

# Електронна структура та властивості низько(роз/ви)мірних систем

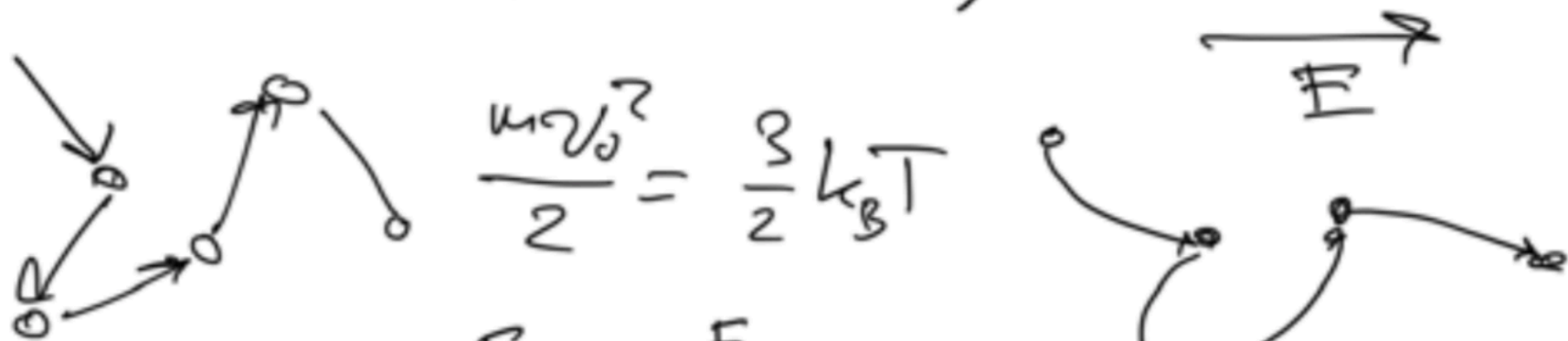
<i>Лекція 1:</i>	Модель Друде
<i>Лекція 2:</i>	Модель Зоммерфельда
<i>Лекція 3:</i>	Електрони в періодичному потенціалі - зонна структура
<i>Лекція 4:</i>	Перехід Паєрлса
<i>Лекції 5, 6:</i>	CDW в дихалькогенідах перехідних металів. Квазікристали
<i>Лекція 7:</i>	Напівкласика
<i>Лекції 8, 9:</i>	Спектральна функція
<i>Лекції 10, 11:</i>	Загадка високотемпературної надпровідності та як її розгадати

## *Лекція 1: Модель Друде*

- Вивести коефіцієнт електропровідності в моделі Друде
- Що ця модель не описувала і чому, навпаки, добре описувала закон Відемана-Франца?

1.1. Модель Друде - Экспериментальное  $\sigma$

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B})$$



$$\frac{mv_0^2}{2} = \frac{3}{2} k_B T$$

$$a = \frac{F}{m} = \frac{eE}{m}$$

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \vec{a}t$$

$$\langle \vec{v} \rangle = \langle \vec{v}_0 \rangle + \frac{eE}{m} \tau$$

$$\langle t \rangle \equiv \tau$$

$$j = en \langle v \rangle = \frac{e^2 n}{m} \tau E = \sigma E$$

$$\sigma = \frac{e^2}{m} n \tau$$

$$R_H = \frac{F_y}{j B_z} = -\frac{1}{e n c}$$

$$\chi = \frac{3}{2} \frac{k_B^2 n}{m} \tau T$$

$$\frac{\chi}{\sigma} = \frac{3}{2} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 T$$

34 Вейера-Фроунт

иско Лоренца  
> у 2 p. в релаксацији

$$C_v < 6 \text{ } 100 p.$$

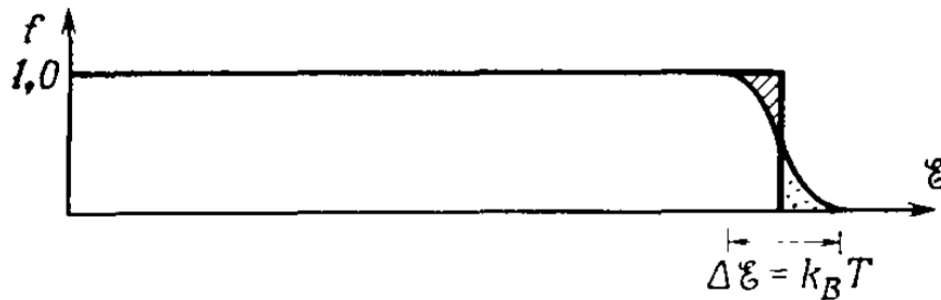
## Лекція 2: Модель Зоммерфельда

- Показати, що за статистики Фермі-Дірака електронна теплоємність пропорційна квадрату температури.
- Що таке  $E_F$ ,  $k_F$ ,  $v_F$ , поверхня Фермі?
- Як залежить густина електронних станів (DOS) від енергії в 1D, 2D, 3D?

# Maxwell–Boltzmann -> Fermi–Dirac distributions

$$f(\mathcal{E}) = \frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mu)/k_B T} + 1}$$

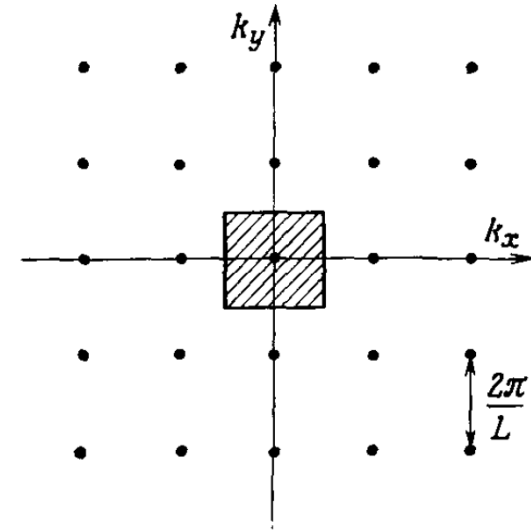
$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad v_F = \left(\frac{\hbar}{m}\right) k_F = \frac{4,20}{r_s/a_0} \cdot 10^8 \text{ cm/c}$$



$$u = u_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g(\mathcal{E}_F)$$

$$c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_n = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F}\right) n k_B$$

[Ашкрофт, Мермин т.1](#)



3-н Відемана-Франца

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2$$

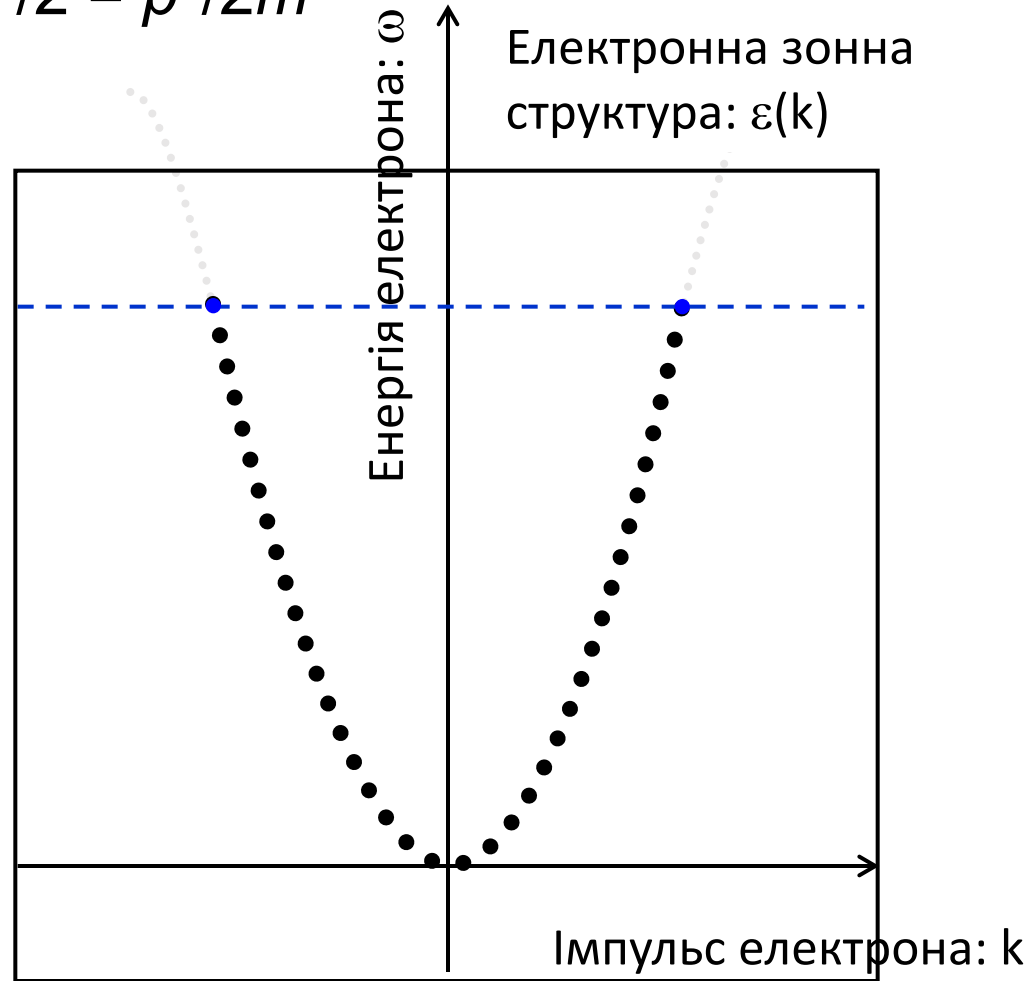
Коеф. Зеебека

$$S = \frac{\pi^2}{6} \frac{k_B}{e} \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F}\right)$$

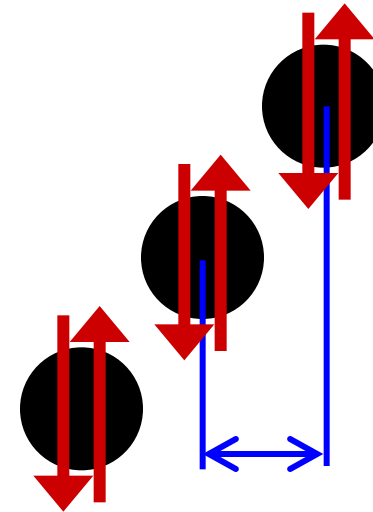
# Парабола вільних електронів

$$E = mv^2/2 = p^2/2m$$

$$p = \hbar k$$

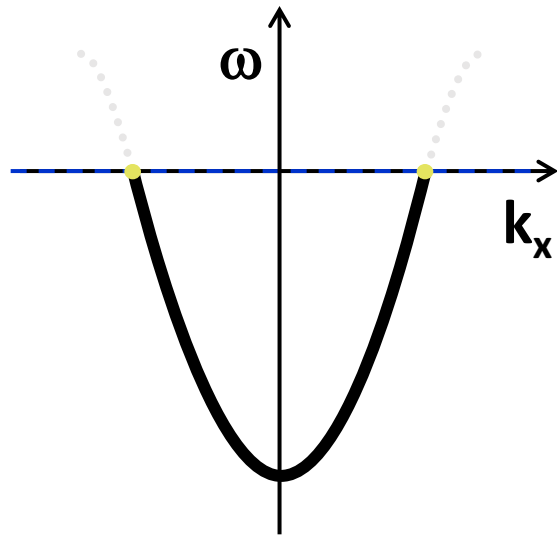


$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

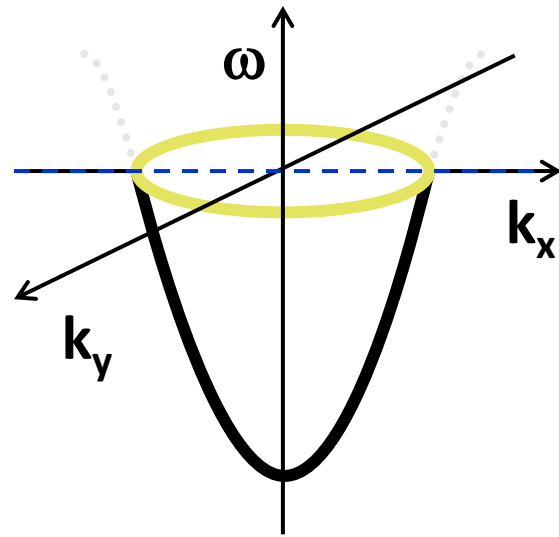


$$dk = 2\pi/L$$

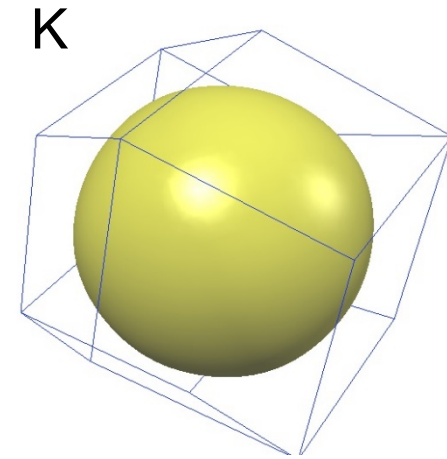
## ... Fermi surface



1D



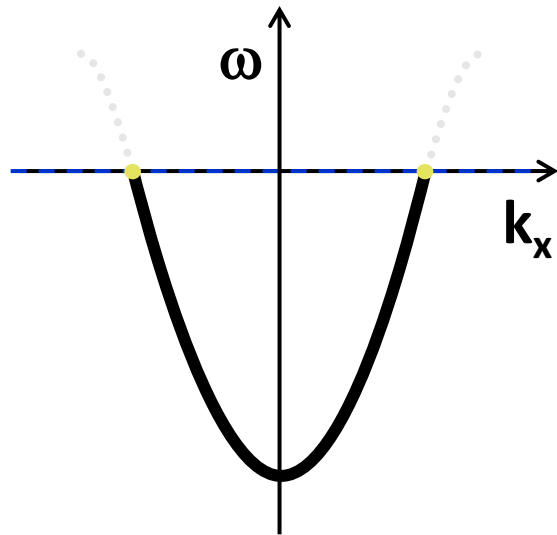
2D



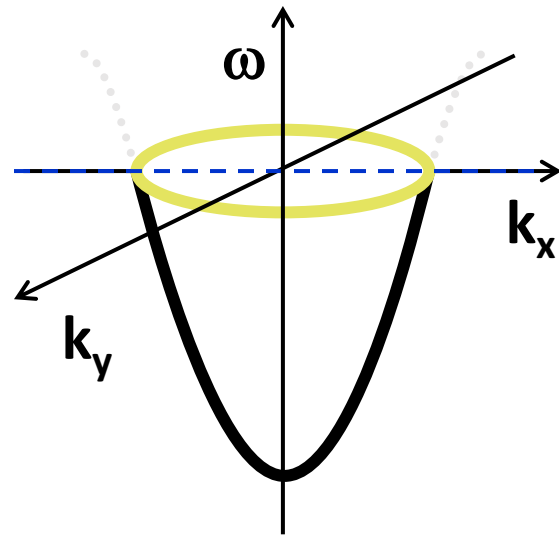
3D



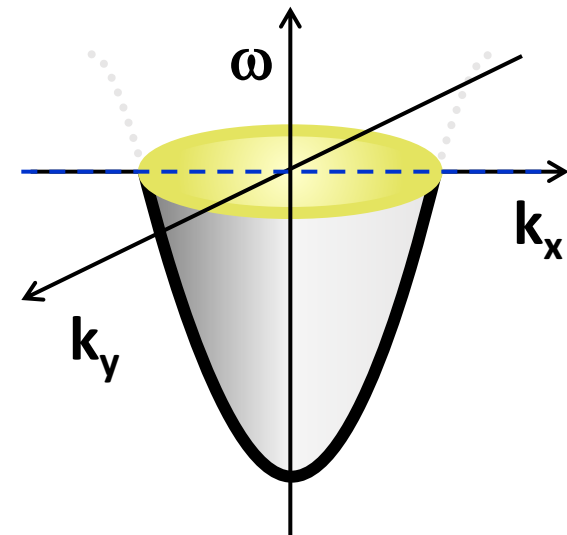
## ... Fermi surface



1D

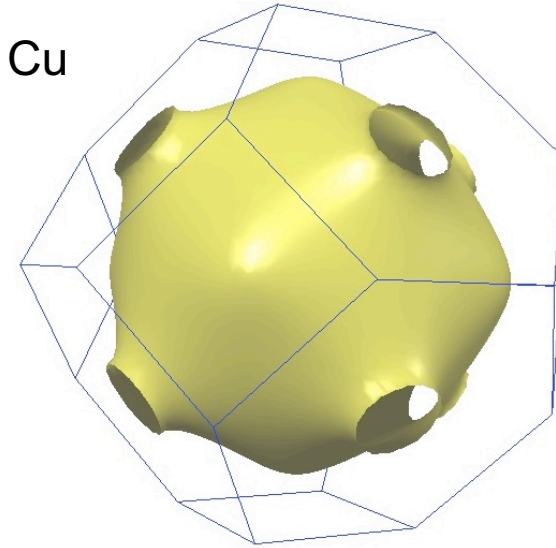


2D



3D projected  
on 2D

Cu



# The Fermi Surface Database

(click icons)

Li	Be																			B	C
Na	Mg																			Al	Si
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Feup	Coup	Niup	Cu	Zn	Ga	Ge								
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn								
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb								
		Ac	Th																		

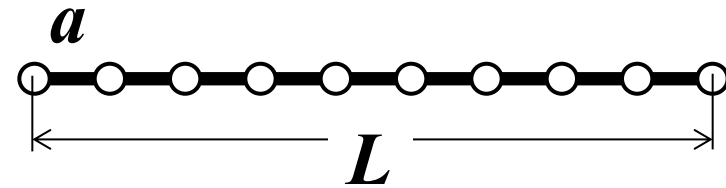
### *Лекція 3: Електрони в періодичному потенціалі - зонна структура*

- Що таке граничні умови Борна-Кармана? Які їх наслідки?
- Чим визначається зонна щілина у наближенні слабкого потенціала?
- Чим визначається ширина зони в моделі сильного зв'язку чи перескоків?
- Як кількість електронів провідності на ел. комірку визначає метал або ізолятор?
- Побудувати  $DOS(w)$  у моделі перескоків до найближчих сусідів для 1D та 2D

# Від хвиль пласких до блохівських



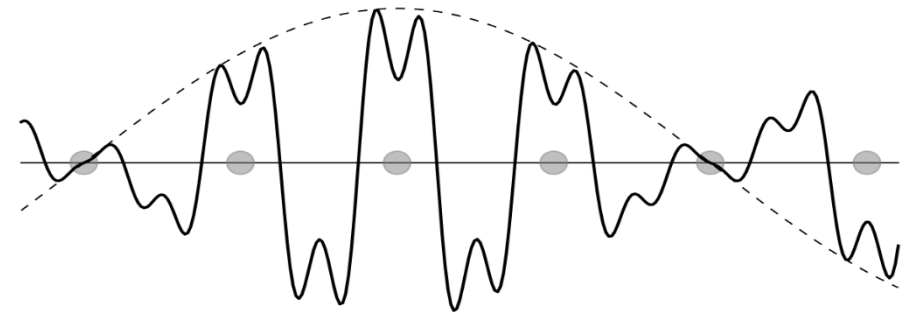
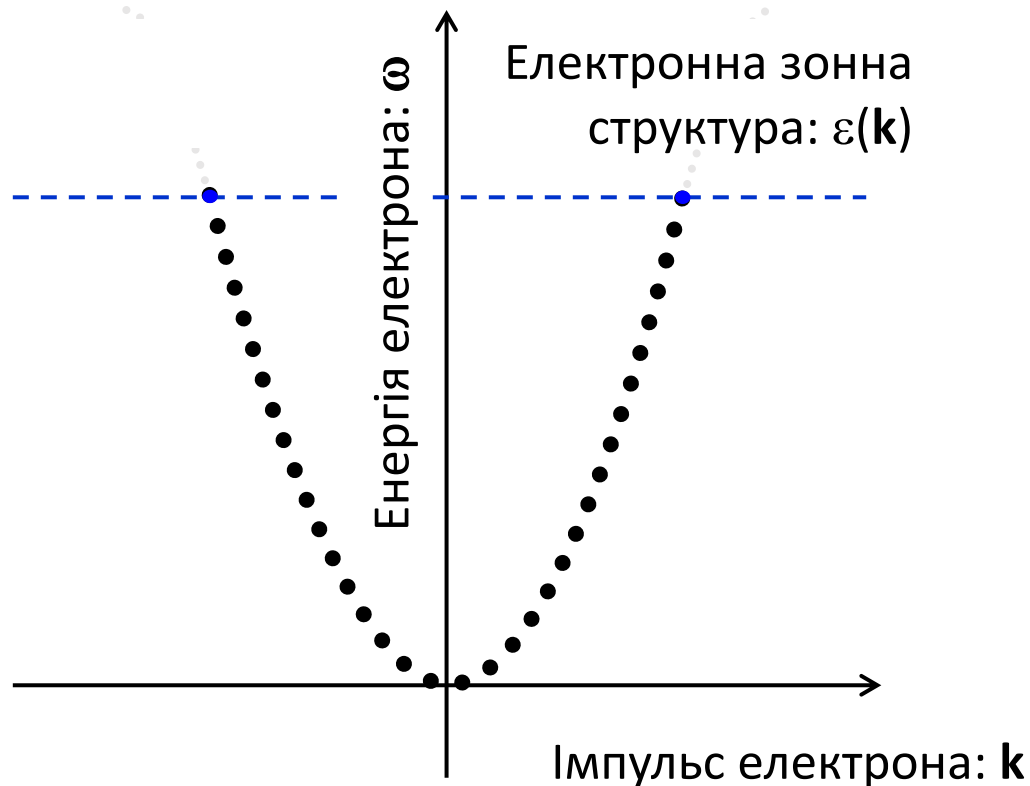
$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$



$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r})$$

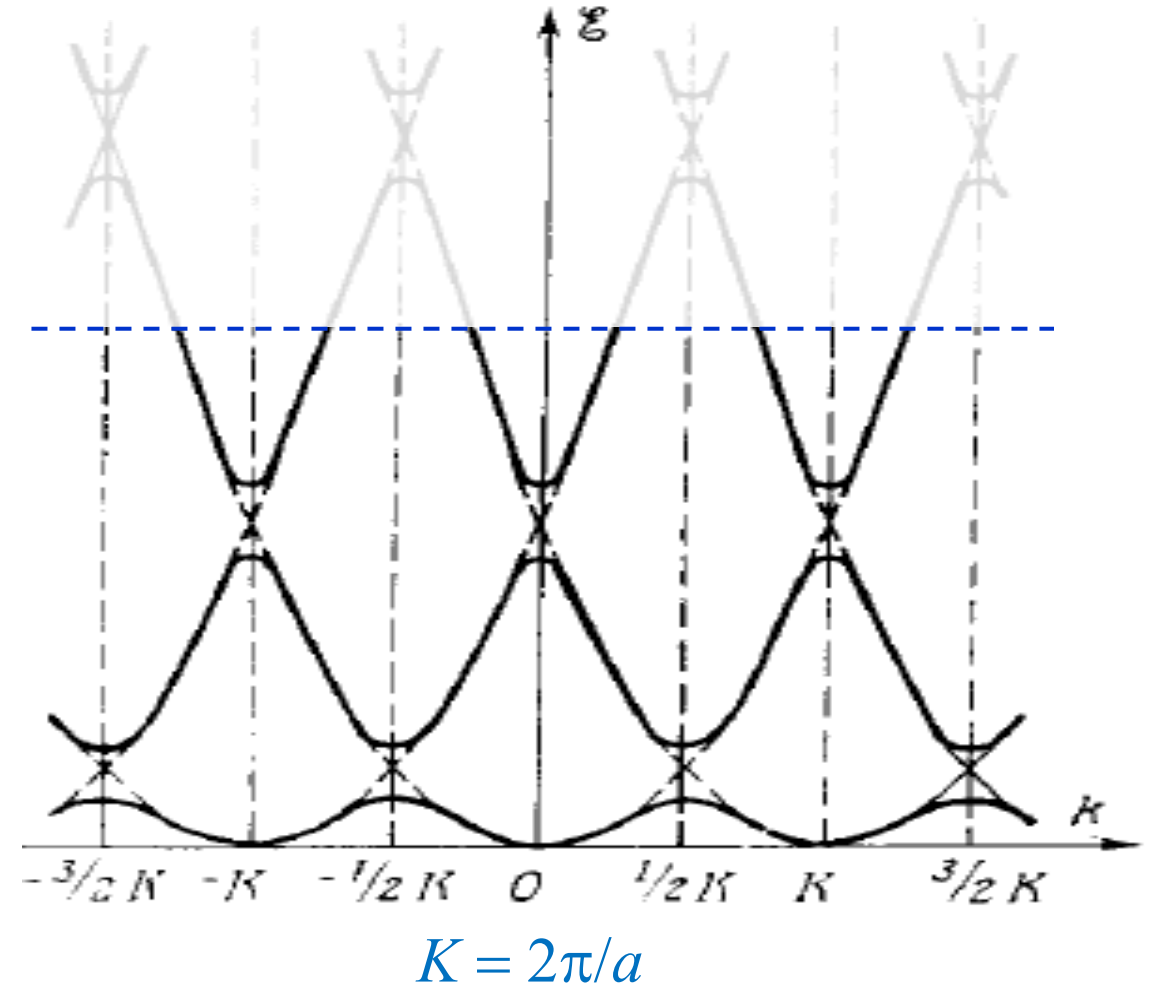
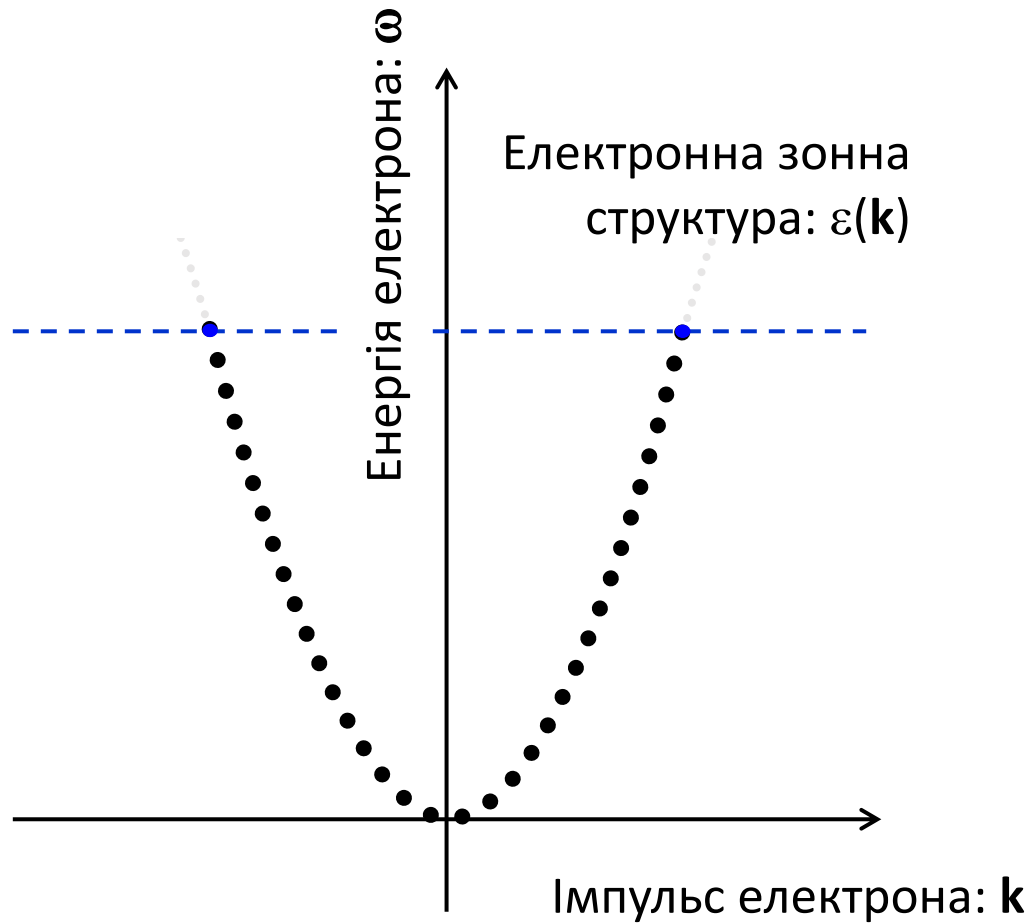
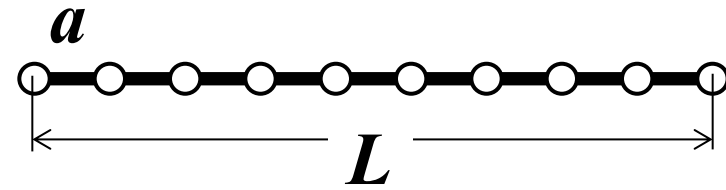
Теорема Блоха

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{a})$$

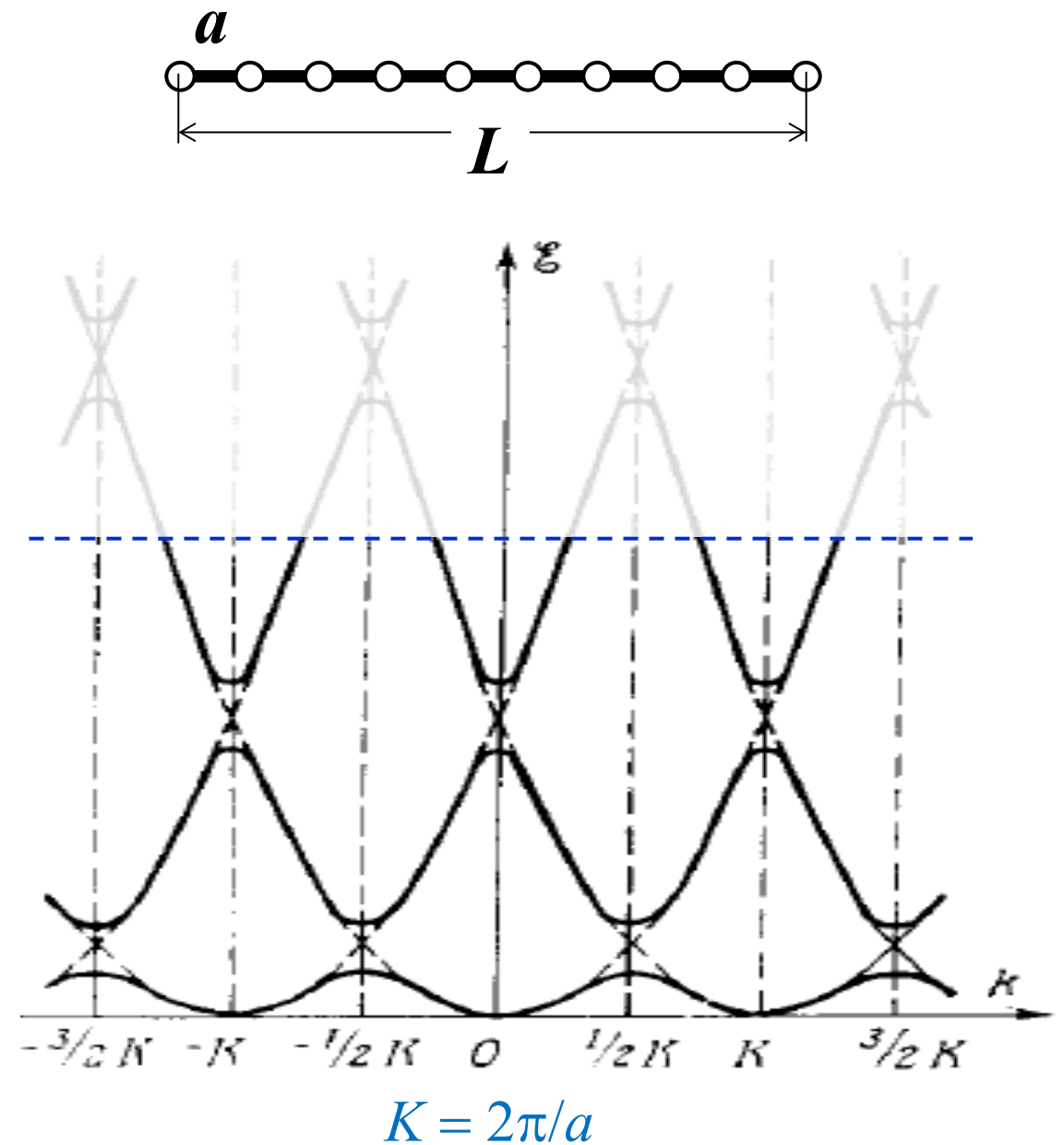
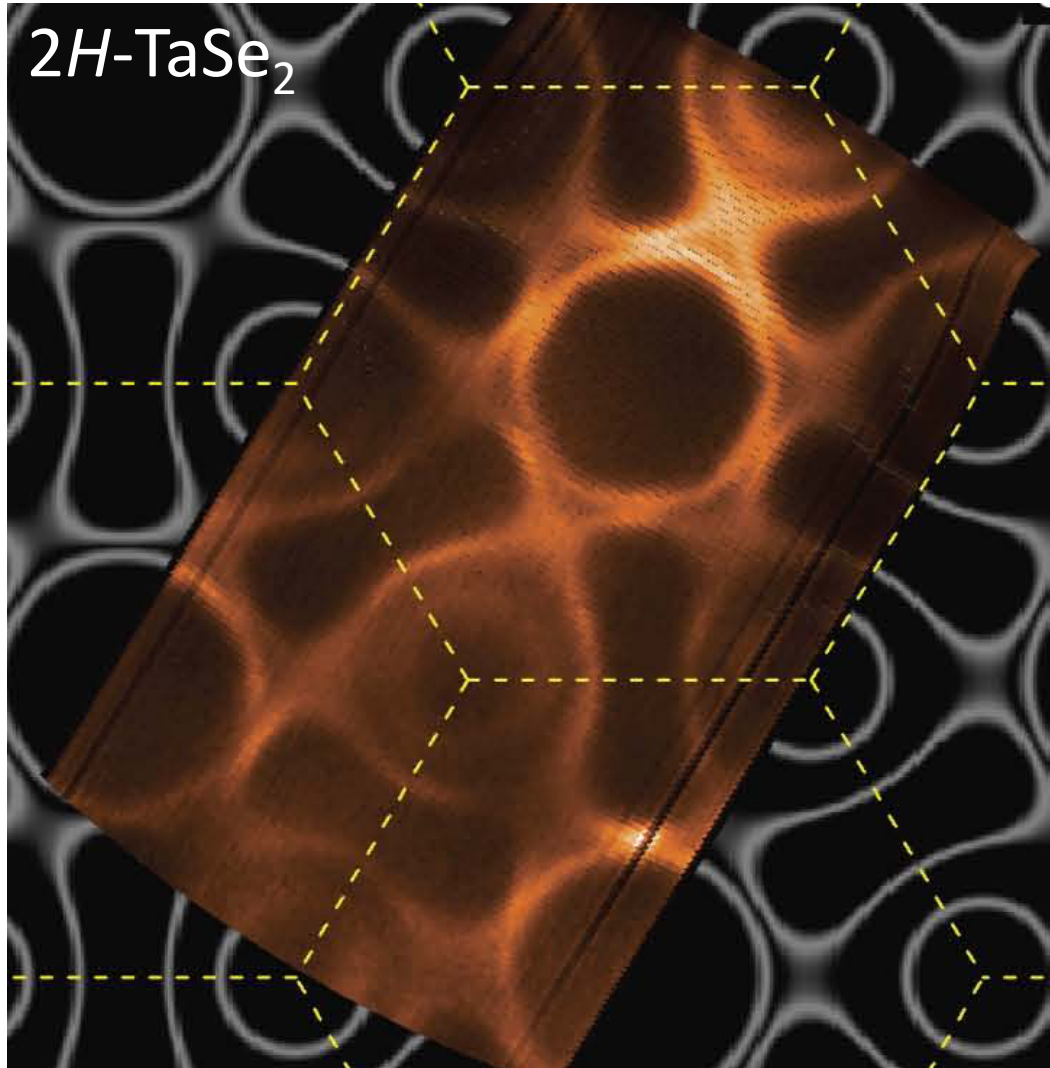


$$\psi_{n\mathbf{k}} = \psi_n(\mathbf{k} + \mathbf{K})$$

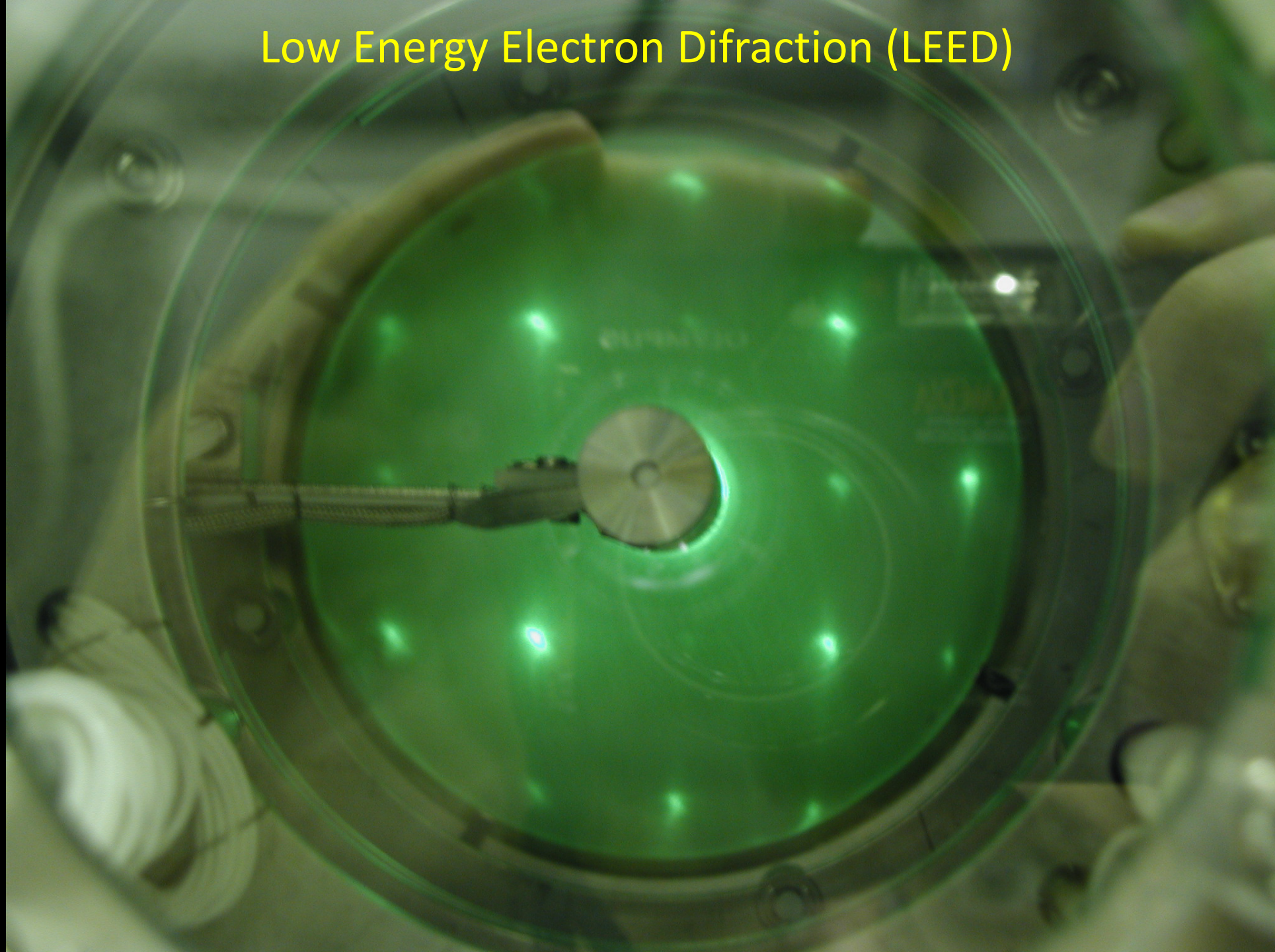
# Від хвиль пласких до блохівських



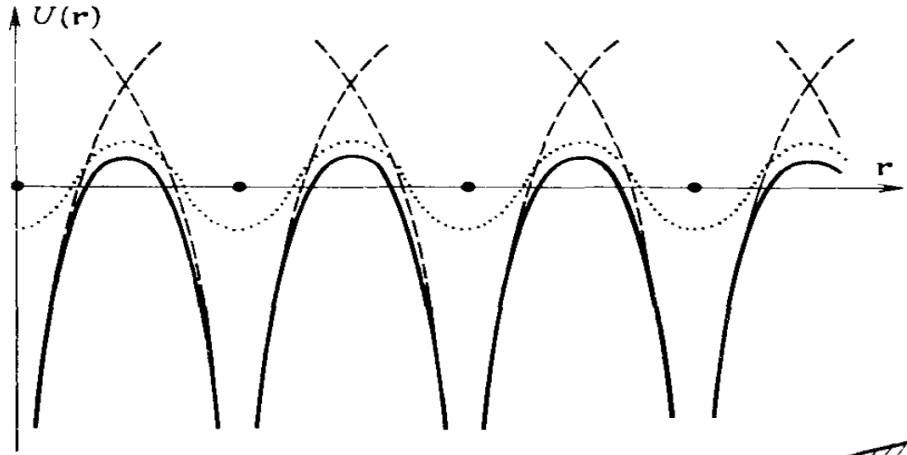
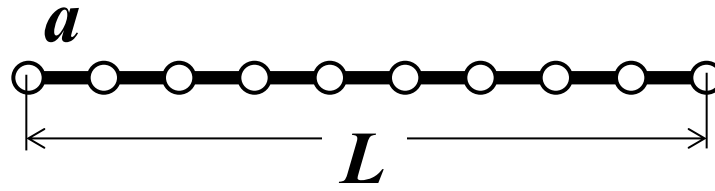
# Блохівські електрони - результат інтерференції вільних електронів на кристалічних площинах



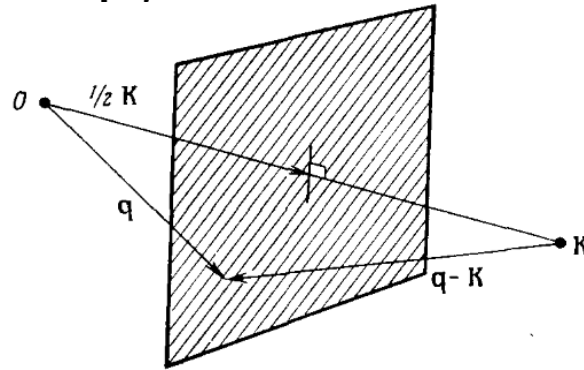
# Low Energy Electron Diffraction (LEED)



# Band gaps

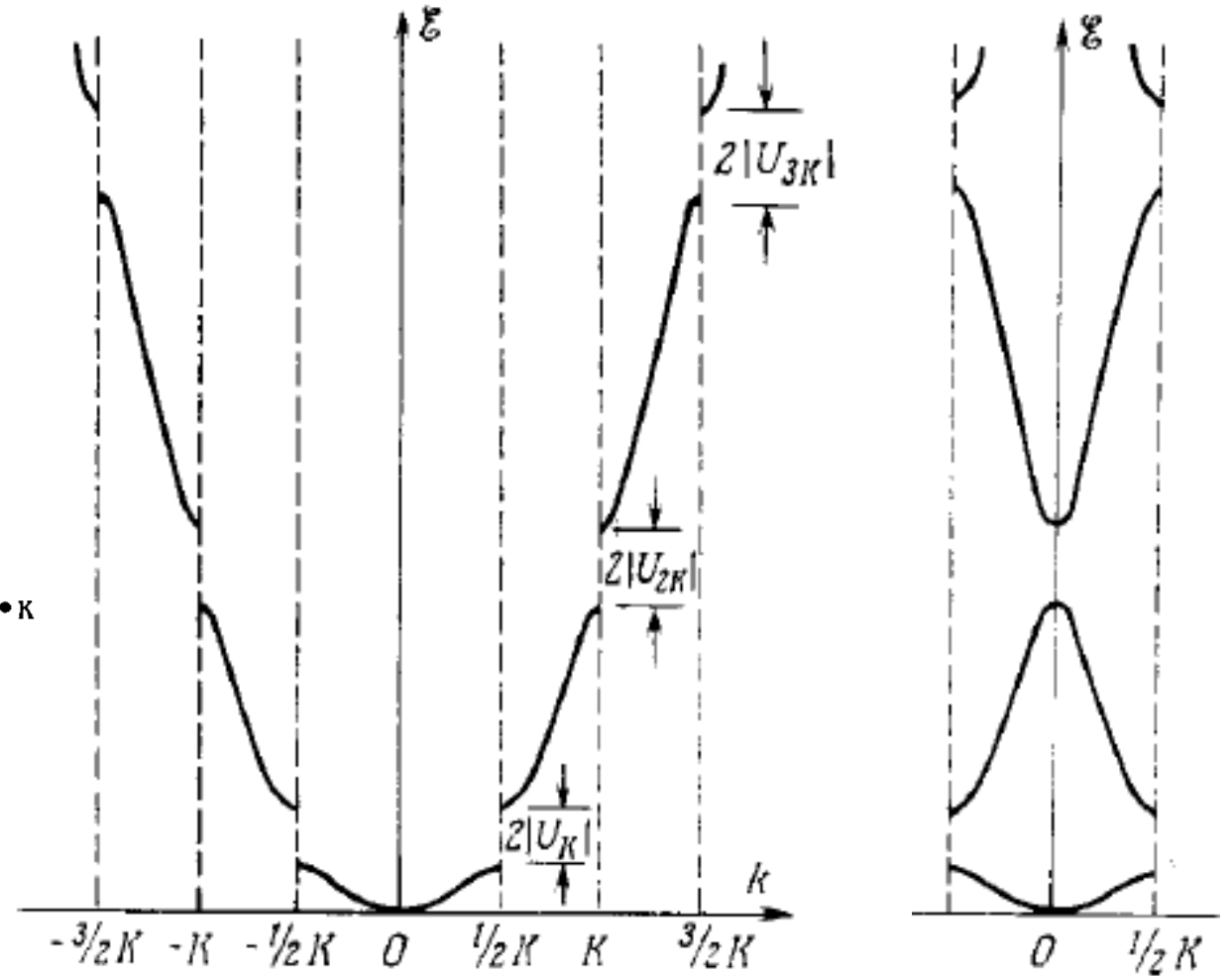


$$\begin{vmatrix} \mathcal{E} - \mathcal{E}_q^0 & -U_K \\ -U_K^* & \mathcal{E} - \mathcal{E}_{q-K}^0 \end{vmatrix} = 0$$



$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_q^0)(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{q-K}^0) = |U_K|^2$$

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} (\mathcal{E}_q^0 + \mathcal{E}_{q-K}^0) \pm \left[ \left( \frac{\mathcal{E}_q^0 - \mathcal{E}_{q-K}^0}{2} \right)^2 + |U_K|^2 \right]^{1/2}$$



$$K = 2\pi/a$$



# Модель перескоків - інтерференція амплітуд перескоків

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \varphi\rangle$$

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle C_n$$

⋮

$$i\hbar \frac{dC_{n-1}}{dt} = E_0 C_{n-1} - AC_{n-2} - AC_n,$$

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = E_0 C_n - AC_{n-1} - AC_{n+1},$$

$$i\hbar \frac{dC_{n+1}}{dt} = E_0 C_{n+1} - AC_n - AC_{n+2}.$$

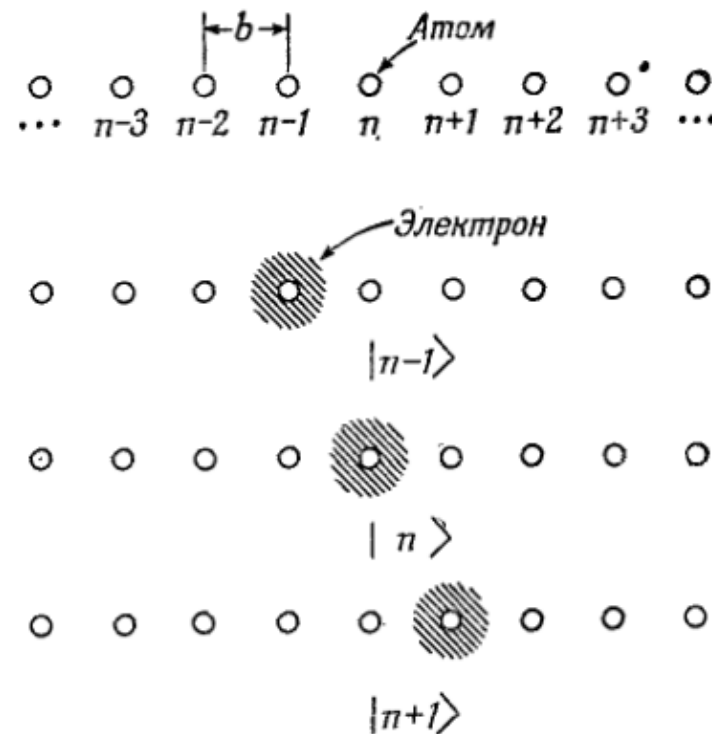
⋮

$$i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} = E_0 C_n(t) - AC_{n+1}(t) - AC_{n-1}(t)$$

$$C_n = a(x_n) e^{-iEt/\hbar}$$

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_{n+1}) - Aa(x_{n-1})$$

Базисні стани електронів



$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_{n+1}) - Aa(x_{n-1}) \quad x_{n+1} = x_n + b$$

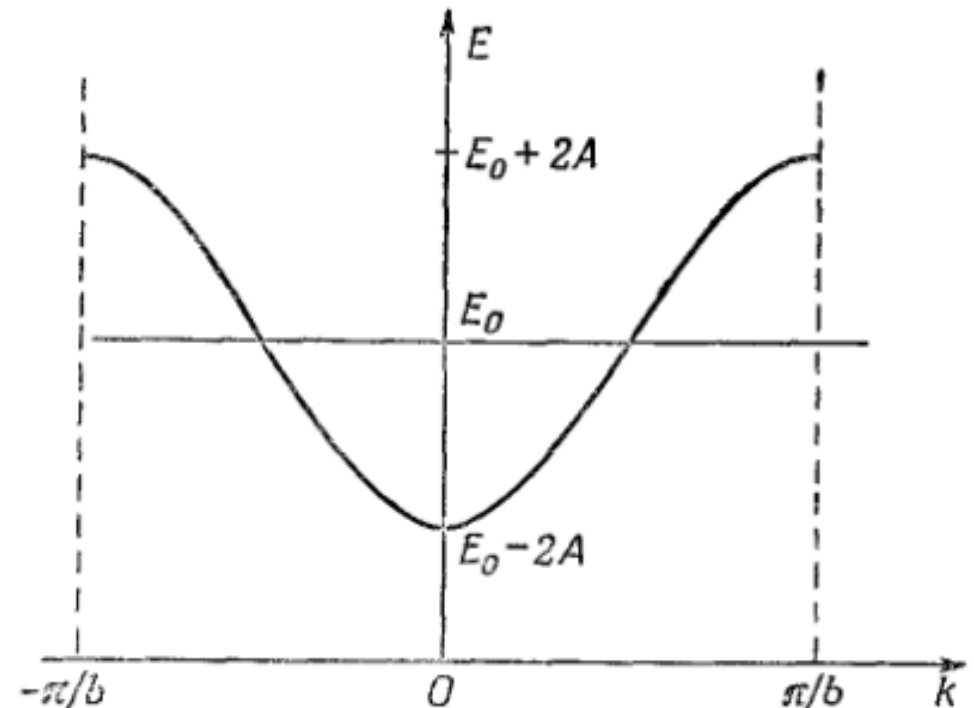
$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_n + b) - Aa(x_n - b)$$

$$a(x_n) = e^{ikx_n} \quad Ee^{ikx_n} = E_0 e^{ikx_n} - Ae^{ik(x_n + b)} - Ae^{ik(x_n - b)}$$

$$E = E_0 - Ae^{ikb} - Ae^{-ikb}$$

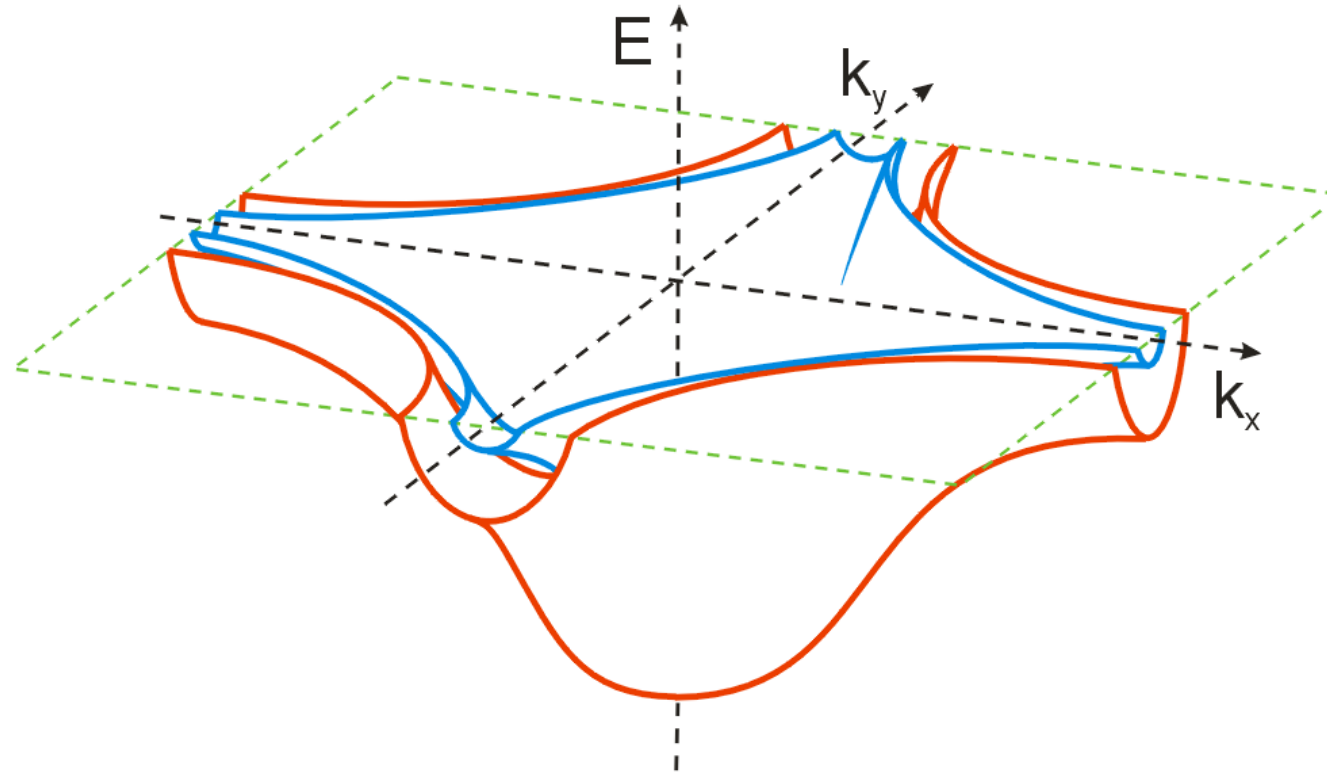
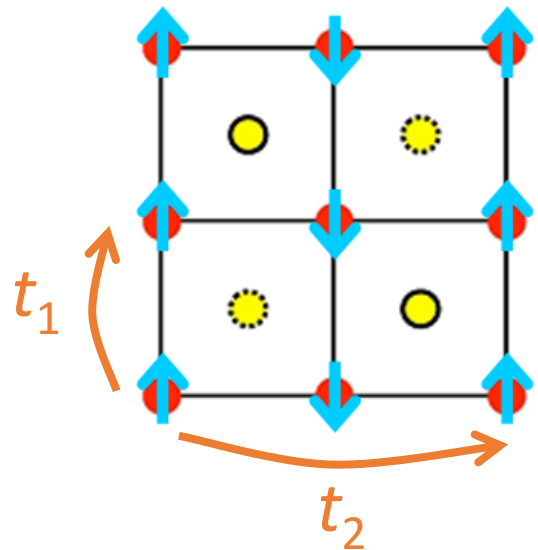
$$E = E_0 - 2A \cos kb$$

$$E = E_0 + t_1 \cos(ak) + t_2 \cos(2ak) + \dots$$



## Модель перескоків в 2D

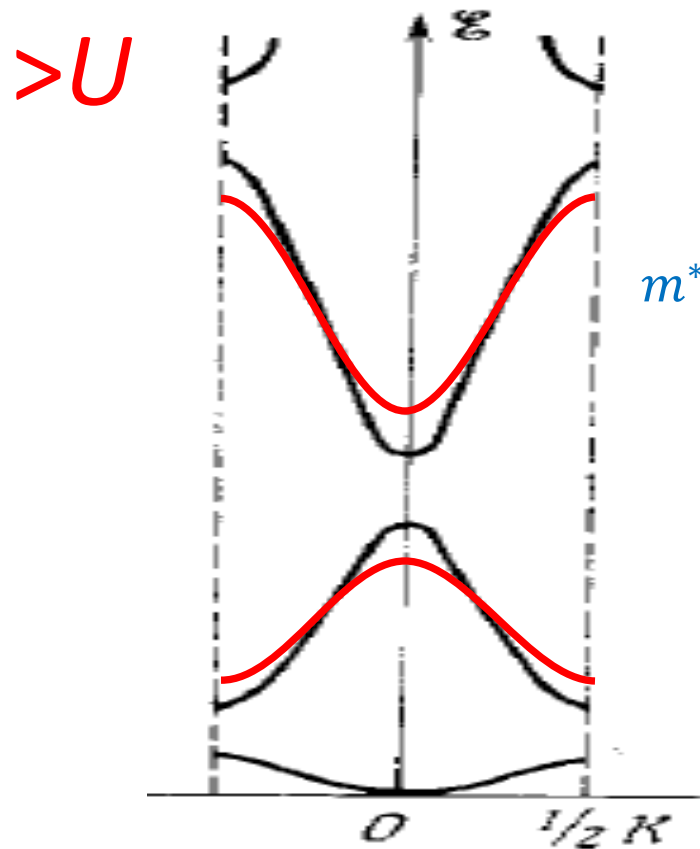
$$E = E_0 + t_1(\cos(ak_x) + \cos(ak_y)) + t_2(\cos(2ak_x) + \cos(2ak_y)) + \dots$$



$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 + t_1 \cos(ka) + t_2 \cos(2ka)$$

# Наближення слабого зв'язку

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} (\mathcal{E}_q^0 + \mathcal{E}_{q-K}^0) \pm \left[ \left( \frac{\mathcal{E}_q^0 - \mathcal{E}_{q-K}^0}{2} \right)^2 + |U_K|^2 \right]^{1/2}$$

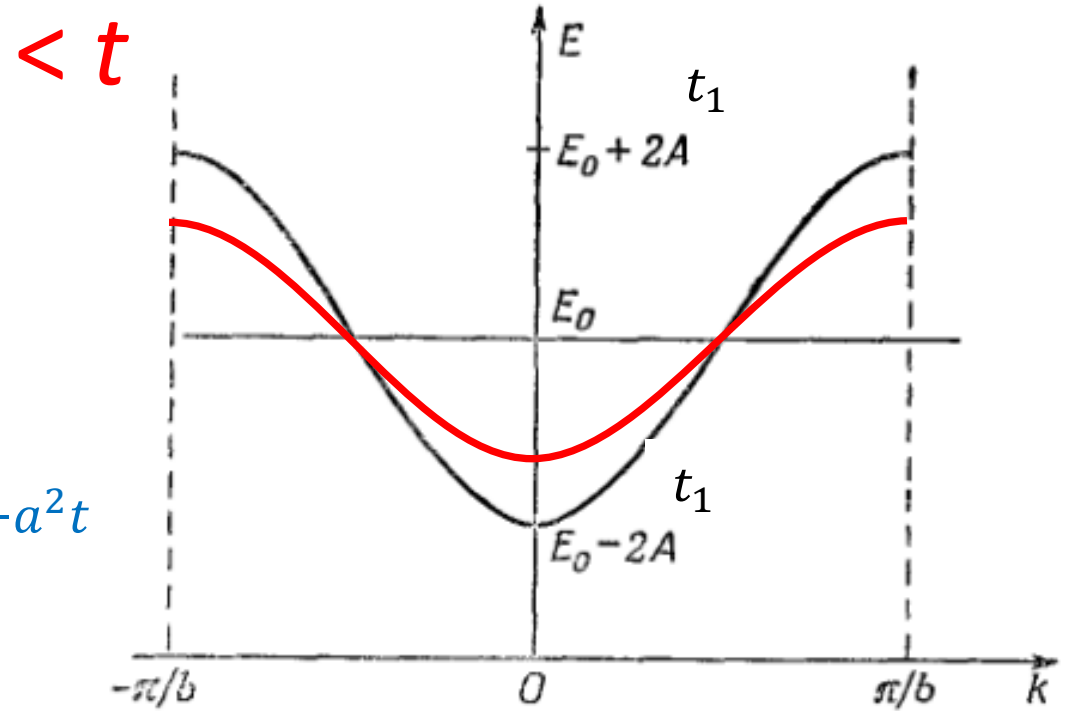


$$m^* = \pm \frac{a^2 m^2 |U_{nK}|}{(n\pi)^2}$$

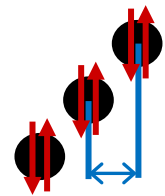
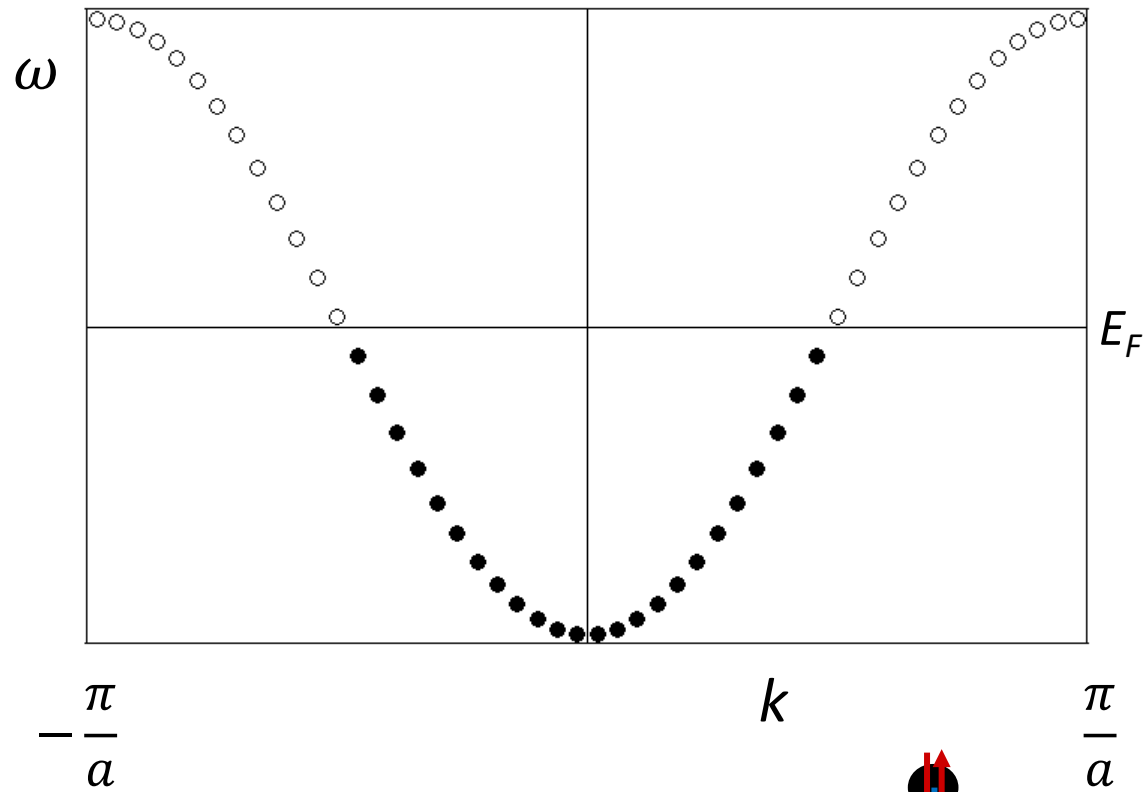
$$m^* = -a^2 t$$

# Модель перескоків

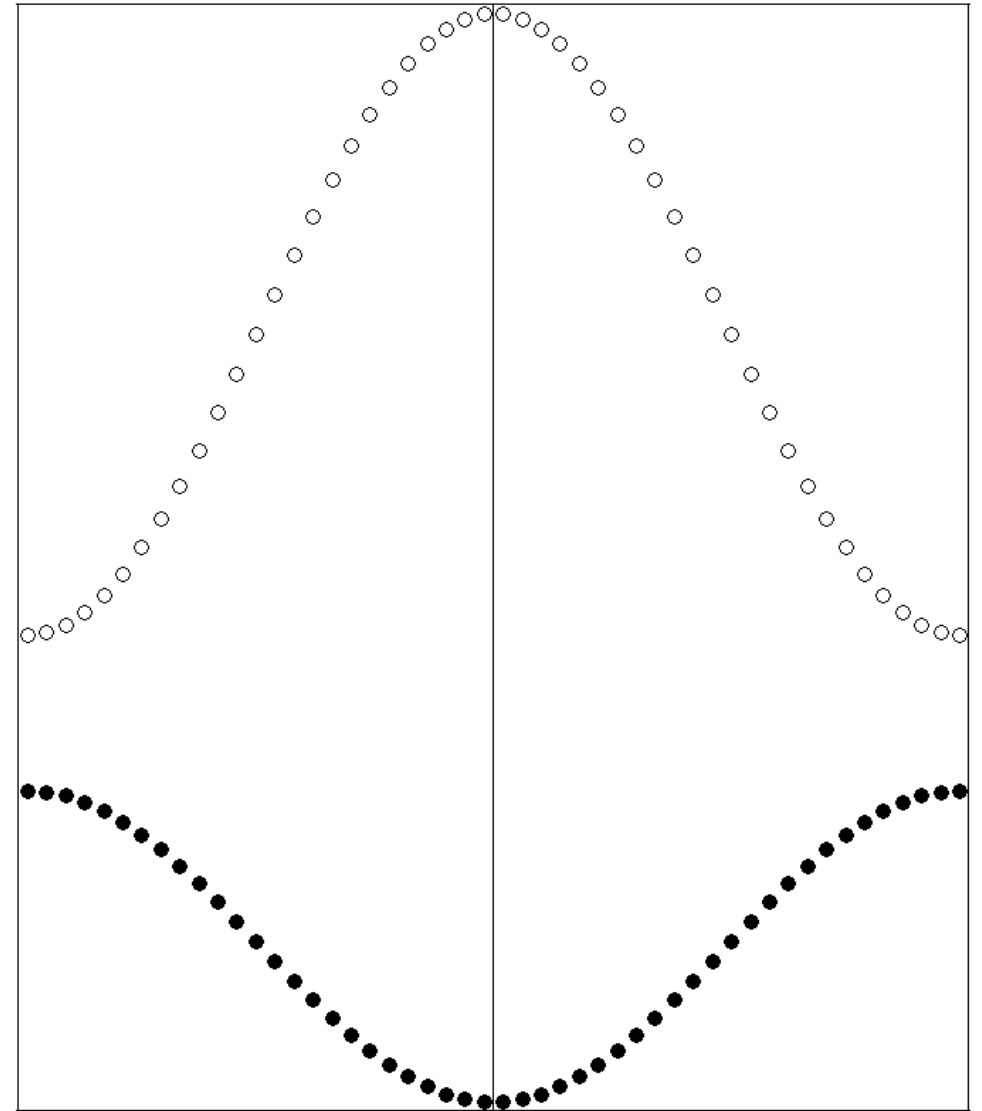
$$E = E_0 + t_1 \cos(ak) + t_2 \cos(2ak) + \dots$$



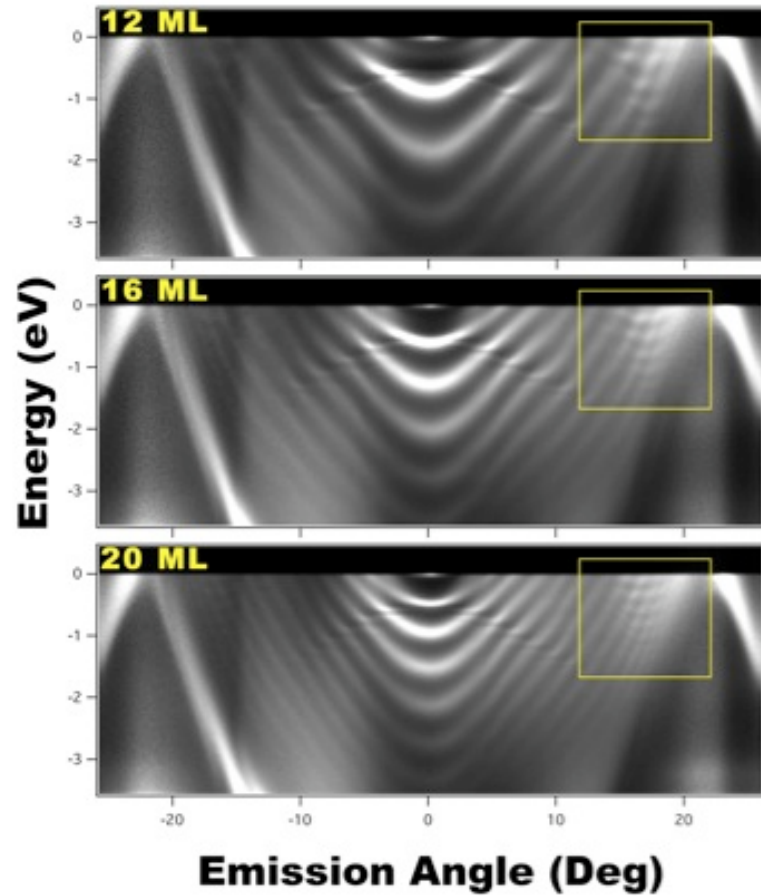
# Metal vs Insulator



$$dk = 2\pi/L$$

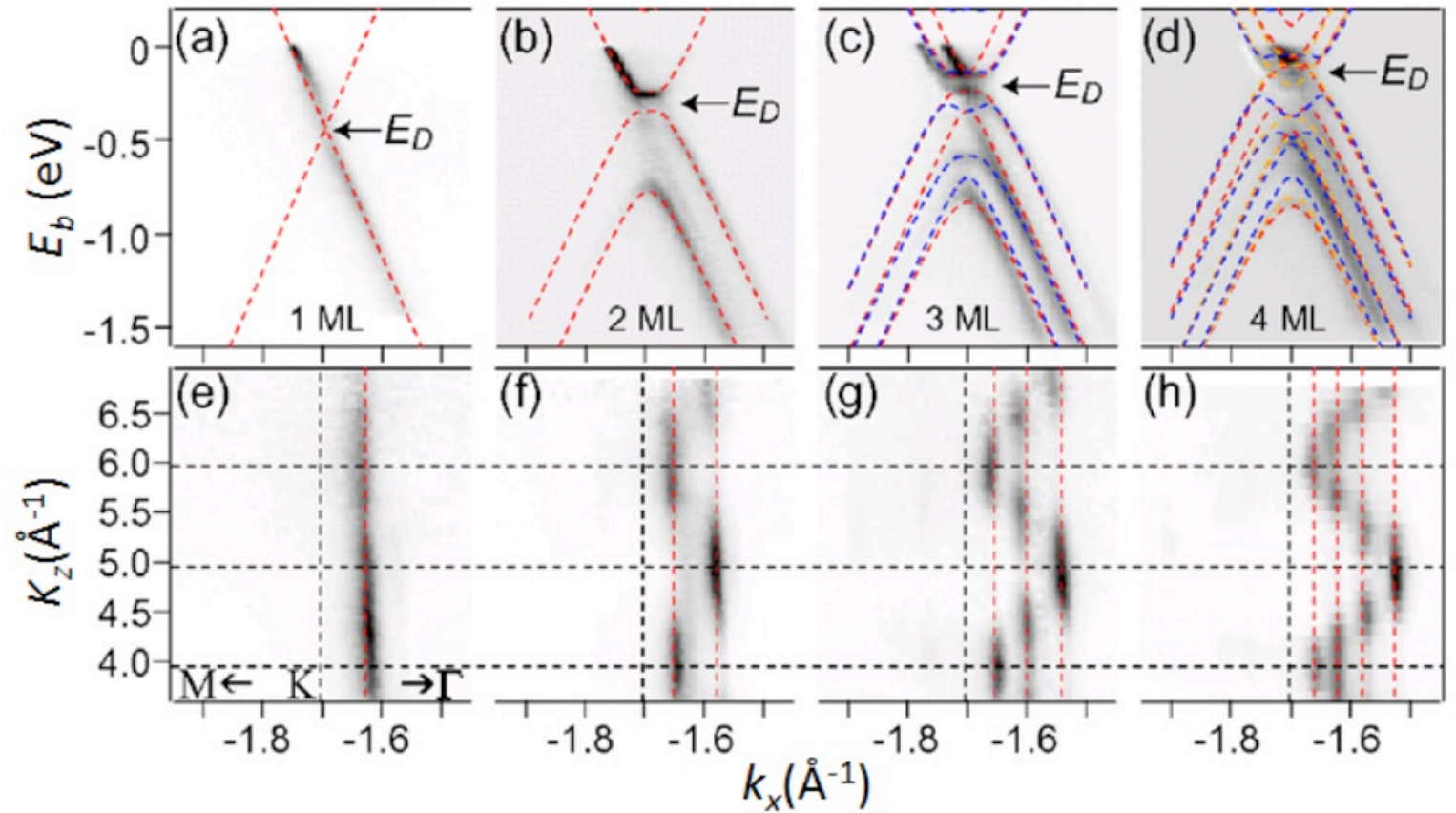


## Quantum confinement



ARPES data for atomically-uniform Ag films of 12, 16 and 20 monolayers (ML) grown on Si(111)-(7x7) substrates

<http://groups.mrl.uiuc.edu/chiang/Speer/Nathan%20J%20Speer/Umklapp-Mediated%20Quantized%20States.html>



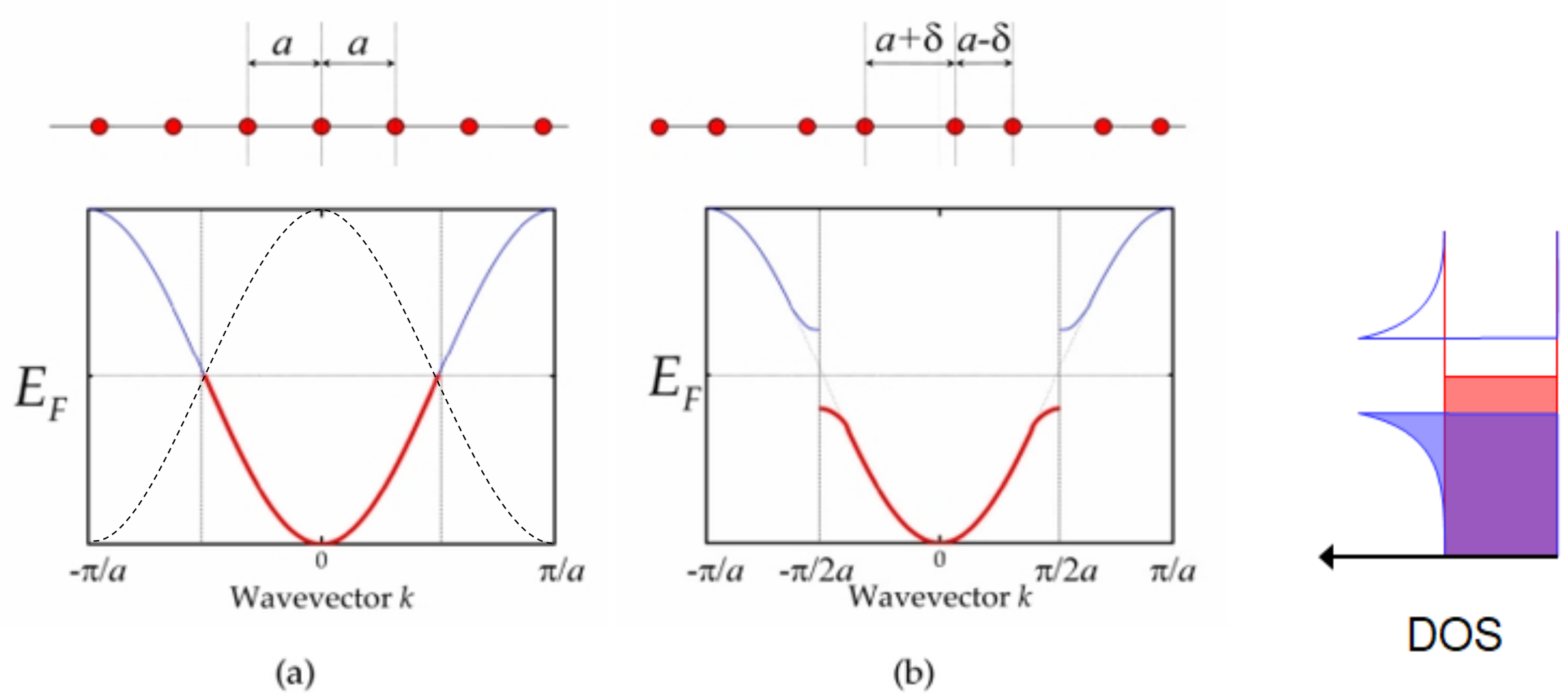
ARPES data on graphene multilayers

V. N. Strocov <https://arxiv.org/abs/1801.07505>

## *Лекція 4: Перехід Паєрлса*

- Чому димеризація має призвести до відкриття нової щілини на рівні Фермі?
- Де виграш в енергії та як він залежить від температури?
- Що таке нестинг поверхонь Фермі?
- Приклади ідеального нестингу в 2D?

# Peierls transition and Fermi surface nesting

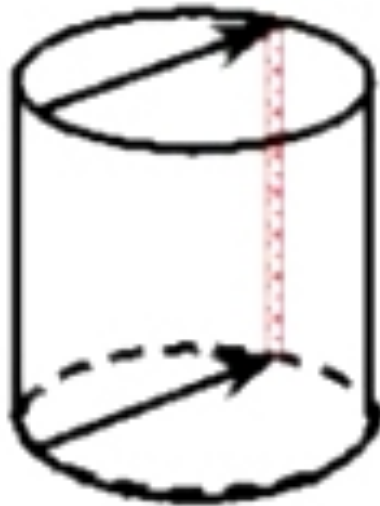




# Peierls transition and Fermi surface nesting



1D

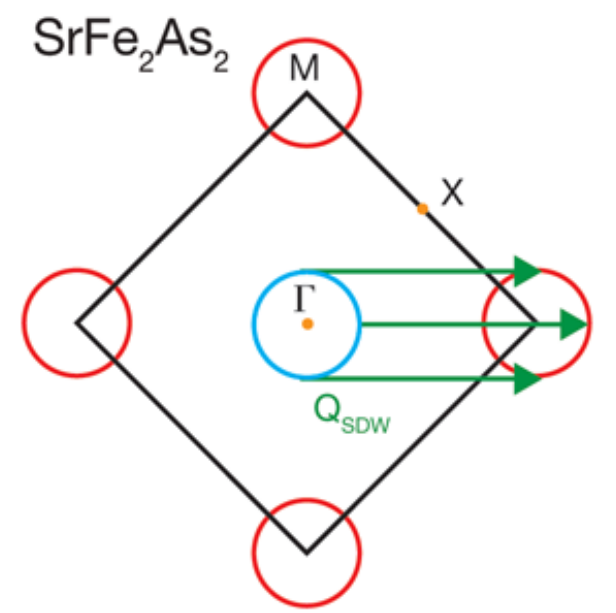
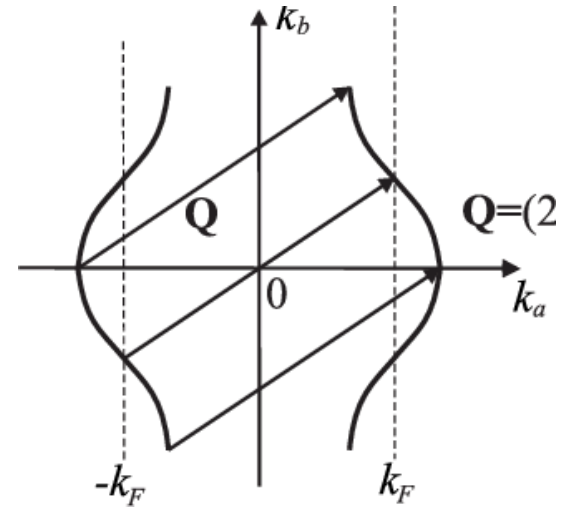
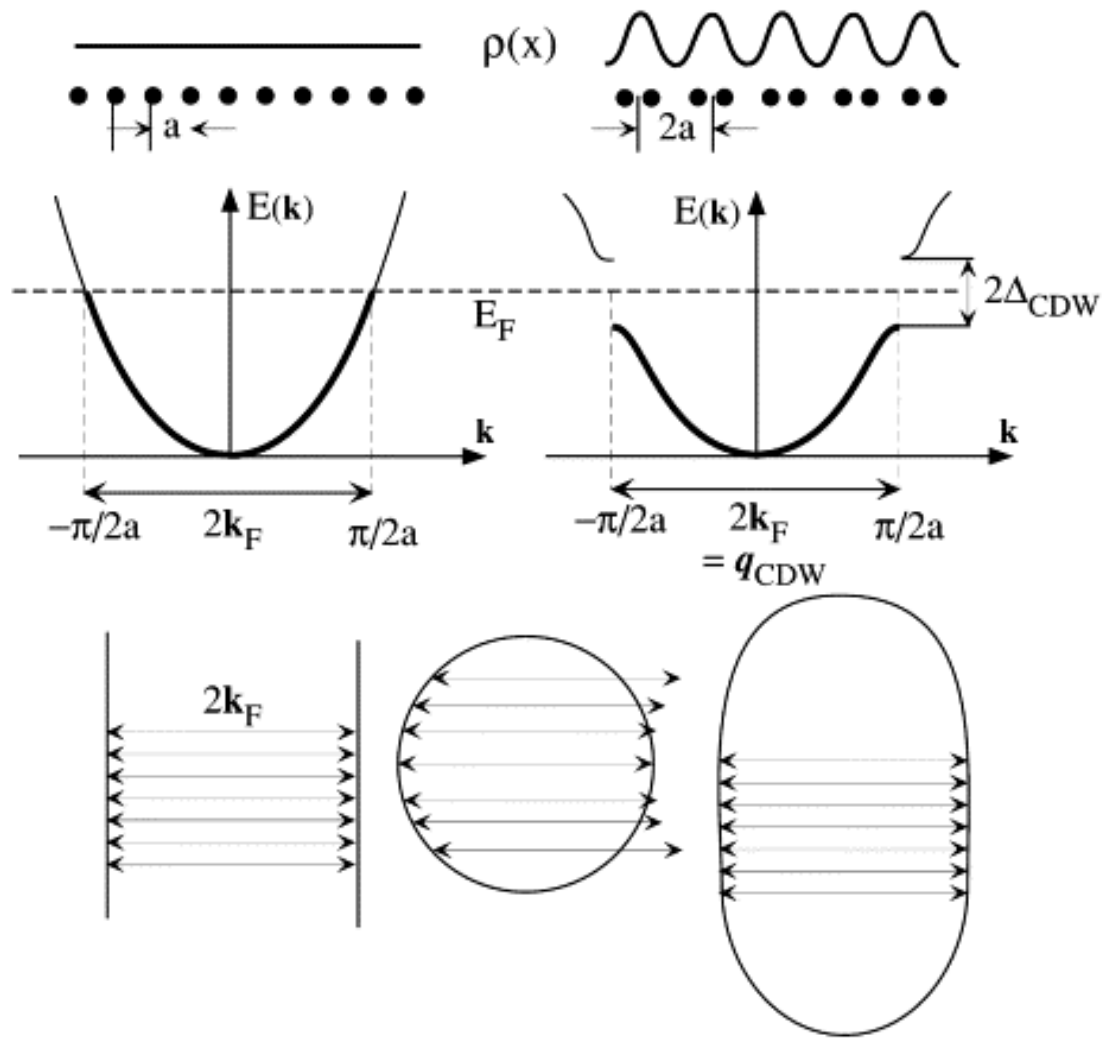


2D



3D

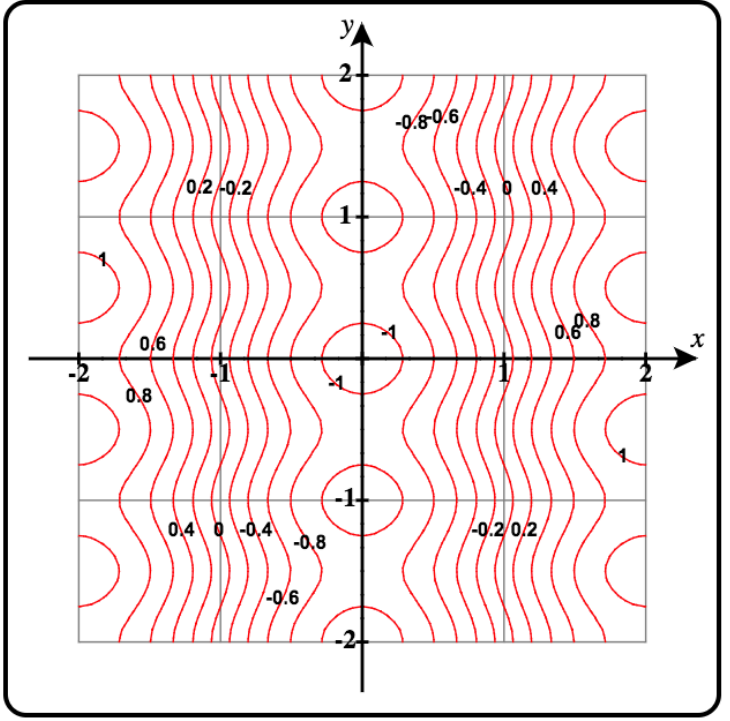
# Peierls transition and Fermi surface nesting





F

Graph 3D Mode



x = 1.963

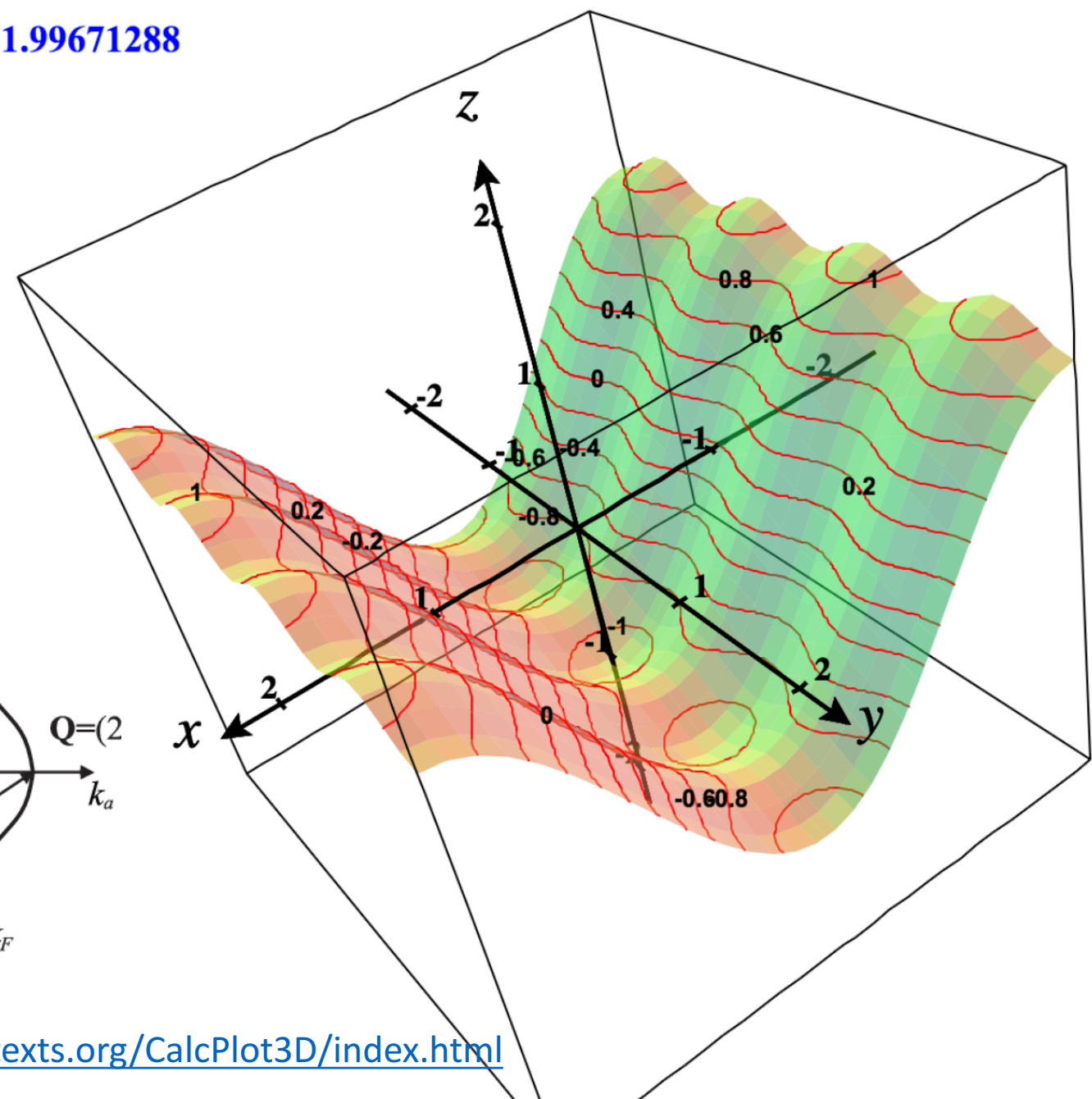
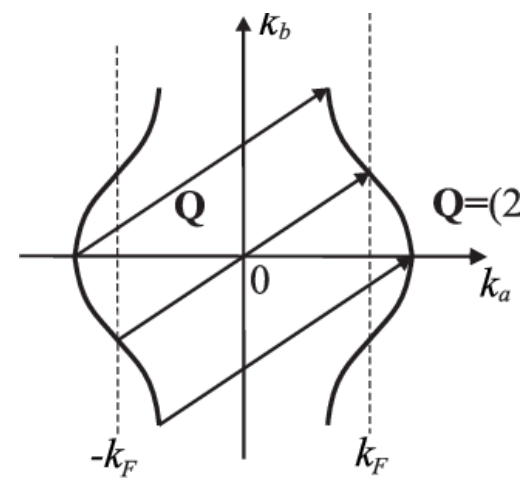
y = 1.963

Add to graph:

z =

Number of Gridlines

$f(1.9635, 1.9635) = 1.99671288$

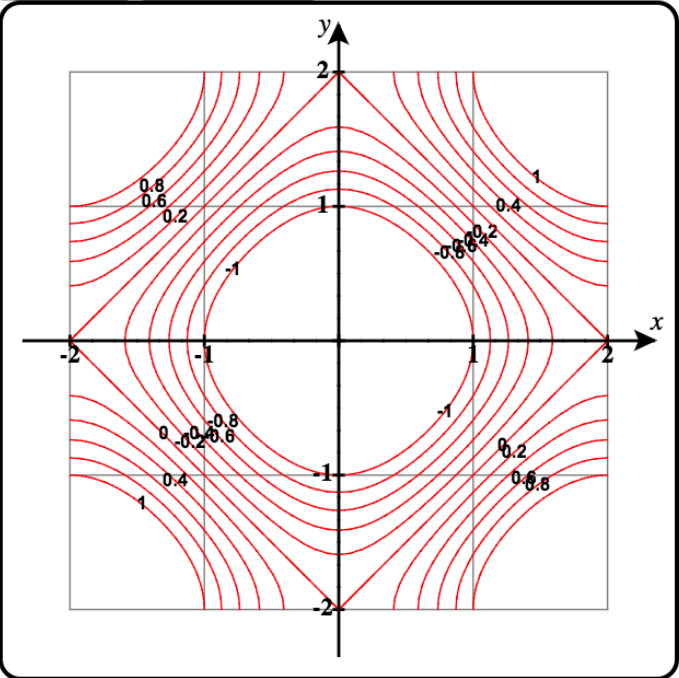


<https://c3d.libretexts.org/CalcPlot3D/index.html>



F

Graph 3D Mode



x = 1.963

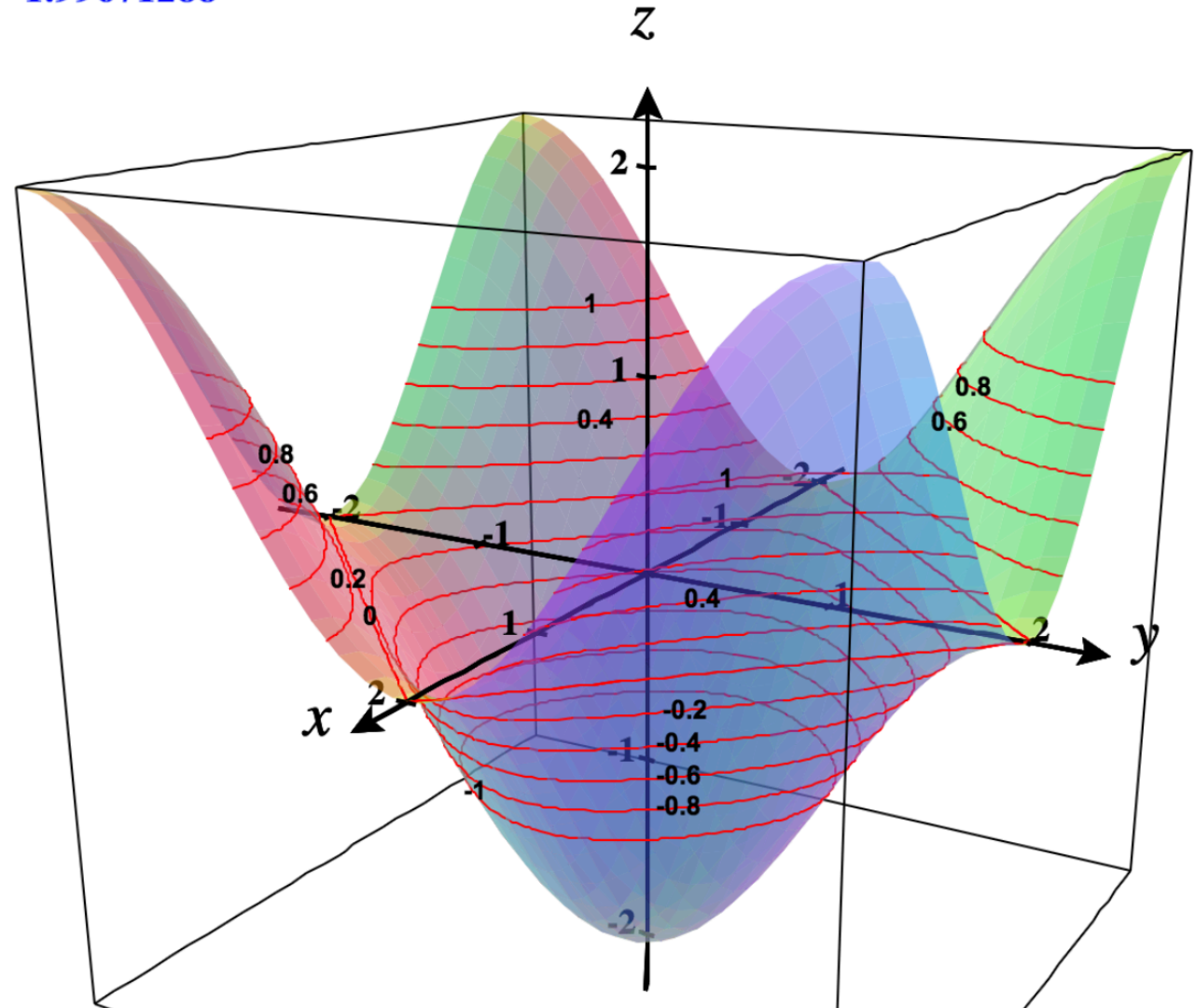
y = 1.963

Add to graph: Select...

z = -cos(pi\*x/2)-cos(pi\*y/2)

Number of Gridlines 30

$f(1.9635, 1.9635) = 1.99671288$



*Лекції 5-6: Хвилі зарядової густини в дихалькогенідах перехідних металів та квазікристали*

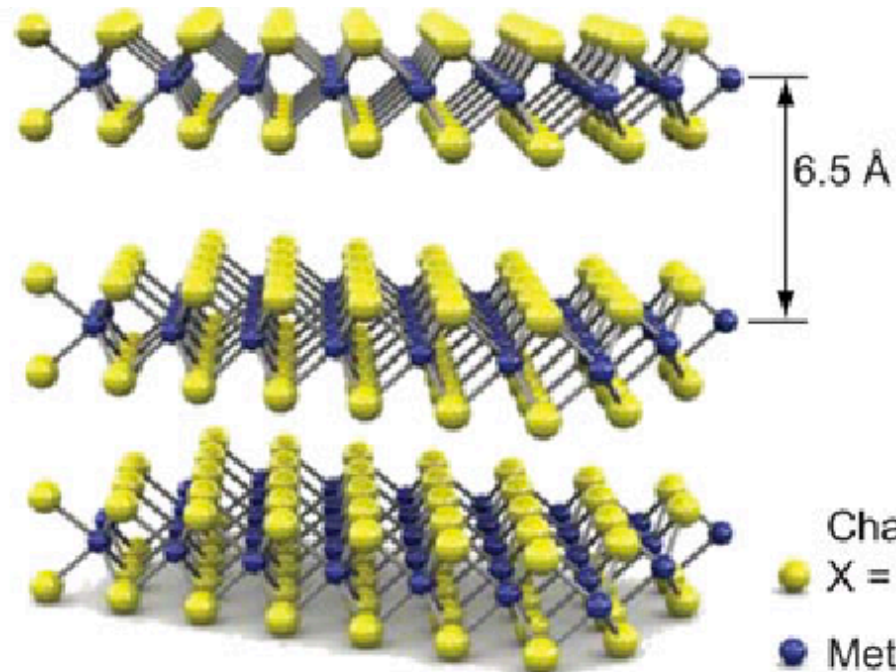
- Що таке компенсований метал?
- Що таке "нестинг" поверхонь Фермі?
- Чому залежить від розмірності простору?
- Що таке співрозмірність?
- Як визначити ступінь кристалічності квазікристалів?

# Transition metal dichalcogenides: crystal structure

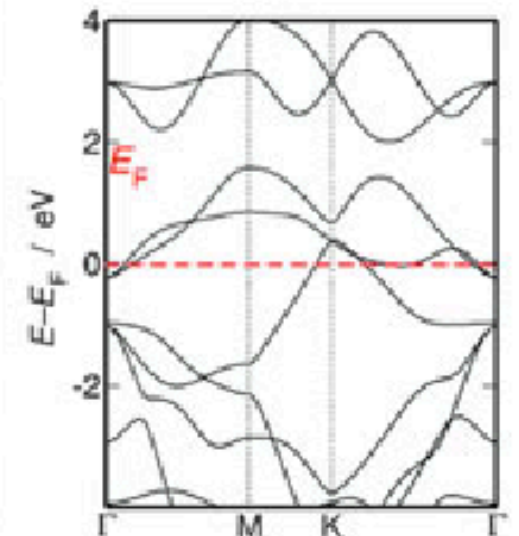
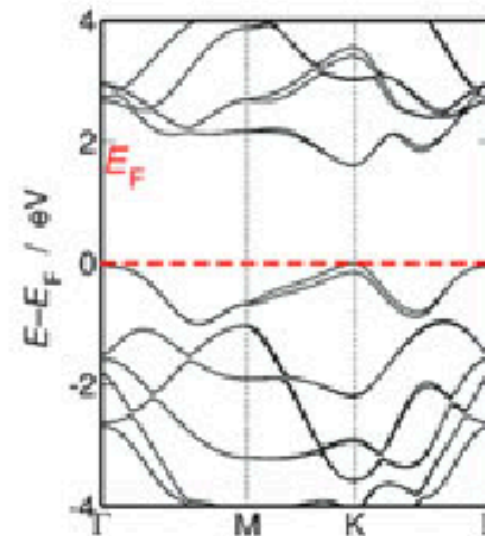
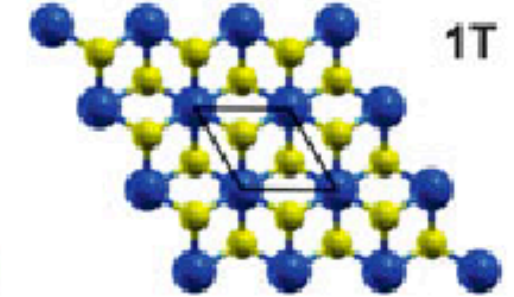
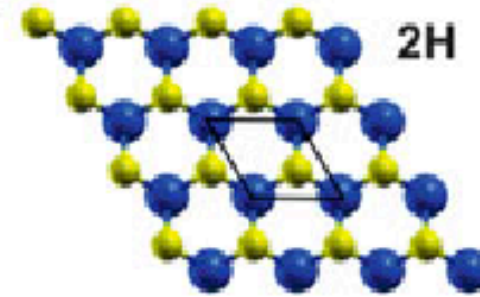
## Electronic properties of transition-metal dichalcogenides

A. Kuc (2015) *Mrs Bulletin*

•DOI:[10.1557/MRS.2015.143](https://doi.org/10.1557/MRS.2015.143)

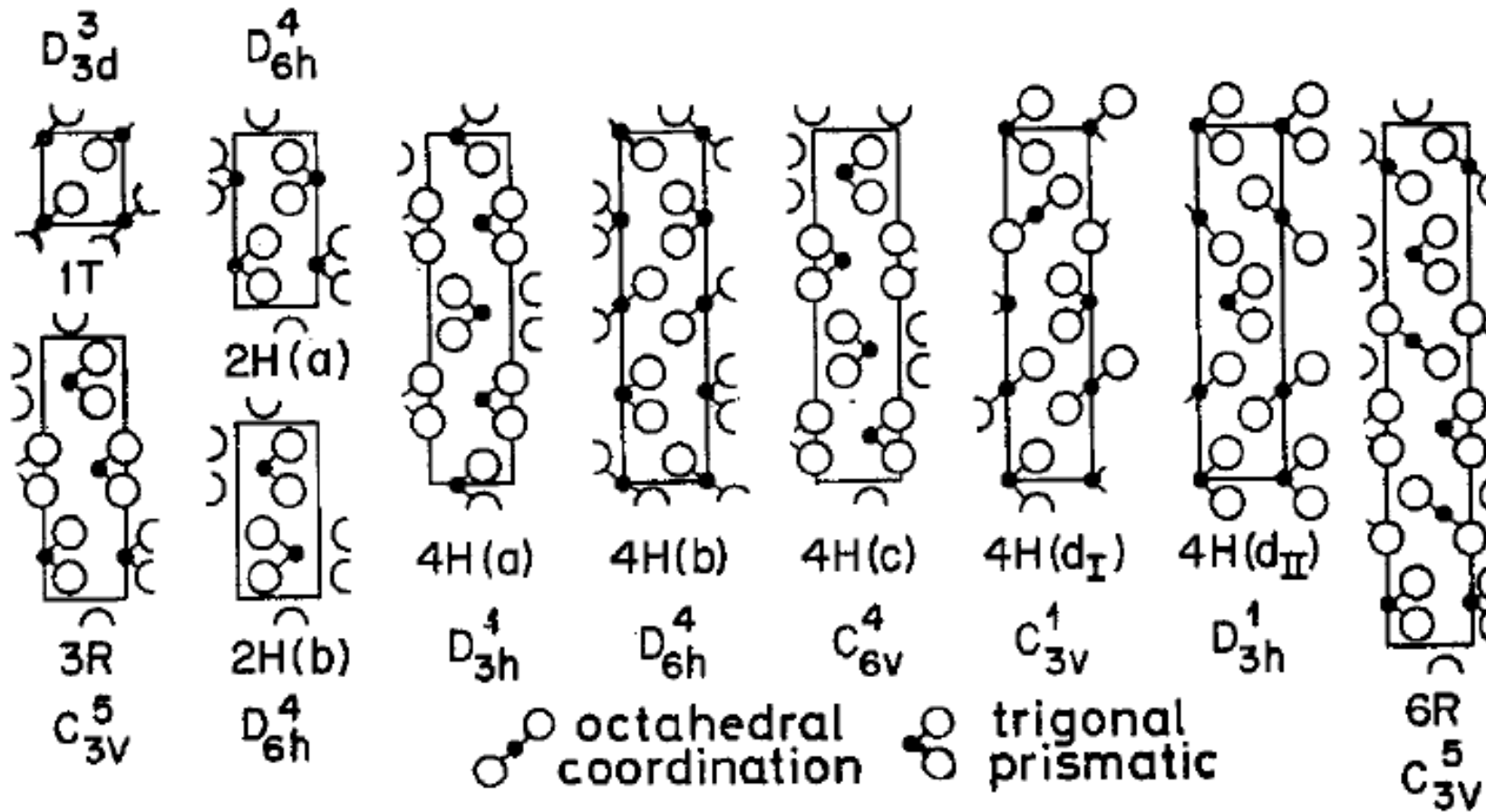


Chalcogenide:  
● X = S, Se, Te, ...  
● Metal atom:  
M = Mo, W, Ti, ...



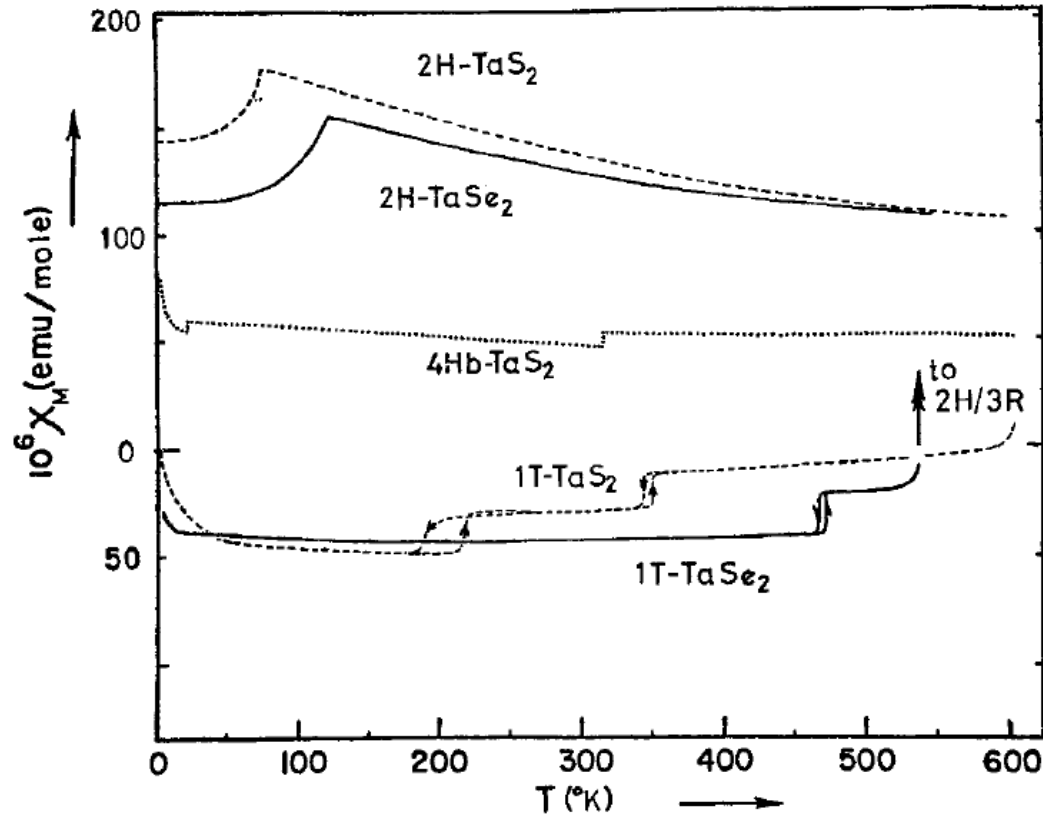
$k$  points

# CDW in transition metal dichalcogenides

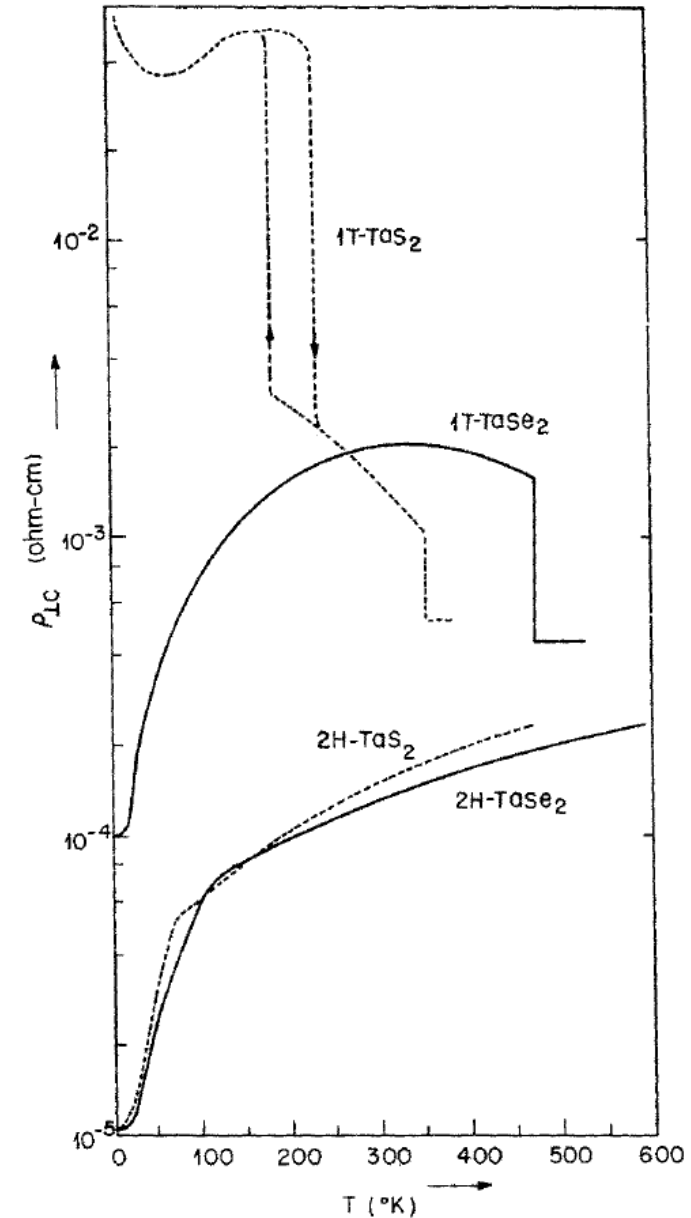


Various polytypes of the layer structure transition metal dichalcogenides

# CDW in transition metal dichalcogenides

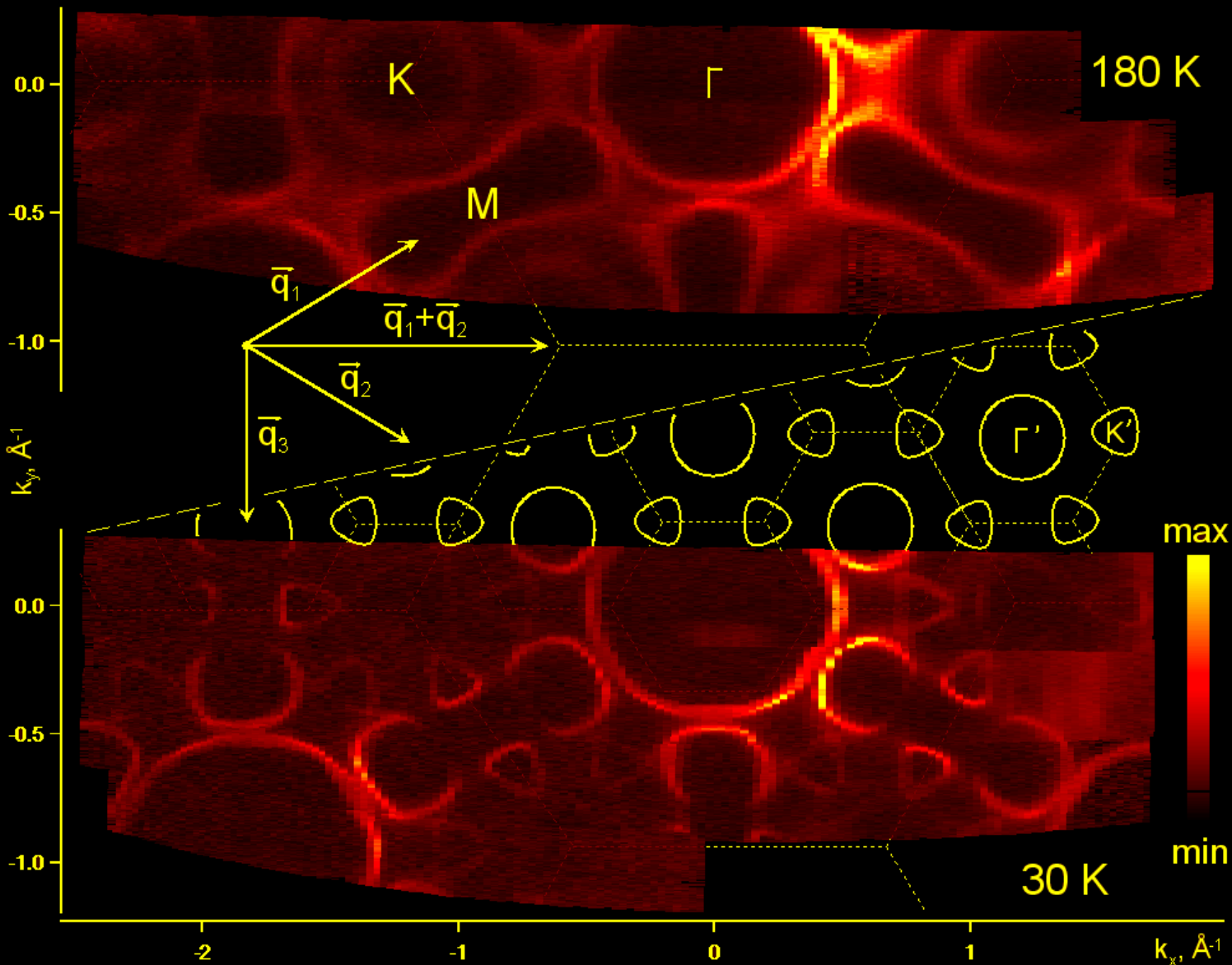
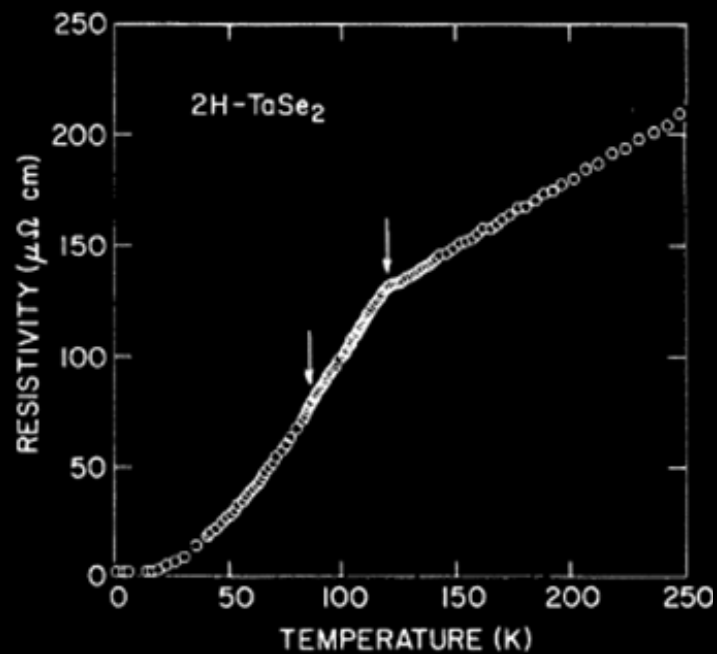
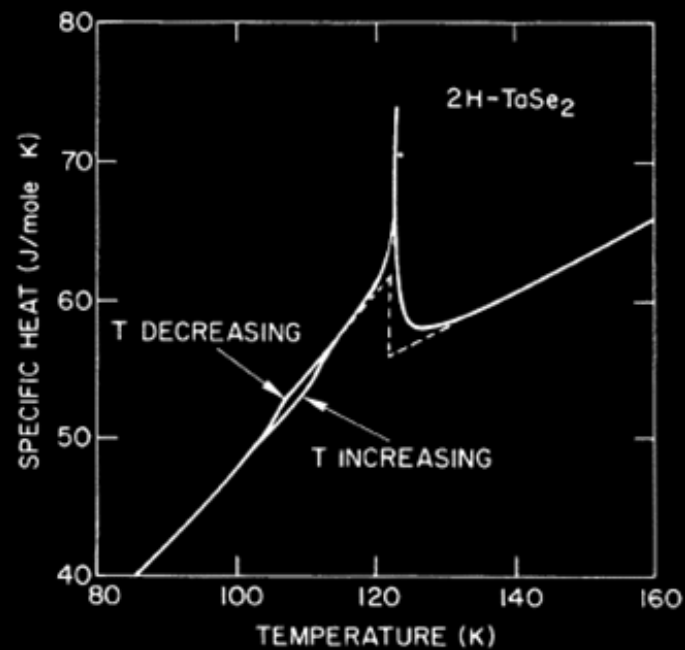


Molar susceptibilities versus  $T$  of a variety of tantalum dichalcogenides.

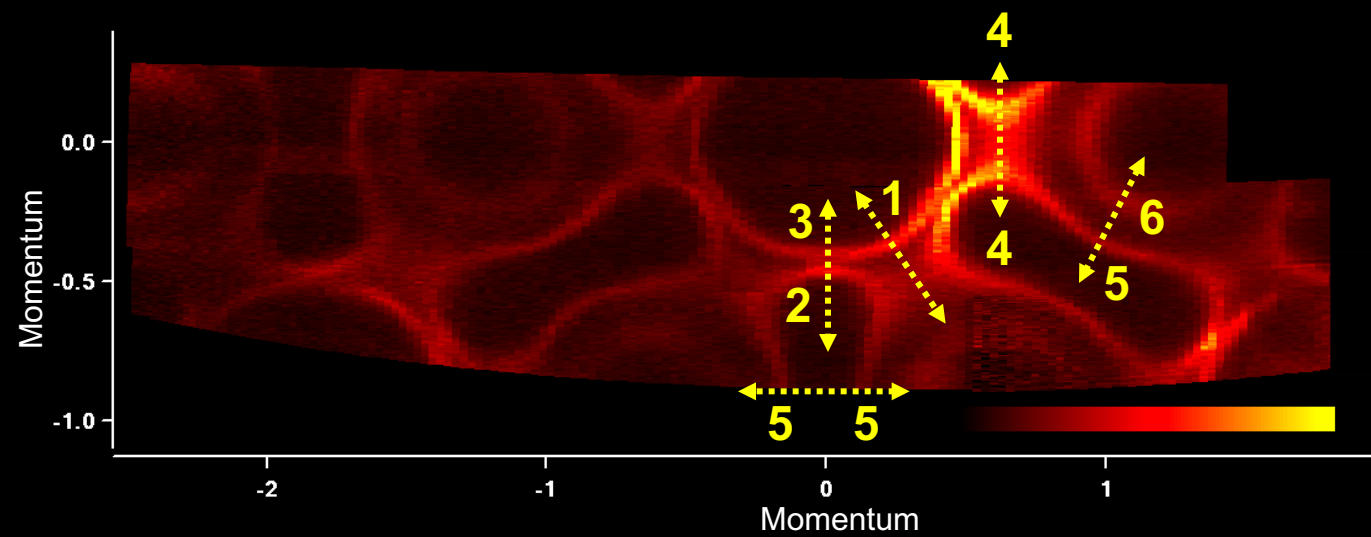
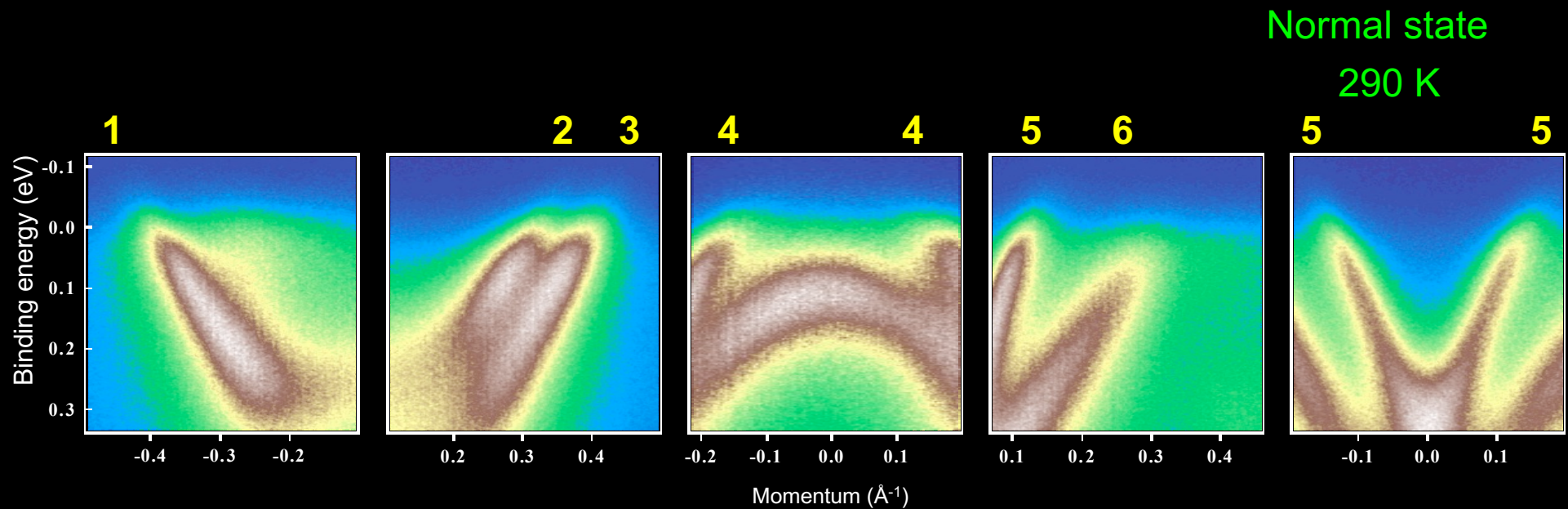


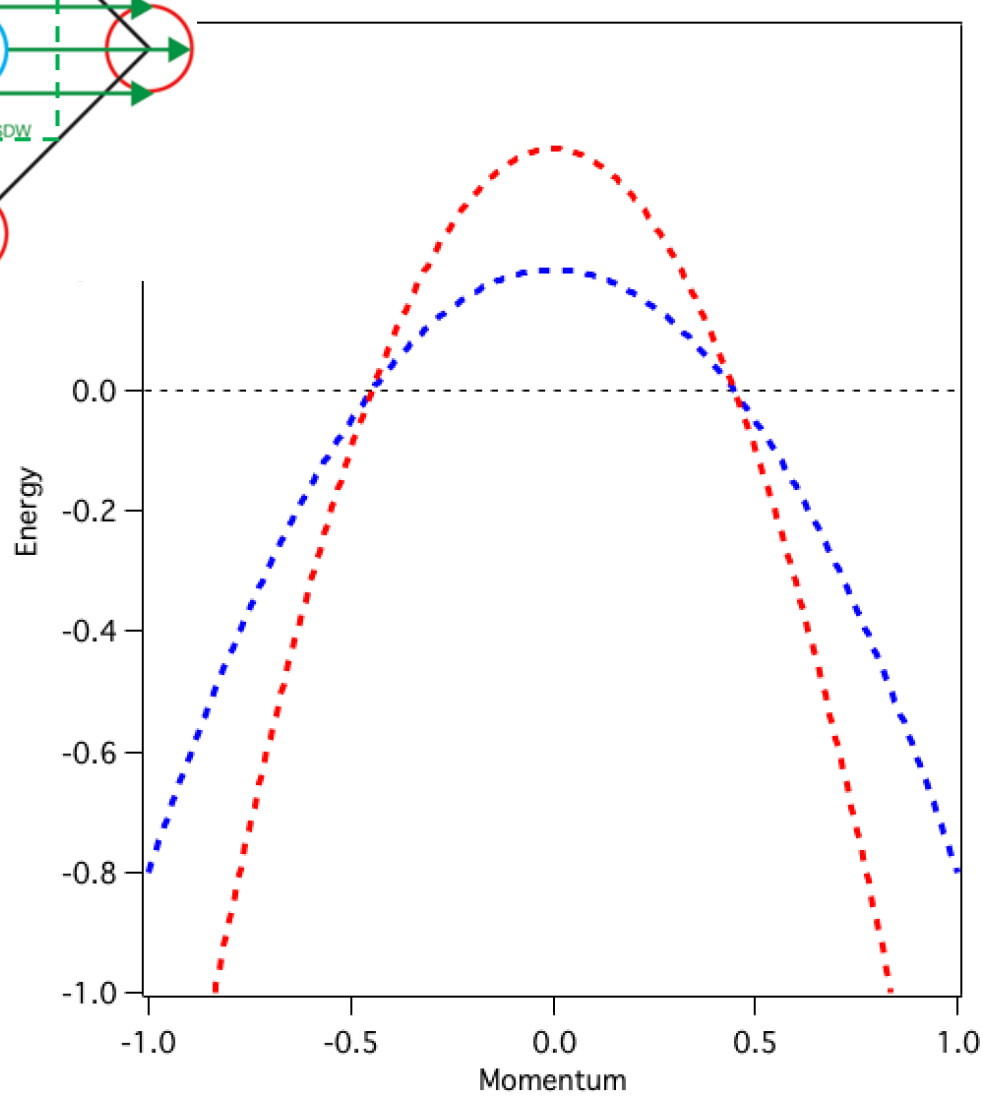
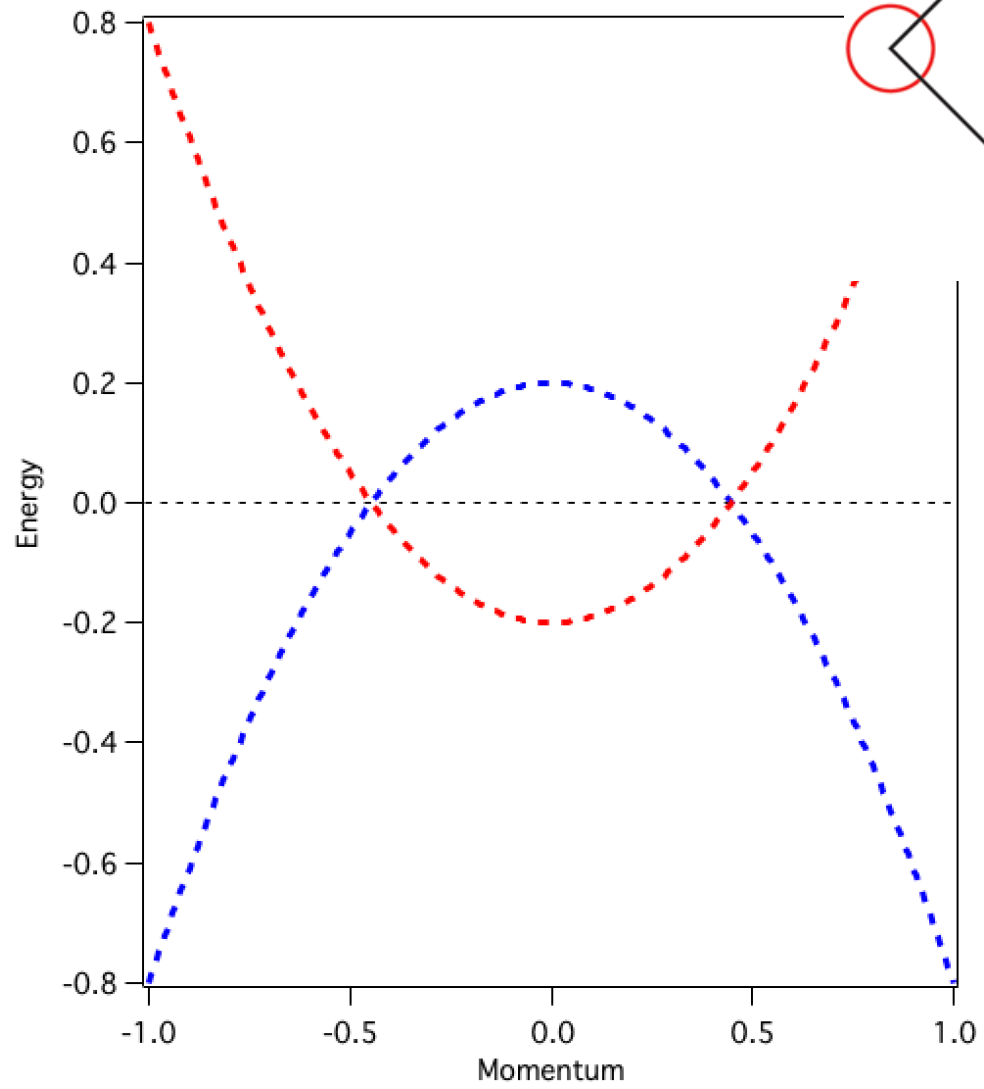
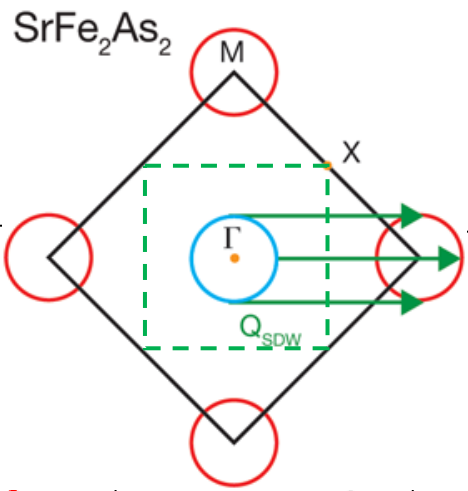


# CDW in TaSe<sub>2</sub>: commensurate CDW state

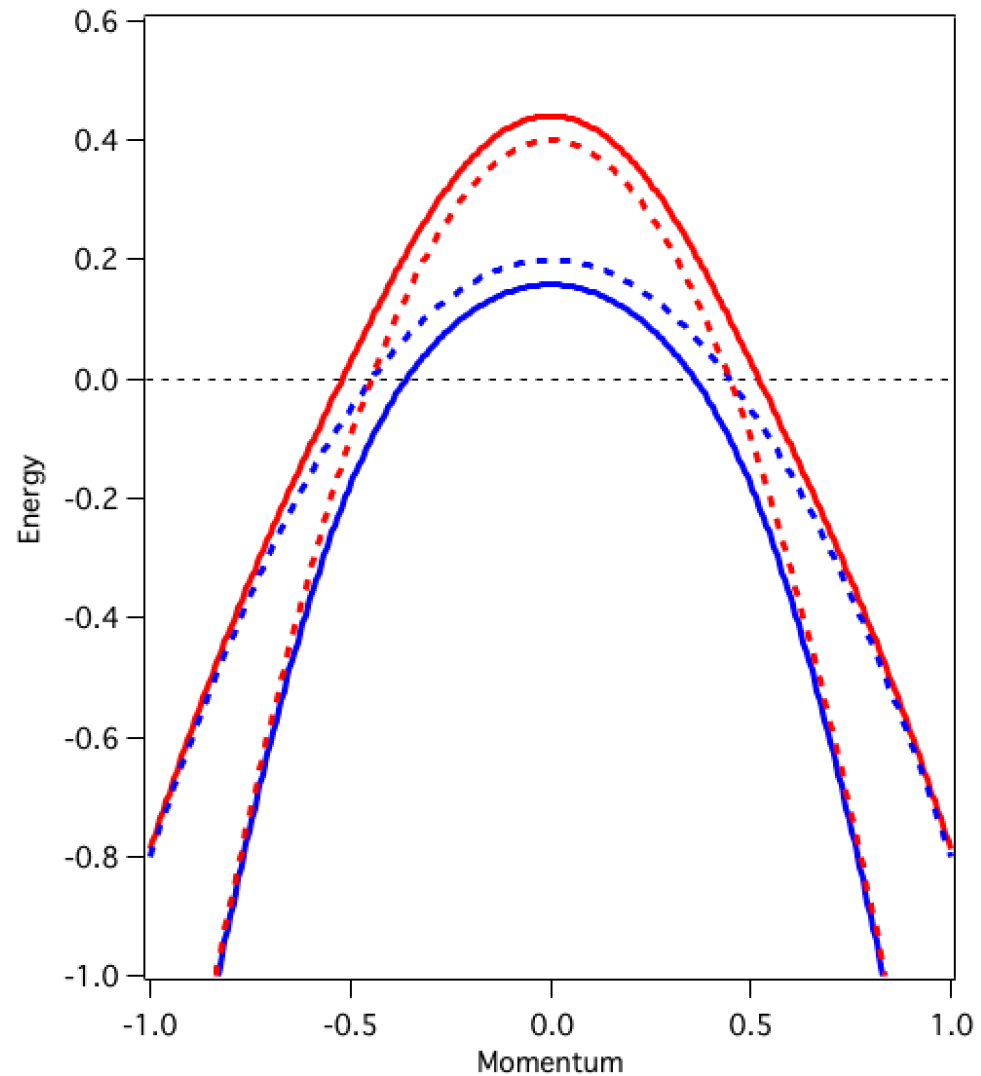
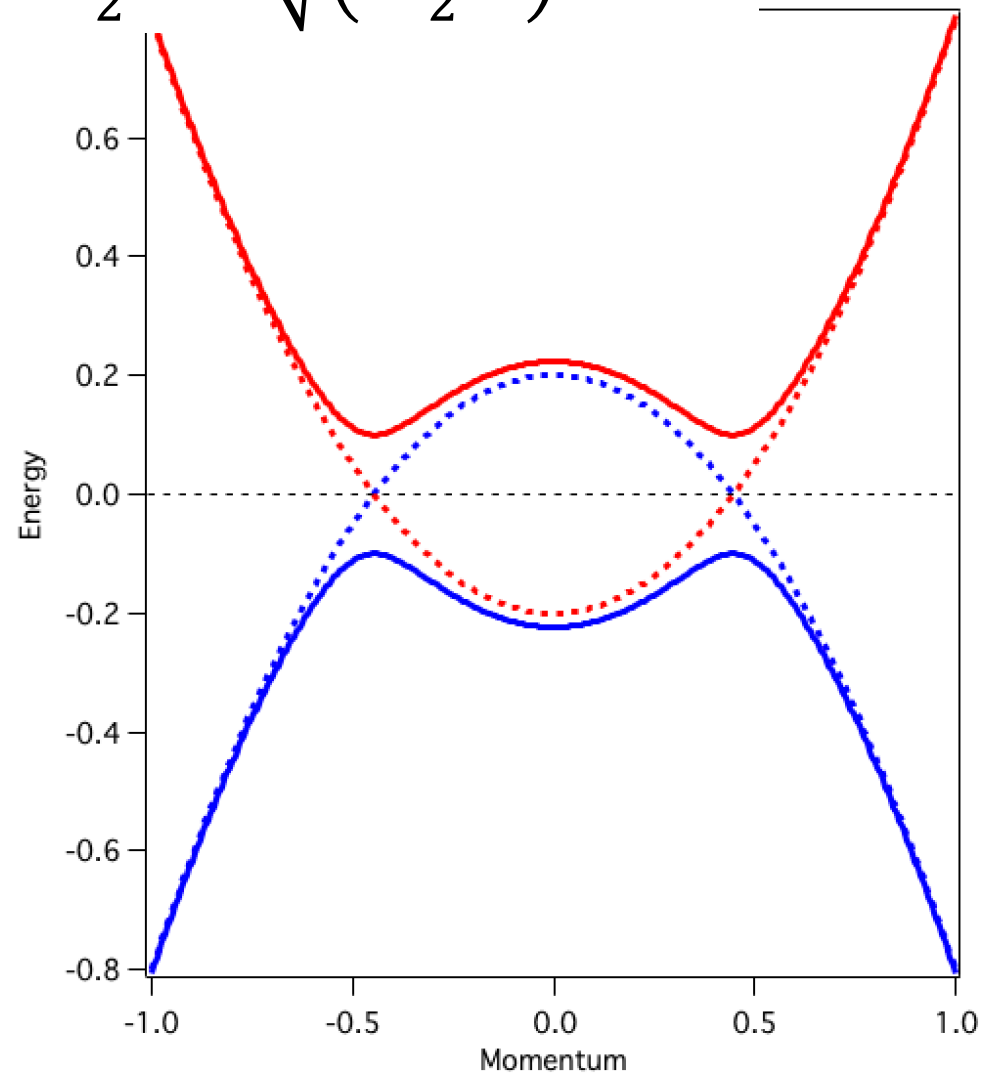


# Normal state of 2H-TaSe<sub>2</sub>

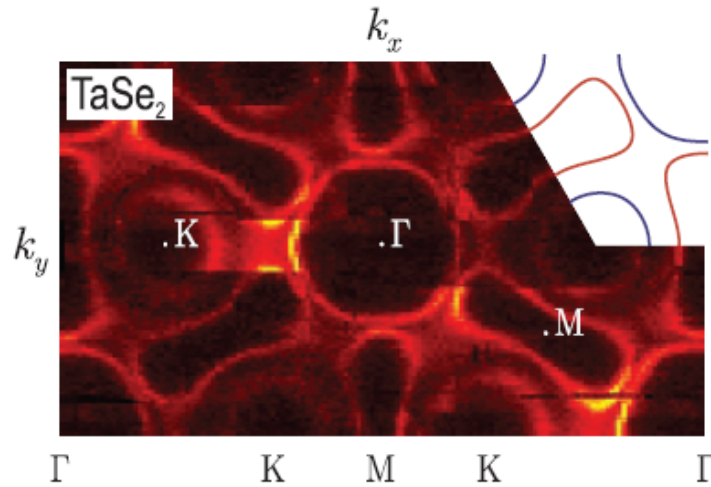




$$\varepsilon_{\pm} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2}\right)^2 + \Delta^2}$$

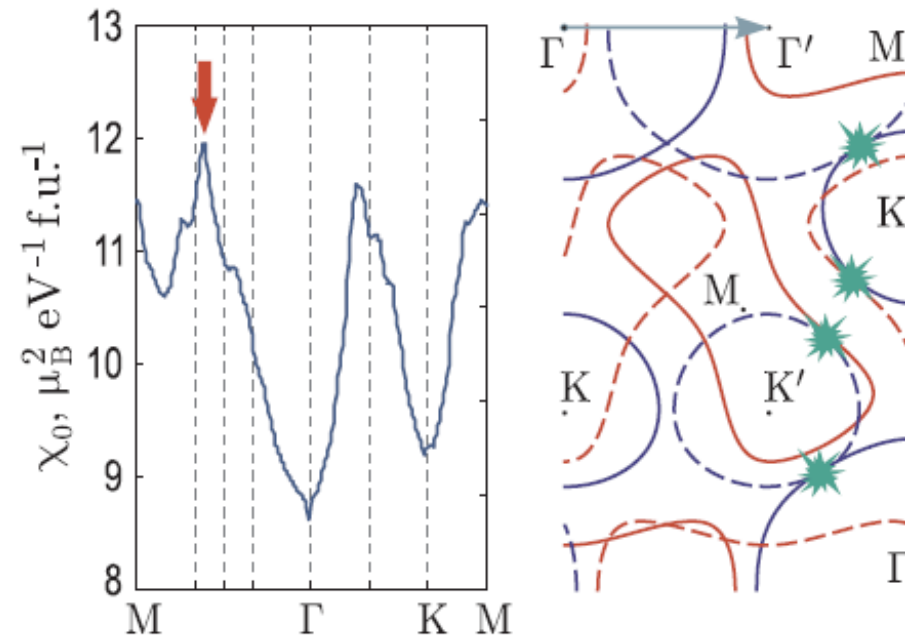
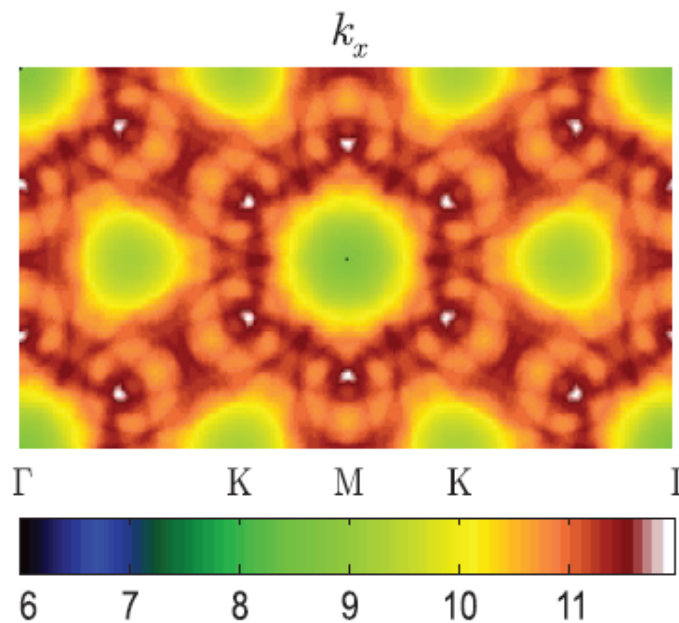


# Fermi surface nesting and Lindhard function

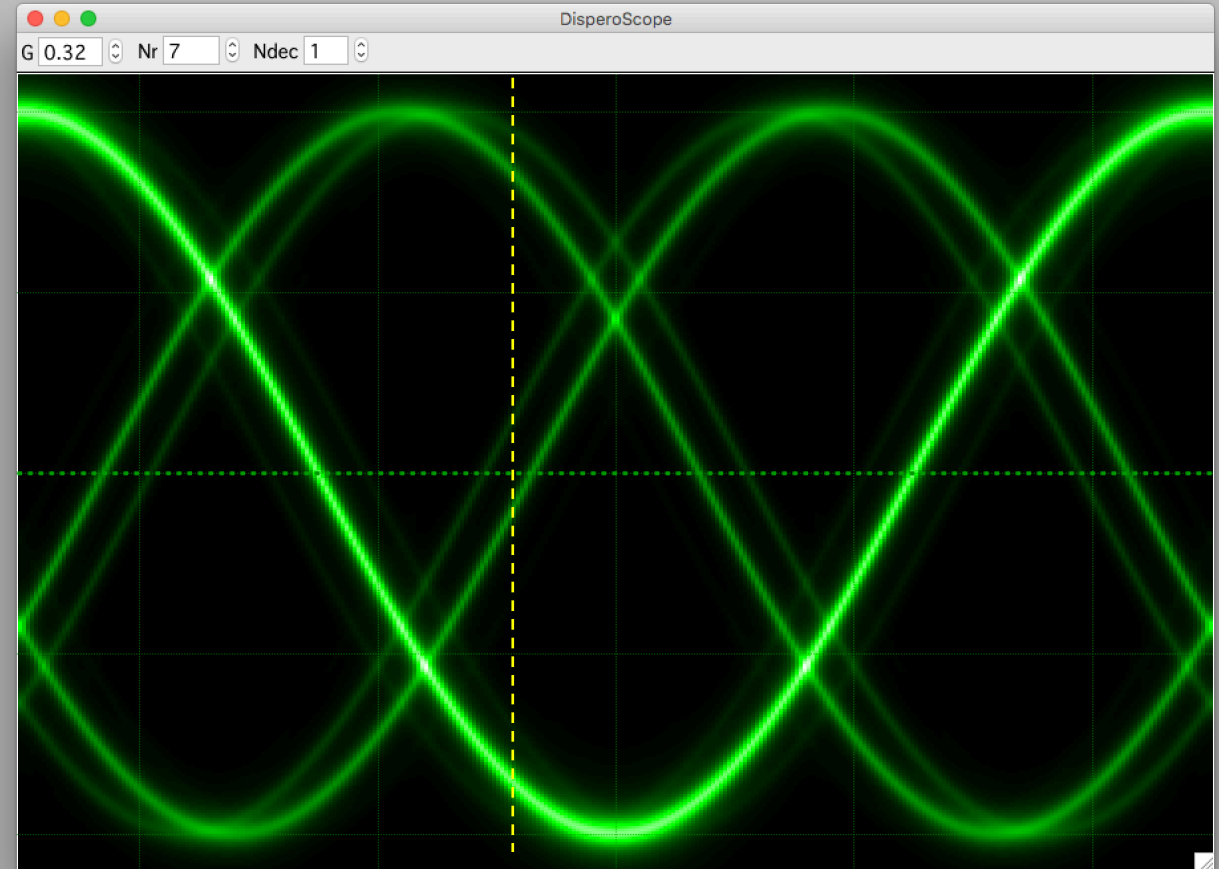
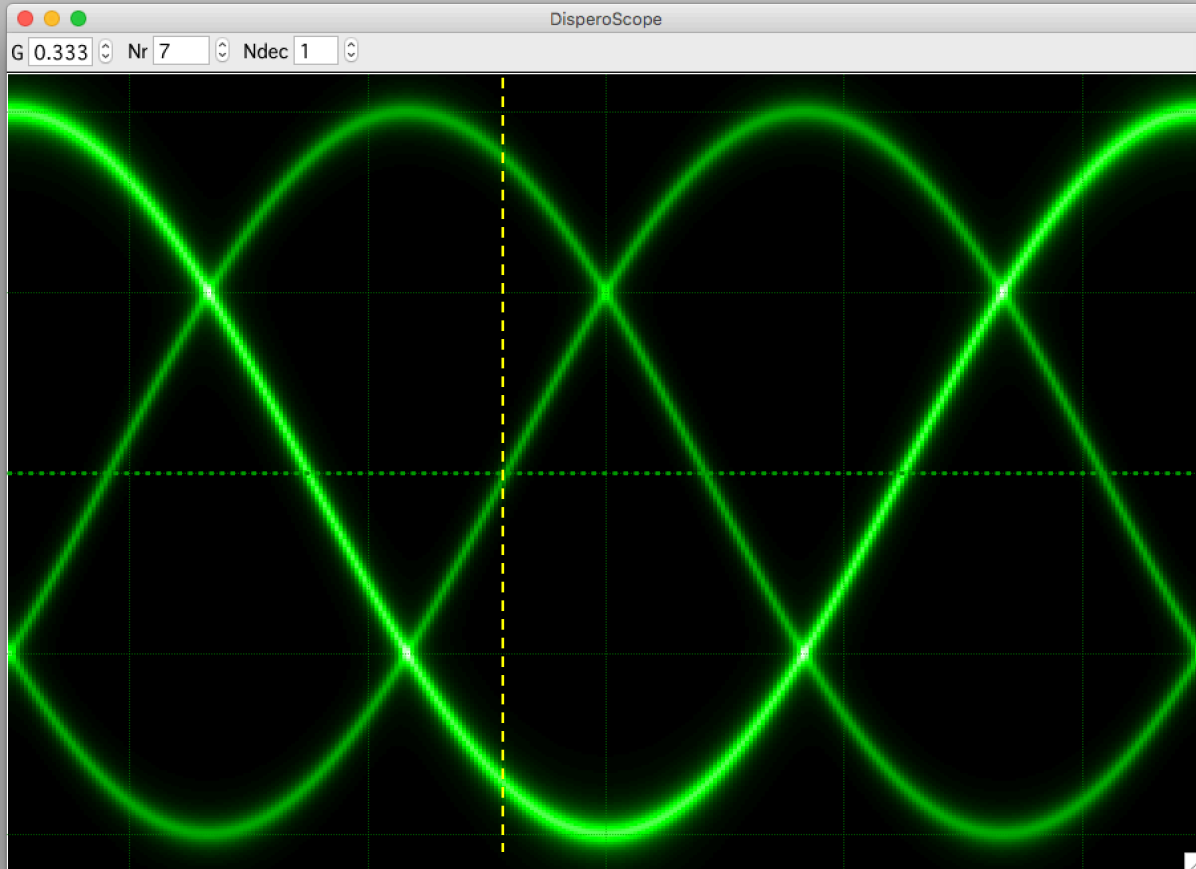


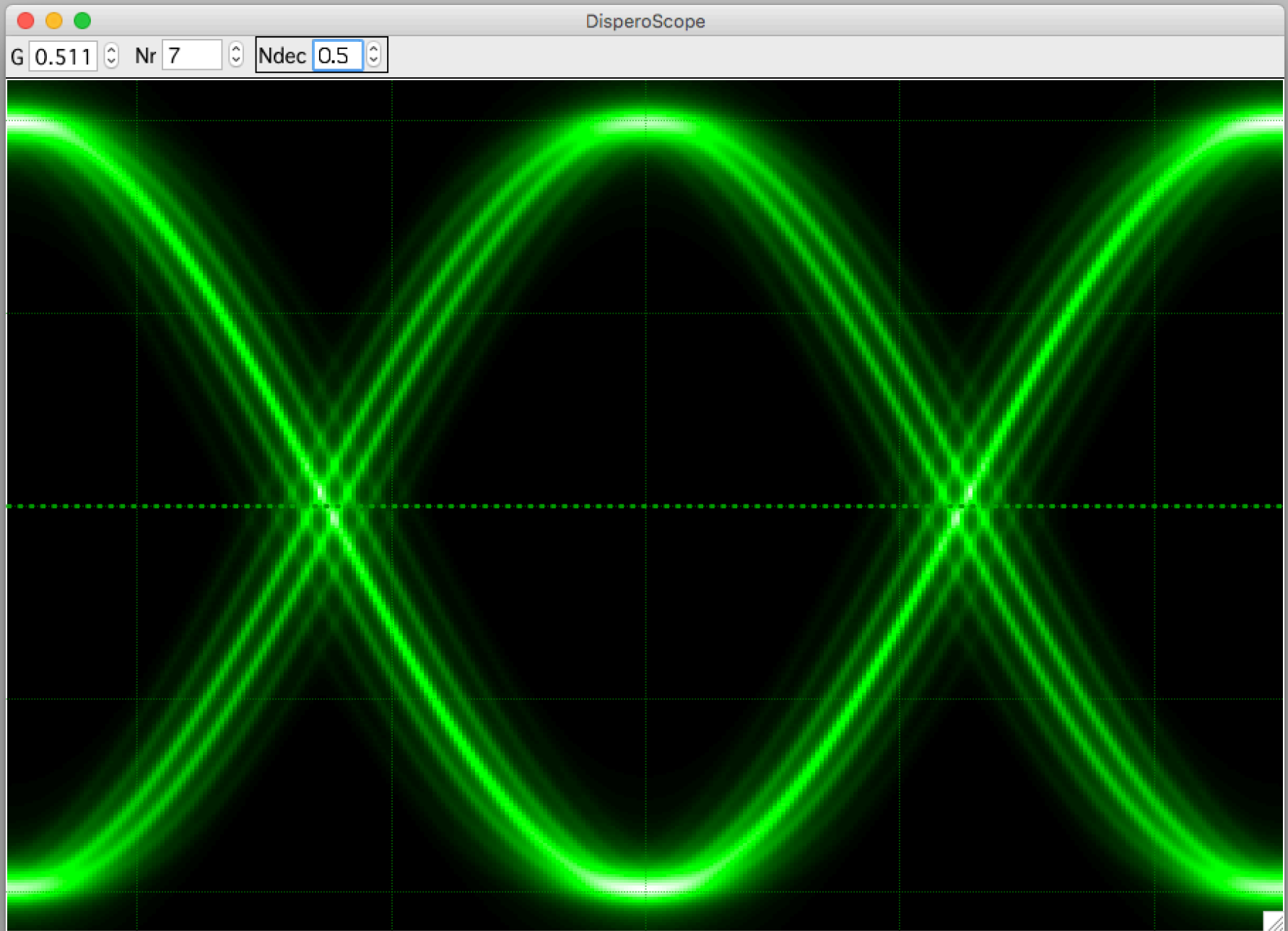
$$\chi_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} [n_{\text{F}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) - n_{\text{F}}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] / (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})$$

$$\chi = G \star G$$



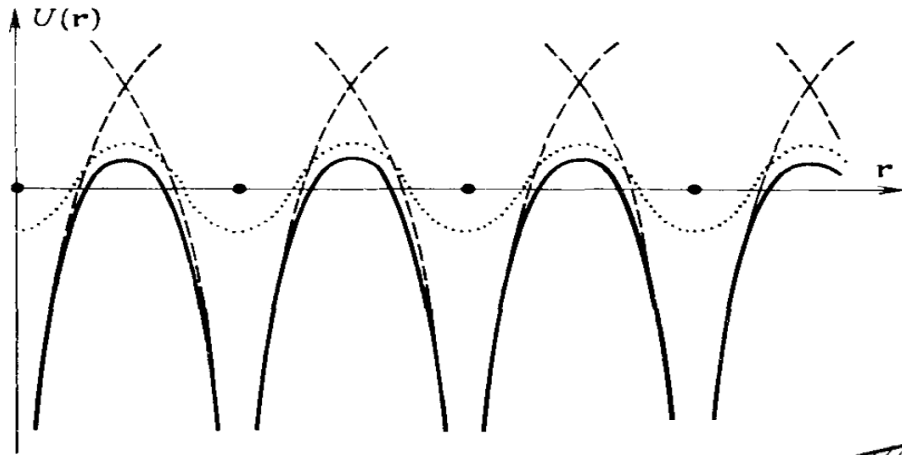
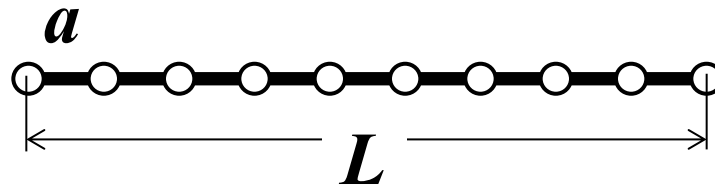
# Commensurate vs Incommensurate



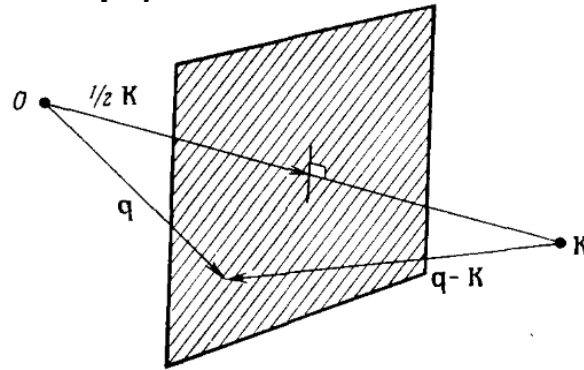


# Band gaps

У попередніх лекціях...

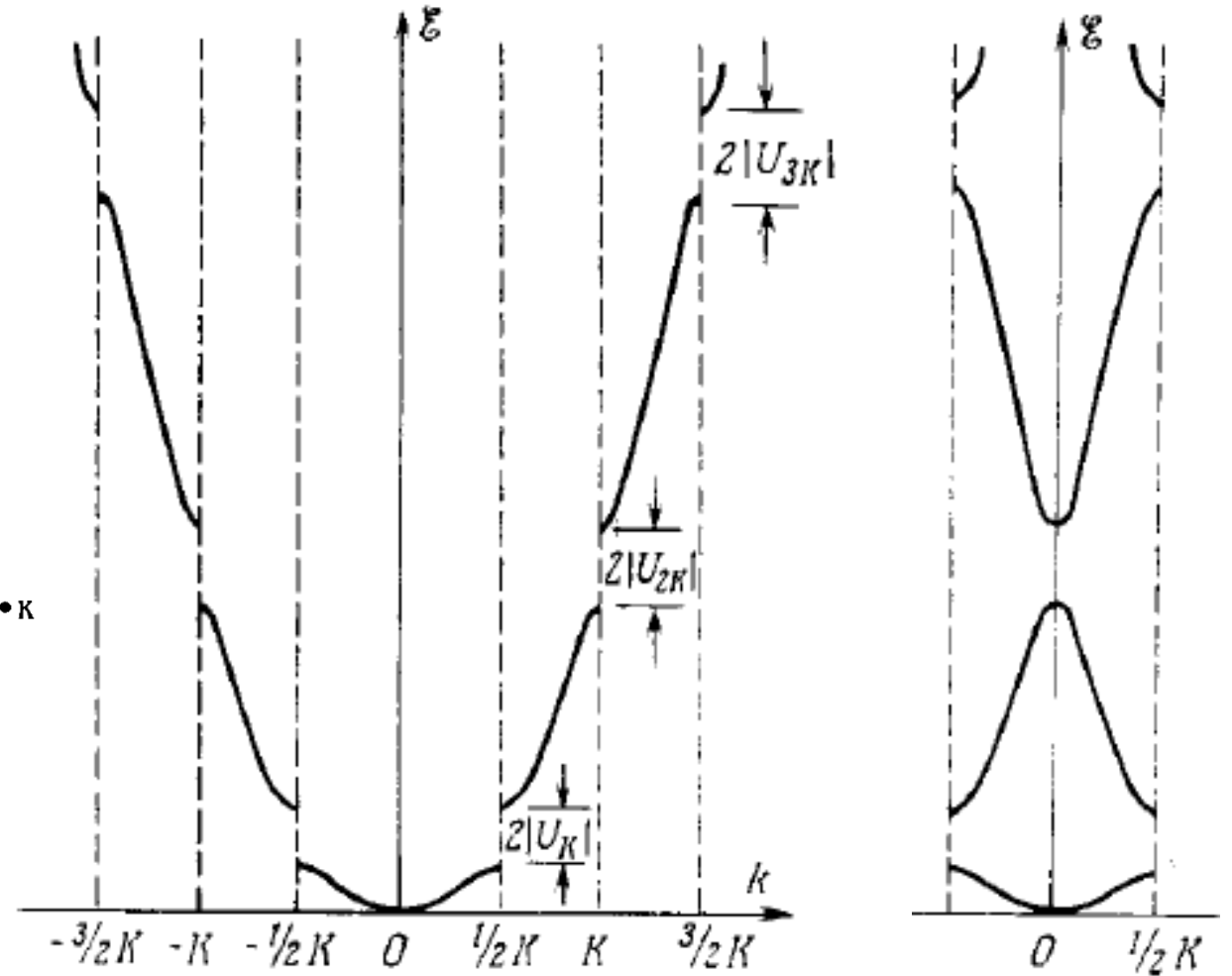


$$\begin{vmatrix} \mathcal{E} - \mathcal{E}_q^0 & -U_K \\ -U_K^* & \mathcal{E} - \mathcal{E}_{q-K}^0 \end{vmatrix} = 0$$



$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_q^0)(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{q-K}^0) = |U_K|^2$$

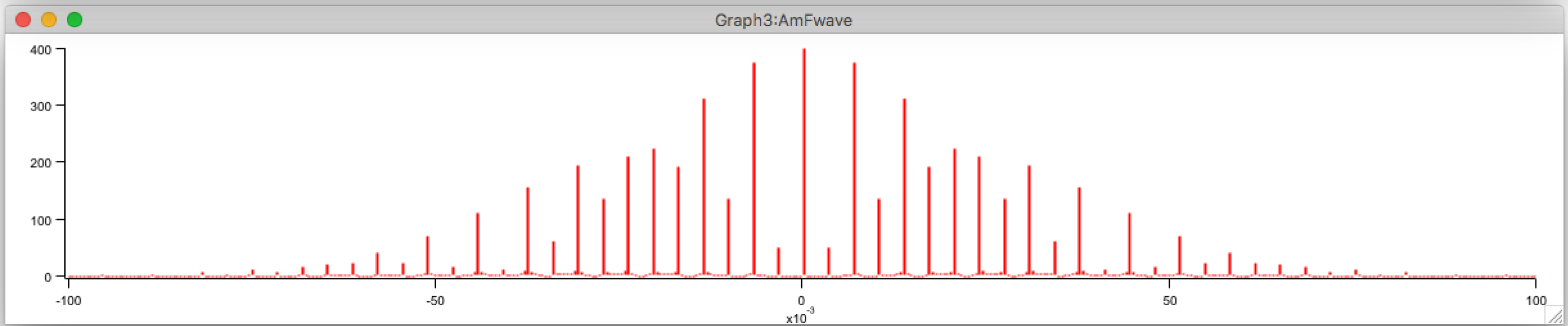
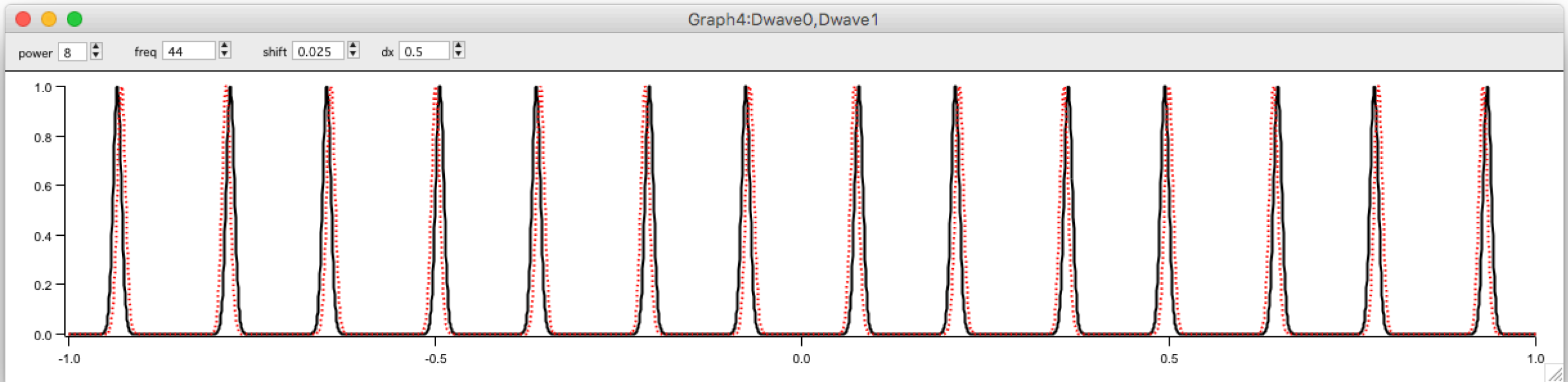
$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} (\mathcal{E}_q^0 + \mathcal{E}_{q-K}^0) \pm \left[ \left( \frac{\mathcal{E}_q^0 - \mathcal{E}_{q-K}^0}{2} \right)^2 + |U_K|^2 \right]^{1/2}$$



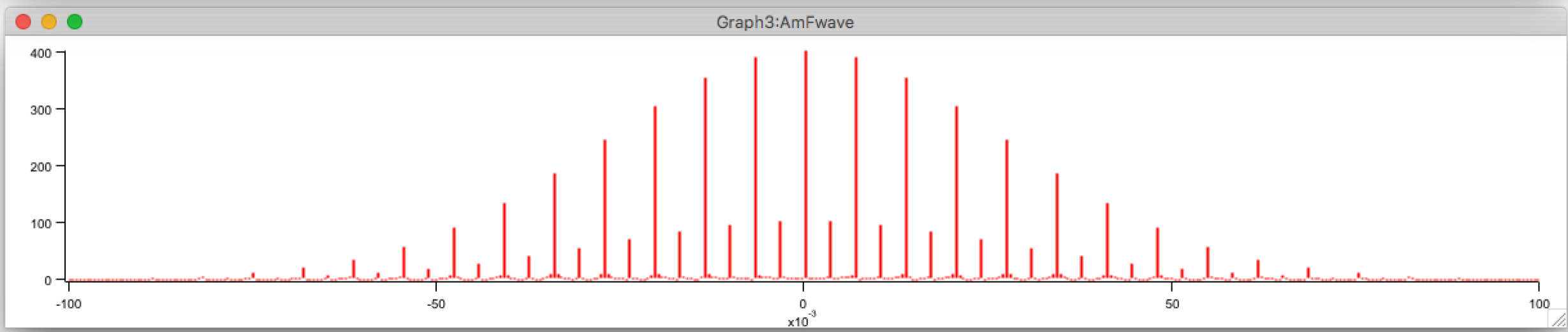
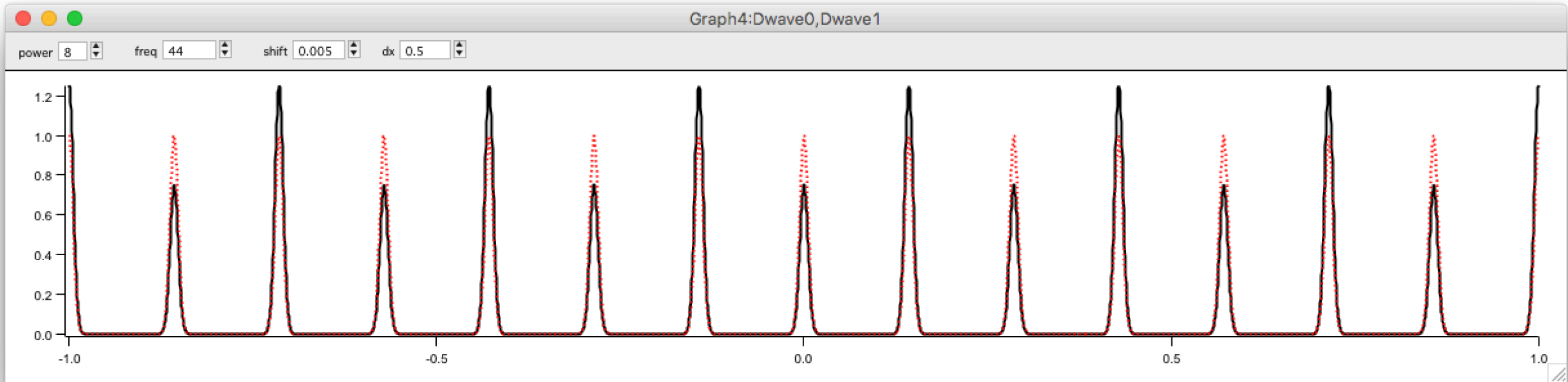
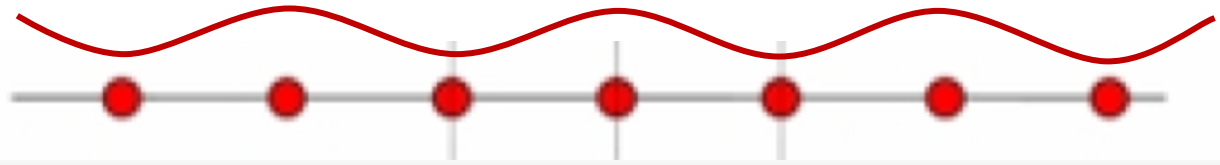
$$K = 2\pi/a$$



# CDW band gaps



# CDW band gaps



# Деякі приклади алгоритмічно нерозв'язних задач (рекурсивної математика)

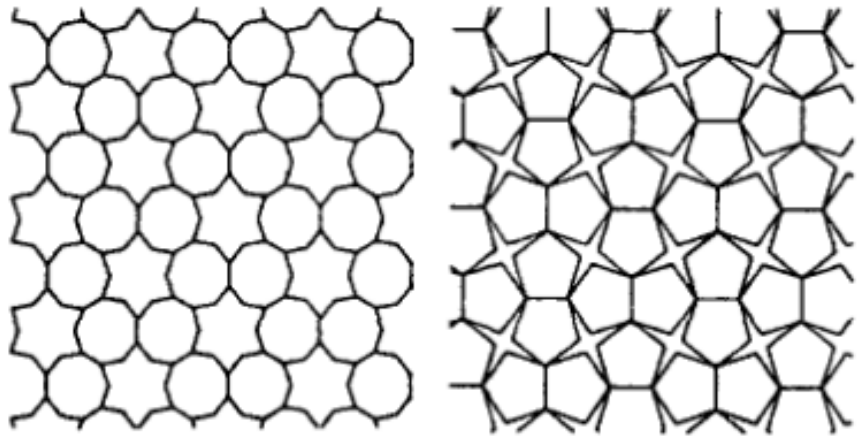


Рис. 4.7. Два примера периодического замощения плоскости фигурами двух форм

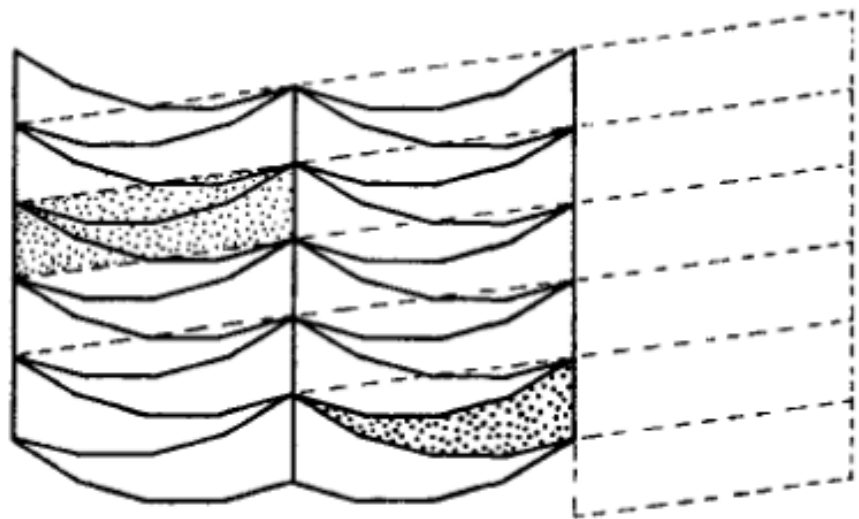


Рис. 4.8. Периодическое замощение и его параллелограмм периодов

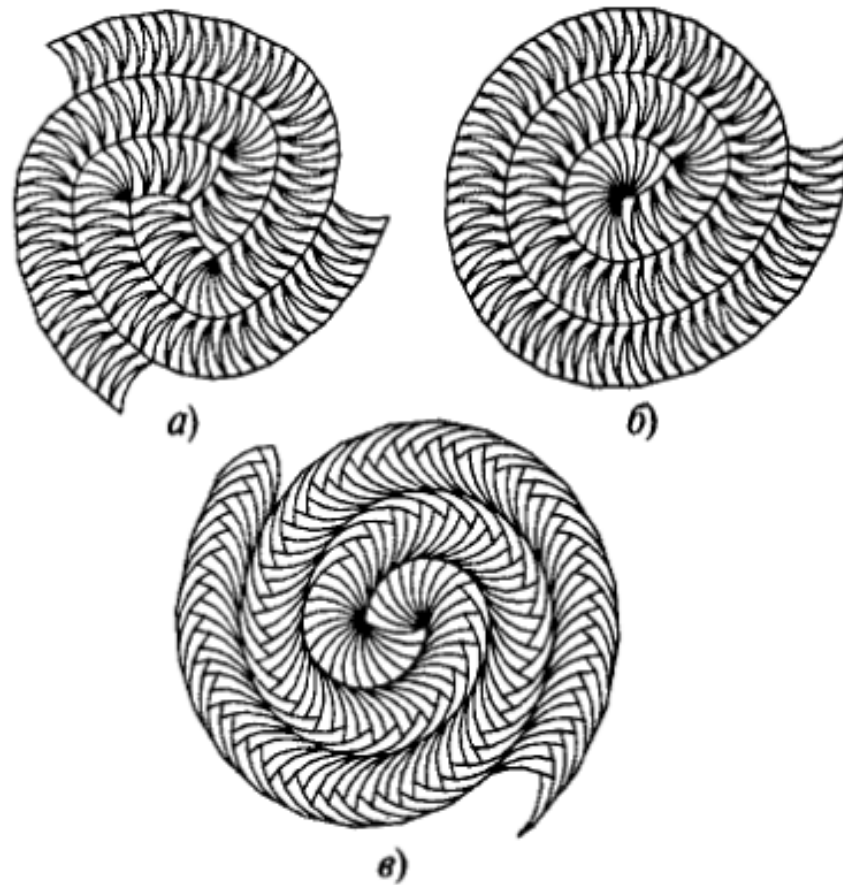
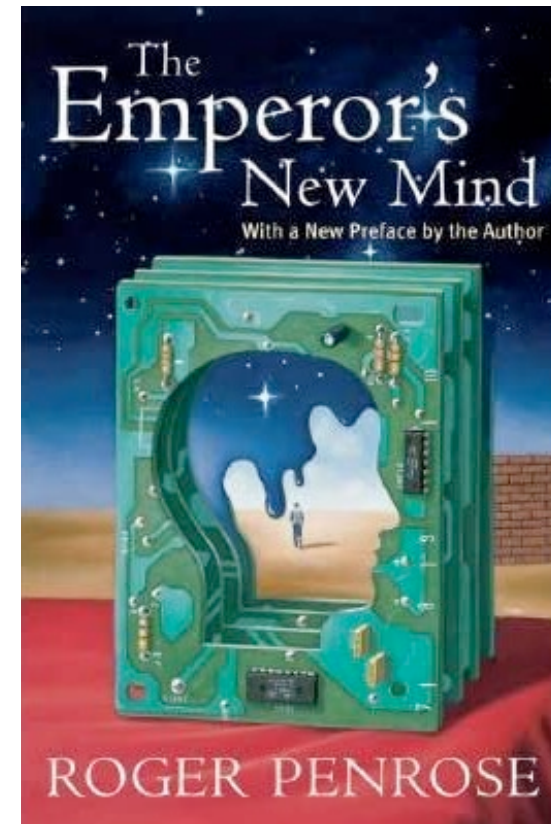
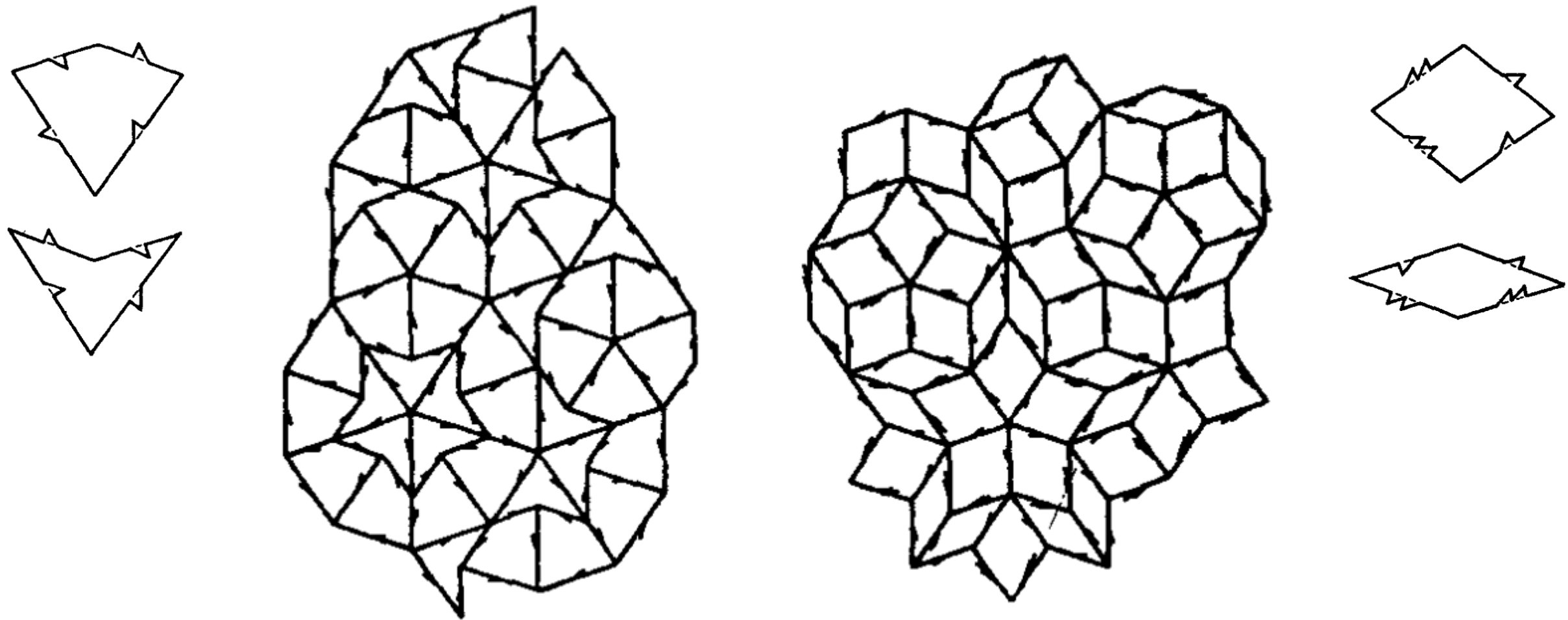


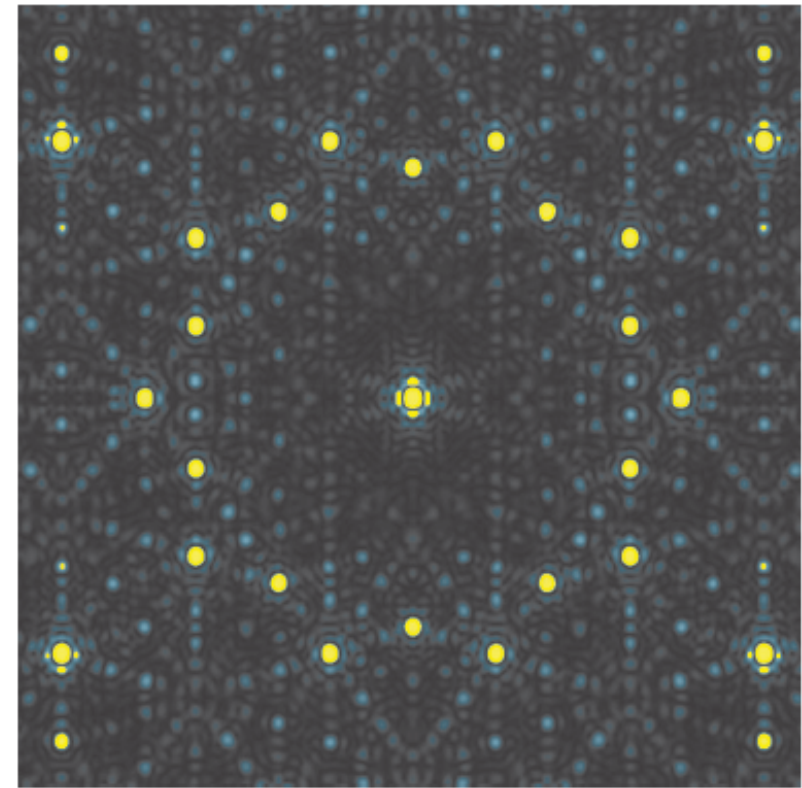
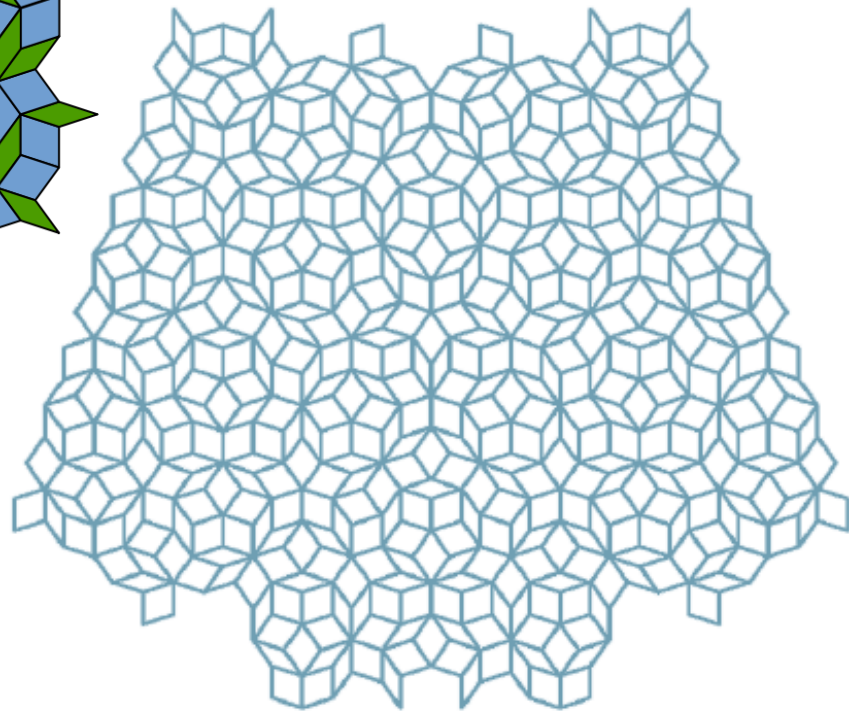
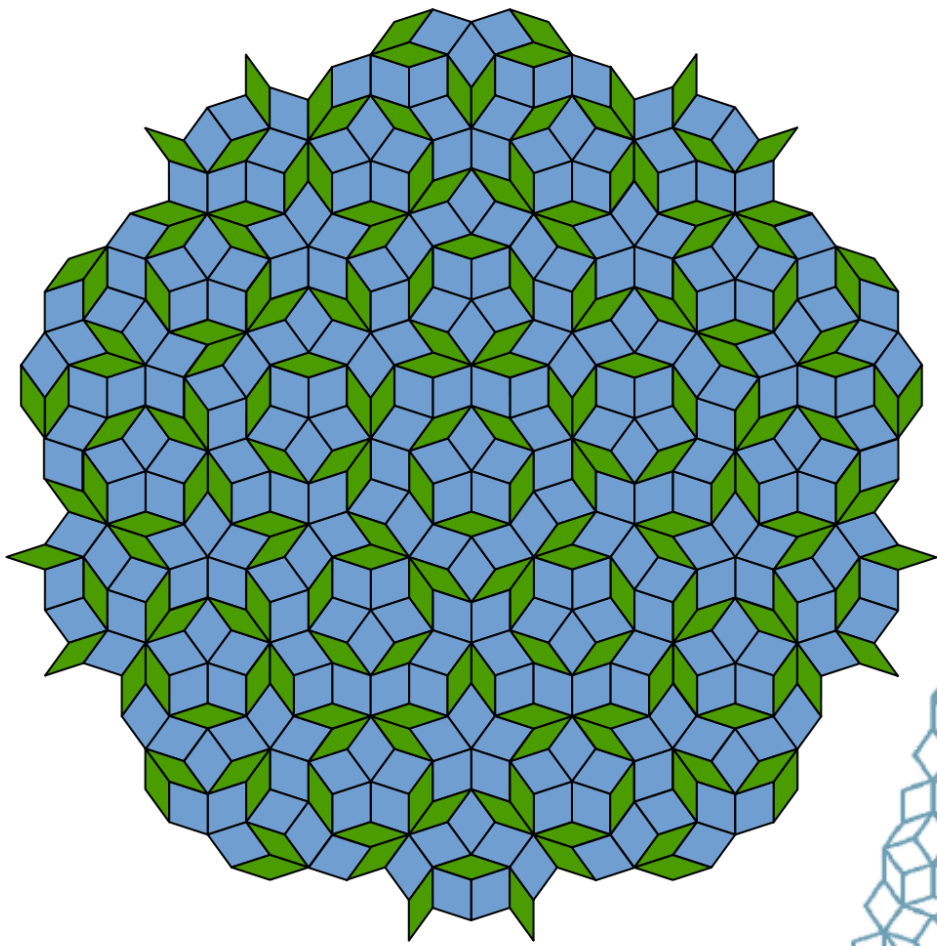
Рис. 4.9. Три неперидических «спиральных» замощения из таких же «универсальных» плиток, как и на рис. 4.8

[Пенроуз Р. Новый ум короля.djvu](http://penrose.p.Новый_ум_короля.djvu)

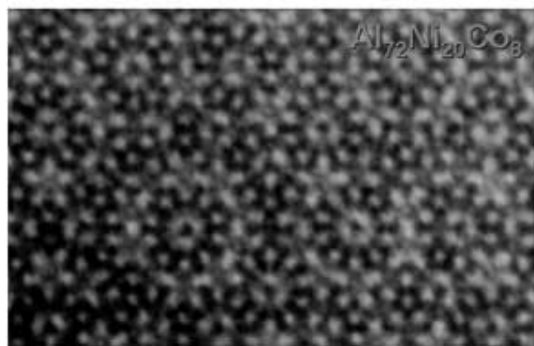
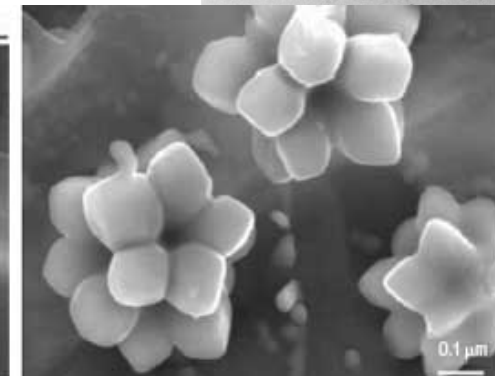
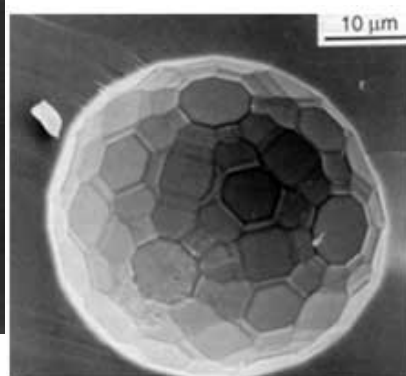
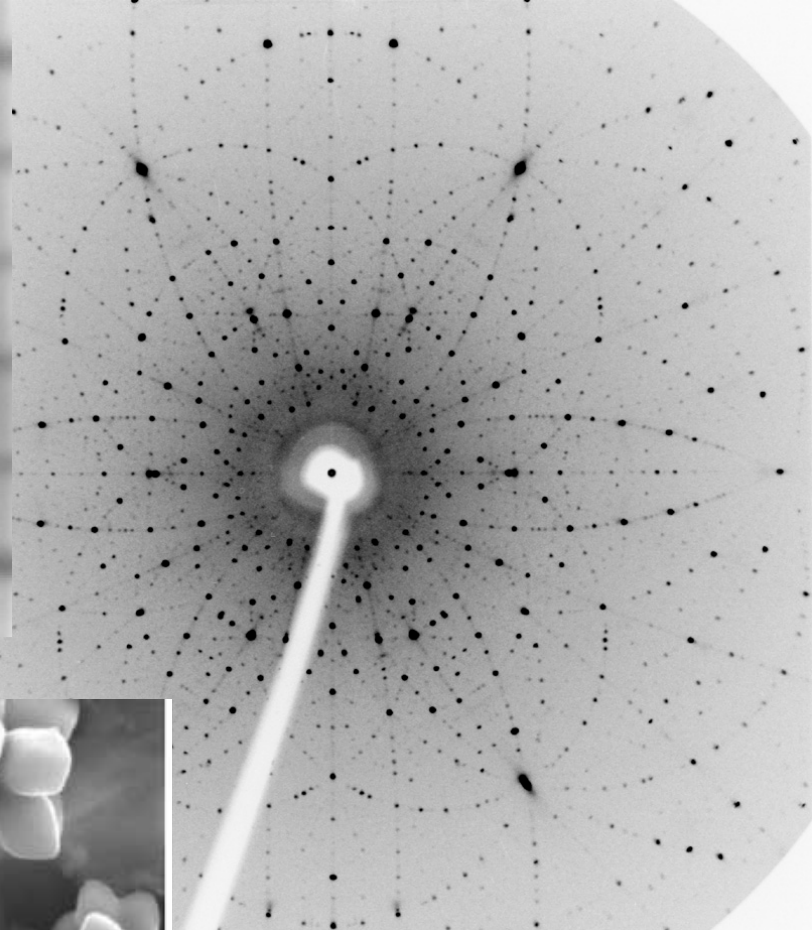
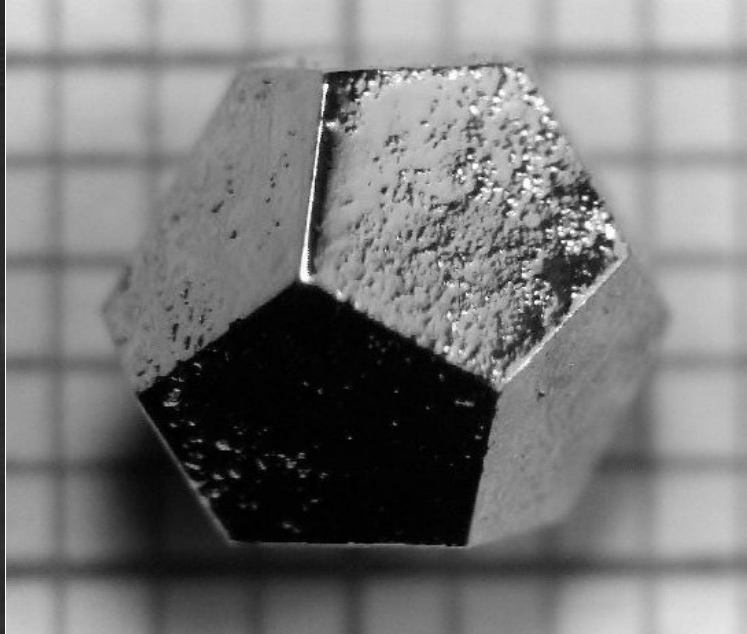
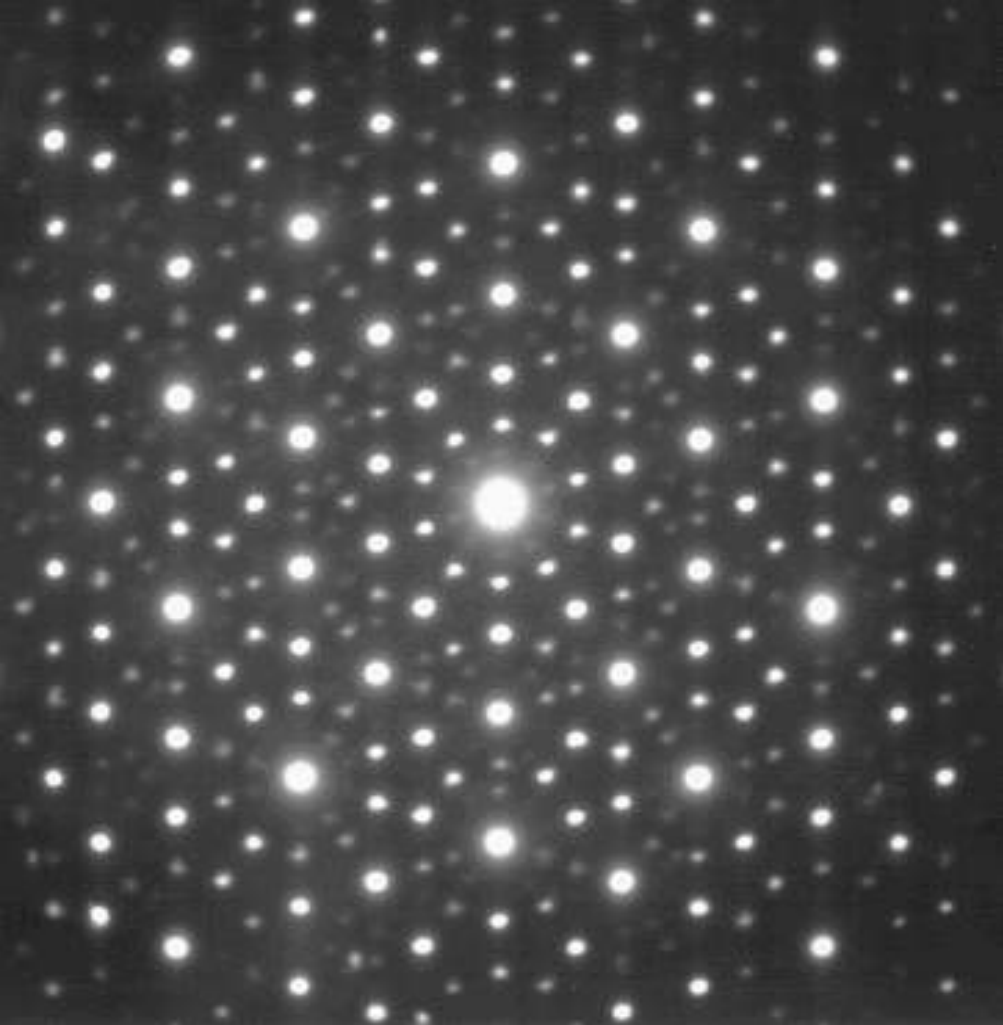




**Рис. 4.12.** Две пары плиток, которые покрывают плоскость только неперiodически («плитки Пенроуза»). Также показано замощение плоскости каждой из этих пар



**Figure 1. (a). A patch of a Penrose tiling. (b). The diffraction diagram of the vertex set  $V$  of (a) is essentially discrete; thus  $F$  is an aperiodic crystal, according to the new definition.**

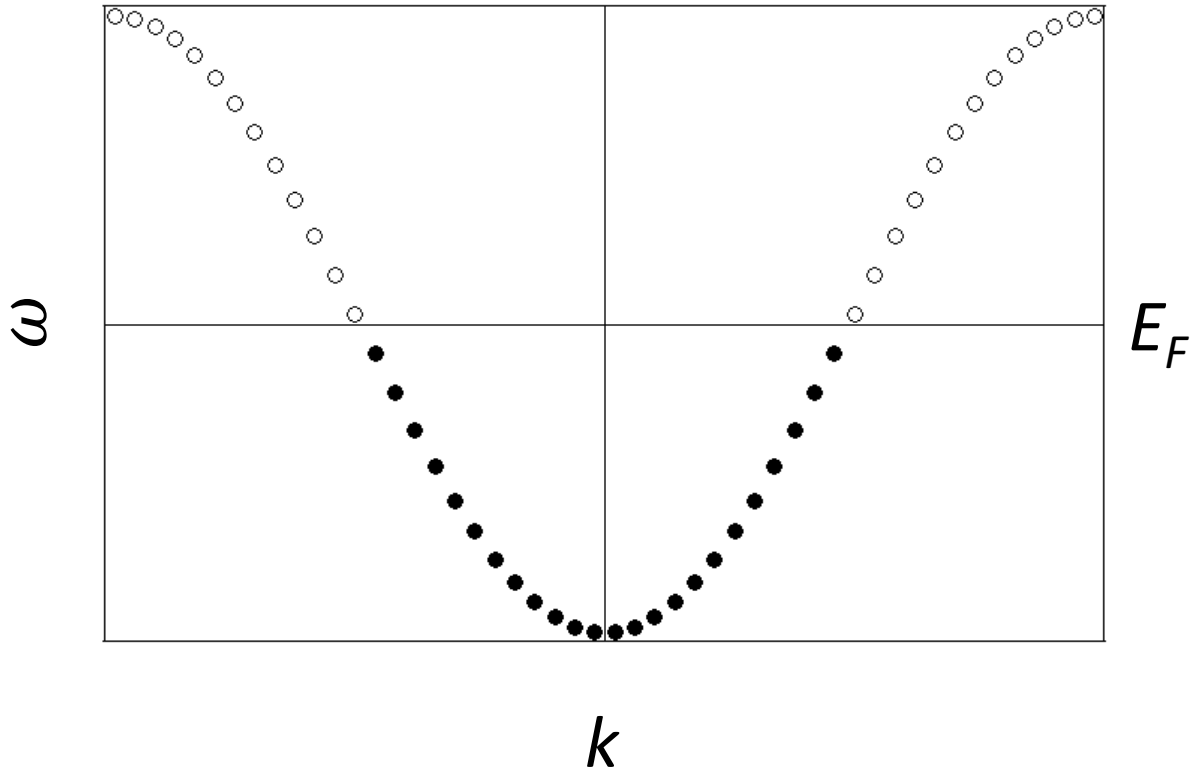


Дифракційна картина розсіяння електронів на ікосаедричній структурі квазікристалу Zn-Mg-No. Видно 10 точок по колу.

## *Лекція 7: Напівкласика*

- В чому головна відмінність класики та напівкласики?
- Як рухається електрон без розсіювання під дією електричного поля?
- Як виникає електричний струм?
- Рух електронів у магнітному полі?

# Напівкласика



$$\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}} = \hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \left[ \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right]$$

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

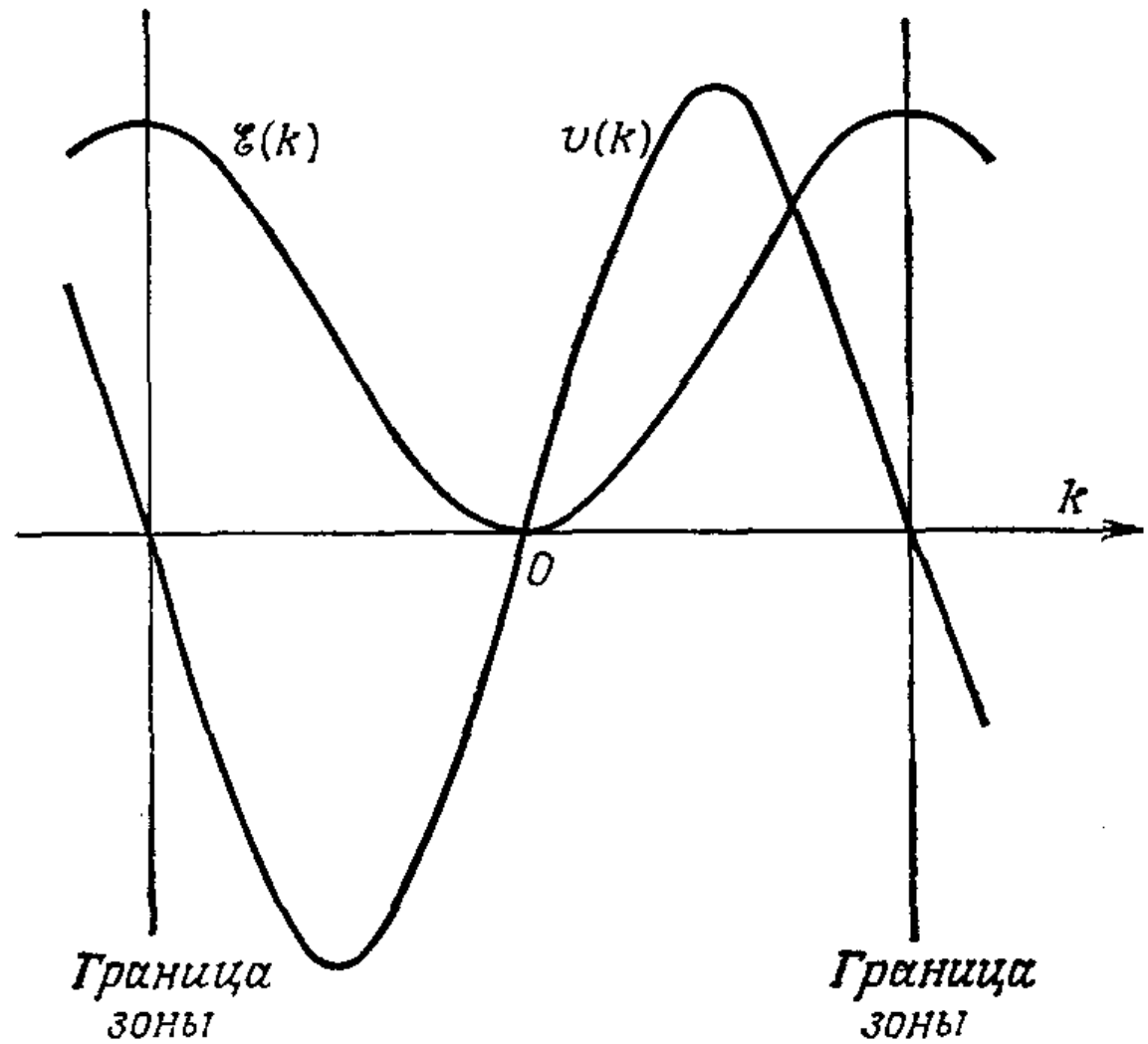


## Сравнение одноэлектронных стационарных уровней Зоммерфельда и Блоха

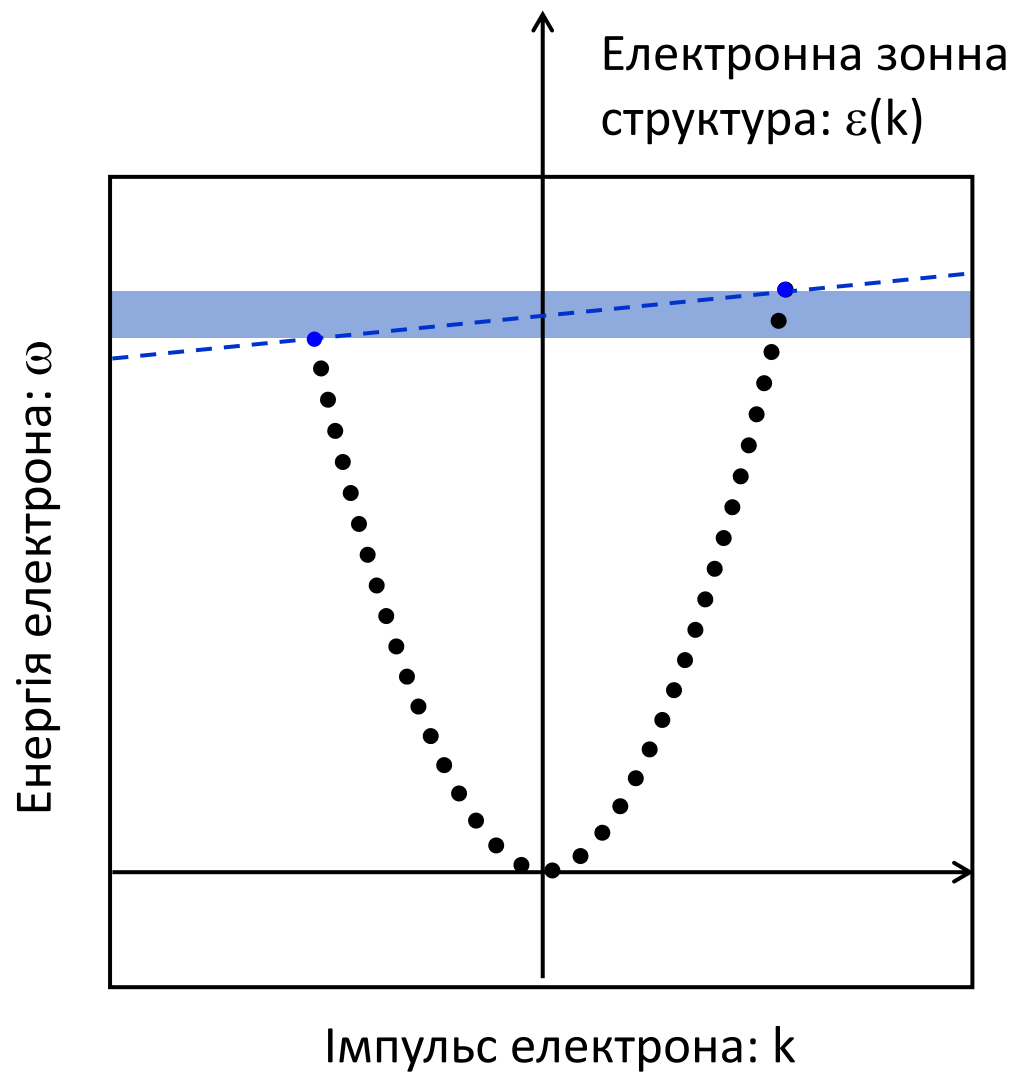
	Зоммерфельд	Блох
Квантовые числа (кроме спина)	$\mathbf{k}$ ( $\hbar\mathbf{k}$ — импульс)	$\mathbf{k}$ , $n$ ( $\hbar\mathbf{k}$ — квазиимпульс, $n$ — номер зоны)
Область изменения квантовых чисел	$\mathbf{k}$ принимает все значения в $k$ -пространстве, удовлетворяющие периодическому граничному условию Борна — Кармана	Для каждого $n$ вектор $\mathbf{k}$ пробегает все волновые векторы, принадлежащие одной элементарной ячейке обратной решетки и удовлетворяющие граничному условию Борна — Кармана; $n$ принимает бесконечное число дискретных значений
Энергия	$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$	Энергия $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ для заданного номера зоны $n$ не может быть записана в виде простого явного выражения. Единственное общее свойство — периодичность в обратной решетке: $\mathcal{E}_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = \mathcal{E}_n(\mathbf{k})$
Скорость	Средняя скорость электрона на уровне с волновым вектором $\mathbf{k}$ равна $\mathbf{v} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{k}}$	Средняя скорость электрона на уровне с номером зоны $n$ и волновым вектором $\mathbf{k}$ равна $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$
Волновая функция	Волновая функция электрона с волновым вектором $\mathbf{k}$ есть $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{V^{1/2}}$	Волновая функция электрона с номером зоны $n$ и волновым вектором $\mathbf{k}$ есть $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$ где функция $u_{n\mathbf{k}}$ не может быть записана в виде простого явного выражения. Единственное ее общее свойство — периодичность в прямой решетке <sup>a)</sup> $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}$$

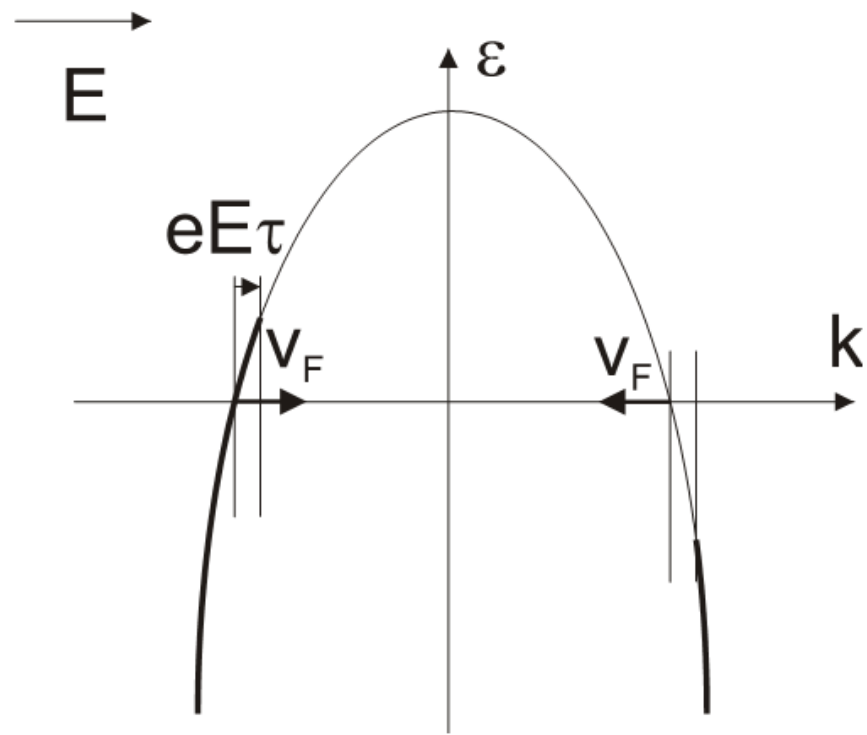
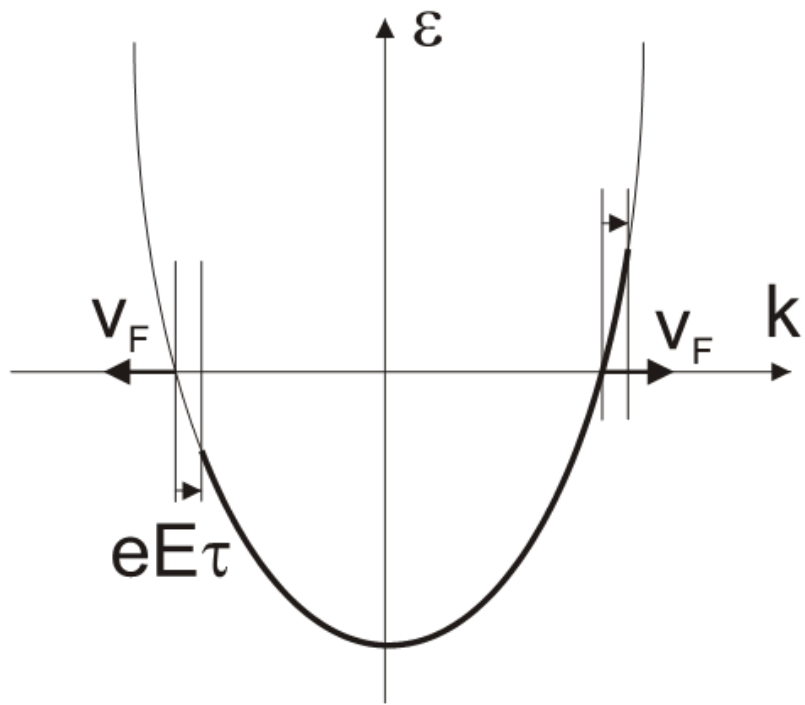
$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$



# Електричне поле -> електричний струм



$$f(\hbar\mathbf{k}) = f^0(\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{E}\tau)$$



$$f^0(\vec{k}) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon_F}{k_B \cdot T}\right)}$$

Если приложить поле  $\vec{E}$ , то функция распределения изменится:  $f = f^0 + f^1$ , где

$$f^1 = -e \cdot \left( \vec{E} \cdot \frac{df}{d\vec{p}} \right) \cdot \tau = -e \cdot \vec{E} \cdot \frac{df}{d\varepsilon} \cdot \frac{d\varepsilon}{d\vec{p}} \cdot \tau = -e \cdot \tau \cdot \frac{df}{d\varepsilon} \cdot (\vec{E} \cdot \vec{v})$$

Что в пределе малых полей соответствует  $f(\vec{k}) = f^0(\vec{k} - e\vec{E}\tau)$ .

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}},$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e) \frac{1}{c} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}.$$

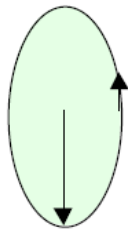
$$\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c}(\vec{a} \cdot \vec{b})$$

$$\hat{\mathbf{H}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{eH}{c} (\dot{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \dot{\mathbf{r}})) = -\frac{eH}{c} \dot{\mathbf{r}}_{\perp}$$

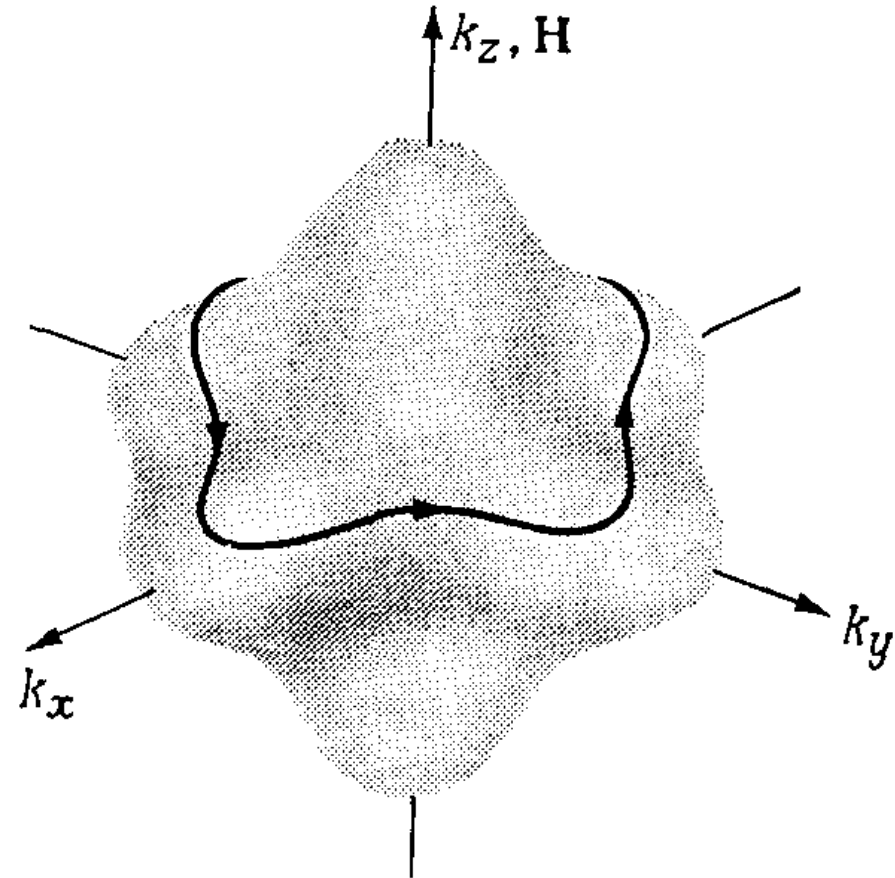
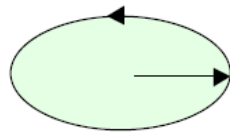
$$\mathbf{r}_{\perp} = \mathbf{r} - \hat{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{r})$$

$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar c}{eH} \hat{\mathbf{H}} \times (\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0))$$

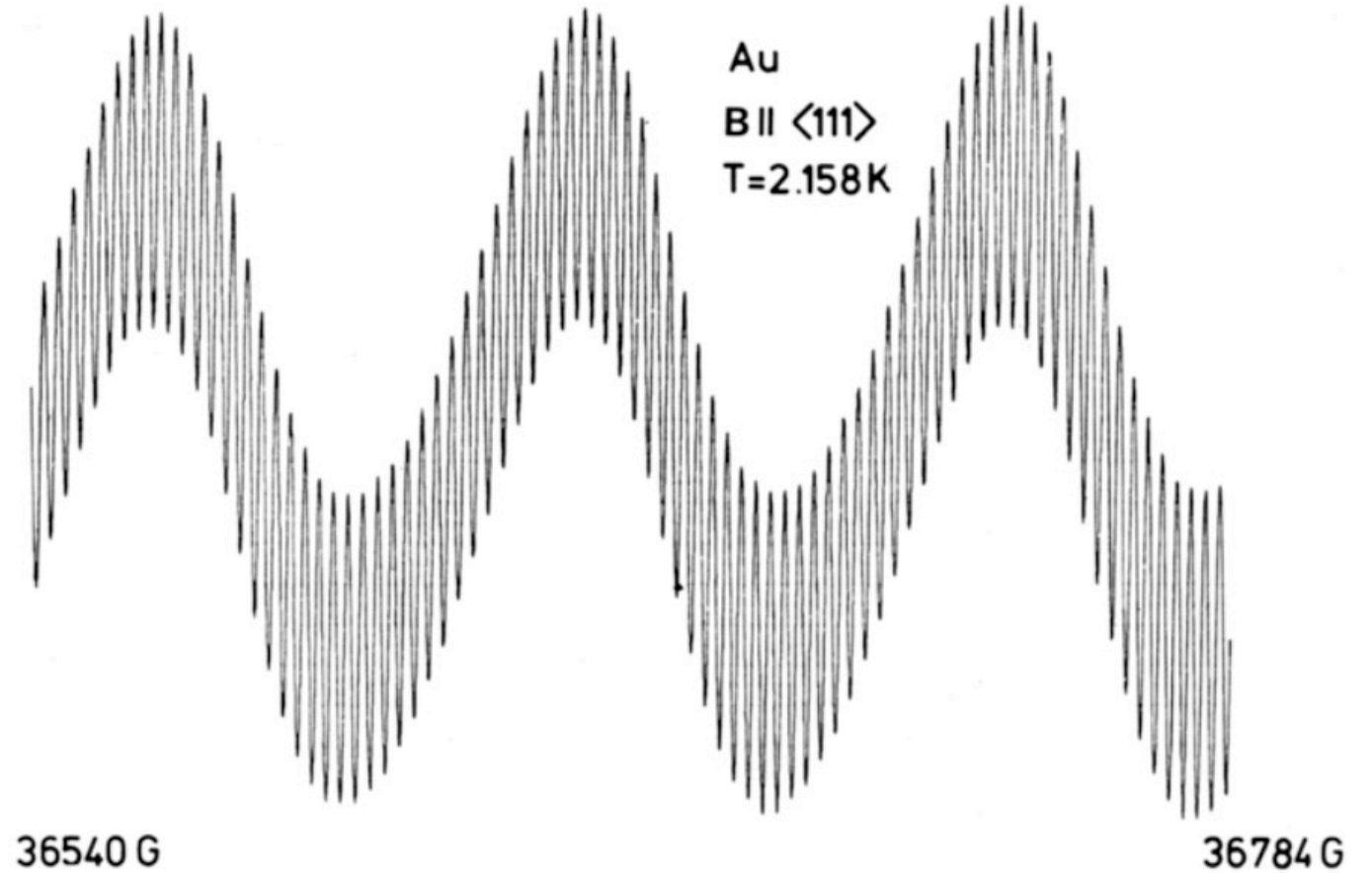
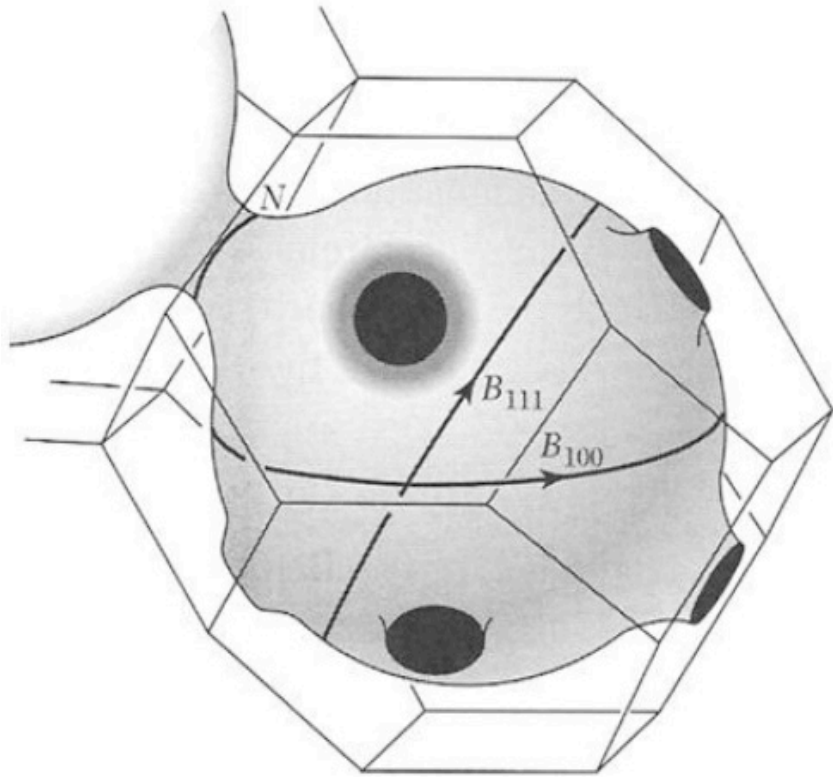
r-orbit



k-orbit



# de Haas-van Alphen effect



$$F = (\hbar/2\pi e)A_k$$

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad \sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}$$

$$\sigma = \frac{e^2}{m} n \tau$$

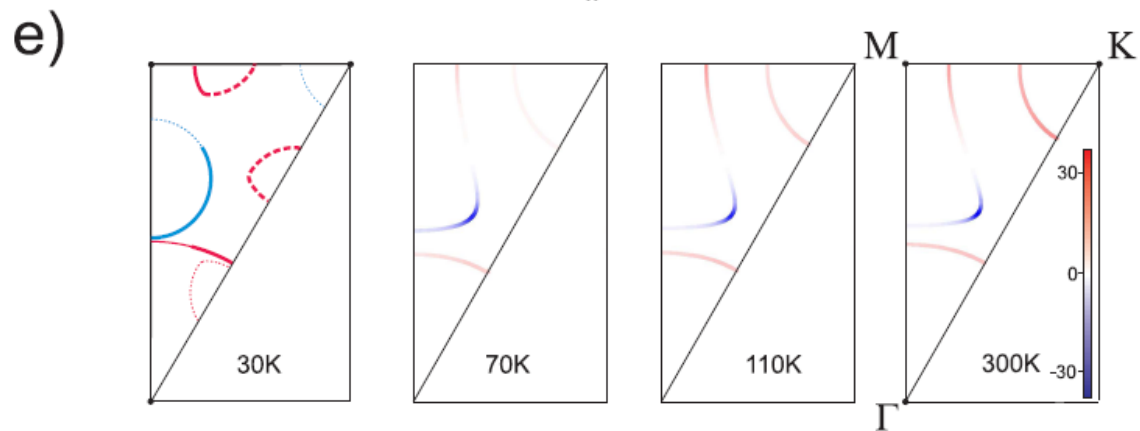
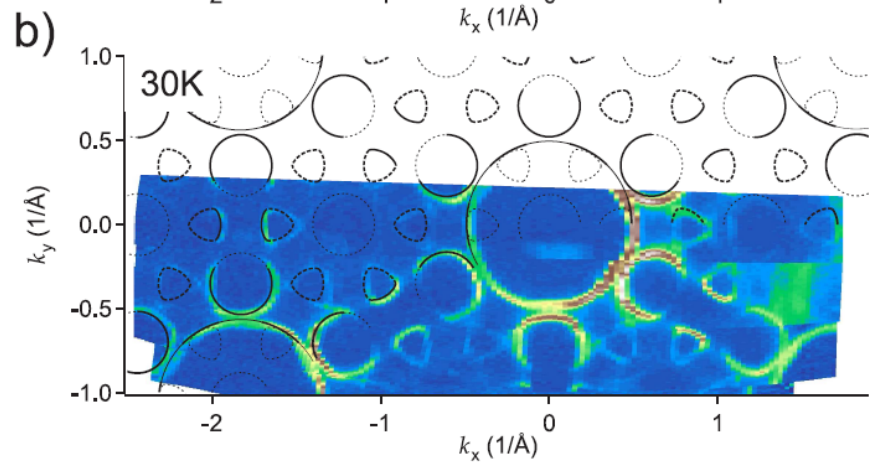
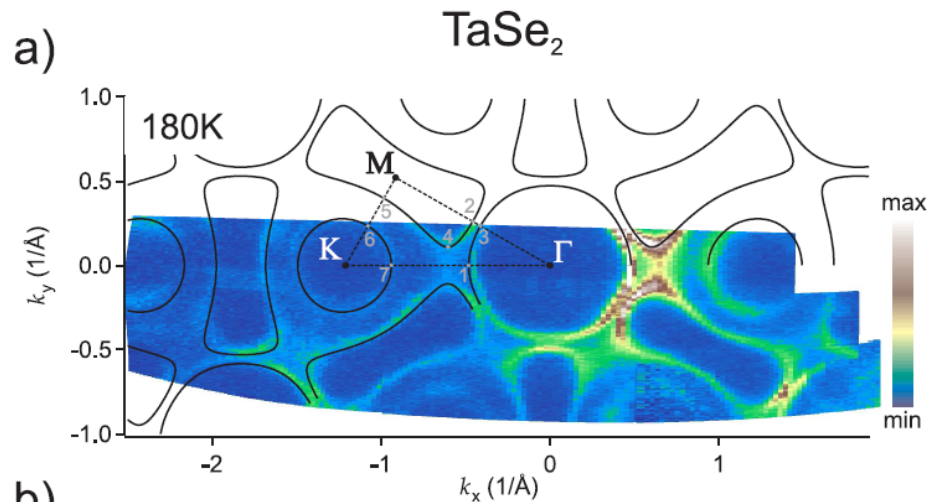
$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\pi L_c h} \int \tau(\mathbf{k}) v_F(\mathbf{k}) d k$$

$$R_H \equiv E_H / (B \cdot \mathbf{j}) = \frac{\sigma_{xy}}{B \sigma_{xx}^2}$$

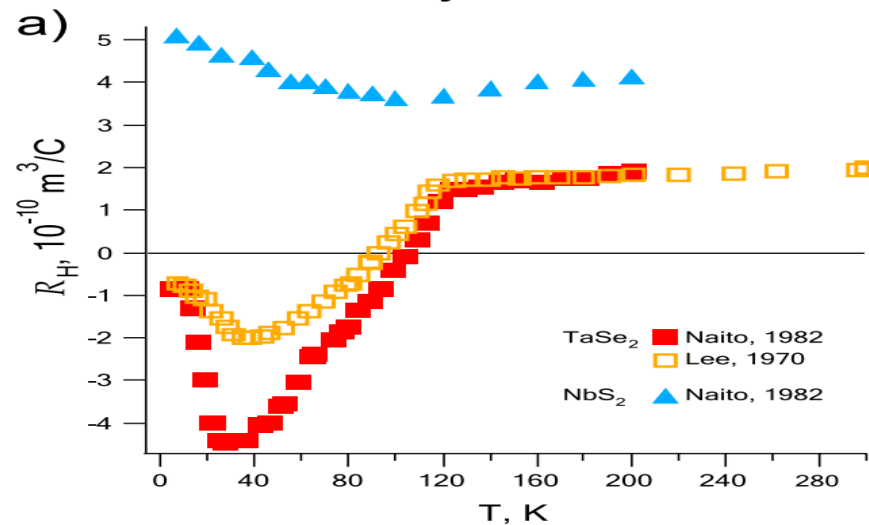
$$\sigma_{xy} = \frac{e^3 B}{L_c h^2} \int \frac{\tau^2(\mathbf{k}) v_F^2(\mathbf{k})}{\rho(\mathbf{k})} d k$$

$$R_H = \frac{4\pi^2 L_c}{e} \frac{\int D(\mathbf{k}) v_F^2(\mathbf{k}) / \rho(\mathbf{k}) d k}{(\int D(\mathbf{k}) v_F(\mathbf{k}) d k)^2}$$

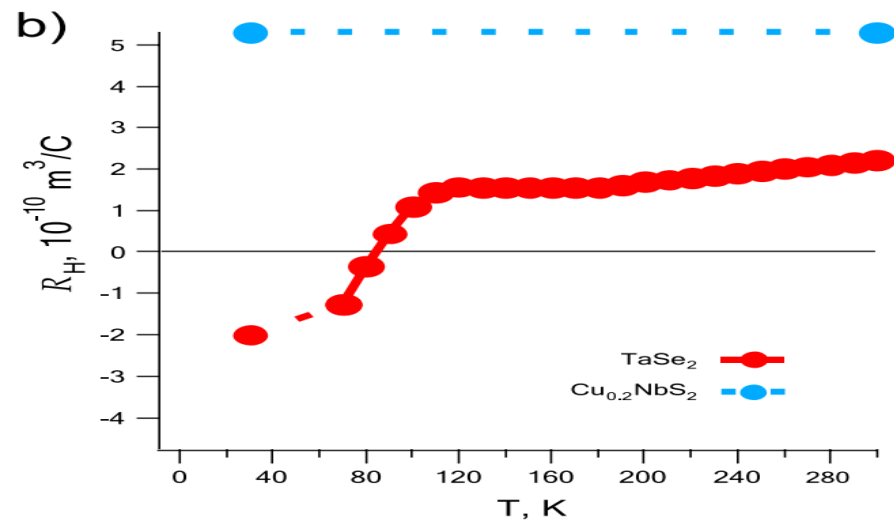
where  $\tau$  is quasiparticle lifetime,  $v_F$  — renormalized Fermi velocity,  $\rho$  — Fermi surface curvature radius,  $d k$  — element of Fermi surface length,  $L_c$  — size of elementary cell along the  $c$  axis,  $h$  — Plank's constant,  $e$  — elementary charge.



Directly measured



Calculated from ARPES

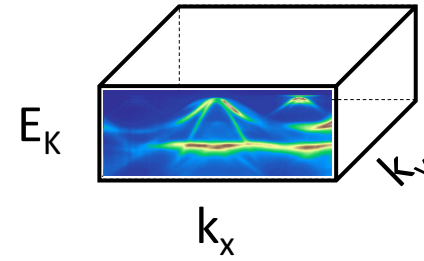




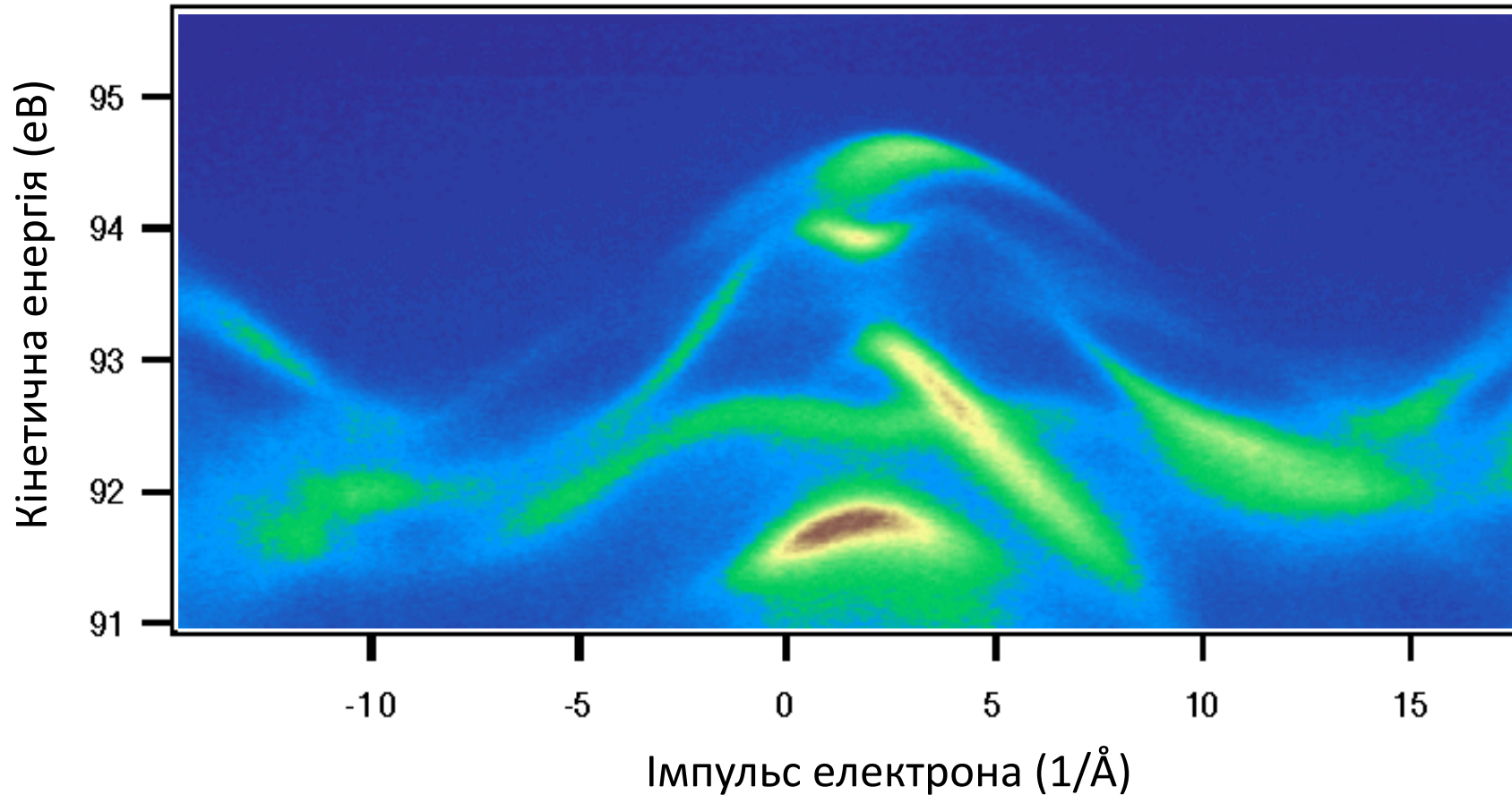
## Лекції 8, 9: Спектральна функція

- Що визначає структуру електронного спектру, а саме: дисперсію, розмиття, інтенсивність
- Чим електрон відрізняється від квазіелектрона?
- Фізичний сенс функції Гріна?
- Знайти на діаграмах Файнмана: ферміони, бозони, функції Гріна...?

# Структура електронного спектру



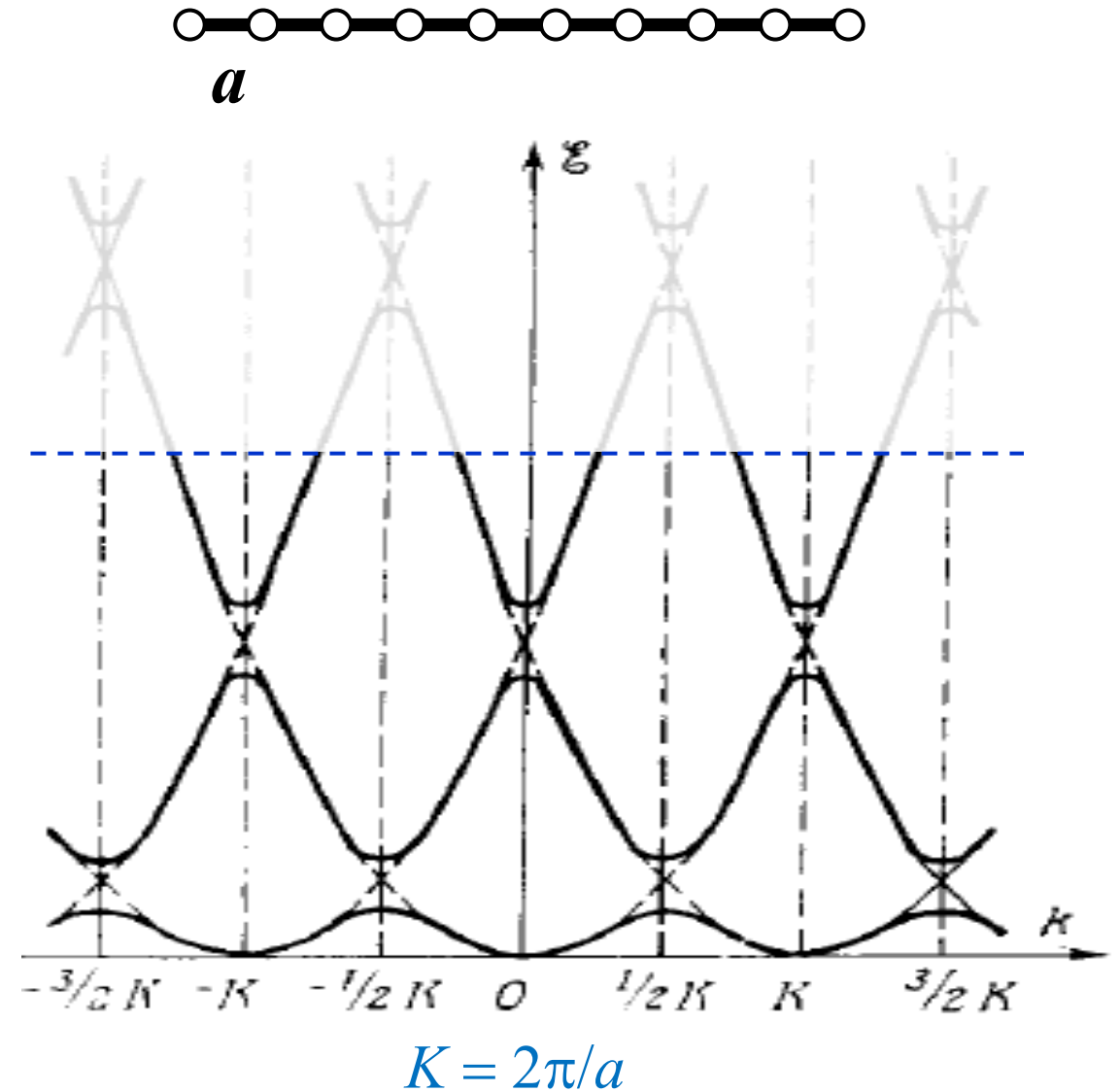
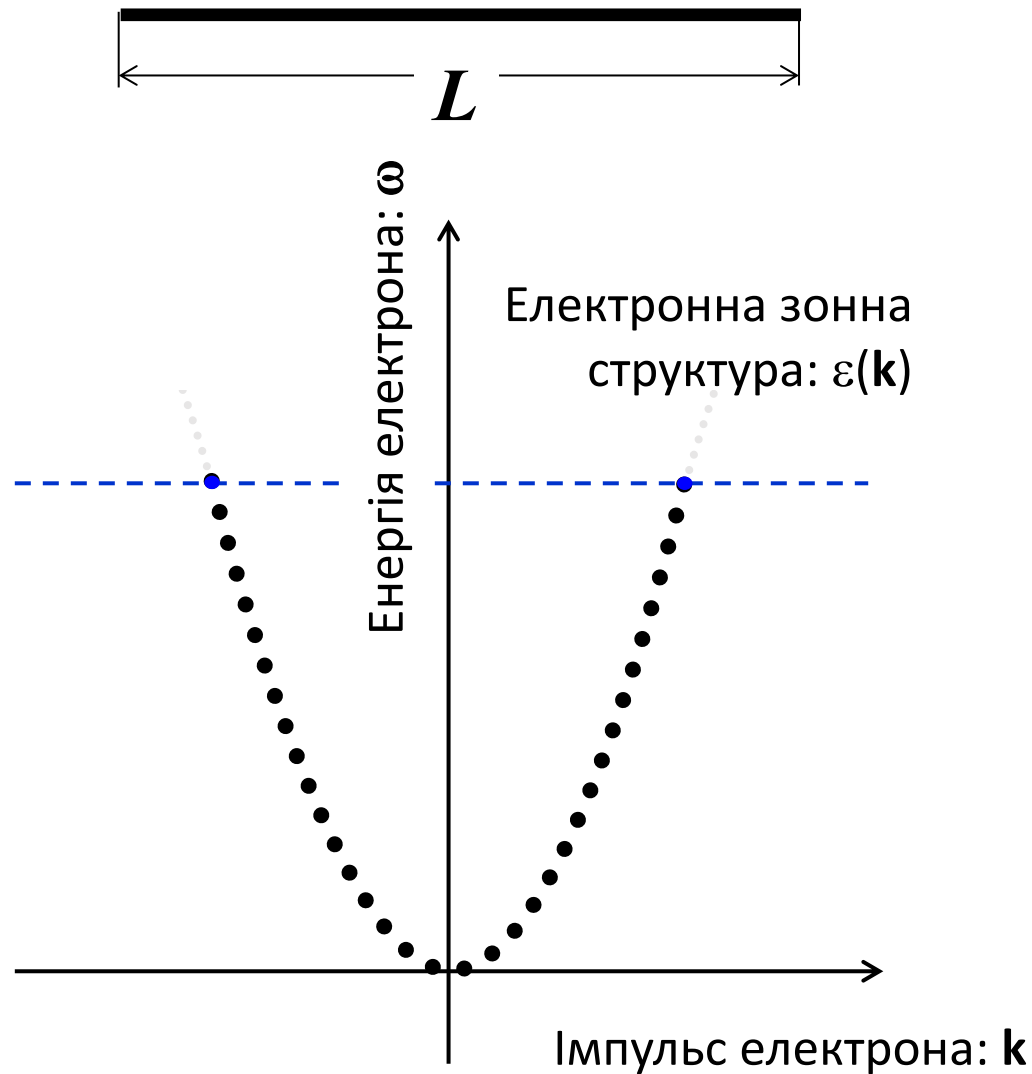
**TiSe<sub>2</sub>** - «ексітонний ізолятор»



Імовірність  
знайти електрон  
з імпульсом  $\mathbf{k}$   
та енергією  $\omega$

- дисперсія
- **РОЗМИТТЯ**
- ІНТЕНСИВНІСТЬ

# Дисперсія блохівських електронів / інтерференція перескоків - наслідок когерентної взаємодії електронів з кристалом



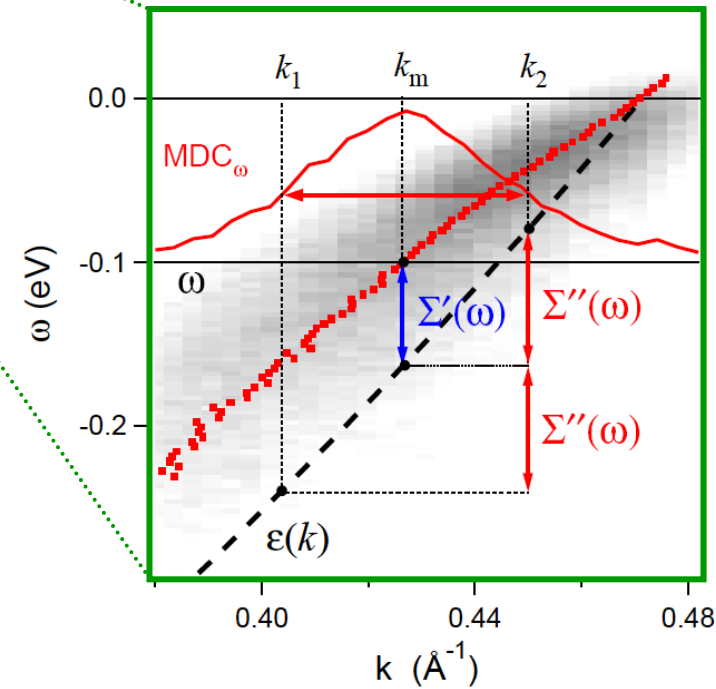
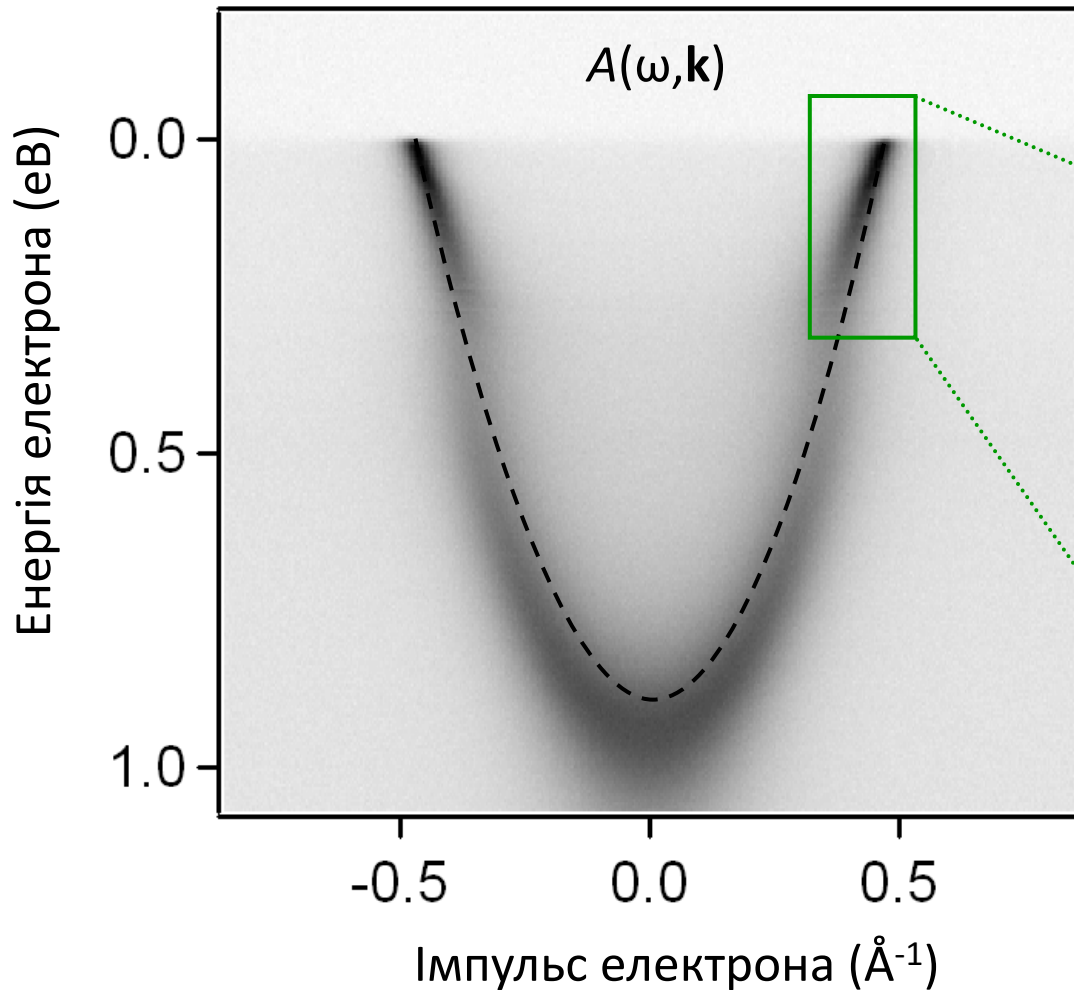
# Структура електронного спектру

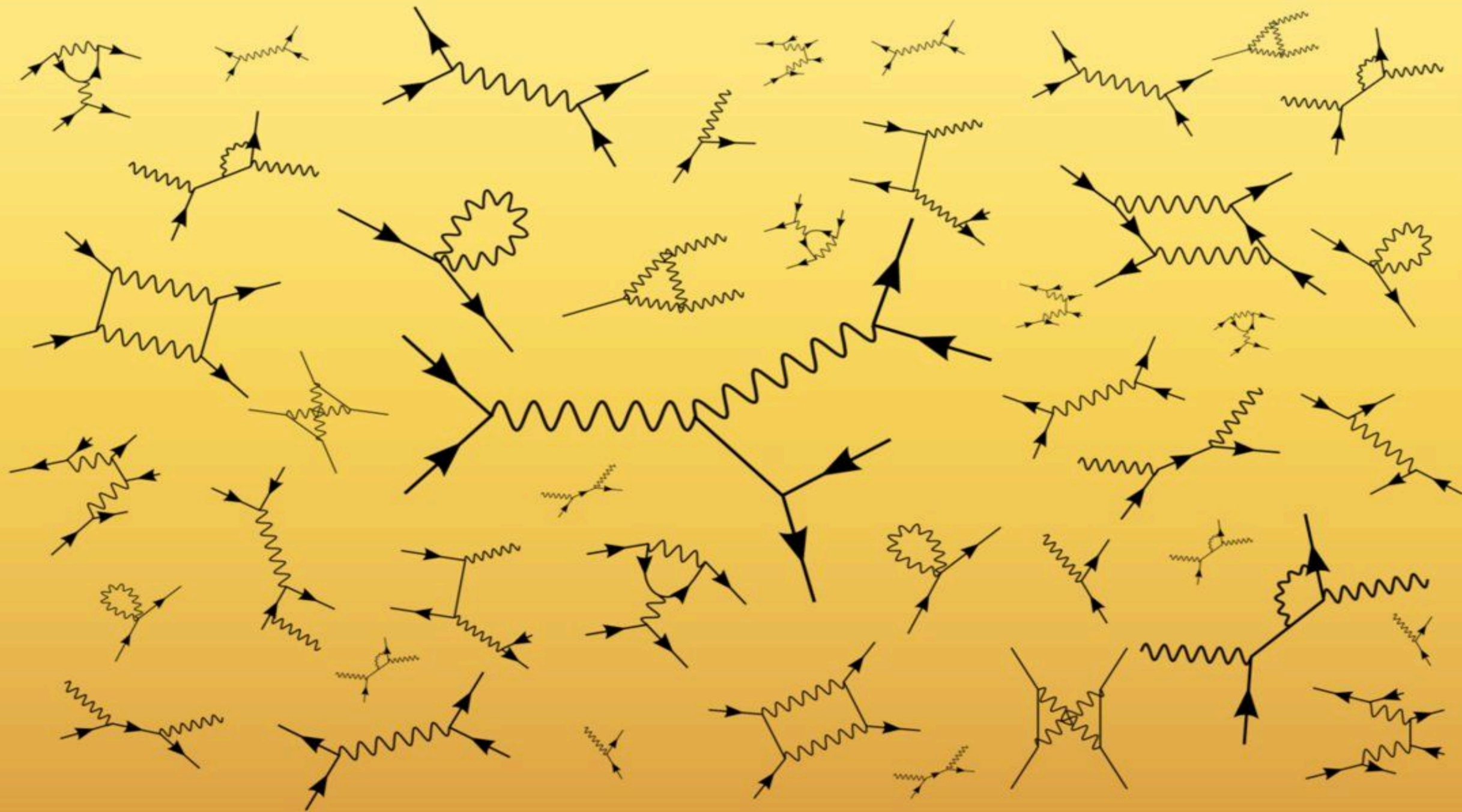
Спектральна функція

$$A(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Sigma''(\omega)}{(\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma'(\omega))^2 + \Sigma''(\omega)^2}$$

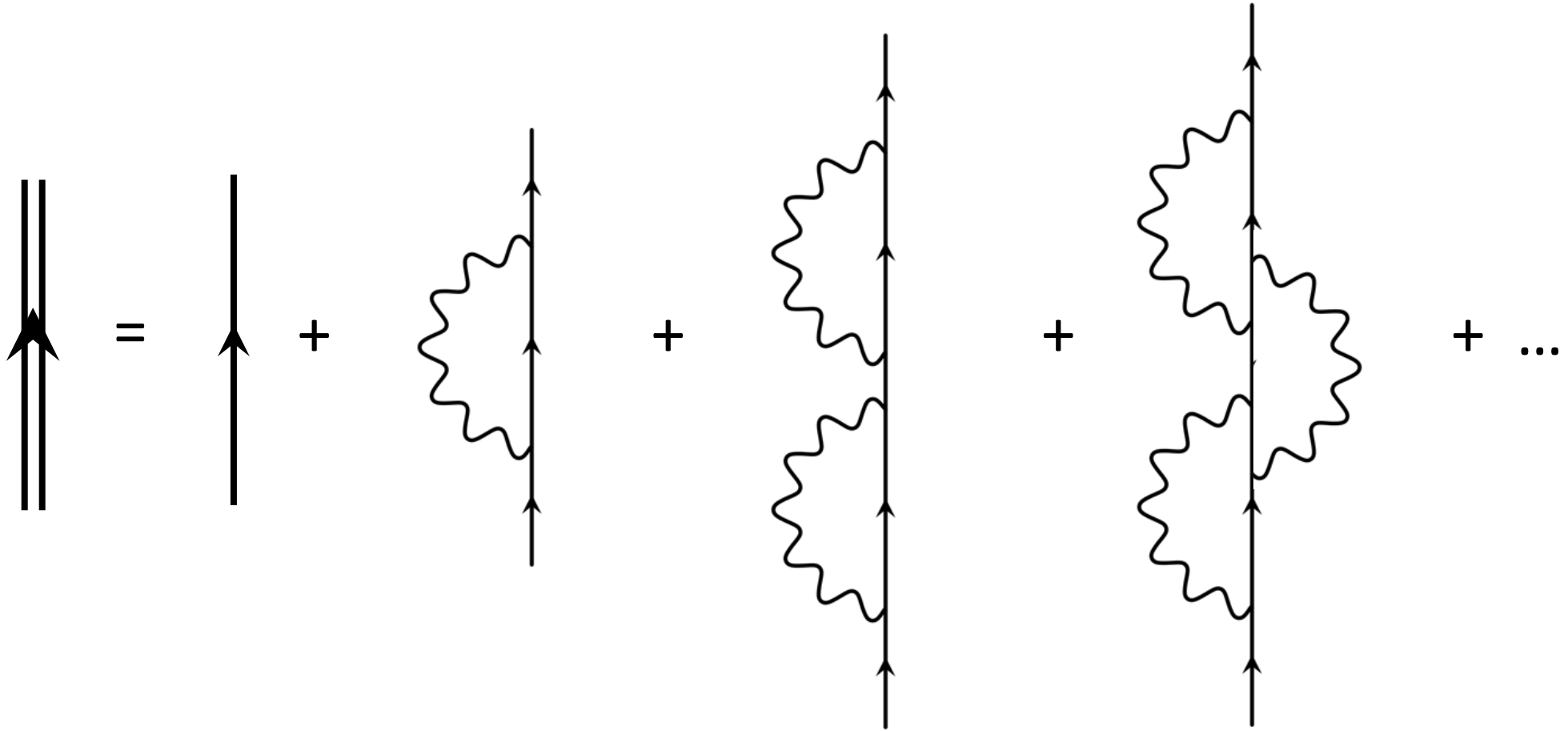
$\varepsilon(\mathbf{k})$  – "гола" електронна  
зонна структура  
 $\Sigma(\omega, \mathbf{k})$  – власна енергія

$$\Sigma'' = \hbar/\tau$$





# Electron Green's function: Feynman's diagrams



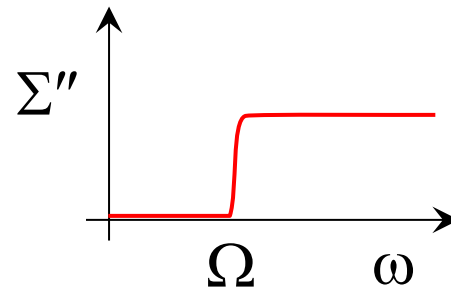
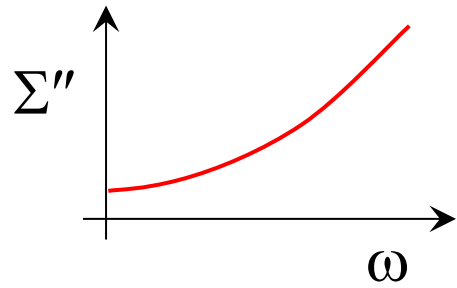
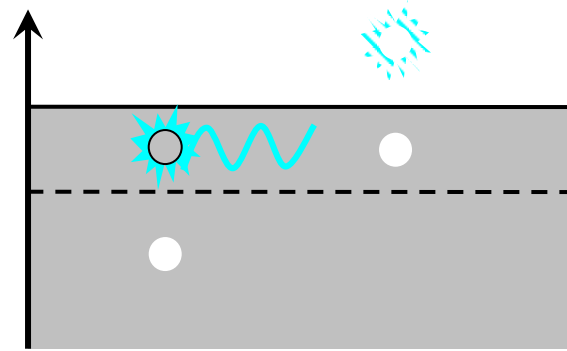
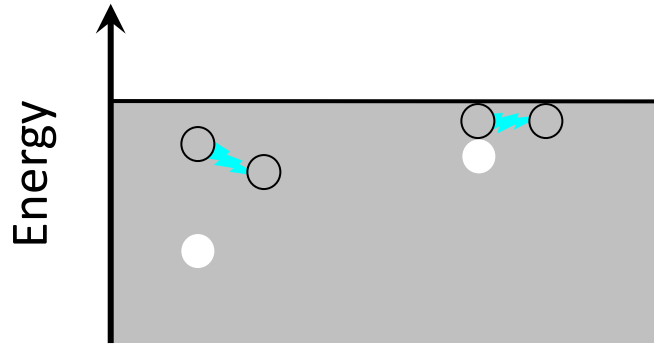
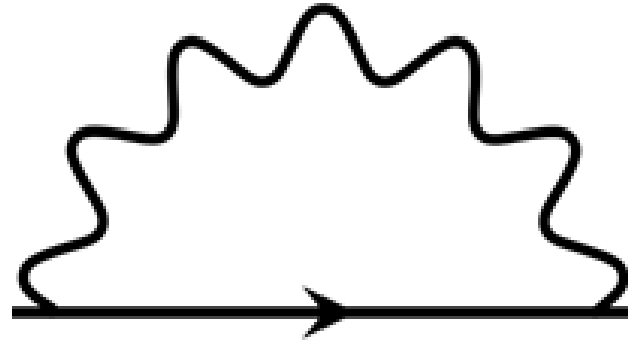
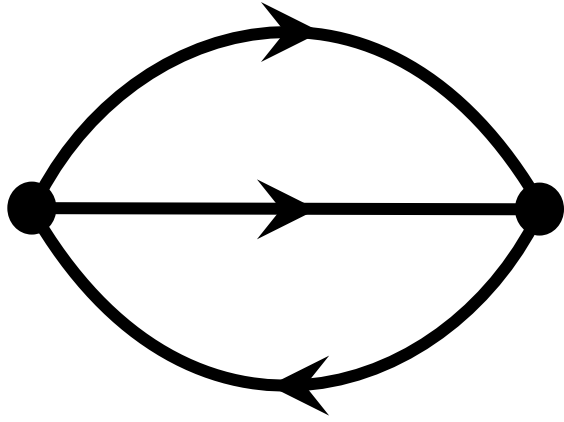
$$G = G_0 + G_0 \Sigma G_0 + G_0 (\Sigma G_0)^2 + G_0 (\Sigma G_0)^3 + \dots$$

# Electron Green's function: Dyson equation

$$\begin{aligned} G &= G_0 + G_0 \Sigma G_0 + G_0 (\Sigma G_0)^2 + G_0 (\Sigma G_0)^3 + \dots = \\ &= G_0 + G_0 \Sigma (G_0 + G_0 \Sigma G_0 + G_0 (\Sigma G_0)^2 + \dots) = G_0 + G_0 \Sigma G \end{aligned}$$

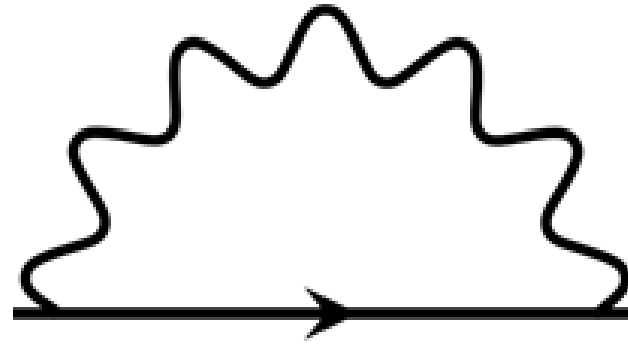
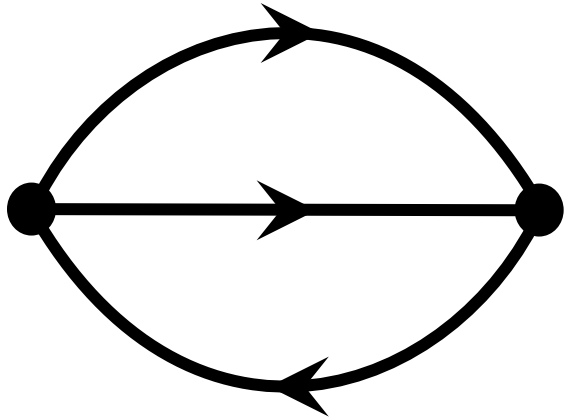
$$G = \frac{G_0}{1 - G_0 \Sigma} = \frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma} = \frac{1}{\omega - \varepsilon - \Sigma}$$

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma$$

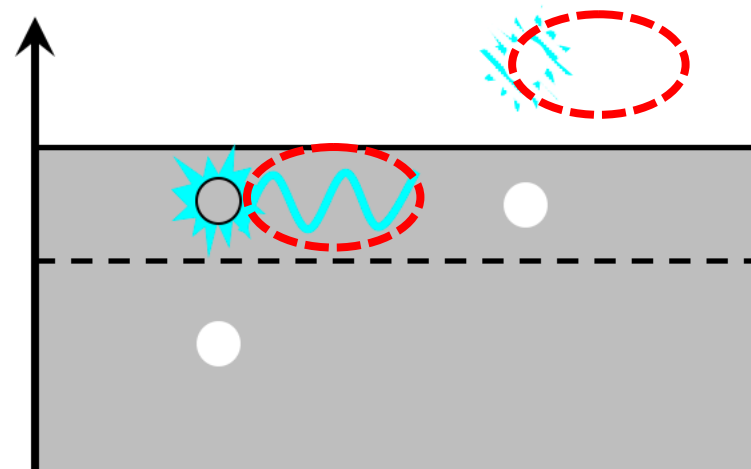
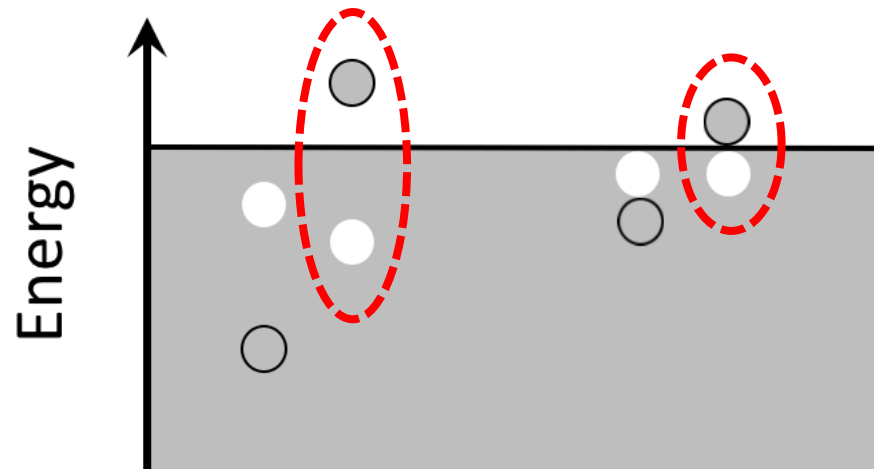
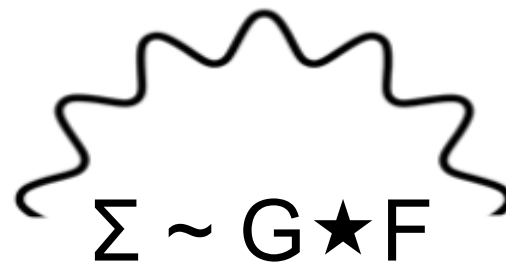
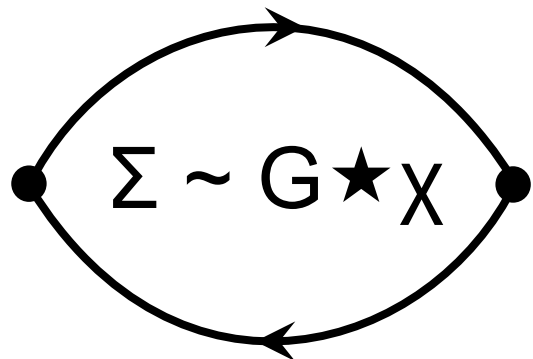




# 1 particle & 2 particle spectral functions



$$\Sigma \sim (G \star X)_{\mathbf{k}, \omega}$$



$$\chi \sim G \star G$$

$$\alpha^2 F$$

Двохчастинкова функція – функція Ліндгарда  
 $\chi(\Omega, \mathbf{Q})$

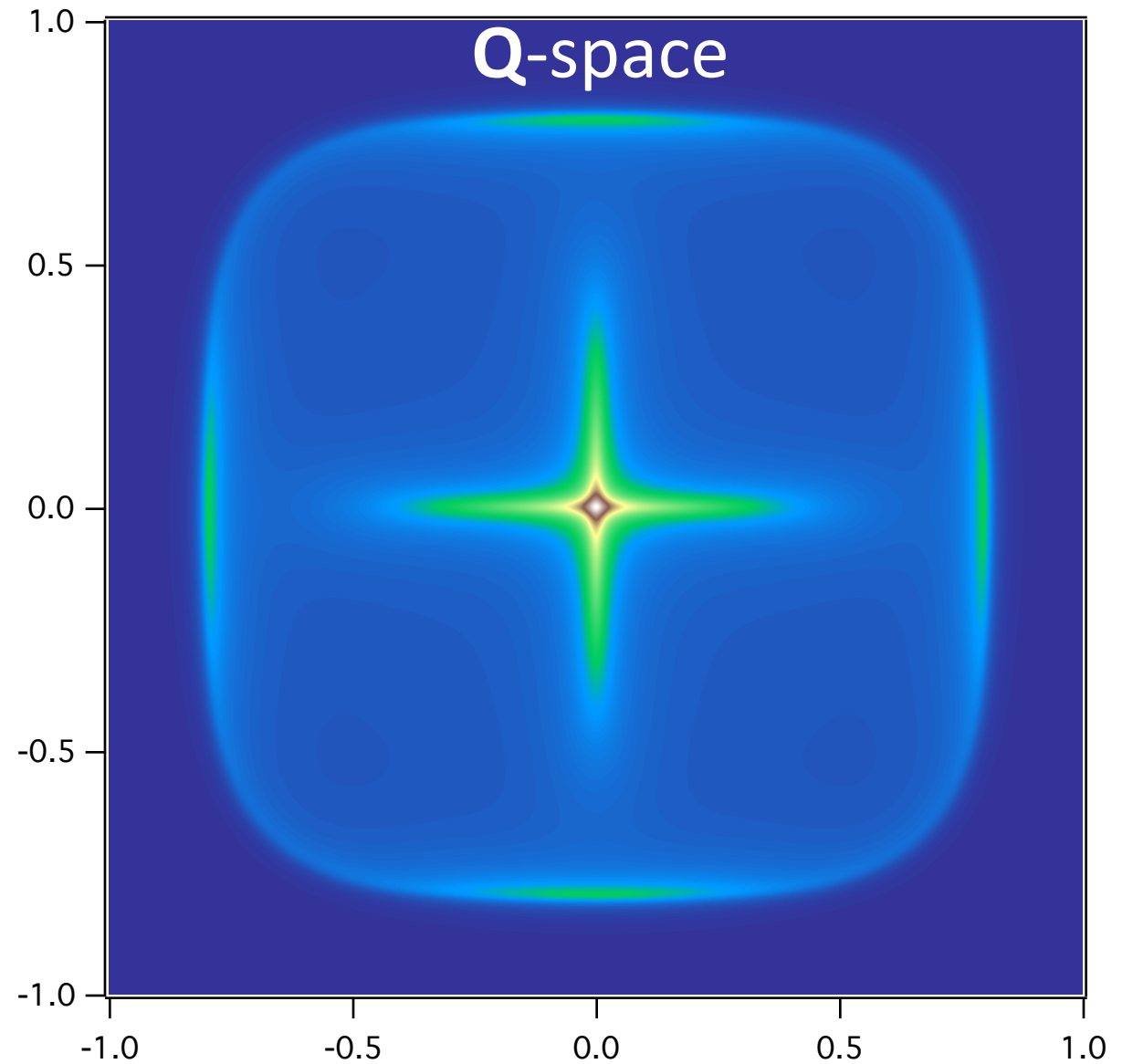
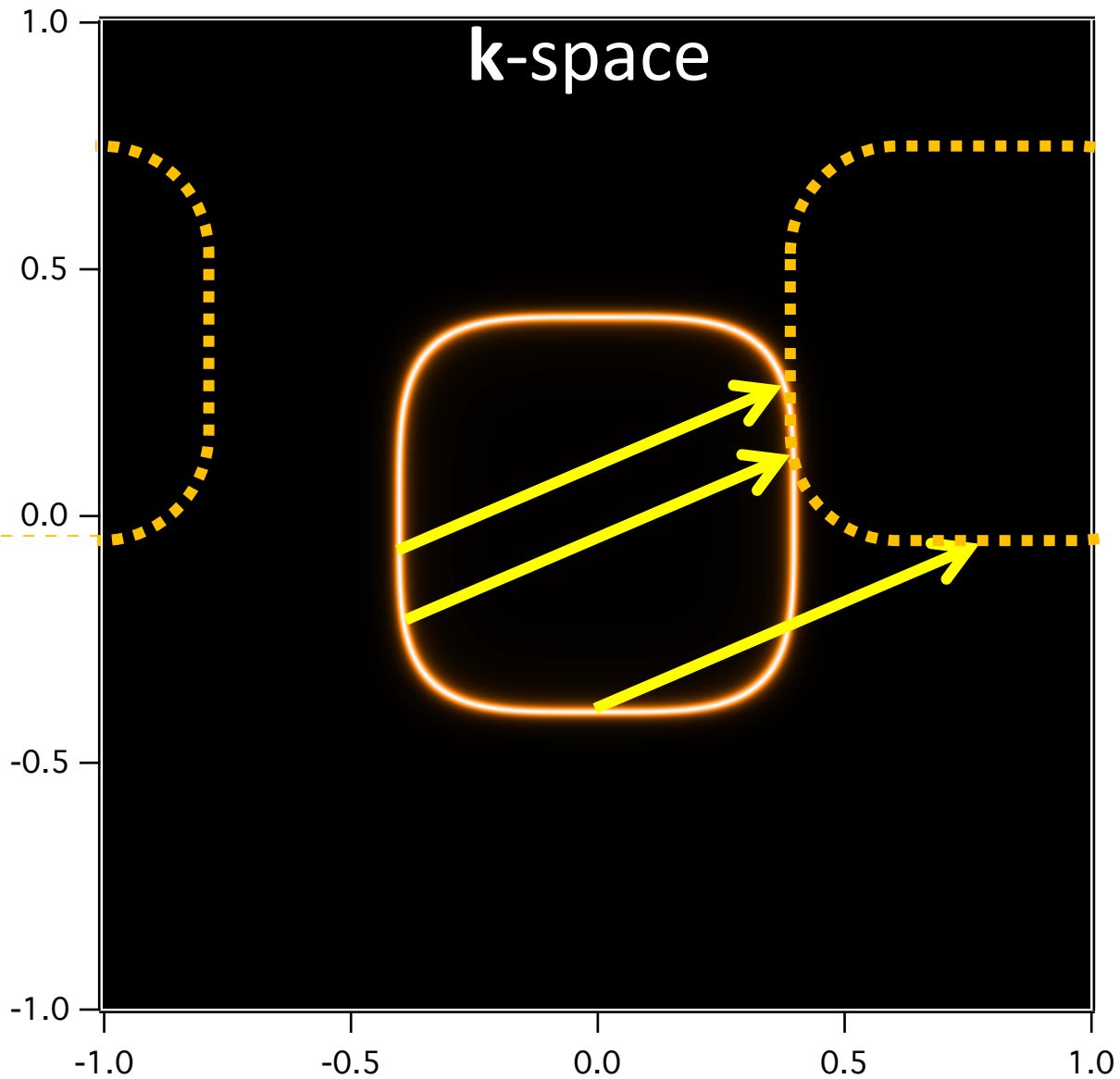
$$\chi_0(\mathbf{Q}, i\Omega_n) = \frac{1}{\pi^2} \int \sum_m G(\mathbf{k}, i\omega_m) G(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, i\omega_m + i\Omega_n) d\mathbf{k}$$

$\mathbf{Q}, \Omega$  - space                       $\mathbf{k}, \omega$  - space

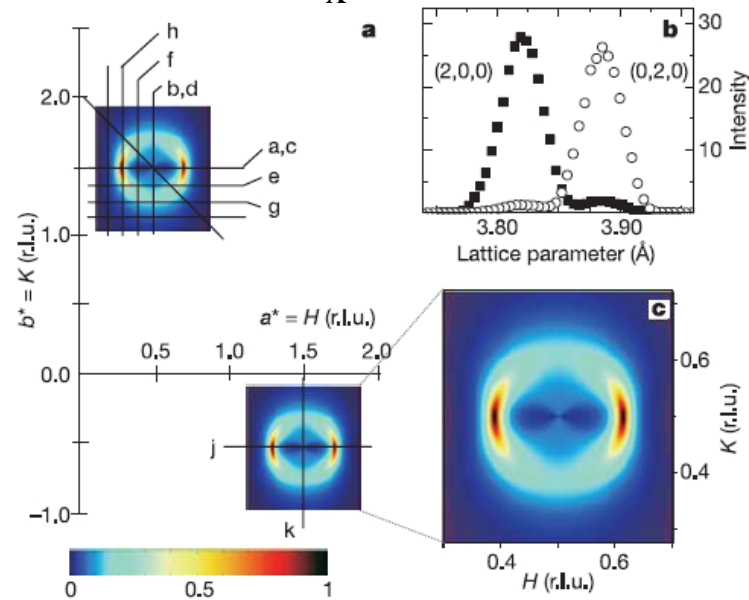
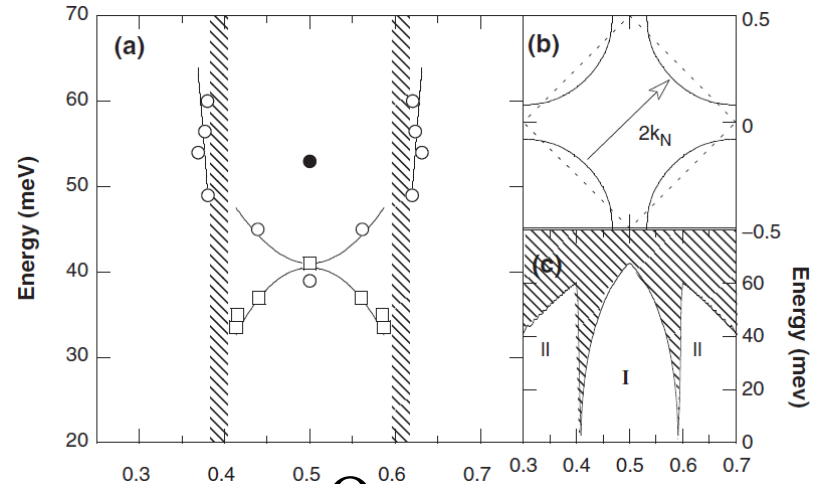
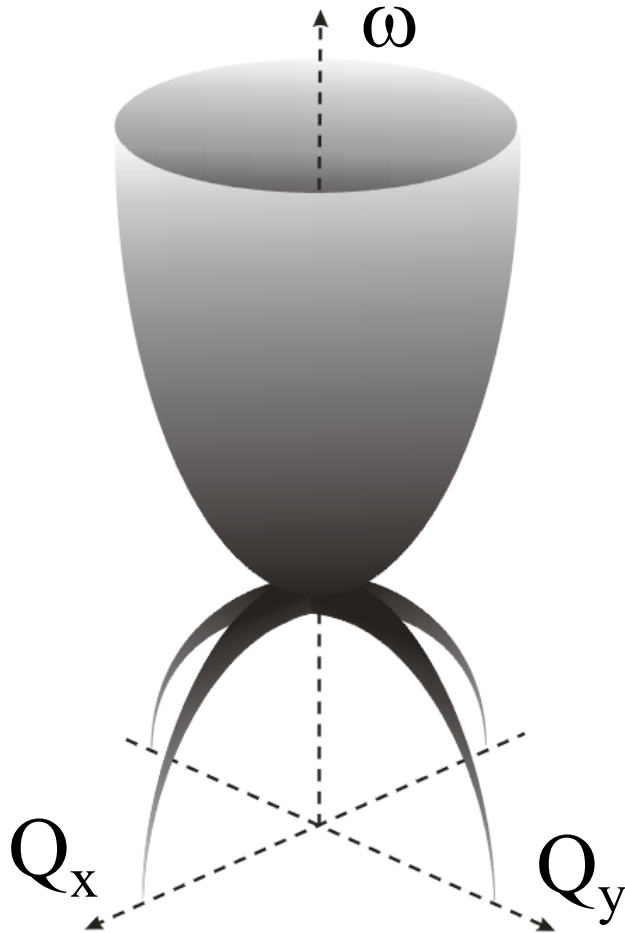
$$\chi \sim G \star G$$

# Numerical (auto)correlation

$$destWaveOut[p] = \sum_{m=0}^{N-1} srcWave[m] \cdot destWaveIn[p+m]$$



# Spin susceptibility structure



$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$

①

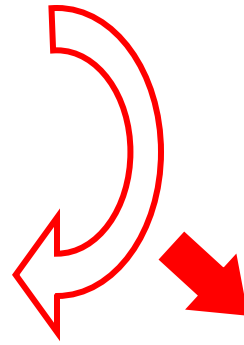
LDA or  
ARPES

$$G_0 \star X_{\text{exp}} \sim \Sigma_i$$

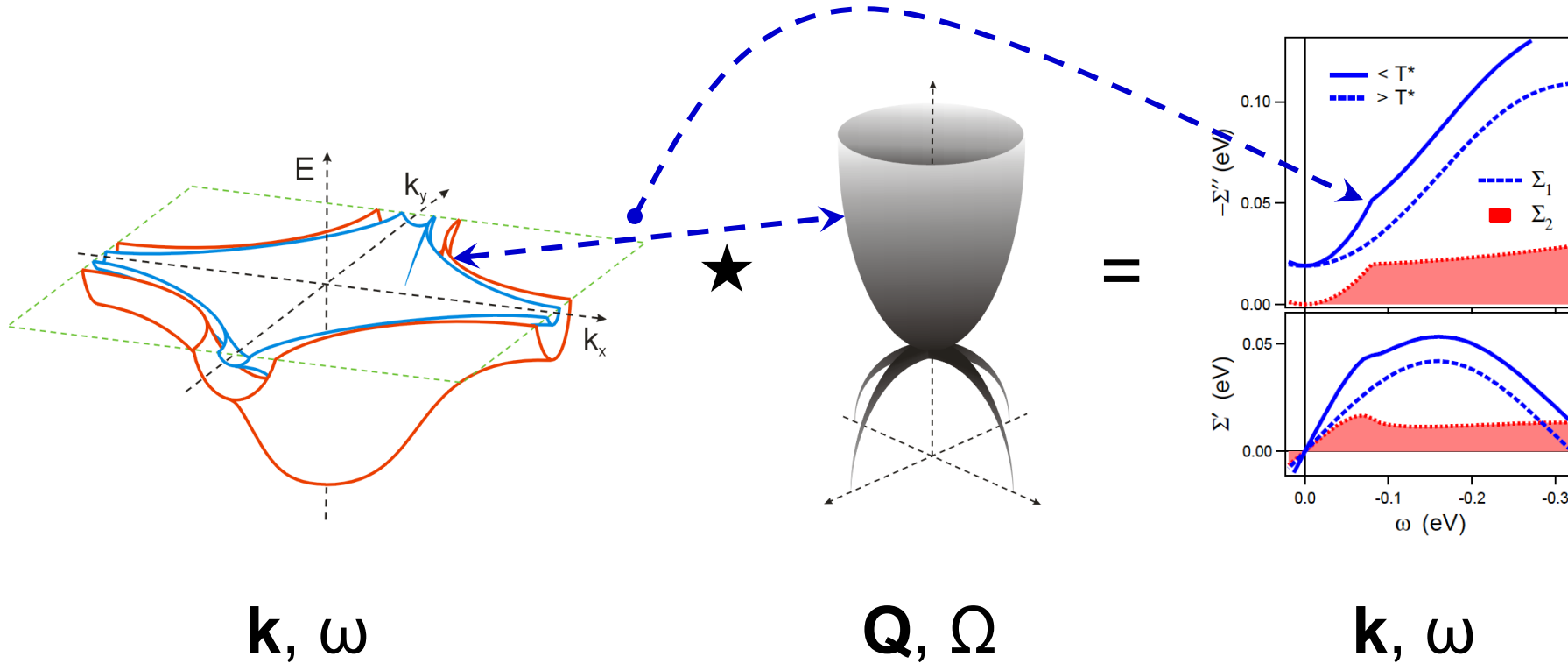


INS

$$G_i^{-1} = G_0^{-1} + \Sigma_i$$

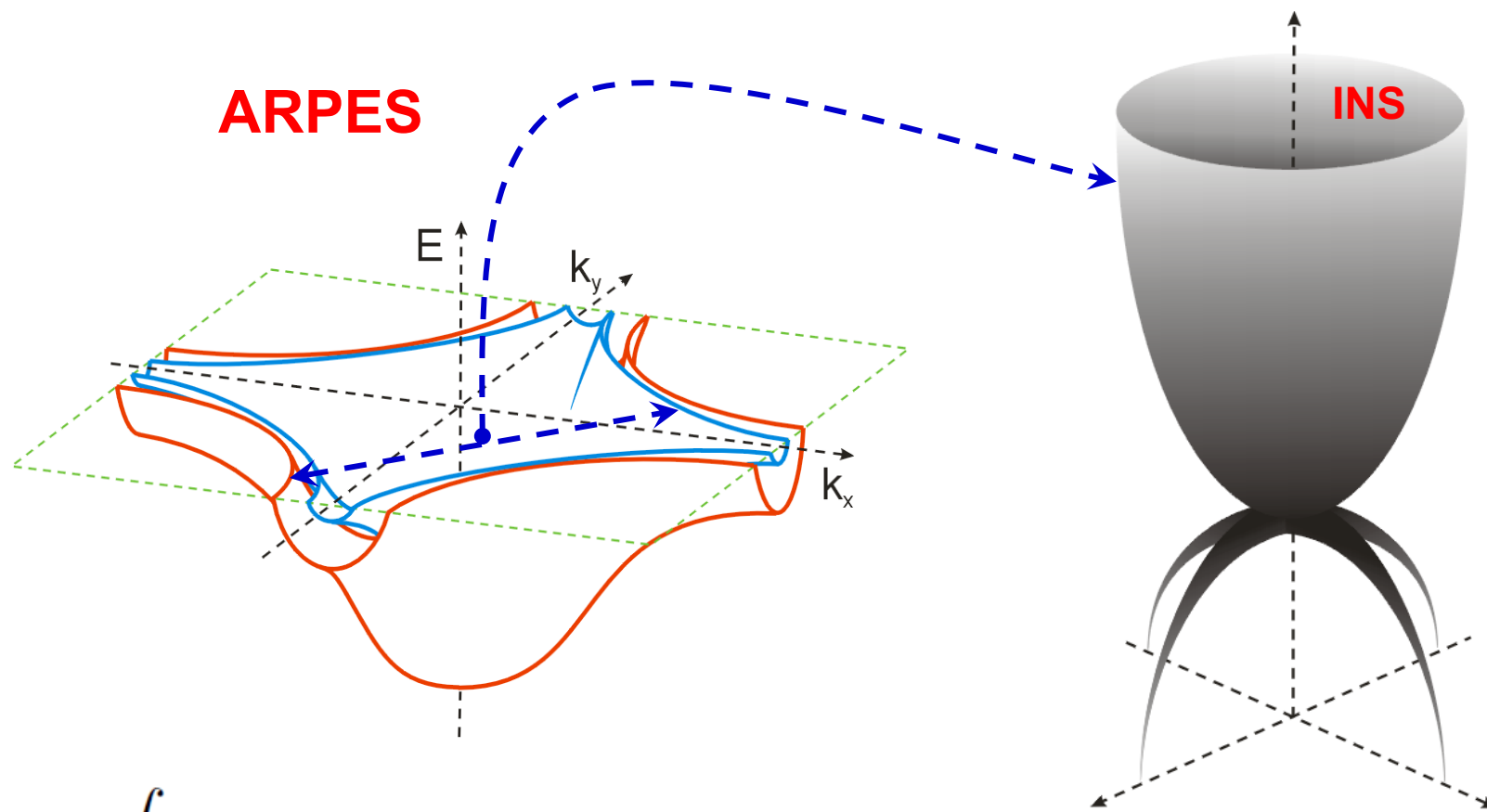


ARPES



itinerant

$$\chi \sim G \star G$$



$$\chi_0(\mathbf{Q}, \Omega) \propto -2i \int G(\mathbf{k}, \omega) G(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \omega + \Omega) d^2k d\omega$$

$$\chi(\mathbf{Q}, \Omega) = \chi_0(\mathbf{Q}, \Omega) / [1 + J_{\mathbf{Q}} \chi_0(\mathbf{Q}, \Omega)]$$

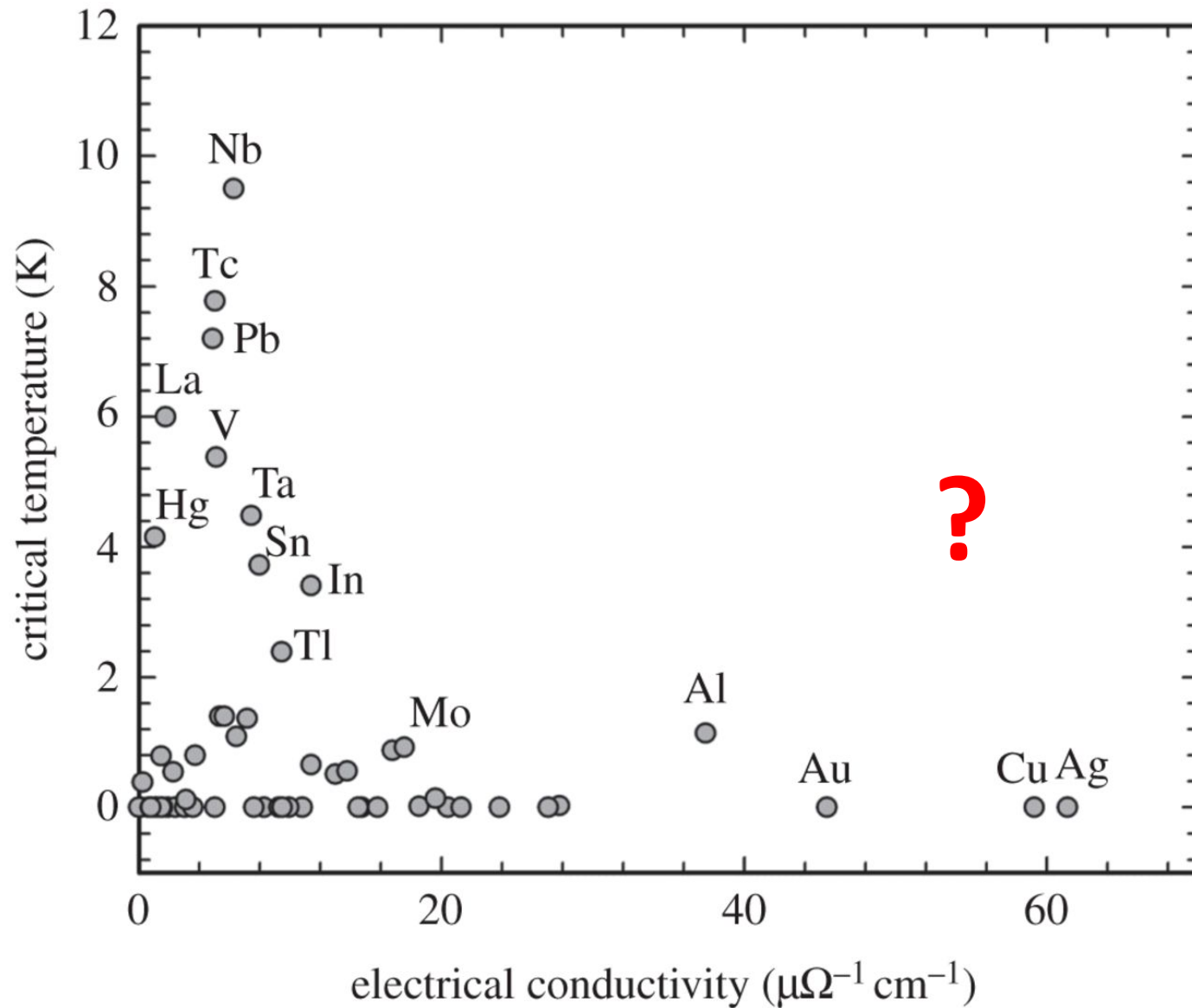
RPA

*Лекції 10, 11:*      **Загадка високотемпературної надпровідності та як її розгадати**

- Чому ртуть? Антикореляція провідності та надпровідності?
- Механізм БКШ? Чим обмежена температура переходу?
- Що таке електронна фазова діаграма та псевдощілина у ВТНП?
- Особливості електронної структури купратів: нод та антинод.
- Надпровідники на основі заліза: що спільного та відмінного з купратами?



# Superconducting Metals and Alloys



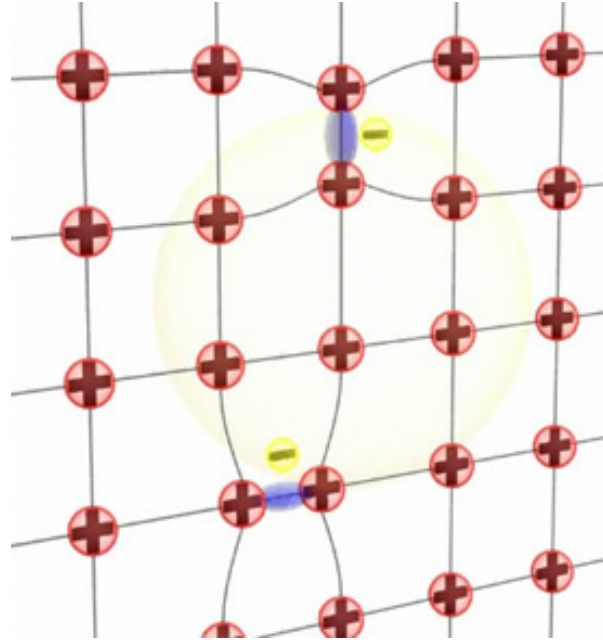
Element/compound	$T_c$ [K]
Al	1.19
Be	0.026
Ga	1.09
Hg	4.15
In	3.40
La	4.8
Nb	9.2
Pb	7.2
Sn	3.72
Ta	4.39
$V_3\text{Ge}$	6.0
$V_3\text{Si}$	17.1
$Nb_3\text{Ge}$	18.0
$Nb_3\text{Sn}$	23.2

# History of superconductivity: BCS

1957

Phonons  
 $T_c < 25\text{K}$

?

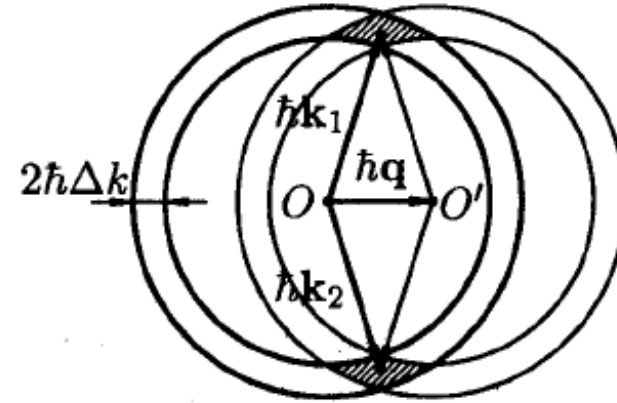
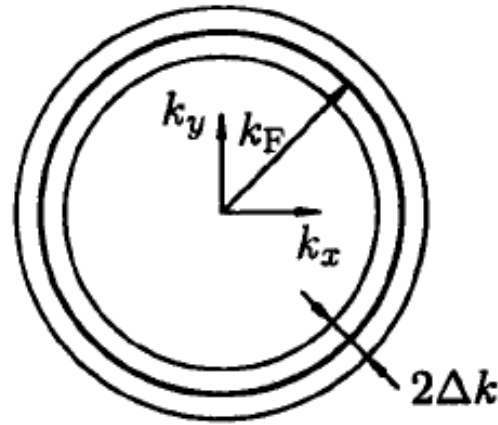
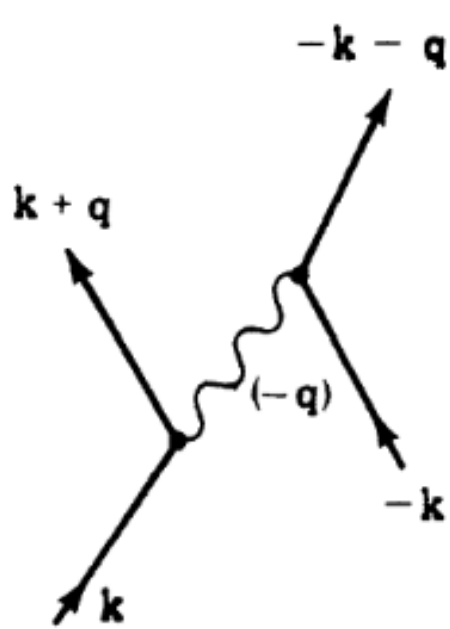


BCS

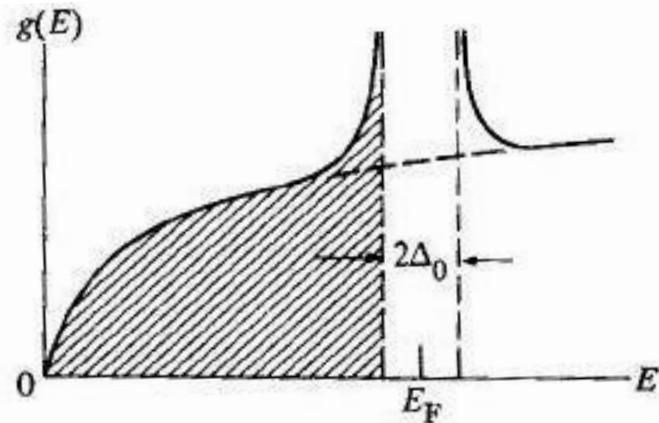
$$k_B T_c = 1.13 E_D e^{-1/N(0) V}$$

$$\Delta(T = 0) = 1.764 k_B T_c$$

# History of superconductivity: BCS

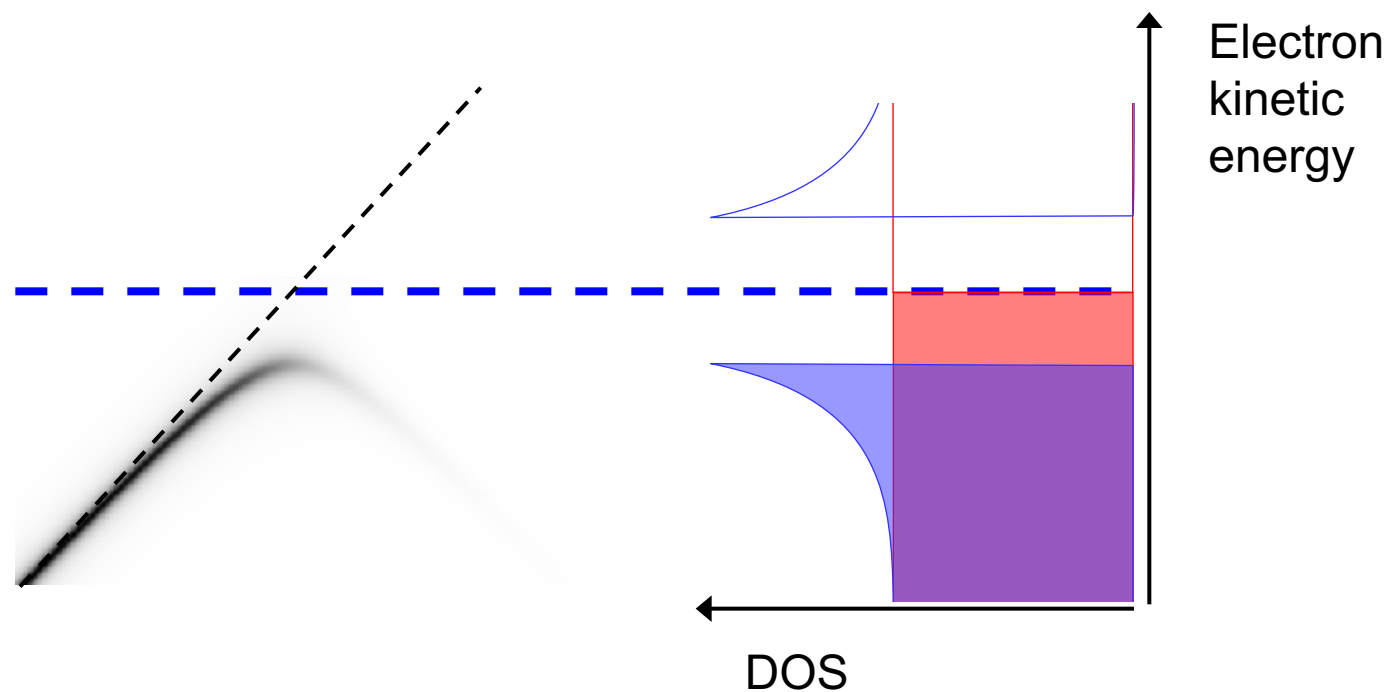


$$\Delta k / k_F \sim \hbar \omega_D / \epsilon_F, \quad \epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m.$$



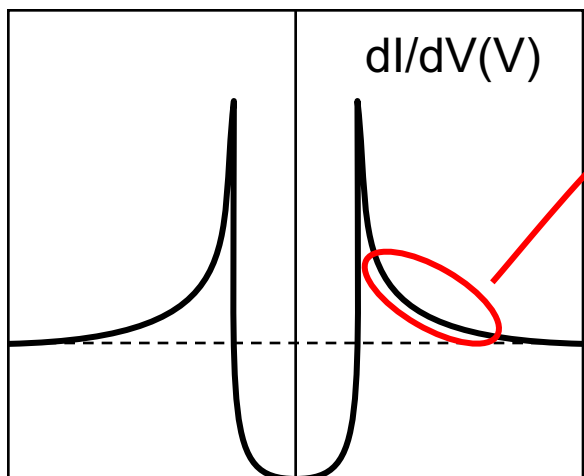
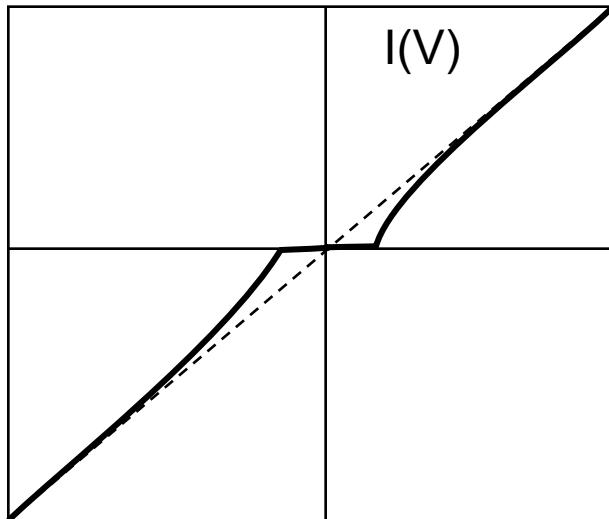
$$\Delta(T \rightarrow T_c) \approx 3.07 k_B T_c \sqrt{1 - (T/T_c)}$$

# Energy scales: superconducting gap

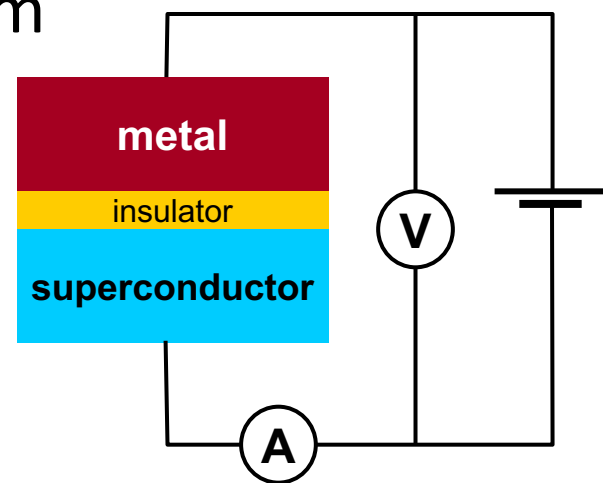
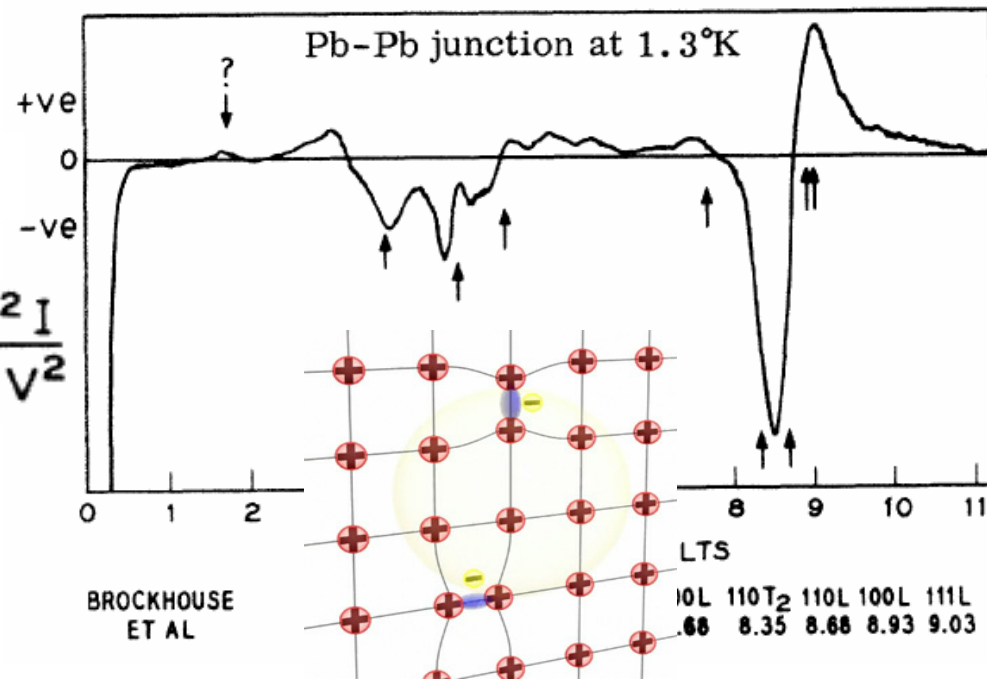


$$2\Delta = 3.5 k T_c$$

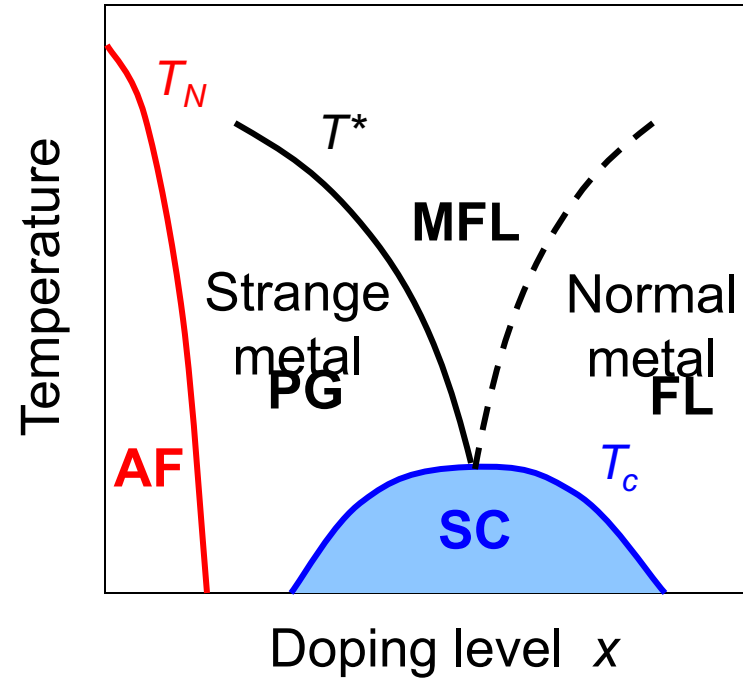
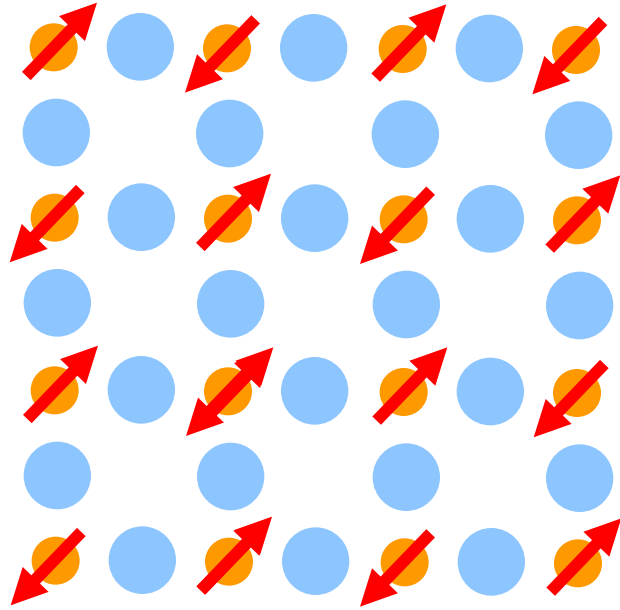
# Experimental proof of the mechanism of superconductivity



$$\frac{d^2 I}{dV^2}$$



# Hole doping

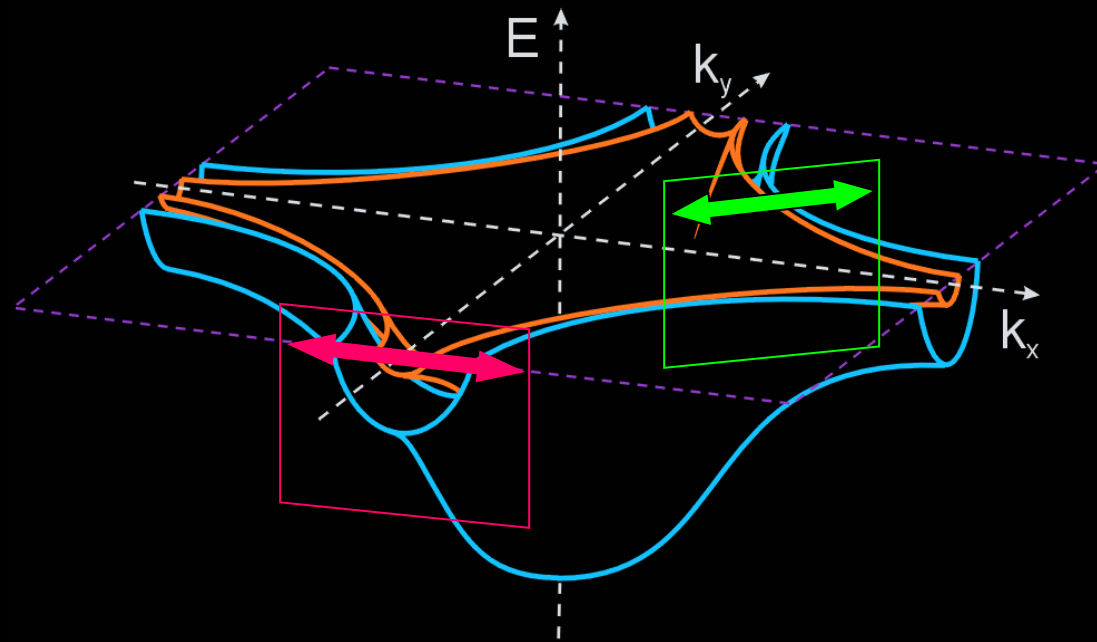
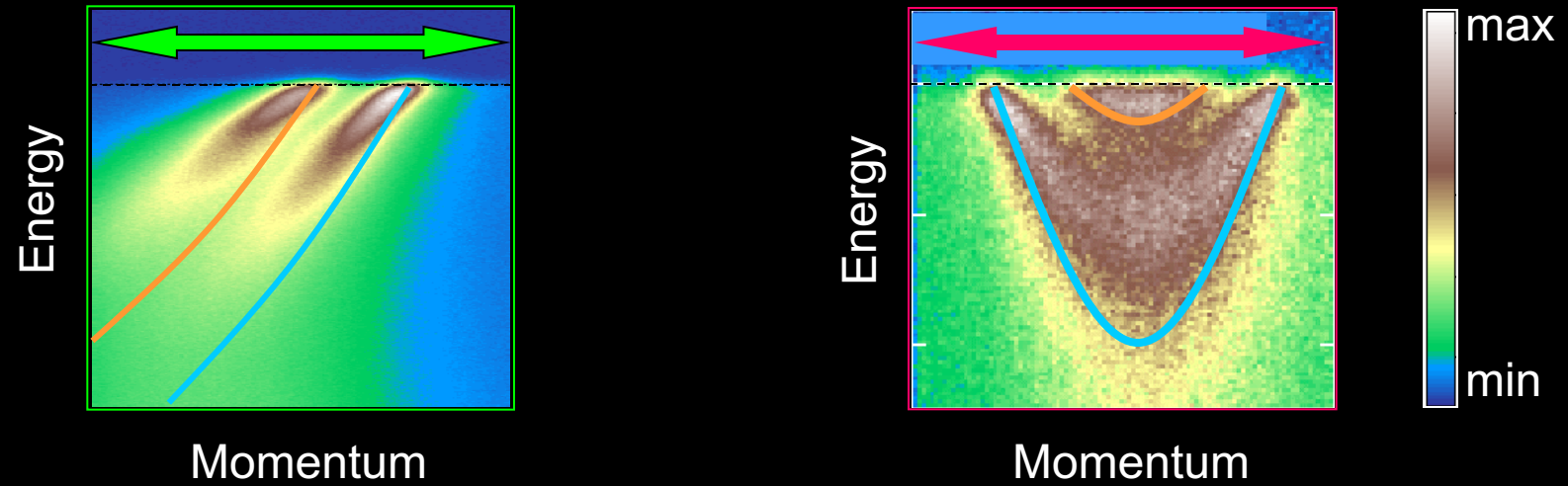


**FL** – Fermi Liquid

**MFL** – Marginal Fermi Liquid

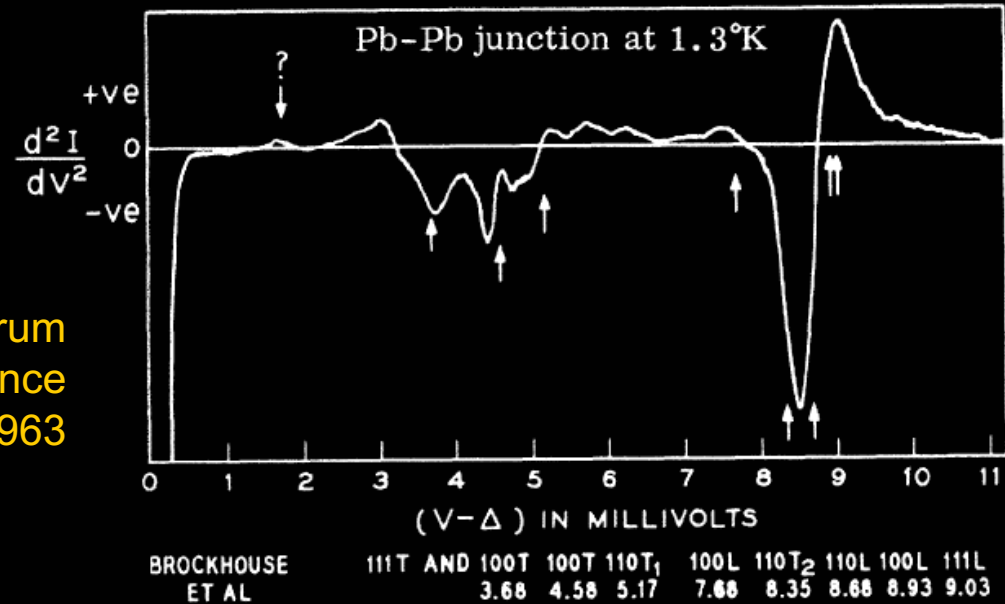
**PG** – Pseudo Gap state

# ВТНП = LDA + Власна енергія ( $\Sigma$ )



# Історія про “відбитки пальців” (fingerprints)

“fingerprints” of the phononic spectrum  
in tunneling differential conductance  
by Rowell *PRL* 1963



$$\Delta(\omega) = \frac{1}{Z(\omega)} \int_0^{\omega_c} d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(\omega')}{(\omega'^2 - \Delta^2(\omega'))^{1/2}} \right\} [K_+(\omega', \omega) - N(0)U_c]$$

$$[1 - Z(\omega)]\omega = \int_0^{\infty} d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\omega'}{(\omega'^2 - \Delta^2(\omega'))^{1/2}} \right\} K_-(\omega', \omega)$$

$$K_{\pm}(\omega, \omega') = \sum_{\lambda} \int_0^{\infty} d\nu \alpha_{\lambda}^2(\nu) F_{\lambda}(\nu) \left[ \frac{1}{\omega' + \omega + \nu + i\delta} \pm \frac{1}{\omega' - \omega + \nu - i\delta} \right]$$

el-ph coupling constant

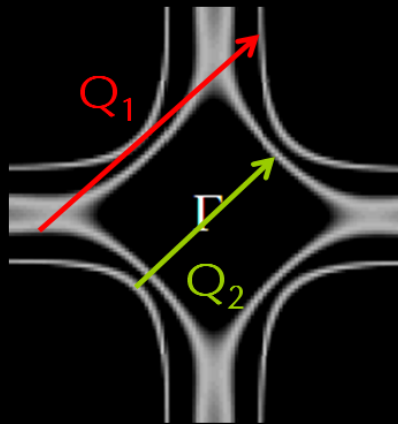
phonon DOS

Scalapino *PR* 1966



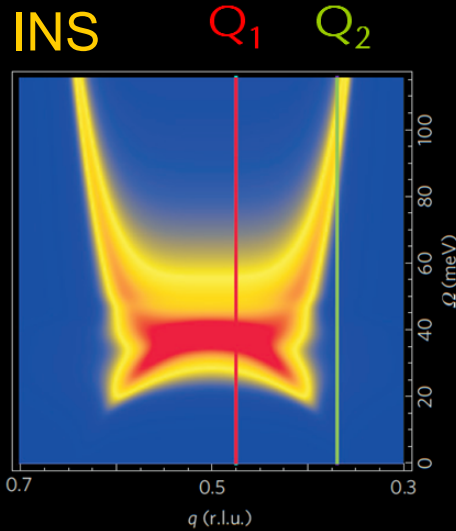
# Спінові флуктуації — медіатор високотемпературної надпровідності

ARPES



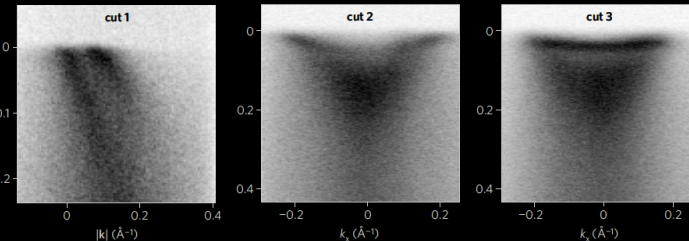
$\text{Im } G_0(\mathbf{k}, \omega)$

INS

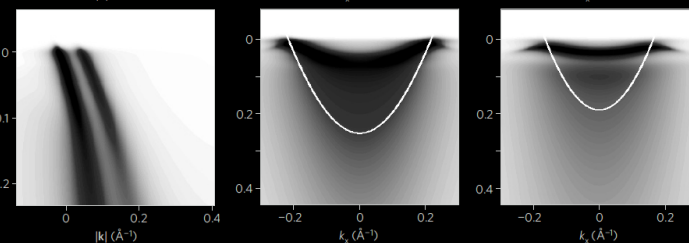


$\text{Im } \chi(\mathbf{q}, \Omega)$

ARPES



Розрах.



$\text{Im } G(\mathbf{k}, \omega)$

Схематична формула купратів:

$$G_0^{-1} + \underbrace{\alpha^2 G \star \chi}_{\Sigma} = G^{-1}$$

$$G_0^{-1} + \alpha^2 G \star \underbrace{G \star G}_{\Sigma} = G^{-1}$$

$G_0, G$  — функції Гріна «голих» електронів та квазічастинок (одночастинкові спектри),  $\Sigma$  — власна енергія,  $\chi$  — спектр спінових флуктуацій (двохчастинковий спектр),  $\alpha$  — константа зв'язку,  $\star$  — операція типу кореляції.

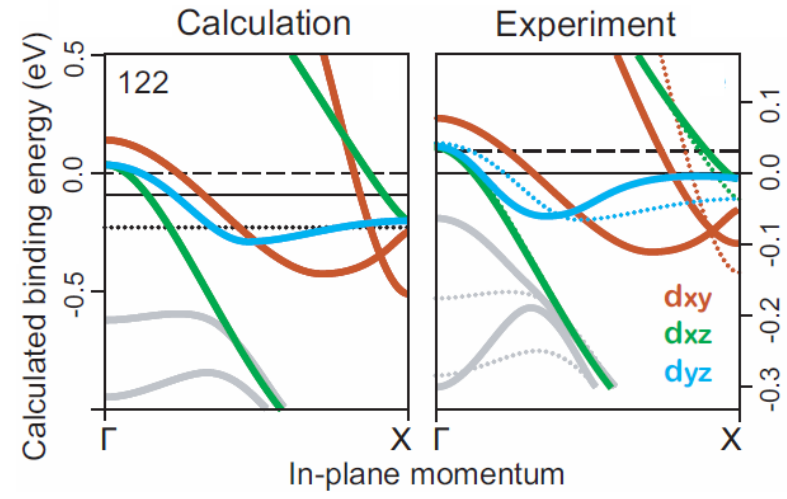
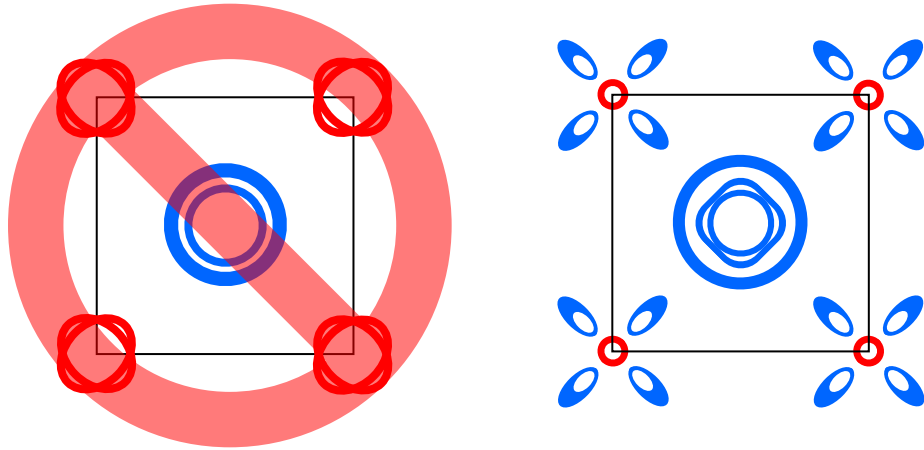
1. Шляхом порівняння ARPES та нейтронних (INS) спектрів показано, що основною причиною ренормалізації в купратах є взаємодія електронів зі **спіновими флуктуаціями**, спектр яких визначається сприйнятливістю електронів провідності.
2. За наявними експериментальними параметрами, магнітний механізм парування передбачає  $T_c \sim 150$  К.

D. Inosov et al., [PRB 2007](#)

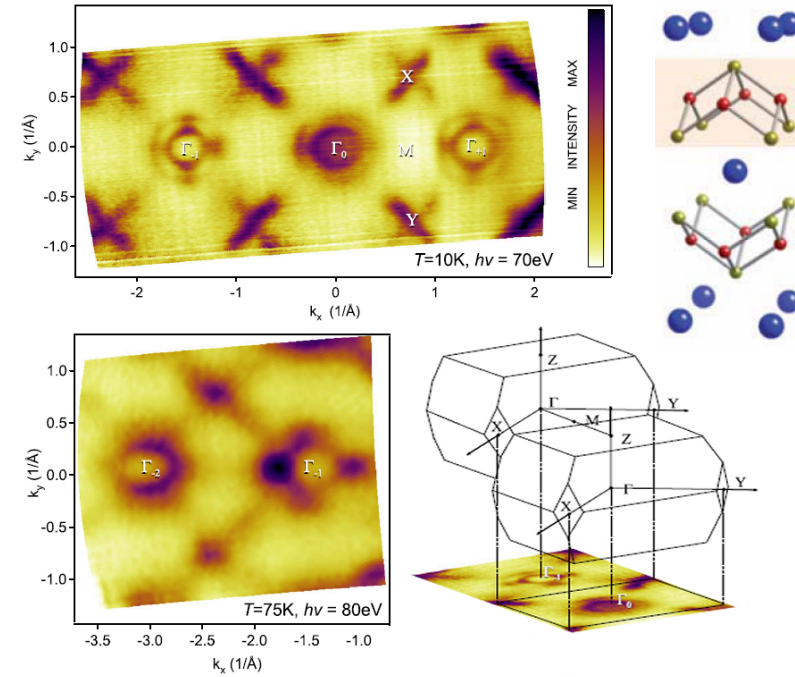
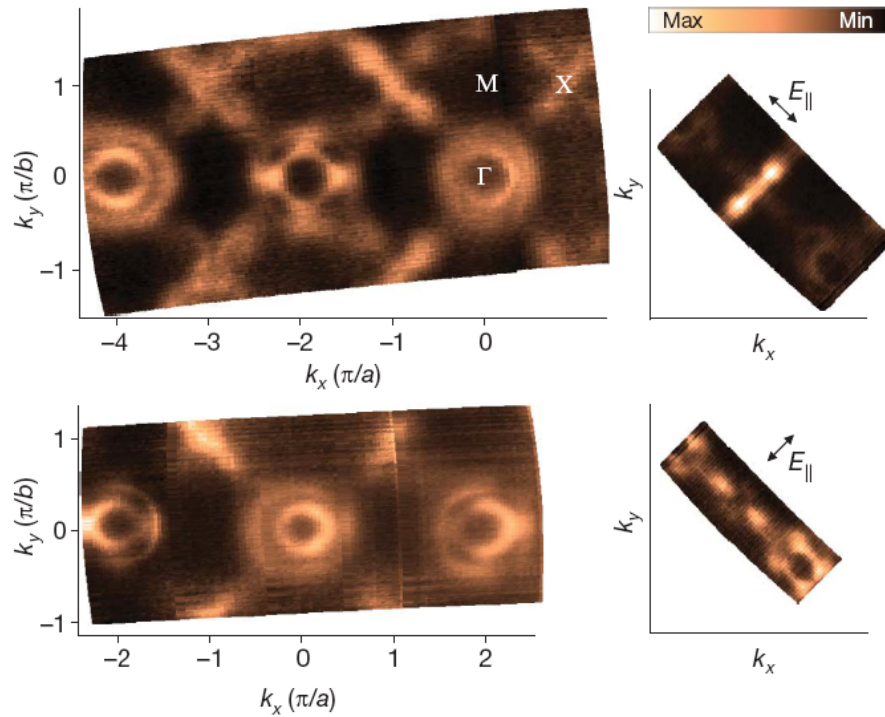
T. Dahm et al., [Nature Phys 2009](#)

A. Kordyuk et al., [EPJ ST 2010](#)

# Поверхня Фермі ВКФА

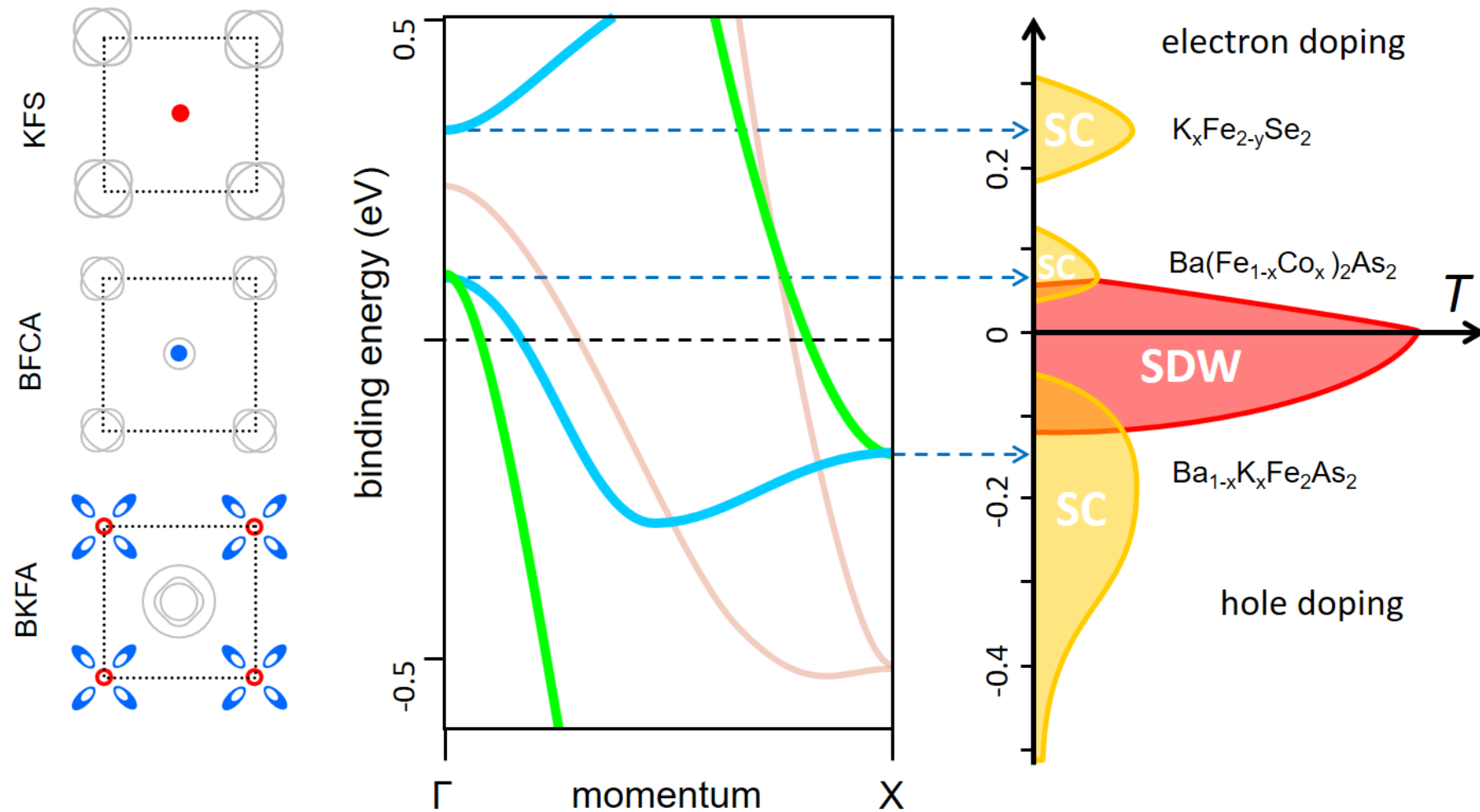


A. A. Kordyuk, *J. Supercond. Nov. Magn.* 2012



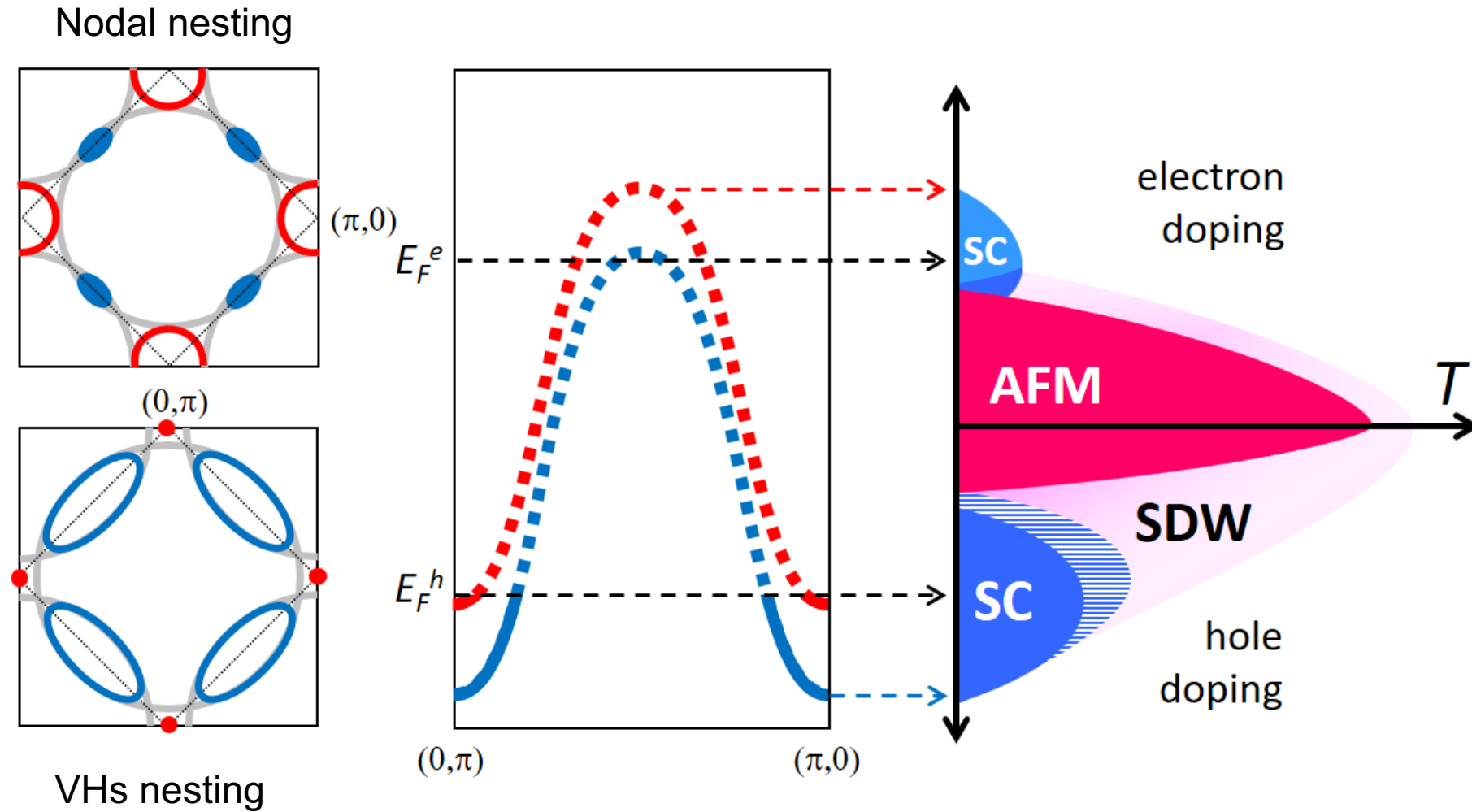
V. Zabolotnyy *Nature* 2009

# "Topological" superconductivity in Fe-SC

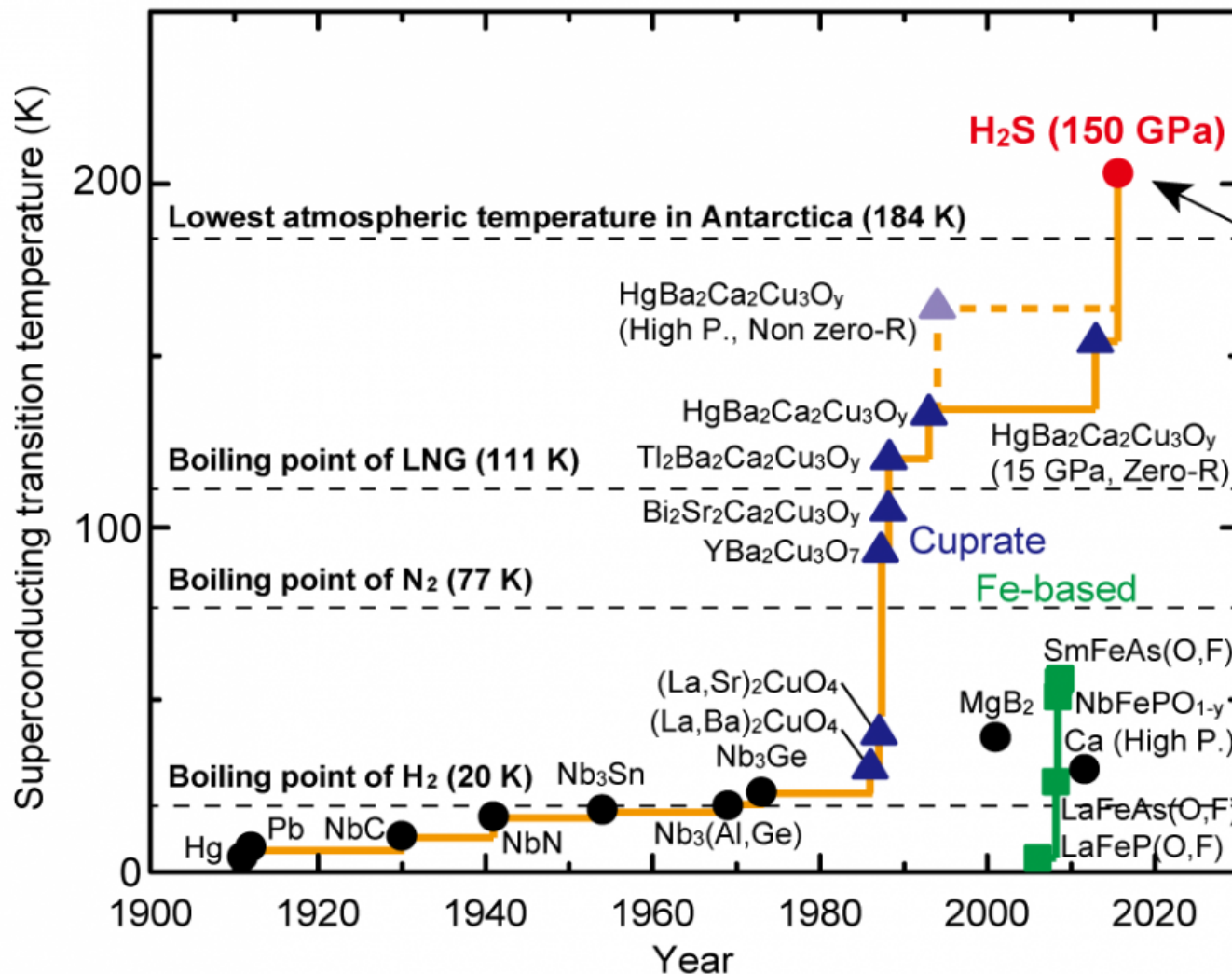


LTP 38, 888 (2012); JSNM 26, 2837-2841 (2013); PRB 88, 134501 (2013);  
PRB 89, 064514 (2014), [LTP \(2018\)](#)...

# SDW and superconductivity



# Фундаментальна проблема: механізм ВТНП



H<sub>2</sub>S: T<sub>c</sub> >200 K @  
>150 GPa

Інтерфейсна  
надпровідність

UC FeSe on SrTiO<sub>3</sub>  
65-100 K

FeSe @ 7 GPa 37 K

FeSe 9 K