



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ & ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

---

Κβαντικές Καταστάσεις Τάξεως στις  
Διεπιφάνειες  $LaTiO_3/SrTiO_3$ ,  
 $LaVO_3/SrTiO_3$  και  $LaAlO_3/SrTiO_3$

---

Χριστοδούλου Παναγιώτης  
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών & Μηχανικών Η/Υ

Επιβλέπων: Βαρελογιάννης Γεώργιος  
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών & Φυσικών Επιστημών

Αθήνα, Φεβρουάριος 2013





ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ & ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

---

Κβαντικές Καταστάσεις Τάξεως στις  
Διεπιφάνειες  $LaTiO_3/SrTiO_3$ ,  
 $LaVO_3/SrTiO_3$  και  $LaAlO_3/SrTiO_3$

---

Χριστοδούλου Παναγιώτης  
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών & Μηχανικών Η/Υ

Επιβλέπων: Βαρελογιάννης Γεώργιος  
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών & Φυσικών Επιστημών

Εγκρίθηκε από τη τριμελή εξεταστική επιτροπή την 14/3/2013

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

.....  
Γ. Βαρελογιάννης

Αν.Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....  
Ι. Ξανθάκης

Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....  
Ευθ. Λιαροκάπης

Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Φεβρουάριος 2013



copyright © Παναγιώτης Χριστοδούλου, 2013  
Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτούν ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.



## Περίληψη

Έχει αποδειχθεί από την ομάδα του ΕΜΠ στο παρελθόν ότι οι κβαντικές καταστάσεις τάξεως ενός υγρού *Fermi* όταν συνυπάρχουν επιβάλλουν και πρόσθετες συγκεκριμένες καταστάσεις τάξεως. Όλες μαζί οι φάσεις εμφανίζονται σε περιοχές κοντά σε κβαντικά κρίσιμα σημεία διαφόρων υλικών ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων. Στα πλαίσια της διατριβής του ο κύριος Γ. Λιβανάς εξετάζει την επιβολή της συνύπαρξης φάσεων σε διεπιφάνειες και ετεροδομές διεπαφών προσομοιώνοντας στον πραγματικό χώρο και στις δύο διαστάσεις με τη μέθοδο *Bogoliubov – DeGennes* μοντέλα *Hubbard* εκτεταμένα τα οποία με κατάλληλα επιλεγμένες παραμέτρους αναπαράγουν τις επιθυμητές παραμέτρους. Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η επέκταση στις τρεις διαστάσεις της μεθόδου του κυρίου Λιβανά σε διεπαφές κατά τις  $(0,0,1)$  και  $(1,0,0)$  διευθύνσεις φυλλοειδών συστημάτων αλλά και σε διαγώνιες διεπαφές κατά την  $(1,1,0)$  για τη μελέτη διεπαφών που εμπλέκουν κύματα πυκνότητας σπιν (*SDW*), κύματα πυκνότητας φορτίου (*CDW*) και σιδηρομαγνητισμό (*FM*). Επιπλέον επέκταση θα μας επιτρέψει την προσομοίωση περισσότερων της μίας διεπαφών ώστε να μπορέσουμε να μελετήσουμε περισσότερο περίπλοκες ετεροδομές. Αποδεικνύεται ότι πράγματι, όπως αναμένεται, η συνύπαρξη οποιουδήποτε ζεύγους αυτών των δύο παραμέτρων τάξεως στη διεπιφάνεια επιβάλλει και την παρουσία της τρίτης παραμέτρου τάξεως στην περιοχή. Επιπλέον, θα μελετηθεί η σταθεροποίηση ή η εξαφάνιση της φάσης του *SDW* κάτω από διάφορες συνθήκες. Το παράδειγμα εμφάνισης μεταλλικού σιδηρομαγνητισμού στη διεπαφή ανάμεσα σε μονωτές *CDW* και *SDW* εξετάζεται σε σχέση με αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα σε διεπαφές *LaTiO<sub>3</sub> / SrTiO<sub>3</sub>*, *LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>* και *LaVO<sub>3</sub> / SrTiO<sub>3</sub>*. Δίνουμε μια εναλλακτική ερμηνεία του φαινομένου της εμφάνισης διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων στη διεπιφάνεια των μονωτών αυτών. Η κατάλληλη προσαρμογή των παραμέτρων οδηγεί στην ύπαρξη ή μη ενός κατωφλίου στον αριθμό των επιπέδων των υλικών που δημιουργούν τη διεπαφή ώστε να εμφανιστεί η συνύπαρξη που μελετάται σε συμφωνία με τα πρόσφατα πειραματικά αποτελέσματα. Μελέτη διαγώνιων διεπαφών κατά την  $(1,1,0)$  αποδεικνύουν ότι το φαινόμενο εξακολουθεί να υπάρχει και σε αυτή τη διεύθυνση επεξηγώντας πειραματικά αποτελέσματα που άλλες ερμηνείες οι οποίες έχουν μέχρι στιγμής προταθεί αδυνατούν. Διαγώνιες διεπαφές ανάμεσα σε υπεραγώγιμες και μαγνητικές καταστάσεις έδωσαν επίσης αναμενόμενα αποτελέσματα επιβεβαιώνοντας την ορθότητα των αριθμητικών υπολογισμών.

λέξεις κλειδιά: συνύπαρξη φάσεων, κύμα πυκνότητας σπιν/φορτίου, μεταλλικός σιδηρομαγνητισμός, διδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων, μέθοδος *Bogoliubov-deGennes*, εκτεταμένο μοντέλο *Hubbard*, πραγματικός χώρος





## Abstract

It has already been proved by the N.T.U.A. group that quantum states of order appearing in a Fermi liquid enforce the emergence of additional states of order when they coexist. On the same footing, these phases appear in regions near quantum critical points of different materials which are described by strongly correlated electrons. Dr G.Livanas, at the framework of his thesis, investigated the enforcement of coexistent phases at interfaces and heterostructures in two-dimensional real space by using Bogoliubov-deGennes method in Extended Hubbard models with properly chosen parameters which simulate real system interfaces. The purpose of this thesis is the extension of Dr Livanas' code in three dimensions to describe interfaces lied along (0,0,1) or (1,0,0) dimension and also diagonal interfaces along (1,1,0) for the study of interfaces involving spin density waves (SDW), charge density waves (CDW) and ferromagnetism (FM). Further extension will give the green light so as to be able to examine more complicated heterostructures. We prove that, indeed, the coexistence of any two of these states of order at the interface enforces the presence of the third phase at the region. Moreover, the stabilization or diasappearance of the phase of SDW under different conditions will be examined. We can associate the appearance of the metallic ferromagnetism between CDW and SDW insulators with recent experimental results at  $LaTiO_3/SrTiO_3$ ,  $LaAlO_3/SrTiO_3$  and  $LaVO_3/SrTiO_3$  interfaces. We describe a substitutional interpretation of the appearance of a 2D electron gas at these interfaces. The appropriate adaption of the model's parameters leads to the appearance or disappearance of a threshold in the number of planes which are necessary to establish the coexistence and the generation of the metallic ferromagnetism in agreement with the experiments. Furthermore, diagonal interfaces are studied with results showing that the phenomenon continues to exist and explaining recent experiments, which was not feasible until now. Diagonal interfaces between superconductive and magnetic states lead to predictable results confirming the accuracy of our calculations.

keywords: phase coexistence, spin/charge density wave, metallic ferromagnetism, two-dimensional electron gas, Bogoliubov-deGennes transformation, Extended Hubbard model, real space



## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς μου ευχαριστίες προς τον κ.Γεώργιο Βαρελογιάννη, Αν.Καθηγητή του Ε.Μ.Π., για την ανάθεση της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας καθώς επίσης για τον πολύτιμο χρόνο που μου διέθεσε, για το ενδιαφέρον του και για την επιστημονική του καθοδήγηση χωρίς τα οποία η εργασία δε θα είχε έλθει εις πέρας. Η βοήθεια του ήταν ανεκτίμητη και η εμπιστοσύνη που μου έδειξε καθοριστική.

Ακόμη, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον υποψήφιο διδάκτορα κ.Γεώργιο Λιβανά για την εμπιστοσύνη μέρους της δικής του εργασίας πάνω στο οποίο βασίστηκε η παρούσα και τις χρήσιμες υποδείξεις του κατά την εκπόνηση των προσομοιώσεων.



# Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Διεπαφές ανάμεσα σε μονωτές <i>LTO/STO</i>, <i>LAO/STO</i> και <i>LVO/STO</i></b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Βασικός φορμαλισμός</b>	<b>11</b>
2.1	Φορμαλισμός δεύτερης κβάντωσης ή αριθμού κατάληψης . . . . .	11
2.1.1	Συστήματα πολλών σωματιδίων . . . . .	11
2.1.2	Συστήματα ταυτόσημων σωματιδίων . . . . .	13
2.2	Υπενθύμιση για το Μεγαλοκανονικό σύνολο . . . . .	17
2.3	Κρυσταλλική δομή στερεού σώματος . . . . .	19
2.3.1	Γενική μορφή Χαμιλτονιανής στερεού σώματος . . . . .	19
2.3.2	Προσέγγιση Χαμιλτονιανής και διάφορα μοντέλα . . . . .	20
2.4	Καταστάσεις τάξεως . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Το <i>Extended Hubbard Model</i> και η μέθοδος <i>Bogoliubov-de Gennes</i></b>	<b>25</b>
3.1	Συστήματα ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων . . . . .	25
3.2	Το Απλό Μοντέλο <i>Hubbard</i> . . . . .	26
3.3	Το <i>Extended Hubbard Model</i> . . . . .	30
3.4	Προσέγγιση μέσου πεδίου . . . . .	36
3.5	Φορμαλισμός <i>Bogoliubov - de Gennes</i> . . . . .	39
3.5.1	Σπινორιακός Φορμαλισμός κατά <i>Nambu</i> . . . . .	40
3.5.2	Διαγωνιοποίηση Χαμιλτονιανής - μετασχηματισμός <i>Bogoliubov-de Gennes</i> . . . . .	41
3.5.3	Υπολογισμός των παραμέτρων μέσου πεδίου- Εξισώσεις αυτοσυνέπειας . . . . .	44
3.6	Μεγάλο δυναμικό στον φορμαλισμό <i>Bogoliubov-de Gennes</i> . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Καταστάσεις τάξεως στο <i>Extended Hubbard Model</i> και η αναζήτησή τους</b>	<b>49</b>
4.1	Το <i>Extended Hubbard Model</i> στον χώρο των ορμών . . . . .	49
4.2	Υπεραγωγμες καταστάσεις τάξης . . . . .	53
4.2.1	Ταυτοποίηση υπεραγωγμών καταστάσεων στο <i>Extended Hubbard model</i> στον πραγματικό χώρο . . . . .	55
4.2.2	Ανίχνευση υπεραγωγμών καταστάσεων . . . . .	56
4.3	Κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν . . . . .	58

<b>5</b>	<b>Αριθμητική Προσομοίωση των Διεπαφών</b>	<b>62</b>
5.1	Η Μέθοδος που Χρησιμοποιήθηκε . . . . .	62
<b>6</b>	<b>Χαρακτηριστικά Αριθμητικά Αποτελέσματα</b>	<b>66</b>
6.1	Διεπαφές κατά την (0 0 1) σε φυλλοειδή συστήματα . . . . .	66
6.1.1	Διεπαφή CDW - SDW . . . . .	67
6.1.2	Διεπαφή CDW - FM . . . . .	71
6.1.3	Διεπαφή SDW - FM . . . . .	75
6.2	Διεπαφές κατά τη διαγώνια διεύθυνση (1 1 0) . . . . .	78
6.3	Μελέτη της εμφάνισης της φάσης του αντισιδηρομαγνητισμού . . . . .	80
6.3.1	Bulk αντισιδηρομαγνητισμός . . . . .	80
6.3.2	Στρώμα αντισιδηρομαγνήτη σε επαφή με μη μαγνητικό υλικό . . . . .	83
<b>7</b>	<b>Συμπεράσματα</b>	<b>87</b>
<b>A'</b>	<b>Πυκνότητα καταστάσεων</b>	<b>91</b>
<b>B'</b>	<b>Διαφοροποίηση κώδικα κατά την διαγώνια τομή</b>	<b>95</b>

## Κεφάλαιο 1

# Διεπαφές ανάμεσα σε μονωτές *LTO/STO*, *LAO/STO* και *LVO/STO*

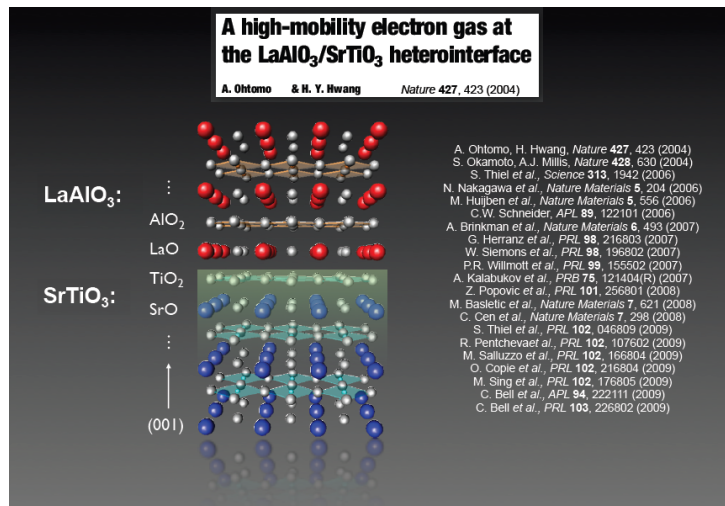
Τα συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων είναι στο κέντρο του επιστημονικού ενδιαφέροντος τις τελευταίες δεκαετίες. Η τεράστια σημασία των συστημάτων αυτών δε σχετίζεται μόνον με τις τεχνολογικές εφαρμογές αλλά και με την φυσική κατανόηση νέων βασικών μορφών πολυπλοκότητας σε αλληλεπιδρώντα κβαντικά συστήματα. Ιδιαίτερα η ανακάλυψη στα τέλη της δεκαετίας του '80 της υπεραγωγιμότητας υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας σε ορισμένα οξειδία του χαλκού, έδωσε τεράστια ώθηση στο πεδίο και εξακολουθεί να αποτελεί πρόβλημα χωρίς κοινώς αποδεκτή λύση. Η συστηματική μελέτη συστημάτων βαρέων Φερμιονίων εξακολουθεί να αναδεικνύει εκπληκτικά προβλήματα για φυσική κατανόηση και εφαρμογές που πηγάζουν πρωτίστως από τον εναγκαλισμό της υπεραγωγιμότητας με τον μαγνητισμό στα συστήματα αυτά. Αντίστοιχα προβλήματα παρατηρούνται και σε μια πλειάδα οργανικών και ανόργανων υλικών συστημάτων που αναδείχτηκε την τελευταία εικοσαετία, όπως για παράδειγμα πρόσφατα τα οξυπνικτίδια του σιδήρου.

Βασικό επακόλουθο των ισχυρών αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα ηλεκτρόνια των συστημάτων αυτών είναι η δημιουργία διαφόρων μορφών κβαντικών καταστάσεων τάξεως οι οποίες είτε ανταγωνίζονται, είτε μερικές φορές συνυπάρχουν. Τέτοιες καταστάσεις είναι η υπεραγωγιμότητα, τα κύματα πυκνότητας φορτίου (*CDW*), τα κύματα πυκνότητας σπίν (*SDW*), ο σιδηρομαγνητισμός (*FM*) κ.α. Οι παράμετροι τάξεως των καταστάσεων αυτών μπορεί να μην είναι συμβατικές εμπεριέχοντας και το σπάσιμο πρόσθετων συμμετριών εκτός από αυτές που χαρακτηρίζουν τη φύση του συμπυκνώματος. Για παράδειγμα, η υπεραγωγιμότητα υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας στα οξειδία του χαλκού είναι τύπου *d-wave*, που σημαίνει ότι περαν της συμμετρίας βαθμίδος που σχετίζεται με το ηλεκτρικό φορτίο και χαρακτηρίζει έναν υπεραγωγο, σπάει και η συμμετρία μετατόπισης κανά ένα σύμμετρο κυματόνυσμα  $Q$  στο χώρο των ορμών. Ο ανταγωνισμός και οι συνύπαρξη τέτοιων παραμέτρων τάξεως είναι το αντικείμενο εντατικής μελέτης, τόσο πειραματικής όσο και θεωρητικής, και βρίσκεται πίσω από πλειάδα εξαιρετικά σημαντικών φαινομένων.

Η βελτίωση των πειραματικών τεχνικών εναπόθεσης κατά την τελευταία δεκαπενταετία

επέτρεψε την ελεγχόμενη δημιουργία διεπαφών και νανοδομών στο χβαντικό επίπεδο ανάμεσα σε υλικά συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων. Μια πλειάδα εξαιρετικά σημαντικών φαινομένων παρατηρήθηκαν από τα οποία θα αναφέρουμε εδώ μόνον ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα που ήταν ίσως από τα πιο εκπληκτικά αποτελέσματα που παρατηρήθηκαν. Πράγματι, ανάμεσα στις διεπαφές που έχουν κατά καιρούς μελετηθεί και μελετώνται ακόμα, ιδιαίτερης σημασίας για τον πλούτο των νέων φαινομένων που εμφανίζουν αποτελούν αυτές μεταξύ **μονωτικών υλικών**. Παρότι η μονωτική συμπεριφορά τέτοιων υλικών είναι εξ ορισμού αντίθετη με την εμφάνιση ηλεκτρικής αγωγιμότητας και υπεραγωγιμότητας, το 2002 οι Ohtomo και Hwang [1] συνθέτοντας ετεροδομές αποτελούμενες από  $LaTiO_3$  (θεωρούμενος μονωτής Mott) και  $SrTiO_3$  (θερούμενος μονωτής ζώνης) βρήκαν **μεταλλική** συμπεριφορά στην διεπιφάνεια των μονωτών. Παρόμοια συμπεριφορά εμφανίζεται και κατά την διεπαφή άλλων μονωτικών υλικών, όπως οι ετεροδομές  $LaAlO_3/SrTiO_3$  και  $LaVO_3/SrTiO_3$  [2], τα υλικά από τα οποία αυτές αποτελούνται θεωρούνται εν γένει μονωτές ζώνης με μεγάλο ενεργειακό χάσμα. Ιδιαίτερου ενδιαφέροντος είναι η ετεροδομή  $LaAlO_3/SrTiO_3$  [2] καθώς εμφανίζει υψηλή κινητικότητα φορέων, υπεραγωγιμότητα ρυθμιζόμενη από ηλεκτρικό πεδίο και μαγνητική συμπεριφορά. Και τα δύο υλικά της τελευταίας διεπαφής κρυσταλλώνονται σε δομές που μπορούν να θεωρηθούν ως μικρή απόκλιση από την κυβική δομή των περοβσκιτών.

Το ηλεκτρονιακό αέριο αυτό εμφανίζεται μόνο στα στρώματα που βρίσκονται στην διεπιφάνεια και μπορεί συνεπώς να θεωρηθεί δύο διαστάσεων. Η αναδιοργάνωση των ηλεκτρονιακών τροχιακών που συμβαίνει στην διεπαφή προκαλεί την εμφάνιση καταστάσεων εντοπισμένων στην κοντινή αυτή περιοχή. Η θεωρία ζώνης προτείνει ότι οι ηλεκτρονιακές ενποτισμένες καταστάσεις που δημιουργούνται και καταλαμβάνονται από ηλεκτρόνια τοπικά προέρχονται από τον διαχωρισμό των  $d$  τροχιακών του  $Ti$  και αναμένεται να είναι ισχυρά συσχετισμένες, αναμένοντας την πιθανή εμφάνιση σιδηρομαγνητισμού ή πυκνότητας φορτίου.

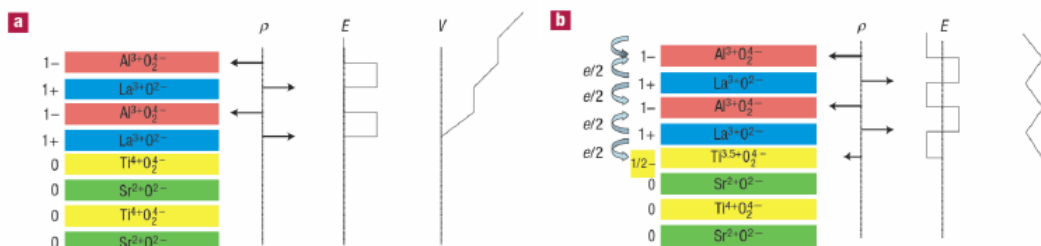


Σχήμα 1.1: Η διεπαφή μεταξύ  $LaAlO_3$  και  $SrTiO_3$ . Το  $LaAlO_3$  κατά την (0 0 1) διεύθυνση δομείται σε επαναλαμβανόμενα στρώματα  $AlO_2$  και  $LaO$ , ενώ το  $SrTiO_3$  σε επαναλαμβανόμενα επίπεδα  $SrO$  και  $TiO_2$ . Όταν τα δύο υλικά έρθουν σε  $LaO/TiO_2$  επαφή εμφανίζεται στη διεπαφή μεταλλικό αέριο με την προϋπόθεση ότι το  $LaTiO_3$  αποτελείται από 4 ή περισσότερα στρώματα. Αντίθετα, κατά την  $AlO_2/SrO$  επαφή παρόμοιο αέριο δεν εντοπίζεται.



Η εμφάνιση του  $2D$  αερίου ηλεκτρονίων πιστεύεται, κατά την κυρίαρχη άποψη, ότι οφείλεται στην ασυνέχεια της πόλωσης κατά την διεπαφή μεταξύ των δύο οξειδίων. Σε αυτό το σενάριο, η κρυσταλλική δομή παίζει ένα σημαντικό ρόλο. Η ετεροδομή, με διεπιφάνεια κατά τον  $(0\ 0\ 1)$  φαίνεται σχηματικά στην εικόνα 1.1.

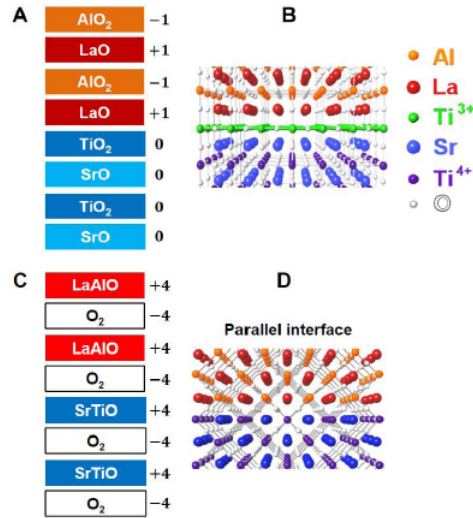
Το  $LaAlO_3$  αποτελείται από διαδοχικά στρώματα  $(AlO_2)^{-1}$  και  $(LaO)^{+1}$ , τα οποία είναι φορτισμένα με μία οπή και ένα ηλεκτρόνιο ανά θεμελιώδη κυψελίδα αντίστοιχα, ενώ το  $SrTiO_3$  αποτελείται από ηλεκτρικά ουδέτερα στρώματα  $(TiO_2)^0$  και  $(SrO)^0$ . Χρησιμοποιώντας επιχειρήματα από τον κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό και θεωρώντας πως τα διαδοχικά στρώματα του πρώτου υλικού μπορούν να θεωρηθούν ομοιογενώς φορτισμένες πλάκες είναι εύκολο να δειχθεί η εμφάνιση ηλεκτρικού πεδίου μέσα σε αυτό της μορφής του σχήματος 1.2(α). Το δυναμικό που συνδέεται με το ηλεκτρικό αυτό πεδίο αποκλίνει, ένα φαινόμενο που ονομάζεται καταστροφή πόλωσης ('polarization catastrophe'). Για να αποτραπεί η απόκλιση αρκεί η μεταφορά μισού ηλεκτρονίου ανά κυψελίδα στο στρώμα  $(TiO_2)^0$  που βρίσκεται στη διεπιφάνεια. Στην περίπτωση αυτή το πεδίο που δημιουργείται κατά μήκος της διεπαφής έχει τη μορφή του σχήματος 1.2(b), οπότε συμφέρει ενεργειακά μια τέτοια αναδιαμόρφωση της ηλεκτρονιακής πυκνότητας. Παρόμοια εξήγηση δίνεται και για τις άλλες δύο διεπαφές  $LTO/STO$  και  $LVO/STO$  με τη διαφορά της αντικατάστασης του στρώματος  $(AlO_2)^{-1}$  από τα  $(TiO_2)^{-1}$  και  $(VO_2)^{-1}$  αντίστοιχα.



Σχήμα 1.2: Τα επίπεδα  $AlO_2$  είναι φορτισμένα με  $-e$  ανά μοναδιαία κυψελίδα, ενώ τα επίπεδα  $LaO$  με  $+e$ . Αντίθετα, τα επίπεδα του  $SrTiO_3$  είναι όλα ουδέτερα. Αυτό οδηγεί στην καταστροφή πόλωσης (α) με το δυναμικό να αποκλίνει σε επίπεδα μακριά από τη διεπαφή. Στο (b) φαίνεται η μεταφορά  $1/2$  ηλεκτρονίου ανα κυψελίδα στο πρώτο επίπεδο του  $TiO_2$  για την αποφυγή της απόκλισης του ηλεκτρικού δυναμικού. Πηγή: N.Nakagawa, H.Y.Hwang and D.A.Muller, Nat.Mater. 5(2006)204

Αρκετές ενστάσεις έχουν εμφανιστεί, ωστόσο, για τον μηχανισμό που βρίσκεται πίσω από την παραγωγή του διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων. Μια τέτοια βασίζεται στο γεγονός ότι κατά την διεπαφή των δύο υλικών που αναφέραμε κατά την  $(1\ 1\ 0)$  διεύθυνση δεν θα έπρεπε να εμφανισθεί η μεταλλική συμπεριφορά που παρατηρείται. Στην περίπτωση αυτή δε θα εμφανιζόταν ασυνέχεια της πόλωσης κατά τη διεπαφή μεταξύ των δύο υλικών, καθώς διαδοχικά στρώματα από  $(LaAlO)^{+4}/(O_2)^{-4}$  και  $(SrTiO)^{+4}/(O_2)^{-4}$  θα χαρακτηρίζαν τη διεπαφή, όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.3. Ομως πρόσφατα πειράματα αποδεικνύουν ότι το διδιάστατο αέριο εμφανίζεται και κατά την  $(1,1,0)$  διεπαφή [3] πράγμα που δεν είναι δυνατόν να εξηγηθεί με την υπόθεση της ασυνέχειας της πόλωσης.

Στα πλαίσια της εργασίας αυτής θα προσπαθήσουμε με τα αποτελέσματα που θα παρα-



Σχήμα 1.3: Στα A και B φαίνεται η δομή των στρωμάτων κατά την  $(0\ 0\ 1)$  διεπαφή μεταξύ  $LaAlO_3$  και  $SrTiO_3$ . Παρατηρείται ασυνέχεια πόλωσης στην διεπαφή. Στα C και D απεικονίζεται η δομή των στρωμάτων κατά την διεπαφή των ίδιων υλικών κατά την  $(1\ 1\ 0)$ . Ασυνέχεια πόλωσης πλέον δεν εμφανίζεται. Πηγή: A.Annadietal., arXiv : 1208.6135

τεθούν να τεκμηριώσουμε μια διαφορετική προσέγγιση για την επεξήγηση του φαινομένου της εμφάνισης του διδιάστατου αερίου στη διεπιφάνεια. Πράγματι, έχει αποδειχθεί θεωρητικά από την ομάδα μας από το 2000 [4] ότι συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπίν σε ένα σύστημα που παρουσιάζει ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής επιβάλλει μία σιδηρομαγνητική συνιστώσα η οποία είναι μεταλλική. Το φαινόμενο αυτό είναι μια γενίκευση του φαινομένου του εξιτονικού σιδηρομαγνητισμού. Στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής του Γεωργίου Λιβανά γίνεται προσπάθεια επιβολής της συνύπαρξης διαφορετικών καταστάσεων σε διεπαφές και έρευνα των επαγόμενων καταστάσεων και των επιπτώσεών τους αποδεικνύοντας ότι οι αναμενόμενες παράμετροι τάξεως όντως επάγονται. Στην παρούσα διπλωματική εργασία έγινε προσαρμογή της μεθόδου του κυρίου Λιβανά σε διεπαφές κατά τον  $(0,0,1)$  σε φυλλοειδή συστήματα (όπως και τα  $STO$ ,  $LTO$  και  $LAO$ ) μελετώντας διεπαφές που εμπλέκουν  $CDW$ ,  $SDW$  και  $FM$ . Το αντίστοιχο έγινε και για διαγώνιες διεπαφές κατά τον  $(1,1,0)$  με αφορμή τα πρόσφατα πειράματα που προαναφέραμε [3].

Πράγματι, όπως αναμενόταν, προκύπτει ένα διδιάστατο σιδηρομαγνητικό αέριο στη διεπιφάνεια των δύο μονωτικών καταστάσεων  $CDW$  και  $FM$  κατά την  $(0,0,1)$ . Όπως επίσης αναμένεται στην περίπτωση μας, και κατά την  $(1,1,0)$  διεπαφή εμφανίζεται το διδιάστατο αέριο σε συμφωνία με τα πρόσφατα πειράματα [3]. Εξετάζεται στο τέλος πιο διεξοδικά η συμβατότητα της προσέγγισής μας με την φαινομενολογία που συνοδεύει τις διεπαφές  $LTO/STO$ ,  $LAO/STO$ .

# Βιβλιογραφία

- [1] A. Ohtomo and N. Hwang, Nature **427**, 423 (2004).
- [2] Χρήσιμη επισκόπηση γίνεται στο: Juan Pereiro, Alexander Petrovic, Christos Panagopoulos and Ivan Bozovic, Physics Express, **1**, 208-241 (2011).
- [3] A. Annadi et al., arXiv:1208.6135.
- [4] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**, 4172 (2000).
- [5] 'Magnetism and superconductivity at LAO/STO-interfaces: the role of Ti 3d interface electrons', N.Pavlenko, T.Kopp, E.Y.Tsymbal, G.A.Sawatzky and J.Mannhart (January 2012)
- [6] 'Two-Dimensional Electron Gases at Oxide Interfaces', J.Mannhart, D.H.A. Blank, H.Y.Hwang, A.J.Millis, J.M.Triscone, MRS BULLETIN, November 2008

## Κεφάλαιο 2

# Βασικός φορμαλισμός

### 2.1 Φορμαλισμός δεύτερης κβάντωσης ή αριθμού κατάληψης

#### 2.1.1 Συστήματα πολλών σωματιδίων

Ας συμβολίσουμε με  $\mathcal{E}_i$  τον χώρο Hilbert των καταστάσεων ενός σωματιδίου- $i$  και με  $\{|u_j^{(i)}\rangle\}$  μια βάση του χώρου αυτού. Η τυχαία κατάσταση  $|\psi_i\rangle$  του ενός σωματιδίου γράφεται στη γενική περίπτωση ως γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων βάσης του  $\mathcal{E}_i$ . Η επέκταση του χώρου Hilbert για  $N$  ανεξάρτητα σωματίδια ορίζεται ως το τανυστικό γινόμενο των μονοσωματιδιακών χώρων

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_N \quad (2.1)$$

έτσι, ώστε μια κατάσταση του χώρου  $\mathcal{E}$  να γράφεται ως

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle \quad (2.2)$$

με  $|\psi_1\rangle \in \mathcal{E}_1, |\psi_2\rangle \in \mathcal{E}_2, \dots, |\psi_N\rangle \in \mathcal{E}_N$ .

Η επόμενη ιδιότητα που προκύπτει από τον ορισμό του χώρου Hilbert  $\mathcal{E}$  θα φανεί ιδιαίτερα χρήσιμη στη συνέχεια: Όταν έχει επιλεγεί μια βάση  $\{|u_j^{(i)}\rangle\}$  στον κάθε  $\mathcal{E}_i$ , το σύνολο των διανυσμάτων  $|u_{j_1}^{(1)}\rangle \otimes |u_{j_2}^{(2)}\rangle \otimes \dots \otimes |u_{j_N}^{(N)}\rangle$  αποτελούν μια βάση του χώρου  $\mathcal{E}$  των  $N$  σωματιδίων. Στο εξής, θα χρησιμοποιούμε τον απλούστερο συμβολισμό

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle = |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle \quad (2.3)$$

Έχοντας υπόψη μας τον παραπάνω συμβολισμό, μπορεί να γραφτεί:

$$|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} c_{j_1, \dots, j_N} |u_{j_1}^{(1)}, u_{j_2}^{(2)}, \dots, u_{j_N}^{(N)}\rangle \quad (2.4)$$

Στη συνέχεια, έχοντας ορίσει τις καταστάσεις που καθορίζουν τον χώρο Hilbert  $N$  σωματιδίων, άμεση είναι η επέκταση της έννοιας των τελεστών στο χώρο αυτόν. Ορίζουμε έτσι

τους τελεστές ενός σώματος οι οποίοι δρουν ανεξάρτητα και συμμετρικά σε κάθε ένα από τα σωματίδια, τους τελεστές δύο σωμάτων οι οποίοι δρουν ανεξάρτητα και συμμετρικά σε ζεύγη σωματιδίων και όμοια τελεστές μεγαλύτερης τάξης με τους οποίους δε θα ασχοληθούμε. Έστω  $A_1^{(i)}$  ένας τελεστής που δρα στον χώρο του ενός σωματιδίου  $i$ , ο οποίος ως προς τη βάση  $\{|u_j^{(i)}\}$  γράφεται

$$A_1^{(i)} = \sum_{j_m, j_n} A_{j_m j_n}^{(i)} |u_{j_m}^{(i)}\rangle \langle u_{j_n}^{(i)}| \quad (2.5)$$

με τους συντελεστές  $A_{j_m j_n}^{(i)}$  να δίνονται από τη σχέση

$$A_{j_m j_n}^{(i)} = \langle u_{j_m}^{(i)} | A_1^{(i)} | u_{j_n}^{(i)} \rangle \quad (2.6)$$

Ο αντίστοιχος τελεστής που δρα με την ίδια ερμηνεία στο σωματίδιο  $i$  στον χώρο των  $N$  σωματιδίων ορίζεται ως

$$A_N^{(i)} = I \otimes \dots \otimes A_1^{(i)} \otimes \dots \otimes I \quad (2.7)$$

αποτελούμενος από το τανυστικό γινόμενο μοναδιαίων τελεστών και του τελεστή  $A_1^{(i)}$  στη θέση  $i$  του γινομένου. Η φυσική ερμηνεία αυτού προκύπτει αβίαστα ως η μοναδιαία δράση στα υπόλοιπα σωματίδια αφήνοντας τα ανέπαφα και του τελεστή  $A_1$  για το σωματίδιο  $i$ . Επομένως, ο τελεστής ενός σώματος στον χώρο των  $N$  σωματιδίων με τις ανεξάρτητες δράσεις για το κάθε ένα ξεχωριστά που αντιστοιχεί στον  $A_1$  είναι

$$A_N = \left( A_1^{(1)} \otimes I \otimes \dots \otimes I \right) + \dots + \left( I \otimes \dots \otimes A_1^{(i)} \otimes \dots \otimes I \right) + \dots + \left( I \otimes \dots \otimes I \otimes A_1^{(N)} \right) \quad (2.8)$$

ή χρησιμοποιώντας χαλαρότερο συμβολισμό

$$A_N = \sum_i A_1^{(i)} \quad (2.9)$$

Κατανοώντας τον παραπάνω συμβολισμό μπορούμε να γράψουμε

$$A_N = \sum_{\substack{(i_1, \dots, i_N) \\ (j_1, \dots, j_N)}} A_{i_1, \dots, i_N, j_1, \dots, j_N} |u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle \langle u_{j_1}^{(1)}, \dots, u_{j_N}^{(N)}| \quad (2.10)$$

όπου οι συντελεστές  $A_{i_1, \dots, i_N, j_1, \dots, j_N}$  ισούνται με

$$A_{i_1, \dots, i_N, j_1, \dots, j_N} = \langle u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)} | \sum_{m=1}^N A_m^{(1)} | u_{j_1}^{(1)}, \dots, u_{j_N}^{(N)} \rangle \quad (2.11)$$

Όμοια ας υποθέσουμε ότι ο  $B_2^{(m,n)}$  είναι ένας τελεστής που δρα στον χώρο κατάστασης δύο σωματιδίων  $m$  και  $n$  που ως προς τη βάση  $\{|u_{i_1}^{(m)}, u_{i_2}^{(n)}\}$  γράφεται

$$B_2^{(m,n)} = \sum_{i_1, i_2, j_1, j_2} B_{i_1, i_2, j_1, j_2}^{(m,n)} |u_{i_1}^{(m)}, u_{i_2}^{(n)}\rangle \langle u_{j_1}^{(n)}, u_{j_2}^{(m)}| \quad (2.12)$$

με

$$B_{i_1, i_2, j_1, j_2}^{(m, n)} = \langle u_{i_1}^{(m)}, u_{i_2}^{(m)} | B_{(2)}^{(m, n)} | u_{j_1}^{(n)}, u_{j_2}^{(n)} \rangle \quad (2.13)$$

Στην περίπτωση αυτή και χρησιμοποιώντας τον ίδιο με πριν χαλαρό συμβολισμό, ο τελεστής δύο σωματιδίων για το σύστημα των  $N$  ταυτόσημων σωματιδίων παίρνει τη μορφή

$$B_{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m, n \\ m \neq n}} B_2^{(m, n)} \quad (2.14)$$

### 2.1.2 Σύστημα ταυτόσημων σωματιδίων

Όπως ειπώθηκε στην προηγούμενη ενότητα, ένα κβαντικό σύστημα  $N$  σωματιδίων περιγράφεται, χρησιμοποιώντας τον φορμαλισμό του Dirac, από ένα διάνυσμα  $|\Psi\rangle = |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle$  στον χώρο Hilbert, το οποίο αποτελεί φυσική επέκταση της κατάστασης του ενός σωματιδίου  $|\psi_i\rangle$ . Στην περίπτωση που το σύστημα που μελετάται αποτελείται από ταυτόσημα σωματίδια, δηλαδή σωματίδια που χαρακτηρίζονται από τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς όπως η μάζα, το φορτίο και το σπιν, τότε αυτά είναι μη διακρίσιμα μεταξύ τους και συνεπώς η εναλλαγή του ρόλου δύο εξ αυτών δεν πρέπει να εμφανίζει καμία αλλαγή στις ιδιότητες και την εξέλιξη του συστήματος. Το γεγονός αυτό οδηγεί στην εμφάνιση μιας ασάφειας ως προς την κατάσταση του συστήματος (καθώς διαφορετικές συμβατές καταστάσεις είναι δυνατό να οδηγήσουν σε διαφορετικές προβλέψεις), κάτι που αναφέρεται στη βιβλιογραφία ως εκφυλισμός ανταλλαγής.

Για την άρση αυτής της ασάφειας είναι απαραίτητη η προσθήκη ενός επιπλέον αξιώματος που θα αναφέρεται σε συστήματα ταυτόσημων σωματιδίων:

Όταν ένα σύστημα περιλαμβάνει ταυτόσημα σωματίδια μόνο συγκεκριμένα διανύσματα του χώρου Hilbert περιγράφουν φυσικές καταστάσεις. Οι φυσικές αυτές καταστάσεις αντιστοιχούν στην ύπαρξη δύο μόνο ειδών σωματιδίων, των μποζονίων ( $\zeta=1$ ) και των φερμιονίων ( $\zeta=-1$ ) τα οποία διαθέτουν αντίστοιχα συμμετρικό και αντισυμμετρικό στην εναλλαγή διάνυσμα κατάστασης:

$$|\psi_1, \dots, \psi_i, \dots, \psi_j, \dots, \psi_N\rangle = \zeta |\psi_1, \dots, \psi_j, \dots, \psi_i, \dots, \psi_N\rangle \quad (2.15)$$

Για την πλήρως συμμετριοποιημένη ή αντισυμμετριοποιημένη μορφή του διανύσματος κατάστασης προκύπτει

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \zeta^P |\psi_P(1)\rangle |\psi_P(2)\rangle \dots |\psi_P(N)\rangle \quad (2.16)$$

όπου το  $P$ -άθροισμα<sup>1</sup> εκτείνεται πάνω σε όλες τις  $N!$  μεταθέσεις των δεικτών  $\{1, 2, \dots, N\}$ .

Αν θεωρήσουμε τώρα μια βάση του χώρου των καταστάσεων ενός σωματιδίου  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots\}$  είναι εύκολο να δειχθεί [1, Sec 3.1.1] ότι το σύνολο των καταστάσεων  $\{|u_{j_1}, u_{j_2}, \dots, u_{j_N}\rangle\}$ , με  $j_1 \leq \dots \leq j_N$  στην περίπτωση μποζονίων και  $j_1 < \dots < j_N$  στην περίπτωση φερμιονίων, αποτελεί μια βάση στον χώρο καταστάσεων των  $N$  σωματιδίων

<sup>1</sup>Είναι πάντα  $1^P = 1$ , ενώ το  $(-1)^P$  ορίζεται ως το πρόσημο της μετάθεσης  $P$ .

$$|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} c_{j_1, \dots, j_N} |u_{j_1}, u_{j_2}, \dots, u_{j_N}\rangle \quad (2.17)$$

Από τα παραπάνω γίνεται απολύτως σαφές πως το πρόβλημα των  $N$  ταυτόσημων σωματιδίων με τον τρόπο που ορίστηκε κατά την πρώτη κβάντωση είναι ιδιαίτερος πολύπλοκο και για μικρό ακόμα αριθμό  $N$  γίνεται μη πρακτικό στην επίλυσή του. Από την Εξ.(1.15), ωστόσο, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι σε κάθε όρο μόνο οι κατειλημμένες μονοσωματιδιακές καταστάσεις  $|u_i\rangle$  παίζουν κάποιο ρόλο. Αυτό μας οδηγεί στην εισαγωγή μιας νέας διατύπωσης του προβλήματος κατά την οποία λαμβάνεται υπόψη μόνο ο αριθμός των σωματιδίων που καταλαμβάνουν την κάθε μονοσωματιδιακή κατάσταση  $|u_i\rangle$ . Εισάγουμε για τον σκοπό αυτόν τα διανύσματα κατάστασης

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle, \quad \sum_{j=1}^{\infty} n_j = N \quad (2.18)$$

Το διάνυσμα αυτό μπορεί να ερμηνευθεί ως μια κατάσταση  $N$  σωματιδίων από τα οποία  $n_1$  βρίσκονται στην μονοσωματιδιακή κατάσταση  $|u_1\rangle$ ,  $n_2$  στην  $|u_2\rangle$  κ.τ.λ. Το σύνολο των διανυσμάτων αυτών  $\{|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle\}$  αποτελεί μία βάση του χώρου Hilbert για τις καταστάσεις των  $N$  ταυτόσημων σωματιδίων. Με άλλα λόγια ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις ορθοκανονικότητας και πληρότητας αντιστοίχως:

$$\langle n_1, n_2, n_3, \dots | n'_1, n'_2, n'_3, \dots \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \delta_{n_3, n'_3} \dots \quad (2.19)$$

$$\sum_{n_1, n_2, n_3, \dots} |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \langle n_1, n_2, n_3, \dots| = 1 \quad (2.20)$$

και συνεπώς η τυχαία κατάσταση  $|\Psi\rangle$  μπορεί να γραφεί ως

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots} c(n_1, n_2, n_3, \dots) |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (2.21)$$

Μια γενίκευση του παραπάνω χώρου των  $N$  ταυτόσημων σωματιδίων αποτελεί ο χώρος Fock, στον οποίον περιέχονται πλέον καταστάσεις με διαφορετικό συνολικό αριθμό σωματιδίων. Για την κατασκευή ενός τέτοιου χώρου απλώς συνδυάζουμε όλους τους χώρους καταστάσεων  $N$  σωματιδίων, με  $N=0,1,2,3,\dots$ . Η αντίστοιχη βάση αποτελείται από τα διανύσματα της μορφής

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle, \quad \sum_{j=1}^{\infty} n_j < \infty \quad (2.22)$$

Είναι πλέον φυσικό να ορίσουμε τους τελεστές αριθμού κατάληψης  $\hat{n}_j$  οι οποίοι έχουν ως ιδιοκαταστάσεις τα παραπάνω διανύσματα με αντίστοιχη ιδιοτιμή τον αριθμό των σωματιδίων που καταλαμβάνουν την κατάσταση  $|u_j\rangle$

$$\hat{n}_j |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = n_j |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (2.23)$$

Συνεχίζοντας την κατασκευή του νέου φορμαλισμού, ορίζουμε τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σωματιδίων με απώτερο στόχο τη σύνδεση μεταξύ πρώτης και δεύτερης

κβάντωσης. Οι τελεστές αυτοί είναι πρωτίστης σημασίας για τον φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης καθώς επιτρέπουν την έκφραση όλων των χρήσιμων τελεστών συναρτήσει αυτών, κάτι που θα φανεί ιδιαίτερα χρήσιμο στη συνέχεια. Ο τελεστής δημιουργίας ενός σωματιδίου στην τυχαία κατάσταση  $|\varphi\rangle$  ορίζεται

$$\alpha^\dagger(\varphi) |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = |\varphi, \psi_1, \dots, \psi_N\rangle \quad (2.24)$$

Η φυσική ερμηνεία της δράσης του τελεστή  $\alpha^\dagger$  δεν είναι άλλη από τη μετατροπή μιας κατάστασης  $N$  σωματιδίων σε κατάσταση  $N + 1$  σωματιδίων προσθέτοντας ένα επιπλέον σωματίδιο στην κατάσταση  $|\varphi\rangle$ .

Αντίστοιχα ο τελεστής καταστροφής σωματιδίου στην τυχαία κατάσταση  $|\varphi\rangle$  ορίζεται ως ο συζυγής του αντίστοιχου τελεστή δημιουργίας

$$\alpha(\varphi) = [\alpha^\dagger(\varphi)]^\dagger \quad (2.25)$$

και η φυσική του σημασία εκφράζεται ως η μετατροπή ενός συστήματος που χαρακτηρίζεται από  $N$  σωματίδια σε μια κατάσταση  $N - 1$  σωματιδίων.

Οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής ικανοποιούν τις παρακάτω αλγεβρικές ιδιότητες που διαθέτουν ενσωματωμένη και χαρακτηρίζουν τη στατιστική των σωματιδίων στα οποία αναφέρονται:

1.  $[\alpha^\dagger(\varphi_1), \alpha^\dagger(\varphi_2)]_{-\zeta} = 0^2$
2.  $[\alpha(\varphi_1), \alpha(\varphi_2)]_{-\zeta} = 0$
3.  $[\alpha(\varphi_1), \alpha^\dagger(\varphi_2)]_{-\zeta} = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$

όπου εξόρισμού  $[A, B]_{-\zeta} = AB - \zeta BA$ .<sup>3</sup>

Από τον ορισμό των τελεστών αυτών προκύπτουν και τα ακόλουθα συμπεράσματα. Πρώτον, η δράση του τελεστή καταστροφής στην κατάσταση κενού  $|0\rangle$  την μηδενίζει

$$\alpha(\varphi) |0\rangle = 0 \quad \text{με } \langle 0|0\rangle = 1 \quad (2.26)$$

Επιπλέον, τα διανύσματα του χώρου Fock κατασκευάζονται απλά δρώντας με τους τελεστές δημιουργίας στην αντίστοιχη ιδιοκατάσταση πάνω στην κατάσταση κενού

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = [\alpha^\dagger(u_1)]^{n_1} [\alpha^\dagger(u_2)]^{n_2} [\alpha^\dagger(u_3)]^{n_3} \dots |0\rangle \quad (2.27)$$

Με τη βοήθεια των Εξ.(2.23) και Εξ.(2.27) μπορεί εύκολα ναδειχθεί ότι ο τελεστής αριθμού κατάληψης γράφεται συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στη μορφή

$$\hat{n}_j = \alpha^\dagger(u_j)\alpha(u_j) \quad (2.28)$$

<sup>2</sup> Από την ιδιότητα αυτή με την αντικατάσταση  $\varphi_1 = u_j$  και  $\varphi_2 = u_j$  προκύπτει η απαγορευτική αρχή Pauli κατά την οποία για φερμιόνια μόνο δύο είναι οι δυνατές τιμές για την κάθε ιδιοτιμή  $n_j$ , οι τιμές 0 και 1

<sup>3</sup> Για μποζόνια ορίζεται ο μεταθέτης  $[A, B]_- = AB - BA$  ενώ για φερμιόνια ορίζεται ο αντιμεταθέτης  $[A, B]_+ = AB + BA$ . Από εδώ και στο εξής θα χρησιμοποιήσουμε για ευκολία τις ισοδύναμες μορφές  $[A, B]_- = [A, B]$  και  $[A, B]_+ = \{A, B\}$



από όπου προκύπτει και η μορφή του τελεστή αριθμησης, δηλαδή του τελεστή που δίνει τον ολικό αριθμό σωματιδίων

$$\hat{N} = \sum_j \alpha^\dagger(u_j)\alpha(u_j) \quad (2.29)$$

Αν θεωρήσουμε την βάση των εντοπισμένων καταστάσεων  $\{|x\sigma\rangle\}$ , όπου η  $|x\sigma\rangle$  περιγράφει την κατάσταση εντοπισμού του σωματιδίου στη θέση  $x$  με σπιν  $\sigma$ , τότε οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής

$$\begin{aligned} c_\sigma^\dagger(x) &\equiv \alpha^\dagger(\mathbf{x}\sigma) \\ c_\sigma(x) &\equiv \alpha(\mathbf{x}\sigma) \end{aligned} \quad (2.30)$$

ονομάζονται τελεστές πεδίου.<sup>4</sup>

Είμαστε σε θέση τώρα να δείξουμε [1, Sec 3.6] ότι οι τελεστές ενός σώματος και δύο σωματίων που ορίστηκαν στην προηγούμενη παράγραφο γράφονται συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής

$$A_N = \sum_{i,j} A_{ij} \alpha^\dagger(u_i)\alpha(u_j) \quad \text{με} \quad A_{ij} = \langle u_i | A_1 | u_j \rangle \quad (2.31)$$

και αντίστοιχα

$$B_N = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} B_{i,j,k,l} \alpha^\dagger(u_i)\alpha^\dagger(u_j)\alpha(u_l)\alpha(u_k) \quad (2.32)$$

με

$$B_{i,j,k,l} = \langle u_i, u_j | B_2 | u_k, u_l \rangle$$

δηλαδή συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στην μονοσωματιδιακή τυχούσα βάση  $|u_i\rangle$  και των συντελεστών του αντίστοιχου τελεστή στον χώρο του ενός ή των δύο σωματιδίων.

Με τη βοήθεια των εξ.(2.31) και εξ.(2.32) είναι δυνατή η έκφραση της ολικής Χαμιλτονιανής ενός συστήματος ταυτόσημων σωματιδίων τα οποία κινούνται με κινητική ενέργεια που εκφράζεται μέσω του τελεστή  $T$  παρουσία ενός εξωτερικού δυναμικού που περιγράφεται μέσω του τελεστή  $V$  (στον χώρο του ενός σωματιδίου) και αλληλεπιδρούν μέσω ενός τελεστή δυναμικού  $U$  (στον χώρο των δύο σωματιδίων)

$$H = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} \alpha^\dagger(u_i)\alpha(u_j) + \frac{1}{2} \sum_{i,j,l,m} U_{ijklm} \alpha^\dagger(u_i)\alpha^\dagger(u_j)\alpha(u_m)\alpha(u_l) \quad (2.33)$$

όπου:

$$\epsilon_{i,j} = \langle u_i | (T + V) | u_j \rangle \quad (2.34)$$

$$U_{ijklm} = \langle u_i, u_j | U | u_l, u_m \rangle \quad (2.35)$$

<sup>4</sup>Στη συνέχεια θα μας ενδιαφέρει η περίπτωση όπου φερμιόνια μπορούν να βρεθούν σε διακριτές θέσεις σε σημεία ενός πλέγματος, οπότε ο συμβολισμός για τους τελεστές πεδίου απλοποιείται ως

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}^\dagger &\equiv \alpha^\dagger(x = R_i, \sigma) \\ c_{i\sigma} &\equiv \alpha(x = R_i, \sigma) \end{aligned}$$

## 2.2 Υπενθύμιση για το Μεγαλοκανονικό σύνολο

Η αναπαράσταση Fock είναι ιδιαίτερα πρακτική για την αντιμετώπιση συστημάτων στο μεγαλοκανονικό σύνολο εξαιτίας της δυνατότητας θεώρησης μεταβλητού συνολικού αριθμού σωματιδίων.

Συμβολίζοντας με  $\{|\Psi_j\rangle\}$  το σύνολο των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής  $\hat{H}$  του συνολικού συστήματος, το οποίο ταυτίζεται και με το σύνολο των ιδιοκαταστάσεων του τελεστή αρίθμησης εφόσον αντιμετωπίζεται με την Χαμιλτονιανή,

$$\begin{aligned}\hat{H}|\Psi_j\rangle &= E_j|\Psi_j\rangle \\ \hat{N}|\Psi_j\rangle &= N_j|\Psi_j\rangle\end{aligned}\quad (2.36)$$

γνωρίζουμε ότι η πιθανότητα εμφάνισης στο σύστημα της ιδιοκατάστασης  $|\Psi_j\rangle$  ισούται με

$$P_j = \frac{1}{Z} \exp\{-\beta(E_j - \mu N_j)\} \quad (2.37)$$

όπου  $\beta = (kT)^{-1}$  με  $k$  την σταθερά του Boltzmann,  $\mu$  το χημικό δυναμικό<sup>5</sup> και  $Z$  η συνάρτηση επιμερισμού για το μεγαλοκανονικό σύνολο που δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned}Z &= \sum_j \exp\{-\beta(E_j - \mu N_j)\} \\ &= Tr\{e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}\} \\ &= Tr\{\hat{\rho}\}\end{aligned}\quad (2.38)$$

Το ίχνος του τελεστή πυκνότητας  $\hat{\rho} = e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}$ , όπως και κάθε τελεστή, είναι ανεξάρτητο της βάσης που χρησιμοποιούμε, οπότε μπορούμε κάθε φορά να χρησιμοποιήσουμε την περισσότερο βολική.

Η μέση τιμή ενός τυχαίου τελεστή  $\hat{A}$  στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας υπολογίζεται

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} Tr\{\hat{\rho}\hat{A}\} \quad (2.39)$$

Γνωρίζοντας την συνάρτηση επιμερισμού και τον τελεστή πυκνότητας είναι δυνατή η εύρεση ενός μεγάλου πλήθους θερμοδυναμικών μεγεθών του συστήματος, μεταξύ των οποίων χρήσιμα είναι

- το μεγάλο δυναμικό:  $\Omega = kT \ln Z$
- η εσωτερική ενέργεια:  $U = \langle \hat{H} \rangle$
- το πλήθος σωματιδίων:  $N = \langle \hat{N} \rangle$
- η ελεύθερη ενέργεια:  $F = \Omega + \mu N$

<sup>5</sup>Το χημικό δυναμικό εισάγεται ως περιορισμός για το γεγονός ότι ο συνολικός αριθμός σωματιδίων του συστήματος και της δεξαμενής διατηρείται σταθερός και φυσικά, σε αντιστοιχία με το ηλεκτρικό δυναμικό, περιγράφει την ενέργεια που απαιτείται για την μεταφορά από το άπειρο μέσα στο σύστημα ενός επιπλέον σωματιδίου

Για το μεγαλοκανονικό σύνολο ισχύει: Υπό συνθήκες σταθερής θερμοκρασίας  $T$ , σταθερού όγκου  $V$  και σταθερού χημικού δυναμικού  $\mu$  το σύστημα επιτυγχάνει της κατάσταση ευσταθούς θερμοδυναμικής ισορροπίας προσαρμόζοντας τις ελεύθερες παραμέτρους του έτσι, ώστε να ελαχιστοποιήσει την τιμή του μεγάλου δυναμικού  $\Omega$ .

Αντίθετα, αν πρόκειται για συνθήκες σταθερού αριθμού σωματιδίων και όχι σταθερού χημικού δυναμικού το σύστημα αναφέρεται στο κανονικό σύνολο κι έτσι το μέγεθος που ελαχιστοποιείται κατά την κατάσταση της ευσταθούς ισορροπίας είναι το αντίστοιχο θερμοδυναμικό δυναμικό του συγκεκριμένου συνόλου, δηλαδή η ελεύθερη ενέργεια.

**Μη αλληλεπιδρώντα σωματίδια:** Στον φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης ο τελεστής  $\hat{H} - \mu\hat{N}$  ενός συστήματος ταυτόσημων σωματιδίων που δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους (οπότε η αντίστοιχη Χαμιλτονιανή περιέχει μόνο κινητικούς όρους) γράφεται με τη βοήθεια της Εξ.(2.31) ως

$$\begin{aligned}\hat{H} - \mu\hat{N} &= \sum_{i,j} \langle u_i | \hat{H}_1 | u_j \rangle \alpha^\dagger(u_i) \alpha(u_j) - \mu \sum_{i,j} \alpha^\dagger(u_i) \alpha(u_j) \\ &= \sum_{i,j} \langle u_i | \epsilon_j | u_j \rangle \alpha^\dagger(u_i) \alpha(u_j) - \mu \sum_{i,j} \alpha^\dagger(u_i) \alpha(u_j) \\ &= \sum_i (\epsilon_i - \mu) \alpha^\dagger(u_i) \alpha(u_i)\end{aligned}\quad (2.40)$$

όπου  $\{|u_i\rangle\}$  το σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων της Χαμιλτονιανής ενός σωματιδίου  $\hat{H}_1$  και  $\epsilon_i$  η αντίστοιχη ιδιοτιμή. Η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος στον φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης ως προς την βάση  $\{|u_i\rangle\}$ <sup>6</sup> είναι η  $|1, \dots, 1, 0, \dots\rangle$ , ενώ μια στοιχειωδώς διεγερμένη κατάσταση  $|\Phi_{exc}\rangle = |1, 1, \dots, 1, 0, 1, \dots, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle$

Ο τελεστής αυτός, όπως φαίνεται από την Εξ.(2.40), είναι διαγώνιος και είναι εύκολη η εξαγωγή χρήσιμων θερμοδυναμικών ποσοτήτων, μία από τις οποίες [1, Sec 4.4.1] είναι η συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων στις μονοσωματιδιακές ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής

$$n(u_i) = \langle \hat{n}_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - \zeta} \quad (2.41)$$

Από την παραπάνω σχέση προκύπτει άμεσα ο μέσος αριθμός σωματιδίων

$$N = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - \zeta} \quad (2.42)$$

απ'όπου είναι δυνατή η έκφραση του χημικού δυναμικού συναρτήσει της θερμοκρασίας και του αριθμού των σωματιδίων του συστήματος.

<sup>6</sup> για ελεύθερα σωματίδια το σύνολο των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής ενός σωματιδίου ταυτίζεται με το σύνολο  $\{|k\rangle\}$  του τελεστή της ορμής. Συμβολίζοντας τους αντίστοιχους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σωματιδίου με ορμή  $k$  και σπιν  $\sigma$  ως  $c_{k\sigma}^\dagger$  και  $c_{k\sigma}$  η σχέση (2.40) γράφεται  $H - \mu N = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  με  $\epsilon_k = \frac{|k|^2}{2m}$

**Σημείωση για αλληλεπιδρώντα σωματίδια:** Στην γενικότερη και σημαντικότερη αυτή περίπτωση η Χαμιλτονιανή δεν μπορεί να εκφραστεί ως διαγώνια στην βάση  $\{|u_i\rangle\}$ . Επομένως, εκτός από λίγα και απλά μοντέλα στη μία ή στις δύο διαστάσεις ο ολοκληρωμένος υπολογισμός δεν είναι δυνατός σε συστήματα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων. Αυτό είναι το λεγόμενο πρόβλημα της Φυσικής Πολλών Σωματιδίων.

Για να υπολογίσουμε την θεμελιώδη κατάσταση και την αντίστοιχη της ιδιοενέργεια, αλλά και διεγερμένες καταστάσεις καθώς επίσης και θερμοδυναμικά μεγέθη που προκύπτουν, έχουν προταθεί αρκετές προσεγγιστικές μέθοδοι. Οι πιο χρήσιμες από αυτές είναι διάφορες μέθοδοι διαταραχών, μέθοδοι μέσου πεδίου (με την οποία θα ασχοληθούμε σε επόμενο κεφάλαιο) και η αριθμητική μέθοδος Monte-Carlo, η επιτυχία των οποίων εξαρτάται κυρίως από το μέγεθος των αλληλεπιδράσεων και το πόσο καλή προσέγγιση έχει γίνει.

## 2.3 Κρυσταλλική δομή στερεού σώματος

Μιλώντας αυστηρά, η μελέτη ενός στερεού σώματος και ειδικότερα ενός κρυσταλλικού στερεού οδηγεί στη μελέτη ενός συστήματος αποτελούμενου από έναν μεγάλο αριθμό νουκλεονίων και ηλεκτρονίων. Η δομή και η συμπεριφορά ενός στερεού καθώς και οι ηλεκτρονικές, οπτικές και πλεγματικές ιδιότητες του καθορίζονται κατά κύριο λόγο από τα ηλεκτρόνια που περιέχει. Δε συμμετέχουν, ωστόσο, όλα τα ηλεκτρόνια του συστήματος με τον ίδιο τρόπο. Οι κυματοσυναρτήσεις των εσωτερικών ηλεκτρονίων των ατόμων επεκτείνονται σε αποστάσεις πολύ μικρότερες των πλεγματικών αποστάσεων και συνεπώς τα ηλεκτρόνια αυτά είναι σθεναρά συνδεδεμένα με τα νουκλεόνια του πυρήνα του αντίστοιχου ατόμου συναποτελώντας με αυτά τα ιόντα. Αντίθετα, τα εξωτερικά ηλεκτρόνια (σθένους) διαθέτουν κυματοσυναρτήσεις οι οποίες επικαλύπτονται σε μεγαλύτερο ή μικρότερο βαθμό με τις αντίστοιχες διπλανών ατόμων επιτρέποντας έτσι την σύναψη δεσμών, την αλληλεπίδρασή τους και την ευκολότερη μετακίνηση. Από εδώ και πέρα θα θεωρήσουμε πως το στερεό αποτελείται από ιόντα -νουκλεόνια και εσωτερικά ηλεκτρόνια- και ηλεκτρόνια σθένους ή απλά ηλεκτρόνια.

### 2.3.1 Γενική μορφή Χαμιλτονιανής στερεού σώματος

Λαμβάνοντας υπόψη την παραπάνω θεώρηση, για την περιγραφή του στερεού σώματος εισάγεται η Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \hat{T}_{el} + \hat{T}_{ion} + \hat{V}_{el-el} + \hat{V}_{ion-ion} + \hat{V}_{el-ion} \quad (2.43)$$

όπου οι δύο πρώτοι όροι περιγράφουν την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων και των ιόντων αντίστοιχα, ο τρίτος όρος την αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων και ο τέταρτος την αλληλεπίδραση μεταξύ των ιόντων. Τέλος, ο τελευταίος όρος αναφέρεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων και ιόντων.

Αν συμβολίσουμε με  $r_i, p_i$  και  $m$  τη θέση, την ορμή και τη μάζα ενός ηλεκτρονίου και αντίστοιχα με  $R_i, P_i$  και  $M$  τη θέση, την ορμή και τη μάζα ενός ιόντος, τότε η Χαμιλτονιανή του συστήματος των ηλεκτρονίων και των ιόντων (2.43) γράφεται πιο αναλυτικά ως

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_l \frac{\hat{P}_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{r}_i - \hat{r}_j|} + \sum_{l,n} \hat{V}(R_l - R_n) + \sum_{i,l} \hat{V}(r_i - R_l) \quad (2.44)$$

Όπως φαίνεται και από την παραπάνω σχέση, οι αλληλεπιδράσεις που θεωρήσαμε είναι ηλεκτρικές αλληλεπιδράσεις Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων, ιόντων και ηλεκτρονίου-ιόντος αντίστοιχα.

### 2.3.2 Προσέγγιση Χαμιλτονιανής και διάφορα μοντέλα

Η Χαμιλτονιανή (2.43) μπορεί να γραφεί με κάπως διαφορετικό τρόπο αν δεχθούμε πως τα ιόντα ταλαντώνονται γύρω από τις θέσεις ισορροπίας τους οι οποίες σχηματίζουν ένα περιοδικό πλέγμα. Οι ταλαντώσεις αυτές μπορούν να θεωρηθούν αρμονικές και να περιγραφούν με τη βοήθεια μποζονίων που ονομάζονται φωνόνια. Αν  $E_{latt}$ <sup>7</sup> η ενέργεια των ιόντων όταν βρίσκονται στη θέση ισορροπίας τους, τότε

$$\hat{H} = \hat{T}_{el} + (E_{latt} + \hat{H}_{ph}) + \hat{V}_{el-el} + (\hat{V}_{el-latt} + \hat{V}_{el-ph}) \quad (2.45)$$

Ο  $\hat{H}_{ph}$  όρος αναφέρεται στο μη αλληλεπιδρόν μέρος των φωνονίων, ενώ τα  $\hat{V}_{el-latt}$  και  $\hat{V}_{el-ph}$  περιγράφουν τις αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων με το στατικό και φωνονικό μέρος των ιόντων.

Το δυναμικό  $\hat{V}_{el-latt}$  από τον ορισμό του γίνεται φανερό πως είναι περιοδικό στο χώρο με την περιοδικότητα  $R_n$  του πλέγματος των ιόντων,  $\hat{V}_{el-latt}(r + R_n) = \hat{V}_{el-latt}(r)$  για κάθε διάνυσμα πλέγματος  $R_n$ .

Χρησιμοποιώντας θερμοδυναμικά επιχειρήματα, τα ηλεκτρόνια και τα ιόντα μπορούν να θεωρηθούν σαν δύο ξεχωριστά υποσυστήματα τα οποία έρχονται σε επαφή δια μέσου του τελευταίου όρου της Χαμιλτονιανής (2.43). Υποθέτοντας θερμική ισορροπία σε όλο το σύστημα μπορούμε να γράψουμε για τον κάθε βαθμό ελευθερίας

$$\langle \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \rangle = \langle \frac{\hat{P}_l^2}{2M} \rangle \quad (2.46)$$

και καθώς  $m/M \approx 10^{-4}$  προκύπτει ότι τα ηλεκτρόνια είναι κατά πολύ ταχύτερα των ιόντων. Αυτό έχει σαν συνέπεια τα ηλεκτρόνια να 'βλέπουν' στατικά τα ιόντα και το δυναμικό που αυτά προκαλούν. Έτσι, είναι λογικό να θεωρήσουμε τα ιόντα ακίνητα στις θέσεις ισορροπίας του πλέγματος που αποτελεί την κατάσταση τους με την μικρότερη δυνατή ενέργεια. Αυτό με τη σειρά του συνεπάγεται πως αμελούμε κάθε όρο που περιγράφει δράση φωνονίων στην Χαμιλτονιανή.

Οι δύο αυτοί περιορισμοί, η περιοδικότητα του εξωτερικού προς τα ηλεκτρόνια δυναμικού του πλέγματος και η στατικότητα των ιόντων, καθορίζουν το μοντέλο πλέγματος (lattice model) του οποίου η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$H = T_{el} + V_{el-el} + V_{el-latt} \quad (2.47)$$

Αν επιπλέον προσεγγίσουμε τη διακριτή και περιοδική φύση του συστήματος των ιόντων από ένα συνεχές, ομογενές και θετικά φορτισμένο ρευστό το νέο αυτό σύστημα περιγράφεται από την

$$H = T_{el} + V_{el-el} \quad (2.48)$$

Η παραπάνω Χαμιλτονιανή ορίζει το jellium model.

<sup>7</sup>Η ενέργεια  $E_{latt}$  είναι σταθερή καθώς αναφέρεται σε ένα σύστημα ακίνητων ιόντων. Πέρα από τον υπολογισμό της ακριβούς τιμής της ενέργειας του συστήματος, το σταθερό μέρος της Χαμιλτονιανής δεν παίζει ιδιαίτερο ρόλο στην επίλυση του προβλήματος και κάθε φορά που θα εμφανίζεται ένα σταθερό μέρος θα το αγνοούμε

**Ενεργό δυναμικό:** Και στις δύο περιπτώσεις η ακριβής επίλυση της αντίστοιχης Χαμιλτονιανής είναι ένα δύσκολο πρόβλημα λόγω της ύπαρξης του όρου των αλληλεπιδράσεων των ηλεκτρονίων και γίνεται ακόμα δυσκολότερη όταν λαμβάνουμε υπόψη το περιοδικό δυναμικό των ιόντων. Μια πολύ καλή προσέγγιση που οδηγεί στην εξήγηση μεγάλου μέρους της συμπεριφοράς του στερεού είναι να θεωρήσουμε ένα ενεργό δυναμικό  $V_{eff}$  το οποίο ενσωματώνει όλες τις αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων με τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια και με το πλέγμα έτσι, ώστε η Χαμιλτονιανή να γραφεί

$$H \approx \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2m} + V_{eff}(r_i) \right) \quad (2.49)$$

Στην περίπτωση αυτή έχει προσεγγισθεί το πρόβλημα πολλών σωματιδίων από ένα πρόβλημα ενός σωματιδίου το οποίο είναι ευκολότερα επιλύσιμο. Το πρόβλημα, λοιπόν, ανάγεται στην επίλυση της εξίσωσης ιδιοτιμών του ενός σωματιδίου:

$$\left( \frac{p_a^2}{2m} + V_{eff}(r_a) \right) \psi_a = \epsilon_a \psi_a \quad (2.50)$$

Σε κάθε περίπτωση η Χαμιλτονιανή (2.49) στον φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης παίρνει τη μορφή

$$H \approx \sum_a \epsilon(a) c_a^\dagger c_a \quad (2.51)$$

Οι τιμές του  $\epsilon(a)$  μπορούν να ιδωθούν ως οι ενεργειακές καταστάσεις ενός συστήματος ελεύθερων οιονεί-σωματιδίων που ενσωματώνουν τις αλληλεπιδράσεις. Για το jellium model, ειδικότερα, έχουμε  $H_{jell} \approx \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ , ενώ για το γενικότερο μοντέλο πλέγματος

$$H_{latt} \approx \sum_{n,k,\sigma} \epsilon_n(k, \sigma) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.52)$$

Το τελευταίο μπορεί να εξηγήσει την θεωρία ζωνών στα στερεά, κάτι που φαίνεται με την προσθήκη του δείκτη ζώνης  $n$ , ενώ η γενική μονοσωματιδιακή λύση είναι της μορφής

$$\psi_{nk\sigma}(r) = u_{nk}(r) e^{jkr} \chi_\sigma \quad \text{με} \begin{cases} k \in FBZ \\ u_{nk}(r + R_n) = u_{nk}(r) \\ n: \text{δείκτης ζώνης} \end{cases} \quad (2.53)$$

Το πρόβλημα έγκειται πλέον στον υπολογισμό των συναρτήσεων  $u_{nk}(r)$ . Έχουν αναπτυχθεί αρκετές μέθοδοι, οι σπουδαιότερες των οποίων είναι:

- Μοντέλο Σχεδόν Ελεύθερων Ηλεκτρονίων: εφόσον οι συναρτήσεις  $u_{nk}(r)$  είναι περιοδικές μπορούν να αναπτυχθούν κατά Fourier,

$$\psi_{nk}(r) = \sum_G C_{nk}(G) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{j(k+G)r} \quad (2.54)$$

Οπότε το πρόβλημα πλέον μεταφέρεται στον υπολογισμό των συντελεστών  $C_{nk}$ . Η μέθοδος αυτή είναι επιτυχής κυρίως όταν οι κινητικοί όροι επικρατούν σε σχέση με τους αντίστοιχους δυναμικούς όρους. Στην περίπτωση αυτή, το περιοδικό δυναμικό μπορεί να θεωρηθεί ως διαταραχή.

- Μοντέλο LCAO (linear combination of atomic orbitals): Στο μοντέλο αυτό χρησιμοποιούμε τα ατομικά τροχιακά  $\phi_\nu$  των ατόμων που απαρτίζουν το στερεό όταν αυτά βρίσκονται απομονωμένα και υποθέτουμε πως τα τροχιακά  $\psi_{nk}(r)$  γράφονται ως γραμμικός συνδυασμός αυτών

$$\psi_{nk}(r) = \sum_{\nu} C_{n\nu} \phi_{\nu}(r) \quad (2.55)$$

με τα τελευταία να έχουν τη μορφή των επικαλυμμένων ατομικών τροχιακών, ώστε να συμβαδίζουν με την μορφή του Bloch

$$\psi_{nk}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{jkR_n} \phi_{\nu}(r - R_n) \quad (2.56)$$

Και στην περίπτωση αυτή το πρόβλημα ανάγεται στον υπολογισμό των συντελεστών. Περαιτέρω απλοποίηση μπορεί να επιτευχθεί αν θεωρήσουμε πως η αλληλεπίδραση μεταξύ των ατομικών τροχιακών περιορίζεται μόνο μεταξύ των κοντινότερων γειτόνων. Κάτι τέτοιο δικαιολογείται μόνο για επαρκώς χωρικά περιορισμένα τροχιακά. Η προσέγγιση αυτή ονομάζεται μοντέλο ισχυρού δεσμού ('tight-binding').

## 2.4 Καταστάσεις τάξεως

**Μεταβάσεις Φάσης:** Ένα διάγραμμα το οποίο περιγράφει στον χώρο των φυσικών παραμέτρων που επηρεάζουν το σύστημα (θερμοκρασία, μαγνητικό πεδίο κ.α.) την κατάσταση που αυτό βρίσκεται για κάθε τιμή των παραμέτρων ονομάζεται διάγραμμα φάσης του συστήματος. Περιοχή φάσης είναι μία περιοχή σημείων στο διάγραμμα φάσης του υλικού στην οποία το αντίστοιχο θερμοδυναμικό δυναμικό και όλες οι θερμοδυναμικές ποσότητες που εξαρτιώνται από αυτό είναι αναλυτικές συναρτήσεις. Επομένως, όταν το σύστημα βρεθεί κοντά σε μία κρίσιμη καμπύλη τότε μία πολύ μικρή μεταβολή της τιμής μιας φυσικής παραμέτρου του συστήματος οδηγεί σε μεγάλες ποιοτικές μεταβολές των φυσικών του χαρακτηριστικών. Μια τέτοια περίπτωση ονομάζεται αλλαγή φάσης του συστήματος. Υπεύθυνες για αυτή την ασυνέχεια ή τον απειρισμό είναι οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων. Για να μελετήσουμε, λοιπόν, τις αλλαγές φάσης είμαστε υποχρεωμένοι να λάβουμε υπόψη μας τις αλληλεπιδράσεις αυτές χωρίς να μπορούμε, λόγω ευκολίας, να τις αμελήσουμε. Βασικός στόχος της έρευνας αποτελεί σήμερα η εξαγωγή του διαγράμματος φάσης για λειτουργικά υλικά, κάτι όχι ιδιαίτερα εύκολο καθώς σε ορισμένες περιπτώσεις δεν μπορεί να γίνει πλήρης ταυτοποίηση των αντίστοιχων φάσεων.

Ο Ehrenfest πρότεινε μια κατηγοριοποίηση των μεταβάσεων σύμφωνα με το ποιες φυσικές ποσότητες (και τη σχέση τους με το θερμοδυναμικό δυναμικό) εμφανίζουν ασυνέχεια κατά τη μετάβαση:

Αν όλες οι παράγωγοι μέχρι  $n - 1$  τάξης, οπότε και τα μεγέθη που σχετίζονται με αυτές, του θερμοδυναμικού δυναμικού είναι συνεχείς και η παράγωγος  $n$  τάξης ασυνεχής, η μετάβαση θα είναι τάξης  $n$ .

**Καταστάσεις Τάξεως:** Μια μακροσκοπική κατάσταση του συστήματος στην οποία εμφανίζεται τάξη σε ένα φυσικό μέγεθος που δεν υπήρχε στην κανονική κατάσταση ονομάζεται κατάσταση τάξης. Τέτοιες καταστάσεις παρουσιάζουν δύο βασικά χαρακτηριστικά γνωρίσματα. Το ένα γνώρισμα είναι η τάξη μακράς εμβέλειας που εμφανίζει. Ακόμα και στην κανονική κατάσταση του συστήματος παρουσιάζεται μια τάξη, αλλά αυτή είναι μικρής εμβέλειας όπου σε μεγάλη κλίμακα δεν γίνεται παρατηρήσιμη, αντίθετα από ό,τι συμβαίνει στην κατάσταση τάξης. Το δεύτερο γνώρισμα αποτελεί το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετριών που εμφανίζονται κατά την κατάσταση αταξίας. Στις καταστάσεις αυτές το σύστημα παύει να παραμένει αναλλοίωτο κάτω από μετασχηματισμούς συμμετρίας, οι πιο συνηθισμένες από τις οποίες είναι:

- συμμετρία μεταφοράς στον χώρο
- συμμετρία περιστροφής στον χώρο
- συμμετρίες που σχετίζονται με την κρυσταλλική δομή του πλέγματος
- συμμετρία αντιστροφής του χρόνου
- συμμετρία βαθμίδας, για γενικευμένα φορτία

Βοηθητική έννοια για τις μεταβάσεις φάσης σε καταστάσεις τάξης αποτελεί η παράμετρος τάξης. Οι παράμετροι αυτές είναι φυσικές ποσότητες που ορίζονται κατά περίπτωση, ανάλογα με τις ιδιαιτερότητες της συγκεκριμένης φάσης και χαρακτηρίζουν την αλλαγή της συμμετρίας που συμβαίνει στο σημείο της μετάβασης. Μια παράμετρος τάξης θα πρέπει να έχει μηδενική τιμή όταν το υλικό βρίσκεται στη συνηθισμένη του κατάσταση, μη μηδενική όταν βρίσκεται στην κατάσταση τάξης και να αυξάνεται όσο προχωράμε πιο 'βαθιά' στη νέα φάση.

Στην περίπτωση που οι παράμετροι τάξης δύο ή περισσότερων φάσεων είναι μη μηδενικές για συγκεκριμένο σημείο του διαγράμματος φάσης, θα έχουμε συνύπαρξη των φάσεων αυτών στο υλικό.

Η κατηγοριοποίηση του Ehrenfest με χρήση της παραμέτρου τάξης γίνεται ως εξής: Αν η παράμετρος τάξης είναι ασυνεχής στο σημείο μετάβασης τότε πρόκειται για μετάβαση πρώτης τάξης. Στην περίπτωση αυτή μπορούμε να έχουμε συνύπαρξη φάσεων στις κρίσιμες τιμές των παραμέτρων. Αν η παράμετρος τάξης είναι συνεχής στο σημείο της μετάβασης με ασυνεχή πρώτη παράγωγο, πρόκειται για μετάβαση φάσης δεύτερης τάξης κ.τ.λ. Σε αυτές τις περιπτώσεις δεν είναι δυνατή η συνύπαρξη φάσεων στις κρίσιμες τιμές των παραμέτρων.



# Βιβλιογραφία

- [1] Γρηγόριος Χ. Ψαλτάκης, 'Κβαντικά Συστήματα Πολλών Σωματιδίων', Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2008.
- [2] Henrik Bruus & Karsten Flensberg, 'Introduction to Many-body quantum theory in condensed matter physics', Copenhagen, 2003.
- [3] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F.Laloe, 'Quantum Mechanics vol1-vol2'
- [4] Ramamurti Shankar, 'Principles of Quantum Mechanics'.
- [5] Claude Garrod, 'Statistical Mechanics and Thermodynamics', OXFORD UNIVERSITY PRESS, 1995.
- [6] U.Rossler, 'Solid State Theory, An Introduction', Springer, Regensburg, April 2004

## Κεφάλαιο 3

# Το Extended Hubbard Model και η μέθοδος Bogoliubov-de Gennes

### 3.1 Συστήματα ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων

Στο προηγούμενο κεφάλαιο περιγράφηκε η εισαγωγή ενός ενεργού δυναμικού στο μοντέλο πλέγματος και η μετατροπή του προβλήματος του στερεού σε ανεξάρτητη περιγραφή οιονεί-σωματιδίων για τον σχηματισμό ενεργειακών ζωνών που αυτά θα καταλάβουν. Το μοντέλο αυτό, όπως και όσα μοντέλα αγνοούν τις αλληλεπιδράσεις ή τις χειρίζονται περισσότερο προσεγγιστικά, αδυνατεί να περιγράψει συγκεκριμένες συμπεριφορές -πειραματικά φαινόμενα και μεταβάσεις φάσης - που εμφανίζονται σε διάφορα λειτουργικά υλικά, πρόσφατα ανακαλυμμένα, στα οποία οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων φαίνεται να παίζουν σπουδαιότερο του συνηθισμένου ρόλο. Παραδείγματα τέτοιων φαινομένων είναι η μετάβαση από μέταλλο σε Mott μονωτή, η μετάβαση ενός παραμαγνητικού υλικού σε αντισιδηρομαγνητικό καθώς και η εμφάνιση υπεραγωγιμότητας υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας.

Για τους λόγους αυτούς είναι απαραίτητη η μελέτη συστημάτων αλληλεπιδρώντων σωματιδίων. Από την Εξ.(2.33) μπορούμε να γράψουμε την Χαμιλτονιανή ενός τέτοιου συστήματος στην βάση  $\{|k\sigma\rangle\}$  των δυνατών κυματανυσμάτων<sup>1</sup> του ενός σωματιδίου

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,k',q \in BZ} \sum_{\sigma,\sigma'} U(q) c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} \quad (3.1)$$

Οι συντελεστές  $\epsilon_k$  που χαρακτηρίζουν το ελεύθερο μέρος της Χαμιλτονιανής περιλαμβάνουν τους κινητικούς όρους των ηλεκτρονίων καθώς επίσης και την συνεισφορά του περιοδικού δυναμικού των ιόντων και ένα ενεργό δυναμικό αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων στις χαμηλότερες ενεργειακά ζώνες που είναι πλήρως κατειλημμένες, ενώ για τους συντελεστές του αλληλεπιδρώντος τμήματος της (3.1) ισχύει

$$U(q) = \begin{cases} \frac{4\pi e^2}{2V|q|^2}, & q \neq 0 \\ 0, & q = 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

---

<sup>1</sup>βασική προϋπόθεση είναι να θεωρήσουμε πως η ορμή και το spin διατηρούνται ως καλοί κβαντικοί αριθμοί του συστήματος που μελετάμε

με  $V$  τον όγκο του συστήματος. Ουσιαστικά, οι συντελεστές  $U(q)$  είναι οι συντελεστές Fourier του δυναμικού αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων της σχέσης (2.44). Η μόνη διαφορά της Χαμιλτονιανής (3.1) σε σχέση με τη γενική Εξ(2.33) είναι η ύπαρξη τριών διαφορετικών δεικτών που περιγράφουν τους κβαντικούς αριθμούς έναντι τεσσάρων και οφείλεται στο γεγονός πως στην περίπτωση που εξετάζουμε το κομμάτι της Χαμιλτονιανής περιγράφει αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίων όπου η συνολική ορμή διατηρείται. Ποσό  $q$  ορμής μεταδίδεται από το ένα ηλεκτρόνιο στο άλλο κατά την αλληλεπίδραση.

Υποθέτοντας περιοδικές συνθήκες στα όρια του συστήματος, οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σωματιδίων σε καταστάσεις Bloch μπορούν να γραφούν ως γραμμικός συνδυασμός των τελεστών πεδίου:

$$c_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{jkR_i} c_{i\sigma} \quad \text{και} \quad c_{k\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-jkR_i} c_{i\sigma}^\dagger \quad (3.3)$$

Με αντικατάσταση των σχέσεων (3.3) στο ελεύθερο μέρος της Χαμιλτονιανής (3.1) έχουμε

$$\begin{aligned} \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k \frac{1}{N} \sum_i e^{-jkR_i} c_{i\sigma}^\dagger \sum_j e^{jkR_j} c_{j\sigma} \\ &= \sum_{i,j,\sigma} \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k e^{jk(R_j-R_i)} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \\ &= \sum_{i,\sigma} \epsilon_{at} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i \neq j}} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \end{aligned} \quad (3.4)$$

με<sup>2</sup>  $\epsilon_{at} = \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k$  και  $t_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k e^{jk(R_j-R_i)}$ . Ο πρώτος όρος της παραπάνω ισότητας αποτελεί την ενέργεια που έχει ένα ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται μόνο του σε ένα σημείο του πλέγματος, ενώ ο δεύτερος αναφέρεται στο κέρδος ενέργειας που προκύπτει από τον απεντοπισμό των ηλεκτρονίων και την κίνησή τους μέσα στο πλέγμα μεταξύ των σημείων  $R_i$  και  $R_j$ .

Με τον ίδιο τρόπο το αλληλεπιδρόν μέρος της εξίσωσης (3.1) μπορεί να γραφεί

$$\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} U(q) c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k',\sigma'} c_{k,\sigma} = \sum_{i,\sigma,\sigma'} U_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma} + \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} V_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} c_{i\sigma} \quad (3.5)$$

όπου  $U_i$  είναι το στοιχείο πίνακα της αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ δύο κυματοσυναρτήσεων ηλεκτρονίων που βρίσκονται κεντραρισμένες στο ίδιο πλεγματοσυντονιστικό σημείο  $R_i$ , ενώ  $V_{ij}$  το στοιχείο πίνακα της αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ ενός ηλεκτρονίου στο σημείο  $R_i$  και ενός στο σημείο  $R_j$ .

## 3.2 Το Απλό Μοντέλο Hubbard

Η ακριβής επίλυση της Χαμιλτονιανής (3.1) ή ισοδύναμα της (3.4) είναι δύσκολη αν όχι αδύνατη. Το μοντέλο Hubbard είναι το απλούστερο μοντέλο πολλών σωματιδίων που επιτρέπει την περιγραφή δύο αντίθετων τάσεων:

<sup>2</sup> Από εδώ και πέρα θα θεωρήσουμε ως σημείο αναφοράς  $\epsilon_{at} = 0$ . Με άλλα λόγια, το ατομικό επίπεδο στο οποίο η ζώνη κεντράρεται επιλέγεται ως ενέργεια μηδέν

- την κινητική ενέργεια, που οδηγεί στον απεντοπισμό των ηλεκτρονίων (καταστάσεις Bloch)
- την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου που οδηγεί στον εντοπισμό των ηλεκτρονίων στα σημεία του πλέγματος

και σχεδιάστηκε αρχικά για να εξηγήσει την πειραματική παρατήρηση ότι οξειδία που με βάση την ηλεκτρονιακή τους δομή η θεωρία ζωνών τα κατατάσσει ως μέταλλα, στην πράξη προκύπτουν να συμπεριφέρονται ως μονωτές (Mott insulators).

Το μοντέλο Hubbard ορίζεται από τις εξής απλοποιήσεις:

- Η ενέργεια μεταπήδησης  $t_{ij}$ , η οποία θεωρείται συναρτήσει μόνο της σχετικής θέσης των σημείων  $\mathbf{R}_i$  και  $\mathbf{R}_j$ , καθορίζεται από την επικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων του ζεύγους των σημείων του πλέγματος. Καθώς οι κυματοσυναρτήσεις εξασθενούν εκθετικά, μόνο για κοντινά σημεία του πλέγματος υπάρχει μετάβαση ηλεκτρονίων. Στο μοντέλο Hubbard για ένα κυβικό πλέγμα, μόνο μεταξύ κοντινότερων γειτονικών σημείων θεωρείται μη μηδενική τιμή της ενέργειας  $t_{ij}$  και εξαιτίας της σταθερής απόστασης μεταξύ των γειτονικών σημείων θα είναι

$$t_{ij} = \begin{cases} -t, & \text{αν } \mathbf{R}_i \text{ και } \mathbf{R}_j \text{ κοντινότεροι γείτονες} \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

- Όμοια η απώθηση Coulomb μεταξύ δύο ηλεκτρονίων εξασθενεί ανάλογα με την απόσταση κι έτσι θεωρούμε μη μηδενική αλληλεπίδραση μόνο μεταξύ ηλεκτρονίων στο ίδιο σημείο του πλέγματος (μικρής κλίμακας αλληλεπίδραση),  $U_i = U$  και  $V_{ij} = 0$ .
- Υποθέτει μια μη εκφυλισμένη, στενή ζώνη ενεργειών στην οποία βρίσκονται τα ηλεκτρόνια που μας ενδιαφέρουν και περιγράφονται από το συγκεκριμένο μοντέλο. Για πλέγματα Bravais το μοντέλο περιλαμβάνει μόνο μία ζώνη και σε κάθε σημείο του πλέγματος αντιστοιχεί ένα μοναδικό τροχιακό. Συνεπώς ένα άτομο μπορεί να δεχθεί δύο το πολύ ηλεκτρόνια.

Από τα παραπάνω γίνεται φανερό πως το συγκεκριμένο μοντέλο έχει την ίδια αφετηρία με το μοντέλο του ισχυρού δεσμού, θεωρώντας επικαλύψεις μεταξύ τροχιακών μόνο σε μικρής κλίμακας αποστάσεις. Θεωρείται, όμως ως μια βελτίωση της προσέγγισης 'tight binding' καθώς πέρα από τον κινητικό όρο μεταπήδησης ηλεκτρονίων σε γειτονικά σημεία του πλέγματος περιλαμβάνει και μια τοπική αλληλεπίδραση Coulomb που αγνοείται από την προηγούμενη προσέγγιση.

Ύστερα από τις παραπάνω απλοποιήσεις το απλό μοντέλο Hubbard στο μεγαλοκανονικό σύνολο περιγράφεται από την

$$H - \mu N = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (3.6)$$

<sup>3</sup>Στο μοντέλο αυτό δεν περιέχονται αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σπιν των ηλεκτρονίων και διαδικασίες που περιλαμβάνουν μεταβιβάσεις σπιν, καθώς επίσης και μεταβιβάσεις ηλεκτρονίων που βοηθούνται από το

όπου ο συμβολισμός  $\langle i, j \rangle$  δηλώνει άθροισμα ως προς τους κοντινότερους γείτονες.

Το αρνητικό πρόσημο στον όρο της κινητικής ενέργειας  $H_T = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$  δηλώνει κέρδος ενέργειας κατά την μετάβαση των ηλεκτρονίων μεταξύ σημείων. Η παράμετρος  $t$  θεωρείται θετική. Αν, ωστόσο, το πλέγμα είναι 'bipartite', δηλαδή μπορεί να χωριστεί σε δύο υποπλέγματα με τέτοιον τρόπο, ώστε ο όρος μεταπήδησης να συνδέει ένα σημείο του ενός υποπλέγματος μόνο με σημεία του άλλου, τότε κάτω από τον μετασχηματισμό  $c_{j\sigma}^\dagger \rightarrow -c_{j\sigma}^\dagger$  για τα σημεία του ενός υποπλέγματος και  $c_{i\sigma}^\dagger \rightarrow c_{i\sigma}^\dagger$  για τα σημεία του άλλου, προκύπτει  $H_T \rightarrow -H_T$ . Αυτή η αλλαγή δεν μεταβάλλει τις φυσικές ιδιότητες του συστήματος (ίδια θεμελιώδης και διεγερμένες ενέργειες), μεταβάλλει όμως το πρόσημο της παραμέτρου  $t$ , κάνοντας το αδιάφορο.

Το δυναμικό  $U$  για την απωθητική δράση μεταξύ ηλεκτρονίων πρέπει να έχει θετική τιμή. Παρόλα αυτά, είναι χρήσιμες και αρνητικές τιμές καθώς δίνουν την δυνατότητα περιγραφής έμμεσων ελκτικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ ηλεκτρονίων, όπως η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωτονίου, που μπορούν να περιγράψουν υπεραγωγίμες καταστάσεις.

Ο τελευταίος όρος, ως γνωστόν, αποτελεί το χημικό δυναμικό και ελέγχει το γέμισμα του συστήματος με ηλεκτρόνια. Αν συμβολίσουμε με  $N$  τον αριθμό των σημείων του πλέγματος και με  $L$  τον συνολικό αριθμό των ηλεκτρονίων του συστήματος, τότε ο αριθμός από τα τελευταία που αντιστοιχούν κατά μέσο σε κάθε σημείο του πλέγματος ονομάζεται παράγοντας γεμίσματος  $ff$

$$ff = \frac{L}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (3.7)$$

Για  $ff = 1$  θεωρούμε ουδετερότητα του φορτίου που αντισταθμίζεται από το θετικό υπόβαθρο των ιόντων. Ο παράγοντας γεμίσματος, μαζί με την παράμετρο  $U/t$  και την θερμοκρασία καθορίζουν τη συμπεριφορά του μοντέλου.

Το μοντέλο Hubbard είναι ένα τεσσάρων καταστάσεων μοντέλο, με την έννοια ότι κάθε σημείο του πλέγματος μπορεί να βρεθεί σε κάποια από τις εξής ιδιοκαταστάσεις

$$\begin{aligned} |0\rangle_j & \text{ το σημείο } j \text{ είναι άδειο από ηλεκτρόνια} \\ |\uparrow\rangle_j = c_{j\uparrow}^\dagger |0\rangle_j & \text{ το σημείο } j \text{ καταλαμβάνεται από ένα ηλεκτρόνιο με σπιν } \uparrow \\ |\downarrow\rangle_j = c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle_j & \text{ το σημείο } j \text{ καταλαμβάνεται από ένα ηλεκτρόνιο με σπιν } \downarrow \\ |\uparrow\downarrow\rangle_j = c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle_j & \text{ το σημείο } j \text{ είναι διπλά κατειλημμένο} \end{aligned}$$

**Οριακή περίπτωση μοντέλου:  $U=0$**  Στην περίπτωση αυτή το σύστημα αποτελείται από ανεξάρτητα ηλεκτρόνια, δεδομένου ότι δεν ασκούν δυνάμεις Coulomb το ένα στο άλλο,

δυναμικό Coulomb. Μια γενικότερη Χαμιλτονιανή που θα περιέγραφε τέτοιες διαδικασίες είναι

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + V \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} + \\ & X \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (c_{i, -\sigma}^\dagger c_{i, -\sigma} + c_{j, -\sigma}^\dagger c_{j, -\sigma}) - J_z \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_j^z - J_{xy} \sum_{\langle i, j \rangle} (\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_j^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_j^y) \end{aligned}$$

όπου ο τέταρτος όρος αναφέρεται σε αλληλεπιδράσεις ζώνης - φορτίου ενώ οι τελευταίοι σε αλληλεπιδράσεις Heisenberg μεταξύ των σπιν των ηλεκτρονίων.

και από το προηγούμενο κεφάλαιο προκύπτει ότι αυτά βρίσκονται σε καταστάσεις Bloch. Η Χαμιλτονιανή του μεγαλοκανονικού συνόλου γράφεται συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας/καταστροφής καταστάσεων  $|k\sigma\rangle$ :

$$H = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (3.8)$$

με σχέση διασποράς  $\epsilon_k = -2t(\cos k_x\alpha + \cos k_y\alpha + \cos k_z\alpha)$ , με το  $k$  να παίρνει διακριτές τιμές σύμφωνα με τη δομή του πλέγματος. Τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τις καταστάσεις  $|k\sigma\rangle$  ενός ηλεκτρονίου ακολουθώντας την απαγορευτική αρχή του *Pauli*.

Στον πραγματικό χώρο, παρατηρώντας την ανάπτυξη (3.3) όλα τα διαφορετικά σημεία του πλέγματος βρίσκονται σε σύνδεση μεταξύ τους: Αν ένα ηλεκτρόνιο ξεκινήσει από ένα σημείο δεν θα παραμείνει εκεί. Η κινητική του ενέργεια θα το μετακινεί σε γειτονικά σημεία. Αντίθετα, στον χώρο των ορμών οι καταστάσεις αποσυσχετίζονται: Ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση  $|k\sigma\rangle$  παραμένει σε αυτή.

Με επιχειρήματα στατιστικής μηχανικής και χρήση της σχέσης (2.38) προκύπτει η συνάρτηση επιμερισμού

$$Z = \prod_k (1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}) \quad (3.9)$$

Η οριακή αυτή περίπτωση, όπως και η περισσότερο πραγματοποιήσιμη περίπτωση  $U \ll t$  χαρακτηρίζεται στη βιβλιογραφία ως περιοχή ασθενών συσχετίσεων (weak coupling).

**Οριακή περίπτωση:**  $t = 0$  Στη δεύτερη ακραία περίπτωση τα ηλεκτρόνια δεν έχουν τη δυνατότητα να κινηθούν μεταξύ των σημείων του πλέγματος. Το γεγονός αυτό οδηγεί σε  $N$  απομονωμένα άτομα τα οποία δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους.

Επαναφέροντας την ενέργεια  $\epsilon_{at}$ , η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$H = \sum_j (\epsilon_{at} \sum_\sigma c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \quad (3.10)$$

ως άθροισμα  $L$  επιμέρους Χαμιλτονιανών, μια για κάθε σημείο. Το μοντέλο αυτό λύνεται εύκολα στον πραγματικό χώρο, έχοντας ως ιδιοκαταστάσεις  $|a\rangle = \{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$  με αντίστοιχες ιδιοτιμές  $\{0, \epsilon_{at}, \epsilon_{at}, 2\epsilon_{at} + U\}$ . Μπορούμε να θεωρήσουμε, λοιπόν, πως το κάθε ένα σύστημα έχει τρία ενεργειακά επίπεδα:

- μηδενική ενέργεια αν δεν υπάρχει ηλεκτρόνιο στο άτομο
- το πρώτο ηλεκτρόνιο έχει ενέργεια  $\epsilon_{at}$
- το δεύτερο ηλεκτρόνιο έχει ενέργεια  $\epsilon_{at} + U$

με τη διαφορά, σε σχέση με την θεωρία ζωνών, ότι το ανώτερο επίπεδο ενέργειας  $\epsilon_{at} + U$  δεν μπορεί να καταληφθεί από ηλεκτρόνιο αν δεν είναι κατειλημμένο το επίπεδο ενέργειας  $\epsilon_{at}$ . Η συνάρτηση επιμερισμού για το κάθε άτομο στην περίπτωση αυτή γίνεται

$$Z = \sum_a \langle a | e^{-\beta(H - \mu N)} | a \rangle = 1 + 2e^{\beta\mu} + e^{2\beta\mu - \beta U} \quad (3.11)$$

Όταν βρισκόμαστε στο όριο αυτό, ή γενικότερα για  $t \ll U$  λέμε πως βρισκόμαστε στην περιοχή ισχυρών συσχετίσεων.

**Γενική περίπτωση:**  $t \neq 0$  και  $U \neq 0$  Στην γενική αυτή περίπτωση η Χαμιλτονιανή δεν μπορεί να λυθεί ακριβώς. Ποιοτικά, ωστόσο, μπορούμε να περιγράψουμε τι συμβαίνει καθώς προστίθεται ένας μη μηδενικός όρος κινητικής ενέργειας στην προηγούμενη περίπτωση.

Για  $t = 0$  το κάθε ένα από τα  $N$  αντίγραφα έχει ενεργειακά επίπεδα  $\{\epsilon_{at}, 2\epsilon_{at} + U\}$ . Όταν  $t \neq 0$  τα ατομικά αυτά επίπεδα γίνονται πιο πλατιά σχηματίζοντας υποζώνες (Hubbard subbands) πλάτους αναλόγου της τιμής του  $t$ . Ωστόσο, οι υποζώνες αυτές έχουν διαφορές σε σύγκριση με τις ζώνες στη θεωρία πλέγματος:

- Ο διαχωρισμός σε subbands είναι φαινόμενο που προκύπτει από τις συσχετίσεις των ηλεκτρονίων.
- Η ύπαρξη της ανώτερης ζώνης εξαρτάται από την παρουσία ηλεκτρονίων στην κατώτερη ζώνη.
- Η κάθε υποζώνη μπορεί να περιέχει μέχρι  $N$  ηλεκτρόνια.

Σημαντικό είναι επίσης να τονίσουμε ότι ο διαχωρισμός σε υποζώνες δεν σχετίζεται με τον χώρο των ορμών: οι υποζώνες έχουν το ίδιο σύνολο κυματοδιανυσμάτων με την αρχική ζώνη ενός ηλεκτρονίου στην περίπτωση  $U = 0$ .

### 3.3 Το Extended Hubbard Model

Η εξήγηση της συμπεριφοράς των υλικών που σχετίζονται με συστήματα με μεγάλο θεωρητικό και πειραματικό ενδιαφέρον μπορεί να δοθεί μόνο αν θεωρήσουμε εκτός από τις μικρής κλίμακας αλληλεπιδράσεις στο ίδιο πλεγματικό σημείο και δυνάμεις μεγαλύτερης κλίμακας. Ένα τέτοιο παράδειγμα αποτελεί η εμφάνιση d-wave υπεραγωγιμότητας σε μια ομάδα υλικών που ονομάζονται Cuprates σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες. Ένας άμεσος τρόπος είναι να θεωρήσουμε το Extended Hubbard Model στο οποίο προστίθενται μη μηδενικές τιμές για την σύζευξη μεταξύ πιο απομακρυσμένων γειτόνων:

- Η αλληλεπίδραση Coulomb είναι πεπερασμένη για ηλεκτρόνια και στα κοντινότερα γειτονικά σημεία του πλέγματος μέσω δυναμικού  $V$ .
- Τα ηλεκτρόνια μπορούν να μεταβούν και στους αμέσως κοντινότερους γείτονες του κυβικού πλέγματος, με ενέργεια μετάβασης  $t'$ .

Όσον αφορά την αλληλεπίδραση μεταξύ σωματιδίων στα γειτονικά σημεία θα αγνοήσουμε την εμφάνιση δυναμικού μεταξύ ηλεκτρονίων με παράλληλα σπιν. Η φυσική εξήγηση πίσω από αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι αναμένεται μια πολύ μικρή πυκνότητα πιθανότητας να βρεθούν δύο ηλεκτρόνια με παράλληλα σπιν και σε πολύ μικρή απόσταση μεταξύ τους εξαιτίας της απαγορευτικής αρχής του Pauli. Με άλλα λόγια, η απαγορευτική αρχή προκαλεί συσχετισμό στη χωρική κίνηση δύο ηλεκτρονίων με παράλληλα σπιν και το αποτέλεσμα μοιάζει σαν να έχουμε μια ισχυρή άπωση μεταξύ των δύο σωματιδίων σε μικρές αποστάσεις. Στην περίπτωση του Extended Hubbard model έχουμε λάβει υπόψη μας μόνο αλληλεπιδράσεις μικρής κλίμακας (στο ίδιο σημείο ή σε κοντινότερους γείτονες) κι έτσι μπορούμε να θεωρήσουμε πως η αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων με αντιπαράλληλα σπιν είναι σημαντικότερη, αγνοώντας την άλλη περίπτωση.

Η Χαμιλτονιανή ενός τέτοιου μοντέλου γράφεται

$$\begin{aligned}
H - \mu N = & -t \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + t' \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho'} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \mu \sum_{i,j} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \\
& + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + V \sum_{i,j} \delta_{i,j+\rho} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} c_{i\uparrow}
\end{aligned} \tag{3.12}$$

χρησιμοποιώντας τις μεταβλητές:

$$\begin{aligned}
\rho &= \{(\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)\} \\
\rho' &= \{(\pm 1, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, \pm 1), (0, \pm 1, \pm 1)\}
\end{aligned}$$

Με το ίδιο σκεπτικό με την παράμετρο  $U$  μπορούμε να θεωρήσουμε  $V > 0$  ή  $V < 0$ . Οι παράμετροι που καθορίζουν στο μοντέλο αυτό την συμπεριφορά του συστήματος και την φάση στην οποία θα βρεθεί το υλικό είναι ο παράγοντας γεμίσματος  $ff$ , οι όροι μεταπήδησης  $t, t'$ , τα δυναμικά  $U$  και  $V$  καθώς και η θερμοκρασία  $T$ . Το όριο  $|U| \gg t$  και  $|V| \gg t$  αποτελεί την περιοχή ισχυρών συσχετίσεων, ενώ αντίστοιχα για  $|U| \ll t$  και  $|V| \ll t$  μιλάμε για την περιοχή ασθενών συσχετίσεων.

Στη γραφή αυτή της Χαμιλτονιανής, η κατά το ήμισυ γεμάτη ζώνη (half-filled band,  $ff = 1$ ) αντιστοιχεί σε χημικό δυναμικό  $\mu = \frac{1}{2}U + 2V$ .

Με την προσθήκη των παραμέτρων αυτών στην περιγραφή της Χαμιλτονιανής εμφανίζεται ένας πλούτος από φάσεις που είναι δυνατόν να παρουσιαστούν ως θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος ανάλογα με τον συνδυασμό των τιμών τους, είτε μόνες τους είτε σε συνύπαρξη. Σε γενικές γραμμές, καθώς περισσότερα θα ειπωθούν στη συνέχεια, οι πιθανές καταστάσεις τάξης που προβλέπει το μοντέλο και μπορεί να εξηγήσει, εφόσον έχουμε αγνοήσει τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίων-φωονίων, είναι η υπεραγωγιμότητα (s-wave SC, d-wave SC, π-wave SC), ο σιδηρομαγνητισμός και ο αντισηδηρομαγνητισμός, κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν.

Παρά την απλότητά του και την εκτεταμένη μελέτη που έχει γίνει, το Extended Hubbard model δεν είναι πλήρως κατανοητό. Η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος που περιγράφει δεν έχει γίνει εντελώς γνωστή συναρτήσει των παραμέτρων που το χαρακτηρίζουν, κυρίως στην περιοχή των μέσων αλληλεπιδράσεων και πέρα από μεθόδους διαταραχών. Παρόλα αυτά, προσεγγιστικές μέθοδοι, όπως η θεωρία μέσου πεδίου, έχουν αναπτυχθεί και μέσω αυτών έχουν εξαχθεί αποτελέσματα που συμβαδίζουν σε μεγάλο βαθμό με τα πειραματικά ευρήματα.

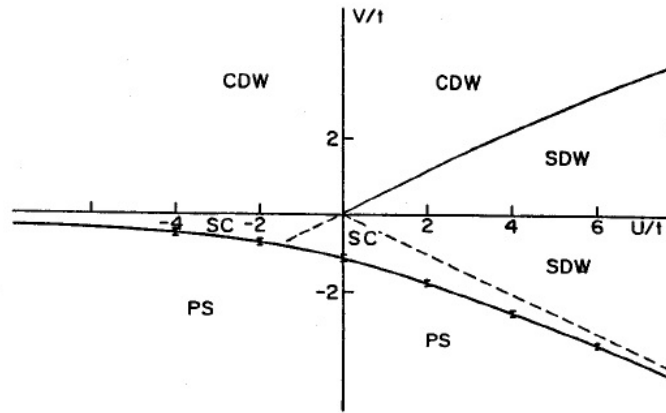
Στη συνέχεια θα ενδιαφερθούμε κυρίως για την περιοχή των μεσαίων και ισχυρών αλληλεπιδράσεων. Στην περιοχή αυτή ενδείκνυται ο χαρακτηρισμός των παραπάνω φάσεων στον πραγματικό χώρο καθώς επικρατεί η ισχυρή σύνδεση των ηλεκτρονίων στα σημεία του πλέγματος σε σχέση με την τάση απεντοπισμού τους. Το διάγραμμα φάσεων μέσω της θεωρίας μέσου πεδίου έχει μελετηθεί αρκετά και παρακάτω παρουσιάζουμε εν συντομία κάποια από τα αποτελέσματα.

Στο Σχήμα 3.1 φαίνεται η περίπτωση του μονοδιάστατου μοντέλου για  $ff = 1$  και  $t' = 0$ . Από το διάγραμμα αυτό μπορούν να εξαχθούν κάποια γενικότερα χαρακτηριστικά του διαγράμματος φάσης για συστήματα μεγαλύτερης διάστασης:

- Η υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται για ελκτικό δυναμικό κοντινότερων γειτόνων και ευνοείται επίσης από ελκτικό δυναμικό στο ίδιο πλεγματοεικό σημείο.



- Για θετικές τιμές των δυναμικών ανταγωνίζονται οι CDW και SDW φάσεις. Η συνύπαρξη τους εξαρτάται από την διάσταση του συστήματος και από τις τιμές των άλλων παραμέτρων. Για  $V$  αρκετά μικρότερο του  $U$  ευνοείται η εμφάνιση κύματος πυκνότητας σπιν, ενώ από μία τιμή του λόγου τους και πάνω η κατάσταση αντιστρέφεται και ευνοείται η φάση SDW.

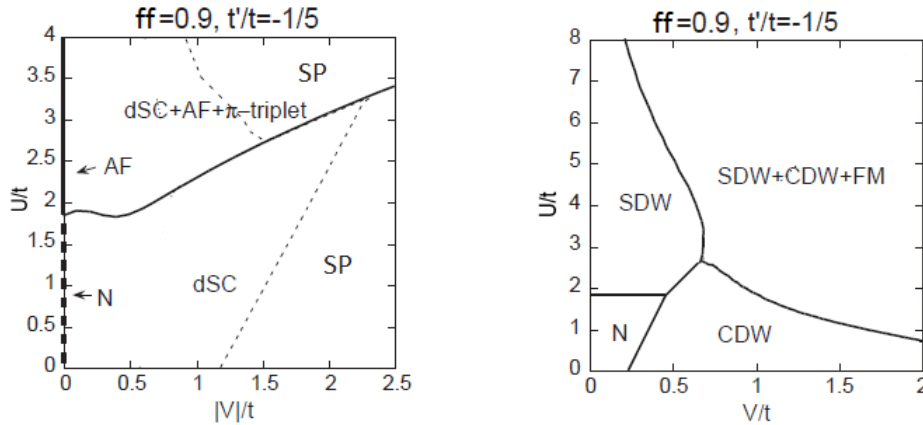


Σχήμα 3.1: Διάγραμμα φάσης για μονοδιάστατο σύστημα με τη μέθοδο του μέσου πεδίου για  $ff = 1$  ( $ff$ : παράγοντας γεμίματος) και  $t' = 0$  σε μηδενική θερμοκρασία. Ως  $SC$  ονομάζουμε την υπεραγωγίμη φάση, με  $CDW$  το κύμα πυκνότητας φορτίου και με  $SDW$  το κύμα πυκνότητας σπιν. Η  $SP$  αποτελεί φάση με τάξη μικρής εμβέλειας. Πηγή: [5]

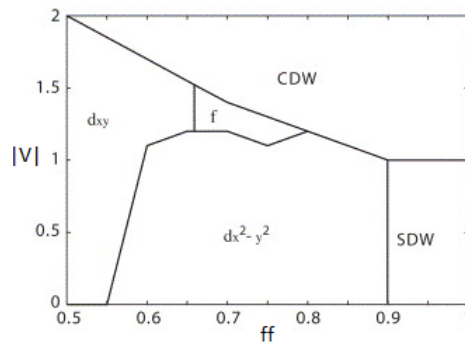
Η περίπτωση του διδιάστατου πλέγματος φαίνεται στο Σχήμα 3.2 για  $ff = 0.9$ , έχοντας εισάγει, δηλαδή, προσμίξεις. Τα βασικά χαρακτηριστικά που αναφέρθηκαν παραπάνω μπορούν να διακριθούν και στο συγκεκριμένο διάγραμμα. Στην περίπτωση αυτή διακρίνονται και συνυπάρχοντα συμπυκνώματα, όπως η συνύπαρξη μεταξύ κύματος πυκνότητας φορτίου, κύματος πυκνότητας σπιν και σιδηρομαγνητισμού. Ένα άλλο τέτοιο συμπύκνωμα αποτελείται από την φάση της  $d$ -wave υπεραγωγιμότητας, της  $\pi$  - *triplet* υπεραγωγιμότητας και του αντισιδηρομαγνητισμού.

Ένα άλλο χαρακτηριστικό που εμφανίζεται στα διαγράμματα φάσης ενός τέτοιου μοντέλου και έρχεται σε συμφωνία με πειραματικά δεδομένα αποτελεί το γεγονός πως για ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης για μη ντοπαρισμένα ( $ff = 1$ ) συστήματα εμφανίζεται αντισιδηρομαγνητική φάση στην θεμελιώδη τους κατάσταση με κατάλληλο συνδυασμό των υπολοίπων παραμέτρων. Ο αντισιδηρομαγνητισμός είναι ένα SDW με περιοδικότητα ίση με την περιοδικότητα του πλέγματος. Εισάγοντας προσμίξεις στο σύστημα και σπάζοντας τη συμμετρία ηλεκτρονίων-οπών η αντισιδηρομαγνητική φάση δίνει τη θέση της σε υπεραγωγιμότητα. Το γεγονός αυτό φαίνεται στο Σχήμα 3.3

Τέλος, πριν προσπαθήσουμε να επιλύσουμε προσεγγιστικά το Extended Hubbard model μίας ζώνης που περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή (3.12) καλό θα ήταν να αναφερθούμε στη χρησιμότητα του να περιγράφει σύγχρονα λειτουργικά υλικά των οποίων η συμπεριφορά έχει προσελκύσει το ενδιαφέρον της έρευνας. Τέτοια υλικά είναι τα Cuprates, δηλαδή ενώσεις οξειδίων χαλκού, η γονική ένωση των οποίων εμφανίζει μονωτική αντισιδηρομαγνη-



Σχήμα 3.2: Διάγραμμα φάσης για διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα με την προσέγγιση του μέσου πεδίου για  $ff = 0.9$  και  $t' = 0.2t$  σε μηδενική θερμοκρασία. Η αριστερή εικόνα αντιστοιχεί σε ελκτικό δυναμικό  $V < 0$ , ενώ η δεξιά σε απωστικό  $V > 0$ . Και στις δύο περιπτώσεις είναι  $U > 0$ . Ως  $AF$  χαρακτηρίζεται η αντισιδηρομαγνητική φάση.



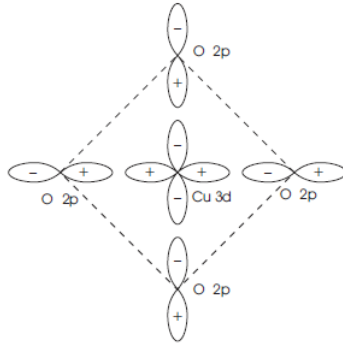
Σχήμα 3.3: Διάγραμμα φάσης για διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα με την προσέγγιση του μέσου πεδίου για διάφορες τιμές της ελκτικής αλληλεπίδρασης κοντινότερων γειτόνων και του παράγοντα γεμίματος. Το δυναμικό  $U$  διατηρείται σταθερό και ίσο με  $4t$ . Οι  $d_{xy}$  και  $d_{x^2-y^2}$  είναι υπεραγωγίμες φάσεις και θα εξηγηθούν στη συνέχεια. Πηγή: [6]

τική συμπεριφορά και διάφορα άλλα οξείδια που θα μας απασχολήσουν στη συνέχεια όπως τα LAO-LTO-LVO-STO.

**Χρήση του μοντέλου στην περιγραφή των cuprates:** Η κατηγορία αυτή των υλικών μοιράζεται μια κοινή ατομική δομή: περιέχουν υπεραγωγίμα στρώματα  $CuO_2$  χωρισμένα από μονωτικά επίπεδα. Πειράματα έχουν δείξει πως τα υλικά αυτά εμφανίζουν ιδιότητες περισσότερο ή λιγότερο ιστροπικές στο επίπεδο των στρωμάτων αυτών αλλά ιδιαίτερα ανιστροπικές κάθετα σε αυτά. Οι ηλεκτρονικές και μαγνητικές ιδιότητες των ενώσεων αυτών καθορίζονται κυρίως από την ηλεκτρονική δομή των  $CuO_2$  στρωμάτων.

Στη γονική ένωση η σύνθεση της ζώνης σθένους για τα άτομα του χαλκού  $Cu^{2+}$  είναι  $3d^9$ , ενώ αυτή των ατόμων οξυγόνου  $O^{2-}$  αντιστοιχεί σε γεμάτα  $2p$  τροχιακά. Από τα  $3d$

τροχιακά του χαλκού, λόγω της ύπαρξης των κοντινών ατόμων που οδηγεί στην καταστροφή του εκφυλισμού, το  $d_{x^2-y^2}$  τροχιακό είναι αυτό με τη μεγαλύτερη ενέργεια και συνεπώς είναι κατά το ήμισυ κατειλημμένο<sup>4</sup>. Για κάθε οξυγόνο, ωστόσο, τα δύο από τα τρία  $2p$  τροχιακά είναι κάθετα με το ημικατειλημμένο τροχιακό του χαλκού και μπορούν να αγνοηθούν. Συνεπώς, στη θεμελιώδη κυψελίδα του στρώματος εμφανίζονται τρία τροχιακά (το  $3d_{x^2-y^2}$  του  $Cu$  και ένα  $2p_x$  ή  $2p_y$  από κάθε οξυγόνο) οπότε το σύστημα που μελετάμε μπορεί να περιγραφεί από ένα μοντέλο τριών ζωνών. Το γεγονός ότι επικάλυψη θεωρείται μόνο μεταξύ τροχιακών γειτονικών ατόμων επιτρέπει ένα 'tight-binding' μοντέλο, όπως είναι το Hubbard model τριών ζωνών.



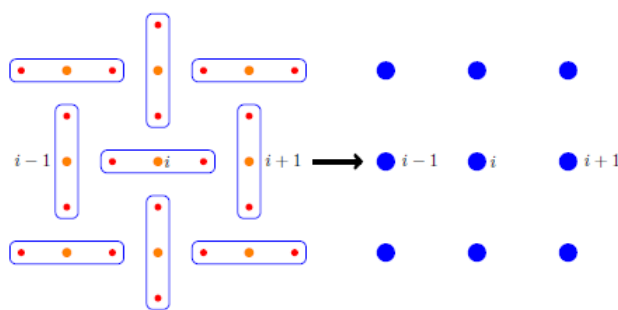
Σχήμα 3.4: Δομή του  $CuO_2$  πλέγματος.

Χωρίζοντας το επίπεδο  $CuO_2$  σε μικρά συμπλέγματα, όπως φαίνεται στο αριστερό μέρος του Σχήματος 3.5 και υπολογίζοντας την Χαμιλτονιανή κάθε ενός από αυτά  $H_i$  στο μοντέλο των τριών ζωνών μπορούμε να γράψουμε

$$H = \sum_i H_i + \sum_{i,j} H_{ij} \quad (3.13)$$

όπου  $H_{ij}$  η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης μεταξύ των συμπλεγμάτων. Στη συνέχεια, ακολουθώντας την πορεία που περιγράφεται αναλυτικά στο [7, chapter 5] μπορούμε να αντικαταστήσουμε το κάθε σύμπλεγμα από ένα μοναδικό σημείο πλέγματος, η κατάσταση του οποίου αντικαθιστά την κατάσταση του συμπλέγματος. Κάτι τέτοιο μπορεί να συμβεί αν αγνοήσουμε τις καταστάσεις υψηλής ενέργειας της Χαμιλτονιανής τριών ζωνών. Η φυσική σημασία πίσω από αυτή την προσέγγιση αντιστοιχεί στο να αμελήσουμε την διασπορά των ζωνών του οξυγόνου. Οι Zhang και Rice [8] έδειξαν ότι μια οπή που προστίθεται στις ζώνες του οξυγόνου δημιουργεί ισχυρό δεσμό με την οπή του ατόμου του χαλκού σχηματίζοντας μια singlet κατάσταση πανω στο σημείο. Αυτή η κατάσταση μπορεί να ιδωθεί ως κινούμενη στο πλέγμα όπως μια οπή σε αντισιδηρομαγνητικό υπόβαθρο. Έτσι η φυσική συμπεριφορά μπορεί να περιγραφεί από ένα μοντέλο Hubbard μιας ζώνης που περιέχει τον κινητικό όρο ο οποίος αντιστοιχεί στον όρο μεταπήδησης αυτής της singlet κατάστασης στο μοντέλο των τριών ζωνών.

<sup>4</sup>είναι ευκολότερο να θεωρήσουμε πως στο όλο σύστημα εμφανίζεται απλά μία οπή στο τροχιακό του χαλκού



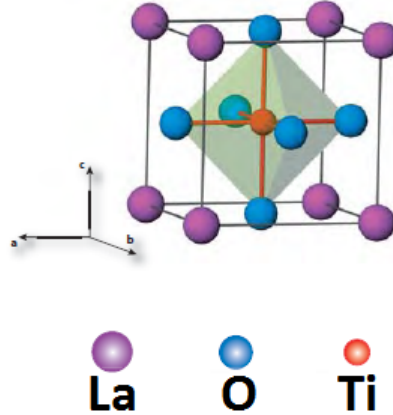
Σχήμα 3.5: Διαχωρισμός του πλέγματος σε μικρά συμπλέγματα και προσέγγιση αυτών από σημεία του πλέγματος σε ένα μοντέλο μίας ζώνης. Πηγή: [7]

Ένα σημαντικό πρόβλημα που αντιμετωπίζει το μοντέλο Hubbard μιας ζώνης αποτελεί το γεγονός πως δεν μπορεί να εξηγήσει την ασυμμετρία που εμφανίζεται στο διάγραμμα φάσης ντοπαρισμένων με ηλεκτρόνια και οπές χαλκιδίων. Προσθέτοντας σύζευξη περαιτέρω γειτόνων στο μοντέλο αυτό σπάζει η συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής. Κάτι τέτοιο μπορεί να συμβεί με επιτυχία αν λάβουμε υπόψη και τα 4s τροχιακά των *Cu*. Στην περίπτωση αυτή, είναι γνωστό [9] ότι σε ντοπαρισμένα με οπές χαλκίδια τα οξυγόνα που δεν ανήκουν στο στρώμα *CuO<sub>2</sub>* διαμορφώνουν τα 4s τροχιακά και έτσι μεταβάλλουν τον λόγο  $t'/t$  σημαντικά σε σχέση με τα ντοπαρισμένα με ηλεκτρόνια χαλκίδια. Στα τελευταία δεν υπάρχουν άτομα οξυγόνου εκτός στρώματος που να μεταβάλλουν τα 4s τροχιακά προκαλώντας την παρατηρούμενη ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής.

### Χρήση του μοντέλου στην περιγραφή των οξειδίων LAO-LTO-LVO-STO:

Και τα τέσσερα αυτά υλικά αποτελούν στοιχεία μιας μεγάλης κατηγορίας χημικών ενώσεων με χημικό τίτλο  $ABO_3$ , όπου συνήθως το *A* είναι ένα στοιχείο των αλκαλίων ή των αλκαλικών γαιών και το *B* ένα μεταβατικό μέταλλο. Οι ενώσεις αυτές κρυσταλλώνονται στη δομή του κυβικού ή τετραγωνικού περοβσκίτη που φαίνεται στο Σχήμα 3.6. Στη μοναδιαία κυψελίδα ενός περοβσκίτη ένα άτομο *B* καταλαμβάνει το κέντρο του κύβου, άτομα *A* τις κορυφές του και άτομα οξυγόνου βρίσκονται στα κέντρα των εδρών του. Όπως ήδη περιγράφηκε και στο πρώτο κεφάλαιο η δομή των οξειδίων αυτών μπορεί να ιδωθεί και ισοδύναμα ως διαδοχική επαλληλία επιπέδων *AO* και *BO<sub>2</sub>*. Μια σημαντική παρατήρηση που θα φανεί χρήσιμη είναι η οκταεδρική συμμετρία που εμφανίζεται στους περοβσκίτες και η οποία φαίνεται στο Σχήμα 3.6 ως το οκτάεδρο με κέντρο το άτομο του τιτανίου και με τα έξι οξυγόνα ως τους κοντινότερους γείτονες.

Στη συνέχεια θα περιγραφεί η περίπτωση του *LTO* μιας και είναι η ευκολότερα κατανοητή. Παρόμοια επιχειρήματα μπορούν να διατυπωθούν και για τα άλλα τρία υλικά της κατηγορίας. Κοιτάζοντας προσεκτικά, η θεμελιώδης κυψελίδα του *LTO* αποτελείται από ένα κατιόν λανθανίου του οποίου είναι πλήρης η εξωτερική στιβάδα, ένα κατιόν τιτανίου με ένα ηλεκτρόνιο σε εξωτερικό 3d τροχιακό και τρία ανιόντα οξυγόνου με συμπληρωμένη την εξωτερική τους στιβάδα ( $LaTiO_3 = La^{3+}Ti^{3+}O_3^{2-}$ ). Επομένως, η κάθε κυψελίδα διαθέτει ένα ημι-κατειλημμένο τροχιακό που προέρχεται από το άτομο του τιτανίου.



Σχήμα 3.6: Δομή περοβσκίτη για το *LTO*.

Λαμβάνοντας υπόψη την οκταεδρική συμμετρία του πλέγματος μπορεί εύκολα να αποδειχθεί μέσω της θεωρίας ομάδων πως τα πέντε  $3d$  τροχιακά του τιτανίου χωρίζονται σε δύο κατηγορίες -  $3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{yz}$  από τη μία και  $3d_{x^2-y^2}, 3d_{3z^2-r^2}$  από την άλλη - έτσι, ώστε να σπάσει ο ενεργειακός εκφυλισμών μεταξύ αυτών των δύο. Λόγω διαφορετικής επικάλυψης μπορούμε να διαπιστώσουμε πως η ενέργεια της πρώτης κατηγορίας τροχιακών είναι χαμηλότερη. Εξάλλου, στην περίπτωση των υλικών αυτών φαίνεται πειραματικά να ικανοποιείται το θεώρημα *Jahn – Teller*, σύμφωνα με το οποίο όταν σε ένα σύστημα εμφανίζεται εκφυλισμός δημιουργείται και η τάση παραμόρφωσης για την άρση αυτού. Στην περίπτωση του *LTO* η παραμόρφωση του πλέγματος συμβαίνει κατά την  $z$ -κατεύθυνση μετατρέποντας τη δομή του κυβικού περοβσκίτη σε τετραγωνικό. Η παραμόρφωση αυτή έχει ως συνέπεια το τροχιακό  $d_{xy}$  που βρίσκεται στο  $xy$ -επίπεδο να αποκτήσει μικρότερη ενέργεια των άλλων δύο της κατηγορίας.

Με όλα τα παραπάνω μπορούμε να πούμε πως στο *LTO* εμφανίζεται ένα ημικατελιημμένο τροχιακό  $3d_{xy}$  ανά θεμελιώδη κυψελίδα της δομής των τετραγωνικών περοβσκιτών. Αρκεί λοιπόν ως μια καλή προσέγγιση η περιγραφή του υλικού από ένα μοντέλο μιας ζώνης σε ένα τετραγωνικό πλέγμα. Ενδιαφέρον εμφανίζει επίσης το γεγονός πως οι συμμετρίες σημείου που ικανοποιεί η δομή του περοβσκίτη είναι οι ίδιες με αυτές του τετραγωνικού πλέγματος. Με άλλα λόγια, οι διάφορες φάσεις που θα εμφανισθούν σε έναν περοβσκίτη μπορούν να αναζητηθούν και σε ένα τετραγωνικό πλέγμα.

### 3.4 Προσέγγιση μέσου πεδίου

Ήδη έχουν συζητηθεί οι λόγοι για τους οποίους πρέπει να προστεθούν οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων στη μελέτη των φάσεων των υλικών. Το Extended Hubbard model είναι ένα μοντέλο που περιέχει αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων στο ίδιο ή σε κοντινά σημεία του πλέγματος. Ακόμα και αυτό το απλό μοντέλο, ωστόσο, περιέχει έναν όρο στην Χαμιλτονιανή με τέσσερις τελεστές *Fermi* και συνεπώς δεν είναι ακριβώς επιλύσιμο.

Μια συνηθισμένη προσέγγιση του όρου αλληλεπιδράσεων της Χαμιλτονιανής είναι αυτή του μέσου πεδίου. Η συνολική Χαμιλτονιανή που προκύπτει με την εφαρμογή της θεωρίας μέσου πεδίου περιέχει μόνο τελεστές ενός σώματος και έτσι το αρχικό πρόβλημα πολλών σωμάτων προσεγγίζεται από ένα πρόβλημα ενός σώματος το οποίο είναι εκ των πραγμάτων επιλύσιμο.

Ας υποθέσουμε δύο φερμιονικούς τελεστές  $A$  και  $B$  οι οποίοι μπορούν να γραφούν ως

$$\begin{aligned} A &= (A- \langle A \rangle) + \langle A \rangle \\ B &= (B- \langle B \rangle) + \langle B \rangle \end{aligned}$$

ως το άθροισμα, δηλαδή, της μέσης τιμής τους και της διακύμανσης γύρω από την μέση τιμή. Ο τελεστής  $AB$  με τη χρήση της παραπάνω γραφής παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} AB &= [(A- \langle A \rangle) + \langle A \rangle][(B- \langle B \rangle) + \langle B \rangle] \\ &= (A- \langle A \rangle)(B- \langle B \rangle) + (A- \langle A \rangle) \langle B \rangle \\ &\quad + \langle A \rangle (B- \langle B \rangle) + \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &= (A- \langle A \rangle)(B- \langle B \rangle) + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &\quad + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &= (A- \langle A \rangle)(B- \langle B \rangle) + A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle \end{aligned}$$

Η προσέγγιση του μέσου πεδίου έγκειται στο να αγνοήσουμε τον πρώτο όρο της προηγούμενης σχέσης που είναι τετραγωνικός ως προς τις διακυμάνσεις και συνεπώς αναμένεται αμελητέος:

$$AB \approx A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (3.14)$$

Η προσέγγιση αυτή του γινομένου των δύο τελεστών ουσιαστικά αποτελεί τη σύζευξη του ενός όρου με το μέσο πεδίο του άλλου και τη σύζευξη του δεύτερου τελεστή με το μέσο πεδίο του πρώτου. Τελικά αφαιρείται το γινόμενο των μέσων τιμών για να μην προσμετρηθεί δύο φορές.

Η εφαρμογή της προσέγγισης (3.14) στον όρο αλληλεπιδράσεων της Χαμιλτονιανής είναι άμεση. Εξαιτίας των αντιμεταθετικών σχέσεων των φερμιονικών τελεστών στον όρο αυτό

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} &= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \\ &= -c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \end{aligned} \quad (3.15)$$

μπορούμε να εφαρμόσουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου για κάθε δυνατό ζεύγος τελεστών του όρου αλληλεπιδράσεων, από τη στιγμή που κάθε συνδυασμός μπορεί να έχει κάποια σημαντική συμμετοχή στο μέσο πεδίο:

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} &\approx \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \\ &\quad - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle - c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \\ &\quad + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle + c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \langle c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (3.16)$$

όπου τα πρόσθετα οφείλονται στον παράγοντα  $-1$  που υπεισέρχεται για κάθε μετάθεση μεταξύ δύο τελεστών. Τα γινόμενα μέσων τιμών που εμφανίζονται στην Εξ.(3.16) λέγονται όροι κενού και παρότι διαδραματίζουν σημαντικό ρόλο στον υπολογισμό της θεμελιώδους κατάστασης

του συστήματος, σε αυτό το στάδιο δεν επηρεάζουν τη μελέτη του μοντέλου οπότε και θα παραληφθούν.

Στην παραπάνω προσεγγιστική Χαμιλτονιανή ο κάθε τελεστής  $c_{\mu}^{\dagger}c_{\mu'}$  -ή όμοια ο  $c_{\mu}^{\dagger}c_{\mu'}$ , με  $\mu, \mu'$  καταστάσεις  $\{|i\sigma\rangle, |j\sigma'\rangle\}$ - είναι σημαντικός μόνο όταν η μέση του τιμή είναι μη μηδενική.

Ορίζουμε, λοιπόν τις παραμέτρους:

$\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{i\uparrow} \rangle$  περιγράφει τον μέσο αριθμό ηλεκτρονίων με σπιν  $\uparrow$  στο σημείο  $R_i$

$\langle n_{i\downarrow} \rangle = \langle c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{i\downarrow} \rangle$  περιγράφει τον μέσο αριθμό ηλεκτρονίων με σπιν  $\downarrow$  στο σημείο  $R_i$

$\Phi_{ij} = \langle c_{j\downarrow}c_{i\uparrow} \rangle$  περιγράφει ζεύγος οπών στα σημεία  $R_i$  και  $R_j$

$\Phi_{ij}^* = \langle c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\downarrow}^{\dagger} \rangle$  περιγράφει ζεύγος ηλεκτρονίων στα σημεία  $R_i$  και  $R_j$

Η παράμετρος  $\Phi_{ij}$  μπορεί να αναλυθεί περαιτέρω<sup>5</sup> σε συμμετρικό μέρος  $\Delta_{ij}$  στην ανταλλαγή των σημείων  $i$  και  $j$  και σε αντισυμμετρικό  $\Pi_{ij}$ ,  $\Phi_{ij} = \Delta_{ij} + \Pi_{ij}$ , με

- $\Delta_{ij} = \langle c_{j\downarrow}c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\downarrow}c_{j\uparrow} \rangle$

- $\Pi_{ij} = \langle c_{j\downarrow}c_{i\uparrow} \rangle - \langle c_{i\downarrow}c_{j\uparrow} \rangle$

Αντίθετα με το τι συμβαίνει κατά την εναλλαγή των δεικτών της θέσης, εξαιτίας των μεταθετικών σχέσεων που ισχύουν για τους φερμιονικούς τελεστές, κατά την εναλλαγή των σπιν η παράμετρος  $\Delta_{ij}$  είναι αντισυμμετρική, ενώ η  $\Pi_{ij}$  συμμετρική.

Οι δυνατές τιμές που μπορεί να πάρει το ολικό σπιν ενός ζεύγους οπών (ή ηλεκτρονίων) είναι  $S = 1$  και  $S = 0$ . Για τις καταστάσεις αυτές έχουμε

$$S = 0 \rightarrow |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$$

$$S = 1 \rightarrow S_z = \begin{cases} 1 & \rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle \\ 0 & \rightarrow |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \\ -1 & \rightarrow |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (3.17)$$

Οι καταστάσεις ζεύγους οπών με  $S = 0$  λέγονται singlet καταστάσεις, ενώ αυτές με συνολικό σπιν  $S = 1$  triplet.

Έχοντας αποκλείσει αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων με το ίδιο σπιν, παρατηρούμε ότι προκύπτουν καταστάσεις με ζεύγη οπών αντισυμμετρικά ως προς την εναλλαγή που περιγράφονται μέσω της παραμέτρου  $\Delta_{ij}$  -η οποία έχει τη συμμετρία της κατάστασης του ζεύγους για  $S = 0$ - και καταστάσεις με ζεύγη ηλεκτρονίων συμμετρικά στην εναλλαγή -με την ίδια συμμετρία με το ζεύγος για  $S = 1$  και  $S_z = 0$ . Μπορούμε να πούμε συνεπώς, πως η παράμετρος  $\Delta_{ij}$  περιγράφει singlet υπεραγωγίμες καταστάσεις, ενώ η  $\Pi_{ij}$  triplet καταστάσεις.

Όσον αφορά τον όρο  $\langle c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\downarrow} \rangle$  (και τον αντίστοιχο  $\langle c_{i\downarrow}^{\dagger}c_{j\uparrow} \rangle$ ) περιγράφει μετακίνηση ηλεκτρονίου από ένα σημείο του πλέγματος σε ένα άλλο με ταυτόχρονη εναλλαγή του σπιν

<sup>5</sup>Μια τέτοια περαιτέρω ανάπτυξη δεν έχει νόημα στην περίπτωση  $i = j$  οπότε ορίζουμε απλά  $\Delta_{ii} = \langle c_{i\downarrow}c_{i\uparrow} \rangle$

του. Ωστόσο, έχουμε αποκλείσει τέτοιες μεταβολές του σπιν οπότε οι παράμετροι  $\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle$  και  $\langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle$  θεωρούνται εξ αρχής μηδενικές.

Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου που προκύπτει από την προσέγγιση που κάναμε γράφεται

$$\begin{aligned}
H_{MF} - \mu N &= -t \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t' \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i,j} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \\
&+ U \sum_i [\langle n_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + \langle n_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{i\uparrow} \rangle] \\
&+ \Delta_{ii} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \Delta_{ii}^* c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - \Delta_{ii} \Delta_{ii}^*] \\
&+ V \sum_i \delta_{i,j+\rho} [\langle n_{i\uparrow} \rangle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} + \langle n_{i\downarrow} \rangle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle] \\
&+ (\Delta_{ij} + \Pi_{ij}) c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} + (\Delta_{ij}^* + \Pi_{ij}^*) c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger - (\Delta_{ij} + \Pi_{ij})(\Delta_{ij}^* + \Pi_{ij}^*)]
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Για τον υπολογισμό των μέσων τιμών που εμφανίστηκαν στην Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου δύο είναι οι κατάλληλες μέθοδοι:

- Προσδιορίζοντάς τες αυτοσυνεπώς χρησιμοποιώντας τη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου:

$$\langle c_{\mu}^\dagger c_{\mu'} \rangle = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} \{ e^{-\beta(H_{MF} - \mu N)} c_{\mu}^\dagger c_{\mu'} \}$$

- Ως οι τιμές που ελαχιστοποιούν το μεγάλο δυναμικό του συστήματος με την προσέγγιση του μέσου πεδίου:

$$\frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial c_{\mu}^\dagger c_{\mu'}} = 0$$

Και με τις δύο μεθόδους προκύπτουν εξισώσεις αυτοσυνέπειας ως προς την παράμετρο που μελετάμε και οι δύο μέθοδοι αυτές είναι ισοδύναμες<sup>6</sup>.

Για να μπορέσουμε να υπολογίσουμε τις παραμέτρους  $\Delta_{ij}$ ,  $\Pi_{ij}$ ,  $\langle n_{i\uparrow} \rangle$  και  $\langle n_{i\downarrow} \rangle$  μέσω των εξισώσεων αυτοσυνέπειας πρέπει να διαγωνοποιήσουμε την Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου και να υπολογίσουμε τις ιδιοενέργειές της.

### 3.5 Φορμαλισμός Bogoliubov - de Gennes

Πρόταση: Για την επίλυση οποιασδήποτε Χαμιλτονιανής που παίρνει τη μορφή

$$H = \sum_{ij} \alpha_i^\dagger h_{ij} \alpha_j \tag{3.19}$$

με  $h$  έναν τετραγωνικό πίνακα, αρκεί η διαγωνοποίηση του  $h$  και στη συνέχεια το γέμισμα των ενεργειακών επιπέδων που προκύπτουν ως ιδιοενέργειες με οιονεί σωματίδια, με τρόπο που ικανοποιεί την απαγορευτική αρχή Pauli.

<sup>6</sup> Αν η θεωρία μέσου πεδίου δεν δίνει 'σωστά' αποτελέσματα τότε είτε δεν επιλέχθηκαν οι σωστές παράμετροι για το μέσο πεδίο ή η μέθοδος αποτυγχάνει και άλλα εργαλεία απαιτούνται



### 3.5.1 Σπινωριακός Φορμαλισμός κατά Nambu

Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου πλέον περιέχει μόνο τελεστές ενός σώματος και μπορεί συνεπώς να διαγωνοποιηθεί μέσω ενός κανονικού μετασχηματισμού. Πρώτος στόχος αποτελεί η γραφή της προσεγγιστικής Χαμιλτονιανής (3.18) στην παραπάνω μορφή (3.19), ώστε να μπορέσουμε στη συνέχεια να τη διαγωνοποιήσουμε και να καταλήξουμε σε έναν ενοποιημένο φορμαλισμό για την περιγραφή καταστάσεων ζευγών ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, ζευγών ηλεκτρονίου-οπής και για τη συνύπαρξή τους.

Για τον λόγο αυτό εισάγεται ο σπινόρας

$$\Psi_i^\dagger = (c_{i\uparrow}^\dagger \quad c_{i\downarrow}) \quad (3.20)$$

και ο αναστροφосуζυγής του

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

με χρήση του οποίου η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου γράφεται

$$H_{MF} - \mu N = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_{ij} + N_{ij\downarrow} & W_{ij} \\ W_{ij}^* & -\epsilon_{ji} - N_{ji\uparrow} \end{pmatrix} \Psi_j \quad (3.22)$$

όπου<sup>7</sup>

$$\epsilon_{ij} = -t\delta_{i,j+\rho} + t'\delta_{i,j+\rho'} - \mu\delta_{ij} \quad (3.23)$$

$$N_{ij\sigma} = U \langle n_{i\sigma} \rangle \delta_{ij} + V \langle n_{i+\rho,\sigma} \rangle \delta_{ij} \quad (3.24)$$

και

$$W_{ij} = U\delta_{i,j}\Phi_{ij} + V\delta_{i,j+\rho}\Phi_{ij} \quad (3.25)$$

Φαίνεται αμέσως η σημασία της εισαγωγής του σπινόρα (3.20) καθώς η Χαμιλτονιανή παίρνει πλέον την προσδοκώμενη μορφή  $\sum_{ij} \Psi_i^\dagger h_{ij} \Psi_j$  με τον  $h$  να είναι ένας  $2N$  τετραγωνικός πίνακας

$h = \begin{pmatrix} T & \Delta \\ \Delta^* & -T^* \end{pmatrix}$  που αποτελείται από:

- έναν  $N \times N$  υποπίνακα  $T$  (και τον συζυγή του) που περιέχει τις ενέργειες μετάβασης μεταξύ όλων των δυνατών σημείων του πλέγματος και τα μέσα φορτία στα σημεία αυτά
- έναν  $N \times N$  υποπίνακα  $\Delta$  (και τον συζυγή του) που περιέχει τις παραμέτρους που περιγράφουν ζεύγη οπών (και ηλεκτρονίων).

<sup>7</sup> τα αρνητικά πρόσημα στο τελευταίο στοιχείο προέκυψαν λόγω των αντιμεταθετικών σχέσεων που ισχύουν στους φερμιονικούς τελεστές  $c_{i\sigma}c_{j\sigma'}^\dagger = -c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma}$

### 3.5.2 Διαγωνιοποίηση Χαμιλτονιανής - μετασχηματισμός Bogoliubov-de Gennes

Η διαγωνιοποίηση της Χαμιλτονιανής  $h$  επιτυγχάνεται εισάγοντας τον παρακάτω μετασχηματισμό, γνωστός και ως μετασχηματισμός Bogoliubov-de Gennes:

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow} &= \sum_n (\gamma_{n\uparrow} u_{ni} - \gamma_{n\downarrow}^\dagger v_{ni}^*) \\ c_{i\downarrow} &= \sum_n (\gamma_{n\downarrow} u_{ni} + \gamma_{n\uparrow}^\dagger v_{ni}^*) \end{aligned} \quad (3.26)$$

και για τους αντίστοιχους τελεστές δημιουργίας:

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^\dagger &= \sum_n (\gamma_{n\uparrow}^\dagger u_{ni}^* - \gamma_{n\downarrow} v_{ni}) \\ c_{i\downarrow}^\dagger &= \sum_n (\gamma_{n\downarrow}^\dagger u_{ni}^* + \gamma_{n\uparrow} v_{ni}) \end{aligned} \quad (3.27)$$

όπου οι γνωστοί τελεστές δημιουργίας-καταστροφής σωματιδίων στη θέση  $R_i$  με σπιν  $\sigma$  γράφονται ως γραμμικοί συνδυασμοί  $2N$  νέων τελεστών δημιουργίας και καταστροφής αντίστοιχα οιονεί σωματιδίων στις καταστάσεις  $n$ , ενώ οι  $u_{ni}, v_{ni}$  και οι συζυγείς τους αποτελούν μιγαδικούς συντελεστές προς εύρεση για να επιτευχθεί η διαγωνιοποίηση της Χαμιλτονιανής ως<sup>8</sup>:

$$H_{MF} - \mu N = E_0 + \sum_{n,\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma} \quad (3.28)$$

Με άλλα λόγια, οι καταστάσεις  $n$  είναι οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής μέσου πεδίου και οι  $\gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{n\sigma}$  οι τελεστές δημιουργίας - καταστροφής στην βάση των ιδιοκαταστάσεων της  $H_{MF}$ .

Οι τελεστές αυτοί οφείλουν να διατηρήσουν τον φερμιονικό χαρακτήρα των τελεστών  $c_{i\sigma}^\dagger$  και  $c_{i\sigma}$  καθώς η μορφή τους πρέπει να παραμείνει αμετάβλητη κάτω από κανονικούς μετασχηματισμούς

$$\begin{aligned} \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}\} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} & \{\gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{m\sigma'}\} &= \delta_{mn} \delta_{\sigma\sigma'} \\ \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\} &= 0 & \{\gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{m\sigma'}^\dagger\} &= 0 \\ \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} &= 0 & \{\gamma_{n\sigma}, \gamma_{m\sigma'}\} &= 0 \end{aligned}$$

Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε τους συντελεστές  $u_{ni}, v_{ni}$ :

- Αρχικά υπολογίζουμε τον μεταθέτη της Χαμιλτονιανής (3.18) με τον τελεστή καταστρο-

<sup>8</sup>  $E_0$  είναι η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης και  $E_n$  η ενέργεια μιας στοιχειώδους διέγερσης ενός οιονεί σωματιδίου στην κατάσταση  $n$  με σπιν  $\sigma$

φής  $c_{i\uparrow}$

$$\begin{aligned}
[H_{MF} - \mu N, c_{i\uparrow}] &= \left[ \sum_{l,j,\sigma} \epsilon_{lj} c_{l\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{l,j,\sigma} N_{lj\sigma} c_{j,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{l,j} W_{lj}^* c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + \sum_{l,j} W_{lj} c_{l\downarrow} c_{j\uparrow}, \quad c_{i\uparrow} \right] \\
&= \left[ \sum_{l,j,\sigma} \epsilon_{lj} c_{l\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, c_{i\uparrow} \right] + \left[ \sum_{l,j,\sigma} N_{lj\sigma} c_{j,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}, c_{i\uparrow} \right] \\
&= \left[ \sum_{l,j} W_{lj}^* c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger, c_{i\uparrow} \right] + \left[ \sum_{l,j} W_{lj} c_{l\downarrow} c_{j\uparrow}, c_{i\uparrow} \right] \\
&= \sum_{l,j,\sigma} \epsilon_{lj} [c_{l\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, c_{i\uparrow}] + \sum_{l,j,\sigma} N_{lj\sigma} [c_{j,-\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma}, c_{i\uparrow}] \\
&\quad + \sum_{l,j} W_{lj}^* [c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger, c_{i\uparrow}] + \sum_{l,j} W_{lj} [c_{l\downarrow} c_{j\uparrow}, c_{i\uparrow}]
\end{aligned}$$

Κάνοντας χρήση της γενικής ιδιότητας για τρεις τελεστές  $[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B$  έχουμε τελικά

$$\begin{aligned}
[H_{MF} - \mu N, c_{i\uparrow}] &= \sum_{l,j,\sigma} \epsilon_{lj} (c_{l\sigma}^\dagger \{c_{j\sigma}, c_{i\uparrow}\} - \{c_{l\sigma}^\dagger, c_{i\uparrow}\} c_{j\sigma}) \\
&\quad + \sum_{l,j,\sigma} N_{lj\sigma} (c_{j,-\sigma}^\dagger \{c_{j,-\sigma}, c_{i\uparrow}\} - \{c_{j,-\sigma}^\dagger, c_{i\uparrow}\} c_{j,-\sigma}) \\
&\quad + \sum_{l,j} W_{lj}^* (c_{l\uparrow}^\dagger \{c_{j\downarrow}^\dagger, c_{i\uparrow}\} - \{c_{l\uparrow}^\dagger, c_{i\uparrow}\} c_{j\downarrow}^\dagger) \\
&\quad + \sum_{l,j} W_{lj} (c_{l\downarrow} \{c_{j\uparrow}, c_{i\uparrow}\} - \{c_{l\downarrow}, c_{i\uparrow}\} c_{j\uparrow})
\end{aligned}$$

και με τη βοήθεια των αντιμεταθετικών σχέσεων για τους τελεστές δημιουργίας - καταστροφής καταλήγουμε στην

$$[H_{MF} - \mu N, c_{i\uparrow}] = - \sum_j \epsilon_{ij} c_{j\uparrow} - \sum_j N_{ji\downarrow} c_{i\uparrow} - \sum_j W_{ij}^* c_{j\downarrow}^\dagger \quad (3.29)$$

αν εισάγουμε τον μετασχηματισμό (3.26)-(3.27) η παραπάνω μεταθετική σχέση γράφεται τελικά

$$\begin{aligned}
[H_{MF} - \mu N, c_{i\uparrow}] &= - \sum_n \gamma_{n\uparrow} \left( \sum_j \epsilon_{ij} u_{nj} + u_{ni} \sum_j N_{ji\downarrow} + \sum_j W_{ij}^* v_{nj} \right) \\
&\quad + \gamma_{n\downarrow}^\dagger \left( - \sum_j \epsilon_{ij} v_{nj}^* - v_{ni}^* \sum_j N_{ji\downarrow} + \sum_j W_{ij}^* u_{nj}^* \right) \quad (3.30)
\end{aligned}$$

- Με την ίδια ακριβώς διαδικασία βρίσκουμε την μεταθετική σχέση μεταξύ της Χαμιλτονιανής με τον τελεστή δημιουργίας  $c_{i\uparrow}^\dagger$ . Προκύπτει

$$\begin{aligned}
[H_{MF} - \mu N, c_{i\uparrow}^\dagger] &= - \sum_j \epsilon_{ji} c_{j\uparrow}^\dagger - c_{i\uparrow}^\dagger \sum_j N_{ji\downarrow} - \sum_j W_{ji} c_{j\downarrow} \\
&= - \sum_n \gamma_{n\downarrow} \left( - \sum_j \epsilon_{ji} v_{nj} - v_{ni} \sum_j N_{ji\downarrow} + \sum_j W_{ji} u_{nj} \right) \\
&\quad + \gamma_{n\uparrow} \left( \sum_j \epsilon_{ji} u_{nj}^* + u_{ni}^* \sum_j N_{ji\downarrow} + \sum_j W_{ji} v_{nj}^* \right)
\end{aligned} \tag{3.31}$$

- Στη συνέχεια, υπολογίζουμε τον μεταθέτη της διαγωνοποιημένης μορφής της Χαμιλτονιανής με τον τελεστή καταστροφής  $c_{i\uparrow}$

$$\begin{aligned}
[H_{MF} - \mu N, c_{i\uparrow}] &= \left[ \sum_{n,\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}, c_{i\uparrow} \right] \\
&= \left[ \sum_{n,\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}, \sum_m (\gamma_{m\uparrow} u_{mi} - \gamma_{m\downarrow}^* v_{mi}^*) \right] \\
&= \sum_{n,m,\sigma} \left( E_n u_{mi} [\gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}, \gamma_{m\uparrow}] - E_n v_{mi}^* [\gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}, \gamma_{m\downarrow}^\dagger] \right) \\
&= \sum_{n,\sigma,m} \left( E_n u_{mi} (\gamma_{n\sigma}^\dagger \{ \gamma_{n\sigma}, \gamma_{m\uparrow} \} - \{ \gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{m\uparrow} \} \gamma_{n\sigma}) \right. \\
&\quad \left. - E_n v_{mi}^* (\gamma_{n\sigma}^\dagger \{ \gamma_{n\sigma}, \gamma_{m\downarrow}^\dagger \} - \{ \gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{m\downarrow}^\dagger \} \gamma_{n\sigma}) \right) \\
&= - \sum_n \left( E_n u_{ni} \gamma_{n\uparrow} - E_n v_{ni}^* \gamma_{n\downarrow}^\dagger \right)
\end{aligned} \tag{3.32}$$

και με τον τελεστή δημιουργίας  $c_{i\uparrow}^\dagger$

$$\begin{aligned}
[H_{MF} - \mu N, c_{i\uparrow}^\dagger] &= \left[ \sum_{n,\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}, c_{i\uparrow}^\dagger \right] \\
&= - \sum_n \left( E_n u_{ni}^* \gamma_{n\uparrow}^\dagger - E_n v_{ni} \gamma_{n\downarrow} \right)
\end{aligned} \tag{3.33}$$

- Οι αντιμεταθετικές σχέσεις των τελεστών δημιουργίας - καταστροφής με την Χαμιλτονιανή πρέπει να είναι ανεξάρτητες της βάσης στην οποία εκφράζεται η τελευταία. Επομένως εξισώνοντας τους αντίστοιχους συντελεστές των σχέσεων (3.30)-(3.31) και (3.32)-(3.33) έχουμε

$$\begin{aligned}
\sum_j \epsilon_{ij} u_{nj} + u_{ni} \sum_j N_{ji\downarrow} + \sum_j W_{ij}^* v_{nj} &= E_n u_{ni} \\
\sum_j \epsilon_{ji} v_{nj} + v_{ni} \sum_j N_{ji\downarrow} - \sum_j W_{ji} u_{nj} &= E_n v_{ni}
\end{aligned}$$

ή σε μητρική μορφή

$$\begin{pmatrix} T & \Delta \\ \Delta^* & -T^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

Το πρόβλημα του προσδιορισμού των συντελεστών  $u_{ni}, v_{ni}$  μετατρέπεται, όπως φαίνεται από την (3.34) στην επίλυση ενός προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων για τον αρχικό πίνακα  $h$  της Χαμιλτονιανής στον σπινιαριακό φορμαλισμό.

Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου γράφεται

$$H_{MF} = \sum_n (\gamma_{n\uparrow}^\dagger \quad \gamma_{n\downarrow}) \begin{pmatrix} E_n & 0 \\ 0 & -E_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{n\uparrow} \\ \gamma_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

όπου το  $-E_n$  οφείλεται στο γεγονός ότι  $\gamma_{n\downarrow} \gamma_{n\downarrow}^\dagger = -\gamma_{n\downarrow}^\dagger \gamma_{n\downarrow}$

### 3.5.3 Υπολογισμός των παραμέτρων μέσου πεδίου- Εξισώσεις αυτοσυνέπειας

Οι παράμετροι που προέκυψαν από την προσέγγιση του μέσου πεδίου  $\Phi_{ij}$  καθώς και  $\langle n_{i\uparrow} \rangle$  και  $\langle n_{i\downarrow} \rangle$  μπορούν να υπολογισθούν με τη χρήση του μετασχηματισμού Bogoliubov-de Gennes και τις εξισώσεις που προέκυψαν για τις άγνωστες σταθερές  $u_{ni}$  και  $v_{ni}$

$$\begin{aligned} \langle n_{i\sigma} \rangle &= \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle \\ &= \langle \sum_n (\gamma_{n\sigma}^\dagger u_{ni}^* - \gamma_{n,-\sigma} v_{ni}) \sum_m (\gamma_{m\sigma} u_{mi} - \gamma_{m,-\sigma}^\dagger v_{mi}^*) \rangle \\ &= \langle \sum_{m,n} (u_{ni}^* u_{mi} \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{m\sigma} - u_{ni}^* v_{mi}^* \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{m,-\sigma}^\dagger \\ &\quad - v_{ni} u_{mi} \gamma_{n,-\sigma} \gamma_{m\sigma} + v_{ni} v_{mi}^* \gamma_{n,-\sigma} \gamma_{m,-\sigma}^\dagger) \rangle \\ &= \sum_{m,n} (u_{ni}^* u_{mi} \langle \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{m\sigma} \rangle - u_{ni}^* v_{mi}^* \langle \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{m,-\sigma}^\dagger \rangle \\ &\quad - v_{ni} u_{mi} \langle \gamma_{n,-\sigma} \gamma_{m\sigma} \rangle + v_{ni} v_{mi}^* \langle \gamma_{n,-\sigma} \gamma_{m,-\sigma}^\dagger \rangle) \\ &= \sum_n [|u_{ni}|^2 n_F(E_n) + |v_{ni}|^2 (1 - n_F(E_n))] \end{aligned} \quad (3.36)$$

όπου  $n_F(E_n)$  η κατανομή Fermi-Dirac και η παρουσία της προκύπτει από το γεγονός ότι η κατάλληλη αντιμεταθετική σχέση σε πεπερασμένη θερμοκρασία είναι  $\langle \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{m\sigma'} \rangle = \delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'} n_F(E_n)$ .

Όμοια για τις  $\Delta_{ij}$  και  $\Pi_{ij}$  έχουμε

$$\begin{aligned}
\Delta_{ij} &= \langle c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle \\
&= \langle \sum_n (\gamma_{n\downarrow} u_{nj} + \gamma_{n\uparrow}^\dagger v_{nj}^*) \sum_m (\gamma_{m\uparrow} u_{mi} - \gamma_{m\downarrow}^\dagger v_{mi}^*) \rangle \\
&\quad + \langle \sum_n (\gamma_{n\downarrow} u_{ni} + \gamma_{n\uparrow}^\dagger v_{ni}^*) \sum_m (\gamma_{m\uparrow} u_{mj} - \gamma_{m\downarrow}^\dagger v_{mj}^*) \rangle \\
&= \sum_{m,n} \left( (u_{nj} u_{mi} + u_{ni} u_{mj}) \langle \gamma_{n\downarrow} \gamma_{m\uparrow} \rangle - (u_{nj} v_{mi}^* + u_{ni} v_{mj}^*) \langle \gamma_{n\downarrow} \gamma_{m\downarrow}^\dagger \rangle \right. \\
&\quad \left. + (v_{nj}^* u_{mi} + v_{ni}^* u_{mj}) \langle \gamma_{n\uparrow}^\dagger \gamma_{m\uparrow} \rangle - (v_{nj}^* v_{mi}^\dagger + v_{ni}^* v_{mj}^*) \langle \gamma_{n\uparrow}^\dagger \gamma_{m\uparrow}^\dagger \rangle \right) \\
&= \sum_n \left( -(u_{nj} v_{ni}^* + u_{ni} v_{nj}^*) \langle \gamma_{n\downarrow} \gamma_{n\downarrow}^\dagger \rangle + (v_{nj}^* u_{ni} + v_{ni}^* u_{nj}) \langle \gamma_{n\uparrow}^\dagger \gamma_{n\uparrow}^\dagger \rangle \right) \\
&= \sum_n \left( (u_{nj} v_{ni}^* + u_{ni} v_{nj}^*) (\langle \gamma_{n\downarrow}^\dagger \gamma_{n\downarrow} \rangle + \langle \gamma_{n\uparrow}^\dagger \gamma_{n\uparrow} \rangle) \right) \\
&= 2 \sum_n (u_{nj} v_{ni}^* + u_{ni} v_{nj}^*) n_F(E_n)
\end{aligned} \tag{3.37}$$

και αντίστοιχα  $\Pi_{ij} = 2 \sum_n (u_{nj} v_{ni}^* - u_{ni} v_{nj}^*) n_F(E_n)$ .

Οι παραπάνω σχέσεις (3.36) και (3.37) εκφράζουν τις παραμέτρους του μέσου πεδίου  $\Phi_{ij}$  και  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  συναρτήσεως των συντελεστών  $u_{ni}$  και  $v_{ni}$  οι οποίοι έχουν μέσω της (3.34) εξάρτηση από τις πρώτες, αποτελώντας έτσι εξισώσεις αυτοσυνέπειας οι οποίες μπορούν να λυθούν με αριθμητικό τρόπο.

Με βάση τα παραπάνω, για την εύρεση των παραμέτρων:

- Υποθέτουμε αρχικά τυχαίες τιμές για τις  $\Phi_{ij}$  και  $\langle n_{i\sigma} \rangle$
- Επιλύουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών προσδιορίζοντας τις ιδιοενέργειες  $E_n$  και τα  $2N$  ιδιοδιανύσματα  $\begin{pmatrix} u_{ni} \\ v_{ni} \end{pmatrix}$  διαστάσεων  $2N \times 1$
- Μέσω των εξισώσεων αυτοσυνέπειας υπολογίζουμε τις νέες τιμές των παραμέτρων

Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται μέχρι τη σύγκλιση των παραμέτρων στις σωστές τους, πεπερασμένες ή μηδενικές, τιμές.

### 3.6 Μεγάλο δυναμικό στον φορμαλισμό Bogoliubov-de Gennes

Στην παράγραφο αυτή θα υπολογισθεί αναλυτικά το μεγάλο δυναμικό του συστήματος που περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου (3.18) καθώς σύμφωνα με την πρόταση της παραγράφου 2.2 αυτή είναι η ποσότητα που θα πρέπει να ελαχιστοποιηθεί κάτω από σταθερό χημικό δυναμικό για την εύρεση των παραμέτρων του μέσου πεδίου.

Ξεκινώντας από τη σχέση της παραγράφου εκείνης που δίνει τη γενική μορφή του μεγάλου δυναμικού στο μεγαλοκανονικό σύνολο έχουμε

$$\begin{aligned}\Omega &= -\frac{1}{\beta} \ln Z \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln \left( \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(H_{MF} - \mu N)} \right\} \right)\end{aligned}\quad (3.38)$$

Αντικαθιστώντας την διαγωνοποιημένη Χαμιλτονιανή ύστερα από τον μετασχηματισμό Bogoliubov-de Gennes (3.28)

$$\begin{aligned}\Omega &= -\frac{1}{\beta} \ln \left( \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(E_0 + \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n)} \right\} \right) \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln \left( \text{Tr} \left\{ e^{-\beta E_0} e^{-\beta \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n} \right\} \right) \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln \left( e^{-\beta E_0} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n} \right\} \right) \\ &= E_0 - \frac{1}{\beta} \ln \left( \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n} \right\} \right)\end{aligned}\quad (3.39)$$

όπου  $E_0$  η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης που ονομάσαμε και όρο κενού. Περιλαμβάνει δε όλους τους σταθερούς όρους της Χαμιλτονιανής μέσου πεδίου που αγνοήθηκαν κατά την ανάλυση στην αντίστοιχη παράγραφο. Η ενέργεια αυτή είναι η ενέργεια που απαιτείται για τη δημιουργία των μέσων πεδίων και δίνεται από τη σχέση

$$E_0 = V \sum_{i,j} (\Delta_{ij}^* + \Pi_{ij}^*) (\Delta_{ij} + \Pi_{ij}) \delta_{i,j+\rho} + U \sum_i (\Delta_{ii}^* \Delta_{ii} + \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle) \quad (3.40)$$

Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας ιδιότητες εκθετικών και λογαριθμικών συναρτήσεων η (3.39) γράφεται

$$\begin{aligned}\Omega &= E_0 - \frac{1}{\beta} \ln \left( \text{Tr} \left\{ \prod_n e^{-\beta \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n} \right\} \right) \\ &= E_0 - \frac{1}{\beta} \ln \left( \prod_n \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n} \right\} \right) \\ &= E_0 - \frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left( \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n} \right\} \right)\end{aligned}\quad (3.41)$$

Ο τελεστής  $\gamma_n^\dagger \gamma_n$  αποτελεί τον τελεστή του αριθμού κατάληψης της κατάστασης  $n$  των οιονεί σωματιδίων και λόγω του φερμιονικού χαρακτήρα των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής

οι ιδιοτιμές του,  $N_m$ , είναι 0 και 1. Τελικά:

$$\begin{aligned}\Omega &= E_0 - \frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left( \sum_m e^{-\beta E_n N_m} \right) \\ &= E_0 - \frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left( e^{-\beta E_n 0} + e^{-\beta E_n 1} \right) \\ &= E_0 - \frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left( 1 + e^{-\beta E_n} \right)\end{aligned}\tag{3.42}$$

Η σχέση (3.42) είναι αυτή που θα χρησιμοποιηθεί για την ελαχιστοποίηση του μεγάλου δυναμικού κατά τη διαδικασία επίλυσης των εξισώσεων αυτοσυνέπειας.



# Βιβλιογραφία

- [1] U.Rossler, 'Solid State Theory, An Introduction', Springer, Regensburg, April 2004.
- [2] Patrik Fazekas, 'Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism', World Scientific, Singapore, 1999.
- [3] Γ. Λιβανάς, Διπλωματική Εργασία ΜΔΕ-ΦΤΕ, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ 2009
- [4] Α. Απέρης, Διδακτορική Διατριβή ΕΜΠ 2012
- [5] H.Q.Lin, D.K.Campbell and R.T.Clay, 'Broken Symmetries in the One-Dimensional Extended Hubbard Model', Chinese Journal Of Physics (February 2000)
- [6] S.Onari, R.Arita, K.Kuroki, H.Aoki, 'Phase diagram of the two-dimensional extended Hubbard model: pairing from charge and spin fluctuations', Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (April 2005)
- [7] Karl-Oskar Backlund, 'Deriving an extended one-band-Hubbard model for cuprate superconductors', April 2011.
- [8] F.C.Zhang and T.M.Rice. 37:3759, 1988.
- [9] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen, and O. K. Andersen, Phys. Rev. Lett.

## Κεφάλαιο 4

# Καταστάσεις τάξεως στο Extended Hubbard Model και η αναζήτησή τους

### 4.1 Το Extended Hubbard Model στον χώρο των ορμών

Για την εύρεση των πιθανών καταστάσεων τάξης που είναι δυνατόν να προκύψουν και να εξηγηθούν μέσω του Extended Hubbard Model είναι βολικό να μεταφέρουμε την Χαμιλτονιανή του μοντέλου (3.18) στον χώρο των ορμών. Κάτι τέτοιο μπορεί να επιτευχθεί με την χρήση των αντιστρόφων σχέσεων των (3.3), δηλαδή των

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{jkR_i} c_{k\sigma} \quad \text{και} \quad c_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-jkR_i} c_{k\sigma}^\dagger \quad (4.1)$$

και την αντικατάστασή τους στην Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου.

Με την χρήση των παραπάνω σχέσεων στους κινητικούς όρους της Χαμιλτονιανής βρίσκουμε

- Ο κινητικός όρος που αντιστοιχεί στους κοντινότερους γείτονες μετασχηματίζεται ως

$$\begin{aligned} & -t \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = \\ & = \frac{-t}{N} \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \sum_{k,k'} \delta_{i,j+\rho} e^{-jkR_i} e^{jk'R_j} c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} \\ & = \frac{-t}{N} \sum_i \sum_{\sigma} \sum_{k,k'} e^{-jkR_i} \left( \sum_{\rho} \delta_{i,j+\rho} e^{jk'(R_i+\rho)} \right) c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} \quad (4.2) \\ & = -t \sum_{\sigma} \sum_{k,k'} \left( \sum_i \frac{1}{N} e^{-j(k-k')R_i} \right) 2(\cos k'_x + \cos k'_y + \cos k'_z) c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} \\ & = -2t \sum_{k',\sigma} (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} \end{aligned}$$

όπου<sup>1</sup> στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήθηκε η σχέση πληρότητας

$$\sum_i e^{-jR_i(k-k')} = N\delta_{kk'}$$

ενώ στο προηγούμενο βήμα έγινε η αντικατάσταση

$$\begin{aligned} \sum_{\rho} e^{jk'\rho} &= e^{jk'(1,0,0)} + e^{jk'(-1,0,0)} + \dots + e^{jk'(0,0,-1)} \\ &= 2(\cos k'_x + \cos k'_y + \cos k'_z) \end{aligned}$$

- Με την ίδια λογική για τους αμέσως κοντινότερους γείτονες:

$$\begin{aligned} &t' \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho'} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \\ &= \frac{t'}{N} \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \sum_{k,k'} \delta_{i,j+\rho'} e^{-jkR_i} e^{jk'R_j} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k'\sigma} \\ &= 4t' \sum_{k',\sigma} (\cos k_x \cos k_y + \cos k_x \cos k_z + \cos k_y \cos k_z) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \end{aligned} \quad (4.3)$$

με τη βοήθεια της παραπάνω σχέσης πληρότητας καθώς και της σχέσης

$$\begin{aligned} \sum_{\rho'} e^{jk'\rho'} &= e^{jk'(1,1,0)} + e^{jk'(-1,1,0)} + \dots + e^{jk'(0,-1,-1)} \\ &= 2(\cos(k'_x + k'_y) + \cos(k'_x - k'_y) + \cos(k'_x + k'_z) \\ &\quad + \cos(k'_x - k'_z) + \cos(k'_y + k'_z) + \cos(k'_y - k'_z)) \\ &= 4(\cos k'_x \cos k'_y + \cos k'_x \cos k'_z + \cos k'_y \cos k'_z) \end{aligned}$$

- Ο όρος του χημικού δυναμικού γράφεται

$$-\mu \sum_i \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} = -\mu \sum_k \sum_{\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \quad (4.4)$$

Επομένως, το ελεύθερο μέρος της Χαμιλτονιανής μέσου πεδίου στον χώρο των ορμών παίρνει την διαγώνια μορφή

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \quad (4.5)$$

με

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) + 4t'(\cos k_x \cos k_y + \cos k_x \cos k_z + \cos k_y \cos k_z) - \mu \quad (4.6)$$

Για τους όρους αλληλεπίδρασης της Χαμιλτονιανής μπορούμε να γράψουμε

---

<sup>1</sup> Αν ο όρος μεταπήδησης είναι διαφορετικός σε μία ή περισσότερες κατευθύνσεις, κάτι ιδιαίτερα χρήσιμο για την μελέτη ανισοτροπικών υλικών, τότε ο αρχικός όρος χωρίζεται σε αθροίσμα για την κάθε κατεύθυνση και εφαρμόζεται η ίδια διαδικασία. Συνήθως τα υλικά που μας ενδιαφέρουν είναι ανισοτροπικά στην μία διεύθυνση και μπορούν να θεωρηθούν διδιάστατα με πολύ καλή προσέγγιση. Σε αυτή την περίπτωση ο όρος μετάβασης κατά την μία διεύθυνση, έστω  $z$ , θεωρείται συχνά αμελητέος και έτσι μπορούν να αγνοηθούν οι συνιστώσες στις οποίες συνεισφέρει

- Ο όρος αλληλεπίδρασης στο ίδιο σημείο του πλέγματος μετασχηματίζεται:

$$\begin{aligned}
& U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \\
&= U \frac{1}{N^2} \sum_i \sum_{k,k',k'',k'''} e^{-jR_i(k+k'-k''-k''')} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'''\uparrow} \\
&= U \sum_{k,k',k'',k'''} \left( \frac{1}{N^2} \sum_i e^{-jR_i(k+k'-k''-k''')} \right) c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'''\uparrow} \\
&= U \sum_{k,k',k'',k'''} (\delta_{k+k',k''+k'''} + \delta_{k-k'',k'''-k'} + \delta_{k-k''',k''-k'}) c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'''\uparrow} \quad (4.7) \\
&= U \sum_{k,k',q} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-(k+q)\downarrow}^\dagger c_{-(k'+q)\downarrow} c_{k'\uparrow} \\
&\quad + U \sum_{k,k',q} c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow}^\dagger c_{(k+q)\downarrow} c_{k'\uparrow} \\
&\quad + U \sum_{k,k',q} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow} c_{(k+q)\uparrow}
\end{aligned}$$

όπου τέθηκε ίσος με  $-q$  ο κάθε όρος της κάθε ισότητας που οφείλουν να ικανοποιούν τα  $k, k', k'', k'''$  για να μην μηδενίζεται ο αντίστοιχος όρος του αθροίσματος.

- Ο όρος αλληλεπίδρασης στα γειτονικά σημεία του πλέγματος μετασχηματίζεται:

$$\begin{aligned}
& V \sum_{i,j} \delta_{i,j+\rho} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} \\
&= V \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{k,k',k'',k'''} \delta_{i,j+\rho} e^{-jk'R_i} e^{-jk'R_j} e^{jk''R_j} e^{jk'''R_i} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'''\uparrow} \\
&= V \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{k,k',k'',k'''} \delta_{i,j+\rho} e^{-jR_i(k-k''')} e^{-jR_j(k'-k'')} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'''\uparrow} \\
&= V \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{k,k',k'',k'''} e^{-jR_i(k-k'''+k'-k'')} \sum_\rho e^{-j\rho(k'-k'')} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'''\uparrow} \\
&= V \sum_{k,k',k'',k'''} \left( \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} e^{-jR_i(k-k'''+k'-k'')} \right) f(k', k'') c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k''\downarrow} c_{k'''\uparrow} \quad (4.8) \\
&= V \sum_{k,k',q} f(-(k+q), -(k'+q)) c_{k\uparrow}^\dagger c_{-(k+q)\downarrow}^\dagger c_{-(k'+q)\downarrow} c_{k'\uparrow} \\
&\quad + V \sum_{k,k',q} f(k+q, k'+q) c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow}^\dagger c_{(k+q)\downarrow} c_{k'\uparrow} \\
&\quad + V \sum_{k,k',q} f(k'+q, k') c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} c_{(k+q)\uparrow}
\end{aligned}$$

Κατά τη διάρκεια των πράξεων ορίστηκε το μέγεθος

$$\begin{aligned}
f(k, k') &= \sum_{\rho} e^{-j\rho(k-k')} \\
&= e^{-j(1,0,0)(k-k')} + e^{-j(-1,0,0)(k-k')} + \dots + e^{-j(0,0,-1)(k-k')} \\
&= 2 (\cos(k_x - k'_x) + \cos(k_y - k'_y) + \cos(k_z - k'_z))
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Ύστερα από πράξεις είναι εύκολο να δειχθεί ότι το  $f(k, k')$  μπορεί να διαχωρισθεί ως προς  $k$  και  $k'$  παίρνοντας την μορφή:

$$f(k, k') = \sum_n f_n(k) f_n(k') \tag{4.10}$$

για πεπερασμένο αριθμό  $n$  που εξαρτάται από τις διαστάσεις και την συμμετρία του συστήματος. Σε κάθε περίπτωση, οι όροι αλληλεπίδρασης παίρνουν την ενιαία μορφή

$$\begin{aligned}
H_{int} &= \sum_{k, k', q} [V_1^q(k, k') c_{k\uparrow}^\dagger c_{-(k+q)\downarrow}^\dagger c_{-(k'+q)\downarrow} c_{k'\uparrow} + V_2^q(k, k') c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow} c_{(k+q)\uparrow} \\
&\quad + V_3^q(k, k') c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow}^\dagger c_{(k+q)\downarrow} c_{k'\uparrow}]
\end{aligned} \tag{4.11}$$

με

$$\begin{aligned}
V_1^q(k, k') &= \sum_n V_{1,n}^q(k, k') = \sum_n V f_n(-(k+q)) f_n(-(k'+q)) \\
V_2^q(k, k') &= \sum_n V_{2,n}^q(k, k') = \sum_n V f_n(k+q) f_n(k'+q) \\
V_3^q(k, k') &= \sum_n V_{3,n}^q(k, k') = \sum_n V f_n(k'+q) f_n(k')
\end{aligned}$$

αν πρόκειται για αλληλεπίδραση σε γειτονικά σημεία του πλέγματος, αλλιώς τα δυναμικά αυτά γίνονται μονάδα. Τα μεγέθη  $V_i^q(k, k')$  τα ονομάζουμε ενεργά δυναμικά της Χαμιλτονιανής. Οι συναρτήσεις  $f_n(k)$  καθορίζουν τη μορφή του ενεργού δυναμικού και για τον λόγο αυτό ονομάζονται παράγοντες μορφής. Η μορφή των πιθανών παραγόντων μορφής καθορίζεται από την ομάδα μετασχηματισμών που αντιστοιχούν στο εκάστοτε σύστημα που μελετάμε.

Χρησιμοποιώντας τη θεωρία του μέσου πεδίου που περιγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο προσεγγίζουμε τον όρο αλληλεπίδρασης:

$$\begin{aligned}
H_{int} &\approx \sum_{k, k', q} \sum_n V_{1,n}^q(k, k') (\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-(k+q)\downarrow}^\dagger \rangle c_{-(k'+q)\downarrow} c_{k'\uparrow} \\
&\quad + c_{k\uparrow}^\dagger c_{-(k+q)\downarrow}^\dagger \langle c_{-(k'+q)\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle) \\
&\quad + V_{2,n}^q (\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k+q)\uparrow} \rangle c_{k'\downarrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow} + c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k+q)\uparrow} \langle c_{k'\downarrow}^\dagger c_{(k'+q)\downarrow} \rangle) \\
&\quad + V_{3,n}^q (\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k+q)\downarrow} \rangle c_{(k+q)\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} + c_{k\uparrow}^\dagger c_{(k+q)\downarrow} \langle c_{(k'+q)\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} \rangle)
\end{aligned} \tag{4.12}$$

αγνοώντας ξανά τους όρους κενού.

Γίνεται πλέον φανερός μέσω της παραπάνω εξίσωσης ο ορισμός των παραμέτρων τάξης των πιθανών καταστάσεων που μπορούν να εμφανιστούν ως:

- $\Phi_{k,q,\sigma,\sigma',n}^* = \sum_{k'} V_{1,n}^q(k, k') \langle c_{k'\sigma}^\dagger c_{-(k'+q)\sigma'}^\dagger \rangle$
- $\Phi_{k,q,\sigma,\sigma',n} = \sum_{k'} V_{1,n}^q(k, k') \langle c_{-(k'+q)\sigma'} c_{k'\sigma} \rangle$
- $M_{k,q,\sigma,\sigma',n} = \sum_{k'} V_{2,n}^q(k, k') \langle c_{k'\sigma}^\dagger c_{(k'+q)\sigma'} \rangle$
- $M'_{k,q,\sigma,\sigma',n} = \sum_{k'} V_{3,n}^q(k, k') \langle c_{(k'+q)\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle$

## 4.2 Υπεραγωγίμες καταστάσεις τάξης

Όπως φαίνεται και από τη μορφή τους στην προηγούμενη ενότητα οι παράμετροι  $\Phi_{kq\uparrow\downarrow n}^*$  περιγράφουν ζεύγη σωματιδίων (γνωστά ως ζεύγη Cooper) με συνολική ορμή  $q$  και αποτελούν παραμέτρους τάξης για τις αντίστοιχες υπεραγωγίμες καταστάσεις.

Το δυναμικό  $V_{1,n}^q(k, k')$  στην περίπτωση αυτή περιγράφει μια ελκτική αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου, η ακριβής προέλευση της οποίας δεν είναι εν γένει γνωστή και δε θα μας αποσπολήσει στο παρόν, και οδηγεί σε αστάθεια στην επιφάνεια Fermi ανοίγοντας ένα ενεργειακό χάσμα. Το χάσμα αυτό είναι αποτέλεσμα του υβριδισμού μεταξύ των αρχικών ηλεκτρονίων και οπών σε νέα σωματίδια τα οποία είναι μια υπέρθεση των πρώτων. Κατά την μετάβαση στην υπεραγωγίμη κατάσταση από την κανονική σπάει τουλάχιστον η συμμετρία βαθμίδας  $U(1)$ .

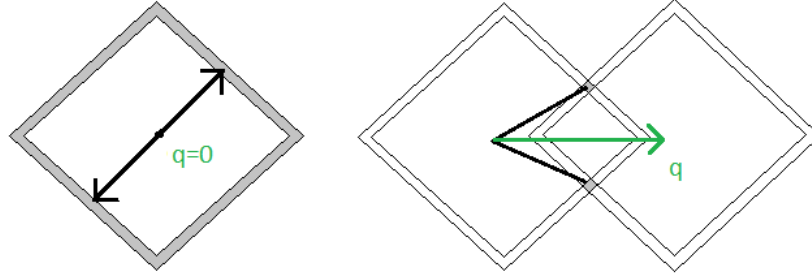
Οι υπεραγωγίμες καταστάσεις διακρίνονται:

- ανάλογα με τη συμμετρία που εμφανίζει το σπιν των ζευγών. Η κυματοσυνάρτηση του σπιν ενός τέτοιου ζεύγους μπορεί να είναι συμμετρική ή αντισυμμετρική στην εναλλαγή των ηλεκτρονίων. Στην πρώτη περίπτωση τα σπιν βρίσκονται σε triplet διάταξη ενώ στην δεύτερη σε singlet διάταξη. Εφόσον έχουμε απορρίψει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων με παράλληλο σπιν μπορούμε να δούμε την εμφάνιση singlet και triplet καταστάσεων αναλύοντας τις παραμέτρους  $\Phi_{k,q,\uparrow,\downarrow}^*$  σε συμμετρικό και αντισυμμετρικό στην εναλλαγή μέρος

$$\begin{aligned} \Delta_{kqn}^* &= \sum_{k'} V f_n(k) f_n(k') \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-(k'+q)\downarrow}^\dagger - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{-(k'+q)\uparrow}^\dagger \rangle \\ \Pi_{kqn}^* &= \sum_{k'} V f_n(k) f_n(k') \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-(k'+q)\downarrow}^\dagger + c_{k'\downarrow}^\dagger c_{-(k'+q)\uparrow}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (4.13)$$

- ανάλογα με την συνολική ορμή του ζεύγους σε καταστάσεις με μηδενική συνολική ορμή ( $q = 0$ ) και καταστάσεις (FFLO ή υπεραγωγίμα κύματα πυκνότητας ζεύγους<sup>2</sup>) οι οποίες είναι διαμορφωμένες κατά ένα κυματόνισμα  $q$ . Απουσία ισχυρού μαγνητικού πεδίου ευνουούνται κυρίως καταστάσεις μη διαμορφωμένου κυματόνισματος με συνολική ορμή ίση με το μηδέν. Ένας τέτοιος ισχυρισμός μπορεί να αποδειχθεί με μεθόδους θεωρίας πεδίου και διαισθητικά μπορεί να γίνει κατανοητός με επιχειρήματα όπως αυτό που συνοδεύει την εικόνα 4.1.

<sup>2</sup>οι καταστάσεις FFLO προκύπτουν λόγω της ύπαρξης ενός ισχυρού μαγνητικού πεδίου που δημιουργεί πεπερασμένη ορμή στο ζεύγος, ενώ τα υπεραγωγίμα κύματα πυκνότητας ζεύγους έχουν πεπερασμένη συνολική ορμή  $Q$  απουσία μαγνητικού πεδίου με το  $Q$  να σχετίζεται με τις ιδιότητες συναρμογής της επιφάνειας Fermi.



**Σχήμα 4.1:** Στο αριστερό μέρος φαίνεται η επιφάνεια Fermi και τα κοντινά σημεία γύρω από αυτή του ελεύθερου συστήματος στην περίπτωση του διδιάστατου πλέγματος όταν  $\mu = 0$  (half-filling) και  $t' = 0$ . Από την σχέση (4.6) προκύπτει  $\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$  οπότε η επιφάνεια Fermi που ορίζεται μέσω της σχέσης  $\epsilon_k = 0$  οδηγεί στην  $|k_x + k_y| = \pi$ . Το ζευγάρισμα σωματιδίων για τον σχηματισμό υπεραγωγίων ζευγών συμβαίνει κοντά στην επιφάνεια Fermi. Στο δεξιό μέρος παρουσιάζεται μια γεωμετρική κατασκευή που δείχνει την πυκνότητα (σκιασμένη περιοχή της επιφάνειας) των ζευγών ηλεκτρονίων με δεδομένη συνολική ορμή  $q \neq 0$ . Η αντίστοιχη πυκνότητα για  $q = 0$  δείχνεται στο πρώτο σχήμα. Γίνεται φανερό πως ο αριθμός των ζευγών με μηδενική συνολική ορμή είναι απείρως μεγαλύτερος και συνεπώς λαμβάνουμε υπόψη μας μόνο τέτοια ζεύγη ηλεκτρονίων.

- ανάλογα με τη μορφή του δυναμικού αλληλεπίδρασης  $V_{1,n}^q(k, k')$ . Μελετάμε την συνηθισμένη περίπτωση με  $q = 0$ , ενώ θεωρούμε ότι το δυναμικό είναι διαχωρίσιμο. Οι συναρτήσεις  $f_n(k)$ , όπως ειπώθηκε προηγουμένως, καθορίζουν τη μορφή της αλληλεπίδρασης και ονομάζονται παράγοντες μορφής. Στην γενικότερη περίπτωση (4.9) το δυναμικό αλληλεπίδρασης αποτελείται από το άθροισμα δυναμικών για διαφορετικούς παράγοντες δομής και αντιστοιχεί στον ανταγωνισμό και τη συνύπαρξη υπεραγωγίων καταστάσεων. Για  $f_n(k) = 1$  αντιστοιχεί η ιστροπική υπεραγωγήμη κατάσταση (γνωστή με την ονομασία s-wave) στην οποία το δυναμικό αλληλεπίδρασης είναι σταθερό και ανεξάρτητο των κυματανυσμάτων. Όλες οι υπόλοιπες καταστάσεις αποτελούν ανιστροπικές υπεραγωγίμες καταστάσεις. Οι δυνατοί παράγοντες μορφής που είναι δυνατόν να εμφανισθούν εξαρτώνται από τις συμμετρίες του πλέγματος.

Στη συνέχεια, θα ενδιαφερθούμε για σχεδόν διδιάστατα κυβικά πλέγματα όπου ο όρος μεταπήδησης και οι αλληλεπιδράσεις είναι αρκετά μεγαλύτερα στο επίπεδο  $xy$  από ό,τι στην τρίτη διάσταση και ιδιαίτερα για τη singlet d-wave και τις triplet  $p_x$  και  $p_y$  καταστάσεις.

**Φυσική ερμηνεία των υπεραγωγίων παραμέτρων τάξης:** Η πρώτη μικροσκοπική ερμηνεία για την υπεραγωγιότητα δόθηκε από τους Bardeen, Cooper, Schrieffer και αφορούσε ιστροπικούς, χαμηλής θερμοκρασίας υπεραγωγούς που τώρα ονομάζουμε s-wave. Η υπεραγωγιότητα στην περίπτωση αυτή, και είναι η μόνη αποδεκτή ερμηνεία μέχρι στιγμής, οφείλεται στην αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με τα φωνόνια του πλέγματος που με τη σειρά της οδηγεί σε μία έμμεση ελκτική αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων. Η s-wave

υπεραγωγιμότητα αντιστοιχεί στην παράμετρο τάξης

$$\begin{aligned}\Delta_k^s &= \Phi_{k,q=0,\uparrow,\downarrow,n=s} = \sum_{k'} V_{1,s}^{q=0}(k, k') \langle c_{k'\sigma}^\dagger c_{-k'\sigma'}^\dagger \rangle \\ &= \sum_{k'} \langle c_{k'\sigma}^\dagger c_{-k'\sigma'}^\dagger \rangle\end{aligned}\quad (4.14)$$

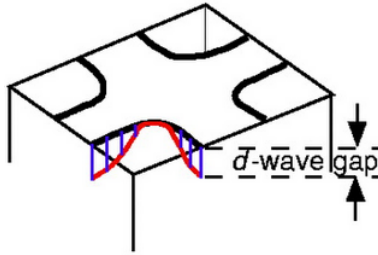
Στη γενικότερη περίπτωση το ενεργό δυναμικό είναι  $k$ -εξαρτώμενο και αντιστοιχεί σε παραμέτρους τάξης ανισοτροπικών υπεραγωγίων καταστάσεων. Αν θεωρήσουμε στην Χαμιλτονιανή (4.12) μη μηδενική μόνο την παράμετρο που αντιστοιχεί σε υπεραγωγιμότητα για  $q = 0$  και για συγκεκριμένο αλλά τυχαίο  $n$ ,  $\Phi_{k,q=0,\uparrow,\downarrow,n} = \Phi_k^n$ , και χρησιμοποιώντας σπινორιακό φορμαλισμό παρόμοιο αυτού του κεφαλαίου 3.5.1 αλλά για τον χώρο των ορμών έχουμε:

$$H = E_0 + \sum_k \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_k & \Phi_k^n \\ (\Phi_k^n)^* & \epsilon_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}\quad (4.15)$$

Διαγωνοποιώντας την Χαμιλτονιανή (4.15) προκύπτουν οι ιδιοενέργειες

$$E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + |\Phi_k^n|^2}\quad (4.16)$$

Ως  $E_0$  θεωρήσαμε του συστήματος όταν βρίσκεται στην θεμελιώδη υπεραγωγίμη κατάσταση όπου τα σωματίδια στην επιφάνεια Fermi σχηματίζουν ζεύγη Cooper, ενώ η  $E_k$  αποτελεί μια στοιχειώδη διέγερση του συστήματος. Με άλλα λόγια,  $E_k$  είναι η ενέργεια που απαιτείται για να σπάσει ένα ζεύγος Cooper και να εμφανισθεί ένα σωματίδιο στην κατάσταση  $k$ . Από τη μορφή (4.16) που έχει η ενέργεια  $E_k$  γίνεται εύκολα κατανοητό πως η παράμετρος τάξης  $|\Phi_k^n|$  αποτελεί το ενεργειακό χάσμα αυτών των δύο καταστάσεων. Στην επόμενη εικόνα φαίνεται το  $k$ -εξαρτώμενο χάσμα στην περίπτωση του  $d$ -wave υπεραγωγού.



Σχήμα 4.2: Η επιφάνεια Fermi και το υπεραγωγίμο χάσμα για κάποια σημείο πάνω σε αυτή. Παρατηρούνται σημεία με μηδενικό χάσμα. Τα σημεία αυτά ονομάζονται nodes και σε αυτά η υπεραγωγιμότητα εξαφανίζεται.

#### 4.2.1 Ταυτοποίηση υπεραγωγίων καταστάσεων στο Extended Hubbard model στον πραγματικό χώρο

Επιλύοντας τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας (3.36)-(3.37) βρίσκουμε τις σωστές παραμέτρους  $\Phi_{ij}$  που ικανοποιούν το σύστημα. Θέλουμε να διαπιστώσουμε ποιά η σχέση αυτών με τις



παραμέτρους τάξης των υπεραγωγίμων καταστάσεων της προηγούμενης παραγράφου. Για τον λόγο αυτόν αναπτύσσουμε τις  $\Phi_{ij}$  κατά *Fourier* και τις εισάγουμε στον αντίστοιχο όρο της Χαμιλτονιανής:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j} \Phi_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger = \\
& = \sum_{i,j} \left( \sum_{k,k'} \phi_{kk'} e^{j(kR_i + k'R_j)} \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k''} e^{jk''R_i} c_{k''\uparrow}^\dagger \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'''} e^{-jk'''R_j} c_{k'''\downarrow}^\dagger \right) \\
& = \sum_{k,k',k'',k'''} \sum_{i,j} \phi_{kk'} e^{j(k-k'')R_i} e^{j(k''-k''')R_j} c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k'''\downarrow}^\dagger \\
& = \sum_{k,k',k'',k'''} \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{j(k-k'')R_i} \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{j(k''-k''')R_j} \right) \phi_{kk'} c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k'''\downarrow}^\dagger \\
& = \sum_{k,k',k'',k'''} \delta_{k,k''} \delta_{k'',k'''} \phi_{kk'} c_{k''\uparrow}^\dagger c_{k'''\downarrow}^\dagger \\
& = \sum_{k,k'} \phi_{kk'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger
\end{aligned} \tag{4.17}$$

όπου τα  $k, k'$  ανήκουν στην πρώτη ζώνη Brillouin. Επομένως για κάθε τέτοιο συνδυασμό κυματανυσμάτων υπάρχει ένα κυματάνυσμα  $q$  το οποίο ανήκει και αυτό στην πρώτη ζώνη Brillouin και για το οποίο ισχύει  $k + k' = -q$ . Σύμφωνα με αυτό μπορούμε να γράψουμε

$$\sum_{i,j} \Phi_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger = \sum_{k,q} \phi_{k,q} c_{-(k+q)\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \tag{4.18}$$

με  $\phi_{k,q}$  να συμβολίζουμε τους συντελεστές *Fourier* των  $\Phi_{ij}$ .

Από την άλλη, απομονώνοντας τον υπεραγωγίμο όρο από την Χαμιλτονιανή στον χώρο των ορμών (4.12), αυτός γράφεται

$$\sum_{k,q} \left[ \sum_n \Phi_{k,q,\uparrow,\downarrow,n} \right] c_{-(k+q)\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger \tag{4.19}$$

Συγκρίνοντας τις σχέσεις (4.18) και (4.19) προκύπτει εύκολα ότι οι συντελεστές  $\phi_{k,q}$  δεν είναι τίποτα άλλο παρά το άθροισμα των παραμέτρων τάξης των υπεραγωγίμων φάσεων διαμορφωμένων κατά  $q$  για όλους τους δυνατούς παράγοντες μορφής.

#### 4.2.2 Ανίχνευση υπεραγωγίμων καταστάσεων

Στη συνέχεια, έχοντας υπολογίσει την τιμή της παραμέτρου  $\Phi_{ij}$  για κάθε συνδυασμό σημείων, θα αναζητήσουμε τις υπεραγωγίμες καταστάσεις που αυτή περιέχει και ποιές είναι δυνατόν να εμφανισθούν σε κάθε περίπτωση. Είναι σημαντικό πως η αναζήτηση κάθε κατάστασης γίνεται ξεχωριστά και δεν είναι δυνατόν να καταλήξουμε στην ύπαρξη μιας κατάστασης χωρίς να την ψάξουμε.

Η υπεραγωγίμη κατάσταση  $\Phi_k^n$  για μηδενικό κυματόνυσμα διαμόρφωσης  $q = 0$  με ενεργό δυναμικό  $V_{1,n}^{q=0}(k, k') = V_{1,n}(k, k')$  μπορεί να αναπτυχθεί κατά Fourier ως εξής

$$\Phi_k^n = \sum_i e^{jkR_i} \Phi_{R_i}^n \quad \text{ή} \quad \Phi_{R_i}^n = \sum_k e^{-jkR_i} \Phi_k^n \quad (4.20)$$

Χρησιμοποιώντας τον ορισμό για την παράμετρο τάξης της υπεραγωγίμης κατάστασης  $\Phi_k^n$  και αναπτύσσοντας το ενεργό δυναμικό κατά αντίστροφο Fourier έχουμε

$$\begin{aligned} \Phi_{R_i}^n &= \sum_k e^{-jkR_i} \Phi_k^n \\ &= \sum_k \left( \sum_{k'} V_n(k, k') \langle c_{k'\uparrow} c_{-k'\downarrow} \rangle \right) e^{-jkR_i} \\ &= \sum_k \left( \sum_{k'} f_n(k) f_n(k') \langle c_{k'\uparrow} c_{-k'\downarrow} \rangle \right) e^{-jkR_i} \\ &= \sum_k f_n(k) e^{-jkR_i} \left( \sum_{k'} f_n(k') \langle \sum_{i'} e^{jk'R_{i'}} c_{i'\uparrow} \sum_j e^{-jk'R_j} c_{j\downarrow} \rangle \right) \\ &= \sum_k f_n(k) e^{-jkR_i} \left( \sum_{k'} f_n(k') \sum_{i'} \sum_j e^{jk'(R_{i'} - R_j)} \Phi_{i'j} \right) \\ &= \sum_k f_n(k) e^{-jkR_i} \sum_{i',j} f_{i'j} \Phi_{i'j} \\ &= f_i \sum_{i',j} f_{i'j} \Phi_{i'j} \\ &= \frac{1}{d} \sum_j f_{ij} \Phi_{ij} \end{aligned} \quad (4.21)$$

όπου κατά το τελευταίο βήμα λαμβάνουμε υπόψη μας πως η άθροιση γίνεται τόσες φορές όσοι οι μη μηδενικοί όροι,  $d$ , του  $f_{ij}$  για σταθερό  $i$ .

Προκύπτει συνεπώς η σημαντική για την ανίχνευση των υπεραγωγίμων καταστάσεων τάξης σχέση:

$$\Phi_{R_i}^n = \frac{1}{d} \sum_j f_{ij} \Phi_{ij} \quad (4.22)$$

Η παραπάνω σχέση συνδέει τη μετασχηματισμένη κατά αντίστροφο Fourier παράμετρο τάξης της υπεραγωγίμης κατάστασης με τον παράγοντα μορφής της (στην μετασχηματισμένη του στον πραγματικό χώρο μορφή) και με την παράμετρο της Χαμιλτονιανής  $\Phi_{ij}$ . Γνωρίζοντας, συνεπώς, τον παράγοντα δομής μιας συγκεκριμένης υπεραγωγίμης παραμέτρου τάξης είμαστε σε θέση να ανιχνεύσουμε την ύπαρξη της φάσης αυτής. Συγκεκριμένα, θα μας απασχολήσουν οι παρακάτω υπεραγωγίμες φάσεις:

**s-wave:**  $f^s(k) = 1 \rightarrow f_{ij}^s = \delta_{i,j} \rightarrow \Phi_{R_i}^s = \Delta_{ij}$

**d-wave:**  $f^d(k) = \cos(k_x) - \cos(k_y) \rightarrow f_{ij}^d = \delta_{i,j+x} + \delta_{i,j-x} - \delta_{i,j+y} - \delta_{i,j-y} \rightarrow \Phi_{R_i}^d = \frac{1}{4}(\Delta_{i,i+x} + \Delta_{i,i-x} - \Delta_{i,i+y} - \Delta_{i,i-y})$

**Sextended-wave:**  $f^s ext(k) = \cos(k_x) + \cos(k_y) \rightarrow f_{ij}^s ext = \delta_{i,j+x} + \delta_{i,j-x} + \delta_{i,j+y} + \delta_{i,j-y} \rightarrow \Phi^s ext_{R_i} = \frac{1}{4}(\Delta_{i,i+x} + \Delta_{i,i-x} + \Delta_{i,i+y} + \Delta_{i,i-y})$

### 4.3 Κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν

Αντίστοιχα με τις υπεραγωγίμες καταστάσεις ορίζονται και καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας με παραμέτρους τάξης

$$\begin{aligned} M_{k,q,\sigma,\sigma',n} &= \sum_{k'} V_{2,n}^q(k, k') \langle c_{k'\sigma}^\dagger c_{(k'+q)\sigma'} \rangle \\ M'_{k,q,\sigma,\sigma'} &= \sum_{k'} V_{3,n}^q(k, k') \langle c_{(k'+q)\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle \end{aligned} \quad (4.23)$$

Στόχος του κάθε συστήματος είναι να επιτύχει την ελαχιστοποίηση της ενέργειάς του. Μείωση της ενέργειας μπορεί να επιτευχθεί με τη δημιουργία ενός χάσματος ενέργειας στην επιφάνεια Fermi του συστήματος στην κανονική του κατάσταση. Οι κατάλληλες αλληλεπιδράσεις μπορούν να δημιουργήσουν τις συνθήκες για την εμφάνιση χάσματος στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος. Οι παραπάνω παράμετροι τάξης περιγράφουν καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας που προέρχονται από την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων και οπών εμφανίζοντας συλλογικές διεγέρσεις ζευγών ηλεκτρονίων-οπών διαμορφωμένων κατά το κυματόνισμα  $q$ .

Η επιδεικτικότητα του ηλεκτρονικού συστήματος  $X(q)$ , δηλαδή η συνάρτηση συσχέτισης της πυκνότητας των ηλεκτρονίων, είναι ανάλογη της ποσότητας

$$X(q) \sim \sum_k f_n(k)^2 \frac{n_F(\epsilon_{k+q}) - n_F(\epsilon_k)}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} \quad (4.24)$$

Στην περίπτωση που η επιδεικτικότητα αποκλίνει εμφανίζεται αστάθεια του συστήματος σε διαταραχές του κυματόνισματος  $q$  και επομένως είναι δυνατό το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας ή συμμετριών για τη δημιουργία μιας φάσης με χαμηλότερη ενέργεια της κανονικής κατάστασης. Από τη μορφή της επιδεικτικότητας είναι φανερό πως τα κυματόνισμα  $q$  τα οποία παίζουν τον σπουδαιότερο ρόλο και ευνοούνται στην εμφάνιση μιας τέτοιας κατάστασης σπασμένης συμμετρίας είναι αυτά τα οποία:

- συνδέουν σημεία της επιφάνειας Fermi με αποκλίνουσα πυκνότητα καταστάσεων (σημεία van Hove)
- ικανοποιούν τη σχέση  $\epsilon_{k+q} \approx \epsilon_k$  για σημεία της επιφάνειας Fermi

Επιπλέον, γίνεται φανερό πως το κυματόνισμα  $q$  πρέπει να συνδέει κατειλημμένες με κενές ενεργειακές καταστάσεις (ηλεκτρόνια με οπές), οπότε απαιτούμε  $\epsilon_{k+q} = -\epsilon_k$ . Στην περίπτωση που μελετάμε  $\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) + 4t'(\cos k_x \cos k_y + \cos k_x \cos k_z +$

$\cos k_y \cos k_z$ )  $- \mu$ . Είναι συνήθης και κυρίως ευνοούμενη για την δημιουργία τέτοιων καταστάσεων η περίπτωση κατά την οποία τα συστήματα εμφανίζουν ισχυρή ανομοιογένεια εμφανίζοντας πολύ ασθενέστερους όρους μεταπήδησης και δυναμικά αλληλεπίδρασης κατά την διεύθυνση  $z$  από ό,τι στο  $xy$  επίπεδο. Με άλλα λόγια, όσο μικρότερη η διάσταση του συστήματος τόσο περισσότερο ευνοείται η εμφάνιση πυκνότητας φορτίου και σπιν. Κάτι τέτοιο μπορεί να εξηγηθεί από το γεγονός πως σε χαμηλοδιάστατα συστήματα ο αριθμός των σημείων της επιφάνειας Fermi που οδηγούν σε απόκλιση είναι πολύ μεγαλύτερος. Στην περίπτωση αυτή προσεγγίζουμε:

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu \quad (4.25)$$

Για  $t' = 0$  και  $\mu = 0^3$  μπορεί εύκολα ναδειχθεί ότι για  $q = Q = (\pi, \pi, 0)$  εμφανίζεται η συμμετρία  $\epsilon_{k+q} = -\epsilon_k, \forall k \in B.Z.$ . Όταν συμβαίνει κάτι τέτοιο επιτυγχάνεται τέλεια συναρμογή, ενώ το διάνυσμα  $Q$  ονομάζεται διάνυσμα συναρμογής (nesting vector). Επομένως, για κάθε σημείο της επιφάνειας Fermi με ενέργεια  $\epsilon_k$  υπάρχει ένα άλλο σημείο της επιφάνειας με ενέργεια  $-\epsilon_k$ . Φυσικά αυτό ερμηνεύει την παρουσία ζευγών ηλεκτρονίων-οπών.

Για  $t' \neq 0$  σπάει η συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής αλλά όσο αυτό παραμένει αρκούντως μικρό μπορούμε να θεωρήσουμε την ύπαρξη συναρμογής μέσω του κυματανύσματος  $Q$ .

Στη συνέχεια υπολογίζουμε την πυκνότητα φορτίου στο τυχαίο πλεγματοειδές σημείο  $R_i$ :

$$\begin{aligned} \rho(R_i) &= \langle n_i \rangle = \langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle \\ &= \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \\ &= \left\langle \sum_{k,k'} e^{-jkR_i} c_{k\uparrow}^\dagger e^{jk'R_i} c_{k'\uparrow} \right\rangle + \left\langle \sum_{k,k'} e^{-jkR_i} c_{k\downarrow}^\dagger e^{jk'R_i} c_{k'\downarrow} \right\rangle \\ &= \sum_{k,k'} e^{-j(k-k')R_i} \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \rangle \end{aligned}$$

και κάνοντας αλλαγή μεταβλητής  $k = k' - q$  προκύπτει

$$\rho(R_i) = \sum_{k,q} e^{jqR_i} \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+q,\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+q,\downarrow} \rangle \quad (4.26)$$

Εξηγήσαμε, όμως, παραπάνω ότι από ότα τα κυματανύσματα  $q$  αυτό που επικρατεί είναι το κυματανύσμα συναρμογής, οπότε από το άθροισμα ως προς  $q$  κρατάμε μόνο αυτό τον όρο καθώς επίσης και τον σταθερό για  $q = 0$

$$\begin{aligned} \rho(R_i) &= \sum_k e^{jQR_i} \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\downarrow} \rangle + \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} \rangle \\ &= e^{jQR_i} \sum_k \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\downarrow} \rangle + \sum_k \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} \rangle \end{aligned} \quad (4.27)$$

Όταν, συνεπώς, η παράμετρος τάξης  $\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q,\sigma} \rangle$  εμφανίζει μια μη μηδενική τιμή η πυκνότητα φορτίου για την μάλιστα με σπιν  $\sigma$  παρουσιάζει περιοδικότητα ως προς την θέση του

<sup>3</sup>οι τιμές αυτές αντιστοιχούν στο half-filling και σε επιφάνεια Fermi που απεικονίζεται στο σχήμα 3.1. Όπως φαίνεται και με αλγεβρική αντικατάσταση, αλλά και σχηματικά, ανα δύο οι πλευρές της επιφάνειας συνδέονται μέσω του κυματανύσματος  $Q = (\pi, \pi, 0)$  (και του ισοδύναμου του  $Q' = (\pi, -\pi, 0)$  καθώς διαφέρουν κατά ένα διάνυσμα ου αντιστρόφου πλέγματος)

πλεγματικού σημείου διαμορφωμένη κατά το κυματόνισμα συναρμογής  $Q$ . Η κατάσταση αυτή με περιοδική διαμόρφωση πυκνότητας ηλεκτρονίων και για τις δύο μπάντες του σπιν σε φάση ονομάζεται κύμα πυκνότητας φορτίου (CDW). Η συμμετρία που σπάει κατά την εμφάνιση του CDW είναι η μεταφορική καθώς το σύστημα παύει να είναι χωρικά ομογενές.

Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να υπολογίσουμε την μαγνήτιση ή αλλιώς την πυκνότητα συνολικού σπιν στον τυχαίο σημείο  $R_i$

$$\begin{aligned}
m(R_i) &= \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle \\
&= \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle - \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \\
&= \langle \sum_{k,k'} e^{-jkR_i} c_{k\uparrow}^\dagger e^{jk'R_i} c_{k'\uparrow} \rangle - \langle \sum_{k,k'} e^{-jkR_i} c_{k\downarrow}^\dagger e^{jk'R_i} c_{k'\downarrow} \rangle \\
&= \sum_{k,k'} e^{-j(k-k')R_i} \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} \rangle
\end{aligned}$$

Για τους ίδιους λόγους το κυματόνισμα που επικρατεί είναι το κυματόνισμα συναρμογής, οπότε κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής  $k = k' - q$  και από το άθροισμα κρατώντας μόνο τους όρους για  $q = 0$  και  $q = Q$  έχουμε

$$\begin{aligned}
m(R_i) &= \sum_k e^{jQR_i} \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\downarrow} \rangle + \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} \rangle \\
&= e^{jQR_i} \sum_k \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\downarrow} \rangle + \sum_k \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} \rangle
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Οι παράμετροι που παίζουν σπουδαίο ρόλο στην περίπτωση αυτή και αποτελούν τις εναλλακτικές παραμέτρους τάξης είναι οι

- $M = \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\downarrow} \rangle$
- $F = \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} \rangle$

Η πρώτη, όταν αντιστοιχεί σε πεπερασμένη τιμή, περιγράφει μια περιοδική κατά  $Q$  διαμόρφωση της πυκνότητας του σπιν στις θέσεις των πλεγματικών σημείων και αντιστοιχεί σε μια κατάσταση που ονομάζεται (σε αντιστοιχία με το CDW) ως κύμα πυκνότητας σπιν (SDW). Γράφοντας λίγο διαφορετικά την παράμετρο τάξης έχουμε

$$M = \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\downarrow} \rangle = \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow} \rangle + e^{j\pi} \langle c_{k\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\downarrow} \rangle$$

από όπου μπορούμε να θεωρήσουμε, εναλλακτικά, ένα SDW ως μια υπέρθεση ενός CDW στην πάνω σπιν μπάντα και ενός στην κάτω σπιν μπάντα, τα οποία παρουσιάζουν μεταξύ τους μια διαφορά φάσης  $\pi$ . Κατά συνέπεια, στην φάση του SDW η ολική πυκνότητα φορτίου παραμένει σταθερή στον χώρο, ενώ η μαγνήτιση εναλλάσσεται περιοδικά.

Η δεύτερη, όταν αντιστοιχεί σε πεπερασμένη τιμή, περιγράφει μία μη μηδενική σταθερή τιμή μαγνήτισης για όλα τα σημεία  $R_i$  και επομένως αντιστοιχεί σε σιδηρομαγνητική κατάσταση του συστήματος.

# Βιβλιογραφία

- [1] Γ. Λιβανάς, Διπλωματική Εργασία ΜΔΕ-ΦΤΕ, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ 2009
- [2] Γ. Λιβανάς, Εσωτερική Έκθεση Προόδου της Διδακτορικής του Διατριβής, 2012
- [3] J. Sadowski, 'Interplay of Charge Density Modulations and Superconductivity', University of Saskatchewan, April 2011

## Κεφάλαιο 5

# Αριθμητική Προσομοίωση των Διεπαφών

### 5.1 Η Μέθοδος που Χρησιμοποιήθηκε

Ακολουθώντας την λογική και τους συμβολισμούς των προηγούμενων κεφαλαίων θα περιοριστούμε στην περιγραφή ενός συστήματος μίας διεπαφής. Η επέκταση στην περίπτωση περισσοτέρων της μίας διεπαφών είναι άμεση. Χωρίς να ελαττώνεται η γενικότητα, επίσης, θα θεωρήσουμε πως η διεπαφή συμβαίνει κατά τον  $z$ -άξονα. Σε αυτή την περίπτωση η Χαμιλτονιανή του συνολικού συστήματος έχει την ακόλουθη μορφή

$$H = H_{up} + H_{dn} + H_T \quad (5.1)$$

όπου  $H_A - A = \{up, dn\}$ - είναι οι Χαμιλτονιανές που περιγράφουν το πάνω και κάτω υποσύστημα αντίστοιχα και  $H_T$  είναι η Χαμιλτονιανή σύζευξης των δύο.

Οι  $H_A$ , χρησιμοποιώντας το Extended Hubbard model έχουν τη μορφή που συζητήθηκε στα προηγούμενα:

$$H_A = \sum_{i,j,\sigma} \epsilon_{ijA} c_{i\sigma A}^\dagger c_{j\sigma A} + \sum_{i,j} V_{ijA} c_{i\uparrow A}^\dagger c_{j\downarrow A}^\dagger c_{j\downarrow A} c_{i\uparrow A} \quad (5.2)$$

με

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijA} = & -t_{xA} \delta_{i,j+(\pm 1,0,0)} - t_{yA} \delta_{i,j+(\pm 0,\pm 1,0)} - t_{zA} \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} \\ & + t'_{xyA} \delta_{i,j+(\pm 1,\pm 1,0)} + t'_{xzA} \delta_{i,j+(\pm 1,0,\pm 1)} + t'_{yzA} \delta_{i,j+(0,\pm 1,\pm 1)} \end{aligned} \quad (5.3)$$

και

$$V_{ijA} = U_A \delta_{i,j} + V_{xA} \delta_{i,j+(\pm 1,0,0)} + V_{yA} \delta_{i,j+(0,\pm 1,0)} + V_{zA} \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} \quad (5.4)$$

Η Χαμιλτονιανή σύζευξης παίρνει τη μορφή

$$H_T = \sum_{i,j,\sigma} \sum_{A,B} t_{ij}^m c_{i\sigma A}^\dagger c_{j\sigma B} + \sum_{i,j} \sum_{A,B} V_{ij}^m c_{i\uparrow A}^\dagger c_{j\downarrow B}^\dagger c_{j\downarrow B} c_{i\uparrow A} \quad (5.5)$$

όπου αντίστοιχα με πριν ισχύουν

$$t_{ij}^m = -t_z^m \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} + t_{xz}^m \delta_{i,j+(\pm 1,0,\pm 1)} + t_{yz}^m \delta_{i,j+(0,\pm 1,\pm 1)} \quad (5.6)$$

και

$$V_{ij}^m = V_z^m \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} \quad (5.7)$$

Στην τελευταία περίπτωση η άθροιση ως προς  $i, j$  γίνεται για όλα τα σημεία που βρίσκονται στην διεπιφάνεια. Φυσικά, αυτό σημαίνει ότι ένα ηλεκτρόνιο (ή αντίστοιχα μία οπή) μπορεί να μεταπηδήσει από το ένα υποσύστημα στο άλλο μόνο μέσω των σημείων που βρίσκονται στην διεπιφάνεια.

Η υπόλοιπη διαδικασία είναι όμοια με την περίπτωση του ενός συστήματος που μελετήθηκε στα προηγούμενα κεφάλαια χωρίς την ύπαρξη διεπαφής

- προσέγγιση μέσου πεδίου στην παραπάνω Χαμιλτονιανή (5.1)
- διαγωνοποίηση της προσεγγιστικής Χαμιλτονιανής μέσω των εξισώσεων Bogoliubov - de Gennes
- ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας του συνολικού συστήματος

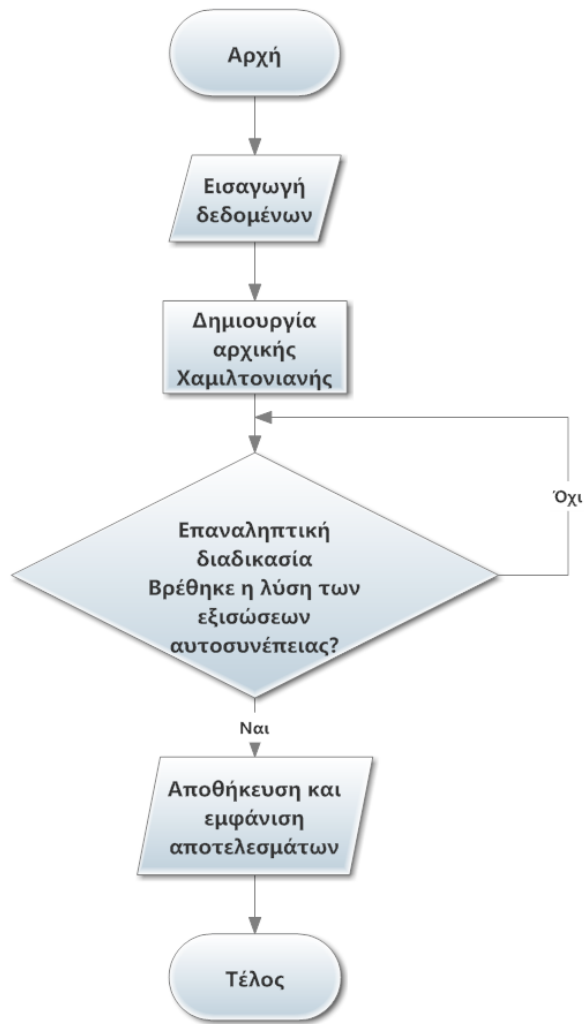
Ο βασικός κώδικας στον οποίο βασιστήκαμε αναπτύχθηκε από τον κύριο Γ. Λιβανά στα πλαίσια της Διδακτορικής του διατριβής η οποία είναι σε εξέλιξη και αφορούσε δύο συστήματα δύο διαστάσεων σε επαφή κατά τη διεύθυνση  $(1,0,0)$ . Στα πλαίσια της εργασίας αυτής έγινε επέκταση του κώδικα για τις εξής περιπτώσεις:

- διεπαφές συστημάτων τριών διαστάσεων κατά τις κατευθύνσεις  $(1,0,0)$  και  $(0,0,1)$ .
- περισσότερες της μίας διεπαφές (με παράμετρο που θα καθορίζεται από τον χρήστη) τριδιάστατων συστημάτων για την προσομοίωση ετεροδομών.
- διδιάστατες διεπαφές κατά τη διαγώνια κατεύθυνση  $(1,1,0)$

για τη μελέτη διεπαφών που εμπλέκουν  $CDW$ ,  $SDW$  και  $FM$  και υπεραγωγιμότητα. Ο κύριος αλγόριθμος περιγράφεται στο διάγραμμα ροής 5.1, ενώ στο 5.2 αναλύεται περαιτέρω το κάθε τμήμα του. Περιγράφεται εδώ κυρίως η περίπτωση του τριδιάστατου συστήματος με αυθαίρετο αριθμό διεπαφών κατά τον  $x$  ή  $z$  άξονα. Η περίπτωση της διαγώνιας διδιάστατης τομής ακολουθεί τον ίδιο αλγόριθμο στην γενική του μορφή. Τα σημεία στα οποία αυτός διαφοροποιείται περιγράφονται στο παράρτημα Β.

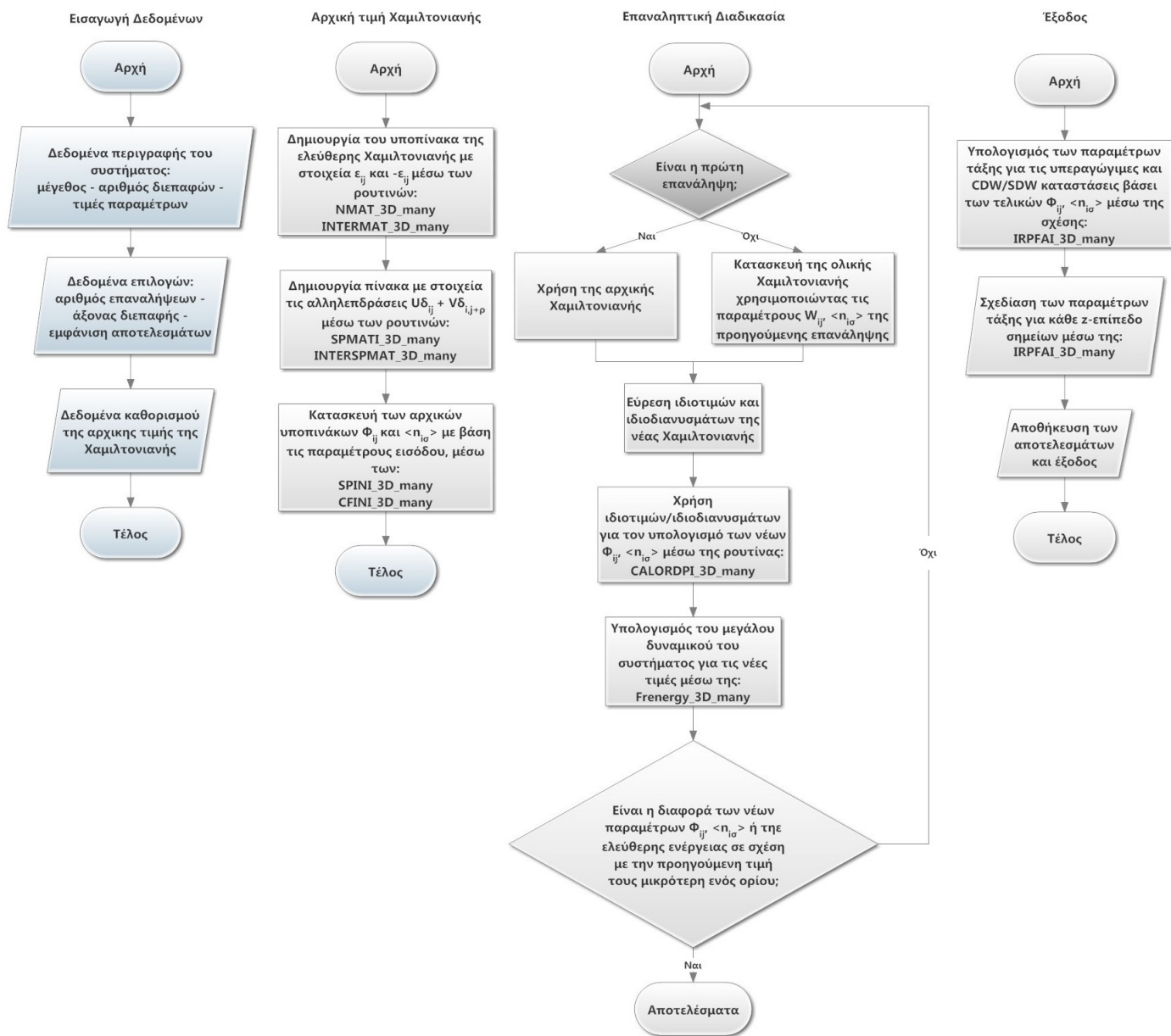
Όπως φαίνεται και από το διάγραμμα 5.1 το πρώτο βήμα είναι να καθοριστεί το σύστημα. Με αυτό εννοούμε να καθορίσουμε την τοπολογία του -αριθμός διεπαφών, αριθμός σημείων, κατεύθυνση διεπαφών - τις τιμές των παραμέτρων - χημικά δυναμικά, όροι μεταπήδησης και αλληλεπίδρασης - και τις επιλογές για την αρχική τιμή της Χαμιλτονιανής πάνω στην οποία θα γίνουν οι επαναλήψεις. Στη συνέχεια υπολογίζονται τα σταθερά τμήματα της Χαμιλτονιανής μέσου πεδίου και ακολούθως βάσει των επιλογών που έχουν γίνει δημιουργείται η αρχική Χαμιλτονιανή πάνω στην οποία θα γίνουν οι επαναλήψεις. Η αρχική αυτή Χαμιλτονιανή μπορεί να περιέχει οποιοσδήποτε από τις φάσεις που θα αναζητηθούν στο τέλος με ισχύ μου καθορίζεται στις παραμέτρους εισόδου και με οποιαδήποτε διαμόρφωση στον χώρο ή τυχαίες.





Σχήμα 5.1: Διάγραμμα ροής για την περιγραφή του αλγορίθμου επίλυσης αυτοσυνεπώς του προβλήματος διεπαφών

Αφού επιλεγεί η αρχική Χαμιλτονιανή το πρόγραμμα μπαίνει στο κυρίως τμήμα του που δεν είναι άλλο από την επαναληπτική διαδικασία. Εκεί υπολογίζεται η νέα Χαμιλτονιανή για την καινούρια εκτέλεση χρησιμοποιώντας τα δεδομένα του προηγούμενου βήματος. Ακολούθως, υπολογίζονται οι νέες ιδιοτιμές της και τα καινούρια ιδιοδιανύσματα και μέσω αυτών το νέο μεγάλο δυναμικό. Αν το τελευταίο διαφέρει από την αντίστοιχη τιμή του κατά το προηγούμενο βήμα λιγότερο από το κριτήριο που έχουμε θέσει εξ αρχής τότε η διαδικασία συγκλίνει. Σε αντίθετη περίπτωση, οι επαναλήψεις συνεχίζονται μέχρι τη σύγκλιση. Αν ο αριθμός των επαναλήψεων ξεπεράσει το όριο που του έχουμε θέσει τότε ένα μήνυμα μη σύγκλισης εμφανίζεται.



Σχήμα 5.2: Διαγράμματα ροής για το κάθε στάδιο του διαγράμματος 5.1

## Κεφάλαιο 6

# Χαρακτηριστικά Αριθμητικά Αποτελέσματα

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιασθούν τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την επίλυση της επαναληπτικής διαδικασίας των εξισώσεων αυτοσυνέπειας για τις περιπτώσεις που εξετάσαμε. Για όλες τις περιπτώσεις θεωρήθηκε ως μονάδα σύγκρισης ο όρο μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων στο  $xy$ -επίπεδο και βάσει αυτού διαμορφώθηκαν οι τιμές των υπολοίπων παραμέτρων για την επίτευξη των διαφόρων καταστάσεων τάξης που προσομοιώθηκαν. Στο πρώτο μέρος περιγράφονται και παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για διεπαφές τριών διαστάσεων κατά τη διεύθυνση  $(0\ 0\ 1)$  για υλικά που βρίσκονται σε φάσεις κύματος πυκνότητας φορτίου, κύματος πυκνότητας σπιν και σιδηρομαγνητισμού. Εξετάσαμε όλους τους δυνατούς συνδυασμούς μεταξύ αυτών των φάσεων. Στο δεύτερο μέρος παρουσιάζονται διδιάστατες διεπαφές κατά την  $(1\ 1\ 0)$  διεύθυνση μεταξύ υπεραγωγιμότητας και κυμάτων πυκνότητας φορτίου/σπιν καθώς και μεταξύ κύματος πυκνότητας φορτίου με κύμα πυκνότητας σπιν. Στο τρίτο μέρος παρουσιάζεται η εξάρτηση της εμφάνισης αντισιδηρομαγνητισμού (κύμα πυκνότητας σπιν) από τον όρο μεταπήδησης μεταξύ πλησιέστερων γειτόνων κατά τη  $z$ -διεύθυνση  $(tz)$  και από τον αριθμό των επιπέδων από τα οποία αποτελείται το σύστημα. Τα αποτελέσματα αυτά των προσομοιώσεων θα μας βοηθήσουν να εξηγήσουμε τα φαινόμενα που περιγράφηκαν κατά το πρώτο κεφάλαιο για τις διεπαφές  $LTO/STO$ ,  $LVO/STO$  και  $LAO/STO$ .

### 6.1 Διεπαφές κατά την $(0\ 0\ 1)$ σε φυλλοειδή συστήματα

Όπως αναλύεται και στο [1] ένα πρότυπο τριάδας καταστάσεων τάξης όπου δεν είναι δυνατή η συνύπαρξη των δύο χωρίς την ταυτόχρονη εμφάνιση και της τρίτης παρουσία κινητικού όρου είναι αυτή της συνύπαρξης σιδηρομαγνητισμού - κύματος πυκνότητας φορτίου (CDW) - κύματος πυκνότητας σπιν(SDW) παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίων-οπών. Στη συνέχεια προσομοιώνουμε τριών ειδών διεπαφές που εμπλέκουν η καθεμία ένα ζεύγος από τις παραπάνω τρεις καταστάσεις τάξεως. Αποδεικνύεται ότι πράγματι είναι αδύνατη η συνύπαρξη στη διεπιφάνεια οποιουδήποτε ζεύγους καταστάσεων από τις SDW, CDW, και FM χωρίς την εμφάνιση και της τρίτης κατάστασης.

### 6.1.1 Διεπαφή CDW - SDW

Για την υλοποίηση του κύματος πυκνότητας φορτίου CDW χρησιμοποιήσαμε τις παρακάτω παραμέτρους στο επεκταμένο πρότυπο Hubbard:

- $t_x = t_y = 1$
- $t_z = 0.3$
- $t'_{xy} = t'_{xz} = t'_{yz} = 0.2$
- $U = 0$
- $V_x = V_y = 0.7$
- $V_z = 0$
- $\mu = 2$

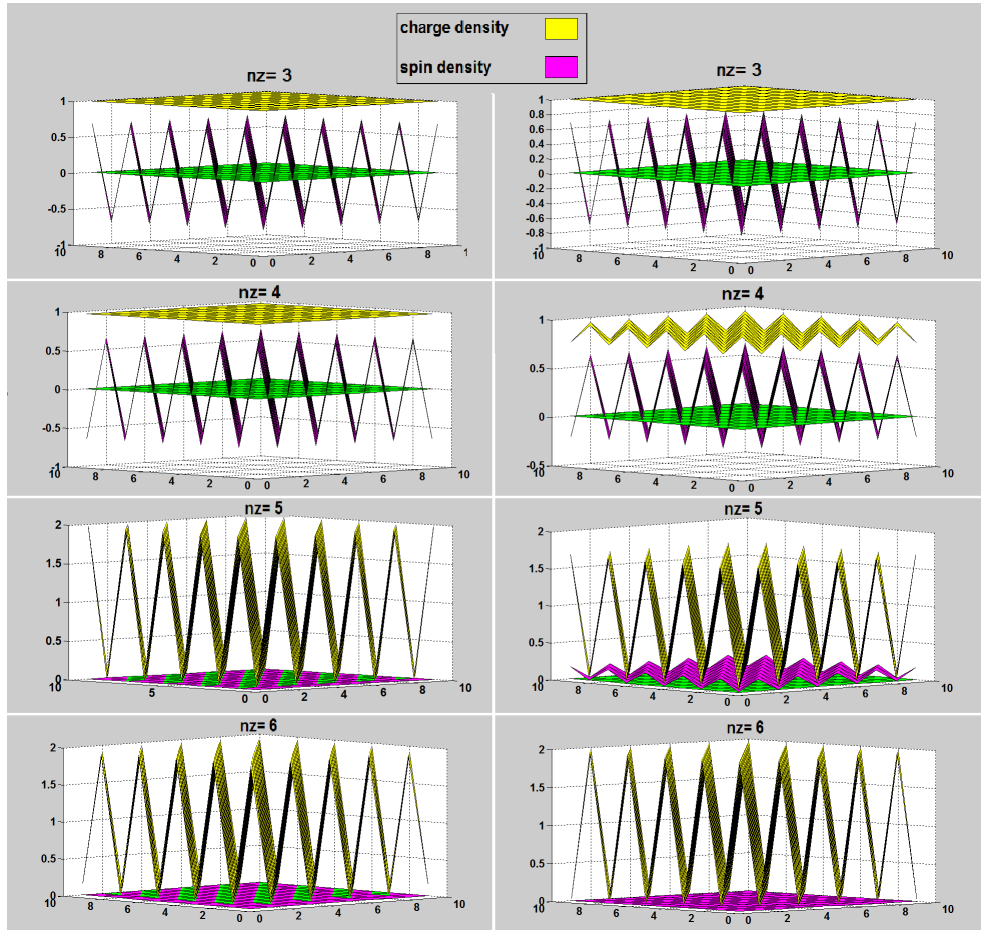
ενώ αντίστοιχα για την υλοποίηση του κύματος πυκνότητας σπιν SDW τις παραμέτρους:

- $t_x = t_y = 1$
- $t_z = 0.3$
- $t'_{xy} = t'_{xz} = t'_{yz} = 0.2$
- $U = 3$
- $V_x = V_y = 0$
- $V_z = 0$
- $\mu = 1$

Στο Σχήμα 6.1 φαίνονται τα πλησιέστερα στρώματα στην διεπιφάνεια μιας ετεροδομής CDW-SDW με τέσσερα στρώματα CDW πάνω από τέσσερα στρώματα SDW. Φαίνονται οι τιμές των παραμέτρων στον πραγματικό χώρο που προέκυψαν από την επαναληπτική διαδικασία των εξισώσεων αυτοσυνέπειας. Με **κίτρινο** παρουσιάζεται η πυκνότητα φορτίου σε κάθε σημείο του κάθε στρώματος και με **μωβ** η αντίστοιχη πυκνότητα σπιν. Στην αριστερή στήλη δεν υπάρχει σύζευξη ανάμεσα στα πάνω επίπεδα SDW ( $z < 4$ ) και τα κάτω επίπεδα CDW, ενώ στη δεξιά την περίπτωση με σύζευξη όρου μεταπήδησης  $t_m = 0.8$ .

Παρατηρούμε ότι στην διεπαφή εισχωρεί η μία φάση στην άλλη και εμφανίζεται συνύπαρξη. Δεν είναι περίεργο, λοιπόν, σύμφωνα με την προηγούμενη συζήτηση, το γεγονός ότι εμφανίζεται μια **μη μηδενική μέση τιμή στο κύμα πυκνότητας σπιν** που δεν είναι τίποτα άλλο από την **μαγνήτιση** που επάγεται λόγω αυτής της συνύπαρξης CDW/SDW.

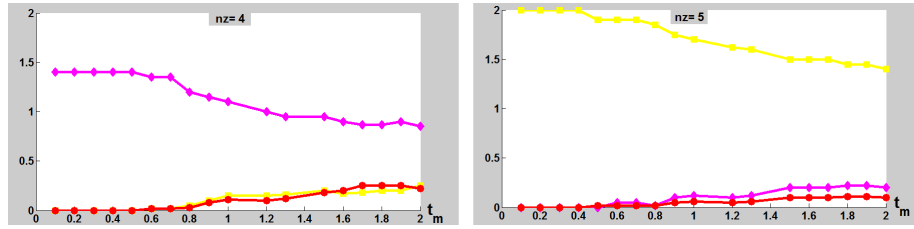
Στη συνέχεια εξετάζουμε την επίδραση που έχει το μέγεθος της σύζευξης μεταξύ των δύο υλικών. Παρατηρούμε ότι η αλλαγή του όρου μεταπήδησης μεταξύ σημείων κατά την διεπιφάνεια (0,0,1) οδηγεί σε μεταβολή του μεγέθους του επαγόμενου σιδηρομαγνητισμού και σε διαφορετική εισχώρηση της μιας υπάρχουσας φάσης μέσα στην περιοχή της άλλης. Αντίθετα,



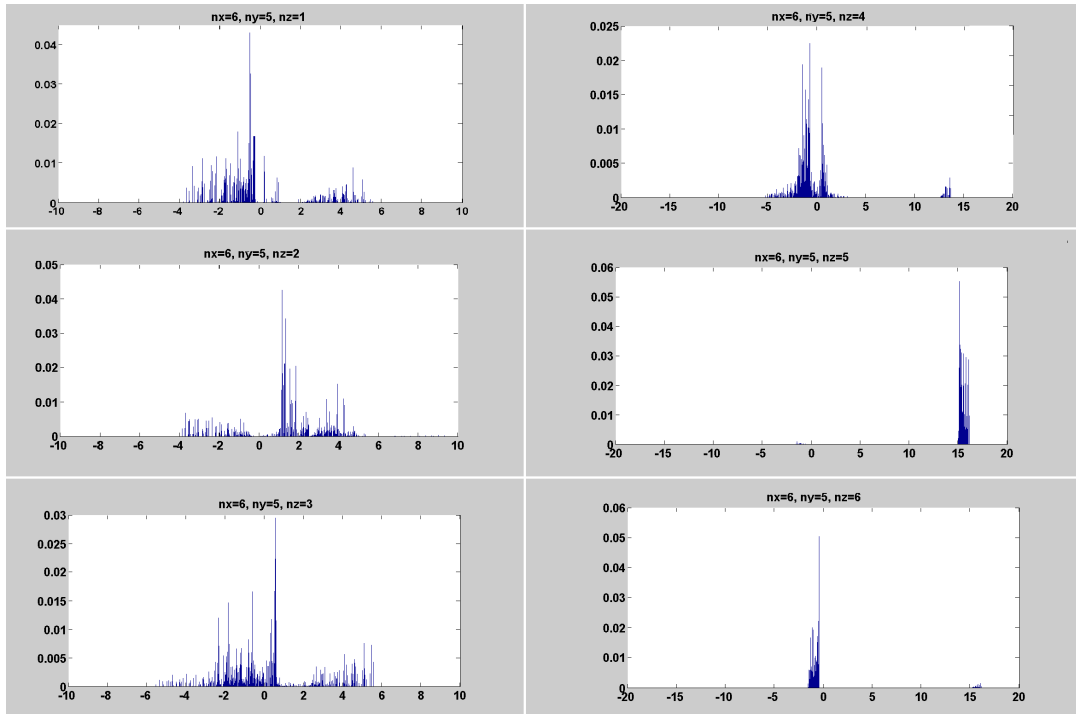
Σχήμα 6.1: Διεπαφή CDW-SDW κατά το  $(0\ 0\ 1)$  επίπεδο. Διαστάσεις συστήματος  $10 \times 10 \times 8$  σημεία. Διεπαφή μεταξύ των επιπέδων  $z = 4$  και  $z = 5$ . Εδώ σχεδιάζονται τα δύο κοντινότερα στη διεπαφή στρώματα κατά τον  $z$ -άξονα για το SDW (τα δύο πρώτα επίπεδα) και το CDW (τα δύο επόμενα). Αριστερά φαίνεται η περίπτωση χωρίς σύζευξη των υποσυστημάτων,  $t_m = 0$ , ενώ δεξιά πως μεταβάλλεται η κατάσταση όταν προστεθεί σύζευξη  $t_m = 0.8$ . Παρατηρείται με την προσθήκη της σύζευξης η εμφάνιση συνύπαρξης CDW+SDW+FM στα δύο κοντινότερα στρώματα ως προς τη διεπαφή. Ο σιδηρομαγνητισμός αντιπροσωπεύεται από την μέση τιμή της πυκνότητας σπιν.

η μεταβολή του δυναμικού μεταξύ κοντινότερων γειτόνων κατά τη διεπαφή  $(0,0,1)$  δε φαίνεται να επηρεάζει τη δυναμική συνύπαρξη των φάσεων κοντά στη διεπαφή. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 6.2.

Η εμφάνιση του αερίου ηλεκτρονίων στην περιοχή της διεπιφάνειας φαίνεται αν κοιτάξουμε την πυκνότητα καταστάσεων του συστήματος. Στο σχήμα 6.3 φαίνεται η τοπική πυκνότητα καταστάσεων σε σημεία διαφορετικών επιπέδων για τα spin-up ηλεκτρόνια. Παρατηρούμε το κλείσιμο του χάσματος στα επίπεδα αμέσως πάνω και αμέσως κάτω από την διεπαφή. Κάτι τέτοιο αντιστοιχεί σε μεταλλική συμπεριφορά στα σημεία αυτά του πλέγματος. Αντίθετα, αν κοιτάξουμε την εικόνα 6.4 που παριστάνει την τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα spin-down σωματίδια δεν εντοπίζουμε το κλείσιμο του χάσματος ούτε για τα σημεία κοντά στη



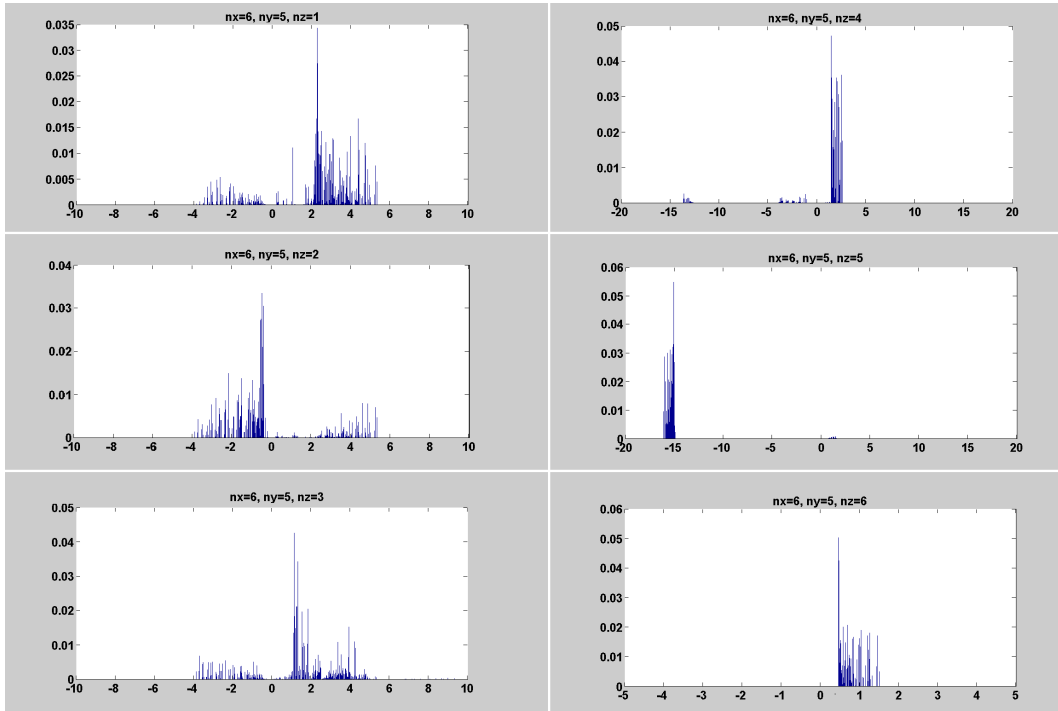
Σχήμα 6.2: Μεταβολή της κατάστασης των πλησιέστερων στρώματων στην διεπαφή συναρτήσει του όρου μεταπήδησης  $t_m$  για το σύστημα της προηγούμενης εικόνας. Αριστερά στο πλησιέστερο στην διεπαφή στρώμα στην περιοχή του  $CDW$ . Δεξιά το ίδιο διάγραμμα για το πλησιέστερο στρώμα από την πλευρά του  $SDW$ . Παρατηρείται η εμφάνιση συνύπαρξης για τιμές του nearest-neighbor hopping-term μεγαλύτερες από 0.6.



Σχήμα 6.3: Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα spin-up σωματίδια σε διάφορα σημεία του συστήματος διαστάσεων  $15 \times 15 \times 6$  σημείων με την διεπαφή  $CDW$ - $SDW$  κατά τον άξονα  $z$  μεταξύ των επιπέδων  $z = 3$  και  $z = 4$ . Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η local DOS πάνω στην ευθεία ( $x = 6, y = 5$ ) για όλες τις τιμές του  $z$ . Παρατηρείται η έλλειψη καταστάσεων με μηδενικές ενέργειες για τα επίπεδα του  $CDW$  μακριά από την διεπαφή. Για τα σημεία που είναι διπλά κατειλημμένα εμφανίζονται καταστάσεις με μεγάλη πιθανότητα κατάληψης για αρνητικές ενέργειες. Αντίθετα, για μη κατειλημμένα σημεία οι μεγάλης πιθανότητας καταστάσεις εμφανίζονται για θετικές μεγάλες τιμές της ενέργειας. Για  $z = 3$  εμφανίζονται καταστάσεις στο μηδέν. Όμοια, στην περιοχή του  $SDW$  μακριά από τη διεπαφή εμφανίζεται το αντίστοιχο χάσμα, ενώ στο στρώμα με  $z = 4$  παρατηρούμε το κλείσιμο του χάσματος.

διεπιφάνεια. Κάτι τέτοιο είναι σύμφωνο με τους προηγούμενους θεωρητικούς υπολογισμούς [1] και δείχνει ημμεταλλική συμπεριφορά του συστήματος κοντά στη διεπιφάνεια για τα σπιν-

πάνω.



Σχήμα 6.4: Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα spin-down σωματίδια σε διάφορα σημεία του συστήματος διαστάσεων  $15 \times 15 \times 6$  σημείων με την διεπαφή κατά τον άξονα  $z$  μεταξύ των επιπέδων  $z = 3$  και  $z = 4$ . Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η local DOS πάνω στην ευθεία  $(x = 6, y = 5)$  για όλες τις τιμές του  $z$ . Εμφανίζεται η ίδια έλλειψη καταστάσεων με την περίπτωση των spin-up στην περιοχή του  $CDW$  μακριά από την διεπαφή. Μάλιστα παρατηρείται ότι στα σημεία όπου η πιθανότητα κατάληψης είναι μεγάλη για τα πάνω spin είναι εξίσου μεγάλη και για τα κάτω spin και αντίθετα. Με άλλα λόγια τα σημεία ή θα είναι διπλά κατειλημμένα ή άδεια. Στην περιοχή της διεπαφής δεν εμφανίζονται στην περίπτωση αυτή καταστάσεις στο μηδέν. Με άλλα λόγια ο σιδηρομαγνητισμός που εμφανίζεται αντιστοιχεί σε σωματίδια με spin πάνω. Αυτό γίνεται φανερό και από την περιοχή του  $FM$  όπου βλέπουμε ότι εμφανίζει μονωτική συμπεριφορά για τα spin-down σωματίδια.

### 6.1.2 Διεπαφή CDW - FM

Για την υλοποίηση του σιδηρομαγνήτη (στην περίπτωση μας ημιμεταλλικός) χρησιμοποιήσαμε τις ακόλουθες παραμέτρους:

- $t_x = t_y = 1$
- $t_z = 0.3$
- $t'_{xy} = t'_{xz} = t'_{yz} = 0.2$
- $U = 10$
- $V_x = V_y = 0$
- $V_z = 0$
- $\mu = 1$

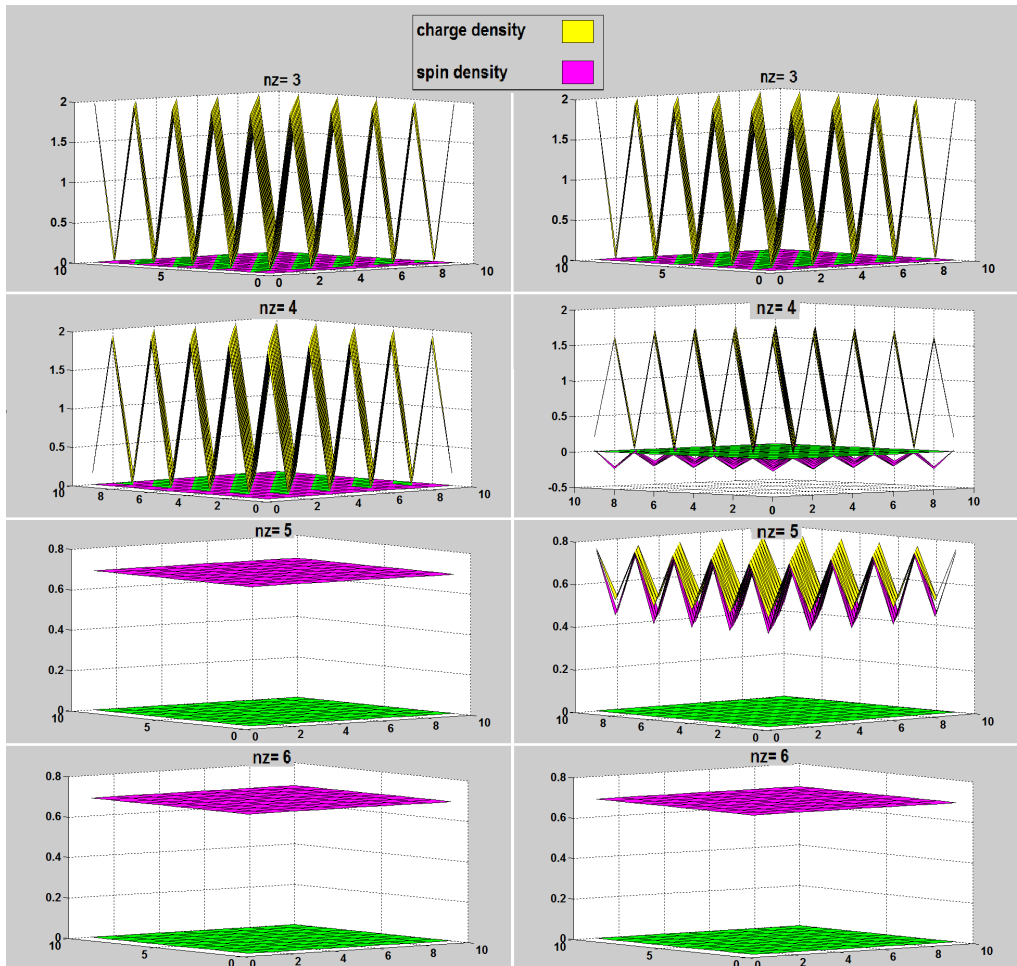
ενώ για το CDW χρησιμοποιούμε τις ίδιες με τις προηγούμενες τιμές.

Στην εικόνα 6.5 φαίνονται τα κοντινότερα επίπεδα της διεπαφής μεταξύ του CDW και του σιδηρομαγνήτη. Όμοια με την προηγούμενη περίπτωση, με κίτρινο αναπαριστάται η πυκνότητα φορτίου στα διάφορα σημεία του πλέγματος και με μωβ η πυκνότητα του σπιν. Ο σιδηρομαγνήτης εμφανίζει σταθερή για όλα τα σημεία πυκνότητα σπιν, ίση με 0.7. Χωρίς τη σύζευξη μεταξύ των δύο υποσυστημάτων, η κάθε φάση υπάρχει ξεχωριστά στο αντίστοιχο τμήμα και στη φανταστική διεπαφή δεν εμφανίζεται κανενός είδους συνύπαρξη. Αντίθετα, με την προσθήκη ενός όρου μεταπήδησης μεταξύ των δύο υποσυστημάτων η κατάσταση μεταβάλλεται όπως φαίνεται στο δεξιό μέρος της εικόνας 6.5. Η σταθερή μαγνήτιση παύει να ισχύει και δίνει τη θέση της σε μία περιοδική διαμόρφωση γύρω από την προηγούμενη σταθερή τιμή. Συνεπώς, προκύπτει η εμφάνιση μαζί με τη μαγνήτιση ενός κύματος πυκνότητας σπιν. Ταυτόχρονα, και σύμφωνα με τα προηγούμενα, εισέρχεται στην περιοχή του σιδηρομαγνήτη το CDW και είναι αυτή η εισχώρηση που προκαλεί την εμφάνιση του κύματος πυκνότητας σπιν που παρατηρήσαμε προηγούμενος.

Ο σιδηρομαγνήτης που παράγεται με τις συγκεκριμένες παραμέτρους του μοντέλου *Hubbard* είναι ημιμεταλλικός, κάτι που σημαίνει πως στην μεταλλική του συμπεριφορά συνεισφέρουν ηλεκτρόνια με συγκεκριμένο σπιν. Στην περίπτωση που εξετάζουμε μόνο τα spin-up ηλεκτρόνια συνεισφέρουν στην ροή ρεύματος με την εφαρμογή ενός πεδίου. Στα σχήματα 6.6 και 6.7 φαίνεται η τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα σωματίδια με σπιν πάνω και κάτω αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι στην πρώτη περίπτωση βρίσκονται πολλές καταστάσεις γύρω από την ενέργεια Fermi, εμφανίζοντας έτσι με ευκολία αγωγιμότητα για τα σπιν πάνω σωματίδια. Διαφορετική είναι η περίπτωση στο σχήμα 6.7. Όπως φαίνεται, τα σπιν κάτω σωματίδια έχουν τη δυνατότητα να καταλάβουν είτε ενεργειακές καταστάσεις με ενέργεια χαμηλότερη του μηδενός, οπότε και στο αντίστοιχο σημείο αναμένεται να βρούμε το σωματίδιο, είτε ενεργειακές καταστάσεις με ενέργεια αρκετά υψηλότερη του μηδενός, οπότε πρόκειται για διεγερμένες καταστάσεις και αναμένεται να βρούμε μια έλλειψη του αντίστοιχου σωματιδίου στο σημείο που μελετάμε.

Κατά τη σύζευξη των δύο υλικών παρατηρείται η εμφάνιση του αερίου ηλεκτρονίων στο επίπεδο του CDW ακριβώς πάνω από τη διεπιφάνεια. Καταστάσεις στη κοντινή περιοχή της

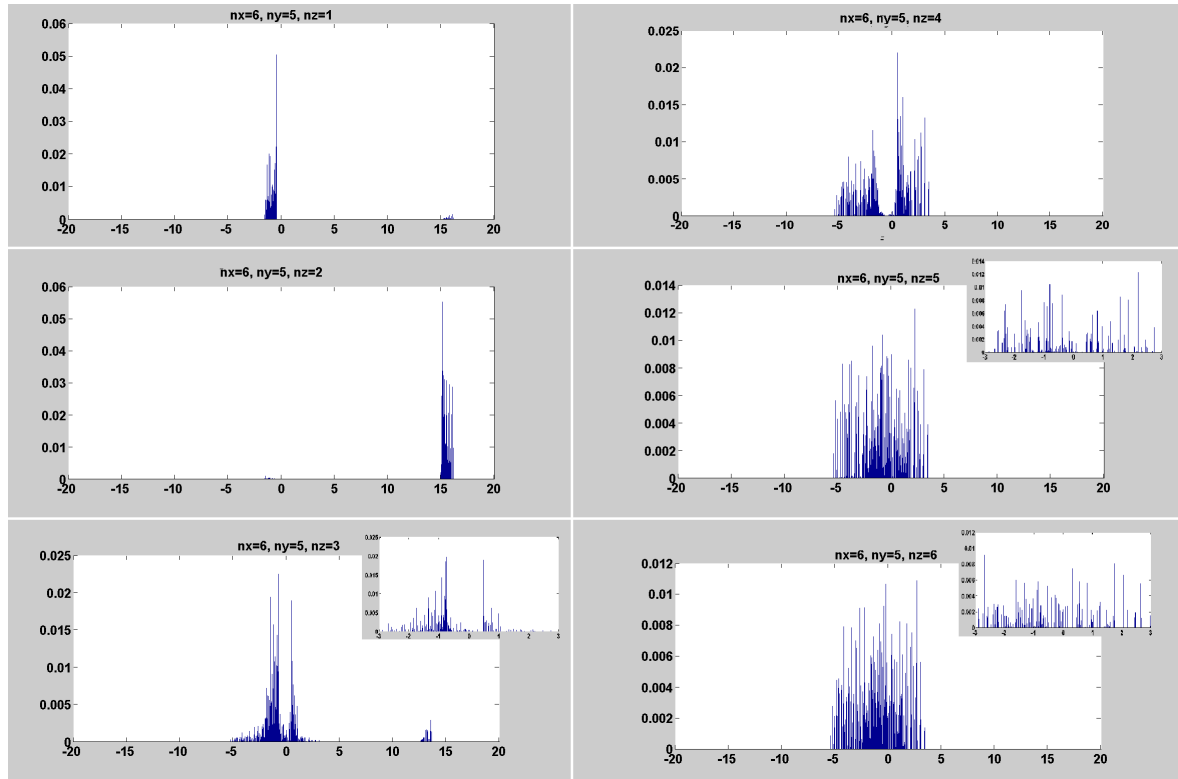




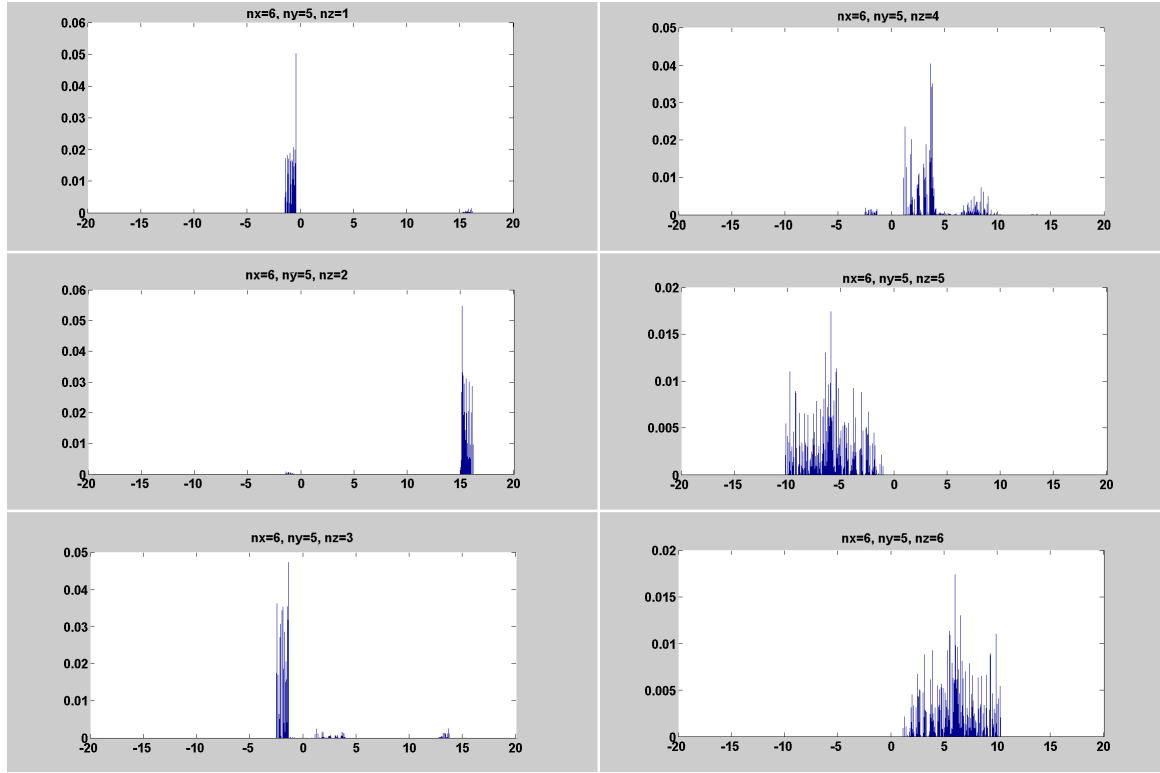
Σχήμα 6.5: Διεπαφή CDW-FM κατά το  $(0\ 0\ 1)$  επίπεδο. Διαστάσεις συστήματος  $10 \times 10 \times 8$  σημεία. Διεπαφή μεταξύ των επιπέδων  $z = 4$  και  $z = 5$ . Στην εικόνα αυτή φαίνονται τα δύο κοντινότερα στη διεπαφή στρώματα κατά τον  $z$ -άξονα για το  $CDW$  (τα δύο πρώτα επίπεδα) και τον σιδηρομαγνητισμό (τα δύο επόμενα). Αριστερά φαίνεται η περίπτωση χωρίς σύζευξη των υποσυστημάτων,  $t_m = 0$ , ενώ δεξιά πως μεταβάλλεται η κατάσταση όταν προστεθεί σύζευξη  $t_m = 1$ . Κατά την προσθήκη της σύζευξης εμφανίζεται κύμα πυκνότητας σπιν στην πλευρά του  $CDW$  με πεπερασμένη μέση τιμή (σιδηρομαγνητισμός). Στην περιοχή του σιδηρομαγνητισμού η επαφή προκαλεί την χωρική κυμάτωση του σπιν προκαλώντας εμφάνιση κύματος φορτίου και σπιν. Το χαρακτηριστικό είναι πως οι κυματώσεις του σπιν και του φορτίου είναι παρόμοιου εύρους και βρίσκονται σε φάση.

μηδενικής ενέργειας κάνουν την εμφάνισή τους μέσα στο ενεργειακό χάσμα του κύματος πυκνότητας φορτίου.

Ένα σημαντικό αποτέλεσμα της συγκεκριμένης διεπαφής είναι το γεγονός ότι το κύμα πυκνότητας φορτίου και κύμα πυκνότητας σπιν έχουν παραπλήσια εύρη στην πλευρά του  $FM$ .



Σχήμα 6.6: Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα spin-up σωματίδια σε διάφορα σημεία του συστήματος διαστάσεων  $15 \times 15 \times 6$  σημείων με την διεπαφή CDW-FM κατά τον άξονα  $z$  μεταξύ των επιπέδων  $z = 3$  και  $z = 4$ . Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η local DOS πάνω στην ευθεία ( $x = 6, y = 5$ ) για όλες τις τιμές του  $z$ . Παρατηρείται η έλλειψη καταστάσεων με μηδενικές ενέργειες για τα επίπεδα του CDW μακριά από την διεπαφή. Για τα σημεία που είναι διπλά κατειλημμένα εμφανίζονται καταστάσεις με μεγάλη πιθανότητα κατάληψης για αρνητικές ενέργειες. Αντίθετα, για μη κατειλημμένα σημεία οι μεγάλης πιθανότητας καταστάσεις εμφανίζονται για θετικές μεγάλες τιμές της ενέργειας. Για  $z = 3$  εμφανίζονται καταστάσεις στο μηδέν. Από την άλλη πλευρά, στην περιοχή του σιδηρομαγνήτη υπάρχει πλειάδα καταστάσεων γύρω από την ενέργεια Fermi. Ο σιδηρομαγνήτης εμφανίζει μεταλλική συμπεριφορά για τα spin-up σωματίδια.

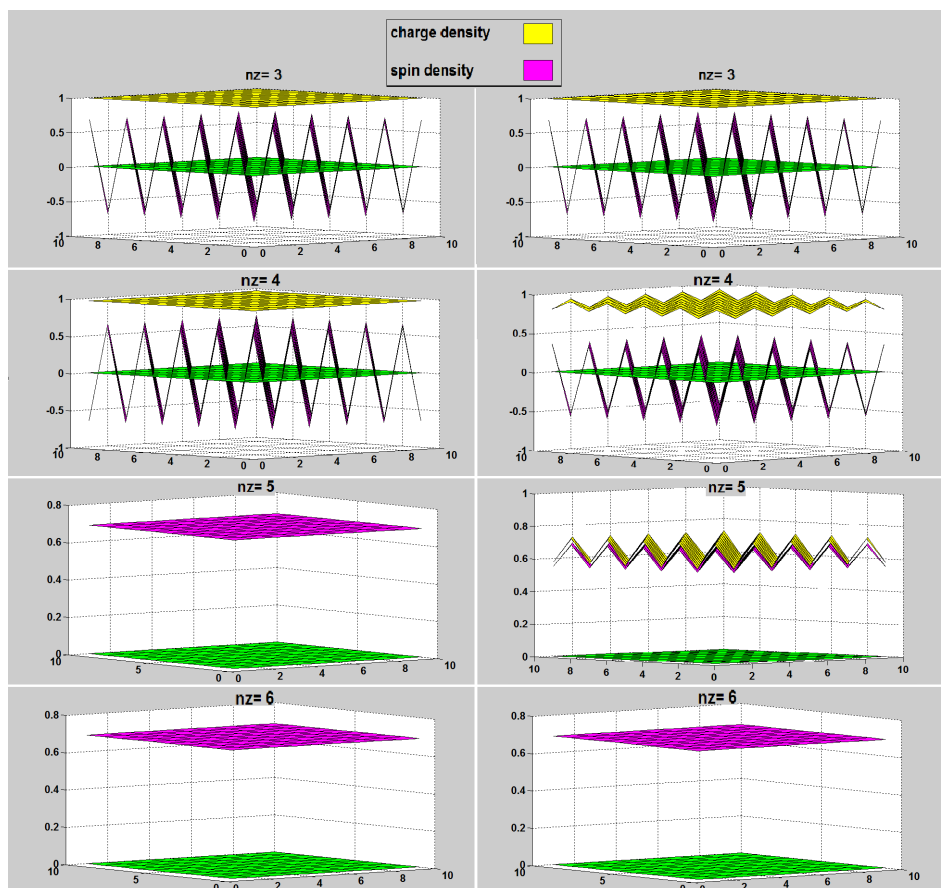


Σχήμα 6.7: Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα spin-down σωματίδια σε διάφορα σημεία του συστήματος της προηγούμενης εικόνας. Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η local DOS πάνω στην ευθεία ( $x = 6, y = 5$ ) για όλες τις τιμές του  $z$ . Εμφανίζεται η ίδια έλλειψη καταστάσεων με την περίπτωση των spin-up στην περιοχή του *CDW* μακριά από την διεπαφή. Μάλιστα παρατηρείται ότι στα σημεία όπου η πιθανότητα κατάληψης είναι μεγάλη για τα πάνω σπιν είναι εξίσου μεγάλη και για τα κάτω σπιν και αντίθετα. Με άλλα λόγια τα σημεία ή θα είναι διπλά κατειλημμένα ή άδεια. Στην περιοχή της διεπαφής δεν εμφανίζονται στην περίπτωση αυτή καταστάσεις στο μηδέν. Ο σιδηρομαγνητισμός που εμφανίζεται αντιστοιχεί σε σωματίδια με σπιν πάνω. Αυτό γίνεται φανερό και από την περιοχή του *FM* όπου βλέπουμε ότι εμφανίζει μονωτική συμπεριφορά για τα spin-down σωματίδια.

### 6.1.3 Διεπαφή SDW - FM

Χρησιμοποιώντας τις ίδιες τιμές για τις παραμέτρους με τις προηγούμενες περιπτώσεις προσομοιώνουμε τη διεπαφή μεταξύ SDW και σιδηρομαγνητισμού.

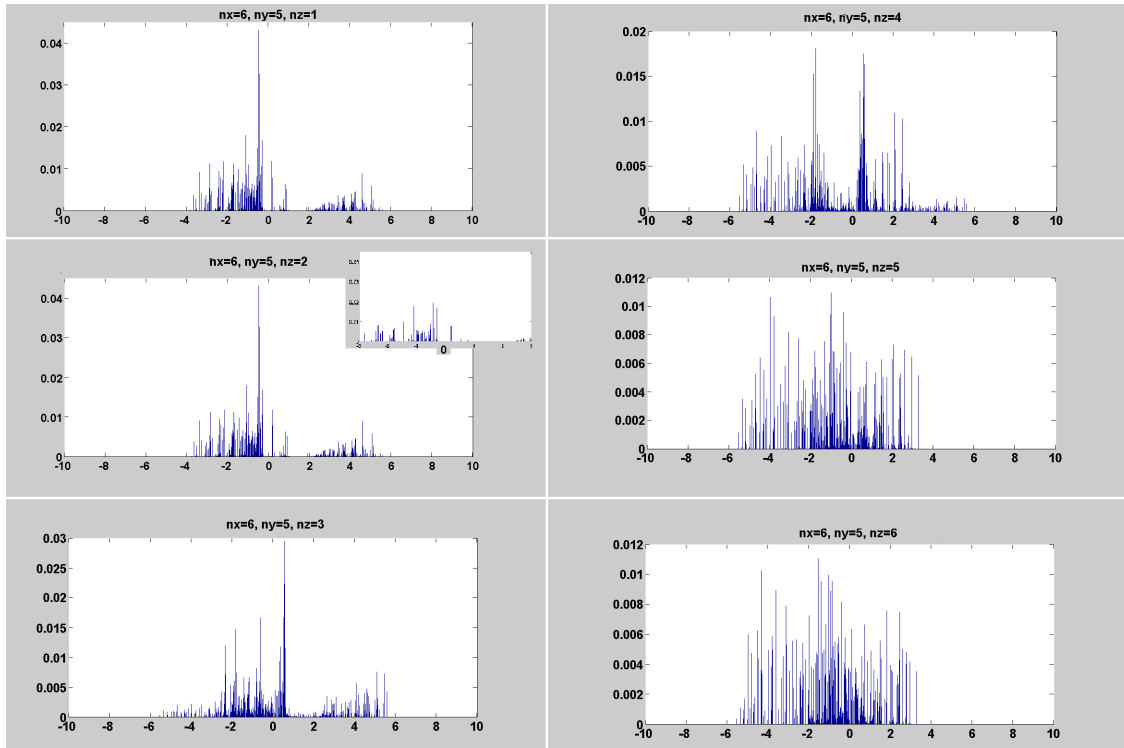
Τα επίπεδα γύρω από την διεπαφή φαίνονται στο σχήμα 6.8. Τα αποτελέσματα έχουν την ίδια λογική με τις προηγούμενες περιπτώσεις. Κι εδώ παρατηρείται η εμφάνιση του αερίου ηλεκτρονίων με τη μεταλλική συμπεριφορά στη διεπιφάνεια από την πλευρά του μονωτή καθώς και η συνύπαρξη των τριών φάσεων στη διεπαφή.



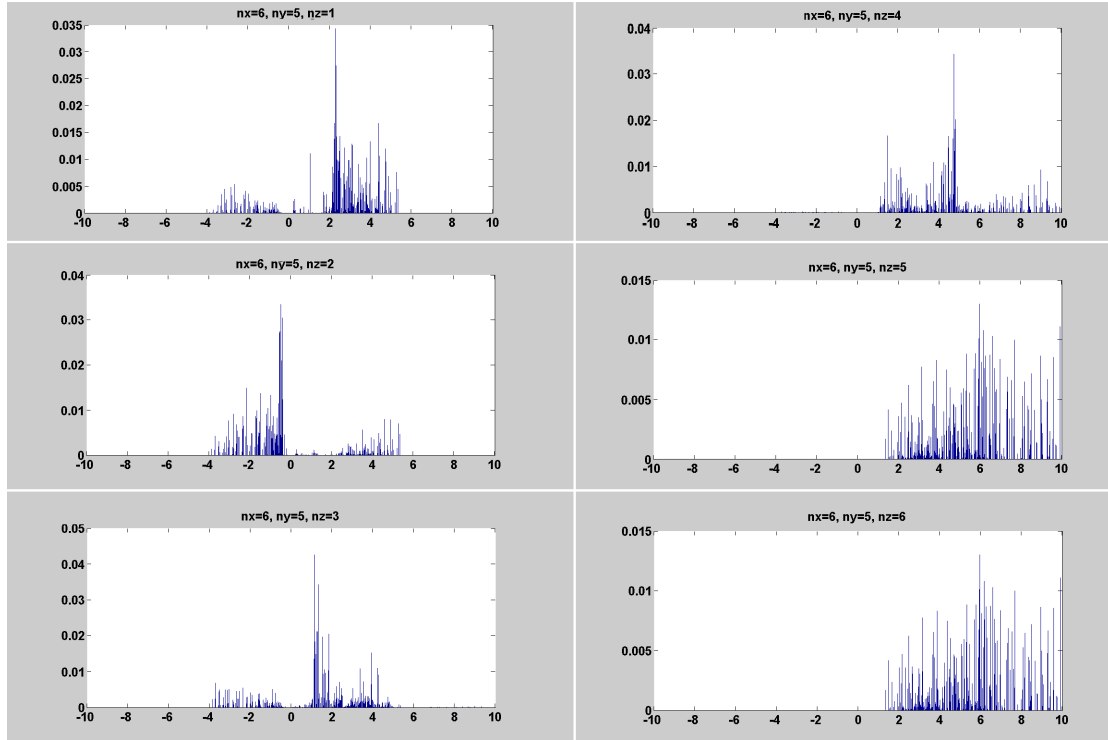
Σχήμα 6.8: Διεπαφή SDW-FM κατά το (0 0 1) επίπεδο. Διαστάσεις συστήματος  $10 \times 10 \times 8$  σημεία. Διεπαφή μεταξύ των επιπέδων  $z = 4$  και  $z = 5$ . Εδώ σχεδιάζονται τα δύο κοντινότερα στη διεπαφή στρώματα κατά τον  $z$ -άξονα για το SDW (τα δύο πρώτα επίπεδα) και τον σιδηρομαγνητισμό (τα δύο επόμενα). Αριστερά φαίνεται η περίπτωση χωρίς σύζευξη των υποσυστημάτων,  $t_m = 0$ , ενώ δεξιά πως μεταβάλλεται η κατάσταση όταν προστεθεί σύζευξη  $t_m = 1$ . Κατά την προσθήκη της σύζευξης εμφανίζεται κύμα πυκνότητας φορτίου στην πλευρά του SDW ενώ παράλληλα μετατοπίζεται το κύμα πυκνότητας σπιν εμφανίζοντας πεπερασμένη μέση τιμή (σιδηρομαγνητισμός). Στην περιοχή του σιδηρομαγνητισμού η επαφή προκαλεί την χωρική κυμάτωση του σπιν προκαλώντας εμφάνιση κύματος φορτίου και σπιν. Ξανά, παρόμοια με την περίπτωση της διεπαφής CDW-FM, παρατηρείται πως πως οι κυματώσεις του σπιν και του φορτίου είναι παρόμοιου εύρους και βρίσκονται σε φάση.

Στα σχήματα 6.9 και 6.10 δείχνεται η πυκνότητα καταστάσεων για τα σπιν πάνω και τα

σπιν κάτω σωματίδια αντίστοιχα.



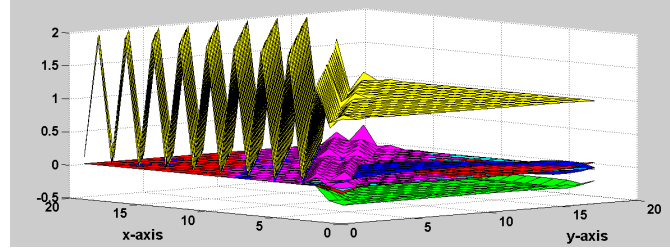
Σχήμα 6.9: Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα spin-up σωματίδια σε διάφορα σημεία του συστήματος διαστάσεων  $15 \times 15 \times 6$  με την διεπαφή SDW-FM κατά τον άξονα  $z$  μεταξύ των επιπέδων  $z = 3$  και  $z = 4$ . Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η local DOS πάνω στην ευθεία ( $x = 6, y = 5$ ) για όλες τις τιμές του  $z$ . Παρατηρείται και στην περίπτωση αυτή έλλειψη καταστάσεων με μηδενικές ενέργειες για τα επίπεδα του SDW μακριά από την διεπαφή. Η SDW κατάσταση έχει μονωτική συμπεριφορά. Για  $z = 3$  εμφανίζονται καταστάσεις στο μηδέν, πράγμα που αναδεικνύει την εμφάνιση σιδηρομαγνητικής φάσης στο συγκεκριμένο επίπεδο. Από την άλλη πλευρά, στην περιοχή του σιδηρομαγνήτη υπάρχει πλειάδα καταστάσεων γύρω από την ενέργεια Fermi δεδομένου ότι ο σιδηρομαγνήτης εμφανίζει μεταλλική συμπεριφορά για τα spin-up σωματίδια με τις συγκεκριμένες παραμέτρους του επεκταμένου πρότυπου Hubbard.



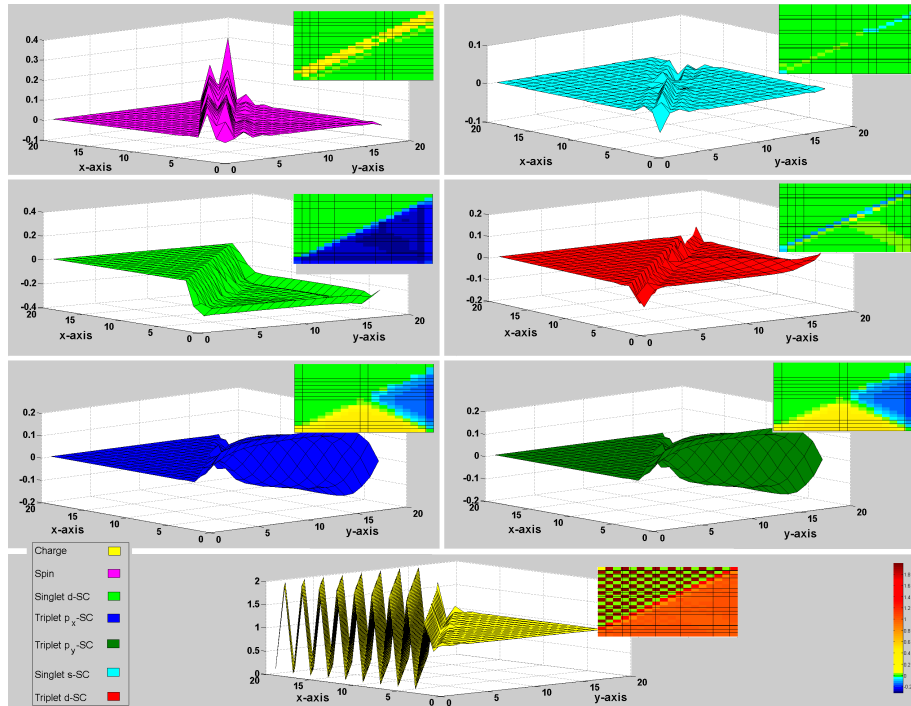
Σχήμα 6.10: Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τα spin-down σωματίδια σε διάφορα σημεία του συστήματος διαστάσεων  $15 \times 15 \times 6$  με την διεπαφή κατά τον άξονα  $z$  μεταξύ των επιπέδων  $z = 3$  και  $z = 4$ . Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η local DOS πάνω στην ευθεία  $(x = 6, y = 5)$  για όλες τις τιμές του  $z$ . Εμφανίζεται η ίδια έλλειψη καταστάσεων με την περίπτωση των spin-up στην περιοχή του SDW μακριά από την διεπαφή. Ενώ, όμως, για τα σωματίδια με spin πάνω η πιθανότητα κατάληψης ενεργειακών καταστάσεων με αρνητική ενέργεια είναι σε όλα τα σημεία μεγάλη, στην περίπτωση των σωματιδίων με spin κάτω η πιθανότητα αυτή εξαρτάται από το σημείο της περιοχής του SDW προκαλώντας έτσι την κυμάτωση του spin και του φορτίου. Στην διεπαφή δεν δημιουργούνται καταστάσεις στο μηδέν, ενώ και στην περιοχή του σιδηρομαγνήτη τέτοιες ενεργειακές καταστάσεις δεν εμφανίζονται κάνοντας ημιμεταλλική τη συμπεριφορά του σιδηρομαγνήτη.

## 6.2 Διεπαφές κατά τη διαγώνια διεύθυνση (1 1 0)

Στο εδάφιο αυτό θα παρουσιάσουμε χαρακτηριστικά αποτελέσματα από την προσομοίωση διεπαφών κατά τη διαγώνιο τομή (1 1 0) σε φυλλοειδή συστήματα. Δίνονται μόνον τα αποτελέσματα μέσα σε ένα συγκεκριμένο επίπεδο.

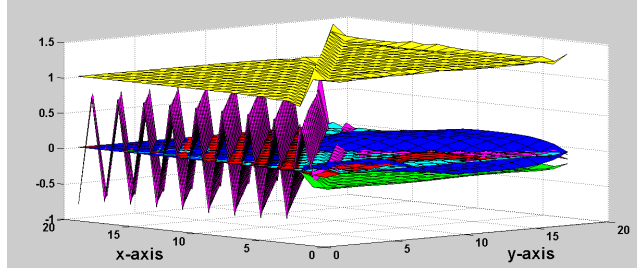


Σχήμα 6.11: Διεπαφή κατά τη διαγώνιο στο επίπεδο  $xy$  μεταξύ CDW και d-wave singlet υπεραγωγιμότητας. Το σύστημα είναι  $20 \times 18$  σημείων. Η σύζευξη των δύο αυτών φάσεων έχει ως αποτέλεσμα την επαγωγή φάσεων που δεν προϋπάρχουν όπως ένα κύμα πυκνότητας σπιν στη διεπαφή και μια διαμορφωμένη s-wave υπεραγωγιμότητα.

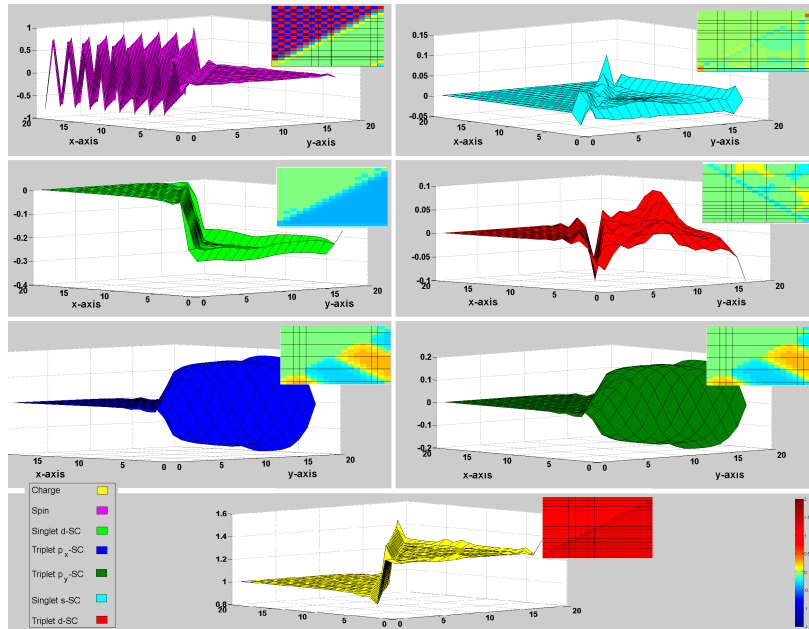


Σχήμα 6.12: Ξεχωριστή εικόνα για την κάθε παράμετρο που εμφανίζεται κατά τη διαγώνιο επαφή μεταξύ CDW και d-wave singlet υπεραγωγιμότητας. Η συνύπαρξη dSC-CDW επάγει υποχρεωτικά κάτω από την ύπαρξη και ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής και τη φάση  $\eta$  που δεν είναι τίποτα άλλο από μια διαμορφωμένη κατά  $Q$   $\sigma$ -wave υπεραγωγιμότητα. Η εμφάνιση SDW στη διεπιφάνεια οδηγεί στην επαγωγή του μαγνητισμού στην πλευρά του CDW. Παρόμοια, η εμφάνιση SDW οδηγεί στην επαγωγή  $\Pi_x$  ( $\Pi_y$ ) υπεραγωγιμότητας στην πλευρά της dSC.

Στο σχήμα 6.11 δίνεται το αποτέλεσμα της προσομοίωσης διεπαφής μεταξύ  $CDW$  και  $d - wave$  υπεραγωγιμότητας, ενώ στο 6.12 φαίνεται η κάθε φάση ξεχωριστά. Όπως αναμενόταν εμφανίζεται στη διεπαφή  $s - wave$  υπεραγωγιμότητα [1]. Όμοια, στο σχήμα 6.13 προσομοιώνεται η διεπαφή μεταξύ  $SDW$  και  $d - wave$  υπεραγωγιμότητας, ενώ στο 6.14 η κάθε φάση αναπαριστάται ξεχωριστά για ευκρίνεια.



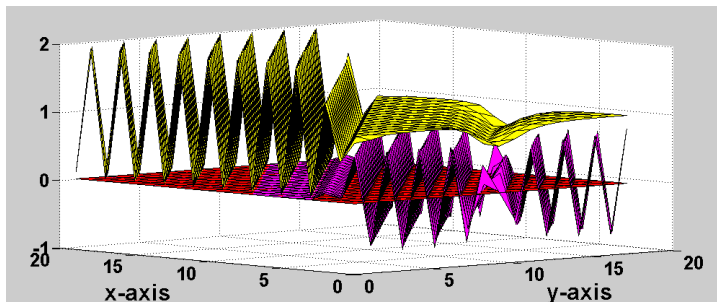
Σχήμα 6.13: Διεπαφή κατά τη διαγώνιο στο επίπεδο  $xy$  μεταξύ  $SDW$  και  $d$ -wave singlet υπεραγωγιμότητας. Το σύστημα είναι  $20 \times 18$  σημείων. Η σύζευξη των δύο αυτών φάσεων έχει ως αποτέλεσμα την επαγωγή φάσεων που δεν προϋπάρχουν όπως ένα κύμα πυκνότητας φορτίου στη διεπαφή και  $\Pi_x(\Pi_y)$  υπεραγωγιμότητα.



Σχήμα 6.14: Ξεχωριστή εικόνα για την κάθε παράμετρο που εμφανίζεται κατά τη διαγώνιο επαφή μεταξύ  $SDW$  και  $d$ -wave singlet υπεραγωγιμότητας. Η συνύπαρξη  $dSC$ - $SDW$  επάγει υποχρεωτικά κάτω από την ύπαρξη και ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής και τη φάση  $\Pi$  triplet  $SC$ . Αξιοσημείωτη είναι η περιοδικότητα που εμφανίζει η φάση αυτή με την περιοδικότητα κατά τη διαγώνιο. Αντίστοιχα με την προηγούμενη περίπτωση, η εμφάνιση  $CDW$  στη διεπιφάνεια οδηγεί στην επαγωγή του μαγνητισμού στην πλευρά του κύματος πυκνότητας σπιν. Παρόμοια, η εμφάνιση  $CDW$  οδηγεί στην επαγωγή η υπεραγωγιμότητας από την πλευρά της  $dSC$ .



Τέλος, στην εικόνα 6.15 παρουσιάζεται το αποτέλεσμα της διαγώνιας διεπαφής μεταξύ κύματος πυκνότητας φορτίου και κύματος πυκνότητας σπιν. Όπως φαίνεται (και αναμένεται σύμφωνα με το [1]) επάγεται και στην περίπτωση αυτή σιδηρομαγνητική φάση κατά μήκος της διεπαφής.



Σχήμα 6.15: Διεπαφή κατά τη διαγώνιο στο επίπεδο  $xy$  μεταξύ CDW και SDW υπεραγωγιμότητα. Το σύστημα είναι  $20 \times 18$  σημείων. Παρατηρείται η επαγωγή σιδηρομαγνητισμού στη διεπιφάνεια στην πλευρά και του CDW και του SDW.

Σε όλες τις παραπάνω περιπτώσεις παίρνουμε τα αναμενόμενα αποτελέσματα με βάση τις προηγούμενες μελέτες από την ομάδα μας στο χώρο των ορμών. Προκύπτουν όμως και μη αναμενόμενα αποτελέσματα όπως η διαφορά κατά μια φάση  $\pi/2$  ανάμεσα σε συνυπάρχουσες  $d$ -wave-triplet και  $\pi$ -wave υπεραγωγίσιμες καταστάσεις τις οποίες θα πρέπει να μελετήσουμε καλύτερα.

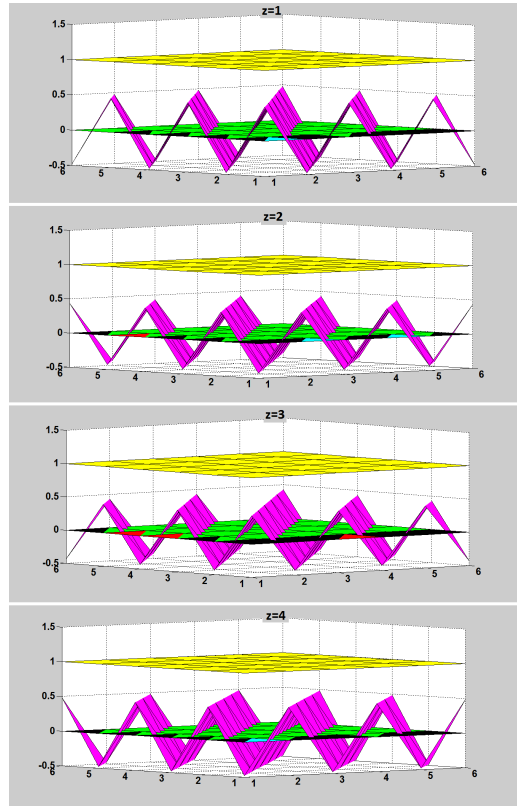
## 6.3 Μελέτη της εμφάνισης της φάσης του αντισιδηρομαγνητισμού

### 6.3.1 Bulk αντισιδηρομαγνητισμός

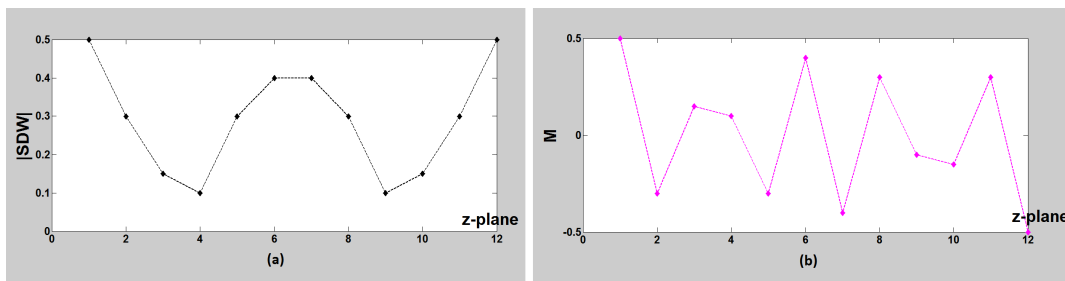
Στο τελευταίο εδάφιο του κεφαλαίου των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις με τη βοήθεια του κώδικα που γράφτηκε θα μελετηθεί κάτω από ποιες συνθήκες και με ποιον τρόπο εμφανίζεται η φάση του αντισιδηρομαγνητισμού (SDW). Όπως ήδη έχει γραφτεί, ύστερα από αναζήτηση βρέθηκαν οι παράμετροι που οδηγούν στη φάση του SDW. Ωστόσο, η φάση αυτή επηρεάζεται με τη μεταβολή κάποιων από τις παραμέτρους και ενισχύεται ή εξασθενεί δίνοντας τη θέση της σε άλλες καταστάσεις τάξης (όπως ο σιδηρομαγνητισμός) ή σε μη καταστάσεις τάξης (όπως η κανονική μεταλλική κατάσταση). Εμάς θα μας απασχολήσει η μεταβολή της φάσης συναρτήσει της παραμέτρου  $tz$  (όρος μεταπήδησης μεταξύ πλησιέστερων γειτόνων κατά τη  $z$ -διεύθυνση - όρος σύζευξης των επιπέδων) καθώς επίσης και του αριθμού των επιπέδων ( $n$ ) που αποτελούν το σύστημα που μελετάμε.

Πρώτα από όλα, πρέπει να παρατηρηθεί το γεγονός πως η μεταβολή της τιμής της παραμέτρου  $U$  (δηλαδή του  $on$  - site δυναμικού στο εκτεταμένο μοντέλο Hubbard) μπορεί να οδηγήσει στην αλλαγή της μορφής στον πραγματικό χώρο της διαμόρφωσης του αντισιδηρομαγνητισμού κατά τη  $z$ -διεύθυνση. Κάτι τέτοιο μπορεί να φανεί στα σχήματα 6.16 και 6.17 όπου σχεδιάζεται το πλάτος του αντισιδηρομαγνητισμού για το κάθε επίπεδο. Πρέπει να τονισθεί

πως μέσα σε ένα επίπεδο η αντισιδηρομαγνητική φάση είναι καλά εγκαταστημένη.

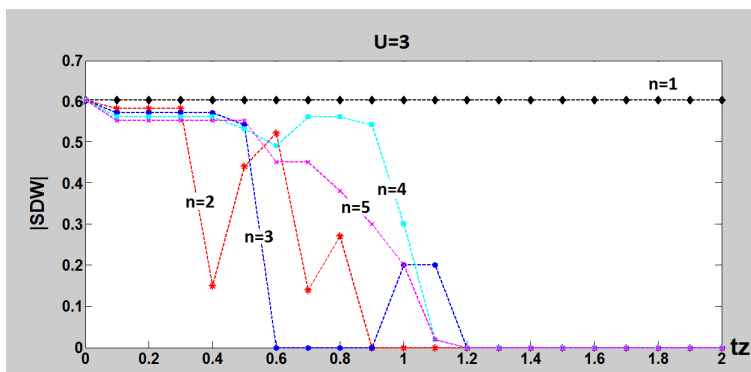


Σχήμα 6.16: Πλήρης αντισιδηρομαγνητισμός κατά την κατεύθυνση (1,1,1). Η αντισιδηρομαγνητική συμπεριφορά μπορεί να παρατηρηθεί κατά τη διεύθυνση  $x$ , κατά τη διεύθυνση  $y$  και κατά τη διεύθυνση  $z$ . Η φάση αυτή εμφανίζεται για  $U = 3$  και για διάφορες τιμές του  $tz$  και του  $n$ . Στη συγκεκριμένη περίπτωση  $tz = 0.7$  και  $n = 4$ .



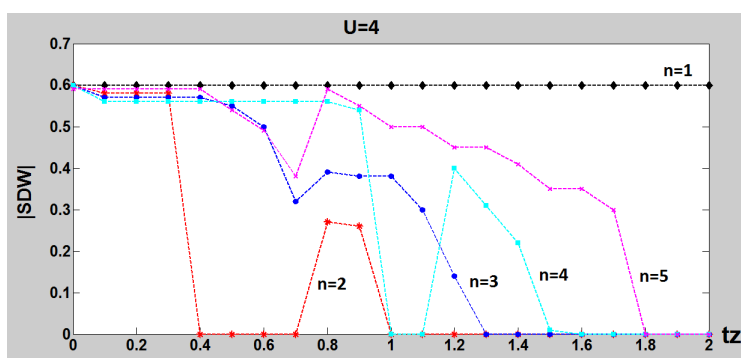
Σχήμα 6.17: Αντισιδηρομαγνητική φάση για  $U = 4$ ,  $tz = 0.7$ ,  $n = 12$ . Μέσα σε κάθε  $xy$ -επίπεδο ο αντισιδηρομαγνητισμός είναι ακριβής. Κατά τη διεύθυνση- $z$  εμφανίζεται μία διαμόρφωση. Στο (α) φαίνεται το πλάτος του  $AF$  για τα διαδοχικά επίπεδα ενώ στο (β) το σπιν των ατόμων κατα μήκος μιας γραμμής στη  $z$ -διεύθυνση. Το σχήμα αντιστοιχεί για ένα σύστημα με  $n = 12$  επίπεδα. Χαρακτηριστικό της παραπάνω διαμόρφωσης, που είναι ανεξάρτητο του αριθμού των επιπέδων, είναι η μεγιστοποίηση του πλάτους στα ακραία επίπεδα του συστήματος.

Στη συνέχεια, θα μελετηθεί η συμπεριφορά του τριών διαστάσεων  $SDW$  στον πραγματικό χώρο για τις περιπτώσεις με  $U = 3$  και  $U = 4$  για τις διάφορες τιμές των  $tz$  και  $n$ . Στην εικόνα 6.18 περιγράφεται η πρώτη περίπτωση ( $U = 3$ ). Παρατηρούμε ότι για το καλά εγκαταστημένο  $(1,1,1)$  αντισιδηρομαγνητισμό ο αριθμός των στρωμάτων δεν παίζει ουσιαστικά κάποιο σπουδαίο ρόλο. Από μία κρίσιμη τιμή του  $tz$  και πέρα η αντισιδηρομαγνητική φάση εξαφανίζεται ανεξαρτήτως του αριθμού των επιπέδων που αποτελούν το σύστημα.



Σχήμα 6.18: Εξάρτηση της εμφάνισης αντισιδηρομαγνητικής φάσης από τον όρο μεταπήδησης  $tz$  κατά τη διεύθυνση  $z$  για συστήματα διαφορετικού αριθμού επιπέδων  $n$  με  $U = 3$ . Παρατηρείται μια κρίσιμη τιμή ( $tz \approx 1.1$ ) πάνω από την οποία ο αντισιδηρομαγνητισμός εξαφανίζεται. Η μόνη εξαίρεση είναι για  $n = 2$  όπου η κρίσιμη αυτή τιμή γίνεται μικρότερη σε σχέση με συστήματα περισσότερων επιπέδων.

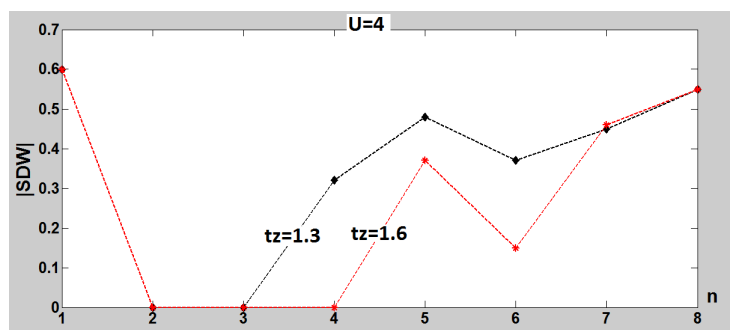
Αντίθετη είναι η περίπτωση με  $U = 4$ , όπως περιγράφεται και στο σχήμα 6.19. Εδώ η κρίσιμη τιμή του  $tz$  πάνω από την οποία η αντισιδηρομαγνητική φάση εξαφανίζεται εξαρτάται από τον αριθμό των επιπέδων που αποτελούν το σύστημα. Η αύξηση του αριθμού των επιπέδων οδηγεί στην αύξηση της κρίσιμης τιμής του όρου μεταπήδησης μεταξύ αυτών.



Σχήμα 6.19: Εξάρτηση της εμφάνισης αντισιδηρομαγνητικής φάσης από τον όρο μεταπήδησης  $tz$  κατά τη διεύθυνση  $z$  για συστήματα διαφορετικού αριθμού επιπέδων  $n$  με  $U = 4$ . Η κρίσιμη τιμή ( $tz \approx 1.1$ ) πάνω από την οποία ο αντισιδηρομαγνητισμός εξαφανίζεται είναι στην περίπτωση αυτή αύξουσα συνάρτηση του αριθμού των επιπέδων που αποτελούν το σύστημα.

Χρήσιμο θα μας φανεί και το παρακάτω διάγραμμα 6.20 στο οποίο σχεδιάζεται το πλάτος

του αντισιδηρομαγνητισμού συναρτήσει του αριθμού των επιπέδων για συγκεκριμένες τιμές του  $tz$ .



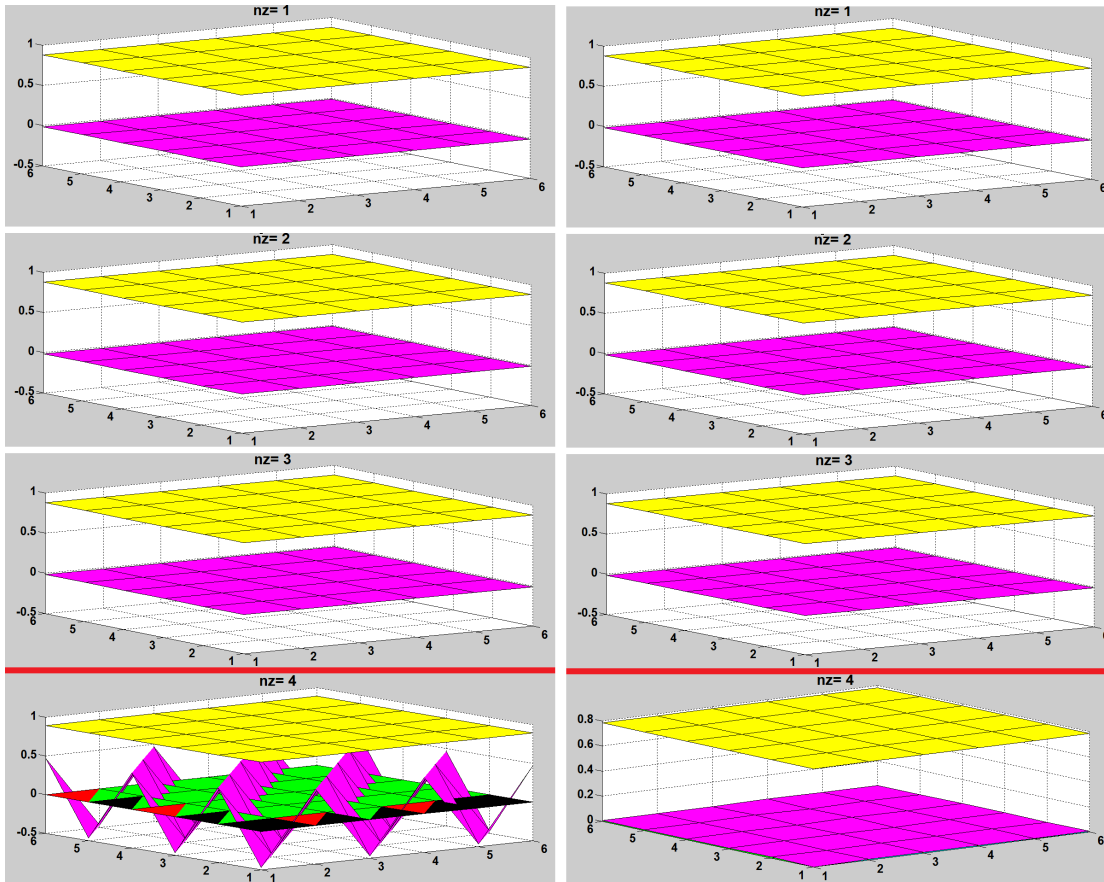
Σχήμα 6.20: Γραφική παράσταση του πλάτους του  $SDW$  συναρτήσει του αριθμού των επιπέδων του συστήματος  $n$  για  $tz = 1.3$  και  $tz = 1.6$ . Στην πρώτη περίπτωση απαιτούνται τουλάχιστον 4 επίπεδα κατά τη  $z$ -διεύθυνση ώστε να εγκατασταθεί η αντισιδηρομαγνητική φάση στα επίπεδα, ενώ στη για  $tz = 1.6$  απαιτούνται τουλάχιστον 5 επίπεδα.

### 6.3.2 Στρώμα αντισιδηρομαγνήτη σε επαφή με μη μαγνητικό υλικό

Στην υποενότητα αυτή θα μελετήσουμε την περίπτωση της σταθεροποίησης της αντισιδηρομαγνητικής φάσης σε ένα στρώμα υλικού με τις κατάλληλες παραμέτρους όταν το βάλουμε σε επαφή με ένα μη μαγνητικό υλικό μεταβλητού αριθμού στρωμάτων. Συγκεκριμένα, θα ελέγξουμε την εξάρτηση της εμφάνισης ή της εξαφάνισης της αντισιδηρομαγνητικής φάσης στο κατώτερο στρώμα από τον αριθμό των στρωμάτων του μη μαγνητικού υλικού.

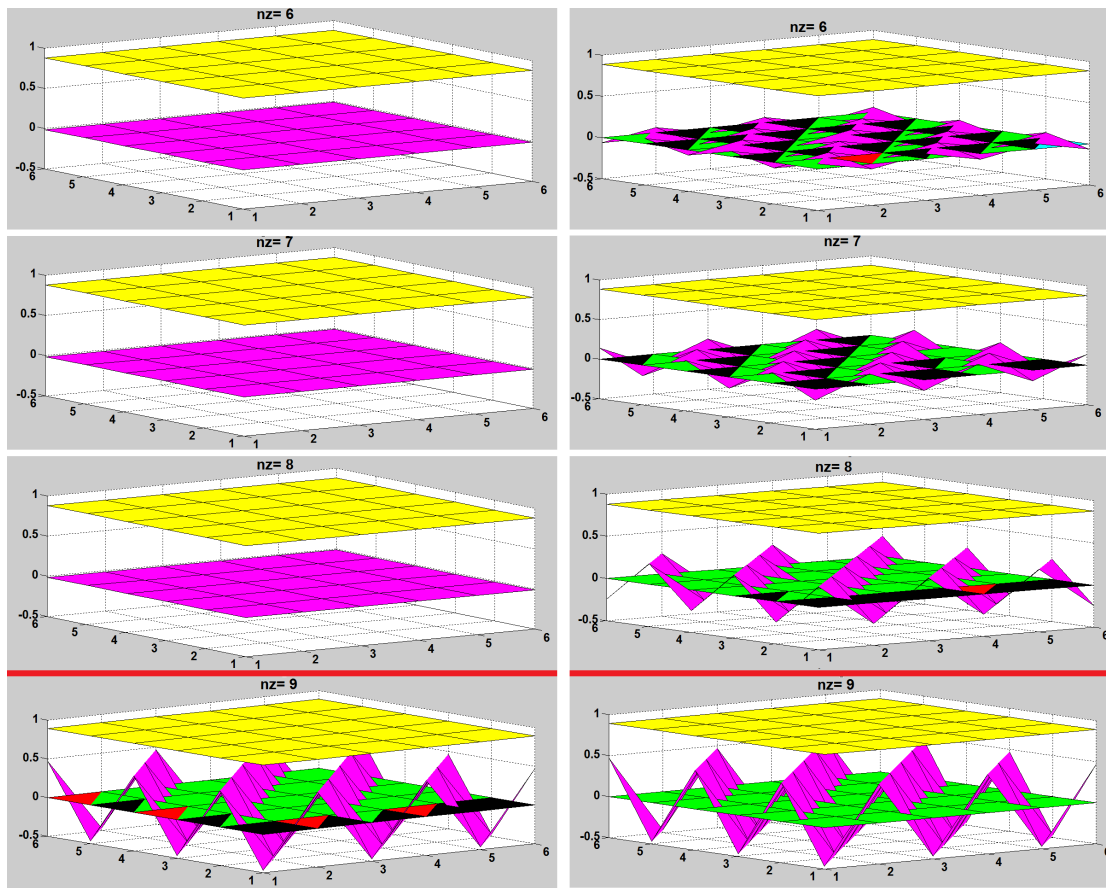
Για το στρώμα του αντισιδηρομαγνητικού υλικού θα επιλέξουμε  $U = 3$  για λόγους που θα φανούν στο επόμενο κεφάλαιο των συμπερασμάτων. Οι υπόλοιπες παράμετροι είναι οι ίδιες με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στις προηγούμενες προσομοιώσεις. Στην αριστερή στήλη της εικόνας 6.21 φαίνεται η περίπτωση του αντισιδηρομαγνητικού στρώματος και το μη μαγνητικό υλικό αποτελούμενο από τρία στρώματα. Τα δύο υλικά δε βρίσκονται σε επαφή ( $tm = 0$ ). Ακριβώς η ίδια εικόνα παρατηρείται και στην αριστερή στήλη του σχήματος 6.22. Το μόνο που έχει αλλάξει σε σχέση με προηγουμένως είναι πως πλέον το μη μαγνητικό υλικό αποτελείται από οκτώ στρώματα και όχι τρία (η απεικόνιση μόνο των τριών τελευταίων από τα οκτώ έγινε για λόγους οικονομίας του χώρου). Στη δεξιά στήλη των δύο αυτών σχημάτων φαίνεται η μεταβολή της φάσης των υλικών όταν τα φέρουμε σε επαφή (με ένα μάλλον μεγάλο hopping  $tm = 2.3$ ). Παρατηρούμε πως με τις ίδιες ακριβώς τιμές όλων των παραμέτρων και για τις δύο περιπτώσεις η συμπεριφορά δεν είναι η ίδια. Συγκεκριμένα, όταν το μη μαγνητικό υλικό αποτελείται από τρία στρώματα τότε η επαφή του με το  $AFM$  στρώμα οδηγεί το δεύτερο στην εξαφάνισή του. Αντίθετα, όταν ο αριθμός των στρωμάτων του πάνω υλικού μετατραπεί από τρία σε οκτώ τότε παρατηρούμε όχι μόνο τη διατήρηση και τη σταθεροποίηση του αντισιδηρομαγνητισμού στο κάτω υλικό αλλά και την επαγωγή της φάσης αυτής και στο κατά τα άλλα μη μαγνητικό υλικό.

Στο σχήμα 6.23 φαίνεται η εξάρτηση του πλάτους του  $AFM$  στρώματος από τον αριθμό  $n$  των στρωμάτων του μη μαγνητικού υλικού. Όπως μπορεί να παρατηρήσει κανείς, από έναν αριθμό στρωμάτων και κάτω η αντισιδηρομαγνητική φάση εξαφανίζεται. Στην περίπτωση με

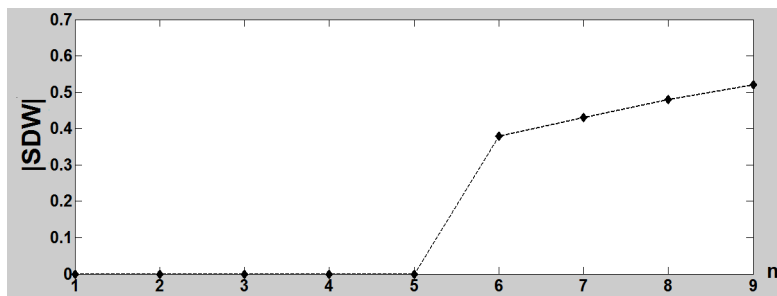


Σχήμα 6.21: Ένα στρώμα αντισιδηρομαγνήτη κάτω από τρία στρώματα μη μαγνητικού υλικού. Στην αριστερή στήλη φαίνεται η περίπτωση χωρίς επαφή των δύο υλικών. Το κάτω υλικό διατηρεί αντισιδηρομαγνητική φάση όταν βρεθεί μόνο του. Στη δεξιά στήλη έχουμε προσθέσει ένα hopping-term  $tm = 2.3$  μεταξύ του κατώτερου στρώματος του μη μαγνητικού υλικού και του προηγούμενος αντισιδηρομαγνήτη. Παρατηρείται η εξαφάνιση της αντισιδηρομαγνητικής φάσης.

$tm = 2.3$  το κατώφλι αυτό είναι τα 5 επίπεδα. Αντίθετα, από  $n = 6$  και πάνω το  $SDW$  φαίνεται να σταθεροποιείται και να επάγεται και στο πάνω υλικό.



Σχήμα 6.22: Ένα στρώμα αντισιδηρομαγνήτη κάτω από οκτώ στρώματα μη μαγνητικού υλικού. Στην εικόνα φαίνονται μόνο τα τρία χαμηλότερα από τα οκτώ στρώματα. Στην αριστερή στήλη φαίνεται η περίπτωση χωρίς επαφή των δύο υλικών. Το κάτω υλικό διατηρεί αντισιδηρομαγνητική φάση όταν βρεθεί μόνο του. Στη δεξιά στήλη έχουμε προσθέσει ένα hopping-term  $tm = 2.3$  μεταξύ του κατώτερου στρώματος του μη μαγνητικού υλικού και του προηγούμενως αντισιδηρομαγνήτη. Παρατηρείται η διατήρηση της αντισιδηρομαγνητικής φάσης στο κατώτερο υλικό και η επαγωγή αντισιδηρομαγνητικής φάσης διαμορφωμένης κατά τη  $z$ -κατεύθυνση και στο προηγούμενως μη μαγνητικό υλικό.



Σχήμα 6.23: Το πλάτος της αντισιδηρομαγνητικής φάσης του κάτω στρώματος όταν έρθει σε επαφή με το μη μαγνητικό υλικό συναρτήσει του αριθμού των στρωμάτων του τελευταίου για  $tm = 2.3$ .

# Βιβλιογραφία

- [1] S.Tsonis, P.Kotetes, G.Varelogiannis and P.B.Littlewood, 'Patterns of coexisting superconducting and particle-hole condensates', arXiv:0804.2450v2 (2008)
- [2] A.Aperis, G.Varelogiannis, P.B.Littlewood and B.D.Simons, 'Coexistence of SDW, d-wave singlet and staggered  $\pi$ -triplet superconductivity', arXiv:0804.2460v1 (2008)

## Κεφάλαιο 7

# Συμπεράσματα

Επιβεβαιώθηκε ότι η διεπαφή ανάμεσα σε δύο από τα  $CDW$ ,  $SDW$  και  $FM$  επιβάλλει και την παρουσία της τρίτης κατάστασης στην περιοχή της διεπαφής. Το αποτέλεσμα αυτό ήταν αναμενόμενο με βάση τη μελέτη ανταγωνισμού και συνύπαρξης χβαντικών καταστάσεων τάξεως στο χώρο των ορμών που έχει πραγματοποιηθεί από την ομάδα μας κατά το παρελθόν [1,2,3]. Ιδιαίτερη σημασία έχει η εμφάνιση **μεταλλικού σιδηρομαγνητισμού** στη διεπαφή ανάμεσα στις μονωτικές καταστάσεις  $CDW$  και  $SDW$ . Σκοπός της εργασίας αυτής ήταν να αναδείξει την πιθανή σύνδεση της επαγόμενης αυτής μεταλλικής κατάστασης με τις μεταλλικές καταστάσεις που παρατηρούνται σε διεπαφές μονωτών  $LaTiO_3/SrTiO_3$ ,  $LaVO_3/SrTiO_3$  καθώς και  $LaAlO_3/SrTiO_3$ .

Πράγματι, το  $LaTiO_3$  είναι ένας αντισιδηρομαγνητικός μονωτής ο οποίος μπορεί να αντιστοιχεί στην κατάσταση σύμμετρου  $SDW$  που θεωρούμε. Μάλιστα το κυματόνισμα του αντισιδηρομαγνητισμού στο  $LaTiO_3$  είναι το  $\pi/2, \pi/2, \pi/2$  [4] ακριβώς το ίδιο με αυτό που παρατηρείται και στις αντισιδηρομαγνητικές φάσεις  $SDW$  που υπολογίζουμε στα φυλλοειδή συστήματα. Αντισιδηρομαγνητική συμπεριφορά παρατηρείται και στο  $LaVO_3$  [5].

Όσο για το  $SrTiO_3$ , θεωρείται εν γένει από την ερευνητική κοινότητα ότι είναι ένας απλός μονωτής ζώνης με χάσμα περίπου  $3eV$  αν και υπολογισμοί του χάσματος στη βάση θεωριών ελευθέρων ηλεκτρονίων δεν είναι επιτυχείς. Σύμφωνα με τη θεωρητική μας προσέγγιση το  $SrTiO_3$  θα πρέπει να αντιστοιχηθεί στην κατάσταση  $CDW$ . Για το λόγο αυτό στα πλαίσια της εργασίας αυτής θεωρήσαμε ένα ιδιαίτερο τύπο  $CDW$ , το οποίο θα μπορούσε να αντιστοιχεί σε ένα ισχυρό μονωτή. Πράγματι η κατάσταση  $CDW$  που περιγράφουμε συνδύαζει τα χαρακτηριστικά ενός κύματος πυκνότητας φορτίου με σύμμετρο κυματόνισμα και ενός μονωτή μεταβίβασης φορτίου (*Charge Transfer Insulator*) του οποίου το χάσμα μπορεί να είναι πολλαπλάσιο του εύρους της ζώνης αγωγιμότητας. Η κατάσταση αυτή προκύπτει όταν στο απλό πρότυπο *Hubbard* προσθέτουμε ένα χημικό δυναμικό περίπου  $4,5t < \mu < 5,3t$  έτσι ώστε να μετατοπίζεται η ενέργεια *Fermi* μόλις πάνω από τη ζώνη αγωγιμότητας.

Πρόσφατα, διαπιστώθηκε πειραματικά ότι οι μεταλλικές καταστάσεις που προκύπτουν στη διεπιφάνεια των μονωτών είναι σιδηρομαγνητικές πράγμα που συμφωνεί απόλυτα με τον χαρακτήρα της κατάστασης που προβλέπουμε. Η τυχόν πειραματική διαπίστωση της ύπαρξης του ιδιαίτερου  $CDW$  που προτείνουμε στο  $SrTiO_3$  σίγουρα θα αποδείκνυε απόλυτα το σωστό της θεωρητικής μας προσέγγισης. Δυστυχώς κάτι τέτοιο δεν είναι εύκολο πειραματικά μια και το  $CDW$  είναι σύμμετρο και η διακύμανση του φορτίου στην οποία αντιστοιχεί συμπίπτει



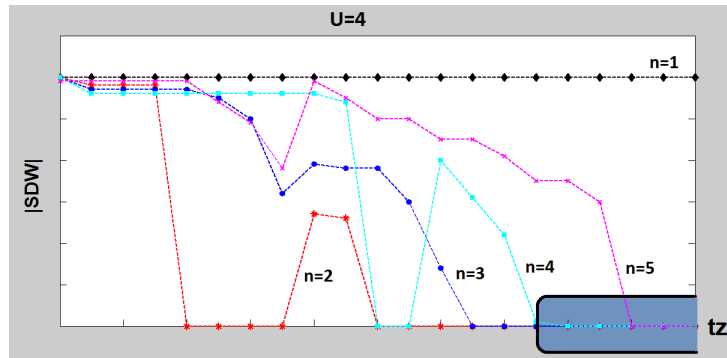
με την περιοδικότητα του πλέγματος. Προσεκτικά σχεδιασμένα πειράματα με συγκεκριμένη στόχευση είναι απαραίτητα.

Όμως η θεωρητική μας προσέγγιση έχει σημαντικά πλεονεκτήματα σε σχέση με την επικρατούσα θεωρία της 'καταστροφής πόλωσης' που περιγράφεται στο κεφάλαιο 1. Κατ' αρχάς εξηγεί ταυτόχρονα όχι μόνο τον μεταλλικό χαρακτήρα των καταστάσεων στη διεπαφή των μονωτών αλλά και τον σιδηρομαγνητικό τους χαρακτήρα χωρίς πρόσθετες υποθέσεις. Το σενάριο της 'καταστροφής πόλωσης' δεν εξηγεί από μόνο του τον σιδηρομαγνητικό χαρακτήρα των μεταλλικών καταστάσεων. Επιπλέον, το σενάριο της 'καταστροφής πόλωσης' προβλέπει μεταλλικές καταστάσεις μόνον σε διεπαφές κατά τον (0,0,1) και όχι σε διαγώνιες διεπαφές κατά την (1,1,0). Πολύ πρόσφατα [6] επιτεύχθηκε η εμφάνιση των μεταλλικών φάσεων σε διεπαφές κατά την (1,1,0) σε αντίθεση με τις προβλέψεις του σεναρίου της 'καταστροφής πόλωσης'. Στην περίπτωση μας όμως η μεταλλική σιδηρομαγνητική κατάσταση οφείλεται σε λόγους συνύπαρξης φάσεων και συμμετριών, οπότε αναμένεται και στη διαγώνιο επαφή όπως αποδεικνύεται άλλωστε και από τους υπολογισμούς σε διαγώνιες διεπαφές κατά την (1,1,0) που παραθέτουμε στο υποκεφάλαιο 6.2.

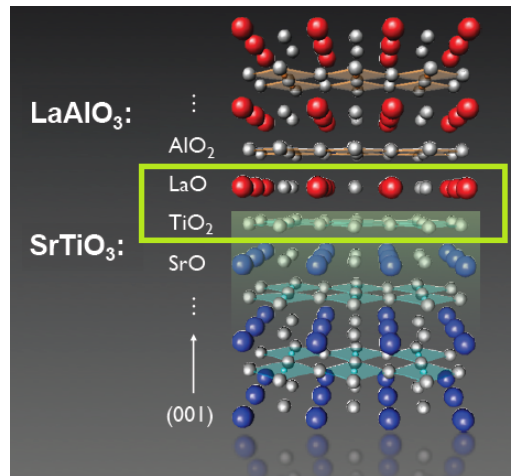
Η μελέτη στο εδάφιο 6.3 σχετικά με την εξάρτηση της εμφάνισης αντισιδηρομαγνητικής φάσης από τον αριθμό των επιπέδων που αποτελούν το σύστημα μπορεί ποιοτικά να εξηγήσει την εμφάνιση ενός κατωφλίου στον αριθμό των επιπέδων που χρειάζονται ώστε να εμφανισθεί το μεταλλικό και σιδηρομαγνητικό αέριο ηλεκτρονίων στη διεπιφάνεια των *LVO/STO* καθώς και *LAO/STO*. Όπως περιγράφεται και στο [7] απαιτούνται τουλάχιστον 5 στρώματα *LVO* πάνω από το *STO* και 4 στρώματα *LAO* πάνω στο *STO* έτσι, ώστε να εμφανισθεί το αέριο ηλεκτρονίων στη διεπιφάνεια. Διαπιστώσαμε (στα σχήματα 6.18, 6.19 και 6.20) ότι η εμφάνιση του όρου σύζευξης κατά τη *z*-διεύθυνση μπορεί να οδηγήσει στη σταθεροποίηση ή την εξαφάνιση της *SDW* φάσης. Ανάλογα με την τιμή των άλλων παραμέτρων βρήκαμε ότι η εμφάνιση του αντισιδηρομαγνητισμού μπορεί να εξαρτάται ή και όχι από τον αριθμό των επιπέδων. Η πρώτη περίπτωση (σχήματα 6.19 και 6.20) -για τη σταθεροποίηση του *bulk* αντισιδηρομαγνητισμού- θεωρούμε ότι αντιστοιχεί στην περιγραφή του *LVO*, ενώ η δεύτερη (σχήμα 6.18) στην περιγραφή του *LTO*. Ποιοτικά μπορούμε να πούμε ότι οι παράμετροι που καθορίζουν το *LVO* πιστεύουμε ότι είναι τέτοιοι, ώστε να προκαλούν την κατάλληλη εξάρτηση από τον αριθμό των επιπέδων και βρίσκονται στη 'μπλε' ζώνη του επόμενου σχήματος. Με άλλα λόγια, πιστεύουμε ότι η ύπαρξη ελαχίστου αριθμού στρωμάτων για την εμφάνιση του αερίου ηλεκτρονίων στη διεπιφάνεια οφείλεται στη σταθεροποίηση ή όχι του *SDW* στην πλευρά του *LVO*.

Η ανάλυση στο εδάφιο 6.3.2 μας επιτρέπει να εξηγήσουμε και το ενδιαφέρον φαινόμενο της εμφάνισης μεταλλικής σιδηρομαγνητικής φάσης κατά τη διεπαφή δύο μη μαγνητικών υλικών όπως είναι τα *LAO* και *STO*. Στο σχήμα 7.2 δείχνεται ξανά η δομή της διεπαφής *LAO/STO*. Όπως φαίνεται και εκεί μία από τις δύο διεπαφές που μπορούν να κατασκευασθούν μεταξύ των δύο υλικών είναι η *LaO/TiO<sub>2</sub>*. Η διαδοχή, ωστόσο, των δύο αυτών επιπέδων ισοδυναμεί με τον σχηματισμό ενός στρώματος *LTO* μεταξύ των δύο υλικών που από όσο είναι πλέον γνωστό είναι αντισιδηρομαγνητικής. Στο 6.3.2 μελετήσαμε τη σταθεροποίηση ενός στρώματος αντισιδηρομαγνητικού υλικού κάτω από ένα μη μαγνητικό υλικό και διαπιστώσαμε την εξάρτηση αυτής από τον αριθμό των επιπέδων του πάνω υλικού. Η επιλογή  $U = 3$  που είχε γίνει τότε οφείλεται σε αυτή την αντιστοιχία, σύμφωνα και με τα παραπάνω.

Συνοψίζοντας, προτείνουμε πως η εμφάνιση του διδιάστατου μεταλλικού στρώματος στις



Σχήμα 7.1: Όταν η τιμή του όρου μεταπήδησης κατά τη  $z$ -διεύθυνση αντιστοιχεί σε σημεία μέσα στο 'μπλέ' περιθώριο τότε η  $SDW$  φάση εμφανίζεται για τουλάχιστον 5 στρώματα. Αντιστοιχεί στην περίπτωση του  $LVO$ .



Σχήμα 7.2: Δομή της διεπαφής  $LAO/STO$ .

διεπιφάνειες των μονωτών που μελετήσαμε οφείλεται στη συνύπαρξη των καταστάσεων  $SDW$  και  $CDW$  που εμφανίζονται ή προτείνουμε πως εμφανίζονται στα υλικά αυτά. Η εξάρτηση της εμφάνισης αυτού του αερίου ηλεκτρονίων από τις διάφορες συνθήκες που ικανοποιούν τα υλικά οφείλεται στη σταθεροποίηση ή όχι της φάσης του  $SDW$ .

# Βιβλιογραφία

- [1] Γ. Λιβανάς, Διπλωματική Εργασία ΜΔΕ-ΦΤΕ, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ 2009
- [2] Γ. Λιβανάς, Εσωτερική Εκθεση Προόδου της Διδακτορικής του Διατριβής, 2012
- [3] S.Tsonis, P.Kotetes, G.Varelogiannis and P.B.Littlewood, 'Patterns of coexisting superconducting and particle-hole condensates', arXiv:0804.2450v2 (2008)
- [4] B.Keimer et al, 'Spin Dynamics and Orbital State in LaTiO3', arXiv:0002014v2 (2000)
- [5] Y.Ren, A.A.Nugroho et al, 'Orbital-ordering-induced phase transition in LaVO3 and CeVO3, physical review B67,014107 (2003)
- [6] A.Annadi et al, 'Unexpected Anisotropic Two Dimensional Electron Gas at the La-AlO3/SrTiO3 (110) Interface', arXiv:1208.6135
- [7] Juan Pereiro, Alexander Petrovic, Christos Panagopoulos and Ivan Bozovic, Physics Express, **1**, 208-241 (2011)

## Παράρτημα Α΄

### Πυκνότητα καταστάσεων

Η πυκνότητα καταστάσεων σε ένα σύστημα είναι από τα πιο σημαντικά μεγέθη στον τρόπο συμπεριφοράς αυτού, κυρίως στην αγωγιμότητα ηλεκτρικού ρεύματος κατά την εφαρμογή ενός πεδίου. Συστήματα που εμφανίζουν έλλειψη καταστάσεων γύρω από την επιφάνεια Fermi παρουσιάζουν μονωτική ή ημιαγώγιμη συμπεριφορά - ανάλογα με το μέγεθος του χάσματος - ενώ η ύπαρξη πλειάδας καταστάσεων στην περιοχή αυτή δηλώνει αγώγιμη συμπεριφορά.

Ως τοπική πυκνότητα καταστάσεων στο πλεγματοειδές σημείο  $R_i$  για την ενέργεια  $E$  ορίζεται το μέγεθος  $\rho(R_i, E)$  το οποίο αντιστοιχεί στον συνολικό αριθμό των καταστάσεων στο σημείο  $R_i$  που χαρακτηρίζονται από ενέργεια  $E^1$ . Η παραπάνω διατύπωση είναι ισοδύναμη με την ακόλουθη: τοπική πυκνότητα καταστάσεων στο σημείο  $R_i$  για την ενέργεια  $E$  είναι το σύνολο των πιθανοτήτων για όλες τις πιθανές καταστάσεις του συστήματος - ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής - να βρεθεί το σωματίδιο στο σημείο  $R_i$  με διεγερμένη ενέργεια  $E$

$$\rho(R_i, E) = \sum_{\alpha, \sigma} |\langle E_\alpha | c_{i\sigma}^\dagger | 0 \rangle|^2 \delta(E - E_\alpha) \quad (A'.1)$$

όπου  $|E_\alpha\rangle$  μια ιδιοκατάσταση με ενέργεια  $E_\alpha$ , η άθροιση γίνεται πάνω σε όλα τα ιδιοδιανύσματα της Χαμιλτονιανής και σε όλα τα σπιν και  $|0\rangle$  η θεμελιώδης κατάσταση κενού του συστήματος.

Στην περίπτωση που μας ενδιαφέρει να μελετήσουμε την πυκνότητα καταστάσεων για σπιν-πάνω καταστάσεις και ξεχωριστά για σπιν-κάτω καταστάσεις τότε ορίζονται αντίστοιχα:

$$\begin{aligned} \rho_\uparrow(R_i, E) &= \sum_{\alpha} |\langle E_\alpha | c_{i\uparrow}^\dagger | 0 \rangle|^2 \delta(E - E_\alpha) \\ \rho_\downarrow(R_i, E) &= \sum_{\alpha} |\langle E_\alpha | c_{i\downarrow}^\dagger | 0 \rangle|^2 \delta(E - E_\alpha) \end{aligned} \quad (A'.2)$$

Αθροίζοντας όλες τις τοπικές πυκνότητες για όλες τις θέσεις του πλέγματος ορίζεται η συνολική πυκνότητα καταστάσεων του συστήματος

$$\rho(E) = \sum_i \rho(R_i, E) \quad (A'.3)$$

---

<sup>1</sup>Στην περίπτωση απείρου πλήθους δυνατών κυματανυσμάτων -η οποία δε θα μας απασχολήσει- όπου ο χώρος των  $k$  γίνεται συνεχής, ως τοπική πυκνότητα καταστάσεων ορίζεται ο συνολικός αριθμός καταστάσεων που αντιστοιχούν σε ένα διάστημα ενεργειών μεταξύ  $E$  και  $E + dE$  ανά μονάδα ενέργειας  $dE$  και ανά μονάδα όγκου

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται ο κώδικας για την σχεδίαση της τοπικής και της ολικής πυκνότητας καταστάσεων. Σύμφωνα με αυτόν, φορτώνονται τα δεδομένα που προέκυψαν από τον κυρίως κώδικα -τελικές τιμές ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων- ενώ επιτρέπει να επιλεγούν τα σημεία του πλέγματος στα οποία θα σχεδιαστούν οι τοπικές πυκνότητες καταστάσεων

$$\begin{aligned} nx\_print &= [3, 3, 3, 2]; \\ ny\_print &= [3, 4, 4, 8]; \\ nz\_print &= [3, 3, 4, 1]; \end{aligned}$$

όπου κάθε κατακόρυφη τριάδα σημείων (ένα σημείο από κάθε διάνυσμα από τα παραπάνω) αποτελεί ένα σημείο του πλέγματος στο οποίο ζητείται ο σχεδιασμός της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων. Ο βασικός αλγόριθμος έχει ως εξής:

- Κοιτάζοντας προσεκτικά την διαγωνοποιημένη Χαμιλτονιανή

$$\sum_n \begin{pmatrix} \gamma_{n\uparrow}^\dagger & \gamma_{n\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_n & 0 \\ 0 & -E_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{n\uparrow} \\ \gamma_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (A'.4)$$

προκύπτει ότι οι  $N$  πρώτες ιδιοτιμές αντιστοιχούν στα spin-up οιονεί σωματίδια, ενώ οι επόμενες  $N$  στα spin-down. Έτσι, μπορούμε να δημιουργήσουμε δυο διαδικασίες, ανεξάρτητες και ισοδύναμες, για την πυκνότητα των καταστάσεων των spin-up και των spin-down οιονεί σωματιδίων.

- Για κάθε μια από τις παραπάνω περιπτώσεις κατασκευάζονται δύο πίνακες, ένας πίνακας γραμμής  $e\_up$  ( $e\_dn$ ) με όλες τις διαφορετικές ιδιοτιμές ενέργειας και ένας πίνακας  $LDOSup$  ( $LDOSdn$ ) του οποίου οι στήλες αντιστοιχούν στις ενέργειες του προηγούμενου πίνακα ενώ οι γραμμές στα σημεία του πλέγματος. Το στοιχείο  $(i, j)$  περιέχει

την συνολική πιθανότητα εμφάνισης της ενέργειας  $e_{up}(1, j)$  στη θέση  $i$ .

```

Pni_help = zeros(NN, 2 * NN);
Pni = zeros(NN, 2 * NN);
for ii = 1 : NN
    for jj = 1 : 2 * NN
        Pni_help(ii, jj) = abs(EV(ii, jj) + EV(ii + NN, jj));
    end
end
Pni = Pni_help * Pni_help; %γραμμές =σημεία, στήλες =πιθανότητα
%για κάθε μία απο τις ιδιοενέργειες είτε είναι ίδιες, είτε διαφορετικές
for ii = 1 : NN
    Eup(ii) = E(ii, ii);
end
LDOSup = Pni(:, 1 : NN);
eup = Eup;
for ii = NN : -1 : 1
    for jj = ii - 1 : -1 : 1
        if Eup(jj) == Eup(ii)
            LDOSup(:, jj) = LDOSup(:, jj) + LDOSup(:, ii);
            LDOSup(:, ii) = [];
            eup(ii) = [];
            break;
        end
    end
end
end
end

```

- Σχεδίαση της κατανομής των πιθανοτήτων συναρτήσει της αντίστοιχης ιδιοενέργειας για τα επιχθόνια σημεία για σπιν πάνω και σπιν κάτω ξεχωριστά.
- Σχεδίαση της συνολικής πυκνότητας καταστάσεων.

Θεωρητική πρόβλεψη της μορφής της πυκνότητας των καταστάσεων στις διάφορες φάσεις που μελετώνται:

**κανονική κατάσταση-μεταλλική:** όπως είναι εύκολα κατανοητό ένα μέταλλο εμφανίζει μεγάλο αριθμό καταστάσεων γύρω από την επιφάνεια Fermi.

**υπεραγώγιμες καταστάσεις:** εμφάνιση χάσματος που διαφοροποιεί την θεμελιώδη κατάσταση της υπεραγωγιμότητας από τις διεγερμένες καταστάσεις και το σπάσιμο των ζευγών ηλεκτρονίων. Το μέγεθος του χάσματος είναι ανάλογο της τιμής της παραμέτρου τάξης.

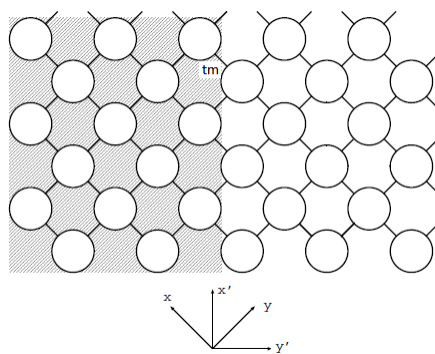
**κύμα πυκνότητας φορτίου/σπιν:** εμφανίζεται συνήθως για ένα συγκεκριμένο παράγοντα πρόσμιξης (κοντά στο half-filling) παράλληλα συνήθως με την παραμόρφωση του πλέγματος, ώστε να διπλασιαστεί η θεμελιώδης κυψελίδα του τελευταίου. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να εμφανισθεί χάσμα σε μικρότερες τιμές των κυματανυσμάτων και όταν οι τιμές αυτές συμπέσουν με την επιφάνεια Fermi τότε εμφανίζεται το κύμα πυκνότητας με ένα χάσμα-μονωτική συμπεριφορά.

## Παράρτημα Β'

# Διαφοροποίηση κώδικα κατά την διαγώνια τομή

Όταν φέρουμε δύο υλικά (που θα τα ονομάζουμε υποσυστήματα) σε επαφή κατά την  $(1\ 1\ 0)$  διεύθυνση, όπως φαίνεται στο σχήμα (B'.1), εμφανίζονται ορισμένα προβλήματα κατά την προσομοίωση της διεπαφής σε σχέση με τον αλγόριθμο που ακολουθήθηκε για διεπαφές κατά το  $(1\ 0\ 0)$  ή το  $(0\ 0\ 1)$  επίπεδο. Οι δυσκολίες αυτές έχουν να κάνουν κυρίως με την αρίθμηση των σημείων του κάθε υποσυστήματος και την κωδικοποιημένη εύρεση των γειτόνων του κάθε σημείου του πλέγματος. Η αρίθμηση των σημείων επιλέγεται να γίνει ανα υποσύστημα σύμφωνα με τους παλιούς  $x$  και  $y$  άξονες, πρώτα διατρέχοντας τον  $x$ -άξονα και ακολούθως τον  $y$ -άξονα, όπως και στην περίπτωση του πλέγματος στις τρεις διαστάσεις.

Για την εύρεση των γειτονικών σημείων που συζεύγονται μέσα σε κάθε υποσύστημα αλλά και στην διεπιφάνεια και την εισαγωγή των όρων σύζευξης στον πίνακα της ολικής Χαμιλτονιανής, θεωρήθηκε βολικότερη η στροφή των αξόνων κατά 45 μοίρες έτσι, ώστε ο νέος  $x'$ -άξονας να γίνει παράλληλος στην διεπαφή. Οι νέοι άξονες φαίνονται στο σχήμα (B'.1).



Σχήμα B'.1:

Η όλη διαδικασία εύρεσης των κοντινότερων και των αμέσως κοντινότερων γειτόνων του κάθε σημείου, σε γενικές γραμμές, επιτυγχάνεται μέσω των πινάκων INTERACTIONS\_L, INTERACTIONS\_R, INTERACTIONS\_T και INTERACTIONS\_T2 για το αριστερό υπο-



σύστημα, το δεξιά και την διεπαφή αντίστοιχα. Στους δύο πρώτους πίνακες αποθηκεύονται κατά γραμμή τα σημεία του αντίστοιχου υποσυστήματος σε μια κατοπτρική δομή, ώστε να είναι εύκολη η συσχέτισή τους. Αν συμβολίσουμε με  $nxLup(nxRup)$  και  $nxLdn(nxRdn)$  τον αριθμό των σημείων στην πρώτη και την τελευταία γραμμή του  $L(R)$  υποσυστήματος η κατοπτρική αυτή δομή φαίνεται στις επόμενες γραμμές:

```

INTERACTIONS_L = zeros(ny, nxLdn);
kk = 0;
ii = 0;
for jj = nxLup : nxLdn
    nn = 0;
    ii = ii + 1;
    for mm = 1 : jj
        nn = nn + 1;
        kk = kk + 1;
        INTERACTIONS_L(ii, mm) = kk;
        INTERACTIONS_L(ii, 2 * jj - nn) = kk;
    end
end
end

```

Το ποιά σημεία είναι γειτονικά μεταξύ τους προκύπτει με κατάλληλες συσχετίσεις των στοιχείων των παραπάνω πινάκων. Για παράδειγμα, στοιχεία που βρίσκονται στην ίδια γραμμή του παραπάνω πίνακα και διαφέρουν κατά μια στήλη συγγενεύουν κατά τον  $x$ -άξονα. Κάτι τέτοιο γράφεται ως εξής:

```

MTX = zeros(nL);
for ii = 1 : ny
    for jj = 1 : 2 * (nxLup + ii - 1) - 2
        mm = INTERACTIONS_L(ii, jj);
        nn = INTERACTIONS_L(ii, jj + 1);
        if nn = 0
            MTX(mm, nn) = 1;
            MTX(nn, mm) = 1;
        end
    end
end
end
end

```

Αντίθετα, στους πίνακες που είναι υπεύθυνοι για την διεπαφή αποθηκεύουμε κατά γραμμές τα σημεία που βρίσκονται στα δύο μέρη της διεπιφάνειας κατά τον νέο  $x'$ -άξονα έτσι, ώστε στοιχεία που βρίσκονται στην ίδια στήλη να σχετίζονται ως γειτονικά σημεία στην διεπαφή

(κοντινότεροι γείτονες για τον πίνακα INTERACTIONS\_T και αμέσως κοντινότεροι γείτονες για τον INTERACTIONS\_T2).

```

INTERACTIONS_T = zeros(2, ny);
for ii = 1 : ny
    INTERACTIONS_T(1, ii) = INTERACTIONS_L(ii, nxLup + ii - 1);
    INTERACTIONS_T(2, ii) = INTERACTIONS_R(ii, 1);
end
INTERACTIONS_T2_L = zeros(1, ny - 1);
INTERACTIONS_T2_R = zeros(1, ny - 1);
for ii = 2 : ny
    INTERACTIONS_T2_L(1, ii - 1) = INTERACTIONS_L(ii, nxLup + ii - 2);
end
for ii = 1 : ny - 1
    INTERACTIONS_T2_R(1, ii) = INTERACTIONS_R(ii, 2);
end

```

Ένα άλλο σημείο κατά την διαδικασία επίλυσης του προβλήματος στο οποίο πρέπει να δοθεί προσοχή είναι η επιλογή της αρχικής Χαμιλτονιανής πάνω στην οποία θα γίνουν οι επαναλήψεις. Στην περίπτωση που θέλουμε να εφαρμόσουμε μια διαμόρφωση στο ένα υποσύστημα τότε η διαδικασία έχει ως εξής:

- θεωρούμε ένα υποθετικό τετραγωνικό πλέγμα διάστασης ίσης με τη μεγαλύτερη διάσταση του υποσυστήματος στο οποίο αναφερόμαστε.
- εφαρμόζουμε την απαιτούμενη διαμόρφωση στο τετραγωνικό πλέγμα.
- αφαιρούμε τα επιπλέον σημεία του τετραγωνικού πίνακα (περιττές στήλες και γραμμές) αναδιατάσσοντας και αλλάζοντας την αρίθμηση στα εναπομείναντα σημεία που δεν είναι άλλα από τα σημεία του αρχικού υποσυστήματος.