



Doctoral Thesis

Unconventional transport properties of correlated two-dimensional Fermi liquids

Author(s):

Buhmann, Jonathan Maximilian

Publication Date:

2013

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-009795997> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

DISS. ETH No. 21085

Unconventional Transport Properties of Correlated Two-Dimensional Fermi Liquids

A dissertation submitted to

ETH Zurich

for the degree of

DOCTOR OF SCIENCES

presented by

Jonathan Maximilian Buhmann

Dipl. Phys., Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

born June 2, 1983

citizen of Germany

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Manfred Sigrist, examiner

Prof. Dr. T. Maurice Rice, co-examiner

2013

Abstract

Transport properties of solid state systems, e.g., the electrical and thermal conductivity, yield important information about the microscopic physics on the level of electronic correlations and interactions of the charge carriers with defects in the ionic lattice. The electrical conductivity classifies a system into categories such as insulators, semi-conductors, and metals. Such insight into the collective behavior of many body systems has proven to be of general importance for both applied, industrial research and fundamental science.

Transport properties of many materials can be measured by simple experimental designs, their conceptual understanding poses a considerable theoretical challenge due to the many body aspect of these phenomena. A theoretical understanding is not at all straightforward. The transport physics of systems with well defined quasiparticle states is in general described by a nonlinear integro-differential equation, the Boltzmann transport equation. Even the linearized Boltzmann equation within the linear response approximation is too complicated to be exactly solvable. The standard approximation of the Boltzmann equation is to express the collision operator by a phenomenological number, the relaxation-time. This single-relaxation-time approximation is equivalent to the Drude model and has shown to be a reliable approximation if quasiparticle interactions are small.

In our study we analyze transport properties of systems, in which correlation effects cannot be ignored. Due to momentum conservation of quasiparticle interactions, umklapp-scattering becomes an essential contribution to the relaxation of a charge current. These umklapp processes introduce strong anisotropy in the quasiparticle-scattering rates and, thus, require a treatment of the collision integral beyond the single-relaxation-time approximation.

In the first part of this thesis, we introduce our numerical approach, developed to solve the linearized Boltzmann equation with the complete collision integral. This numerical scheme is based on an efficient discretization of the momentum-space in the vicinity of the Fermi surface. We provide a complete description of our method from the linearization of the Boltzmann equation and the appearance of spin-dependent scattering rates to a discussion of energy and momentum relaxation in Boltzmann theory and the implications for the transport properties. The Boltzmann equation is conceptually solved in the context of electric and magnetic fields as well as thermal gradients and allows us to derive the electrical conductivity, the Hall coefficient, the thermal conductivity, and the Seebeck effect. Our method requires two kinds of input, the low-energy band structure of the quasiparticles and their interactions. The band structure of quasi two-dimensional systems is often obtained from angle-resolved-photoemission spectroscopy or quantum oscillation experiments. The interactions are usually described as a screened Coulomb repulsion or as strongly renormalized correlations determined within a functional renormalization-group calculation. This flexibility of our method yields a broad spectrum of applications for our numerical approach.

In the second part of this thesis, we apply our method to a simple model of a correlated two-dimensional metal on a lattice and discuss the evolution of the transport properties as a function of the band filling. As a result of the strong geometric constraints for umklapp-scattering, we identify regimes, in which umklapp processes are dominant and other band fillings, for which this type of scattering is exponentially suppressed. The crossover between these regimes leads to sharp edges in the electrical conductivity and, thus, suggests an interesting and potentially large thermoelectric effect. We study the thermopower in detail and discuss the limitations of Mott's formula in the presence of strongly anisotropic scattering rates. As another consequence of the umklapp-scattering induced anisotropy, many transport properties exhibit unconventional characteristics for special band fillings. Those features encompass an unconventional resistivity that does not scale quadratically with the temperature, a violation of Matthiessen's rule,

a strongly temperature-dependent Hall coefficient, and a Seebeck coefficient that changes its sign with temperature. We discuss these effects in detail and demonstrate in this context, that some of the characteristic properties of non-Fermi-liquid systems are also generically present in simple metals subject to dominant umklapp-scattering.

Finally, in the third part of this thesis we extend our numerical method to the normal-state of the high-temperature superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ in the overdoped regime using phenomenological input for the band structure. The scattering rates are generated from the renormalized scattering vertex of a functional renormalization-group study. We establish a very good qualitative agreement between experimental results and our numerical simulation of the unconventional normal-state transport properties. This model reproduces an emerging linear temperature dependence in the resistivity, as the hole concentration is reduced from the overdoped side toward optimal doping. Moreover, temperature scales, that separate regimes of qualitatively different resistivity scaling, are identified and linked to properties of the non-trivial band structure. The Seebeck coefficient of our simulation of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ is compared to the experimental data of a slightly different compound ($\text{La}_{1.8-x}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$) and good qualitative agreement is again found. The numerical simulation reproduces properties of the experiment that are often interpreted as a signature of quantum critical behavior.

We extend our computational simulation to $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ and $\text{Ta}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$. It turns out that a similarly detailed study as for $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ is at present not possible for these compounds. Nevertheless, our method promises to be capable of explaining some of the unconventional properties of these cuprates.

In summary, this dissertation investigates the following conjecture: A detailed analysis of transport properties in solid state systems requires to model quasiparticle-scattering by solving the Boltzmann equation with particular consideration of the angular and radial dependencies of the collision integral. This conjecture is supported by a complete analysis of various unconventional features in the conductivity, the Hall coefficient, and the Seebeck effect, which deviate from the predictions of standard Fermi-liquid theory. The discussed transport properties are fully explained by umklapp-scattering processes and strongly anisotropic quasiparticle velocities in simple Fermi liquids.

Zusammenfassung

Die Transporteigenschaften von Festkörpern, wie z.B. die elektrische und thermische Leitfähigkeit, liefern wichtige Informationen über die mikroskopische Physik der Wechselwirkungen unter den Elektronen und den Stößen zwischen den Ladungsträgern und Störstellen im ionischen Gitter. Die elektrische Leitfähigkeit ermöglicht eine phänomenologische Unterscheidung zwischen Isolatoren, Halbleitern und Metallen. Die Eigenschaften der Leitfähigkeit eröffnen Einblicke in kollektive Phänomene von Vielteilchensystemen und sind daher von grundlegender Bedeutung sowohl für die angewandte Forschung in der Industrie als auch für Grundlagenforschung in den Wissenschaften.

Obwohl die Transporteigenschaften eines Materials experimentell oft relativ einfach bestimmt werden können, ist ein konzeptionelles Verständnis nicht trivial. Im Allgemeinen kann der Transport von Ladung und Energie innerhalb von Systemen mit wohldefinierten Quasiteilchenzuständen durch eine nichtlineare Integral-Differentialgleichung, der Boltzmann-Transportgleichung, beschrieben werden. Da selbst die linearisierte Boltzmann-Gleichung generell nicht exakt gelöst werden kann, wird üblicherweise der Kollisionsoperator durch eine phänomenologische Zahl ersetzt. Diese Näherung, auch einfache Relaxationszeitnäherung genannt, ist im Wesentlichen äquivalent zum Drude-Modell und hat sich für Systeme, in denen die Wechselwirkungen unter den Quasiteilchen klein und somit vernachlässigbar sind, als zuverlässige Näherung etabliert.

In dieser Arbeit untersuchen wir die Transporteigenschaften von Vielteilchensystemen, in denen Korrelationseffekte nicht ignoriert werden können. Bedingt durch die Impulserhaltung von Streuprozessen zwischen den Quasiteilchen gewinnen die sogenannten Umklappprozesse an Bedeutung und stellen den entscheidenden Beitrag zur Relaxation eines Ladungsstroms. Diese Umklappprozesse sorgen für eine grosse Anisotropie in den Streuraten der Quasiteilchenzustände und erzwingen eine gründlichere Betrachtung des Kollisionsintegrals verglichen mit der einfachen Relaxationszeitnäherung.

Im ersten Abschnitt dieser Dissertation erläutern wir unsere numerische Methode im Detail. Diese Analyse haben wir entwickelt, um die Boltzmann-Gleichung einschliesslich des vollständigen Kollisionsintegrals zu lösen. Die numerische Rechnung basiert auf dem Ansatz, den Impulsraum in der Nähe der Fermifläche effizient zu diskretisieren. Wir erklären die Details unserer Methode von der Linearisierung der Boltzmann-Gleichung unter Berücksichtigung spinabhängiger Streuraten bis hin zu einer Diskussion über Energie- und Impulserhaltung im Rahmen der Boltzmann-Theorie und ihrer Bedeutung für die Transporteigenschaften. Wir lösen die Boltzmann-Gleichung in allgemeiner Form für Systeme unter dem Einfluss externer elektrischer und magnetischer Felder sowie von thermischen Gradienten. Die allgemeine Lösung führt direkt zur Berechnung der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit und des Hall- bzw. Seebeck-Koeffizienten. Unsere Methode basiert auf zwei Inputs, der Bandstruktur der Quasiteilchen im Niederenergiesektor und deren Wechselwirkungen. Die Bandstruktur in quasi-zweidimensionalen Systemen kann oft experimentell gemessen werden, z.B. durch winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie oder durch die Untersuchung von Quantenoszillationen. Als effektive Wechselwirkungen der Quasiteilchen kann eine abgeschirmten Coulomb-Kraft verwendet werden oder die renormierten Korrelationen werden durch eine funktionale Renormierungsgruppenrechnung bestimmt. Dass die Eingabeparameter eine so grosse Variabilität aufweisen, impliziert einen weiten Anwendungsbereich für unsere numerische Simulation.

Im zweiten Abschnitt dieser Arbeit untersuchen wir ein einfaches Modell eines korrelierten zweidimensionalen Metalls auf einem Gitter. Wir diskutieren die Abhängigkeit der Transportgrössen von der Bandfüllung. Bedingt durch die strikten geometrischen Zwangsbedingungen für Umklappstreuung ergeben sich Bereiche in der Bandfüllung, in denen diese Prozesse dominant sind, und andere, in denen diese Art der Streuung exponentiell unterdrückt ist. Der Übergang zwischen diesen Regimen führt automatisch zu

starken Änderungen in der elektrischen Leitfähigkeit und lässt daher auf eine ungewöhnliche und grosse Thermoelektrizität schliessen. Wir analysieren den thermoelektrischen Effekt im Detail und untersuchen in diesem Zusammenhang die Unzulänglichkeiten von Mott's Formel unter dem Einfluss von anisotropen Streuraten. Eine weitere Konsequenz der durch Umklappstreuung bedingten Anisotropie ist das unkonventionelle Verhalten einiger Transportgrössen in der Nähe spezieller Füllungsniveaus. Unter diesen ungewöhnlichen Eigenschaften finden sich eine nicht-quadratische Temperaturabhängigkeit des Widerstands, eine Verletzung der Mathiessen'schen Regel, stark temperaturabhängige Hall-Koeffizienten und ein Seebeck-Koeffizient, der sein Vorzeichen mit der Temperatur ändert. Wir studieren diese Phänomene im Detail und zeigen in diesem Kontext, dass einige Eigenschaften, die oft als Indiz für einen Nicht-Fermiflüssigkeitszustand interpretiert werden, auch im Rahmen von einfachen Metallen als Konsequenz von dominanter Umklappstreuung auftreten können.

Zum Abschluss wenden wir unsere Methode auf den normalleitenden Zustand des Hochtemperatursupraleiters $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ im überdotierten Bereich an. Dazu verwenden wir phänomenologischen Input für die Bandstruktur und berechnen den effektiven Wechselwirkungsvertex durch eine funktionale Renormierungsgruppenrechnung. Wir demonstrieren gute qualitative Übereinstimmung zwischen unserer Simulation und dem Experiment im Hinblick auf die unkonventionellen Transporteigenschaften. Wir reproduzieren das Auftauchen eines Terms im elektrischen Widerstand, der linear mit der Temperatur skaliert und mit abnehmender Dotierung anwächst. Ausserdem finden wir Temperaturbereiche, die sich durch das Skalieren des Widerstands unterscheiden und erkennen einen Zusammenhang zwischen diesen Temperaturbereichen und Eigenschaften der Bandstruktur. Auch der Seebeck-Koeffizient, den wir für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ berechnet haben, stimmt in mehreren Aspekten mit experimentellen Befunden für ein leicht modifiziertes Material ($\text{La}_{1.8-x}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$) überein. Unsere numerische Simulation reproduziert zusätzlich auch experimentelle Eigenschaften, die als Anzeichen für einen quantenkritischen Punkt angesehen werden.

Wir erweitern unsere Simulation auf $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ und $\text{Ta}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$. Für diese Cuprate stellt sich heraus, dass eine ähnlich detaillierte Simulation wie für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ zurzeit nicht möglich ist. Dennoch zeigen wir, dass es durchaus Potential gibt einige der unkonventionellen Transporteigenschaften dieser Cuprate im Rahmen unserer Analyse erfassen zu können.

In der vorliegenden Dissertation wird folgende Vermutung untersucht: Eine detaillierte Analyse der Transporteigenschaften von Festkörpersystemen setzt eine Modellierung der Quasiteilchenstreuung durch die Lösung der Boltzmann-Gleichung unter Berücksichtigung der winkelabhängigen und radialen Freiheitsgrade des Kollisionsintegrals voraus. Diese Vermutung wird bestärkt durch eine umfassende Diskussion einiger unkonventioneller Transporteigenschaften der Leitfähigkeit, des Hall Koeffizienten und des Seebeck-Effekts, die von den Vorhersagen der Fermiflüssigkeitstheorie abweichen. Diese Transporteigenschaften können durch Berücksichtigung von Umklappstreuung und anisotropen Fermigeschwindigkeiten vollständig erklärt werden.