

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Διπλωματική εργασία

«Συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν
παρουσία μαγνητικού πεδίου»

Ρούμπος Γεώργιος
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Η/Υ

επιβλέπων: Βαρελογιάννης Γεώργιος
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

Αθήνα Ιούνιος 2004

Ευχαριστώ όμως τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Γιώργο Βαρελογιάννη για την καθοδήγησή του, καθώς και το Σπύρο Τσώνη για τη συνεργασία στη διάρκεια της χρονιάς. Ευχαριστώ επίσης τους κ. Σωφρόνη Παπαδόπουλο και Κώστα Παρασκευαΐδη για τις υποδείξεις και διορθώσεις, καθώς και τον κ. Νίκο Τράκα για τη βοήθεια στη χρήση του *LAT_EX*. Από τη θέση αυτή, θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τους δύο ανθρώπους που συνέβαλλαν καθοριστικά στην απόφασή μου να ασχοληθώ με τη φυσική: τον κ. Μανώλη Δρυ (ή Δρη), που με εισήγαγε στον κόσμο της σύγχρονης φυσικής, καθώς και τον κ. Αντώνη Μοδινό, εκτός από τη διδασκαλία, για τον ενθουσιασμό, τη συμπαράσταση και τις συμβουλές στη διάρκεια των σπουδών μου στο Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. Η εργασία αφιερώνεται στην εθνική ομάδα ποδοσφαίρου, η οποία αγωνίζεται αυτές τις ημέρες στο Ευρωπαϊκό Πρωτάθλημα της Πορτογαλίας.

Περίληψη

Η μελέτη των διαφόρων καταστάσεων τάξεως σε φερμιονικά συστήματα είναι στο επίκεντρο του ερευνητικού ενδιαφέροντος για πολλές δεκαετίες, δεδομένου ότι αποσκοπεί στη βασική κατανόση των μηχανισμών από τους οποίους προκύπτει η «ηλεκτρονική λειτουργικότητα» υλικών που χρησιμοποιούνται σε μια πλειάδα εφαρμογών. Μετά τις πρωτοποριακές ιδέες του Landau περι σπασίματος συμμετρίας, καθώς και την περιγραφή τέτοιων μεταβάσεων με τη βοήθεια παραμέτρων τάξης, τεράστια πρόδος σημειώθηκε στην ανάλυση των φαινομένων αυτών σε συστήματα συσχετισμένων φερμιονίων, όπως τα ηλεκτρόνια στα μέταλλα. Σημαντικό βήμα ήταν και η περιγραφή του ηλεκτρονικού συστήματος ως ανθροίσματος οιονεί-σωματιδίων, χάρη στη Θεωρία Landau των υγρών Fermi.

Ο συνδυασμός των ιδεών της παραμέτρου τάξης και των οιονεί-σωματιδίων καρποφόρησε, οδηγώντας τους Bardeen, Cooper και Schrieffer στην δίασημη θεωρία BCS, που εξήγησε το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας. Η χρήση στη συνέχεια μεθόδων της κβαντικής στατιστικής θεωρίας πεδίου, προσαρμοσμένων στη θεωρητική φυσική συμπυκνωμένης ύλης, όπως οι ομαλές και ανώμαλες συναρτήσεις Green και οι διαγραμματικές μέθοδοι του Feynman, επέτρεψε σημαντική πρόοδο στην κατανόση των ηλεκτρονικών μεταβάσεων φάσεων.

Ωστόσο, καμία αναγκαιότητα δεν επιβάλλει την ύπαρξη μιας μόνο ηλεκτρονικής κατάστασης τάξης σε ένα υλικό. Τα τελευταία χρόνια γίνεται όλο και πιό προφανές ότι διάφορες φάσεις συνυπάρχουν και ανταγωνίζονται μεταξύ τους στα πιό ενδιαφέροντα υλικά συστήματα. Κατανόηση και έλεγχος τέτοιων φαινομένων μπορεί να οδηγήσει σε νέες λειτουργικές εφαρμογές των υλικών αυτών. Στην παρούσα διπλωματική εργασία μελετήσαμε ένα χαρακτηριστικό πρόβλημα συνύπαρξης και ανταγωνισμού τέτοιων φάσεων, αυτό της συνύπαρξης κύματος πυκνότητας φορτίου (charge density wave, CDW) με κύμα πυκνότητας σπιν (spin density wave, SDW), παρουσία μαγνητικού πεδίου παράλληλου και κάθετου στην πόλωση του SDW.

Σκοπός των πρώτων δύο κεφαλαίων είναι η εισαγωγή στις βασικές έννοιες και στο γενικό φορμαλισμό της θεωρίας πεδίων που χρησιμοποιήθηκε, αποφεύγοντας τη μαθηματική αυστηρότητα και δίνοντας έμφαση στη φυσική εικόνα που αντιστοιχεί. Μερικές μαθηματικές αποδείξεις και ορισμούς ο αναγνώστης μπορεί να βρει στα παραρτήματα, καθώς και στις αναφορές σε κλασσικά συγγράμματα και εργασίες. Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται η περιγραφή της μεθοδολογίας, και παρατίθενται κώδικες που αξιοποιήθηκαν τόσο στην αναλυτική όσο και στην υπολογιστική συνιστώσα της παρούσας εργασίας. Τέλος, στο τέταρτο και πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της μελέτης συνύπαρξης CDW με SDW, παρουσία μαγνητικού πεδίου παράλληλου και κάθετου στην πόλωση του SDW αντίστοιχα.

Περιεχόμενα

1 Βασικά εργαλεία και έννοιες	4
1.1 Δεύτερη κβάντωση, ή φορμαλισμός αριθμού κατάληψης	4
1.2 Οιονεί-σωματίδια και η εικόνα ηλεκτρονίου-οπής	8
1.3 Συναρτήσεις Green στο πρόβλημα πολλών σωμάτων	9
1.4 Διαγράμματα Feynman και εξισώσεις Dyson	13
1.5 Μεταβάσεις φάσεων και ανώμαλες συναρτήσεις Green	20
2 Φορμαλισμός για το πρόβλημα της συνύπαρξης φάσεων σε πε- περασμένη θερμοκρασία	25
2.1 Στατιστική μηχανική στο πρόβλημα μεταβλητού αριθμού σωμα- τιδίων	25
2.2 Συναρτήσεις Green πεπερασμένης θερμοκρασίας	26
2.3 Φορμαλισμός για τη συνύπαρξη περισσότερων φάσεων	28
2.4 Κύμα πυκνότητας σπιν (spin density wave, SDW) και φορτίου (charge density wave, CDW)	32
2.5 Η προσέγγιση του ισχυρού δεσμού (Tight binding model) στο φορμαλισμό για τη συνύπαρξη φάσεων	37
3 Θεωρητική και υπολογιστική μεθοδολογία	45
3.1 Γενική διαδικασία για την έκφραση των εξισώσεων αυτοσυνέπειας	45
3.2 Κριτήριο για την ανάμειξη καταστάσεων χρησιμοποιώντας τη $\hat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$	46
3.3 Κώδικας για την εκτέλεση των πολλαπλασιασμών μεταξύ αλθο- συμάτων πινάκων Pauli	48
3.4 Κώδικας για τη λύση των εξισώσεων αυτοσυνέπειας	50
4 Συνύπαρξη SDW με CDW, παρουσία μαγνητικού πεδίου πα- ράλληλου στην πόλωση του SDW	57
5 Συνύπαρξη SDW με CDW, παρουσία μαγνητικού πεδίου κά- θετου στην πόλωση του SDW	64
Α' Μαθηματικός ορισμός της συνάρτησης Green μηδενικής θερ- μοκρασίας	68

Β' Μαθηματικός ορισμός της συνάρτησης Green πεπερασμένης θερμοκρασίας και ιδιότητα περιοδικότητας αυτής	70
Γ' Υπολογισμός της παραμέτρου τάξης για τη μαγνήτιση στο x - άξονα	72
Δ' Αναλυτικός υπολογισμός των αθροισμάτων στις συχνότητες Matsubara	74

Κεφάλαιο 1

Βασικά εργαλεία και έννοιες

Ο φυσικός κόσμος απαρτίζεται από συστήματα πολλών σωμάτων, που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Η ακριβής περιγραφή των συστημάτων αυτών απαιτεί φυσικά να ληφθεί υπόψη το δυναμικό μεταξύ των σωματιδίων. Η πληρέστερη περιγραφή του συστήματος είναι με την κυματοσυνάρτηση N σωματιδίων, ωστόσο ο υπολογισμός μιας τέτοιας λύσης δεν είναι δυνατός εν γένει, αλλά και η έκφραση καταλήγει να είναι μη πρακτική. Επομένως, είναι απαραίτητο να καταφύγουμε σε άλλες τεχνικές, δηλαδή τη δεύτερη κβάντωση και τις συναρτήσεις Green.

Με τη χρήση του φορμαλισμού δεύτερης κβάντωσης, απλά αλλάζουμε συμβολισμό, ωστόσο έχουμε σημαντικά πλεονεκτήματα, όπως την απλότητα στην έκφραση, καθώς επίσης και το γεγονός ότι οι τελεστές δεύτερης κβάντωσης έχουν ενσωματωμένη τη στατιστική των σωματιδίων (Bose ή Fermi). Επίσης, με τη βοήθεια των τελεστών αυτών, μπρούμε να γράψουμε εύκολα, όπως θα διόμε παρακάτω, τις διάφορες παραμέτρους τάξης, που χρησιμοποιούμε σε αυτήν την εργασία. Οι συναρτήσεις Green από την άλλη, αν και δεν παρέχουν πλήρη εικόνα του συστήματος υπό εξέταση, περιέχουν όμως τις πιο σημαντικές φυσικές πληροφορίες που μπορούμε να αντλήσουμε από αυτό, όπως την ενέργεια και το χρόνο ζωής των διεγερμένων καταστάσεων, αλλά και την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης, ή τη γραμμική απόκριση σε εξωτερική διέγερση.

1.1 Δεύτερη κβάντωση, ή φορμαλισμός αριθμού κατάληψης

Λειτουργώντας με τον παραδοσιακό τρόπο, σε ένα σύστημα πολλών σωμάτων αρχικά κανείς θα εξέφραζε την κυματοσυνάρτηση Ψ του συστήματος ως γινόμενο κυματοσυναρτήσεων ενός σωματιδίου, στην εκάστοτε συμφέρουσα βάση, πχ επίπεδα κύματα όταν έχουμε ένα κουτί και επιβάλλουμε συνθήκες

περιοδικότητας στα άκρα. Δηλαδή:

$$\Psi(x_1 \dots x_N, t) = \sum_{E'_1 \dots E'_N} C(E'_1 \dots E'_N, t) \psi_{E'_1}(x_1) \dots \psi_{E'_N}(x_N) \quad (1.1)$$

όπου $\psi_{E_k}(x_k)$ κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου, και E_k είναι ένα πλήρες σύνολο κβαντικών αριθμών για το συγκεκριμένο πρόβλημα. Με άλλα λόγια, η άνθροιση στην (1.1) γίνεται ως προς όλους τους δυνατούς συνδυασμούς καταστάσεων των μεμονωμένων σωματιδίων. Η εξίσωση Schrödinger για το πρόβλημα αυτό γράφεται:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1 \dots x_N, t) = H\Psi(x_1 \dots x_N, t) \quad (1.2)$$

όπου η χαμιλτονιανή H για τις συνηθισμένες περιπτώσεις:

$$H = \sum_{k=1}^N T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N V(x_k, x_l) \quad (1.3)$$

T είναι η κινητική ενέργεια και V είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Για να υπολογίσουμε την κυματοσυνάρτηση, αντικαθιστούμε στην (1.2) την έκφραση (1.1) και πολλαπλασιάζουμε από αριστερά με $\psi_{E_1}(x_1)^\dagger \dots \psi_{E_N}(x_N)^\dagger$, δηλαδή με το γινόμενο των συζυγών κυματοσυναρτήσεων ενός σωματιδίου που αντιστοιχούν σε σταθερούς κβαντικούς αριθμούς $E_1 \dots E_N$. Ολοκληρώνοντας ως προς όλες τις μεταβλητές (ενδεχομένως αθροίζοντας και ως προς τα σπιν), με χρήση των συνθηκών ορθογωνιότητας μεταξύ των κυματοσυναρτήσεων ψ_{E_k} , δηλαδή

$$\int dx_k \psi_{E_i}^\dagger(x_k) \psi_{E_j}(x_k) = \delta_{ij} \quad (1.4)$$

τελικά παίρνουμε:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(E_1 \dots E_N) &= \sum_{k=1}^N \sum_W \int dx_k \psi_{E_k}(x_k)^\dagger T(x_k) \psi_W(x_k) \\ &\quad \times C(E_1 \dots E_{k-1} W E_{k+1} \dots E_N, t) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \sum_W \sum_{W'} \int \int dx_k dx_l \psi_{E_k}(x_k)^\dagger \psi_{E_l}(x_l)^\dagger V(x_k, x_l) \psi_W(x_k) \psi_{W'}(x_l) \\ &\quad \times C(E_1 \dots E_{k-1} W E_{k+1} \dots E_{l-1} W' E_{l+1} \dots E_N, t) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Θα πρέπει τώρα να λάβουμε υπόψη τη στατιστική των σωματιδίων, οπότε η κυματοσυνάρτηση του συστήμαρος θα πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση:

$$\Psi(\dots x_i \dots x_j \dots, t) = \pm \Psi(\dots x_j \dots x_i \dots, t) \quad (1.6)$$

όπου το $+$ είναι για μποζόνια και το $-$ για φερμιόνια. Αναγκαία και ικανή συνθήκη είναι οι συντελεστές να είναι οι ίδιοι είτε συμμετρικοί είτε αντισυμμετρικοί ως προς τους κβαντικούς αριθμούς:

$$C(\dots E_i \dots E_j \dots, t) = \pm C(\dots E_j \dots E_i \dots, t) \quad (1.7)$$

Από την (1.5), είναι φανερό ότι ο συμβολισμός μας δεν είναι καλός, μιας και το πρόβλημα, από τη διατύπωσή του ακόμη, έχει γίνει πολύπλοκο, ενώ η (1.7) εισάγει επιπλέον περιπλοκές. Συνεπώς, ένας νέος τρόπος διατύπωσης του προβλήματος είναι απαραίτητος.

Θα ξεχάσουμε την προηγούμενη ανάλυση, και θα επιχειρήσουμε μια εναλλακτική κβαντομηχανική διατύπωση, η οποία περιγράφει τον αριθμό των σωματιδίων που καταλαμβάνουν κάθε κατάσταση από ένα πλήρες σύνολο μονοσωματιδιακών καταστάσεων. Για το σκοπό αυτό, εισάγουμε τα *χρονοανεξάρτητα διανύσματα κατάστασης*

$$|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (1.8)$$

όπου ο συμβολισμός αυτός σημαίνει ότι υπάρχουν n_1 σωματίδια στην ιδιοκατάσταση 1, n_2 στην ιδιοκατάσταση 2 κλπ. Θέλουμε αυτή η βάση να είναι ορθοκανονική και πλήρης, δηλαδή:

$$\langle n'_1 n'_2 \dots n'_\infty | n_1 n_2 \dots n_\infty \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} \quad (1.9)$$

$$\sum_{n_1 n_2 \dots n_\infty} |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle \langle n_1 n_2 \dots n_\infty| = 1 \quad (1.10)$$

Η πρώτη σχέση μας λέει ότι οι καταστάσεις είναι ανά δύο ορθογώνιες, ενώ η δεύτερη ότι οποιαδήποτε κατάσταση του συστήματος μπορεί να αναπτυχθεί ως υπέρθεση τέτοιων ιδιοκαταστάσεων. Για να συμπληρωθεί η εικόνα, εισάγουμε τους *χρονοεξαρτώμενους τελεστές* a_r και a_r^\dagger , που ικανοποιούν τις σχέσεις αντικμετάθεσης

$$\{a_r, a_s^\dagger\} = \delta_{rs} \quad \{a_r, a_s\} = \{a_r^\dagger, a_s^\dagger\} = 0 \quad (1.11)$$

όπου ο αντικμεταθέτης ορίζεται ως

$$\{A, B\} \equiv [A, B]_+ \equiv AB + BA \quad (1.12)$$

Ο τελεστής a_r^\dagger δημιουργεί ένα σωματίδιο στην κατάσταση r , ενώ ο τελεστής a_r καταστρέφει ένα σωματίδιο από την κατάσταση r . Για το λόγο αυτό ονομάζονται τελεστές δημιουργίας και καταστροφής. Οι ιδιότητές των τελεστών αυτών προκύπτουν από τις σχέσεις αντικμετάθεσης, και μάλιστα οι σχέσεις αυτές έχουν ενσωματωμένη μέσα τους τη στατιστική των σωματιδίων (φερμιόνια). Πράγματι, αν στη δεύτερη ισότητα από την (1.11) θέσουμε $r = s$, τότε βλέπουμε ότι δημιουργώντας δύο σωματίδια στην ίδια κατάσταση, είτε καταστρέφοντας δύο από την ίδια κατάσταση, καταλήγουμε σε μηδενικό αποτέλεσμα. Με άλλα λόγια, ένα μόνο σωματίδιο επιτρέπεται σε κάθε ιδιοκατάσταση.

Αν ξεχάσουμε για λίγο τη φυσική του προβλήματος και κρατήσουμε μόνο τα μαθηματικά, βλέπει κανείς ότι οι τελεστές αυτοί είναι όμοιοι με τους ομώνυμους τελεστές στον αρμονικό ταλαντωτή ([3]). Αντίστοιχα, ίδιες είναι και οι ταυτότητες που μπορεί κανείς να δείξει. Εμάς εδώ μας ενδιαφέρει μόνο ο τελεστής

$$N_s = a_s^\dagger a_s \quad (1.13)$$

που μετράει πόσα σωματίδια βρίσκονται στην κατάσταση r , καθώς και οι ταυτότητες

$$a^\dagger |0\rangle = |1\rangle \quad a|1\rangle = |0\rangle \quad a^\dagger |1\rangle = 0 \quad a|0\rangle = 0 \quad (1.14)$$

οι οποίες κάνουν απλά εμφανές το φυσικό νόημα των τελεστών, το οποίο σημειώσαμε παραπάνω. Για απλότητα, στην παραπάνω σχέση δε χρησιμοποιήσαμε δείκτες, θεωρώντας ότι ενδιαφερόμαστε για ένα μόνο σωματίδιο. Η κατάσταση $|0\rangle$ είναι η κατάσταση κενού, όπου κανένα σωματίδιο δεν είναι παρόν.

Λόγω του αντιμεταθέτη, κανείς πρέπει να είναι προσεκτικός με τα πρόσημα. Για παράδειγμα, με τον ορισμό

$$|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle \quad (1.15)$$

μπορύμε να υπολογίσουμε την επίδραση του τελεστή καταστροφής a_s στην κατάσταση αυτή. Αν $n_s = 1$:

$$a_s |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = (-1)^{S_s} (a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_s a_s^\dagger) \dots (a_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle \quad (1.16)$$

όπου ο παράγοντας s είναι ο αριθμός των μεταθέσεων για να μετακινήσουμε τον τελεστή a_s στη νέα του θέση.

$$S_s = n_1 + n_2 + \dots + n_{s-1} \quad (1.17)$$

Αν τώρα $n_s = 0$, τότε ο τελεστής a_s μπορεί να μετακινηθεί μέχρι την κατάσταση κενού, δίνοντας έτσι τελικά μηδέν. Μετά και από αυτό το παράδειγμα, γίνεται εμφανές και το ότι ο τελεστής αριθμησης $N_s = a_s^\dagger a_s$ δίνει πράγματι το σωστό αποτέλεσμα, δηλαδή τον αριθμό των σωματιδίων στην κατάσταση s .

Στη συνέχεια, θα εκφράσουμε την εξίσωση Schrödinger για το πρόβλημα αυτό στο νέο φορμαλισμό. Είπαμε παραπάνω ότι η τυχαία κυματοσυνάρτηση είναι δυνατό να γραφεί ως υπέρθεση των ιδιοκαταστάσεων (1.8), δηλαδή

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 n_2 \dots n_\infty} f(n_1 n_2 \dots n_\infty, t) |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle \quad (1.18)$$

Χρησιμοποιώντας την (1.5), είναι δυνατό να δείξει κανείς ότι η εξίσωση Schrödinger παίρνει τελικά τη μορφή¹:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (1.19)$$

¹για την απόδειξη, βλέπε [2]

όπου η χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H = \sum_{rs} a_r^\dagger \langle r|T|s\rangle a_s + \frac{1}{2} \sum_{rstu} a_r^\dagger a_s^\dagger \langle rs|V|tu\rangle a_u a_t \quad (1.20)$$

και τα $\langle r|T|s\rangle$ και $\langle rs|V|tu\rangle$ είναι τα στοιχεία μήτρας της κινητικής και δυναμικής ενέργειας, δηλαδή

$$\langle r|T|s\rangle = \int dx_k \psi_{E_r}(x_k)^\dagger T(x_k) \psi_{E_s}(x_k) \quad (1.21)$$

και ομοίως για τη δυναμική ενέργεια. Τα στοιχεία αυτά γράφονται για συντομία και ως T_{rs} , V_{rstu} .

Οι τελεστές στο φορμαλισμό δεύτερης χβάντωσης είναι αντίστοιχης μορφής με την εξίσωση (1.20). Όταν στην εικόνα Schrödinger περιλαμβάνουν τις συνιστώσες ενός σωματιδίου, τότε παίρνουν τη μορφή της κινητικής ενέργειας στην (1.20), ενώ όταν περιλαμβάνουν τις παραμέτρους δύο σωματιδίων, τότε παίρνουν τη μορφή της δυναμικής ενέργειας στην (1.20)².

1.2 Οιονεί-σωματίδια και η εικόνα ηλεκτρονίου-οπής

Όποιος (όχι μόνο ηλεκτρολόγος μηχανικός) έχει ασχοληθεί με τη θεωρία των ημιαγώγιμων διατάξεων θα έχει σίγουρα αναρρωτηθεί για ποιο λόγο η ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων σε έναν κρύσταλλο εξαρτάται από το υλικό, καθώς και από την κρυσταλλογραφική διεύθυνση της κίνησης, ή ποιος ο λόγος να μιλάμε για οπές και όχι μόνο για ηλεκτρόνια, αφού στο κάτω-κάτω αυτά είναι που κινούνται στην πραγματικότητα. Η απάντηση είναι ότι όταν μιλάμε για ηλεκτρόνια σε ένα υλικό, δεν εννοούμε τα συνηθισμένα ελεύθερα ηλεκτρόνια που γνωρίζουμε, αλλά ένα «είδος» ηλεκτρονίων σε αλληλεπίδραση με το πλέγμα. Αυτά ονομάζονται οιονεί-ηλεκτρόνια (quasi-electrons).

Για να γίνουμε πιο σαφείς, θα δώσουμε ένα απλό παράδειγμα. Έστω ότι έχουμε ένα νέφος ηλεκτρονίων που κινείται σε ένα ομοιόμορφα θετικά φορτισμένο υπόβαθρο, που είναι ένα απλό μοντέλο του κρυσταλλικού πλέγματος. Λόγω της άπωσης Coulomb, το ένα ηλεκτρόνιο απωθεί το άλλο, συνεπώς γύρω από κάθε ηλεκτρόνιο θα υπάρχει μια περιοχή με χαμηλή συγκέντρωση ηλεκτρονίων. Άρα, κάθε ηλεκτρόνιο θα περιβάλλεται ουσιαστικά από ένα θετικά φορτισμένο νέφος, το οποίο θα κινείται μαζί με αυτό. Αυτό το θωρακισμένο ηλεκτρόνιο, δηλαδή το ηλεκτρόνιο μαζί με το νέφος που το περιβάλλει, είναι ένα οιονεί-σωματίδιο.

Ο λόγος που χρησιμοποιεί κανείς αυτήν την εικόνα, και όχι τις παραδοσιακές μεθόδους, είναι ότι συχνά οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των οιονεί-σωματιδίων

²Στην εικόνα Schrödinger, η κινητική ενέργεια έχει τη μορφή $\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$, όπου η παραγώγιση στο ∇ γίνεται ως προς \mathbf{x} , ενώ η δυναμική ενέργεια έχει τη μορφή $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, δηλαδή εμπλέκει δύο σωματίδια

είναι πολύ ευκολότερο να ληφθούν υπόψη από τις αλληλεπιδράσεις των πραγματικών σωματιδίων. Πράγματι, στο παράδειγμά μας τα οιονεί-ηλεκτρόνια έχουν ένα ενεργό φορτίο που είναι πολύ μικρότερο από το φορτίο του ηλεκτρονίου λόγω του ψευτικά φορτισμένου νέφους γύρω από αυτά, συνεπώς οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους θα είναι ασθενείς. Άρα, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε πιθανότατα με επιτυχία τη θεωρία διαταραχών, η οποία θα μας δώσει σημαντικά αποτελέσματα όσον αφορά μετρήσιμες φυσικές ποσότητες, και μάλιστα με σχετική ευκολία. Αντίθετα, η αλληλεπιδραση Coulomb μεταξύ των πραγματικών ηλεκτρονίων είναι αρκετά ισχυρή, ώστε κάθε απόπειρα να ληφθεί αυτή υπόψη με διαταρακτικές μεθόδους να μην οδηγεί πουθενά.

Σε πραγματικά υλικά, τα οιονεί-σωματίδια δεν είναι πλέον θωρακισμένα ηλεκτρόνια, αλλά κύματα Bloch. Μια απλή εικόνα για τι περίπου είναι αυτά τα κύματα μπορεί να πάρει κανείς αν σκεφτεί ότι σε ένα κουτί, στου οποίου τα άκρα επιβάλλουμε συνθήκες περιοδικότητας, οι ιδιοκαταστάσεις είναι επίπεδα κύματα. Αντίστοιχα, ένας κρύσταλλος είναι ένα τέτοιο κουτί, στο οποίο όμως κάθε ηλεκτρόνιο κινείται στο συνδυασμένο φορτίο των ιόντων και των υπόλοιπων ηλεκτρονίων. Λύνοντας αυτοσυνεπώς το πρόβλημα (αφού τα ηλεκτρόνια κινούνται στο πεδίο που εν μέρει καθορίζεται και από αυτά τα ίδια), προκύπτουν λύσεις αντίστοιχες με τα επίπεδα κύματα, μόνο που η έκφρασή τους δεν είναι πλεόν τόσο απλή, αλλά και η σχέση διασποράς δεν είναι το γνωστό $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Αντίθετα, οι καμπύλες διασποράς σχηματίζουν τη δομή ζωνών για το συγκεχριμένο υλικό, η οποία είναι συνήθως πολύπλοκη.³

Σε θερμοκρασίες κοντά στο απόλυτο μηδέν, περιμένουμε ότι λίγες μόνο καταστάσεις επάνω από την ενέργεια Fermi θα είναι κατειλημμένες. Επομένως, πετυχαίνουμε μεγάλη οικονομία στην αναπαράσταση, αν συμβολίζουμε κάθε κατάσταση βασιζόμενοι στις διαφορές αυτής από τη θεμελιώδη. Συνεπώς, θα πρέπει να δηλώνουμε κάθε φορά ποιες καταστάσεις κάτω από την ενέργεια Fermi είναι κενές και ποιες καταστάσεις επάνω από την ενέργεια Fermi είναι κατειλημμένες. Στην πρώτη περίπτωση μιλάμε για οπές, ενώ στη δεύτερη για ηλεκτρόνια (ψυσικά πρόκειται για οιονεί-ηλεκτρόνια). Μια τέτοια κατάσταση μπορύμε να τη συμβολίσουμε με το συνηθισμένο διάνυσμα $|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle$, όπου όταν μια κατάσταση στο εσωτερικό της επιφάνειας Fermi δηλώνεται στο συμβολισμό ότι είναι κατειλημμένη, αυτό σημαίνει ότι σε εκείνη τη θέση υπάρχει μια οπή. Οι οπές είναι βέβαια και αυτές οιονεί-σωματίδια, με αυθύπαρκτη οντότητα, και τις λαμβάνουμε υπόψη όπως ακριβώς και τα (οιονεί-)ηλεκτρόνια.

1.3 Συναρτήσεις Green στο πρόβλημα πολλών σωμάτων

Ως γνωστόν, στον ηλεκτρομαγνητισμό μια συνηθισμένη μέθοδος για να λύσει κανείς αρκετά μη στοιχειώδη προβλήματα είναι εκείνη των συναρτήσεων

³Για λεπτομερέστερη περιγραφή των κυμάτων Bloch, βλέπε κάποιο εισαγωγικό βιβλίο φυσικής στερεάς κατάστασης

Green. Ουσιαστικά, η συνάρτηση Green $G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ παριστάνει το δυναμικό στη θέση \mathbf{r}_2 που δημιουργείται από ένα στοιχειώδες φορτίο στη θέση \mathbf{r}_1 , με βάση τη γεωμετρία του προβλήματος. Τα ορίσματα της παραδοσιακής αυτής συνάρτησης Green δεν περιλαμβάνουν το χρόνο, ωστόσο εμείς ενδιαφερόμαστε στο πρόβλημά μας για τη χρονική εξέλιξη του συστήματος, συνεπώς και ο χρόνος όταν πρέπει να ληφθεί υπόψη. Ορίζουμε ως συνάρτηση Green (Green's function ή propagator) για το πρόβλημα πολλών σωμάτων στη μηδενική θερμοκρασία:⁴

$$iG(\mathbf{r}_2 t_2, \mathbf{r}_1 t_1)_{t_2 > t_1} \equiv iG^+(\mathbf{r}_2 t_2, \mathbf{r}_1 t_1) \quad (1.22)$$

≡ πλάτος πιθανότητας για το σύστημα να είναι τη στιγμή t_2 στη θεμελιώδη κατάσταση με ένα επιπλέον σωματίδιο στο σημείο \mathbf{r}_2 , αν τη στιγμή t_1 έχουμε προσθέσει στο αλληλεπιδρόν σύστημα, που βρίσκεται στη θεμελιώδη του κατάσταση, ένα σωματίδιο στη θέση \mathbf{r}_1 .

Η φανταστική μονάδα i μπροστά από τη συνάρτηση Green είναι απλά θέμα σύμβασης, έτσι ώστε να απλοποιούνται λίγο οι πράξεις στη συνέχεια. Η αντίστοιχη πιθανότητα όταν είναι φυσικά

$$P(\mathbf{r}_2 t_2, \mathbf{r}_1 t_1) = G^+(\mathbf{r}_2 t_2, \mathbf{r}_1 t_1)^* G^+(\mathbf{r}_2 t_2, \mathbf{r}_1 t_1) \quad (1.23)$$

Βέβαια, συνήθως χρησιμοποιούμε κβαντικούς αριθμούς για να περιγράψουμε ένα σωματίδιο και όχι τη θέση στην οποία βρίσκεται, οπότε αν $\phi_k(\mathbf{r})$ είναι οι μονοσωματιδιακές ιδιοκαταστάσεις του συστήματος, έχουμε την ακόλουθη τροποποίηση για τη συνάρτηση Green:

$$iG^+(k_2 t_2, k_1 t_1)_{t_2 > t_1} \quad (1.24)$$

≡ πλάτος πιθανότητας για το σύστημα να είναι τη στιγμή t_2 στη θεμελιώδη του κατάσταση με ένα σωματίδιο επιπλέον στην κατάσταση $\phi_{k_2}(\mathbf{r})$, αν τη στιγμή t_1 έχουμε προσθέσει στο αλληλεπιδρόν σύστημα, που βρίσκεται στη θεμελιώδη του κατάσταση, ένα σωματίδιο στην κατάσταση $\phi_{k_2}(\mathbf{r})$.

Για $t_2 \leq t_1$, ορίζουμε

$$iG^+(k_2 t_2, k_1 t_1)_{t_2 \leq t_1} \equiv 0 \quad (1.25)$$

Στις συνηθισμένες περιπτώσεις, η χαμιλτονιανή δεν εξαρτάται από το χρόνο, συνεπώς τότε όταν μας ενδιαφέρουν μόνο οι χρονικές διαφορές, και όχι η συγκεχριμένη χρονική στιγμή, άρα η συνάρτηση Green όταν γράφεται $G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1)$ ⁵.

⁴Για το μαθηματικό ορισμό της συνάρτησης Green, βλέπε [2] και παράρτημα A'

⁵Για την απόδειξη, βλέπε Παράρτημα A'

Έχει ενδιαφέρον να υπολογίσουμε τη συνάρτηση Green για ελεύθερο σωματίδιο G_0^+ (δηλαδή για σωματίδιο σε κενό, χωρίς αλληλεπιδράσεις). Έστω ότι τη στιγμή t_1 η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου είναι η $\phi_{k_1}(\mathbf{r})$, δηλαδή:

$$\psi(\mathbf{r}, t_1) = \phi_{k_1}(\mathbf{r}) \quad (1.26)$$

Τη στιγμή t_2 , η κυματοσυνάρτηση θα είναι προφανώς⁶

$$\psi(\mathbf{r}, t_2) = \phi_{k_1}(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_{k_1}(t_2-t_1)} \quad (1.27)$$

όπου ϵ_{k_1} είναι η ενέργεια του σωματιδίου, η οποία δίνεται από τη γνωστή σχέση

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (1.28)$$

Στην παραπάνω σχέση, \mathbf{k} είναι το κυματάνυσμα, ενώ ο δείκτης k_1 περιλαμβάνει και το σπιν. Το πλάτος πιθανότητας να είναι το σωματίδιο στην κατάσταση k_2 είναι απλά η προβολή της $\psi(\mathbf{r}, t_2)$ επάνω στην $\phi_{k_2}(\mathbf{r})$:

$$\int d^3\mathbf{r} \phi_{k_2}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t_2) = e^{-i\epsilon_{k_1}(t_2-t_1)} \int d^3\mathbf{r} \phi_{k_2}^*(\mathbf{r}) \phi_{k_1}(\mathbf{r}) = e^{-i\epsilon_{k_1}(t_2-t_1)} \delta_{k_2 k_1} \quad (1.29)$$

λόγω της ορθογωνιότητας των ιδιοκαταστάσεων. Συνεπώς, μπορούμε να γράψουμε

$$G_0^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = \delta_{k_2 k_1} G_0^+(k_1, t_2 - t_1) \quad (1.30)$$

όπου⁷

$$G_0^+(k, t_2 - t_1) = \begin{cases} -i\theta_{t_2-t_1} e^{-i\epsilon_k(t_2-t_1)}, & \text{για } t_2 \neq t_1 \\ 0, & \text{για } t_2 = t_1 \end{cases} \quad (1.31)$$

και η βηματική συνάρτηση

$$\theta_{t_2-t_1} = \begin{cases} 1, & \text{αν } t_2 > t_1 \\ 0, & \text{αν } t_2 < t_1 \end{cases} \quad (1.32)$$

Μας βολεύει να εργαστούμε με το μετασχηματισμό Fourier της συνάρτησης Green. Για να συγκλίνει το ολοκλήρωμα, προσθέτουμε στην ενέργεια ένα φανταστικό παράγοντα $-i\delta$, όπου το δ είναι ένας απειροστός θετικός αριθμός.⁸ Τελικά, καταλήγουμε στην έκφραση:

$$G_0^+(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\delta} \quad (1.33)$$

⁶Σε όλα τα παρακάτω, έχουμε θέσει $\hbar = 1$, που είναι η συνηθισμένη αλλαγή διαστάσεων. Για το μη εξοικειωμένο αναγνώστη, αρκεί να αντικαταστήσει τις ενέργειες $\epsilon_{\mathbf{k}}$ με $\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar}$.

⁷Ο λόγος που είναι μηδέν για $t_2 = t_1$ προκύπτει από το μαθηματικό χειρισμό του προβλήματος.

⁸Παρακάτω, θα δούμε και το φυσικό νόημα του παράγοντα αυτού.

Βλέπουμε ότι οι πόλοι της συνάρτησης Green βρίσκονται απειροστά κοντά στην ενέργεια ϵ_k , δηλαδή στην ενέργεια του σωματιδίου που προσθέσαμε στην κατάσταση ϕ_k . Το αποτέλεσμα αυτό είναι αρκετά γενικό, και μάλιστα μπορεί να δειχθεί ότι:

Οι πόλοι της $G^+(k, l; \omega)$, δηλαδή του μετασχηματισμού Fourier της συνάρτησης Green βρίσκονται σε τιμές του ω ίσες με τις ενέργειες διέγερσης του αλληλεπιδρώντος συστήματος $N+1$ σωματιδίων μείον την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του συστήματος N σωματιδίων

Αυτή είναι μια πρώτη ενδιαφέρουσα ιδιότητα της συνάρτησης Green για το πρόβλημα πολλών σωμάτων.

Τώρα ας υποθέσουμε ότι το σύστημα είναι αλληλεπιδρόν. Τότε, το οιονείσωματίδιο στην κατάσταση k θα έχει μια νέα ενέργεια ϵ'_k , καθώς και ένα χρόνο ζωής τ_k , δηλαδή λόγω των συγκρούσεων η ενέργεια του σωματιδίου διασκορπίζεται, οπότε η κατάστασή του γίνεται λιγότερο «σαφής». Αν υποθέσουμε εκθετική απόσβεση, τότε η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου τη χρονική στιγμή t_2 θα δίνεται από τη σχέση

$$\psi(\mathbf{r}, t_2) = \phi_k(\mathbf{r}) e^{-i(\epsilon'_k - i\tau_k^{-1})(t_2 - t_1)} \quad (1.34)$$

Και η συνάρτηση Green θα έχει την ίδια μορφή με πριν, εκτός από την αντικατάσταση του ϵ_k σε ϵ'_k και του δ με τ_k^{-1} . Φυσικά, θέλουμε το οιονείσωματίδιο να παραμένει ως έχει σε όλο το διάστημα παρατήρησης, δηλαδή να αποσβαίνει αργά. Το διάστημα παρατήρησης, όμως, καθορίζει την ενεργειακή κλίμακα μέτρησης. Με άλλα λόγια, πρέπει να βλέπουμε το σύστημα για αρκετή ώρα, για να δούμε τις λεπτομέρειες της ενεργειακής υφής, σύμφωνα με την αρχή της αβεβαιότητας

$$\Delta\epsilon\Delta t \geq 1 \quad (1.35)$$

Συνεπώς, θα πρέπει

$$\tau_k^{-1} \ll \epsilon'_k \quad (1.36)$$

Αυτό δίνει και μια εικόνα για την πραγματική σημασία του παράγοντα σύγκλισης δ , και δείχνει ότι οι πόλοι της συνάρτησης Green βρίσκονται κοντά στον πραγματικό άξονα.

Στην περίπτωση τώρα των οπών, τα πράγματα είναι λίγο διαφορετικά. Όταν προσθέτουμε μια οπή στο σύστημα, ουσιαστικά αφαιρούμε ένα σωματίδιο, οπότε το νέο σύστημα θα έχει την ενέργεια του αρχικού μείον την ενέργεια του σωματιδίου που έψυγε. Συνεπώς, η ενέργεια της οπής θα είναι

$$\epsilon_k^{hole} = -\epsilon_k \quad (1.37)$$

Το σχήμα της κυματοσυνάρτησης για την οπή θα είναι το ίδιο ακριβώς με του σωματιδίου, αφού η οπή είναι απλά η έλλειψη του σωματιδίου:

$$\psi(t)^{hole} = \phi_k e^{-i(-\epsilon_k)t}, \quad \epsilon_k < \epsilon_F \quad (1.38)$$

όπου ϵ_F η ενέργεια Fermi του συστήματος. Αν τώρα αποδώσουμε αυτήν την αλλαγή προσήμου (1.37) όχι στην ενέργεια ϵ_k , αλλά στο χρόνο t , τότε βλέπουμε ότι η οπή μπορεί να θεωρηθεί ως ένα σωματίδιο που κινείται αντίστροφα στο χρόνο⁹. Αυτό είναι βέβαια απλά ένας μαθηματικός τρόπος περιγραφής, χωρίς κάποιο (μετα)φυσικό περιεχόμενο.

Ακριβώς όπως ορίσαμε συναρτήσεις Green για τα σωματίδια, αντίστοιχα για τις οπές ορίζουμε:

$$iG(k_2 t_2, k_1 t_1)_{t_2 \leq t_1} \equiv iG^-(k_2 t_2, k_1 t_1) \quad (1.39)$$

$\equiv (-1) \times$ πλάτος πιθανότητας για το σύστημα να είναι τη στιγμή t_1 στη θεμελιώδη του κατάσταση με απών ένα σωματίδιο από τη θέση k_1 , αν τη στιγμή t_2 έχουμε αφαιρέσει ένα σωματίδιο από την κατάσταση k_2

Προχωρώντας με τον ίδιο τρόπο όπως και στην περίπτωση των σωματιδίων, βρίσκουμε ότι για τις οπές θα είναι:

$$G_0^-(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k - i\delta}, \quad \epsilon_k < \epsilon_F \quad (1.40)$$

1.4 Διαγράμματα Feynman και εξισώσεις Dyson

Τηράχει ένας παραστατικός τρόπος να εφαρμόσει κανείς τη θεωρία διαταραχών, προκειμένου να υπολογίσει τη συνάρτηση Green για ένα σύστημα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων. Αυτός είναι με χρήση των διαγραμμάτων Feynman. Η μέθοδος αυτή αναπτύχθηκε από το Feynman στις εργασίες του επάνω στην κβαντική ηλεκτροδυναμική ([4]).

Η μαθηματική θεμελίωση της μεθόδου είναι πολύπλοκη, και ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης μπορεί να τη βρει σε προχωρημένα βιβλία φυσικής συμπυκνωμένης ύλης ([1], [2]). Εδώ θα επιχειρήσουμε μια απλοποιημένη παρουσίαση των βασικών σημείων της μεθόδου.

Στον ορισμό της συνάρτησης Green, θεωρήσαμε ότι τη χρονική στιγμή t_1 προσθέτουμε στη θεμελιώδη κατάσταση ένα σωματίδιο (ηλεκτρόνιο, εφόσον ασχολούμαστε με τέτοιου είδους συστήματα) στο σημείο r_1 . Αυτό το ηλεκτρόνιο ταξιδεύει μέσα στο σύστημα, μέχρι τη χρονική στιγμή t_2 , όπου θα το αναζητήσουμε στο σημείο r_2 . Στην πορεία του αυτή, συναντάει τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια και αλληλεπιδρά με αυτά¹⁰. Τα διαγράμματα Feynman είναι μία μέθοδος να ληφθούν υπόψη όλοι οι δυνατοί τρόποι της αλληλεπίδρασης του ενός ηλεκτρονίου με τα υπόλοιπα. Η πραγματική διαδικασία στην οποία συμμετέχει το ηλεκτρόνιο είναι το άνθροισμα όλων αυτών των επιμέρους διαδικασιών.

⁹ Η ιδέα αυτή προτάθηκε από τον Feynman[4]

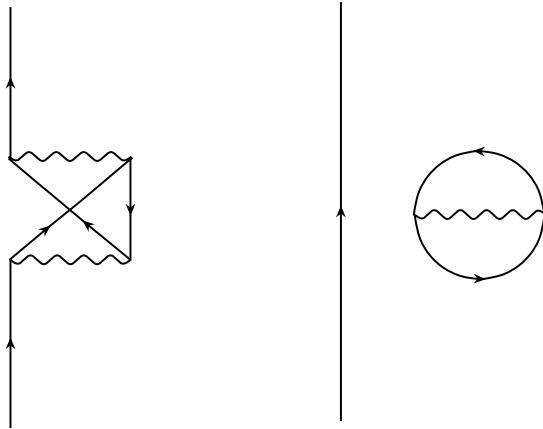
¹⁰ Σε έναν τέλειο κρύσταλλο στη μηδενική θερμοκρασία δεν υπάρχει σκέδαση των ηλεκτρονίων με το πλέγμα, και όηη η αλληλεπίδραση εκφράζεται από τις κυματοσυναρτήσεις Bloch και τις καμπύλες διασποράς

Βέβαια, η εικόνα αυτή δεν πρέπει να ωθείται στα áκρα, καθώς πρόκειται κατά βάση για μαθηματικό εργαλείο. Έτσι, η ερμηνεία ορισμένων διαγραμμάτων φαίνεται εξωπραγματική, ή χωρίς κανένα νόημα, και είναι αφηρημένο μαθηματικό πρόβλημα να αποφασίσει κανείς ποια είναι τελικά τα διαγράμματα αυτά που πρέπει να συμπεριληφθούν.

Το λεξιλόγιο των διαγραμμάτων είναι απλό. Θεωρούμε ότι ο χρόνος κυλάει από κάτω προς τα πάνω. Μια μονή συνεχής γραμμή σημαίνει ένα ηλεκτρόνιο (ή οπή) που διαδίδεται ελεύθερα, δηλαδή χωρίς να αντιλαμβάνεται την παρουσία των υπολοίπων ηλεκτρονίων (ή οπών), ενώ μια κυματιστή γραμμή σημαίνει στιγμιαία αλληλεπίδραση (σκέδαση) του ενός ηλεκτρονίου με ένα άλλο ηλεκτρόνιο (ή οπή) μέσω του δυναμικού Coulomb. Οι οπές διακρίνονται από τα ηλεκτρόνια από τη φορά του βέλους: αν δείχνει προς τα πάνω, πρόκειται για ηλεκτρόνια, ενώ αν δείχνει προς τα κάτω, πρόκειται για οπές. Φυσικά, οι οπές κινούνται και αυτές στην κανονική φορά ροής του χρόνου, δηλαδή το βέλος επάνω στη γραμμή μπορεί να θεωρηθεί απλά ως ένδειξη της ταυτότητας του σωματιδίου, και δε δείχνει προς ποια κατεύθυνση κινείται το σωματίδιο. Μία έντονη γραμμή σημαίνει ένα ηλεκτρόνιο που διαδίδεται μέσα στο υλικό παρουσία των αλληλεπιδράσεων, παριστάνει δηλαδή τη διαδικασία που φάγνουμε να υπολογίσουμε. Ένα διάγραμμα λέγεται μηδενικής τάξης αν δεν περιλαμβάνει καμία σκέδαση, πρώτης τάξης αν περιλαμβάνει μία σκέδαση κοκ. Τα διαγράμματα σχηματίζονται τοποθετώντας κόμβους, και ενώνοντάς τους με συνεχείς ή κυματιστές γραμμές. Σε κάθε κόμβο θα πρέπει να συναντιούνται δύο συνεχείς και μια κυματιστή γραμμή, εκτός από τους εξωτερικούς κόμβους, στους οποίους καταλήγει μια γραμμή ηλεκτρονίου. Το άθροισμα πραγματοποιείται επάνω σε όλα τα συνεκτικά (connected) διαγράμματα, δηλαδή αυτά που απαρτίζονται από ένα μόνο κομμάτι (βλέπε σχήμα 1.1)¹¹, τα οποία πρέπει να είναι μεταξύ τους τοπολογικά ανεξάρτητα (topologically distinct). Με αυτό εννούμε ότι δεν πρέπει το ένα να προκύπτει από το άλλο με καθρέφτισμα ολόκληρου, ή κομματιού του διαγράμματος (βλέπε σχήμα 1.2).

Η αναπαράσταση με βάση το κυματάνυσμα και τη συχνότητα είναι συμφέρουσα σε σχέση με την αναπαράσταση θέσης και χρόνου. Ο λόγος είναι ότι επιτρέπει τη χρήση απλών κανόνων για τη γραφή όλων των επιτρεπτών διαγραμμάτων. Μάλιστα, η εισαγωγή της συχνότητας δεν αλλάζει τον τρόπο να βλέπουμε τα διαγράμματα ως μια διαδικασία στην οποία ο χρόνος κυλάει προς τα πάνω. Η συχνότητα πάντως δεν έχει σχέση με την ενέργεια που κουβαλάει το σωματίδιο, η οποία εξαρτάται από την ορμή του. Στους παρακάτω κανόνες προϋποθέτουμε ακαριαία αλληλεπίδραση, ανεξάρτητη του σπιν, και εξαρτώμενη μόνο από το διάνυσμα απόστασης των δύο σωματιδίων. Έτσι, σε κάθε γραμμή (συνεχή ή κυματιστή) αντιστοιχούμε μια ορμή **k** και μια συχνότητα **ω**, ενώ σε κάθε συνεχή γραμμή αντιστοιχούμε και μια προβολή του σπιν στον άξονα

¹¹ Εκτός από αυτά που παραβιάζουν την αρχή διατήρησης της ορμής, καθώς και αυτά που παρουσιάζουν ένα σωματίδιο και μια οπή στην ίδια κατάσταση την ίδια χρονική στιγμή. Τα τελευταία διαγράμματα δεν εξαρούνται στην περίπτωση της μη μηδενικής θερμοκρασίας, δημοσιεύοντας ότι γίνεται φανερό στην παράγραφο 2.2



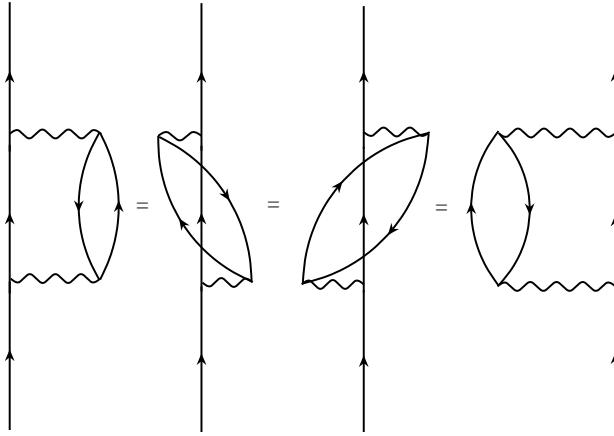
Σχήμα 1.1: συνεκτικό και μη συνεκτικό διάγραμμα

z. Προσέχουμε ότι ωστε σε κάθε κόμβο να διατηρείται τόσο η ορμή, όσο και η συχνότητα, αλλά και να μην αλλάζει το σπιν των σωματιδίων λόγω της αλληλεπίδρασης. Στη συνέχεια, σε κάθε μονή γραμμή αντιστοιχούμε μια συνάρτηση Green ελεύθερου σωματιδίου $iG_0(\mathbf{k}, \omega)$ και σε κάθε κυματιστή γραμμή αντιστοιχούμε ένα στοιχείο αλληλεπίδρασης $-iV_q$, όπου V_q είναι ο μετασχηματισμός Fourier του δυναμικού αλληλεπίδρασης $V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = V(\mathbf{r})$ ¹². Επίσης, σε κάθε κλειστό κύκλο φερμιονίων αντιστοιχούμε έναν παράγοντα -1 . Τέλος, ολοκληρώνουμε ως προς όλες τις ενδιάμεσες μεταβλητές, και αθροίζουμε ως προς τα σπιν.

Ας επιχειρήσουμε τώρα μια φυσική ερμηνεία των διαγραμμάτων πρώτης τάξης (1.3). Το πρώτο διάγραμμα παριστάνει μια διαδικασία στην οποία ένα ηλεκτρόνιο εισέρχεται στο σύστημα, αλληλεπιδρά με ένα άλλο σημείο του συστήματος, και συνεχίζει την πορεία του. Στο σημείο στο οποίο έδρασε η αλληλεπίδραση, δημιουργείται μια οπή, που όμως εξαφανίζεται ακαριαία. Η διαδικασία αυτή καλείται εμπροσθοσκέδαση (forward scattering). Στο δεύτερο διάγραμμα παρουσιάζεται μια διαδικασία, στην οποία ένα ηλεκτρόνιο εισέρχεται στο σύστημα, αλληλεπιδρά με κάποιο άλλο σημείο αυτού, στο οποίο και ακαριαία μεταφέρεται, και από εκεί συνεχίζει την πορεία του. Το διάγραμμα αυτό λέγεται διάγραμμα ανοιχτού στρειδιού (open oyster diagram). Αυτά τα δύο διαγράμματα είναι και τα περισσότερο «προβληματικά» στη φυσική ερμηνεία τους.

Παρατηρούμε ότι και στα δύο αυτά διαγράμματα παρουσιάζονται συνεχείς γραμμές στις οποίες η αρχική και τελική χρονική στιγμή είναι η ίδια. Πρόκειται δηλαδή για σωματίδια τα οποία καταστρέφονται τη στιγμή που δημιουργούνται. Ο μαθηματικός του προβλήματος δείχνει ότι τα σωματίδια αυτά πρέπει

¹²Οταν η αλληλεπίδραση δεν είναι ακαριαία, τότε έχουμε και μια εξάρτηση από τη συχνότητα.



Σχήμα 1.2: ισοδύναμα διαγράμματα

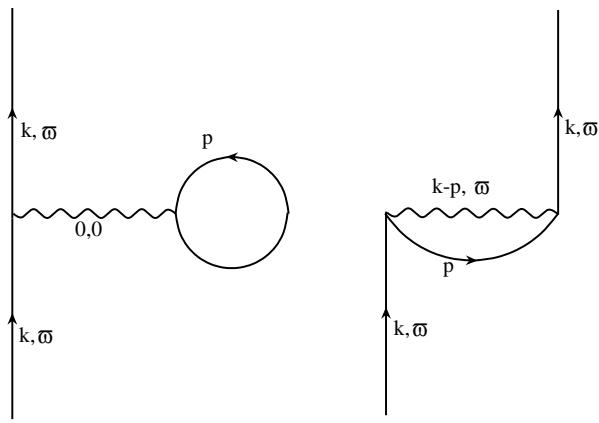
να ληφθούν ως οπές, και επομένως μια τέτοια γραμμή αντιστοιχεί με -1 όταν $|\mathbf{k}| < k_F$ και με 0 όταν $|\mathbf{k}| > k_F$.

Τη πάρχει ένας αυτοσυνεπής τρόπος να υπολογίσουμε τη συνάρτηση Green, αθροίζοντας ορισμένους τύπους διαγραμμάτων σε άπειρη τάξη. Για το σκοπό αυτό, ψα ορίσουμε πρώτα των έννοια της ιδιοενέργειας (self energy). Αν παρατηρήσει κανείς τα διαγράμματα, θα δει ότι η μορφή τους είναι πάντα ως εξής: ένα σωματίδιο εισέρχεται στο σύστημα, αλληλεπιδρά με αυτό, και στη συνέχεια εξέρχεται. Η ιδιοενέργεια είναι το άθροισμα όλων αυτών των «εσωτερικών» διαγραμμάτων, που παρουσιάζεται ως η ενεργός αλληλεπιδραση του σωματιδίου με το σύστημα. Πιο αυστηρά, ορίζουμε ως κομμάτι ιδιοενέργειας (self energy part) κάθε διάγραμμα χωρίς εξωτερικές γραμμές, το οποίο μπορεί να εισαχθεί σε μια γραμμή σωματιδίου (ή οπής). Παραδείγματα παρουσιάζονται στο σχήμα 1.5¹³. Η ιδιοενέργεια είναι το άθροισμα όλων των κομματιών ιδιοενέργειας.

Στο ανάπτυγμα αυτό, όμως, υπάρχουν δομές που επαναλαμβάνονται. Είναι δυνατό, επαναλληπτικά, να λάβουμε υπόψη όλα αυτά τα διαγράμματα. Για το σκοπό αυτό, ορίζουμε το κανονικό κομμάτι ιδιοενέργειας (proper, or irreducible self energy part) ως ένα κομμάτι ιδιοενέργειας που δεν μπορεί να χωριστεί στα δύο, διαγράφοντας απλά μια γραμμή σωματιδίου, ή οπής. Παραδείγματα φαίνονται στο σχήμα 1.6.

Η γενική μορφή της εξίσωσης Dyson, που μας επιτρέπει να αθροίσουμε

¹³Στα σχήματα αυτά, οι γραμμές χωρίς βέλος παριστάνουν σημεία σύνδεσης με γραμμές ηλεκτρονίων ή οπών.

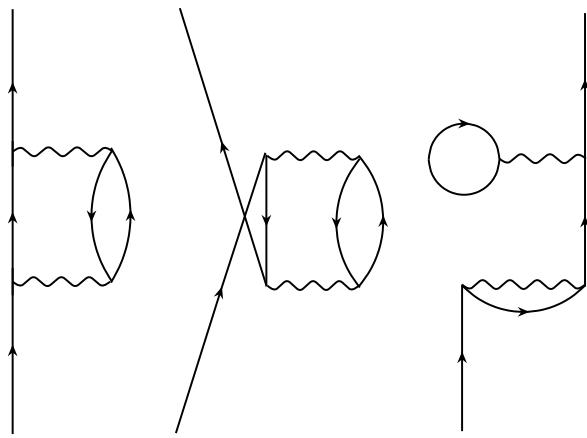


Σχήμα 1.3: διαγράμματα πρώτης τάξης

ορισμένους τύπους διαγραμμάτων σε άπειρη τάξη, είναι η παρακάτω:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccc}
 \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \end{array} & = & \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \text{---} \uparrow \\ \Sigma \end{array}
 \end{array} \\
 (1.41)
 \end{array}$$

Οι κύκλοι με το ελληνικό «Σ» συμβολίζουν κανονικά κομμάτια ιδιοενέργειας. Η

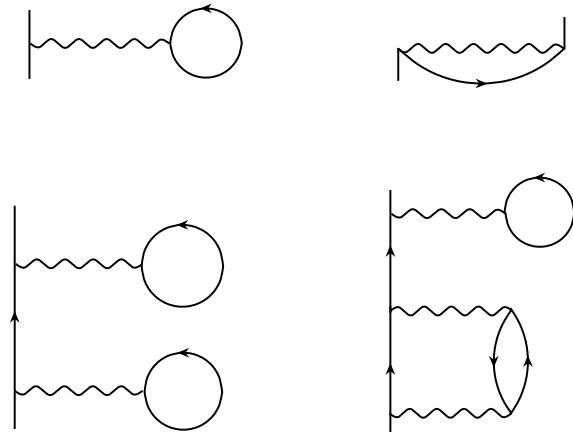


Σχήμα 1.4: διαγράμματα δεύτερης τάξης

απόδειξη της (1.41) είναι απλή. Πράγματι, αν την εφαρμόσουμε επαναληπτικά

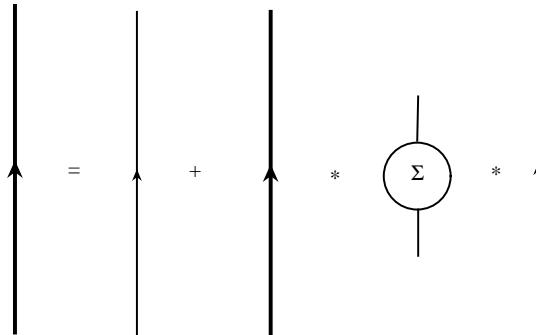
$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c} = & + & + & = & + & + & + & \dots \\
 | & | & | & | & | & | & | & \\
 \Sigma & \\
 \uparrow & \\
 \end{array} \\
 (1.42)
 \end{array}$$

βλέπουμε ότι λόγω του ορισμού της ιδιοενέργειας, περιλαμβάνονται στο ανά-



Σχήμα 1.5: κομμάτια ιδιοενέργειας

πτυγμα αυτό όλα τα δυνατά διαγράμματα. Η (1.41) μπορεί να γραφεί και ως:



(1.43)

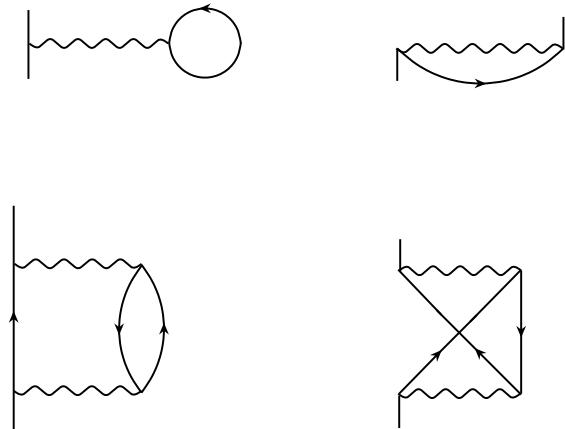
$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) + G(\mathbf{k}, \omega)\Sigma(\mathbf{k}, \omega)G_0(\mathbf{k}, \omega) \quad (1.44)$$

Αυτή είναι μια αυτοσυνεπής εξίσωση, που μπορεί να λυθεί ως προς την ακριβή συνάρτηση Green:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{G_0(\mathbf{k}, \omega)^{-1} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} \quad (1.45)$$

Συνήθως, προσεγγίζουμε την ιδιοενέργεια με μερικούς μόνο όρους της σειράς, οπότε προκύπτουν διαφόρων ειδών προσεγγίσεις.

Η μέθοδος αυτή της εξίσωσης Dyson επεκτείνεται και σε άλλες περιπτώσεις (βλέπε [1]), όπου υπολογίζονται ακριβείς αλληλεπιδράσεις, κορυφές κλπ.



Σχήμα 1.6: κανονικά κομμάτια ιδιοενέργειας

1.5 Μεταβάσεις φάσεων και ανώμαλες συναρτήσεις Green

14

Είναι καθημερινή εμπειρία το γεγονός ότι, κάτω από ορισμένες συνθήκες, ένα σύστημα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων μπορεί ξαφνικά να καταστεί ασταθές και να μεταβεί σε μια «συμπυκνωμένη» φάση με ριζικά διαφορετικές ιδιότητες. Ένα συνηθισμένο παράδειγμα μιας τέτοιας μετάβασης φάσης είναι η μεταβολή του αερίου σε υγρό, όταν μειώνεται η θερμοκρασία, ή αυξάνεται η πίεση. Άλλες γνωστές μεταβάσεις είναι η μετάβαση του υγρού σε στερεό, ή του αγωγού σε υπεραγωγό. Το χαρακτηριστικό σε τέτοιες μεταβάσεις είναι ότι το σύστημα που προκύπτει παρουσιάζει νέες ιδιότητες, που δεν έχουν καμία σχέση με αυτές του αρχικού. Έτσι, για παράδειγμα, τα στερεά είναι σκληρά, ενώ τα υγρά μαλακά, οι υπεραγωγοί παρουσιάζουν μηδενική αντίσταση, ενώ οι αγωγοί πεπερασμένη χλπ.

Η βασική ιδέα για το λόγο της μετάβασης είναι ότι στο αρχικό σύστημα υπάρχει μια τάξη μικρής εμβέλειας (*short range order SRO*), ενώ το συμπυκνωμένο σύστημα παρουσιάζει μια τάξη μακράς εμβέλειας (*long range order LRO*).¹⁵ Για παράδειγμα, σε έναν παραμαγνήτη η κατεύθυνση ενός σπιν δημιουργεί ένα τοπικό πεδίο¹⁶ που ωθεί και τα γειτονικά του να προσανατολιστούν

¹⁴Για μια ολοκληρωμένη παρουσίαση του θέματος, βλέπε [1] και [5]

¹⁵Παρακάτω θα χρησιμοποιούμε μόνο τους αγγλόφωνους όρους SRO και LRO

¹⁶Μπορούμε να πούμε ότι η αλληλεπίδραση ανταλλαγής, που είναι υπεύθυνη για φαινόμενα όπως ο σιδηρομαγνητισμός (βλέπε κάποιο βιβλίο φυσικής συμπυκνωμένης ύλης), μπορεί να μοντελοποιηθεί από ένα πεδίο, συγκεκριμένα το πεδίο Weiss (βλέπε [5]). Η αλληλεπίδραση ανταλλαγής προέρχεται χονδρικά από το γεγονός ότι σωματίδια με αντίθετο σπιν, λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli, θα βρίσκονται μακριά το ένα από το άλλο, οπότε η δυναμική ενέργεια αλληλεπιδραστής τους θα είναι μικρή.

στην ίδια με αυτό κατεύθυνση. Ωστόσο, οι θερμικές κινήσεις είναι έντονες, και έτσι δύο σπιν που βρίσκονται σε μεγάλη αποστάση μεταξύ τους είναι ασυγχέτιστα, με αποτέλεσμα η συνολική κατανομή των σπιν να παρουσιάζεται ως τυχαία. 'Όταν όμως η θερμοκρασία φθάσει αρκετά χαμηλά, ή όταν τα σπιν έρθουν αρκετά κοντά (δηλαδή όταν αυξήσουμε την πίεση), τότε το τοπικό αυτό πεδίο ωθεί έναν κρίσιμο αριθμό από γειτονικά σπιν να προσανατολιστούν στην ίδια κατεύθυνση. 'Όλα αυτά τα σπιν, όμως, συμβάλλουν με τη σειρά τους στην αύξηση του τοπικού πεδίου, και έτσι νέα έρχονται να προστεθούν σε αυτό το συσσωμάτωμα, έως ότου όλος ο κρύσταλλος μπει στη σιδηρομαγνητική φάση.

'Ένα μέτρο του πόσο «βαθειά» είναι το υλικό στη συμπυκνωμένη φάση είναι οι παράμετροι τάξης. Οι παράμετροι αυτοί ορίζονται κατά περίπτωση, ανάλογα με τις ιδιαιτερότητες της συγκεκριμένης φάσης. Μια παράμετρος τάξης θα πρέπει να είναι μηδενική όταν το υλικό βρίσκεται στη συνηθισμένη του κατάσταση, μη μηδενική όταν αυτό βρίσκεται στη συμπυκνωμένη φάση, και να αυξάνεται όσο προχωράμε πιο «βαθειά» στη νέα φάση. Έτσι, για το σιδηρομαγνήτη μια καλή παράμετρος είναι η σχετική μαγνήτιση, δηλαδή το πηλίκο της ολικής μαγνήτισης προς τη μέγιστη που μπορεί να αποκτήσει το σύστημα:

$$\mathbf{M} = \frac{\mu_B \langle \mathbf{S} \rangle}{N\mu_B/2} = \frac{2}{N} \langle \mathbf{S} \rangle \quad (1.46)$$

όπου ο παράγοντας $\frac{1}{2}$ προέκυψε επειδή θεωρούμε σπιν- $\frac{1}{2}$ σωματίδια, μ_B είναι η μαγνητόνη του Bohr, N ο αριθμός των ελεύθερων ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου και $\langle \mathbf{S} \rangle$ το μέσο σπιν ανά μονάδα όγκου.

Εκτός από τη LRO, ο σιδηρομαγνήτης παρουσιάζει και ένα ακόμη χαρακτηριστικό γνώρισμα των συμπυκνωμένων φάσεων, τη σπασμένη συμμετρία. Πράγματι, στην παραμαγνητική φάση όλες οι κατεύθυνσεις είναι ισοδύναμες, οπότε το σύστημα παραμένει αναλλοίωτο ως προς περιστροφές γύρω από οποιονδήποτε άξονα. Ωστόσο, στη σιδηρομαγνητική φάση υπάρχει μια κατεύθυνση που είναι περισσότερο «σημαντική» από τις άλλες, η κατεύθυνση της μακροσκοπικής μαγνήτισης. Πλέον, το σύστημα παραμένει αναλλοίωτο μόνο για περιστροφές γύρω από τον άξονα της μακροσκοπικής μαγνήτισης, δηλαδή η συμμετρία του είναι χαμηλότερη από τη συμμετρία του αρχικού συστήματος.

Θα μπορούσαμε, έτσι, να δώσουμε τον εξής ορισμό:

Μια μετάβαση φάσης είναι μια ξαφνική αλλαγή από μια κανονική κατάσταση με μόνο SRO και τέλεια συμμετρία, σε μια συμπυκνωμένη κατάσταση με LRO και σπασμένη συμμετρία.

Οι παράμετροι που καθορίζουν εάν το σύστημα θα είναι στην κανονική, ή στη συμπυκνωμένη φάση είναι η θερμοκρασία T , και η πυκνότητα ρ (ή, εναλλακτικά, η σταθερά σύζευξης για την αλληλεπίδραση μεταξύ των σωματιδίων). Το ίδιο φερμιονικό σύστημα μπορεί στην πραγματικότητα να υφίσταται σε μία (ή πολλές) από περισσότερες φάσεις, ανάλογα με τις τιμές των T και ρ .

Μια κατηγοριοποίηση των μεταβάσεων τάξης είναι ανάλογα με τη συμπεριφορά της παραμέτρου τάξης στο σημείο της μετάβασης. Αν η παράμετρος

τάξης είναι ασυνεχής στο σημείο της μετάβασης, τότε πρόκειται για μετάβαση πρώτης τάξης. Αν είναι συνεχής, αλλά έχει ασυνεχή πρώτη παράγωγο, πρόκειται για μετάβαση δεύτερης τάξης κλπ.

Ένα ενδιαφέρον θέμα σε σχέση με τις συμπυκνωμένες φάσεις είναι ότι η διάδοση σωματιδίων μέσα σε αυτές περιλαμβάνει και διαδικασίες που δε λαμβάνονται υπόψη στη συνηθισμένη συνάρτηση Green. Έστω, για παράδειγμα, ένας σιδηρομαγνήτης με μαγνήτιση στο x -άξονα, και έστω ένα ηλεκτρόνιο με σπιν \uparrow^{17} . Κατά τη διάδοση του ηλεκτρονίου αυτού μέσα στο υλικό, λόγω του μαγνητικού πεδίου, μπορεί να λάβει χώρα μετάπτωση του σπιν σε σπιν \downarrow . Το φαινόμενο αυτό είναι αντίστοιχο με τη μετάπτωση του άξονα περιστροφής μιας σβούρας, λόγω του βαρυτικού πεδίου¹⁸. Η διαδικασία αυτή, όμως, δεν περιλαμβάνεται στη συνήθη συνάρτηση Green. Άρα, σε ένα τέτοιο υλικό μπορούμε να έχουμε ανώμαλες συναρτήσεις Green, οι οποίες μεταβάλλουν την προβολή του σπιν:

$$\left. \begin{aligned} G(\mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k} \uparrow, t' - t) &= -i \langle \Psi_0 | T\{c_{\mathbf{k}\downarrow}(t') c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(t)\} | \Psi_0 \rangle \\ G(\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \downarrow, t' - t) &= -i \langle \Psi_0 | T\{c_{\mathbf{k}\uparrow}(t') c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger(t)\} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \right\} \quad (1.47)$$

Όλες αυτές οι συναρτήσεις μπορούν να ενσωματωθούν σε μια συνάρτηση Green-πίνακα:

$$\hat{G}_{fer}(\mathbf{k}, t' - t) = \begin{bmatrix} G(\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow, t' - t) & G(\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \downarrow, t' - t) \\ G(\mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k} \uparrow, t' - t) & G(\mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k} \downarrow, t' - t) \end{bmatrix} \quad (1.48)$$

Το ευτύχημα είναι ότι η διαγραμματική ανάλυση ισχύει και σε αυτήν την περίπτωση, μόνο που τώρα θα αντιστοιχίζουμε κάθε γραμμή με έναν πίνακα.

Οι ανώμαλες συναρτήσεις Green έχουν την πολύτιμη ιδιότητα ότι οι LRO παράμετροι τάξης μπορούν να προκύψουν από αυτές. Για παράδειγμα, στη σιδηρομαγνητική περίπτωση, όπου η μαγνήτιση είναι στο x -άξονα, αποδεικνύεται:¹⁹

$$M_x = \frac{2}{N} \langle S_x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi_0 \rangle \quad (1.49)$$

Αυτό βλέπει κανείς εύκολα ότι μπορεί να γραφεί:

$$M_x = \frac{-i}{N} \sum_{\mathbf{k}} [G(\mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k} \uparrow, 0^-) + G(\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \downarrow, 0^-)] \quad (1.50)$$

Πιο απλή και κατανοητή είναι η περίπτωση της μαγνήτισης στο z -άξονα. Πράγματι, διαισθητικά καταλαβαίνουμε ότι θα πρέπει να υπολογίσουμε τον αριθμό των σωματιδίων με σπιν \uparrow και να αφαιρέσουμε τον αριθμό των σωματιδίων με σπιν \downarrow . Χρησιμοποιώντας τον τελεστή αρίθμησης (1.13), βρίσκουμε ότι:

$$M_z = \frac{2}{N} \langle S_x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} | \Psi_0 \rangle \quad (1.51)$$

¹⁷Οι προβολές των σπιν είναι στο z -άξονα

¹⁸Για τη μαθηματική ερμηνεία του φαινομένου, βλέπε κάποιο εισαγωγικό βιβλίο κβαντομηχανικής

¹⁹Για την απόδειξη βλέπε Παράρτημα Γ' και [5]

$$\Rightarrow M_z = \frac{-i}{N} \sum_{\mathbf{k}} [G(\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow, 0^-) - G(\mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k} \downarrow, 0^-)] \quad (1.52)$$

Από την εξίσωση αυτή, βλέπουμε ότι ως ανώμαλη συνάρτηση Green θα πρέπει να θεωρήσουμε τη διαφορά

$$\Delta G(\mathbf{k}, t' - t) = G(\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow, t' - t) - G(\mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k} \downarrow, t' - t) \quad (1.53)$$

Πράγματι, αυτό μπορεί κανείς να το καταλάβει και ως εξής: σε αυτήν την περίπτωση δε λαμβάνει χώρα κάποια ανώμαλη διαδικασία, όπως η αλλαγή στο σπιν, ωστόσο, λόγω της μαγνήτισης του υλικού, η θετική φορά του z-άξονα είναι τώρα διαφορετική από την αρνητική φορά. Άρα τα σωματίδια με σπιν \uparrow δε θα βλέπουν το ίδιο περιβάλλον που βλέπουν και τα σωματίδια με σπιν \downarrow . Συνεπώς η διαφορά των δύο συναρτήσεων Green, για σπιν \uparrow και σπιν \downarrow , μπορεί να ληφθεί ως ανώμαλη διαδικασία.

Οι έννοιες αυτές ισχύουν και στην περίπτωση άλλων φάσεων, μερικές από τις οποίες εξετάζονται στο [5]. Η περίπτωση του σιδηρομαγνήτη, όμως, είναι μάλλον η πιο απλή και διαισθητικά κατανοητή, γι' αυτό και την επιλάξαμε ως παράδειγμα. Η σημαντικότερη από τις υπόλοιπες φάσεις είναι η υπεραγωγιμότητα, για μια παρουσίαση της οποίας ο αναγνώστης παραπέμπεται στο [6]. Επίσης, στην παράγραφο (2.4) γίνεται παρουσίαση της κατάστασης SDW.

Βιβλιογραφία

Richard Mattuck, ‘*A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*’ 2nd ed., chapters 0, 3.1, 4, 7, 9.1-9.7, 10.1-10.2, 10.5-10.6, 11.4, 17.1-17.4, appendices F-G Dover Publications, Inc., New York, 1967

Alexander L. Fetter and John Dirk Walecka, ‘*Quantum theory of many-particle systems*’, sections 1-2, 6-9, Dover Publications, Inc., Mineola, New York, 1971.

Στέφανος Τραχανάς, ‘Σχετικιστική Κβαντομηχανική’, κεφ. 5.1, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 1991.

R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **76**: 749 (1949); **76**: 769 (1949).

Mattuck, R. D., and Johansson, B., ‘*Quantum field theory of phase transitions in fermi systems*’, *Advances in Physics*, **17**, 509 (July 1968).

J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer ‘*Theory of superconductivity*’, *Physical Review*, **108**, 1175 (1957).

Κεφάλαιο 2

Φορμαλισμός για το πρόβλημα της συνύπαρξης φάσεων σε πεπερασμένη θερμοκρασία

2.1 Στατιστική μηχανική στο πρόβλημα μεταβλητού αριθμού σωματιδίων

Εφόσον η δεύτερη κβάντωση αναφέρεται σε συστήματα όπου ο αριθμός των σωμάτων N είναι εν γένει μη καθορισμένος, θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε μια στατιστική μέθοδο κατάλληλη για το πρόβλημα μεταβλητού N , δηλαδή τη μέθοδο του μεγαλοκανονικού συνόλου. Αυτό σημαίνει ότι το σύστημά μας είναι βυθισμένο σε μια δεξαμενή που απαρτίζεται από το ίδιο είδος σωματιδίων και διατηρείται σε θερμοκρασία T . Το σύστημα μπορεί να απελευθερώσει σωματίδια ή ενέργεια προς τη δεξαμενή, ή να δεχτεί σωματίδια ή ενέργεια από αυτήν.

Εφόσον έχουμε μεταβλητό N , οι ιδιοσυναρτήσεις $|\Psi_i\rangle$ της χαμιλτονιανής θα εξαρτώνται από το N . Έστω N_i ο αριθμός των σωματιδίων του συστήματος στην κατάσταση $|\Psi_i\rangle$, και E_i η αντίστοιχη ενέργεια, δηλαδή

$$H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle, \quad \sum_k c_k^\dagger c_k |\Psi_i\rangle = N_i |\Psi_i\rangle \quad (2.1)$$

Η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα (θεωρούμενο ως μέλος του συνόλου) στην κατάσταση $|\Psi_i\rangle$ είναι:

$$\mathcal{P}_i = \frac{e^{-\beta[E_i - \mu N_i]}}{\sum_n e^{-\beta[E_n - \mu N_n]}} = \frac{\rho_i}{Z} \quad (2.2)$$

όπου μ =χημικό δυναμικό, δηλαδή η ενέργεια που χρειαζόμαστε για να αποσπάσουμε ένα σωματίδιο από το σύστημα, και $\beta = 1/kT$ (k : ο παράγοντας

Boltzmann). Ο παρανομαστής Z της (2.2) είναι η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού, και ο αριθμητής ρ_i η μεγαλοκανονική συνάρτηση κατανομής. Μας βολεύει να γράψουμε αυτές τις ποσότητες σε συνάρτηση του τελεστή κατανομής

$$\rho = e^{-\beta(H - \mu N)} \quad (2.3)$$

όπου H και N είναι τώρα οι αντίστοιχοι τελεστές, οπότε

$$\rho_i = \langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle \quad (2.4)$$

$$Z = \sum_i \langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle = \text{tr} \rho, \quad \mathcal{P}_i = \frac{\langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle}{\text{tr} \rho} \quad (2.5)$$

όπου tr σημαίνει το ίχνος του αντίστοιχου πίνακα. Για να βρούμε τη μέση τιμή ενός τυχαίου τελεστή \mathcal{O} , υπολογίζουμε τη μέση τιμή σε όλες τις καταστάσεις, με βάρη τις αντίστοιχες πιθανότητες:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_i \langle \Psi_i | \mathcal{O} | \Psi_i \rangle \mathcal{P}_i = \frac{\text{tr} \mathcal{O} \rho}{\text{tr} \rho} \quad (2.6)$$

Στην παραπάνω εξίσωση, χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα ότι ο τελεστής ρ είναι διαγώνιος, λόγω της (2.1).

Η εξίσωση (2.6) χρησιμοποιεί τις ακριβείς κυματοσυναρτήσεις $|\Psi_i\rangle$ του προβλήματος. Επειδή όμως αυτές εν γένει δεν είναι γνωστές, μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει το γεγονός ότι το ίχνος μένει αναλλοίωτο κάτω από ένα μετασχηματισμό της βάσης. Έτσι, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μια πιο κατάλληλη βάση, έστω $|\Phi_i\rangle$. Οι $|\Phi_i\rangle$ συνήθως επιλέγονται ως οι ιδιοσυναρτήσεις του μη αλληλεπιδρώντος συστήματος. Έτσι:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{i,p} \langle \Phi_i | \mathcal{O} | \Phi_p \rangle \langle \Phi_p | \rho | \Phi_i \rangle}{\sum_i \langle \Phi_i | \mathcal{O} | \Phi_i \rangle} \quad (2.7)$$

2.2 Συναρτήσεις Green πεπερασμένης θερμοκρασίας

Αν παρατηρήσει κανείς τη μορφή του τελεστή κατανομής (2.3), θα διαπιστώσει ότι ισχύει η λεγόμενη εξίσωση Bloch:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -(H - \mu N) \rho \quad (2.8)$$

Η εξίσωση αυτή παρουσιάζει ομοιότητα με την εξίσωση Schrödinger. Στην πραγματικότητα είναι η ίδια, αρκεί να εφαρμόσει κανείς τις αντικαταστάσεις $\Psi \leftrightarrow \rho$, $H \leftrightarrow H - \mu N$, $it \leftrightarrow \beta$. Έτσι, βλέπουμε ότι μπορούμε να χτίσουμε ένα φορμαλισμό πεπερασμένης θερμοκρασίας βασισμένο στην εξίσωση Bloch, με τον ίδιο τρόπο που ο φορμαλισμός μηδενικής θερμοκρασίας ήταν βασισμένος

στην εξίσωση Schrödinger. Στην περίπτωση αυτή, το σύστημα όμως εξελίσσεται στη θερμοκρασία¹, ενώ προηγουμένως η εξέλιξη του συστήματος ήταν στο χρόνο.

Προφανώς, τα πράγματα δεν είναι τώρα ακριβώς ίδια. Πράγματι, ενώ προηγουμένως δημιουργούσαμε, σε μια δεδομένη στιγμή, ένα σωματίδιο στη θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος, τώρα δημιουργούμε το σωματίδιο στην κατάσταση που είναι το σύστημα σε κάποια θερμοκρασία. Αυτό σημαίνει ότι όμως πρέπει να υπολογίσουμε το στατιστικό μέσο όρο επάνω σε όλες τις δυνατές καταστάσεις του συστήματος, στις οποίες όμως περιλαμβάνονται φυσικά και διεγερμένες καταστάσεις. Άρα, έχει πλέον νόημα να δημιουργούμε οπές και επάνω από τη στάθμη Fermi, αφού όμως υπάρχουν εκεί σωματίδια που μπορούμε να τα «καταστρέψουμε», καθώς επίσης και σωματίδια κάτω από τη στάθμη Fermi, αφού όμως υπάρχουν εκεί οπές που μπορούμε να τις «γεμίσουμε». Επίσης, εφόσον η κατάσταση του συστήματος είναι κάθισ φορά υπέρθεση όλων των δυνατών καταστάσεων, μπορούμε να έχουμε στα διαγράμματα όμως σωματίδιο και μια οπή ταυτόχρονα στην ίδια ιδιοκατάσταση k . Στην πραγματικότητα, ποτέ δε όμως υπάρχει σωματίδιο και οπή ταυτόχρονα στην ίδια ιδιοκατάσταση. Η μεν οπή διαδίδεται μέσω των καταστάσεων του συστήματος που περιλαμβάνουν όμως σωματίδιο στην k , ενώ το σωματίδιο διαδίδεται μέσω των υπολοίπων καταστάσεων του συστήματος, που έχουν την k κενή.

Η συνάρτηση Green πεπερασμένης θερμοκρασίας $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau)$ παρουσιάζει την ενδιαφέρουσα ιδιότητα²:

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) = \pm \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau + \beta) \quad (2.9)$$

όπου το $+$ είναι για μποζόνια και το $-$ για φερμιόνια. Φυσικά, εμείς έχουμε ορίσει την $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau)$ στο διάστημα $(0, \beta)$, αφού αυτό είναι το εύρος θερμοκρασιών που μας ενδιαφέρει. Ωστόσο, μπορούμε να πάρουμε την περιοδική συνέχιση της συνάρτησης και στο υπόλοιπο διάστημα των πραγματικών αριθμών. Έτσι, αντί για το μετασχηματισμό Fourier, όμως έχουμε τώρα τη σειρά Fourier:

$$\mathcal{G}_{per}(\mathbf{k}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (2.10)$$

όπου

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{+\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) \quad (2.11)$$

$$\omega_n = \frac{\pi n}{\beta}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.12)$$

Από τη (2.9), είναι φανερό ότι για τα φερμιόνια μόνο οι συχνότητες που αντιστοιχούν σε περιττά n έχουν μη μηδενικούς συντελεστές Fourier, ενώ για τα μποζόνια κρατάμε τα άρτια n . Ο υπολογισμός της συνάρτησης Green για το

¹συγκεκριμένα από την άπειρη στη δεδομένη θερμοκρασία

²Για την απόδειξη, βλέπε Παράρτημα B'

ελεύθερο σωματίδιο είναι αντίστοιχος με την περίπτωση της μηδενικής θερμοχρασίας, και δίνει:

$$G_0(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k + \mu} \quad (2.13)$$

2.3 Φορμαλισμός για τη συνύπαρξη περισσότερων φάσεων

Όπως σημειώσαμε στην παράγραφο 1.5, στην περίπτωση των συμπυκνωμένων φάσεων χρησιμοποιούμε συναρτήσεις Green-πίνακες δύο συνιστωσών, όπως στην εξίσωση (1.48). Επειδή όμως θέλουμε να λάβουμε υπόψη τη συνύπαρξη περισσότερων φάσεων, θα πρέπει να εισάγουμε πίνακες μεγαλύτερων διαστάσεων, έτσι ώστε να συμπεριλαμβάνονται οι ανώμαλες συναρτήσεις Green όλων των φάσεων³. Σε μια πρώτη προσέγγιση, αρκεί να εισάγουμε το διάνυσμα:

$$\zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger}, c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}) \quad (2.14)$$

οπότε η αντίστοιχη συνάρτηση Green-πίνακας, στο φορμαλισμό μηδενικής θερμοχρασίας, θα έχει τη μορφή⁴:

$$\begin{aligned} \widehat{G}(\mathbf{k}, t' - t) &= -i \langle \Psi_0 | T(\zeta_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger}) | \Psi_0 \rangle = \\ &= -i \left(\begin{array}{cccccc} \langle \Psi_0 | T(c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}) | \Psi_0 \rangle & \dots & \langle \Psi_0 | T(c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}) | \Psi_0 \rangle \\ \langle \Psi_0 | T(c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}) | \Psi_0 \rangle & \dots & \langle \Psi_0 | T(c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}) | \Psi_0 \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \Psi_0 | T(c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}) | \Psi_0 \rangle & \dots & \langle \Psi_0 | T(c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}) | \Psi_0 \rangle \end{array} \right) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Αυτός ο πίνακας θα δούμε ότι περιέχει όλες τις ανώμαλες συναρτήσεις Green που θέλουμε να συμπεριλάβουμε. Οι τελεστές της εξίσωσης (2.14) μας αρκούν επίσης για να γράψουμε όλες τις παραμέτρους τάξης των φάσεων που μας ενδιαφέρουν, αφού αυτές θα είναι της μορφής (1.49). Έτσι, μια παράμετρος τάξης A θα γράφεται:

$$A = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_0 | \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \widehat{A} \zeta_{\mathbf{k}} | \Psi_0 \rangle \quad (2.16)$$

όπου $\zeta_{\mathbf{k}}$ είναι το συζυγές διάνυσμα-στήλη του (2.14), \widehat{A} ένας πίνακας, που είναι, φυσικά, διαφορετικός για κάθε παράμετρο τάξης και N ο αριθμός των κατεληγμένων καταστάσεων (δηλαδή των σωματιδίων) του συστήματος. Η εξίσωση

³βλέπε [3]

⁴Βλέπε παράρτημα A' για το μαθηματικό ορισμό της μονοδιάστατης συνάρτησης Green μηδενικής θερμοχρασίας. Στην παρακάτω εξίσωση υπονοείται η χρονική εξάρτηση των τελεστών δεύτερης κβάντωσης $c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^{\dagger}$, $c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}$ κλπ.

(2.16) αναφέρεται στη μηδενική θερμοκρασία, εφόσον $|\Psi_0\rangle$ είναι η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος. Για πεπερασμένες θερμοκρασίες, όμως πρέπει να πάρουμε και το στατιστικό μέσο σε όλες τις δυνατές καταστάσεις, περιλαμβανόμενων και των διεγερμένων.

Ο πίνακας \hat{A} όμως πρέπει να είναι ερμιτιανός⁵, εφόσον θέλουμε η παράμετρος τάξης να είναι πραγματική⁶. Άρα, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ως βάση για τους πίνακες \hat{A} τους πίνακες Pauli:

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Οι πίνακες αυτοί έχουν τις παρακάτω ιδιότητες:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 &= i \hat{\sigma}_3, & \hat{\sigma}_2 \hat{\sigma}_3 &= i \hat{\sigma}_1, & \hat{\sigma}_3 \hat{\sigma}_1 &= i \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_j^2 &= 1, & \{\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k\} &= 0, & j \neq k, & j, k = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Βέβαια, χρειαζόμαστε πίνακες 8×8 , επομένως οι (2.17) δε μας κάνουν όπως είναι. Για το σκοπό αυτό, ορίζουμε τα εξωτερικά γινόμενα:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_0 \otimes \hat{\sigma}_i &= \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_i & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_i \end{pmatrix}, & \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\sigma}_i &= \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\rho}_2 \otimes \hat{\sigma}_i &= \begin{pmatrix} 0 & -i \hat{\sigma}_i \\ i \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\rho}_3 \otimes \hat{\sigma}_i &= \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_i & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.19)$$

που είναι πίνακες 4×4 . Αντίστοιχα ορίζουμε και τους πίνακες $\hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_j \otimes \hat{\sigma}_k$. Παρακάτω, παραλείπουμε για λόγους συντομίας το σύμβολο του εξωτερικού γινομένου \otimes .

Ως πρώτο παράδειγμα, όμως γράψουμε την παράμετρο τάξης για το σιδηρομαγνητισμό στο z -άξονα. Για την περίπτωση που έχουμε μόνο τους τελεστές $c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger$, $c_{\mathbf{k}\downarrow\uparrow}$, η παράμετρος τάξης υπολογίστηκε στην (1.51). Εδώ προχωράμε αντίστοιχα. Ο τελεστής της προβολής του σπιν στο z -άξονα παίρνει τώρα τη μορφή⁷:

$$\begin{aligned} 2s_z &= c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} + c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \\ &+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Για να γράψουμε τον τελεστή αυτό στη βάση μας, χρησιμοποιούμε τη σχέση αντιμετάθεσης (1.11), η οποία όταν περιλαμβάνονται και τα σπιν γράφεται:

$$\{c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{l}\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.21)$$

⁵ δηλαδή να ισούται με το συζυγή του, όπου, για να πάρουμε το συζυγή ενός πίνακα, τον αναστρέφουμε και στη συνέχεια παίρνουμε τα μιγαδικά συζυγή των στοιχείων του

⁶ Πράγματι, όμως πρέπει $\langle \Psi_0 | \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{A} \zeta_{\mathbf{k}} | \Psi_0 \rangle^\dagger = \langle \Psi_0 | \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{A}^\dagger \zeta_{\mathbf{k}} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{A} \zeta_{\mathbf{k}} | \Psi_0 \rangle \Rightarrow \hat{A}^\dagger = \hat{A}$

⁷ Η μορφή αυτή προϋποθέτει ότι η άθροιση στη (2.16) όμως γίνει σε κατάλληλο χωρίο, έτσι ώστε κάθε κυματάνυσμα να συνεισφέρει από μια φορά, ή ότι στην άθροιση έχουμε λάβει υπόψη τη συμματρία που ενδεχομένως υπάρχει ως προς \mathbf{Q} και ως προς την αλλαγή $\mathbf{k} \leftrightarrow -\mathbf{k}$ και διαιρούμε με κατάλληλο συντελεστή.

όπου οι μεταβλητές σ, σ' αναφέρονται στην προβολή του σπιν. Έτσι, όταν είναι:

$$\begin{aligned}
2s_z &= c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} - c_{-\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \\
&+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} - c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger - c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger = \\
&= \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow} \right) \cdot \\
&\quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}\downarrow} \\ c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \\ c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \tag{2.22}
\end{aligned}$$

Εύκολα μπορεί να δει κανείς ότι ο πιο πάνω τελεστής γράφεται τελικά:

$$s_z = \frac{1}{2} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \zeta_{\mathbf{k}} \tag{2.23}$$

Πράγματι

$$\begin{aligned}
\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 &= \begin{pmatrix} \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hat{\sigma}_3 \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.24}
\end{aligned}$$

Στα παρακάτω, παραλείπουμε όλους τους πίνακες με δείκτη 0.

Για λόγους που θα γίνουν φανεροί στη συνέχεια, υπολογίζουμε την χαμιλτονιανή του συστήματος \mathcal{H} σε ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο H^{ext} . Κατά τα γνωστά, όταν είναι:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\mathbf{k}} \mu_B H^{ext} s_z = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} \mu_B H^{ext} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \zeta_{\mathbf{k}} \tag{2.25}$$

όπου μ_B η μαγνητόνη του Bohr. Στη θεωρία του Weiss για το σιδηρομαγνητισμό⁸, υποθέτουμε ότι οι στοιχειώδεις μαγνητικές ροπές, λόγω του αυθόρυμητου

⁸βλέπε κάποιο βιβλίο φυσικής συμπυκνωμένης ύλης

προσανατολισμού τους, δημιουργούν ένα μαγνητικό πεδίο μέσα στο υλικό. Το πεδίο αυτό θα εξαρτάται από την παράμετρο τάξης, δηλαδή τη μαγνήτιση, ενώ στη συνέχεια χρησιμοποιείται για να υπολογίσουμε την παράμετρο τάξης, αφού η μαγνήτιση του υλικού εξαρτάται από το μαγνητικό πεδίο που εφαρμόζεται.

Αντίστοιχα, και εδώ μπορούμε να υποθέσουμε ότι οι μαγνητικές ροπές δημιουργούν ένα μαγνητικό πεδίο H^{int} μέσα στο υλικό. Το πεδίο αυτό εν γένει δε θα είναι χωρικά ομοιόμορφο. Επειδή όμως εργαζόμαστε στο χώρο των κυματισμών, η χωρική αυτή εξάρτηση μπορεί να ληφθεί υπόψη ύσεωρώντας το μετασχηματισμό Fourier $H_{\mathbf{k}}^{int}$. Συνδυάζοντας το γινόμενο $\frac{1}{2}\mu_B H_{\mathbf{k}}^{int}$ σε μια μεταβλητή $F_{\mathbf{k}}$, η οποία δηλώνει την ενέργεια της σιδηρομαγνητικής φάσης που σχετίζεται με το κυματάνυσμα \mathbf{k} , έχουμε για το κομμάτι της χαμιλτονιανής του συστήματος λόγω της σιδηρομαγνητικής φάσης:

$$\mathcal{H}^{fer} = - \sum_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \zeta_{\mathbf{k}} \quad (2.26)$$

Μπορούμε να ύσεωρήσουμε ότι όλες οι φάσεις δημιουργούνται με έναν παρόμοιο μηχανισμό (βλέπε [3]), επομένως για μια παράμετρο τάξης A με αντίστοιχο πίνακα \widehat{A} θα είναι:

$$\mathcal{H}^A = \pm \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \widehat{A} \zeta_{\mathbf{k}} \quad (2.27)$$

Τελικά, η χαμιλτονιανή του συστήματος για τη συνύπαρξη περισσότερων φάσεων παίρνει τη μορφή:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} (\pm A_{\mathbf{k}} \widehat{A} \pm B_{\mathbf{k}} \widehat{B} \pm \dots) \zeta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \widehat{E}_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}} \quad (2.28)$$

Η χαμιλτονιανή αυτή έχει τη μορφή χαμιλτονιανής ελεύθερου σωματιδίου στο φορμαλισμό δεύτερης κβάντωσης⁹, με τη μόνη διαφορά ότι εδώ οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής είναι διανύσματα και η ενέργεια $\widehat{E}_{\mathbf{k}}$ πίνακας. Πράγματι, δεν υπάρχει πουνθενά σε αυτήν τη χαμιλτονιανή όρος δυναμικής ενέργειας, οπότε είναι σαν τα σωματίδια να κινούνται στο κενό, ανεξάρτητα το ένα από το άλλο. Καθώς η εξίσωση Dyson (1.45) ισχύει και για συναρτήσεις Green-πίνακες, μπορούμε να ύσεωρήσουμε ότι η συνάρτηση Green του συστήματος είναι η Green ελεύθερου σωματιδίου¹⁰

$$\widehat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \widehat{E}_{\mathbf{k}}} \quad (2.29)$$

Το δεύτερο μέλος της παραπάνω εξίσωσης είναι μια συνάρτηση πίνακα, ενώ όπου $i\omega_n$ υπονοείται $i\omega_n \widehat{1} = i\omega_n \widehat{\tau}_0 \widehat{\rho}_0 \widehat{\sigma}_0$. Ουσιαστικά, η συνάρτηση Green που θέλουμε να υπολογίσουμε είναι ο αντίστροφος του πίνακα στον παρανομαστή.

⁹βλέπε εξίσωση (1.20)

¹⁰Στο υπόλοιπο κομμάτι της εργασίας, η διάκριση των συνάρτησεων Green πεπερασμένης και μηδενικής ύφεμοκρασίας θα γίνεται από τα ορίσματά τους ($t' - t$ ή $i\omega_n$), οπότε για ευκολία αντικαθιστούμε το καλλιγραφικό G με απλό G .

Γνωρίζοντας τη συνάρτηση Green, μπορούμε να γράψουμε εξισώσεις αυτο-
συνέπειας για τις παραμέτρους τάξης ως εξής:

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{8}kT \sum_{\mathbf{k}} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \text{tr}[\widehat{A}\widehat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)] \quad (2.30)$$

Επειδή το πρόβλημά μας θα περιλαμβάνει πολλές φάσεις, θα έχουμε ένα σύ-
στημα εξισώσεων, το οποίο πρέπει να λύσουμε αυτοσυνεπώς. Η εξισωση αυτή,
καθώς και η χαμηλτονιανή (2.28), θα γίνουν κατανοητές με ένα παράδειγμα
συμπυκνωμένης φάσης, που παρουσιάζουμε στην επόμενη παράγραφο.

2.4 Κύμα πυκνότητας σπιν (spin density wave, SDW) και φορτίου (charge density wave, CDW)

Το κύμα πυκνότητας σπιν δεν είναι αυτό που φαντάζεται κανείς στην πρώτη
ανάγνωση της λέξης, δηλαδή ένα φαινόμενο μεταφοράς κάποιας ενέργειας που
σχετίζεται με το σπιν. Αντίθετα, είναι μια κατάσταση συλλογικής τακτοποίη-
σης, όπου το πέρας των διανυσμάτων προσανατολισμού των σπιν του υλικού
διαγράφουν μια σπείρα στο χώρο με περίοδο R . Με άλλα λόγια, εάν σε κάποιο
σημείο του υλικού το στοιχειώδες σπιν είναι προσανατολισμένο προς τα θετικά
 z , σε απόσταση $R/2$ θα είναι προσανατολισμένο προς τα αρνητικά z , ενώ σε
απόσταση R θα είναι προσανατολισμένο και πάλι προς στα θετικά z . Τέτοια
υλικά ονομάζονται αντισιδηρομαγνήτες, αφού μοιάζουν με τους σιδηρομαγνή-
τες στο ότι παρουσιάζουν συλλογική τακτοποίηση των σπιν, λόγω όμως του
τρόπου αυτής της τακτοποίησης το υλικό συνολικά παρουσιάζεται αμαγνήτιστο.

Για να χειριστούμε αυτά τα υλικά, εισάγουμε τον τελεστή της χωρικής
κατανομής του σπιν:

$$\mathbf{S}_{op}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{s}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.31)$$

όπου \mathbf{s}_i είναι ο τελεστής του σπιν για το i -οστό στοιχειώδες σπιν, που είναι
εντοπισμένο στο σημείο \mathbf{r}_i . Θυμίζουμε ότι

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2} [\sigma_1 \hat{i}_x + \sigma_2 \hat{i}_y + \sigma_3 \hat{i}_z] \quad (2.32)$$

όπου σ_i , $i = 1, 2, 3$ είναι οι πίνακες Pauli που ορίστηκαν στη (2.17). Εφόσον
η κατανομή του σπιν (δηλαδή η μέση τιμή του τελεστή (2.31)) είναι περιοδική,
θα αναπτύσσεται σε σειρά Fourier ως εξής:

$$\mathbf{S} = \langle \Psi_0 | \mathbf{S}_{op} | \Psi_0 \rangle = \sum_n S_{Qn} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.33)$$

όπου \mathbf{Q} είναι το διάνυσμα αντίστροφου πλέγματος που αντιστοιχεί στην περιο-
δικότητα \mathbf{R} , οπότε $|\mathbf{Q}| = \frac{2\pi}{R}$. Ως παράμετροι τάξης θεωρούνται οι συντελεστές
Fourier της παραπάνω σειράς. Συνήθως παίρνουμε μόνο τον πρώτο συντελε-
στή, ο οποίος είναι και ο επικρατέστερος.

Στο φορμαλισμό δεύτερης κβάντωσης, ο τελεστής (2.31) γράφεται:

$$\mathbf{S}_{op}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{l}\sigma'} \langle \mathbf{k}\sigma | \mathbf{s}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{l}\sigma' \rangle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{l}\sigma'} \quad (2.34)$$

Για να υπολογίσουμε τα στοιχεία πίνακα, θα χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση ελεύθερων ηλεκτρονίων, οπότε οι κυματοσυναρτήσεις θα είναι επίπεδα κύματα. Έτσι, έχουμε:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}\sigma | \mathbf{s}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{l}\sigma' \rangle &= \langle \mathbf{k} | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{l} \rangle \langle \sigma | \mathbf{s} | \sigma' \rangle = \\ &= e^{i(\mathbf{l}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \times \frac{1}{2} [(\delta_{-\sigma, \sigma'}) \hat{i}_x + (i\sigma' \delta_{-\sigma, \sigma'}) \hat{i}_y + (\sigma' \delta_{\sigma, \sigma'}) \hat{i}_z] \end{aligned} \quad (2.35)$$

Η δεύτερη ισότητα προκύπτει επειδή ο τελεστής \mathbf{s} δρα στο μέρος της κυματοσυναρτησης που σχετίζεται με το σπιν, ενώ ο τελεστής $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ δρα στο χωρικό κομμάτι. Τα στοιχεία πίνακα του \mathbf{s} υπολογίζονται από τη (2.32), ενώ τα στοιχεία πίνακα του χωρικού κομματιού υπολογίζονται εύκολα:

$$\langle \mathbf{k} | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{l} \rangle = \int d^3 \mathbf{r}' \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\mathbf{l}} = \int d^3 \mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{l} \cdot \mathbf{r}'} = e^{i(\mathbf{l}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \quad (2.36)$$

Στη γενική περίπτωση, οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων είναι κύματα Bloch, δηλαδή επίπεδα κύματα πολλαπλασιασμένα με κατάλληλες συναρτήσεις, που έχουν την περιοδικότητα του πλέγματος. Η εξίσωση (2.35), αν αντικατασταθεί στη (2.34), δίνει:

$$\mathbf{S}_{op}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{k}} e^{i(\mathbf{l}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \{ [c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{l}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{l}\uparrow}] \hat{i}_x + i [c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{l}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{l}\downarrow}] \hat{i}_y + [c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{l}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{l}\uparrow}] \hat{i}_z \} \quad (2.37)$$

Ας υποθέσουμε τώρα ότι ο άξονας του σπιράλ είναι στη διεύθυνση των x , και ας πάρουμε ως παράμετρο τάξης τον πρώτο συντελεστή της σειράς Fourier (2.33) για την προβολή του σπιν στον άξονα z . Ο n -στόχος συντελεστής της σειράς θα δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{S}_{Qn} = \int d^3 \mathbf{r} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} \langle \Psi_0 | \mathbf{S}_{op}(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (2.38)$$

οπότε τελικά θα έχουμε:

$$S_{Qz} \equiv (\mathbf{S}_{Q0})_z = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} | \Psi_0 \rangle \quad (2.39)$$

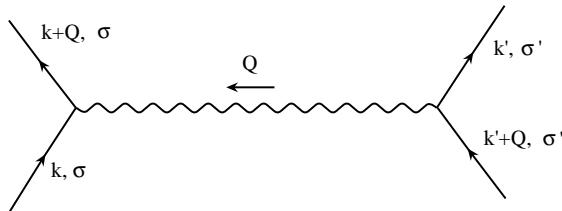
Στο πρόβλημά μας έχουμε θεωρήσει κυματάνυσμα \mathbf{Q} , τέτοιο ώστε αν μετακινηθούμε κατά $2\mathbf{Q}$, επανερχόμαστε στο ίδιο σημείο της ζώνης Brillouin. Επίσης, έχουμε θεωρήσει υλικό με συμμετρία $\mathbf{k} \leftrightarrow -\mathbf{k}$. Με αυτά τα δεδομένα, κανείς βλέπει εύκολα ότι η παράμετρος τάξης S_{Qz} γράφεται:

$$S_{Qz} = \frac{1}{8N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_0 | \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \zeta_{\mathbf{k}} | \Psi_0 \rangle \quad (2.40)$$

Στη συνέχεια, θα επιχειρήσουμε να εξάγουμε το ίδιο αποτέλεσμα από διαφορετικό δρόμο, που θα ρίξει περισσότερο φως στη φυσική του θέματος¹¹. Όπως γνωρίζουμε, όταν σε ένα SDW υλικό έχουμε στο σημείο \mathbf{r} ένα σωματίδιο με σπιν \uparrow , τότε στο σημείο $\mathbf{r} + \mathbf{R}$ έχουμε πάλι ένα σωματίδιο με σπιν \uparrow . Συνεπώς, μέσα στο υλικό αναπτύσσεται ένα δυναμικό που είναι ελκτικό για σωματίδια ίδιου σπιν σε απόσταση $n\mathbf{R}$, και απωστικό για σωματίδια αντίθετου σπιν στην ίδια απόσταση. Αυτή η περιοδικότητα του δυναμικού επιτρέπει να το αναπτύξουμε σε σειρά Fourier και να κρατήσουμε μόνο τον πρώτο όρο, που θα αντιστοιχεί στο χυματάνυσμα \mathbf{Q} . Κατά κάποιον τρόπο, ένα σωματίδιο, μέσω του κατάλληλου προσανατολισμού που δημιουργείται σε όλα τα υπόλοιπα σωματίδια του υλικού, παρουσιάζει αυτό το ενεργό δυναμικό. Εάν θεωρόυσαμε το μετασχηματισμό Fourier του δυναμικού, αυτός θα είχε κορυφές στα σημεία $n\mathbf{Q}$. Συνεπώς, μπορούμε στη χαμιλτονιανή του αρχικού συστήματος να προσθέσουμε και μια δυναμική ενέργεια, που όμως είναι μη μηδενική μόνο για το χυματάνυσμα \mathbf{Q} (ή αλλιώς για μεταφορά ορμής \mathbf{Q}):

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{norm} + \mathcal{H}^{SDW} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger V_{\mathbf{k}\mathbf{k}', \sigma\sigma'}^{\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\sigma'} \quad (2.41)$$

Η αλληλεπίδραση αυτή αντιστοιχεί στο διάγραμμα του σχήματος 2.1.



Σχήμα 2.1: Σχήμα αλληλεπίδρασης σε υλικά SDW

Το δυναμικό αυτό είπαμε ότι είναι ελκτικό για παράλληλα σπιν και απωστικό για αντιπαράλληλα. Επομένως, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι έχει μια αρνητική τιμή $-V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}}$ για παράλληλα σπιν και την ίδια αλλά θετική τιμή για αντιπαράλληλα

¹¹Τα επιχειρήματα που παρουσιάζονται εδώ δεν είναι ακριβή, δίνουν όμως μια επαρκή εικόνα.

σπιν. Τότε η \mathcal{H}^{SDW} παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{SDW} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\uparrow\downarrow} \left[-c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow\downarrow}^\dagger V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow\downarrow}^\dagger V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow} \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} [c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}] V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}} [c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\downarrow}] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}} b_{\mathbf{k}'}\end{aligned}\quad (2.42)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τους τελεστές

$$\begin{cases} b_{\mathbf{k}}^\dagger = c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \\ b_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\uparrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\downarrow} \end{cases}\quad (2.43)$$

Η χαμιλτονιανή (2.42) έχει τη μορφή ενέργειας αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων με τελεστές δημιουργίας και καταστροφής τούς (2.43). Ας δούμε το φυσικό νόημα αυτών των τελεστών. Ο τελεστής $c_{\mathbf{k}\uparrow}$ καταστρέψει ένα σωματίδιο (δηλαδή δημιουργεί μια οπή) από το σημείο \mathbf{k} με σπιν \uparrow , ενώ ο τελεστής $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger$ δημιουργεί ένα σωματίδιο στη θέση $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ με σπιν \uparrow . Επομένως, συνολικά ο τελεστής $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}$ δημιουργεί ένα ζεύγος σωματιδίου-οπής στις θέσεις $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ και \mathbf{k} αντίστοιχα, με σπιν \uparrow . Αντίστοιχα και για τον $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}$, μόνο που εδώ υπάρχει μια αλλαγή προσήμου λόγω του αντίθετου σπιν.

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο σε μια υπέρθεση των καταστάσεων $\mathbf{k}\uparrow$ και $\mathbf{k}\downarrow$:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = c_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\uparrow\rangle + c_2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\downarrow\rangle\quad (2.44)$$

και δρούμε στην κυματοσυνάρτησή του τον τελεστή $\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} b_{\mathbf{k}}^\dagger$. Όπως θα γίνει φανερό παρακάτω, το ιδανικό SDW δημιουργείται ως ισόποση υπέρθεση της κανονικής και της διεγερμένης κατάστασης. Η νέα κυματοσυνάρτηση θα είναι:

$$\begin{aligned}\psi'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} b_{\mathbf{k}}^\dagger \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} c_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (1 + e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}) |\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} c_2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (1 - e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}) |\downarrow\rangle = \\ &= c_1 \sqrt{2} e^{i(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}) \cdot \mathbf{r}} \cos\left(\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}}{2}\right) |\uparrow\rangle - i c_2 \sqrt{2} e^{i(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}) \cdot \mathbf{r}} \sin\left(\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}}{2}\right) |\downarrow\rangle\end{aligned}\quad (2.45)$$

Παρατηρούμε ότι, εκτός από την αύξηση της ορμής κατά $\frac{\mathbf{Q}}{2}$, η συνιστώσα $|\uparrow\rangle$ εμφανίζεται και εξαφανίζεται με περίοδο $\frac{2\pi}{Q} = R$, και το ίδιο συμβαίνει με τη συνιστώσα $|\downarrow\rangle$. Επίσης, τα μέγιστα της συνιστώσας $|\uparrow\rangle$ συμπίπτουν με τα ελάχιστα (εδώ μηδενισμούς) της συνιστώσας $|\downarrow\rangle$ και αντιστρόφως. Άρα,

πρόκειται πράγματι για SDW, όπως το είχαμε περιγράψει στην αρχή αυτής της παραγράφου¹².

Σε αυτό το σημείο, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η χαμιλτονιανή (2.41), λόγω της (2.42), παρουσιάζει ομοιότητα με τη χαμιλτονιανή (2.14) του [4]. Το γεγονός αυτό ήταν που μας ώθησε να αναπτύξουμε μια παρόμοια προσέγγιση και εδώ. Αυτό είναι ένα παράδειγμα της γενικότητας των μεθόδων που χρησιμοποιούνται σε τέτοια θέματα, ανεξάρτητα από τις λεπτομέρειες του εκάστοτε προβλήματος.

Στη συνέχεια, θα επιχειρήσουμε να προσεγγίσουμε τη χαμιλτονιανή (2.42) με μια χαμιλτονιανή μέσου πεδίου, στην οποία θα εμφανίζονται τα πραγματικά σωματίδια, και όχι πλέον τα οιονεί-σωματίδια (2.43). Όπως γνωρίζουμε, στην προσέγγιση μέσου πεδίου θεωρούμε ότι κάθε ηλεκτρόνιο κινείται στο μέσο πεδίο που δημιουργούν όλα τα άλλα ηλεκτρόνια, τα οποία στον υπολογισμό του πεδίου αυτού θεωρούνται στατικά. Άρα, στη (2.43) θα πρέπει να πάρουμε μια μέση τιμή ως προς το δεύτερο σωματίδιο με δείκτη \mathbf{k}' :

$$\mathcal{H}_H^{SDW} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} [c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}] V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}} [\langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\downarrow} \rangle] \quad (2.46)$$

όπου η δείκτης H της χαμιλτονιανής υπονοεί την προσέγγισην γλισης Ηαρτρεγρεεκ, δηλαδή την προσέγγιση μέσου πεδίου. Η χαμιλτονιανή αυτή μπορεί να γραφεί με μορφή ανάλογη της (2.26) αν ορίσουμε:

$$M_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}} [\langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\downarrow} \rangle] \quad (2.47)$$

Αυτή είναι μια έκφραση γενικότερη της (2.39), αφού ο μέσος όρος γίνεται με άνθροιση κατά βάρη επάνω σε όλες τις δυνατές καταστάσεις. Οι μέσες τιμές στο παραπάνω άνθροισμα είναι ουσιαστικά συνιστώσες της συνάρτησης Green-πίνακα (2.15). Χρησιμοποιώντας τις συμμετρίες που αναφέρονται κάτω από την εξίσωση (2.39), τελικά βρίσκουμε:

$$M_{\mathbf{k}} = -i \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{Q}} \text{tr} \{ \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{G}_0(\mathbf{k}', t' - t) \} \quad (2.48)$$

με τη χαμιλτονιανή να παίρνει τη μορφή:

$$\mathcal{H}_H^{SDW} = - \sum_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \zeta_{\mathbf{k}} \quad (2.49)$$

Για πεπερασμένες θερμοκρασίες, οι μέσες τιμές στη (2.47) περιλαμβάνουν και στατιστικό μέσο όρο σε όλες τις δυνατές καταστάσεις (δηλαδή και στις

¹²Για μια περιγραφή των πραγματικών κυματοσυναρτήσεων του SDW, βλέπε [5], ωστόσο η πλήρης κατανόηση αυτών των άρθρων απαιτεί γνώση της θεωρίας για το υγρό Fermi

διεγερμένες). Η συνάρτηση Green πεπερασμένης ψερμοκρασίας ενσωματώνει αυτή την άθροιση, επομένως η (2.48) παίρνει τώρα τη μορφή:

$$M_{\mathbf{k}}(\tau) = -\frac{1}{8} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q \text{tr}\{\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{G}_0(\mathbf{k}', \tau)\} \quad (2.50)$$

Εμείς όμως ενδιαφερόμαστε για την τρέχουσα ψερμοκρασία $T = \frac{1}{k\beta}$. Χρησιμοποιούμε τη σειρά Fourier (2.10), από την οποία κρατάμε μόνο τους όρους με $\omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n + 1)$, καθώς πρόκειται για φερμιονικό σύστημα, επομένως όταν είναι:

$$M_{\mathbf{k}} = \frac{1}{8} kT \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^Q \text{tr}\{\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{G}_0(\mathbf{k}', i\omega_n)\} \quad (2.51)$$

Το άθροισμα αυτό μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά, χάρη σε μια τεχνική που παρουσιάζεται στο Παράρτημα Δ'.

Τελικά, έχουμε τις παραμέτρους τάξης να προσδιορίζουν τη χαμιλτονιανή. Από τη χαμιλτονιανή στη συνέχεια υπολογίζουμε τη συνάρτηση Green, και από αυτήν, μέσω εξισώσεων αντίστοιχων με την παραπάνω, προσδιορίζονται πάλι οι παράμετροι τάξης. Αυτή η διαδικασία ακολουθείται επαναλληπτικά, μέχρι να συγκλίνει σε μια παραδεκτή λύση.

Η περίπτωση του κύματος πυκνότητας φορτίου (charge density wave, CDW) είναι παρόμοια. Μόνο που τώρα όταν έχουμε διακυμάνσεις στην τιμή του φορτίου, δηλαδή στην πυκνότητα του ηλεκτρονικού νέφους, και όχι στην κατεύθυνση του σπιν. Επομένως, πρόκειται για περίπτωση συμμετρική ως προς σπιν \uparrow και σπιν \downarrow και το μόνο που αλλάζει σε σχέση με την παραπάνω ανάλυση είναι μερικά πρόσημα. Τελικά, βρίσκουμε ότι η χαμιλτονιανή που σχετίζεται με τη φάση CDW είναι:

$$\mathcal{H}^{CDW} = \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \zeta_{\mathbf{k}} \quad (2.52)$$

2.5 Η προσέγγιση του ισχυρού δεσμού (Tight binding model) στο φορμαλισμό για τη συνύπαρξη φάσεων

Στην προσέγγιση αυτή, θεωρούμε ότι ο δεσμός ανάμεσα στα ιόντα και τα ηλεκτρόνια είναι ισχυρός, και είναι αυτός που καθορίζει τη μορφή της κυματοσυνάρτησής τους. Φυσικά, τα ηλεκτρόνια παραμένουν μη εντοπισμένα, επομένως είναι φυσικό να θεωρήσουμε ότι η κυματοσυνάρτηση κάθε ηλεκτρονίου είναι ισόποση υπέρθεση των τροχιακών για κάθε άτομο του πλέγματος. Με άλλα λόγια, αν κάθε άτομο προσφέρει ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο στο στερεό, τότε το εξωτερικό αυτό τροχιακό του καλύπτεται από όλα τα ηλεκτρόνια του πλέγματος, και καθένα από τα ηλεκτρόνια βρίσκεται ταυτόχρονα σε όλα τα τροχιακά.

Η υπέρθεση πρέπει να κτασκευαστεί έτσι ώστε να πρόκειται για κύμα Bloch. Αν $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ η κυματοσυνάρτηση του εξωτερικού τροχιακού για το άτομο που βρίσκεται στη θέση \mathbf{R} , τότε οι κυματοσυναρτήσεις που ικανοποιούν τις παραπάνω ιδιότητες είναι οι:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (2.53)$$

όπου το άθροισμα πραγματοποιείται επάνω σε όλα τα πλεγματικά σημεία, δηλαδή \mathbf{R} είναι ένα διάνυσμα περιοδικότητας του πλέγματος. Πράγματι, οι παραπάνω κυματοσυναρτήσεις γράφονται ως:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{r})} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.54)$$

όπου η $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ έχει την περιοδικότητα του πλέγματος, δηλαδή $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + n\mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Δηλαδή η κυματοσυνάρτηση $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ είναι ένα επίπεδο κύμα διαμορφωμένο από μια συνάρτηση με την περιοδικότητα του πλέγματος, άρα πρόκειται πράγματι για κύμα Bloch. Η εξίσωση (2.53), για συντόμευση του συμβολισμού, μπορεί να γραφεί επίσης:

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (2.55)$$

όπου $|\mathbf{R}\rangle$ συμβολίζει την κατάσταση όπου το γλεκτρόνιο είναι εντοπισμένο στο άτομο που βρίσκεται στο \mathbf{R} , δηλαδή το τροχιακό $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$.

Για να βρούμε την εξίσωση διασποράς, θα πρέπει να λύσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών:

$$H|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = E_{\mathbf{k}}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (2.56)$$

με τη χαμιλτονιανή

$$H = T + \sum_{\mathbf{R}} v_{\mathbf{R}}, \quad v_{\mathbf{R}} = v(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (2.57)$$

όπου T η κινητική ενέργεια και $v(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ η δυναμική ενέργεια λόγω της παρουσίας του ιόντος στο σημείο \mathbf{R} . Η (2.56) μπορεί να μετατραπεί σε αλγεβρική εξίσωση, χωρίς να χάσουμε καθόλου πληροφορία, εάν την πολλαπλασιάσουμε με $\langle \mathbf{R}|$:

$$\langle \mathbf{R}|H - E_{\mathbf{k}}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = 0 \Rightarrow \sum_{\mathbf{R}'} \langle \mathbf{R}|H - E_{\mathbf{k}}|\mathbf{R}'\rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}'} = 0 \quad (2.58)$$

Η παραπάνω εξίσωση είναι ο γενικός τύπος της θεωρίας. Στην προσέγγιση των κοντινότερων γειτόνων, θεωρούμε ότι το κάθε τροχιακό είναι περίπου εντοπισμένο στο αντίστοιχο άτομο, και έχει σημαντική επικάλυψη μόνο με τα αιμέσως γειτονικά του. Άρα τα στοιχεία πίνακα της (2.58) $\langle \mathbf{R}|H - E_{\mathbf{k}}|\mathbf{R}'\rangle$ θα είναι μη μηδενικά μόνο για $\mathbf{R}' = \mathbf{R} + \Delta$, όπου Δ είναι ένα διάνυσμα που

παίρνει τις τιμές των αποστάσεων ενός πλεγματικού σημείου από τα αμέσως γειτονικότερα. Π.χ. για μια μονοδιάστατη αλυσίδα ατόμων στον άξονα z και σε αποστάσεις a μεταξύ τους, θα είναι $\Delta = \pm a\hat{z}$. Έτσι, η εξίσωση (2.58) παίρνει τη μορφή:

$$\langle \mathbf{R} | H - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} \rangle + \sum_{\Delta} \langle \mathbf{R} | H - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} + \Delta \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\Delta} = 0 \quad (2.59)$$

Για τον υπολογισμό του πρώτου κομματιού της (2.59), θα υποθέσουμε ότι μόνο τα δυναμικά των κοντινότερων γειτόνων, καθώς και του υπάρχοντος ιόντος, συμβάλλουν στον καθορισμό της ενέργειας του εκάστοτε τροχιακού, δηλαδή:

$$\langle \mathbf{R} | H - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} \rangle \simeq \langle \mathbf{R} | T + v_{\mathbf{R}} - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} \rangle + \sum_{\Delta} \langle \mathbf{R} | v_{\mathbf{R}+\Delta} | \mathbf{R} \rangle \quad (2.60)$$

Ο πρώτος όρος της παραπάνω εξίσωσης δηλώνει την ενέργεια του ατομικού τροχιακού, χωρίς την ύπαρξη δηλαδή του πλέγματος:

$$(T + v_{\mathbf{R}}) | \mathbf{R} \rangle = E_{\text{at}} | \mathbf{R} \rangle \quad (2.61)$$

Αν συμβολίσουμε

$$\alpha = \sum_{\Delta} \langle \mathbf{R} | v_{\mathbf{R}+\Delta} | \mathbf{R} \rangle = \sum_{\Delta} \int d^3 \mathbf{r} |\chi(\mathbf{r} - \mathbf{R})|^2 v(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \Delta) \quad (2.62)$$

τότε έχουμε

$$\langle \mathbf{R} | H - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} \rangle \simeq E_{\text{at}} - E_{\mathbf{k}} + \alpha \quad (2.63)$$

Για το δεύτερο κομμάτι της (2.59), έχουμε:

$$\langle \mathbf{R} | H - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} + \Delta \rangle = \langle \mathbf{R} | T + \sum_{\mathbf{R}'} v_{\mathbf{R}'} - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} + \Delta \rangle \quad (2.64)$$

με

$$\langle \mathbf{R} | v_{\mathbf{R}'} | \mathbf{R} + \Delta \rangle = \int d^3 \mathbf{r} \chi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) v(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \Delta) \quad (2.65)$$

Το δυναμικό $v(\mathbf{r})$, καθώς και τα τροχιακά $\chi(\mathbf{r})$ είναι μικρά σε απόλυτη τιμή μακριά από το κέντρο τους. Επομένως το παραπάνω ολοκλήρωμα θα είναι μικρό για $\mathbf{R}' \neq \mathbf{R}, \mathbf{R} + \Delta$. Άρα, θα είναι προσεγγιστικά:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{R} | H - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} + \Delta \rangle &\simeq \langle \mathbf{R} | T + v_{\mathbf{R}+\Delta} - E_{\mathbf{k}} | \mathbf{R} + \Delta \rangle + \langle \mathbf{R} | v_{\mathbf{R}} | \mathbf{R} + \Delta \rangle \\ &= (E_{\text{at}} - E_{\mathbf{k}}) \langle \mathbf{R} | \mathbf{R} + \Delta \rangle + \langle \mathbf{R} | v_{\mathbf{R}} | \mathbf{R} + \Delta \rangle \end{aligned} \quad (2.66)$$

Αν συμβολίσουμε με

$$\mathcal{J}_{\Delta} = \langle \mathbf{R} | \mathbf{R} + \Delta \rangle \quad (2.67)$$

το ολοκλήρωμα επικάλυψης μεταξύ γειτονικών τροχιακών και με

$$\beta_{\Delta} = \langle \mathbf{R}|v_{\mathbf{R}}|\mathbf{R} + \Delta \rangle \quad (2.68)$$

το ολοκλήρωμα μεταφοράς μεταξύ γειτονικών τροχιακών, θα είναι:

$$\langle \mathbf{R}|H - E_{\mathbf{k}}|\mathbf{R} + \Delta \rangle \simeq (E_{\text{at}} - E_{\mathbf{k}})\mathcal{J}_{\Delta} + \beta_{\Delta} \quad (2.69)$$

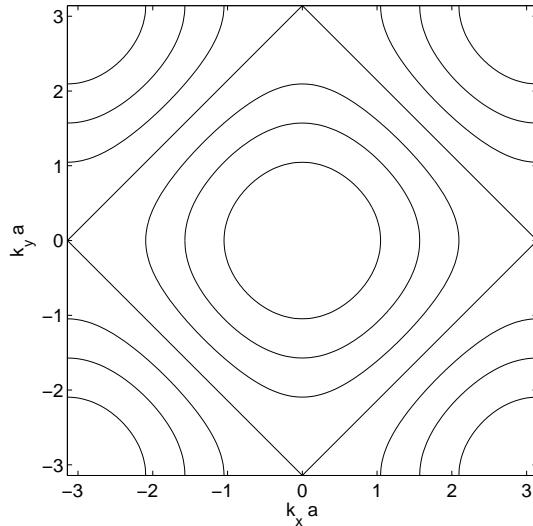
Τελικά, η (2.59) γράφεται:

$$\begin{aligned} E_{\text{at}} - E_{\mathbf{k}} + \alpha + \sum_{\Delta} \{(E_{\text{at}} - E_{\mathbf{k}})\mathcal{J}_{\Delta} + \beta_{\Delta}\} e^{i\mathbf{k}\cdot\Delta} &= 0 \\ \Rightarrow E_{\mathbf{k}} &\simeq E_{\text{at}} + \frac{\alpha + \sum_{\Delta} \beta_{\Delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\Delta}}{1 + \sum_{\Delta} \mathcal{J}_{\Delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\Delta}} \simeq E_{\text{at}} + \alpha + \sum_{\Delta} \beta_{\Delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\Delta} \end{aligned} \quad (2.70)$$

Για παράδειγμα, σε ένα διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα, με αποστάσεις a ανάμεσα στα πλεγματικά σημεία, θα είναι:

$$\Delta = \pm a\hat{x}, \pm a\hat{y} \Rightarrow E_{\mathbf{k}} = E_{\text{at}} + \alpha + 2\beta(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (2.71)$$

Οι ισοδυναμικές επιφάνειες φαίνονται στο σχήμα 2.2.



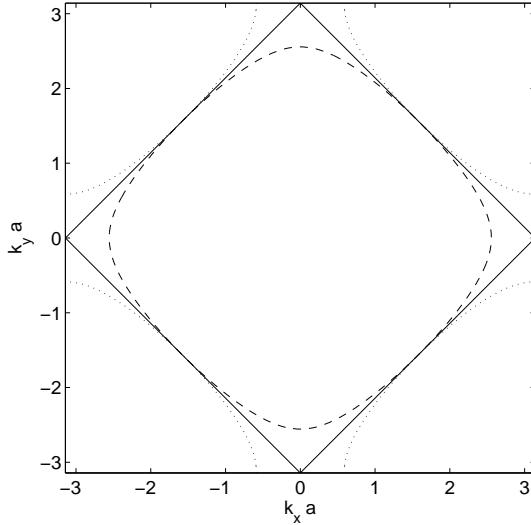
Σχήμα 2.2: Ισοδυναμικές επιφάνειες στην προσέγγιση ισχυρού δεσμού για τετραγωνικό πλέγμα. Η επιφάνεια Fermi είναι το «πλαγιαστό» τετράγωνο στο σχήμα αυτό, έτσι ώστε να καταλαμβάνει τη μισή ζώνη Brillouin. Εάν στο υλικό εισάγουμε προσμίζεις που δίνουν οπές (δέκτες ηλεκτρονίων), ουσιαστικά αν αφαιρέσουμε ηλεκτρόνια από το σύστημα, τότε η επιφάνεια Fermi μετακινείται προς τις εσωτερικές ισοδυναμικές επιφάνειες, ενώ το αντίστροφο συμβαίνει εάν εισάγουμε προσμίζεις που είναι δότες ηλεκτρονίων.

Εάν ληφθούν υπόψη και τα πλεγματικά σημεία που βρίσκονται στις αντιδιαμετρικές κορυφές ενός τετραγώνου, θα είναι:

$$\Delta = \pm a\hat{x}, \pm a\hat{y}, \pm a(\hat{x} + \hat{y}), \pm a(\hat{x} - \hat{y})$$

$$\Rightarrow E_{\mathbf{k}} = E_{\text{at}} + \alpha + 2\beta_1 (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) + 4\beta_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a) \quad (2.72)$$

Οι αντίστοιχες επιφάνειες Fermi φαίνονται στο σχήμα 2.3.



Σχήμα 2.3: Επιφάνειες Fermi στην προσέγγιση ισχυρού δεσμού για τετραγωνικό πλέγμα, όπου έχουν ληφθεί υπόψη και τα πλεγματικά σημεία που βρίσκονται στις αντιδιαμετρικές κορυφές ενός τετραγώνου. Με συνεχή γραμμή είναι η επιφάνεια Fermi για $\frac{2\beta_2}{\beta_1} = 0$, με διακεκομμένη και με διάστικτη γραμμή είναι οι περιπτώσεις $\frac{2\beta_2}{\beta_1} = 0.2$ και $\frac{2\beta_2}{\beta_1} = -0.2$. Για τα β_1, β_2 , βλέπε εξίσωση (2.72).

Ας ρίξουμε μια ματιά στο σχήμα της επιφάνειας Fermi του σχήματος 2.2, σε σχέση με τη χαμιλτονιανή (2.42). Στη χαμιλτονιανή αυτή παρουσιάζεται ο τελεστής $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}$ που μεταφέρει ένα σωματίδιο από την κατάσταση $|\mathbf{k}\uparrow\downarrow\rangle$ στην κατάσταση $|\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow\rangle$. Όμως, λόγω της ύπαρξης και του όρου $\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}$, τα σωματίδια αυτά δεν μπορούν να προέρχονται από «βαθειές» ενεργειακές καταστάσεις, ούτε να καταλήγουν σε καταστάσεις αρκετά υψηλότερα από τη στάθμη Fermi, γιατί τότε η ενέργεια που θα απαιτούσαν θα ήταν μεγάλη, άρα η νέα κατάσταση δε θα ήταν ενεργειακά συμφέρουσα. Συνεπώς, τα σωματίδια αυτά θα πρέπει να προέρχονται λίγο κάτω από τη στάθμη Fermi και να καταλήγουν λίγο πάνω από αυτήν. Από το σχήμα 2.2, γίνεται φανερό ότι το κυματάνυσμα \mathbf{Q} που ικανοποιεί αυτήν την απαίτηση είναι το $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})^{13}$, όπου a η πλεγματική σταθερά, δηλαδή η απόσταση των ιόντων στο πλέγμα. Αυτό είναι και το κυματάνυσμα που επιλέξαμε για το πρόβλημα αυτό, κοινό

¹³φυσικά και τα $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}), (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}), (-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a})$

για τα SDW, CDW. Λόγω αυτού του κυματανύσματος, η περιοδικότητα των SDW, CDW θα είναι $2a$, σε διαγώνια όμως διεύθυνση σε σχέση με τη διάταξη των ατόμων στο πλέγμα.

Παρατηρούμε ότι μετακίνηση κατά $2\mathbf{Q}$ μας επαναφέρει στο ίδιο σημείο της ζώνης Brillouin. Το γεγονός αυτό εκμεταλλευόμαστε για τη συμμετρική έκφραση των όρων της χαμιλτονιανής¹⁴. Συγκεκριμένα, ορίζουμε:

$$\begin{cases} 2\gamma_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \\ 2\delta_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{cases} \quad (2.73)$$

Στην περίπτωση της προσέγγισης ισχυρού δεσμού, που χρησιμοποιούμε εδώ, θα είναι:

$$\begin{cases} \gamma_{\mathbf{k}} = 2\beta_1 (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \\ \delta_{\mathbf{k}} = 4\beta_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a) \end{cases} \quad (2.74)$$

όπου θεωρήσαμε ως μηδενικό επίπεδο τη στάθμη Fermi. Πράγματι, στην έκφραση της συνάρτησης Green πεπερασμένης θερμοκρασίας εμφανίζεται στον παρανομαστή η διαφορά $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, όπου μ το χημικό δυναμικό. Εδώ, μπορούμε να θέσουμε το χημικό δυναμικό ίσο με την ενέργεια Fermi, πράγμα που ισχύει στις πιο πολλές περιπτώσεις. Ωστόσο αυτό παραμένει μια προσέγγιση, αφού θεωρήσαμε την ενέργεια Fermi απουσία των υπολοίπων φάσεων.

Οι ενέργειες $\gamma_{\mathbf{k}}$ και $\delta_{\mathbf{k}}$ είναι αντισυμμετρικές και συμμετρικές αντίστοιχα ως προς \mathbf{Q} , ενώ είναι και οι δύο συμμετρικές ως προς την εναλλαγή $\mathbf{k} \leftrightarrow -\mathbf{k}$:

$$\begin{cases} \gamma_{\mathbf{k}} = -\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}, & \gamma_{\mathbf{k}} = \gamma_{-\mathbf{k}} \\ \delta_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}, & \delta_{\mathbf{k}} = \delta_{-\mathbf{k}} \end{cases} \quad (2.75)$$

Χρησιμοποιώντας αυτήν την ιδιότητα, υπολογίζουμε για την ενέργεια της κανονικής κατάστασης του συστήματος:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} &= \sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} (\gamma_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} = \\ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} &\left(\gamma_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} + \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} \left(\delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} + \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow} \right) = \\ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}} &\left(c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} \delta_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow\downarrow} \right) \end{aligned} \quad (2.76)$$

Αν χρησιμοποιήσουμε και τη συμμετρία αντιστροφής $\mathbf{k} \leftrightarrow -\mathbf{k}$, τελικά βλέπουμε ότι θα έχουμε:

$$\sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 \zeta_{\mathbf{k}} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\rho}_3 \zeta_{\mathbf{k}} \quad (2.77)$$

¹⁴βλέπε και κάτω από την εξίσωση (2.39)

Παρακάτω, ενσωματώνομε τη σταθερά $\frac{1}{4}$ στα $\gamma_{\mathbf{k}}$ και $\delta_{\mathbf{k}}$, οπότε θα έχουμε

$$\sum_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow} = \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 \zeta_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\rho}_3 \zeta_{\mathbf{k}} \quad (2.78)$$

$\mu\varepsilon$

$$\begin{cases} \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \beta_1 (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \\ \delta_{\mathbf{k}} = \beta_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a) \end{cases} \quad (2.79)$$

Βιβλιογραφία

Richard Mattuck, '*A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*', chapters 14.1-14.3, Dover Publications, Inc., New York, 1967

Alexander L. Fetter and John Dirk Walecka, '*Quantum theory of many-particle systems*', sections 4-5, 23-24, Dover Publications, Inc., Mineola, New York, 1971

Mattuck, R. D., and Johansson, B., '*Quantum field theory of phase transitions in fermi systems*', Advances in Physics, **17**, 509 (July 1968).

J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, '*Theory of superconductivity*', Physical Review, **108**, 1175 (1957).

A. W. Overhauser, '*Giant spin density waves*', Physical Review Letters, **4**, 462 (1960), and '*Spin density waves in an electron gas*', Physical Review, **128**, 1437 (1962).

Κεφάλαιο 3

Θεωρητική και υπολογιστική μεθοδολογία

3.1 Γενική διαδικασία για την έκφραση των εξισώσεων αυτοσυνέπειας

Έστω ότι έχουμε μια παράμετρο τάξης $A_{\mathbf{k}}$, με αντίστοιχο πίνακα \widehat{A} . Τότε η εξισωση αυτοσυνέπειας για την $A_{\mathbf{k}}$ δίνεται από τη σχέση:

$$A_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^A \frac{1}{8} \text{tr}\{\widehat{A}\widehat{G}(\mathbf{k}', i\omega_n)\} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^A \frac{1}{8} \text{tr}\{[\widehat{G}^{-1}(\mathbf{k}', i\omega_n)\widehat{A}]^{-1}\} \quad (3.1)$$

επειδή $\widehat{A}^{-1} = \widehat{A}$. Η συνάρτηση Green $\widehat{G}_0(\mathbf{k}', i\omega_n)$ δίνεται από τη (2.29), οπότε ξέρουμε την αντίστροφή της. Όπως γνωρίζουμε, το ίχνος ενός πίνακα είναι ίσο με το άθροισμα των ιδιοτιμών του. Επίσης, οι ιδιοτιμές του αντίστροφου πίνακα είναι οι αντίστροφες των ιδιοτιμών του ορθού πίνακα. Έτσι, αν λ_i είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα $\widehat{G}_0^{-1}(\mathbf{k}', i\omega_n)\widehat{A}$, η εξισωση αυτοσυνέπειας παίρνει τη μορφή:

$$A_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^A \frac{1}{8} \sum_i \frac{1}{\lambda_i} = \\ T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^A \frac{1}{8} \frac{\lambda_2 \lambda_3 \dots \lambda_8 + \lambda_1 \lambda_3 \lambda_4 \dots \lambda_8 + \dots + \lambda_1 \dots \lambda_7}{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_8} \quad (3.2)$$

Τα λ_i είναι οι ρίζες της εξισωσης:

$$\text{Det}[\widehat{G}^{-1}(\mathbf{k}', i\omega_n)\widehat{A} - \lambda I] = 0 \Leftrightarrow \text{Det}[\widehat{G}^{-1}(\mathbf{k}', i\omega_n)\widehat{A} - \lambda \widehat{A}^2] = 0 \\ \Leftrightarrow \text{Det}[\widehat{G}^{-1}(\mathbf{k}', i\omega_n) - \lambda \widehat{A}] \text{Det}[\widehat{A}] = 0 \quad (3.3)$$

Όμως $\text{Det}[\widehat{A}] = \pm 1$, οπότε η εξισωση (3.3) είναι ισοδύναμη με την

$$\text{Det}[\widehat{G}^{-1}(\mathbf{k}', i\omega_n) - \lambda \widehat{A}] = 0 \quad (3.4)$$

Ωστόσο, δε χρειάζεται να λύσουμε αυτήν την εξίσωση. Απλά αναπτύσσουμε το πρώτο μέλος ως πολυώνυμο του λ , και παρατηρούμε ότι, αν διαιρέσουμε το πολυώνυμο με το συντελεστή του λ^8 , ο σταθερός όρος είναι ίσος με $\lambda_1\lambda_2\dots\lambda_8$, ενώ ο συντελεστής του λ ισούται με $-(\lambda_2\lambda_3\dots\lambda_8 + \dots + \lambda_1\dots\lambda_7)$.

Αυτή η διαδικασία εύρεσης των εξισώσεων αυτοσυνέπειας ίσως να μην είναι συμφέρουσα υπολογιστικά. Ωστόσο, παρέχει μια γενική μέθοδο υπολογισμού, ακόμη και όταν γνωρίζουμε μόνο τον αντίστροφο πίνακα της συνάρτησης Green, ο οποίος μπορεί να βρεθεί εύκολα από τη χαμιλτονιανή. Ωστόσο, στην εργασία αυτή χρησιμοποιήσαμε το πρόγραμμα που αναπτύξαμε για τον υπολογισμό γινομένων από αυθορίσματα πινάκων Pauli, έτσι ώστε σταδιακά και με δοκιμές εκτελέσαμε τις ζητούμενες αντιστροφές. Το πρόγραμμα αυτό παρουσιάζεται σε επόμενη παράγραφο του κεφαλαίου.

3.2 Κριτήριο για την ανάμειξη καταστάσεων χρησιμοποιώντας τη $\widehat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$

Έστω ότι έχουμε τη χαμιλτονιανή (βλέπε εξίσωση (2.28)):

$$\mathcal{H} = \zeta_{\mathbf{k}}^\dagger E_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}} \quad (3.5)$$

Η συνάρτηση Green ελεύθερου σωματιδίου γράφεται στη μορφή:

$$\widehat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}}} = f_0(\mathbf{k}, i\omega_n) + f_1(\mathbf{k}, i\omega_n)E_{\mathbf{k}} + \dots + f_7(\mathbf{k}, i\omega_n)E_{\mathbf{k}}^7 \quad (3.6)$$

εφόσον ο $E_{\mathbf{k}}$ είναι ένας πίνακας 8×8 . Έστω ότι η χαμιλτονιανή περιλαμβάνει τις παραμέτρους τάξης α, β και γ , με αντίστοιχους πίνακες \widehat{A} , \widehat{B} και $\widehat{\Gamma}$, δηλαδή

$$E_{\mathbf{k}} = \alpha\widehat{A} + \beta\widehat{B} + \gamma\widehat{\Gamma} + \dots \quad (3.7)$$

Θα εξετάσουμε την εξίσωση αυτοσυνέπειας για την παράμετρο γ , επομένως μας ενδιαφέρει η συνιστώσα της $\widehat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ που είναι ανάλογη του $\widehat{\Gamma}$. Πράγματι, λόγω της (2.30) και της μορφής των πινάκων Pauli (2.17), μόνο η συνιστώσα αυτή θα δίνει μη μηδενική συνεισφορά στο ίχνος. Από τις εξισώσεις (3.6) και (3.7), είναι φανερό ότι θα υπάρχει εν γένει μια συνεισφορά σε αυτή τη συνιστώσα ανάλογη του $\alpha\beta$ αν ικανοποιείται η συνθήκη:

$$\widehat{A}\widehat{B} = c\widehat{\Gamma} \quad (3.8)$$

Ωστόσο, εφόσον αυτή η συνεισφορά προέρχεται από κάποια δύναμη του $E_{\mathbf{k}}$, θα υπάρχει πάντα μια όμοια συνεισφορά ανάλογη του $\widehat{B}\widehat{A}$. Επομένως, θα πρέπει να ισχύει:

$$\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A} \neq 0 \quad (3.9)$$

Σύμφωνα όμως με τις ιδιότητες των πινάκων Pauli (2.18), μπορούμε να έχουμε μόνο $\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A}$, ή $\widehat{A}\widehat{B} = -\widehat{B}\widehat{A}$. Άρα θα πρέπει να είναι:

$$\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{B}\widehat{A} = c\widehat{\Gamma} \quad (3.10)$$

Στη συνέχεια, εκμεταλλευόμαστε την ιδιότητα των πινάκων Pauli να δίνουν μονάδα όταν πολλαπλασιάζονται με τον εαυτό τους, οπότε έχουμε (προσέχοντας και τη σειρά των πολλαπλασιασμών, αφού οι πίνακες δε μετατίθενται):

$$\left. \begin{array}{l} \hat{A}\hat{B} = c\hat{\Gamma} \Rightarrow \hat{B} = c\hat{A}\hat{\Gamma} \\ \hat{B}\hat{A} = c\hat{\Gamma} \Rightarrow \hat{B} = c\hat{\Gamma}\hat{A} \end{array} \right\} \Rightarrow 1 = \hat{B}^2 = c^2\hat{\Gamma}\hat{A}\hat{\Gamma}\hat{A}\hat{\Gamma} = c^2 \Rightarrow c = \pm 1 \quad (3.11)$$

Με αυτές τις προϋποθέσεις, μπορεί να δει κανείς εύκολα ότι θα υπάρχει και μια συνεισφορά στη συνιστώσα \hat{B} της $\hat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ ανάλογη του $\alpha\gamma$, καθώς και μια συνεισφορά στη συνιστώσα \hat{A} ανάλογη του $\beta\gamma$. Εάν τώρα ήδη υπάρχουν στο σύστημα οι δύο από τις τρεις αυτές φάσεις, τότε εν γένει θα υπάρχει μια μη μηδενική συνεισφορά στην εξίσωση αυτοσυνέπειας για την τρίτη παράμετρο. Συνεπώς, η ύπαρξη δύο οποιωνδήποτε φάσεων από τις α , β επιβάλλει την ύπαρξη και της τρίτης γ . Η συνύπαρξη αυτή μπορεί να μην εκτείνεται για όλες τις θερμοκρασίες, ή για όλα π.χ. τα μαγνητικά πεδία. Ωστόσο, για να είναι το πρόβλημα πλήρες θα πρέπει εξαρχής να συμπεριλάβουμε και τις τρεις αυτές παραμέτρους, και στο τέλος να δούμε αν κάποιες από αυτές μηδενίζονται, ενδεχομένως και για ολόκληρη την περιοχή που μας ενδιαφέρει.

Εύκολα βλέπει κανείς ότι η συνύπαρξη συνύπαρξης απλοποιείται περαιτέρω σε

$$\hat{A}\hat{B} = \pm\hat{\Gamma} \quad (3.12)$$

δηλαδή δε χρειάζεται να απαιτήσουμε $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Πράγματι

$$\hat{A}\hat{B} = \pm\hat{\Gamma} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \hat{B} = \pm\hat{A}\hat{\Gamma} \\ \hat{A} = \pm\hat{\Gamma}\hat{B} \Rightarrow \hat{\Gamma}\hat{A} = \pm\hat{\Gamma}^2\hat{B} = \pm\hat{B} \end{array} \right\} \Rightarrow \hat{A}\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}\hat{A} = \pm\hat{B} \quad (3.13)$$

Με τον ίδιο τρόπο, μπορούμε να δείξουμε κυκλικά ότι θα ισχύουν επίσης

$$\hat{\Gamma}\hat{B} = \hat{B}\hat{\Gamma} = \pm\hat{A}, \quad \hat{A}\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}\hat{A} = \pm\hat{B} \quad (3.14)$$

Θα δείξουμε τώρα ότι η συνύπαρξη (3.12), εκτός από ικανή για τη συνύπαρξη τριών φάσεων, είναι και αναγκαία για την ανάμειξη των τριών φάσεων, με βάση τη συνάρτηση Green ελεύθερου σωματιδίου. Με άλλα λόγια, αυτός ο μηχανισμός αναμειγνύει μόνο φάσεις που ικανοποιούν την (3.12). Πράγματι, η συνάρτηση Green ελεύθερου σωματιδίου μπορεί να αναπτυχθεί σε σειρά Taylor:

$$\hat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{i\omega_n} \left[1 + \frac{E_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} + \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{i\omega_n} \right)^2 + \dots \right] \quad (3.15)$$

Η σειρά αυτή συγκλίνει για ιδιοτιμές του πίνακα $\frac{E_{\mathbf{k}}}{i\omega_n}$ που βρίσκονται μέσα στο μοναδιαίο κύκλο. Έτσι, αν θεωρήσουμε τη θερμοκρασία αρκετά υψηλή, τότε η (3.15) συγκλίνει για κάθε n και \mathbf{k} . Ωστόσο, γνωρίζουμε ότι η (3.15) συγκλίνει σε μια ρητή έκφραση (αφού είναι ο αντίστροφος ενός πίνακα), οι συντελεστές της οποίας μπορούν να υπολογιστούν για αρκετά μεγάλες θερμοκρασίες. Αυτή η έκφραση, όμως, πρέπει να είναι αληθής και για χαμηλότερες θερμοκρασίες,

όταν δε βρίσκονται όλες οι ιδιοτιμές του $\frac{E_k}{i\omega_n}$ στο μοναδιαίο κύκλο, αφού οι συντελεστές της δεν έχουν λόγο να εξαρτώνται και από τη θερμοκρασία. Έτσι, βλέπουμε ότι ο μόνος τρόπος να έχουμε μια συνιστώσα της $\widehat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ ανάλογη του $\alpha\beta\widehat{\Gamma}$ είναι όταν ικανοποιείται η σχέση (3.12).

Η συλλογιστική αυτή μπορεί να επεκταθεί και στην περίπτωση περισσότερων φάσεων. Έστω έχουμε τρεις φάσεις α, β, γ και δ , με αντίστοιχους πίνακες A, B, Γ και Δ . Η αναγκαία και ικανή συνθήκη για τη γέννηση της φάσης δ από τις άλλες τρεις είναι:

$$\widehat{A}\widehat{B}\widehat{\Gamma} = c\widehat{\Delta} \quad (3.16)$$

$$\widehat{A}\widehat{B}\widehat{\Gamma} + \widehat{A}\widehat{\Gamma}\widehat{B} + \dots \neq 0 \Leftrightarrow \{\widehat{A}, \widehat{B}\}\widehat{\Gamma} + \{\widehat{A}, \widehat{\Gamma}\}\widehat{B} + \{\widehat{B}, \widehat{\Gamma}\}\widehat{A} \neq 0 \quad (3.17)$$

Εάν ισχύει η (3.16), τότε μπορούμε εύκολα να δείξουμε ότι η δ θα γεννάται, όταν είτε ένα, είτε και τα τρία από τα ζεύγη που σχηματίζουν οι $\widehat{A}, \widehat{B}, \widehat{\Gamma}$ μετατίθεται.

Για την περίπτωση τεσσάρων παραμέτρων τάξης που γεννούν μια πέμπτη, οι συνθήκες είναι οι:

$$\widehat{A}\widehat{B}\widehat{\Gamma}\widehat{\Delta} = c\widehat{E} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} & \{\widehat{A}, \widehat{B}\}\{\widehat{\Gamma}, \widehat{\Delta}\} + \{\widehat{A}, \widehat{\Gamma}\}\{\widehat{B}, \widehat{\Delta}\} + \{\widehat{A}, \widehat{\Delta}\}\{\widehat{B}, \widehat{\Gamma}\} + \{\widehat{B}, \widehat{\Gamma}\}\{\widehat{A}, \widehat{\Delta}\} + \\ & + \{\widehat{B}, \widehat{\Delta}\}\{\widehat{A}, \widehat{\Gamma}\} + \{\widehat{\Gamma}, \widehat{\Delta}\}\{\widehat{A}, \widehat{B}\} \neq 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

και η κατάσταση γίνεται μη τετριμμένη.

3.3 Κώδικας για την εκτέλεση των πολλαπλασιασμών μεταξύ αυθροίσμάτων πινάκων Pauli

Στους υπολογισμούς μας, ιδίως στην εύρεση του αντίστροφου στην εξίσωση (2.29), έχουμε να υπολογίσουμε πολλά γινόμενα της μορφής:

$$\sum_i a_i \widehat{\tau}_{i_1} \widehat{\rho}_{i_2} \widehat{\sigma}_{i_3} \cdot \sum_j b_j \widehat{\tau}_{j_1} \widehat{\rho}_{j_2} \widehat{\sigma}_{j_3} \quad (3.20)$$

Για τη γρήγορη εκτέλεση των πολλαπλασιασμών αυτών, αναπτύξαμε ένα πρόγραμμα σε Mathematica, εκμεταλλευόμενοι τις ιδιότητες των πινάκων Pauli (2.18). Το πρόγραμμα αυτό υπολογίζει το αποτέλεσμα κάθε πολλαπλασιασμού ενός στοιχείου του πρώτου αυθροίσματος με ένα στοιχείο του δεύτερου και το προσθέτει στο τελικό αποτέλεσμα, το οποίο αρχικά τίθεται ίσο με μηδέν. Ακολουθεί ο ψευδοκώδικας, όπου με «:=» εννοούμε «γίνεται ίσο», ενώ με «==» εννοούμε έλεγχο εάν ισχύει η ισότητα. Επίσης, μέσα σε (* *) είναι τα σχόλια.

διάσταση του $\mu :=$ αριθμός όρων πρώτου αυθροίσματος
 $\mu :=$ λίστα πινάκων, όπου κάθε πίνακας έχει τα στοιχεία a_i, i_1, i_2, i_3 της (3.20).
 διάσταση του $\nu :=$ αριθμός όρων δεύτερου αυθροίσματος

$v :=$ λιστα πινάκων, όπου κάθε πίνακας έχει τα στοιχεία b_i, j_1, j_2, j_3 της (3.20).

$apot :=$ πίνακας $4 \times 4 \times 4$ με μηδενικά

(* Ο πίνακας αυτός στο τέλος θα περιέχει το αποτέλεσμα. Οι τρεις συνιστώσες σημαίνουν τους δείκτες των $\hat{\tau}, \hat{\rho}, \hat{\sigma}$, ενώ η τιμή του στοιχείου τον αντίστοιχο συντελεστή *)

$temp :=$ διάνυσμα τεσσάρων συνιστώσων με μηδενικά

(* Ο πίνακας αυτός περιέχει το αποτέλεσμα του τρέχοντος πολλαπλασιασμού.

$temp_1$ είναι ο συντελεστής, ενώ $temp_2, temp_3, temp_4$, είναι οι συντελεστές των $\hat{\tau}, \hat{\rho}, \hat{\sigma}$. *)

πρόσημο := 1

Για i από 1 ως διάσταση του μ

Για j από 1 ως διάσταση του v

Αν $a_i = 0$, ή $b_j = 0$, πήγαινε στην επόμενη επανάληψη

πρόσημο := 1

Για k από 2 ως 4

Αν $i_k = j_k$, τότε $temp_k := i_k + j_k$, Αν όχι, τότε

Αν $i_k = 0$, ή $j_k = 0$, τότε $temp_k := i_k + j_k$, Αν όχι, τότε

$temp_k := 6 - i_k - j_k$

Αν $i_k - j_k = -1$, ή $i_k - j_k = 2$, τότε πρόσημο := i , Αν όχι, τότε

πρόσημο := $-i$

$temp_1 :=$ πρόσημο $\cdot a_i \cdot b_j$

$apot_{temp_2,temp_3,temp_4} := apot_{temp_2,temp_3,temp_4} + temp_1$

(* Στο τέλος πρέπει να ακολουθεί δημιουργία ενός πίνακα στη μορφή των μ , v , ώστε το αποτέλεσμα να μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε επόμενο πολλαπλασιασμό. Οι εντολές που πρέπει να χρησιμοποιηθούν εξαρτώνται από τις λεπτομέρειες της αναπαράστασης πινάκων και λιστών στη συγκεκριμένη γλώσσα προγραμματισμού *)

Στο σώμα του προγράμματος καλύπτονται όλες οι περιπτώσεις για τους δείκτες i_k και j_k , μέσω κατάλληλης κατηγοριοποίησης αυτών των περιπτώσεων. Ο αναγνώστης μπορεί να ελέγξει την ορθότητα του προγράμματος. Στη συνέχεια, ακολουθεί η υλοποίηση του παραπάνω κώδικα σε Mathematica, όπου πραγματοποιείται ως παράδειγμα ο υπολογισμός

$$\begin{aligned} & (-i\omega_n - \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 + M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 + W_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3) \\ & \times (i\omega_n - \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 + M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 + W_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3) \end{aligned} \quad (3.21)$$

md = 5;

```

m = {{-I wn, 0, 0, 0}, {-g, 3, 3, 0}, {d, 0, 3, 0}, {mc, 1, 3, 3},
{wc, 1, 3, 0}};
nd = 5;
n = {{I wn, 0, 0, 0}, {-g, 3, 3, 0}, {d, 0, 3, 0}, {mc, 1, 3, 3},
{wc, 1, 3, 0}};

apot = Table[0, {i, 4}, {j, 4}, {k, 4}];
temp = Table[0, {i, 4}];
pros = 1;

For[ i = 1, i <= md, i = i+1,
  For[ j = 1, i <= nd, j = j+1,
    If[ m[[i,1]] == 0 || n[[j,1]] == 0, Continue[ ] ];
    pros = 1;
    For[ k = 2, k <= 4, k = k+1,
      If[ m[[i,k]] == n[[j,k]], temp[[k]] = 0,
        If[ m[[i,k]]==0 || n[[j,k]]==0, temp[[k]]=m[[i,k]]+n[[j,k]],
          temp[[k]] = 6 - m[[i,k]] - n[[j,k]];
        If[ m[[i,k]] - n[[j,k]] == -1 || m[[i,k]] - n[[j,k]] == 2,
          pros = I * pros,
          pros = -I * pros
        ]
      ]
    ];
    temp[[1]] = pros * m[[i,1]] * n[[j,1]];
    apot[[ temp[[2]]+1, temp[[3]]+1, temp[[4]]+1 ]] =
      apot[[ temp[[2]]+1, temp[[3]]+1, temp[[4]]+1 ]] + temp[[1]]
  ];
ap=Table[{apot[[Quotient[i,16]+1,Quotient[Mod[i,16],4]+1,Mod[i,4]+1]],

Quotient[i,16], Quotient[Mod[i,16],4], Mod[i,4]}, {i,0,63}]

```

Το αποτέλεσμα προκύπτει στη μορφή των m και n , δηλαδή των λιστών εισόδου, όπου έχει όμως και τις 64 συνιστώσες, πολλές από τις οποίες θα είναι μηδέν.

3.4 Κώδικας για τη λύση των εξισώσεων αυτοσυνέπειας

Αναπτύξαμε σε Matlab ένα πρόγραμμα για τη λύση των εξισώσεων αυτοσυνέπειας στα προβλήματα που εξετάζονται σε αυτήν την εργασία. Ωστόσο,

πρόκειται για διαδικασία που μπορεί εύκολα να προσαρμοστεί σε οποιοδήποτε παρόμοιο πρόβλημα, αλλάζοντας απλά τις βασικές εξισώσεις, και ενδεχομένως μερικές σταθερές. Το πρόγραμμα είναι απλό, γιαυτό και παρατίθεται χωρίς πολλά σχόλια. Για επιτάχυνση των υπολογισμών, θεωρούμε ότι τα δυναμικά σκέδασης $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW}$, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW}$ εξαρτώνται από τη διαφορά $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$. Έτσι, οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας καταλήγουν να είναι ολοκληρώματα συνέλιξης, που μπορούν να υπολογιστούν με βάση τη γνωστή σχέση

$$f(\mathbf{x}) \otimes g(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\} \cdot \mathcal{F}\{g(\mathbf{x})\}\} \quad (3.22)$$

όπου για το μετασχηματισμό Fourier χρησιμοποιείται FFT. Η επιλογή του πλέγματος πρέπει να γίνει με τρόπο ώστε να μη μηδενίζεται κάποια ποσότητα που βρίσκεται στον παρανομαστή, ενώ και όταν θέλει κανείς να διερευνήσει μια περίπτωση όπου μια μεταβλητή εισόδου είναι μηδέν, είναι πιο σίγουρο να θέσει τη μεταβλητή αυτή ίση με μια μικρή πεπερασμένη τιμή. Ακολουθεί το πρόγραμμα που χρησιμοποιήσαμε, όπου οι σειρές που ξεκινούν με «%» είναι σχόλια:

```
%This function was created by George Roumpos on March 2004
%Calculates the mean values of the gaps for SDW and CDW
%
%The arguments must be vectors and they are:
%
%1st argument: temperature
%2nd argument: magnetic field
%3rd argument: constant t1 for \gamma_k
%4th argument: constant t2 for \delta_k
%
%Editing the source file, you can change the constants
%n: number of points at each axe
%vmc: value of the potential V_{k k'} for the SDW
%vwc: value of the potential V_{k k'} for the CDW
%steps: conversion constant (as a percentage of the current value)
%rmax: maximum number of iterations

% arithmos shmeiwn se kathe aksona
n = 32;

%eleghos ean oi metablhtes eisodou einai dianysmata
%kai eyresh ths diastashs toys
[dimt,dt] = size(t);
if dimt>1
    temp = sprintf('argument t must be a vector');
    disp(temp);
```

```

    return;
end

[dimt,df] = size(mh);
if dimt>1
    temp = sprintf('argument f must be a vector');
    disp(temp);
    return;
end

[dimt,dt1] = size(t1);
if dimt>1
    temp = sprintf('argument t1 must be a vector');
    disp(temp);
    return;
end

[dimt,dt2] = size(t2);
if dimt>1
    temp = sprintf('argument t2 must be a vector');
    disp(temp);
    return;
end

%Pinakes pou periexoun tis times twn kx, ky
kx = zeros(n,n);
for j = 1:n
    kx(j,:)= (j-(n+1)/2) * (2*pi/(n-1));
end

ky = zeros(n,n);
for l = 1:n
    ky(:,l)= (l-(n+1)/2) * (2*pi/(n-1));
end

%Ypologismos pinakwn gia ta dynamika skedashs
vmc = 2;
vm = zeros(n,n);
vm(:,:) = vmc;
% vm = vmc* exp( -(kx.^2 + ky.^2)/50 );
% figure; mesh(vm);

vwc = 2.2;
vw = zeros(n,n);

```

```

vw(:,:) = vwc;
% vw = vwc* exp( -(kx.^2 + ky.^2)/50 );
% figure; mesh(vw);

%Statheres sygklishs
tdeps = 1e-5;
rmax = 10000;

%Dhmiourgia twn pinakwn pou tha periexoun to apotelesma
apm1 = zeros(dt,df,dt1,dt2);
apw1 = zeros(dt,df,dt1,dt2);

warning off MATLAB:divideByZero;

%Arxikes times (random)
m = mean(mean(vm)) * rand(n,n,dt,df,dt1,dt2) ;
w = mean(mean(vw)) * rand(n,n,dt,df,dt1,dt2) ;

%FFTs twn dynamikwn skedashs
fvm = fftn(vm);
fvw = fftn(vw);

%-----
%Main program
%-----

for rt1 = 1:dt1
for rt2 = 1:dt2
    g = gamma(kx,ky,t1(rt1));
    % figure; meshc(g);
    d = delta(kx,ky,t2(rt2));
    % figure; meshc(d);

    for rf = 1:df
    for rt = 1:dt

        for r = 1:rmax

%Pinakes pou periexoun tis times twn polwn e11, e12, e21, e22
x_1 = w(:,:,rt,rf,rt1,rt2) + m(:,:,rt,rf,rt1,rt2);
x_2 = w(:,:,rt,rf,rt1,rt2) - m(:,:,rt,rf,rt1,rt2);
x1 = sqrt(g.^2 + x_1(:,:).^2);
x2 = sqrt(g.^2 + x_2(:,:).^2);

```

```

x3 = d + mh(rf);
x4 = d - mh(rf);
e11 = x1 + x3;
e12 = x2 + x4;
e21 = x1 - x3;
e22 = x2 - x4;

temp1 = tanh(e11(:, :)/(2*t(rt))) + tanh(e21(:, :)/(2*t(rt)));
temp2 = tanh(e12(:, :)/(2*t(rt))) + tanh(e22(:, :)/(2*t(rt)));
fm = fftn((x_1(:, :)./(8*x1(:, :))).*temp1-(x_2(:, :)./(8*x2(:, :))).*temp2);
fw = fftn((x_1(:, :)./(8*x1(:, :))).*temp1+(x_2(:, :)./(8*x2(:, :))).*temp2);

%0i nees times gia ta xasmata
m1 = n^-2 * ifftn( fvm .* fm );
w1 = n^-2 * ifftn( fvw .* fw );

%elegxos sygklishs kai apothikeish twn newn timwn
if (abs(m(:,:,rt,rf,rt1,rt2) - m1) <= teps*abs(m(:,:,rt,rf,rt1,rt2))) &
    (abs(w(:,:,rt,rf,rt1,rt2) - w1) <= teps*abs(w(:,:,rt,rf,rt1,rt2)))
    m(:,:,rt,rf,rt1,rt2) = m1;
    w(:,:,rt,rf,rt1,rt2) = w1;
    temp = sprintf('finished normally after %u iterations', r);
    disp(temp);
    break;
elseif r == rmax
    temp = sprintf('unable to converge for t = %e, f = %e, t1 = %e,
        t2 = %e', t(rt), mh(rf), t1(rt1), t2(rt2));
    disp(temp);
    m(:,:,rt,rf,rt1,rt2) = m1;
    w(:,:,rt,rf,rt1,rt2) = w1;
else
    m(:,:,rt,rf,rt1,rt2) = m1;
    w(:,:,rt,rf,rt1,rt2) = w1;
% temp = sprintf('iteration no %u ', r);
% disp(temp);
end
end

% [x,y] = meshgrid(1:n);
% figure; meshc(m);
% figure; contour(x,y,dq);
% figure; meshc(w);
% figure; contour(x,y,w);
% figure; meshc(x,y,f);

```

```

% figure; contour(x,y,f);

apm1(rt,rf,rt1,rt2) = mean(mean(m(:,:,rt,rf,rt1,rt2)));
apw1(rt,rf,rt1,rt2) = mean(mean(w(:,:,rt,rf,rt1,rt2)));
end
end
end
end

%reshape toy apotelesmatos, wste na dinei to swsto pinaka h dianysma
if dt == 1
    if df == 1
        if dt1 == 1
            apm = apm1(:);
            apw = apw1(:);
        else
            apm = reshape(apm1,dt1,dt2);
            apw = reshape(apw1,dt1,dt2);
        end
    else
        if dt1 == 1
            apm = reshape(apm1,df,dt2);
            apw = reshape(apw1,df,dt2);
        else
            apm = reshape(apm1,df,dt1,dt2);
            apw = reshape(apw1,df,dt1,dt2);
        end
    end
else
    if df == 1
        if dt1 == 1
            apm = reshape(apm1,dt,dt2);
            apw = reshape(apw1,dt,dt2);
        else
            apm = reshape(apm1,dt,dt1,dt2);
            apw = reshape(apw1,dt,dt1,dt2);
        end
    else
        if dt1 == 1
            apm = reshape(apm1,dt,df,dt2);
            apw = reshape(apw1,dt,df,dt2);
        else
            apm = apm1;
            apw = apw1;
        end
    end
end

```

```
    end
  end
end

%synarthseis gia ta \gamma_k \delta_k
function ap1 = gamma(kx,ky,t1);
ap1 = t1* ( cos(kx) + cos(ky) );
return

function ap2 = delta(kx,ky,t2)
ap2 = t2* cos(kx) .* cos(ky);
return
```

Κεφάλαιο 4

Συνύπαρξη SDW με CDW, παρουσία μαγνητικού πεδίου παράλληλου στην πόλωση του SDW

Με βάση το φορμαλισμό του Κεφαλαίου 2, μελετήσαμε το πρόβλημα της συνύπαρξης SDW με CDW, όπου ως διεύθυνση πόλωσης του SDW θεωρήσαμε τον άξονα z . Αυτή είναι δηλαδή η δεινόθυνση της προβολής των σπιν. Παρουσία μαγνητικού πεδίου κατά τον ίδιο άξονα, εμφανίζονται ενδιαφέρουσες μεταβάσεις από την κατάσταση ήπαρξης μιας μόνο φάσης, στη συνύπαρξη των δύο φάσεων. Μερικά αντιπροσωπευτικά αριθμητικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στο τέλος του κεφαλαίου.

Η χαμιλτονιανή σε αυτήν τη γενική περίπτωση γράφεται στη μορφή¹:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} (\gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 - W_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 + \mu_B H \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3) \zeta_{\mathbf{k}} \quad (4.1)$$

όπου $M_{\mathbf{k}}$ η παράμετρος τάξης για το SDW και $W_{\mathbf{k}}$ η παράμετρος τάξης για το CDW. Η αντίστοιχη συνάρτηση Green είναι η:

$$\begin{aligned} \widehat{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 - W_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 + \mu_B H \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3} = \\ &= (-i\omega_n - \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 + M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 + W_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 + \mu_B H \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3) \\ &\quad \left[A_P(\mathbf{k}, i\omega_n) + 2(\delta_{\mathbf{k}} \mu_B H - M_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}}) \hat{\sigma}_3 + 2i\delta_{\mathbf{k}} \omega_n \hat{\rho}_3 - 2i\mu_B H \omega_n \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \right] \\ &\quad \left\{ B_P(\mathbf{k}, i\omega_n) - 4i\omega_n \left[\delta_{\mathbf{k}} \left[A_P(\mathbf{k}, i\omega_n) + 2\mu_B^2 H^2 \right] - 2M_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}} \mu_B H \right] \hat{\rho}_3 \right\} \end{aligned}$$

¹Τα πρόσημα στην εξίσωση αυτή επελέγησαν έτσι ώστε να έχουμε τη σχέση αυτοσυνέπειας (2.30) με θετικό πρόσημο για όλες τις παραμέτρους τάξης

$$\times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k})][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k})][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k})][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k})] \right]^{-1} \quad (4.2)$$

$\mu \varepsilon$

$$\begin{cases} E_{+\pm}(\mathbf{k}) = \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W_{\mathbf{k}} \pm M_{\mathbf{k}})^2} + (\delta_{\mathbf{k}} \pm \mu_B H) \\ E_{-\pm}(\mathbf{k}) = \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W_{\mathbf{k}} \pm M_{\mathbf{k}})^2} - (\delta_{\mathbf{k}} \pm \mu_B H) \end{cases} \quad (4.3)$$

$\chi \alpha \iota$

$$A_P(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\delta_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2 + M_{\mathbf{k}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2 - \mu_B^2 H^2 + \omega_n^2 \quad (4.4)$$

$$B_P(\mathbf{k}, i\omega_n) = A_P^2(\mathbf{k}, i\omega_n) + 4\omega_n^2 (\mu_B^2 H^2 - \delta_{\mathbf{k}}^2) - 4(\delta_{\mathbf{k}} \mu_B H - M_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}})^2 \quad (4.5)$$

Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας για τα $M_{\mathbf{k}}$, $W_{\mathbf{k}}$ παρίστανται με την μορφή:

$$W_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW} \left\{ B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) \left[W_{\mathbf{k}'} \left[A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) - 2M_{\mathbf{k}'}^2 \right] + 2\delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} \mu_B H \right] + \right. \\ \left. + 8\omega_n^2 (-M_{\mathbf{k}'} \mu_B H + \delta_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'}) \left[\delta_{\mathbf{k}'} \left[A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2\mu_B^2 H^2 \right] - 2M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} \mu_B H \right] \right\} \\ \times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}')]\right]^{-1} \quad (4.6)$$

$$M_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW} \left\{ B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) \left[M_{\mathbf{k}'} \left[A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) - 2W_{\mathbf{k}'}^2 \right] + 2\delta_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} \mu_B H \right] + \right. \\ \left. + 8\omega_n^2 (-W_{\mathbf{k}'} \mu_B H + \delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'}) \left[\delta_{\mathbf{k}'} \left[A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2\mu_B^2 H^2 \right] - 2M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} \mu_B H \right] \right\} \\ \times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}')]\right]^{-1} \quad (4.7)$$

Η, αθροίζοντας στα ω_n σύμφωνα με την τεχνική του Παραρτήματος Δ' :

$$W_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW} \left\{ \frac{M_{\mathbf{k}'} + W_{\mathbf{k}'}}{8\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + (M_{\mathbf{k}'} + W_{\mathbf{k}'})^2}} \sum_{\pm} \tanh \left(\frac{E_{\pm+}(\mathbf{k}')}{2T} \right) + \right. \\ \left. \frac{W_{\mathbf{k}'} - M_{\mathbf{k}'}}{8\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + (M_{\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}'})^2}} \sum_{\pm} \tanh \left(\frac{E_{\pm-}(\mathbf{k}')}{2T} \right) \right\} \quad (4.8)$$

$$M_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW} \left\{ \frac{M_{\mathbf{k}'} + W_{\mathbf{k}'}}{8\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + (M_{\mathbf{k}'} + W_{\mathbf{k}'})^2}} \sum_{\pm} \tanh \left(\frac{E_{\pm+}(\mathbf{k}')}{2T} \right) + \right. \\ \left. \frac{M_{\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}'}}{8\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + (M_{\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}'})^2}} \sum_{\pm} \tanh \left(\frac{E_{\pm-}(\mathbf{k}')}{2T} \right) \right\} \quad (4.9)$$

Οι εξισώσεις (4.6) και (4.7), με κατάλληλη αναδιάταξη των όρων, και θεωρώντας μια σιδηρομαγνητική παράμετρο τάξης $F_{\mathbf{k}}$, αντί για το σταθερό μαγνητικό πεδίο $\mu_B H$, γράφονται:

$$W_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW} \left\{ W_{\mathbf{k}'} \left\{ B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) - 2M_{\mathbf{k}'}^2] + 8\omega_n^2 \delta_{\mathbf{k}'} \right. \right. \\ \left. \left[\delta_{\mathbf{k}'} [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2F_{\mathbf{k}'}^2] - 2M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} \right] + 16\omega_n^2 M_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} (M_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} - \delta_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'}) \right\} + \\ \left. + 2\delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} \left[B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) - 4\omega_n^2 [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2F_{\mathbf{k}'}^2] \right] \right\} \\ \times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}')]\right]^{-1} \quad (4.10)$$

$$M_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW} \left\{ M_{\mathbf{k}'} \left\{ B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) - 2W_{\mathbf{k}'}^2] + 8\omega_n^2 \delta_{\mathbf{k}'} \right. \right. \\ \left. \left[\delta_{\mathbf{k}'} [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2F_{\mathbf{k}'}^2] - 2M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} \right] + 16\omega_n^2 W_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} - \delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'}) \right\} + \\ \left. + 2\delta_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} \left[B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) - 4\omega_n^2 [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2F_{\mathbf{k}'}^2] \right] \right\} \\ \times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}')]\right]^{-1} \quad (4.11)$$

$$F_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FER} \left\{ F_{\mathbf{k}'} \left\{ B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2\delta_{\mathbf{k}'}^2 - 2\omega_n^2] - 8\omega_n^2 \delta_{\mathbf{k}'} \right. \right. \\ \left. \left[\delta_{\mathbf{k}'} [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2F_{\mathbf{k}'}^2] - 2M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} \right] + 16\omega_n^2 M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} (\delta_{\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}'} - M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'}) \right\} - \\ \left. - 2\delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'} \left[B_P(\mathbf{k}', i\omega_n) - 4\omega_n^2 [A_P(\mathbf{k}', i\omega_n) + 2F_{\mathbf{k}'}^2] \right] \right\} \\ \times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}')]\right]^{-1} \quad (4.12)$$

Παρατηρούμε ότι στην παραπάνω μορφή των εξισώσεων αυτοσυνέπειας για κάθε παράμετρο τάξης στο άρθροισμα εμφανίζονται δύο όροι. Ο πρώτος είναι ανάλογος της αντίστοιχης παραμέτρου, ενώ ο δεύτερος είναι ανάλογος του $\delta_{\mathbf{k}}$ και των άλλων δύο παραμέτρων. Αυτό σημαίνει ότι παρουσία του όρου $\delta_{\mathbf{k}}$ (ο οποίος υπάρχει πρακτικά σε όλα τα υλικά), η συνύπαρξη δύο φάσεων από αυτές τις τρεις γεννάει και την τρίτη. Αυτό διότι ο δεύτερος όρος των παραπάνω εξισώσεων θα είναι εν γένει μη μηδενικός, οπότε θα δίνει μια συνεισφορά στην αντίστοιχη παράμετρο τάξης². Έχουμε ήδη αναπτύξει στην παράγραφο (3.2)

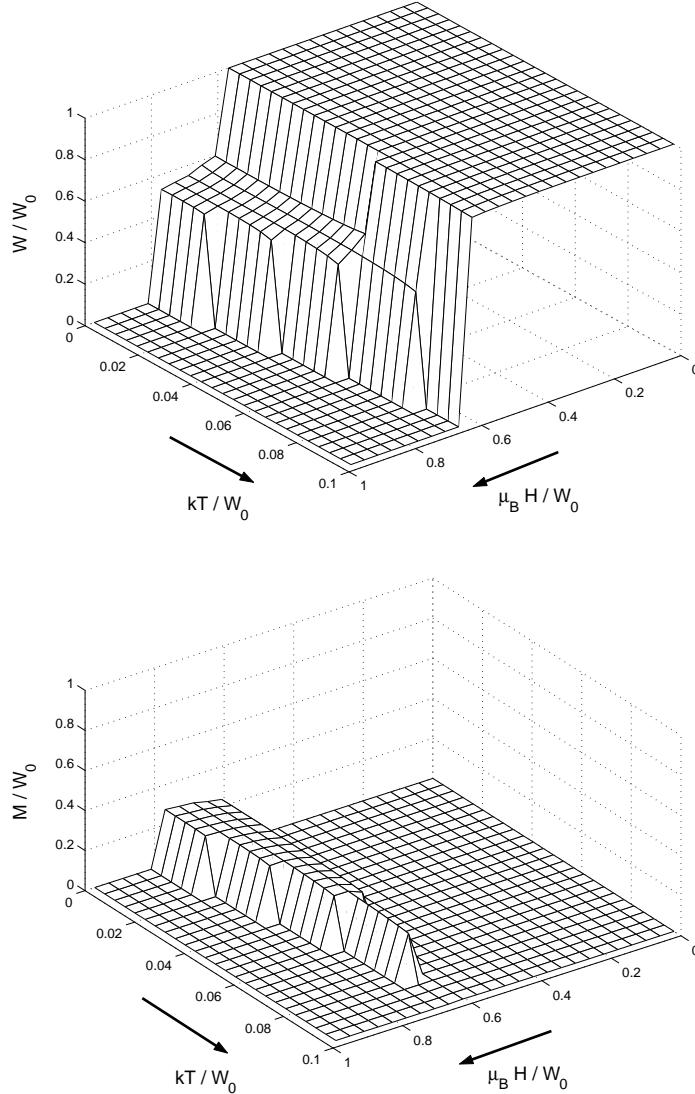
²Η ιδιότητα αυτή είναι φυσικά παρούσα και στις εξισώσεις (4.8) και (4.9), είναι ωστόσο χρυσμένη στα ορίσματα των υπερβολικών εφαπτομένων.

ένα γενικό κριτήριο για τον εντοπισμό τέτοιων ομάδων από φάσεις που δεν μπορούν να υφίστανται χωριστά. Στα αποτελέσματα που παρουσιάζουμε παραχάτω, η ύπαρξη του όρου $\delta_{\mathbf{k}}$ ενισχύει τη συνύπαρξη των φάσεων που μελετάμε, φαίνεται όμως να μην είναι ο αποκλειστικός υπεύθυνος για αυτή τη συνύπαρξη.

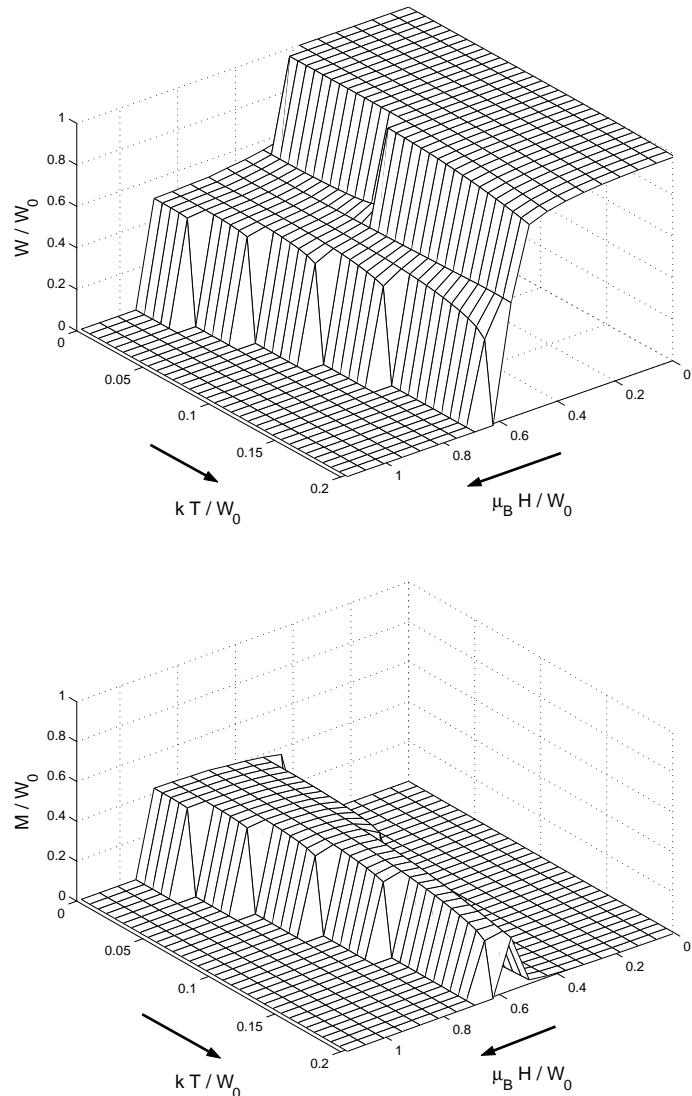
Παρατηρούμε ότι οι εξισώσεις (4.8) και (4.9) είναι απολύτως συμμετρικές ως προς τα $W_{\mathbf{k}}$, $M_{\mathbf{k}}$. Αυτό σημαίνει ότι η πρακτικά η μόνη διαφοροποίηση ανάμεσα στις δύο φάσεις είναι σε σχέση με το δυναμικό $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW}$, ή $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW}$ που τις γεννά. Στην αριθμητική διερεύνηση των εξισώσεων αυτών χρησιμοποιήσαμε δυναμικά που δεν εξαρτώνται από τα \mathbf{k} , \mathbf{k}' , όπως περιμένει κανείς και διαισθητικά από το σχήμα 2.1. Επομένως, θα παίζει ρόλο μόνο η (σταθερή) τιμή του ενός σε σχέση με την τιμή του άλλου. Κοντά στη μηδενική θερμοκρασία, τα ορίσματα των υπερβολικών εφαπτομένων στις (4.8), (4.9) θα είναι $\pm\infty$, επομένως αυτές θα παίρνουν τις τιμές ± 1 . Με βάση αυτό το σκεπτικό, κανείς μπορεί να κάνει μια διερεύνηση για τη μηδενική θερμοκρασία.

Στα σχήματα που ακολουθούν, χρησιμοποιώντας το μοντέλο του ισχυρού δεσμού της Παραγάφου 2.5, λύσαμε τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας (4.8), (4.9) για μια περιοχή θερμοκρασιών και μαγνητικών πεδίων, διαφοροποιώντας το λόγο $\frac{V_{SDW}^{CDW}}{V_{SDW}^{SDW}}$ και $\frac{\beta_1}{2\beta_2}$ της (2.79). Επίσης, επελέγη $\frac{2V_{SDW}^{SDW}}{\beta_1} = 2$, ωστόσο η τιμή αυτού του λόγου δεν επηρεάζει σημαντικά τα αποτελέσματα. Γενικά, όσο μεγαλύτερος είναι αυτός ο λόγος, τόσο μεγαλώνει η περιοχή όπου υφίστανται οι φάσεις SDW και CDW, αφού γίνονται έτσι περισσότερο σημαντικές από τα υπόλοιπα φαινόμενα που μπορεί να συμβαίνουν στο πλέγμα και είναι ενσωματωμένα στη σχέση διασποράς. Τα διαγράμματα που χαράσσονται παριστάνουν τη μέση τιμή των ενεργειών $W_{\mathbf{k}}$, $M_{\mathbf{k}}$ στη ζώνη Brillouin, κανονικοποιημένη ως προς τη μέγιστη τιμή W_0 , που εμφανίζεται σε αυτήν την περιοχή (συγκεκριμένα για μηδενική θερμοκρασία και μαγνητικό πεδίο).

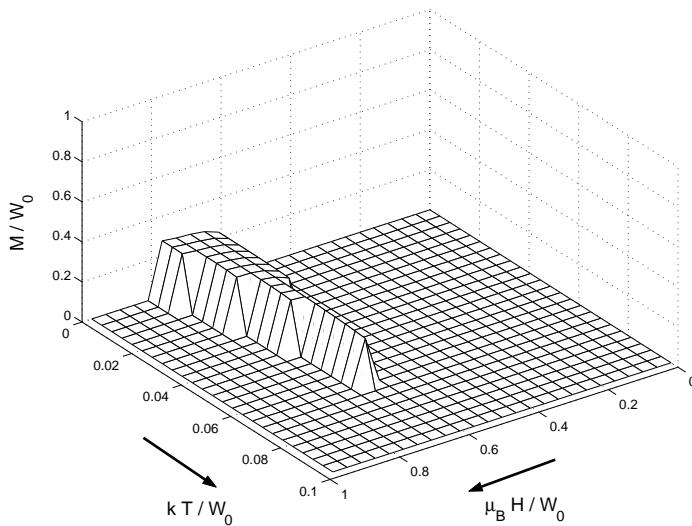
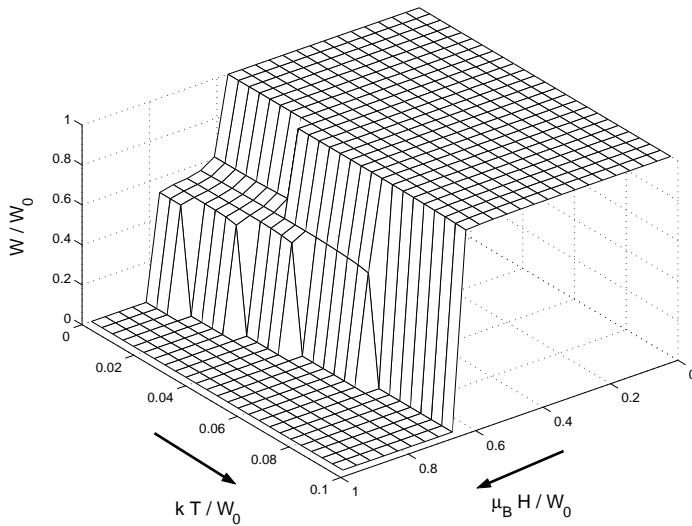
Παρατηρούμε σε όλα τα σχήματα μια περιοχή συνύπαρξης των δύο φάσεων για χαμηλές θερμοκρασίες και μεγάλα μαγνητικά πεδία. Το μαγνητικό πεδίο, δηλαδή, είναι αυτό που γεννά τη δεύτερη φάση μέσα στην πρώτη, εάν η θερμοκρασία είναι αρκούντως χαμηλή. Όπως είναι φυσικό, η μείωση του λόγου $\frac{V_{SDW}^{CDW}}{V_{SDW}^{SDW}}$ μεγαλώνει την περιοχή συνύπαρξης, αφού έτσι γίνεται εξίσου σημαντική και η δεύτερη φάση. Επίσης, η αύξηση του λόγου $\frac{\beta_1}{2\beta_2}$ μικραίνει την περιοχή συνύπαρξης, σε συμφωνία με την παρατήρηση αμέσως μετά την εξίσωση (4.12).



Σχήμα 4.1: Κανονικοποιημένα χάσματα των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν (charge density wave-CDW, spin density wave-SDW) για την περίπτωση $\frac{V^{CDW}}{V^{SDW}} = \frac{3}{2}$ και $\frac{\beta_1}{2\beta_2} = 10$, όπου τα V^{CDW} , V^{SDW} είναι τα δυναμικά σκέδασης για τα CDW, SDW, ενώ οι σταθερές β_1 , β_2 επεξηγούνται στην εξίσωση (2.79). Στην πρώτη εικόνα παρουσιάζεται το χάσμα για το CDW W , όπου έχουμε θεωρήσει τη μέση τιμή στη ζώνη Brillouin. Στον άξονα x είναι το παράλληλο μαγνητικό πεδίο, ενώ στον άξονα y είναι η απόλυτη θερμοκρασία. Όλες οι ενέργειες έχουν κανονικοποιηθεί με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 . Στη δεύτερη εικόνα είναι μέση τιμή στη ζώνη Brillouin του χάσματος για το SDW, κανονικοποιημένη με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 .



Σχήμα 4.2: Κανονικοποιημένα χάσματα των CDW, SDW για την περίπτωση $\frac{V^{CDW}}{V^{SDW}} = \frac{11}{10}$ και $\frac{\beta_1}{2\beta_2} = 10$, όπου τα V^{CDW}, V^{SDW} είναι τα δυναμικά σκέδασης για τα CDW, SDW, ενώ οι σταθερές β_1, β_2 επεξηγούνται στην εξίσωση (2.79). Στην πρώτη εικόνα παρουσιάζεται το χάσμα για το CDW W , όπου έχουμε θεωρήσει τη μέση τιμή στη ζώνη Brillouin. Στον άξονα x είναι το παράλληλο μαγνητικό πεδίο, ενώ στον άξονα y είναι η απόλυτη θερμοκρασία. Όλες οι ενέργειες έχουν κανονικοποιηθεί με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 . Στη δεύτερη εικόνα είναι μέση τιμή στη ζώνη Brillouin του χάσματος για το SDW, κανονικοποιημένη με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 .



Σχήμα 4.3: Κανονικοποιημένα χάσματα των CDW, SDW για την περίπτωση $\frac{V^{CDW}}{V^{SDW}} = \frac{3}{2}$ και $\frac{\beta_1}{2\beta_2} = 100$, όπου τα V^{CDW}, V^{SDW} είναι τα δυναμικά σκέδασης για τα CDW, SDW, ενώ οι σταθερές β_1, β_2 επεξηγούνται στην εξίσωση (2.79). Στην πρώτη εικόνα παρουσιάζεται το χάσμα για το CDW W , όπου έχουμε θεωρήσει τη μέση τιμή στη ζώνη Brillouin. Στον άξονα x είναι το παράλληλο μαγνητικό πεδίο, ενώ στον άξονα y είναι η απόλυτη ωρμοκρασία. Όλες οι ενέργειες έχουν κανονικοποιηθεί με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 . Στη δεύτερη εικόνα είναι μέση τιμή στη ζώνη Brillouin του χάσματος για το SDW, κανονικοποιημένη με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 .

Κεφάλαιο 5

Συνύπαρξη SDW με CDW, παρουσία μαγνητικού πεδίου κάθετου στην πόλωση του SDW

Μελετήσαμε και αυτήν την περίπτωση συνύπαρξης, ωστόσο εδώ δεν παρατηρήσαμε ανάλογες διαδικασίες μετάπτωσης από την κατάσταση ύπαρξης μιας φάσης στη συνύπαρξη και των δύο. Η χαμιλτονιανή τώρα γράφεται:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}}^{\dagger} (\gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 - W_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 + \mu_B H \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1) \zeta_{\mathbf{k}} \quad (5.1)$$

οπότε η αντίστοιχη συνάρτηση Green παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} \hat{G}_o(\mathbf{k}, i\omega_n) &= (-i\omega_n - \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 + M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 + W_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 - \mu_B H \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1) \\ &\quad \left[A_Q(\mathbf{k}, i\omega_n) - 2M_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_3 + 2i\delta_{\mathbf{k}} \omega_n \hat{\rho}_3 + 2W_{\mathbf{k}} \mu_B H \hat{\tau}_1 \hat{\sigma}_1 - 2\gamma_{\mathbf{k}} \mu_B H \hat{\tau}_3 \hat{\sigma}_3 \right] \\ &\quad \left[B_Q(\mathbf{k}, i\omega_n) - 4i\delta_{\mathbf{k}} \omega_n A_Q(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{\rho}_3 \right] \\ &\times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k})][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k})][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k})][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k})] \right]^{-1} \end{aligned} \quad (5.2)$$

όπου

$$A_Q(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\delta_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2 + M_{\mathbf{k}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2 + \mu_B^2 H^2 + \omega_n^2 \quad (5.3)$$

$$B_Q(\mathbf{k}, i\omega_n) = A_Q^2(\mathbf{k}, i\omega_n) - 4 \left(\gamma_{\mathbf{k}}^2 \mu_B^2 H^2 + M_{\mathbf{k}}^2 W_{\mathbf{k}}^2 + \mu_B^2 H^2 W_{\mathbf{k}}^2 + \delta_{\mathbf{k}}^2 \omega_n^2 \right) \quad (5.4)$$

Οι πόλοι της συνάρτησης Green εμφανίζονται στις ενέργειες:

$$E_{\pm\pm}(\mathbf{k}) = \sqrt{\left[\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2 \left(1 + \frac{M_{\mathbf{k}}^2}{\mu_B^2 H^2} \right)} \pm \mu_B H \right]^2 + M_{\mathbf{k}}^2 \left(1 - \frac{W_{\mathbf{k}}^2}{\mu_B^2 H^2} \right)} \pm \delta_{\mathbf{k}} \quad (5.5)$$

Εύκολα δείχνει κανείς ότι η ποσότητα στο ριζικό της παραπάνω εξισώσης είναι θετική. Πράγματι, ισοδύναμα έχουμε:

$$E_{\pm\pm}(\mathbf{k}) = \sqrt{\left[\sqrt{M_{\mathbf{k}}^2 + \mu_B^2 H^2 \left(1 + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^2}{W_{\mathbf{k}}^2} \right)} \pm W_{\mathbf{k}} \right]^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2 \left(1 - \frac{\mu_B^2 H^2}{W_{\mathbf{k}}^2} \right)} \pm \delta_{\mathbf{k}} \quad (5.6)$$

Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας για τις παραμέτρους $W_{\mathbf{k}}$, $M_{\mathbf{k}}$ παίρνουν τη μορφή:

$$W_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW} W_{\mathbf{k}'} \left[B_Q(\mathbf{k}', i\omega_n) \left[A_Q(\mathbf{k}', i\omega_n) - 2(M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2) \right] + + 8\delta_{\mathbf{k}'}^2 \omega_n^2 A_Q(\mathbf{k}', i\omega_n) \right] \times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}')] \right]^{-1} \quad (5.7)$$

$$M_{\mathbf{k}} = T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW} M_{\mathbf{k}'} \left[B_Q(\mathbf{k}', i\omega_n) \left[A_Q(\mathbf{k}', i\omega_n) - 2W_{\mathbf{k}'}^2 \right] + 8\delta_{\mathbf{k}'}^2 \omega_n^2 A_Q(\mathbf{k}', i\omega_n) \right] \times \left[[\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')][\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}')] \right]^{-1} \quad (5.8)$$

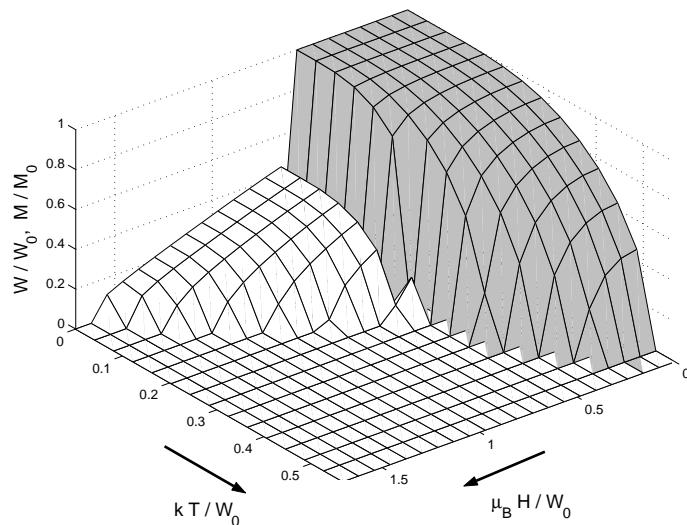
$\dot{\eta}$

$$W_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{CDW} \frac{W_{\mathbf{k}'}}{8\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}} \\ \times \left\{ \frac{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2 + W_{\mathbf{k}'}^2 + 2\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}}} \sum_{\pm} \tanh \left(\frac{E_{\pm\pm}(\mathbf{k}')}{2T} \right) \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2 + W_{\mathbf{k}'}^2 - 2\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}}} \sum_{\pm} \tanh \left(\frac{E_{-\pm}(\mathbf{k}')}{2T} \right) \right\} \quad (5.9)$$

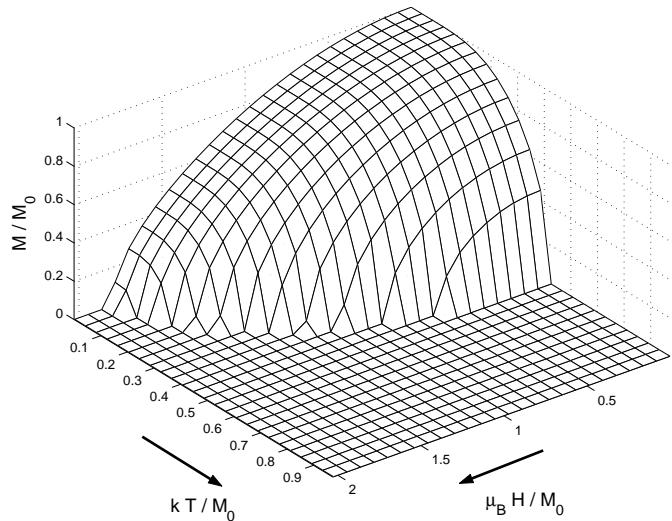
$$M_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW} \frac{M_{\mathbf{k}'}}{8\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}} \\ \times \left\{ \frac{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2 + W_{\mathbf{k}'}^2 + 2\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2} W_{\mathbf{k}'}}} \sum_{\pm} \tanh \left(\frac{E_{\pm\pm}(\mathbf{k}')}{2T} \right) \right.$$

$$+ \frac{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2 W_{\mathbf{k}'}^2} - W_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2 + W_{\mathbf{k}'}^2} - 2\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 H^2 + (M_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2)^2 W_{\mathbf{k}'}^2}} \sum_{\pm} \tanh\left(\frac{E_{-\pm}(\mathbf{k}')}{2T}\right) \quad (5.10)$$

Σε αυτήν την περίπτωση, οι λύσεις $W_{\mathbf{k}} = 0$, $\forall \mathbf{k}$ και $M_{\mathbf{k}} = 0$, $\forall \mathbf{k}$ είναι πάντα επιτρπτές, ανεξάρτητα από την ύπαρξη ή όχι της άλλης φάσης. Επίσης, οι εξισώσεις δεν είναι τώρα μη συμμετρικές ως προς $W_{\mathbf{k}}$, $M_{\mathbf{k}}$, οπότε παρακάτω διερευνούμε αριθμητικά την περίπτωση επικρατούντος CDW, καθώς και επικρατούντος SDW.



Σχήμα 5.1: Κανονικοποιημένα χάσματα των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν (charge density wave-CDW, spin density wave-SDW) για την περίπτωση επικρατούντος CDW, με $\frac{V^{CDW}}{V^{SDW}} = \frac{3}{2}$ και $\frac{\beta_1}{2\beta_2} = 10$, όπου τα V^{CDW} , V^{SDW} είναι τα δυναμικά σκέδασης για τα CDW, SDW, ενώ οι σταθερές β_1 , β_2 επεξηγούνται στην εξίσωση (2.79). Με γκρίζο παρουσιάζεται το χάσμα για το CDW W , όπου έχουμε θεωρήσει τη μέση τιμή στη ζώνη Brillouin. Στον άξονα x είναι το κάθετο μαγνητικό πεδίο, ενώ στον άξονα y είναι η απόλυτη θερμοκρασία. Όλες οι ενέργειες έχουν κανονικοποιηθεί με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 . Με λευκό είναι μέση τιμή στη ζώνη Brillouin του χάσματος για το SDW, κανονικοποιημένη με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το CDW W_0 .



Σχήμα 5.2: Κανονικοποιημένα χάσματα των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν (charge density wave-CDW, spin density wave-SDW) για την περίπτωση επικρατούντος SDW, με $\frac{V^{CDW}}{V^{SDW}} = \frac{2}{3}$ και $\frac{\beta_1}{2\beta_2} = 10$, όπου τα V^{CDW} , V^{SDW} είναι τα δυναμικά σκέδασης για τα CDW, SDW, ενώ οι σταθερές β_1 , β_2 επεξηγούνται στην εξίσωση (2.79). Παρουσιάζεται το χάσμα για το SDW M , όπου έχουμε θεωρήσει τη μέση τιμή στη ζώνη Brillouin. Στον άξονα x είναι το κάθετο μαγνητικό πεδίο, ενώ στον άξονα y είναι η απόλυτη θερμοκρασία. Όλες οι ενέργειες έχουν κανονικοποιηθεί με τη μέγιστη τιμή του χάσματος για το SDW M_0 . Παρατηρούμε ότι CDW δεν εμφανίζεται σε αυτήν την περίπτωση.

Παράρτημα Α'

Μαθηματικός ορισμός της συνάρτησης Green μηδενικής θερμοκρασίας

Στο παράρτημα αυτό θα χρησιμοποιήσουμε τους λεγόμενους τελεστές πεδίου, οι οποίοι είναι γραμμικοί συνδυασμοί των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\mathbf{k}) &\equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x}) c_k \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{k}) &\equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x}) c_k^\dagger\end{aligned}\quad (\text{A}'1)$$

Οι τελεστές αυτοί δημιουργούν (ή καταστρέψουν) ένα σωματίδιο στη θέση \mathbf{x} , ενώ οι τελεστές c_k^\dagger , c_k δημιουργούν (ή καταστρέψουν) ένα σωματίδιο στην ιδιοκατάσταση k . Για σπιν- $\frac{1}{2}$ φερμιόνια, οι τελεστές πεδίου έχουν δύο συνιστώσες

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \psi_k(\mathbf{x})_1 \\ \psi_k(\mathbf{x})_2 \end{bmatrix} \equiv \psi_k(\mathbf{x})_\alpha \quad (\text{A}'2)$$

Οι τελεστές πεδίου υπακούουν απλές σχέσεις μετάθεσης ή αντιμετάθεσης, ανάλογα με το αν πρόκειται για φερμιόνια ή μποζόνια:

$$[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')]_\mp = \sum_k \psi_k(\mathbf{x})_\alpha \psi_k(\mathbf{x}')^*_\beta = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (\text{A}'3)$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}')]_\mp = [\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')]_\mp = 0 \quad (\text{A}'4)$$

όπου το επάνω (κάτω) πρόσημο αναφέρεται σε μποζόνια (φερμιόνια).

Η συνάρτηση Green μηδενικής θερμοκρασίας για ένα σωματίδιο ορίζεται ως:

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{\langle \Psi_0 | T[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (\text{A}'5)$$

όπου $|\Psi_0\rangle$ είναι η θεμελιώδης κατάσταση στην εικόνα Heisenberg¹ του αλληλεπιδρώντος συστήματος, δηλαδή

$$\hat{H}|\Psi_0\rangle = E|\Psi_0\rangle \quad (\text{A'.6})$$

και $\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)$ είναι ένας τελεστής Heisenberg (που έχει επάνω του τη χρονική εξάρτηση):

$$\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (\text{A'.7})$$

Τέλος, το γινόμενο T ορίζεται ως:

$$T[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] = \begin{cases} \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t'), & t > t' \\ \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}t), & t < t' \end{cases} \quad (\text{A'.8})$$

όπου το επάνω (κάτω) πρόσημο αναφέρεται σε μποζόνια (φερμιόνια). Γενικότερα, το γινόμενο T περισσότερων τελεστών τους ταξινομεί σε αύξουσα σειρά χρόνου (δηλαδή οι μικρότεροι χρόνοι στα δεξιά), και προσθέτει έναν παράγοντα $(-1)^P$, όπου P είναι ο αριθμός των εναλλαγών φερμιονικών τελεστών από την αρχική σειρά.

Από τον ορισμό (A'.5), γίνεται φανερό και το φυσικό νόημα της συνάρτησης Green, που είχε χρησιμοποιηθεί ως ορισμός στην παράγραφο 1.3. Πράγματι, αν υποθέσουμε ότι $t > t'$, τότε η (A'.5) γράφεται:

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{\langle \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) e^{-iHt/\hbar} |\Psi_0 | e^{-iH(t-t')/\hbar} \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') e^{-iHt'/\hbar} |\Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (\text{A'.9})$$

Δηλαδή η θεμελιώδης κατάσταση εξελίσσεται μέχρι το χρόνο t' , λόγω του τελεστή χρονικής εξέλιξης $e^{-iHt'/\hbar}$. Κατόπιν, προσθέτουμε ένα σωματίδιο στο σημείο x' και η νέα κατάσταση εξελίσσεται μέχρι το χρόνο t . Για να βρούμε το ζητούμενο πλάτος πιθανότητας, παίρνουμε το εσωτερικό γινόμενο της κυματοσυνάρτησης αυτής με την κατάσταση στην οποία ένα σωματίδιο έχει προστεθεί στη θεμελιώδη κατάσταση στο σημείο x κατά τη χρονική στιγμή t .

Μάλιστα, αν η χαμιλτονιανή είναι χρονοανεξάρτητη, τότε κανείς βλέπει εύκολα ότι η πιο πάνω σχέση γράφεται:

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = e^{iE_0(t-t')/\hbar} \frac{\langle \Psi_0 | \psi_\alpha(\mathbf{x}) e^{-iH(t-t')/\hbar} \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (\text{A'.10})$$

όπου E_0 η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης. Παρατηρούμε ότι σε αυτήν την περίπτωση η συνάρτηση Green εξαρτάται από τι διαφορά $t - t'$.

¹ Θυμίζουμε ότι στην εικόνα Heisenberg οι κυματοσυναρτήσεις είναι χρονοανεξάρτητες, ενώ η χρονική εξάρτηση έχει μεταφερθεί εξολοκλήρου στους τελεστές

Παράρτημα Β'

Μαθηματικός ορισμός της συνάρτησης Green πεπερασμένης θερμοκρασίας και ιδιότητα περιοδικότητας αυτής

Για συντομία συμβολισμού, ορίζουμε αρχικά τον τελεστή

$$K = H - \mu N \quad (\text{B'.1})$$

οπότε τώρα η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού, καθώς και η μεγαλοκανονική συνάρτηση κατανομής γράφονται ως:

$$Z_G = \text{tr} e^{-\beta K} \quad (\text{B'.2})$$

$$\rho_G = e^{-\beta K} \quad (\text{B'.3})$$

Βλέπουμε ότι ο τελεστής (B'.1) μπορεί να θεωρηθεί ως μια μεγαλοκανονική χαμιλτονιανή. Στη συνέχεια, ορίζουμε την τροποποιημένη εικόνα Heisenberg:

$$\mathcal{O}_K(\mathbf{x}\tau) \equiv e^{K\tau/\hbar} \mathcal{O}(\mathbf{x}) e^{-K\tau/\hbar} \quad (\text{B'.4})$$

όπου ο αρχικός τελεστής $\mathcal{O}(\mathbf{x})$ είναι τελεστής Schrödinger. Έτσι, οι τελεστές πεδίου παίρνουν τώρα τη μορφή:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) &= e^{K\tau/\hbar} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) e^{-K\tau/\hbar} \\ \hat{\psi}_{K\alpha}^\dagger(\mathbf{x}\tau) &= e^{K\tau/\hbar} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) e^{-K\tau/\hbar} \end{aligned} \quad (\text{B'.5})$$

Οι τελεστές αυτοί λέγονται και τελεστές φανταστικού χρόνου. Η συνάρτηση Green μη μηδενικής θερμοκρασίας για ένα σωματίδιο ορίζεται ως:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \equiv -\frac{\text{tr} T[\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau')]\rho_G}{\text{tr}\rho_G} \quad (\text{B'.6})$$

Παρατηρούμε ότι στην έκφραση αυτή υπεισέρχεται ο στατιστικός μέσος ως προς όλες τις καταστάσεις, καθώς και η μέση τιμή του τελεστή $\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)\hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau')$ στις αντίστοιχες καταστάσεις.

Στη συνέχεια ωα αποδείξουμε την ιδιότητα περιοδικότητας. Λόγω της κυκλικής ιδιότητας του ίχνους, έχουμε:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}0, \mathbf{x}'\tau') &= \frac{1}{Z} \text{tr} e^{-\beta K} \hat{\psi}_{k\alpha}(\mathbf{x}0) \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau') = \\ &= \mp \frac{1}{Z} \text{tr} e^{-\beta K} \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau') \hat{\psi}_{k\alpha}(\mathbf{x}0) = \mp \frac{1}{Z} \text{tr} \hat{\psi}_{k\alpha}(\mathbf{x}0) e^{-\beta K} \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau') = \quad (\text{B'.7}) \\ &= \mp \frac{1}{Z} \text{tr} e^{-\beta K} \hat{\psi}_{k\alpha}(\mathbf{x}\beta\hbar) \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau') = \pm \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\beta\hbar, \mathbf{x}'\tau')\end{aligned}$$

όπου το επάνω (κάτω) πρόσημο αναφέρεται σε μποζόνια (φερμιόνια). Αντίστοιχα, μπορούμε να αποδείξουμε ότι

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'0) = \pm \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\beta\hbar) \quad (\text{B'.8})$$

Παράρτημα Γ'

Υπολογισμός της παραμέτρου τάξης για τη μαγνήτιση στο x -άξονα

Η παράμετρος τάξης θα είναι η σχετική μαγνήτιση στο x -άξονα, η οποία, σύμφωνα με την εξίσωση (1.46), γράφεται:

$$M_x = \frac{2}{N} \langle \Psi_0 | S_x | \Psi_0 \rangle \quad (\Gamma'.1)$$

όπου S_x ο τελεστής του ολικού σπιν στη διεύθυνση x . Ο τελεστής αυτός στο φορμαλισμό δεύτερης χβάντωσης, ακολουθώντας τη συζήτηση μετά την εξίσωση (1.21), θα είναι:

$$S_x = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{l}\sigma'} \langle \mathbf{k}\sigma | s_x | \mathbf{l}\sigma' \rangle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{l}\sigma'} \quad (\Gamma'.2)$$

όπου \mathbf{k}, \mathbf{l} τα διανύσματα των χβαντικών αριθμών των σωματιδίων, εκτός από τη φορά του σπιν, και σ, σ' οι φορές των σπιν. Εφόσον έχουμε επιλέξει ορθογώνιες χυματοσυναρτήσεις, θα είναι:

$$\langle \mathbf{k}\sigma | s_x | \mathbf{l}\sigma' \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \langle \sigma | s_x | \sigma' \rangle \quad (\Gamma'.3)$$

όμως ο τελευταίος πίνακας είναι ο πίνακας της προβολής του σπιν στη διεύθυνση x , ο οποίος κατά τα γνωστά εκφράζεται ως:

$$s_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \delta_{-\sigma, \sigma'} \quad (\Gamma'.4)$$

επομένως

$$S_x = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \right] \quad (\Gamma'.5)$$

και τελικά η παράμετρος τάξης ωντα είναι:

$$M_x = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_0 | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi_0 \rangle \quad (\Gamma'.6)$$

Παράρτημα Δ'

Αναλυτικός υπολογισμός των αθροισμάτων στις συχνότητες Matsubara

Ενδιαφερόμαστε για τον υπολογισμό του αθροίσματος

$$\sum_n \frac{1}{(i\omega_n)^2 - \epsilon^2} = \sum_n F(i\omega_n), \quad i\omega_n = \frac{\pi i}{\beta}(2n + 1) \quad (\Delta'.1)$$

όπου οι τιμές του ω_n είναι για φερμιόνια. Η συνάρτηση $F(z)$ ορίζεται φυσικά ως:

$$F(z) = \frac{1}{z^2 - \epsilon^2} \quad (\Delta'.2)$$

Θα εκμεταλλευτούμε το θεώρημα των ολοκληρωτικών υπολοίπων¹, για να μετατρέψουμε αυτό το άθροισμα σε ένα επικαμπύλιο ολοκήρωμα στο μιγαδικό επίπεδο. Για το σκοπό αυτό, χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση:

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \quad (\Delta'.3)$$

Η συνάρτηση αυτή έχει απλούς πόλους στις συχνότητες στις οποίες πραγματοποιείται το άθροισμα ($\Delta'.1$). Πράγματι, εύκολα μπορεί να δει κανείς ότι στις συχνότητες αυτές η συνάρτηση ($\Delta'.3$) απειρίζεται, ενώ το όριο

$$\lim_{z \rightarrow i\omega_n} (z - i\omega_n) f(z) = \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{z - i\omega_n}{e^{\beta z} + 1} = \frac{(z - i\omega_n)'}{(e^{\beta z} + 1)'}|_{z \rightarrow i\omega_n} = \frac{1}{\beta e^{i\beta\omega_n}} = -\frac{1}{\beta} \quad (\Delta'.4)$$

είναι πεπερασμένο. Η σχέση ($\Delta'.4$) είναι και ο ορισμός του ολοκληρωτικού υπολοίπου για απλό πόλο. Έτσι, η συνάρτηση $f(z)F(z)$ έχει απλούς πόλους στα σημεία $z = i\omega_n$, καθώς και στα $z = \pm\epsilon$. Μπορεί να δει κανείς ότι εάν

¹βλέπε κάποιο εισαγωγικό βιβλίο μιγαδικής ανάλυσης

πάρουμε ως καμπύλη ολοκλήρωσης C έναν κύκλο με ακτίνα R , και αφήσουμε το R να πάει στο άπειρο, τότε, λόγω της μορφής της $F(z) = \frac{1}{z^2 - \epsilon^2}$, το ολοκλήρωμα θα είναι μηδέν. Έτσι το άθροισμα των ολοκληρωτικών υπολοίπων της $f(z)F(z)$ θα είναι μηδέν. Συνεπώς, λόγω και της $(\Delta'.4)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\epsilon} \frac{1}{e^{\beta\epsilon} + 1} - \frac{1}{2\epsilon} \frac{1}{e^{-\beta\epsilon} + 1} - \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{(i\omega_n)^2 - \epsilon^2} &= 0 \\ \Rightarrow \sum_n \frac{1}{(i\omega_n)^2 - \epsilon^2} &= -\frac{\beta}{2\epsilon} \tanh\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right) \end{aligned} \quad (\Delta'.5)$$

Η μέθοδος αυτή μπορεί να επεκταθεί και στην περίπτωση περισσότερων, ή πολλαπλών πόλων².

²δηλαδή διπλών, τριπλών κλπ πόλων