

# قطبش‌پذیری و نوسانات فریدل در نیمه فلزات خط-گره کج‌شده دوبعدی

رحیم پور، حمید؛ عابدین پور، سعید

دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه، گاوازنگ، زنجان

## چکیده

در این کار ما پاسخ چگالی-چگالی نیمه فلزات خط-گره توپولوژیک کج‌شده دوبعدی را برای حالت‌های ذاتی و آلابیده به شکل تحلیلی مطالعه و وابستگی حد استاتیک این تابع پاسخ به انرژی فرمی و میزان کج‌شده‌گی نوار را در رژیم‌های مختلف بررسی کرده‌ایم. علی‌رغم ناهمسانگردی ساختار نواری این سیستم، قطبش‌پذیری در تمام رژیم‌های آلابیش همسانگرد باقی می‌ماند. برای انرژی فرمی‌های کم برخلاف حالت ذاتی و بیش-آلابیش، دو تکینگی مجزا در قطبش‌پذیری مشاهده می‌شود که منجر به مشاهده پدیده زنش در نوسانات فریدل می‌شود.

## Polarizability and Friedel oscillations in two-dimensional tilted nodal-line semimetals

Rahimpoor, Hamid; Abedinpoor, Saeed H.

Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan

## Abstract

*In this work, we analytically investigate the static density-density response function of topological two-dimensional tilted nodal-line semimetals in both the intrinsic and doped regimes. Despite the anisotropic electronic structure of the system, the polarizability remains isotropic at all doping levels. In the low-doping regime, unlike the un-doped and highly-doped systems, we observe two distinct singularities in the polarizability, which results in the observation of a beat pattern in the Friedel oscillations.*

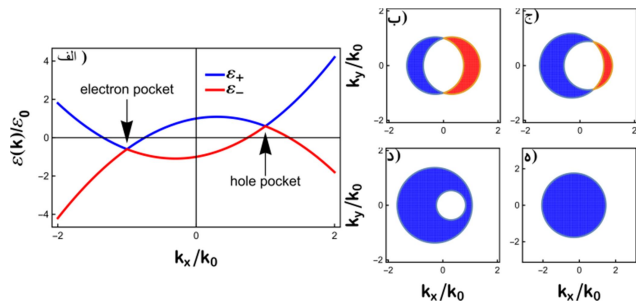
PACS No

یک حلقه را در فضای تکانه تشکیل می‌دهد [۳]. نیمه فلزات خط-گره سه‌بعدی ابتدا به صورت تئوری و سپس به صورت تجربی در سیستم‌های مختلفی پیشنهاد و مشاهده شد [۴,۵]. علاوه بر سیستم‌های سه‌بعدی، مواد توپولوژیک اغلب دارای مشابه دوبعدی نیز هستند. به طور مثال در ترکیبی از شبکه‌های کاکومه و شش گوشه حالت‌های خط-گره دوبعدی را می‌توان یافت [۶]. شکل خاص سطح فرمی در نیمه فلزات خط-گره باعث بروز خواص غیر معمول می‌شود. رسانندگی اپتیکی نیمه فلزات خط-گره دوبعدی در رژیم کم-آلابیش مستقل از چگالی حامل‌هاست در حالیکه برای حالت بیش-آلابیش به طور خطی با پتانسیل شیمیایی تغییر می‌کند [۷]. در این مقاله ما به بررسی پاسخ چگالی-چگالی استاتیک و نوسانات فریدل در نیمه فلزات خط-گره دوبعدی کج‌شده، با محاسبه تابع قطبش‌پذیری برای رژیم ذاتی و آلابیده می‌پردازیم.

## مقدمه

فازهای توپولوژیک مواد یکی از موضوعات مهم در فیزیک ماده چگال مدرن بوده که در دهه‌ی اخیر توجهات زیادی به خود جلب کرده است. نقطه شروع این مواد توپولوژیک، عایق‌های توپولوژیک است که در توده عایق بوده ولی روی سطحشان حالت‌های فلزی دارند [۱]. اخیراً دایره مواد توپولوژیک به فلزات نیز گسترش یافته است. نسلی از این مواد که ساختار نواریشان خواص منحصر به فرد توپولوژیک دارد با عنوان نیمه فلزات توپولوژیک شناخته می‌شوند. نیمه فلزات نقطه-گره مانند دیراک و وایل موادی هستند که نوارهای ظرفیت و رسانش در نزدیکی سطح فرمی در نقاط مجزایی با هم تماس دارند و ساختار نوار انرژی در اطراف نقاط تقاطع به صورت خطی می‌باشد [۲]. دسته دیگری از نیمه فلزات توپولوژیک، نیمه فلزات خط-گره می‌باشد که نقاط تماس نواری

شکل‌گیری پاکت‌های حفره و الکترون در حد انرژی‌های نزدیک صفر می‌شود. حضور هم‌زمان الکترون و حفره در سطح فرمی، انگیزه اولیه ما برای بررسی قطبش‌پذیری این سیستم بوده است.



شکل ۱: (الف) پاشندگی انرژی-کم نیمه فلزات خط-گره دوبعدی کج شده با شدت کج شده‌گی  $u = 0.6v_0$  و برای  $k_y = 0$ . (ب-د) سطوح انرژی ثابت برای (ب)  $\epsilon_F = 0$  (ج)  $\epsilon_F = 0.3\epsilon_0$  (د)  $\epsilon_F = 0.8\epsilon_0$  و  $\epsilon_F = 2\epsilon_0$ . شدت کج شده‌گی در تمامی شکل‌ها  $u = 0.6v_0$  انتخاب شده است. حضور هم‌زمان پاکت‌های الکترون (آبی) و حفره (قرمز) در بخش‌های ب و ج به وضوح مشخص است. چگالی حالت‌ها بر واحد سطح از روی رابطه طیف انرژی به صورت زیر بدست می‌آید

$$\rho(\epsilon)/\rho_0 = 1 - \frac{1}{2} \Theta[|\epsilon| - (1 + \frac{m^2 u^2}{k_0^2}) \epsilon_0] \quad (1)$$

که در آن  $\rho_0 = 2m/\pi$  و  $\Theta[x]$  تابع پله ای هویساید می‌باشد. توجه داریم که چگالی حالت‌ها در رژیم کم-آلایش الکترون یا حفره (یعنی  $|\epsilon_F|/\epsilon_0 < 1 + m^2 u^2/k_0^2$ ) دو برابر رژیم بیش-آلایش (یعنی  $|\epsilon_F|/\epsilon_0 > 1 + m^2 u^2/k_0^2$ ) است. ادامه این مقاله به محاسبه و بررسی تابع قطبش‌پذیری، حد استاتیک قطبش‌پذیری و نوسانات فریدل متناظر با این سیستم در رژیم‌های ذاتی و آلایده خواهیم پرداخت. برای راحتی و اجتناب از بیش نویسی در ادامه با کمیت‌های بدون بعد کار خواهیم کرد به طوریکه تمام بردار موج‌ها در واحد  $k_0$ ، تمام انرژی‌ها در واحد  $\epsilon_0$ ، تمام سرعت‌ها در واحد  $v_0 = k_0/(2m)$  و قطبش‌پذیری در واحد  $\rho_0$  بدون بعد شده است.

### تابع قطبش‌پذیری

وقتی سیستمی تحت یک اختلال الکترومغناطیسی قرار بگیرد،

در حد استاتیک و در حالت کم-آلایش، بر خلاف حالت ذاتی و بیش-آلایش، دو تکینگی مجزا در رفتار قطبش‌پذیری مشاهده می‌شود که مسئول نوسانات فریدل می‌باشند و نشان‌دهنده پدیده زنش در نوسانات چگالی الکترونی ناشی از یک ناخالصی باردار می‌باشد.

### مدل هامیلتونی

خواص فیزیکی نیمه فلزات خط-گره دوبعدی کج شده (با کج شده‌گی خطی) در حد انرژی‌های کم را می‌توان با هامیلتونی حد پیوستار غیر برهمکنشی زیر توصیف کرد (در تمام قسمت‌های این مقاله  $\hbar=1$ )

$$H_0 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{k} \sigma_0 + \frac{1}{2m} (k_\rho^2 - k_0^2) \sigma_x \quad (1)$$

که  $\mathbf{u}$  بردار سرعت کج شده‌گی،  $\sigma_x$  و  $\sigma_0$  به ترتیب ماتریس واحد دو در دو و مولفه X ماتریس پائولی هستند که بر درجات آزادی زیر شبکه (شبه اسپینی) عمل می‌کنند،  $m$  جرم نواری،  $k_\rho = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  و  $k_0$  شعاع خط-گره است. با حل معادله ویژه مقداری، پاشندگی نواری به صورت

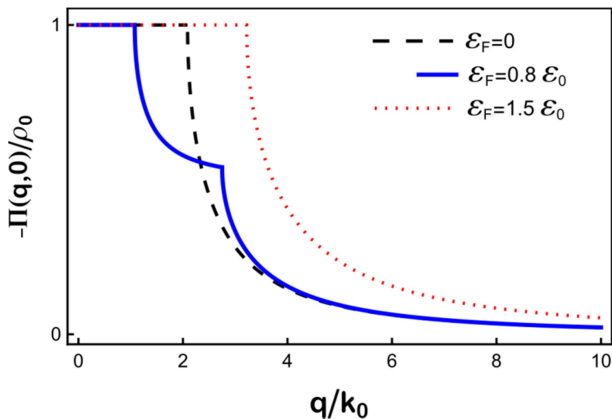
$$\epsilon_{ks} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{k} + \frac{s}{2m} |k_\rho^2 - k_0^2| \quad (2)$$

بدست می‌آید که در آن  $s = +(-)$  شاخص نواری برای نوار رسانش (+) و نوار ظرفیت (-) بوده و ویژه حالت‌های متناظر به صورت

$$|ks\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s \text{Sgn}(k_\rho^2 - k_0^2) \end{pmatrix} \quad (3)$$

هستند که  $\text{Sgn}(x)$  تابع علامت است. در حالت کلی سرعت کج شده‌گی در صفحه  $x-y$  می‌باشد اما بدون از دست دادن کلیت مساله، محور  $x$  را در راستای کج شده‌گی فرض می‌کنیم ( $u_y = 0$ ). شکل ۱ (الف) پاشندگی انرژی در واحد  $\epsilon_0 = k_0^2/(2m)$  و (ب-د) سطوح انرژی فرمی برای رژیم ذاتی (آلایده نشده)، و رژیم های کم-آلایش و بیش-آلایش را نشان می‌دهد. همانطور که از شکل ۱ مشخص است، بدلیل کج شده‌گی نوارها، نوار ظرفیت به سمت انرژی‌های مثبت و نوار رسانش به سمت انرژی‌های منفی عبور کرده‌اند که این پدیده منجر به

با حالت ذاتی و گاز الکترونی دویعدی دارد. همانطور که در بخش بعد ملاحظه خواهیم کرد، وجود دو نقطه تکین منجر به رفتاری کاملاً متفاوت در نوسانات فریدل، در مقایسه با حالت ذاتی و بیش-آلایش خواهد شد.



شکل ۲: رفتار تابع پاسخ استاتیک برای سه حالت ذاتی (نمودار خط چین)، رژیم کم-آلایش با  $\epsilon_F = 0.8\epsilon_0$  (نمودار خط پیوسته) و رژیم بیش-آلایش با  $\epsilon_F = 1.5\epsilon_0$  (نمودار نقطه چین). در هر سه نمودار مقدار کج شده‌گی برابر  $u = 0.6v_0$  است.

### ج) رژیم بیش-آلایش

در این رژیم تابع قطبش‌پذیری همانند حالت ذاتی بوده با این تفاوت که در رابطه (۶) به جای  $\kappa$  در تابع پاسخ استاتیک،  $k_+$  را جایگزین می‌کنیم. رفتار تابع پاسخ در این رژیم در شکل ۲ (نمودار نقطه چین) رسم شده است. در این حالت همانند رژیم ذاتی تنها یک نقطه تکین در  $q = k_+$  وجود دارد.

### نوسانات فریدل

با استفاده از روابط قطبش‌پذیری استاتیک، می‌توان با تبدیل فوریه، تابع  $\Pi(\mathbf{r})$  را محاسبه کرد که به طور فیزیکی چگالی بار القا شده بر اثر پتانسیلی که در مبدا جایگزیده است را نشان می‌دهد [۸].

$$\Pi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \Pi(\mathbf{q}, 0) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (۸)$$

### الف) رژیم ذاتی

در این رژیم با حل انتگرال بالا به رابطه تحلیلی زیر می‌رسیم

$$\Pi(\mathbf{r}) = \alpha \left[ J_0 \left( \frac{\kappa x}{2} \right) N_0 \left( \frac{\kappa x}{2} \right) + J_1 \left( \frac{\kappa x}{2} \right) N_1 \left( \frac{\kappa x}{2} \right) \right] \quad (۹)$$

توزیع بار تغییر کرده و سیستم قطبیده می‌شود. برای سیستم غیر برهمکنشی تابع قطبش‌پذیری به صورت زیر تعیین می‌شود

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}, s, s'} F_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \frac{f_{\mathbf{k}s} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s'}}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}s} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s'} + i\eta} \quad (۵)$$

که  $f_{\mathbf{k}s}$  تابع توزیع فرمی-دیراک،  $A$  سطح سیستم و  $F_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = [1 + ss' \text{Sgn}(k^2 - 1) \text{Sgn}(|\mathbf{k} + \mathbf{q}|^2 - 1)]/2$  تابع ساختار بوده که از همپوشانی توابع موج بدست می‌آید. در ادامه به ارائه نتایج مربوط به حد استاتیک تابع قطبش‌پذیری در سه رژیم ذاتی، کم-آلایش و بیش-آلایش می‌پردازیم.

### حد استاتیک

#### الف) رژیم ذاتی

تابع پاسخ استاتیک ( $\omega = 0$ ) حقیقی بوده و شکل تحلیلی آن در حد دماهای پایین ( $T \rightarrow 0$ ) و در رژیم ذاتی به صورت زیر بدست می‌آید

$$\frac{\Pi(\mathbf{q}, 0)}{\rho_0} = -1 + \frac{1}{q} \sqrt{q^2 - \kappa^2} \theta(q - \kappa) \quad (۶)$$

که  $\kappa = \sqrt{4 + u^2}$ . در حد طول موج‌های بلند، همانطور که انتظار می‌رود، تابع پاسخ استاتیک به منفی چگالی حالت‌های سیستم در سطح فرمی میل می‌کند. یکی از مهم‌ترین مشخصه‌های تابع پاسخ استاتیک، وجود نقاط تکین در آن بدلیل وجود سطح فرمی که حالت‌های خالی و پر را از هم جدا می‌کند، است. این نقاط تکین مسئول نوسانات فریدل در استتار پتانسیل ناخالصی هستند. همانطور که در شکل ۲ (نمودار خط چین) نشان داده شده است یک نقطه تکین در  $q = \kappa$  در رفتار تابع پاسخ استاتیک سیستم آلاییده نشده وجود دارد.

#### ب) رژیم کم-آلایش

در این رژیم پاسخ استاتیک به طور تحلیلی رابطه زیر را دارد

$$\frac{\Pi(\mathbf{q}, 0)}{\rho_0} = -1 + \frac{1}{2q} \sqrt{q^2 - \kappa_-^2} \theta(q - \kappa_-) + \frac{1}{2q} \sqrt{q^2 - \kappa_+^2} \theta(q - \kappa_+) \quad (۷)$$

که در آن  $\kappa_{\pm} = \sqrt{4 + u^2 \pm 4\epsilon_F}$ . همانطور که شکل ۲ (نمودار خط پیوسته) نشان می‌دهد در این حالت بر خلاف حالت ذاتی دو نقطه تکین در بردار موج‌های  $q = k_+$  و  $q = k_-$  در رفتار قطبش‌پذیری استاتیک دیده می‌شود که رفتاری کاملاً متفاوت

### ج) رژیم بیش-آلایش

رابطه تحلیلی قطبش‌پذیری با جاگذاری  $k_+$  بجای  $k$  در رابطه ۹ بدست می‌آید. همانطور که در شکل ۳ (راست) نشان داده شده است نوسانات شبیه حالت ذاتی بوده و تنها دوره تناوب علاوه بر شعاع حلقه و پارامتر کج‌شده‌گی، به انرژی فرمی نیز وابسته است.

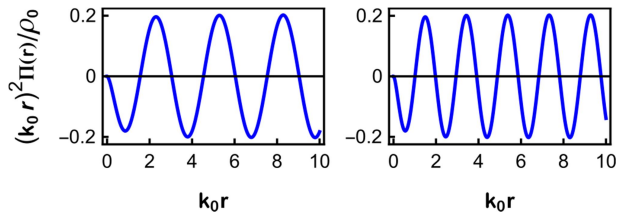
### نتیجه‌گیری

سیستم مورد مطالعه ما نیمه فلز خط-گره دویبعدی کج شده بود که یک سیستم ناهمسانگرد است اما تابع پاسخ چگالی-چگالی این سیستم کاملاً همسانگرد است. در مدل موثر در نظر گرفته شده ما برای سیستم خط-گره، جفت شده‌گی بین شبه اسپین (زیر شبکه) و تکانه وجود ندارد. کج شده‌گی نیز به شکل کاملاً قطری به سیستم افزوده شده و صرفاً طیف انرژی را ناهمسانگرد می‌کند در حالیکه ویژه حالت‌های سیستم بدون تغییر باقی می‌ماند مجموع این دو عامل باعث می‌شود تا پس از جمع روی جهت‌های مختلف (انتگرال گیری روی  $k$ ) پاسخ بدست آمده مستقل از جهت شده و همسانگرد شود. انتظار می‌رود برای مدل‌های پیچیده تر خط-گره کج شده اثرات ناهمسانگردی در پاسخ‌ها قابل مشاهده باشد. در حد استاتیک در حالت ذاتی و بیش-آلایش نوسانات فریدل متعارف، مشابه با گاز الکترونی دویبعدی را در آن ملاحظه می‌کنیم. در رژیم کم-آلایش پدیده زنش را در نوسانات فریدل مشاهده می‌کنیم. لازم به ذکر است که رفتار همسانگرد در پاسخ دینامیکی و مدهای جمعی این سیستم نیز مشاهده می‌شود [۹].

### مرجع‌ها

- [1] Qi, X.-L. and S.-C. Zhang, *Topological insulators and superconductors*. Reviews of Modern Physics, 2011. **83** (4): p. 1057.
- [2] Young, S.M., et al., *Dirac semimetal in three dimensions*. Physical review letters, 2012. **108** (14): p. 140405.
- [3] Fang, C., et al., *Topological nodal line semimetals with and without spin-orbital coupling*. Physical Review B, 2015. **92**(8): p. 081201.
- [4] H. Weng, Y. Liang, Q. Xu, R. Yu, Z. Fang, X. Dai, and Y. Kawazoe, Phys. Rev B. **92**, 045108 (2015).
- [5] LS. Xie, L. M. Schoop, E. M. Seibel, Q.D. Gibson, W. Xie, and R.J. Cava, arXiv:1504.01731 (2015).
- [6] Lu, J.-L., et al., *Two-dimensional node-line semimetals in a Honeycomb-Kagome lattice*. Chinese Physics Letters, 2017. **34** (5): p. 057302.
- [7] Barati, S. and Abedinpour, S.H., 2017. Optical conductivity of three and two dimensional topological nodal-line semimetals. *Physical Review B*, **96**(15), p. 155150.
- [8] G. F. Giuliani and G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2005).
- [9] Rahimpoor, H. and Abedinpour, S.H., In preparation.

که در آن  $J_i(x)$  و  $N_i(x)$  به ترتیب توابع بسل از مرتبه اول و دوم،  $x = k_0 r$  و  $\alpha = \rho_0 k_0^2 k^2 / (2\pi)$  است. همانطور که از رابطه (۹) مشخص است این تابع در فواصل دور با  $r^{-2}$  افت می‌کند شکل ۳ نشان می‌دهد که در این رژیم این تابع رفتاری کاملاً نوسانی دارد که منجر به نوسانات فریدل در چگالی الکترونی القایی می‌شود.



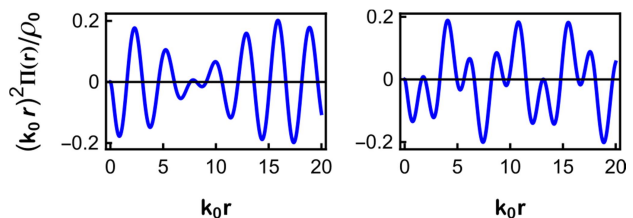
شکل ۳: (چپ) نوسانات فریدل برای حالت ذاتی  $\epsilon_F = 0$  و (راست) رژیم بیش-آلایش با  $\epsilon_F = 1.5\epsilon_0$ . برای هر دو حالت مقدار کج‌شده‌گی برابر با  $u = 0.6v_0$  در نظر گرفته شده است.

### ب) رژیم کم-آلایش

با استفاده از رابطه (۷) داریم

$$\Pi(\mathbf{r}) = \frac{\beta}{2} [J_0\left(\frac{k_+x}{2}\right) N_0\left(\frac{k_+x}{2}\right) + J_1\left(\frac{k_+x}{2}\right) N_1\left(\frac{k_+x}{2}\right)] + \frac{\gamma}{2} [J_0\left(\frac{k_-x}{2}\right) N_0\left(\frac{k_-x}{2}\right) + J_1\left(\frac{k_-x}{2}\right) N_1\left(\frac{k_-x}{2}\right)] \quad (10)$$

که در آن  $\beta = \rho_0 k_0^2 k_+^2 / (2\pi)$  و  $\gamma = \rho_0 k_0^2 k_-^2 / (2\pi)$ . توجه به اینکه رابطه (۱۰) حاصل جمع دو تابع نوسانی با دوره تناوب متفاوت است، همانطور که در شکل‌های ۴ ملاحظه می‌شود پدیده زنش در نوسان‌های چگالی الکترونی القایی ناشی از ناخالصی باردار اتفاق می‌افتد.



شکل ۴: نوسانات فریدل برای حالت کم-آلایش با  $\epsilon_F = 0.2\epsilon_0$  (چپ) و  $\epsilon_F = 0.8\epsilon_0$  (راست). برای هر دو حالت مقدار کج‌شده‌گی برابر با  $u = 0.6v_0$  در نظر گرفته شده است.