $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ za $k_\parallel > k_F$ negativan $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima dvije nule u području $\mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$, prvu u području $\mu - \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu - \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$ u kojem je $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) \neq 0$ i drugu u području $\mu - \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$ u kojem je $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) = 0$.

Međutim, za $k_\parallel \leq k_F$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima singularitet u $\omega = \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$. Za $k_\parallel < k_F$, kako ω raste od $\omega = \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) + 0$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ raste iz $-\infty$ na lokalni maksimum i pada na $-\infty$ za $\omega = \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) - 0$. Kako je lokalni maksimum pozitivan, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima dvije nule u području $\mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$, jednu u području $\mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel)$ u kojem je $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) = 0$ i drugu u području $\mu + \omega(k_\parallel - k_F, Q_\perp) + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$ u kojem je $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega) \neq 0$.

Posebno za $k_\parallel = k_F$, kako ω raste iz $\omega = \mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) + 0$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ raste iz $-\infty$ i divergira prema $+\infty$ za $\omega = \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) - 0$. Tako za $k_\parallel = k_F$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima nulu u području $\mu - \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) < \omega < \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$. Kao što je vidljivo na slici 5.3 za $k_\parallel \geq k_F$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima singularitet u $\omega = \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$, a kako ω raste iz $\omega = \mu + \omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ raste od pozitivne vrijednosti za $\omega = \omega_{pl} + E_0(k_\parallel) + 0$ prema lokalnom maksimumu s kojeg pada i divergira u $-\infty$ za $\omega = \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) - 0$. Kako je lokalni maksimum pozitivan $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima nulu u ovom području. Konačno, kako ω raste iz $\omega = \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel) + 0$, $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ raste iz $-\infty$ prema $+\infty$. U $\omega = \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$ $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ ima također konačni singularitet koji se pomiče prema većim vrijednostima od ω kako $k_\parallel$ raste. U isto vrijeme nula od $ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ za $\omega > \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$ se pomiče nadesno i sve je dalja i dalja od singulariteta u $\omega = \mu + \Omega_{pl} + E_0(k_\parallel)$.

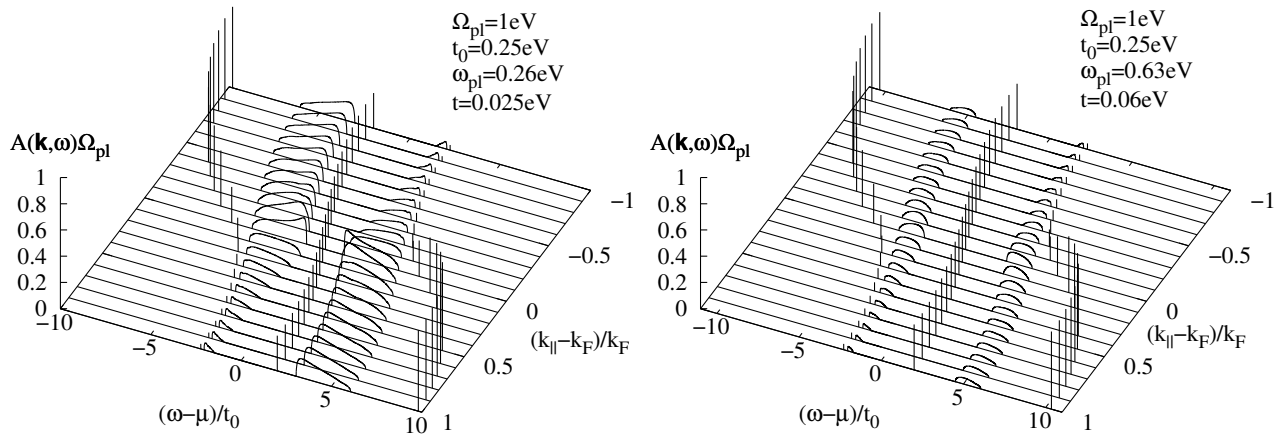
$ReG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ i $ImG^{-1}(k_\parallel, \omega)$ određuju izravno Greenovu funkciju kada je

$ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) \neq 0$. S druge strane, $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ ima nulu u području frekvencija $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)| > \Omega_{pl}$ u kojem $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ iščezava. Tada u ovom području frekvencija Greenova funkcija $G(k_\parallel,\omega)$ ima pol prvog reda oblika $\omega_0(k_\parallel) = E(k_\parallel) - i\Gamma(k_\parallel)$, te se Greenova funcija može zapisati u standardnom rezonantnom obliku (4.53). Također, $ReG^{-1}(k_\parallel,\omega)$ ima nulu u području frekvencija $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)| < \omega_{pl}$ u kojem je $ImG^{-1}(k_\parallel,\omega) = 0$, tako da se i u ovom području Greenova funcija može zapisati u standardnom rezonantnom obliku (4.53). Primjetimo da je pojava ove nule posljedica optičkog procjepa ω_{pl} u dugovalnoj plazmonskoj disperziji koji je rezultat konačnog integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance t u jednoelektronskoj disperziji.

Dobijeni rezultat u niskoenergijskom području se kvalitativno slaže s odgovarajućim rezultatom za trodimenzionalni izotropni ,,jellium" model u G_0W_0 pristupu [26, 27, 28]. Naime, i u tom slučaju plazmonska disperzija ima dugovalni optički minimum Ω_{pl}. Kako imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije iščezava u području $\mu-\Omega_{pl} < \omega < \mu+\Omega_{pl}$, a u tom području realni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije ima nulu, i ova Greenova funkcija može se izraziti u standardnom rezonantnom obliku (4.53).

5.3 Spektralna funkcija

Uvrštavajući rezultate za realni i imaginarni dio recipročne vrijednosti Greenove funkcije $G^{-1}(k_\parallel,\omega)$, izrazi (5.36), (5.37) i (5.41), u odgovarajuće izraze za spektralnu funkciju kvazijednodimenzionalnog metala s jednom vrpcom (4.55) i (4.56) dobijamo spektralnu funkciju prikazanu na slici 5.4 za dvije vrijednosti transverzalne plazmonske frekvencije, malu $\omega_{pl} = 0.26eV$ i veliku $\omega_{pl} = 0.63eV$. $A(k_\parallel,\omega)$ ima široki maksimum u području $\omega_{pl} < |\omega-\mu-E_0(k_\parallel)| < \Omega_{pl}$ koji potječe od plazmonske disperzije. Zbog ovisnosti $E_0(k_\parallel)$ široki maksimum mijenja svoj položaj polagano s promjenom longitudinalne komponente valnog vektora $k_\parallel$. Nadalje spektralna funkcija sadrži kvazičesticu ovisnu o $k_\parallel$ u području $|\omega-\mu-E_0(k_\parallel)| > \Omega_{pl}$ te ima još jednu kvazičesticu ovisnu o $k_\parallel$ u području $\mu+E_0(k_\parallel)-\omega_{pl} < \omega < \mu+E_0(k_\parallel)+\omega_{pl}$. Sve ove komponente spektralne funkcije su prisutne za svaki $t \neq 0$. Primjetimo da smanjenje integrala prijelaza u sm-



(a) (b)

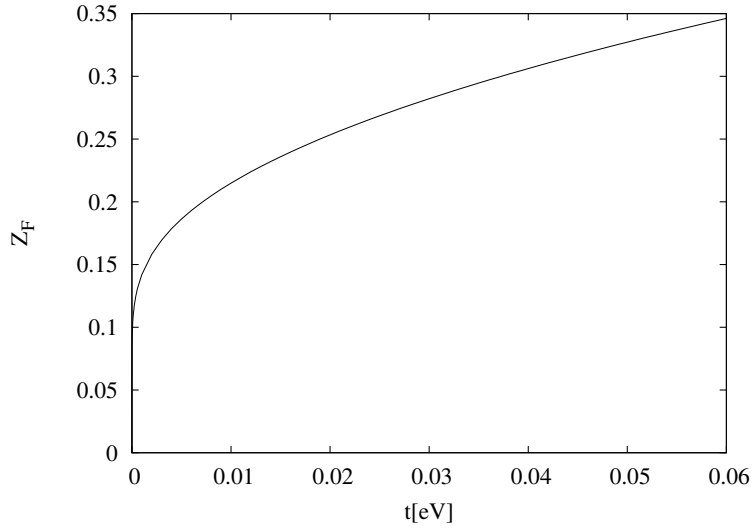
Slika 5.4: Spektralna funkcija $A(k_\parallel, \omega)$ za malu ($\omega_{pl} = 0.26eV$) i veliku ($\omega_{pl} = 0.63eV$) vrijednost transverzalne plazmonske frekvencije ω_{pl} u slučaju $k_F = \pi/2b$. Široki maksimumi za različite longitudinalne komponente valnog vektora $k_\parallel$ slijede iz izraza (4.55), dok su δ-peak-ovi reprezentirani svojim težinama $Z(k_\parallel)$ prema izrazu (4.56).

jeru okomitom na lance dovodi do smanjenja spektralne težine kvazičestice u području $\mu + E_0(k_\parallel) - \omega_{pl} < \omega < \mu + E_0(k_\parallel) + \omega_{pl}$ u korist maksimuma koji se širi pri zatvaranju optičkog procjepa u dugovalnoj plazmonskoj disperziji ω_{pl}. Slučaj $t \to 0$ dovodi do $\omega_{pl} \to 0$ pa sva težina niskoenergijske kvazičestice prelazi na maksimum.

Naglašavamo da uzimanjem $t \to 0$ dolazimo do našeg ranijeg rezultata za spektralnu funkciju s $t = 0$ u kojem nema niskoenergijske kvazičestice. Za ilustraciju nestanka kvazičestične težine u niskoenergijskom području pri $t \to 0$ na slici 5.5 je prikazana ovisnost $Z(k_\parallel)$ o t za $k_\parallel$ na Fermijevoj površini.

Ističemo da i u ovom slučaju dobijeni rezultat za spektralnu funkciju odlično numerički zadovoljava pravilo sume (4.57) sa slaganjem do na 10^{-4} u cijelom području valnih vektora $k_\parallel$ i za sve promatrane t.

Niskoenergijska kvazičestica kao standardno obilježje Fermijeve tekućine pojavljuje se uz strukturu koja potječe od plazmonskih efekata u izotropnom ,,jellium" modelu kao što su to pokazali Hedin i Lundqvist unutar G_0W_0 [26, 27, 28]. Naime, unutar tog pristupa dugovalni minimum plazmonske disperzije ω_{pl} otvara područje $\mu - \omega_{pl} < \omega <$



Slika 5.5: Kvazičestična težina Z na Fermijevoj površini.

$\mu + \omega_{pl}$ u kojem se pojavljuje kvazičestica reducirane spektralne težine, a istovremeno plazmonski mod dovodi do prelaska kvazičestične težine na energije više od plazmonske energije ispod i iznad kemijskog potencijala.

Dobijeni rezultati pokazuju da integral prijelaza u smjeru okomitom na lance odgovoran za stvaranje optičkog procijepa ω_p u dugovalnoj plazmonskoj disperziji dovodi do stvaranja niskoenergijske kvazičestice u spektralnoj funkciji. Naglašavamo da se prijelaz iz režima Fermijeve tekućine u režim ne-Fermijeve tekućine odvija putem smanjenja kvazičestične težine usljed zatvaranja optičkog procijepa u dugovalnoj plazmonskoj disperziji zbog smanjenja integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance. Dakle, kao što je očekivano, u slučaju $t = 0$ anizotropnost kvazijednodimenzionalnog metala odgovorna za stvaranje akustičkog niskoenergijskog kolektivnog plazmonskog moda dovodi do nestanka niskoenergijske kvazičestice i stvaranja široke strukture na energijama reda veličine plazmonske energije.

Kao što je to pokazano u prošlom poglavlju spektralna funkcija u režimu ne-Fermieve tekućine ($t = 0$) je u kvalitativnom slaganju s ARPES spektrima Bechgaardovih soli koji nemaju niskoenergijsku kvazičesticu. Rezultat za spektralnu

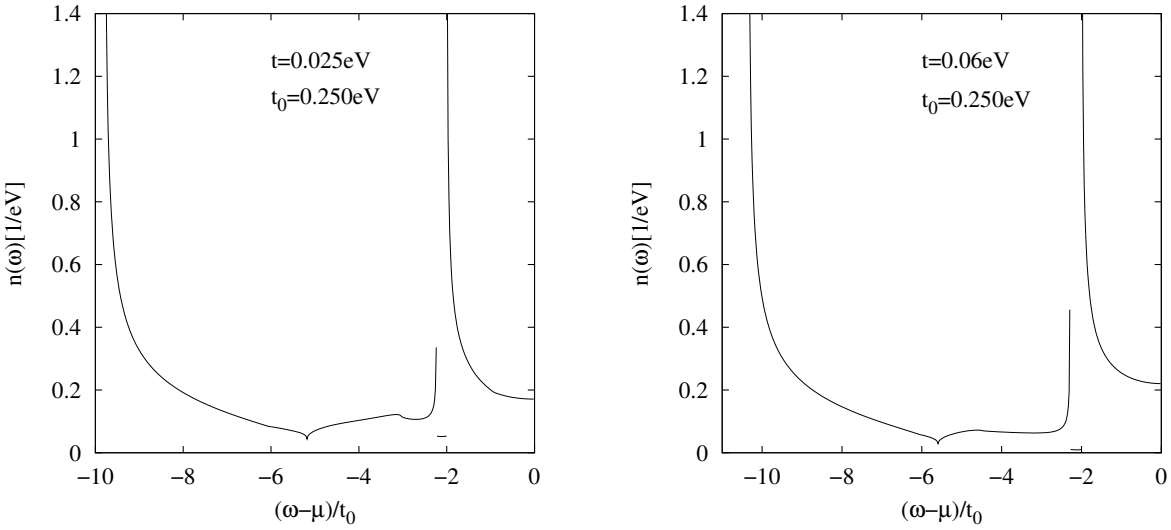
funkciju kvazijednodimenzionalnog metala u režimu Fermijeve tekućine sugerira da je za $(TMTSF)_2PF_6$ (za koju je $t = 0.0125eV$ i $t_0 = 0.125eV$) kvazičestična težina reda veličine 20%, te da se kvazičestica nalazi na udaljenosti oko $\omega_{pl} = 0.13eV$ od širokog maksimuma.

Proučavajući model elektrona na jednodimenzionalnim lancima s konačnim integralom prijelaza među lancima t i trodimenzionalnom Coulombovom interakcijom Schönhammer, Meden and Kopietz našli su također konačni kvazičestični ostatak (3.106) za proizvoljni $t \neq 0$ [15, 23]. Iako strogo govoreći Luttingerovo ponašanje postoji samo za $t = 0$, oni su našli da za mali omjer $|t/E_F|$ postoji veliko srednje područje valnih vektora i frekvencija u kojem se Greenova funkcija jednako ponaša kao i za $t = 0$. Tvrde da je upravo to srednje područje relevantno jer se eksperimenti uvijek izvode s konačnom rezolucijom, te tako uzimaju da je integral prijelaza irelevantan.

RPA zasjenjena Coulombova interakcija kod kvazidvodimenzionalnog metala s konačnim transverzalnim integralom prijelaza t rezultira također jako anizotropnom plazmonskom frekvencijom oblika (5.16) s malom transverzalnom frekvencijom u odnosu na longitudinalnu [72]. Dobijena spektralna funkcija sastoji se od reduciranog kvazičestičnog peak-a i širokog maksimuma koji se proteže sve do longitudinalne plazmonske frekvencije. Ovaj rezultat je u skladu s ARPES spektrima kvazidvodimenzionalnih kristala u normalnoj vodljivoj fazi koji sadrže kvazičestični peak na Fermijevoj energiji i široki maksimum na višim energijama [73].

5.4 Gustoća stanja i funkcija distribucije momenta

Integrirajući numerički spetralnu funkciju kvazijednodimenzionalnog metala s $t \neq 0$ $A(k_{\|}, \omega)$ prikazanu na slici 5.4 po izrazu (4.62) dobijamo pripadnu gustoću stanja po broju elektrona u sistemu $n(\omega)$ prikazanu na slici 5.6 za vrijednosti integrala prijelaza u okomitom smjeru $t = 0.025eV$ i $0.06eV$. U gustoći stanja razlučujemo tri konačna singulariteta koji se pojavljuju na energijama koje odgovaraju rubovima pripadnih kvazičestičnih disperzija. Zbog kvazičestice u energijskom području $\omega < \mu + E_0(k_{\|}) - \Omega_{pl}$

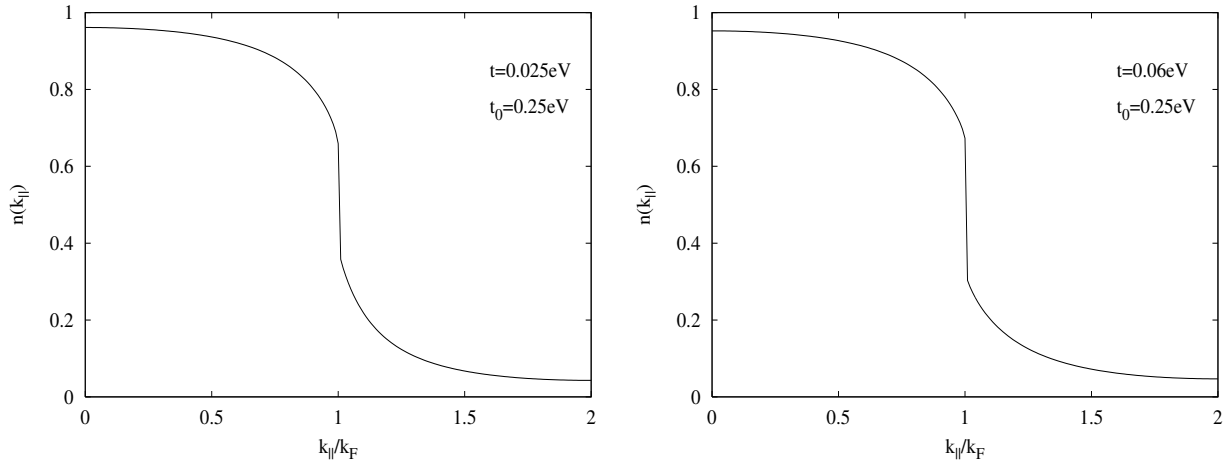


(a) (b)

Slika 5.6: Gustoća stanja $n(k_\parallel)$ za t jednako $0.025eV$ (a) i $0.06eV$ (b).

gustoća stanja pada s maksimalne vrijednosti pri najnižoj energiji kvazičestičnog δ-peak-a ovisnog o $k_\parallel$ na lokalni minimum. Dalje gustoća stanja raste do konačnog diskontinuiteta pri najvišoj energiji kvazičestičnog δ-peak-a ovisnog o $k_\parallel$ u području $\omega < \mu + E_0(k_\parallel) - \Omega_{pl}$. Nadalje, gustoća stanja ima gotovo konstantni doprinos od širokog maksimuma u energijskom području od najviše energije kvazičestičnog δ-peak-a ovisnog o $k_\parallel$ u području $\omega < \mu + E_0(k_\parallel) - \Omega_{pl}$ do najniže energije kvazičestičnog δ-peak-a ovisnog o $k_\parallel$ u području $\mu + E_0(k_\parallel) - \omega_{pl} < \omega < \mu + E_0(k_\parallel) + \omega_{pl}$ pri kojem ima sljedeći diskontinuitet. Kako se pomičemo prema energijama višim od trećeg diskotinuiteta gustoća stanja pada na minimum koji dostiže na $\omega = \mu$. Za razliku od gustoće stanja u slučaju $t = 0$ (slika 4.6) koja pada na nulu na $\omega = \mu$ konačna gustoća stanja na $\omega = \mu$ dobijena za $t \neq 0$ pokazatelj je pojave kvazičestice u spektralnoj funkciji na kemijskom potencijalu.

Numeričkim računom iz izraza (4.63) odredili smo funkciju distribucije momenta $n(k_\parallel)$ prikazanu na slici 5.7 za integrale prijelaza u smjeru okomitom na lance $t =$



(a) (b)

Slika 5.7: Funkcija distribucije momenta za $k_F = \frac{\pi}{2b}$ i t jednako $0.025eV$ (a) i $0.06eV$ (b) ima diskontinuitet na k_F.

$0.025eV$ i $t = 0.06eV$. Površina ispod krivulja (a) i (b) razlikuje se od točnog broja elektrona za manje od 0.1% što pokazuje da je G_0W_0 aproksimacija zadovoljavajuće samousaglašena.

Funkcija distribucije momenta pada s maksimalne vrijednosti na $k_{\|} = 0$ prema konačnom diskontinuitetu na k_F. Sam iznos diskontinuiteta od $n(k_{\|})$ jednak je spektralnoj težini $Z(k_F)$ kvazičestičnog δ-peak-a na $\omega = \mu$. Ovakav oblik funkcije distribucije momenta pokazatelj je ponašanja u skladu s Fermijevom tekućinom. Iz slike 5.7 je vidljivo da kvazičestična težina pada kako se integral prijelaza u smjeru okomitom na lance smanjuje.

Poglavlje 6

Zaključak

Spektralna svojstva metalne faze interagirajućih elektronskih sustava jako ovise o dimenzionalnosti. Teorijski je dobro poznato da se Landauova teorija Fermijeve tekućine koja dobro opisuje trodimenzionalne izotropne metale ne može primjeniti na sustav interagirajućih elektrona u jednoj dimenziji za koji je egzaktno rješiv Luttingerov model. Među materijalima pogodnim za proučavanje prijelaza između ova dva režima su zbog svoje anizotropnosti i kvazijednodimenzionalni vodiči.
Također, upravo anizotropnost omogućava i upotrebu kutno razlučive fotoemisije za analizu neobičnih spektralnih svojstava ovih materijala kao što su izostanak kvazičestice na kemijskom potencijalu i široki maksimum na energijama reda veličine plazmonske energije [1, 2, 3, 4].

U ovom radu proučavali smo utjecaj plazmonskog kolektivnog moda na spektralna svojstva kvazijednodimenzionalnih metala s jednom elektronskom vrpcom po lancu koristeći G_0W_0 aproksimaciju s RPA zasjenjenom trodimenzionalnom Coulombovom interakcijom. Iako dobijeni izraz za spektralnu funkciju ne reproducira egzaktni rezutat dobijen ranije za Luttingerovu tekućinu u niskoenergijskom području, očekujemo da daje kvalitativno dobar opis spektralnih svojstava kvazijednodimenzionalnih vodiča na energijskoj skali reda veličine plazmonske energije. Naša analiza pokazuje da jako anizotropni niskoenergijski plazmonski mod induciran dugodosežnom Coulombovom interakcijom u vodljivoj elektronskoj vrpci s (kvazi)jednodimenzionalnom disperzijom daje dominantan doprinos vlastitoj energiji elektrona te da je odgovoran za elektronska spektralna svojstva u normalnoj fazi.

Naime, anizotropni plazmonski mod dovodi do formiranja široke spektralne strukture na energijskoj skali plazmonske energije. Sve dok nema transverzalnog integrala prijelaza t u vodljivoj elektronskoj vrpci nema ni niskoenergijske kvazičestice u spektralnoj funkciji. S druge strane, konačan integral prijelaza t u elektronskoj disperziji dovodi do formiranja niskoenergijske kvazičestice. Naime, konačan t daje optički karakter anizotropnoj plazmonskoj disperziji. Optički procijep jednak transverzalnoj plazmonskoj frekvenciji omogućava pojavu niskoenergijske kvazičestice u spektralnoj funkciji. Proces smanjivanja transverzalnog integrala prijelaza t praćen je zatvaranjem optičkog procjepa pri čemu dolazi do prijelaza kvazičestične spektralne težine na široku spektralnu strukturu koja se prostire na energijskoj skali plazmonske energije. Granica $t = 0$ daje akustični karakter plazmonskoj disperziji i kvazičestica nestaje.

Nepostojanje niskoenergijske kvazičestice u spektralnoj funkciji za $t = 0$ je centralni rezultat ovog računa koji pokazuje da se već u G_0W_0 aproksimaciji spektralna svojstva kvazijednodimenzionalnih vodiča kvalitativno razlikuju od onih trodimenzionalnih izotropnih metala koji pokazuju standardna svojstva Fermijeve tekućine. On se očituje i u izostanku diskontinuiteta na Fermijevom valnom broju u funkciji distribucije momenta, te u nestajanju gustoće stanja na kemijskom potencijalu. Ovo su sve svojstva i Luttingerovih tekućina.

Štoviše, G_0W_0 aproksimacija omogućava praćenje prijelaza spektralne težine niskoenergijske kvazičestice na široku spektralnu strukturu prilikom prijelaza iz režima Fermijeve tekućine u režim ne-Fermijeve tekućine koji se postiže smanjivanjem integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance. Ovaj prijelaz najbolje se može pratiti u funkciji distribucije momenta čiji se diskontinuitet na Fermijevom valnom broju jednak kvazičestičnoj spektralnoj težini smanjuje smanjenjem integrala prijelaza u smjeru okomitom na lance. U tom procesu gustoća stanja gubi na intenzitetu u niskoenergijskom području na račun intenziteta u energijskom području reda veličine plazmonske energije.

Dolazimo do zaključka da postojanje niskoenergijskog anizotropnog kolektivnog moda u slučaju $t = 0$ kod kvazijednodimenzionalnih metala onemogućava razvoj Greenove funkcije oko kemijskog potencijala, kao polazne točke u pristupu Fermijeve tekućine.

S druge strane, G_0W_0 aproksimacija omogućava određivanje položaja široke spektralne strukture za razliku od pristupa u okviru slike Luttingerove tekućine koji su

ograničeni na egzaktno određivanje niskoenergijskog ponašanja. Tako ove dvije metode možemo smatrati komplementarnima u analizi uloge kolektivnih modova u spektralnim svojstvima kvazijednodimenzionalnih vodiča očekujući da zajedno daju potpun uvid u široku energijsku skalu relevantnu za ARPES mjerenja.

Ističemo da G_0W_0 aproksimacija kvalitativno potvrđuje rezultat pristupa sustavu slabo vezanih lanaca s trodimenzionalnom Coulombovom interakcijom elektrona u okviru slike Luttingerove tekućine da konačan transverzalni integral prijelaza dovodi do formiranja niskoenergijskog kvazičestičnog ostatka.

Spektri Bechgaardovih soli dobiveni kutno razlučivom fotoemisijom u kvalitativnom su slaganju s rezultatima dobivenim u okviru G_0W_0 aproksimacije za slučaj $t = 0$ ili za t dovoljno mali da rezolucija eksperimenta ne dozvoljava opažanje kvazičestičnog ostatka. Isti zaključak vrijedi i za interpretaciju ovih spektara u okviru modela slabo vezanih lanaca s trodimenzionalnom dugodosežnom Coulombovom interakcijom elektrona u okviru slike Luttingerove tekućine za anomalnu dimenziju veću od jedinice. U tom smislu transverzalni integral prijelaza t možemo smatrati irelevantnim parametrom za interpretaciju ARPES spektara Bechgaardovih soli. Također, isti zaključak slijedi i iz proučavanja problema jednodimenzionalnih lanaca interagirajućih elektrona vezanih malim transverzalnim integralom prijelaza u okviru perturbacijskog pristupa. U tom pristupu za $\alpha > 1$ konzistentan s ARPES spektrima Bechgaardovih soli ne pojavljuje se kvazičestični ostatak i spektralna svojstva ostaju jednodimenzionalna na svim temperaturama, te transverzalni integral prijelaza postaje irelevantan.

Opisan u modelu kvazijednodimenzionalnog metala s dvije elektronske vrpce po donorskim i akceptorskim lancima i s trodimenzionalom RPA zasjenjenom Coulombovom interakcijom elektrona $TTF-TCNQ$ zbog jake sprege plazmona i dipolnog moda ima niskoenergijski kolektivni mod [74]. Preostaje vidjeti kako ovaj mod utječe na niskoenergijska spektralna svojstva kvazijednodimenzionlnog metala s jednom elektronskom vrpcom po donorskim i akceptorskim lancima $TTF-TCNQ$-a u G_0W_0 aproksimaciji s RPA zasjenjenom interakcijom dobijenom u modelu s dvije vrpce. Na osnovu rezultata dobivenih u ovom radu očekujemo da radi ovog niskoenergijskog kolektivnog moda ni u njihovoj spektralnoj funkciji niskoenergijska kvazičestica neće imati značaj. Očekujemo,

također, da će ovaj pristup dati rezultate za spektralnu funkciju koji će biti u kvalitativno dobrom slaganju s ARPES spektrima $TTF-TCNQ$-a i na široj energijskoj skali.

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

[6] J. M. Luttinger i J. C. Ward, Phys. Rev. **118**, 1417 (1960).

[7] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153 (1960).

[8] S. Tomonaga, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) **5**, 544 (1950).

[9] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).

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

[11] M. Sing *et al.*, Phys. Rev. B **67**, 125402 (2003).

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

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

[14] S. Botrić i S. Barišić, J. Physique **45**, 185 (1984).

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

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

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

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

[19] A. Schwartz. et al., Phys. Rev. B **58**, 1261 (1998).

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

[21] P. Auban-Senzier, D. Jérome i J. Moser *Physical Phenomena at High Magnetic Fields* ed Fisk, Gorkov i Schrieffer (Singapore: World Scientific) pp 211, (1999).

[22] C. S. Jacobsen, D. B. Tanner i K. Bechgaard, Phys. Rev. Lett. **27**, 1142 (1981).

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

[24] Ž. Bonačić Lošić, P. Županović, A. Bjeliš, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 3655 (2006).

[25] Ž. Bonačić Lošić, A. Bjeliš, P. Županović, u pripremi

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

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

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

[29] P. García-Gonzáles i R. W. Godby, Phys. Rev. B **63**, 075112 (2001).

[30] A. Schindlmayr, Phys. Rev. B **56**, 3528 (1997).

[31] L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A796 (1965).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

[45] 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.

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

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

[48] A. Damascelli, Z. Hussain i Z.-X Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).

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

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

[51] D. C. Mattis i E. M. Lieb, J. Math. Phys. **6**, 304 (1965).

[52] A. Luther i I Peschel, Phys. Rev. B **9**, 2911 (1974).

[53] J. Voit, **cond-mat/0005114**.

[54] K. Schönhammer, **cond-mat/0305035**.

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

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

[57] X. G. Wen, Phys. Rev. B 42, 6623 (1990).

[58] C. Bourbonais i L. G. Caron, Int. J. Mod. Phys. B **5**, 1033 (1991).

[59] D. Boies, C. Bourbonnais i A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. Lett. **74**,968 (1995).

[60] D. G. Clarke i S. P. Strong, J. Phys. Cond. Mat. **8**, 10089 (1996).

[61] A. M. Tsvelik, cond-mat/9607209.

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

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

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

[65] B. I. Lundqvist, Phys. kondens. Materie **6**, 193 (1967).

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

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

[68] V. Meden, Phys. Rev. B **60**, 4571 (1999).

[69] D. Pines, *Elementary excitations in solids*, W. A. Benjamin, Inc., New York, (1964).

[70] J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge Univ., Cambridge, (1972).

[71] J. F. Kwak, Phys. Rev. B **26**, 4789 (1982).

[72] S. N. Artemenko i S. V. Remizov, **cond-mat/0109264**, JETP Lett. **74**, 392 (2001).

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

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

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. Magistarski rad, pod nazivom ,,Fotoemisijska svojstva kvazijednodimenzionalnih vodiča" izradila sam pod vodstvom dr. sc. Paška Županovića i prof. sc. Alekse Bjeliša i obranila 2002. godine.

Od 1998. do 2003. godine radila sam kao mlađi asistent, a od 2003. godine radim kao asistent na Zavodu za fiziku Fakulteta prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja Sveučilišta u Splitu.

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**, J. Phys. IV France **12** (2002), p. 53

3. Ž. Agić, P. Županović, A. Bjeliš: **Effects of transverse electron dispersion on photo-emission spectra of quasi-one-dimensional systems**, J. Phys. IV France **114** (2004), 95-97

4. Ž. Bonačić Lošić, P. Županović, A. Bjeliš: **Photo-emission properties of quasi-one-dimensional conductors**, J. Phys.: Condens. Matter **18** (2006), 3655-3670