

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

*Antonio Štrkalj*

**Metal-izolator prijelaz u  
jednodimenzionalnom  
modelu ravnina bakrovog  
oksida**

Zagreb, 2016.

Ovaj rad je izrađen na Fizičkom odsjeku  
Prirodoslovno-matematičkog fakulteta na Zavodu za teorijsku fiziku  
kondenzirane tvari, pod vodstvom prof. dr. sc. Denisa Sunka te je  
predan na dodjelu Rektorove nagrade u akademskoj godini  
2015./2016.

## **Popis i objašnjenje kratica korištenih u radu**

**1.B.Z.** - prva Brillouinova zona

**TB metoda** - *eng. tight binding* metoda, metoda čvrste veze

**FM** - feromagnet

**AFM** - antiferomagnet

**1D, 2D** - jednodimenzionalan, dvodimenzionalan

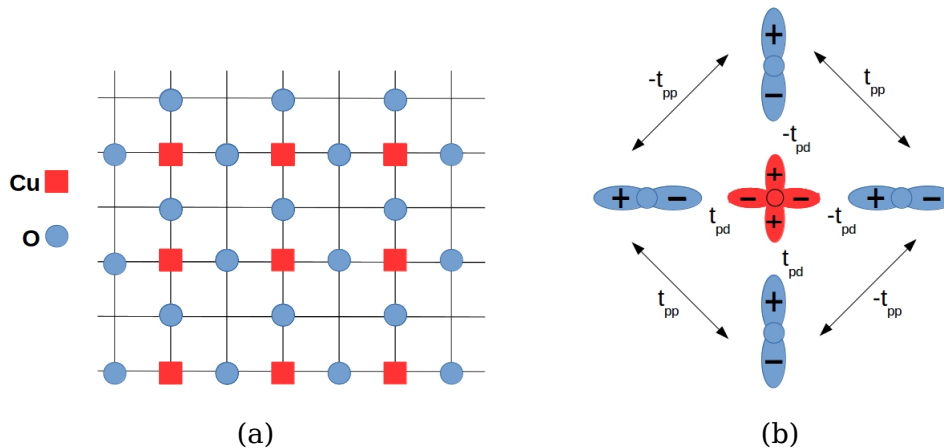
# Sadržaj

<b>1 Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2 Model 1</b>	<b>3</b>
2.1 Hamiltonijan modela . . . . .	3
2.2 Struktura energijskih vrpca . . . . .	4
2.2.1 Uvjet izravnjanja vrpca . . . . .	7
2.2.2 Provjera metaličnosti . . . . .	8
2.3 Valne funkcije . . . . .	9
<b>3 Model 2</b>	<b>11</b>
3.1 Hamiltonijan modela . . . . .	12
3.2 Struktura energijskih vrpca . . . . .	12
3.2.1 Uvjet izravnjanja vrpca . . . . .	14
3.2.2 Provjera metaličnosti . . . . .	15
3.3 Valne funkcije . . . . .	15
<b>4 Magnetska interakcija</b>	<b>16</b>
4.1 Uvođenje spina . . . . .	16
4.2 Hubbardova interakcija . . . . .	17
4.3 Analiza srednjeg polja . . . . .	19
4.3.1 Metalno stanje . . . . .	19
4.3.2 Feromagnetsko i antiferomagnetsko stanje . . . . .	21
4.3.3 Fazni dijagrami . . . . .	22
<b>5 Zaključak</b>	<b>29</b>
<b>Dodatak A Kohnov kriterij</b>	<b>30</b>

<b>Dodatak B Energija feromagnetskog stanja</b>	<b>33</b>
<b>6 Zahvale</b>	<b>36</b>
<b>7 Sažetak</b>	<b>37</b>
<b>8 Summary</b>	<b>38</b>
<b>9 Životopis</b>	<b>39</b>

# 1 Uvod

Bakar-kisik ( $\text{CuO}_2$ ) ravnine su dobro poznat i važan strukturni element visokotemperaturnih supravodiča [1], [2]. To su ravnine koje sadrže bakrove atome okružene s četiri kisikova atoma kao što se može vidjeti na slici 1a i 1b. Zbog simetrije sustava i postojanja dvije vrste preskoka, onih između bakra i kisika ( $t_{pd}$ ) i dvaju susjednih kisika ( $t_{pp}$ ), fizika ovakvog sustava je iznimno bogata kako u režimu supravodljivog prijelaza, tako i u režimu metal-izolator prijelaza. Da



Slika 1: a) Prikaz  $\text{CuO}_2$  ravnine sa crvenim kvadratićima kao bakrovim i plavim kružićima kao kisikovim atomima. Skokovi postoje između bakra i kisika ( $t_{pd}$ ) i susjednih kisika ( $t_{pp}$ ).

b) Uvećani prikaz jednog bakra okruženog s 4 kisika s naznačenim preskocima  $t_{pd}$  i  $t_{pp}$ . Crtež ne prikazuje realnu situaciju jer je bakrova d orbitala puno manja od kisikove p orbitale no radi bolje preglednosti nacrtane su podjednake.

bismo istražili prijelaz materijala iz vodljivog metalnog u izolatorski režim, moramo prvo dobiti energetske vrpce sustava. Njihovom analizom dobivamo grube informacije o ponašanju materijala u ovisnosti o parametarima sustava. No računanje energijskih vrpca nam nije dovoljno da bismo procijenili da li je materijal metal ili nije. Tu imamo

primjer NiO (nikal(II)oksid) u čistom stanju koji nije metal iako mu vrpca nije do kraja popunjena [3]. Moramo uključiti i kulonsku interakciju među elektronima u izračune kako bismo dobili potpuniju informaciju o sustavu [4]. Dva glavna faktora koji određuju da li je materijal metal ili nemetal su kinetička energija koja pogoduje metalnom ponašanju i kulonska energija koja nastoji lokalizirati elektrone na atomima pretvarajući materijal u izolator [5].

U CuO<sub>2</sub> ravninama uz određene uvjete upravno kulonska interakcija između elektrona dovodi do lokaliziranja elektrona na bakru i prijelaza materijala u izolator iako preklopi valnih funkcija nisu nula i skokovi preko kisika ostaju dopušteni.

Istražit ćemo sličan metal-izolator prijelaz na primjeru 1D lanca. Iako je princip preskoka među atomima sličan, zbog smanjenja dimenzije sa 2D na 1D, problem nije potpuno analogan CuO<sub>2</sub> ravninama jer u 2D i 1D ne dominiraju nužno isti fizički mehanizmi. Zanimat će nas kvantni fazni prijelaz pa ćemo sve raditi na temperaturi  $T = 0$  K. Biti će razmatran slučaj polupopunjenja. Također, za feromagnetsku i antiferomagnetsku fazu ćemo pretpostaviti da su elektroni lokalizirani na bakrovim atomima bez mogućnosti preskoka na kisike.

Koristit ćemo se metodom čvrste veze (TB metodom) i većinu rezultata dobiti analitički. Za izračune nekih analitički nerješivih integrala koristit ćemo se numeričkim metodama u programu *Mathematica*. Grafovi su također dobiveni pomoću programa *Mathematica*.

U poglavljima "*Model 1*" i "*Model 2*" prikazujemo rezultate analize dva jednodimenzionalna modela koja imaju neka svojstva bakar-kisik ravnina, te ćemo istražiti da li se metal-izolator prijelaz može dogoditi ukoliko izravnamo energijsku vrpcu u kojoj se nalaze elektroni.

U poglavlju "*Magnetska interakcija*" ćemo uvesti Heisenbergovu interakciju između spinova i gledati kako ona narušava metalno stanje i prevodi sustav u izolatorsko stanje. Detaljno ćemo analizirati fazne dijagrame metalne, feromagnetske i antiferomagnetske faze. Sva tri navedena poglavlja sadrže odgovarajuće rezultate i rasprave.

## 2 Model 1

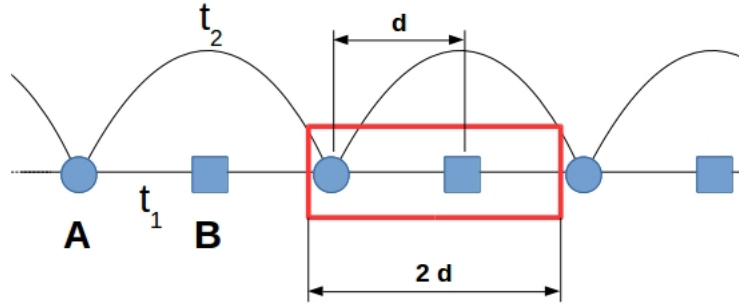
Da bismo napravili 1D analogon  $\text{CuO}_2$  ravnine, moramo imati dvije vrste različitih atoma i 2 načina preskoka među njima. Stavimo dakle u jediničnu ćeliju dva atoma A i B, odnosno "kisik" i "bakar", te neka su preskoci između "bakra" i "kisika"  $t_1$ , a između "kisika" i "kisika" u drugoj ćeliji  $t_2$ . Radi zornosti, od sada nadalje nećemo pisati navodnike za bakar i kisik, već ćemo atome tipa A nazvati kisikovim, a tipa B bakrovim. Napomenimo da model nije nužno vezan samo za bakar i kisik, već općenito za elemente s p orbitalom poput kisikove i prijelazne metale sa d orbitalom kao što je bakar. Slika 2 prikazuje naš model sa svim naznačenim parametrima.

### 2.1 Hamiltonijan modela

Hamiltonijan neinteragirajućeg modela je slijedeći:

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon_A \sum_i a_i^\dagger a_i + \epsilon_B \sum_i b_i^\dagger b_i + t_1 \sum_i (a_i^\dagger b_i + a_{i+1}^\dagger b_i + h.c.) \\
 & + t_2 \sum_i (a_i^\dagger a_{i+1} + h.c.)
 \end{aligned}
 \tag{1}$$





Slika 2: Prikaz promatranog jednodimenzionalnog lanca sa naznačenim preskocima  $t_1$  i  $t_2$ . Kružići označuju A tip atoma ("kisik"), kvadratići B tip ("bakar"). Razmak između susjednih atoma je  $d$ . Crvenim pravokutnikom označena je jedinična ćelija veličine  $2d$ .

sa operatorima stvaranja elektrona  $a_i^\dagger$  na kisiku i  $b_i^\dagger$  na bakru u  $i$ -toj ćeliji te operatorima poništenja  $a_i, b_i$ . Prva dva člana stvaraju elektron na kisiku i bakru po svim ćelijama i za to plaćamo redom energije  $\epsilon_A$  i  $\epsilon_B$ . Neka je  $\epsilon_A > \epsilon_B$  jer će nam to biti fizikalno zanimljiviji režim. Treći član opisuje skokove među susjednim atomima kisika i bakra, a posljednji član skokove između kisikovih atoma susjednih ćelija.

## 2.2 Struktura energijskih vrpca

Operatore stvaranja i poništenja možemo zapisati kao Fourier transformate

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k e^{-ikj(2d)}; \quad b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k b_k e^{-ik(j+\frac{1}{2})(2d)} \quad (2)$$

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k^\dagger e^{ikj(2d)}; \quad b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k b_k^\dagger e^{ik(j+\frac{1}{2})(2d)}$$

gdje je  $N$  broj čestica. Stavljajući tako raspisane operatore u početni hamiltonijan (1) i koristeći

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(k'-k)(2d)} = \delta_{k',k} \quad (3)$$

on postaje

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_A + 2t_2 \cos(2kd) & 2t_1 \cos(kd) \\ 2t_1 \cos(kd) & \epsilon_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Želimo naći linearnu kombinaciju  $c_k^\dagger = f_a(k)a_k^\dagger + f_b(k)b_k^\dagger$  koja će nam dijagonalizirati hamiltonijan

$$H = \sum_k E(k) c_k^\dagger c_k = \sum_k E(k) \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_a(k) \\ f_b(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_a^*(k) & f_b^*(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad (5)$$

Usporedbom (4) i (5), čitav problem svodimo na svojstveni problem, odnosno dijagonalizaciju matrice

$$\begin{pmatrix} \epsilon_a + 2t_2 \cos(2kd) & 2t_1 \cos(kd) \\ 2t_1 \cos(kd) & \epsilon_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_a(k) \\ f_b(k) \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} f_a(k) \\ f_b(k) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

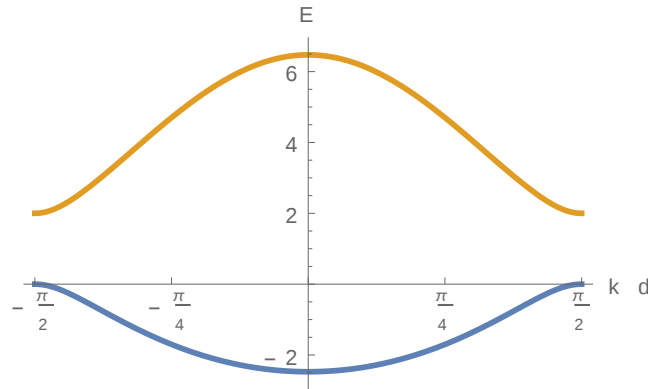
Svojstvene vrijednosti dobivamo rješavajući

$$\begin{vmatrix} \epsilon_A + 2t_2 \cos(2kd) - E(k) & 2t_1 \cos(kd) \\ 2t_1 \cos(kd) & \epsilon_B - E(k) \end{vmatrix} = 0. \quad (7)$$

Rješenja su dvije energijske vrpce  $E_+(k)$  i  $E_-(k)$

$$E_\pm = \frac{\epsilon_+}{2} + t_2 \cos(2kd) \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_-}{2} + t_2 \cos(2kd)\right)^2 + 4t_1^2 \cos^2(kd)} \quad (8)$$

gdje smo uveli pokrate;  $\epsilon_{\pm} \equiv \epsilon_A \pm \epsilon_B$ .



Slika 3: Svojevne energije hamiltonijana  $E_{\pm}(k)$ .  $E_{+}(k)$  je prikazana narančastom, a  $E_{-}(k)$  plavom bojom. Pošto su periodične, vrpce crtamo samo u prvoj Brillouinovoj zoni (1.B.Z.). Korišteni su parametri:  $d = 1$ ,  $t_1 = 2$ ,  $t_2 = 0.5$ ,  $\epsilon_B = 0$ ,  $\epsilon_A = 3$ .

Odmah uočavamo da nam se preskok između susjednih atoma,  $t_1$ , pojavljuje samo jednom u izrazu za energije i to kvadriran što nam govori da njegov predznak neće igrati ulogu u mijenjanju izgleda vrpce, već samo njegova vrijednost. Za preskoke koji se dešavaju preko  $t_2$  to nije slučaj. Pojavljuju se linearni članovi pod korijenom i izvan njega, stoga će oblici vrpce značajno ovisiti o predznaku preskoka  $t_2$ .

Na slici 3 vidimo izgled dvaju dobivenih vrpce. Odabrali smo ishodište energije stavljajući  $\epsilon_B = 0$ . Razmak između vrpce je najmanji na kraju 1.B.Z te iznosi  $\Delta = \epsilon_A - \frac{t_2}{2}$ .

Varirajući parametre sustava možemo sužavati i proširivati vrpce. Jedan način za sužiti vrpce je povećati razmak  $\Delta$  povećavši  $\epsilon_A$ , a drugi je varirati preskoke  $t_1$  i  $t_2$ . Iako matematički ekvivalentni, ta dva načina se razlikuju sa stajališta fizike. U prvom načinu povećavamo energiju  $\epsilon_A$  koju moramo platiti da stavimo elektron na kisik, čineći atome kisika energetski manje povoljnima za elektrone. To nema iz-

ravne veze sa kohezivnom interakcijom čiji matrični element povezuje dva atoma, već sa svakim atomom zasebno. Efekt koji dobivamo time je da se elektroni krenu lokalizirati na bakrovim atomima potencijalno rušeći sustav u izolatorsko stanje. Drugi način je da podešavajući omjer koeficijenata  $t_2$  i  $t_1$  dobijemo destruktivnu interferenciju koja bi predvidivo mogla spriječiti elektrone da vode struju ne dajući im da preskoče u sljedeću ćeliju.

### 2.2.1 Uvjet izravnjanja vrpca

Promotrimo netrivialno izravnjanje vrpca namještanjem omjera  $t_2/t_1$ . Da bismo našli uvjet na taj omjer  $t_2/t_1$ , dovoljno je tražiti da derivacija energije bude nula za svaki  $k$

$$\frac{dE_{\pm}(k)}{dk} = 0. \quad (9)$$

Nakon sređivanja, dobivamo uvjet

$$2t_2^2 - t_2\epsilon_A - t_1^2 = 0 \implies t_2 = \frac{\epsilon_A}{4} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{\epsilon_A}{2}\right)^2 + 2t_1^2} \quad (10)$$

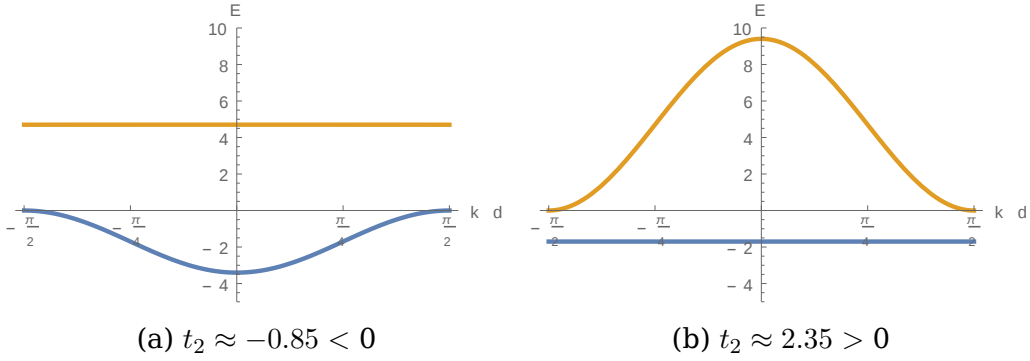
koji ne ovisi o  $k$  kao što i treba biti. I u gornjem uvjetu (10) vidimo da predznak od  $t_1$  ne igra nikakvu ulogu jer se pojavljuje kao kvadratičan. Ukoliko izaberemo rješenje za  $t_2$  koje u sebi ima + ispred korijena, ono će biti pozitivno, dok će – ispred korijena davati negativno rješenje. Pošto ćemo gledati fiziku koja se odvija na polupopunjenju sustava, zanimljivo će nam biti izravnjanje donje  $E_-(k)$  vrpce.

Uvrštavanjem  $t_2$  koji zadovoljava (10) u  $E_{\pm}(k)$ , laganim sređivanjem dobivamo da se za pozitivan  $t_2$  izravnava donja vrpca, a za negativan gornja.

Tablica 1: Izravnavanje pojedine vrpce za određeni predznak od  $t_2$ . Kada je  $t_2$  negativan izravna se gornja vrpca, a kada je pozitivan donja vrpca.

	izravnanje
$t_2 < 0$	$E_+$
$t_2 > 0$	$E_-$

Nas će dakle više zanimati slučaj kada se donja vrpca izravna i tada je rješenje (10) za  $t_2$  pozitivno kao što možemo vidjeti na slici 4.



Slika 4: Izravnavanje donje i gornje vrpce za  $t_2$  koji zadovoljava (10). Vrijednosti korištenih varijabli su:  $d = 1$ ,  $t_1 = 2$ ,  $\epsilon_B = 0$ ,  $\epsilon_A = 3$ .

## 2.2.2 Provjera metaličnosti

Iako je vrpca ravna, ne možemo reći da je tada izolatorska. Da bismo saznali kakav je naš sustav u tom režimu koristit ćemo Kohnov kriterij koji je objašnjen u *Dodatku A*. Stavimo cikličke rubne uvjete na naš sustav i zamijenimo jedan  $t_2$  u  $-t_2$ . Hamiltonijan time postaje

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon_A \sum_i a_i^\dagger a_i + \epsilon_B \sum_i b_i^\dagger b_i + t_1 \sum_i (a_i^\dagger b_i + a_{i+1}^\dagger b_i + h.c.) \\
 & + t_2 \sum_i (a_i^\dagger a_{i+1} + h.c.) - t_2 (a_N^\dagger a_1 + h.c.)
 \end{aligned} \tag{11}$$

gdje zadnja suma sa  $t_2$  ne uključuje preskok sa kisika N-te ćelije na kisik prve ćelije. Koristeći transformaciju

$$a_j \longrightarrow a_j = \tilde{a}_j e^{-i\frac{\pi}{N}j} \quad (12)$$

$$b_j \longrightarrow b_j = \tilde{b}_j e^{-i\frac{\pi}{N}j - i\frac{\pi}{2N}} \quad (13)$$

i prebacujući sve u k-prostor, hamiltonijan se svodi na

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} \tilde{a}_k^\dagger & \tilde{b}_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_A + 2t_2 \cos(2kd + \frac{\pi}{N}) & 2t_1 \cos(kd + \frac{\pi}{2N}) \\ 2t_1 \cos(kd + \frac{\pi}{2N}) & \epsilon_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{a}_k \\ \tilde{b}_k \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Puštajući  $N \rightarrow \infty$  dobivamo istu matricu kao i kod (4). Samim time što je ova transformacija moguća odnosno daje iste vrpce, možemo reći da je sustav metaličan. Pošto nismo koristili nikakve restrikcije na koeficijente  $t_1, t_2$  transformacija vrijedi i za slučaj izravnavanja vrpce. Ravna vrpca ostaje vodljiva.

Zaključak dosadašnje analize je da će sustav biti metaličan čak i kada se donja vrpca izravna. Nikakav omjer  $t_2/t_1$  neće lokalizirati valne funkcije i time prevesti sustav iz metalnog u izolatorsko ponašanje.

## 2.3 Valne funkcije

Dijagonalizacijom matrice (6) smo dobili svojstvene energije i koristeći njih možemo naći svojstvene vektore. Običaj je pisati ih u već normiranom obliku

$$|v_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \end{pmatrix}, \quad |v_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix} \quad (15)$$

gdje je  $|v_+\rangle$  svojstveni vektor sa svojstvenom vrijednosti  $E_+$ , a  $|v_-\rangle$  sa  $E_-$ .  $\phi$  je kut kojeg ćemo odrediti rješavajući svojstveni problem (6).

Rješenje za kut  $\phi$  je

$$\tan 2\phi(k) = \frac{-4t_1 \cos^2(kd)}{\epsilon_A + 2t_2 \cos 2(kd)} \equiv g. \quad (16)$$

Ovdje smo  $g$  uveli kao oznaku izračunatog tangensa dvostrukog kuta. Kut  $\phi$  će biti funkcija od  $k$  i ovisit će o svim varijablama sustava, a elementi vektora će biti realni. Trigonometrijskim relacijama dođemo do izraza za  $\sin \phi$  i  $\cos \phi$

$$\sin \phi(k) = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1+g^2}} \right)}; \quad \cos \phi(k) = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{1+g^2}} \right)} \quad (17)$$

čime je svojstveni problem riješen u potpunosti.

Hamiltonijan (4) smo preveli u dijagonalni oblik transformacijom operatora  $a_k$  i  $b_k$  dobivajući nove operatore

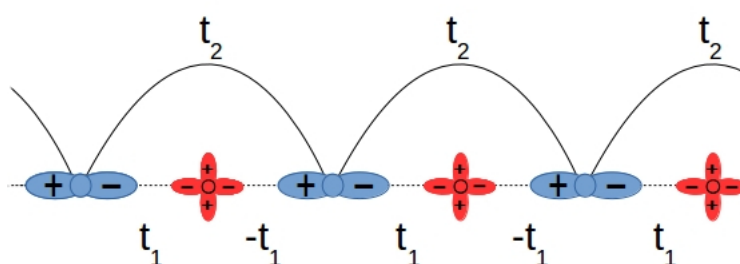
$$\begin{aligned} A_k &= \cos \phi(k) a_k + \sin \phi(k) b_k \\ B_k &= -\sin \phi(k) a_k + \cos \phi(k) b_k \end{aligned} \quad (18)$$

koji stvaraju vrpcu. Dijagonalizirani hamiltonijan (4) je

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} A_k^\dagger & B_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_+(k) & 0 \\ 0 & E_-(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}. \quad (19)$$

### 3 Model 2

*Model 1* predstavlja najjednostavniji model koji sadrži dvije vrste atoma s dva različita preskoka  $t_1$  i  $t_2$ . Ukoliko umjesto atoma A i B nacrtamo realistične orbitale  $p$  za kisik i  $d$  za bakar, kao što je prikazano na slici 5, vidjet ćemo da postoji simetrijska razlika s *modelom 1*.



Slika 5: Plavo je označena veća kisikova  $p$  orbitala, crveno manja bakrova  $d$  orbitala. Razmak između susjednih atoma je  $d$ . Više nemamo iste preskoke  $t_1$  sa bakra na kisik, već oni alterniraju.

Preskoci između susjednih kisika će ostati isti za svaku ćeliju i iznositi  $t_2$ , ali preskoci  $t_1$  sa kisika na bakar i obrnuto će alternirati u prostoru. Zbog  $+/-$  simetrije  $p$  orbitale čak i ako umjesto bakrove  $d$  orbitale stavimo  $s$  orbitalu (jer kod prijelaznih metala  $s$  orbitala može hibridizirati sa  $d$  orbitalom), svejedno ćemo dobiti alternirajući niz preskoka  $t_1$ .



### 3.1 Hamiltonijan modela

Hamiltonijan će sadržavati predznak minus kod bakar-kisik skokova između dvije ćelije

$$H = \epsilon_A \sum_i a_i^\dagger a_i + \epsilon_B \sum_i b_i^\dagger b_i + t_1 \sum_i (a_i^\dagger b_i - a_{i+1}^\dagger b_i + h.c.) + t_2 \sum_i (a_i^\dagger a_{i+1} + h.c.). \quad (20)$$

Koristeći (2) možemo ga zapisati u  $k$  prostoru

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_A + 2t_2 \cos(2kd) & 2i t_1 \sin(kd) \\ -2i t_1 \sin(kd) & \epsilon_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Jedina razlika sa hamiltonijanom (4) je što na nedijagonalnim mjestima umjesto  $2t_1 \cos(kd)$  sada imamo  $\pm 2i t_1 \sin(kd)$ .

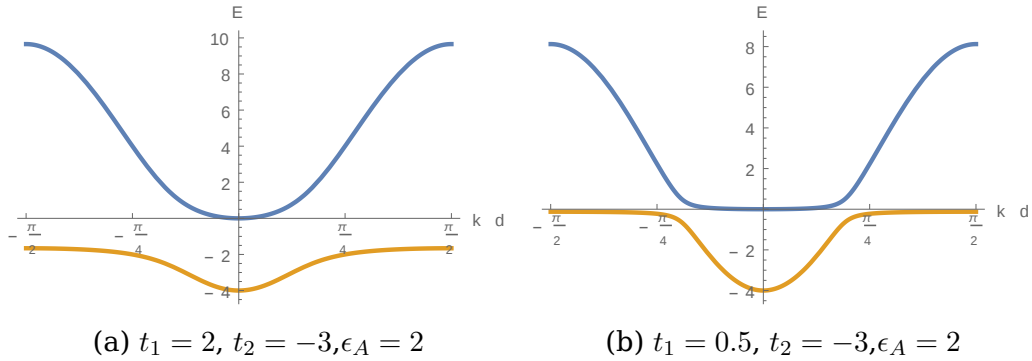
### 3.2 Struktura energijskih vrpca

Energije će pod korijenom sadržavati  $\sin(kd)$  uz preskok  $t_1$

$$E_{\pm} = \frac{\epsilon_{\pm}}{2} + t_2 \cos(2kd) \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_{-}}{2} + t_2 \cos(2kd)\right)^2 + 4t_1^2 \sin^2(kd)}. \quad (22)$$

Vidimo da se  $t_1$  opet pojavljuje kao kvadratičan dok se  $t_2$  pojavljuje i linearno pa će nam samo mijenjanje predznaka  $t_2$  imati utjecaja isto kao i u *modelu 1*. Postojat će dva načina da suzimo vrpcu, jedan povećanjem  $\epsilon_A$ , a drugi namještanjem omjera  $t_2/t_1$ . Opet ćemo skalirati energije stavljajući  $\epsilon_B = 0$ .

Na slici 6 je zanimljivo uočiti oblik vrpca i što se s njim događa



Slika 6: Energijske vrpce  $E_{\pm}(k)$  za *model 2* sa različitim parametrom  $t_1$  u a) i b) slučaju.  $E_+(k)$  je prikazana plavom, a  $E_-(k)$  narančastom bojom. Udaljenost između susjednih atoma je  $d = 1$  i  $\epsilon_B = 0$ .

kada parametre malo promijenimo. Postoje značajne razlike sa oblikom vrpce *modela 1*. Obje vrpce sada imaju minimume u  $k = 0$  i izbjegnuta presijecanja unutar 1.B.Z. za razliku od energija *modela 1* koji imaju izbjegnuta presijecanja na rubu zone i gdje gornja vrpca ima maksimum na  $k = 0$ . Izbjegnuto presijecanje u *modelu 1* (slika 3) uvijek ostaje na rubu zone i posljedica je simetrije sustava, dok se u *modelu 2* presijecanja mijenjaju sa promjenom parametara sustava. To se upravo dešava i u realnim 2D bakar-kisik ravninama gdje je položaj izbjegnutog presijecanja određen parametrima te je u tom pogledu *model 2* realističniji, odnosno, analogija sa stvarnim kupratima je bliža.

Parametar  $t_1$  kontrolira širinu ravnog dijela vrpce, dok  $\epsilon_A$  i  $t_2$  mijenjaju širinu gornje vrpce i razmak između vrpce. Gornja vrpca je na rubovima kisikova, a donja je bakrova na ravnijim dijelovima za male vrijednosti  $t_1$ . Kako se približavamo sredini zone, odnosno točki  $k = 0$ , donja vrpca dobiva sve veći utjecaj kisikove orbitale i postaje kisikova dok će gornja u tom dijelu postati bakrova. Ovakvo miješanje doprinosa kisikovih i bakrovih orbitala nastaje kada je kisikova

vrpca šira od početnog razmaka između dvije vrpce  $\epsilon_A - \epsilon_B$  i dešava se i u realnim kisik-bakar ravninama. Dopiranjem možemo mijenjati fermijev nivo tako da on bude pri dnu donje vrpce gdje prevladava kisikova  $p$  orbitala ili pri vrhu vrpce u ravnijem dijelu gdje prevladava bakrova  $d$  orbitala.

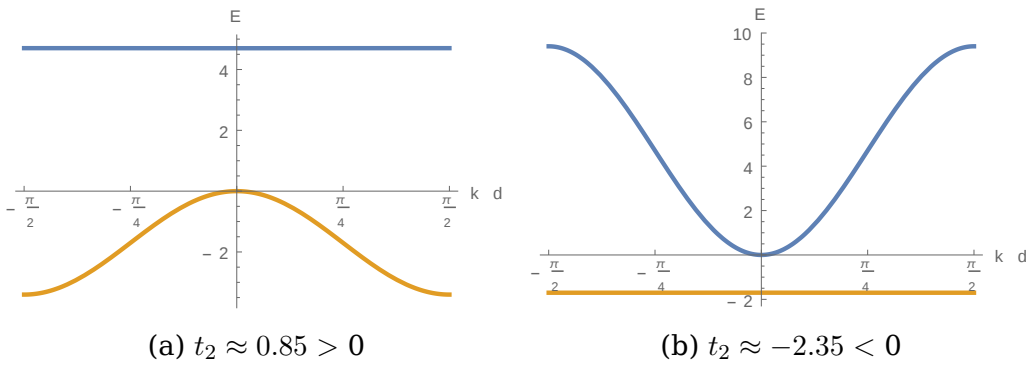
### 3.2.1 Uvjet izravnanja vrpce

Kako bismo našli omjer  $\frac{t_2}{t_1}$  koji izravnava  $E_-$  vrpce, tražit ćemo iščezavanje derivacije za svaki  $k$  kao i u *modelu 1*

$$\frac{dE_{\pm}(k)}{dk} = 0. \quad (23)$$

Iz njega dobivamo

$$2t_2^2 + t_2\epsilon_A - t_1^2 = 0 \implies t_2 = -\frac{\epsilon_A}{4} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{\epsilon_A}{2}\right)^2 + 2t_1^2}. \quad (24)$$



Slika 7: Izravnanje donje i gornje vrpce za  $t_2$  koji zadovoljava (24). Vrijednosti korištenih varijabli su:  $d = 1$ ,  $t_1 = 2$ ,  $\epsilon_B = 0$ ,  $\epsilon_A = 3$ .

Uvjet destruktivne interferencije je do na predznak ispred  $\epsilon_A$  isti kao i (10). Posljedica alternirajućih  $t_1$  je da sada  $t_2 < 0$  izravnava

donju  $E_-$  vrpcu dok  $t_2 > 0$  izravna gornju  $E_+$  vrpcu kao što se može vidjeti na slici 7. U ovom modelu, na polupopunjenju je zanimljivo promatrati slučaj  $t_2 < 0$  kada se izravna donja vrpca.

Tablica 2: Izravnavanje pojedine vrpce za određeni predznak od  $t_2$ . Kada je  $t_2$  negativan izravna se donja vrpca, a kada je pozitivan gornja vrpca.

	izravnanje
$t_2 < 0$	$E_-$
$t_2 > 0$	$E_+$

### 3.2.2 Provjera metalčnosti

Da li lanac ostaje metal i sada kada smo uveli alternirajući red  $t_1$  možemo opet provjeriti Kohnovim kriterijem iz *Dodatka A*. Postupak je analogan onom izvedenom za *model 1* i budući da ne postoji razlika u simetriji preskoka  $t_2$  između dva modela, krajnji rezultat će biti isti. Sustav ostaje metal i kada mu namještanjem parametara  $t_2/t_1$  u potpunosti izravnamo vrpcu.

### 3.3 Valne funkcije

Analognim postupkom kao i u *modelu 1*, iz normiranog zapisa valnih funkcija

$$|v_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \end{pmatrix}, \quad |v_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix} \quad (25)$$

i uz rješavanje svojstvene jednadžbe za hamiltonijan *modela 2*, dobivamo

$$\tan 2\phi(k) = \frac{-4t_1 \sin^2(kd)}{\epsilon_A + 2t_2 \cos 2(kd)} \equiv g. \quad (26)$$

Jedina je razlika u tome što za  $g$  u brojniku sada imamo  $\sin^2(kd)$  umjesto  $\cos^2(kd)$ . Operatori koji dijagonaliziraju hamiltonijan su zadržali oblik

$$\begin{aligned} A_k &= \cos \phi(k) a_k + \sin \phi(k) b_k \\ B_k &= -\sin \phi(k) a_k + \cos \phi(k) b_k \end{aligned} \tag{27}$$

uz drugačiji  $\phi(k)$ .

Fizika modela s alternirajućim preskokom  $t_1$  nije se drastično promijenila u odnosu na model sa istim preskocima  $t_1$ , ali nastale promjene koje postoje čine model s alternirajućim preskokom  $t_1$  realističnijim. Budući da je *model 2* kao 1D analogon bliži bakar-kisik ravninama, u daljnjim razmatranjima ćemo koristiti upravo njega.

## 4 Magnetska interakcija

Kao što smo vidjeli, efekt interferencije koji izravnavava vrpcu ne prevodi sustav u izolatorsko stanje. Da bi sustav prešao iz metala u izolator, moramo uključiti dodatnu interakciju između elektrona koja će imati svojstvo da lokalizira elektrone na atomu.

### 4.1 Uvođenje spina

Ukoliko uključimo i spinski stupanj slobode koji elektroni posjeduju, fizika modela će postati znatno bogatija i nešto bliža realističnim sustavima. U prije razmatranim modelima *Model 1* i *Model 2* smo dobili rezultate izostavljajući spin, ali njega možemo trivijalno uključiti u odsustvu interakcije. Ništa od prijašnjih razmatranja se neće promi-

jeniti. Imat ćemo i dalje dvije vrpce od kojih će elektroni u polupopunjenu ispunjavati donju vrpcu. Izravnane donje vrpce kao i njezina metaličnost ostaju nepromijenjeni.

## 4.2 Hubbardova interakcija

Sada kada smo uveli spinske stupnjeve slobode, model možemo učiniti realnijim ako uključimo interakciju između spinova. Krenimo od uobičajenog Hubbardovog modela interakcije

$$H_{Hubb} = U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \quad (28)$$

gdje su  $\uparrow, \downarrow$  spin u jednom i drugom smjeru. Ukupni hamiltonijan postaje

$$\begin{aligned} H = & \epsilon_A \sum_{i,\sigma} a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} + \epsilon_B \sum_{i,\sigma} b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + t_1 \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + a_{i+1,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + h.c.) \\ & + t_2 \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+1,\sigma} + h.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \end{aligned} \quad (29)$$

U fizikalnom režimu kada je  $U \gg \Delta_{AB} = (\epsilon_A - \epsilon_B)$  gornji hamiltonijan se može pojednostavniti. Članovi u sumi s  $t_1$  će dobiti projektore uz operatore  $b_{i,\sigma}$  te će postati

$$t_1 \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} (1 - \hat{n}_{i,\sigma}) + a_{i+1,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} (1 - \hat{n}_{i,\sigma}) + h.c.). \quad (30)$$

dok će se Hubbardov član transformirati u

$$-J \sum_i \hat{S}_i \hat{S}_{i+1} \quad (31)$$

gdje su  $\hat{S}_i$  operatori spina, a  $J \approx \frac{4t_1^4}{\Delta_{AB}^3}$  koeficijent izmjene [6], [7]. Prilikom usrednjavanja u metodi srednjeg polja, projektori će postati  $(1 - \langle \hat{n}_{i,\sigma} \rangle)$  te za fiksirano popunjenje neće utjecati na energije i fazni dijagram. Ukoliko ne bismo fiksirali popunjenje, trebalo bi računati dodatne integrale  $\langle \hat{n}_{i,\sigma} \rangle$  za svaku vrijednost popunjenja. Ovako ih jednostavno možemo uključiti u koeficijent  $t_1$  i kako su nam i  $t_1$  i  $J$  samo varijable, njihov oblik i postupak kojim su nastale nam neće biti bitan. Zamjena projektora srednjom vrijednošću drastično pojednostavljuje model, jer sada ostaje samo član u  $J$  kao mogući uzrok izolatorskog ponašanja.

Hubbardov model smo sveli na Heisenbergov model interakcije susjednih spinova. Ukupni hamiltonijan nam je

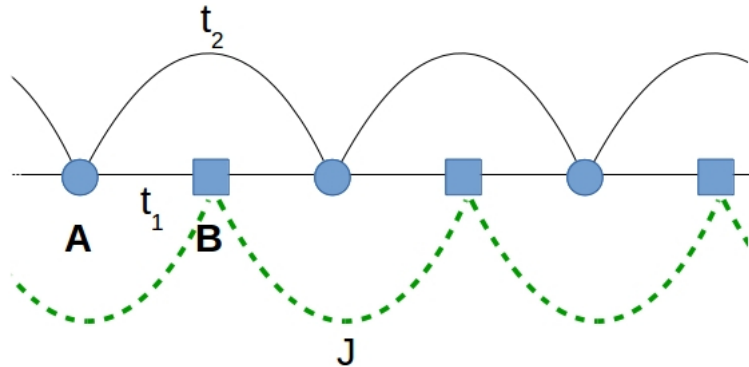
$$H = H_0 + H_J \quad (32)$$

$$\begin{aligned} H = & \epsilon_A \sum_{i,\sigma} a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} + \epsilon_B \sum_{i,\sigma} b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + t_1 \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + a_{i+1,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + h.c.) \\ & + t_2 \sum_{i,\sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+1,\sigma} + h.c.) - J \sum_i \hat{S}_i \hat{S}_{i+1}. \end{aligned} \quad (33)$$

Radi konzistentnosti sa prijašnjom analogijom s bakar-kisik ravni-  
nom,  $J$  interakcija će biti samo između elektrona koji se nalaze na bakru (B tip atoma). Tu situaciju možemo vidjeti na slici 8.

Iz Heisenbergove interakcije

$$H_J = -J \sum_i \hat{S}_i \hat{S}_{i+1} \quad (34)$$



Slika 8: Prikaz promatranog jednodimenzionalnog lanca sa naznačenim preskocima  $t_1$  i  $t_2$  i uključenom Heisenbergovom  $J$  interakcijom (zelene crtkane linije). Kružići označuju kisikove, kvadratići bakrove atome. Razmak između susjednih atoma je  $d$ . Veličina jedinične ćelije ostaje nepromijenjena,  $2d$ .

vidimo da će ovako zapisan hamiltonijan imati nižu energiju za spin-ski suprotno orijentirane susjede ako je  $J < 0$  ili za isto orijentirane susjedne spinove ako je  $J > 0$ . Sustav za  $J < 0$  preferira antiferomagnetsko stanje, a za  $J > 0$  feromagnetsko.

## 4.3 Analiza srednjeg polja

### 4.3.1 Metalno stanje

Metalni dio hamiltonijana je (20) i njegovu energiju ćemo dobiti računajući

$$E_0 = \langle F | H_0 | F \rangle \quad (35)$$

gdje je  $|F\rangle$  osnovno stanje sustava. Promatramo slučaj polupopunjavanja pa će u osnovnom stanju elektroni popunjavati stanja do  $k_F = \pm \frac{\pi}{4d}$



u donjoj vrpici.

$$\langle F|H_0|F\rangle = \frac{Nd}{\pi} \int E_-(k) \langle F|B_k^\dagger B_k|F\rangle dk = \frac{2Nd}{\pi} \int_0^{k_F = \frac{\pi}{4d}} E_-(k) dk \quad (36)$$

Integral u gornjoj jednadžbi se neće dati u potpunosti analitički izračunati

$$\begin{aligned} & \int_0^{k_F} E_-(k) dk = \\ & = \int_0^{k_F} \left( \frac{\epsilon_+}{2} + t_2 \cos(2kd) - \sqrt{\left(\frac{\epsilon_-}{2} + t_2 \cos(2kd)\right)^2 + 4t_1^2 \sin^2(kd)} \right) dk = \\ & = \epsilon_A k_F + \frac{t_2}{d} \sin(2k_F d) - 2 \int_0^{k_F} \sqrt{\left(\frac{\epsilon_-}{2} + t_2 \cos(2kd)\right)^2 + 4t_1^2 \sin^2(kd)} dk. \end{aligned} \quad (37)$$

Zadnji član ćemo računati numerički i pisati kao:  $t_1 I^1$ . Sve ćemo skalirati u odnosu na  $t_1$  pa će ostati samo 3 slobodne varijable u sustavu. Pokrate su sljedeće

$$\tilde{\epsilon} \equiv \frac{\epsilon_A}{t_1}; \quad \tilde{t}_2 \equiv \frac{t_2}{t_1}; \quad \tilde{J} \equiv \frac{J}{t_1}. \quad (38)$$

Nakon uvrštavanja  $k_F = \frac{\pi}{4d}$  dobivamo izraz za energiju po ćeliji skaliranu u odnosu na  $t_1$

$$\varepsilon_0^{(M)} \equiv \frac{E_0}{Nt_1} = \frac{\tilde{\epsilon}}{4} + \frac{\tilde{t}_2}{\pi} - 2\frac{I}{\pi}. \quad (39)$$

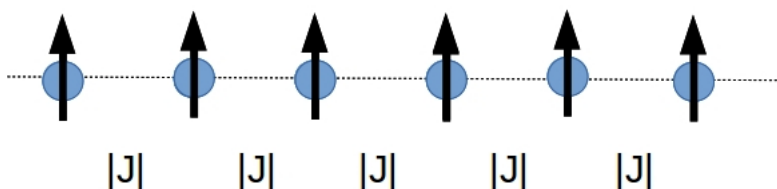
Rezultat (39) nam je bitan u daljnjem računanju faznog dijagrama.

---

<sup>1</sup>Primijetimo da smo iz integrala izlučili  $t_1$  tako da unutar integrala ostanu varijable definirane (38).

### 4.3.2 Feromagnetsko i antiferomagnetsko stanje

Kada smo na polupopunjenju imamo jedan elektron po jediničnoj ćeliji i on se može lokalizirati na bakru prevodeći sustav u nemetalno stanje. Ovisno o predznaku  $J$  spinovi tih elektrona će se poredati paralelno i sustav će biti feromagnet ili antiparalelno da sustav bude antiferomagnet. Ta dva stanja će imati različite energije. Na slici 9 je prikazano feromagnetsko stanje.



Slika 9: Prikaz samo bakrenih atoma (B tip atoma) sa lokaliziranim elektronima i njihovim spinovima u feromagnetskom stanju. Veličina jedinične ćelije je  $2d$ .

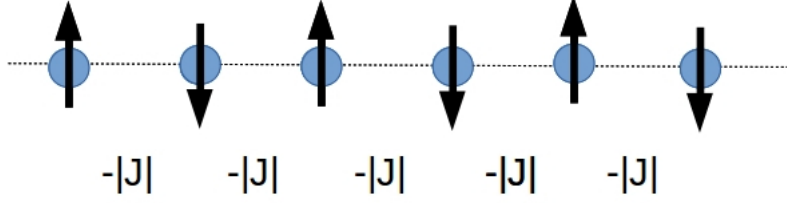
Energija osnovnog stanja je izvedena u *Dodatku B* i iznosi

$$\varepsilon_0^{(F)} \equiv \frac{E_0^F}{Nt_1} = \frac{1}{4}\tilde{J} = -\frac{1}{4}|\tilde{J}|. \quad (40)$$

jer je  $\tilde{J}$  pozitivan za feromagnet.

Ukoliko se spinovi poredaju antiparalelno kao na slici 10, imat ćemo antiferomagnetsko stanje.

Elektroni su i dalje lokalizirani samo na bakru i energija takvoga



Slika 10: Prikaz samo bakrenih atoma (B tip atoma) sa lokaliziranim elektronima i njihovim spinovima u feromagnetskom stanju. Veličina jedinične ćelije je  $2d$ .

stanja po jediničnoj ćeliji iznosi <sup>2</sup>

$$\varepsilon_0^{(AF)} \equiv \frac{E_0^{AF}}{Nt_1} = \left( -\frac{1}{4} + \ln 2 \right) \tilde{J} \approx -0.44 |\tilde{J}|. \quad (41)$$

$\tilde{J}$  je negativan pa je ukupna energija negativna. Vidimo da je energija antiferomagnetskog stanja nešto niža od feromagnetskog.

### 4.3.3 Fazni dijagrami

Prijelaz iz feromagnetske u antiferomagnetsku fazu događa se trivijalno kada  $\tilde{J}$  prelazi iz pozitivne u negativnu vrijednost. Netrivijalna promjena se dešava između metalne faze i tih dviju faza. Da bismo dobili fazni dijagram, gledat ćemo kada je energija metalnog uređenja  $\varepsilon_0^{(M)}$  manja od energije feromagnetskog  $\varepsilon_0^{(F)}$ , odnosno antiferomagnetskog uređenja  $\varepsilon_0^{(AF)}$ .

Uvjet da bi sustav bio metal kada je  $\tilde{J} < 0$  je

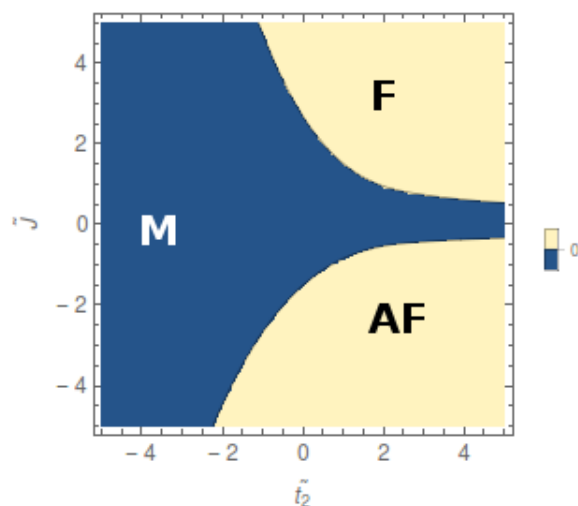
$$\varepsilon_0^{(M)} - \varepsilon_0^{(AF)} < 0 \implies \frac{\tilde{\epsilon}}{4} + \frac{1}{\pi} \tilde{t}_2 - \frac{2}{\pi} I - \left( \frac{1}{4} - \ln 2 \right) |\tilde{J}| < 0 \quad (42)$$

<sup>2</sup>Nećemo izvoditi ovaj rezultat, već ćemo se samo referirati na ranije račune energija 1D antiferomagneta: [8], [9], [10], [11], [16]

Time ćemo dobiti granicu između metalne faze i antiferomagnetske faze. Uvjet da bi sustav bio metal kada je  $\tilde{J}$  u feromagnetskom režimu, odnosno  $\tilde{J} > 0$ , je

$$\varepsilon_0^{(M)} - \varepsilon_0^{(F)} < 0 \implies \frac{\tilde{\varepsilon}}{4} + \frac{1}{\pi}\tilde{t}_2 - \frac{2}{\pi}I + \frac{1}{4}|\tilde{J}| < 0. \quad (43)$$

Koristeći gornja dva uvjeta, dobili smo fazne dijagrame u ovisnosti o parametrima  $\tilde{t}_2$  i  $\tilde{J}$ . Crtamo 2D prikaz dijagrama za neki određeni  $\tilde{\varepsilon}$ .



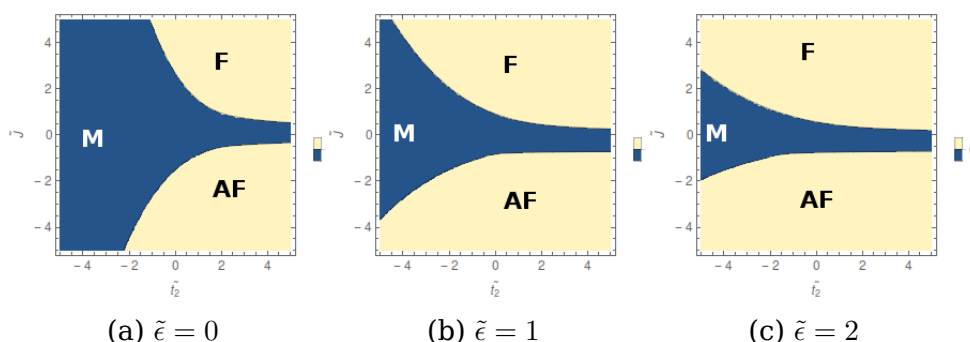
Slika 11: Fazni dijagram za  $\tilde{\varepsilon} = 0$ . Plavom bojom je označena metalna faza i naznačena sa "M". Feromagnetska i antiferomagnetska faza označene su bež bojom i slovima "F", odnosno "AF".

Slika 11 prikazuje dijagram za  $\tilde{\varepsilon} = 0$ . Vidimo da je funkcija klinastog oblika i kontinuirano prelazi iz pozitivnih  $t_2$  u negativne.

Za pozitivne  $\tilde{t}_2$  metalno se stanje sužava porastom preskoka  $t_2$ , dok se za negativne  $\tilde{t}_2$  ono širi. Ukoliko je  $t_2 > 0$  i raste, energija potrebna za preskok između dva susjedna kisika će postajati veća i elektronima će energetski isplativije biti lokalizirati se na bakru za

manje vrijednosti  $|J|$ . Za jako visoke vrijednosti preskoka  $t_2$  čak i mala perturbacija u obliku  $J$  interakcije će prevesti sustav iz metalnog u izolatorsko feromagnetsko/antiferomagnetsko stanje. Metalna faza će se asimptotski sužavati, no širina neće biti nula čak i za velike  $t_2$  što i treba biti jer ukoliko je  $J = 0$  sustav će biti metaličan za bilo koju vrijednost  $t_2$ .

Kada se nalazimo u području negativnih  $\tilde{t}_2$ , dešavati će se suprotno. Što je  $t_2$  negativniji, to su preskoci sa kisika direktno na drugi kisik energetski isplativiji i trebat će nam sve veći  $|J|$  da bi sustav preveli u izolatorsko feromagnetsko/antiferomagnetsko stanje.



Slika 12: Plavom bojom je označena metalna faza i naznačena sa "M". Feromagnetska i antiferomagnetska faza označene su bež bojom i slovima "F", odnosno "AF". Prikazani su dijagrami za tri različita parametra  $\tilde{\epsilon}$

Na slici 12 možemo vidjeti ponašanje faza kako mijenjamo  $\tilde{\epsilon}$ . Uočavamo da kad je  $\tilde{\epsilon}$  veći metalna faza postaje uža. Razlog tome je što elektroni vode pomoću preskoka preko kisika,  $t_2$ , a ako povećavamo energiju  $\epsilon_A$  elektroni će preferirati lokalizaciju na bakru i skokovi po kisicima neće biti omogućeni. Povećanjem  $\epsilon_A$  pojavljivanje elektrona na kisiku postaje energetski nepovoljno. Za visoke  $\epsilon_A$  potreban je manji  $|J|$  da bi sustav prešao u izolatorsko stanje.

Pokušajmo objasniti gornje ponašanje faznih dijagrama pomoću zaključaka o vrpcaima iz poglavlja 3.2. Ukoliko pogledamo početnu matricu hamiltonijana (21) uočavamo da prvi element na dijagonali, koji je oblika  $\epsilon_A + 2t_2 \cos(2kd)$ , sadrži preskok  $t_2$ . Bez preskoka između kisika, širina energijskog stanja bi bila jednostavno  $W_A = \epsilon_A$ . Kada u sustavu uključimo skokove sa kisika na susjedne kisike, širina gornje vrpce više nije jednaka samo  $\epsilon_A$  već postaje  $\tilde{W}_A = \epsilon_A + 2t_2 \cos(2kd)$ . Možemo reći da  $t_2$  razbija degeneraciju  $\epsilon_A$  nivoa. Uzrok takve popravke širine  $W_A$  je čisto simetrijske prirode i izlazi iz simetrije samoga modela koji uzrokuje pojavu člana s  $t_2$  na dijagonali hamiltonijana. Metoda srednjeg polja nije u prvom redu osjetljiva na ovu induciranu ovisnost udaljenosti nivoa o  $k$ , te nam ostaje razmatranje širine kisikove vrpce  $\tilde{W}_A$ , koja u sebi sadrži  $\epsilon_A$  i  $t_2$ . Klinasti oblik faznog dijagrama 11 jako ovisi o  $t_2$  i  $\epsilon_A$  i možemo ga lako protumačiti koristeći se razmatranjima iz poglavlja 3.2. Tamo smo zaključili da  $\epsilon_A$  mijenja početnu udaljenost između dviju vrpca, a  $t_2$  mijenja širinu na način da za negativniji  $t_2$  kisikova vrpca postaje šira i produbljuje se prema dolje dok se za pozitivniji  $t_2$  vrpca prvo sužava pa se krene širiti prema gore udaljavajući se od donje bakrove vrpce. Kada je kisikova vrpca šira od razmaka  $\Delta_{AB} = \epsilon_A$ , vrpce se krenu preklapati i donja vrpca dobije dio koji je većinski sastavljen od kisikove orbitale. Tada šireći gornju vrpcu prema dolje, ili snižavajući nivo kisika da bude bliža donjoj, povećavamo širinu donje vrpce snižavajući energetske nivoe elektronima i ukupna energija tih elektrona će biti niža. To znači da za manje kisikove energije  $\epsilon_A$  i negativnije  $t_2$  imamo negativniju ukupnu energiju sustava, odnosno metalnog stanja. Zbog toga se područje metalnog stanja širi kada snižavamo  $\epsilon_A$  (tj.  $\tilde{\epsilon}$ ) ili ako

idemo prema negativnijim koeficijentima  $t_2$  (tj.  $\tilde{t}_2$ ). Ovo se u potpunosti slaže s ponašanjem dobivenih faznih dijagramima na slikama 11 i 12.

U sustavu sa spin-spin interakcijom imamo kompeticiju veličine  $J$  koja uzrokuje izolatorsko stanje i širine vrpce  $E_-(k)$  koja preferira metalno stanje. Pomoću gornjih dijagrama vidimo kada će sustav prelaziti iz metalnog u izolatorsko stanje. Znamo da ukoliko je  $J \gg W$ , gdje je  $W$  širina vrpce, sustav će biti izolator, a ukoliko je  $W \gg J$  sustav ostaje metal. Postavlja se pitanje da li je samo odnos širine vrpce i  $J$  bitan za metaličnost sustava ili omjer parametara igra veću ulogu. Da li je isto ako širinu vrpce mijenjamo promjenom parametra  $\epsilon_A$  ili promjenom  $t_2$ ? To ćemo testirati tako da držimo širinu vrpce konstantnom i mijenjamo parametre gledajući da li sustav prelazi iz metala u izolator.

Širinu donje vrpce ćemo odrediti kao razliku najviše energije koja se nalazi na rubu zone i minimuma koji je u točki  $k = 0$

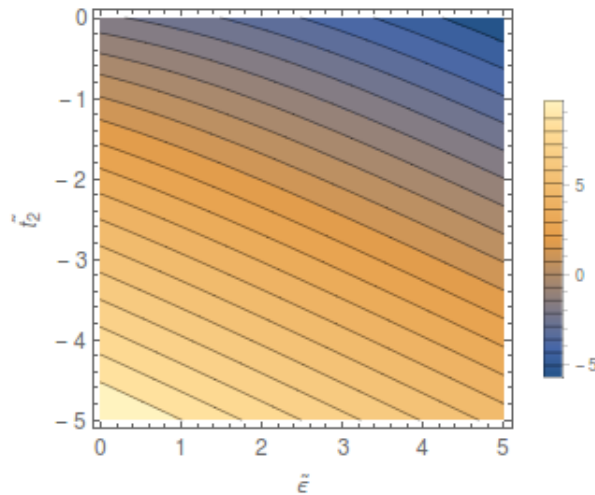
$$W = E_-\left(\frac{\pi}{2d}\right) - E_-(0). \quad (44)$$

Uvrštavanjem izraza za  $E_-(k)$  iz (22) i sređivanjem, dolazimo do širine vrpce skalirane u odnosu na  $t_1$  koja ovisi o parametrima  $\tilde{t}_2$  i  $\tilde{\epsilon}$

$$W = -2\tilde{t}_2 - \left(\frac{\tilde{\epsilon}}{2} + \tilde{t}_2\right) - \sqrt{\left(\frac{\tilde{\epsilon}}{2} + \tilde{t}_2\right)^2 + 4}. \quad (45)$$

Kako se nalazimo na polupopunjenju, zanimljiv će nam biti režim izravnavanja donje vrpce što znači da trebamo gledati šta se dešava za  $t_2 < 0$ . U prijašnjim razmatranjima smo objasnili da ćemo gledati

slučaj kada  $\epsilon_A > \epsilon_B$ , odnosno budući da je energija bakra skalirana na nulu, razmatrati ćemo samo  $\epsilon_A > 0$ . Na slici 13 vidimo funkciju (45) u ovisnosti o te dvije varijable,  $\tilde{t}_2$  i  $\tilde{\epsilon}$ .

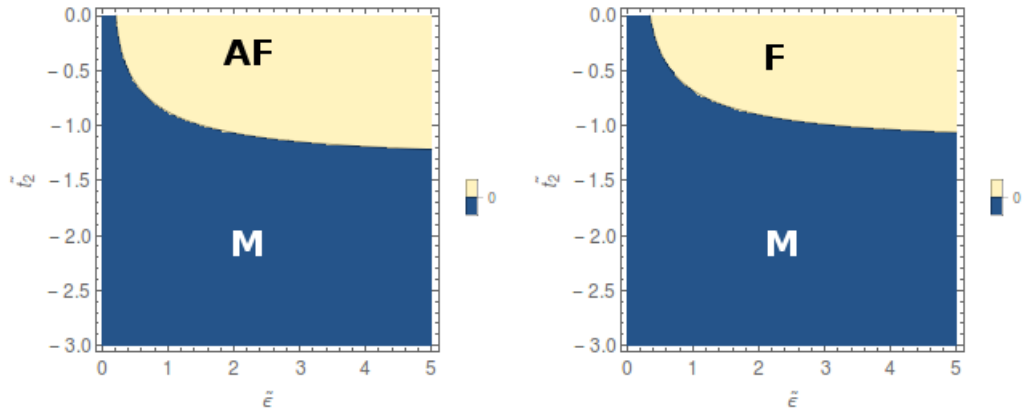


Slika 13: Širina donje vrpce u ovisnosti o parametrima  $\tilde{t}_2$  i  $\tilde{\epsilon}$ . Prikazane su izohipse konstantne širine vrpce  $W$ .

Da bismo mogli odgovoriti na pitanje da li na metaličnost sustava utječe samo omjer širine vrpce  $W$  i  $J$  ili promjena parametara  $t_2$  i  $\epsilon_A$ , moramo nacrtati fazni dijagram u ovisnosti o  $t_2$  i  $\epsilon_A$ . On je za feromagnetsko i antiferomagnetsko stanje prikazan na slici 14.

Slike (a) i (b) su slične i obje se mijenjaju promjenom  $|J|$  tako da što je  $|J|$  veći, feromagnetsko/antiferomagnetsko stanje se više širi i potiskuje metalno stanje. Iz oblika krivulja je vidljivo da za visoke vrijednosti  $\tilde{\epsilon}$  ( $> 1$ ), blizu granice prijelaza faza, mala promjena  $\tilde{t}_2$  pri konstantnom  $\tilde{\epsilon}$  dovodi do prijelaza iz metala u izolator, dok je za isti prijelaz između faza potrebna velika promjena  $\tilde{\epsilon}$  pri konstantnom  $\tilde{t}_2$ . Ukoliko su vrijednosti  $\tilde{\epsilon}$  oko 0.5 i nalazimo se blizu granice prijelaza, onda vrijedi obrnuto. Za malu promjenu  $\tilde{\epsilon}$  pri konstantnom  $\tilde{t}_2$  sustav priđe iz jedne u drugu fazu dok je za isti efekt potrebna veća



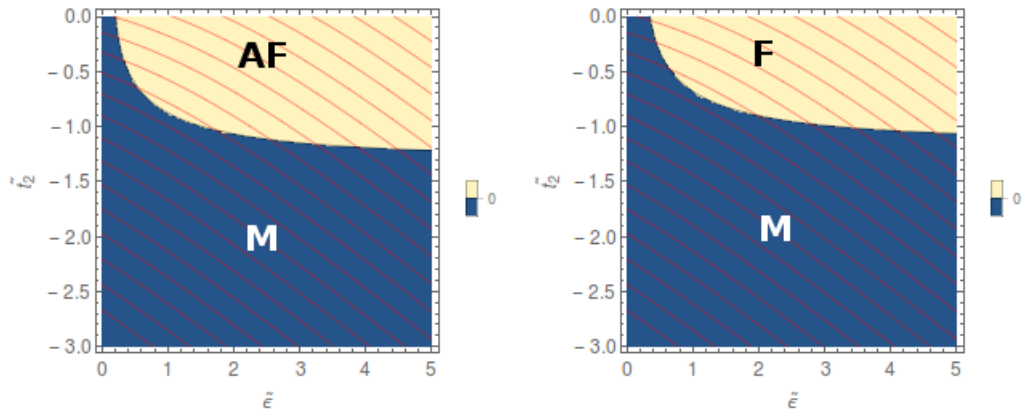


(a) antiferomagnetski dio,  $\tilde{J} = -0.5$       (b) feromagnetski dio,  $\tilde{J} = 0.5$

Slika 14:  $\tilde{\epsilon} - \tilde{t}_2$  fazni dijagrami za vrijednost  $|J| = 0.5t_1$ . Plavi dio predstavlja metalnu fazu, bež dio feromagnetsku/antiferomagnetsku fazu.

promjena  $\tilde{t}_2$  pri konstantnom  $\tilde{\epsilon}$ .

Sada možemo nacrtati  $\tilde{\epsilon} - \tilde{t}_2$  fazni dijagram za feromagnetski i antiferomagnetski dio na koji ćemo staviti i linije konstantnih širina vrpce  $W$ . Takav preklop dijagrama sa slikom 13 je prikazan na slici 15.



(a) antiferomagnetski dio,  $\tilde{J} = -0.5$       (b) feromagnetski dio,  $\tilde{J} = 0.5$

Slika 15:  $\tilde{\epsilon} - \tilde{t}_2$  fazni dijagrami za vrijednost  $|J| = 0.5t_1$ . Plavi dio predstavlja metalnu fazu, bež dio feromagnetsku/antiferomagnetsku fazu. Crvene linije su izohipse konstantne širine vrpce (45).

Sada uočavamo da linije konstantnih širina vrpce  $W$  nisu paralelne sa linijom metal-izolator prijelaza. To znači da iako je širina vrpce ostala konstantna, sustav može prijeći iz metalnog u izolatorsko stanje i obrnuto variranjem parametara  $t_2$  i  $\epsilon_A$ . Zaključujemo da za metal-izolator prijelaz nije bitan samo omjer širine vrpce  $W$  i  $J$ , nego i nezavisno vrijednosti parametara  $t_2$  i  $\epsilon_A$ .

## 5 Zaključak

Analiziran je 1D analogon ravnine bakrovog kisika. Predstavili smo dva modela od kojih smo kasnije razmatrali model sa alternirajućim preskocima  $t_1$  između bakra i kisika jer su mu svojstva bliža realnim ravninama bakrovog oksida. Analizirali smo ponašanje vrpce modela i uvjet destruktivne interferencije koji izravna vrpcu. Ravna vrpca znači manje kinetičke energije za elektrone i potencijalan prijelaz iz metala u izolator, ali to se nije dogodilo u odsustvu interakcije. Kohnovim kriterijem smo pokazali da vrpca ostaje vodljiva čak i kada je ravna.

Potom smo uveli magnetsku interakciju između elektrona i ispitivali kako će ona srušiti sustav u izolatorsko stanje. Analizu smo radili pomoću metode srednjeg polja uspoređujući energije metalnog stanja sa energijama lokaliziranog feromagnetskog i antiferomagnetskog stanja. Dobili smo fazne dijagrame i detaljno ih analizirali te objasnili njihovu ovisnost o parametrima sustava.

Pokazali smo da metal-izolator prijelaz ne ovisi samo o omjeru širine vrpce  $W$  i jačine interakcije  $J$ , nego i o parametrima sustava

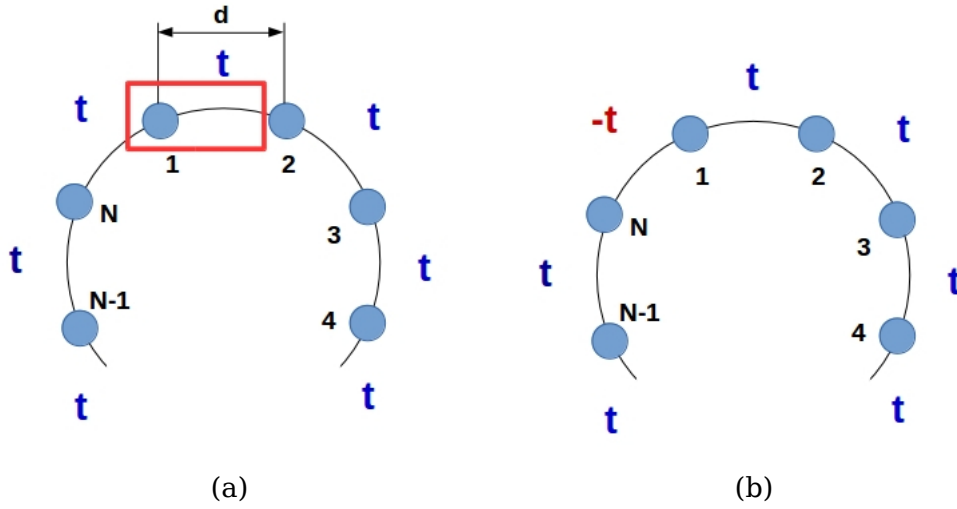
$t_2$  i  $\epsilon_A$ . Omjeri parametara  $t_1$ ,  $t_2$  i  $\epsilon_A$  su bitni za metaličnost sustava nezavisno od omjera širine vrpce i  $J$ , jer iako smo držali širinu  $W$  konstantnom, mijenjući te parametre sustav je prelazio iz metalne u izolatorsku fazu i obrnuto.

Analiza je napravljena za slučaj polupopunjenja i uz najjednostavniju pretpostavku da se u feromagnetskoj i antiferomagnetskoj fazi elektroni nalaze samo na bakrovim atomima bez mogućnosti preskoka na kisik. Daljnja analiza ovog modela bi trebala obuhvatiti slučajeve kada elektroni u feromagnetskoj i antiferomagnetskoj fazi nisu strogo lokalizirani na bakru i kada se ne nalazimo nužno na polupunjenju.

## **Dodatak A Kohnov kriterij**

Kohn [12] predlaže kriterij za metaličnost sustava koji se manifestira u fazama valnih funkcija [13],[14],[15]. Da bi sustav bio vodič, mijenjanje parametara na jednom kraju lanca mora se propagirati sve do drugog kraja lanca. Tako da ukoliko promijenimo parametar preskoka  $t$  na samo jednom mjestu u lancu, ta promjena će utjecati i na ostale dijelove toga lanca.

Kako bismo shvatili Kohnov kriterij uzmimo za primjer najjednostavniji slučaj jednodimenzionalnog lanca istovrsnih atoma A, sa preskocima  $t$  između susjednih atoma. Na lanac sastavljen od  $N$  atoma nametnimo cikličke rubne uvjete kao što je prikazano na slici 16a. Takav lanac ima delokalizirane valne funkcije, odnosno, bit će metal. Ukoliko postavimo ishodište energije sa  $\epsilon_A = 0$ , njegova vrpca će biti



Slika 16: 1D lanac atoma sa cikličkim rubnim uvjetom. Crveni pravokutnik na slici a) prikazuje jediničnu ćeliju veličine  $d$ . Preskoci između susjeda su: a) svi  $t$ , b) jedan promijenjen  $t \rightarrow -t$ .

oblika

$$E(k_n) = 2t \cos(k_n d). \quad (46)$$

Pošto imamo  $N$  atoma,  $k_n$  će biti diskretan, kao i energije, ali puštanjem limesa  $N \rightarrow \infty$  lako stvar poopćavamo na beskonačni lanac.

No što ako uvedemo nečistoću u obliku zamjene  $t \rightarrow -t$  na jednom mjestu kao što je prikazano na slici 16b? Hamiltonijan će sada biti nešto drugačiji

$$H = t \sum_i (a_i^\dagger a_{i+1} + h.c.) - t(a_1^\dagger a_N + h.c.) \quad (47)$$

gdje suma ne uključuje skok između atoma 1 i  $N$ , odnosno onaj s predznakom  $-t$ . Takav hamiltonijan se neće dati dijagonalizirati uobičajenim prebacivanjem u  $k$ -prostor Fourier-transformacijom operatora, već moramo transformirati operatore na način koji će dopustiti uključivanje drugog člana hamiltonijana (47) u sumu sa ostalim presko-

cima. Trik je u tome da zapišemo minus ispred drugog člana kao fazu

$$-t(a_1^\dagger a_N + h.c.) = e^{i\pi} t(a_1^\dagger a_N + h.c.) \quad (48)$$

i napravimo transformaciju operatora dodajući im fazu koja ovisi o položaju ćelije

$$a_j \longrightarrow a_j e^{i\frac{\pi}{N}j} e^{-i\frac{\pi}{N}j} \equiv \tilde{a}_j e^{-i\frac{\pi}{N}j}. \quad (49)$$

Umnožak susjednih članova se transformira kao

$$a_j^\dagger a_{j+1} = \tilde{a}_j^\dagger \tilde{a}_{j+1} e^{i\frac{\pi}{N}} \quad (50)$$

dok će nam drugi član hamiltonijana (47) postati

$$e^{i\pi} t(a_1^\dagger a_N + h.c.) = t(\tilde{a}_1^\dagger \tilde{a}_N e^{i\frac{\pi}{N}} + \tilde{a}_N^\dagger \tilde{a}_1 e^{-i\frac{\pi}{N}}). \quad (51)$$

Vidimo da smo dobili istu formu kao i za članove unutar sume pa hamiltonijan zapisujemo kao

$$H = t \sum_j (\tilde{a}_j^\dagger \tilde{a}_{j+1} e^{-i\frac{\pi}{N}} + h.c.) \quad (52)$$

i Fourier transformacijom operatora kao u (2) dobivamo dijagonalizirani oblik

$$H = \sum_k \left[ 2t \cos \left( kd + \frac{\pi}{N} \right) \right] \tilde{a}_k^\dagger \tilde{a}_k. \quad (53)$$

Sistem neutralizira efekt nečistoće  $t \rightarrow -t$  tako da se minus ugradi u valnu funkciju koja sada dobiva fazu na svakom atomu. Metaličnost sistema je dakle uvjetovana time da se nametnuta dodatna faza kroz sistem kompenzira u istim obrocima posvuda, odnosno i dalje se za-

kreće u jednakim koracima kao i prije. Ukoliko gornja transformacija nije moguća, odnosno daleki dijelovi lance ne vide promjenu na jednom njegovom dijelu, sustav je u izolatorskom stanju. To je Kohnov kriterij.

## Dodatak B Energija feromagnetskog stanja

Energiju 1D lanca sa spinovima u osnovnom feromagnetskom stanju ćemo izračunati raspisivajući Heisenbergov hamiltonijan u jednostavniji oblik

$$H_J = -J \sum_i \hat{S}_i \hat{S}_{i+1} = -J \sum_i \left[ \frac{1}{2} (\hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+ + \hat{S}_{i+1}^- \hat{S}_i^+) + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \right] \quad (54)$$

sa operatorima podizanja  $\hat{S}_+$  i spuštanja spina  $\hat{S}_-$ . Ti operatori imaju sljedeće svojstvo

$$\begin{aligned} \hat{S}^+ | \uparrow \rangle &= \hat{S}^- | \downarrow \rangle = 0; \\ \hat{S}^+ | \downarrow \rangle &= | \uparrow \rangle; \quad \hat{S}^- | \uparrow \rangle = | \downarrow \rangle. \end{aligned} \quad (55)$$

Kada gornji hamiltonijan usrednjimo u stanju gdje svi elektroni gledaju u istom smjeru  $| \uparrow \uparrow \dots \uparrow \rangle$ , za energiju po jediničnoj ćeliji dobivamo

$$\frac{1}{N} \langle \uparrow \uparrow \dots \uparrow | H_J | \uparrow \uparrow \dots \uparrow \rangle = \frac{E_0^F}{N} = -\frac{1}{4} J. \quad (56)$$

$J$  je u ovom slučaju pozitivan pa će energija biti manja od nule [16], [17], [18].

## Literatura

- [1] A. J. Leggett, *Nature Physics* **2**, 134 - 136 (2006)
- [2] A. Narlikar, *Studies of High Temperature Superconductors* (Nova Science Publishers, New York, 2006.)
- [3] N. F. Mott, *Proc. Phys. Soc. (London) A* **62**, 416 (1949)
- [4] N. F. Mott, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 677 (1968)
- [5] Jenő Sólyom, *Fundamentals of the Physics of Solids, Volume III- Normal, Broken-Symmetry, and Correlated Systems* (Springer, 2003.)
- [6] H. Eskes and J. H. Jefferson, *Phys. Rev. B* **48**, 9788 (1993)
- [7] S. M. Hayden et al. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3622 (1991)
- [8] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, (Clarendon, Oxford, 2004.)
- [9] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **38**, 441 (1926)
- [10] P. Dirac, *Proc. Roy. Soc. London* **112A**, 661 (1926)
- [11] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931)
- [12] W. Kohn, *Phys. Rev.* **133**, A171 (1964)
- [13] A. J. Millis and S. N. Coppersmith, *Phys. Rev. B* **43**, 13770 (1991)
- [14] W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **37**, 7382 (1988)
- [15] P. Fazekas and K. Penc, *Int.J.Mod.Phys. B* **1**, 1021 (1988)

- [16] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism I, Statistics and Dynamics* (Springer-Verlag, 1981.)
- [17] R. Boyd and J. Callaway, *Phys. Rev.* **138A**, 1621 (1965)
- [18] K. Hepp, *Phys. Rev.* **B5**, 95 (1972)



## **6 Zahvale**

Zahvaljujem se mentoru prof. dr. sc. Denisu Sunku na svom uloženom trudu i vremenu, na svim konstruktivnim komentarima i savjetima te posebice na beskrajnom strpljenju kada je riječ o pitanjima.

## 7 Sažetak

Antonio Štrkalj, Metal-izolator prijelaz u jednodimenzionalnom modelu ravnina bakrovog oksida

$\text{CuO}_2$  ravnine osnovni su strukturni element visokotemperaturnih supravodiča. Kulonska interakcija između elektrona može dovesti do lokaliziranja elektrona na bakru i prijelaza materijala u izolator iako preklopi valnih funkcija nisu nula i skokovi preko kisika ostaju dopušteni. Takva vrsta prijelaza je poznatija kao Mottov prijelaz. U ovome radu promatrali smo jednodimenzionalni analogon kupratnim ravninama i analizirali prijelaz iz metalnog u izolatorsko stanje. Metodom srednjeg polja smo dobili fazne dijagrame te pokazali da za procjenu metal-izolator prijelaza nije dovoljno uspoređivati širinu vrpce i jakost interakcije  $J$ . Važniji je bio uvjet na parametre sustava.

Ključne riječi: *Metal-izolator prijelaz, Mottov prijelaz, metoda srednjeg polja, kupratne ravnine*

## 8 Summary

Antonio Štrkalj, Metal-insulator transition in one-dimensional model of copper oxide layers

CuO<sub>2</sub> layers are the basic structural elements of high-temperature superconductors. Coulomb interaction between electrons can localize them on copper atoms making the system become insulator although overlaps between wavefunctions aren't zero. That kind of transition is known as Mott transition. In present work we studied one-dimensional analogy of cuprate layers and analyzed metal-insulator transition. Using mean field theory we obtained phase diagrams and showed that comparison of band width with interaction constant  $J$  is insufficient for estimation of metal-insulator transition. More important condition is the relationship between parameters of the system. Keywords: *Metal-insulator transition, Mott transition, mean field theory, cuprates*

## 9 Životopis

Antonio Štrkalj

Rođen 3. kolovoza 1992. godine u Zagrebu. 2011. godine završio XV. gimnaziju u Zagrebu za vrijeme koje je sudjelovao na nekoliko državnih natjecanja iz fizike te osvojio "Počasno priznanje" na međunarodnoj Olimpijadi iz fizike u Bangkoku. Sudjelovao kao voditelj radionica na Ljetnoj školi mladih fizičara 2015. godine. Od 2012. godine vodi pripreme za međunarodnu olimpijadu iz fizike. Koautor članka: V. Despoja, A. Štrkalj and Z. Rukelj; "Optical absorption and transmissivity in molybdenum disulfide ( $\text{MoS}_2$ ) monolayer". Sudjelovao na ljetnoj školi za studente na GSI institutu za istraživanje teških iona (Darmstadt, Njemačka). Dobitnik Stipendije grada Zagreba. Trenutno je student pete godine istraživačkog studija fizike na PMF-u u Zagrebu.