

Tézisfüzet

Nemkonvencionális Kondenzátumok a Szilárdtestfizikában

Ványolos András

Témavezető: Prof. Virosztek Attila
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Fizika Tanszék

2007

1. Bevezetés

Az anyag különböző szimmetriasértő alapállapotainak tanulmányozása a modern alacsony hőmérsékleti szilárdtestfizika egyik legfontosabb feladata. Ezen egzotikus alapállapotok közé tartozik a szupravezetés és a sűrűséghullám (SH) állapot különböző változatai. A konvencionális s -hullámú szupravezetés és a konvencionális kvázi-egydimenziós töltés- és spinsűrűség hullámok (TSH, SSH) fizikája az elmúlt ötven év intenzív kutatásának köszönhetően mára már jól ismert. Azonban a nehéz fermion szupravezetők 1979-es, a szerves szupravezetők 1980-as és a magashőmérsékletű szupravezetők 1986-os felfedezése óta kiderült, hogy ezeknek a szupravezető anyagoknak a nagy része ún. nemkonvencionális: azaz, a rendparaméterük hullámszámfüggő és így a Fermi felület különböző pontjaiban más és más értéket vesznek fel. A gap eme erős anizotróp jellege emlékeztet a jól ismert szuperfolyékony ^3He A-fázisára. Továbbá igaz az is, hogy az imént felsorolt anyagoknak nem csak a szupravezető fázisa rendelkezik hullámszámfüggő rendparaméterrel. Például az alul-dópolt réz-oxid alapú magashőmérsékletű szupravezetők erősen vitatott pszeudogap fázisa is sok tekintetben leírható egy kétdimenziós nemkonvencionális töltéssűrűséghullámmal (NTSH). A

legérdekesebb tulajdonsága a nemkonvencionális sűrűséghullámoknak (NSH) abban nyilvánul meg, hogy a gapfüggvény Fermi felületen vett átlagának eltűnése miatt ezek az anyagok nem rendelkeznek se a töltéssűrűség se pedig a spinsűrűség térbeli modulációjával. Ezért a fázisátalakulás hagyományos kísérleti technikákkal - mint pl. röntgenszórás vagy NMR - nem érhető tetten. A kvázi-egydimenziós TSH $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$ pszeudogap fázisa sem mutat nyilvánvaló hosszútávú rendet. Továbbá, az URu_2Si_2 nehéz fermion fém rejtélyes mikromágneses fázisa még mindig vita tárgyát képezi; a lehetséges modellek között szerepel a tiszta NTSH ugyanúgy mint a mágneses szennyezőkkel szennyezett NSSH. A 2H-NbSe_2 átmeneti fém sok tekintetben szokatlan TSH fázisának rendparamétere valószínűleg f -hullámú szimmetriával bír, míg az $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ szerves vezető anyag alapállapota feltehetőleg kvázi-egydimenziós NTSH.

2. Célkitűzések

A vizsgálataim célja az volt hogy a nemkonvencionális sűrűség-hullámok már meglévő elméletét kiterjesszem és új irányokat nyissak az NSH kutatásban. A disszertáció témáját a kvázi-egydimenziós NSH kondenzátumok képezik. Elsőként az elekt-

ronikus Raman szórásról tanulmányoztam és kiszámoltam a fény-szórás hatáskeresztmetszetét. A második részben az elektronfonon kölcsönhatást vizsgáltam kvázi-egydimenziós vezetőkben. Ezt követően részletesen vizsgáltam az egy-szennyező problémát NSH-ban. Meghatároztam a lokális állapotssűrűséget és a Friedel oszcillációkat. Végül pedig a nemmágneses szennyezőkön történő szórásról vizsgáltam a nemkeresztezhető közelítésben (NCA) a perturbációban végtelen rendben.

3. Új tudományos eredmények

1. Megvizsgáltam az elektronikus Raman szórásról kvázi-egydimenziós konvencionális és nemkonvencionális sűrűségkulámokban átlagtér közelítésben. A teljes Raman válasz kváziré-szecksé járuléka jellegzetes vonalalakot mutat, különösen a nemkonvencionális esetben. Az első szomszéd szoros kötésű közelítésben kapható modell sávszerkezet alkalmazása véges intenzitásról csak az ún. párhuzamos szórás geometriákban tud számot adni, azaz olyankor amikor a beeső és szórt foton polarizációi egyaránt az x , y vagy a z kristálytani tengelyek irányába mutatnak. Ezek a spektrumok az ortogonális rács D_{2h} pontcsoportjának az A_g teljesen szimmetrikus irreducibilis ábrázolásához

tartoznak. Annak érdekében hogy a modell a merőleges polarizációkban is számot tudjon adni a véges abszorpcióról, általánosítottam a sáv szerkezetet a másodsomszédok közötti átfedési integrálok bevonásával. Ezek a tagok írják le a fény szórását a másik három „gerade” reprezentációban (B_{1g} , B_{2g} és B_{3g}). Az NSH gap nélküli tulajdonsága miatt véges abszorpció figyelhető meg a maximális optikai gap alatt (2Δ). Továbbá, a Raman vertex és a gapfüggvény konkrét hullámszámfüggéseinek összjátéka az $y - y$ szórás geometriában két kvalitatíve különböző spektrumhoz vezet. Ez a tulajdonság különösen hasznosnak bizonyulhat a gap szimmetriájának megállapításában, ugyanis ebben a szórás elrendezésben a teljes Raman válasz lényegében megegyezik a kvázirészecske járulékkal; a kollektív effektusok itt nem meghatározóak. Tanulmányoztam a tökéletes illeszkedéstől való eltérés és a külső mágneses tér hatását. Mindkét effektus a Raman spektrumok további strukturáltságához vezet és tiszta optikai gap megjelenése is lehetségessé válik nulla hőmérsékleten illetve a tökéletes nesting-től való elegendően nagy eltérés esetén. Az elektron-elektron kölcsönhatást az ún. „random phase” közelítésben (RPA) vizsgáltam. A kölcsönhatás rövid hullámhosszú komponense a rendparaméter fluktuációiért felelős és csak az $x - x$ geometriában kapható spektrumra van hatással. Itt jelen-

tősen megváltoztatja a vonalalakat a kvázirészecske közelítésben kaphatóhoz képest: a rendparaméter amplitúdó módusának erősen túlszabályozott volta miatt az $\omega = 2\Delta$ körül jelentős spektrális súly halmozódik fel egy viszonylag széles csúcs formájában. A kölcsönhatás hosszú hullámhosszú Coulomb erői viszont elhanyagolható járulékot adnak, ami annak a következménye, hogy a Raman vertex a Fermi felületen nullára átlagolódik. [1,2]

2. Tanulmányoztam a sűrűség-hullám rend kialakulását kvázi-egydimenziós kölcsönható elektron-fonon rendszerben, különös tekintettel a nemkonvencionális rendeződésre. A teljes rácsperiodicitás figyelembe vétele az elektron-fonon csatolási állandó szignifikáns hullámszámfüggéséhez vezet. Ebből kiindulva megmutattam, hogy a gap hullámszámfüggése megegyezik az elektron-elektron kölcsönhatásból létrejövő NTSH-ban kaphatóval. A fonon kicserélődés által hajtott NTSH-ban azonban a rácshoz való csatolás Peierls torzuláshoz vezet. Ezáltal a fázisátalakulás minden esetben felfedi önmagát, még akkor is ha az elektronikus kondenzátum lényegében nemkonvencionális, azaz egyáltalán nem vagy csak kis töltésmodulációt mutat. Felkutatam a csatolt elektron-fonon rendszer kollektív gerjesztéseit. A TSH kondenzátum elmozdulásával kapcsolatos fázisgerjesztés diszperziója megegyezik a konvencionális TSH-ban kaphatóval,

azonban az egyrészecske típusú gerjesztések széles kontinuumja miatt itt csak a hosszú hullámú határesetben csillapíthatatlan a gerjesztés. Ezzel szemben az amplitúdó módus, amely természetéből adódóan véges tiltott sávval rendelkezik, még a hosszú hullámú határesetben is túlcillapított. A transzport tulajdonságok közül az optikai vezetőképességet számoltam ki egy több komponensű rendparaméter esetére. Az RPA számolás számot ad a fázisfluktuációk hatásáról és lehetővé teszi a kollektív mozgás effektív tömegének meghatározását. A több komponensű gap használatával, az amplitúdók folytonos változtatásával részletesen tudtam feltérképezni a vezetőképességet mind a lényegében konvencionális mind pedig a nemkonvencionális esetekben. Gap nélküli NTSH-ban véges abszorpció van a maximális optikai gap (2Δ) alatt. A kollektív járulékok elnyomják a 2Δ -nál lévő logaritmikus szingularitást és logaritmikus éllé transzformálják azt. Ugyanakkor jelentős spektrális súly halmozódik fel nulla frekvencián véges Drude súly formájában. Ez jelzi a csúszó TSH végtelen vezetőképességét. Számolásaim szerint a sztatikus effektív tömeg a hőmérséklet függvényében újszerű nemmonoton viselkedést mutat. Ez a tulajdonság a gap nélküli Dirac elektromok következménye, ami nyilvánvalóan hiányzik a konvencionális TSH-ban. [3,4,5]

3. Tanulmányoztam az egy-szennyező problémát NSH-ban. Részletesen vizsgáltam a szennyező atom hatását a lokális állapotossűrűsége és a Friedel oszcillációkra. A potenciálszórást a T -mátrix közelítésben vizsgáltam és megengedtem az előre- és hátraszórási amplitúdók különbözőségét. A szennyező által indukált lokális állapotossűrűség aszimmetriát mutat a Fermi energiára nézve, jelezvén ezzel a részecske-lyuk szimmetria sérülését. Dupla csúcscsal rendelkező kvázirészecske rezonanciát találtam a Fermi energia közelében, kiszámoltam a virtuális állapotok energiáját és élettartamát, valamint meghatároztam a pásztázó alagút mikroszkóppal nyerhető lokális állapotossűrűség mintázatokat a párhuzamos láncok mentén. A dupla csúcscsal rendelkező rezonancia a különböző szórási amplitúdók következménye. Az energiák és élettartamok megegyezésben vannak a d -típusú SH-ban vagy a d -hullámú szupravezetőkben találtakal. Tiszta NSH-ban nincs se töltés- se pedig spinsűrűség hullám, ezért amint az várható is volt, robosztus Friedel oszcillációkat találtam a ξ_0 koherencia hossz alatt. Ezen a távolságskálán az oszcillációk megegyeznek a normál fémbeli eredménnyel. Továbbá, a konvencionális SH-ban talált exponenciális levágással ellentétben, ξ_0 -nál nagyobb távolságokon algebrai hatványfüggvény lecsengés jellemzi az NSH-beli Friedel oszcillá-

ciókat, ami a gap nélküli gerjesztések következménye. Az anyag kvázi-egydimenziós jellege egy extra karakterisztikus távolság-skála ($\xi = v_F/t_b$) megjelenésében valamint a sűrűség oszcillációk és az állapotsűrűség valós térbeli - ξ -vel jellemzett - lebegésében mutatkozik meg. [6]

4. Vizgáltam a nemmágneses szennyezőszórást NSH-ban az ún. nemkeresztező közelítésben. Általánosítottam a meglévő gyenge (Born) és az erős szórású (unitér) határeseteket a perturbációs számítás tetszőleges rendjére. A számolás kiindulópontját a végtelen rendű önkonzisztens sajátenergia jelenti, amely az összes létra- és szivárvány-típusú diagramot tartalmazza. Azt találtam, hogy a normál szennyezők minden esetben elnyomják az SH kondenzátumot, függetlenül az alkalmazott perturbációs számítás rendjétől. Ez az Abrikosov-Gor'kov (AG) formulában manifesztálódik matematikailag. Az AG formula analízise kapcsán kiderült, hogy egy bizonyos kritikus szennyező koncentráció alatt, bármilyen erős legyen is a szennyező potenciál, nem képes teljesen lerombolni az NSH kondenzátumot. E kritikus koncentráció nagyságrendje kb. 1%. A sajátenergia precíz kezelése megmutatta, hogy az előreszórás sérti a részecske-lyuk szimmetriát és a részecskeszám megmaradást. Ezért a kémiai potenciál eltolása szükséges. Az eltolódásra egzakt analitikus formulát

vezettem le, amely egyaránt érvényes normál fémekben is. Kibontottam a termodinamikát és egzakt analitikus kifejezéseket vezettem le a legtöbb mennyiségre mind nulla hőmérséklet mind pedig T_c közelében. A Δ/T_c arány maximuma durván a tiszta eredmény kétszeresének adódott. Az állapotsűrűség (DOS) a valódi (eltolt) Fermi energiára nézve aszimmetrikus, ami $\omega = 0$ körül a leglátványosabb. Itt, az extrém határesetekkel (Born, unitér) ellentétben, a frekvenciafüggés lineáris. Ez azt is maga után vonja, hogy a DOS minimuma nem a Fermi energiánál van. NSH-ban már tetszőlegesen kis szennyezőszórás esetén is betöltődik a DOS a Fermi energia körül, ami normál fémes viselkedést eredményez elegendően alacsony hőmérsékleten. A szórási amplitúdók folytonos változtatásával a Born és az unitér határesetek közötti teljes skála feltérképezhető. A végtelen rendű perturbációs számítás ilyen módon lehetőséget teremtett, hogy megvizsgáljam a DOS evolúcióját az ismert határesetek között. A korrelációs függvények közül a Pauli szuszceptibilitást számoltam ki. Az eredményül adódott szembetűnően egyszerű fémes formula a nemkeresztező közelítés „megőrző” voltából fakad. [7]

4. A disszertációhoz kapcsolódó publikációk

1. A. Ványolos, A. Virosztek:

Electronic Raman scattering in density waves

AIP Conference Proceedings **715**, 245 (2004)

2. A. Ványolos, A. Virosztek:

Electronic Raman scattering in unconventional density waves

Phys. Rev. B **72**, 115119 (2005)

3. A. Ványolos, A. Virosztek:

Unconventional charge density wave in coupled electron-phonon system

J. Phys. IV France **131**, 347 (2005)

4. A. Ványolos, B. Dóra, A. Virosztek:

Unconventional charge density waves driven by electron-phonon coupling

Phys. Rev. B **73**, 165127 (2006)

5. A. Ványolos, B. Dóra, A. Virosztek:

Unconventional charge density wave arising from electron-phonon interaction

J. Supercond. (in press)

6. A. Ványolos, B. Dóra, A. Virosztek:

Local density of states and Friedel oscillations around a non-magnetic impurity in unconventional density wave

Phys. Rev. B **75**, 193101 (2007)

7. A. Ványolos, B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek:

Impurity scattering in unconventional density waves: non-crossing approximation for arbitrary scattering rate

New J. Phys. **9**, 216 (2007)

5. További publikációk

8. B. Dóra, K. Maki, A. Ványolos, A. Virosztek:

Magnetothermopower and Nernst effect in unconventional density waves

Phys. Rev. B **68**, 241102 (2003)

9. B. Dóra, K. Maki, A. Ványolos, A. Virosztek:

Magnetothermopower in unconventional density waves
Synth. Met. **141**, 103 (2004)

10. B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek, A. Ványolos:
Magnetothermopower in unconventional charge density wave
ground state of α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄
J. Phys. IV **114**, 301 (2004)

11. K. Maki, B. Dóra, A. Virosztek, A. Ványolos:
Giant Nernst effect in the pseudogap phase of high- T_c super-
conductors
Current Applied Physics **4**, 693 (2004)

12. B. Dóra, K. Maki, A. Ványolos, A. Virosztek:
Unconventional spin density wave in Bechgaard salt
(TMTSF)₂PF₆
Europhys. Lett. **67**, 1024 (2004)

13. B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek, A. Ványolos:
Unconventional density wave in CeCoIn₅?
Phys. Rev. B **71**, 172502 (2005)

14. B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek, A. Ványolos:
Unconventional density wave as possible explanation of the
Nernst signal in CeCoIn_5
Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 404 (2005)
15. B. Dóra, A. Ványolos, K. Maki, A. Virosztek:
Gapped optical excitations from gapless phases: imperfect
nesting in unconventional density waves
Phys. Rev. B **71**, 245101 (2005)
16. H. Won, S. Haas, D. Parker, S. Telang, A. Ványolos, K.
Maki:
BCS theory of nodal superconductors
AIP Conference Proceedings **789**, 3 (2005)
17. B. Dóra, A. Ványolos, A. Virosztek:
The pseudogap phase in $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$
Phys. Rev. B **73**, 125110 (2006)
18. L. Mihály, B. Dóra, A. Ványolos, H. Berger, L. Forró:
Spin-lattice interaction in the quasi-one dimensional helimagnet
 LiCu_2O_2

Phys. Rev. Lett. **97**, 067206 (2006)

19. B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek, A. Ványolos:
Pseudogap enhancement due to magnetic impurities in d -
density waves

Phys. Rev. B **75**, 132504 (2007)

20. B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek, A. Ványolos:
Effect of doping on the pseudogap enhancement due to magnetic
impurities in d -density waves

Phys. Stat. Sol. (b) **244**, 2338 (2007)