A 3D visualization of a metal surface system showing a charge density wave. The surface is composed of a regular lattice of atoms, represented by white and red spheres. A blue, wavy structure runs along the surface, representing the charge density wave. The wave is periodic and has a higher density of blue spheres in certain regions, indicating a modulation of the charge density. The background is a light blue gradient.

**Die Physik quasi-eindimensionaler
metallischer Oberflächensysteme:
Charge Density Wave-Instabilität**

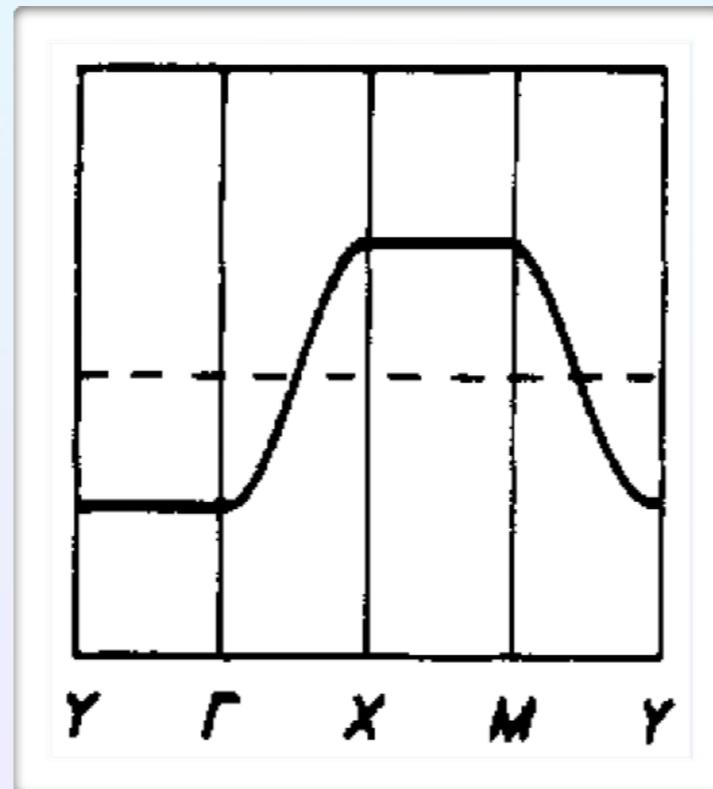
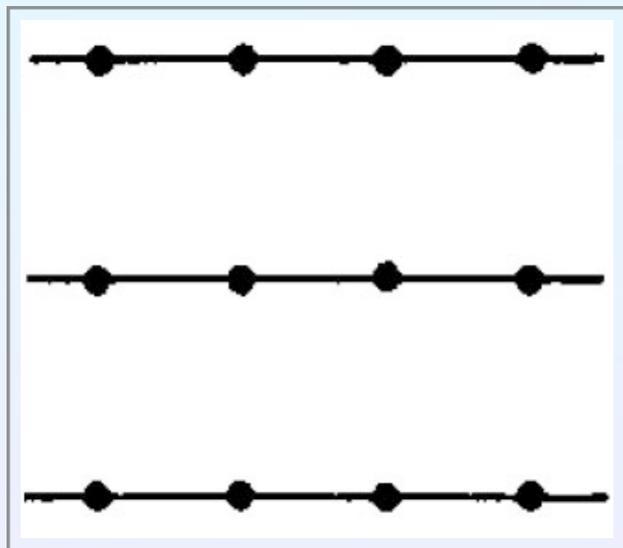
**Universität Paderborn - Department Physik
Hauptseminar SS08
Nadja Koch**

Gliederung

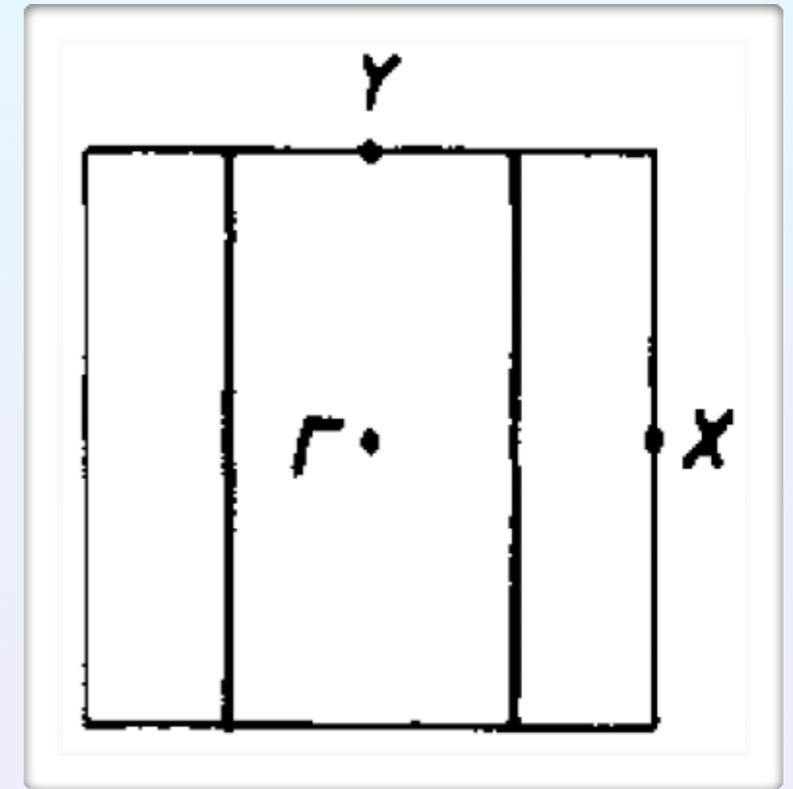
- Einleitung
- Das Phänomen der Charge Density Wave-Instabilität („CDW-Instabilität“)
- In/Si(111): Ein Beispiel für die CDW-Instabilität?
- Zusammenfassung

Einleitung

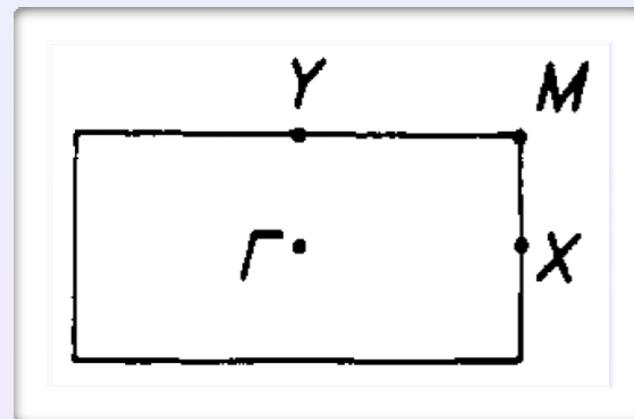
Charakteristische Eigenschaften eines quasi-1D Oberflächensystems



[1]



[1]



[1]

- atomare Ketten auf einem (Halbleiter-)Substrat
- Bandstruktur: keine Dispersion senkrecht zur Kettenrichtung
- Fermi-Fläche: gerade Linien senkrecht zur Kettenrichtung

Das Phänomen der CDW-Instabilität

CDW-Instabilität im Überblick

Fermi-Flächen-Nesting

Störung des Systems durch ein
Phonon mit geeignetem
Wellenzahlvektor



Energiegewinn des elektronischen Systems
durch Orbitalmischung (temperaturabhängig)

CDW-Instabilität

bei kritischer Temperatur: Energiegewinn wird größer als die für
die Störung aufzuwendende Energie



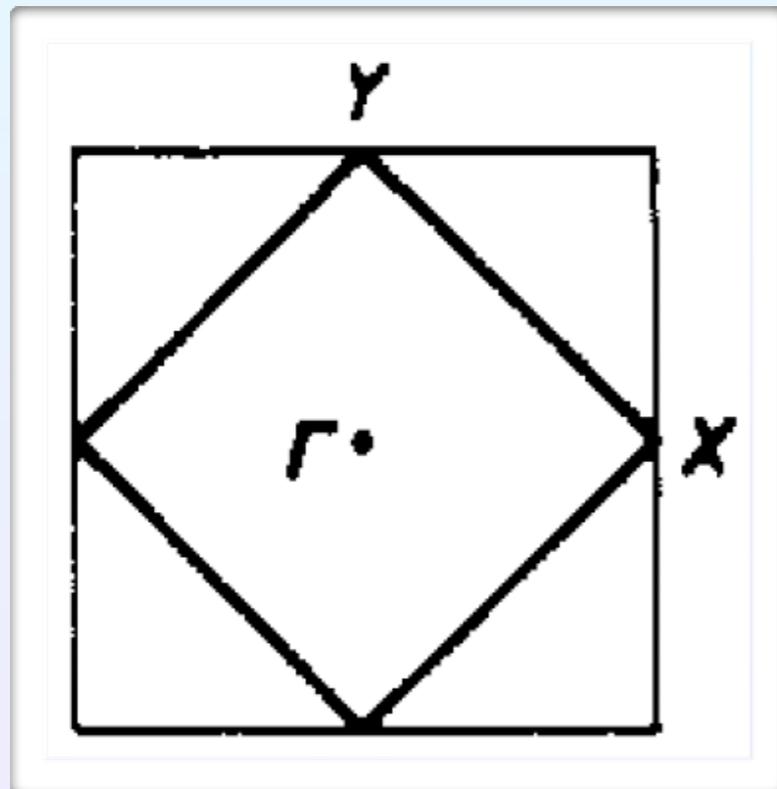
CDW-Übergang

Metall-Isolator-Übergang

statische Gitterverzerrung

Fermi-Flächen-Nesting

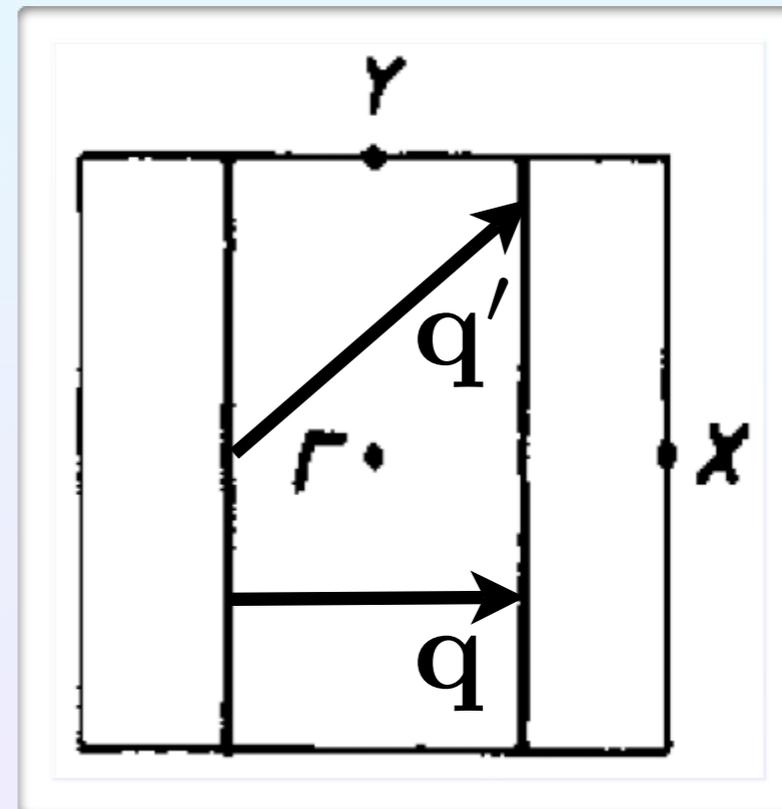
2D-Oberfläche



[1]

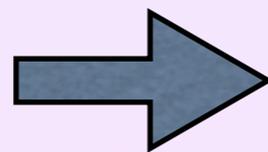
kein Fermi-Flächen-Nesting

quasi-1D-Oberfläche (mit genau einem halbgefüllten Band)



[1]

Fermi-Flächen-Nesting,
beliebig viele Nesting-Vektoren

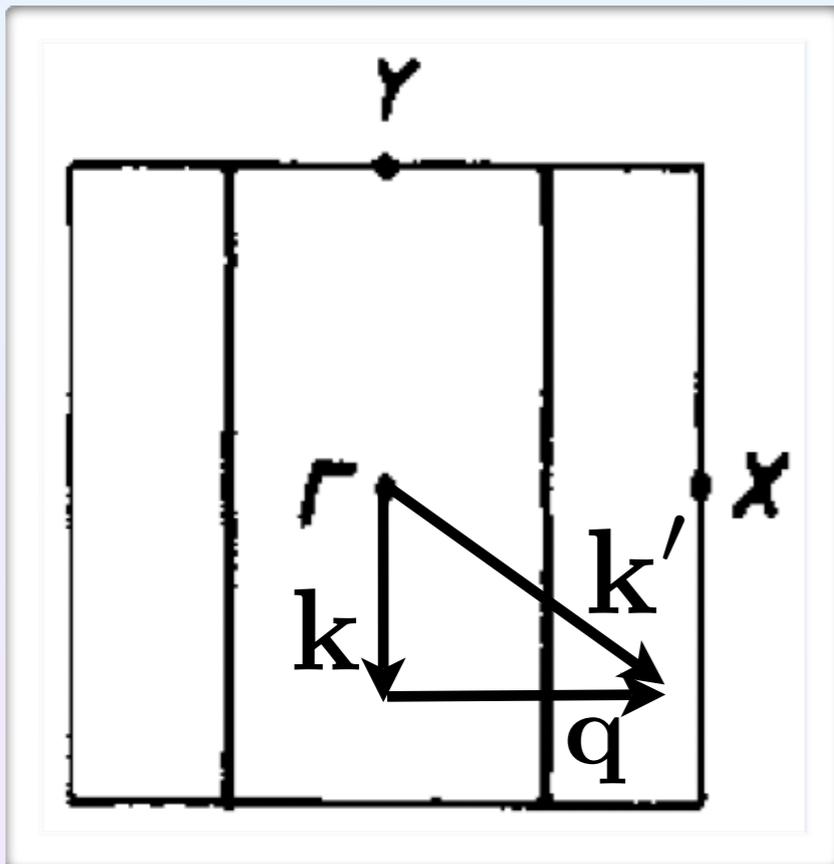


quasi-1D-Oberflächensysteme
für CDW-Instabilität prädestiniert

Orbitalmischung (I)

quasi-1D-Oberfläche

(mit genau einem
halbgefüllten Band)



[1]

- Nesting-Vektor \mathbf{q} :
Paare von Wellenzahlvektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}'
mit $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{q}$
- Störung des Systems durch ein Phonon
mit Wellenzahlvektor \mathbf{q}



Orbitalmischung: $\Psi_{\mathbf{k}} = \Phi_{\mathbf{k}} + \mu\Phi_{\mathbf{k}'}$
 $\Psi_{\mathbf{k}'} = -\mu\Phi_{\mathbf{k}} + \Phi_{\mathbf{k}'}$

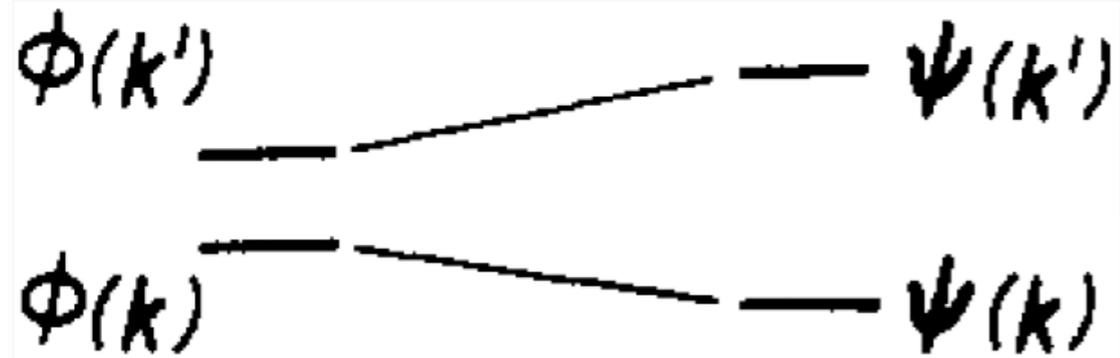
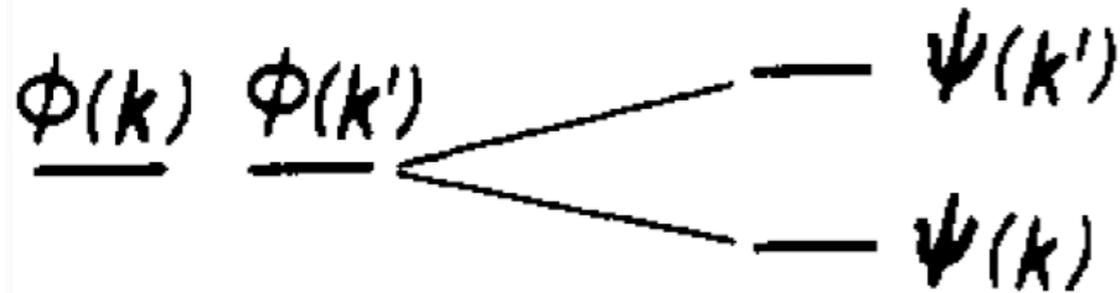
für $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{q}$

($\Phi_{\mathbf{k}}$ und $\Phi_{\mathbf{k}'}$: ursprüngliche Eigenfunktionen)

Orbitalmischung (II)

\hat{H}

$\hat{H} + \hat{H}'$

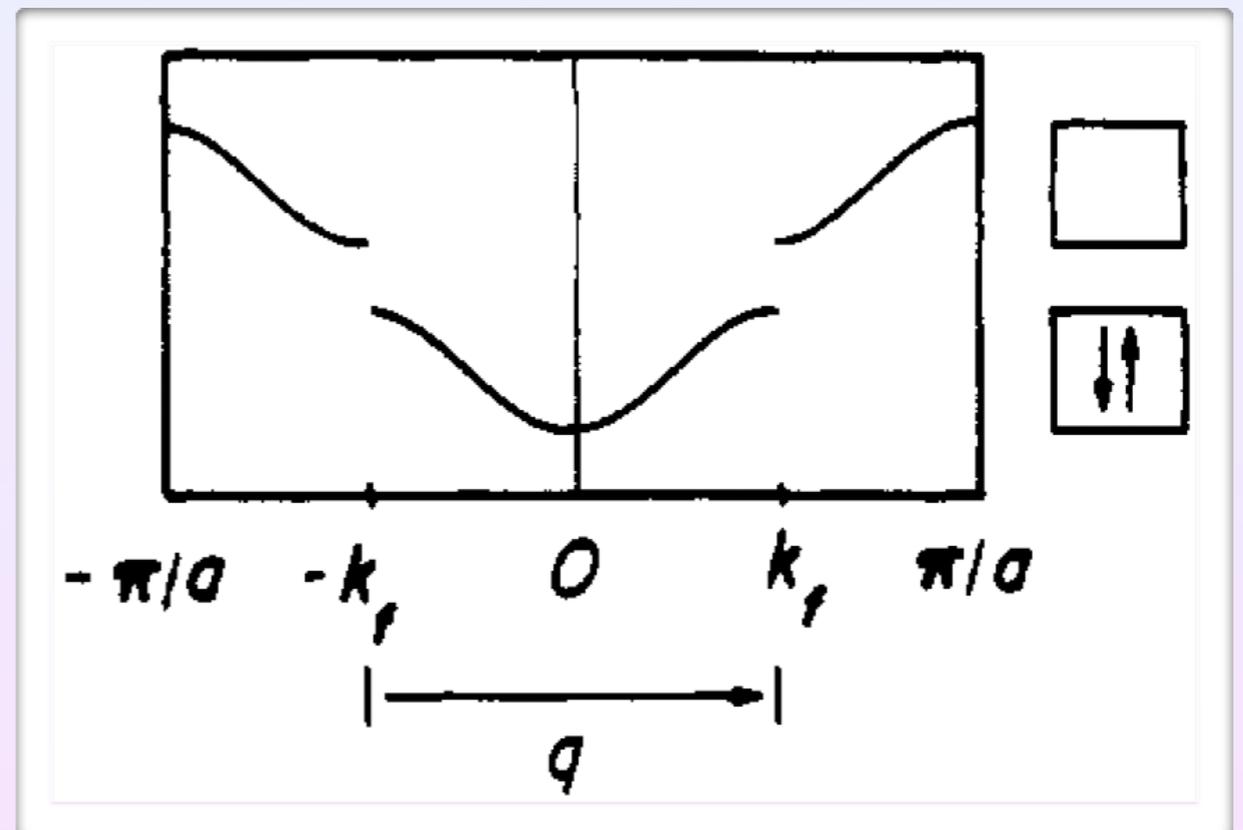


[1]

- Öffnung einer Bandlücke
- elektronischer Energiegewinn
(temperaturabhängig)

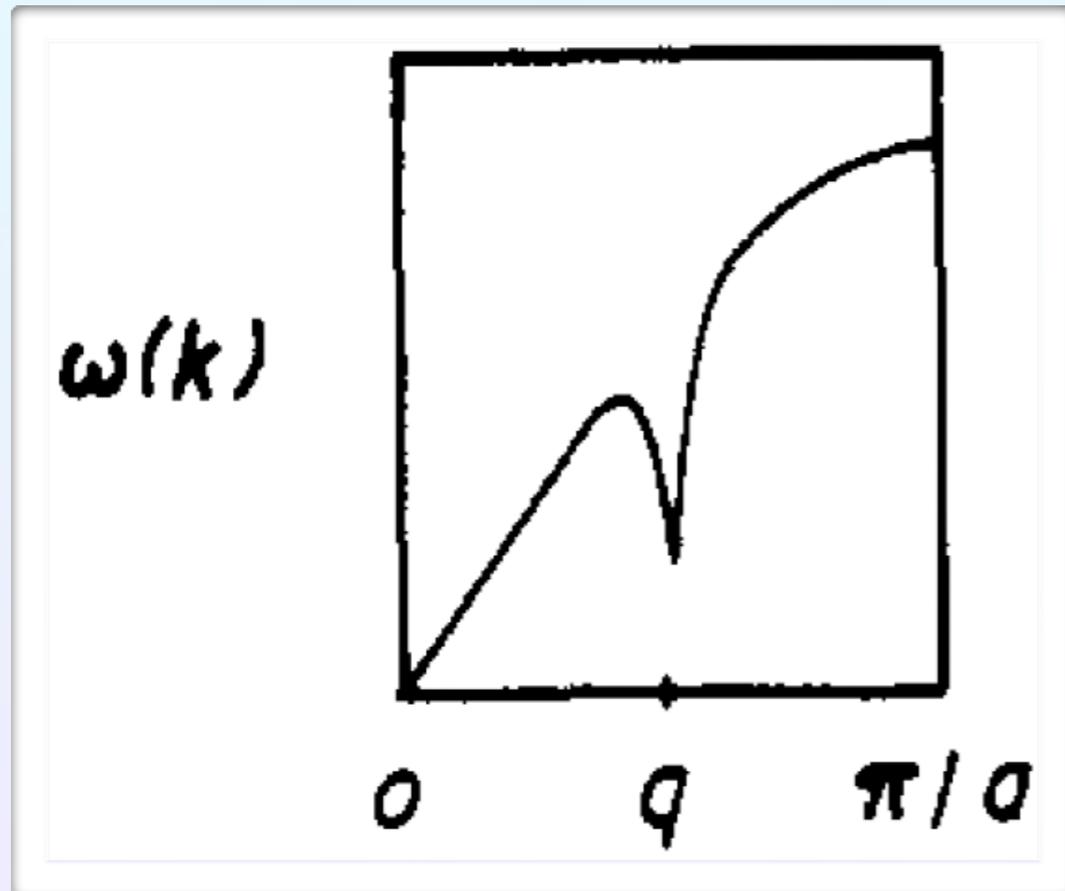
Störungstheorie:

- Aufhebung der Entartung am Fermi-Niveau
- Vergrößerung der Energiedifferenz abseits der Fermi-Fläche



[1]

Kohn-Anomalie



[1]

- Kohn-Anomalie:
Minimum der
Phononen-Dispersionskurve
bei $k = q$ („soft phonon“),
wobei q : Nesting-Vektor

- Ausprägung des Minimums temperaturabhängig

$$T = T_c : \quad \omega(\mathbf{q}) = 0$$

→ „Einfrierung“ des „soft phonons“,
also statische Gitterverzerrung

Charge Density Wave (CDW)

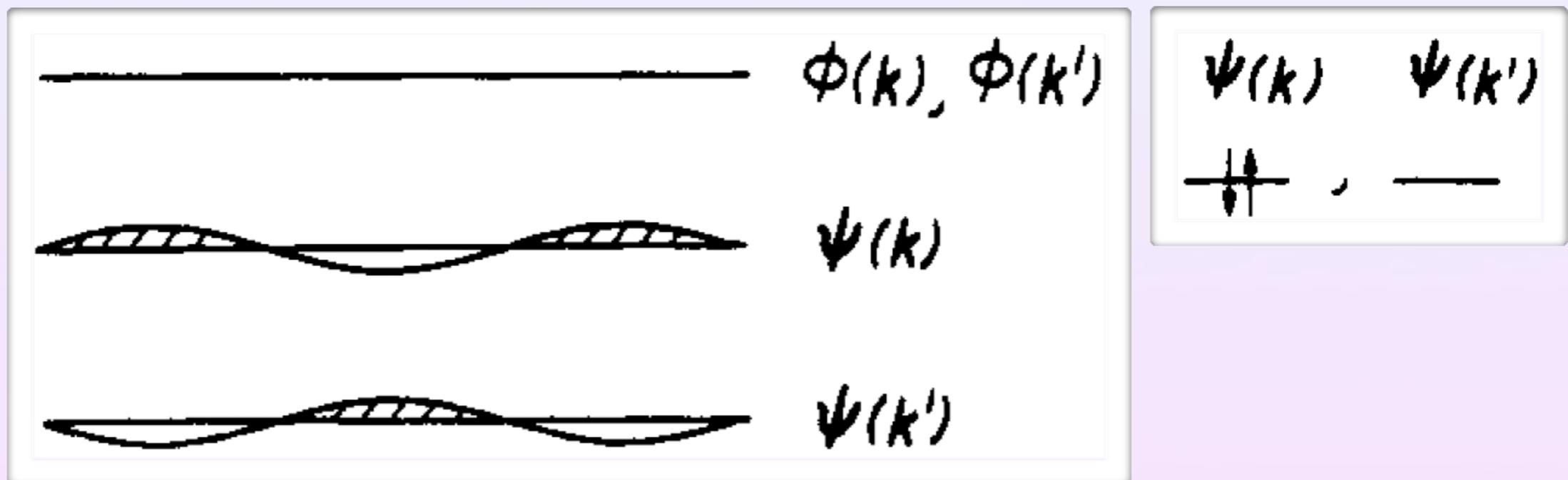
- Ladungsdichten von $\Psi_{\mathbf{k}}$ und $\Psi_{\mathbf{k}'}$:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}|^2 \propto |\Phi_{\mathbf{k}}|^2 + \gamma^2 |\Phi_{\mathbf{k}'}|^2 + \Delta\rho$$

$$|\Psi_{\mathbf{k}'}|^2 \propto \gamma^2 |\Phi_{\mathbf{k}}|^2 + |\Phi_{\mathbf{k}'}|^2 - \Delta\rho,$$

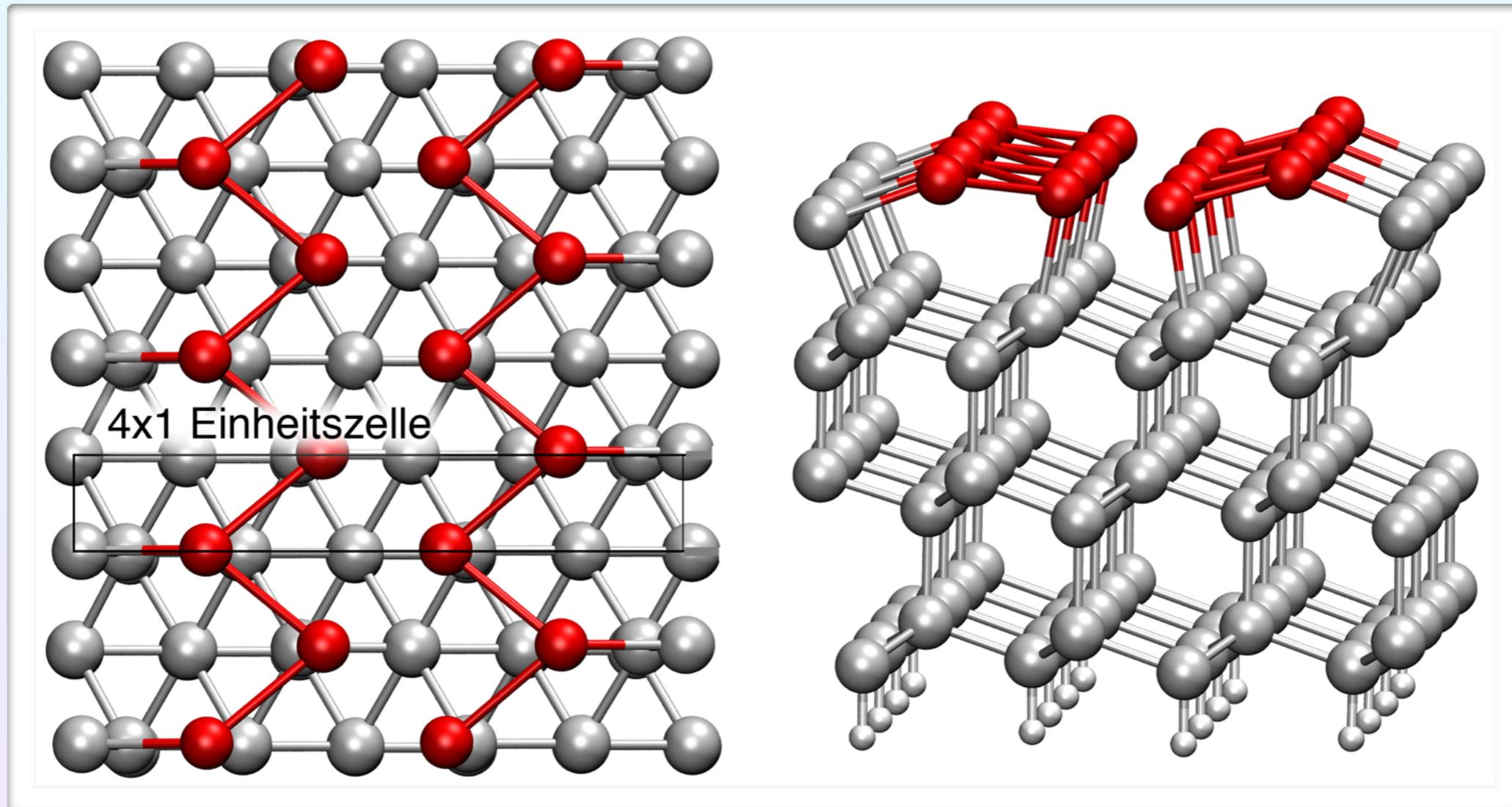
wobei $\Delta\rho(\mathbf{r}) \sim \cos(\mathbf{q}\mathbf{r})$

➔ gegeneinander phasenverschobene Ladungsdichtewellen



**In/Si(111): Ein Beispiel für die
CDW-Instabilität?**

In/Si(111) bei Raumtemperatur (I)

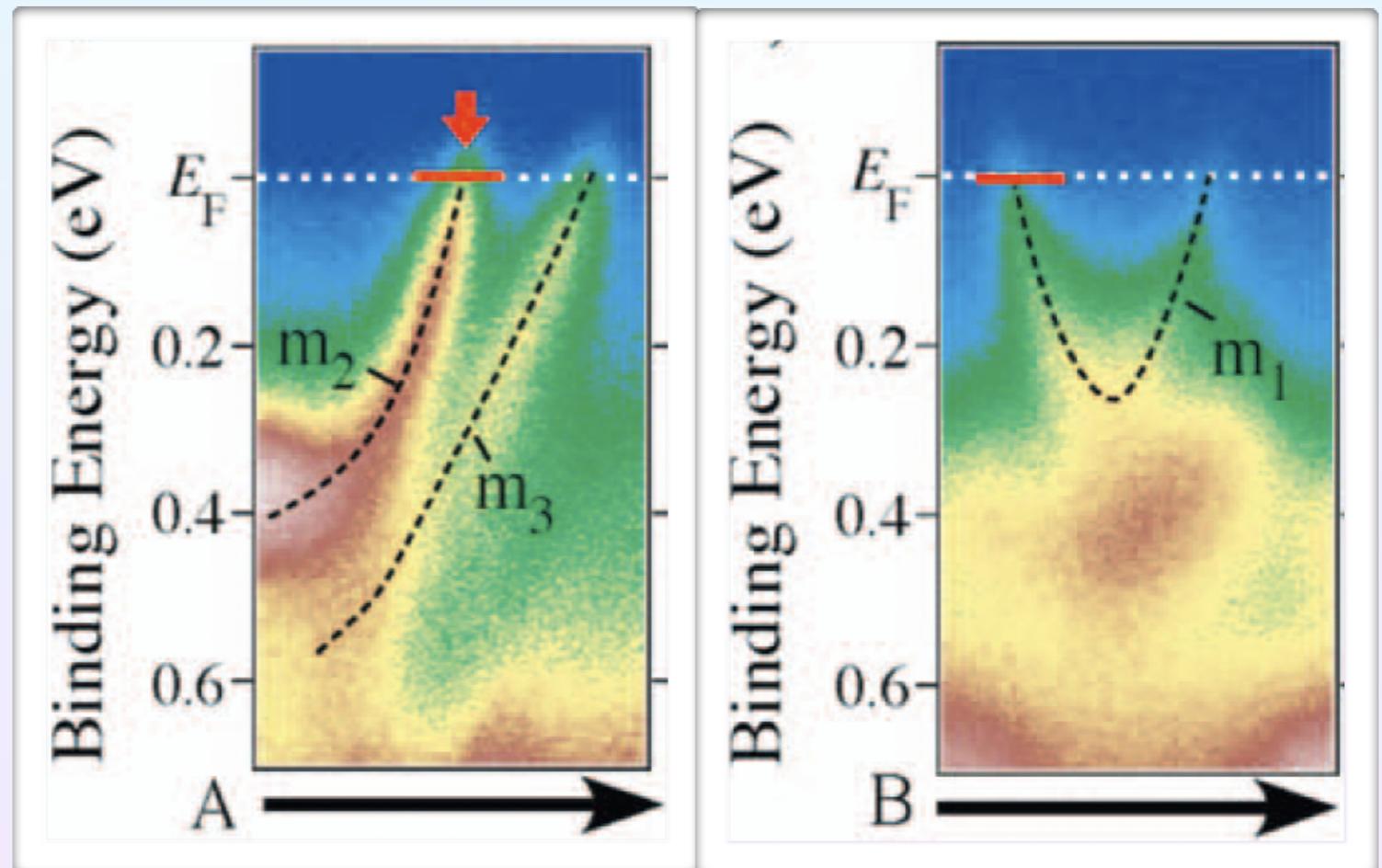


- (4x1)-Translationssymmetrie
- „In-Nanodrähte“ bestehend aus zwei In-Zigzag-Ketten

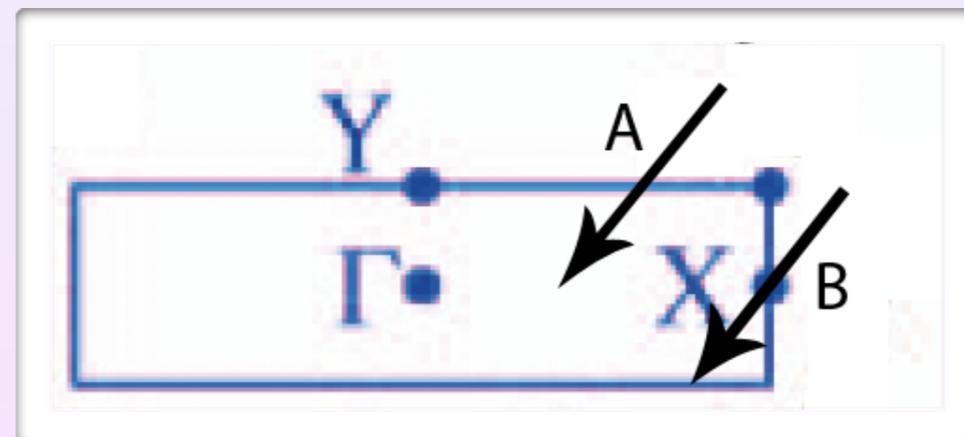
In/Si(111) bei Raumtemperatur (II)

ARPES-Experiment bei $T = 295 \text{ K}$:^[2]

- drei metallische Bänder



[2]



Phasenübergang von In/Si(111)

reversibler Phasenübergang bei $T \approx 120$ K:

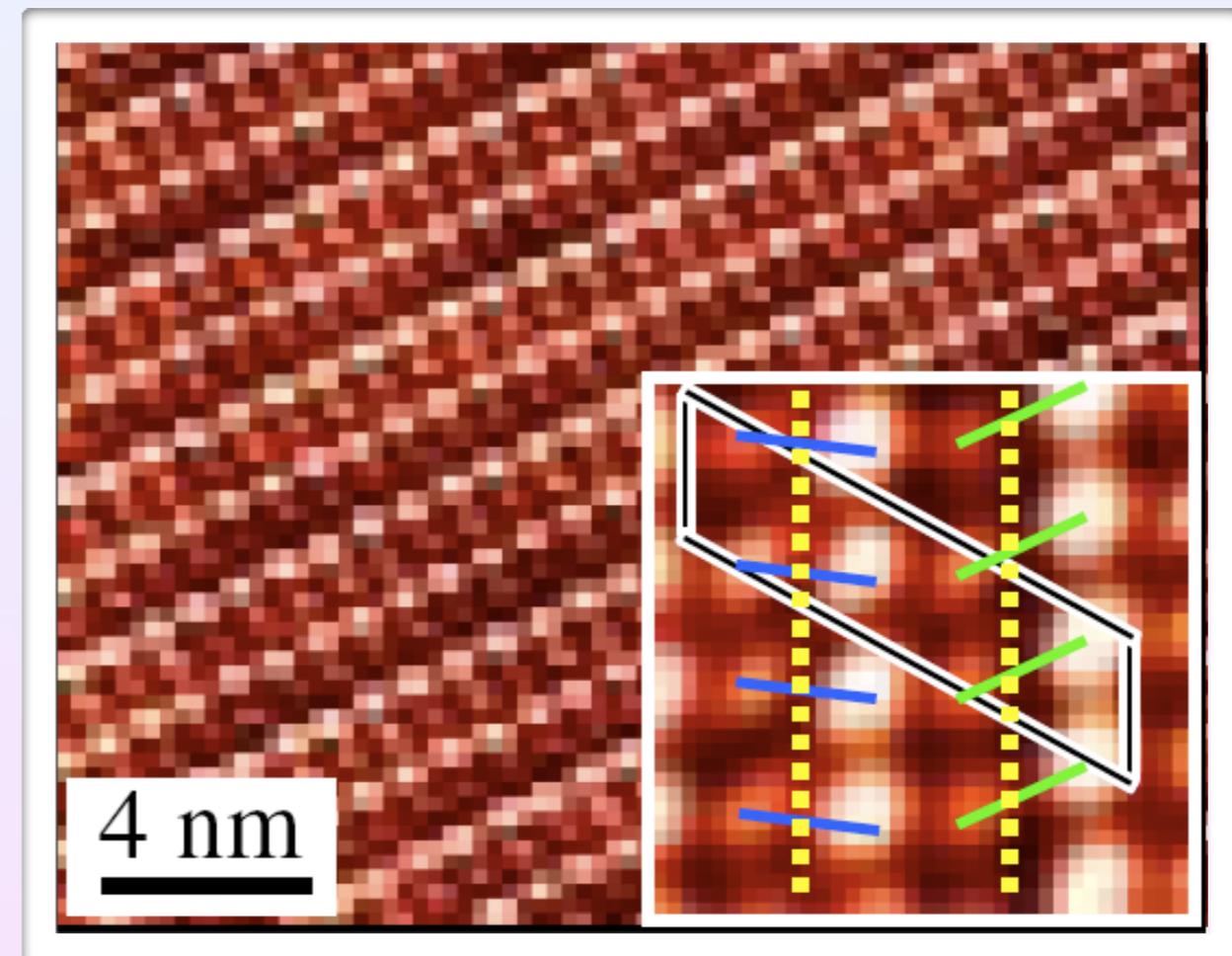
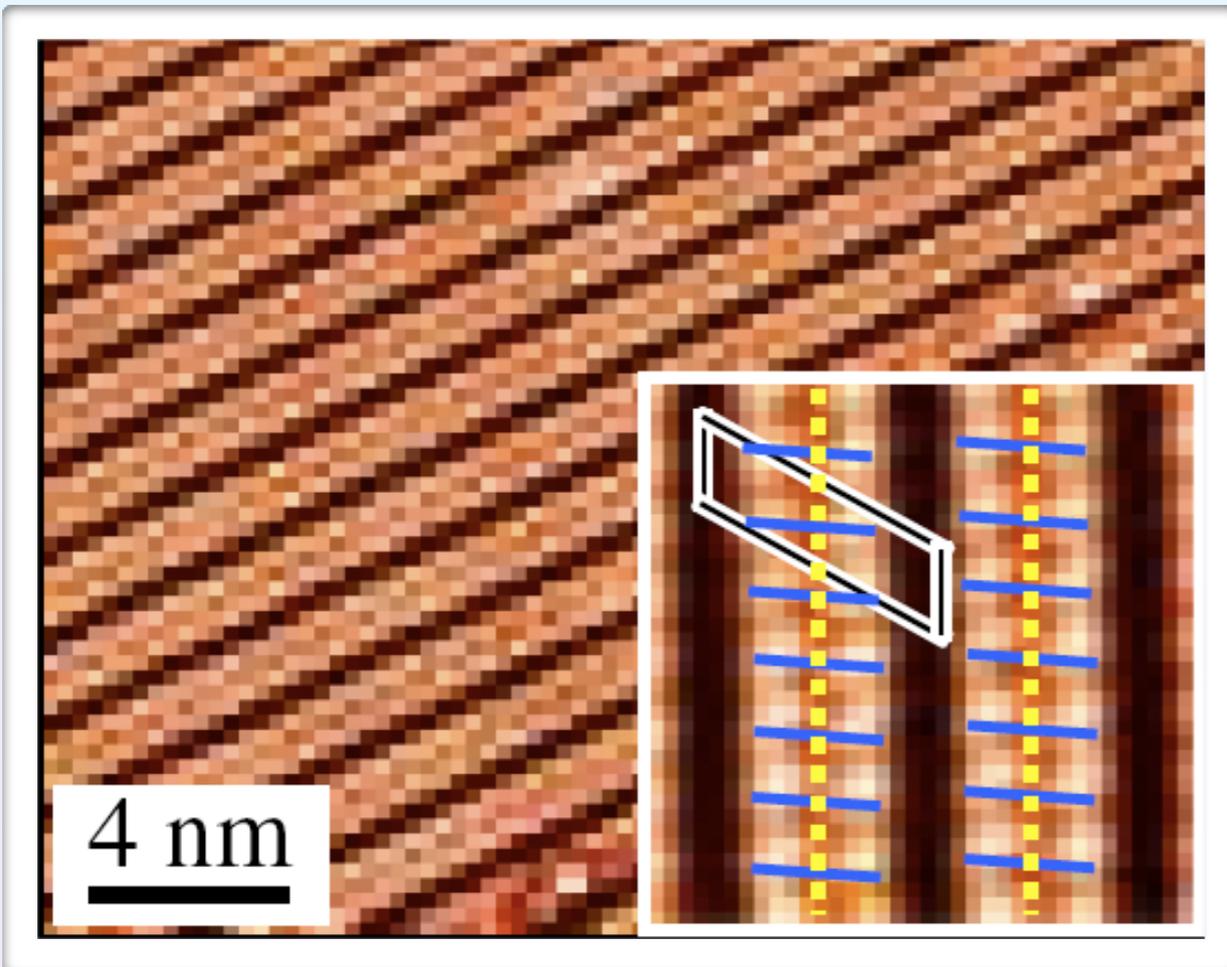
- strukturell: $(4 \times 1) \rightarrow (8 \times 2)$
- elektronisch: Metall \rightarrow Isolator

CDW-Übergang?

Struktureller Phasenübergang

STM-Experiment:^[3]

Raumtemperatur:
(4x1)-Struktur



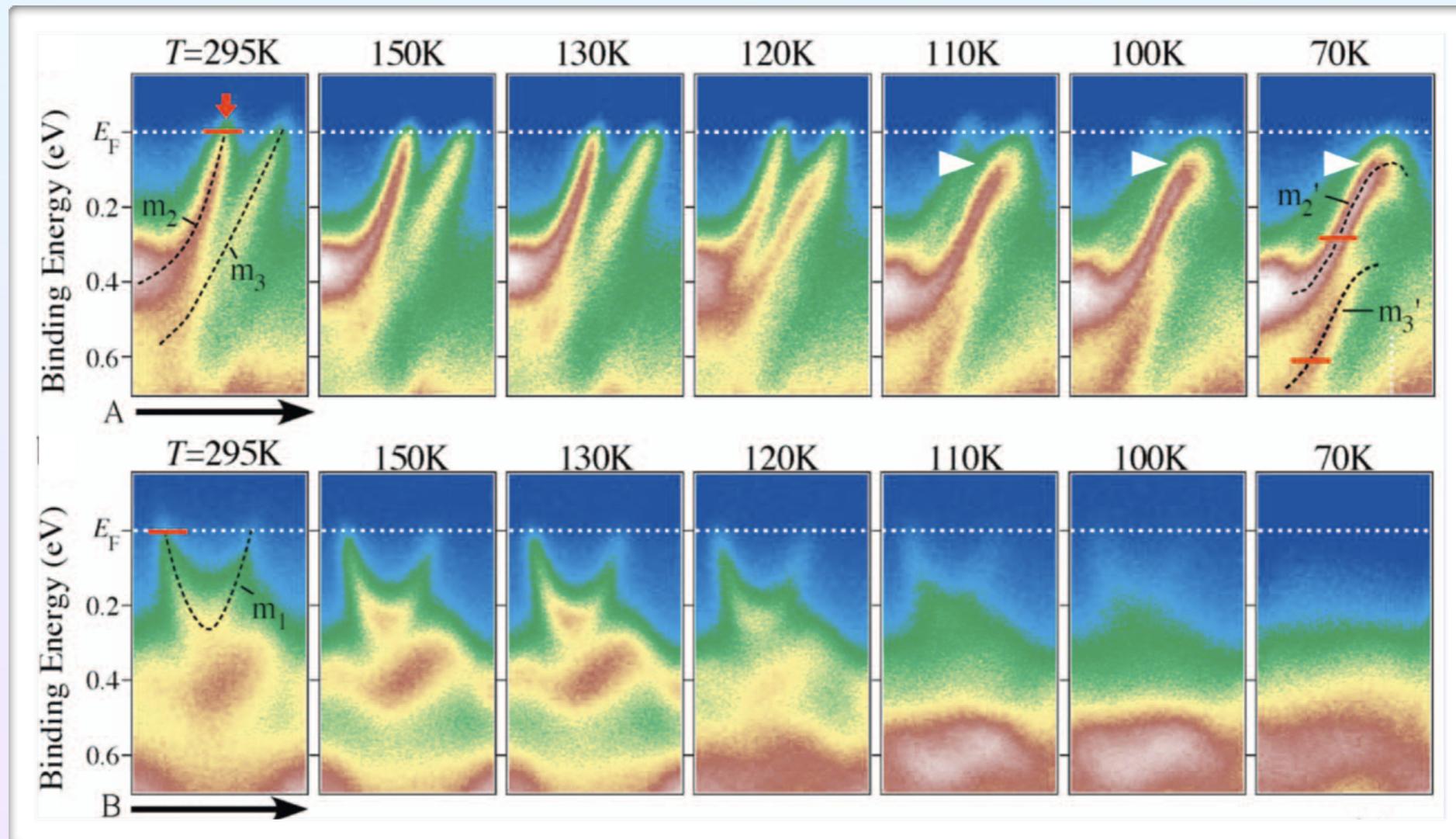
T = 40 K:
(8x2)-Struktur

[3]

[3]

Elektronischer Phasenübergang

temperaturaufgelöstes ARPES-Experiment: [2]

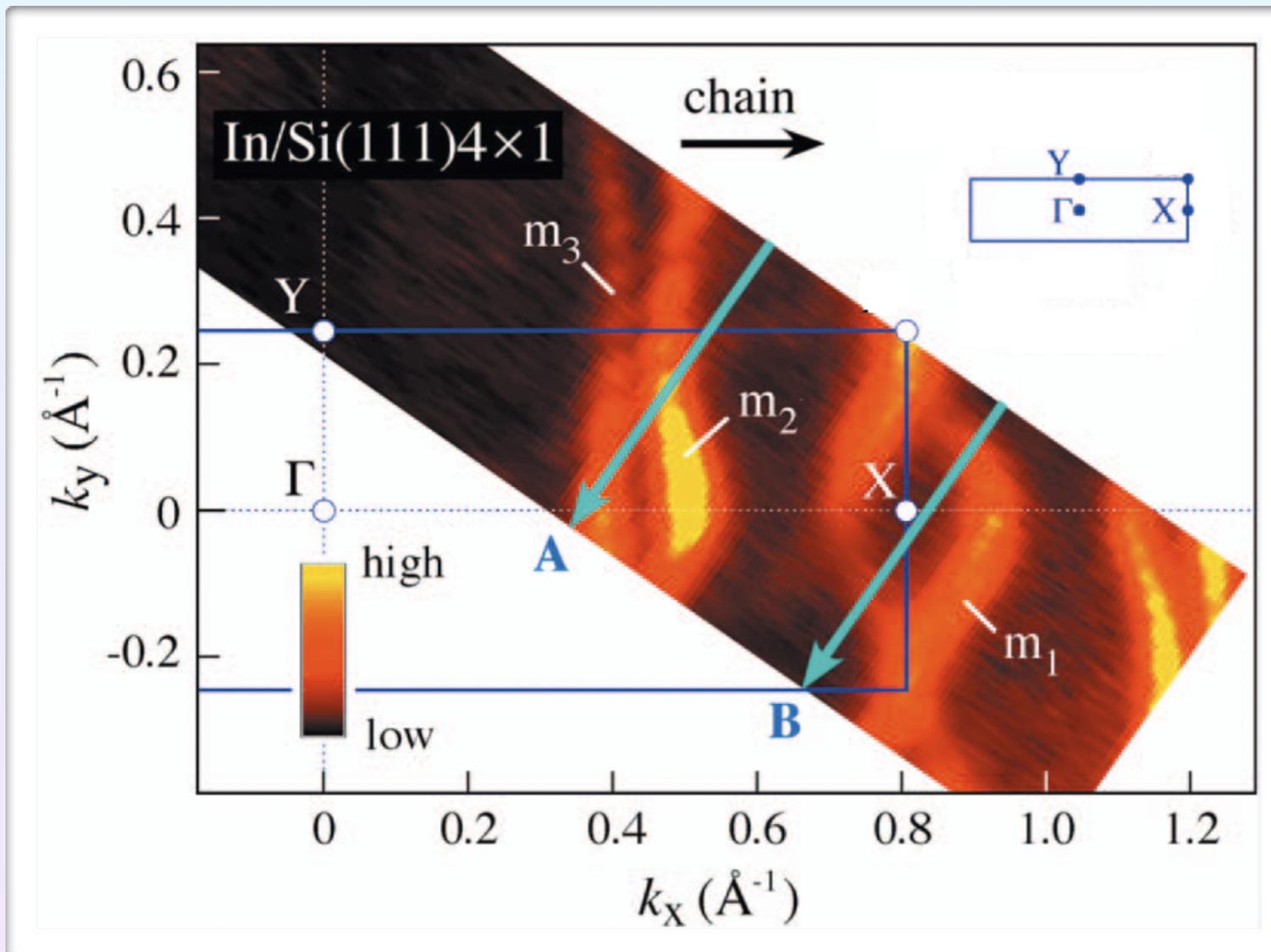


[2]

- Metall-Isolator-Übergang
- Bandstruktur ändert sich substantiell und plötzlich

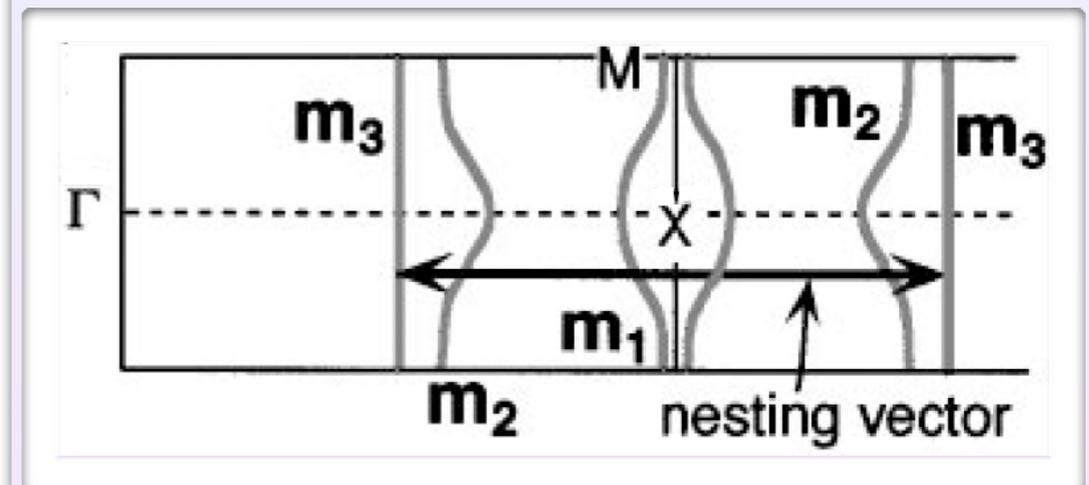
Fermi-Flächen-Nesting?

Messung der Fermi-Fläche mittels ARPES: ^[2]



[2]

ARPES-Intensität
bei $E_F \pm 30$ meV
(Raumtemperatur)



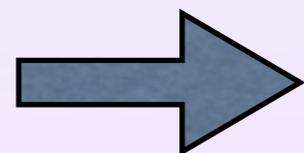
[4]

- unvollständiges Fermi-Flächen-Nesting

CDW-Instabilität als Ursache für den Phasenübergang?

Pro: • Nesting-Vektor von m_3 konsistent mit der beobachteten Verdopplung der Gitterperiodizität entlang der Kettenrichtung

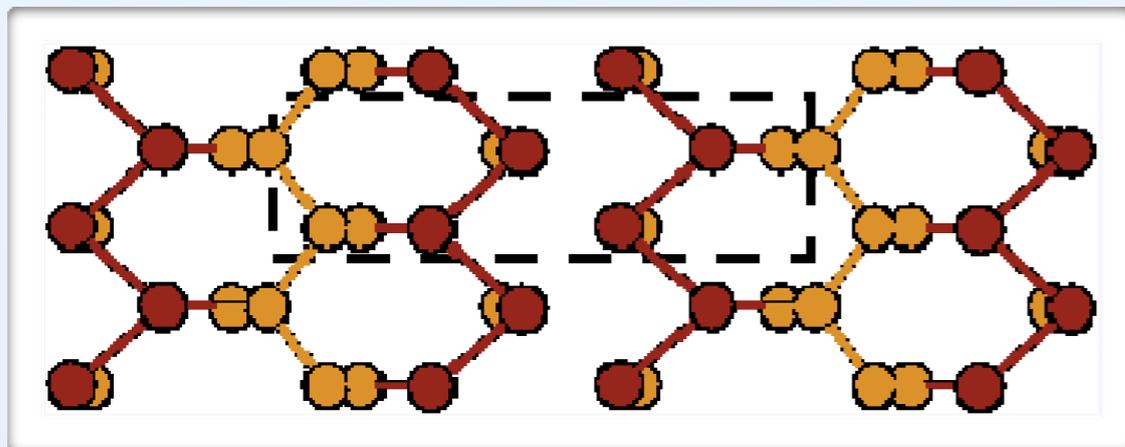
Contra: • nur unvollständiges Fermi-Flächen-Nesting
• substantielle Änderung der Bandstruktur



CDW-Instabilität nicht die (alleinige) Erklärung!

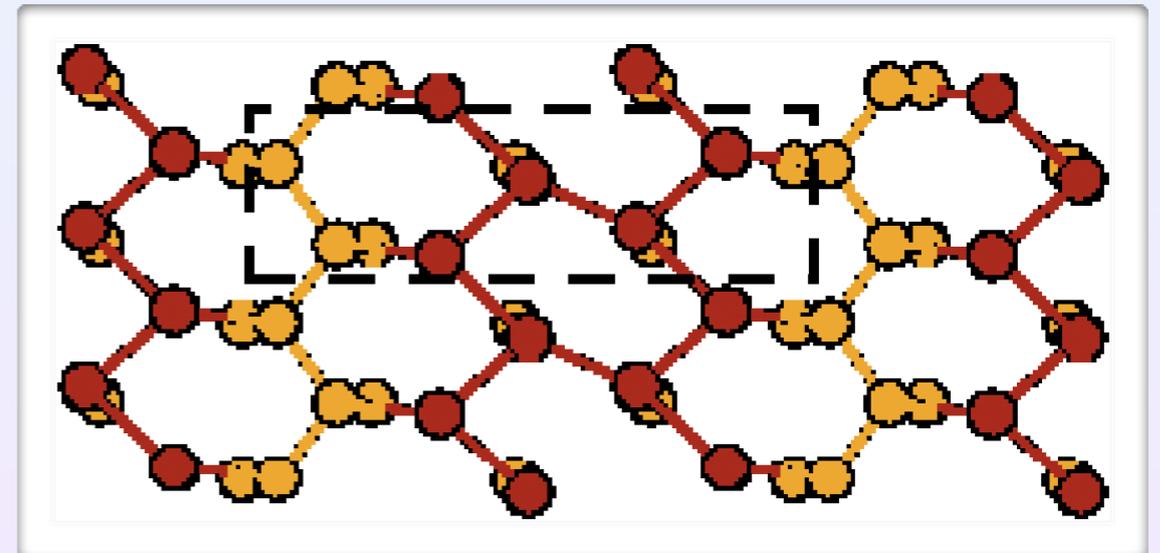
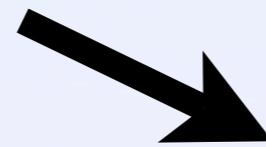
Zusammenwirken einer Scherung und CDW-Instabilität? (I)

DFT-Rechnung: ^[5]



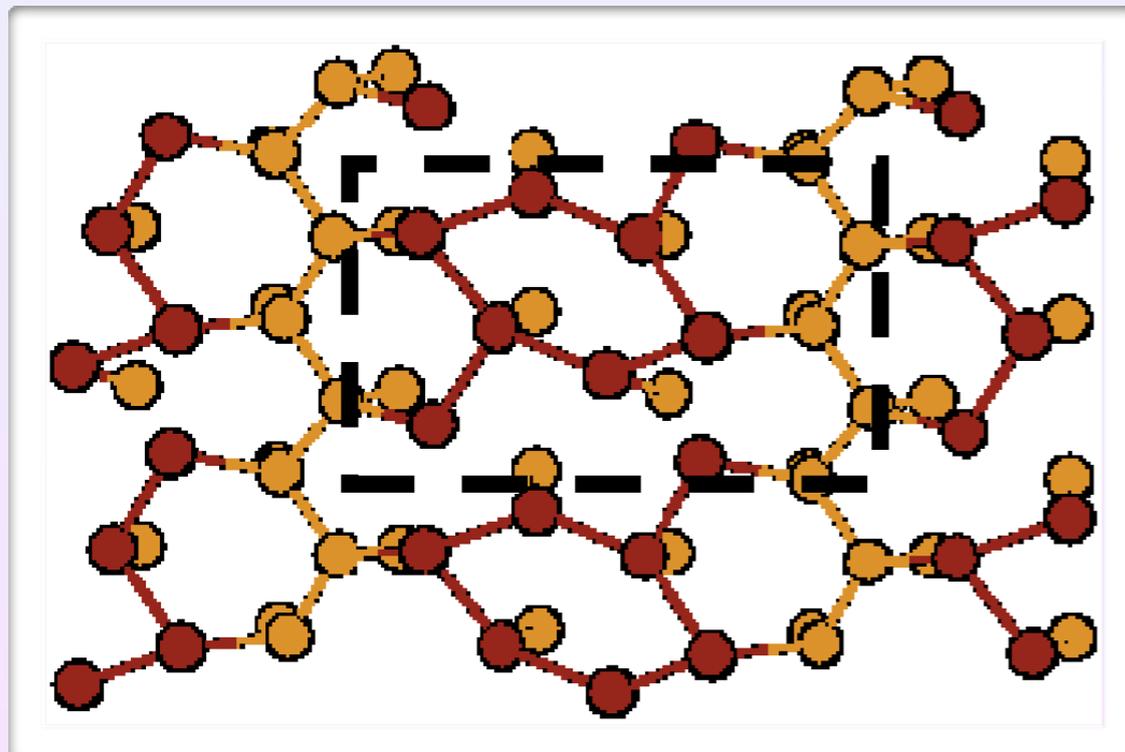
(4x1)-Raumtemperatur-Struktur

Scherung



[5]

Dimerisierung

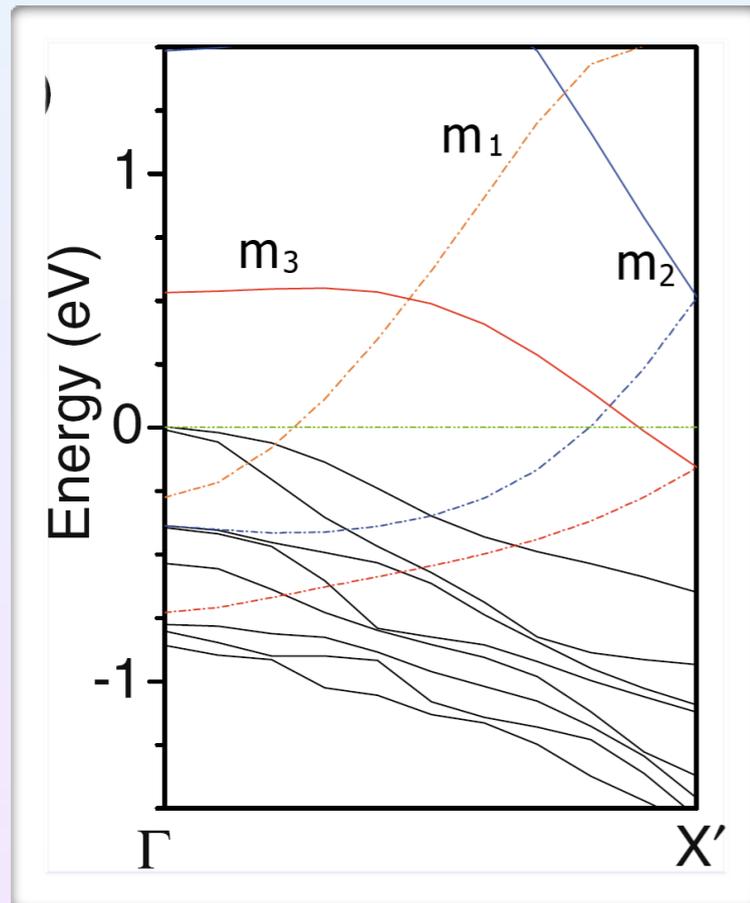
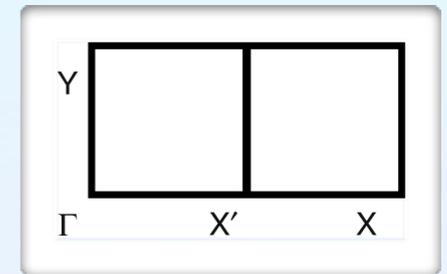


„(4x2)-Hexagon“-Struktur
als Grundzustand ^[5]

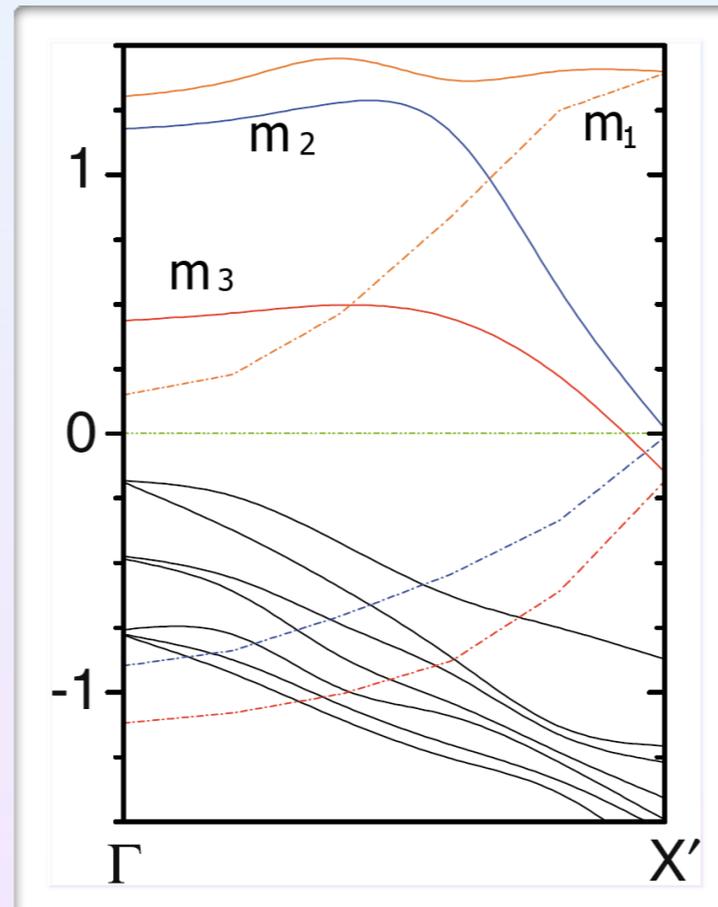
[5]

Zusammenwirken einer Scherung und CDW-Instabilität? (II)

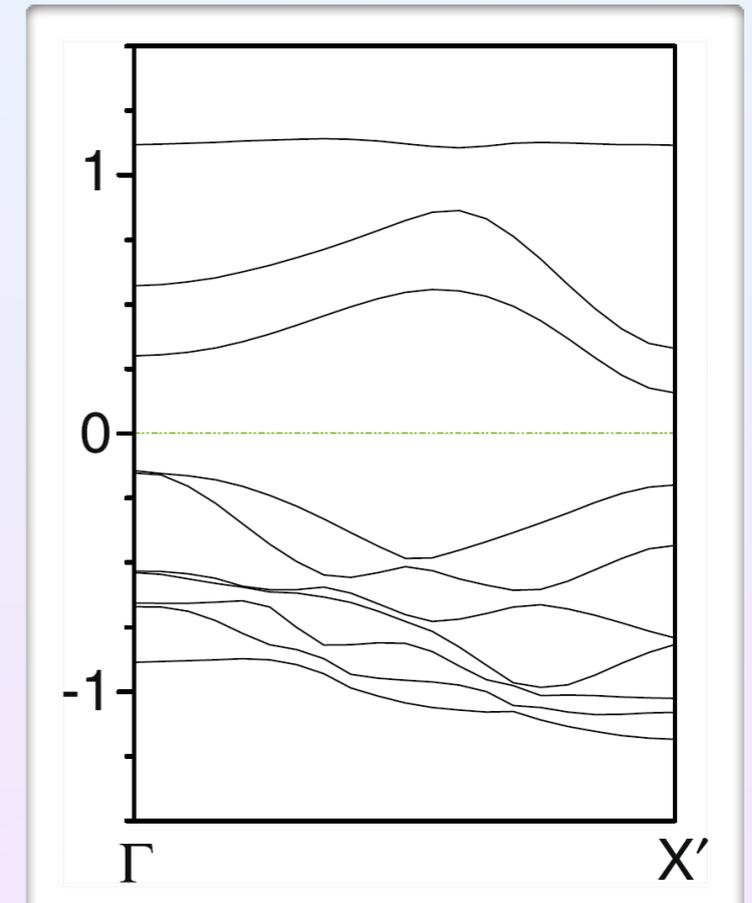
DFT-Rechnung: ^[5]



[5]



[5]



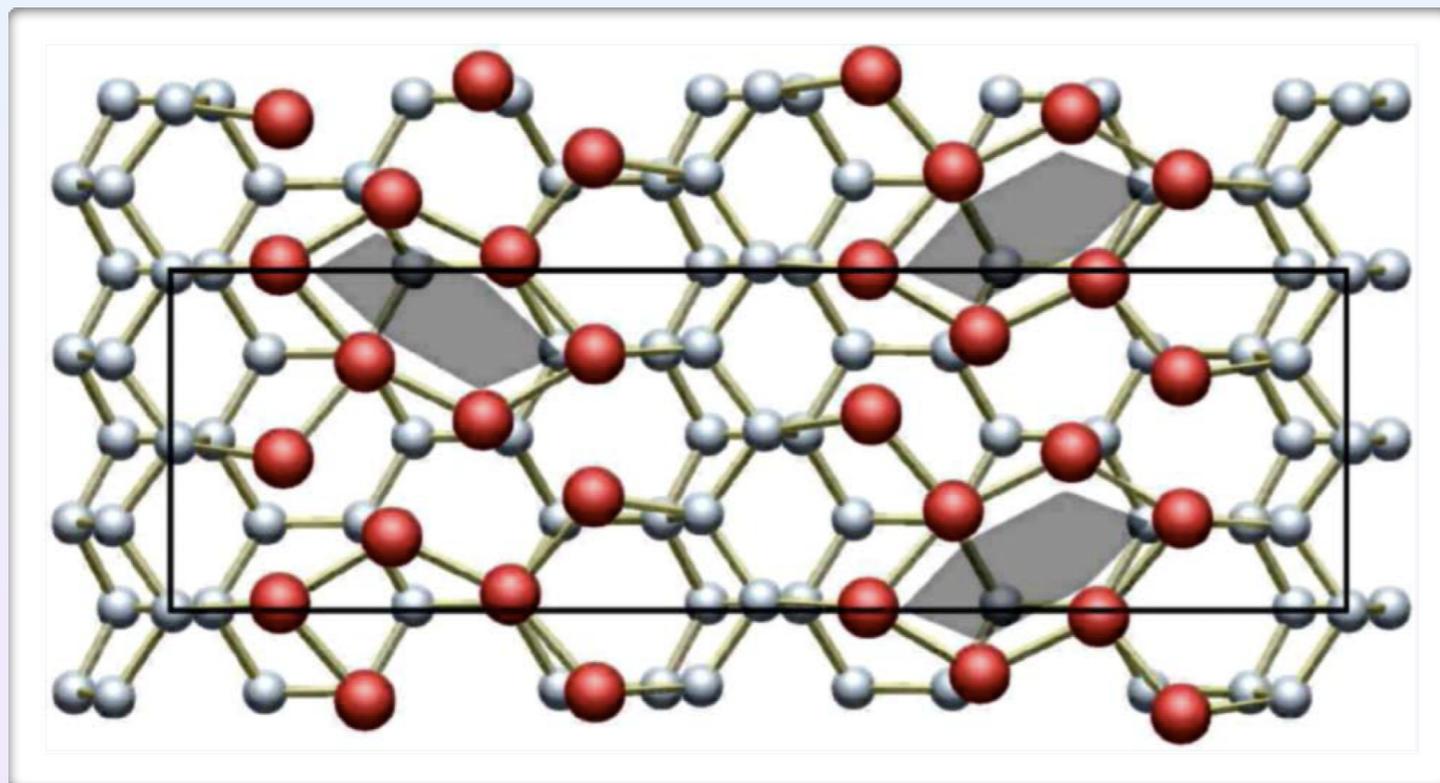
[5]

(4x1)-Struktur $\xrightarrow{\text{Scherung}}$ $\xrightarrow{\text{Dimerisierung}}$ (4x2)-Hexagon

Zusammenwirken einer Scherung und CDW-Instabilität? (III)

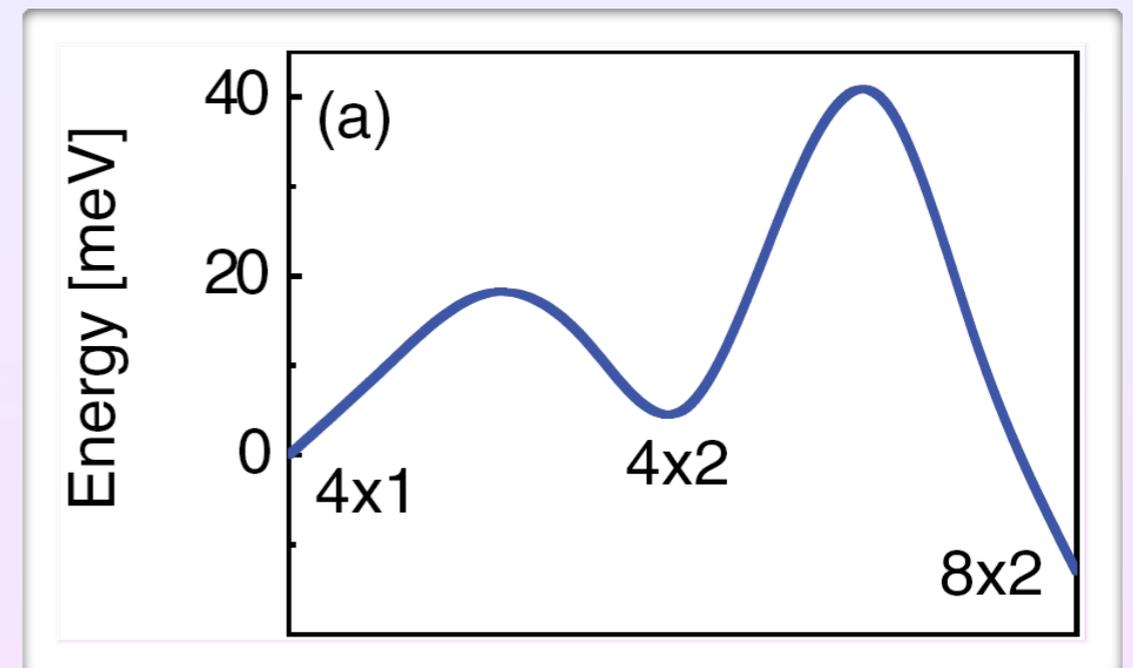
weitere DFT-Rechnung: ^[6]

„(8x2)-Hexagon“-Struktur ^[6]



[6]

gegenphasige Anordnung der Hexagone notwendig zur Stabilisierung ^[6]



[6]

Configurational coordinate

Zusammenfassung

Zusammenfassung (I)

- Eigenschaften quasi-eindimensionaler Oberflächensysteme:
 - Verschwinden der Dispersion senkrecht zur Kettenrichtung
 - Fermi-Fläche: gerade Linien senkrecht zur Kettenrichtung
- Das Phänomen der CDW-Instabilität:
 - Fermi-Flächen-Nesting
 - Störung durch ein Phonon mit geeignetem Wellenzahlvektor führt zu Orbitalmischung
 - Energiegewinn des elektronischen Systems
 - „CDW-Übergang“ bei einer kritischen Temperatur:
Metall-Isolator-Übergang und statische Gitterverzerrung

Zusammenfassung (II)

- In/Si(III): reversibler temperaturinduzierter Phasenübergang bei $T \approx 120$ K
 - CDW-Instabilität als alleinige Ursache unwahrscheinlich
 - eventuell Zusammenwirken einer Scherung und einer CDW-Instabilität

Literaturverzeichnis

- [1] Canadell, Whangbo, Conceptual Aspects of Structure-Property Correlations and Electronic Instabilities, with Applications to Low-Dimensional Transition-Metal Oxides, Chem. Rev. 1991, 91, 965-1034
- [2] Sun, Agario, Souma, Sugawara, Tago, Sato, Takahashi, Cooperative structural and Peierls transition of indium chains on Si(111), Phys. Rev. B 77, 2008
- [3] Guo, Lee, Plummer, Inertwined Electronic and Electronic Phase Transitions in the In/Si(111) Interface, Phys. Rev. Lett. 95, 2005
- [4] Himpsel, Altmann, Bennewitz, Crain, Kirakosian, Lin, McChesney, One-dimensional electronic states at surfaces
- [5] Gonzáles, Ortega, Flores, Metal-insulator transition in one-dimensional In-chains on Si(111): combination of a soft shear distortion and a double-band Peierls instability
- [6] Stekolnikov, Seino, Bechstedt, Wippermann, Schmidt, Calzolari, Buongiorno Nardelli, Hexagon versus Trimer Formation in In Nanowires on Si(111): Energetics and Quantum Conductance, Phys. Rev. Lett. 98, 2007

**Vielen Dank
für Ihre Aufmerksamkeit!**