



| The European Synchrotron

Рассказы о гнездовании

А. Босак

European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France



Коновские аномалии – почему, как и зачем мы их изучаем при помощи рассеяния синхротронного излучения

А. Босак

European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

- что такое коновская аномалия
- как мы это можем увидеть
- profit?



Walter Kohn
Nobel Prize in Chemistry
October 13, 1998
Density-functional theory

INTRODUCTION (sans douleur)

Wiki: Поверхность Ферми — поверхность постоянной энергии в k -пространстве, равной энергии Ферми в металлах или вырожденных полупроводниках. Знание формы поверхности Ферми играет важную роль во всей физике металлов и вырожденных полупроводников, так как благодаря вырожденности электронного газа транспортные свойства его, такие как проводимость, магнетосопротивление зависят только от электронов вблизи поверхности Ферми. Поверхность Ферми отделяет заполненные состояния от пустых при абсолютном нуле температур.

- эффекты де Гааза-ван Альфена и Шубникова-де Гааза (низкая температура, высокие магнитные поля)
- ARPES (поверхность)
- позитронная аннигиляция
- ...

IMAGE OF THE FERMI SURFACE IN THE VIBRATION SPECTRUM OF A METAL*

W. Kohn

Department of Physics, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, Pennsylvania

(Received April 6, 1959)

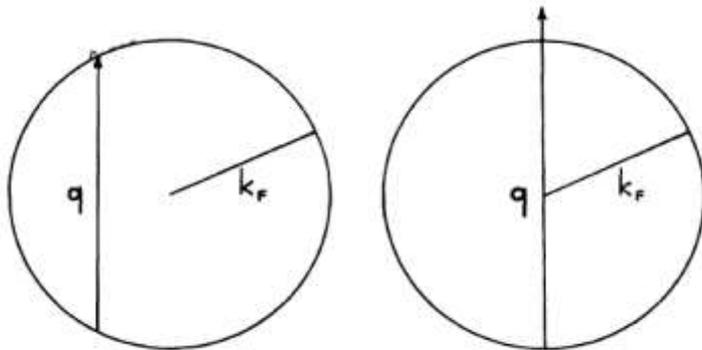


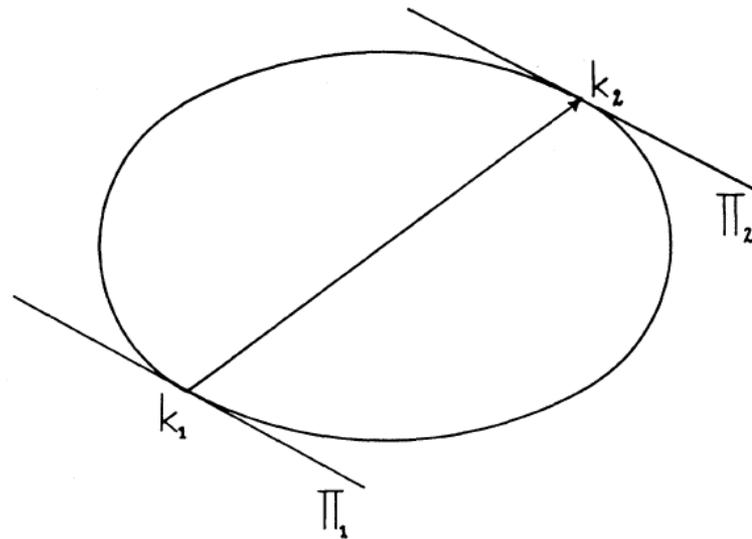
FIG. 1. Virtual excitations for $q < 2k_F$ and $q > 2k_F$.

as long as $q < 2k_F$,
 $\rho_{\text{ext}}(\vec{r})$ causes virtual excitations of some elec-
 trons with conservation of energy while when
 $q > 2k_F$ such excitations are no longer possible

Способность электронов
 проводимости экранировать
 заряды резко падает, как
 только q превосходит $2k_F$

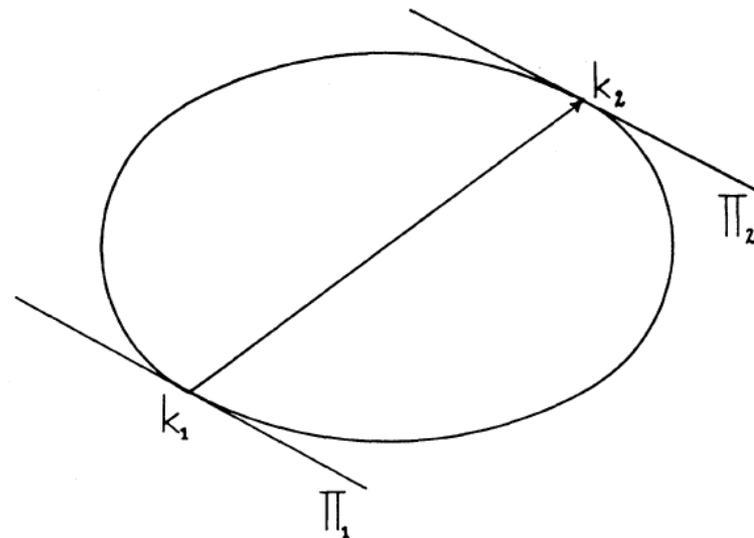
ГНЕЗДОВАНИЕ, гнездования, мн. нет, ср. (спец.). Витье, сооружение гнезд у птиц и некоторых животных. Наступила пора гнездования. Толковый словарь Ушакова. Д.Н. Ушаков. 1935-1940.

вектор гнездования – вектор, совмещающий два фрагмента поверхности Ферми



ГНЕЗДОВАНИЕ, гнездования, мн. нет, ср. (спец.). Витье, сооружение гнезд у птиц и некоторых животных. Наступила пора гнездования. Толковый словарь Ушакова. Д.Н. Ушаков. 1935-1940.

вектор нестинга – вектор, совмещающий два фрагмента поверхности Ферми

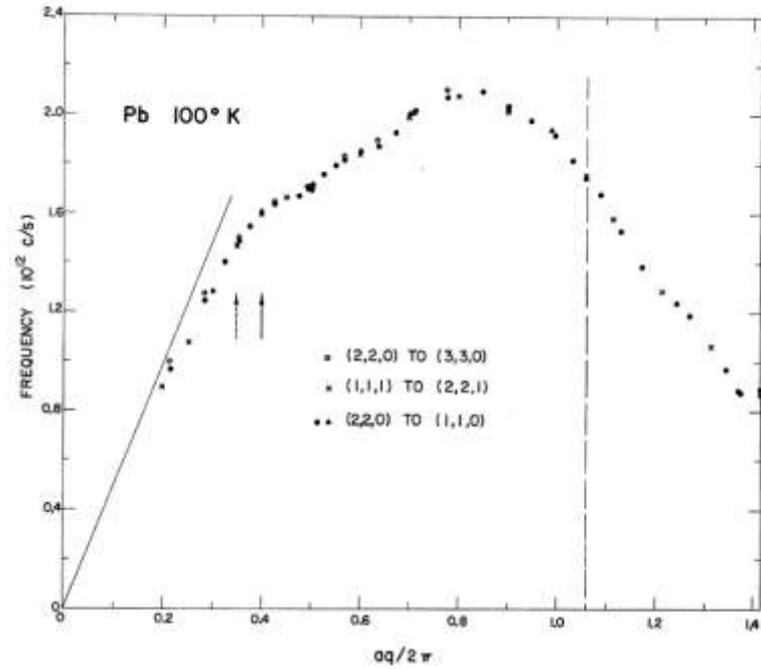
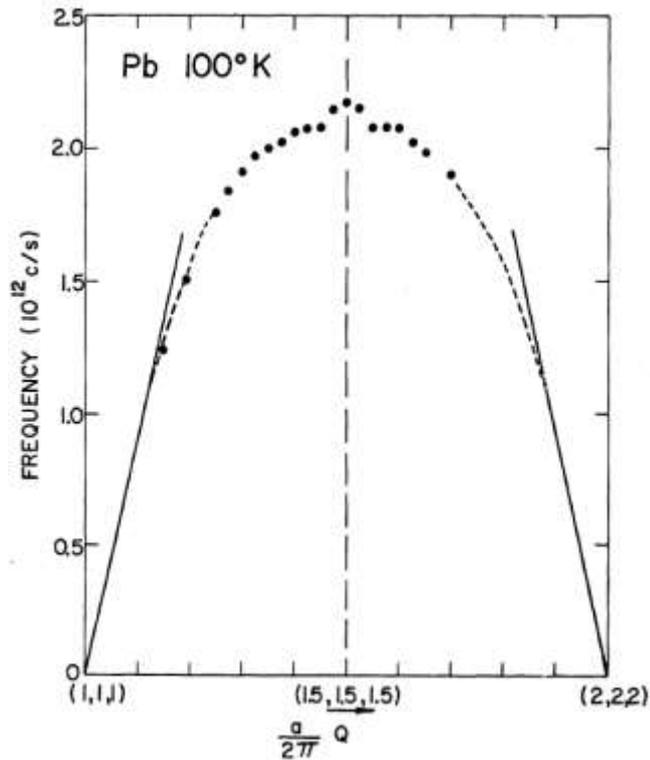


INTRODUCTION

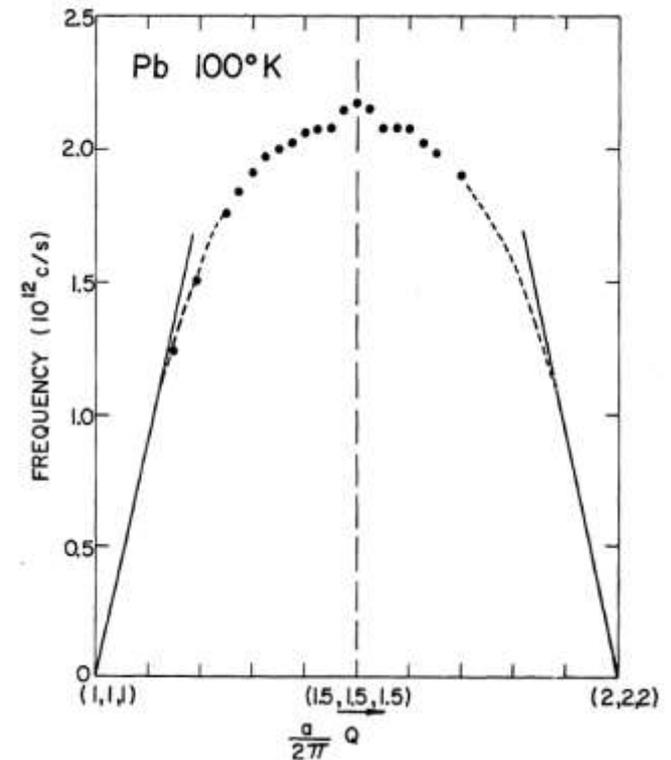
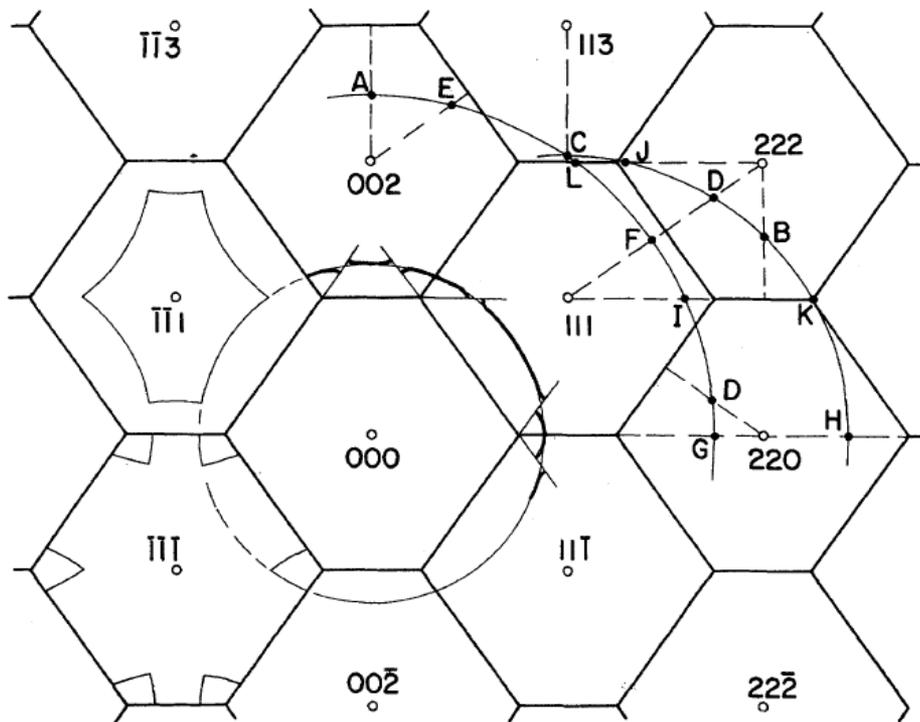
(sans douleur)

IMAGE OF THE FERMI SURFACE IN THE LATTICE VIBRATIONS OF LEAD

B. N. Brockhouse, K. R. Rao,* and A. D. B. Woods



Неупругое рассеяние нейтронов



некоторые аномалии можно интерпретировать уже в модели свободных электронов

Fermi Surface of Aluminum from Kohn Anomalies

JOHN W. WEYMOUTH*

Behlen Laboratory of Physics, University of Nebraska, Lincoln, Nebraska 68508

AND

R. STEDMAN

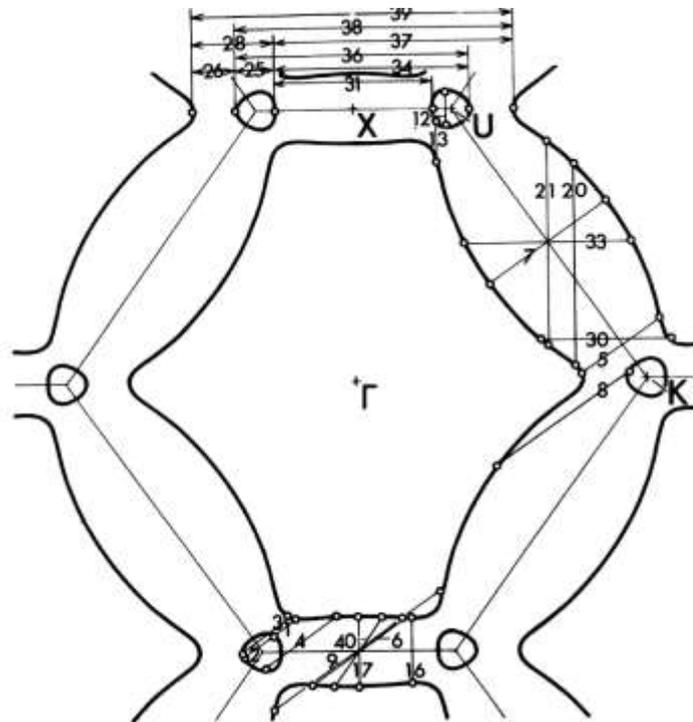


Fig. 1. A [110] section of the Al Fermi surface with predicted Kohn-anomaly transitions.

коновская поверхность -
геометрическое место концов
векторов хорошего нестинга

- диаметральные аномалии
- недиадметральные
- внутризонные
- межзонные

Fermi Surface of Aluminum from Kohn Anomalies

JOHN W. WEYMOUTH*

Behlen Laboratory of Physics, University of Nebraska, Lincoln, Nebraska 68508

AND

R. STEDMAN

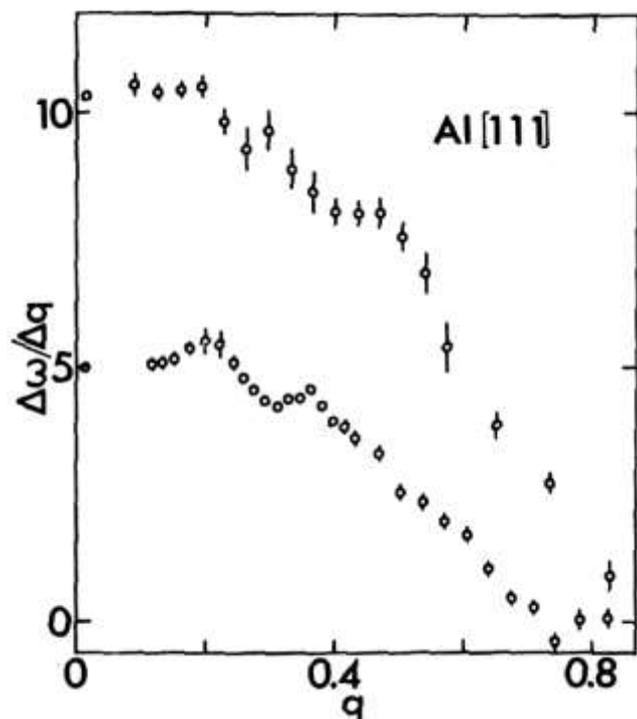


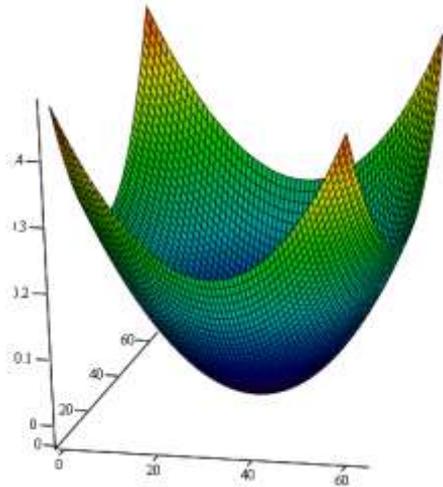
FIG. 3. Slopes $\Delta\omega/\Delta q$ versus q for the [111] branches in units of $(10^{12} \text{ rad/sec})/(2\pi/a)$ versus $(2\pi/a)$. Upper curve for L branch, lower for T branch.

коновская поверхность -
геометрическое место концов
векторов хорошего нестинга

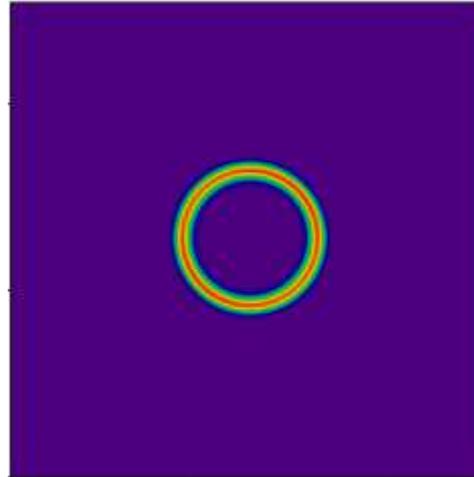
- диаметральные аномалии
- недиадметральные
- внутризонные
- межзонные

Фактор нестинга, функция нестинга

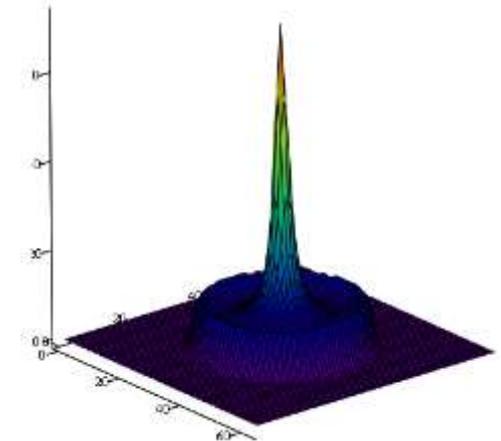
$$X_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_F).$$



2D параболическая дисперсия
+ периодичность



кольцевая поверхность Ферми

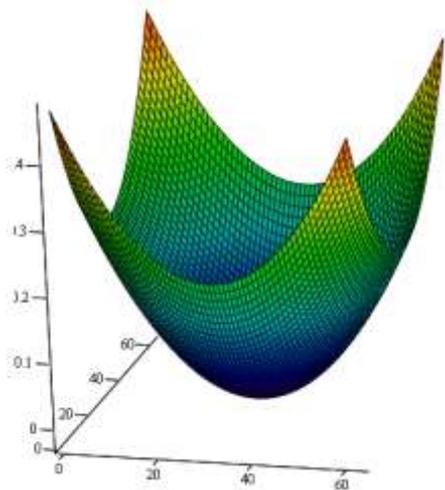


фактор нестинга

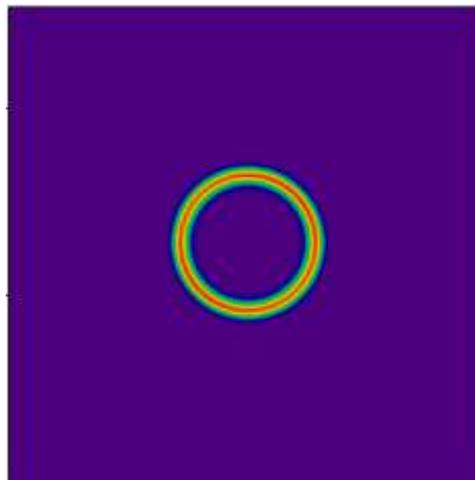
обычное определение функции нестинга дает артефакты в $Q=0$
(всякая непатологическая поверхность хорошо гнездится с собой)

Фактор нестинга, функция нестинга

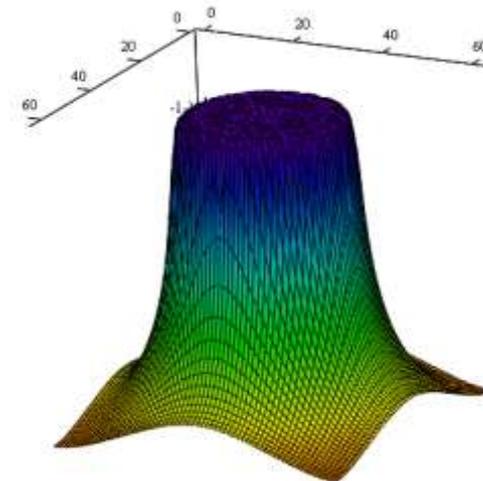
$$\chi_q = \sum_k [n_F(\varepsilon_k) - n_F(\varepsilon_{k+q})] / (\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q})$$



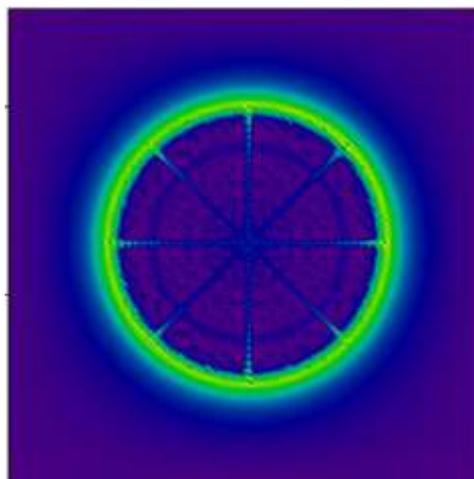
2D параболическая дисперсия
+ периодичность



кольцевая поверхность Ферми



функция Линдхарта



$|\text{grad}\chi_q|$

$|\text{grad}\chi_q|$ воспроизводит
конусную поверхность

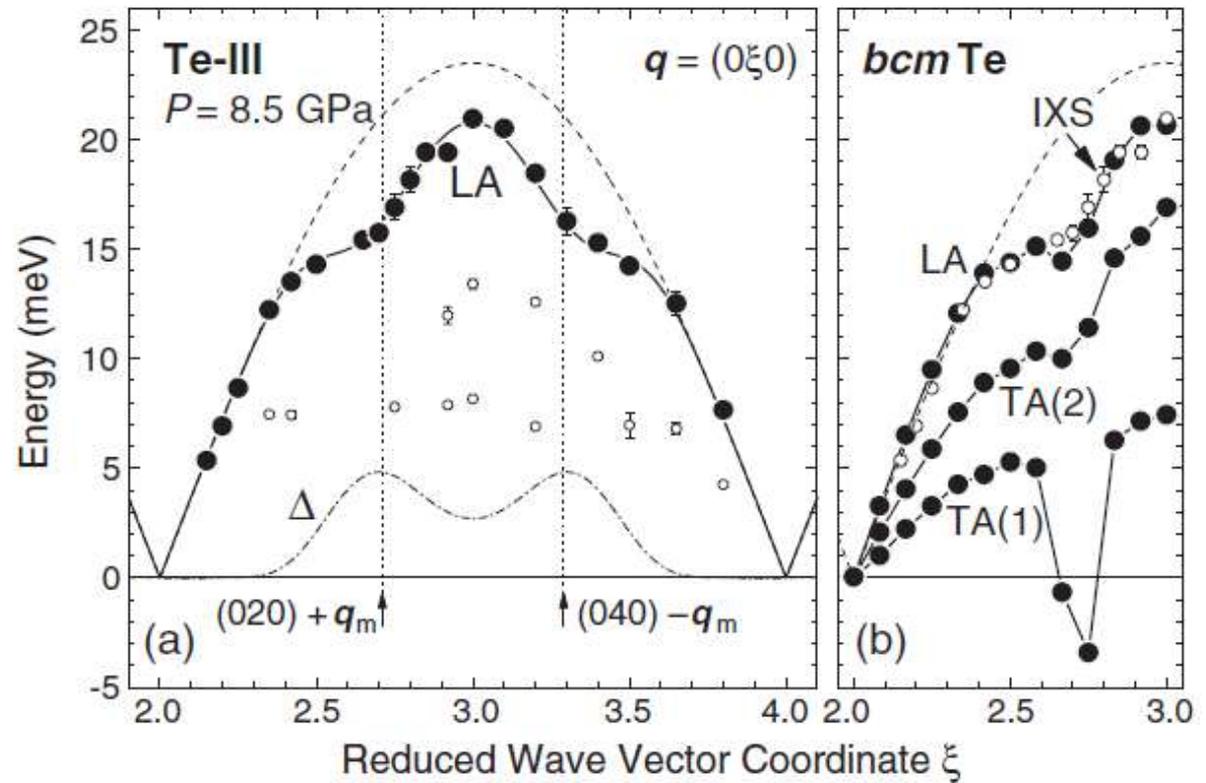
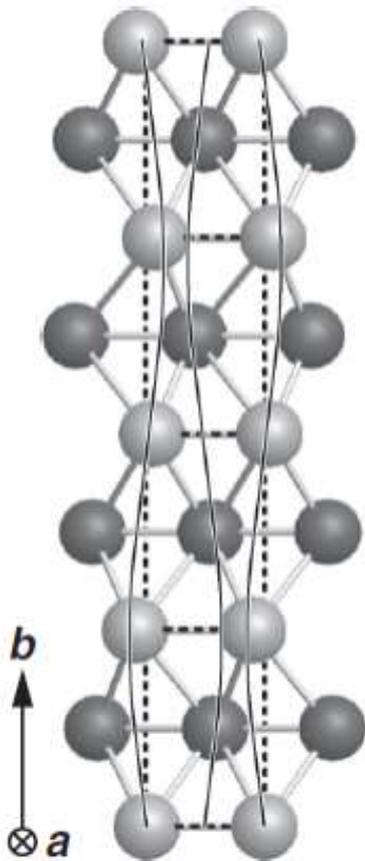
Функция нестинга и коновская поверхность

- есть картинки, простая поверхность Ферми => рисуем коновскую поверхность
- есть расчеты, любая поверхность Ферми => считаем функцию нестинга
- ...
- сравниваем с экспериментом
- думаем
- ...
- profit!

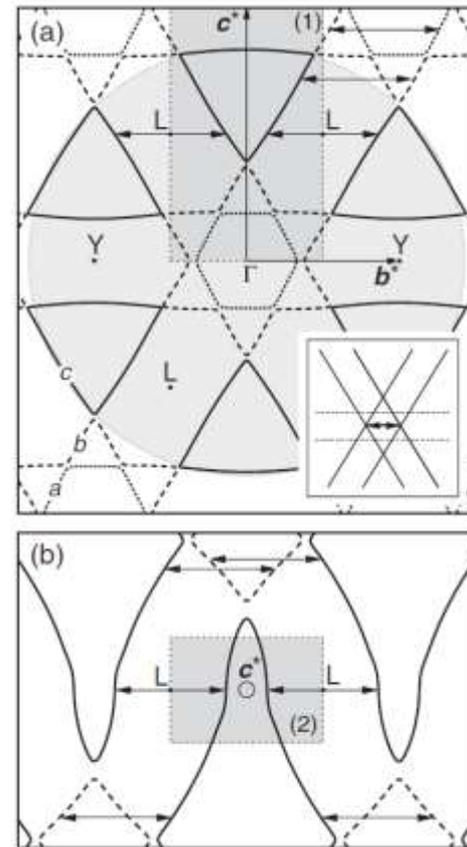
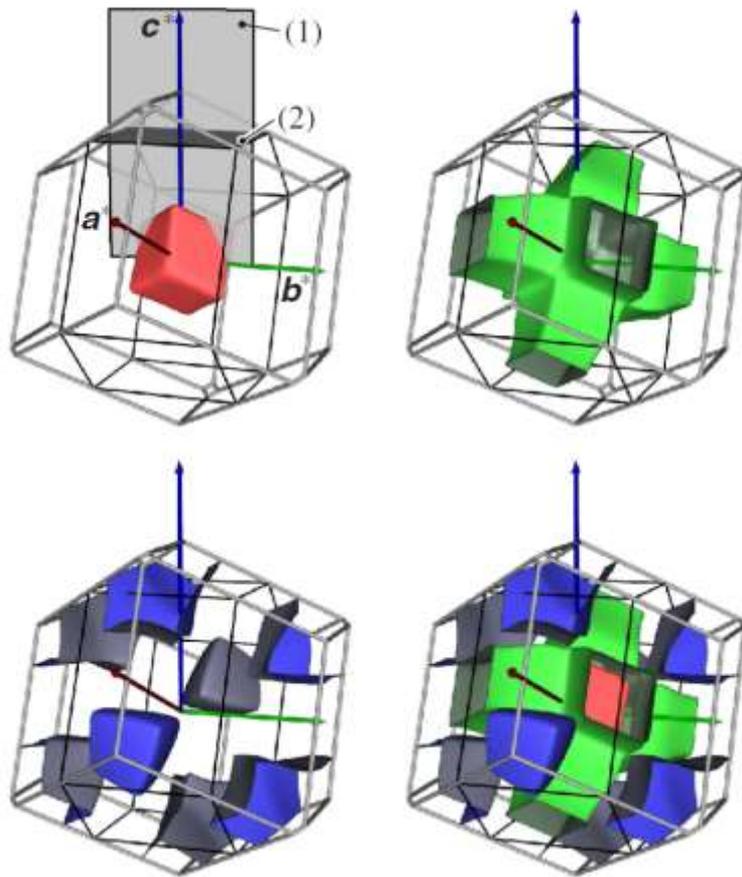
Примеры с неупругим рассеянием

Origin of the Incommensurate Modulation in Te-III and Fermi-Surface Nesting in a Simple Metal

I. Loa,^{1,*} M. I. McMahon,¹ and A. Bosak²



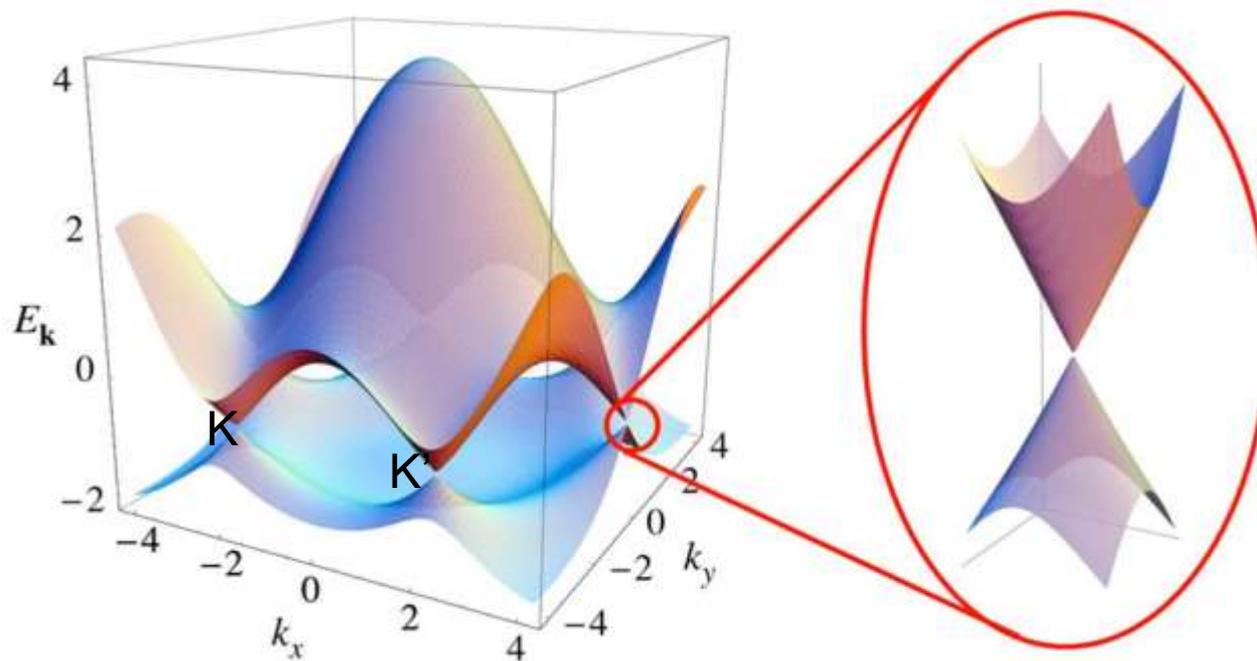
Пример: Te-III



The calculated Fermi surface of bcc Te exhibits surprisingly effective nesting for a simple, electronically three-dimensional metal.

The phonon anomaly is reproduced in first-principles lattice dynamics calculations of unmodulated, body-centered monoclinic (bcm) Te, which is shown to be dynamically unstable.

Пример: графит



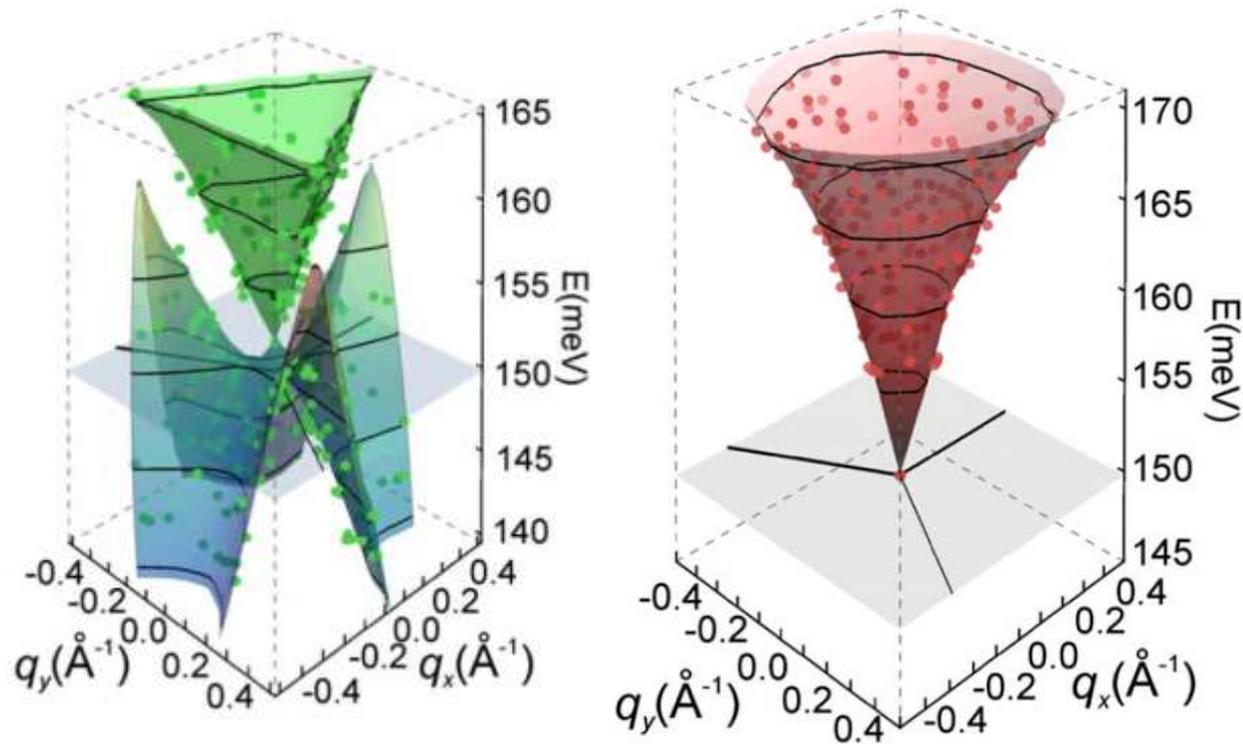
поверхность Ферми графена

гнездование в точках Γ и K , аналогично в графите

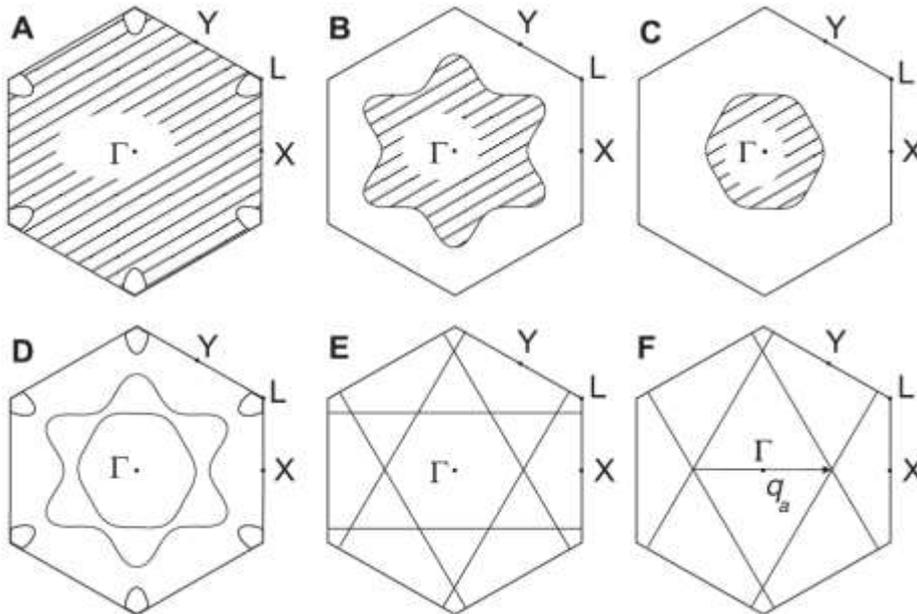
PHYSICAL REVIEW B **80**, 085423 (2009)

Phonon surface mapping of graphite: Disentangling quasi-degenerate phonon dispersions

A. Grüneis,^{1,2} J. Serrano,³ A. Bosak,⁴ M. Lazzeri,⁵ S. L. Molodtsov,⁶ L. Wirtz,⁷ C. Attaccalite,⁸ M. Krisch,⁴ A. Rubio,^{8,9}
F. Mauri,⁵ and T. Pichler¹



Hidden nesting позволяет объяснить подозрительную эффективность нестинга сведением зонной структуры к наложению квазиодномерных



Predicted Fermi surface for $\text{KMo}_6\text{O}_{17}$ from tight binding calculations of Ref. [1]. (a)–(c) Individual Fermi surfaces from three distinct bands; (d) full Fermi surface; (e) “hidden” 1D Fermi surfaces; and (f) nesting wave vector q connecting two 1D Fermi surfaces.

[1] M.-H. Whangbo, E. Canadell, P. Foury, and J.-P. Pouget, *Science* **252**, 96 (1991).

Примеры с тепловым диффузным рассеянием

IMAGE OF THE FERMI SURFACE IN THE LATTICE VIBRATIONS OF LEAD

B. N. Brockhouse, K. R. Rao,* and A. D. B. Woods

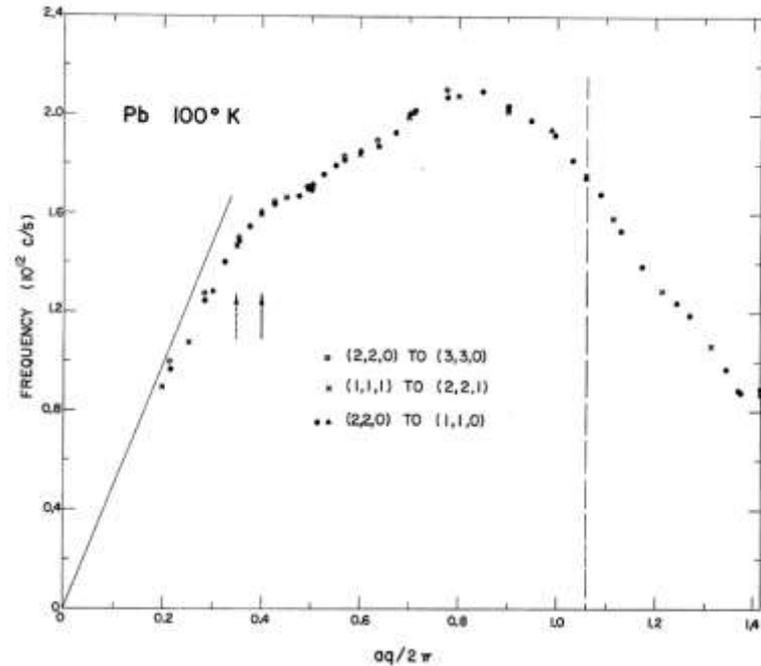
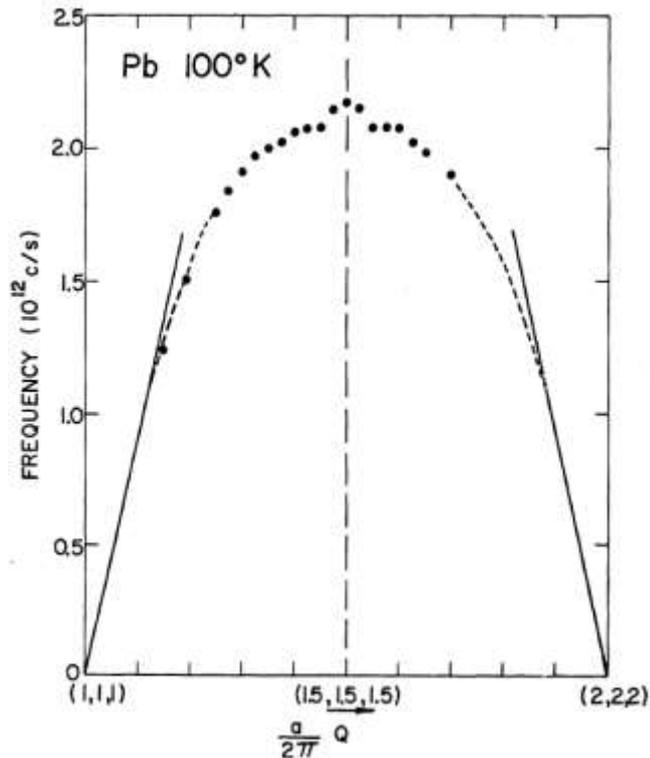
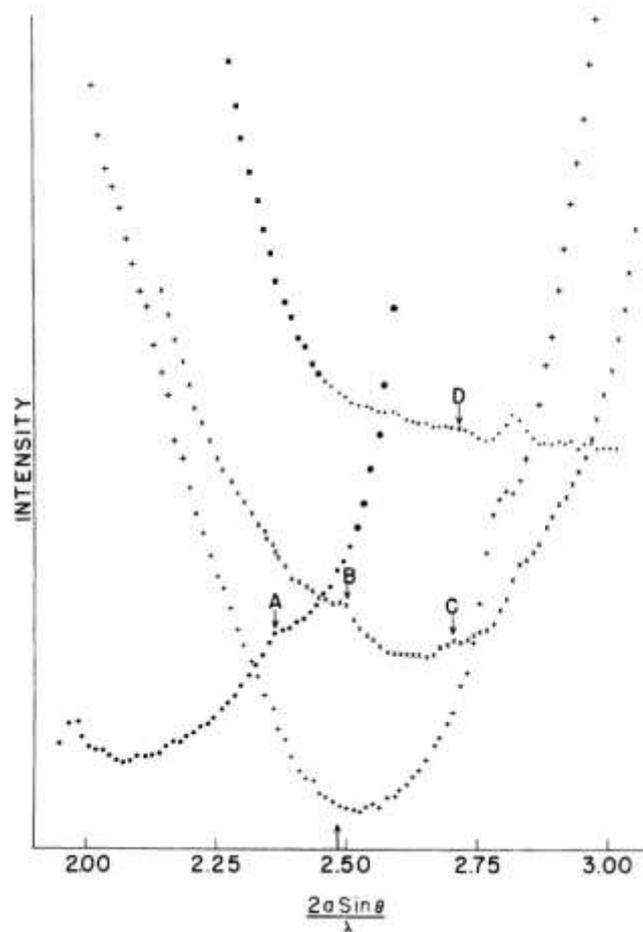


IMAGE OF THE FERMI SURFACE IN LEAD

Arthur Paskin and R. J. Weiss

Materials Research Laboratory, Army Materials Research Agency, Watertown, Massachusetts

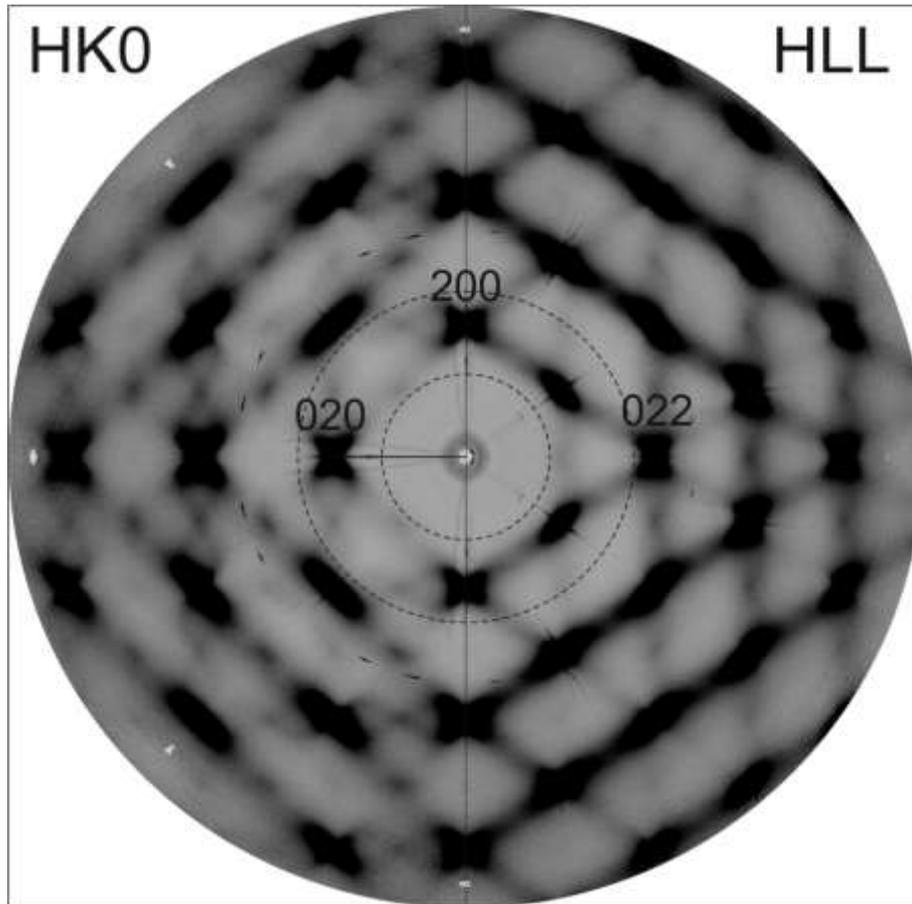
(Received July 19, 1962)



КОНОВСКИЕ АНОМАЛИИ МОЖНО
ВИДЕТЬ В ДИФФУЗНОМ
РАССЕЯНИИ

$$I \sim 1/\omega^2$$

FIG. 1. X-ray diffuse scattering intensity curves for the [110] (●'s), [111] (×'s), [221] (+'s) and [100] (■'s) directions. A, B, and C correspond to Kohn anomalies observed by neutrons. D is a possible discontinuity in the [100] direction. The height of each point indicates the statistical error in counting. The arrow indicates the free-electron value at 2.48.



A. Bosak
ESRF/ID15
67 keV PILATUS3 300K CdTe

аномалии в направлениях
низкой симметрии

плохое согласие с моделью
свободных электронов

непонятно согласие
с ранними работами

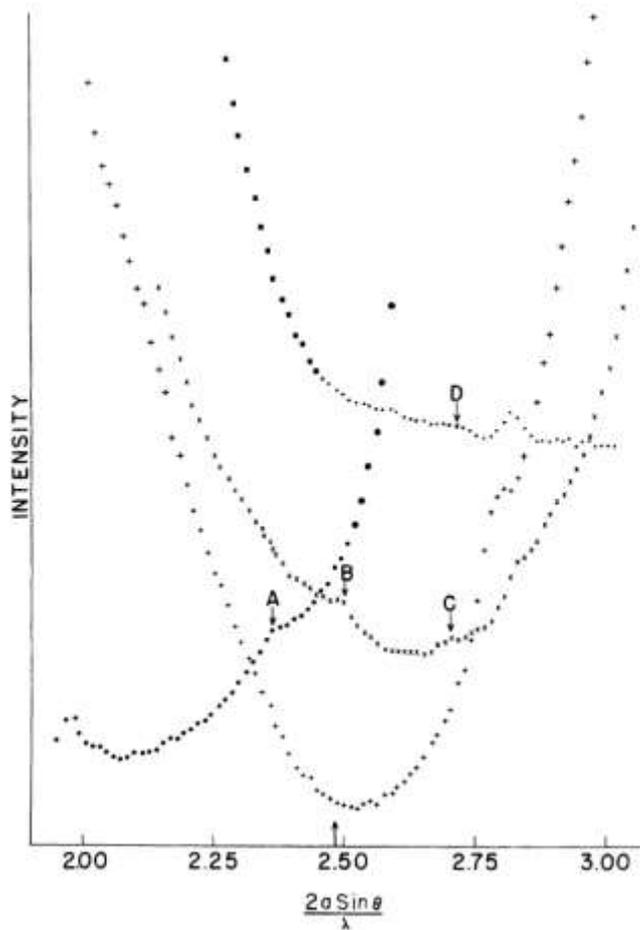
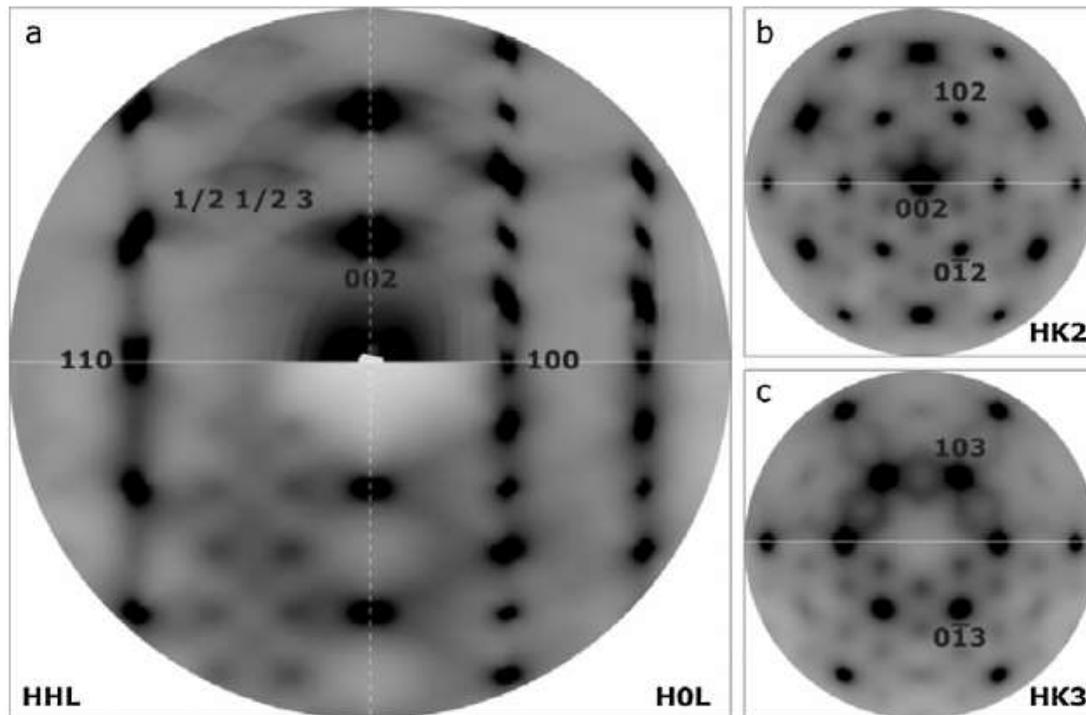


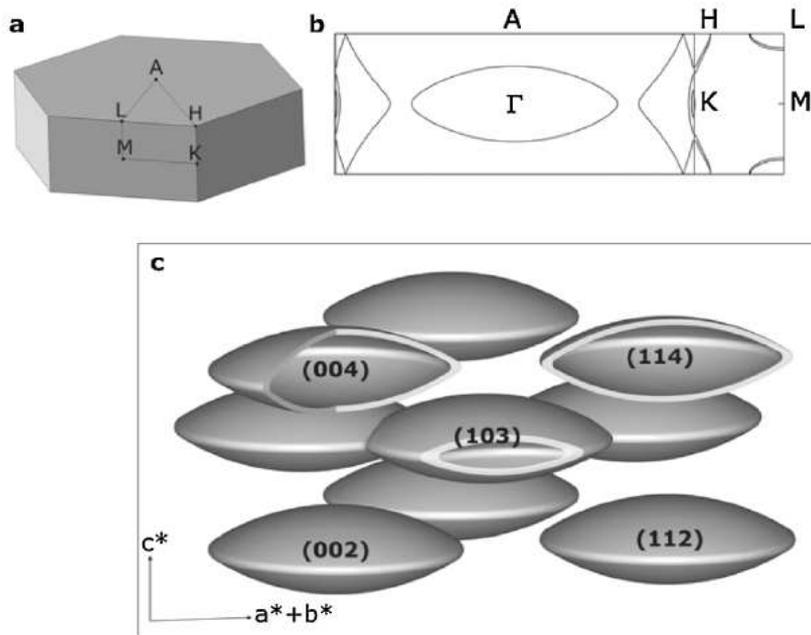
FIG. 1. X-ray diffuse scattering intensity curves for the [110] (●'s), [111] (×'s), [221] (+'s) and [100] (■'s) directions. *A*, *B*, and *C* correspond to Kohn anomalies observed by neutrons. *D* is a possible discontinuity in the [100] direction. The height of each point indicates the statistical error in counting. The arrow indicates the free-electron value at 2.48.

3D Imaging of the Fermi Surface by Thermal Diffuse Scattering

A. Bosak,¹ M. Hoesch,¹ M. Krisch,¹ D. Chernyshov,² P. Pattison,^{2,3} C. Schulze-Briese,⁴ B. Winkler,⁵ V. Milman,⁶
K. Refson,⁷ D. Antonangeli,⁸ and D. Farber^{9,10}



Поверхность Ферми в цинке



редкий случай – форма коновской аномалии совпадает с формой листа поверхности Ферми

FIG. 2. (a) Brillouin zone of zinc with denoted special points; (b) high-symmetry section of the Fermi surface obtained by *ab initio* calculations; (c) scheme of the assembly of lenslike surfaces centered on strong Bragg spots and their dissection by *HHL* plane.

Примеры с упругим диффузным рассеянием

Аномалия в статической диэлектрической функции =>
аномалия в Фурье-преобразовании потенциала парного взаимодействия



M.A. Krivoglaz

при наличии примеси в кристалле она
может перераспределиться, следуя
особенностям потенциала

диффузное рассеяние на примеси может
отразить особенности поверхности
Ферми родительского компонента

IMAGING THE FERMI SURFACE THROUGH DIFFUSE SCATTERING FROM CONCENTRATED DISORDERED ALLOYS

S. C. Moss*

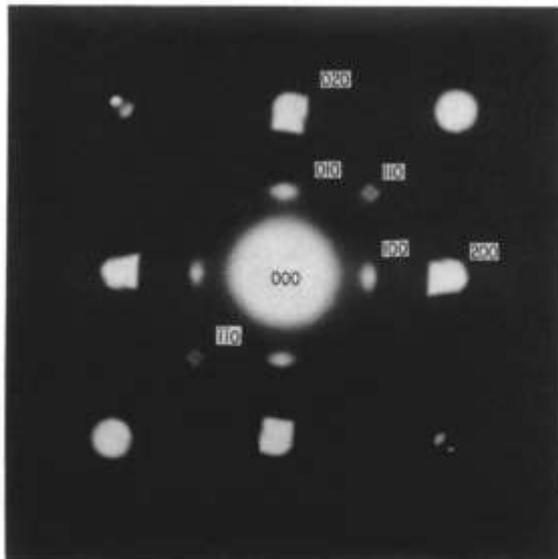


FIG. 1. Electron diffraction pattern of a single-crystal Cu-24.4% Au ($\sim\text{Cu}_3\text{Au}$) alloy, rapidly quenched from 900°C, which shows the pronounced fourfold splitting of the scattering about the (110) position (see Ref. 16).

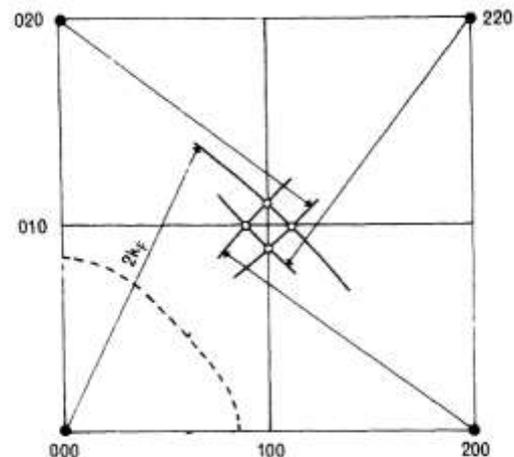
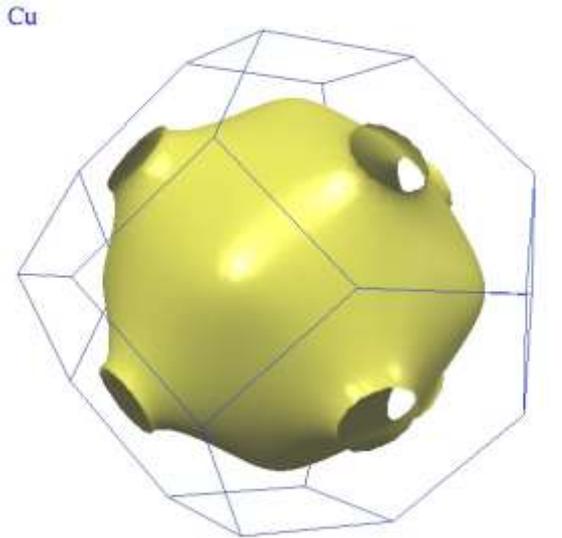


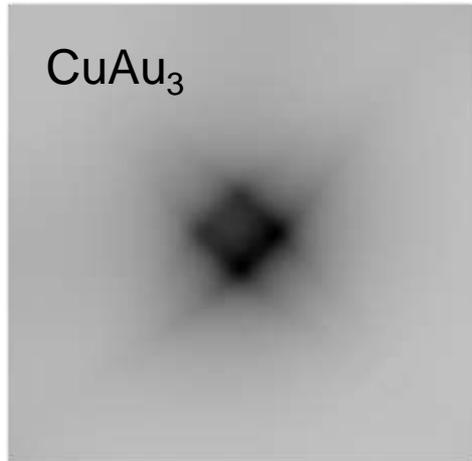
FIG. 2. A partial Kohn construction for Cu in the $(hk0)$ plane to illustrate the origination of the extra peakings about (110) in Fig. 1.

We show qualitatively how the Fermi surface of a disordered alloy will be reflected in the local-order diffuse scattering of x rays, etc., through anomalies similar to those predicted by Kohn for phonon scattering. These ideas are then applied to the existing data on the splitting of the diffuse spots from Cu-Au alloys above T_c and, more tentatively, to the $\langle 111 \rangle$ scattering profile from β -CuZn. The results indicate that disordered Cu_3Au has a Fermi surface much like copper's while disordered CuAu_3 resembles gold.

Пример: Cu_3Au и CuAu_3



1.5 0.5 1.5 1.5



0.5 0.5 1.5 0.5
ID23 ESRF
PILATUS 6M

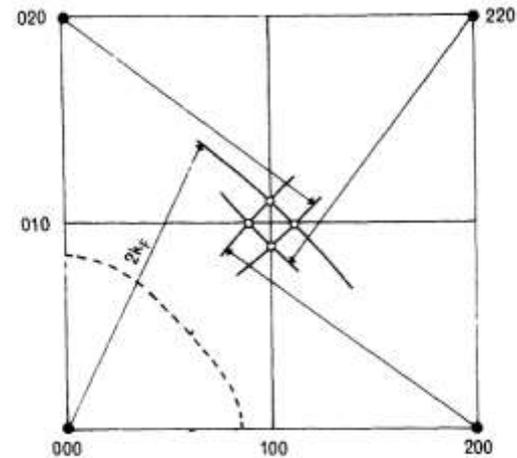


FIG. 2. A partial Kohn construction for Cu in the $(hk0)$ plane to illustrate the origination of the extra peakings about (110) in Fig. 1.

кто родитель при концентрации примеси 25%?

An accidental visualization of the Brillouin zone in an Ni–W alloy *via* diffuse scattering

Sascha B. Maisel,^a Nils Schindzielorz,^a Stefan Müller,^{a*} Harald Reichert^{c,b} and Alexei Bosak^c

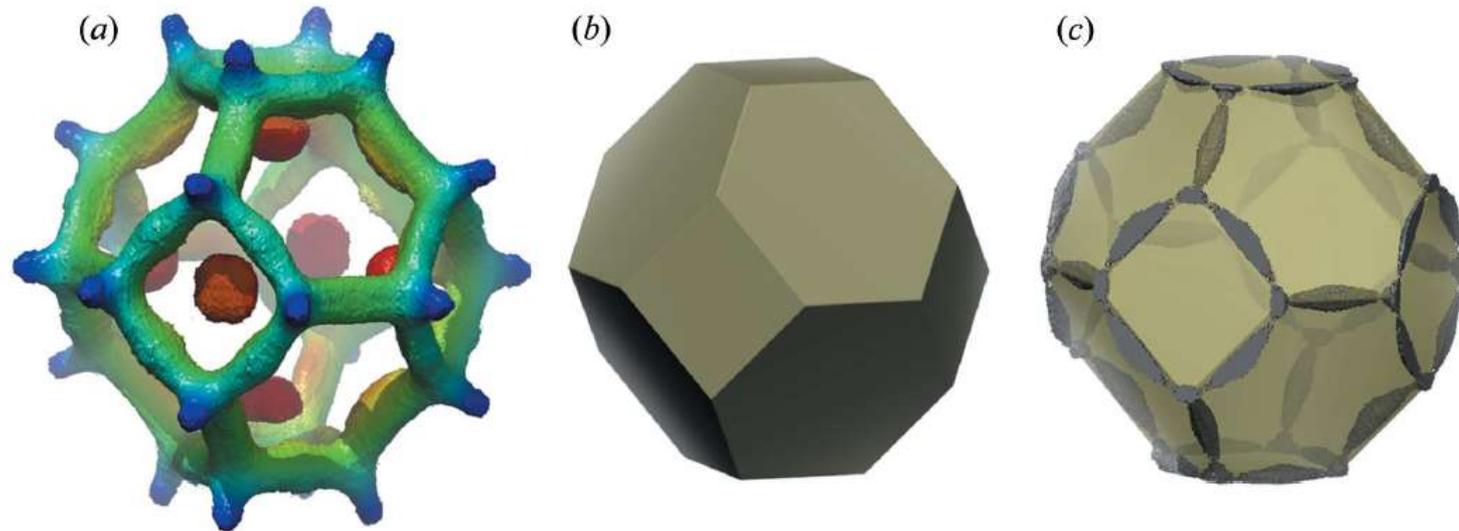


Figure 1

(a) Symmetrized isosurface of the measured diffuse scattering of $\text{Ni}_{0.92}\text{W}_{0.08}$ in reciprocal space. The colour scales with distance from the centre. (b) Sketch of the first Brillouin zone of the f.c.c. lattice on the same scale. The surface defines a truncated octahedron. (c) Measured diffuse scattering close to the boundaries of the first Brillouin zone superposed onto the truncated octahedron.

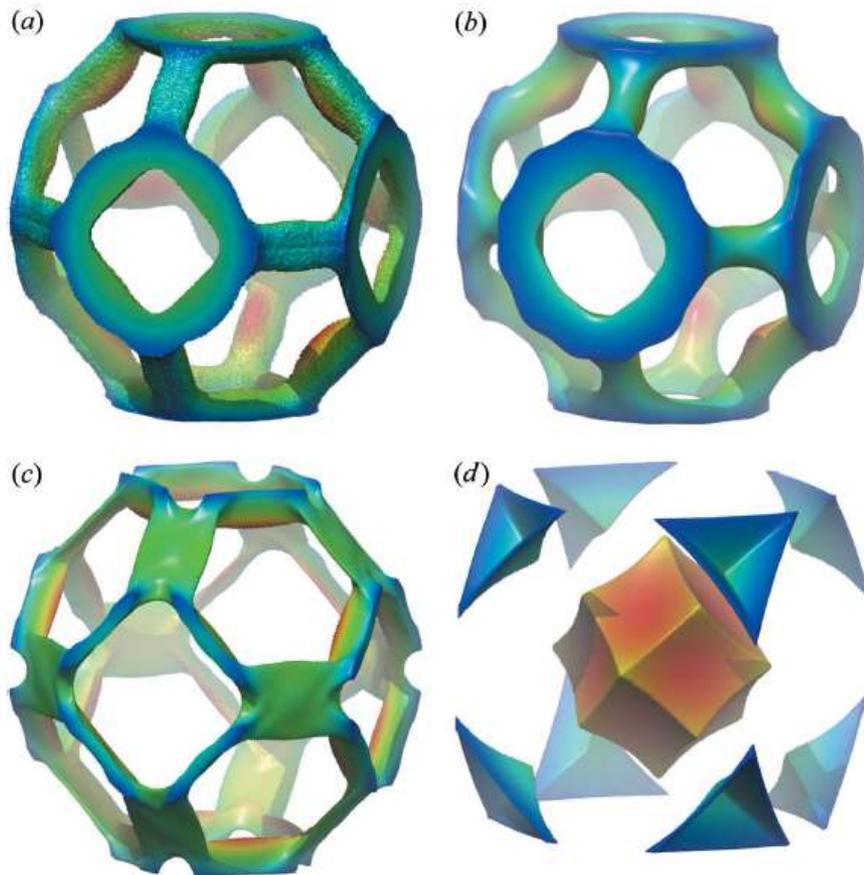


Figure 2

(a) Symmetrized isosurface of the measured diffuse scattering intensity of $\text{Ni}_{0.92}\text{W}_{0.08}$ in the first Brillouin zone. (b) Fourier transform of the Warren-Cowley short-range-order parameters for $\text{Ni}_{0.92}\text{W}_{0.08}$ deduced from an *ab initio* cluster expansion. (c) Nesting construction for the innermost sheet of the Fermi surface of pure nickel. (d) Calculated innermost Fermi surface sheet of pure Ni used for the nesting construction. The colour scales with distance from the centre.

конструкция гнездования =
модуль градиента функции
Линдхарта

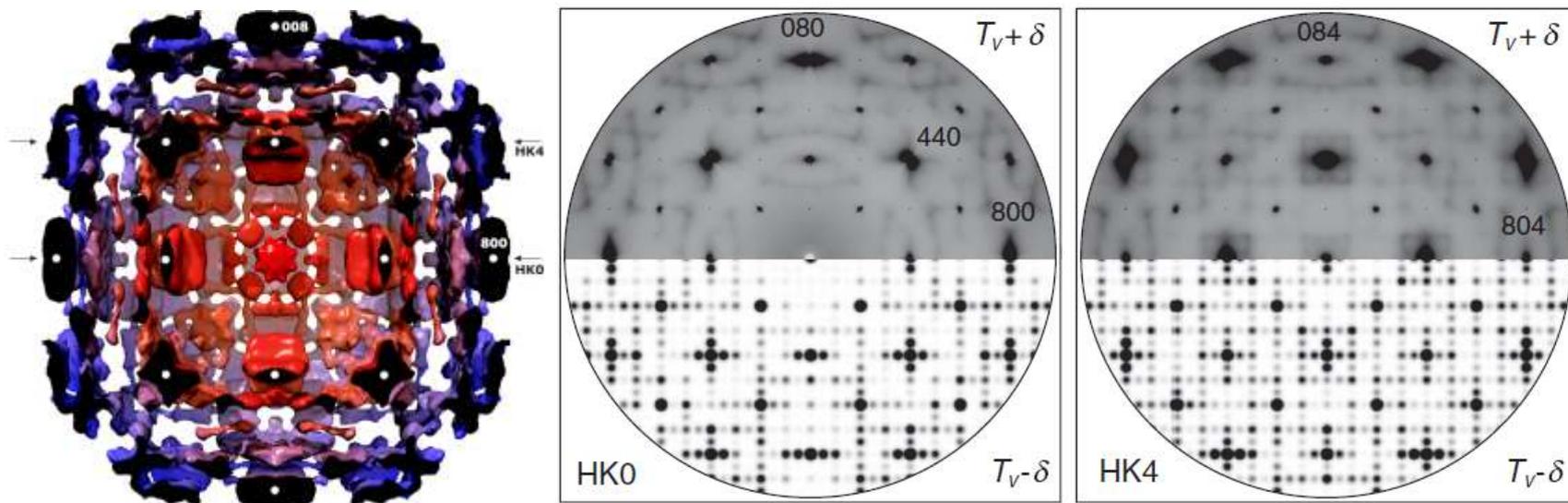
а почему не так в сплавах Ni-
Re?

информация о
высокотемпературном
состоянии

Примеры прочие

Short-Range Correlations in Magnetite above the Verwey Temperature

Alexey Bosak,¹ Dmitry Chernyshov,² Moritz Hoesch,³ Przemysław Piekarczyk,⁴ Mathieu Le Tacon,⁵
Michael Krisch,¹ Andrzej Kozłowski,⁶ Andrzej M. Oleś,^{5,7} and Krzysztof Parlinski⁴



общий мотив упорядочения низкотемпературной фазы (<124 K)
выживает в виде поляронов (?) до комнатной температуры

а почему именно такой?

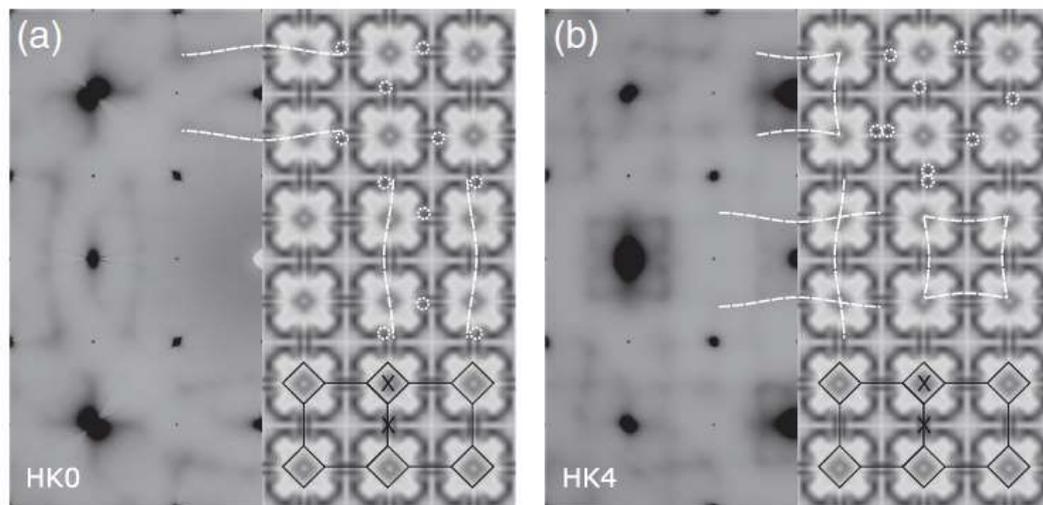
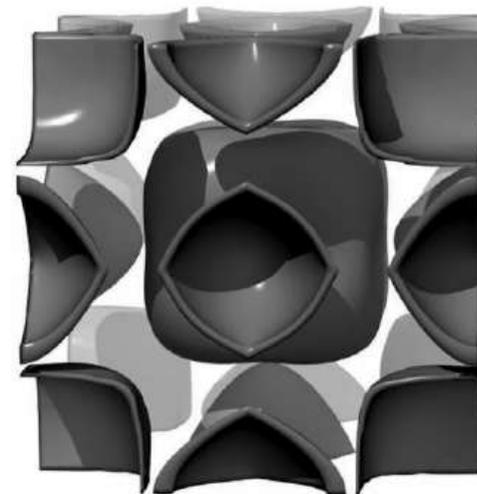


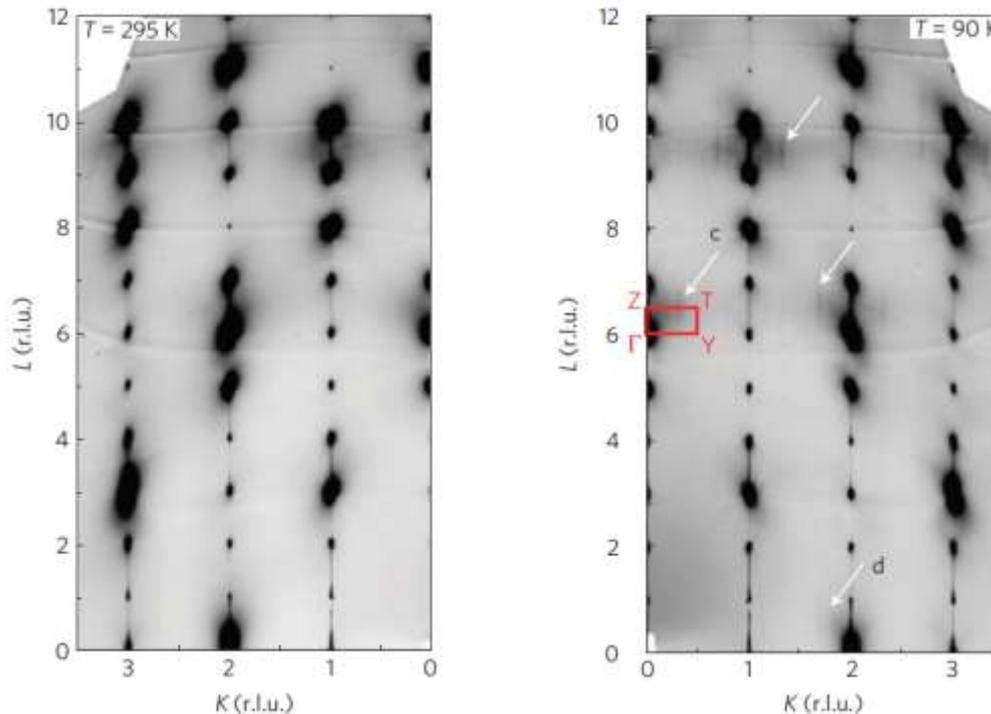
FIG. 6. Nesting signatures in the reciprocal space of magnetite. Selected reciprocal space patterns of magnetite at $T_V + \delta$ [left-hand panels of (a) and (b)] in the (a) HK0 plane and (b) HK4 plane are compared to the Fermi surface nesting construction [right-hand panels of (a) and (b)]. Dark features in the nesting construction correspond to more efficient nesting. Common features are underlined or encircled by dashed lines. The contours of the Brillouin zone are superposed on the right-hand subpanels, X points are indicated. Note that the X point is avoided, in both the experiment and the calculation.



а где гарантия того, что
зонная структура
посчитана правильно?

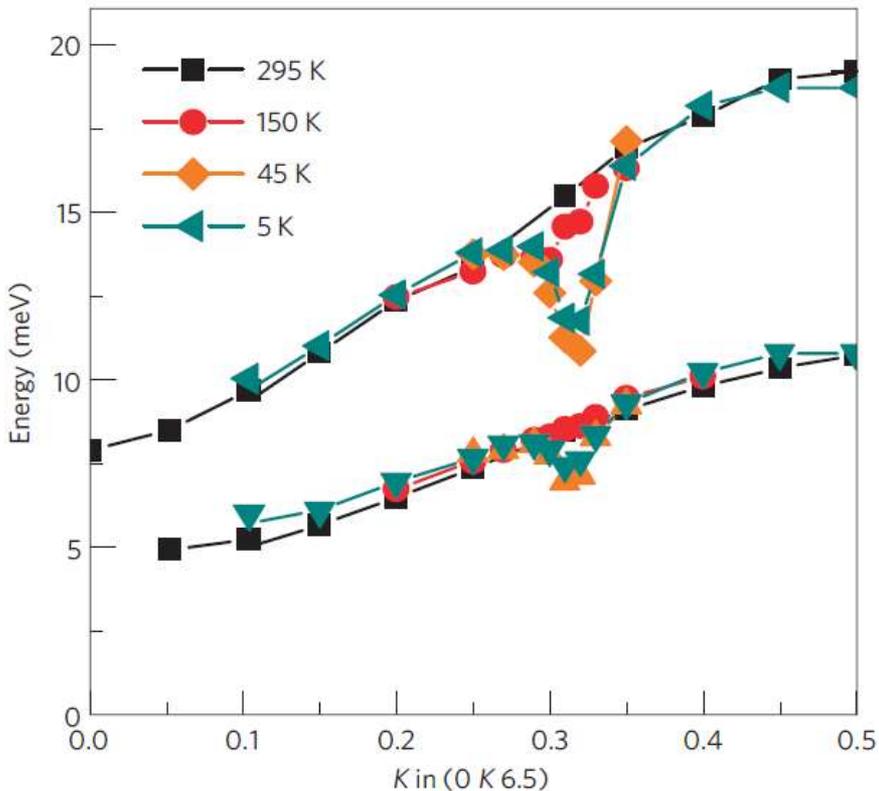
Inelastic X-ray scattering in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ reveals giant phonon anomalies and elastic central peak due to charge-density-wave formation

M. Le Tacon^{1*}, A. Bosak², S. M. Souliou¹, G. Dellea³, T. Loew¹, R. Heid⁴, K-P. Bohnen⁴, G. Ghiringhelli⁵, M. Krisch² and B. Keimer^{1*}



несоизмеримые сателлиты
появляются при охлаждении

картография обратного
пространства дает
понимание, где мерить
неупругое рассеяние



в области аномалии:

- провал низколежащих фононов по частоте
- уширение фононов
- рост центрального пика

наблюдение скорее в пользу механизма, конкурирующего со сверхпроводимостью

Snake in the grass

PHYSICAL REVIEW B 77, 165135 (2008)



Fermi surface nesting and the origin of charge density waves in metals

M. D. Johannes and I. I. Mazin

Идея Пайерлса об электронной неустойчивости в одномерном металле часто применяется к реальным низкоразмерным системам для объяснения зарядового упорядочения нестингом.

В большинстве случаев процедура не обладает предсказательной силой.

Реальные фазовые переходы всегда включают ионную подсистему.

Наблюдения за коновскими аномалиями и им подобными могут дать полезную информацию о поверхности Ферми, дополнив прочие методы с их собственными ограничениями

- эффекты де Гааза-ван Альфена и Шубникова-де Гааза (низкая температура, высокие магнитные поля)
- ARPES (поверхность)
- позитронная аннигиляция
- ...

Объяснительная сила

хороший нестинг может объяснить, почему вектор волны зарядовой плотности вот такой, какой он есть

Наблюдения за коновскими аномалиями и им подобными не позволяют однозначно и полно восстановить поверхность Ферми, ограничиваясь проверкой предсказаний моделей (как правило)

Объяснительная сила

хороший нестинг может не иметь отношения к реальному вектору волны зарядовой плотности

Предсказательная сила

???



KNOWLEDGE

I BELIEVE THAT CHILDREN ARE OUR FUTURE. AND THAT TERRIFIES ME.